

**Der Einsatz hyperspektraler Fernerkundungsdaten zur Analyse
schwermetallbedingter Boden- und Pflanzenbelastungen
in einem Auenökosystem unter besonderer
Berücksichtigung der Feinmorphologie**

**Dissertation
zur Erlangung des
Doktorgrades der Naturwissenschaften (Dr. rer. nat.)**

der

Naturwissenschaftlichen Fakultät III
Agrar- und Ernährungswissenschaften,
Geowissenschaften und Informatik

der Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg

vorgelegt von

M.Sc. Riedel, Frank

Geb. am 07.11.1988 in Sonneberg

Gutachter:

1. Prof. Dr. C. Gläßer
2. Prof. Dr. T. Udelhoven

Tag der Verteidigung: Halle (Saale), 29.10.2018

Vorwort

Die vorliegende Dissertation entstand am Lehrstuhl für Geofernerkundung und Kartografie des Institutes für Geowissenschaften und Geographie an der Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg. Die dazugehörigen Arbeiten wurden im Rahmen des vom BMWi und DLR geförderten Projektes „EnviMetal - Vegetationsstress als Indikator für Bodenkontamination in Flussauen“ (FKZ: 50 EE 1346) durchgeführt. Frau Prof. Dr. C. Gläßer sei an dieser Stelle für die Betreuung der Arbeit gedankt.

Frau S. Kurze danke ich für die Durchführung der zeitintensiven Laboranalysen und Herrn M. von Hoff für die Unterstützung bei Laborarbeiten an der MLU Halle-Wittenberg. Herrn Dr. M. Zierdt danke ich für die Konsultationen im Vorfeld der Laboranalysen. Frau Dr. K. Lewinska und dem Team der AMU Posen danke ich dafür, dass sie kurzfristig weitere Laboranalysen an der AMU Posen realisieren und durchführen konnten. Herrn Dr. R. Kolander sei für den Transport der Proben nach Posen gedankt.

Herrn Dr. D. Morche danke ich für die mehrmalige und unkomplizierte Bereitstellung des GNSS-GPS. Herrn T. Weniger danke ich für die Bodenansprachen auf den Untersuchungsgebieten und die dadurch gewonnenen Informationen. Frau G. Schulz sei für ihre Hilfe bei der Ausleihe des ASD-Spektrometers gedankt. Bei Frau Dr. C. Schulz-Zunkel möchte ich mich für die Gespräche und Hinweise bedanken. Herrn M. Scholz danke ich für die Bereitstellung von zahlreichen Daten und Informationen aus dem RIVA-Projekt.

Weiterhin danke ich dem GFZ-Potsdam für die Koordination der HySpex-Befliegungen im Jahr 2015 und Herrn M. Brell für die Vorprozessierung der Datensätze. Herrn Dr. H. Eichstädt und der Firma DIMAP-Spectral danke ich für die Organisation der Befliegungskampagnen im Jahr 2016 und für die Vorprozessierung der Daten. Frau G. Kühnemund sei für ihre Hilfe bei finanzspezifischen Problem- und Fragestellungen gedankt.

Großer Dank gilt Ally, Christian und Micha sowie meinen HiWis Clemens, Friedrich, Gaby und Verena für die Unterstützung bei allen erdenklichen Arbeiten, egal ob im Labor oder im Gelände. Ohne euch hätte die vorliegende Arbeit nicht realisiert werden können!

Unsere gemeinsamen Ausflüge in die Elbaue werde ich vermissen.

Heike, Henning und Karl danke ich für ihre Hilfsbereitschaft bei Problemen jeglicher Art und für die vielen Gespräche, auch abseits des Arbeitsalltages.

Bei meinen Kollegen Micha, Mike und Vera möchte ich mich für die unzähligen Gespräche, Kaffeerunden, aufmunternden Worte, Hinweise und für die, trotz aller Aufgaben und Herausforderungen, schöne gemeinsame Zeit am Institut bedanken. Neben der ganzen Arbeit ist der Humor auf jeden Fall nicht zu kurz gekommen.

Christian, Franz, Johannes, Martin, Max und Tobi - danke, dass ihr in den vergangenen Monaten für die notwendige Ablenkung, Zerstreuung und Motivation gesorgt habt!

Johannes und Madlen danke ich sehr für die Korrekturen und Anmerkungen zu dieser Arbeit. Ihr habt Sachen gefunden, die ich nach all den Wochen übersehen hätte.

Besonderer Dank gilt meiner Familie und meinen Eltern, die mich in den letzten Jahren in jeglicher Hinsicht unterstützt und helfend zur Seite gestanden haben und Madlen, für ihre Hilfe und dafür, dass sie in den vergangenen Monaten bei allen Höhen und Tiefen immer für mich da war. Für diesen Rückhalt bin ich euch allen sehr dankbar.

Halle im Februar 2018,
Frank Riedel

Inhaltsverzeichnis

Vorwort.....	I
Inhaltsverzeichnis	III
Abbildungsverzeichnis	V
Tabellenverzeichnis	XII
Abkürzungsverzeichnis	XV
Abstract.....	XVII
Kurzbeschreibung.....	XVIII
1 Einleitendes Kapitel.....	1
1.1 Hinführung zur Thematik	1
1.2 Zielstellung und Gliederung der Arbeit	4
2 Charakteristika und Wirkungspfade von Metallen	7
2.1 Eigenschaften der untersuchten Metalle.....	7
2.2 Eintragspfade und bodenspezifische Mobilitätsfaktoren.....	10
2.3 Der Boden-Pflanze-Wirkungspfad	14
3 Verfahren zur Detektion von Kontaminationen in Böden und Pflanzen.....	19
3.1 Bindungs- und Reflexionsmechanismen in Böden.....	19
3.2 Spektrale Pflanzensignaturen und Vegetationsstress	22
3.3 Methoden zur Erfassung von Metallgehalten anhand von Bodenspektren	25
3.3.1 Vorhersagen basierend auf Eisenoxiden und Tonmineralen	26
3.3.2 Vorhersagen basierend auf organischen Bestandteilen	30
3.4 Methoden zur Abschätzung von Metallgehalten anhand von Pflanzenspektren.....	35
4 Untersuchungsgebiete und verwendete Datensätze	42
4.1 Charakterisierung der Testgebiete	42
4.2 Datengrundlage.....	49
4.2.1 Raster- und Vektordaten.....	49
4.2.2 Geländemessungen und Laboranalysen	51
4.2.2.1 Definition der Probenahmepunkte in den Auen	51

4.2.2.2	Geländeparameter und Vegetationsspektren	55
4.2.2.3	Laboranalysen und Bodenspektren.....	56
5	Methodik	59
5.1	Qualitative und quantitative Auswertung der Bodenparameter	59
5.1.1	Statistische Aufbereitung der Bodenparameter	59
5.1.2	Quantifizierung der Gesamtgehalte mittels PLSR.....	60
5.2	Spektrale Parameter zur Bewertung der Pflanzenvitalität.....	62
5.3	Modellierung der Metallgehalte in der Auenvegetation.....	65
5.3.1	Selektion der Spektralparameter mittels RF.....	65
5.3.2	Quantifizierung der Gesamtgehalte mittels MLR und SVM.....	67
6	Ergebnisse	70
6.1	Bodeneigenschaften und Bodenbelastung.....	70
6.2	Abschätzung der Metallgehalte in den Auenböden.....	80
6.3	Vitalität und spektrale Variabilität der Vegetation.....	86
6.4	Akkumulierte Metallkonzentrationen in den Pflanzen.....	96
6.5	Abschätzung der Metallgehalte in der Auenvegetation.....	103
7	Diskussion.....	114
7.1	Bewertung der Metallbelastungen in den Auenböden.....	114
7.2	Einordnung der Metallbelastungen in der Auenvegetation	119
7.3	Genauigkeit der modellierten Gesamtgehalte der Böden	127
7.4	Einschätzung der modellierten Gesamtgehalte der Vegetation.....	132
	Zusammenfassung und Ausblick.....	139
	Literaturverzeichnis	142
	Anhang	163

Abbildungsverzeichnis

Abbildung 1-1: Charakteristisches Relief in einem Auenökosystem unter Berücksichtigung des dortigen Wasserhaushaltes und der Bodentypen	4
Abbildung 2-1: a) Gelöste und partikuläre Anteile von verschiedenen Elementen in der Wasserphase und b) beispielhafte Veränderung des gelösten Anteiles an As während des Sommerhochwassers 2002 an der Elbe (Probenahme nahe Magdeburg).....	11
Abbildung 3-1: Ein Bodenspektrum im VNIR- (oben) und MIR-Spektralbereich (unten) und dazugehörige Bodenbestandteile, welche Absorptionsmerkmale hervorrufen.....	21
Abbildung 3-2: Die spektrale Signatur gesunder Vegetation im sichtbaren- und infraroten Wellenlängenbereich (0.35 - 2.5 μm), mit den dominierenden Streumechanismen (blau) und typischen Absorptions- und Reflexionsmerkmalen (grün).....	23
Abbildung 3-3: <i>Continuum Removal</i> -Bodenspektren und variierende Bandentiefen bei 610 nm, in Abhängigkeit vom Cr-Gehalt.....	27
Abbildung 3-4: Korrelationen zwischen Bodenreflexionen und dem gesamten organischen Kohlenstoffgehalt (TOC) (A) und Gegenüberstellung der Reflexions- und TOC-Werte bei 518 nm (B)	31
Abbildung 3-5: Die erste Ableitung ausgewählter Vegetationsspektren eines niedrig- und hoch belasteten Standortes (links) und der Zusammenhang zwischen der <i>Red Edge</i> -Position und der Pb-Konzentration im Boden (rechts).....	36
Abbildung 3-6: Reflexionsspektren von Reispflanzen unterschiedlich kontaminierter Standorte (links) und variierende Chlorophyllkonzentrationen in Abhängigkeit von der Wachstumsphase und Bodenbelastung (rechts)	39
Abbildung 4-1: Berücksichtigte Datensätze zur Ausweisung potentieller Testgebiete.....	43
Abbildung 4-2: Lage der potentiellen Testgebiete an der Mittleren Elbe und Mulde.....	44
Abbildung 4-3: Lage der beiden Untersuchungsflächen an der Mittleren Elbe	44

Abbildung 4-4: Charakterisierung der Morphologie beider Untersuchungsflächen	45
Abbildung 4-5: Tägliche Temperatur- und Niederschlagswerte nahe der Untersuchungsflächen für die Untersuchungsjahre 2015 (oben) und 2016 (unten).....	46
Abbildung 4-6: Darstellung der 84 Probenahme- und Messpunkte innerhalb der Auenstandorte.....	53
Abbildung 4-7: Visualisierung der Schritte zur Definition der Probenahme- und Messpunkte auf den Untersuchungsflächen	55
Abbildung 5-1: Konzeptioneller Aufbau der PLSR-Modelle zur Quantifizierung der Gesamtgehalte, auf Grundlage der Bodenspektren.....	62
Abbildung 5-2: Konzeptioneller Aufbau der MLR- und SVM-Modelle zur Quantifizierung der Gesamtgehalte, auf Grundlage der spektralen Vegetationsparameter	68
Abbildung 6-1: Ermittelte pH-Werte und Wassergehalte in den Böden der Bezugseinheiten.....	72
Abbildung 6-2: Ermittelte Leitfähigkeit und organische Substanz in den Böden der Bezugseinheiten	72
Abbildung 6-3: Korngrößenzusammensetzung in den Böden der Bezugseinheiten, aufgeteilt nach a) Senken, b) Terrassen und c) Plateaus.....	73
Abbildung 6-4: Gegenüberstellung der normalisierten Gesamtgehalte in den Böden der Bezugseinheiten, unabhängig von den Untersuchungsgebieten und -jahren.....	76
Abbildung 6-5: Gegenüberstellung ausgewählter normalisierter Gesamtgehalte in den Böden der Bezugseinheiten beider Untersuchungsgebiete, unabhängig von den Untersuchungsjahren	78
Abbildung 6-6: Korrelationsplot der Gesamtgehalte in den Auenböden (n = 84).....	79
Abbildung 6-7: Summe aller interpolierten Gesamtgehalte (n = 10) in den Böden beider Untersuchungsgebiete, basierend auf jeweils 42 Probenahmepunkten	79
Abbildung 6-8: Wertebereich aller gemessenen Bodenspektren (n = 84).....	80
Abbildung 6-9: Korrelationsspektren für Cd, Cr, Cu, Ni und Zn, basierend auf den VNIR-Bodenspektren (n = 84)	81

Abbildung 6-10: Korrelationsspektren für As, Fe, K, Hg und Pb, basierend auf den VNIR-Bodenspektren (n = 84)	81
Abbildung 6-11: Optimale PLSR-Validierungsergebnisse für die Gesamtgehalte der Elemente As, Cd, Cr, Cu, Fe, und Hg.....	84
Abbildung 6-12: Optimale PLSR-Validierungsergebnisse für die Gesamtgehalte der Elemente K, Ni, Pb und Zn.....	85
Abbildung 6-13: Ermittelte Chlorophyllgehalte auf den Bezugseinheiten beider Untersuchungsgebiete.....	86
Abbildung 6-14: Charakterisierung der Pflanzenvitalität auf Grundlage der Spektrometermessungen und ausgewählten Indizes, unabhängig von den Untersuchungsgebieten und -jahren	88
Abbildung 6-15: NDVI_a- (oben) und PSRI-Werte (unten) im Untersuchungsgebiet 1, abgeleitet aus HySpex (a), in Relation zum DGM (b) und in Vergleich zu den Geländemessungen (c)	89
Abbildung 6-16: NDWI-Werte im Untersuchungsgebiet 1, abgeleitet aus HySpex (a), in Relation zum DGM (b) und in Vergleich zu den Geländemessungen (c).....	90
Abbildung 6-17: NDVI_a- (oben) und PSRI-Werte (unten) im Untersuchungsgebiet 1 für 2015 und 2016, abgeleitet aus HySpex (a), in Relation zueinander (b) und vergleichende Statistiken (c).....	92
Abbildung 6-18: NDWI-Werte im Untersuchungsgebiet 1 für 2015 und 2016, abgeleitet aus HySpex (a), in Relation zueinander (b) und vergleichende Statistiken (c).....	93
Abbildung 6-19: Veränderung der Pflanzenvitalität im Untersuchungsgebiet 2 für das Jahr 2016, auf Grundlage der Spektrometermessungen und ausgewählten Indizes.....	94
Abbildung 6-20: Rangliste der 20 Parameter mit der höchsten relativen Streuung, auf Grundlage der Spektrometermessungen und unabhängig von den Untersuchungsgebieten und -jahren	95
Abbildung 6-21: Darstellung der fünf Parameter mit der höchsten relativen Streuung unter Berücksichtigung der Feinmorphologie, unabhängig von den Untersuchungsgebieten und -jahren	95

Abbildung 6-22: Trennbarkeit der Senken und Plateaus kategorisiert nach der Art der Indizes (oben) und den verwendeten Spektralbereichen (unten), auf Grundlage der Spektrometermessungen und unabhängig von den Untersuchungsgebieten und -jahren	97
Abbildung 6-23: Gegenüberstellung der normalisierten Gesamtgehalte in der Vegetation der Bezugseinheiten, unabhängig von den Untersuchungsgebieten und -jahren.....	100
Abbildung 6-24: Gegenüberstellung ausgewählter normalisierter Gesamtgehalte in der Vegetation der Bezugseinheiten beider Untersuchungsgebiete, unabhängig von den Untersuchungsjahren	102
Abbildung 6-25: Güte der Kalibrierung und Validierung bei der Abschätzung der Gesamtgehalte in der Vegetation, unabhängig von der Art der Modelle	103
Abbildung 6-26: Optimale Kalibrierungsergebnisse für die Gesamtgehalte der Elemente As, Cd, Hg und Pb.....	107
Abbildung 6-27: Optimale Validierungsergebnisse für die Gesamtgehalte der Elemente As, Cd, Hg und Pb.....	109
Abbildung 6-28: Darstellung der in den Modellsetups am häufigsten selektierten Parameter zur Abschätzung der Gesamtgehalte.....	110
Abbildung 6-29: Vergleich der Anzahl der verwendeten Parameter in den Modellsetups für alle Gesamtgehalte	111
Abbildung 6-30: Prognosekarten für die Gesamtgehalte der Elemente As und Cd (oben) sowie K und Mn (unten) im Untersuchungsgebiet 1 für das Jahr 2015	112
Abbildung 6-31: Prognosekarten für die Gesamtgehalte der Elemente Cd und Cu im Untersuchungsgebiet 1 für das Jahr 2016.....	113
Abbildung 7-1: Veränderung der Pflanzengehalte ($\mu\text{g/g}$) ausgewählter Schwermetalle im Untersuchungsgebiet 2 für das Jahr 2016, unter Berücksichtigung der Mahd.....	125
Abbildung 7-2: Auswahl an fehlerhaften Spektralparametern und Artefakten in den HySpex-Befliegungsdaten, die eine Quantifizierung der Metallgehalte erschweren.....	136
Abbildung 7-3: Abgeleitete Prognosekarten für Cd-Pflanzengehalte in den beiden Untersuchungsgebieten mit anschließender Übertragung der Modellansätze auf eine neue Auenfläche	138

Abbildung A4-1: Im Rahmen des RIVA-Projektes kartierte Bodenformen der Schleusenheger Wiesen	163
Abbildung A4-2: Im Rahmen des RIVA-Projektes kartierte Biotoptypen der Schleusenheger Wiesen	164
Abbildung A4-3: Vegetationskartierung der Schleusenheger Wiesen im Rahmen des RIVA-Projektes.....	164
Abbildung A4-4: RapidEye-Mosaik des Juni Hochwassers 2013 an der Mittleren Elbe und die daraus abgeleitete Hochwassermaske.....	164
Abbildung A4-5: Darstellung der mit dem HySpex-Sensor beflogenen Gebiete an der Mittleren Elbe und Mulde	164
Abbildung A4-6: Monatliche Temperatur- und Niederschlagsdaten der Klimastation Wittenberg für das Jahr 2015	164
Abbildung A4-7: Monatliche Temperatur- und Niederschlagsdaten der Klimastation Wittenberg für das Jahr 2016	164
Abbildung A4-8: Vergleich der täglichen mittleren Abflusswerte des Pegels Wittenberg für ein Hochwasser- (oben, Jahr 2013) und ein Niedrigwasserereignis (unten, Jahr 2015) (MQ = durchschnittlicher Abfluss, MNQ = mittlerer Niedrigwasserabfluss, MHQ = mittlerer Hochwasserabfluss).....	164
Abbildung A6-1: Gegenüberstellung der Gesamtgehalte in den Böden der Bezugseinheiten, unabhängig von den Untersuchungsgebieten und -jahren	164
Abbildung A6-2: Gegenüberstellung der Gesamtgehalte in den Böden der Bezugseinheiten beider Untersuchungsgebiete, unabhängig von den Untersuchungsjahren	164
Abbildung A6-3: Interpolierte Gesamtgehalte in den Böden des Untersuchungsgebietes 1, basierend auf 42 Probenahmepunkten.....	164
Abbildung A6-4: Interpolierte Gesamtgehalte in den Böden des Untersuchungsgebietes 2, basierend auf 42 Probenahmepunkten.....	164
Abbildung A6-5: Optimale PLSR-Kalibrierungsergebnisse für die Gesamtgehalte der Elemente As, Cd, Cr, Cu, Fe, und Hg.....	164
Abbildung A6-6: Optimale PLSR-Kalibrierungsergebnisse für die Gesamtgehalte der Elemente K, Ni, Pb und Zn.....	164
Abbildung A6-8: Charakterisierung der Pflanzenvitalität auf Grundlage der Spektrometermessungen und ausgewählten Indizes im Untersuchungsgebiet 1, unabhängig von den Untersuchungsjahren.....	164

Abbildung A6-9: Charakterisierung der Pflanzenvitalität auf Grundlage der Spektrometermessungen und ausgewählten Indizes im Untersuchungsgebiet 2, unabhängig von den Untersuchungsjahren.....	164
Abbildung A6-7: Ermittelte Pflanzenhöhen auf den Bezugseinheiten beider Untersuchungsgebiete.....	164
Abbildung A6-10: NDVI_a-Werte im Untersuchungsgebiet 2, abgeleitet aus HySpex (a), in Relation zum DGM (b) und in Vergleich zu den Geländemessungen (c).....	164
Abbildung A6-11: PSRI- (oben) und NDWI-Werte (unten) im Untersuchungsgebiet 2, abgeleitet aus HySpex (a), in Relation zum DGM (b) und in Vergleich zu den Geländemessungen (c)	164
Abbildung A6-12: Veränderung der Pflanzenvitalität im Untersuchungsgebiet 1 für das Jahr 2015 und 2016, auf Grundlage der Spektrometermessungen und ausgewählten Indizes.....	164
Abbildung A6-13: Veränderung der Pflanzenvitalität im Untersuchungsgebiet 2 für das Jahr 2015, auf Grundlage der Spektrometermessungen und ausgewählten Indizes.....	164
Abbildung A6-14: Rangliste der 20 Parameter mit der höchsten relativen Streuung im Untersuchungsgebiet 1 (oben) und im Untersuchungsgebiet 2 (unten), auf Grundlage der Spektrometermessungen und unabhängig von den Untersuchungsjahren	164
Abbildung A6-15: Darstellung der fünf Parameter mit der höchsten relativen Streuung unter Berücksichtigung der Feinmorphologie im Untersuchungsgebiet 1 (oben) und Untersuchungsgebiet 2 (unten), unabhängig von den Untersuchungsjahren.....	164
Abbildung A6-16: Gegenüberstellung der Gesamtgehalte in der Vegetation der Bezugseinheiten, unabhängig von den Untersuchungsgebieten und -jahren	164
Abbildung A6-17: Gegenüberstellung der Gesamtgehalte in der Vegetation der Bezugseinheiten beider Untersuchungsgebiete, unabhängig von den Untersuchungsjahren	164
Abbildung A6-18: Gegenüberstellung der normalisierten Gesamtgehalte in den Böden der Bezugseinheiten in den Jahren 2015 und 2016 im Untersuchungsgebiet 1	164

Abbildung A6-19: Gegenüberstellung der normalisierten Gesamtgehalte in den Böden der Bezugseinheiten in den Jahren 2015 und 2016 im Untersuchungsgebiet 2	164
Abbildung A6-20: Gegenüberstellung der normalisierten Gesamtgehalte in der Vegetation der Bezugseinheiten in den Jahren 2015 und 2016 im Untersuchungsgebiet 1	164
Abbildung A6-21: Gegenüberstellung der normalisierten Gesamtgehalte in der Vegetation der Bezugseinheiten in den Jahren 2015 und 2016 im Untersuchungsgebiet 2	164
Abbildung A6-22: Optimale Kalibrierungsergebnisse für die Gesamtgehalte der Elemente Ca, Cu, Fe und K.....	164
Abbildung A6-23: Optimale Kalibrierungsergebnisse für die Gesamtgehalte der Elemente Mn, Ni und Zn.....	164
Abbildung A6-24: Optimale Validierungsergebnisse für die Gesamtgehalte der Elemente Ca, Cu, Fe und K.....	164
Abbildung A6-25: Optimale Validierungsergebnisse für die Gesamtgehalte der Elemente Mn, Ni und Zn.....	164
Abbildung A6-26: Optimale Kalibrierungs- und Validierungsergebnisse für die Gesamtgehalte der Elemente As und Cd, unter Verwendung aller Messungen als Modellinput (Setup A)	164
Abbildung A6-27: Optimale Kalibrierungs- und Validierungsergebnisse für die Gesamtgehalte der Elemente Hg und Pb, unter Verwendung aller Messungen als Modellinput (Setup A)	164
Abbildung A6-28: Prognosekarten für die Gesamtgehalte der Elemente Ca und Fe (oben) sowie Cd und Cu (unten) im Untersuchungsgebiet 2 für das Jahr 2016	164
Abbildung A6-29: Prognosekarten für die Gesamtgehalte der Elemente As und K (oben) im Untersuchungsgebiet 1 sowie Pb(unten) im Untersuchungsgebiet 2 für das Jahr 2016.....	164
Abbildung A6-30: Prognosekarten für die Gesamtgehalte des Elementes Pb im Untersuchungsgebiet 1 für die Jahre 2015 und 2016	164
Abbildung A7-1: Veränderung der Pflanzengehalte ($\mu\text{g/g}$) ausgewählter Schwermetalle im Untersuchungsgebiet 2 für das Jahr 2015, unter Berücksichtigung der Mahd.....	164

Tabellenverzeichnis

Tabelle 2-1: Koeffizienten des Boden-Pflanze-Transfers für ausgewählte Metalle sowie normale und kritische Wertebereiche der Elemente für Pflanzen und Tierfutter (in $\text{mg kg}^{-1} \text{ m}_T$)	16
Tabelle 2-2: Schädigungsmerkmale, die bei Pflanzen durch Metalle hervorgerufen werden können	18
Tabelle 3-1: Auswahl an natürlichen und anthropogenen Stressfaktoren, welche auf terrestrische Vegetation einwirken können	25
Tabelle 4-1: Im Rahmen der Arbeit verwendete Rasterdaten sowie deren räumliche und spektrale Auflösung	50
Tabelle 4-2: Im Rahmen der Arbeit verwendete Vektordaten	52
Tabelle 4-3: Übersicht zu den auf den Auenstandorten erhobenen Geländeparametern innerhalb der Untersuchungsjahre 2015 und 2016.....	54
Tabelle 4-4: Übersicht zu den durchgeführten Laboranalysen zur Erhebung verschiedener Boden- und Pflanzenparameter	57
Tabelle 4-5: Übersicht zu den durchgeführten Laboranalysen zur Extraktion der Elementkonzentrationen in den Boden- und Pflanzenproben	58
Tabelle 5-1: Aus den Vegetationsspektren abgeleitete Parameter zur Bewertung der Pflanzenvitalität auf den Auenstandorten	64
Tabelle 5-2: Aufnahmetag der Spektren und Pflanzenproben, welche für die Modellentwicklung berücksichtigt wurden	66
Tabelle 6-1: Statistiken zu den ermittelten Bodenparametern auf den Bezugseinheiten, unabhängig von den Untersuchungsgebieten und -jahren	71
Tabelle 6-2: Statistiken zu den ermittelten Gesamtgehalten in den Auenböden (in $\mu\text{g/g}$), unabhängig von den Untersuchungsgebieten und -jahren.....	74
Tabelle 6-3: Statistiken zu den ermittelten Gesamtgehalten in den Böden der Bezugseinheiten (in $\mu\text{g/g}$), unabhängig von den Untersuchungsgebieten und -jahren	75
Tabelle 6-4: Statistiken zu ausgewählten Gesamtgehalten in den Böden der Bezugseinheiten (in $\mu\text{g/g}$) beider Untersuchungsgebiete, unabhängig von den Untersuchungsjahren	77

Tabelle 6-5: Optimale PLSR-Kalibrierungsergebnisse für die Gesamtgehalte der Auenböden (n = 42), basierend auf verschiedenen Spektrentypen und Validierungsstrategien	82
Tabelle 6-6: Optimale PLSR-Validierungsergebnisse für die Gesamtgehalte der Auenböden (n = 42), basierend auf verschiedenen Spektrentypen und Validierungsstrategien	83
Tabelle 6-7: Statistiken zu den ermittelten Gesamtgehalten in der Auenvegetation (in µg/g), unabhängig von den Untersuchungsgebieten und -jahren	98
Tabelle 6-8: Statistiken zu den ermittelten Gesamtgehalten in der Vegetation der Bezugseinheiten (in µg/g), unabhängig von den Untersuchungsgebieten und -jahren.....	99
Tabelle 6-9: Statistiken zu ausgewählten Gesamtgehalten in der Vegetation der Bezugseinheiten (in µg/g) beider Untersuchungsgebiete, unabhängig von den Untersuchungsjahren	101
Tabelle 6-10: Übersicht zu den angewandten Modellsetups zur Abschätzung der Gesamtgehalte in der Auenvegetation.....	104
Tabelle 6-11: Vergleich der Kalibrierungsergebnisse zur Abschätzung der Gesamtgehalte in der Vegetation, unter Berücksichtigung aller Modellsetups und Modellarten.....	106
Tabelle 6-12: Vergleich der Validierungsergebnisse zur Abschätzung der Gesamtgehalte in der Vegetation, unter Berücksichtigung aller Modellsetups und Modellarten.....	108
Tabelle 7-1: Gegenüberstellung der ermittelten Gesamtgehalte in den Auenböden (in µg/g) mit Vergleichswerten anderer Studien und Maßnahmewerten der BBodSchV	115
Tabelle 7-2: Gegenüberstellung der ermittelten Gesamtgehalte in der Auenvegetation (in µg/g) mit Vergleichswerten anderer Studien und Höchstgehalten der FuttMV	120
Tabelle Z-1: Zusammenfassende Darstellung der erzielten Modellgenauigkeiten bei der Abschätzung der Metallgehalte in den Auenböden und der -vegetation.....	140
Tabelle A4-1: Übersicht zu allen Probenahmepunkten in den Untersuchungsgebieten 2015 und 2016.....	164

Tabelle A5-1: Verwendete Vegetationsindizes zur Bewertung der Pflanzenvitalität auf den Auenstandorten, basierend auf spezifische Reflexionswerte	164
Tabelle A5-2: Verwendete Vegetationsindizes zur Bewertung der Pflanzenvitalität auf den Auenstandorten, basierend auf spezifische Wellenlängenbereiche	164
Tabelle A5-3: <i>Red Edge</i> spezifische Vegetationsindizes zur Bewertung der Pflanzenvitalität auf den Auenstandorten	164
Tabelle A5-4: Abgeleitete Anstiege innerhalb der Vegetationsspektren zur Bewertung der Pflanzenvitalität auf den Auenstandorten	164
Tabelle A5-5: Abgeleitete Flächen und Banden innerhalb der Vegetationsspektren zur Bewertung der Pflanzenvitalität auf den Auenstandorten	164
Tabelle A6-1: Korrelationsmatrix zu den untersuchten Gesamtgehalten	164
Tabelle A6-2: Übersicht zu den besten PLSR-Ergebnissen für die Gesamtgehalte der Auenböden, basierend auf $U1_{kal}$ (n = 42) und $U2_{val}$ (n = 42)	164
Tabelle A6-3: Übersicht zu den besten PLSR-Ergebnissen für die Gesamtgehalte der Auenböden, basierend auf $U2_{kal}$ (n = 42) und $U1_{val}$ (n = 42)	164
Tabelle A6-4: Übersicht zu den besten PLSR-Ergebnissen für die Gesamtgehalte der Auenböden, basierend auf KS zur Kalibrierung (n = 42) und Validierung (n = 42)	164
Tabelle A6-5: In den Modellsetup A und B berücksichtigte Spektralparameter zur Abschätzung der Gesamtgehalte in der Auenvegetation	164
Tabelle A6-6: In den Modellsetup C und D berücksichtigte Spektralparameter zur Abschätzung der Gesamtgehalte in der Auenvegetation	164
Tabelle A6-7: In den Modellsetup E und F berücksichtigte Spektralparameter zur Abschätzung der Gesamtgehalte in der Auenvegetation	164
Tabelle A6-8: In den Modellsetup G und H berücksichtigte Spektralparameter zur Abschätzung der Gesamtgehalte in der Auenvegetation	164

Abkürzungsverzeichnis

As	<i>Arsen</i>
Ca	<i>Kalzium</i>
Cd	<i>Cadmium</i>
Co	<i>Cobalt</i>
Cr	<i>Chrom</i>
Cu	<i>Kupfer</i>
Fe	<i>Eisen</i>
Hg	<i>Quecksilber</i>
K	<i>Kalium</i>
Mg	<i>Magnesium</i>
Mn	<i>Mangan</i>
Ni	<i>Nickel</i>
Pb	<i>Blei</i>
S	<i>Schwefel</i>
Sb	<i>Antimon</i>
Sn	<i>Zinn</i>
Zn	<i>Zink</i>
AAS	<i>Atomabsorptionsspektrometer</i>
AIC	<i>Akaike's Information Criteria</i>
ANN	<i>Artificial Neural Network</i>
ATKIS	<i>Amtlich Topographisch-Kartografisches Informationssystem</i>
BTNT	<i>Biotoptypen- und Nutzungstypenkartierung</i>
Coef.var	<i>Variationskoeffizient</i>
C_{org}	<i>organic Carbon</i>
CR	<i>Continuum Removal</i>
DGM	<i>Digitales Laserscanner Geländemodell</i>
d1	<i>erste Ableitung</i>
d2	<i>zweite Ableitung</i>
EL	<i>elektrische Leitfähigkeit</i>
GÜK	<i>Geologische Übersichtskarte</i>
ICP-MS	<i>Massenspektrometrie mit induktiv gekoppeltem Plasma</i>

JMD	<i>Jeffries-Matusita Distance</i>
KS	<i>Kennard-Stone sampling</i>
LUA	<i>Landesumweltamt Brandenburg</i>
Max	<i>Maximumwert</i>
Mean	<i>Mittelwert</i>
Min	<i>Minimumwert</i>
MIR	<i>Mid Infrared (Spektralbereich zwischen 2500 - 25000 nm)</i>
MLR	<i>Multiple Linear Regression</i>
MSC	<i>Multi Scatter Correction</i>
NDVI	<i>Normalized Difference Vegetation Index</i>
NIR	<i>Near Infrared (Spektralbereich zwischen 700 - 1000 nm)</i>
OA	<i>Anteil an organischer Substanz</i>
OOB	<i>Out-Of-Bag</i>
OR	<i>Originalspektrum</i>
PCR	<i>Principal Component Regression</i>
PLSR	<i>Partial Least Square Regression</i>
r	<i>Korrelationskoeffizient</i>
R²	<i>Bestimmtheitsmaß</i>
REP	<i>Red Edge Position</i>
RF	<i>Random Forest</i>
RMSE	<i>Root Mean Square Error</i>
SNV	<i>Standard Normal Variate</i>
SOM	<i>Soil Organic Matter</i>
Std.dev	<i>Standardabweichung</i>
SVM	<i>Support Vector Machine</i>
SVMtune	<i>optimierte (getunte) Support Vector Machine</i>
SWIR	<i>Short Wave Infrared (Spektralbereich zwischen 1000 - 2500 nm)</i>
TOC	<i>Total Organic Carbon</i>
U1	<i>Untersuchungsgebiet 1</i>
U2	<i>Untersuchungsgebiet 2</i>
VBK	<i>Vorläufige Bodenkarte</i>
VI	<i>Variable Importance</i>
VIS	<i>Visible (Spektralbereich zwischen 350 - 700 nm)</i>
VNIR	<i>Visible-Near Infrared (Spektralbereich zwischen 350 - 2500 nm)</i>
WG	<i>Wassergehalt</i>

Abstract

Application of hyperspectral remote sensing data for the analysis of heavy metal related soil- and plant contamination in a floodplain ecosystem under consideration of morphology

Although the water quality of the Elbe River has improved during the last decades, flood water which passes abandoned open pit mines, industrial areas, intensively used agricultural fields and urban structures is still highly enriched with diverse contaminants. Floodplain ecosystems are exposed to flood events and as a consequence of that, polluted sediment loads and dissolved heavy metals accumulate in soil and gradually enrich in vegetation, which is often used for fodder production. Thus, it is necessary to monitor these contaminations. In this thesis, the potential of *Visible-Near Infrared* (VNIR, 350 - 2500 nm) non-imaging and imaging spectroscopy for the assessment of metal contents in floodplain areas is tested.

As data basis, a total of 84 soil- and 182 plant samples were collected between 2015 and 2016 on two floodplain sites near the Middle Elbe River in Saxony-Anhalt, considering different morphological units (sinks, terraces, plateaus) and sampling dates. Chemical analyses provided information regarding various element concentrations of soils (As, Cd, Cr, Cu, Fe, Hg, K, Ni, Pb, Zn) and vegetation (As, Ca, Cd, Cu, Fe, Hg, K, Ni, Mn, Pb, Zn). Spectral information was collected with an *ASD FieldSpec Pro FR* in the laboratory (soils) as well as in situ (vegetation). Simultaneously to the field measurements, airborne based HySpex-images were recorded. For the estimation of metal contents, different pre-processed soil spectra were used as input for *Partial Least Square Regression* (PLSR) models and parameters based on spectral plant properties (e.g. ratios, indices) were implemented in *Multiple Linear Regression*- (MLR) and *Support Vector Machine* (SVM) models.

In general, sinks were characterized by higher soil metal contents and reliable PLSR-model outcomes were obtained for the majority of the analysed elements, with the best prediction results for Pb ($R^2 = 0.89$) and Cd ($R^2 = 0.86$). Interactions between plant parameters and metal concentrations were weaker, resulting in missing stress features and comparatively low plant contents, which negatively affected the quality of the model approaches. Promising results were generated for Cd (MLR, $R^2 = 0.75$), As (SVM, $R^2 = 0.61$) and Pb (SVM, $R^2 = 0.56$). Based on interpolations between the sampling points of the soil contents and the adaptation of the plant models to the HySpex-images, contamination maps were derived and the spatial distribution of heavy metals could be mapped. This thesis shows that hyperspectral remote sensing data has the benefit to provide reliable information about selected heavy metal contents in floodplain soils and plants. In future, such data should be used to identify pollutant hot spots and included in monitoring programs of floodplain ecosystems.

Kurzbeschreibung

Der Einsatz hyperspektraler Fernerkundungsdaten zur Analyse schwermetallbedingter Boden- und Pflanzenbelastungen in einem Auenökosystem unter besonderer Berücksichtigung der Feinmorphologie

Obwohl sich in den vergangenen Jahrzehnten die Wasserqualität der Elbe verbessert hat, sind Hochwasser, welche Tagebaugelände, Industriestandorte sowie intensiv genutzte landwirtschaftliche und urbane Flächen passieren, mit diversen Schadstoffen angereichert. Flussauenökosysteme sind von Überschwemmungen betroffen, wodurch sich verunreinigte Sedimente und gelöste Schwermetalle in Böden anreichern und von der Auenvegetation, die häufig als Futtermittel weiterverarbeitet wird, akkumuliert werden können. Um derartigen Schadstoffeinträgen entgegenwirken zu können, ist ein kontinuierliches Monitoring der Flächen erforderlich. Vor diesem Hintergrund wird das Potential nicht-abbildender und abbildender Spektrometrie des *Visible-Near Infrared* (VNIR, 350 - 3500 nm) zur Erfassung von Metallgehalten in Flussauen abgeschätzt.

Als Datengrundlage dienten 84 Boden- und 182 Pflanzenproben, welche zwischen 2015 und 2016 auf zwei Auenflächen an der Mittleren Elbe in Sachsen-Anhalt erhoben wurden. Dabei wurden mehrere Höhenstufen (Senken, Terrassen, Plateaus) und diverse Aufnahmezeitpunkte berücksichtigt. Anhand chemischer Analysen erfolgte die Ermittlung verschiedener Elementkonzentrationen in den Böden (As, Cd, Cr, Cu, Fe, Hg, K, Ni, Pb, Zn) und in der Vegetation (As, Ca, Cd, Cu, Fe, Hg, K, Ni, Mn, Pb, Zn). Die spektrale Information wurde mittels eines *ASD FieldSpec Pro FR* im Labor (Boden) und in situ (Vegetation) aufgezeichnet. Simultan zu den Geländemessungen sind Befliegungsdaten mit dem HySpex-Sensor aufgenommen worden. Zur Detektion der Metallgehalte wurden unterschiedlich vorprozessierte Bodenspektren in *Partial Least Square Regression* (PLSR) Modelle eingebunden und vegetative Spektralparameter (e.g. Ratios, Indizes) wurden in *Multiple Linear Regression*- (MLR) und *Support Vector Machine* (SVM) Modelle implementiert.

Generell waren die Böden in den Senken durch höhere Metallgehalte charakterisiert und robuste PLSR-Modelle konnten für die Mehrzahl der Elemente abgeleitet werden. Die besten Ergebnisse wurden für Pb ($R^2 = 0.89$) und Cd ($R^2 = 0.86$) erzielt. Die Interaktionen zwischen den spektralen Pflanzenparametern und den Metallkonzentrationen waren schwächer ausgeprägt. Fehlende Stressmerkmale und die vergleichsweise geringen Pflanzengehalte minderten die Qualität der Modelle. Zufriedenstellende Resultate konnten dennoch für Cd (MLR, $R^2 = 0.75$), As (SVM, $R^2 = 0.61$) und Pb (SVM, $R^2 = 0.56$) generiert werden. Durch Interpolationen zwischen den Probenahmepunkten der Bodengehalte und der Adaption der Pflanzen-Modelle auf die HySpex-Szenen wurden Prognosekarten erstellt und die räumliche Verteilung einzelner Schwermetalle abgebildet. Die Arbeit hat gezeigt, dass hyperspektrale Fernerkundungsdaten zuverlässige Informationen über ausgewählte Schwermetallgehalte in Auenböden und -vegetation bereitstellen können. Zukünftig sollten diese Daten zur Identifikation von Schadstoffquellen genutzt und in Monitoringprogramme von Flussauenökosystemen integriert werden.

1 Einleitendes Kapitel

Das einleitende Kapitel verdeutlicht dem Leser zunächst die weltweit zunehmende Verunreinigung von Flächen durch Schwermetalle. In Anlehnung an den übergeordneten Themenkomplex der Arbeit, wird auf den Eintrag dieser Schadstoffe in Flusslandschaften hingewiesen, die Bedeutung von Auenökosystemen bekräftigt und es wird zu den Nutzen hyperspektraler Fernerkundungsdaten zur Identifikation von Metallbelastungen in Böden und Pflanzen übergeleitet. Der zweite Gliederungspunkt widmet sich der Zielstellung und dem weiteren Aufbau der Arbeit. Hier werden die wichtigsten Kernaspekte, Forschungsfragen sowie Hypothesen hervorgehoben und der Inhalt der einzelnen Abschnitte wird kurz erläutert.

1.1 Hinführung zur Thematik

Die beiden Umweltorganisationen *Green Cross* aus der Schweiz und das amerikanische *Blacksmith Institute* veröffentlichten 2010 den umfangreichen *World's Worst Pollution Problems Report*, in welchem „erstmalig eine Rangliste der sechs weltweit schädlichsten Umweltgifte“ enthalten ist (UMG 2010:1). Der Bericht stützt sich auf mehr als 1000 Risikobewertungen von kontaminierten Flächen in zahlreichen Ländern. Als Kriterien für die Liste wurde neben der Toxizität und dem Wirkungspfad der Stoffe auch deren Gefährdungspotential gegenüber Menschen berücksichtigt (UMG 2010:1-2). Die Ergebnisse der Recherche verdeutlichen, dass die Rangliste von Schwermetallen, wie Blei und Chrom sowie von dem Halbmetall Arsen, angeführt wird. Diese Elemente können ab bestimmten Konzentrationen ernsthafte Gesundheitsrisiken darstellen und mehr als 100 Millionen Menschen sind schon jetzt direkt oder unmittelbar von den Folgeerscheinungen zu hoher Belastungslevel betroffen (vgl. MCCARTOR & BECKER 2010:7). Entsprechend besorgniserregend fällt die Bilanz des Reports aus, da „[d]ie globalen Gesundheitsauswirkungen von giftigen Schadstoffen wie Schwermetallen [...] grösser [sic!] als bisher angenommen [sind]“ (UMG 2010:2). Die Quellen dieser Kontaminanten sind vielfältig. Sie reichen von recycelten Blei-Säure-Batterien über Bergbau-Altlasten bis hinzu Mülldeponien oder Rückständen bei chemischen Herstellungsprozessen (PURE EARTH & GREEN CROSS 2016:4). Ausgehend von diesen Quellen gelangen die potentiellen Gifte in natürliche und anthropogene Lebensräume. Einer der Haupteintrags- und Wirkungspfade von Metallen sind Flüsse und Gewässer, in welchen die Elemente in gelöster Form oder durch die partikuläre Bindung an Schwebstoffen weiter transportiert und verlagert werden können. Insbesondere bei Hochwasserereignissen werden verstärkt Metalle mobilisiert und reaktiviert. Verunreinigte Ablagerungen bleiben nach dem Rückzug des Wassers auf den Überschwemmungsflächen zurück (KRÜGER et al. 2005a:30,38). Diese Zusammenhänge sind ebenso für Deutschland relevant, da die mittlere Anzahl an Tagen pro Jahr, an denen Wetterlagen Hochwasser begünstigen, in den letzten Jahrzehnten angestiegen ist (HATTERMANN et al. 2013:470). Zudem prognostizieren verschiedene Modellrechnungen bis

zum Ende des 21. Jahrhunderts für Nord- und Mitteleuropa vermehrte Starkniederschläge in den Sommer- und Wintermonaten (CHRISTENSEN & CHRISTENSEN 2003:805, PALMER & RÄISÄNEN 2002:513).

Doch nicht nur klimatische Faktoren affektieren die Stärke von Hochwasserereignissen. Flusslandschaften wurden in den vergangenen Jahrhunderten anthropogen überprägt und „im Laufe der Zeit den wechselnden Bedürfnissen der Menschen angepasst“ (BÖHNKE & GEYER 2009:101). „[D]as ursprüngliche Landschafts- und Gewässerbild“ wurde etwa durch „Flussbegradigungen, Eindeichungen [und] intensive landwirtschaftliche Nutzung“ verändert, wodurch natürliche Überschwemmungsbereiche verloren gegangen sind (BÖHNKE & GEYER 2009:101). Daraus resultierende, variierende Wasserstände und Abflussraten können die Wirksamkeit von Hochwasser ebenso beeinflussen. Mit der einsetzenden Umgestaltung der Landoberfläche hat auch die Verschmutzung der Gewässer zugenommen. Konkret erhöhte sich im 19. und 20. Jahrhundert, mit dem Beginn der Industrialisierung und einer ansteigenden Bevölkerungsdichte, der Belastungsgrad von Europas Flusssystemen dramatisch (SCHULZ-ZUNKEL & KRÜGER 2009:1349). Dies hatte Auswirkungen auf die Wasserqualität der Elbe, die Ende der 1980er Jahre als einer der am stärksten kontaminierten Flüsse in ganz Europa bewertet wurde (ZERLING et al. 2006:234). Durch den intensiven Bergbau und der Förderung und Weiterverarbeitung von Metallen im Einzugsgebiet des Flusses reicherten sich verschiedene Elemente und Umweltgifte in diesem an (KRÜGER et al. 2005a:12). In den Folgejahren konnte zwar der Schwermetalleintrag vermindert und die Wasserqualität durch die Modernisierung von Industriestandorten oder dem Bau von Abwasser- und Kläranlagen verbessert werden (ZERLING et al. 2006:234), durch die lange Verweildauer der Schwermetalle, welche „weder mikrobiell noch chemisch abbaubar“ sind (SCHEFFER & SCHACHTSCHABEL 2010:459), existieren aber auch heute noch hohe Belastungen in den Sedimenten der Elbauen (SCHULZ-ZUNKEL & KRÜGER 2009:1350). Dies muss kritisch untersucht werden, da Auenböden „aufgrund ihrer hohen Bodenfruchtbarkeit [...] für landwirtschaftliche (Ackerbau, Grünland- und Weidewirtschaft) und forstwirtschaftliche Nutzungen von hohem Interesse“ sind (RINKLEBE et al. 2009:131). Deutschlandweit werden mehr als 45 % der im Falle eines Hochwassers überfluteten rezenten Auen als Grünland bewirtschaftet (BMU & BfN 2009:7,10). Darüber hinaus beherbergen Auen wie „[k]ein anderes Ökosystem in Mitteleuropa [...] eine vergleichbare Arten- und Lebensraumvielfalt“ (BMU & BfN 2009:4). Wenngleich die Hälfte der rezenten Auen in Deutschland als Natura-2000-Schutzgebiete ausgewiesen ist, wird nur „weniger als 1 % [dieser Flussauen] als sehr gering verändert“ eingestuft (BMU & BfN 2009:4). Dies hebt den anthropogenen Einfluss und die thematisierte Umgestaltung der Flusslandschaften hervor.

Die Schadstoffdeposition in Auen wird maßgeblich von den dortigen Sedimentationsraten, welche an Hochwasser geknüpft sind, reguliert (ZERLING et al. 2006:234). In Sedimenten und Böden akkumulierte Schwermetalle können von Pflanzen aufgenommen und durch verschiedene Transferpfade in Nahrungs- und Lebensmittelkreisläufe überführt werden. In diesem Kontext wurden in Sachsen-Anhalt Empfehlungen zur landwirtschaftlichen Nutzung von Flussauen erarbeitet, um beispielsweise einer „Verschmutzung des Erntegutes oder [...] einem Schadstoffeintrag in die Nahrungskette“ entgegenwirken zu können (LLG 2007:1). Gegenüber den historisch bedingten Verunreinigungen ist der Kontaminationsgrad der heute abgelau-

gerten Sedimente zwar zurückgegangen, es werden aber weiterhin regelmäßig Belastungsgrenzwerte für Umweltgifte in Böden und Pflanzen überschritten (KRÜGER 2005c:51). So konnten in Abschnitten der Mittleren Elbe, die sich von Riesa bis nach Geesthacht erstreckt (IKSE 2005:11), Maßnahmewerte der Bundes-Bodenschutzverordnung für Arsen, Kupfer und Quecksilber nicht eingehalten werden (KRÜGER et al. 2005b:461). In Pflanzen wurden für Arsen, Cadmium und Quecksilber ebenfalls kritische Konzentrationen ermittelt, die oberhalb der zulässigen Höchstgehalte der Futtermittelverordnung liegen (KRÜGER & GRÖNGROFT 2003:439). Da das Einzugsgebiet der Elbe auch in der jüngeren Vergangenheit, wie in den Jahren 2013, 2011, 2010, 2006 und 2002, immer wieder von Hochwasser betroffen war (vgl. IKSE 2016:1 Tabelle 1), muss von einer kontinuierlichen Schadstoffzufuhr in die Auengebiete ausgegangen werden. Vor diesem Hintergrund ist das Monitoring solcher Standorte und insbesondere der, an der ehemals hochgradig belasteten Elbe gelegenen, Auenflächen essentiell, um gegebenenfalls Bewirtschaftungsverbote auszusprechen oder Schutzmaßnahmen einleiten zu können. Durch die komplexen Wirkungszusammenhänge in Auenökosystemen können mittels in situ Messungen und punktuellen Probenahmen kaum ausreichend Informationen über die zeitliche und räumliche Dynamik des Schwermetalleintrages akquiriert werden, insbesondere wenn großflächige Messergebnisse oder Details über abgelegene Testgebiete benötigt werden.

Dahingehend hat die Bedeutung fernerkundungsbasierter Methoden, um Umweltprozesse, -zustände und -veränderungen zu erfassen, welche sowohl die menschliche Gesundheit, als auch das ökologische Gleichgewicht beeinflussen, in den vergangenen Jahren zugenommen. Hyperspektrale Fernerkundungssensoren zeichnen die reflektierte oder emittierte elektromagnetische Strahlung der Erdoberfläche in hunderten Spektralbändern auf, wodurch solche Daten enormes Anwendungspotential besitzen und die Identifikationen einer Vielzahl an Materialien und Landbedeckungen ermöglichen (SLONECKER & FISHER 2014:4). So ist nachvollziehbar, dass die Reflexion von Metallen in der Bodenmatrix oder die Auswirkungen solcher Elemente auf spektrale Pflanzensignaturen potentielle Untersuchungsvariablen darstellen, die es auf Grundlage nicht-abbildender- (Labor- und Feldspektren) und abbildender Spektrometrie (Luft- und Satellitenbilder) auf unterschiedlichen Skalen zu detektieren gilt (SLONECKER & FISHER 2014:7, SHI et al. 2014:169). Die Abschätzung von Bodenparametern und -metallgehalten, basierend auf spektrometrischen Reflexionsmessungen, wurde bereits vielfach getestet und entsprechende Verfahren haben sich im Bereich des Bodenmonitorings etabliert (e.g. BEN-DOR & BANIN 1995, MALLEY & WILLIAMS 1997, JANIK et al. 1998, CHANG et al. 2001, KEMPER & SOMMER 2002, UDELHOVEN et al. 2003, SIEBIELEC et al. 2004, BROWN et al. 2006). Ebenso wurde die Bindung von Metallen an spektral aktive Bodenbestandteile erläutert (e.g. XIA et al. 2007, CHOE et al. 2008, JI et al. 2010) und in den Studien von KOOISTRA et al. (2001) und VOHLAND et al. (2009) wurden Relationen zwischen den Spektren und Schwermetallgehalten von Auenböden sichtbar. Daneben wurde geprüft, inwieweit die Veränderung typischer Absorptions- und Reflexionsmerkmale in Vegetationsspektren auf, in Pflanzenbestandteilen akkumulierte, Metalle zurückgeführt werden kann. Hier konnten Zusammenhänge zwischen Spektralparametern, welche direkt mit Pflanzen- und Blatteigenschaften wie dem Chlorophyll- oder Wassergehalt korrelieren und Elementkonzentrationen nachgewiesen werden (e.g. DUNAGAN et al. 2007, SRIDHAR et al. 2007b, LIU et al. 2008, REN et al. 2008, SLO-

NECKER et al. 2009, GÖTZE et al. 2010, LIU et al. 2011b). Während die Mehrzahl der Studien als Laborexperimente mit standardisierten Rahmenbedingungen, einer geringen Artenvielfalt und einer kontrollierten Schadstoffzufuhr gekennzeichnet sind (e.g. SRIDHAR et al. 2007a, LIU et al. 2008, BANDARU et al. 2010, GÖTZE et al. 2010), wurden Feldspektren oder abbildende Hyperspektraldaten zur Charakterisierung von Pflanzenbelastungen in natürlichen Untersuchungsgebieten oder Flussökosystemen bisher nur selten eingesetzt (e.g. VAN DEVENTER & CHO 2014, WANG et al. 2015).

1.2 Zielstellung und Gliederung der Arbeit

In der vorliegenden Arbeit sollen schwermetallbedingte Boden- und Pflanzenbelastungen analysiert und mit Hilfe hyperspektraler Fernerkundungsdaten abgeschätzt werden. Der flächenhaften Erfassung und Beurteilung des aktuellen Schwermetallbelastungszustandes zweier Auengebiete im Bereich der Mittleren Elbe, unter Verwendung nicht-abbildender und abbildender Spektrometrie, sind insgesamt drei, aufeinander aufbauende, Themenkomplexe zugeordnet. Die wichtigste Datengrundlage bilden Labor- und Feldspektren sowie hyperspektrale Befliegungsdaten, die allesamt den *Visible-* (VIS, 350 - 700 nm), *Near Infrared-* (NIR, 700 - 1000 nm) und *Short Wave Infrared-* (SWIR, 1000 - 2500 nm) Bereich des elektromagnetischen Spektrums abdecken (vgl. HECKER et al. 2010:62). Die einzelnen Bereiche werden in der Ausarbeitung unter dem Begriff des *Visible-Near Infrared* (VNIR, 350 - 2500 nm) zusammengefasst. Zwar beeinflusst die Hochwasserdynamik in den Auen die Schadstoffdeposition entscheidend, die Sedimentationsraten können aber in Abhängigkeit von Standortfaktoren sowohl zeitlich als auch räumlich variieren. Die Morphologie wirkt auf die Überflutungsdauer und -häufigkeit sowie auf die Fließgeschwindigkeit des Wassers ein und sie führt zur Herausbildung unterschiedlicher Bodentypen. Die genannten Zusammenhänge sind vereinfacht in Abbildung 1-1 dargestellt. Zudem ließen sich in KRÜGER et al. (2005b:463) Verbindungen zwischen dem Auenrelief und den Belastungsniveaus nachweisen, sodass die Bedeutung der Feinmorphologie auf die Verteilung der Schwermetallkonzentrationen im besonderen Maße berücksichtigt wird. Neben den Spektraldaten stützt sich die Arbeit auf eine Vielzahl an Boden- und Pflanzenproben, welche in den Jahren 2015 und 2016 auf den Auenflächen erhoben

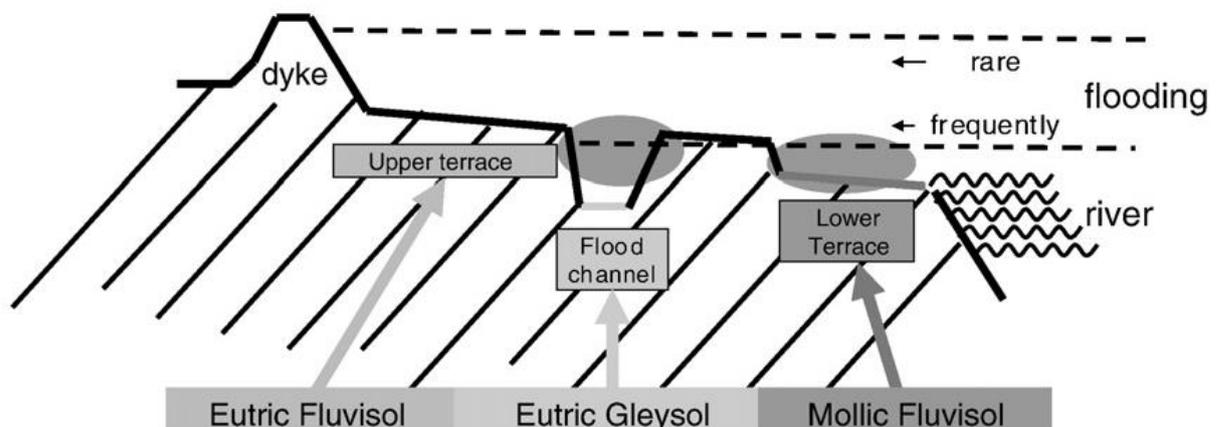


Abbildung 1-1: Charakteristisches Relief in einem Auenökosystem unter Berücksichtigung des dortigen Wasserhaushaltes und der Bodentypen
(verändert, aus: DU LAING et al. 2009:3974)

wurden. Diese sind für die Methodenentwicklung essentiell. Während der Feldkampagnen wurden unterschiedliche Höhenstufen beprobt (Senken, Terrassen, Plateaus) und die Datengrundlage wird durch weitere Boden- und Pflanzenparameter komplettiert.

Die Zielstellung der Arbeit kann wie folgt zusammengefasst werden. Zunächst sollen die Gesamtgehalte der Elemente Arsen (As), Cadmium (Cd), Chrom (Cr), Kupfer (Cu), Eisen (Fe), Quecksilber (Hg), Kalium (K), Nickel (Ni), Blei (Pb) und Zink (Zn) in den Auenböden extrahiert und mittels multivariater statistischer Modelle und spektrometrischer Reflexionsmessungen quantifiziert werden. Dabei wird eine Bewertung der ökotoxikologischen Wirksamkeit der Metalle vorgenommen und der Einfluss der Feinmorphologie auf die Bodenbelastungen und -parameter herausgearbeitet. Weiterhin wird geprüft, inwieweit eine Vorprozessierung der im Labor gemessenen Bodenspektren die Qualität der Modellergebnisse verbessert. In einem nächsten Schritt erfolgt die Beurteilung der Pflanzenvitalität der Auenstandorte auf Basis von Feldspektren und Befliegungsdaten. Hier sollen etwaige Stressmuster aufgedeckt und vegetative Spektralparameter generiert werden, welche morphologisch bedingte Variationen beinhalten und anhand derer die Höhenklassen im Idealfall voneinander separiert werden können. Anschließend werden die Metallkonzentrationen der Pflanzen (As, Kalzium (Ca), Cd, Cu, Fe, Hg, K, Ni, Mangan (Mn), Pb, Zn) aufgearbeitet und der Nutzen der zuvor abgeleiteten Spektralparameter zur Abschätzung der Metallgehalte wird getestet. Dies beinhaltet eine elementspezifische Selektion der Parameter im Vorfeld der Modellierung, ehe die Ansätze auf die Hyperspektraldaten angewendet werden können. In diesem Kontext werden die Resultate der vorhergehenden Themenkomplexe eingebunden und es wird analysiert, ob Zusammenhänge zwischen der Pflanzenbelastung und -vitalität sowie zur Feinmorphologie und zu den Bodenbelastungen bestehen.

Basierend auf der genannten Zielstellung sowie den bekannten Relationen zwischen der Hochwasserdynamik und der existierenden Schwermetallbelastung in den Elbauen, werden folgende Hypothesen abgeleitet, die im Verlauf der Arbeit untersucht und in der späteren Diskussion wieder aufgegriffen werden:

- I. Aufgrund der charakteristischen Überschwemmungsdynamik in Flussauen ist mit einer vermehrten Schwermetallakkumulation in den Flutrinnen und Senken zu rechnen. Gegenüber den Hochflächen sollten diese Bereiche höhere Boden- und Pflanzengehalte aufweisen.
- II. Durch die Bindung von Metallen an spektral sensitive Bestandteile können mittels Bodenspektren robuste Modelle zur Vorhersage der Bodengesamtgehalte gebildet werden.
- III. Wenngleich die Metallakkumulation von Pflanzen komplex und durch diverse Einflussfaktoren gesteuert wird, können anhand der Spektralparameter für Einzelelemente zuverlässige Prognosen über die punktuelle und räumliche Verteilung der Metalle abgeleitet werden.
- IV. Anhand von vegetativen Stressmerkmalen sind Zusammenhänge zwischen der Vitalität und dem Belastungsgrad der Auenvegetation erkennbar.

Im ersten Teil der Arbeit werden die Eigenschaften der untersuchten Metalle dargestellt und für Auenökosysteme relevante Eintrags- und Transferpfade gekennzeichnet. Darauf aufbauend werden spektrale Boden- und Pflanzenmerkmale erläutert, die in Interaktion mit Kontaminationen stehen können und der Entwicklungs- und Forschungsstand bisheriger spektrometrischer Verfahren zur Detektion von Metallgehalten wird aufgezeigt. In den nächsten beiden Kapiteln werden die Lage der Untersuchungsgebiete, die gesamte Datengrundlage und die genaue methodische Vorgehensweise beschrieben. Die Ergebnisse der Laboranalysen, der Pflanzenvitalität und der Modelldurchläufe für Böden und Pflanzen bilden den Schwerpunkt des sechsten Kapitels. Das vorletzte Kapitel beinhaltet eine kritisch geführte Diskussion, in welcher die Belastungssituation der Auenflächen eingeordnet und bewertet wird. Weiterhin werden Vor- und Nachteile der gewählten Verfahren und Modellansätze zusammengetragen und mit den Resultaten anderer Studien verglichen. Abschließend erfolgt ein kurzes Resümee zu den wichtigsten Aspekten dieser Arbeit.

2 Charakteristika und Wirkungspfade von Metallen

In diesem Abschnitt werden zunächst die relevanten Eigenschaften und potentiellen Schädwirkungen der, in der Arbeit berücksichtigten, Metalle zusammengefasst, ehe deren Eintragspfade in Flussökosysteme dargestellt werden. Die Charakterisierung mobilisierender Faktoren, durch die Metallionen in die Bodenlösung freigesetzt und für Pflanzen verfügbar werden, erfolgt in Absatz 2.2. Zuletzt werden der Transferpfad der Metallionen aus der Bodenlösung und anderer Kompartimente in Pflanzenbestandteile sowie deren Einflüsse auf die Pflanzenvitalität erläutert.

2.1 Eigenschaften der untersuchten Metalle

Zunächst können unter dem Begriff der Schwermetalle all jene Metalle zusammengefasst werden, „die sich mit einer Dichte von $> 3,5 \dots 5$ (in gediegenem Zustand) an die Leichtmetalle anschließen“ (SCHEFFER & SCHACHTSCHABEL 2010:459). „Zu ihnen zählen sowohl die für den Stoffwechsel von Menschen, Tieren, Pflanzen und Mikroorganismen notwendigen Spurennährstoffe wie Eisen, Mangan, Chrom, Kupfer, Kobalt, Nickel und Zink als auch Elemente, die keine physiologische Bedeutung besitzen (Blei, Cadmium, Quecksilber, Thallium)“ (SCHEFFER & SCHACHTSCHABEL 2010:459). Folglich lassen sich Schwermetalle in essentielle und nicht-essentielle Elemente untergliedern (ALLOWAY 1999:3). Mit Cd, Cr, Cu, Fe, Hg, Ni, Pb und Zn kann der überwiegende Anteil der in dieser Arbeit untersuchten Metalle der Gruppe der Schwermetalle zugeordnet werden. Ebenso wird das Halbmetall As aufgrund vergleichbarer Eigenschaften, wie etwa seine Dichte oder mögliche Toxizität, ebenfalls als Schwermetall kategorisiert (SCHEFFER & SCHACHTSCHABEL 2010:459). Hinsichtlich der Kontamination von Böden besitzen Schwermetalle „eine besondere Bedeutung [...], da sie bereits in geringen Konzentrationen toxisch wirken [...] und [...] weder mikrobiell noch chemisch abbaubar [sind]“ (SCHEFFER & SCHACHTSCHABEL 2010:459). Sie „können toxisch auf Bodenmikroorganismen und Bodentiere wirken [und] [w]egen ihres ionischen Charakters binden Schwermetalle an verschiedene zelluläre Liganden und ersetzen essentielle Nährstoffe an ihren natürlichen Bindungsstellen von Organismen“ (SCHEFFER & SCHACHTSCHABEL 2010:114). Die potentiell toxische Wirkung der Schwermetalle muss allerdings elementspezifisch und differenziert betrachtet werden.

In elementarer Form wird As im Allgemeinen als nicht-toxisch eingestuft, es „kann aber leicht in toxische Verbindungen überführt werden“ (KRÜGER 2005a:33). In der Bodenlösung liegt As meist als H_2AsO_4^- vor und gegenüber „anderen Schwermetallen steigt die Löslichkeit von As mit ansteigendem pH[-Wert]“ (SCHEFFER & SCHACHTSCHABEL 2010:465). Zu den bedeutendsten As-Sorbenten zählen Eisenoxide (SCHEFFER & SCHACHTSCHABEL 2010:465).

Weitere Arsenspezies stellen Arsenate und Arsenite dar, wobei die Toxizität von Arsenaten als geringer zu bewerten ist (HAHN 2014:33,37, nach CHENG et al. 2009) und diese bei der Pflanzenaufnahme mit den Phosphaten konkurrieren (SCHEFFER & SCHACHTSCHABEL 2010:396). Daneben wird ebenso ein essentieller Nutzen des Metalloids für Menschen und Tiere vermutet (KRÜGER 2005a:32). Demgegenüber tritt Cd als „nicht essentielles, hochgiftiges Element“ auf (HAHN 2014:24), welches zugleich mobil ist und von Pflanzen gut aufgenommen werden kann (SCHEFFER & SCHACHTSCHABEL 2010:467). Im Vergleich zu anderen Schwermetallen ist seine toxische Wirkung für Pflanzen, Tiere und Menschen um ein Vielfaches höher (LfUG 2000:17). Bereits in sehr geringen Konzentrationen kann Cd etwa negativ das Pflanzenwachstum oder die Tätigkeit von Mikroorganismen in Böden beeinflussen (HAHN 2014:24, nach SCHEFFER & SCHACHTSCHABEL 2002). Es existiert meist als Cd^{2+} -Ion in der Bodenlösung und „sein Verhalten [wird] [...] durch unspezifische und spezifische Ad- und Desorptionsprozesse bestimmt“ (HOFACKER 2007:9). Zudem kann Cd als „metallorganischer Komplex sehr stark [im Boden] gebunden“ sein (HOFACKER 2007:9). Ein, für Menschen und Tiere, bedeutungsvolles Spurenelement stellt Cr dar (LfUG 2000:19). Das Schwermetall „liegt in Abhängigkeit von den Redoxbedingungen in drei- und sechswertiger Form [in Böden] vor (SCHEFFER & SCHACHTSCHABEL 2010:464), wobei generell dem Chromat (Cr^{6+}) eine größere Schadwirkung gegenüber Bodentieren, Mikroorganismen und Pflanzen zuzuordnen ist als Chromit (Cr^{3+}) (HAHN 2014:24). Letzteres wird vor allem durch Eisen- und Hydroxide absorbiert (SCHEFFER & SCHACHTSCHABEL 2010:464).

Auch Cu wird als ein, für Pflanzen und Lebewesen essentielles, Spurenmetall charakterisiert (SCHEFFER & SCHACHTSCHABEL 2010:459), welches jedoch in „hohe[n] Konzentration[en] ein hohes ökotoxikologisches Potential“ entfalten kann (HOFACKER 2007:10). So kann beispielsweise eine hohe Cu-Bodenbelastung zu einem „Fe-, Zn- und Mo-[Defizit] [...] bei [...] Pflanzen“ mit entsprechenden Mangelerscheinungen führen (SCHEFFER & SCHACHTSCHABEL 2010:436). Das Metall ist überwiegend an organische Substanzen oder an Eisen- und Manganoxide gebunden (HOFACKER 2007:10). Durch die starken Bindungsmechanismen ist in der Regel der Anteil an frei löslichen Cu^{2+} -Ionen im Boden gering (SCHEFFER & SCHACHTSCHABEL 2010:435). Als „ein unentbehrliches Element für Pflanze, Tier und Mensch“ beschreiben SCHEFFER & SCHACHTSCHABEL (2010:434) die Bedeutung von Fe. Pflanzliche Organismen benötigen das Schwermetall etwa für die Photosynthese oder diverse Stoffwechselfunktionen und nehmen Fe in Form von „organischen Fe(II)- und Fe(III)-Komplexen [...] [aus] der Bodenlösung“ auf (SCHEFFER & SCHACHTSCHABEL 2010:434). Demnach können Pflanzen durch Eisenmangel geschädigt werden, welcher durch eine sich verändernde Blattfarbe sichtbar wird (SCHEFFER & SCHACHTSCHABEL 2010:434f.). Solche Merkmale werden auch durch andere Schwermetalle hervorgerufen, wenn sie in hohen Konzentrationen im Boden vorliegen. Gleichzeitig kann „[e]ine erhöhte Schwermetallaufnahme [...] die Ursache für eine verringerte Fe-Aufnahme sein“ (SCHEFFER & SCHACHTSCHABEL 2010:435). Weiterhin können unter anaeroben Bodenverhältnissen Fe^{2+} -Ionen ebenfalls toxisch auf Pflanzen wirken, wenn simultan ein Defizit an bedeutsamen Spurenelementen vorherrscht (SCHEFFER & SCHACHTSCHABEL 2010:435). Hg repräsentiert hingegen ein für Menschen und Tiere gleichermaßen schädigendes stark toxisches Element (LfUG 2000:23, nach SCHEFFER & SCHACHTSCHABEL 1989), welches „keinen essenziellen Bestandteil des Körpers dar[stellt]“ (KRÜGER 2005a:29). Die

Hg-Konzentration in Böden wird insbesondere durch die „Disproportionierungsreaktion“ geprägt, wobei „Übergänge zu [...] einzelnen Oxidationsstufen [...] maßgeblich von Mikroorganismen beeinflusst“ werden (SCHEFFER & SCHACHTSCHABEL 2010:465). Die Mobilität von Hg kann als gering bewertet werden. Das Schwermetall wird überwiegend durch organische Bodenbestandteile gebunden, wodurch es vor „Verdampfung, Auswaschung sowie [durch die] Aufnahme [von] [...] Pflanzen geschützt“ ist (SCHEFFER & SCHACHTSCHABEL 2010:465).

Neben den zuvor beschriebenen Schwermetallen Cu und Fe werden auch Ni und Zn als „Spurennährelemente oder Mikronährelemente bezeichnet“ (SCHEFFER & SCHACHTSCHABEL 2010:430). Pflanzen benötigen nur geringe Konzentrationen an Ni, weshalb in der Regel „keine Mangelernährung unter Feldbedingungen auftritt“ (SCHEFFER & SCHACHTSCHABEL 2010:430). In der Bodenlösung existiert Ni meist als „Ni²⁺-Ion [...]“ sowie als organischer Ni-Komplex“ (HOFACKER 2007:10). „An Fe-, Mn-Oxiden und Tonmineralen“ findet eine stärkere Fixierung des Metalls statt (HOFACKER 2007:10). Zn hingegen wird überwiegend „als Zn²⁺ [...], Zn(OH)⁺ sowie in Form gelöster organischer Zn-Komplexe aus der Bodenlösung [von Pflanzen] aufgenommen“ und beispielsweise für die Chlorophyllproduktion benötigt (SCHEFFER & SCHACHTSCHABEL 2010:437). Das Gefahrenpotential des Elementes wird als äußerst gering eingeschätzt (LfUG 2000:38). Ein Zn-Mangel kann jedoch Symptome wie ein „verringertes Pflanzenwachstum und Kleinblättrigkeit“ verursachen und sehr hohe Zn-Konzentrationen können „toxisch auf Pflanzen und Mikroorganismen wirken“ (SCHEFFER & SCHACHTSCHABEL 2010:437). Als ein „nicht essentielles, toxisches und nahezu ubiquitär verbreitetes Element“ wird Pb eingeordnet (LfUG 2000:28, nach REIMANN & CARITAT 1998). Es wird als immobil bewertet und „Fe-, Al- und Mn-Oxide zeigen eine hohe Bindungskapazität für“ das Schwermetall (HOFACKER 2007:10). Aufgrund seiner starken Fixierung wird Pb nur „schwach durch gelöste organische Substanzen [...] mobilisiert“ (HAHN 2014:21, nach OPP 1999, HERMS & BRÜMMER 1984). Entsprechend wenig Pb wird von Pflanzen akkumuliert, wodurch die potentiell toxische Wirkung des Metalls verringert wird. Eine Ausnahme stellen Standorte „mit sehr hohen Bleikonzentrationen“ dar, auf welchen das „Pflanzenwachstum und [die] mikrobielle[...] Aktivität“ von Bodenorganismen eingeschränkt sein kann (HAHN 2014:26, nach SCHEFFER & SCHACHTSCHABEL 2002).

Ergänzend zu den dargestellten Schwermetallen wurden drei weitere Elemente in der Arbeit berücksichtigt, welche toxisch unwirksam sind, aber einen relevanten Nutzen für Pflanzen und Tiere aufweisen. Ein solch fundamentales Element stellt das Erdalkalimetall Ca dar, dessen Ionen (Ca²⁺) von Pflanzen akkumuliert werden und welches u.a. „als Kalk zur Steuerung der Bodenreaktion [...] [und zur] Erhaltung eines optimalen pH-Wertes für das Pflanzenwachstum“ verwendet wird (LfUG 2000:41, SCHEFFER & SCHACHTSCHABEL 2010:427). Das Metall ist in Form von „Phytin, Pektin und Ca-Phosphat“ in Pflanzen fixiert und Ca bedingte Mangelsymptome treten für gewöhnlich nicht in Erscheinung (SCHEFFER & SCHACHTSCHABEL 2010:427). Das Alkalimetall K repräsentiert ein weiteres „für alle Lebewesen essentielles Element“ (SCHEFFER & SCHACHTSCHABEL 2010:423), das „[f]ür die Bewertung der Nährstoffausstattung der Böden [...] eine zentrale Position ein[nimmt]“ (LfUG 2000:42). Als K⁺-Ion wird K von Pflanzen aus der Bodenlösung aufgenommen, wo es zur „Einstellung des osmotischen Drucks und [...] [zur] Regulierung des Wasserhaushaltes“ eingebunden wird (SCHEFFER & SCHACHTSCHABEL 2010:423). Sind Pflanzen ausreichend mit K versorgt, so

steigert dies deren Resistenz gegenüber natürlichen Stressfaktoren wie Dürre und Frost. Demgegenüber kann ein K-Defizit das Welken von Blättern beschleunigen (SCHEFFER & SCHACHTSCHABEL 2010:423). Das Übergangsmetall Mn wird ebenso als „unentbehrliches Spurenelement“ betrachtet (LfUG 2000:25, nach SCHEFFER & SCHACHTSCHABEL 1989), dessen frei verfügbare Ionen (Mn^{2+}) sich ähnlich wie bei Ca und K zuvor in den Pflanzen anreichern. Das Element ist beispielsweise für die Photosynthesefunktion und Chlorophyllbildung unentbehrlich und ein Mangel an Mn kann verschiedene Krankheitssymptome wie Chlorose bedingen (SCHEFFER & SCHACHTSCHABEL 2010:430).

Das Kapitel hat die ökotoxikologische Relevanz und den Nutzen verschiedener Metalle veranschaulicht. Während etwa Ca und K als Hauptnährelemente und Cu, Fe, Mn, Ni und Zn als Spurennährelemente für Lebewesen, hinsichtlich ihrer Ernährung, Vitalität und ihrem Wachstum, entscheidend sind, repräsentieren As, Cd, Cr, Hg und Pb, unter Bezugnahme entsprechender chemischer Verbindungen, Schwermetalle mit einem hochtoxischen Potential. Folglich können insbesondere Schwermetalle nicht verallgemeinernd als giftig für Lebewesen bewertet werden. Die Gefahrenwirkung einzelner Elemente muss dennoch beachtet werden. Insbesondere die Bodenkonzentration der jeweiligen Metalle ist für Pflanzen von Bedeutung, da Mangelercheinungen und Toxizitätsmerkmale gleichermaßen, in Folge niedriger beziehungsweise hoher Elementeinträge, hervorgerufen werden können. Neben der Konzentration der einzelnen Elemente in den Böden muss elementspezifisch der Boden-Pflanze-Wirkungspfad und die Mobilität der Metalle, welche maßgeblich durch verschiedene Bodenparameter beeinflusst wird, berücksichtigt werden. Die entsprechenden Faktoren werden, in Verbindung mit den Quellen und Eintragungswegen der Metalle, in dem folgenden Kapitel aufgearbeitet.

2.2 Eintragungspfade und bodenspezifische Mobilitätsfaktoren

Die im vorhergehenden Abschnitt der Arbeit charakterisierten und „ab bestimmten Konzentrationen toxisch wirksame[n] Elemente wie beispielsweise Arsen oder [...] Quecksilber, Blei, Cadmium [...] und Kupfer, finden sich im gesamten Elbe-Einzugsgebiet“ wieder (KRÜGER et al. 2005a:12). Der Elementeintrag in das Flussökosystem muss dabei differenziert betrachtet und in natürliche und anthropogene Eintragungspfade untergliedert werden. „[So] wurden [Metalle] aus den Elbe-begleitenden Mittelgebirgsregionen (Riesengebirge, Böhmerwald, Adlergebirge, Isergebirge, Erzgebirge, Harz) schon immer durch Wind- und Wassererosion abgetragen [...] und entsprechend der jeweiligen Flussdynamik teils abgelagert, teils weiterspült“ und letztlich in die Elbe überführt (KRÜGER et al. 2005a:12). Da Metalle „natürliche Bestandteile von Mineralen“ sind (SCHEFFER & SCHACHTSCHABEL 2010:459), bedingt dieser Eintrag „die sogenannte geogene Hintergrundbelastung“ in den Gewässern (KRÜGER et al. 2005a:12). Daneben wird der „geogene Grundgehalt [...] [durch das] Ausgangsgestein (lithogener Anteil), ggf. Vererzungen (chalkogener Anteil) und [...] pedogenetische Prozesse beeinflusst“ (SCHEFFER & SCHACHTSCHABEL 2010:462). Mit dem Beginn der Industrialisierung und einer zunehmenden Bevölkerungsdichte nahm der anthropogene Druck auf Europas Flüsse im 19. und 20. Jahrhundert merklich zu, wodurch die Metallkonzentrationen in den Gewässern stark anstiegen (SCHULZ-ZUNKEL & KRÜGER 2009:1349). Folglich nahm auch die Wasserqualität

der Elbe ab, die Ende der 1980er Jahre als einer der am stärksten verunreinigten Flüsse in ganz Europa eingestuft wurde (ZERLING et al. 2006:234). Betrachtet man die Mittelgebirgsregion des Elbe-Einzugsgebietes, so kann der Bergbau als einer der größten anthropogenen Schadstoffquellen angesehen werden. Aus der Förderung und Bearbeitung von Metallen resultieren „Spülwässer, [...] Abraum [...] [und] Abfallprodukte der Verhüttung“, wodurch sich verschiedene Elemente in Gewässer anreichern können (KRÜGER et al. 2005a:12). Weitere bedeutsame „[a]nthropogene Quellen von Schwermetallen sind Emissionen aus Industrie- und Verbrennungsanlagen und Kraftfahrzeugen“ (SCHEFFER & SCHACHTSCHABEL 2010:459). Zudem werden Metalle „[d]urch [die] Verwertung metallhaltiger Abfälle, Abwasserverrieselung, Verwendung von Düngern und Pestiziden [...] direkt in Böden eingetragen“ (SCHEFFER & SCHACHTSCHABEL 2010:459). Diese diffusen Schadstoffanteile müssen dem geogenen Hintergrundgehalt hinzuaddiert werden (KRÜGER et al. 2005a:12).

Ein essentieller Faktor hinsichtlich der Schadstoffdeposition in Flussauen sind die dortigen Sedimentationsraten. In Form von *suspended particulate matter* sind Metalle in Fließgewässern hauptsächlich an Schwebstoffe gebunden, weshalb die Verlagerung dieser den Haupteintragspfad der Elemente in Auenböden kennzeichnet (ZERLING et al. 2006:234). Dabei beeinflussen Hochwasser die Wasserqualität und den Sedimenteintrag in die Überschwemmungsbereiche entscheidend, da in Folge von Hochwasserereignissen „bereits abgelagerte Sedimente mobilisiert, und [...] weitere Schadstoffquellen aktiviert werden“ können (KRÜGER 2005a:28). Konkret „[steigt] [m]it der Zunahme der Durchflussmenge im Fließgewässer [...] die Fließgeschwindigkeit des Wassers an“, wodurch Sedimente zunehmend aufgewirbelt und mobilisiert werden, was sich in „höheren Schadstoffgehalten in der Flutwelle“ widerspiegelt (KRÜGER 2005a:28). Zur Bewertung der Belastungssituation sind neben den partikulär gebundenen Anteilen auch die gelösten Stoffanteile in der Wasserphase von Bedeutung (KRÜGER 2005a:30). Wie in Abbildung 2-1 a) ersichtlich, variieren diese Anteile in Abhängigkeit vom jeweiligen Metall enorm. Während etwa Elemente wie Cr, Hg und Pb zu mehr als 80% partikulär gebunden sind, werden As, Cu und Ni vorwiegend in gelöster Form im Wasser transportiert. Die Abbildung 2-1 b) zeigt den, während des Sommerhochwassers 2002

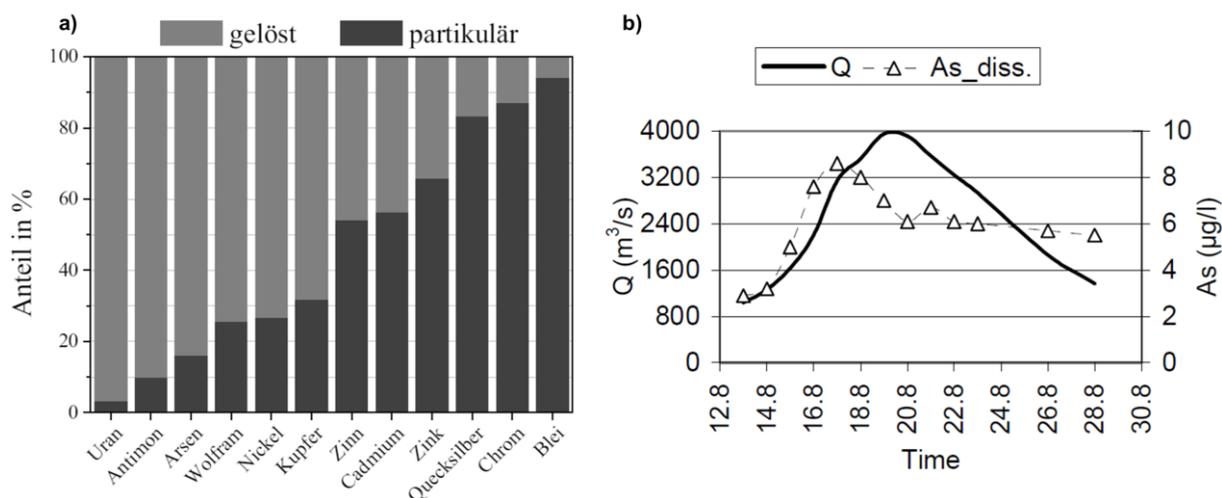


Abbildung 2-1: a) Gelöste und partikuläre Anteile von verschiedenen Elementen in der Wasserphase und b) beispielhafte Veränderung des gelösten Anteiles an As während des Sommerhochwassers 2002 an der Elbe (Probenahme nahe Magdeburg)
(verändert, aus KRÜGER 2005a:30, BABOROWSKI et al. 2004:142)

nahe Magdeburg, gemessenen Abfluss der Elbe und den darin gelösten Anteil an As. Die Grafik veranschaulicht beispielhaft die thematisierte Schadstoffzunahme im Wasser während eines Hochwasserereignisses. Der Elementeintrag kann jedoch nicht verallgemeinert werden. Er schwankt vielmehr elementspezifisch in seiner räumlichen und zeitlichen Dimension (vgl. BABOROWSKI et al. 2004:142 Abbildung 8 und 9). Zieht sich das Hochwasser zurück, so bleiben auf den Überschwemmungsflächen schadstoffbelastete Ablagerungen liegen. Diese „Schlämme oder [...] Sedimente sind abgesetzte Schwebstoffe und deshalb mit den gleichen Inhaltsstoffen behaftet“ (KRÜGER 2005b:38). Bei ihnen existiert ebenfalls keine gleichförmige Belastung. Insofern führt eine Hochwassersituation „nicht in jedem Fall zu einer Erhöhung der Schadstoffgehalte im Schwebstoff und Schlamm“ (KRÜGER 2005b:44).

Ebenso komplex und variabel wie der Eintrag von Metallen in Auenböden sind die Mechanismen und Faktoren, welche den Anteil an frei verfügbaren Metallionen im Boden regulieren. Die Ionenkonzentration wird durch das interaktive Zusammenspiel der Prozesse der *“sedimentation, adsorption, co-precipitation, cation exchange, complexation, microbial activity, and plant uptake“* bestimmt (SCHULZ-ZUNKEL & KRÜGER 2009:1351, nach MATAGI et al. 1998). Die Stärke dieser Prozesse resultiert aus dem Gleichgewicht zwischen den Metallionen und den Tonmineralen, der organischen Substanz sowie den hydratisierten Oxiden. Zudem wird die Balance maßgeblich durch den im Boden vorliegenden pH-Wert und Redox-Zustand determiniert (SCHULZ-ZUNKEL & KRÜGER 2009:1351, nach LINDSAY 1979, MATAGI et al. 1998, VAN GRIETHUYSEN et al. 2005). Auenböden sind dem Einfluss stetig wechselnder Wasserstände ausgesetzt, die über das Jahr hinweg u.a. zu einer temporären Wassersättigung führen und wodurch sowohl feuchte als auch trockene Bodenbedingungen hervorgerufen werden (SCHULZ-ZUNKEL & KRÜGER 2009:1352). Neben dem Wassergehalt unterliegen auch die Temperatur und die Verfügbarkeit an organischer Substanz saisonalen Schwankungen, die allesamt auf den Redoxgradienten einwirken, wobei *“the mobilization of trace metals [...] is strongly dependent on redox gradients“* (SCHULZ-ZUNKEL & KRÜGER 2009:1352, nach HAMILTON-TAYLOR & DAVISON 1995, OLIVIE-LAUQUET et al. 2001). In der Arbeit von OLIVIE-LAUQUET et al. (2001:943) wurde eine vermehrte Freisetzung von Spurenmetallen nachgewiesen, die mit einem deutlichen Rückgang des Redoxpotentials, mit einem Temperaturanstieg und einer Zunahme an organischem Kohlenstoff im Boden einherging (SCHULZ-ZUNKEL & KRÜGER 2009:1352). Nicht jedes Überschwemmungsereignis mindert dabei zwangsweise das Redoxpotential. So scheinen Sommerhochwasser einen stärkeren Effekt auf die Mobilisierung von Substanzen auszuüben als vergleichbare Winterereignisse und der Redoxgradient fluktuiert in Senken und Flutrinnen stärker als auf umliegenden Hochflächen. Auch die Dauer der Hochwasserphase übt einen Effekt auf den Redox-Zustand aus (SCHULZ-ZUNKEL & KRÜGER 2009:1352f., nach SCHWARTZ 2001, HEINRICH et al. 2000).

Diverse Redoxreaktionen reglementieren zugleich die Dekomposition organischer Substanzen, die aufgrund ihrer Adsorptionswirkung und durch die Bildung metallorganischer Komplexe bedeutsam für die Retention von Spurenmetallen in der Bodenmatrix sind (vgl. SCHULZ-ZUNKEL & KRÜGER 2009:1353). Konkret wird die Mobilität sedimentbindender Kontaminanten und der Ein- und Austrag entsprechender Substanzen durch den organischen Kohlenstoffanteil beeinträchtigt (SCHULZ-ZUNKEL & KRÜGER 2009:1353, nach OLIVIE-LAUQUET et al. 2001, VAN GRIETHUYSEN et al. 2005). In der Studie von KRÜGER et al. (2005b) wurden

signifikante Korrelationen zwischen Schwermetallkonzentrationen und dem organischen Kohlenstoffgehalt nachgewiesen, was *“the importance of soil carbon as an indicator for soil contamination in the Elbe floodplains“* hervorhebt (KRÜGER et al. 2005b:463). Weiterhin wurden Zusammenhänge zwischen der Feinmorphologie, der Überschwemmungshäufigkeit und dem organischen Kohlenstoffgehalt sichtbar (SCHULZ-ZUNKEL & KRÜGER 2009:1353, nach KRÜGER et al. 2005b). Daneben ist die Wirksamkeit der organischen Substanz auf die Spurenmetallmobilität standortabhängig und an die Zusammensetzung der Bodenlösung sowie an die Quantität und Qualität der organischen Substanz gekoppelt. Zudem wird in Böden, die durch pH-Werte < 4.5 gekennzeichnet sind, der Effekt der organischen Substanz auf derartige Prozesse deutlich abgeschwächt (SCHULZ-ZUNKEL & KRÜGER 2009:1353, nach KALBITZ & KNAPPE 1997, KALBITZ & WENNRICH 1998).

Da die Mobilität der meisten Metalle unter zunehmend sauren Milieubedingungen ansteigt, wird der pH-Wert im Allgemeinen als Hauptfaktor bezeichnet, der die Konzentration löslicher und pflanzenverfügbarer Metalle im Boden reguliert (SCHULZ-ZUNKEL & KRÜGER 2009:1353f., nach ALLOWAY 1997, BRALLIER et al. 1996). Dies liegt weniger an dem pH-Wert an sich, sondern vielmehr an der pH-Wert Abhängigkeit mobilitätssteuernder Parameter. Demnach werden beispielsweise die Oberflächenladung mehrerer Bodenbestandteile, Ausfällungs- und Lösungsreaktionen, das zuvor erläuterte Redoxpotential oder die Sorptionswirkung von Kationen grundlegend beeinflusst (SCHULZ-ZUNKEL & KRÜGER 2009:1354, nach ADRIANO 2001). Bereits HERMS & BRÜMMER (1984) konnten anhand ihrer Laborstudie dokumentieren, dass mit sinkendem pH-Wert „die Löslichkeit der Schwermetalle in Böden mit geringeren Gehalten an organischer Substanz [...] in der Reihenfolge $Pb < Cu < Zn < Cd$ zu[nimmt]“ (HERMS & BRÜMMER 1984:421). KRÜGER et al. (2004) bewerteten in diesem Kontext und auf Basis von Geländemessungen an der Mittleren Elbe die Mobilität von Metallen. Die Autoren generierten eine Mobilitätsreihe mit „ $Cd (3.6 \%) \gg Zn (0.9 \%) > Cu (0.2 \%) \gg As (0.07 \%) > Pb (0.03 \%)$ “, wobei die Zahlen den mobilisierbaren Anteil im Vergleich zum Totalgehalt widerspiegeln (KRÜGER et al. 2004:244). Dies geht mit den in Kapitel 2.1 erläuterten Eigenschaften der Metalle konform und weitere Studien konnten für Cd und Zn ebenfalls die höchsten Mobilitätsraten in alluvialen Böden nachweisen (vgl. SCHULZ-ZUNKEL & KRÜGER 2009:1354).

Hydratisierte Fe-, Mn- und Al-Oxide repräsentieren essentielle Bodenkomponenten, die einerseits den frei beweglichen Anteil an Spurenmetallen erhöhen, andererseits aber auch kristalline und äußerst stabile Strukturen bilden können, welche Metalle binden und immobilisieren. Derartige Prozesse verlaufen in Abhängigkeit von den vorliegenden Redoxbedingungen und variieren je nach Element (vgl. SCHULZ-ZUNKEL & KRÜGER 2009:1354f.). Folglich sind Metallionen durch unterschiedliche Adsorptionsaffinitäten gegenüber Oxiden gekennzeichnet, wie sie beispielhaft durch die Abfolge „ $Pb > Cu > Zn > Cd$ [...] $> Mn$ [...] $> Ca$ “ verdeutlicht werden (SCHULZ-ZUNKEL & KRÜGER 2009:1355, nach TRIVEDI & AXE 2000). Gleichzeitig besitzen Oxide verschiedene Bindungspräferenzen gegenüber Spurenmetallen. Während Manganoxide vorzugsweise Cu, Ni, Cobalt (Co) und Pb adsorbieren, beanspruchen Eisen- und Aluminiumoxide überwiegend Pb und Cu (SCHULZ-ZUNKEL & KRÜGER 2009:1355, nach ADRIANO 2001). Die genannten Relationen werden darüber hinaus durch die Häufigkeit, in welcher die jeweiligen Oxide im Boden vorkommen, und durch die Art der

Zusammenschlüsse gesteuert. Für Böden im Bereich der Mittleren Elbe scheinen insbesondere Eisenoxide in Form von Ferrihydrit von Bedeutung zu sein. Vorangegangene Studien haben außerdem gezeigt, dass As primär an hydratisierte Oxide gebunden wird (SCHULZ-ZUNKEL & KRÜGER 2009:1355, nach FITTSCHEN & GROENGRÖEFT 2000, SCHWARTZ 2001).

Wenngleich Tonminerale auf die Retention von Metallen eine geringere Wirkung als die zuvor beschriebenen Parameter ausüben, weisen sie aufgrund ihrer Häufigkeit, mit der sie in den Böden vorkommen, eine enorme Bedeutung auf. Ähnlich wie bei den hydratisierten Oxiden bestimmen die Art der Tonminerale und der pH-Wert deren Sorptionskapazität grundlegend. Unter sauren Bodenbedingungen verschlechtern hohe Tongehalte die Löslichkeit von Metallen (SCHULZ-ZUNKEL & KRÜGER 2009:1355, nach KUNTZE et al. 1984, KUNTZE & HERMS 1986). In den Böden der Mittleren Elbe dominieren Tonminerale in Form von Illiten und Kaoliniten, woraus eine mittlere Austauschkapazität gegenüber Metallen abgeschätzt werden kann. Daneben existieren Abstufungen hinsichtlich der Korngröße in Relation zu der Feinmorphologie. So überwiegen in den Senkenbereichen Tone und Silte, wohingegen auf Hochflächen das Bodensubstrat einen merklich höheren Sandanteil besitzt (vgl. SCHULZ-ZUNKEL & KRÜGER 2009:1355).

Im Rahmen des Kapitels wurden die Eintragswege der Metalle in natürliche Ökosysteme und deren Böden aufgezeigt. Es wurde ersichtlich, dass die geogenen Hintergrundgehalte durch eine Fülle an anthropogenen und natürlichen Spurenmetallquellen um ein Vielfaches überschritten werden können. Für Auenbereiche sind vor allem die Dauer und Intensität von Hochwasser, in Folge dessen Kontaminanten remobilisiert, transportiert und später abgelagert werden, von Interesse. Bedeutsamer als der eingetragene Gesamtgehalt an Metallionen, ist deren frei verfügbarer Anteil, der durch das Zusammenspiel verschiedener Bodenparameter gesteuert wird. Eine umfangreiche elementspezifische Zusammenfassung der Faktoren, welche die Mobilität und Verfügbarkeit der jeweiligen Metalle in Auenböden an der Elbe regulieren, bietet die Arbeit von SCHULZ-ZUNKEL & KRÜGER (2009) (vgl. SCHULZ-ZUNKEL & KRÜGER 2009:1358 Tabelle 6). Durch die enge Verknüpfung und wechselseitige Beeinflussung dieser Parameter, unterliegt die Freisetzung von Metallionen räumlichen und zeitlichen Schwankungen. Befinden sich potentielle Schadstoffe in der Bodenlösung, können diese in diverse Pflanzenbestandteile weitertransportiert werden. Die Aufnahme, Akkumulation und etwaige Reaktionen der Pflanzen auf bestimmte Metalle bilden den Schwerpunkt des nächsten Kapitels.

2.3 Der Boden-Pflanze-Wirkungspfad

Neben den in Kapitel 2.2 beschriebenen Bodenparametern, durch welche die Pflanzenverfügbarkeit bestimmter Metalle reguliert wird, bedingen eine Vielzahl weiterer Faktoren die pflanzenspezifische Metallaufnahme. Die Faktoren umfassen beispielsweise die Art der Pflanze und deren Größe, den Konkurrenzkampf zwischen verschiedenen Pflanzenspezies oder das Wurzelsystem und das Entwicklungsstadium der jeweiligen Pflanze (vgl. SCHULZ-ZUNKEL & KRÜGER 2009:1356). Ebenso können steigende Umgebungstemperaturen und eine erhöhte Lichtintensität zu einer vermehrten Metallaufnahme führen (GREGER 2004:12, SCHULZ-ZUNKEL & KRÜGER 2009:1356, nach KABATA-PENDIAS & PENDIAS 2001). Weiterhin

wird die Bioverfügbarkeit der Metalle maßgeblich durch deren Verteilung innerhalb verschiedener Bodenfraktionen beeinflusst, wobei Spurenmetalle in austauschbarer Form die höchste Löslichkeit aufweisen (SCHULZ-ZUNKEL & KRÜGER 2009:1356). Generell kann der Boden-Pflanze-Wirkungspfad in drei weitere Teilpfade untergliedert werden. Das Landesumweltamt Brandenburg (LUA) differenziert in ihrem Leitfaden zur Detailuntersuchung des Wirkungspfad zwischen Boden und Nutzpflanzen einen „Systemische[n] Pfad“, einen „Luft-Pfad“ und einen „Verschmutzungspfad“ (LUA 2010:12). Der „Systemische[.] Pfad [kennzeichnet] die Aufnahme von Schadstoffen mit dem Bodenwasser in die Wurzel und [den] nachfolgende[n] Stofftransfer mit dem Transpirationsstrom in andere Pflanzenorgane“ (LUA 2010:12). Der Eintrag über die Luft ist durch die „[Aufnahme] von leichtflüchtigen Schadstoffen [...] über die Spaltöffnungen bzw. Kutikula der Blätter und [die] Verteilung [der Stoffe] innerhalb des pflanzlichen Gewebes“ charakterisiert (LUA 2010:12). Die Metallakkumulation über diesen Transferpfad ist jedoch „nur in Emittentennähe [und] bei wenig mobilen Metallen wie z. B. Blei“ relevant (SCHEFFER & SCHACHTSCHABEL 2010:467). Für Auenökosysteme ist insbesondere der „Verschmutzungspfad“ von Bedeutung, welcher „die Anlagerung von schadstoffhaltigen Bodenpartikeln an oberirdische Pflanzenorgane infolge meteorologischer [...], standortbedingter [...] und/oder nutzungsbedingter Einflüsse“ umfasst (LUA 2010:12). Ein entsprechender Eintrag findet während Hochwasserereignisse auf Überschwemmungsflächen statt (vgl. GRÖNGRÖFT et al. 2005:466ff.).

Die Metallaufnahme kann letztlich durch die Prozesse der Akkumulation, Indikation oder Exklusion erfolgen, wobei die Absorption der Metalle, die auch essentielle Nährstoffe repräsentieren können (vgl. Kapitel 2.2), durch die Wurzeln der Pflanzen als Haupteintragspfad angesehen wird (SCHULZ-ZUNKEL & KRÜGER 2009:1356, nach FERGUSON 1990, KABATA-PENDIAS & PENDIAS 2001). Die Aufnahme der Metalle durch verschiedene Pflanzenbestandteile ist wiederum, neben den bereits einleitend beschriebenen Faktoren, von weiteren Parametern abhängig. Im Allgemeinen können mehr Metalle aufgenommen werden, wenn die Metallkonzentration im Boden ansteigt, wobei die Aufnahme nicht linear mit dem steigenden Konzentrationslevel korreliert. Dies muss in Verbindung mit einsetzenden Sättigungseffekten ab bestimmten Metallkonzentrationen gesehen werden. Folglich ist die Aufnahmeeffizienz oder der Akkumulationsfaktor der Pflanzen höher, wenn niedrigere Metallgehalte im Boden existieren. Weiterhin fördert eine große Wurzelfläche und eine damit einhergehende größere Absorptionsfläche die Effektivität der Metallaufnahme. Gleichzeitig nimmt die Metallkonzentration in den einzelnen Pflanzenbestandteilen durch den Vorgang der biologischen Verdünnung mit einer zunehmenden Wurzelbiomasse ab. Darüber hinaus wird die Aufnahmeeffizienz durch konkurrierende Wurzeln verschiedener Pflanzen in der Bodenmatrix abgeschwächt (GREGER 2004:11, nach EKVALL & GREGER 2003, MARSCHNER 1995). Über die Wurzeln erfolgt zunächst der Weitertransport der Metalle in den Apoplast, von wo aus ein Teil der Gesamtmenge in Zellen oder in den Apoplast selber verlagert sowie an Substanzen der Zellwände gebunden wird. Die Verteilung der Metalle innerhalb dieser drei Kompartimente ist vom jeweiligen Metall, dem Genotyp der Pflanze und von externen Faktoren abhängig (GREGER 2004:7f.). Die Bewegung der Metalle aus der Bodenlösung in die Zellwände stellt dabei einen nicht-metabolischen passiven Prozess dar, welcher durch Diffusion oder Massenfluss angetrieben wird (GREGER 2004:8, nach MARSCHNER 1995). Weiterhin können

2 Charakteristika und Wirkungspfade von Metallen

Tabelle 2-1: Koeffizienten des Boden-Pflanze-Transfers für ausgewählte Metalle sowie normale und kritische Wertebereiche der Elemente für Pflanzen und Tierfutter (in mg kg⁻¹ m_T)
(verändert, aus SCHEFFER & SCHACHTSCHABEL 2010:467)

Metall	Transferkoeffizient	normal in Pflanzen	kritisch für Pflanzenwuchs	kritisch als Tierfutter
As	< 0.5	< 0.1...5	10...20	> 50
Cd	0.03...10	< 0.1...1	5...10	0.5...1
Cr	< 0.5	0.1...1	1...2	50...3000
Cu	0.01...2	3...15	15...20	30...100
Hg	< 0.05	< 0.1...0.5	0.5...1	> 1
Ni	0.01...2	< 0.1...5	20...30	50...60
Pb	< 0.5	1...5	10...20	10...30
Zn	0.03...10	15...150	150...200	300...1000

die Metalle, ausgehend von dem Apoplast, durch die Plasmamembran in das Cytoplasma transportiert werden, in welchem eine Bindung an verschiedene Makromoleküle vollzogen wird (GREGER 2004:8f.). Daneben findet sowohl die Aufnahme als auch die Freisetzung essentieller und nichtessentieller Metalle über die Stomata der Blätter statt (GREGER 2004:9f.).

Neben der ungleichen Metallakkumulation in Abhängigkeit von der Pflanzenart können auch Differenzen „zwischen den Sorten einer Art sowie einzelnen Pflanzenteilen [...] bestehen“ (SCHEFFER & SCHACHTSCHABEL 2010:467). So akkumulieren beispielsweise „Blattgemüse [...] Schwermetalle wesentlich stärker als Gräser“ (SCHEFFER & SCHACHTSCHABEL 2010:467). Weiterhin beschreiben SCHEFFER & SCHACHTSCHABEL (2010), dass „Wurzeln und Blätter [...] häufig hohe, Stängel, Früchte und Körner geringe Metallgehalte auf[weisen]“ (SCHEFFER & SCHACHTSCHABEL 2010:468). Dies stimmt im Wesentlichen mit der vom LUA veröffentlichten Reihenfolge, bezüglich der Schadstoffakkumulation in Pflanzenbestandteilen, überein (Wurzel >> Spross ≥ Blatt >> Frucht) (LUA 2003:33). Die Aufnahme der Metalle innerhalb des Boden-Pflanze-Wirkungspfades wird neben den dargestellten boden- und pflanzenspezifischen Einflussfaktoren auch von der Art beziehungsweise der Löslichkeit des jeweiligen Metalls im Boden beeinflusst (vgl. Kapitel 2.2). Entsprechend variieren die Transferkoeffizienten, welche zur „quantitative[n] Abschätzung des Stofftransfers im System Boden/Pflanze“ dienen (LUA 2010:28). Tabelle 2-1 liefert in diesem Kontext Wertebereiche von Transferkoeffizienten für ausgewählte Elemente sowie Angaben über normale und kritische Metallkonzentrationen in Pflanzen. Die Tabelle verdeutlicht, dass die Wertebereiche „[i]n Abhängigkeit von der betrachteten Pflanzenart und dem Bodensubstrat“ enormen Schwankungen unterliegen und dass die Koeffizienten, wenn verschiedene Metalle gegenüber gestellt werden, um das 1000 Fache variieren können (SCHEFFER & SCHACHTSCHABEL 2010:467).

Metalle wie As, Cr, Hg und Pb werden aufgrund der starken Bindungsmechanismen im Boden nur in geringen Anteilen von Pflanzen akkumuliert. Folglich ist „ein Eintritt [dieser Elemente] in die Nahrungskette nur bei sehr hohen Bodenbelastungen zu befürchten“ (SCHEFFER & SCHACHTSCHABEL 2010:467). Demgegenüber können Cd und Zn sehr gut von Pflanzen aufgenommen werden (vgl. Tabelle 2-1). Vergleichbare Zusammenhänge wurden auch von GRÖNGRÖFT et al. (2005) beschrieben, welche die Pflanzenverfügbarkeit diverser Metalle in Oberbodenproben von Elbauenstandorten analysierten. Die Autoren bewerteten die Mobilität der Elemente in der Reihenfolge $Cd > Zn > Cu \approx Pb > As > Hg$ (GRÖNGRÖFT et al. 2005:466). In einer weiteren entlang der Elbe angelegten Studie beurteilten OVERESCH et al. (2007) den für Pflanzen nutzbaren mobilen Anteil wie folgt: $Cd > Zn > Ni > > Pb, Cu > As, Cr, Hg$ (OVERESCH et al. 2007:803, vgl. SCHULZ-ZUNKEL & KRÜGER 2009:1357). Jenes muss in Relation zu den vorhergehend erläuterten Bindungsmechanismen und den daraus resultierenden Mobilitätsraten der Elemente gesehen werden (vgl. Kapitel 2.2., KRÜGER et al. 2004:244). Weitere Kennzahlen zu Schwermetall- und Arsengehalten in Grünlandvegetation im Bereich der Elbe liefert die Studie von KRÜGER & GRÖNGRÖFT (2003) (vgl. KRÜGER & GRÖNGRÖFT 2003:439 Tabelle 2).

Werden kritische Konzentrationslevel in den Pflanzen erreicht, können diese sowohl indirekt als auch direkt die Pflanzenvitalität affektieren. Direkt können etwa cytoplasmatische Enzyme gehemmt oder die Zellstruktur durch oxidativen Stress geschädigt werden. Die Neu-besetzung essentieller Nährstoffe an Kationenaustauschflächen durch Metallionen ist hingegen ein indirekter Wirkmechanismus (CHIBUIKE & OBIORA 2014:2). Darüber hinaus können Schwermetalle das Pflanzenwachstum hemmen. Dieser Prozess kann durch eine Reduzierung von, für Pflanzen nützliche, Mikroorganismen in metallbelasteten Böden verstärkt werden, da „wesentliche Umsetzungsprozesse wie Abbau und Umsetzung organischer Substanz oder die Mineralisation von Stickstoff empfindlich gehemmt werden“ (SCHEFFER & SCHACHTSCHABEL 2010:468, CHIBUIKE & OBIORA 2014:2). Weitere sichtbare Symptome können zum Beispiel Veränderungen in der Form und Farbe der Blätter oder das Absterben einzelner Gewebeteile der Pflanzen darstellen (SHAW et al. 2004:97). Tabelle 2-2 bietet eine Auswahl an wesentlichen Schädigungsmerkmalen, welche verschiedene Metalle bei Pflanzen hervorrufen können. Weitere detaillierte Übersichten zu der toxischen Wirkung von Schwermetallen auf Pflanzen und einzelne Pflanzenarten bieten die Arbeiten von CHIBUIKE & OBIORA (2014) und MUSTAFA & KOMATSU (2016) (vgl. CHIBUIKE & OBIORA 2014:4f. Tabelle 1, MUSTAFA & KOMATSU 2016:935f. Tabelle 1). Basierend auf diese vielfältigen Reaktionen, die durch erhöhte Metallkonzentrationen verursacht werden können, lassen sich Pflanzen in Hyper- und Nichtakkumulatoren unterteilen, wobei Hyperakkumulatoren 10 bis 500 mal mehr Metalle aufnehmen können als gewöhnliche Pflanzen (CHIBUIKE & OBIORA 2014:6). So existieren Hyperakkumulatoren „auf Böden mit „natürlich“ hohen Schwermetallgehalten [wie etwa] in der Umgebung von Erzlagerstätten“ (SCHEFFER & SCHACHTSCHABEL 2010:468). Die Fähigkeit der übermäßigen Metallanreicherung wird als Phytoremediation beschrieben und kennzeichnet einen auf Pflanzen beruhenden Ansatz zur Säuberung und Sanierung metallkontaminierter Böden (MUSTAFA & KOMATSU 2016:933). Weiterführend sei auf die Arbeiten von LONE et al. (2008), TANGAHU et al. (2011) und CHIBUIKE & OBIORA (2014) verwiesen, welche die Thematik umfangreich beschreiben.

2 Charakteristika und Wirkungspfade von Metallen

Tabelle 2-2: Schädigungsmerkmale, die bei Pflanzen durch Metalle hervorgerufen werden können
(verändert, nach SHAW et al. 2004:97)

Metall	toxische Symptome
<i>Al</i>	<i>Vergilbung und Absterben von Blattspitzen, Einrollen junger Blätter, Zusammenbruch von Wachstumspunkten oder Blattstiele, Hemmung der Wurzelausdehnung</i>
<i>As</i>	<i>rot-braune nekrotische Flecken auf älteren Blättern, gelbliches Verbraunen von Wurzeln, Reduzierung des Pflanzenwachstums</i>
<i>Cd</i>	<i>braune Blattränder, Chlorose, Nekrose, Reduzierung des Pflanzenwachstums, violette Färbung, Verkümmern der Wurzeln</i>
<i>Cu</i>	<i>Chlorose, gelbe Färbung, violette Färbung der unteren Seite der Mittelrippe, Hemmung des Wurzelwachstums</i>
<i>Fe</i>	<i>dunkelgrünes Blattwerk, Beeinträchtigung des Wurzelwachstums, braune Punkte auf den Blättern, dunkelbraune und violette Blätter</i>
<i>Hg</i>	<i>starke Beeinträchtigung von Sämlingen und Wurzeln, Chlorose, Verbraunung der Blattpunkte, Reduzierung des Pflanzenwachstums</i>
<i>Ni</i>	<i>Chlorose, Nekrose, Hemmung des Wurzelwachstums, Abnahme der Blattfläche</i>
<i>Pb</i>	<i>dunkelgrüne Blätter, Beeinträchtigung des Blattwerkes, erhöhte Menge an Trieben</i>
<i>Zn</i>	<i>Chlorose, Beeinträchtigung und Reduzierung der Wurzelausdehnung</i>

Die Ausarbeitungen haben gezeigt, dass innerhalb des Boden-Pflanze-Wirkungspfadens Metalle maßgeblich über die Wurzeln der Pflanzen aufgenommen werden. Daneben ist in Auenökosystemen, die durch fluktuierende Wasserstände charakterisiert sind, der Schadstoffeintrag über oberirdische Pflanzenorgane bedeutsam. Der mobile Anteil an Metallionen im Boden als alleiniger Faktor zur Abschätzung der Metallkonzentrationen, die von den Pflanzen akkumuliert werden und woraus potentielle toxische Effekte resultieren können, ist unzureichend. Zugleich reagieren alle in der Arbeit untersuchten Elemente (vgl. Kapitel 2.1) in ihrem Mobilitätsverhalten stark unterschiedlich. Wechselwirkungen zwischen boden- und pflanzenspezifischen Parametern und geochemischen Rahmenbedingungen kennzeichnen die Vielschichtigkeit der Transferpfade und die damit einhergehende Bioverfügbarkeit der Metalle. Die hohe räumliche und zeitliche Variabilität dieser Prozesse erschwert aktuelle Prognosen zur Belastungssituation in Flussauen sowie über deren Böden und Grünlandflächen (SCHULZ-ZUNKEL & KRÜGER 2009:1359). Folglich besteht ein enormer Bedarf, flächendeckende und möglichst genaue Vorhersagen für diese Ökosysteme ableiten zu können. In diesem Zusammenhang bieten fernerkundliche Methoden und Sensoren außerordentliches Potential, da beispielsweise mit einer entsprechenden spektralen und räumlichen Auflösung Schädigungsmerkmale bei Pflanzen detektiert werden können (vgl. Tabelle 2-2).

3 Verfahren zur Detektion von Kontaminationen in Böden und Pflanzen

Im folgenden Kapitel werden einleitend die bedeutendsten Bodenbestandteile benannt, welche spezifische spektrale Reflexions- und Absorptionsmerkmale bedingen. Diese Bestandteile sind auch an der Bindung von Metallen in der Bodenmatrix beteiligt (vgl. Kapitel 2.2). Im zweiten Kapitel wird die charakteristische spektrale Signatur von Vegetation und deren Beeinflussung durch Stressfaktoren erläutert. Somit vermitteln die ersten beiden Abschnitte spektrale Interaktionsmechanismen, die bei fernerkundungsbasierten Methoden zur Detektion von Metallkonzentrationen in Böden und Vegetation genutzt werden können. Entsprechende Verfahren werden ausführlich in den Kapiteln 3.3 und 3.4 beschrieben.

3.1 Bindungs- und Reflexionsmechanismen in Böden

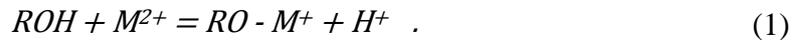
Spektrometrische Messungen des VIS-, NIR- und SWIR-Bereiches wurden bereits häufig als kostengünstige und schnell verfügbare Informationen zur Analyse einer Vielzahl an Bodenparametern eingesetzt (e.g. BROWN et al. 2006, ZORNOZA et al. 2008, VOHLAND et al. 2014). Diese Entwicklung wurde in den vergangenen Jahren durch die Etablierung neuer mathematischer Methoden und Auswerteverfahren begünstigt (WU et al. 2007:918). Wird der Boden einer Strahlung mit entsprechender Wellenlänge ausgesetzt, geraten molekulare Bindungen in Abhängigkeit von den Bodenbestandteilen *“either by bending or stretching“* in Schwingung und absorbieren Licht (STENBERG et al. 2010:4). Das daraus hervorgehende Signal entspricht einem, aus Absorption und Reflexion resultierenden, Spektrum, welches eine charakteristische Form aufweist und weiter analysiert werden kann (STENBERG et al. 2010:4f.).

Die Absorption von Böden im elektromagnetischen Wellenlängenbereich zwischen 350 und 2500 nm beruht im Wesentlichen auf Eisenoxiden, Tonmineralen, Wasser und organischen Substanzen (*Soil Organic Matter*, SOM), *“as a consequence of the vibrational energy transitions of these dominant molecular bonds“* (SHI et al. 2014:167). Dabei treten orbitale Elektronenübergänge zwischen 400 und 700 nm auf. Zwischen 700 und 2500 nm dominieren molekulare Vibrationsprozesse der NH-, OH- und CH-Gruppen (VISCARRA ROSSEL et al. 2006:60, SHI et al. 2014:167). Primäre Absorptionsmerkmale im sichtbaren- und kurzwelligen nahen Infrarotbereich zwischen 350 und 1100 nm werden durch Eisenoxide, wie sie etwa in Goethiten oder Haemathiten enthalten sind, hervorgerufen (STENBERG et al. 2010:5, SHI et al. 2014:167). Weitere Charakteristika können aus der Bindung von Eisenoxiden mit anderen metallischen Kationen oder Hydroxylgruppen resultieren (SONG et al. 2012:77). Tonminerale weisen Merkmale im kurzwelligen nahen Infrarotbereich zwischen 1100 und 2500 nm auf, *“due to OH, H₂O and CO₃ overtones and combination vibrations“* (SHI et al. 2014:167). Andere Wellenlängenbereiche, welche für die Schwingungen von Wasser- und mineralischen

Hydroxylbanden bekannt sind, können zur Bestimmung des Feuchtegehaltes von Böden genutzt werden (WHITING et al. 2004:537). Im Allgemeinen ist eine Abnahme der Reflexion mit zunehmender Bodenfeuchtigkeit erkennbar. Kennzeichnend dabei ist die Absorption von Wasser in den Bereichen nahe 1400 und 1900 nm (SHI et al. 2014:167). Schwächere Features existieren um 900 nm und 2200 nm (WHITING et al. 2004:537). Diese Merkmale wurden bereits in zahlreichen Studien zur Evaluierung oder Klassifikation bestimmter Bodeneigenschaften verwendet (e.g. WEIDONG et al. 2002, DEMEATTÉ et al. 2004, BEN-DOR et al. 2008). Die bedeutendsten Wasserbanden und deren Absorptionswirkung sind in WHITING et al. (2004) nochmals zusammengetragen (vgl. WHITING et al. 2004:537 Tabelle 1). Auch SOM zeigt ausgeprägte Merkmale in der VIS- und NIR-Region, die auf verschiedene chemische Verbindungen, wie beispielsweise mit Kohlen- oder Wasserstoffatomen, beruhen (SHI et al. 2014:167). HE et al. (2009) schreiben in diesem Zusammenhang, dass zwischen 350 und 2500 nm kein SOM-Absorptionspeak existiert. Vielmehr korrelieren die Bodenspektren negativ mit dem SOM-Gehalt, wobei die stärksten Wechselwirkungen bei 675 nm, 1681 und 2178 nm auftreten (HE et al. 2009:39f.). In längeren Wellenlängenbereichen, wie in der *Mid Infrared*- (MIR) Region (2500 - 25000 nm, 4000 - 400 cm^{-1}) des elektromagnetischen Spektrums (vgl. VISCARRA ROSSEL 2006:61 Abbildung 1), sind molekulare Schwingungen ebenfalls eminent. So zeigen sich bei SONG et al. (2012) entsprechende Anzeichen zwischen ~ 3800 und $\sim 3250 \text{ cm}^{-1}$, welche auf Hydroxidbanden in Kaolinit, Smectit und SOM zurückzuführen sind. Weitere Merkmale werden etwa durch Kalzit ($\sim 1466 \text{ cm}^{-1}$, $\sim 897 \text{ cm}^{-1}$, $\sim 704 \text{ cm}^{-1}$), Goethit ($\sim 879 \text{ cm}^{-1}$, 798 cm^{-1}) oder Quarz ($\sim 1120 \text{ cm}^{-1}$, $\sim 1022 \text{ cm}^{-1}$) verursacht (SONG et al. 2012:77f.). Diesbezüglich beinhaltet Abbildung 3-1 ein repräsentatives Bodenspektrum, in welchem dominierende und eingangs erläuterte Absorptionsmerkmale zusammenfassend dargestellt sind. Abschließend sei auf die Veröffentlichung von VISCARRA ROSSEL et al. (2006) verwiesen, die eine Übersicht liefert, welche Bodenbestandteile anhand multivariater statistischer Methoden, in Kombination mit Spektrometernmessungen verschiedener Wellenlängenbereiche, abgeschätzt werden können (vgl. VISCARRA ROSSEL et al. 2006:62ff. Tabelle 1).

Die Detektion von Metallen anhand spektraler Informationen gestaltet sich komplexer. In den Ausführungen von SHI et al. (2014:167) werden zwei spezielle Bedingungen genannt, welche erfüllt sein müssen, damit sich Elemente wie Ni, Cu, Co oder Cr ebenfalls durch Absorptionsfeatures hervorheben. Zum einen müssen die Metalle in sehr hohen Konzentrationen von über 4000 mg kg^{-1} in den Böden vorliegen und zum anderen müssen sie eine ungefüllte d-Schale besitzen, wodurch eine Bewegung der Elektronen zu einem höheren Energieniveau ermöglicht wird und woraus letztlich die Absorption der elektromagnetischen Energie resultiert (SHI et al. 2014:176, WU et al. 2007:919). Weiterführend wird die Arbeit von CLARK (1999) empfohlen, in welcher die entsprechenden Grundlagen im Detail behandelt werden (nach SHI et al. 2014:167). Die angesprochenen starken Bodenbelastungen sind in natürlichen oder naturnahen Ökosystemen nicht vorzufinden und beschränken sich üblicherweise auf Minen- oder Bergbaugebiete. Folglich ist eine direkte, quantitative Vorhersage von geringen Metallgehalten in Böden mittels VNIR-Spektrometrie im Allgemeinen nicht realisierbar (RATHOD et al. 2013:408). Auch wenn Metalle in moderaten Konzentrationen in Böden selbst keine spektralen Merkmale aufweisen, so ist eine Bindung derer an spektral sensitive Bodenbestandteile, wie Eisenoxide und Tonminerale, möglich (SHI et al. 2014:167). Konkret rei-

chern sich metallische Kationen an hydroxylierten Oberflächen an. Nach CHOE et al. (2008:3223) kann dieser Vorgang generell durch folgende Formel beschrieben werden:



Dabei kennzeichnet *ROH* die mineralische Oberfläche und *R* kann an dieser Stelle durch beliebige Minerale wie Al, Fe oder Mn ersetzt werden. Wie in der Formel 1 dargestellt, werden bei dieser Reaktion H^+ -Ionen von *ROH* freigesetzt und M^{2+} -Kationen adsorbiert. Eine Zunahme an metallischen Kationen hat demnach eine Abnahme der Hydroxidoberfläche zur Folge. Steigt beispielsweise der Anteil an Eisenoxiden an der Oberfläche von Tonmineralen an, können daraus Variationen im Spektrum zwischen 500 und 1000 nm oder bei 2200 nm entstehen, die letztlich Rückschlüsse auf den Metallgehalt im Boden erlauben (CHOE et al. 2008:3223f.). Betrachtet man die organische Substanz im Boden, so liegen die Metalle hier „entweder in austauschbarer Form vor (besonders Ca, Mg) oder [sie] sind in Form von Komplexen meist sehr fest gebunden“ (SCHEFFER & SCHACHTSCHABEL 2010:52). Durch metallische Komplexbildungen an SOM beeinflusst der Abbau humusreicher Substanzen, hervorgerufen etwa durch deren Dekomposition, entscheidend das Verhalten der Metalle (SHI et al. 2014:168f.). SCHEFFER & SCHACHTSCHABEL (2010) schreiben diesbezüglich, dass „[d]ie

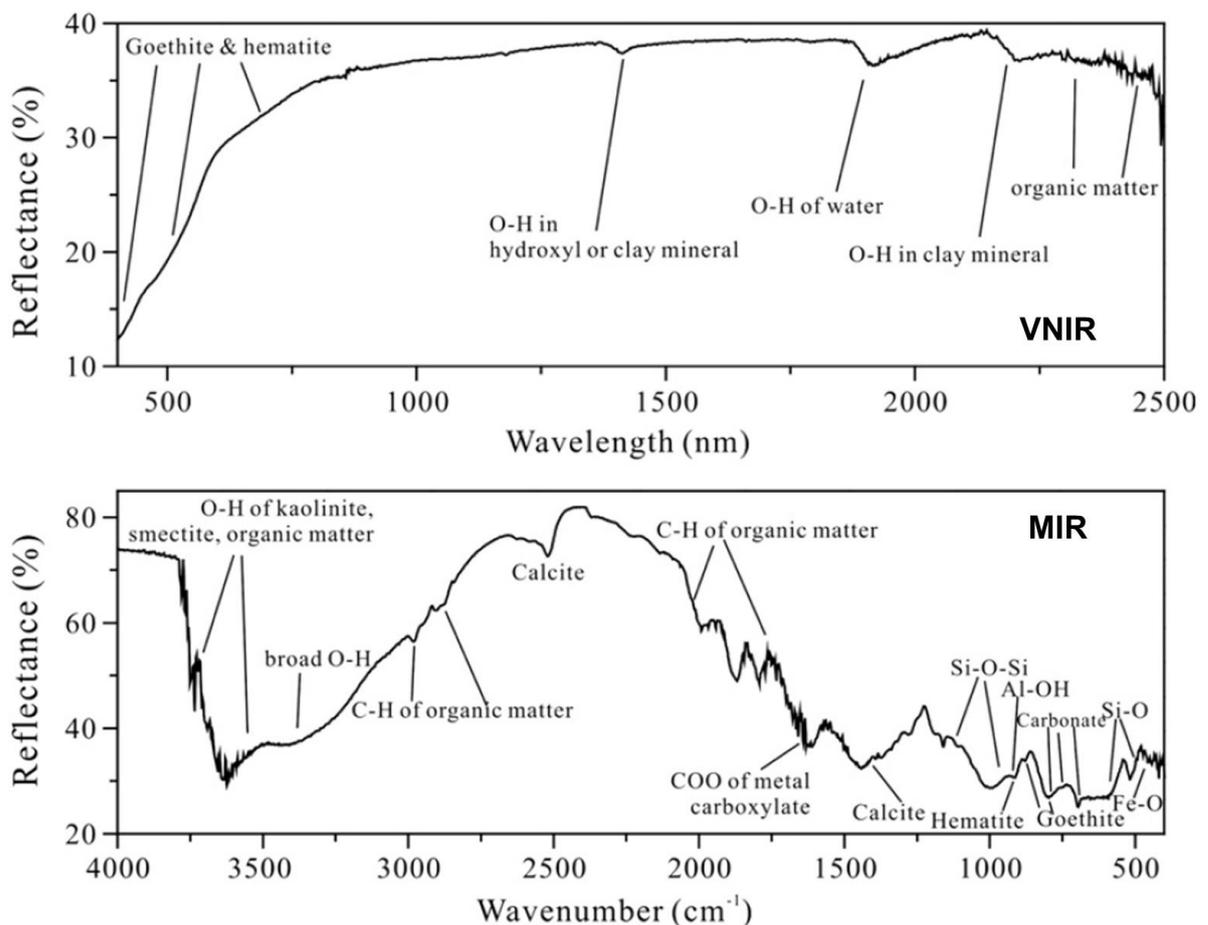


Abbildung 3-1: Ein Bodenspektrum im VNIR- (oben) und MIR-Spektralbereich (unten) und dazugehörige Bodenbestandteile, welche Absorptionsmerkmale hervorrufen (verändert, aus: SONG et al. 2012:78)

Freisetzung von Metallen, die mit organischen Liganden [...] stabile Komplexe bilden, [...] durch organische Komplexbildner gefördert [wird]. Durch sie werden vor allem Al, Fe und Mn sowie Schwermetalle wie Cu und Pb komplexiert. Auch Huminstoffe [...] beteiligen sich an der Komplexierung der Metalle“ (SCHEFFER & SCHACHTSCHABEL 2010:42). In SHI et al. (2014) sind dahingehend verschiedene Interaktionsformen der angesprochenen Komplexbildung zwischen metallischen Kationen (M^{2+}) und SOM dargestellt (vgl. SHI et al. 2014:168 Abbildung 2).

Diese chemischen Bindungen an Bodenbestandteilen sind essentiell, da sie die indirekte Detektion von Metallen in Böden erlauben, welche üblicherweise keine spektralen Merkmale aufweisen. Es muss jedoch berücksichtigt werden, dass die dargestellten Zusammenhänge ortsgebunden und gebietspezifisch sind und in Abhängigkeit vom Bodentyp, der Bodenart und den vorherrschenden Metallkonzentrationen variieren können (SHI et al. 2014:168). Wie die erläuterten spektralen Grundlagen und Mechanismen in der Praxis für das Monitoring von metallinduzierten Bodenverunreinigungen genutzt werden können, wird in Kapitel 3.3 der Arbeit aufgearbeitet.

3.2 Spektrale Pflanzensignaturen und Vegetationsstress

Schon Mitte des 20. Jahrhunderts wurden Luftbilder als zusätzliches Hilfsmittel zur Beobachtung landwirtschaftlicher Nutzpflanzen eingesetzt (vgl. SLONECKER & FISHER 2014:6). Durch die fortschreitende Weiterentwicklung diverser Spektrometer- und Fernerkundungssysteme konnten auch zunehmend vegetationsspezifische Stressmuster aufgedeckt werden. Dies führte zu einer Intensivierung der Forschung in diesem Bereich zu Beginn der 1990er Jahre und hatte die Etablierung von Indizes zur Folge, die auf spektralen Informationen beruhen (SLONECKER & FISHER 2014:6).

Die von SHI et al. (2014) erläuterten entscheidenden Faktoren, welche die spektrale Information und das Rückstreuverhalten von Pflanzen kennzeichnen, sind deren Zellstruktur sowie deren Chlorophyll- und Wassergehalt (SHI et al. 2014:168). Während biochemische Blatteigenschaften wellenlängenabhängige Absorptionsmerkmale hervorrufen, beeinflusst die Morphologie der Blätter die Stärke der Streuprozesse (CLARK et al. 2005:377). Die Abbildung 3-2 verdeutlicht in diesem Zusammenhang die charakteristische Reflexion gesunder Vegetation zwischen 350 und 2500 nm. Die Banden der kürzeren Wellenlängenbereiche (350 bis 800 nm) werden primär durch Elektronenübergänge verursacht, wohingegen “[a]t longer wavelengths [...] absorption tends to be explained by rotation and stretching of chemical bonds between light atoms (C, O, H, N)” (JONES & VAUGHAN 2010:41). Allgemein ist im VIS die Reflexion durch die Chlorophyllabsorption im blauen und roten Spektralbereich bei etwa 450 und 650 nm gering. Das Merkmal im blauen Spektrum wird gleichzeitig durch die Absorption von Carotinoiden überlagert, wodurch dieser Wellenlängenbereich nicht zur Abschätzung von Chlorophyllgehalten verwendet wird (SIMS & GAMMON 2002:338). Folglich werden üblicherweise Reflexionen nahe 550 nm oder 700 nm zur Vorhersage von Chlorophyll genutzt (e.g. VINCINI et al. 2008, PANIGADA et al. 2009). Durch den Einfluss von Anthocyan bei 550 nm befürworten SIMS & GAMMON (2002:338) Chlorophyllindizes, welche lediglich auf die Absorption um 700 nm beruhen. Eine reine Carotinoïdbestimmung auf Grundlage eines

Pflanzenspektrums ist aufgrund der angesprochenen spektralen Überlagerung der beiden Pigmentarten schwierig. Zudem ist die Chlorophyllkonzentration in den meisten Blättern höher als die der Carotinoide. Häufiger werden Indizes gebildet, welche das Carotinoidmerkmal zwischen 400 und 500 nm und das Chlorophyllcharakteristikum im roten Spektralbereich gegenüberstellen. Beispiele entsprechender Indizes, welche beide Blattbestandteile berücksichtigen, liefern die Studien von GAMON et al. (1992), PEÑUELAS et al. (1995) und MERZLYAK et al. (1999) (nach SIMS & GAMON 2002:340). Weiterhin wird auch die Absorption der Anthocyane im VIS durch das Chlorophyll überlagert (vgl. SIMS & GAMON 2002:339 Abbildung 1). Im grünen Wellenlängenbereich, bei etwa 550 nm, entsteht ein Reflexionsmaximum durch das Chlorophyll (GOVENDER et al. 2007:146). Eine weitere Zunahme der Reflexion wird, wie in Abbildung 3-2 dargestellt, in der NIR-Region sichtbar. Der Anstieg im Reflexionsgradienten um 700 nm wird als *Red Edge* beschrieben. Er bildet zugleich einen der wichtigsten Stress-Indikatoren, da die Stärke der erläuterten Chlorophyllabsorption im roten Spektrum die Position der *Red Edge* beeinflusst (SCHLERF et al. 2005:182, JONES & VAUGHAN 2010:180). Zwischen 700 nm und 1300 nm reflektieren Blätter typischerweise 40 bis 50 % der einfallenden Strahlung. Die restliche Strahlung wird transmittiert und nur etwa 5 % werden absorbiert (GOVENDER et al. 2007:147). Die hohen Reflexionen werden durch die Photonenstreuung der "leaf air-cell wall interfaces", in denen auch das Schwammmesophyll enthalten ist, verursacht (CLARK et al. 2005:377). Der Bereich wird als NIR-Plateau bezeichnet und erstreckt sich etwa von 750 bis 1300 nm (CIPAR et al. 2004:2348, KOKALY et al. 2009:80). Das Plateau unterscheidet sich unverkennbar von den umliegenden Signaturen und kann auch zur Separierung von Pflanzenarten verwendet werden (GOVENDER et al. 2007:147). Zudem treten kleinere Wasserabsorptionsbanden in dieser Region nahe 970 und 1200 nm auf, ehe die Reflexion

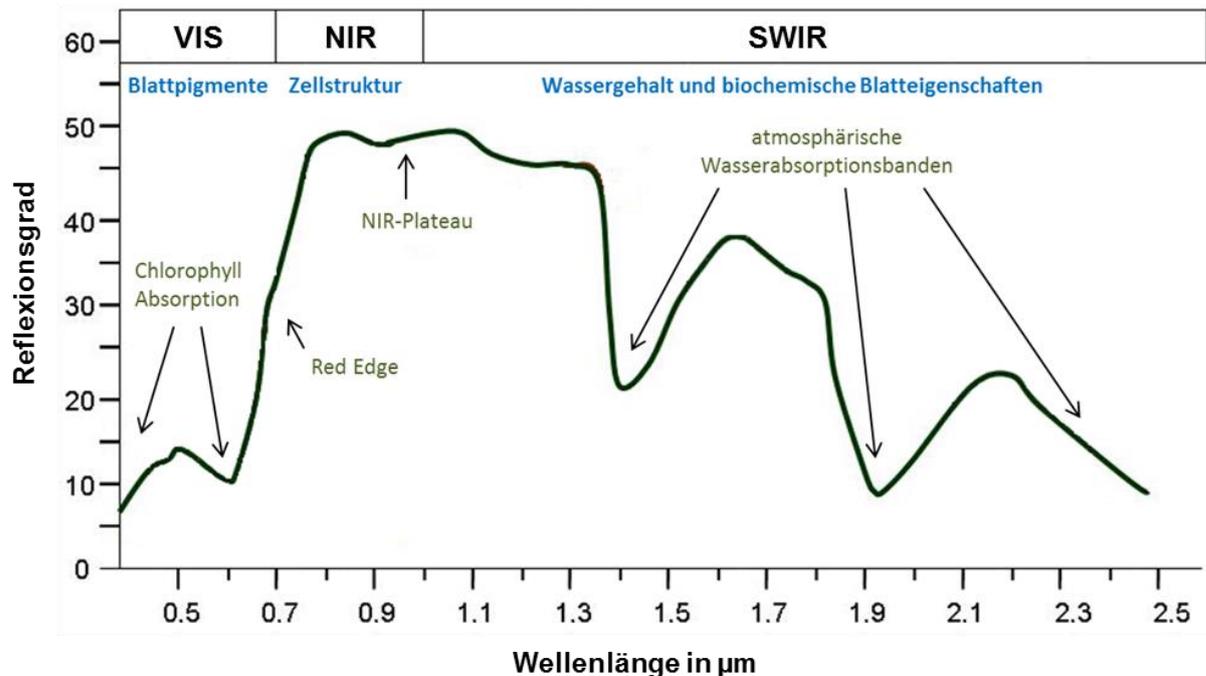


Abbildung 3-2: Die spektrale Signatur gesunder Vegetation im sichtbaren- und infraroten Wellenlängenbereich (0.35 - 2.5 µm), mit den dominierenden Streumechanismen (blau) und typischen Absorptions- und Reflexionsmerkmalen (grün) (verändert, nach SEOS 2011:o.S., ADAM et al. 2010:283)

der Vegetation um 1300 nm wieder abnimmt. Markante Wasserabsorptionsbanden werden nun um 1440, 1950 und 2700 nm im SWIR evident (SIMS & GAMON 2003:528, GOVENDER et al. 2007:147). Diese können tendenziell auch andere Absorptionsmerkmale überdecken, welche etwa durch Lignin oder Zellulose herbeigeführt werden (CLARK et al. 2005:377). Diese Stoffe weisen Merkmale um 1690 und 1780 nm auf und signifikante Protein- und Stickstoffbanden können nahe 1510 und 2180 nm ausgeprägt sein (JONES & VAUGHAN 2010:41). Zuletzt sei auf die Veröffentlichung von JONES & VAUGHAN (2010) hingewiesen, in welcher die hier aufgezählten typischen Absorptionsmerkmale nochmals tabellarisch zusammengefasst sind (vgl. JONES & VAUGHAN 2010:41 Tabelle 3.1).

Das auf Pflanzen bezogene Stresskonzept ist bereits vor mehr als 60 Jahren thematisiert und seitdem kontinuierlich weiterentwickelt und etabliert worden. Laut LICHTENTHALER (1996) wird Vegetationsstress sinngemäß als “[a]ny unfavorable condition or substance that affects or blocks a plant’s metabolism, growth or development“ angesehen (LICHTENTHALER 1996:4). Tabelle 3-1 enthält diesbezüglich eine Auswahl an natürlichen und anthropogenen Stressfaktoren, welche auf terrestrische Vegetation einwirken können. Metalle, die im Fokus dieser Arbeit stehen, sind als anthropogene Einflüsse kategorisiert. Neben dieser Einteilung ist auch eine Differenzierung in Kurz- und Langzeiteffekte sowie in niedrige und starke Stressevents möglich (LICHTENTHALER 1996:4). Dabei wirken die in Tabelle 3-1 aufgelisteten Stressoren selten individuell und separat auf die Vegetation ein. Vielmehr agieren mehrere Faktoren üblicherweise simultan (LICHTENTHALER 1996:9). Weiterhin teilt LICHTENTHALER (1996) die Reaktion der Vegetation auf einzelne oder komplexe Stressevents in vier Phasen ein (LICHTENTHALER 1996:7). Sie sind als *Response*-, *Restitution*-, *End*- und *Regeneration*-Phase definiert, wobei letztere nur eintritt, wenn der Stressor entfernt und die physiologische Funktionalität der Pflanze vollständig oder zumindest teilweise wiederhergestellt werden konnte. Ebenso ist eine Erkrankung oder ein Absterben der Pflanze innerhalb der dritten Phase möglich (vgl. LICHTENTHALER 1996:7). Wie von SLONECKER & FISHER (2014) angesprochen, haben Boden- und Grundwasserkontaminationen in den meisten Fällen negative Effekte auf den Stoffwechsel und das Wachstum von Vegetation (SLONECKER & FISHER 2014:6). Während Pflanzen eine Vielzahl an Mechanismen besitzen, welche sie vor natürlichen Stressoren schützen können, sind sie weniger gut anthropogenen Einflüssen angepasst (ZINNERT et al. 2012:133). Eine detaillierte Auswahl an Symptomen, die bei Pflanzen auftraten, welche auf Metall belasteten Böden wuchsen, liefert die Tabelle 2-2 in Kapitel 2.3.

Derartige Vitalitätseinflüsse bedingen auch Änderungen in der spektralen Signatur der Vegetation. Die häufigsten physiologischen Auswirkungen, die aus Pflanzenstress resultieren, treten in den Blattpigmenten auf. Zu diesen Bestandteilen zählt das bereits thematisierte Chlorophyll, welches das einfallende Licht im Bereich zwischen 430 und 660 nm absorbiert (WILSON et al. 2004:1088, vgl. Abbildung 3-2). Wie von WILSON et al. (2004:1088) beschrieben, wurden schon in früheren Veröffentlichungen Reflexionsunterschiede durch Stress induzierte Anomalien in den Bereichen des *Green Peak* (~ 500 nm) und der *Red Edge* sichtbar. Dabei sind die Veränderungen im *Red Edge*-Bereich die am häufigsten genutzten Merkmale zur Untersuchung phänologischer Problemstellungen, weshalb sie auch in Verbindung mit gestresster Vegetation eingesetzt werden (e.g. GITELSON & MERZYLAK 1994, DATT 1999, SIMS & GAMON 2003, GITELSON et al. 2003, SLONECKER & FISHER 2014). Weitere spektrale

Tabelle 3-1: Auswahl an natürlichen und anthropogenen Stressfaktoren, welche auf terrestrische Vegetation einwirken können
(nach: LICHTENTHALER 1996:9)

natürliche Stressfaktoren	anthropogene Stressfaktoren
<i>hohe Strahlungsintensitäten</i>	<i>Herbizide, Pestizide, Fungizide</i>
<i>hohe oder niedrige Temperaturen</i>	<i>Luftverschmutzungen</i>
<i>plötzlich oder spät einsetzender Frost</i>	<i>Ozon und photochemischer Smog</i>
<i>Wassermangel</i>	<i>zunehmende UV-Strahlung</i>
<i>Defizit an natürlichen Mineralien</i>	<i>Photooxidantien</i>
<i>lange Regenperioden</i>	<i>saurer Regen, Nebel, Tau</i>
<i>Insektenbefall</i>	<i>saure pH-Werte von Boden und Wasser</i>
<i>virale, fungale oder bakterielle Erreger</i>	<i>Metalle</i>

Features, Ratios und Indizes, anhand derer Metallgehalte auf Grundlage von Pflanzenspektren abgeleitet wurden, werden in Kapitel 3.4 der Arbeit herausgearbeitet und zusammengefasst. Die Verfahren stützen sich dabei auf die hier dargestellten typischen Reflexions- und Absorptionsmerkmale von Vegetation, welche aus bestimmten Blattbestandteilen und Streumechanismen resultieren.

3.3 Methoden zur Erfassung von Metallgehalten anhand von Bodenspektren

Konventionelle Anwendungen zur Bestimmung von Metallgehalten in Böden basieren häufig auf Probenahmen im Gelände, ehe nasschemische Verfahren mit hochkonzentrierten Säuren oder “*atomic absorption spectrometry or inductively coupled plasma spectroscopy measurements*” durchgeführt werden (WU et al. 2007:918). Fernerkundungsmethoden stellen hingegen berührungslose und zerstörungsfreie Verfahren zur Abschätzung der Metallkonzentrationen dar. Sie umfassen sowohl die Aufnahmen hyperspektraler Kameras, als auch punktuelle spektrometrische Gelände- oder Labormessungen. Dabei wird versucht anhand der in Kapitel 3.1 beschriebenen spektral sensitiven Bodenbestandteile, Relationen zu den Metallen herzustellen. Im Folgenden werden zunächst Studien zusammengefasst, welche primär die Interaktionen zwischen Metalle und Eisenoxide respektive Tonminerale nutzen, ehe das Potential organischer Bodenbestandteile zur Bestimmung der Metallgehalte erläutert wird (vgl. RATHOD et al. 2013:409ff.).

3.3.1 Vorhersagen basierend auf Eisenoxiden und Tonmineralen

Bereits 2002 analysierten und spektrometrierten KEMPER & SOMMER (2002) 214 Bodenproben eines durch Pyridschlamm kontaminierten Testgebietes in Spanien. Mittels einer *Multiple Linear Regression* (MLR) und eines *Artificial Neural Networks*- (ANN) Ansatzes wurde die Möglichkeit der Detektion von As, Cd, Cu, Fe, Hg, Pb, Schwefel (S), Antimon (Sb) und Zn getestet. Auf Grundlage der Spektren konnten sechs der neun Elemente mit hoher Genauigkeit bestimmt werden, wobei die R^2 -Werte für Hg und Pb mit 0.96 respektive 0.95 am höchsten waren. Ferner waren die Resultate der MLR und des ANN vergleichbar (KEMPER & SOMMER 2002:2742). Unterschiede existierten bei der Gegenüberstellung der Spektren von verunreinigten und nicht kontaminierten Böden. Am auffälligsten war dabei eine starke Abnahme der gesamten Albedo in den kontaminierten Proben. Ebenfalls wurden Änderungen innerhalb der OH-Absorptionsbanden bei 1400, 1900 und 2200 nm deutlich. Bei hohen Metallkonzentrationen waren derartige Merkmale nahezu ausgelöscht (KEMPER & SOMMER 2002:2744).

Das Beobachtungsgebiet von WU et al. (2005a) lag im Jiangning Distrikt in China, in welchem insgesamt 120 Proben aus den obersten 10 cm des Bodens entnommen wurden (Wu et al. 2005a:874). In der Studie wurde eine *Principal Component Regression* (PCR) zur Abschätzung der Hg-Konzentrationen verwendet (Wu et al. 2005a:873). Im Allgemeinen zeigten sich negative Korrelationen zwischen den Bodenspektren und dem Schwermetall. Die Ergebnisse der Korrelationsanalyse implizieren zudem mit einem r von 0.52 einen ausgeprägten Zusammenhang zwischen Hg und der Absorptionstiefe bei $0.496 \mu\text{m}$. Moderate Zusammenhänge zu den Spektren wurden um $2.21 \mu\text{m}$ errechnet und negative Korrelationen existierten bei $1.44 \mu\text{m}$. Interessanterweise waren die Modellvorhersagen für niedrige Metallkonzentrationen zuverlässiger (WU et al. 2005a:877). Laut WU et al. (2005) könnte durch die Berücksichtigung verschiedener chemischer Formen von Hg im Vorfeld der Modellkalibrierung die Genauigkeit der PCR gesteigert werden (WU et al. 2005a:877).

In einer weiterführenden Studie betrachteten WU et al. (2005b) den Ni-, Cr-, Cu-, Hg-, Pb-, Zn- und As-Gehalt der von WU et al. (2005a) entnommenen Bodenproben. Anstelle der PCR nutzten die Autoren eine *Partial Least Square Regression* (PLSR). Weiterhin wurden die Auswirkungen eines spektralen Resamplings untersucht (WU et al. 2005b:1055). Die Ergebnisse verdeutlichen, dass die spektrale Auflösung nicht zwingend einen limitierenden Faktor bei der Auswertung darstellt, da die wichtigsten spektralen Informationen und Banden erhalten bleiben (WU et al. 2005b:1055, 1058). Für Ni und Cr wurden die besten Modellrechnungen mit einem r von über 0.87 erzielt. Die übrigen Validierungsergebnisse variierten zwischen 0.65 und 0.81 (WU et al. 2005b:1056). Ähnlich wie in WU et al. (2005a:877) lagen die wichtigsten Banden zur Vorhersage der einzelnen Metalle bei 0.52, 0.90, 1.42, 1.90 μm und zwischen 2.0 - 2.2 μm . Bei dem Goethit-Merkmal um $0.52 \mu\text{m}$ wurde der höchste Regressionskoeffizient mit negativer Ausprägung errechnet (WU et al. 2005b:1056). Gegenüber Pb, Zn und As waren in dieser Studie die Modellrechnungen der Ni-, Cr-, Cu- und Hg-Gehalte genauer. Zwischen diesen Elementen und den Eisengehalten existierten auch stärkere Korrelationen (WU et al. 2005b:1058).

Die vorhergehenden Arbeiten wurden von WU et al. (2007) auf einer Überschwemmungsfläche im Südosten Chinas fortgeführt. In dem Gebiet sind 61 Proben aus den obersten 20 cm

des Bodens entnommen und ausgewertet worden (WU et al. 2007:918f.). Neben Ni, Cr, Co, Cu, As, Zn und Pb wurden auch die Anteile an Cd und Fe bestimmt. Als Regressionsmethode zur Modellkonstruktion und Ergebnisvalidierung wurde adäquat zu WU et al. (2005b:1055) eine PLSR angewandt (WU et al. 2007:920). Neben den bekannten OH- und Goethit-Banden (vgl. KEMPER & SOMMER 2002:2742, WU et al. 2005a:877) traten Fe-bedingte Absorptionen in dem Bereich zwischen 380 und 1300 nm auf. Weiterhin erhöhten die Autoren sequentiell die Metallkonzentration in einer ausgewählten Probe und werteten deren *Continuum Removal*-Spektren aus. Es wurde ersichtlich, dass unabhängig von anderen Bodenbestandteilen Metalle die eine Konzentration kleiner als 1000 mg kg^{-1} aufwiesen, spektrometrisch nicht direkt detektiert werden konnten. Dieser Zusammenhang wird anhand der Bodenspektren in Abbildung 3-3 verdeutlicht, wobei die Zahlen in der Abbildung unterschiedlich hohe Cr-Konzentrationen repräsentieren. Bei hohen Cr-Gehalten konnten diagnostische Absorptionsmerkmale bei 610 nm nachgewiesen werden. Selbiges zeigte sich für Cu bei etwa 830 nm (WU et al. 2007:921f.). Die besten Modellvorhersagen konnten mit R^2 -Werten um 0.80 für die Elemente Co, Ni und Cr getroffen werden (WU et al. 2007:923). Die dargestellten Relationen zwischen den Bodenspektren und den Metall- beziehungsweise Goethitgehalten stimmen mit den Ergebnissen in WU et al. (2005b:1056) überein. Konträr zu WU et al. (2005b:1058), bei denen die Interkorrelationen zwischen den Elementen und mehreren Bodenbestandteilen als entscheidende Faktoren zur Abschätzung der Metallgehalte herausgearbeitet wurden, beschreiben WU et al. (2007:925) nun alleine die Fe-Korrelationen zur Vorhersage der Metalle als relevant.

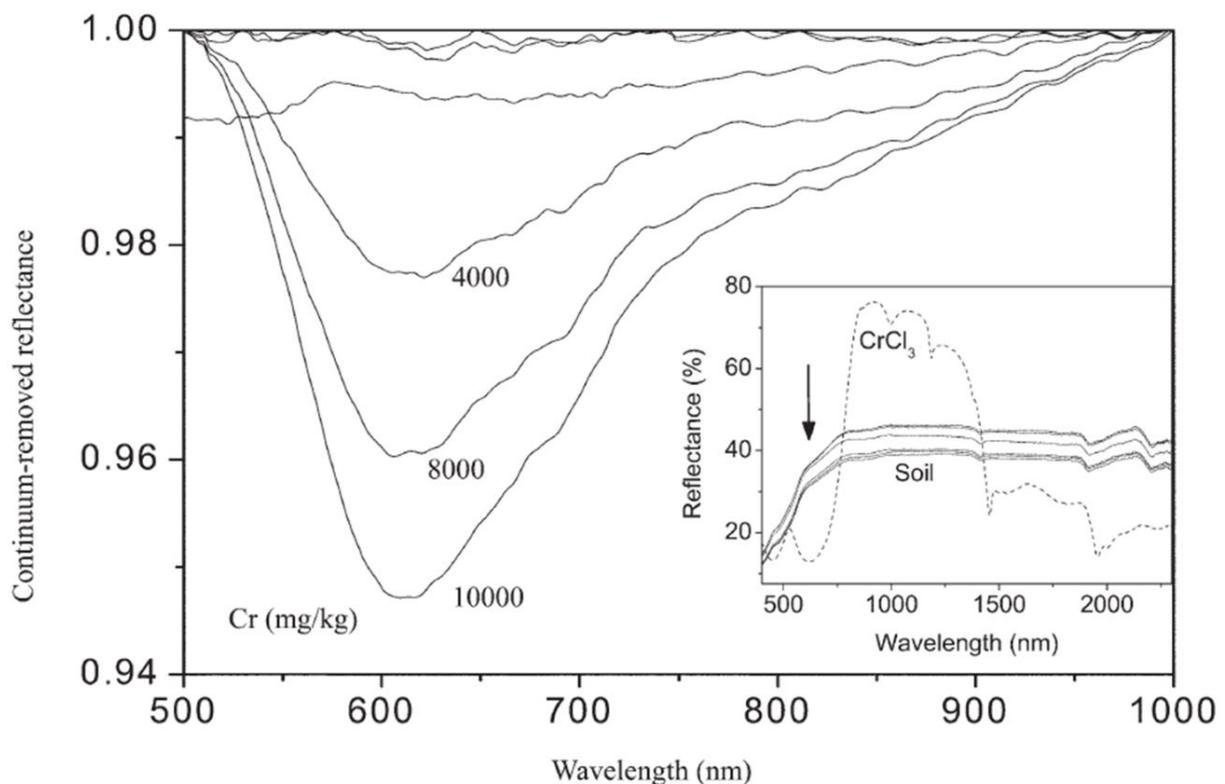


Abbildung 3-3: Continuum Removal-Bodenspektren und variierende Bandentiefen bei 610 nm, in Abhängigkeit vom Cr-Gehalt
(aus: WU et al. 2007:922)

Die spektrometrischen Eigenschaften von Cd verunreinigter Sedimente des Changjiang Flusses in China betrachteten XIA et al. (2007). Insgesamt wurden 69 Proben aus den obersten Sedimentschichten erhoben, chemisch aufbereitet und spektrometrisch bemessen (XIA et al. 2007:3449). Anhand der Ergebnisse ließen sich starke exponentielle Zusammenhänge zwischen den Cd-Gehalten und den spektralen Merkmalen verschiedener Bodenbestandteile ableiten. Die Autoren resümieren, dass die Fe- und Mn-Oxidhydrate sowie die Tonminerale die Sorption des Schwermetalls und somit auch die Vorhersage von Cd maßgeblich beeinflussen (XIA et al. 2007:3451f.). Im Detail zeigte die erste Ableitung der Reflexionskurven Interaktionen mit den Fe-Oxiden und Tonmineralen bei 560 - 760 nm und bei 1410, 1910 und 2300 nm (XIA et al. 2007:3449).

Auch CHOE et al. (2008) untersuchten die Möglichkeiten der indirekten Metallbestimmung anhand der spektralen Signatur metallbindender Minerale. Als Testfläche wählten die Autoren ein Goldminengebiet in Südostspanien, in welchem 49 Sedimentproben aus einem Flussbett analysiert und deren As-, Cu-, Pb- und Zn-Konzentrationen ermittelt wurden (CHOE et al. 2008:3224). Ähnlich wie bei WU et al. (2007:922) variierte die Tiefe der OH-Bande bei 2200 nm in Abhängigkeit vom Metallgehalt der Böden (vgl. CHOE et al. 2008:3224 Abbildung 2a - c). Neben der Berücksichtigung der charakteristischen Eisenoxidmerkmale zwischen 400 und 1200 nm wurden weitere spektrale Parameter gebildet, wie etwa Ratios aus 610 und 500 nm respektive 1344 und 778 nm. Anhand zweier verschiedener MLRs wurden die Zusammenhänge zwischen den Spektren und den Metallwerte quantifiziert (CHOE et al. 2008:3225, 3228). Bezüglich der abgeleiteten spektralen Parameter wurden signifikante Korrelationen zwischen Pb, As, Zn und dem Ratio aus 610 und 500 sowie zwischen der Fläche und Asymmetrie bei 2200 nm nachgewiesen (CHOE et al. 2008:3232). Weiterhin konnten, in Anlehnung an die durchgeführten Geländemessungen, übereinstimmende Verteilungsmuster der Metallkonzentrationen durch die Adaption der Parameter auf flächendeckende HyMAP-Daten generiert werden. Gleichzeitig verweisen die Autoren darauf, dass Diskrepanzen aus der unterschiedlichen räumlichen und spektralen Auflösung der Datensätze resultieren können (CHOE et al. 2008:3232).

In der ein Jahr später veröffentlichten Studie von CHOE et al. (2009) wurde die Anwendbarkeit der zuvor genannten spektralen Parameter zur Vorhersage der As-, Cu- und Pb-Gehalte in einem verlassenen Minengebiet in Südkorea getestet, für welches 22 Bodenproben zur Verfügung standen (CHOE et al. 2009:478). Die mittels einer *Enter Multiple Linear Regression* durchgeführte Modellierung der Metallgehalte erzielte vielversprechende Ergebnisse für As und Cu mit R²-Werten zwischen 0.60 und 0.81 (CHOE et al. 2009:477). Ungenauigkeiten ergaben sich laut CHOE et al. (2009:482) aus dem Vorhandensein vieler, sich überlappenden Bänder und aus der limitierten Anzahl an Molekülen, welche im VIS- und NIR-Bereich spektral sensitiv sind.

Auf der Schätzung des Kontaminationsgrades von As und Cu in landwirtschaftlich genutzten Böden, nahe der Baoshan Mine in China, lag der Fokus in der Arbeit von REN et al. (2009). Auch der Fe-Gehalt wurde berücksichtigt. Hierfür wurden 33 Samples aus den obersten 20 cm des Bodens analysiert und spektrometriert (REN et al. 2009:720f.). Wie in vorangegangenen Studien (e.g. WU et al. 2005b, WU et al. 2007), nutzten die Autoren eine PLSR zur Ableitung der Zusammenhänge zwischen den Spektren und den gemessenen Bodenvariablen

(REN et al. 2009:722). Befriedigende Modellvorhersagen konnten für Fe ($r = 0.88$) und As ($r = 0.76$) getroffen werden. Letztlich bestätigen die Autoren, dass Metallgehalte indirekt durch Bodenspektren und deren Korrelationen zu den Eisenkonzentrationen abgeleitet werden können (REN et al. 2009:724). Dies stimmt mit den bereits thematisierten Resultaten von WU et al. (2007:925) überein.

Wie in XIA et al. (2007) untersuchten JI et al. (2010) die Sedimentbelastung des Changjiang Flussdeltas. Aus einer maximalen Tiefe von 20 cm wurden 122 Proben aus den obersten Bodenhorizonten bemessen und deren Anteile an Hg, As, Cd, Cr, Pb, Cu und Zn bestimmt (JI et al. 2010:47f.). Bedeutende negative Korrelationen existierten für Cr, Cu, Zn, As überwiegend im NIR-Bereich, wobei für Cu und As auch einzelne stärkere Zusammenhänge nahe 428 und 538 nm nachgewiesen werden konnten. Hingegen waren für Cd, Pb und Hg nur in der VIS-Region zwischen 500 und 700 nm gute Korrelationen sichtbar. Diese Parameter zeigten auch keine Affinität hinsichtlich der Bindung an Tonminerale oder Eisenoxide (JI et al. 2010:49). Demgegenüber betrachten JI et al. (2010:48) Eisenoxide als die bedeutendsten Bindungsmechanismen für Cu und As, was mit den Ergebnissen von WU et al. (2007:925) und REN et al. (2009:724) konform geht. Die Regression ergab r -Werte von 0.676 und 0.823 für beide Elemente. Zudem war der Korrelationskoeffizient zwischen Cr und Fe_2O_3 am höchsten ausgeprägt (JI et al. 2010:49). Dies ist ebenso mit den Erkenntnissen von WU et al. (2007:923) vergleichbar.

Die Studie von JI et al. (2010) wurde in SONG et al. (2012) nochmals aufgegriffen und die Analysen um das MIR-Spektrum zwischen 4000 und 400 cm^{-1} erweitert (SONG et al. 2012:75). Die Korrelationsspektren der toxischen Elemente zeigten im MIR komplexe Veränderungen gegenüber den VNIR-Spektren (vgl. SONG et al. 2012:79 Abbildung 3). Am stärksten waren die Korrelationen im MIR bei Cr, Cu und As, wobei die Zusammenhänge generell schwächer und differenzierter ausgeprägt waren als in den kürzeren Wellenlängenbereichen (SONG et al. 2012:78). Ebenso war die Güte der PLSR-Modellrechnungen unter Berücksichtigung des VNIR-Bereiches besser (SONG et al. 2012:82).

Die hier dargestellten Untersuchungen der vergangenen Jahre zeigen, dass durch die Bindung bestimmter Metalle an Eisenoxid- oder Tonminerale Abweichungen im Spektralsignal resultieren können, die eine indirekte Detektion des Bodenmetallgehaltes ermöglichen. Neben der Bindung an Eisenoxide oder Tonminerale und der Stärke der Korrelationen in spezifischen Wellenlängenbereichen sind auch die Interkorrelationen zwischen den Elementen bedeutend. Anhand dieser Merkmale ist auch eine Kategorisierung der Metalle denkbar (e.g. WU et al. 2005b:1054, JI et al. 2010:49, SONG et al. 2012:78). Die Mehrzahl der Studien konzentrierte sich dabei auf Untersuchungsgebiete in Asien und nutzte PLSR-Modelle zur Abschätzung der Metallgehalte (e.g. WU et al. 2005a, WU et al. 2005b, REN et al. 2009, SONG et al. 2012). In Abhängigkeit von der Art des zu untersuchenden Metalls und vom Kontaminationsgrad, variierten die Genauigkeiten der Prognosen jedoch stark. Entsprechend konnten nicht für alle Metalle zufriedenstellende Modellergebnisse generiert werden, was die beschriebenen Verfahren in ihrer Anwendbarkeit limitiert. Gleichzeitig wurden aber Elementgruppen herausgearbeitet, für die auf Basis spektraler Messungen und statistischer Verfahren zuverlässige Vorhersagen getroffen werden können.

3.3.2 Vorhersagen basierend auf organischen Bestandteilen

Schon Mitte der 90er Jahre nutzten MALLEY & WILLIAMS (1997) spektrometrische Messungen im Bereich des NIR zur Vorhersage von Cd-, Cu-, Zn-, Pb-, Ni-, Mn- und Fe-Konzentrationen in Frischwassersedimenten nordwestlich von Ontario, Kanada (MALLEY & WILLIAMS 1997:3461). Insgesamt wurden 169 Proben entnommen und bei der statistischen Auswertung ist neben einer schrittweisen MLR auch die PLSR angewendet worden (MALLEY & WILLIAMS 1997:3462). Die höchsten Metallkonzentrationen wurden auf den Standorten mit den größten Anteilen an SOM nachgewiesen (MALLEY & WILLIAMS 1997:3463). Insgesamt konnten mit Fe, Mn, Zn, Cu, Pb und Ni sechs der sieben untersuchten Elemente zufriedenstellend vorhergesagt und 75 bis 94 % deren Varianz bestimmt werden (MALLEY & WILLIAMS 1997:3464). Demgegenüber verhinderten niedrige Cd-Konzentrationen möglicherweise eine genauere Vorhersage des Metalls (MALLEY & WILLIAMS 1997:3465). Die aus der PLSR abgeleiteten Informationen zeigen zudem, dass Absorptionsbanden im NIR, welche auf Protein, Zellulose und Öl hinweisen, stärker mit den Metallgehalten korrelierten, was die Indikatorfunktion des SOM hervorhebt (MALLEY & WILLIAMS 1997:3466).

Auch CHANG et al. (2001) verwendeten die NIR-Spektroskopie zur Abschätzung diverser Bodenkomponenten. Innerhalb der Vereinigten Staaten von Amerika wurden an 442 Standorten über 800 Bodenproben erhoben und aufbereitet. Neben diversen Bodeneigenschaften lag der Fokus auf den Elementen Ca, Cu, Fe, K, Magnesium (Mg), Mn, Zn und Phosphor sowie auf den austauschbaren Basen Ca, Mg, K und Natrium (CHANG et al. 2001:481). Aufgrund der hohen Probenanzahl schwankten die Metallkonzentrationen auf den Testflächen sichtbar. Zur Abschätzung der Zusammenhänge zwischen den Spektren und den gemessenen Parametern wurde eine PCR eingesetzt (CHANG et al. 2001:482). Unter Verwendung der PCR konnten sehr gute Prognosen für C, N, die Bodenfeuchte, Schluff und Sand mit R^2 -Werten zwischen 0.80 und 1.00 getroffen werden. Bei den Metallen zeigten sich nur für Ca, Mg und Mn gute Ergebnisse mit R^2 -Werten zwischen 0.70 und 0.80. Am schlechtesten waren die Prognosen für Cu ($R^2 = 0.25$) (CHANG et al. 2001:485f.). Die größten Limitationen bei den Verfahren sahen die Autoren in der Auswahl der optimalen Datenvorverarbeitungs- und Kalibrierungstechniken (CHANG et al. 2001:487).

Im gleichen Jahr veröffentlichten KOOISTRA et al. (2001) eine Studie, in welcher die Cd- und Zn-Kontamination in Auenböden nahe des Rheins in den Niederlanden untersucht wurde. Über eine PLSR und spektral aktive Bodenbestandteile wurden Relationen zwischen den VNIR-Messungen und den unterschiedlichen Konzentrationslevel der Metalle hergestellt (KOOISTRA et al. 2001:97). Hierfür wurden auf zwei Auenflächen insgesamt 69 Proben aus den obersten Bodenhorizonten erhoben (KOOISTRA et al. 2001:98). Die genannten Elemente korrelierten mit r -Werten von über 0.70 positiv mit der organischen Substanz, wohingegen die Zusammenhänge zum Tongehalt mit einem r von 0.43 für Cd und einem r von 0.46 für Zn nur moderat ausgeprägt waren (KOOISTRA et al. 2001:101). Bei den Modellergebnissen wurde ersichtlich, dass eine hohe Anzahl an PLSR-Faktoren nicht zwingend Unsicherheiten minimiert (vgl. KOOISTRA et al. 2001:102 Abbildung 4). Letztlich konnten für alle Bodenparameter sehr gute Vorhersagen getroffen werden ($r > 0.90$) (KOOISTRA et al. 2001:104). Ein interessanter Aspekt war, dass sowohl vertikale als auch horizontale Variabilitäten in Bezug auf

die Probenahme und die Testgebiete nur einen geringen Einfluss auf die Resultate hatten. Dies würde die Übertragbarkeit der entwickelten Modelle auf andere Auengebiete erleichtern (KOOISTRA et al. 2001:105).

Im Vergleich zu den vorherigen Studien nutzten SIEBIELEC et al. (2004) neben VNIR- auch MIR-Spektren zur nicht-destruktiven Bestimmung der Fe-, Cd-, Cu-, Ni-, Pb- und Zn-Gehalte von 70 Bodenproben, welche aus der in Polen gelegenen Bergbauregion Tarnowskie stammten (SIEBIELEC et al. 2004:2056). Ähnlich wie bei KOOISTRA et al. (2001:99) verwendeten die Autoren einen PLSR-Ansatz (SIEBIELEC et al. 2004:2058). Laut SIEBIELEC et al. (2004) war in beiden Wellenlängenbereichen die Form der einzelnen Spektren nahezu identisch, was auf analoge Absorptionsmechanismen schließen lässt. Mit Ausnahme von Cu waren alle Metalle stark abhängig vom Tongehalt. Das Metall korrelierte als einziges signifikant mit dem organischen Kohlenstoffgehalt, was die Affinität des Elements zu organischen Bodenbestandteilen betont (SIEBIELEC et al. 2004:2060). Die auf den MIR-Spektren basierenden Modellkalibrierungen übertrafen im Wesentlichen die Ergebnisse der VNIR-Modelle. Akkurate Vorhersagen konnten für Fe ($R^2 = 0.95$), Ni ($R^2 = 0.88$) und Zn ($R^2 = 0.78$) getroffen werden (SIEBIELEC et al. 2004:2067f.). Durch die komplexen Relationen zwischen den Metallen und den Bodenbestandteilen schätzen die Autoren die Übertragbarkeit der kalibrierten Modelle auf andere Testgebiete als schwierig ein (SIEBIELEC et al. 2004:2068).

In der unter Kapitel 3.3.1 bereits angesprochenen Arbeit von XIA et al. (2007) wurde der generelle Einfluss der organischen Substanz auf Bodenspektren geprüft. Die Spektren kommerzieller Huminsäure waren durch geringe Reflexionswerte und durch schwache Absorptionsmerkmale nahe 1414 nm und zwischen 2200 und 2300 nm gekennzeichnet (XIA et al. 2007:3450f.). Die Korrelationen zwischen den Spektren und den Kohlenstoffgehalten der 69 Proben waren bei 518 nm mit einem r von 0.79 am stärksten ausgeprägt. Entsprechend definierten XIA et al. (2007) den Wellenlängenbereich von 400 bis 530 nm als spektralen Zeiger für die organische Substanz (XIA et al. 2007:3451). Abbildung 3-4 visualisiert die angesprochenen Korrelationen und die Interaktionen bei 518 nm. Obwohl, dass von den Autoren untersuchte Cd üblicherweise keine spektralen Merkmale aufweist, korrelierten die Metallkonzentrationen mit diesem Wellenlängenbereich. Der überwiegende Anteil des Metalls lag zudem in austauschbarer Form im Boden vor, was die Bindung von Cd an andere Bodenbe-

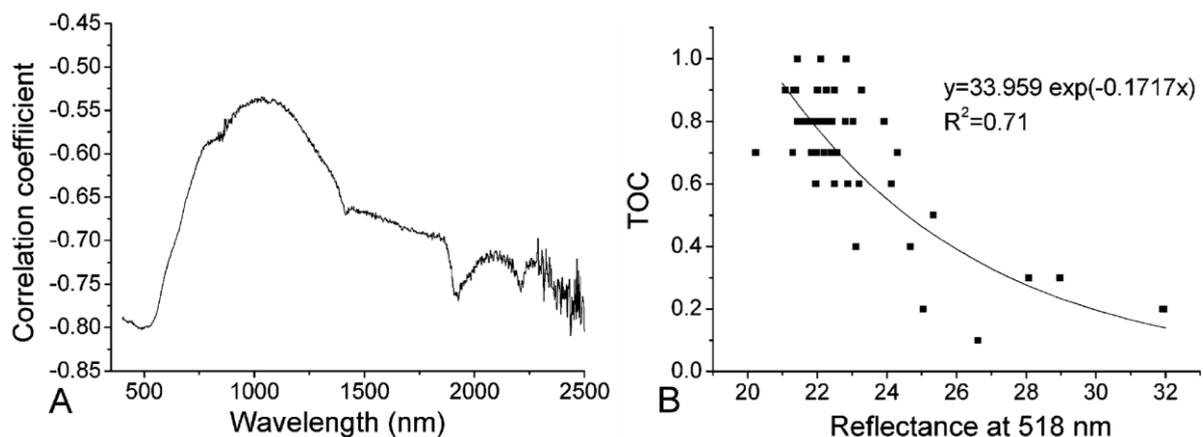


Abbildung 3-4: Korrelationen zwischen Bodenreflexionen und dem gesamten organischen Kohlenstoffgehalt (TOC) (A) und Gegenüberstellung der Reflexions- und TOC-Werte bei 518 nm (B) (verändert, aus: XIA et al. 2007:3451)

standteile wie SOM erklärt und letztlich auch eine Abschätzung der Metallgehalte ermöglichte (XIA et al. 2007:3453).

In der Studie von MOROS et al. (2009) wurden neben VNIR- auch MIR-Spektren zum räumlichen und saisonalen Monitoring von insgesamt 14 verschiedenen Elementen eingesetzt, welche aus 117 Sedimentproben des spanischen Nerbioi-Ibaizabal Flusses extrahiert wurden (MOROS et al. 2009:9314). Auf Grundlage der Spektren wählten die Autoren zur Vorhersage der Elementkonzentrationen zwei optimierte PLSR-Ansätze. Im Verlauf der mehrjährigen Beobachtungen konnten auf den Standorten saisonale Veränderungen bei den Metallgehalten nachgewiesen werden. So verringerte sich etwa die Pb-Konzentration der Sedimente in den Herbst- und Wintermonaten und stieg im Frühjahr beziehungsweise Sommer wieder an. Vergleichbare Tendenzen zeichneten sich auch für As, Cu, Zn und Zinn (Sn) ab (MOROS et al. 2009:9315). Typische Absorptionsbanden, die durch SOM-Bestandteile geprägt werden, waren im VNIR um 1414, 1925 und 2209 nm evident (MOROS et al. 2009:9316f.). Im MIR zeigten die Proben Merkmale, welche vermehrt durch Silicium- und diverse Hydroxidverbindungen verursacht wurden (MOROS et al. 2009:9317). Im Vergleich zu SIEBIELEC et al. (2004:2067f.), welche mit den MIR-Spektren bessere Vorhersagegenauigkeiten erzielten, beschreiben MOROS et al. (2009) die auf den VNIR-Daten basierenden PLSR-Modelle als konsistenter und robuster, da sie auch die Saisonalität der Metallkonzentrationen besser abbildeten (MOROS et al. 2009:9319).

Im selben Jahr wurde in der Arbeit von VOHLAND et al. (2009) der Kontaminationsgrad von Auenböden nahe Osnabrück betrachtet. Auf verschiedenen Graslandplots wurden 149 Proben erhoben und mittels VNIR-Spektroskopie bemessen. Die Cu-, Zn- und Pb-Gehalte sollten indirekt mittels einer PLSR quantifiziert werden (VOHLAND et al. 2009:202). Das von XIA et al. (2007:3451) dargestellte *organic Carbon*- (C_{org}) Merkmal zwischen 400 und 530 nm war auch in den von VOHLAND et al. (2009:204) generierten Korrelationsspektren erkennbar. Weiterhin waren die PLSR-Koeffizienten und Graphen der Metalle sehr ähnlich ausgeprägt. Diesbezüglich schreiben VOHLAND et al. (2009), “[t]his again indicates that these metals do not provide distinguishable and therefore diagnostic reflectance patterns [...] [and] as they are represented by nearly identical spectral information, the same optically active variables must be significant” (VOHLAND et al. 2009:205). In diesem Fall konnte dem C_{org} die stärkste Indikatorwirkung zugeschrieben werden und die errechneten R^2 -Werte der Validierung lagen zwischen 0.56 und 0.71 (VOHLAND et al. 2009:205f.). Die Autoren geben zu bedenken, dass die Bindungsmechanismen zwischen den Schwermetallen und dem organischen Anteil variabel und abhängig von der Korngröße und dem Kontaminationsgrad sind. Dies kann die Anwendung der entwickelten Modelle auf andere Testflächen erschweren (VOHLAND et al. 2009:207).

In der Studie von REN et al. (2009), deren Zielstellung im vorhergehenden Kapitel betrachtet wurde, existierten schwach negative Korrelationen zwischen dem SOM und Cu ($r = -0.27$), As ($r = -0.21$) und Fe ($r = -0.18$) (REN et al. 2009:722). Die Ergebnisse stehen im Kontrast zu den Resultaten von KOOISTRA et al. (2001), in deren Arbeit Cd- und Zn-Gehalte ausgewertet und positive r -Werte von über 0.70 in Verbindung mit der organischen Substanz errechnet wurden (KOOISTRA et al. 2001:101). In späteren Arbeiten zeigten sich für andere Metalle analoge Effekte (vgl. XIA et al. 2007:3454, VOHLAND et al. 2009:203). Möglicherweise hatte die

verhältnismäßig geringe Probenanzahl bei REN et al. (2009) deren Statistiken negativ beeinflusst (REN et al. 2009:722).

In der Veröffentlichung von PANDIT et al. (2010) wurde die Metallbelastung eines urbanen Gebietes betrachtet. Hierfür sind acht Proben entlang einer Transekte in einem in Indianapolis gelegenen Park aus den obersten 5 cm des Bodens entnommen worden. Neben Pb- wurden auch die Zn-, Cu-, Cd-, Mn- und SOM-Gehalte der Böden bestimmt und die Spektren wurden in situ aufgezeichnet. Als multivariate statistische Methode wurde die etablierte PLSR angewendet (PANDIT et al. 2010:4113f.). Mit zunehmender Entfernung zur Hauptstraße war ein Rückgang der Metall- und SOM-Werte ersichtlich und bei der Auswertung der Spektren konnte eine Abnahme der Albedo mit ansteigenden Pb-Konzentrationen nachgewiesen werden (PANDIT et al. 2010:4117). Für Mn, Zn und Pb lagen die R^2 -Werte der Modellvalidierung bei 0.808, 0.760 und 0.746 (PANDIT et al. 2010:4120). In Bezug zum SOM-Gehalt existierte nur ein schwacher Zusammenhang zu den Pb-Konzentrationen und die Autoren fügen hinzu, *“although organic matter is a factor in Pb retention, it does not control the deposition of Pb”* (PANDIT et al. 2010:4117). Trotz zufriedenstellender Modellergebnisse schätzen die Autoren den Nachweis von geringen Metallkonzentrationen mittels spektroskopischer Verfahren weit- aus schwieriger ein (PANDIT et al. 2010:4121f.).

Ji et al. (2010), deren Beitrag im vorherigen Kapitel zusammengefasst wurde, untersuchten den Kontaminationsgrad der Sedimente des Changjiang Flussdeltas (JI et al. 2010:47). Die Ergebnisse ihrer Studie suggerierten, *“that Cd, Pb and Hg are only strongly associated with organic matters, not with iron oxides or clays”* (JI et al. 2010:49). Dies stimmt mit den Erkenntnissen von SONG et al. (2012:82) überein.

Einen kombinierten Ansatz von NIR- und MIR-Spektroskopie zur Bewertung der Metallbelastungen landwirtschaftlich genutzter Böden verwendeten DONG et al. (2011). Im Detail wurden auf elf chinesischen Apfelplantagen 111 Proben aus den obersten 20 cm des Bodens erhoben und deren As-, Cu-, Zn-, Pb- und Cr-Konzentrationen analysiert (DONG et al. 2011:593). Gegenüber SIEBIELEC et al. (2011:2060) waren die Absorptionsmerkmale der MIR-Spektren schwächer ausgeprägt (DONG et al. 2011:596). Unter Verwendung einer PLSR und mit den NIR-Spektren als Input konnten sehr gute Modellergebnisse für Cu und Zn erzeugt werden und bis auf Pb wurden für alle Parameter hohe r-Werte zwischen 0.80 und 0.93 generiert (DONG et al. 2011:596,598). Die Modelldurchläufe mit den MIR-Spektren beinhalteten eine geringere Vorhersagekraft für alle nichtmetallischen Bodenparameter. Bei den übrigen Elementen wurde, mit Ausnahme von Cu, eine leichte Verbesserung erzielt (DONG et al. 2011:600f.). Jenes stimmt mit den Erfahrungen von SIEBIELEC et al. (2004:2067f.) überein. Dennoch bekräftigen DONG et al. (2011), *“[that] NIR is more advantageous than MIR because it could accurately predict several soil parameters, metallic and nonmetallic, simultaneously”* (DONG et al. 2011:601).

Im selben Jahr wurde von LIU et al. (2011a) eine Fallstudie zu den Schwermetallverunreinigungen entlang des Le An-Flusses in China vorgestellt. LIU et al. (2011a) ermittelten für 30 Bodenproben, die aus einer Tiefe zwischen 2 bis 5 cm stammten, ihre Anteile an SOM, Pb, Cu und Zn. Mit einem Spektrometer wurden die Bodenreflexionen zwischen 350 und 2500 nm aufgenommen (LIU et al. 2011a:12f.). Anhand des Ratios der ersten Ableitung der Spektren bei 624 und 564 nm ließen sich 52 % der Variation des SOM erklären. Weiterhin konnten

über den SOM-Gehalt 59 %, 51 % und 50 % der Variationen von Pb, Cu und Zn erfasst werden. Eine höhere Probenanzahl oder lineare und nicht-lineare Regressionsmethoden hätten, laut LIU et al. (2011a), möglicherweise zu stabileren und genaueren Vorhersagen führen können (LIU et al. 2011a:15f.).

ZHENG et al. (2011) nutzten unter standardisierten Laborbedingungen VNIR-Messungen zur Abschätzung der As-Gehalte diverser Bodenproben mittels einer PLSR. Das beste Modellergebnis lieferte ein R^2 von 0.711. Interessanterweise wurden höhere Genauigkeiten bei Proben erzielt, welche einen niedrigeren SOM-Anteil beinhalteten (ZHENG et al. 2011:173).

Der Fokus in der Studie von LIAN et al. (2015) liegt auf dem Wan-sheng Bergbauggebiet in China. Insgesamt wurden 122 Bodenproben aus der Region spektral analysiert und von knapp einem Drittel wurden die Anteile an Al, Co und Cr ermittelt. Darauf aufbauend erfolgte über eine MLR die Schätzung der Metallkonzentrationen. Weiterhin sollte durch die Interpolation der Probennahmepunkte die räumliche Verteilung der Metalle wiedergegeben werden (LIAN et al. 2015:2). Vielversprechende Modelldurchläufe wurden für Al mit einem R^2 von 0.813 erzielt. Bei den übrigen Elementen lag das Bestimmtheitsmaß bei 0.638 (Cu) und 0.604 (Cr) (LIAN et al. 2015:4). Neben den bekannten Vorteilen spektraler Messverfahren in Form einer schnellen und destruktiven Datenaufnahme bewerten die Autoren den Zeitaufwand bei der Modellerstellung und den eingeschränkten Monitoring Bereich als nachteilig (LIAN et al. 2015:7). Bei flächendeckenden Aufnahmen hyperspektraler Sensoren ist insbesondere eine exakte radiometrische und atmosphärische Korrektur der Daten unerlässlich (LIAN et al. 2015:9).

Zahlreiche Studien konnten die essentielle Rolle, die organische Bestandteile bei der Bindung von Metallen in der Bodenmatrix einnehmen, belegen. Dies wurde beispielsweise durch hohe Korrelationen zwischen spektralen Merkmalen, die durch SOM hervorgerufen werden, und bestimmten Metallen wie Cd, Pb und Hg sichtbar (e.g. JI et al. 2010:47, SONG et al. 2012:75). Auch die Abschätzung von Metallgehalten durch Modellrechnungen war mit C_{org} als Prädiktorvariable möglich (VOHLAND et al. 2009:206). Dabei wurden multivariate statistische Modelle und insbesondere die PLSR bevorzugt angewendet, was mit den Studien des vorhergehenden Kapitels konform geht. Die unter 3.3.1 und 3.3.2 betrachteten Untersuchungen haben gezeigt, dass anhand spektral sensitiver Bodenbestandteile, welche als Eisenoxide, Tonminerale und organische Komponenten charakterisiert sind, Relationen und quantitative Vorhersagen zu Metallgehalten in Böden hergestellt respektive getroffen werden können. Entsprechend haben sich Fernerkundungsmethoden und insbesondere Spektrometernmessungen als zerstörungsfreie Analyseverfahren in diesem Forschungsfeld etabliert. Die Deposition ausgewählter Metalle in Abhängigkeit von spezifischen Bodenparametern wurde hingegen nur selten betrachtet und die Übertragbarkeit der multivariaten Modelle ist oftmals problematisch, da sie auf die jeweiligen Gebiete angepasst worden (e.g. PANDIT et al. 2010:4117, VOHLAND et al. 2009:207). Wie in den Studien von CHOE et al. (2008:3232) und LIAN et al. (2015:7) dargestellt, sollte in Zukunft verstärkt durch Interpolationsverfahren oder durch den Einsatz flächendeckender Hyperspektralsensoren die Übertragbarkeit der punktuellen Informationen auf räumliche Daten getestet werden. Weiterhin sollten saisonale und langzeitliche Dynamiken hinsichtlich der Metalldekomposition, wie sie in MOROS et al. (2009:9315) bewertet wurden, berücksichtigt werden. Abschließend sei auf die Veröffentlichungen von

SCHWARTZ et al. (2011), RATHOD et al. (2013), SHI et al. (2014) und HORTA et al. (2015) verwiesen, welche allesamt gute Reviews zu den hier angesprochenen Thematiken darstellen.

3.4 Methoden zur Abschätzung von Metallgehalten anhand von Pflanzenspektren

Bereits KOOISTRA et al. (2003) untersuchten, inwieweit die VNIR-Reflexionen von Grasflächen zur Klassifikation variierender Metallkonzentrationen in Böden verwendet werden können (KOOISTRA et al. 2003:4996). Dabei wurden im Rahmen einer in den Niederlanden durchgeführten experimentellen Feldstudie den Böden unterschiedliche Zn-Konzentrationen zugeführt (KOOISTRA et al. 2003:4997). Die Zusammenhänge zwischen insgesamt 83 Pflanzenspektren und den Metallkonzentrationen wurden über eine polynomiale Regression, diverse Vegetationsindizes und anhand einer PLSR evaluiert (KOOISTRA et al. 2003:4998). Zufriedenstellende Ergebnisse mit einer Gesamtgenauigkeit von jeweils 60 und 55 % konnten mit der polynomialen Regression und dem *Modified Soil Adjusted Vegetation Index* sowie mit der PLSR für die Bodenklasse mit den höchsten Zn-Werten erzielt werden (KOOISTRA et al. 2003:5002,5005). Mit der Position der *Red Edge* (vgl. Kapitel 3.2) wurden vergleichsweise schlechte Ergebnisse generiert. Möglicherweise wurde die Indikatorwirkung der Spektren durch deren Aufnahme im Oktober abgeschwächt, weshalb saisonale Einflüsse zukünftig stärker berücksichtigt werden sollten (KOOISTRA et al. 2003:5004).

Ein Jahr später legten KOOISTRA et al. (2004) den Fokus auf naturnahe Graslandflächen zweier am Fluss Waal in den Niederlanden gelegenen Auenstandorte. Aus den dortigen Böden wurden die Gesamtgehalte an Ni, Cd, Cu, Zn und Pb extrahiert und in Relation zu Vegetationsspektren gesetzt, welche zwischen 400 und 1350 nm aufgenommen wurden (KOOISTRA et al. 2004:281). Insgesamt wurden entlang von neun Transekte 54 Bodenproben mit korrespondierenden Pflanzenspektren erhoben (KOOISTRA et al. 2004:282f.). Für die statistische Auswertung nutzten die Autoren lineare und multivariate Regressionen (KOOISTRA et al. 2004:284). Die Resultate der angewendeten Regressionen waren mit R^2 -Werten von 0.50 bis 0.73 miteinander vergleichbar (vgl. KOOISTRA et al. 2004:287 Tabelle 2). Gegenüber KOOISTRA et al. (2003:5004) waren die Zusammenhänge, welche auf Grundlage der *Red Edge-Position* (REP) abgeleitet wurden, signifikanter. Ferner veranschaulichten die Regressionsvektoren die Bedeutung des NIR-Bereiches zwischen 700 und 1100 nm (KOOISTRA et al. 2004:287). KOOISTRA et al. (2004) verweisen darauf, dass die Relationen zwischen den Vegetationsspektren und den Metallgehalten artspezifisch und etwaige toxische Effekte weniger von den Gesamtgehalten der Metalle im Boden, sondern vielmehr von deren Bioverfügbarkeit, abhängig sind (KOOISTRA et al. 2004:288).

CLEVERS et al. (2004) verwendeten die gleichen Daten wie KOOISTRA et al. (2004) und betrachteten den Nutzen der REP zur Abschätzung der Metallgehalte auf den beschriebenen Grasflächen detaillierter (CLEVERS et al. 2004:3884ff.). Allgemein konnte kein negativer Einfluss der Metalle auf die Biomasse der Gräser festgestellt werden. Vielmehr zeigte die Vegetation auf Böden mit höheren Metallkonzentrationen eine stärkere Reflexion im NIR. So scheinen höhere Bodenfeuchte- und SOM-Werte auf diesen Standorten die Vitalität der Pflanzen positiv beeinflusst zu haben (CLEVERS et al. 2004:3888). Die REP korrelierte weiterhin

mit r-Werten von -0.502 für Ni und -0.802 für Pb signifikant negativ mit den Metallkonzentrationen (CLEVERS et al. 2004:3891). Interessanterweise konnten innerhalb der *Red Edge* der Spektren zwei Peaks nahe 700 und zwischen 716 und 722 nm detektiert werden (vgl. CLEVERS et al. 2004:3892). In Abbildung 3-5 ist beispielhaft die erste Ableitung ausgewählter Vegetationsspektren zwischen 670 und 750 nm dargestellt. Je nach Kontaminationsgrad des Bodens variieren die Reflexionen und Merkmale in diesem Bereich sichtbar. Die rechte Abbildung veranschaulicht zudem den von CLEVERS et al. (2004:3891) beschriebenen Zusammenhang zwischen der REP und der Pb-Konzentration der Auenböden.

Unter kontrollierten Laborbedingungen betrachteten DUNAGAN et al. (2007) das Wachstum von Senfspinatpflanzen auf Hg kontaminierten Böden. Über einen gesamten Wachstumszyklus hinweg wurden die Pflanzen regelmäßig spektrometriert und die VNIR-Reflexionen mit Spektren nicht kontaminierter Kontrollpflanzen abgeglichen (DUNAGAN et al. 2007:301). Zur Modellierung des Zusammenhanges zwischen den Hg-Gehalten in den Blättern und Böden wurde eine MLR eingesetzt. Bedeutsame positive Korrelationen konnten nur für die ersten beiden Stichprobentage ermittelt werden (DUNAGAN et al. 2007:304). Die Pflanzen der verunreinigten Böden zeigten im Durchschnitt höhere Reflexionen nahe 550 nm und geringere *Ratio Vegetation Index*- und REP-Werte zu Beginn der Wachstumsperiode. Jenes deutet auf eine geringere Chlorophyllkonzentration oder eine Beeinträchtigung des Stoffwechsels bei den jüngeren Pflanzen hin und resultiert aus einem Hg-induzierten Vegetationsstress (DUNAGAN et al. 2007:309).

In einem weiteren Gefäß-Experiment analysierten SRIDHAR et al. (2007a) die As- und Cr-Akkumulation chinesischer Saumfarnpflanzen und inwiefern spektrale Indizes sensitiv auf etwaige strukturelle Blattveränderungen, die aus der Aufnahme der Metalle resultieren, reagieren (SRIDHAR et al. 2007a:1055). Hierfür wurden 25 Farne über 22 Tage hinweg As und Cr in unterschiedlichen Mengen zugeführt. Gleichzeitig wurden die VNIR-Reflexionen der Pflanzen aufgenommen, ehe diese geerntet und deren Metallgehalte ermittelt wurden. Zur Abschätzung des Vegetationsstresses während der Beobachtungsperiode wurden der *Normalized Difference Vegetation Index* (NDVI) und der Ratio aus den Reflexionswerten bei 1110

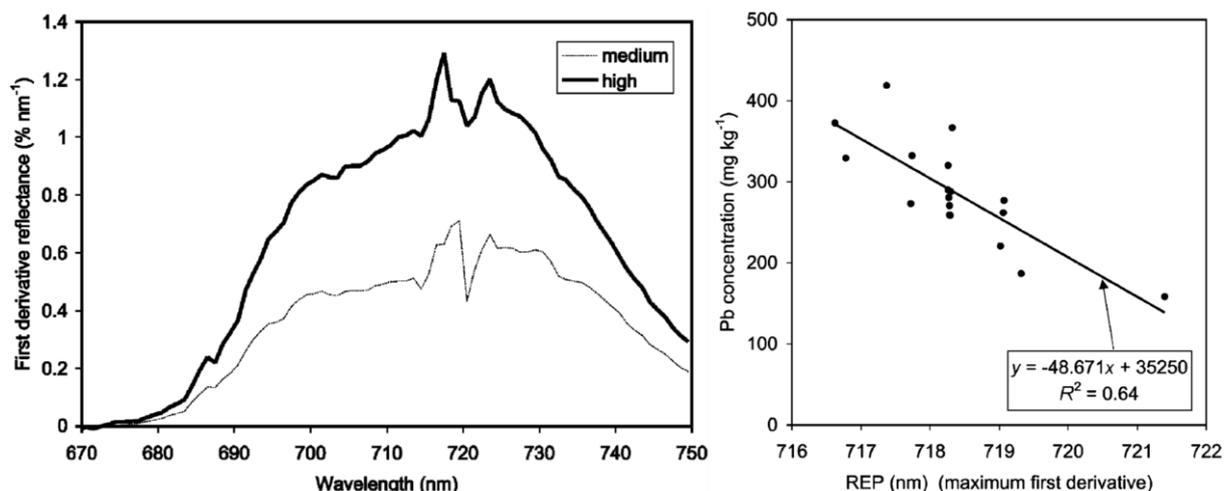


Abbildung 3-5: Die erste Ableitung ausgewählter Vegetationsspektren eines niedrig- und hoch belasteten Standortes (links) und der Zusammenhang zwischen der *Red Edge*-Position und der Pb-Konzentration im Boden (rechts)
(verändert, aus: CLEVERS et al. 2004:3890,3893)

und 810 nm eingesetzt (SRIDHAR et al. 2007a:1057ff.). Während die Cr-Akkumulation eindeutig strukturelle und physiologische Eigenschaften der Pflanzen beeinflusste, bewirkte As keine vergleichbaren Effekte. Folglich korrelierte der Ratio mit den schädigenden Cr- und nicht mit den As-Gehalten. Anhand des NDVI konnten zwar Stressmerkmale detektiert werden, aber eine Trennung in As- oder Cr-bedingten Vegetationsstress war nicht möglich (SRIDHAR et al. 2007a:1063ff.).

In einer weiteren Studie verwendeten SRIDHAR et al. (2007b) die zuvor angesprochenen Indizes zur Analyse der Auswirkungen einer Zn- und Cd-Akkumulation bei Gerstpflanzen. Dabei wurden die Pflanzen in verschiedene Belastungsgruppen eingeteilt, regelmäßig spektrometriert und nach fünf bis sechs Wochen abgeerntet (SRIDHAR et al. 2007b:1043f.). Aus der Elementaufnahme resultierend, konnte in den Vegetationsspektren ein *blue shift* innerhalb des *Red Edge*-Bereiches beobachtet werden. Der NDVI offenbarte zudem Stressmuster, ehe diese visuell sichtbar wurden. Der Index wurde im Wesentlichen durch eine abnehmende Chlorophyllkonzentration, die auch durch andere Stressfaktoren, wie Wasser- oder Nährstoffmangel, verursacht werden kann, gesteuert (SRIDHAR et al. 2007b:1050). Der Ratio aus 1110 und 810 nm reagierte wie bei SRIDHAR et al. (2007a:1065) sensitiv auf strukturelle Blattveränderungen. Derartige Anomalien konnten bei den Gerstpflanzen in Folge der Zn-Anreicherung nachgewiesen werden. Vergleichbare Effekte waren für Cd nicht sichtbar. Entsprechend zeigte der Ratio nur Abweichungen bei den Zn-kontaminierten Pflanzen, was das Potential des Index metallinduzierte Pflanzenschäden erfassen zu können, hervorhebt (SRIDHAR et al. 2007b:1050f.).

REN et al. (2008) untersuchten in ihrer Studie, inwieweit Böden, welche mit Pb angereichert wurden, das Wachstum und die Vitalität von Reispflanzen beeinflussen (REN et al. 2008:323). Im Rahmen eines Gewächshausversuches wurden drei verschiedene Konzentrationslevel und deren Auswirkungen an fünf Pflanzen über einen Zeitraum von 90 Tagen hinweg getestet. Die VNIR-Reflexionen der Pflanzen sind dabei mehrmals aufgezeichnet worden. Neben der REP wurden aus den *Continuum Removal*-Spektren diverse Absorptionstiefen abgeleitet (REN et al. 2008:324). Zwar wurden Stressmerkmale, wie der in SRIDHAR et al. (2007b:1050) beschriebene *blue shift* der *Red Edge* bei den belasteten Pflanzen sichtbar, jedoch schätzten die Autoren den Probenumfang für akkurate Vorhersagen als zu gering ein (REN et al. 2008:324f.).

In einer weiteren Laborstudie betrachteten LIU et al. (2008) die Auswirkungen von Cu auf die Vitalität und spektrale Signatur von Rapspflanzen. Dabei bildeten die Autoren sechs Belastungsgruppen und nach 28 Tagen wurden die VNIR-Spektren sowie die Chlorophyll- und Cu-Gehalte der Pflanzen erfasst (LIU et al. 2008:203). Die Flächen unterhalb der Reflexionskurven zwischen 460 bis 670 nm und 750 bis 1000 nm wurden als spektrale Indikatoren verwendet und in Relation zu den Cu-Konzentrationen gesetzt. Wie in den Arbeiten zuvor wurden Veränderungen im *Red Edge*-Bereich ebenfalls als spektrale Merkmale eingebunden (e.g. SRIDHAR et al. 2007b:1050, REN et al. 2008:324) (LIU et al. 2008:204). Höhere Cu-Gehalte in den Böden führten zu einer vermehrten Anreicherung des Metalls in den Rapspflanzen. Weiterhin veranschaulichten die Ergebnisse, dass mit einer steigenden Cu-Konzentration in den Blättern deren Chlorophyllgehalt sank (LIU et al. 2008:205). Konkret deuteten die berechne-

ten Flächenstatistiken auf eine erhöhte Reflexion im VIS- und eine verminderte Reflexion im NIR-Bereich hin (LIU et al. 2008:206f.).

In der Arbeit von SLONECKER et al. (2009) wurden die aus der Aufnahme von As resultierenden spektralen Eigenschaften von Farnpflanzen analysiert. In dem Gewächshausexperiment wurde von April bis Oktober das Wachstum von 300 Einzelpflanzen dreier Farnarten auf Böden mit abweichenden As-Konzentrationen überwacht (SLONECKER et al. 2009:650). In kontinuierlichen Abständen wurden die Pflanzen spektrometriert und die aufgenommenen Spektren sind zur Entwicklung von Regressionsmodellen eingesetzt worden (SLONECKER et al. 2009:651f.). Generell war ein inverser Zusammenhang zwischen der As-Konzentration der Böden und der Menge an Biomasse beim Abernten erkennbar (SLONECKER et al. 2009:655). Neben einer gehemmten Biomasseproduktion traten bei einigen Pflanzen auch deutlich toxische Symptome wie Nekrose oder das Absterben von Blättern hervor (SLONECKER et al. 2009:655). Obwohl die Korrelationen zwischen den Spektren und As-Gehalten insgesamt weniger stark ausgeprägt waren, ließen sich charakteristische Muster und Relationen zu bestimmten Wellenlängenbereichen ableiten (SLONECKER et al. 2009:664). Interessanterweise wurden in Abhängigkeit von der Art des Farnes unterschiedliche Wellenlängenbereiche bei der Modellentwicklung selektiert, was auf artspezifische Reflexions- und Aufnahmemechanismen hindeutet (SLONECKER et al. 2009:664,670).

Wie REN et al. (2008) zuvor untersuchten auch REN et al. (2010) die spektralen Signaturen von Reispflanzen und inwiefern diese durch Bodenmetalle beeinflusst respektive gestört werden. Dabei sollten Unterschiede zwischen belasteten und unbelasteten Pflanzen sowie repräsentative Wellenlängenbereiche zur Erstellung von Indizes als Zeiger für Pb-, Zn-, Cu- und As-Gehalte in Böden herausgearbeitet werden (REN et al. 2010:430). Die Reflexionen bei 460, 560, 660 und 1100 nm reagierten dabei sensitiv auf die Metallkonzentrationen (REN et al. 2010:431). Weitere Zusammenhänge wurden zwischen Indizes, deren Berechnung an die des NDVI angelehnt war, und den Metallen sichtbar. So korrelierte etwa der Index aus 810 und 510 nm signifikant mit Pb ($r = -0.58$) und As ($r = -0.38$). Vergleichbare Indizes aus 510 und 870 nm beziehungsweise aus 660 und 870 nm korrelierten hingegen deutlich mit Zn ($r = -0.75$) und Cu ($r = -0.76$) (REN et al. 2010:432).

Ähnlich wie in den Arbeiten von KOOISTRA et al. (2004) und CLEVERS et al. (2004) betrachteten auch GÖTZE et al. (2010) den aus anthropogenen Quellen resultierenden Eintrag von Metallen in Auenökosysteme. Im Detail bildete ein standardisierter Gefäßversuch mit Auenvegetation und mehreren kontaminierten Böden die Grundlage der Studie, in welcher die toxikologischen Effekte der Metalle indirekt über Pflanzenspektren abgeleitet werden sollten. Weiterhin sollten vegetative Stressmerkmale durch diverse Normalisierungstechniken und Indizes parametrisiert werden (GÖTZE et al. 2010:133). Neben Cd, Cr, Cu, Mn und Ni wurden die Pb-, Fe- und Zn-Konzentrationen der Böden berücksichtigt. Während des Beobachtungszeitraumes von April bis August wurde mittels des Variationskoeffizienten die Sensitivität der Methoden im Hinblick auf pflanzenphysiologische Veränderungen abgeschätzt (GÖTZE et al. 2010:134). Mit Hilfe des Ansatzes konnte der von den Metallen herbeigeführte Pflanzenstress von anderen Stressarten getrennt werden. Die Bandentiefe der *Continuum Removal*-Spektren nahe 1730 nm wurde zudem als potentieller Indikator für entsprechende Stressursachen ausgewiesen. Möglicherweise wurde die Ausprägung der Spektren in diesem Wellenlängenbe-

reich durch die Protein- und Ligninproduktion der Pflanzen beeinflusst (GÖTZE et al. 2010:136).

Ein weiteres Experiment unter festgesetzten Rahmenbedingungen wurde von BANDARU et al. (2010) durchgeführt, welche die Auswirkungen einer As-Anreicherung in den Blättern hydroponisch gezogener Spinatpflanzen erprobten. Dabei sollte der Zusammenhang zwischen spektralen und strukturellen Blatteigenschaften geprüft werden (BANDARU et al. 2010:4163). Neben Pflanzenspektren wurden weitere Variablen, wie etwa die Dicke und Oberfläche des Mesophylls in den Blättern, aufgenommen (BANDARU et al. 2010:4167f.). Mit steigender As-Konzentration waren ein vermindertes Pflanzenwachstum, reduziertes Trockengewicht sowie abnehmender Blattwassergehalt erkennbar (BANDARU et al. 2010:4169). Zudem war bei den stärker kontaminierten Pflanzen eine Zunahme der Reflexionen im VIS und eine Abnahme der Reflexionen im NIR ersichtlich (BANDARU et al. 2010:4172), was mit den Erkenntnissen von LIU et al. (2008:206f.) konform geht. Die Wellenlängen um 1048, 1080 und 1098 nm korrelierten stark mit den As-Gehalten und mittels eines linearen Regressionsmodells und dem Ratio aus 1048 und 1021 nm konnten die As-Konzentrationen in den Blättern zuverlässig geschätzt werden ($R^2 = 0.59$) (BANDARU et al. 2010:4174).

Ein auf neuronalen Netzwerken basierender Ansatz zur Modellierung der Chlorophyllkonzentrationen metallbelasteter Reispflanzen wurde von LIU et al. (2010) vorgestellt (LIU et al. 2010:223). Als Untersuchungsflächen dienten drei, in der Jilin Provinz in China gelegene und an ein Industriegebiet angrenzende, Standorte mit variierenden Cu- und Cd-Bodenbelastungen (LIU et al. 2010:224). Unter Berücksichtigung der saisonalen Wachstumsphasen der Reispflanzen wurden zwischen Juli und September Vegetationsspektren erhoben (LIU et al. 2010:225). In Abbildung 3-6 sind die gemittelten Reflexionskurven aller Zeitpunkte und die unterschiedlichen Chlorophyllgehalte während der Wachstumsstadien veranschaulicht. Wie in den Studien von BANDARU et al. (2010:4172) und LIU et al. (2008:206f.) sind die Pflanzen auf stärker belasteten Standorten (Level I und Level II) durch höhere Reflexionen im VIS-Bereich und durch niedrigere Reflexionswerte im NIR und SWIR zwischen 700 und 1300 nm gekennzeichnet. Weiterhin verdeutlicht die rechte Abbildung, dass der Chlorophyllgehalt der unbelasteten Reispflanzen zu allen Zeitpunkten höher ist (LIU et al. 2010:226). Zudem konnten

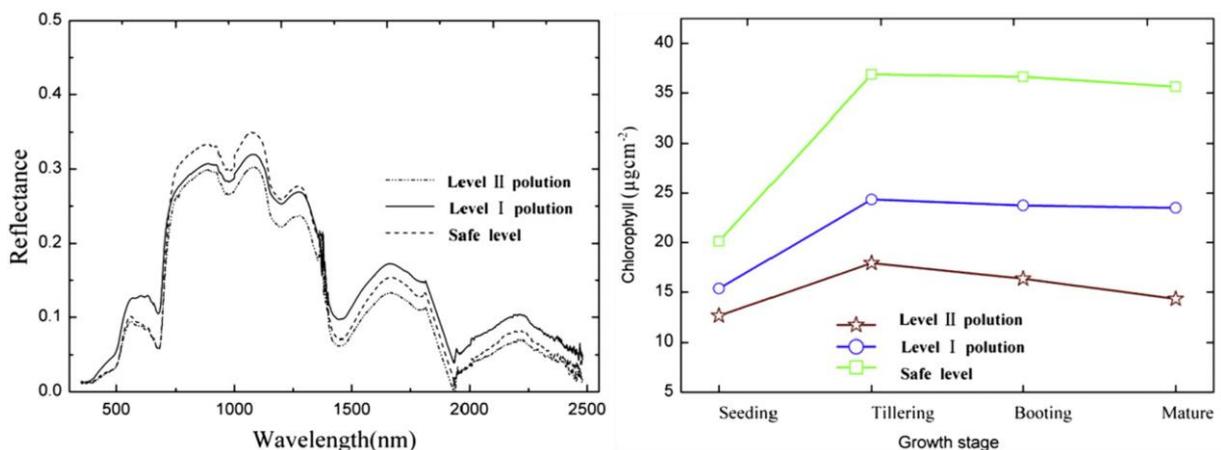


Abbildung 3-6: Reflexionsspektren von Reispflanzen unterschiedlich kontaminierter Standorte (links) und variierende Chlorophyllkonzentrationen in Abhängigkeit von der Wachstumsphase und Bodenbelastung (rechts)
(verändert, aus: LIU et al. 2010:225,226)

mit dem neuronalen Netzwerk-Ansatz die entsprechenden Chlorophyllkonzentrationen präzise für alle Testflächen geschätzt werden ($R^2 = 0.9014$) (LIU et al. 2010:230f.).

Die zuvor beschriebene Methodik wurde von LIU et al. (2011b) zur Vorhersage von Cu- und Cd-Konzentrationen in Reisblättern nochmals aufgegriffen und optimiert (LIU et al. 2011b:1642). Der NDVI und der *Optimized Soil Adjusted Vegetation Index* korrelierten dabei signifikant mit den Metallwerten (LIU et al. 2011b:1646). Zur Verbesserung der Übertragbarkeit und Genauigkeit nutzten die Autoren bei der Modellentwicklung neben spektralen Indizes auch sogenannte *“environmental parameters“*, wie den pH-Wert des Bodens oder monatliche Temperatur- und Niederschlagsdaten (LIU et al. 2011b:1644). Durch die kombinierte Anwendung dieser Inputvariablen war eine exakte Vorhersage der Metallgehalte möglich und bei der Modellvalidierung wurden R^2 -Werte von 0.7821 und 0.7251 für Cu und Cd ermittelt (vgl. LIU et al. 2011b:1649 Tabelle 6).

Einen Beitrag bezüglich der Auswirkungen von kontaminiertem Wasser auf die Vegetation von Feuchtgebieten liefert die Studie von VAN DEVENTER & CHO (2014). Anhand von Feldspektren sollten mögliche Differenzen zwischen Pflanzen unbelasteter und belasteter Standorte in Südafrika, welche durch saures Grubenwasser verunreinigt wurden, erfasst werden (VAN DEVENTER & CHO 2014:1). Dabei sind Wasser-, Sediment- und Pflanzenproben mehrerer mit Schilfrohr bewachsener Testflächen ausgewertet worden. Zusätzlich wurden über einen Zeitraum von zwei Jahren hinweg Vegetationsspektren aufgezeichnet, aus denen der NDVI und die REP abgeleitet wurden (VAN DEVENTER & CHO 2014:3f.). Auf den von dem Grubenwasser betroffenen Flächen ließen sich niedrigere Index-Werte und eine höhere Variabilität für beide Vegetationsindizes nachweisen. Die Autoren fügen jedoch hinzu, dass die zeitliche und räumliche Ausprägung der Metallkonzentrationen in den Sedimenten und Pflanzen der Feuchtgebiete von zahlreichen Faktoren beeinflusst wird, die ebenso auf die spektralen Indizes einwirken können (VAN DEVENTER & CHO 2014:10f.).

In einer aktuellen Studie verwendeten WANG et al. (2015) einen *discrete wavelet transform*-Ansatz zur indirekten Abschätzung von Metallkonzentrationen in Seggen (WANG et al. 2015:15340). Als Untersuchungsraum diente ein Feuchtgebiet nahe des Poyang Sees in China, in welchem durch umliegende Bergbauaktivitäten hohe Cu-Konzentrationen eingetragen wurden (WANG et al. 2015:15343). Aus den transformierten Pflanzenspektren wurden die Flächenanteile im Spektralbereich zwischen 605 und 720 nm errechnet und in Relation zu den Cu-Werten der Seggenblätter gesetzt (WANG et al. 2015:15343,15347). In der Auswertung zeigten sich zunächst stark negative Korrelationen ($r = -0.719$) zwischen den Cu- und den Chlorophyllgehalten (WANG et al. 2015:15348). Mit Hilfe der *wavelet* basierenden Flächenparameter war eine genaue Schätzung der Cu-Werte möglich, was sich in einem R^2 von 0.706 widerspiegelte (WANG et al. 2015:15353). Zudem erzielte der Ansatz im Vergleich zu anderen getesteten spektralen Parametern ebenfalls die höchsten Genauigkeiten und WANG et al. (2015) resümieren, *“[that] the main mechanism of such successful estimation originates from the strong correlation between Cu and chlorophyll“* (WANG et al. 2015:15354f.).

Die dargestellten Arbeiten bestätigen das Potential hyperspektraler Fernerkundungstechniken zur Abschätzung von Metallkonzentrationen in Pflanzenbestandteilen. Ein Anwendungsschwerpunkt ist dabei der Nutzen einzelner spektraler Pflanzensignaturen zur Untersuchung der Auswirkungen von Bodenmetallen auf die Pflanzenvitalität. In diesem Kontext wurde

deutlich, dass der Großteil der Studien zur Minimierung externer Einflussfaktoren auf standardisierte Rahmenbedingungen ausgelegt war (e.g. DUNAGAN et al. 2007, LIU et al. 2008, BANDARU et al. 2010, GÖTZE et al. 2010) und vergleichsweise wenig spektrale Informationen direkt im Gelände aufgezeichnet wurden (e.g. KOOISTRA et al. 2004, CLEVERS et al. 2004, VAN DEVENTER & CHO 2014). Weitere Zusammenhänge ließen sich zwischen der Reflexion der Pflanzen und den in Blättern angereicherten Metallen herstellen (e.g. BANDARU et al. 2010, LIU et al. 2011b, WANG et al. 2015). Dabei werden häufig charakteristische Wellenlängenbereiche, wie die *Red Edge*-Region oder etablierte Vegetationsindizes eingesetzt, anhand derer sich Stress- und Vitalitätsmerkmale charakterisieren lassen (e.g. SRIDHAR et al. 2007b, REN et al. 2008, LIU et al. 2011b). Die spektralen Merkmale sollten jedoch nicht eigenständig mit den Metallgehalten verknüpft werden, da Metalle nur einen von vielen Faktoren repräsentieren, welche Stresssymptome in Pflanzen hervorrufen können. Auch zukünftig wird es unabdingbar sein, biologische und physiologische Stressursachen zuverlässig voneinander zu trennen. Weiterhin gilt es, robuste Auswerteverfahren zu entwickeln, die auf verschiedene Pflanzenarten und Wachstumsstadien angewendet werden können und gleichzeitig eine Vielzahl an Stressoren berücksichtigen. Ausführliche Reviews zu der genannten Thematik bieten die entsprechenden Unterkapitel der Veröffentlichungen von SCHWARTZ et al. (2011:82ff.) und RATHOD et al. (2013:414ff.).

4 Untersuchungsgebiete und verwendete Datensätze

Im ersten Abschnitt werden zunächst die beiden Untersuchungsgebiete geografisch lokalisiert und die klimatischen Gegebenheiten erörtert. Daran folgend werden die im Rahmen der vorliegenden Arbeit genutzten Daten vorgestellt. Diese beinhalten neben den verwendeten Raster- und Vektordaten ebenso die im Gelände und im Labor erhobenen Parameter, wobei einzelne Prozessierungs- und Analyseschritte in der Beschreibung berücksichtigt werden.

4.1 Charakterisierung der Testgebiete

Mit einem Gesamteinzugsgebiet von 148268 km² repräsentiert die Elbe „das viertgrößte Flussgebiet Mitteleuropas“ (IKSE 2005:7). Es erstreckt sich über die Staaten Deutschland, Tschechische Republik, Polen und Österreich. Der Lauf des 1094 km langen Flusses wird innerhalb Deutschlands in die Abschnitte der Oberen-, Mittleren- und Unteren Elbe gegliedert (IKSE 2005:7, SCHOLZ et al. 2005:5). Der Untersuchungsschwerpunkt innerhalb dieser Arbeit wurde auf die Auenstandorte im Bereich der Mittleren Elbe gelegt. Der 489 km und 80843 km² umfassende Elbabschnitt erstreckt sich von Schloss Hirschstein bei Riesa bis hin zum Wehr in Geesthacht und beherbergt die Naturräume des Elbe-Elster-Tieflandes und der Elbtalniederung (IKSE 2005:11, SCHOLZ et al. 2005:5). Im Groben ist der Untersuchungsraum durch die Städte Barby im Westen und durch Lutherstadt Wittenberg im Osten abgrenzbar. Nach Süden hin wurde der Flusslauf der Mulde bis nach Jeßnitz eingebunden.

Zunächst galt es, potentielle Untersuchungsflächen zu definieren. Deren Auswahl erfolgte auf Grundlage verschiedener Kriterien, welche mit Geländebegehungen abgeglichen wurden. Die Kriterien wurden aus frei verfügbaren beziehungsweise aus bereits vorhandenen Daten des Archives des Fachbereiches Geofernerkundung und Kartographie der MLU Halle-Wittenberg erstellt. Zum einen sollten die Auenflächen direkt vom Elbe-Hochwasser 2013 betroffen gewesen sein, da durch das Überschwemmungsereignis von einem vermehrten Sediment- und Schadstoffeintrag ausgegangen werden kann (vgl. Kapitel 2.2). Hierfür wurden die überfluteten Elbauenbereiche innerhalb eines RapidEye-Mosaiks vom 05.06.2013 klassifiziert. Die Wassermaske ist objektbasiert auf Grundlage des NDVI generiert worden, was eine einfache Separierung der Wasserflächen ermöglichte (vgl. Abbildung A4-4). Aus der *Vorläufigen Bodenkarte* (VBK) (Maßstab 1:50000) wurden typische Auenböden, Gleye und Stagnosole extrahiert. Die Grünlandklassen aus der *Biotoptypen- und Nutzungstypenkartierung* (BTNT) (Maßstab 1:1000) und aus dem *Amtlich Topographisch-Kartografischen Informationssystem* (ATKIS) (maßstabsfrei) flossen ebenfalls in die Bewertung mit ein. Die geomorphologischen Gegebenheiten wurden auf Grundlage der *Geologischen Übersichtskarte* (GÜK) (Maßstab 1:20000) berücksichtigt. Alle genannten Datensätze sind in der Tabelle 4-2

im folgenden Kapitel nochmals zusammengestellt. Abbildung 4-1 veranschaulicht die Verschneidung der aus den erläuterten Raster- und Vektordaten gewonnenen Informationen. Die dadurch abgeleiteten potentiellen Untersuchungsflächen sind gelb in Abbildung 4-2 visualisiert. Wie zu erwarten, konnten größere und zusammenhängende Flächen an der Elbe ausgewiesen werden. In dem vergrößerten Ausschnitt in Abbildung 4-2 sind auffallend kleinere Flächen an der Mulde erkennbar. Mit Hilfe dieser Datenbasis und in Kombination mit den Geländebegehungen wurden zwei Auenbereiche linkselbisch und nordwestlich beziehungsweise nordöstlich von Wörlitz in Sachsen-Anhalt als Hauptuntersuchungsgebiete festgelegt, da sie die Kriterien einer homogenen Grünlandbedeckung, einer ausgeprägten Feinmorphologie und einer ausreichenden räumlichen Ausdehnung erfüllten. Die Lage der Flächen ist in Abbildung 4-3 dargestellt, wobei die Zahlen das *Untersuchungsgebiet 1* (U1) und das *Untersuchungsgebiet 2* (U2) kennzeichnen. Im Allgemeinen wird das U1 auch als „Schleusenheger bei Wörlitz“ beschrieben (SCHOLZ et al. 2009:72). Durch die vergleichbaren Gebietscharakteristika und durch die geringe Entfernung von ca. 10 Flusskilometern zwischen den Flächen sind die Entwicklung robuster Methoden und deren Übertragbarkeit gewährleistet.

Aufgrund der starken landschaftlichen Prägung der Mittleren Elbe durch die vergangenen Eiszeiten, folgt der Flussverlauf überwiegend den „eiszeitlichen Entwässerungsbahnen“ (SCHOLZ et al. 2005:7). Genauer gesagt wurden die Gebiete „durch die glazialen Bildungen der pleistozänen Eisvorstöße der verschiedenen Kaltzeiten [...] sowie [durch] glazilimnische[...] und fluviatale[...] Ablagerungen“ geformt (SCHOLZ et al. 2009:75). Typisch für diesen Elbabschnitt „ist das geringe Gefälle des Flussbettes“, wodurch der Fluss „im flachen Gelände des breiten Elbtals stark ausschwing[t]“ (SCHOLZ et al. 2005:7). Derartige Schwingungen sind

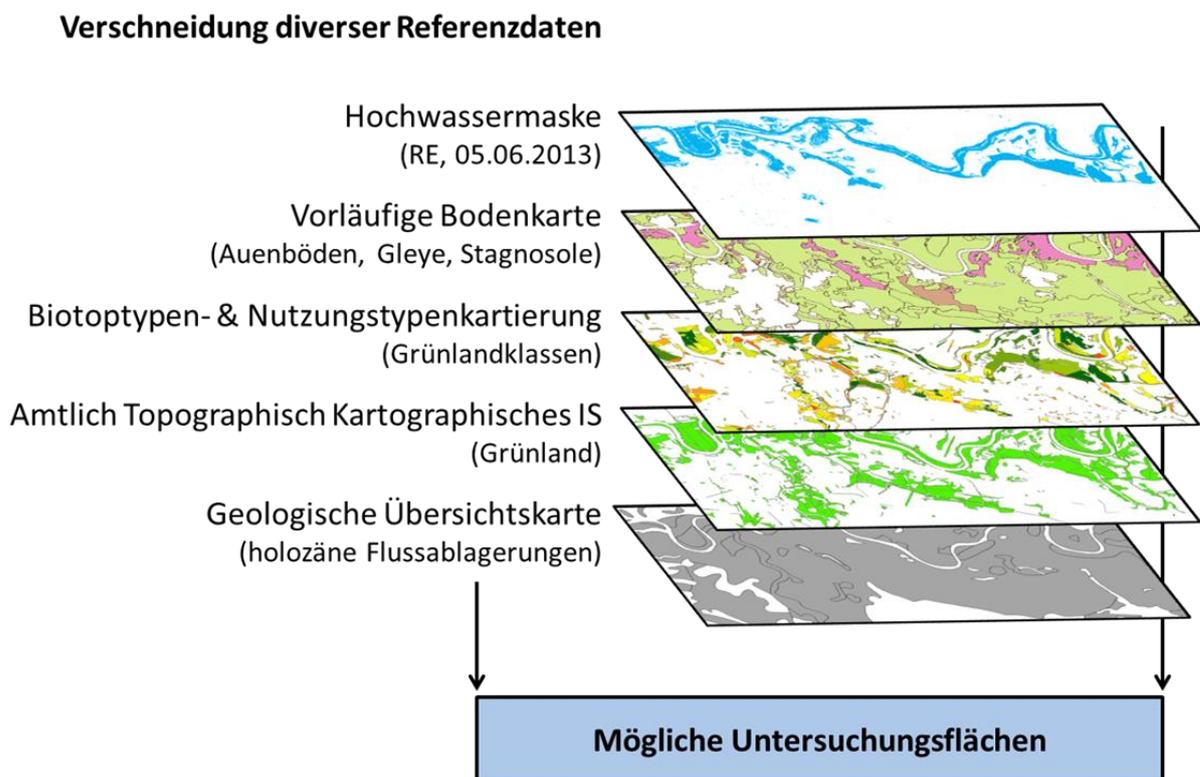


Abbildung 4-1: Berücksichtigte Datensätze zur Ausweisung potentieller Testgebiete
(Datengrundlage: BlackBridge, LAGB, LAU, LVermGeo)

4 Untersuchungsgebiete und verwendete Datensätze

auch in Abbildung 4-3 sichtbar. Die Topographie der beiden Untersuchungsgebiete wird von Uferwällen, Niederterrassen sowie von Flutrinnen und Senkenbereichen geprägt. Anhand des hochaufgelösten *Digitalen Laserscanner Geländemodells* (DGM) (vgl. Tabelle 4-1) mit einer Pixelgröße von einem Meter können die topographischen Gegebenheiten nachvollzogen werden. Dies ist in Abbildung 4-4 erkennbar. Das U1 liegt auf einer Höhe von 59.27 bis 62.95 m

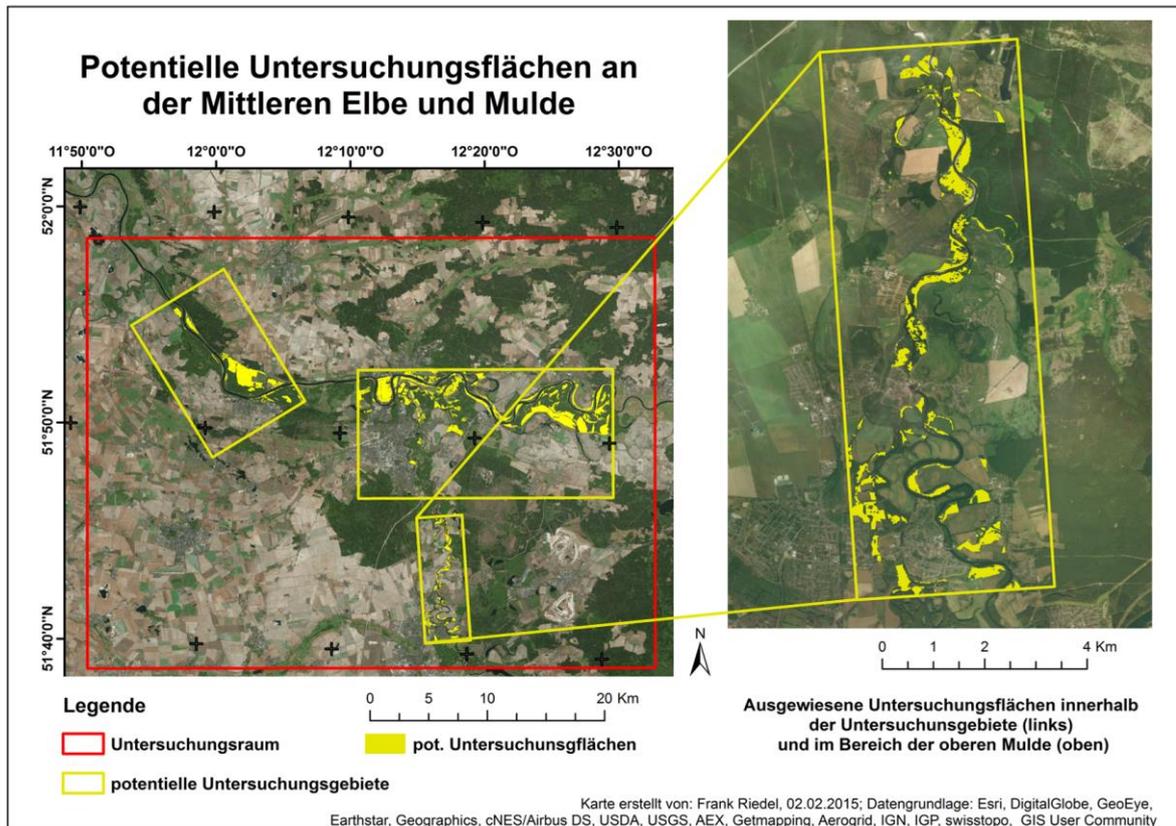


Abbildung 4-2: Lage der potentiellen Testgebiete an der Mittleren Elbe und Mulde

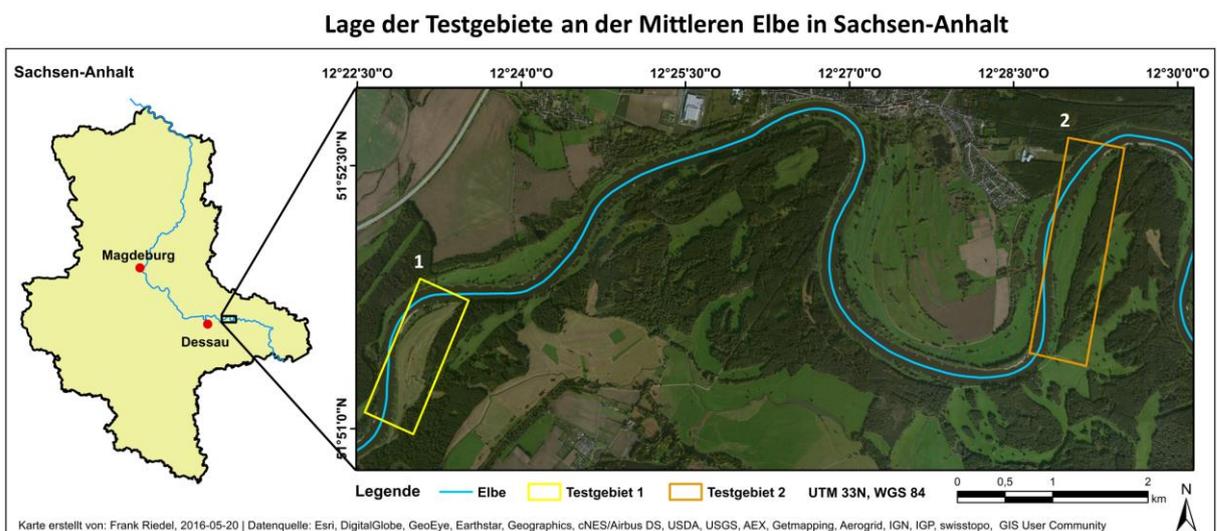


Abbildung 4-3: Lage der beiden Untersuchungsflächen an der Mittleren Elbe

über NN und nimmt in etwa eine Fläche von 0.29 km² ein. Die Höhenunterschiede sind auf dem ca. 0.33 km² großen U2 mit Werten zwischen 61.40 und 65.01 m über NN größer. Für die Generierung der Höhenklassen respektive Bezugseinheiten wurde das DGM normalisiert, sodass die Minimum- und Maximumwerte der beiden Flächen einen Wertebereich zwischen 0 und 1 umfassen. In jedem Gebiet wurden den Senken, Terrassen und Plateaus jeweils Höhenwerte von 0 - 0.33, 0.331 - 0.66 und 0.661 bis 1 zugewiesen, sodass die Unterteilung der Einheiten auf beiden Flächen miteinander vergleichbar ist. Wie in Abbildung 4-4 visualisiert, ist in jedem Areal ein Nord-Süd-Gradient im Höhenprofil erkennbar. Beide Gebiete werden von Norden nach Süden verlaufenden Senken durchzogen. Die Flutrinnen „weisen eine temporäre Wasserführung auf, die vorwiegend mit dem Elbeabfluss korreliert“ (SCHOLZ et al. 2009:72). Derartige morphologische Merkmale sind im U1 sichtbar größer und zusammenhängender ausgebildet. Kleinere Plateaus existieren im östlichen Teil vom U1, wohingegen im südlichen Areal des U2 die Struktur eines Deiches hervortritt.

Wie von SCHOLZ et al. (2009) beschrieben, „befindet sich [die Mittlere Elbe] am Rande des Mitteldeutschen Trockengebietes, im Regenschatten des Harzes“ (SCHOLZ et al. 2009:73). Das Klima im Inland ist entsprechend kontinental geprägt. Unter Berücksichtigung der Klimadaten des Deutschen Wetterdienstes für die Messstation Wörlitz geben SCHOLZ et al. (2009:74) eine mittlere Jahrestemperatur von 8.4° C und einen mittleren Jahresniederschlag von 570 mm für das Gebiet an. Detailliertere Aussagen über die klimatischen Verhältnisse innerhalb des Untersuchungszeitraumes erlauben die klimatischen Messwerte des Deutschen Wetterdienstes der Jahre 2015 und 2016 für die Station Wittenberg. Hierfür sind in der Abbildung 4-5 jeweils die täglichen Mittel der Lufttemperatur und des Niederschlages beider Jahre abgebildet. Während 2015 die niedrigsten Temperaturen im Februar erreicht wurden, war es

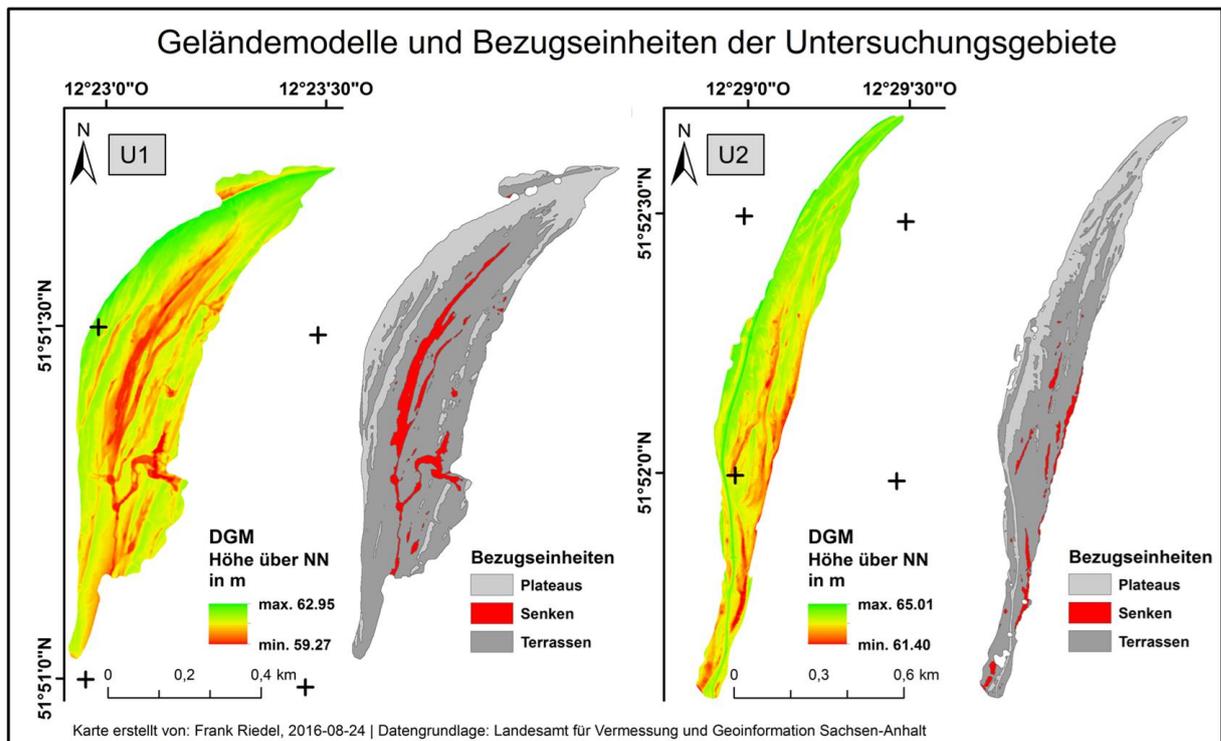
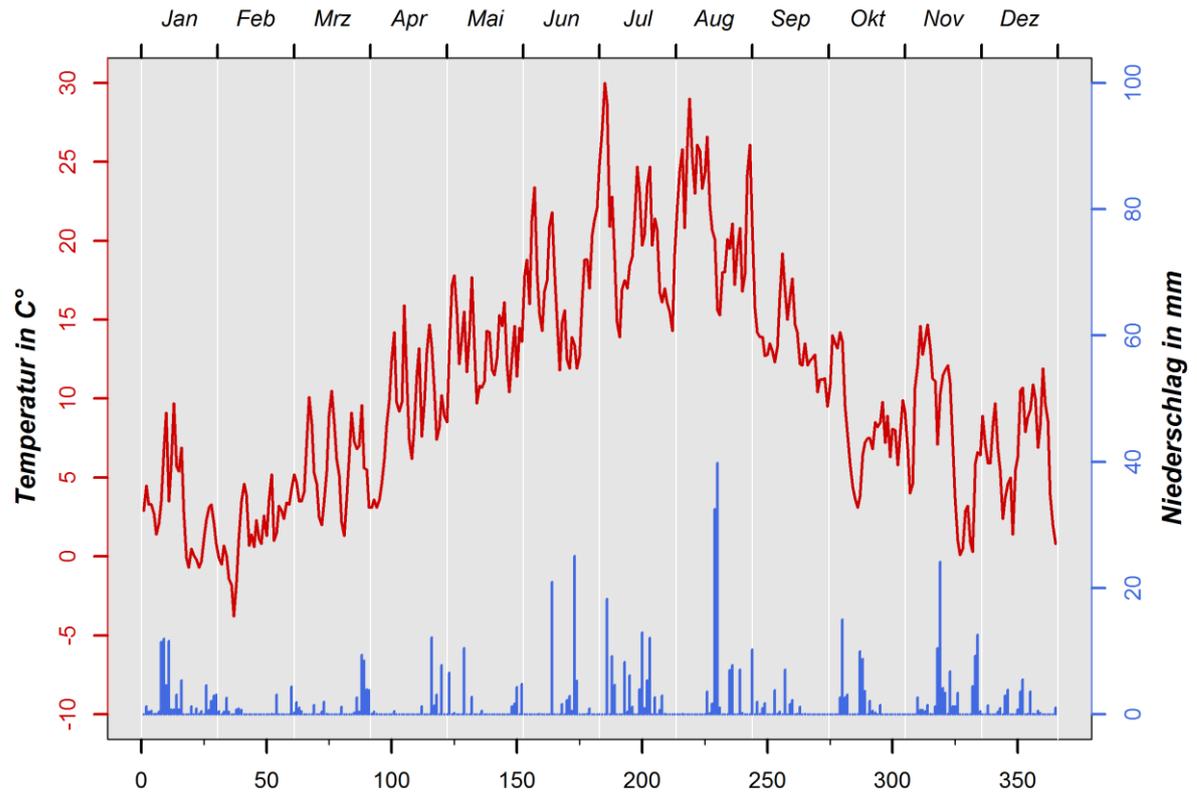


Abbildung 4-4: Charakterisierung der Morphologie beider Untersuchungsflächen

Tägliche Temperatur- und Niederschlagswerte für die Klimastation Wittenberg (2015)



Tägliche Temperatur- und Niederschlagswerte für die Klimastation Wittenberg (2016)

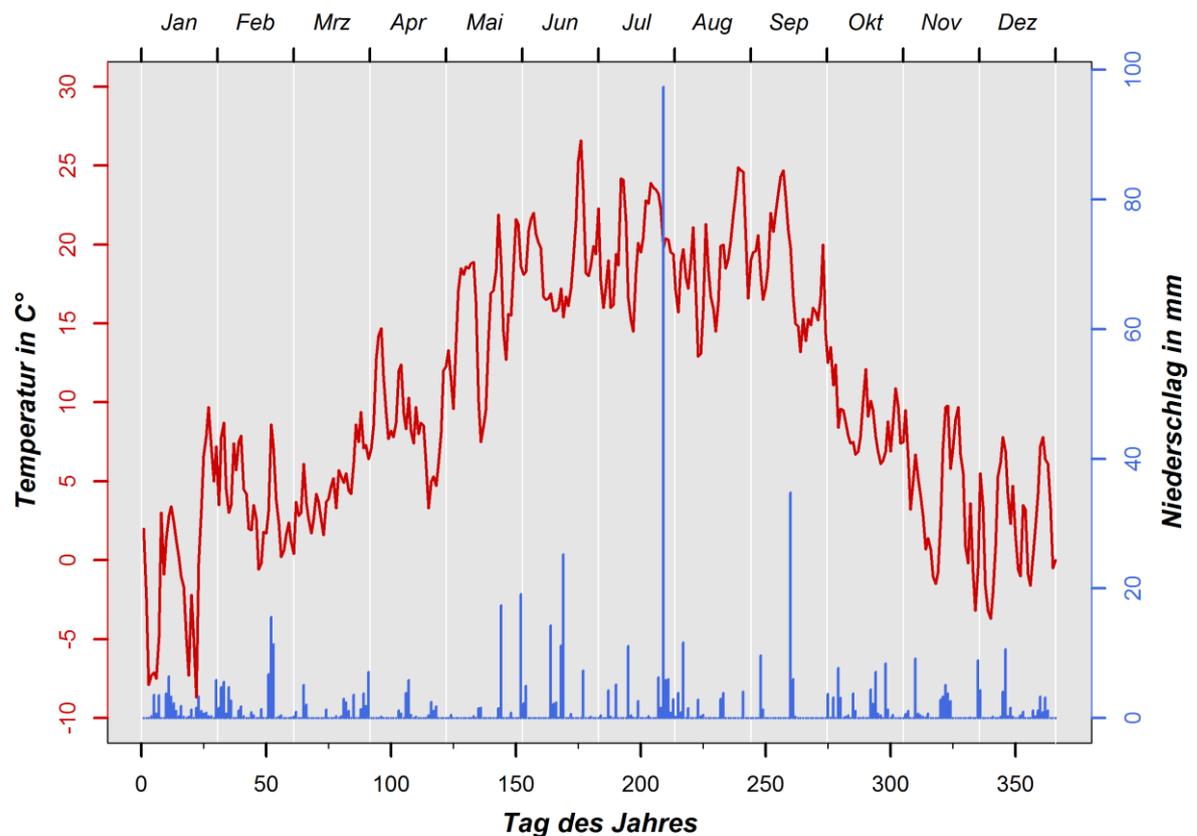


Abbildung 4-5: Tägliche Temperatur- und Niederschlagswerte nahe der Untersuchungsflächen für die Untersuchungsjahre 2015 (oben) und 2016 (unten)
(Datengrundlage: DWD 2017b, DWD 2017d)

2016 im Januar am kältesten. Verglichen mit 2015 war das Frühjahr 2016 durch einen deutlich kälteren April geprägt. Weiterhin waren innerhalb des ersten Untersuchungszeitraumes die Temperaturen Anfang Juli mit vereinzelt Mittelwerten von über 30°C höher. Auffällig ist, dass im Sommer 2015 der August wärmer und niederschlagsreicher war, während eine unverkennbare Niederschlagsspitze im Juli des Folgejahres erreicht wurde. Das zweite Untersuchungsjahr zeichnete sich zudem durch höhere Temperaturen gegen Ende August und im September aus. Der Verlauf der monatlichen Mittel der Temperatur und des Niederschlages bestätigen dies. Die entsprechenden Abbildungen können im Anhang der Arbeit eingesehen werden (vgl. Abbildung A4-6 und A4-7).

In Bezug auf die hydrologischen Gegebenheiten der Elbeflächen schreiben BÖHNKE & GEYER (2009), dass sich „[d]er Wasserhaushalt der Flussauen [...] zwischen Überflutung durch Hochwasser und extremer Austrocknung in Niedrigwasserzeiten“ bewegt (BÖHNKE & GEYER 2009:104). Konkret ist „[d]as Abflussregime der Elbe [...] durch einen hohen Abfluss im hydrologischen Winterhalbjahr (November-April) und durch einen geringeren Abfluss im hydrologischen Sommerhalbjahr (Mai-Oktober) gekennzeichnet“ (SCHOLZ et al. 2009:76, nach IKSE 1994 & IKSE 1995). Folglich tritt die Mehrzahl der Hochwasser des „pluvionalen“ Abflussregimes im Frühjahr als Resultat von Schneeschmelz- und Regenereignissen auf (SCHOLZ et al. 2009:76). Im Einzugsgebiet der Elbe sind in der jüngeren Vergangenheit insbesondere die Hochwasser aus den Jahren 2013, 2011, 2010, 2006 und 2002 hervorzuheben (vgl. IKSE 2016:1 Tabelle 1). Weiterhin weisen die Auenflächen durch den Wechsel, von in den ufernahen Bereichen der Elbe stattfindenden, „infiltrierenden und exfiltrierenden Verhältnissen, [...] die stärksten Grundwasserstandsschwankungen [auf]“ (BÖHNKE & GEYER 2009:104). Letztlich stellt „[d]er Flusswasserstand [...] ein[en] zentrale[n] abiotische[n] Standardfaktor“ dar, welcher „direkt auf die Flora und Fauna“ der Untersuchungsgebiete einwirkt (BÖHNKE & GEYER 2009:105).

Unter Bezugnahme der Abflussdaten des Pegels Wittenberg wurde für den Zeitraum von 1950 bis 2015 ein durchschnittlicher Abflusswert von 356 m³/s für diesen Elbabschnitt ermittelt. Hervorzuheben ist, dass zwischen Juli und August im Jahr 2015 eine extreme Niedrigwassersituation vorherrschte, bei welcher ein Tagesmittel von 90.4 m³/s für den Durchfluss erfasst wurde. Im Vergleich dazu wurden während der Sommerhochwasser 2002 und 2013 Tageswerte von über 3900 m³/s gemessen (BfG 2016) (vgl. Abbildung A4-8). Durch den geringen Durchfluss und aufgrund niedriger Wasserstände während der Sommermonate innerhalb des Untersuchungszeitraumes kann zu diesen Zeitpunkten von einer Austrocknung der Auenflächen ausgegangen werden.

Entsprechend werden auch die Auenböden von den regelmäßigen Überflutungen geprägt. In diesem Kontext schildern SCHOLZ et al. (2009), dass „[d]er Einfluss von Überschwemmungen [...] für die hierdurch ausgelösten Prozesse der Erosion und Sedimentation sowie für die Stoffakkumulation und -dynamik [...] bestimmend [ist]“ (SCHOLZ et al. 2009:79). Weiterhin „[führen] [d]ie variierenden Wasserstände [...] zu wechselnden anaeroben/ aeroben Bedingungen und zu einer Veränderung von physikalisch-chemischen Steuergrößen wie dem pH-Wert und dem Redoxpotential“ (SCHOLZ et al. 2009:79). Wie in Kapitel 2 beschrieben, bedingen diese und weitere Parameter, wie die organische Substanz oder der Tongehalt, maßgeblich die Bindung und Mobilität der Metalle im Boden (vgl. Kapitel 2.2, SCHULZ-ZUNKEL &

KRÜGER 2009:1352ff.). Die vorliegenden bodenkundlichen Flächeninformationen der VBK wurden durch mittel- und großmaßstäbige Projekt- und Standortkartierungen erhoben und zuletzt 2009 aktualisiert (LAGB 2011). Weitere Grundlagen und Methoden dazu sind in dem Bodenbericht von Sachsen-Anhalt aus dem Jahr 2014 enthalten (LAGB 2014). Die VBK weist für beide Testgebiete weiträumige Bodengesellschaften in Form von Gley-Vegen aus. Einzelne Bereiche des U2 werden von Vegen dominiert. Im Rahmen des ehemaligen RIVA-Modellprojektes (vgl. SCHOLZ et al. 2009:61) wurde eine Übersichtskarte mit den Bodenformen des U1 erstellt (vgl. Abbildung A4-1). Mit einem Anteil von über 75 % sind Vegen die bestimmende Bodenform auf der ersten Testfläche (vgl. SCHOLZ et al. 2009:79 Abbildung 4.2-7). Diese Böden sind sehr gut mit Nährstoffen versorgt und durch die enorme Pufferfähigkeit der „bindigen Substrate“ wird partiell dem Eintrag von Kontaminanten in tiefere Grundwasserschichten entgegengewirkt (SCHOLZ et al. 2009:80). Weiterhin existieren Tschernitzen und Gleye auf der Fläche, wobei letztere vor allem in tiefer gelegenen Rinnen- und Senkenbereichen vorzufinden sind, in denen generell mit einer erhöhten Schwermetallkonzentration gerechnet werden kann (SCHOLZ et al. 2009:80). Die dargestellte Verteilung der Böden konnte auf beiden Untersuchungsflächen durch Bodenansprachen, in Kooperation mit einem Mitarbeiter des Landesamtes für Geologie und Bergwesen Sachsen-Anhalt, im November 2015 bestätigt werden. Innerhalb der Bodentypen konnten weitere Unterschiede festgestellt werden. Während die Struktur der auf den Terrassen und Plateaus kartierten Vegen in Abhängigkeit von der Uferentfernung variiert, wurden Abweichungen bei den Gleyen in Verbindung mit der Rinnenstruktur sichtbar. Letztlich beeinflusst die Feinmorphologie auch das Erscheinungsbild der Vegetation.

Allgemein kann die Auenvegetation „im europäischen Maßstab als azonal und gering differenziert angesehen“ werden, die „strukturell und pflanzensoziologisch“ hinreichend erforscht ist (AMARELL & KLOTZ 2009:171). In diesem Kontext liefern die Kartierungen der BTNT zusätzliche und teils detaillierte Informationen über die Vegetation und Nutzung der Untersuchungsgebiete. Die Erstaufnahme des BTNT-Kataloges für Sachsen-Anhalt erfolgte zwischen 1992 und 1994 auf Grundlage von Luftbildern. Für weitere Informationen bezüglich der methodischen Vorgehensweise sei auf GÜNTHER et al. (1994) verwiesen. Die Daten wurden anhand weiterer Befliegungen 2005 und 2009 aktualisiert (ST-BIS 2015:1). Das U1 wird von krautiger Vegetation und Grünland als Struktureinheit dominiert. Nahezu die Hälfte der in Abbildung 4-3 dargestellten Fläche wird als artenarmes Intensivgrünland charakterisiert. Die zentral gelegenen Senkenbereiche werden als Flutrasen mit Hochstauden eingeordnet. Nach Osten hin grenzen Auwälder an. Knapp 85 % der Fläche des U2, wie sie von dem DGM in Abbildung 4-4 eingegrenzt ist, wird laut BTNT von Grünlandflächen eingenommen. Konkret handelt es sich dabei um mesophiles- sowie Feucht- und Nassgrünland in Kombination mit vereinzelt Bäumen und Büschen (vgl. LAU 1994:23ff.). Im ATKIS-Objektartenkatalog sind die Auenflächen ebenfalls als weiträumige Grünlandflächen kategorisiert (ADV 2008:133). Durch die zeitliche Diskrepanz zu dem in dieser Arbeit vorliegenden Untersuchungszeitraum sollten die BTNT- und ATKIS-Daten jedoch nicht als eigenständige Referenz betrachtet werden. Sie erlauben vielmehr eine allgemeine Vegetationsbeschreibung der Testgebiete. Ähnlich wie bei den Böden zuvor konnte für das U1 auf eine, innerhalb des RIVA-Projektes entstandene, umfassende Biotoptypen- und Vegetationskartierung zurückgegriffen

werden. Die dazugehörigen Karten können im Anhang der Arbeit eingesehen werden (vgl. Abbildung A4-2 und A4-3). Die ausgewiesenen Biotoptypen sind vergleichbar mit den Aufnahmen der BTNT. Es überwiegen artenarme Intensivgrünlandflächen. Größere Areale werden von Rohrglanzgrasröhrichten und Rasenschmielen bedeckt (vgl. Abbildung A4-2). Prägend für die Vegetation der Flussauen sind die Labkraut-Fuchsschwanz-Wiesen (*Galio molluginis-Alopecuretum pratensis*) (vgl. Abbildung A4-3). Diese Pflanzengesellschaft kennzeichnet „wechselfrische, nährstoffreiche, lehmige bis tonige Böden“ (SCHOLZ et al. 2009:84). Vor allem im nördlichen Teil des Untersuchungsgebietes wurden Silgen-Rasenschmielen-Wiesen (*Sanguisorbo officinalis-Silaetum silai*) kartiert. Rohrglanzgras-Röhrichte (*Phalaridetum arundinaceae*) treten in flacheren Senken- und Rinnenbereichen auf (vgl. Abbildung A4-3, SCHOLZ et al. 2009:84). „In den Flutrinnen selbst kommt ein kleinräumiges Mosaik verschiedener Pflanzengesellschaften vor“ (SCHOLZ et al. 2009:84). Vergleichbare Vegetationsmuster konnten während der Geländekampagnen auch im U2 festgestellt werden.

4.2 Datengrundlage

In den folgenden Unterkapiteln werden die Raster- und Vektordaten dargestellt, die bei einzelnen Vorverarbeitungs-, Prozessierungs- oder Auswerteschritten genutzt wurden. Ebenso wird das Probenahmekonzept erläutert und es wird eine Übersicht zu den Parametern gegeben, die in den beiden Untersuchungsgebieten aufgenommenen wurden. Diese beinhalten neben den Pflanzen- und Bodenproben weitere vegetative Kenngrößen und die Pflanzenspektren. Zuletzt werden die chemischen Analysen der Pflanzen- und Bodenproben zur Bestimmung der Metallgehalte und die Aufnahme der Bodenspektren betrachtet.

4.2.1 Raster- und Vektordaten

Die Tabelle 4-1 enthält die wichtigsten multi- und hyperspektralen Daten sowie deren Bezugsquelle und deren räumliche und spektrale Auflösung. Wie in Kapitel 4.1 beschrieben, wurde ein RapidEye-Mosaik zur Abschätzung der Hochwassersituation im Juni 2013 genutzt. Die Satellitendaten lagen als Level 3A Produkt vor. Dieses RapidEye Prozessierungslevel beinhaltet eine radiometrische, sensorspezifische und geometrische Korrektur der Daten (vgl. BLACKBRIDGE 2015:9).

Einen Schwerpunkt in dieser Arbeit bilden die flugzeuggestützten HySpex-Aufnahmen. 2015 wurden die Befliegungen vom Institut für Weltraumwissenschaften der FU-Berlin und die anschließende Vorprozessierung der Aufnahmen vom GFZ-Potsdam durchgeführt. Im darauffolgenden Jahr übernahm die Firma DIMAP-Spectral die Akquise und Prozessierung der HySpex-Szenen. In beiden Jahren wurden die HySpex-Module VNIR-1600 und SWIR-320m-e der Firma *Norsk Elektro Optikk AS* zur Aufzeichnung der jeweiligen Wellenlängenbereiche eingesetzt. Dabei nimmt die VNIR-1600 Kamera einen Spektralbereich von 0.4 - 1.0 μm mit 160 Bändern und einer spektralen Bandbreite von 3.7 nm auf (NEO 2016a). Das SWIR-320m-e Modell erfasst mit 256 Kanälen und einer spektralen Bandbreite von 6 nm den Wellenlängenbereich von 1.0 - 2.5 μm (NEO 2016b). Im Wesentlichen beinhaltet die externe Vorverarbeitung die radiometrische Korrektur und die Orthorektifizierung der Befliegungs-

4 Untersuchungsgebiete und verwendete Datensätze

Tabelle 4-1: Im Rahmen der Arbeit verwendete Rasterdaten sowie deren räumliche und spektrale Auflösung

Daten (Raster)	Aufnahmetag / Quelle	räumliche Auflösung	spektrale Auflösung (Wvl, Bandbreite)
RapidEye	05.06.2013 / Blackbridge AG, Germany	5 x 5 m (orthorektif.)	8 Bänder (Blue, 440 - 510 nm) (Green, 520 - 590 nm) (Red, 630 - 685 nm) (Red Edge, 690 - 730 nm) (Near IR, 760 - 850 nm)
HySpex	04.08.2015 (U1) / Deutsches GeoForschungs- Zentrum- (GFZ) Potsdam, Freie Universität (FU) Berlin ----- 25.08.2016 (U1/U2) / DIMAP-Spectral GmbH	1 x 1 m (VIS, NIR) 1 x 1 m bis 2 x 2 m (SWIR) 1 x 1 m bis 2 x 2 m (Layerstack)	160 Bänder (VNIR) (0.4 - 1.0 µm, 3.7 nm) 256 Bänder (SWIR) (1.0 - 2.5 µm, 6 nm)
Digitales Laserscanner Geländemodell (DGM)	2011 / Landesamt für Vermessung und Geoinformation (LVerGeo) Sachsen-Anhalt	1 x 1 m	1 Band Graustufenbild

daten. Die atmosphärisch korrigierten Aufnahmen wurden als *surface reflectance data* im ENVI-Format bereitgestellt. Neben einzelnen VIS/NIR- und SWIR-Szenen wurden Layerstacks, in welchen die Aufnahmen beider Kamerasysteme zusammengefügt wurden, vom GFZ-Potsdam und von DIMAP-Spectral angefertigt. Wie in Tabelle 4-1 erkennbar, ist für das Jahr 2015 und 2016 jeweils ein Datensatz berücksichtigt worden. Während im ersten Befliegungsjahr das U1 im Mittelpunkt der Betrachtung stand, wurde im zweiten Jahr der Fokus auf beide Untersuchungsgebiete gelegt. Durch unterschiedliche Befliegungshöhen variiert die räumliche Auflösung der Layerstacks zwischen 1 x 1 m und 2 x 2 m (vgl. Tabelle 4-1). Daneben beeinflussten wechselhafte Wetterverhältnisse die Qualität der hyperspektralen Daten entscheidend. Anhand von Abbildung A4-5 kann die Ausdehnung der beflogenen Gebiete nachvollzogen werden. 2015 wurde bei den Befliegungen neben den Elbstandorten zwischen Dessau-Roßlau und Wörlitz auch ein Gebiet an der Mulde zwischen Jeßnitz und Sollnitz eingebunden, um bei Bedarf auch andere Auenflächen bei der Entwicklung und Übertragung der Methoden mit einbeziehen zu können. Insgesamt wurden zu jedem Zeitpunkt zwischen 12 und 14 HySpex-Streifen aufgenommen, wobei das Muldegebiet durch zwei bis vier Streifen

abgedeckt war. Im darauffolgenden Jahr wurden die Flugstreifen an der Mittleren Elbe erweitert (vgl. Abbildung A4-5), um weitere Auenflächen südwestlich von Lutherstadt Wittenberg einbeziehen zu können, da sie vergleichbare Eigenschaften wie die beiden Untersuchungsgebiete aufweisen. Das gesamte Areal umfasst etwa 159 km² und wurde von DIMAP-Spectral in 13 bis 16 HySpex-Streifen erfasst.

Wichtige Kenntnisse über die Feinmorphologie der Auenflächen an der Mittleren Elbe liefern die Höheninformationen des vom Landesamt für Vermessung und Geoinformation in Sachsen-Anhalt bereitgestellten DGMs. Das Geländemodell wurde bei der Auswahl der Testflächen, der Bildung der Bezugseinheiten, der Selektion der Probenahmepunkte, der späteren Ableitung der Belastungskarten sowie bei der räumlichen Analyse der Befliegungsdaten berücksichtigt. Weitere Reliefparameter, wie die Hangneigung oder Konturlinien, wurden ebenfalls aus dem DGM generiert. Die Geländedaten wurden als XYZ-Files geliefert und zunächst in ENVI (v. 5.3) vorprozessiert.

Wie in Kapitel 4.1 aufgezeigt, wurden die in Tabelle 4-2 aufgeführten Vektordaten im Wesentlichen zur Ableitung und Charakterisierung der Testgebiete eingesetzt. Während die BTNT beispielsweise kleinräumige Informationen beinhaltet, liefern andere Daten wie die VBK, verglichen mit den übrigen Shapefiles, großmaßstäbige Infos. Durch das Zusammenführen ausgewählter Attribute der Layer in Verbindung mit der RapidEye-Hochwassermaske konnte eine Vorauswahl an möglichen Testflächen an der Mittleren Elbe getroffen werden (vgl. Abbildung 4-2). Da sich die Vektordaten in ihrem Maßstab und in ihrer Aktualität unterscheiden, mussten die Informationen mit Geländebegehungen abgeglichen werden. Dennoch erleichterten die Verschneidung der Datensätze und der daraus erzielte Mehrwert an Flächeninformationen die Festlegung der Untersuchungsgebiete enorm.

4.2.2 Geländemessungen und Laboranalysen

In den nachfolgenden Abschnitten wird einleitend die Auswahl der Probenahmepunkte beschrieben. Die Punkte repräsentieren die Basis für alle weiteren Feld- und Labormessungen, welche sich auf die Geländebegehungen stützen. Dabei werden zunächst die in den Auen erhobenen Parameter aufgelistet, ehe auf die Laboranalysen Bezug genommen wird.

4.2.2.1 Definition der Probenahmepunkte in den Auen

Innerhalb des normalisierten DGMs wurden für beide Untersuchungsgebiete die Minima-Werte der Senken bestimmt, welche die tiefsten Auenbereiche kennzeichnen. Von diesen Standorten wird angenommen, dass sie am stärksten mit Metallen belastet sind, da hier beispielsweise die im Wasser mitgeführten Schadstoffe länger akkumulieren können als auf den umliegenden Hochflächen. Die Extrema bilden zugleich die Grundlage für die später festgelegten Probe- und Messpunkte. Anhand von Geländebegehungen wurde die Position der detektierten Minima abgeglichen und unbrauchbare Punkte wurden entfernt. So blieben Extrema, welche zu nah an umliegenden Waldflächen angrenzten ebenso unberücksichtigt, wie Flächen, die ganzjährig unter Wasser standen. In jedem Untersuchungsgebiet wurden 2015 jeweils sechs Senken respektive Minima als potentielle Probenahmepunkte ausgewählt. Aus-

Tabelle 4-2: Im Rahmen der Arbeit verwendete Vektordaten

Daten (Vektor)	Erstellungsjahr / Quelle	Maßstab
Vorläufige Bodenkarte (VBK)	2009 / Landesamt für Geologie und Bergwesen (LAGB) Sachsen-Anhalt	1:50000
Biotoptypen- und Nutzungstypenkartierung (BTNT)	1992-1994 / Landesamt für Umweltschutz (LAU) Sachsen-Anhalt	1:1000
Amtlich Topographisch-Kartografisches Informationssystem (ATKIS)	2007 (Grundaktualität) 2010 (Spitzenaktualität) / Landesamt für Vermessung und Geoinformation (LVerGeo) Sachsen-Anhalt	maßstabsfrei
Geologische Übersichtskarte (GÜK)	2000 / Landesamt für Geologie und Bergwesen (LAGB) Sachsen-Anhalt	1: 20000
Kartierungen im Rahmen des RIVA-Projektes (Bodenformen, Vegetation, Biotoptypen)	1999 / Helmholtz-Zentrum für Umweltforschung (UFZ) Leipzig	maßstabsfrei

gehend von den Senken sind sechs Transekte gebildet und die Punkte um Terrassen- und Hochflächen erweitert worden. Jede Transekte enthielt somit drei bis vier Punkte, die sich auf unterschiedliche Höhenstufen verteilen, sodass insgesamt 21 Probenahmepunkte auf jeder Fläche festgelegt wurden. Das angewandte Konzept erlaubt konkrete Aussagen über die Belastungssituation der Auenstandorte unter Berücksichtigung der Feinmorphologie und in Abhängigkeit von der Entfernung zur Elbe. Konkret beinhaltet das U1 im Jahr 2015 sechs Senken, fünf Terrassen und zehn Plateaus. Für das U2 wurden jeweils sieben Standorte auf jeder morphologischen Einheit definiert. Um sicherzustellen, dass bei jeder Geländekampagne die gleichen Stellen beprobt wurden, sind die Positionen der Punkte zentimetergenau mit einem Trimble R9s GNSS-GPS-Gerät eingemessen und mit Stäben markiert worden. Dies gestattet im späteren Verlauf der Arbeit zudem eine exakte Übertragung der punktuellen Informationen auf die abbildenden HySpex-Befliegungsdaten. Im Jahr 2016 erfolgte eine adäquate Herangehensweise, wobei versucht wurde, Lücken zwischen den Transekten aus dem Vorjahr zu

schließen beziehungsweise diese sinnvoll zu erweitern. So wurden für das U1 21 neue Messpunkte hinzugefügt, welche sich gleichmäßig auf die definierten Höhenklassen verteilen. Im U2 sind hingegen sieben Senken, acht Terrassen und sechs Plateaus ergänzt worden. Insgesamt wurden für beide Untersuchungsjahre 84 Beprobungspunkte in den Gebieten festgelegt und die Messungen auf 42 Stellen pro Jahr aufgeteilt. In Abbildung 4-6 sind alle Punkte sowie deren Messjahr und Klasseneinteilung veranschaulicht. Ergänzend dazu sind im Anhang der Arbeit die genauen Koordinaten, Höhenwerte und Standortbezeichnungen zu allen Stellen enthalten (vgl. Tabelle A4-1). Unter Bezugnahme der Punkte wurden auf beiden Testgebieten am 28.05.2015 und 19.05.2016 jeweils 42 Proben aus den obersten 20 cm der Auenböden entnommen und später aufbereitet. Zusätzlich wurden innerhalb der beiden Untersuchungsjahre insgesamt 182 Mischproben von den Blättern der an den Probenahmepunkten dominierenden Vegetation erhoben. Die genauen Zeitpunkte der Probenahme sind in Tabelle 4-3 aufgeführt. Dabei wurde versucht, die Pflanzenproben simultan oder zeitnah zu den HySpex-Befliegungen oder den übrigen Geländemessungen aufzunehmen. Insbesondere die mehrmalige Mahd der Auenflächen innerhalb eines Jahres erschwerte jedoch eine kontinuierliche Probenahme, woraus letztlich eine variierende Probenanzahl für beide Testgebiete resultierte (vgl. Tabelle 4-3).

Verteilung der Probenahme- und Messpunkte in den Untersuchungsgebieten 2015 und 2016

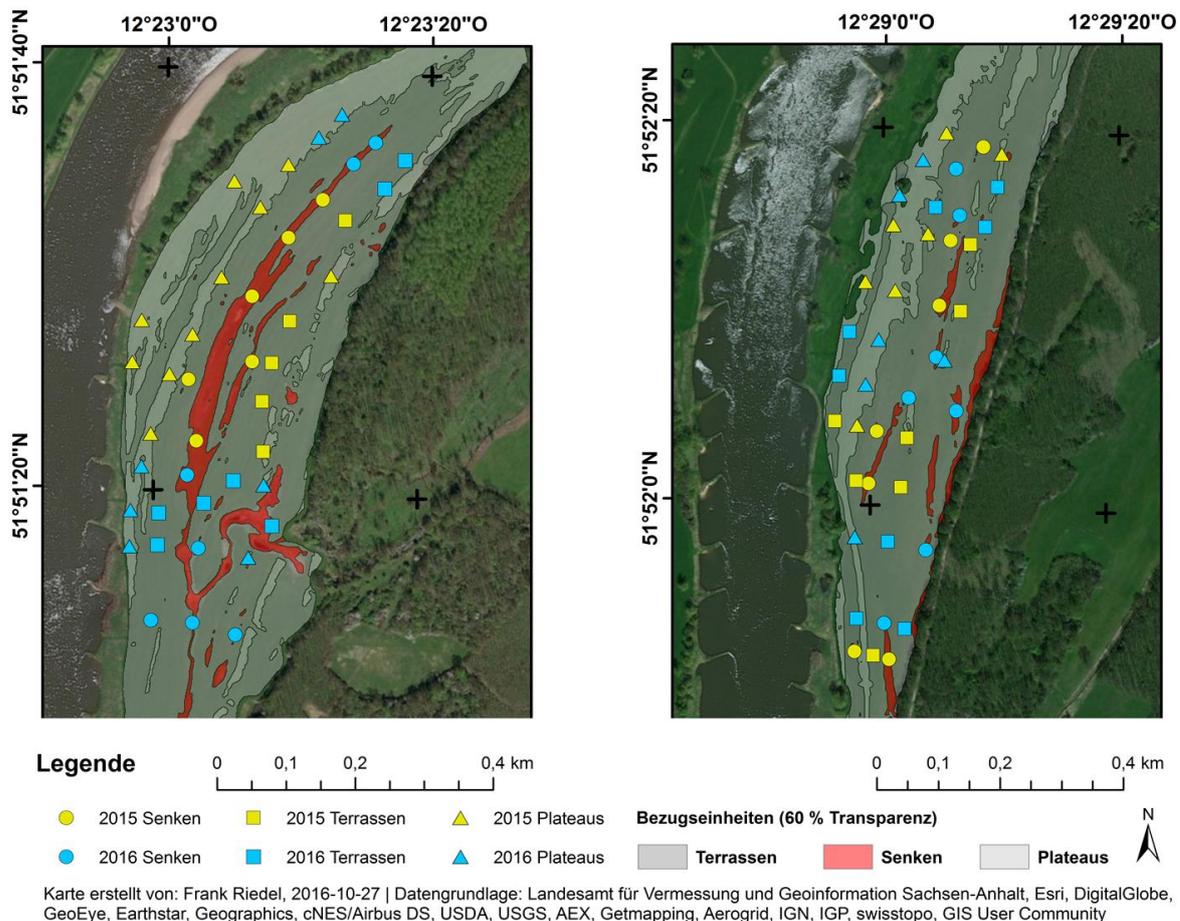


Abbildung 4-6: Darstellung der 84 Probenahme- und Messpunkte innerhalb der Auenstandorte

4 Untersuchungsgebiete und verwendete Datensätze

Tabelle 4-3: Übersicht zu den auf den Auenstandorten erhobenen Geländeparametern innerhalb der Untersuchungsjahre 2015 und 2016

<i>Geländeparameter</i>	<i>Anzahl (n)</i>	<i>Gebiet</i>	<i>Datum</i>
<i>Bodenproben</i>	42	U1 + U2	2015-05-28
($\sum n = 84$)	42	U1 + U2	2016-05-19
	21	U2	2015-05-15
	21	U2	2015-07-03
	21	U2	2015-08-04
<i>Pflanzenproben</i>	21	U1	2015-08-07
($\sum n = 182$)	14	U1	2015-08-12
	21	U2	2016-06-08
	21	U2	2016-07-03
	21	U2	2016-08-17
	21	U1	2016-08-25
	21	U2	2015-07-03
	21	U2	2015-08-04
<i>Spektrometer-</i> <i>messungen</i>	16	U1	2015-08-07
(<i>Vegetation,</i> $\sum n = 184$)	21	U2	2016-06-07
	21	U2	2016-07-16
	21	U1	2016-07-20
	21	U2	2016-08-17
	42	U1 + U2	2016-08-25
<i>Chlorophyllgehalt +</i> <i>Pflanzenhöhe</i>	21	U2	2015-05-15
($\sum n = 105$)	21	U2	2015-07-03
	21	U2	2016-06-08
	42	U1 + U2	2016-08-04

4.2.2.2 Geländeparameter und Vegetationsspektren

An jedem der 84 Probenahmepunkte wurden weitere Messpunkte entlang eines Transektes bestimmt, an welchen mehrmals im Jahr verschiedene Pflanzenparameter aufgenommen wurden. Insgesamt wurden entlang einer Transekte sechs Messpunkte in einem gleichmäßigen Abstand von 6 m definiert. Die zusätzlichen Transekte orientierten sich in ihrer Ausdehnung an die Struktur der morphologischen Einheiten und waren entsprechend überwiegend von Norden nach Süden hin ausgerichtet, wobei der erste Messpunkt bei 0 m immer am nördlichsten gelegen war. Durch die zusätzlichen Messpunkte sollte die Homogenität der Bezugseinheiten in Relation zu den Geländeparametern und in Zusammenhang mit der räumlichen Auflösung der abbildenden Fernerkundungsdaten geprüft werden. An jedem Punkt wurde jeweils fünfmal der Chlorophyllgehalt der Blätter verschiedener Pflanzen mit einem SPAD-502 Gerät der Firma *Konica Minolta* ermittelt. Genauso häufig wurde mit einem Metermaß die vegetative Höhe der Pflanzen abgeleitet. Je nachdem wie wechselhaft die Wetterbedingungen zum Zeitpunkt der Spektrometermessungen waren, wurden fünf bis zehn Pflanzenspektren pro Messpunkt aufgezeichnet. Die Reflexionsmessungen wurden in einem Abstand von einem Meter zur Vegetation mit einem *ASD FieldSpec Pro FR* durchgeführt. Das Gerät misst in dem Spektralbereich von 0.35 - 2.5 μm mit insgesamt drei Detektoren, die auf die VIS/NIR- und SWIR-Region verteilt sind. Die Übergänge zwischen den Detektoren sind nahe 0.7, 1.5 und 2.1 μm positioniert. Die spektrale Bandbreite des Gerätes beträgt im VIS/NIR 3 nm und im

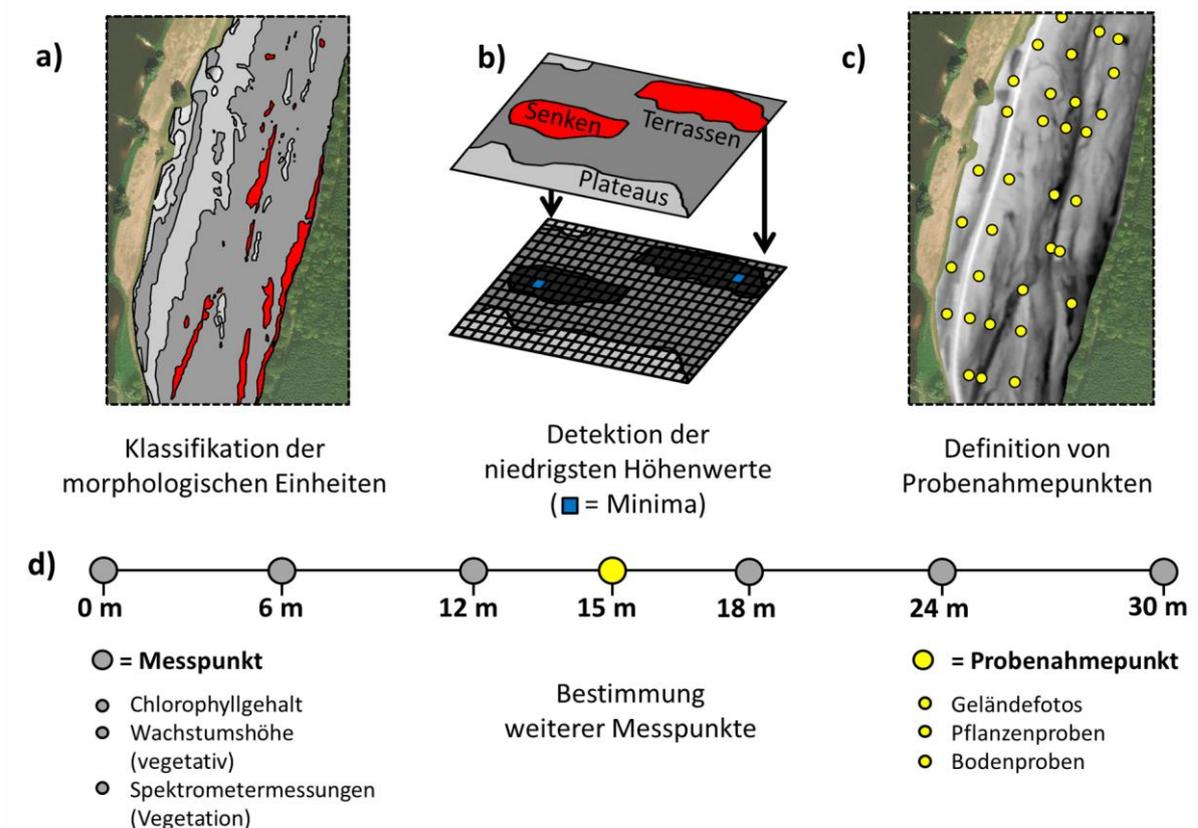


Abbildung 4-7: Visualisierung der Schritte zur Definition der Probenahme- und Messpunkte auf den Untersuchungsflächen

SWIR 10 nm. Vor jeder Messung wurde eine Spectralonplatte als Referenzmaterial zur Kalibrierung des Gerätes verwendet. Folglich wurden im Idealfall für jede Bezugseinheit 30 Chlorophyll- und Pflanzenhöhenwerte sowie 30 bis 60 Vegetationsspektren erhoben. Das exakte Datum der Messungen ist ebenfalls in Tabelle 4-3 aufgeführt. Wenn möglich, wurden die Geländeparameter simultan oder zeitnah vor oder nach einer Befliegung der Testgebiete erfasst. Die in Tabelle 4-3 dargestellte Häufigkeit der Messungen bezieht sich nicht auf die genannten Einzelmessungen, sondern viel mehr auf die Anzahl an Bezugseinheiten, welche zum jeweiligen Messdatum erfasst werden konnte. Die Messungen wurden durch Geländefotos ergänzt, die zu allen Zeitpunkten aufgenommen wurden. Der Schwerpunkt der Datenerhebung lag auf den Spektrometernmessungen, da aus diesen später die Pflanzenvitalität und Relationen zu den Metallgehalten im Boden und in der Vegetation abgeschätzt werden sollten. Die übrigen Parameter dienten als zusätzliche Informationen, die bei der Auswertung der Ergebnisse berücksichtigt wurden.

Alle in den letzten beiden Kapiteln beschriebenen Schritte zur Definition der Probenahme- und Messpunkte sind in Abbildung 4-7 für einen kleinen Ausschnitt des U2 nochmals visualisiert und zusammengefasst. Der Klassifikation der morphologischen Einheiten (4-7 a) folgte die Detektion der kleinsten Höhenwerte innerhalb der Senken (4-7 b). Darauf aufbauend wurden Transekte gebildet und weitere Probenahmepunkte definiert (4-7 c), an welchen mehrere Messpunkte aufgespannt wurden (4-7 d).

4.2.2.3 Laboranalysen und Bodenspektren

Der Fokus der Laboranalysen lag auf der Extraktion der in den Boden- und Pflanzenproben enthaltenen Gesamtgehalte (vgl. Tabelle 4-3). Tabelle 4-5 beinhaltet die hierfür angewendeten chemischen Analyseverfahren, welche jeweils in Kooperation mit den Laboreinrichtungen der MLU Halle-Wittenberg und der AMU Posen durchgeführt wurden. Dadurch konnte in kurzer Zeit eine Vielzahl an Metallgehalten extrahiert und gegenübergestellt werden. Ehe die einzelnen Verfahren durchgeführt werden konnten, musste das Probenmaterial entsprechend aufbereitet werden.

Konkret wurden die Bodenproben zunächst bei 105°C getrocknet und anschließend auf < 2 mm gemahlen. Im Verlauf der Trocknung wurde der Wassergehalt durch den Abgleich der Feucht- und Trockengewichte abgeschätzt. Daneben wurden der aktuelle pH-Wert (in Anlehnung an DIN 19 684, mittels Inolab Level 1 Multiparameter Meter, *Cole-Parmer*), die elektrische Leitfähigkeit (mittels Inolab Level 1 Multiparameter Meter, *Cole-Parmer*) und der Anteil an organischer Substanz, basierend auf dem Glührückstand (nach DIN 38 414), bestimmt. Informationen über die Korngrößenverteilung wurden mit einem Laserbeugungssensor (mittels HELOS und QUIXEL/L, *Sympatec GmbH*) akquiriert. Die getrockneten und gemahlten Bodenproben wurden anschließend unter standardisierten Rahmenbedingungen in einem abgedunkelten Raum spektrometriert. Hierfür wurden etwa 25 g jeder Probe in eine Petrischale gefüllt und mit einem *ASD Fieldspec pro FR* (vgl. Kapitel 4.2.2.2) in einem Abstand von 15 cm bemessen, was einem Messbereich von ca. 7 cm entspricht. Als externe Lichtquelle diente eine *ASD Pro lamp* mit 50 W, welche in einem 45° Winkel zu den Proben ausgerichtet war. Zur Minimierung etwaiger Ungenauigkeiten oder oberflächenbedingter Streueffekte wurde

Tabelle 4-4: Übersicht zu den durchgeführten Laboranalysen zur Erhebung verschiedener Boden- und Pflanzenparameter

Zielgröße	Verfahren/ Methode	abgeleitete Parameter	Proben- anzahl (n)
Wassergehalt (Boden, Pflanze)	Probentrocknung bei 105°C	Wassergehalt in %	266
aktueller pH-Wert, elektrische Leitfähigkeit (Boden)	Messung in H ₂ O-Lösung (in Anlehnung an DIN 19 684)	aktueller pH-Wert, elektr. Leitfähigkeit in µS/cm	84
Korngrößenverteilung (Boden)	Laserbeugung	Korngrößen (Schluff, Ton, Sand)	84
Gehalt an organischer Substanz (Boden)	Glühverlust (nach DIN 38 414)	organischer Anteil in %	84
Spektrometermessungen (Boden)	3 Messungen aus 4 Richtungen je Probe (= 12) (getrocknet, gemahlen)	Bodenreflexion	84

jede Probe aus vier verschiedenen Richtungen jeweils dreimal spektrometriert, sodass für jede Probe insgesamt 12 Einzelspektren aufgezeichnet wurden. Adäquat dazu erfolgte die Aufbereitung der Pflanzenproben. Die Wassergehalte der Blätter wurden ebenfalls nach deren Trocknung bei 105°C abgeleitet, ehe die Proben mit einer Mörsermühle zerkleinert wurden (mittels RM 200, *Retsch*). Eine Übersicht zu allen im Labor erhobenen Boden- und Pflanzenparametern sowie zu den Bodenspektren bietet Tabelle 4-4.

Die Analyse der im Boden vorhandenen Gesamtgehalte an Cd, Cr, Cu, Fe, K, Ni, Pb und Zn erfolgte im Physisch-Geographischen/Geoökologischen Labor der MLU Halle-Wittenberg unter Verwendung des Königswasseraufschlusses, einem Gemisch aus konzentrierter Salzsäure (HCl) und Salpetersäure (HNO₃) (nach DIN ISO 11466). Anschließend wurden die in dem Königswasser-Extrakt enthaltenen Elementkonzentrationen mit Hilfe eines Atomabsorptionsspektrometers (AAS) bestimmt (mittels AAS Nova, *Analytik Jena AG*). Durch die simultane Probenauswertung in den Laboreinrichtungen des geologischen Institutes der AMU Posen konnten die Gesamtgehalte der Auenböden um die Elemente As und Hg erweitert werden. Im Vergleich zu den vorhergehenden Analysemethoden wurden die Gehalte unter Einsatz von Perchlorsäure (HClO₄) und massenspektrometrisch mit induktiv gekoppeltem Plasma (ICP-MS) abgeleitet (mittels ICP-MS 8800 QQQ, *Agilent*). Mehlich 3 wurde zur Extraktion der Gesamtgehalte an Ca, Cd, Cu, Fe, K, Ni, Mn, Pb und Zn in den Pflanzenproben genutzt (mittels AAS SpectrAA 250 Plus, *Varian*). Für eine ausführliche Beschreibung des Verfahrens sei

4 Untersuchungsgebiete und verwendete Datensätze

Tabelle 4-5: Übersicht zu den durchgeführten Laboranalysen zur Extraktion der Elementkonzentrationen in den Boden- und Pflanzenproben

Parameter	chemische Lösung, Analysemethode	analysierte Elemente	Proben- anzahl (n)
Gesamtgehalt Elementkonzentrationen (Boden)	Königswasser, AAS ¹ Nova, Analytik Jena AG (Labor MLU-Halle-Wittenberg)	Cd, Cr, Cu, Fe, K, Ni, Pb, Zn	84
Gesamtgehalt Elementkonzentrationen (Boden)	Perchlorsäure, ICP-MS ² 8800 QQQ, Agilent Technologies (Labor AM Universität Posen)	As, Hg	84
Gesamtgehalt Elementkonzentrationen (Pflanze)	Mehlich 3, AAS SpectrAA 250 Plus, Varian (Labor AM Universität Posen)	Ca, Cd, Cu, Fe, K, Ni, Mn, Pb, Zn	182
Gesamtgehalt Elementkonzentrationen (Pflanze)	Perchlorsäure, ICP-MS 8800 QQQ, Agilent Technologies (Labor AM Universität Posen)	As, Hg	182

Abkürzungen:

AAS¹ = Atomabsorptionsspektrometer

ICP-MS² = Massenspektrometrie mit induktiv gekoppeltem Plasma

an dieser Stelle auf ZIADI & SEN TRAN (2006) verwiesen. Daneben wurden auch weitere Metalle in Form von As und Hg, basierend auf Perchlorsäure und ICP-MS, berücksichtigt (mittels ICP-MS 8800 QQQ, Agilent). Wie eingangs beschrieben sind alle Methoden, angewendeten chemischen Lösungen sowie die in den unterschiedlichen Einrichtungen analysierten Metalle in Tabelle 4-5 zusammenfassend dargestellt.

5 Methodik

In dem Kapitel werden die auf der vorhandenen Datengrundlage basierenden methodischen Abläufe zur Auswertung der Boden- und Pflanzenparameter sowie die Schritte zur Modellierung der Metallgehalte beschrieben. Die qualitative und quantitative Analyse der Bodenparameter wird in Kapitel 5.1 vorgestellt. Es beinhaltet, neben einer kurzen Erläuterung zu der statistischen Aufbereitung der Daten, die Herangehensweise bei der Modellierung der Elementkonzentrationen und benennt dabei alle relevanten Vorprozessierungsschritte. Die spektralen Parameter zur Bewertung der Pflanzenvitalität werden in Kapitel 5.2 aufgearbeitet. Sie dienen gleichermaßen als Input für verschiedene Modelle, anhand derer die Gesamtgehalte der Auenvegetation vorhergesagt werden sollen. Die Variablenselektion, Modellsetups sowie die spätere Übertragung der Ansätze auf die hyperspektralen Befliegungsdaten werden in Kapitel 5.3 thematisiert. Alle Zwischenschritte wurden über die Programmiersprache *R* (Version 3.3.1) und innerhalb der Benutzeroberfläche *RStudio* umgesetzt (Version 1.0.136).

5.1 Qualitative und quantitative Auswertung der Bodenparameter

Die Auswertung der Bodenparameter umfasste neben der Berechnung statistischer Kenngrößen auch die Analyse der existierenden Korrelationen zwischen den Elementen. Zur Quantifizierung der Metallkonzentrationen wurde die PLSR genutzt. Der Abschnitt kennzeichnet weiterhin die Vorprozessierung der Bodenspektren, die Modellentwicklung, die festgelegten Eingabeparameter und die angewendeten Validierungsstrategien.

5.1.1 Statistische Aufbereitung der Bodenparameter

Bei der statistischen Aufbereitung wurden die Gesamtgehalte von As, Cd, Cr, Cu, Fe, Hg, K, Ni, Pb und Zn betrachtet. Zudem wurden die übrigen Bodenparameter (Wassergehalt, aktueller pH-Wert, elektrische Leitfähigkeit, Korngrößenverteilung, Gehalt an organischer Substanz) in die Auswertung mit einbezogen. In einem ersten Schritt wurden eine Reihe an deskriptiven Statistiken zu den genannten Metallgehalten und Bodenparametern mit Hilfe des *pasteqs*-Packages (Version 1.3-18) in *R* erstellt (vgl. GROSJEAN & IBANEZ 2014:53f.). Neben den jeweiligen Minimum- und Maximumwerten (Min, Max) wurde der Wertebereich (Range), der Median, der Mittelwert (Mean), die Standardabweichung (Std.dev) und der Variationskoeffizient (Coef.var) für jeden Parameter berechnet. Letzterer wird aus der Division der Standardabweichung durch den Mittelwert generiert. Die Statistiken erlauben sowohl eine gebietsspezifische, als auch eine gebietsübergreifende Bewertung der Bodenbelastung und der Bodeneigenschaften, unter Rücksichtnahme der Feinmorphologie.

In einem zweiten Auswerteschritt wurden die Interkorrelationen zwischen den Gesamtgehalten analysiert, um beurteilen zu können, inwieweit Abhängigkeiten zwischen den Elementkonzentrationen existieren. Für die Berechnung der Korrelationsmatrizen und der p-

Werte wurde das *Hmisc*-Package (Version 3.17-4) genutzt (vgl. HARREL 2017:233f.). Die Resultate wurden unter Verwendung des *corrplot*-Packages (Version 0.77) visualisiert (vgl. WEI & SIMKO 2016:5ff.). Daneben ist eine räumliche Bewertung der Belastungssituation in den beiden Auengebieten vorgenommen worden, in dem jeweils zwischen den 42 Messpunkten die Metallgehalte interpoliert wurden (vgl. Abbildung 4-6, Tabelle A4-1). Hierfür wurde auf das DGM und die *kriging*-Funktion des *automap*-Packages (Version 1.0-14) zurückgegriffen (vgl. HIEMSTRA 2015:5ff.).

5.1.2 Quantifizierung der Gesamtgehalte mittels PLSR

Zunächst wurden die im Labor aufgezeichneten 12 Einzelspektren je Bodenprobe zusammengefügt und gemittelt. Weiterhin wurden verrauschte und gleichzeitig merkmalsfreie Wellenlängenbereiche entfernt, sodass für weitere Analysen der Wellenlängenbereich von 390 bis 2449 nm ausgewählt wurde. Zur Minimierung spektraler Variationen in Verbindung mit oberflächenbedingten Streueffekten wurden unterschiedliche Vorprozessierungstechniken zur Normalisierung der Spektren eingesetzt, da diese die Qualität multivariater Modelle beeinflussen können (vgl. Kapitel 3.3.1 und Kapitel 3.3.2).

Im Detail wurde eine *Standard Normal Variate*- (SNV) und eine *Multi Scatter Correction*- (MSC) Transformation genutzt. Bei der SNV wird der Mittelwert eines Spektrums vom jeweiligen Reflexionswert des Einzelspektrums subtrahiert. Das Resultat wird wiederum durch die Standardabweichung des Spektrums dividiert (vgl. STEVENS & RAMIREZ-LOPEZ 2015:30f., nach BARNES et al. 1989). Bei der MSC werden Streueffekte in den Einzelspektren über ein Referenzspektrum abgeschätzt, welches üblicherweise den Mittelwert aller Spektren repräsentiert (MEVIK et al. 2015:20, nach MARTENS & NÆS 1989). Ferner wurde das *Continuum Removal*- (CR) Verfahren angewendet, bei welchem lokale Maxima innerhalb eines Spektrums identifiziert und über eine lineare Interpolation miteinander verbunden werden. Anschließend wird das Originalspektrum (OR) durch das interpolierte Spektrum dividiert, wodurch Reflexionsmerkmale in den Bodenspektren hervorgehoben werden (vgl. STEVENS & RAMIREZ-LOPEZ 2015:7f., nach CLARK & ROUSH 1984). Zudem wurde von jedem dieser genannten Spektren (OR, MSC, SNV, CR) die erste- (d1) und zweite (d2) Ableitung erzeugt, wodurch weitere Störeffekte minimiert und Merkmale akzentuiert werden sollten (vgl. STEVENS & RAMIREZ-LOPEZ 2015:11f.). Letztlich wurden 12 verschiedene Spektrentypen beziehungsweise Ableitungen gebildet (OR, OR-d1, OR-d2, MSC, MSC-d1, MSC-d2, SNV, SNV-d1, SNV-d2, CR, CR-1, CR-2), welche als Input für die weiteren Analysen dienen.

Ehe eine Quantifizierung der Gesamtgehalte unter Verwendung der Bodenspektren erfolgte, wurde geprüft, wie stark die gemessenen Spektren mit den Metallgehalten korrelieren. Dabei wurden die einzelnen Wellenlängen jeder Bodenprobe in Relation zu den korrespondierenden Analysewerten gesetzt und deren Korrelationskoeffizienten (r) nach Pearson berechnet (vgl. CLEFF 2008:106). Anhand der daraus generierten Korrelationsspektren galt es, spektral sensitive Wellenlängenbereiche zu identifizieren und etwaige Merkmale abzuleiten, welche später wiederum in Verbindung zu den Metallgehalten gesetzt werden können. Zudem sollten Variablengruppen ermittelt werden, die ähnliche Korrelationsspektren aufweisen.

Zur Abschätzung der Zusammenhänge zwischen den Bodenspektren und den Elementkonzentrationen wurde als multivariate Regressionsmethode die etablierte PLSR eingesetzt, wobei die Spektren als *predictor*- und die Metallwerte als *response*-Variable agieren. Hierfür wurden die Funktionen des *pls*-Packages (Version 2.5-0) verwendet, welches von MEVIK et al. (2015) implementiert wurde (vgl. MEVIK et al. 2015:1ff.). Der PLSR-Ansatz ähnelt der Hauptkomponentenanalyse. Im Allgemeinen werden bei der PLSR die Bodenspektren in eine Reihe von Eigenvektoren und Scores zerlegt. Im Vergleich zu der PCR, wo die beschriebene Dekomposition und Regression separat durchgeführt werden, bindet die PLSR die Bodeninformation in den Dekompositionsprozess ein. Konkret werden die Korrelationen zwischen den Spektren und den Parametern berücksichtigt. Dadurch stehen die spektralen Vektoren in direktem Zusammenhang mit den Bodeneigenschaften (VISCARRA ROSSEL et al. 2006:61, nach GELADI & KOWALSKI 1986). Die PLSR selektiert sukzessive Faktoren, welche die Kovarianz zwischen den abhängigen und unabhängigen Variablen maximieren. Folglich werden diejenigen Faktoren gesucht, die den Großteil der Varianz zwischen den Variablen erklären (VISCARRA ROSSEL et al. 2006:66). Lineare Kombinationen dieser Faktoren bilden schließlich das Modell zur Vorhersage der Bodenparameter (SIEBIELEC et al. 2004:2058). Weitere ausführliche Beschreibungen zu der PLSR liefern beispielsweise die Veröffentlichungen von MARTENS & NÆS (1989) oder HAENLEIN & KAPLAN (2004).

Für die Modellrechnungen wurde eine maximale Anzahl an 30 Faktoren festgelegt. Dies ist gleichbedeutend mit 30 Modelldurchläufen für jeden Parameter und Spektrentyp, wobei die Anzahl der Faktoren bei jedem Durchlauf um eins erhöht wird. Die 84 Bodenspektren und die dazugehörigen Gesamtgehalte wurden in Kalibrierungs- und Validierungsdaten eingeteilt. Insgesamt erfolgte die Anwendung von drei unterschiedlichen Validierungsstrategien. Zum einen wurde die Übertragbarkeit des Ansatzes getestet, in dem die Daten von U1 zum Kalibrieren und die Daten von U2 zum Validieren eingesetzt werden ($U1_{\text{kal}} \rightarrow U2_{\text{val}}$). Entsprechend ist auch das entgegengesetzte Modellsetup genutzt worden ($U2_{\text{kal}} \rightarrow U1_{\text{val}}$). Zuletzt wurde der *Kennard-Stone sampling*- (KS) Algorithmus für eine automatisierte Probeneinteilung ausgewählt. Über eine Hauptkomponententransformation werden die Spektren in einem neuen Merkmalsraum überführt, in welchem der Abstand zwischen den Punkten über die Mahalanobis-Distanz ermittelt wird. Der Algorithmus selektiert zunächst die beiden Punkte, welche am weitesten voneinander entfernt sind und ordnet diese den Trainings- und Referenzdaten zu. Die Auswahl wird verworfen und die Prozedur an den Punkten fortgeführt, deren Abstand nun am größten ist. Der Ablauf wird fortgesetzt, bis keine Einträge mehr vorhanden sind und alle Daten aufgeteilt wurden (vgl. STEVENS & RAMIREZ-LOPEZ 2015:14ff., nach KENNARD & STONE 1969). Wie aus der Beschreibung ersichtlich, wurden bei jedem Modellsetup 42 Daten zum Kalibrieren und 42 Daten zum Validieren verwendet. Bei der Kalibrierung wurde die *leave-one-out cross validation* eingebunden, bei welcher jeweils eine Variable der Stichprobe weggelassen und auf Grundlage der übrigen Daten geschätzt wird (vgl. MEVIK et al. 2015:21ff.). Dieser Vorgang wird für alle Variablen respektive Metallgehalte wiederholt. Das am besten kalibrierte Modell und die daraus resultierende optimale Anzahl an PLSR-Faktoren wurde für jeden Parameter über *Akaike's Information Criteria* (AIC) abgeleitet. Das Kriterium errechnet sich über die Formel:

$$AIC = n [\ln(RSS/n)] + 2k \quad , \quad (2)$$

wobei n die Probenanzahl und k in diesem Fall die variierende Anzahl an Faktoren repräsentiert. Der als *Residual Sum of Squares* beschriebene RSS spiegelt die Summe der Differenz zwischen den geschätzten und gemessenen Variablen wider (vgl. SYMONDS & MOUSSALLI 2011:14, nach AKAIKE 1974). Das Modell mit dem niedrigsten AIC-Wert wurde auf den Datensatz zur Validierung übertragen und die Modellgüte über den *Root Mean Square Error* (RMSE) und über das Bestimmtheitsmaß (R^2) abgeschätzt. Zusammenfassend ist der konzeptionelle Aufbau der in der Arbeit gewählten PLSR-Modelle in Abbildung 5-1 visualisiert.

5.2 Spektrale Parameter zur Bewertung der Pflanzenvitalität

Zur Abschätzung der Pflanzenvitalität auf den beiden Auenstandorten wurde eine Vielzahl an spektralen Merkmalen genutzt, welche in Relation zu diversen Pflanzenparametern stehen und auf der typischen spektralen Signatur von Vegetation im VNIR-Bereich beruhen (vgl. Kapitel 3.2). Die Merkmale charakterisieren beispielsweise den Wasser-, Chlorophyll- oder Nährstoffgehalt der Vegetation und dienen folglich als Indikatoren für die Pflanzenvitalität und für potentiellen Pflanzenstress. In einem ersten Schritt erfolgte die Analyse der im Gelände aufgezeichneten Vegetationsspektren für die einzelnen Probenahmepunkte (vgl. Tabelle A4-1), aus denen insgesamt 123 spektrale Parameter abgeleitet wurden. Die genaue Bezeichnung der

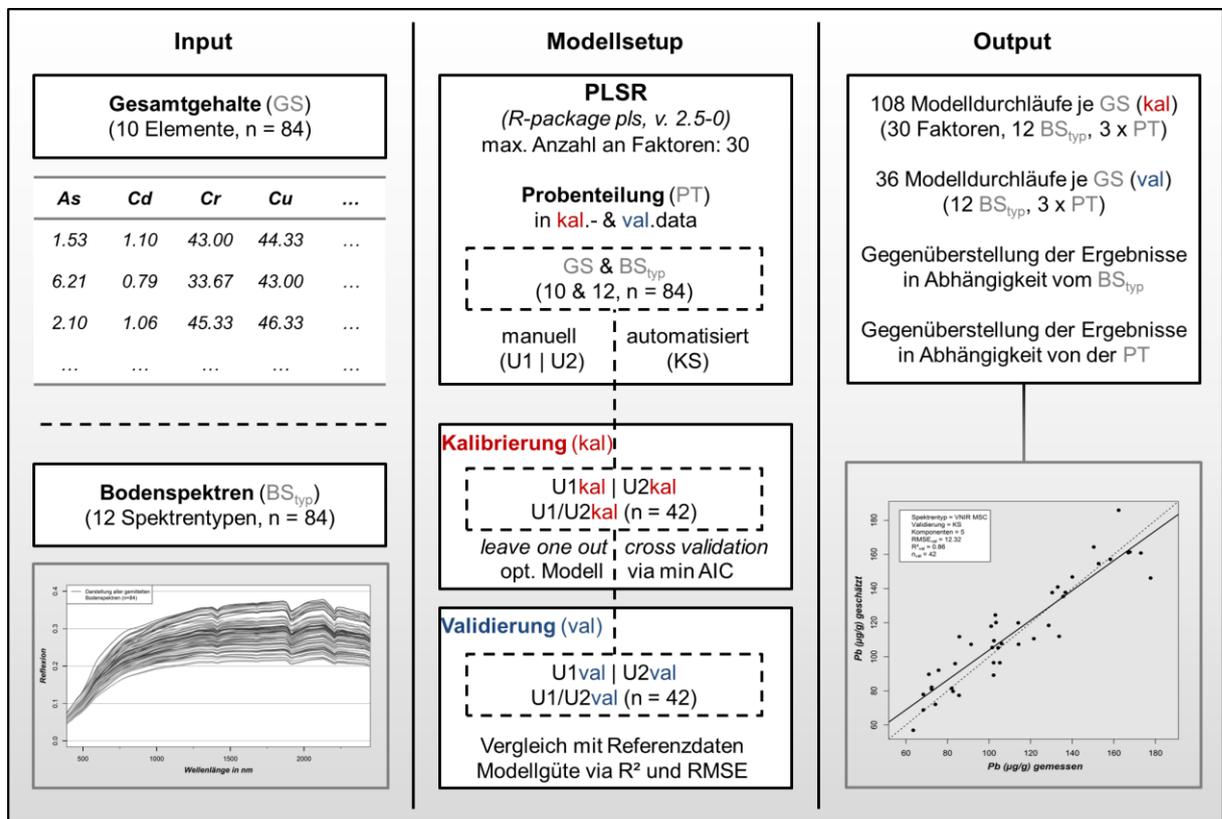


Abbildung 5-1: Konzeptioneller Aufbau der PLSR-Modelle zur Quantifizierung der Gesamtgehalte, auf Grundlage der Bodenspektren

Parameter, ihre Berechnung, die dazugehörige Referenz und ihre Sensitivität hinsichtlich bestimmter Pflanzenmerkmale sind ausführlich im Anhang der Arbeit dargestellt (vgl. Tabelle A5-1, A5-2, A5-3, A5-4, A5-5).

Allgemein können die verwendeten Spektralparameter in fünf Kategorien eingeteilt werden. Die erste Gruppe ist durch wellenlängenspezifische Ratios und Indizes gekennzeichnet, zu denen beispielsweise der NDVI, der NDWI oder der EVI zählen. Weiterhin wurden aus den quasi kontinuierlichen Spektren Ratios und Indizes abgeleitet, bei deren Berechnung Minima, Maxima oder Mittelwerte eines bestimmten Wellenlängenintervalls eingebunden werden. Die dritte Gruppe ist explizit auf Variationen im *Red Edge*-Bereich ausgerichtet. Diese Region repräsentiert eine der bedeutendsten Merkmale in Zusammenhang mit Vegetationsstress. Da durch Veränderungen in den Absorptionsbanden der Verlauf und somit auch der Anstieg innerhalb eines Vegetationsspektrums beeinflusst werden kann, wurden die genannten Parameter durch Anstiegsberechnungen innerhalb des Wellenlängenbereiches zwischen 400 und 960 nm ergänzt. Zuletzt wurden Flächenanteile unter der Reflexionskurve und spezifische Bandentiefen berechnet. Während für den Großteil der Parameter die Originalspektren verwendet wurden, sind für einzelne Merkmale die erste Ableitung oder CR-Spektren gebildet worden. Die einzelnen Kategorien sowie die Abkürzungen der dazugehörigen Spektralparameter sind in Tabelle 5-1 aufgelistet. Die hohe Parameteranzahl resultiert einerseits aus der hohen spektralen Auflösung der Reflexionsmessungen und andererseits wurde versucht, die gesamte Bandbreite und den Informationsgehalt der VNIR-Region zu nutzen.

Letztlich sind auf Grundlage der spektralen Parameter drei verschiedene Themenbereiche in Verbindung mit der Pflanzenvitalität betrachtet worden. Zum einen wurde getestet, welche Merkmale und Merkmalskombinationen mögliche Vitalitätsunterschiede in Relation zu der Feinmorphologie der Auenstandorte am besten abbilden (vgl. Tabelle 4-1 und 4-3). Hierfür wurden der Range, der Mean und die Std.dev der einzelnen Merkmale berücksichtigt. Darauf aufbauend wurde die Variabilität der Parameter über beide Untersuchungsgebiete und -jahre hinweg ausgewertet. Basierend auf den Min- und Maxwerten wurden die einzelnen Merkmale normalisiert, deren Coef.var berechnet und miteinander verglichen. Abschließend ist die Trennbarkeit der Parameter, welche auf Senken und Plateaus erhoben wurden, abgeschätzt worden, um eine generelle Aussage darüber treffen zu können, inwiefern sich die beiden Klassen spektral unterscheiden oder überlagern. Als Trennbarkeitsmaße wurden die *Jeffries-Matusita Distance* (JMD) und die M-Statistik unter Verwendung des *spatialEco*-Packages (Version 0.1-7) in *R* ermittelt (vgl. EVANS & Ram 2017:77f.). Die JMD zweier spektraler Klassen misst die mittlere Distanz zwischen den beiden Dichtefunktionen, welche die Klassenverteilung beschreiben. Sie errechnet sich in Anlehnung an RICHARDS & JIA (2006:273) für normalverteilte Klassen wie folgt:

$$JMD_{ij} = 2 (1 - e^{-B}) \quad , \quad (3)$$

wobei

Tabelle 5-1: Aus den Vegetationsspektren abgeleitete Parameter zur Bewertung der Pflanzenvitalität auf den Auenstandorten

Kategorie	abgeleitete Parameter*
wellenlängenspezifische Ratios und Indizes ($\sum n = 67$)	ARI1, ARI2, CAI, CI, CI_RE, CRI1, CRI2, DSWI, LCI, LWVI1, LWVI2, MCARI, MCARI1, MCARI2, MRENDVI, MRESR, MSAVI, MSI, MTCI, MTVI, MTVI2, NDII, NDLI, NDNI, NDRE, NDVI_a, NDVI_510_810, NDVI_510_870, NDVI_660_870, NDWI, NMDI, NPCI, NPQI, OSAVI, PRI, PSND_a, PSND_b, PSND_c, PSRI, PSSR_a, PSSR_b, PSSR_c, R430, R448, R460, R471, R550, R560, R660, R662, R1100, R1048_1021, R1110_810, RVSI, SAVI_a, SIPI, TCARI, TCI, TGI, TVI, VREI1, VREI2, WI, MCARI_MTVI2, MTVI_MCARI, MTVI_OSAVI, TCARI_OSAVI
Ratios und Indizes basierend auf Wellenlängenbereiche ($\sum n = 16$)	CI_G, CVI, DVI, EVI, GLI, gNDVI, IPVI, MSAVI2, MSR, NDVI_b, NGRDI, RDVI, RGR, RVI, SAVI_b, VARI
Red Edge spezifische Vegetationsindizes ($\sum n = 7$)	R780, R800, REIP, REIng, REPI_spec, REP_wvl1, REP_wvl2
Anstiege innerhalb der Vegetationsspektren ($\sum n = 8$)	SLALL_slopes, SLPA_slopes, SL4_slopes, SL8_slopes, SL16_slopes, SL32_slopes, S64_slopes, SL128_slopes
Flächen und Banden innerhalb der Vegetationsspektren ($\sum n = 25$)	AUC_Blue, AUC_Green, AUC_Red, AUC_Pa, AUC_NIR, AUC_NIRII, AUC_SWIR, AUC_SWIRII, AUC_CR0500, AUC_CR0671, AUC_CR0671ab, AUC_CR0700, AUC_CR0950, AUC_CR0983, AUC_CR0983ab, AUC_CR2100, AUC_CR1205, AUC_CR1205ab, AUC_CR1600, AUC_CR1730, AUC_CR2100, AUC_CR2103, AUC_CR2103ab, AUC_CR2304, AUC_CR2304ab

*detaillierte Informationen zu den einzelnen Parametern sind im Anhang der Arbeit dargestellt (vgl. Tabelle A5-1, A5-2, A5-3, A5-4, A5-5)

$$B = \frac{1}{8}(m_i - m_j)^t \left\{ \frac{\sum i + \sum j}{2} \right\}^{-1} (m_i - m_j) + \frac{1}{2} \ln \left\{ \frac{|\sum i + \sum j|}{|\sum i|^{1/2} |\sum j|^{1/2}} \right\} \quad (4)$$

B ist dabei gleichzusetzen mit der *Bhattacharyya distance* (RICHARDS & JIA 2006:273). Die JMD verhält sich asymptotisch zu $\sqrt{2}$, wobei Werte von $\sqrt{2}$ eine komplette Trennbarkeit der beiden Klassen signalisieren (EVANS & Ram 2017:77, nach BRUZZONE et al. 1995). Zusätzlich wurde die auf KAUFMAN & REMER (1994:677) beruhende M-Statistik berechnet, welche

die Differenzierung der Klassenhistogramme quantifiziert. In deren Berechnung fließen die Std.dev (σ) und der Mean (μ) der Klassen wie folgt ein:

$$M = \frac{(\mu_1 - \mu_2)}{(\sigma_1 + \sigma_2)} \quad (5)$$

M-Werte kleiner als 1 kennzeichnen eine Überlappung der beiden Histogramme und somit eine schlechte Klassentrennbarkeit. Sind hingegen die M-Werte größer als 1 ausgeprägt, überschneiden sich die Histogramme nicht und die Klassen sind einfach voneinander zu differenzieren (EVANS & Ram 2017:77, nach KAUFMAN & REMER 1994). Die Resultate wurden durch die, auf den Untersuchungsflächen erhobenen, Chlorophyllgehalte und Pflanzhöhen ergänzt.

5.3 Modellierung der Metallgehalte in der Auenvegetation

Anders als bei den Böden, bei denen die Spektren als *predictor*-Variable zur Vorhersage der Gesamtgehalte eingesetzt wurden (vgl. Kapitel 5.1.2), sind zur Abschätzung der Metallgehalte in der Auenvegetation die Spektralparameter verwendet worden. Konkret sollten die 123 Parameter in Relation zu den analysierten Gesamtgehalten der Pflanzenproben gesetzt und später als Input für verschiedene Modelldurchläufe genutzt werden. Folglich sind zunächst die Parameter beziehungsweise Spektrometermessungen selektiert worden, welche innerhalb der beiden Untersuchungsjahre am selben Tag oder in einem maximalen Zeitabstand von 14 Tagen zur Beprobung im Feld erhoben wurden. Die daraus resultierenden korrespondierenden Messungen und Proben sind in Tabelle 5-2 zusammengefasst. Wie in der Tabelle ersichtlich, standen sieben Zeitpunkte und insgesamt 142 Proben- und Messpaare für die spätere Modellierung zur Verfügung. Die Modellentwicklung selbst kann als mehrstufiger Prozess beschrieben werden. In einem ersten Schritt wurden die bedeutendsten Parameter respektive Variablen elementspezifisch über einen *Random Forest*- (RF) Ansatz ausgewählt. Darauf aufbauend sind mit der MLR und der *Support Vector Machine* (SVM) zwei unterschiedliche Modellansätze verfolgt worden, die sich in ihrer Komplexität unterscheiden. Im Folgenden werden die Variablenselektion und die beiden Modellansätze genauer beschrieben.

5.3.1 Selektion der Spektralparameter mittels RF

Für die Auswahl der Variablen wurde ein RF basiertes Verfahren nach GENUER et al. (2010) angewendet, welches von den Autoren später als *VSURF*-Package (Version 1.0.3) in *R* integriert wurde (vgl. GENUER et al. 2015). Das Verfahren stützt sich auf die RF-Prozedur von BREIMAN & CUTLER (2004). Entscheidende Bestandteile der Parameterselektion sind der sogenannte *Out-Of-Bag*- (OOB) Fehler und die Quantifizierung der *Variable Importance* (VI) (GENUER et al. 2015:20). Allgemein bildet der RF-Algorithmus eine bestimmte Menge an *trees* oder Entscheidungsbäumen (*ntree*), wobei an jedem Knotenpunkt aus den Eingabedaten zufallsbasiert eine festgelegte Anzahl an Variablen ausgewählt und angepasst wird. Für Vor-

Tabelle 5-2: Aufnahmezeitpunkt der Spektren und Pflanzenproben, welche für die Modellentwicklung berücksichtigt wurden

Aufnahmezeitpunkt der Pflanzenspektren*	Aufnahmezeitpunkt der Pflanzenproben*	Gesamtanzahl Spektren + korrespondierende Proben (n)	Gebiet
2015-07-03	2015-07-03	21	U2
2015-08-04	2015-08-04	21	U2
2015-08-07	2015-08-07	16	U1
2016-06-07	2016-06-08	21	U2
2016-07-16	2016-07-03	21	U2
2016-08-17	2016-08-17	21	U2
2016-08-25	2016-08-25	21	U1

*Vergleich Kapitel 4.2.2 Tabelle 4-3

hervorgehoben werden alle angepassten *trees* berücksichtigt beziehungsweise die Prädiktoren aggregiert. Der OOB veranschaulicht die Fehlerrate des RF und benutzt für jeden Baum die Variablen, die zuvor in dessen Aufbau nicht eingebunden wurden (LIAW & WIENER 2002:18). Der OOB fließt in die Berechnung der VI ein, für welche nach GENUER et al. (2015:21) folgende Formel verwendet wird:

$$VI(X^j) = \frac{1}{ntree} \sum_t (err\overline{OOB}_t^j - errOBB_t) \quad . \quad (6)$$

Dabei kennzeichnet $errOBB_t$ den OOB-Fehler für jeden Baum (t) des RF und durch die Permutation der Variable X^j innerhalb des Baumes wird deren Fehlerrate $err\overline{OOB}_t^j$ bestimmt (GENUER et al. 2015:21). Die VI drückt aus, inwieweit sich die mittlere Fehlerrate des RF durch wechselnde Ausprägungen einer Variable ändert, während andere Parameter unangetastet bleiben. Je größer der Anstieg des Fehlers, desto bedeutender ist die Variable (GENUER et al. 2014:10). Danach erfolgt die Zusammenstellung der Variablen mittels *VSURF* in zwei Stufen, die als “*Preliminary elimination and ranking*“ und “*Variable selection*“ definiert sind. Zunächst werden die Spektralparameter in Abhängigkeit ihrer VI geordnet und unbedeutende Variablen werden entfernt. Der *ntree*-Wert wird für gewöhnlich auf 2000 festgesetzt und die VI über 50 RF-Durchläufe hinweg gemittelt. Der Schwellwert zur Separierung der Parameter wird aus der Std.dev der VI abgeleitet, da, wie bereits angedeutet, einflussreiche Parameter eine größere Variabilität aufweisen (GENUER et al. 2015:22). Der erste Schritt ist damit abgeschlossen. Die verbleibenden Variablen können dennoch eine hohe Redundanz beinhalten (GENUER et al. 2010:2229). Im nächsten Schritt, der eigentlichen “*Variable selec-*

tion“, werden wiederum RF-Modelle gebildet, wobei die Anzahl der eingebundenen Parameter stetig erhöht und das Modell mit dem niedrigsten mittleren OOB-Wert über 25 Durchläufe hinweg aufrechterhalten wird. Auch hier wird neben dem OOB-Fehler die Std.dev aller Modelldurchläufe bemessen. Dieser Zwischenschritt dient der *interpretation*. Für die finale Auswahl an Spektralparametern werden in aufsteigender Reihenfolge RF-Modelle durch das schrittweise Hinzufügen und Testen der übrigen Variablen erstellt, wobei nur die Parameter beibehalten werden, durch deren Ergänzung der OOB-Fehler des Modells verringert und gleichzeitig ein bestimmter Schwellwert überschritten wird. Dabei gilt die Annahme, “*that the OOB error decrease must be significantly greater than the average variation obtained by adding noisy variables*” (GENUER et al. 2015:22). Die Formel zur Festlegung des Schwellwertes lautet demnach:

$$\frac{1}{m - m'} \sum_{j=m'}^{m-1} |err_{OBB}(j + 1) - err_{OBB}(j)| \quad . \quad (7)$$

M und m' charakterisieren die RF-Modelle nach den Durchläufen der *Preliminary elimination and ranking* und der *interpretation*. Die Variable j deklariert die herausgearbeiteten wichtigsten Parameter (GENUER et al. 2015:22). Eine detaillierte Ausarbeitung dieser Methodik ist in den entsprechenden Veröffentlichungen von GENUER et al. (2010) und GENUER et al. (2015) enthalten. Mit diesem Schritt ist die Variablenselektion, die separat für jedes Element durchgeführt wurde, abgeschlossen und die verbleibenden Spektralparameter wurden nun als Input für die weiteren Modelle zur Abschätzung der Gesamtgehalte genutzt.

5.3.2 Quantifizierung der Gesamtgehalte mittels MLR und SVM

Als erster Modellansatz wurde eine MLR gewählt, bei welcher die einfache lineare Regression erweitert wird und durch die Kombination zweier oder mehrerer unabhängiger Variablen die jeweiligen Elementkonzentrationen erklärt werden sollen. Die dazugehörige Funktion ist in dem *stats*-Package (Version 3.3.1) in *R* implementiert (vgl. R CORE TEAM 2016). Exemplarisch sei die Ableitung der Zielgröße nach YAU (2017:o.S.) dargestellt:

$$y = a + \sum_k \beta_k x_k + \epsilon \quad . \quad (8)$$

Y ist die abhängige Variable, welche durch die Prädiktoren (x_1, x_2, \dots, x_p ($p > 1$)) und die Parameter a und β_k ($k = 1, 2, \dots, p$) sowie dem Fehlerterm ϵ bestimmt wird (YAU 2017:o.S.).

Neben dieser simplen Modellanwendung wurde eine auf maschinelles Lernen beruhende Methode in Form einer SVM als Regressor eingesetzt. Die SVM lässt sich konzeptionell auf die Arbeit von CORTES & VAPNIK (1995) zurückführen. Sie ist in verschiedenen Ausführungen in *R* integriert, wobei für die vorliegende Arbeit auf das *e1071*-Package (Version 1.6-8.) von MEYER et al. (2017) zurückgegriffen wurde. Als Referenz verweisen die Autoren auf die Veröffentlichung von CHANG & LIN (2013). Die SVM zählt zu den *Large Margin Classifier*,

deren Funktionsweise vereinfacht wie folgt ausgedrückt werden kann. Der Grundgedanke der SVM ist die Trennung von Trainingsvektoren durch eine Hyperebene (HERTEL 2012:6). Dabei gilt es den Abstand zwischen den Stützvektoren (oder *Support Vectors*), derjenigen Vektoren, „die der Hyperebene am nächsten liegen“, zu maximieren (HERTEL 2012:6). Folglich ist die Hyperebene nur „von den ihr am nächsten liegenden Vektoren abhängig“ (HERTEL 2012:7). Da die Hyperebene lediglich lineare Objekte exakt separieren kann, werden bei nicht-linearen Fragestellungen die „Trainingsvektoren in [einen] höher-dimensionalen Vektorraum“ transformiert (HERTEL 2012:8). Hierfür stehen verschiedene Kernel-Funktionen zur Verfügung. Die SVM kann gleichermaßen als Klassifikator oder Regressor verwendet werden. Im Rahmen dieser Arbeit wurde eine *eps-regression-SVM* mit einem radialen Kernel eingesetzt (vgl. MEYER et al. 2017:49f.). Eine umfangreiche Aufarbeitung der *Epsilon Support Vector Regression* wird von CHANG & LIN (2013:6) vorgenommen und Einführungen in die theoretischen Grundlagen der SVM sind beispielsweise in DRUCKER et al. (1998), SMOLA & SCHÖLKOPF (1998) oder RIVAS-PEREA et al. (2013) enthalten. Nach einem ersten Modelldurchlauf, in dem die selektierten Spektralparameter als Prädiktoren zur Vorhersage des jeweiligen Metalls dienten, wurden üblicherweise die Standardeinstellungen der SVM ($\epsilon = 0.10$, $cost = 1$) anhand der *tune*-Funktion des *e1701*-Packages optimiert. Dabei werden über einem *grid-search* verschiedene Konfigurationen und Parameter Settings getestet, um die Performance des SVM-Modells zu verbessern. Für ϵ wurden Werte zwischen 0 und 1, in einem Abstand von 0.1, und für den *cost*-Wert Einstellungen mit 2,4,6 und 8 angenommen, woraus 44

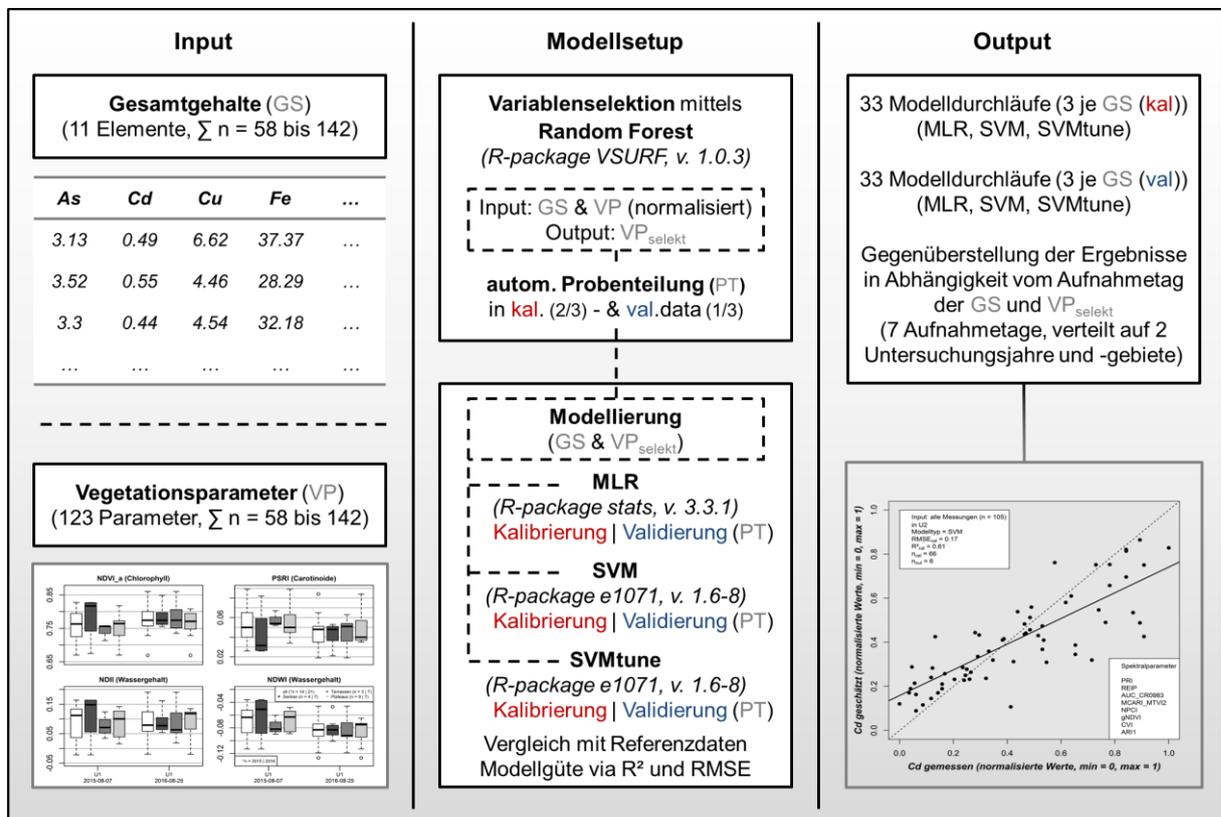


Abbildung 5-2: Konzeptioneller Aufbau der MLR- und SVM-Modelle zur Quantifizierung der Gesamtgehalte, auf Grundlage der spektralen Vegetationsparameter

weitere Modelldurchläufe resultieren. Das beste Modell wurde letztlich anhand einer Kreuzvalidierung und des daraus errechneten RMSE ermittelt (vgl. MEYER et al. 2017:53ff.).

Unter Berücksichtigung der vorhergehenden Absätze können die Arbeitsschritte zur Quantifizierung der Metallgehalte wie folgt zusammengefasst werden. Nach der elementspezifischen Selektion der idealen Spektralparameter auf Grundlage eines RF-Ansatzes, wurden diese als Input für eine MLR, eine SVM und eine optimierte SVM (SVMtune) verwendet. Die Güte der drei Modelle wurde mit Hilfe des RMSE und des R^2 abgeleitet und gegenübergestellt. Da insgesamt 142 Proben- und Messpaare für die Modellierung zur Verfügung standen (vgl. Tabelle 5-2), wurde eine Vielzahl an Modelldurchläufen durchgeführt. Dabei wurden sowohl für einzelne Jahre und Untersuchungsgebiete ($n = 58 - 121$), als auch für den gesamten Untersuchungszeitraum ($n = 142$) Modelle erstellt und getestet. Dadurch sollte gewährleistet werden, dass eine möglichst große Spannweite an spektraler Information und akkumulierten Elementkonzentrationen in den Modellen eingebunden wird. Alle Eingangsdaten wurden im Vorfeld zwischen 0 und 1 skaliert und normalisiert (vgl. HSU et al. 2016:4). Adäquat zu der Vorgehensweise bei der Quantifizierung der Bodenmetalle wurde, bezogen auf die Anzahl an Eingabeparametern, für eine Probenteilung in Kalibrierungs- und Validierungsdaten der KS-Algorithmus genutzt (vgl. Kapitel 5.1.2). Dabei sind $2/3$ der Inputdaten zum Kalibrieren und $1/3$ zum Validieren der Modelle beansprucht worden. Weiterhin wurden potentielle Ausreißer bei den Gesamtgehalten im Vorfeld der Modelldurchläufe über die *scores*-Funktion des *R*-Packages *outliers* (Version 0.14) eliminiert. Konkret wurden hierfür die *chi-squared scores* errechnet und es wurde ein p-Wert von 0.90 angenommen (vgl. KOMSTA 2011:13f.). Um Prognosen über die räumliche Verteilung der Metallkonzentrationen in der Auenvegetation treffen zu können, wurden Modelle, welche für Einzelelemente und den jeweiligen Eingabeparametern zufriedenstellende Validierungsergebnisse lieferten, in einem finalen Schritt auf die HySpex-Szenen adaptiert. Dies setzt eine Berechnung der notwendigen Spektralparameter aus den Befliegungsdaten voraus. Abschließend sind alle in dem Kapitel erläuterten Zwischenschritte und Modellentwicklungen in Abbildung 5-2 dargestellt.

6 Ergebnisse

Die Ergebnisse der Arbeit können in fünf Teilbereiche differenziert werden. Zunächst werden die im Labor ermittelten Parameter und Metallgehalte der Auenböden ausgewertet und in Relation zu den Bezugseinheiten beziehungsweise Höhenstufen der Untersuchungsgebiete gesetzt. Der Abschnitt bewertet auch die Interkorrelationen zwischen den Elementen und die generierten Belastungskarten. Im zweiten Abschnitt werden die Modellergebnisse zur Abschätzung der Bodenmetalle beschrieben und die Korrelation der Spektren zu den Elementen sowie die optimalen Resultate der Kalibrierung und Validierung aufgezeigt. Im darauffolgenden Kapitel werden die im Gelände aufgezeichneten Pflanzenparameter und die Vitalität der Auenvegetation auf Grundlage der spektralen Indikatoren veranschaulicht. Dabei sind die spektralen Merkmale aus den Vegetationsspektren abgeleitet und auf die HySpex-Szenen übertragen worden. Das Kapitel betrachtet ebenso die Variabilität der Parameter, ehe zu den akkumulierten Metallkonzentrationen in den Pflanzen übergeleitet wird. Der letzte Abschnitt beinhaltet die Resultate zu den modellierten Metallgehalten in der Auenvegetation. Auch hier dienen die spektralen Parameter als Modellinput, wobei elementspezifische Merkmalskombinationen gebildet und auf die hyperspektralen Befliegungsdaten angewendet wurden.

6.1 Bodeneigenschaften und Bodenbelastung

Die im Labor analysierten Bodeneigenschaften umfassen den Wassergehalt (WG), den aktuellen pH-Wert, die elektrische Leitfähigkeit (EL), den Anteil an organischer Substanz (OA) und die Bodenart. Sie basieren auf 84 Bodenproben, die im Untersuchungszeitraum erhoben wurden und sich gleichmäßig auf beide Testgebiete verteilen (vgl. Abbildung 4-6). 27 Proben wurden dabei auf Senken und Terrassen und 30 Proben auf Plateaus entnommen. Tabelle 6-1 enthält die Statistiken zu den einzelnen Parametern. Im Mittel besitzen die Senken einen höheren WG und einen niedrigeren pH-Wert als die höher gelegenen Standorte. Dies ist auch in Abbildung 6-1 erkennbar, in welcher beide Parameter gegenübergestellt und die Werte der Senken als blaue Punkte visualisiert sind. Der WG besitzt in den Senken einen sichtbar größeren Range mit vereinzelt Werten von über 35 %. Gleichzeitig liegt der pH-Wert für die meisten Proben unter 4.8. Im Vergleich dazu bewegt sich der pH-Wert auf den Terrassen und Plateaus um 5.5. Die höchsten Werte für die EL wurden ebenfalls in den Senken nachgewiesen. Tabelle 6-1 verdeutlicht zudem, dass im Mittel der OA in den Senken etwas höher ausgeprägt ist. Beide Kenngrößen sind in Abbildung 6-2 gegeneinander geplottet. Hier ist der OA auf den Terrassen und Plateaus miteinander vergleichbar. Größere Unterschiede treten in den Senken hervor, wo die Werte einen Bereich von 7.40 bis 16.96 % einnehmen. Weiterhin zeigt die Abbildung sichtbar niedrigere EL-Einzelwerte für die Plateaus ($\leq 400 \mu\text{s}/\text{cm}$). Die Verteilung der Hauptbodenarten in Tabelle 6-1 ist in den Proben der Senken und Terrassen ähnlich. Die Plateaus hingegen besitzen einen merklich höheren Sandanteil, welcher im Mittel bei 22.69 % liegt. Das Bodenartendiagramm in Abbildung 6-3 spiegelt in diesem Zusammenhang

6 Ergebnisse

Tabelle 6-1: Statistiken zu den ermittelten Bodenparametern auf den Bezugseinheiten, unabhängig von den Untersuchungsgebieten und -jahren

		WG* <i>(in %)</i>	akt. pH- Wert	EL <i>(in $\mu\text{s}/\text{cm}$)</i>	OA <i>(in %)</i>	Ton <i>(in %)</i>	Schluff <i>(in %)</i>	Sand <i>(in %)</i>
Senken	<i>n</i>	27	27	27	27	27	27	27
	<i>Min</i>	19.52	3.98	517.00	7.40	5.58	62.66	0.03
	<i>Max</i>	40.55	5.57	1102.00	16.96	13.36	87.32	31.76
	<i>Range</i>	21.03	1.59	585.00	9.56	7.78	24.66	31.73
	<i>Mean</i>	27.95	4.78	784.78	12.15	8.58	76.20	15.22
	<i>Std. dev</i>	5.82	0.37	138.85	2.14	2.05	6.34	8.11
Terrassen	<i>n</i>	27	27	27	27	27	27	27
	<i>Min</i>	17.07	4.87	467.00	8.10	4.39	57.54	0.01
	<i>Max</i>	29.76	5.98	961.00	13.59	13.44	87.44	38.07
	<i>Range</i>	12.69	1.11	494.00	5.49	9.05	29.90	38.06
	<i>Mean</i>	22.31	5.37	686.22	11.20	8.11	74.87	17.03
	<i>Std. dev</i>	2.97	0.31	130.71	1.46	2.23	7.06	9.14
Plateaus	<i>n</i>	30	30	30	30	30	30	30
	<i>Min</i>	14.78	4.87	185.00	9.00	3.88	55.98	0.00
	<i>Max</i>	26.87	5.87	841.00	13.21	16.78	83.41	39.67
	<i>Range</i>	12.09	1.00	656.00	4.21	12.90	27.43	39.67
	<i>Mean</i>	21.29	5.49	601.20	11.07	6.91	70.40	22.69
	<i>Std. dev</i>	3.15	0.23	174.79	1.22	2.88	8.15	10.43

* Abkürzungen: WG = Wassergehalt | EL = elektrische Leitfähigkeit | OA = Anteil an organischer Substanz

die genauen Anteile an Sand (S), Schluff (U) und Ton (T) in den Proben wider. Generell dominiert die Bodenartenhauptgruppe der Schluffe und die Mehrzahl der Proben kann dem Übergangsbereich zwischen Us und Ut2 zugeordnet werden. Lediglich acht Proben sind als mittel toniger Schluff (Ut3) kategorisiert. Betrachtet man die Korngrößenverteilung standort-

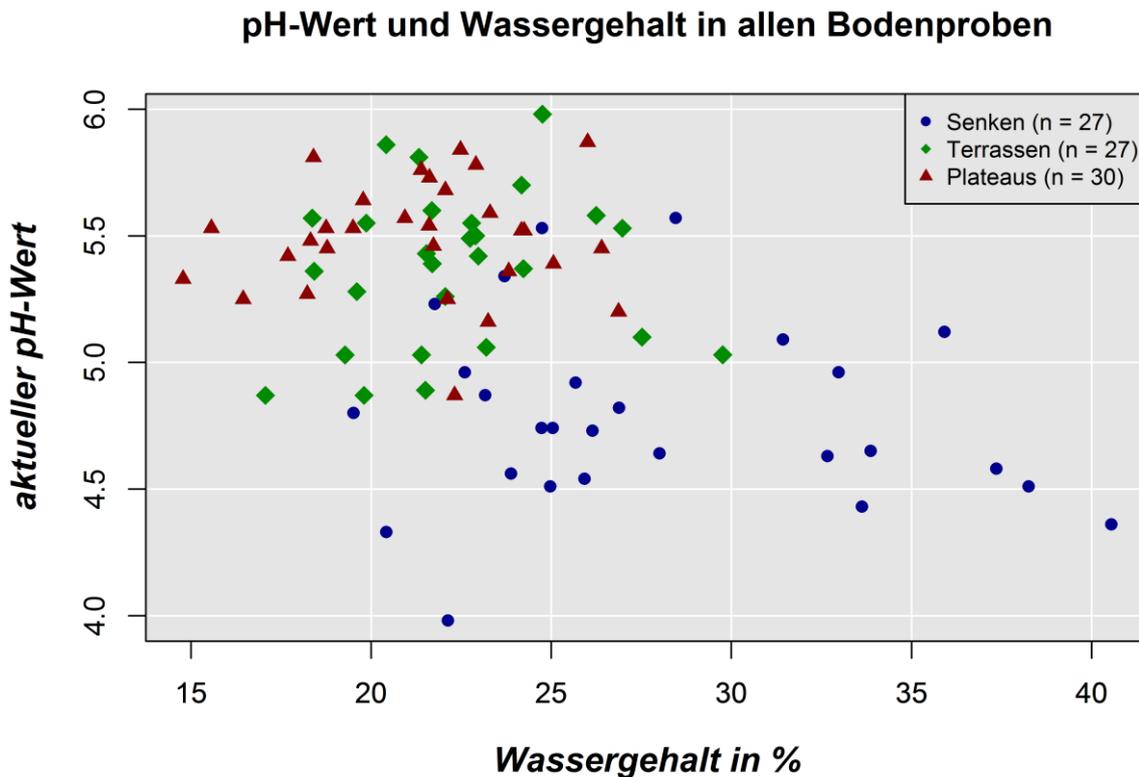


Abbildung 6-1: Ermittelte pH-Werte und Wassergehalte in den Böden der Bezugseinheiten

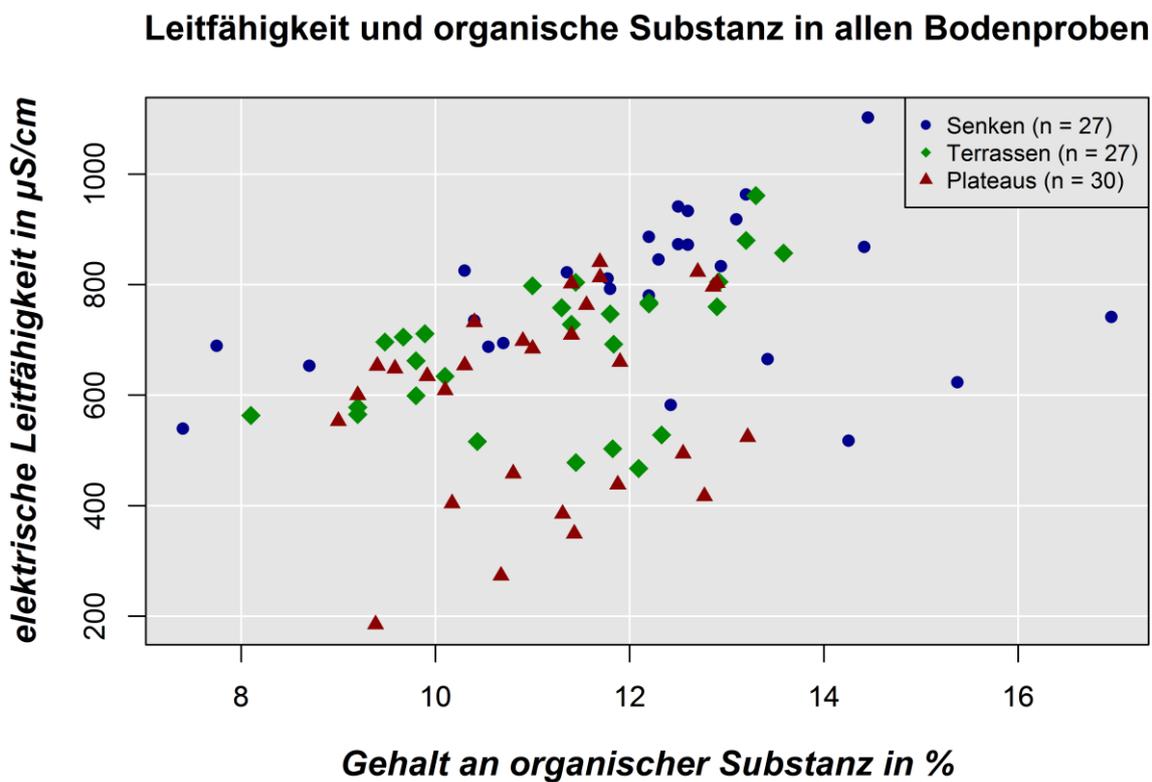


Abbildung 6-2: Ermittelte Leitfähigkeit und organische Substanz in den Böden der Bezugseinheiten

spezifisch (vgl. Abbildung 6-3 a-c), so sind Gemeinsamkeiten zwischen den Senken und Terrassen unverkennbar. Auf den Plateaus hingegen waren in 14 Proben Schluffanteile von weniger als 70 % evident.

Neben ausgewählten Bodeneigenschaften lag der Schwerpunkt bei der Laboranalyse auf der Bestimmung der Gesamtgehalte der Elementkonzentrationen in den Auenböden. Einen allgemeinen Überblick zu den ermittelten Gesamtgehalten, unabhängig von den Untersuchungsgebieten und -jahren, bietet die Tabelle 6-2. Anhand der Tabelle wird ersichtlich, dass gering belasteten Standorten Bereiche mit hohen Metallkonzentrationen gegenüberstehen. So wurden für As ein Minimum von 0.33 und ein Maximum von 45.60 µg/g nachgewiesen. Der Mittelwert für Cd lag bei 1.75 µg/g, wobei der Maximalwert mit 7.36 µg/g um ein Vielfaches höher ausgeprägt war. Für Cr und Cu wurden Werte zwischen 33.67 und 231.19 µg/g beziehungsweise zwischen 40.70 und 193.70 µg/g abgeleitet. Die höchsten Elementkonzentrationen wurden für Fe bestimmt. Im Durchschnitt enthielten die Proben 33666.84 µg/g Fe bei einer Std.dev von 34220.44 µg/g. Weitere hohe Konzentrationen wurden mit 2018.60 - 4433.33 µg/g für K und mit 152.67 - 1196.67 µg/g für Zn festgestellt. Die Wertebereiche müssen jedoch elementspezifisch und in Relation zu dem ökotoxikologischen Potential der

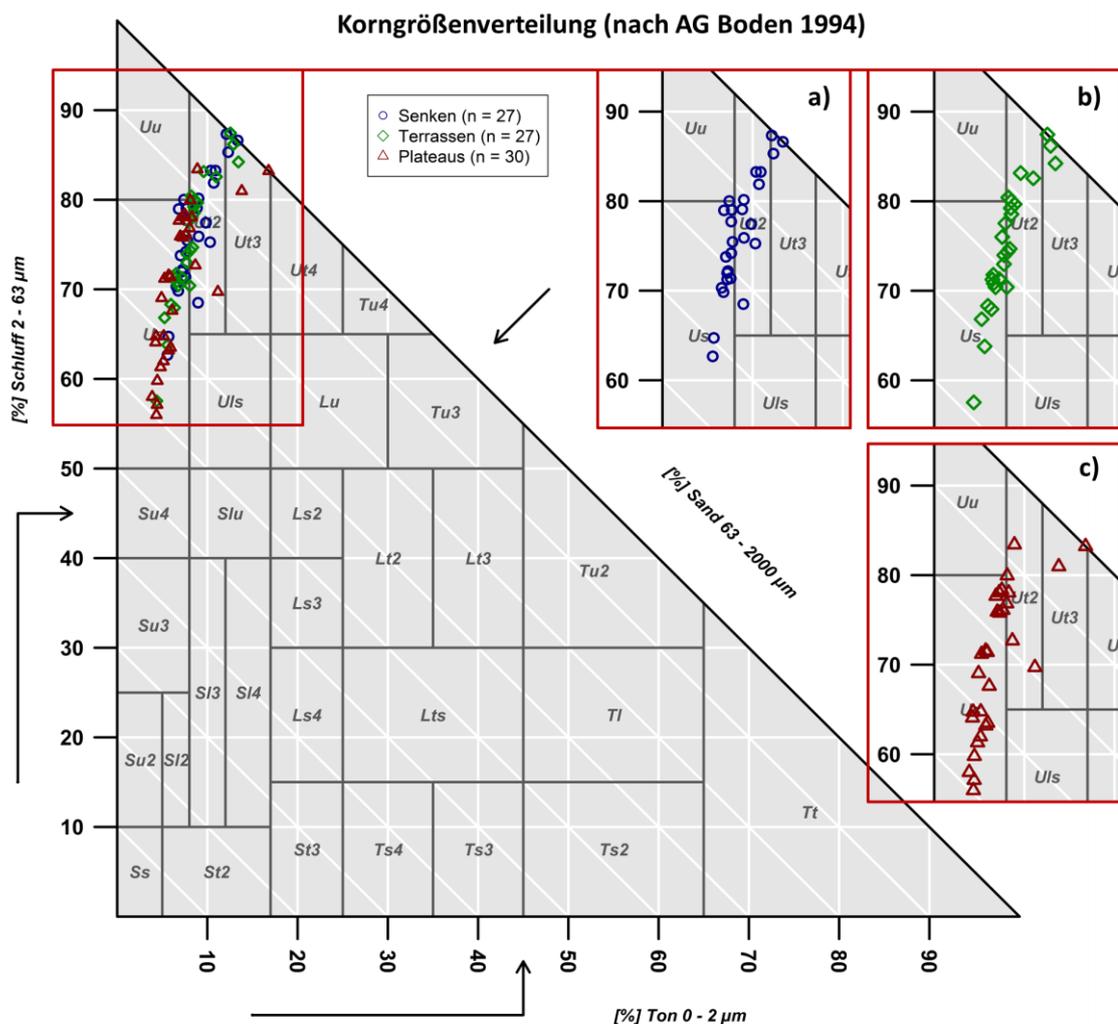


Abbildung 6-3: Korngrößenzusammensetzung in den Böden der Bezugseinheiten, aufgeteilt nach a) Senken, b) Terrassen und c) Plateaus (nach MOEYS 2016:22-23)

Tabelle 6-2: Statistiken zu den ermittelten Gesamtgehalten in den Auenböden (in µg/g), unabhängig von den Untersuchungsgebieten und -jahren

	As*	Cd	Cr	Cu	Fe	Hg*	K	Ni	Pb	Zn
<i>n</i>	84	84	84	84	84	84	84	84	84	84
<i>Min</i>	0.33	0.27	33.67	40.70	25400.00	0.25	2018.60	31.00	60.83	152.67
<i>Max</i>	45.60	7.63	231.19	193.70	48333.33	3.77	4433.33	77.33	218.33	1196.67
<i>Range</i>	45.27	7.36	197.52	153.00	22933.33	3.52	2414.73	46.33	157.50	1044.00
<i>Mean</i>	3.63	1.75	83.43	69.85	33666.84	0.68	3204.30	44.17	103.83	284.53
<i>Std. dev</i>	8.13	2.14	95.47	81.15	34220.44	1.00	3162.57	45.56	112.70	343.10
<i>Coef. Var¹</i>	10.05	1.47	46.24	35.59	4584.33	0.78	510.74	9.65	38.00	188.81

*Analysen von AM Universität Posen, alle anderen Analysen von MLU Halle-Wittenberg, ¹ dimensionslos

Metalle betrachtet werden. Für Hg und Pb ergaben die Laboranalysen einen Mittelwert von 0.68 und 103.83 µg/g. Einen differenzierteren Blick auf die Verteilung der Gesamtgehalte auf den Untersuchungsflächen ermöglicht die Tabelle 6-3, in welcher die Elementkonzentrationen unter Berücksichtigung der Probenahmepunkte aufgelistet sind. Mit Ausnahme von As weisen die Senkenbereiche die höchsten Konzentrationen für alle Elemente auf. Demgegenüber war der Mittelwert für As mit 10.23 µg/g auf den Terrassen am höchsten ausgeprägt. Der auf den Plateaus ermittelte Maximalwert ist mit 36.80 µg/g für As zudem größer, als der vergleichbare Wert in den Senken. Etwaige Variationen sind bei den übrigen Elementen nicht erkennbar. Die Bodenproben der Senken beinhalten im Durchschnitt 2.45 µg/g Cd und 1.30 µg/g Hg. Für beide Elemente ist die Std.dev in den tiefer gelegenen Probenahmestellen deutlich größer. Identische Zusammenhänge existieren auch für Cr, Cu und Zn. Während die Mittelwerte für Cr und Cu auf den Terrassen und Plateaus ähnlich ausgebildet sind (84.39 - 89.89 µg/g und 70.51 - 77.59 µg/g), waren die Senken mit 113.38 und 96.51 µg/g auffallend stärker belastet. Lediglich bei K und Pb war die Std.dev der Gesamtgehalte auf den Terrassen größer als auf den übrigen Flächen. Weiterhin ist die Spannweite der Pb-Konzentrationen auf den Plateaus erheblich geringer. Die Mittelwerte von Ni bewegen sich auf allen Bezugseinheiten zwischen 43.04 und 48.43 µg/g. Beachtlich sind in diesem Kontext die für Zn ermittelten Extremwerte. Hier weicht der Maximalwert der Senken gegenüber den restlichen Höhenstufen um über 410 beziehungsweise 530 µg/g ab, womit die dargestellten Differenzen größer als die jeweiligen Durchschnittswerte sind. Wie bei den vorherigen Metallen ist auch die Verteilung der Fe-Gehalte merklich an die Feinmorphologie der Auenstandorte gebunden. Diese Relationen werden in Abbildung 6-4 hervorgehoben, in welcher die Verteilung der Metallgehalte auf den Höhenstufen anhand von Boxplots visualisiert ist. Um alle Metalle unabhängig von ihrem

6 Ergebnisse

Tabelle 6-3: Statistiken zu den ermittelten Gesamtgehalten in den Böden der Bezugseinheiten (in µg/g), unabhängig von den Untersuchungsgebieten und -jahren

	As*	Cd	Cr	Cu	Fe	Hg*	K	Ni	Pb	Zn	
Senken	<i>n</i>	27	27	27	27	27	27	27	27	27	
	<i>Min</i>	1.13	0.60	33.67	43.00	27567.00	0.37	2695.27	32.00	64.16	175.10
	<i>Max</i>	35.10	7.63	231.19	193.70	48333.33	3.77	4433.33	77.33	218.33	1196.67
	<i>Mean</i>	8.51	2.45	113.38	96.51	35685.20	1.30	3499.70	48.43	138.68	392.53
	<i>Std. dev</i>	8.37	1.75	58.83	42.26	4860.40	0.98	416.91	11.03	33.61	231.88
Terrassen	<i>n</i>	27	27	27	27	27	27	27	27	27	
	<i>Min</i>	0.97	0.27	41.33	42.70	27766.67	0.26	2155.27	34.67	60.83	166.33
	<i>Max</i>	45.60	5.37	186.67	154.70	43000.00	2.99	4066.67	67.00	201.00	783.33
	<i>Mean</i>	10.23	2.01	89.89	77.59	34987.65	0.95	3200.00	45.47	107.68	332.86
	<i>Std. dev</i>	13.22	1.41	39.59	31.59	4443.22	0.76	484.35	9.11	39.22	177.74
Plateaus	<i>n</i>	30	30	30	30	30	30	30	30	30	
	<i>Min</i>	0.33	0.35	41.67	40.70	25400.00	0.25	2018.60	31.00	64.50	152.67
	<i>Max</i>	36.80	4.67	166.86	130.70	41000.00	2.05	3533.33	64.33	167.00	666.67
	<i>Mean</i>	5.89	1.98	84.39	70.51	32211.65	0.77	2825.48	43.04	93.82	307.82
	<i>Std. dev</i>	7.77	1.25	33.99	27.94	3814.44	0.49	394.65	8.30	26.84	147.79

*Analysen von AM Universität Posen, alle anderen Analysen von MLU Halle-Wittenberg

Wertebereich in einem Plot abbilden zu können, wurden die Gesamtgehalte elementspezifisch normalisiert. Hierfür wurden den Maxima jeweils Werte von 1 und den Minima Werte von 0 zugeordnet. Generell ist der Median bei allen Elementen in den Senken größer als auf den übrigen Bezugseinheiten. Die Spannweite der einzelnen Metalle auf den Höhenstufen variiert jedoch prägnant. Nahezu für jedes Element sind die Boxplots durch eine klare Abstufung im Übergang von den Senken zu den Plateaus hin gekennzeichnet. Eine Besonderheit stellt die Verteilung der As-Werte dar, bei welcher der Interquartilsabstand auf den Terrassen unverkennbar größer ist. Bei Cr, Cu, Hg und Ni sind hingegen die Senken durch einen auffallend größeren Wertebereich charakterisiert. Weiterhin ist bei Cd, Cu, Hg und Zn der Median auf

den Plateaus größer als auf den darunter liegenden Terrassen, wobei im Allgemeinen die Unterschiede zwischen den beiden Klassen gering sind. Im Vergleich zu den anderen Bezugseinheiten sind die Abweichungen des unteren und oberen Quartils in den Senken bei K und Pb offensichtlich. Für alle Elemente können die nicht-normalisierten Boxplots im Anhang der Arbeit eingesehen werden (vgl. Abbildung A6-1 und A6-2).

Neben der Verteilung der Gesamtgehalte in Abhängigkeit von der Feinmorphologie ist ebenso die Betrachtung der Bodenbelastungen innerhalb beider Untersuchungsgebiete bedeutsam. Die entsprechenden Statistiken können für die Elemente As, Cd, Cr, Hg und Pb aus Tabelle 6-4 entnommen werden. Für alle Elemente werden höhere Bodenkonzentrationen auf dem ersten Untersuchungsgebiet sichtbar. Die größten Abweichungen existieren dabei für As auf den Terrassen beider Testflächen, wo die durchschnittliche Belastung auf dem U1 mit $19.28 \mu\text{g/g}$ mehr als sechsmal so hoch ist wie auf dem U2. Auch die mittleren Cd-Konzentrationen aller Bezugseinheiten des U1 überschreiten die korrespondierenden Werte des U2 um das Doppelte. Analoge Tendenzen offenbarten die Laboranalysen auch für Hg. In den Senken des U2 fällt das Maximum für Cr mit $102.67 \mu\text{g/g}$ geringer aus als der niedrigste Wert des Elementes im U1 ($104.33 \mu\text{g/g}$). Während die Std.dev für Pb in den Senken mit 27.27 und $21.58 \mu\text{g/g}$ noch annähernd miteinander vergleichbar ist, werden die Differenzen auf den übrigen Höhenstufen größer. Die geschilderten Zusammenhänge werden durch die in Abbildung 6-5 dargestellten Boxplots mit den normalisierten Gesamtgehalten der fünf Elemente bekräftigt. Im Verhältnis zu den vorherrschenden Belastungen im U2 ist die Spannwei-

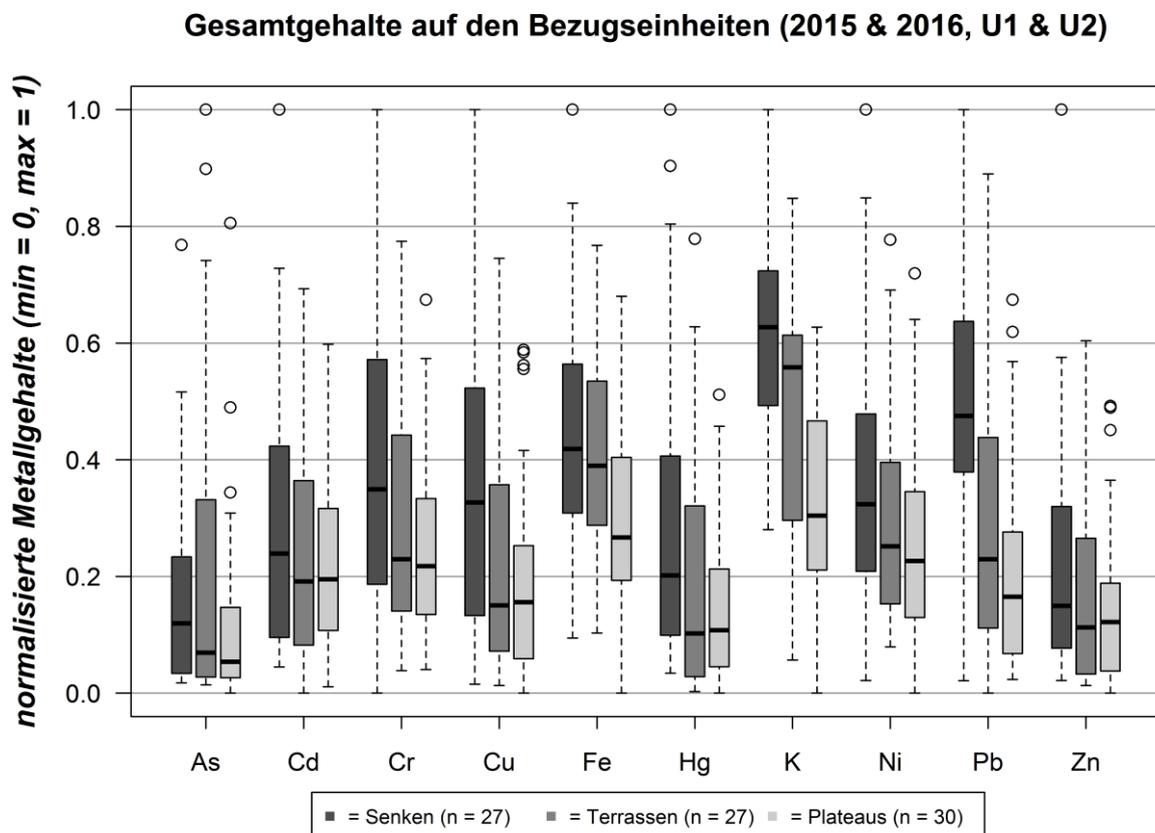


Abbildung 6-4: Gegenüberstellung der normalisierten Gesamtgehalte in den Böden der Bezugseinheiten, unabhängig von den Untersuchungsgebieten und -jahren

6 Ergebnisse

Tabelle 6-4: Statistiken zu ausgewählten Gesamtgehalten in den Böden der Bezugseinheiten (in µg/g) beider Untersuchungsgebiete, unabhängig von den Untersuchungsjahren

	As* U1 / U2	Cd U1 / U2	Cr U1 / U2	Hg* U1 / U2	Pb U1 / U2
Senken					
<i>n</i>	13 / 14	13 / 14	13 / 14	13 / 14	13 / 14
<i>Min</i>	1.13 / 1.16	2.03 / 0.60	104.33 / 33.67	0.96 / 0.37	128.67 / 64.16
<i>Max</i>	35.10 / 15.70	7.63 / 3.29	231.19 / 102.67	3.77 / 1.83	218.33 / 140.33
<i>Mean</i>	12.42 / 4.88	3.78 / 1.21	161.58 / 68.62	1.98 / 0.67	162.64 / 116.44
<i>Std. dev</i>	10.19 / 3.85	1.55 / 0.70	46.63 / 20.83	0.99 / 0.36	27.27 / 21.58
Terrassen					
<i>n</i>	12 / 15	12 / 15	12 / 15	12 / 15	12 / 15
<i>Min</i>	1.66 / 0.97	1.34 / 0.27	77.67 / 41.33	0.61 / 0.26	73.00 / 60.83
<i>Max</i>	45.60 / 12.10	5.37 / 2.92	186.67 / 127.33	2.99 / 1.40	201.00 / 136.67
<i>Mean</i>	19.28 / 2.98	3.04 / 1.19	118.42 / 67.07	1.47 / 0.54	130.03 / 89.91
<i>Std. dev</i>	15.52 / 2.92	1.27 / 0.88	35.51 / 25.78	0.83 / 0.34	44.15 / 23.56
Plateaus					
<i>n</i>	17 / 13	17 / 13	17 / 13	17 / 13	17 / 13
<i>Min</i>	1.11 / 0.33	1.29 / 0.35	70.00 / 41.67	0.41 / 0.25	68.33 / 64.00
<i>Max</i>	36.80 / 5.12	4.67 / 2.46	166.86 / 89.33	2.05 / 1.03	167.00 / 106.67
<i>Mean</i>	8.54 / 2.43	2.63 / 1.12	103.66 / 59.18	1.00 / 0.48	103.78 / 80.78
<i>Std. dev</i>	9.55 / 1.23	1.17 / 0.72	31.66 / 15.53	0.51 / 0.26	29.82 / 15.18

*Analysen von AM Universität Posen, alle anderen Analysen von MLU Halle-Wittenberg

te der Metallkonzentrationen im U1 um ein Vielfaches größer. Der Median der gering belasteten Standorte des U1 liegt über den Median der am stärksten belasteten Flächen des U2. Lediglich bei den Pb-Gehalten fallen die Abweichungen geringer aus, wo der Median der Senken des U2 die Vergleichswerte der Terrassen und Plateaus des U1 überschreitet. Demgegenüber sind die Diskrepanzen zwischen den beiden Untersuchungsgebieten für As und Cd am größten. Insofern beeinflusst nicht nur die Feinmorphologie, sondern auch die Lage der Untersuchungsgebiete und deren spezifische Charakteristika den Grad der Bodenbelastung entscheidend. In einem weiteren Schritt wurden die Interkorrelationen zwischen den untersuchten Bodenmetallen ausgewertet. Abbildung 6-6 zeigt diesbezüglich den Korrelationsplot und

die entsprechenden linearen Korrelationskoeffizienten. Bedeutsame Korrelationen mit r -Werten von über 0.90 wurden für Cd und Cr, Cd und Cu, Cr und Cu, Cr und Hg, Cd und Zn sowie für Cu und Zn berechnet. Demgegenüber waren die Zusammenhänge zwischen K und den Elementen As, Cd, Cr und Hg nur schwach ausgeprägt. Eine Korrelationsmatrix mit p -Werten ist zusätzlich im Anhang der Arbeit enthalten (vgl. Tabelle A6-1). Die Tabelle verdeutlicht, dass für den überwiegenden Anteil der Elementkombinationen signifikante Korrelationen mit p -Werten kleiner als 0.001 beziehungsweise 0.01 vorliegen. Abschließend sind in Abbildung 6-7 die interpolierten Gesamtgehalte für beide Auengebiete, basierend auf den dortigen Probenahmepunkten, visualisiert. Konkret wurden für die Darstellung zunächst die Belastungskarten für alle Elemente erstellt und normalisiert (min = 0, max = 1), wodurch ein einheitlicher Wertebereich erzielt wurde. Anschließend wurden die Layer aufsummiert. Entsprechend ist in der Abbildung die räumliche Verteilung aller Bodenmetalle berücksichtigt, was die Identifikation potentieller Belastungsschwerpunkte ermöglicht. In beiden Gebieten sind abnehmende Metallkonzentrationen von Norden nach Süden hin evident. Gleichzeitig treten Rinnenstrukturen mit erhöhten Metallkonzentrationen hervor und der Einfluss der Morphologie ist unverkennbar (vgl. Abbildung 4-4). Die Einzelkarten der Elemente können im Anhang der Arbeit eingesehen werden (vgl. Abbildung A6-3 und A6-4). Während die Karten der Metallkonzentrationen des U1 miteinander vergleichbar sind, treten im U2 sichtbare Abweichungen bei den Gesamtgehalten hervor. Weitere Einflussfaktoren und etwaige Unsicherheiten in den Grafiken werden in Kapitel 7 der Arbeit erläutert.

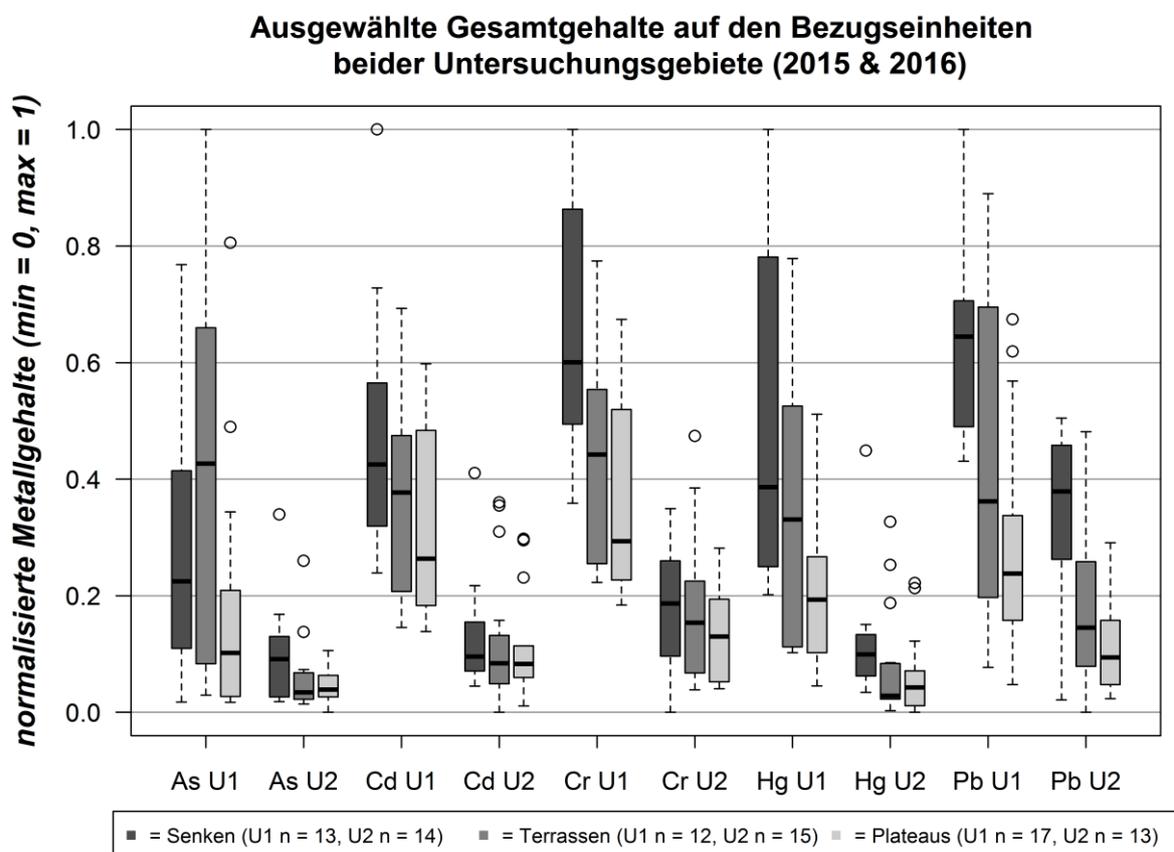
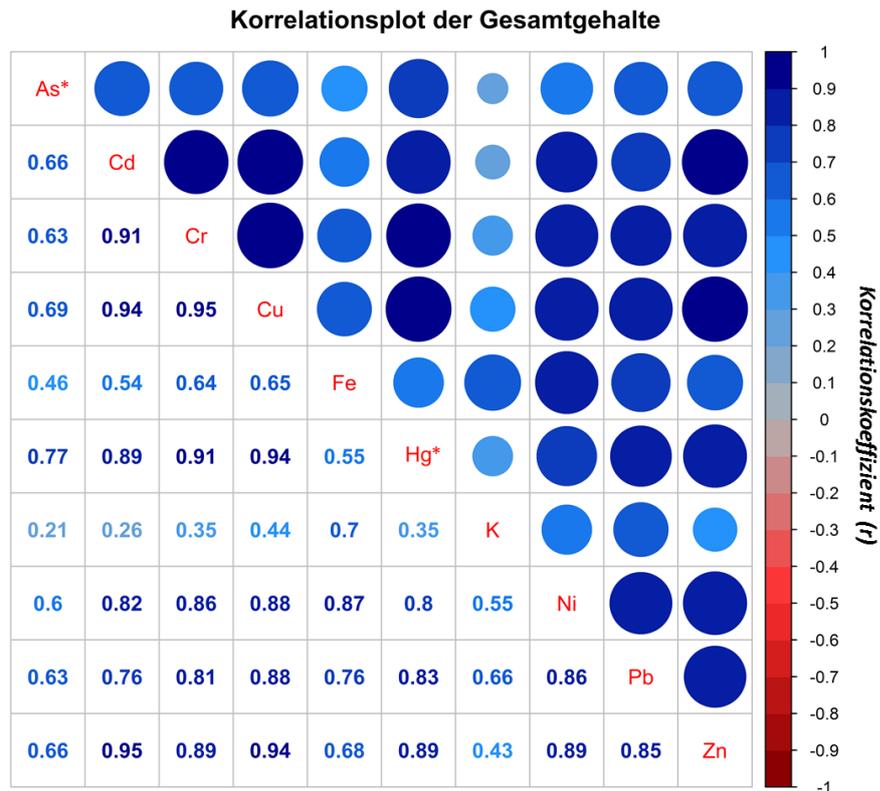


Abbildung 6-5: Gegenüberstellung ausgewählter normalisierter Gesamtgehalte in den Böden der Bezugseinheiten beider Untersuchungsgebiete, unabhängig von den Untersuchungsjahren



**Analysen von AM Universität Posen, alle anderen Analysen von MLU Halle-Wittenberg*

Abbildung 6-6: Korrelationsplot der Gesamtgehalte in den Auenböden (n = 84)
(nach WEI & SIMKO 2016:5ff.)

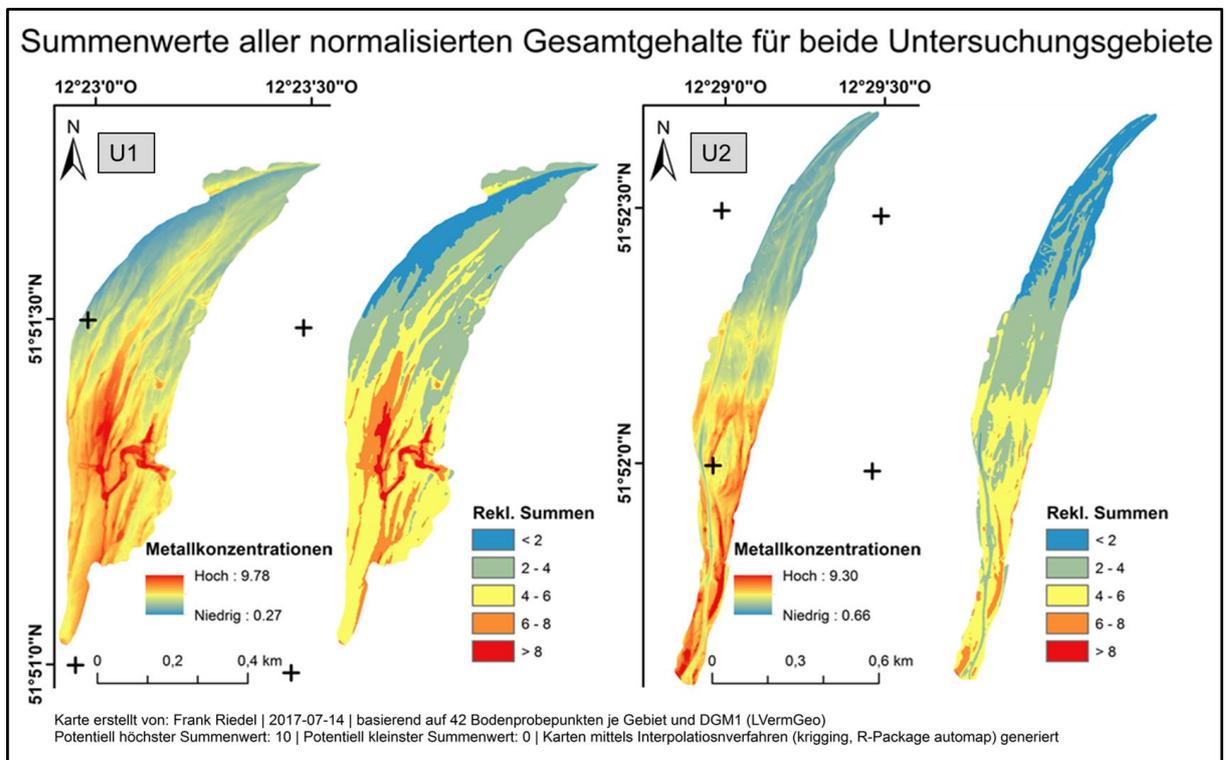


Abbildung 6-7: Summe aller interpolierten Gesamtgehalte (n = 10) in den Böden beider Untersuchungsgebiete, basierend auf jeweils 42 Probenahmepunkten

6.2 Abschätzung der Metallgehalte in den Auenböden

Die Spannweite der im Labor gemessenen Bodenreflexionen innerhalb der VNIR-Region ist in Abbildung 6-8 veranschaulicht. Allgemein nimmt die Bodenreflexion vom VIS- zum NIR-Bereich zu und charakteristische Absorptionsmerkmale treten nahe 1400, 1900 und 2200 nm auf. Der Verlauf aller aufgenommenen Spektren war vergleichbar, wenngleich die Intensität der Reflexionen und die Tiefe der Absorptionsbanden schwankten. Die wellenlängenabhängigen Korrelationen der Metallkonzentrationen zu den Bodenspektren werden in den Abbildungen 6-9 und 6-10 wiedergegeben. Wie bei den Originalspektren zuvor zeigen die Korrelationspektren ähnliche Kurvenverläufe. Die bedeutendsten Zusammenhänge waren für alle Elemente im SWIR-Spektrum zwischen 1500 und 2250 nm vorhanden. Offensichtlich sind dabei abnehmende r -Werte innerhalb der Wellenlängen, in welchen die zuvor beschriebenen Absorptionsmerkmale liegen. Unter Bezugnahme des Korrelationskoeffizienten konnten verschiedene Gruppierungen erstellt werden. Für Cd, Cr, Cu, Ni und Zn wurden negative r -Werte von unter -0.70 errechnet. Die Stärke des linearen Zusammenhangs nahm dabei in der Reihenfolge $Cr > Zn > Cd > Cu > Ni$ ab. Für Hg und Pb wurden Korrelationskoeffizienten kleiner als -0.60 nachgewiesen und für As und Fe bewegten sich die Werte im Bereich von -0.50 . Die mit Abstand schwächsten Beziehungen zu den Bodenspektren wurden für K ermittelt.

Wie in Kapitel 5.1.2 erläutert, wurde im weiteren Verlauf der Arbeit getestet, inwieweit unterschiedlich vorprozessierte Bodenspektren als Prädiktoren zur Abschätzung der Gesamtgehalte mit Hilfe von PLSR-Modellen verwendet werden können. Die besten Resultate der kalibrierten Modelle, in Abhängigkeit von der jeweiligen Validierungsstrategie, sind für jedes Element in Tabelle 6-5 enthalten. Es ist offensichtlich, dass diverse Methoden zur Normalisie-

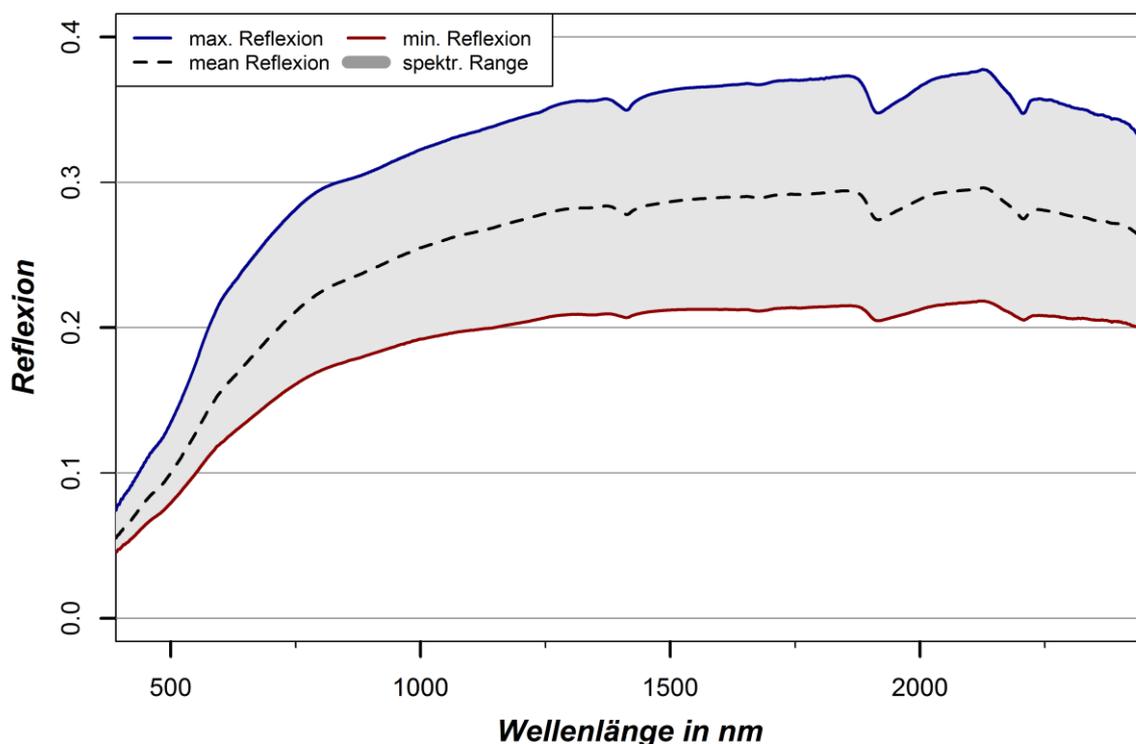


Abbildung 6-8: Wertebereich aller gemessenen Bodenspektren (n = 84)

Korrelationsspektren für ausgewählte Metalle

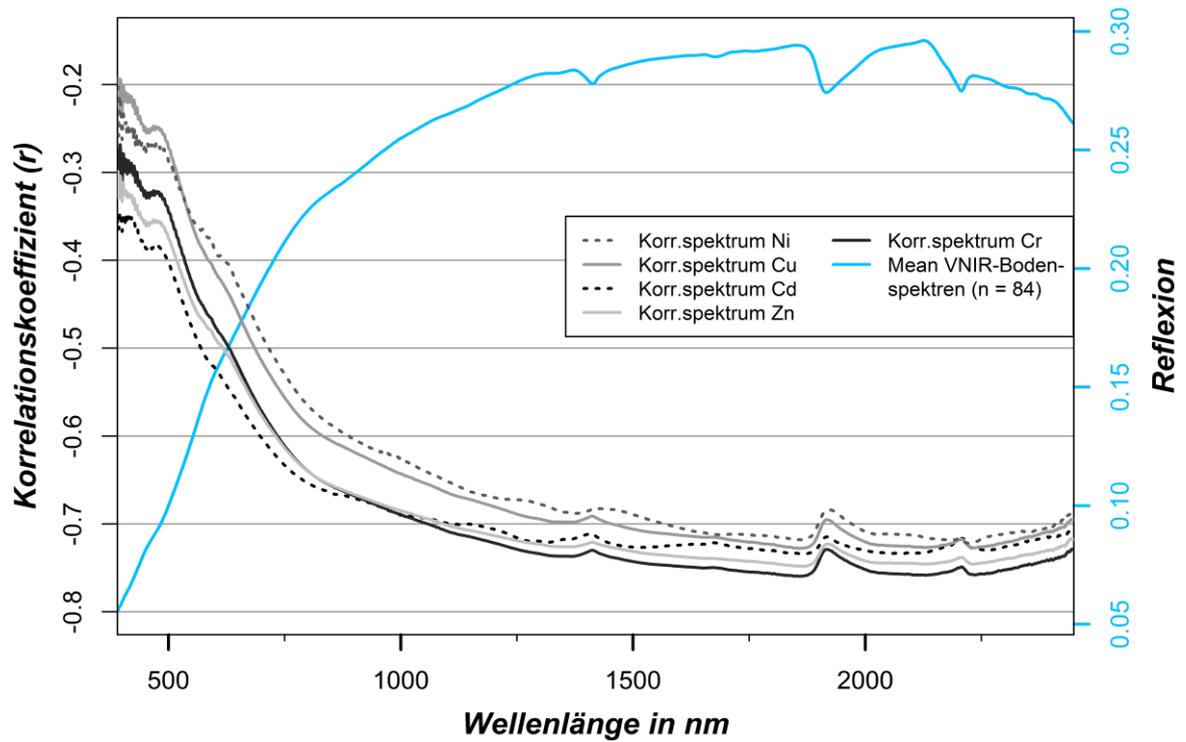


Abbildung 6-9: Korrelationsspektren für Cd, Cr, Cu, Ni und Zn, basierend auf den VNIR-Bodenspektren (n = 84)

Korrelationsspektren für ausgewählte Metalle

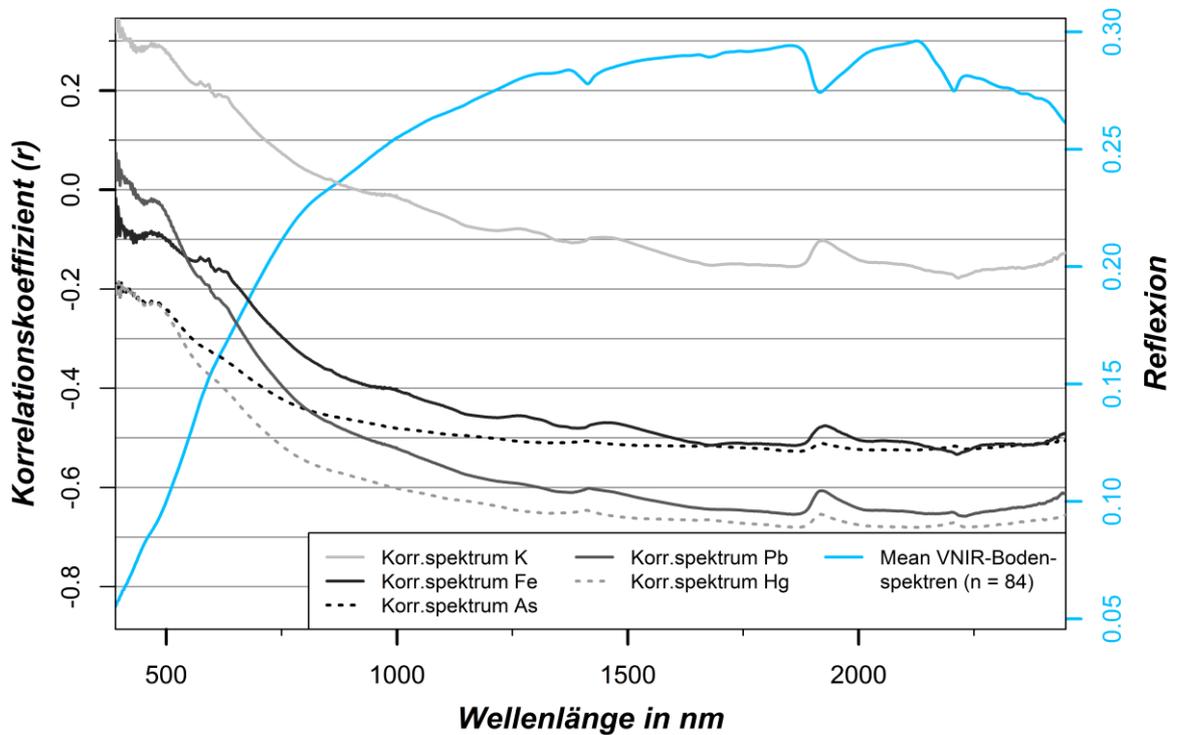


Abbildung 6-10: Korrelationsspektren für As, Fe, K, Hg und Pb, basierend auf den VNIR-Bodenspektren (n = 84)

Tabelle 6-5: Optimale PLSR-Kalibrierungsergebnisse für die Gesamtgehalte der Auenböden (n = 42), basierend auf verschiedenen Spektrentypen und Validierungsstrategien

<i>Metall</i>	<i>Spektrentyp</i>	<i>n Anzahl an Faktoren</i>	<i>R²cal</i>	<i>RMSEcal µg/g</i>	<i>Art der Validierung</i>
<i>As*</i>	<i>SNV d1</i>	<i>1</i>	<i>0.31</i>	<i>7.28</i>	<i>KS</i>
<i>Cd</i>	<i>CR</i>	<i>8</i>	<i>0.86</i>	<i>0.52</i>	<i>U1_{kal} -> U2_{val}</i>
<i>Cr</i>	<i>MSC</i>	<i>6</i>	<i>0.86</i>	<i>18.04</i>	<i>KS</i>
<i>Cu</i>	<i>MSC</i>	<i>8</i>	<i>0.92</i>	<i>10.70</i>	<i>KS</i>
<i>Fe</i>	<i>OR</i>	<i>4</i>	<i>0.78</i>	<i>1614.57</i>	<i>U2_{kal} -> U1_{val}</i>
<i>Hg*</i>	<i>MSC</i>	<i>6</i>	<i>0.82</i>	<i>0.34</i>	<i>KS</i>
<i>K</i>	<i>SNV</i>	<i>8</i>	<i>0.79</i>	<i>267.27</i>	<i>U1_{kal} -> U2_{val}</i>
<i>Ni</i>	<i>CR</i>	<i>7</i>	<i>0.84</i>	<i>3.77</i>	<i>U1_{kal} -> U2_{val}</i>
<i>Pb</i>	<i>MSC</i>	<i>5</i>	<i>0.94</i>	<i>10.78</i>	<i>KS</i>
<i>Zn</i>	<i>CR</i>	<i>8</i>	<i>0.86</i>	<i>73.87</i>	<i>U1_{kal} -> U2_{val}</i>

*Analysen von AM Universität Posen, alle anderen Analysen von MLU Halle-Wittenberg
 Abkürzungen: OR = Originalspektrum | d1 = erste Ableitung | MSC = Multi Scatter Correction |
 SNV = Standard Normal Variate | CR = Continuum Removal | KS = Kennard-Stone sampling

rung der Spektren die Qualität der Modellergebnisse verbesserten. Insbesondere MSC-korrigierte und CR-normalisierte Bodenreflexionen wurden häufig als optimale Spektrentypen selektiert. Zudem übertrafen für die Hälfte der analysierten Metalle die Modelle mit einer automatisierten Probenteilung die Performance der übrigen Validierungsarten. Demgegenüber lieferten die Daten des U2 nur für Fe die bestmöglichen Ergebnisse bei der Kalibrierung. Gute Resultate generierte die PLSR für Pb und Cu, mit R²-Werten von jeweils 0.94 und 0.92. Bei Cd, Cr, Hg, Ni und Zn variierte das Bestimmtheitsmaß zwischen 0.82 und 0.86. Unzureichende Ergebnisse erzielten die Modelle für As, was sich in einem R² von 0.31 und einem RMSE von 7.28 µg/g widerspiegelt. Hier wurde auch nur ein Faktor bei der Modellbildung eingebunden. Die Plots zu den Kalibrierungsergebnissen, anhand derer die Abweichungen zwischen den modellierten- und gemessenen Werten nachvollzogen werden können, finden sich im Anhang der Arbeit wieder (vgl. Abbildung A6-5 und A6-6). Im nächsten Schritt wurde die Anwendbarkeit der kalibrierten Modelle auf die übrigen Validierungsdaten geprüft. Basierend auf den Modelldurchläufen der Kalibrierung wurden parameterabhängig für jede Validierungsstrategie (U1_{kal} -> U2_{val}, U2_{kal} -> U1_{val}, KS) die ideale Anzahl an PLSR-Faktoren und der dazugehörige Spektrentyp eingesetzt. Adäquat zu den vorherigen Kalibrierungsergebnissen sind in Tabelle 6-6 die Gütemaße und das optimale Modellsetup für die 10 Gesamtgehalte

Tabelle 6-6: Optimale PLSR-Validierungsergebnisse für die Gesamtgehalte der Auenböden (n = 42), basierend auf verschiedenen Spektrentypen und Validierungsstrategien

<i>Metall</i>	<i>Spektrentyp</i>	<i>n Anzahl an Faktoren</i>	<i>R²val</i>	<i>RMSEval µg/g</i>	<i>Art der Validierung</i>
<i>As*</i>	<i>CR</i>	<i>1</i>	<i>0.27</i>	<i>10.61</i>	<i>KS</i>
<i>Cd</i>	<i>MSC</i>	<i>6</i>	<i>0.86</i>	<i>0.52</i>	<i>KS</i>
<i>Cr</i>	<i>CR</i>	<i>3</i>	<i>0.79</i>	<i>19.51</i>	<i>KS</i>
<i>Cu</i>	<i>CR</i>	<i>5</i>	<i>0.85</i>	<i>12.72</i>	<i>KS</i>
<i>Fe</i>	<i>SNV</i>	<i>4</i>	<i>0.67</i>	<i>4193.12</i>	<i>U1_{kal} -> U2_{val}</i>
<i>Hg*</i>	<i>SNV</i>	<i>5</i>	<i>0.73</i>	<i>0.42</i>	<i>KS</i>
<i>K</i>	<i>OR</i>	<i>4</i>	<i>0.75</i>	<i>372.13</i>	<i>U2_{kal} -> U1_{val}</i>
<i>Ni</i>	<i>SNV</i>	<i>3</i>	<i>0.79</i>	<i>10.36</i>	<i>U2_{kal} -> U1_{val}</i>
<i>Pb</i>	<i>MSC</i>	<i>5</i>	<i>0.89</i>	<i>14.87</i>	<i>U2_{kal} -> U1_{val}</i>
<i>Zn</i>	<i>CR</i>	<i>5</i>	<i>0.84</i>	<i>77.78</i>	<i>KS</i>

*Analysen von AM Universität Posen, alle anderen Analysen von MLU Halle-Wittenberg
 Abkürzungen: OR = Originalspektrum | MSC = Multi Scatter Correction |
 SNV = Standard Normal Variate | CR = Continuum Removal | KS = Kennard-Stone sampling

der Auenböden zusammengefasst. Wie in der Tabelle ersichtlich ist, wurden bei den Modell-durchläufen wiederholt MSC-, SNV- und CR-Spektren eingesetzt, wobei letztere am häufigsten als Input ausgewählt wurden. Die erste oder zweite Ableitung der Spektrentypen scheint hingegen keinen essentiellen Mehrwert für die PLSR-Modelle zu beinhalten. Wie zu erwarten sind die Gütemaße etwas schlechter ausgeprägt als bei den kalibrierten Modellen zuvor. Eine Ausnahme stellen das R²- und der RMSE-Wert für Cd dar, welcher mit 0.86 und 0.52 µg/g mit den Statistiken der Kalibrierung konform geht. Bei den übrigen Elementen verringerte sich der Determinationskoeffizient und der Schätzfehler nahm zu. Dennoch erzeugten die PLSR-Modelle auch für Cu, Pb und Zn robuste und zuverlässige Ergebnisse mit R²-Werten von über 0.84. Hier sind jeweils fünf Faktoren bei der Modellbildung eingeflossen. Für Cr, Hg, K und Ni lag das Bestimmtheitsmaß zwischen 0.73 und 0.79. Weiterhin funktionierte die automatisierte Probenentzug bei sechs Metallen am besten. Dies ist nachvollziehbar, da das KS den gesamten Wertebereich der einzelnen Elemente beim Erstellen der Kalibrierungs- und Validierungsdaten einbezieht und sich die ermittelten Gesamtgehalte beider Testgebiete deutlich voneinander unterscheiden (vgl. Kapitel 6.1). Dies erklärt auch den sichtbar höheren RMSE für Fe bei der Validierung, unter Verwendung der Daten des U1. Die optimalen Plots der Validierung der Bodenmetalle sind in den Abbildungen 6-11 und 6-12 dargestellt. Unver-

6 Ergebnisse

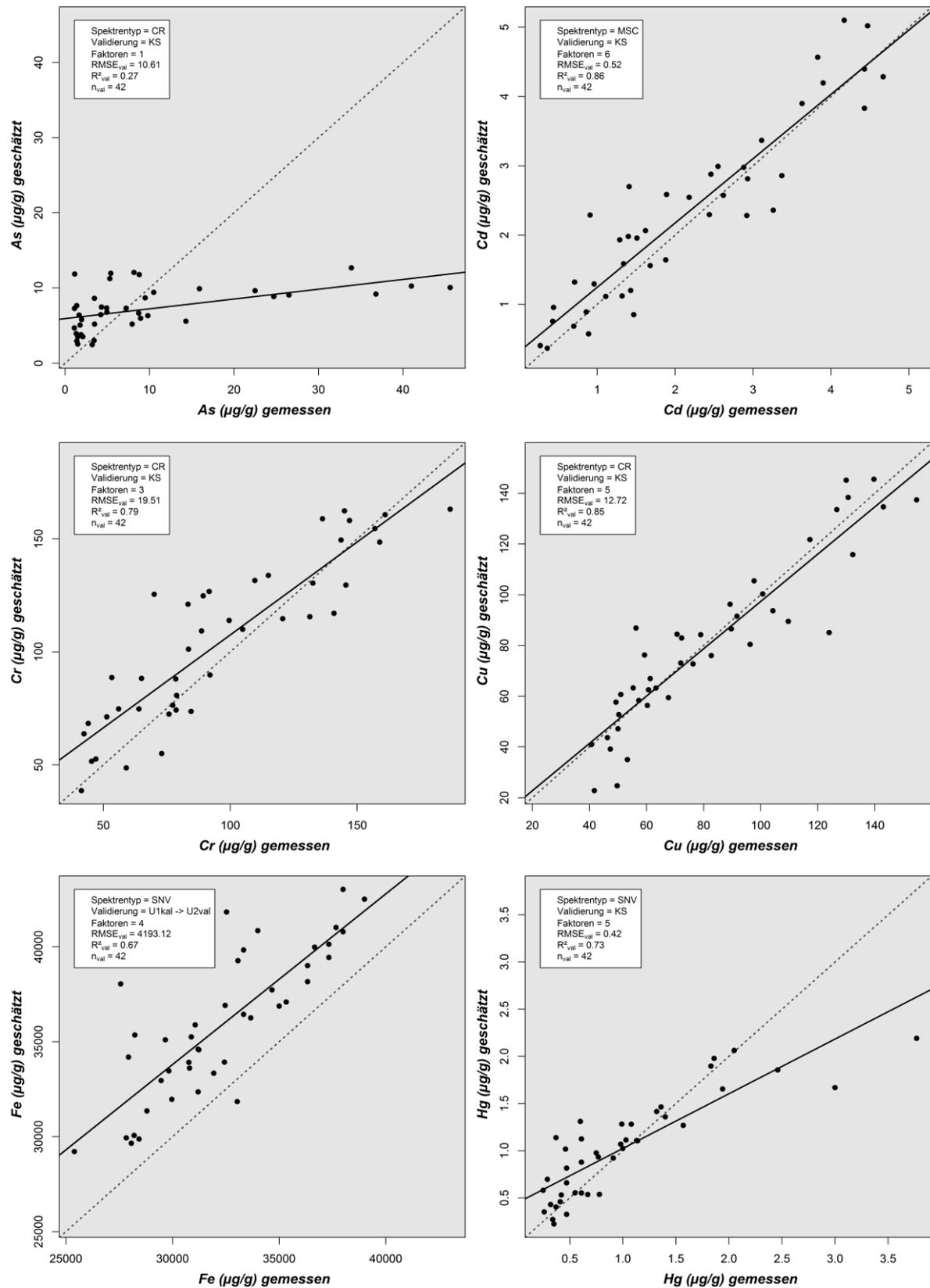


Abbildung 6-11: Optimale PLSR-Validierungsergebnisse für die Gesamtgehalte der Elemente As, Cd, Cr, Cu, Fe, und Hg

6 Ergebnisse

kennbar nehmen die Diskrepanzen für As bei Bodenkonzentrationen von über 10 $\mu\text{g/g}$ zu und das daraus resultierende R^2 von 0.27 ist zugleich der niedrigste Wert für alle Metalle. Wenige Ausreißer, welche die Gütemaße negativ beeinflussen, sind für Hg bei Konzentrationen von über 2.30 $\mu\text{g/g}$ präsent. Bei den Fe-Gehalten findet nahezu für jede Probe eine Überschätzung der darin enthaltenen Elementkonzentrationen statt. Für Ni kann ein gegenteiliger Trend beobachtet werden und die Unsicherheiten werden mit steigenden Bodengehalten größer. Im Kontrast dazu stehen die Plots für Cd, Cu, Pb und Zn, in welchen die Abweichungen zu den Referenzwerten gering sind und die validierten Punkte eine einheitliche Verteilung aufweisen. Vereinzelt Extrema konnten mit einer hohen Genauigkeit dargestellt werden, ebenso wie die durchschnittlichen Metallgehalte. Größere Differenzen zwischen den gemessenen- und geschätzten Werten sind selten. Dies hebt die Anwendbarkeit der multivariaten Regressionsmethode für entsprechende Fragestellungen hervor. Darüber hinaus sind neben den hier beschriebenen optimalen PLSR-Ergebnissen die ausführlichen Statistiken zu den einzelnen Validierungsarten in den Tabellen A6-2, A6-3 und A6-4 aufgelistet.

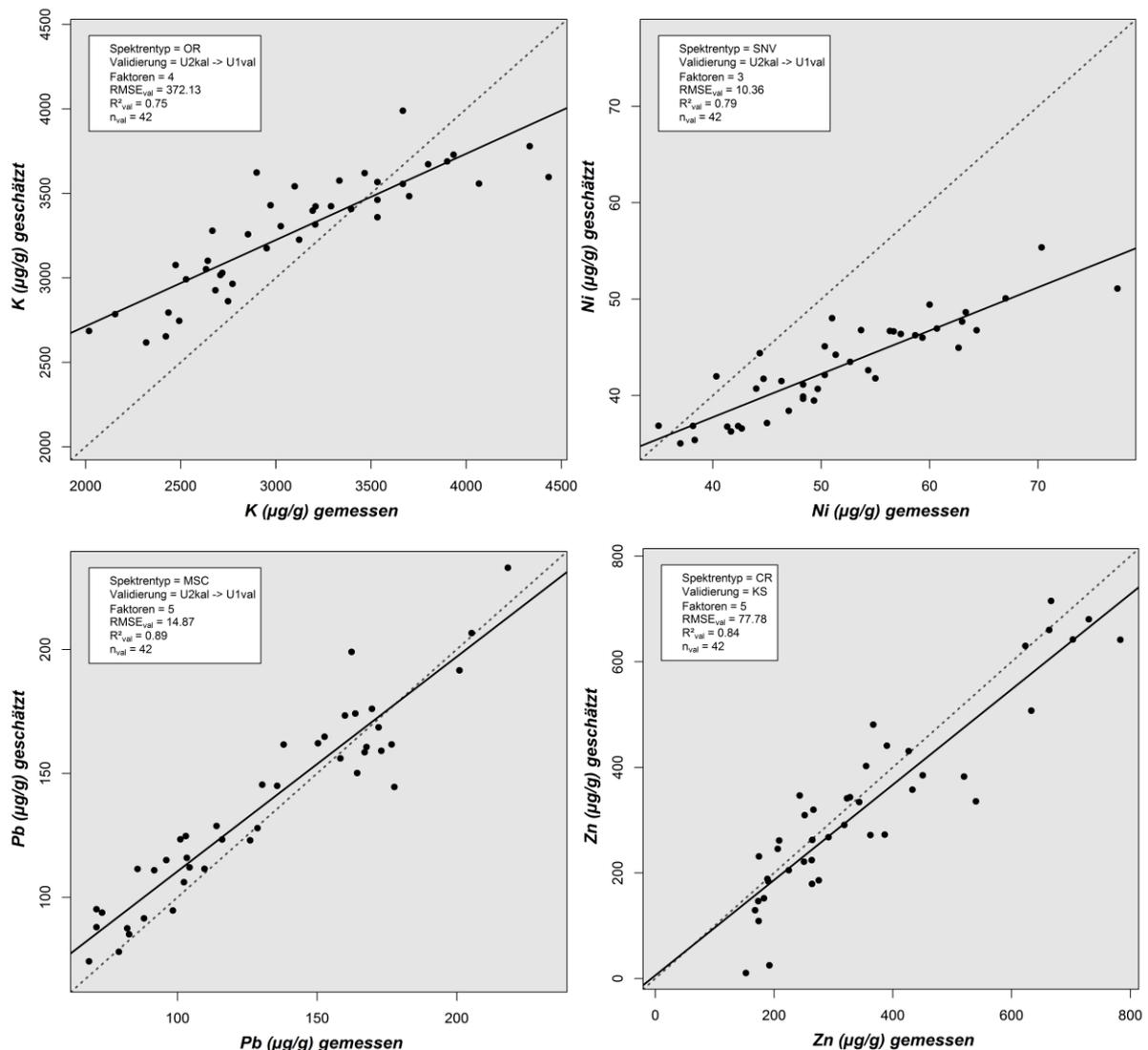


Abbildung 6-12: Optimale PLSR-Validierungsergebnisse für die Gesamtgehalte der Elemente K, Ni, Pb und Zn

6.3 Vitalität und spektrale Variabilität der Vegetation

Zur Bewertung der Pflanzenvitalität wurden die spektralen Informationen der *ASD Fieldspec Pro FR*-Messungen und der *HySpex*-Aufnahmen genutzt und zusätzlich diverse Pflanzenparameter innerhalb der beiden Testgebiete abgeleitet (vgl. Kapitel 4.2.1 und Kapitel 4.2.2.2). Im Rahmen dieser Untersuchungen wurden der Chlorophyllgehalt und die Pflanzenhöhe zu verschiedenen Zeitpunkten im Jahr bestimmt. Abbildung 6-13 beinhaltet die an den jeweiligen Probenahmepunkten gemittelten SPAD-Werte zur Abschätzung des Chlorophyllgehaltes, in Abhängigkeit von der Feinmorphologie. Die Mehrzahl der Messungen konzentrierte sich dabei auf das U2. In beiden Untersuchungsjahren sind kleinere Schwankungen in den SPAD-Werten der Höhenklassen evident. 2015 wurden im Mai die höchsten Medianwerte auf den morphologischen Einheiten nachgewiesen. Die Abweichungen zwischen den Höhenstufen sind im August des Jahres am stärksten ausgeprägt. Im August des darauffolgenden Jahres sind die Werte in den Senken ähnlich verteilt und merkliche Differenzen zu den Terrassen und Plateaus sind ebenfalls erkennbar. Im U1 sind zu diesem Zeitpunkt die Unterschiede zwischen den Bezugseinheiten geringer, wenngleich die SPAD-Werte einen sichtbar größeren Wertebereich einnehmen. Die angesprochenen Pflanzenhöhen sind im Anhang der Arbeit in Abbildung A6-7 visualisiert. Auch hier variieren die Wuchshöhen über die beiden Untersuchungsjahre hinweg. Ein allgemeiner Trend in Relation zu der Feinmorphologie ist aber nicht ersichtlich.

Chlorophyllgehalte auf den Bezugseinheiten (2015 & 2016, U1 & U2)

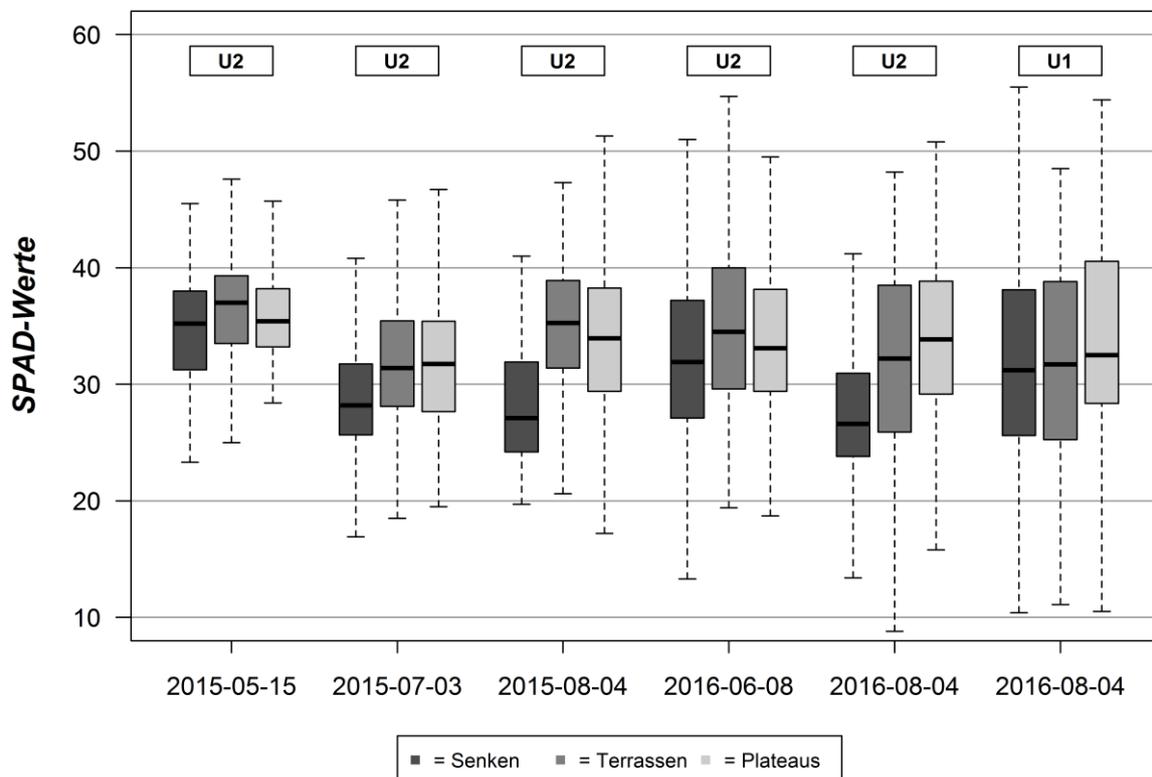


Abbildung 6-13: Ermittelte Chlorophyllgehalte auf den Bezugseinheiten beider Untersuchungsgebiete

Detailliertere Aussagen über die Pflanzenvitalität und insbesondere über die Variabilität verschiedener Pflanzenbestandteile ermöglichen die aus den ASD-Geländemessungen ermittelten spektralen Parameter (vgl. Kapitel 5.2). Abbildung 6-14 enthält in diesem Zusammenhang eine Auswahl an repräsentativen und häufig verwendeten Indizes zur Charakterisierung bestimmter Pflanzenmerkmale. Sie wurden aus den insgesamt 184 gemittelten Spektren gebildet, welche 2015 und 2016 auf beiden Auenstandorten aufgenommen wurden (vgl. Kapitel 4.2.2.1 Tabelle 4-3). Die „grüne Vegetation“ verdeutlicht den Wertebereich vitaler Vegetation. Während der NDVI_a und der MRENDVI in Verbindung mit dem Chlorophyllgehalt der Vegetation stehen, kennzeichnen der CAI und der PSRI spektrale Veränderungen, die durch Zellulose und Carotinoide hervorgerufen werden. Der NDII und NDWI reagieren beide auf Anomalien im Blattwassergehalt der Vegetation. In der Abbildung vereinen die grünen Plots die Statistiken aller Spektrometermessungen. Die übrigen Diagramme stellen die Verteilung der Merkmalswerte auf den Senken (n = 59), Terrassen (n = 64) und Plateaus (n = 61) dar. Bei den Senken ist über den gesamten Messzeitraum der Median des NDVI_a etwas höher als auf den übrigen Bezugseinheiten. Eine Abnahme des Lageparameters ist von den Senken über den Terrassen zu den Plateaus hinweg präsent. Betrachtet man den MRENDVI, so liegen die höchsten Werte des Index auf den Terrassen vor. Im Vergleich zu den übrigen Höhenklassen haben die Senken tendenziell niedrigere CAI- und PSRI-Werte. Die Werte auf den Terrassen und Plateaus sind hingegen vergleichbar. Die Blattwasser sensitiven Parameter zeigen einen ähnlichen Verlauf. In beiden Fällen ist der Median auf den Senken am höchsten und auf den Plateaus am geringsten. Auffällig ist eine Zunahme an Ausreißern beim NDWI. Im Allgemeinen können die Unterschiede zwischen den Bezugseinheiten und innerhalb der hier dargestellten Indizes als gering bewertet werden und es existieren große Überschneidungsbereiche. Weiterhin wurden für alle Merkmale keine kritischen Grenzwerte überschritten, welche auf signifikante Stressmuster hinweisen. Die analogen Abbildungen zu den Indizes, untergliedert in die jeweiligen Untersuchungsgebiete, können im Anhang der Arbeit eingesehen werden (vgl. Abbildung A6-8 und A6-9).

Während durch die *ASD Fieldspec Pro FR*-Messungen punktuelle Informationen über den Zustand der Vegetation bereitgestellt werden können, erlauben die HySpex-Aufnahmen eine räumliche Betrachtung bestimmter Spektralparameter. Abbildung 6-15 a) und 6-16 a) veranschaulichen den, aus der HySpex-Aufnahme vom 25.08.2016 abgeleiteten, reklassifizierten NDVI_a, PSRI und NDWI für das U1. Daneben ist in der Grafik b) die Verteilung der Indexwerte in Relation zu der Geländehöhe abgebildet. Die Prozentwerte symbolisieren den Anteil der jeweiligen Bezugseinheit am gesamten Untersuchungsgebiet. Zusätzlich sind in Tabelle c) die höhenklassenbezogenen Statistiken zu den Indizes enthalten. Sie können darüber hinaus mit den Resultaten der Spektrometermessungen, die am selben Tag im U1 durchgeführt wurden, abgeglichen werden. In der flächenhaften Darstellung des NDVI_a sind unterschiedliche Vitalitätsmuster offensichtlich. Insbesondere im nördlichen und östlichen Teil des U1 treten Indexwerte < 0.50 auf. Berücksichtigt man die Ausprägung des Index in Relation zum DGM, so bewegt sich der Großteil der Indexwerte auf allen Höhenstufen zwischen 0.50 und 0.85. Die Mehrzahl der Werte liegt zwischen 61 und 62 m über NN im Übergangsbereich zwischen den Terrassen und Plateaus. Sie besitzen einen Indexwert von 0.80. Außergewöhnlich ist eine Reihe an niedrigen NDVI_a-Werten in den Senken um 60 m über NN. Weitere Ausreißer

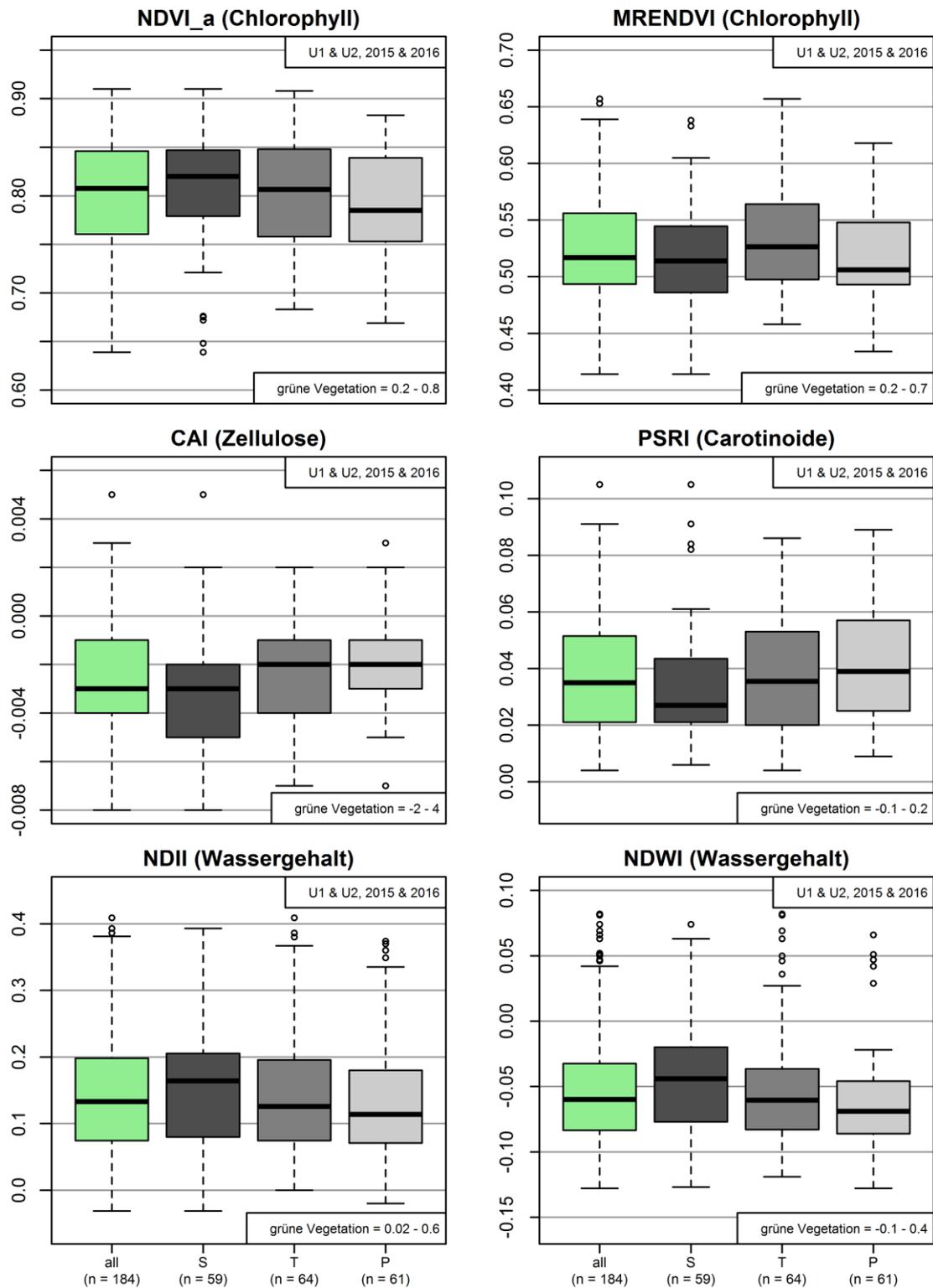


Abbildung 6-14: Charakterisierung der Pflanzenvitalität auf Grundlage der Spektrometernmessungen und ausgewählten Indizes, unabhängig von den Untersuchungsgebieten und -jahren

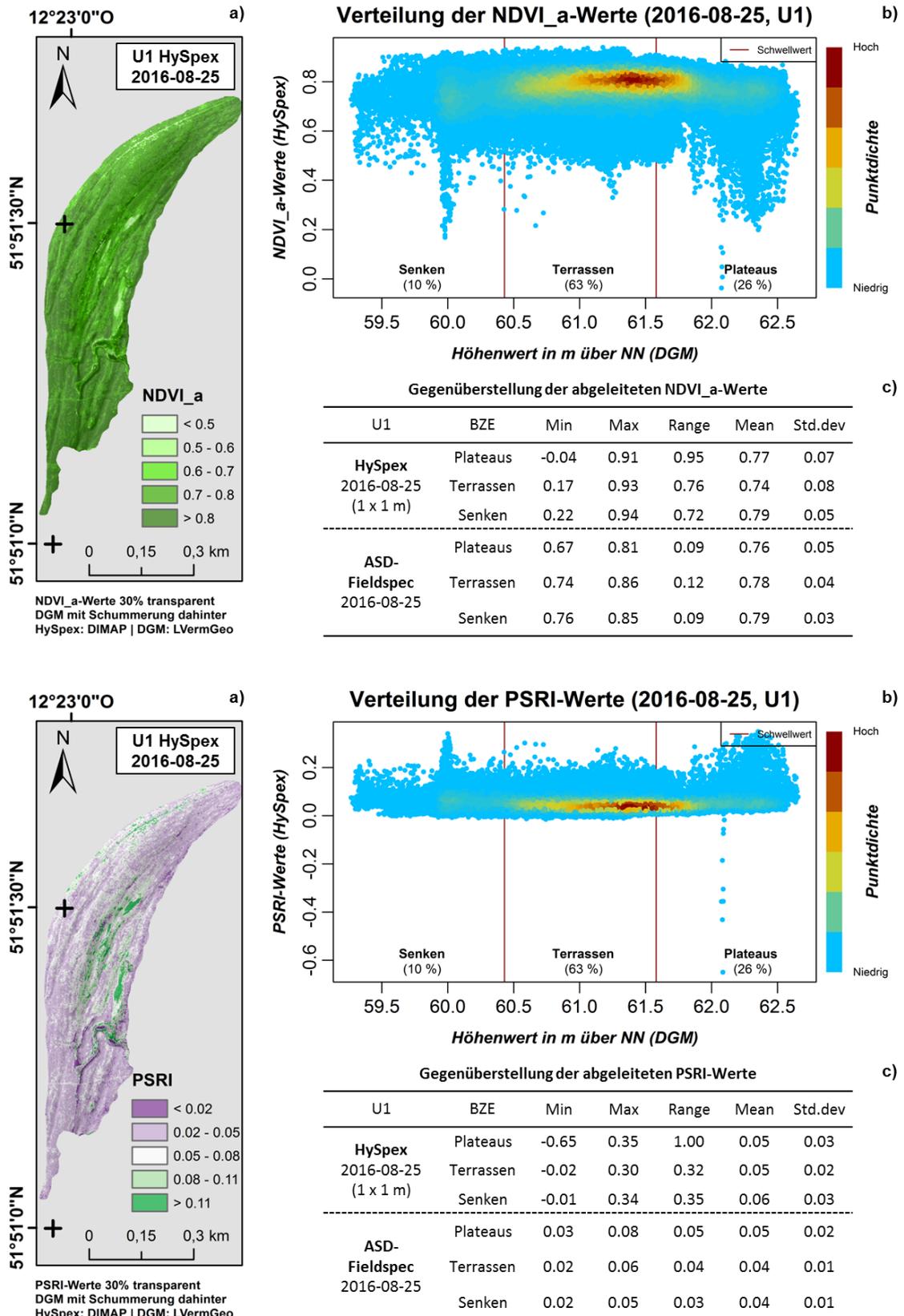


Abbildung 6-15: NDVI_a- (oben) und PSRI-Werte (unten) im Untersuchungsgebiet 1, abgeleitet aus HySpex (a), in Relation zum DGM (b) und in Vergleich zu den Geländemessungen (c) (b nach SCHWALB et al. 2015:24f., VANDERWAL et al. 2013:28f.)

werden auf den Plateaus ersichtlich. Ein NDVI_a-Wert von -0.04 ist zugleich der geringste Wert auf allen Bezugseinheiten, was sich auch in den Statistiken von Tabelle c) widerspiegelt. Dadurch weicht der Range der Plateaus deutlich von dem der Terrassen und Senken ab. Die NDVI_a-Mittelwerte sind hingegen mit 0.77, 0.74 und 0.79 komparabel. Demgegenüber weisen die Spektrometermessungen, die sich auf einige wenige Messpunkte im Gelände verteilen, einen geringeren Range auf. Der Mean beider Datensätze ist jedoch vergleichbar ausgebildet und für die Senken mit 0.79 sogar identisch. Beim PSRI treten in den morphologischen Strukturen ebenfalls unterschiedliche Klassenfarben hervor und niedrige und hohe Werte sind gleichermaßen verteilt. Dies verdeutlicht auch der Scatterplot in b). Im Vergleich zum NDVI_a streuen die PSRI-Werte weniger, wobei markante negative Ausreißer wiederum auf den Plateaus auftreten. Die Mehrzahl der Punkte bewegt sich um 61.50 m über NN und ist durch Werte von 0.05 gekennzeichnet. Wie in Tabelle c) illustriert, sind die HySpex-Extremwerte auf den Senken und Terrassen nahezu konform und die Mittelwerte aller Klassen mit 0.05 und 0.06 fast deckungsgleich. Sie stimmen mit den Mittelwerten der Spektrometermessungen (0.04 & 0.05) sehr gut überein. Der in Abbildung 6-16 a) wiedergegebene NDWI offenbart ein heterogenes Bild in den Rinnenstrukturen des U1, wo diverse NDWI-Klassen in Erscheinung treten. Ein Ansteigen oder ein Abfallen der in b) gezeigten Punktwolke, in Abhängigkeit von der Feinmorphologie, ist allerdings, wie auch bei dem NDVI_a und PSRI zuvor, nicht ersichtlich. Der überwiegende Anteil der Werte schwankt zwischen 0.00 und 0.20. Vergleichsweise hohe Werte von über 0.40 bestehen auf den Terrassen um 61 m über NN. In Kontrast zu den beiden vorhergehenden Indizes weichen die Statistiken der Hy-

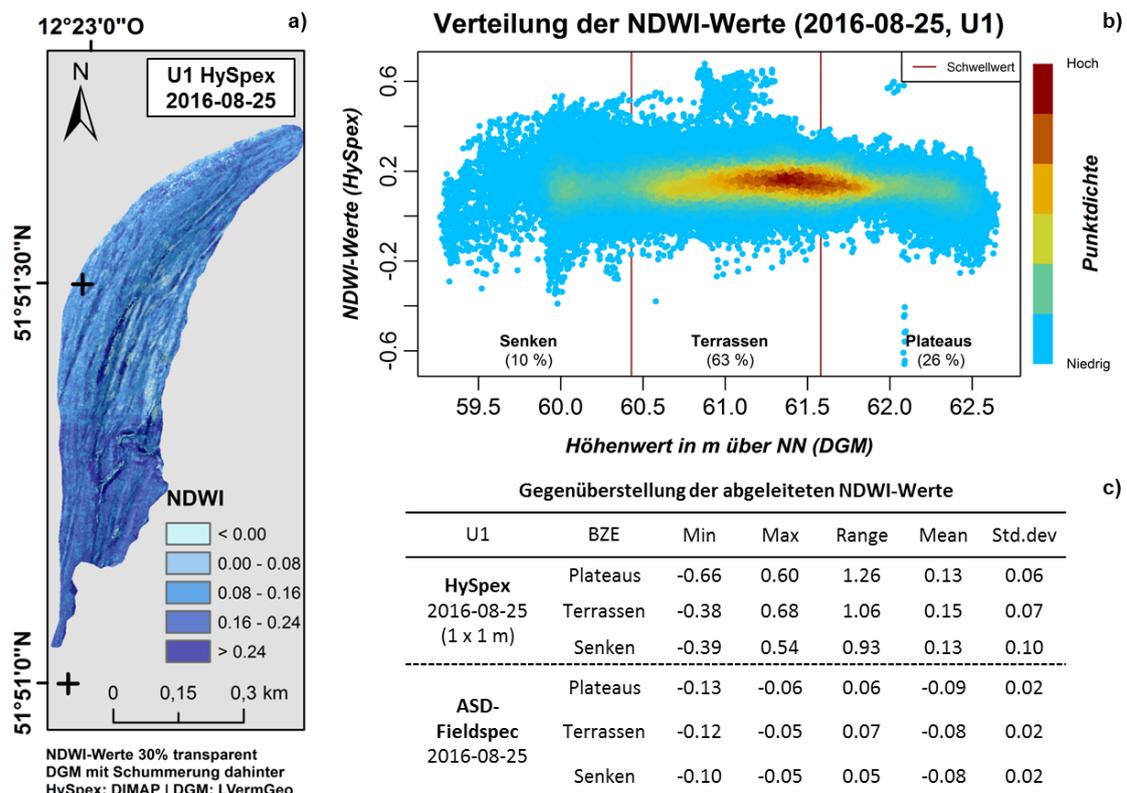


Abbildung 6-16: NDWI-Werte im Untersuchungsgebiet 1, abgeleitet aus HySpex (a), in Relation zum DGM (b) und in Vergleich zu den Geländemessungen (c)
(b nach SCHWALB et al. 2015:24f., VANDERWAL et al. 2013:28f.)

Spex- und ASD-Daten deutlich voneinander ab. Während aus den ASD-Messungen durchweg negative Mittelwerte generiert wurden, bewegen sich die Durchschnittswerte bei der HySpex-Szene zwischen 0.13 und 0.15. Die Variationen innerhalb der beiden Datensätze sind ungeachtet dessen gering. Die entsprechenden Darstellungen zum U2 sind im Anhang unter A6-10 und A6-11 abgebildet. Während die Statistiken des aus den Geländemessungen resultierenden NDVI_a und PSRI mit denen der HySpex-Szene korrespondieren, sind, wie vorhergehend im U1, größere Differenzen beim NDWI erkennbar.

Abgesehen von der monotemporalen Bewertung der Pflanzenvitalität auf den Untersuchungsgebieten wurde ebenso eine multitemporale Analyse auf Basis der abbildenden Hyperpektraldaten umgesetzt. Hierfür wurde für das U1 die vorhergehend angesprochene HySpex-Aufnahme vom August 2016 mit einer Szene desselben Monats von 2015 verglichen. In den Abbildungen 6-17 a) und 6-18 a) sind die reklassifizierten NDVI_a-, PSRI- und NDWI-Werte für beide Jahre visualisiert. Die Indexwerte der Szenen sind in den Scatterplots b) gegeneinander geplottet und die auf die Morphologie bezogenen Statistiken sind in den jeweiligen Tabellen unter c) dargestellt. Betrachtet man den NDVI_a, so existieren im Wesentlichen geringfügige Differenzen zwischen den beiden Aufnahmezeitpunkten. Eine Mehrzahl der Pixel besitzt sehr hohe Indexwerte von 0.80 und das Bild wird nur durch wenige Ausreißer mit negativen Werten, die im Jahr 2015 auftraten, gestört. Die Statistiken unter c) offenbaren ähnliche Mittelwerte und im ersten Untersuchungsjahr ist der Durchschnitt mit 0.75 für alle Bezugseinheiten homogen. Einzig die Minimumwerte weichen auf beiden Szenen stärker voneinander ab. Auch beim PSRI sind konvergente Strukturen in den HySpex-Aufnahmen erkennbar. Im Diagramm streuen die meisten Punkte zwischen 0.00 und 0.10. Zwar unterscheiden sich die Extremwerte und folglich der Range in beiden Aufnahmen merklich, eine maßgebliche Beeinflussung der Mittelwerte findet aber nicht statt. Diese sind mit 0.06 und 0.05 für die Plateaus und Terrassen in beiden Jahren vergleichbar ausgebildet. Bemessen am NDVI_a und PSRI kann der Zustand der Vegetation im U1 in beiden Jahren als sehr vital eingeschätzt und großflächige Stressmerkmale konnten auf den Bezugseinheiten nicht detektiert werden. Die Interpretation der NDWI-Werte in Abbildung 6-18 wird durch aufnahmebedingte Artefakte im nördlichen und südlichen Teil der Szene vom 04.08.2015 erschwert. Unabhängig davon sind höhere Blattwassergehalte am 25.08.2016 sichtbar. Dies ist auch in dem Streudiagramm unter b) nachvollziehbar, in welchem die Mehrheit der Werte von 2016 größer als 0.10 ist. Während die Mittelwerte der Höhenstufen von 2015 knapp über 0.00 liegen, erreichen sie im darauffolgenden Jahr Werte von 0.13 und 0.14. Innerhalb der beiden Aufnahmen können die Schwankungen aber vernachlässigt werden.

Daneben können die aus den Spektrometermessungen abgeleiteten Indizes ebenfalls als Indikatoren für eine multitemporale Abschätzung der Pflanzenvitalität herangezogen werden. Abbildung 6-19 zeigt in diesem Zusammenhang die Veränderung des NDVI_a, des PSRI, des NDII und des NDWI im U2 während des Untersuchungsjahres 2016, in welchem an vier verschiedenen Tagen Vegetationsspektren aufgezeichnet wurden. Unverkennbar ist Anfang Juni der NDVI_a mit vereinzelt Werten von über 0.90 am höchsten, wobei die Senken und Terrassen vitaler als die Plateaus erscheinen. Zu allen anderen Zeitpunkten liegt der Median der Plateaus über dem der anderen Standorte und Ende August ist eine abnehmende Tendenz beim NDVI_a auf allen Bezugseinheiten offensichtlich. Übereinstimmende Entwicklungen

6 Ergebnisse

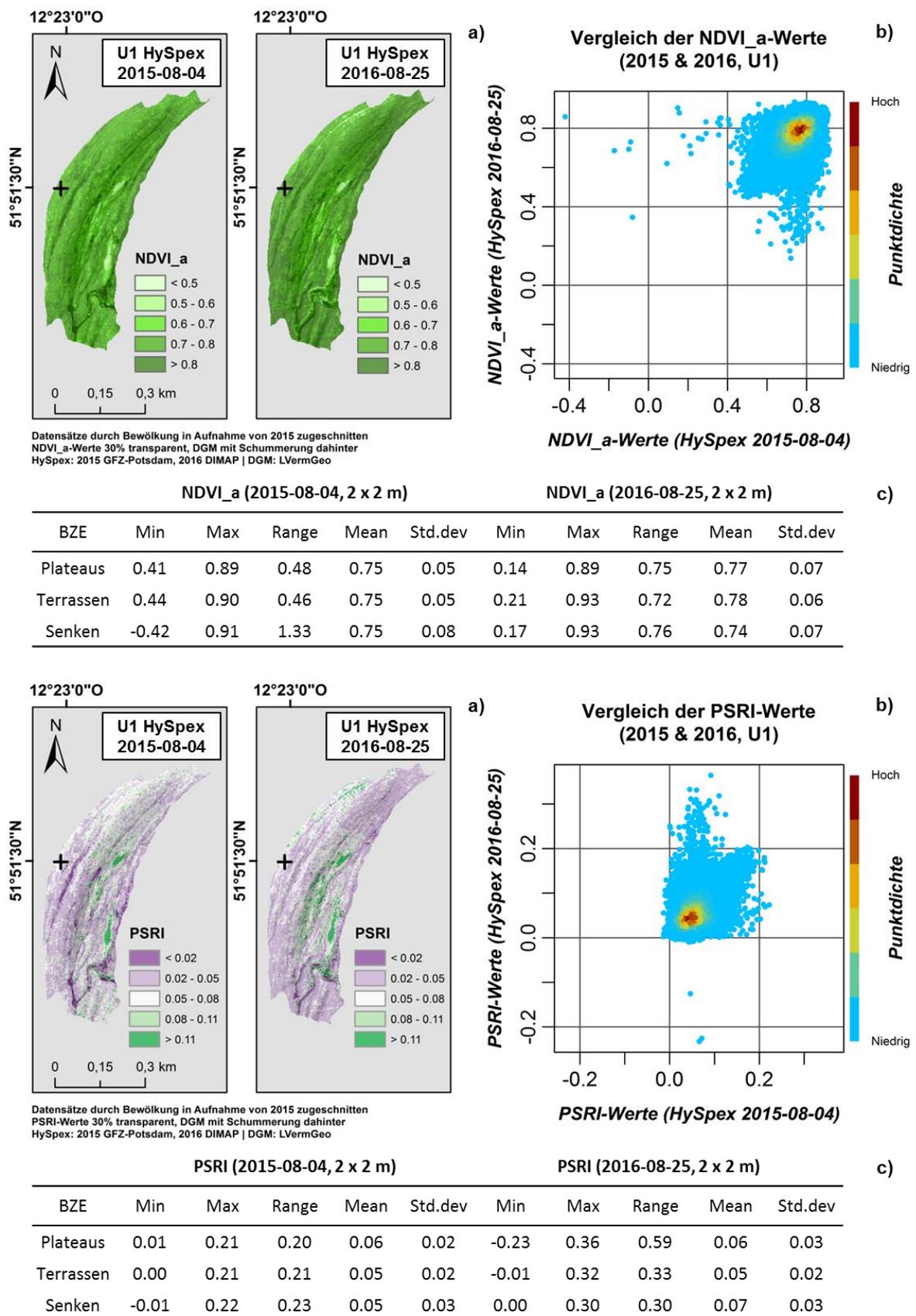


Abbildung 6-17: NDVI_a- (oben) und PSRI-Werte (unten) im Untersuchungsgebiet 1 für 2015 und 2016, abgeleitet aus HySpex (a), in Relation zueinander (b) und vergleichende Statistiken (c)
 (b nach SCHWALB et al. 2015:24f., VANDERWAL et al. 2013:28f.)

konnten auch für den NDII und NDWI nachgewiesen werden. Während Anfang Juni beim NDII die Mediane aller morphologischen Klassen größer als 0.35 sind, fallen die Vergleichswerte Ende August unter 0.10. Über den Beobachtungszeitraum hinweg sind die Differenzen beim NDWI geringer. Hier überschreitet der Median der Senken an allen Messtagen den Vergleichswert der Plateaus, wenngleich die Abweichungen zwischen den Bezugseinheiten minimal sind. Für den PSRI sind ansteigende Indexwerte evident und der Median aller Klassen nimmt von 0.01 auf etwa 0.04 zu. Auffällig ist in Relation zu den Senken und Plateaus die große Spannweite der Terrassen im Juli, die auch bei den anderen Indizes wahrgenommen werden kann. Weitere Plots, in denen die Veränderung der hier beschriebenen Indizes zu weiteren Zeitpunkten im U1 und U2 nachvollziehbar ist, sind im Anhang der Arbeit unter A6-12 und A6-13 präsent.

Aufgrund der Vielzahl an errechneten spektralen Parametern (vgl. Kapitel 5.2 Tabelle 5-1) enthalten die bisherigen Abbildungen lediglich eine Selektion von etablierten und bekannten Indizes, anhand derer die Variabilität bestimmter Pflanzenmerkmale abgeschätzt werden kann. Um eine allgemeingültige Aussage über die Differenziertheit aller Parameter treffen zu können, die aus den ASD-Spektren abgeleitet wurden, sind die Ratios, Indizes sowie die berechneten Anstiege, Flächen und Banden normalisiert, deren Coef.var gebildet und miteinander verglichen worden. Eine Rangliste zu den 20 Parametern mit der höchsten relativen Streuung, in welcher die Daten beider Untersuchungsgebiete und -jahre berücksichtigt wurden, findet sich in Abbildung 6-20 wieder. Im Verhältnis zu den anderen Kenngrößen streut

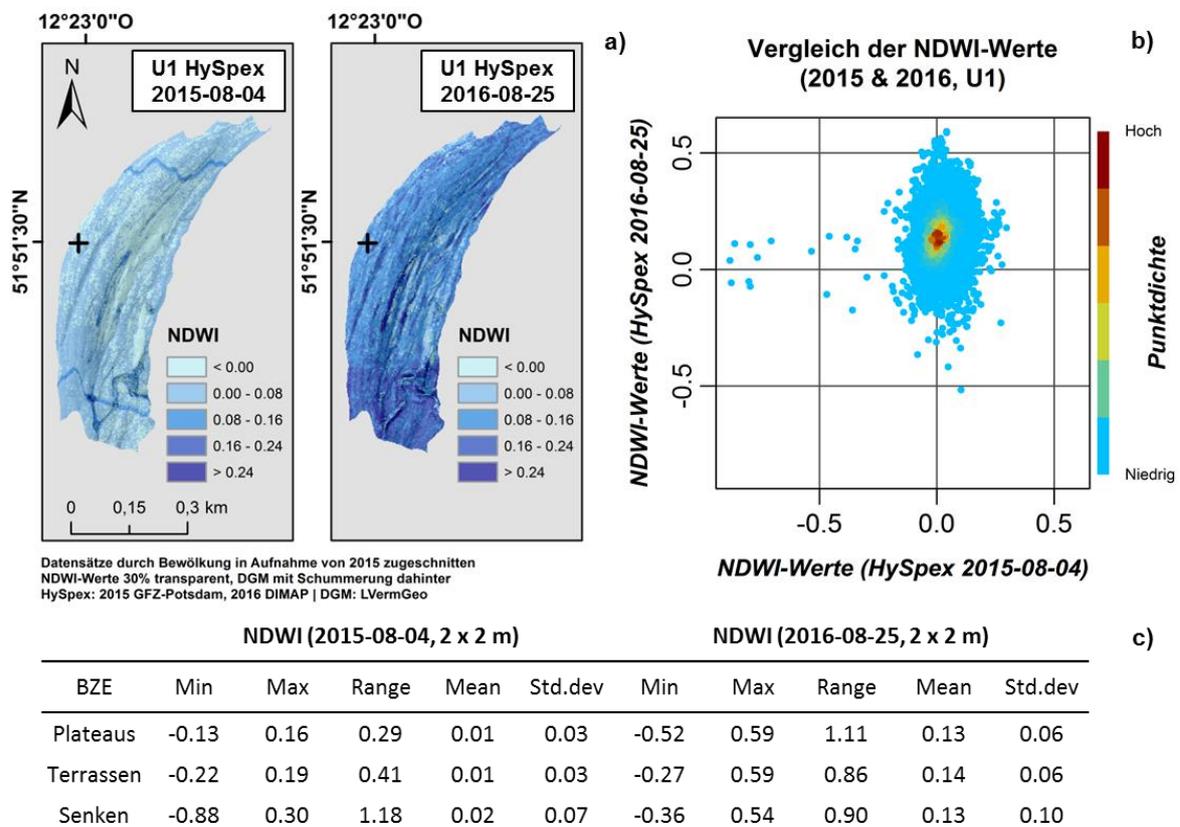


Abbildung 6-18: NDWI-Werte im Untersuchungsgebiet 1 für 2015 und 2016, abgeleitet aus HySpex (a), in Relation zueinander (b) und vergleichende Statistiken (c)
(b nach SCHWALB et al. 2015:24f., VANDERWAL et al. 2013:28f.)

der REPI_spec mit einem Coef. var von 0.83 am stärksten. Der Index kennzeichnet das Maximum innerhalb der *Red Edge* zwischen 690 und 740 nm, basierend auf der ersten Ableitung der Spektren. Die zweithöchste Variabilität mit einem Coef.var von 0.71 zeigt der Ratio aus 1048 und 1021 nm. Es folgen mit dem AUC_CR1205ab, dem LWVI2 und dem DSWI drei Parameter, welche auf Veränderungen im Blattwassergehalt der Vegetation reagieren. Auf den Rängen 7, 8 und 9 sind mit dem CI_G, dem RVI und dem MSR die ersten Indizes vertreten, die auf Grundlage von Wellenlängenbereichen gebildet wurden. Dieser Kategorie kann ebenfalls der DVI zugeordnet werden. Der erste Anstiegsparameter ordnet sich mit dem SL128_slopes auf den elften Rang ein. Die kleinste Streuung aller 123 spektralen Parameter wurde bei dem CAI mit einem Coef.var von 0.11 ermittelt. Die relative Streuung der Kenngrößen innerhalb der beiden Untersuchungsgebiete ist jeweils in der Abbildung A6-14 im Anhang der Arbeit zusammengefasst. Außergewöhnlich ist dabei der Coef.var für den REPI_spec im U1, der mit 0.99 deutlich vor dem zweiten Index positioniert ist (MCARI, Coef.var = 0.66) und zugleich den höchsten Wert aller Parameter repräsentiert (vgl. Abbildung A6-14 oben). Im U2 ist der Variationskoeffizient beim R1048_1021 mit 0.69 am größten, gefolgt vom REPI_spec (0.67) und dem PSRI (0.66) (vgl. Abbildung A6-14 unten). Darüber hinaus ist die Variabilität der Parameter auf den Bezugseinheiten von Bedeutung. Hierfür wurden die fünf Merkmale mit dem höchsten Coef.var nochmals separat abgebildet und deren relative Streuung auf den morphologischen Einheiten gegenübergestellt. Die Ergebnisse sind in Abbildung 6-21 veranschaulicht. Mit Ausnahme des R1048_1021 beinhalten die Terrassen bei allen Parametern die höchste relative Streuung. Das Maximum wird beim REPI_spec mit

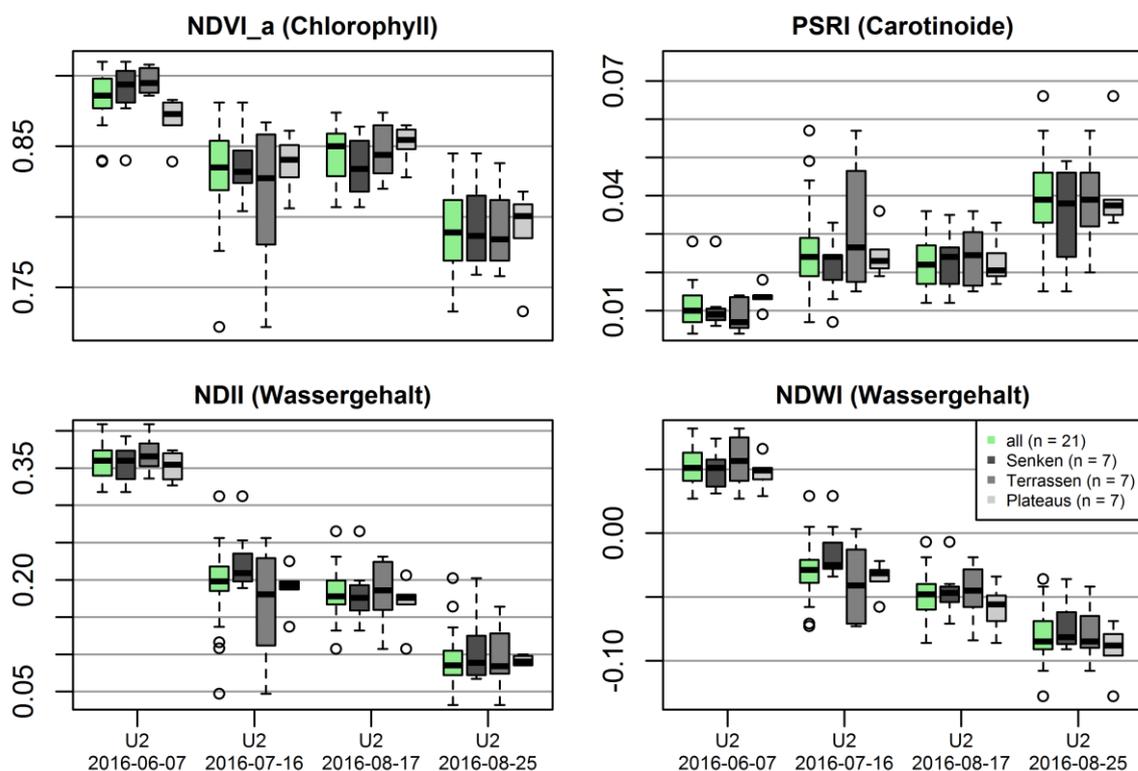


Abbildung 6-19: Veränderung der Pflanzenvitalität im Untersuchungsgebiet 2 für das Jahr 2016, auf Grundlage der Spektrometermessungen und ausgewählten Indizes

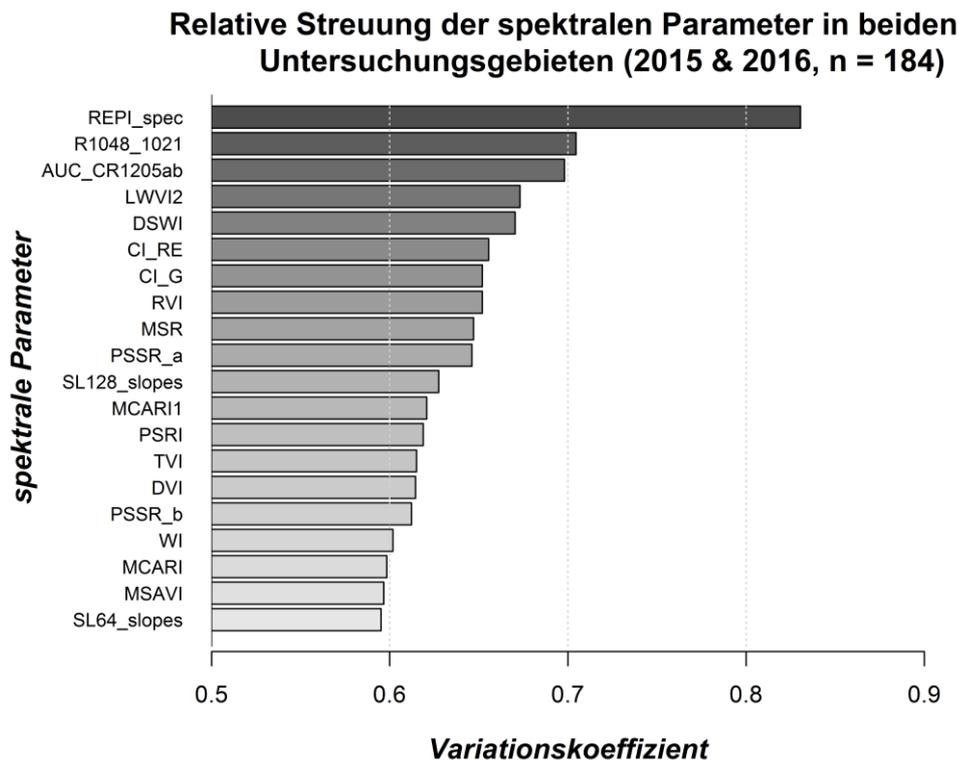


Abbildung 6-20: Rangliste der 20 Parameter mit der höchsten relativen Streuung, auf Grundlage der Spektrometermessungen und unabhängig von den Untersuchungsgebieten und -jahren

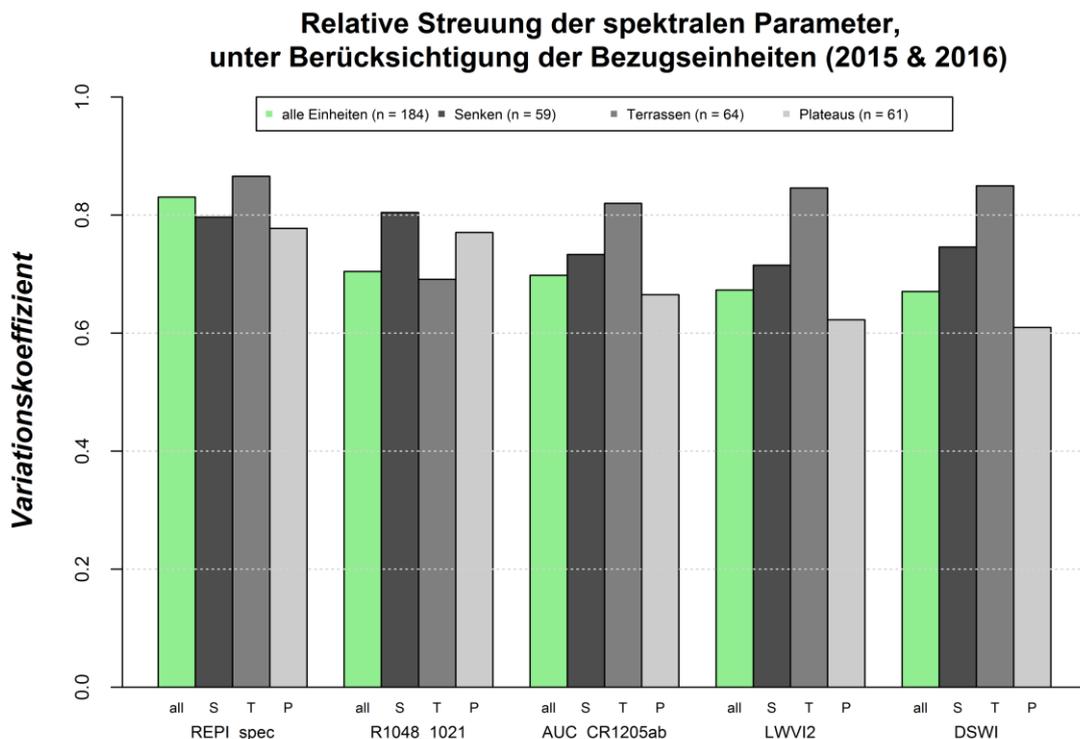


Abbildung 6-21: Darstellung der fünf Parameter mit der höchsten relativen Streuung unter Berücksichtigung der Feinmorphologie, unabhängig von den Untersuchungsgebieten und -jahren

mit 0.87 erreicht. Es folgen die DSWI- und LWVI2-Werte der Terrassen mit einem Coef.var von jeweils 0.85. Markant sind die vergleichsweise niedrigen Variationskoeffizienten beim AUC_CR1205ab, DSWI und LWVI2 auf den Plateaus. Die korrespondierenden Abbildungen für das U1 und U2 können im Anhang unter A6-15 eingesehen werden. Es ist auffallend, dass die Parameter im U1 generell stärker streuen als im U2. Interessanterweise vereinen die Plateaus im ersten Untersuchungsgebiet die höchsten Variationskoeffizienten aller Bezugseinheiten, wohingegen im U2 der Coef.var der Senken beim R1048_1021, REPI_spec und AUC_CR1205ab am höchsten ist (vgl. Abbildung A6-15 oben und unten).

Zuletzt wurde im Rahmen der Vitalitätsanalyse die Trennbarkeit respektive die spektrale Überlagerung der Parameter, welche auf Senken und Plateaus erhoben wurden, mit Hilfe der M-Statistik und der JMD bewertet (vgl. Kapitel 5.2). Die beiden Trennbarkeitsmaße sind in Abbildung 6-22 gegeneinander abgetragen. Zusätzlich sind die 123 spektralen Parameter farblich nach der Art ihrer Berechnung (Abbildung 6-22 oben) und den dabei verwendeten Wellenlängenbereichen (Abbildung 6-22 unten) eingeteilt worden (vgl. Kapitel 5.2 Tabelle 5-1). Beide Trennbarkeitsmaße signalisieren zunächst eine starke Überlagerung der beiden Klassen. Sowohl die Werte der M-Statistik, als auch die Werte der JMD liegen klar unter 1. Dies geht konform mit den zuvor gezeigten Darstellungen zur Charakterisierung der Pflanzenvitalität (e.g. Abbildung 6-14 und 6-17), da hier bereits große Überlagerungen zwischen den morphologischen Einheiten ersichtlich waren. Die statistisch beste Trennung konnte unter Verwendung des MTVI_OSAVI (M-Statistik = 0.56, JMD = 0.41) und des MCARI_MTVI2 (M-Statistik = 0.55, JMD = 0.39) erzielt werden. Beide Parameter können den wellenlängenspezifischen Ratios und Indizes zugeordnet werden und ihre Berechnung stützt sich auf Reflexionswerte des VIS- und NIR-Bereiches. Durch die Verwendung wellenlängenspezifischer Ratios und Indizes kann hinsichtlich der Klassentrennbarkeit kein Mehrwert generiert werden. Das beste Ergebnis dieser Kategorie lieferte der CVI und bei den *Red Edge* spezifischen Indizes schneidet der REIP am besten ab. Die Punkte zu den berechneten Anstiegen innerhalb der Spektren sind in der Abbildung 6-22 überwiegend ähnlich verteilt. Als geeignetster Wellenlängenbereich tritt unmissverständlich die VIS/NIR-Region hervor, wengleich alle Spektralbereiche keine zufriedenstellende Separierung der Senken und Plateaus ermöglichten.

6.4 Akkumulierte Metallkonzentrationen in den Pflanzen

Insgesamt standen 182 Pflanzenproben aus beiden Untersuchungsgebieten zur Verfügung (vgl. Kapitel 4.2.2.1 Tabelle 4-3), aus denen die Metallgehalte extrahiert wurden. Tabelle 6-7 bietet in diesem Kontext einen allgemeinen Auszug über die ermittelten Elementkonzentrationen in der Vegetation. Im Mittel enthielten die Proben 2.93 µg/g As und 0.38 µg/g Cd. Die Maximalwerte für beide Elemente lagen bei 5.63 und 1.05 µg/g. Demgegenüber waren die Gehalte von Ca und K mit Werten zwischen 1111.20 und 10462.20 µg/g beziehungsweise 4093.00 und 34240.00 µg/g in den Pflanzen am höchsten. Weitere hohe Konzentrationen wurden für Fe, Mn und Zn mit Durchschnittswerten von 38.23, 34.23 und 20.09 µg/g abgeleitet, wobei die Werte immer in Relation zu ihrer ökologischen Schädigung eingeordnet werden müssen. Es folgen in absteigender Reihenfolge Cu, Pb und Ni mit Mittelwerten von 4.94, 3.02 und 2.05 µg/g. Auffällig sind die Hg-Konzentrationen, welche einen Wertebereich von

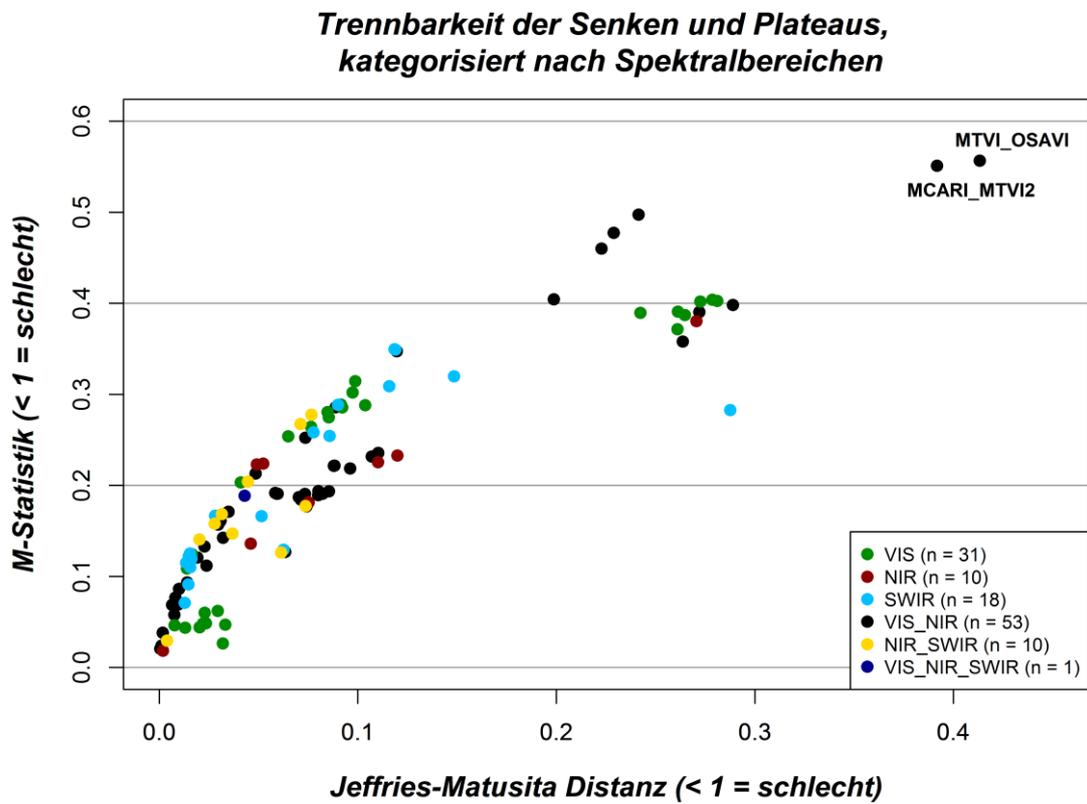
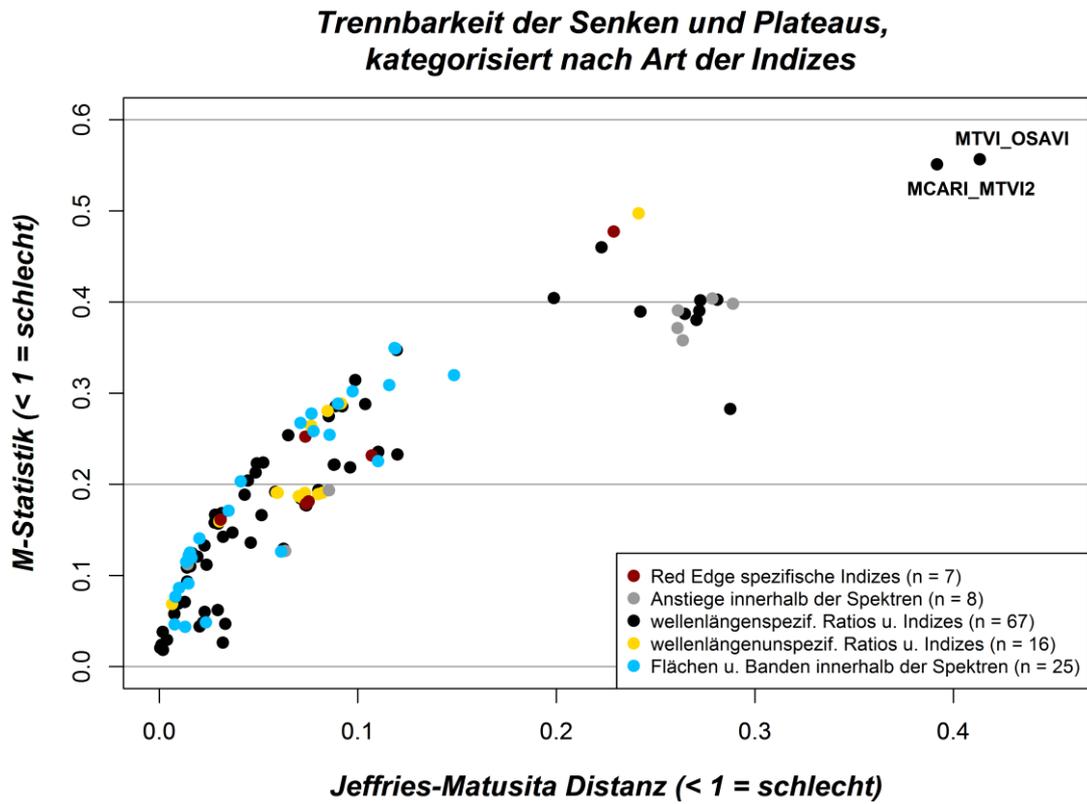


Abbildung 6-22: Trennbarkeit der Senken und Plateaus kategorisiert nach der Art der Indizes (oben) und den verwendeten Spektralbereichen (unten), auf Grundlage der Spektrometermessungen und unabhängig von den Untersuchungsgebieten und -jahren

Tabelle 6-7: Statistiken zu den ermittelten Gesamtgehalten in der Auenvegetation (in µg/g), unabhängig von den Untersuchungsgebieten und -jahren

	As	Ca	Cd	Cu	Fe	Hg	K	Mn	Ni	Pb	Zn
<i>n</i>	182	182	182	182	182	182	182	182	182	182	182
<i>Min</i>	0.12	1111.20	0.27	2.37	18.71	0.01	4093.00	11.54	0.50	0.86	8.28
<i>Max</i>	5.63	10462.20	1.05	14.93	584.84	0.70	34240.00	149.42	7.34	10.71	104.31
<i>Range</i>	5.51	9351.00	0.78	12.56	566.13	0.69	30147.00	137.88	6.84	9.85	96.03
<i>Mean</i>	2.93	2801.75	0.38	4.94	38.23	0.14	14196.00	34.23	2.05	3.02	20.09
<i>Std. dev</i>	0.73	3145.59	0.39	5.57	61.09	0.16	15311.70	39.34	2.25	3.19	22.88
<i>Coef. Var¹</i>	0.25	1366.67	0.09	2.18	75.47	0.12	5204.81	21.57	1.02	1.38	12.04

¹ dimensionslos

0.01 und 0.70 µg/g umfassen. Darauf aufbauend ist in Tabelle 6-8 die Verteilung der Elementkonzentrationen auf den jeweiligen Bezugseinheiten dargestellt. Während bei den Böden die Gesamtgehalte stark an die Morphologie der Untersuchungsgebiete gebunden waren (vgl. Kapitel 6.1 Tabelle 6-3), ist der Einfluss der Geländehöhe bei der Auenvegetation geringer. So ist die durchschnittliche As-Konzentration auf den Senken, Terrassen und Plateaus mit Werten von 2.90 und 2.95 µg/g nahezu identisch. Auf den drei Höhenstufen stimmen auch die Mittelwerte für Cd (0.40, 0.39, 0.38 µg/g), Cu (5.60, 5.52, 5.61 µg/g) und Hg (0.15, 0.16 0.17 µg/g) annähernd überein. Der höchste Cd-Wert wurde zudem mit 1.05 µg/g auf einer Terrasse nachgewiesen. Auf dieser Bezugseinheit waren auch im Mittel die Fe-Konzentrationen mit 66.33 µg/g am höchsten, wobei die entsprechenden Gehalte des Elementes auf den Plateaus wiederum geringer als in den Senken waren. Die durchschnittlichen Ca-Werte der Terrassen und Plateaus sind um mehr als 400 µg/g höher als in den Senken. Im Kontrast dazu akkumuliert die Vegetation der Senken deutlich mehr K als die Vegetation der restlichen Höhenstufen. Ebenso waren in den Proben der Senkenstandorte die mittleren Mn-, Ni- und Zn-Konzentrationen höher. Erwähnenswert sei an dieser Stelle der Maximalwert von Zn, welcher mit 104.31 µg/g beinahe doppelt so groß ist wie der entsprechende Wert der beiden anderen Klassen. Zudem ist die Spannweite der Pb-Gehalte in den Senken am größten (0.86 - 10.62 µg/g). Der Durchschnittswert der Plateaus ist mit 3.32 µg/g jedoch geringfügig höher ausgebildet. Adäquat zum Ergebnisteil der Böden wurden die analysierten Gesamtgehalte der Vegetation normalisiert und unter Berücksichtigung der Probenahmepunkte in Abbildung 6-23 zusammengetragen. Der Wertebereich aller Elemente bewegt sich zwischen 0 und 1, wobei Werte von 0 die jeweiligen Minima und 1 die Maxima repräsentieren. Auch wenn durch die Normalisierung die Elemente einheitlich in einem Plot wiedergegeben werden können, erlaubt

Tabelle 6-8: Statistiken zu den ermittelten Gesamtgehalten in der Vegetation der Bezugseinheiten (in µg/g), unabhängig von den Untersuchungsgebieten und -jahren

	As	Ca	Cd	Cu	Fe	Hg	K	Mn	Ni	Pb	Zn	
Senken	<i>n</i>	62	62	62	62	62	62	62	62	62	62	
	<i>Min</i>	1.06	1111.20	0.29	2.37	18.71	0.01	8889.00	12.20	0.68	0.86	11.47
	<i>Max</i>	4.71	7535.30	0.80	14.93	584.84	0.70	34240.00	149.42	7.34	10.62	104.31
	<i>Mean</i>	2.90	2837.34	0.40	5.60	59.66	0.15	17030.60	44.38	2.62	3.29	25.59
	<i>Std. dev</i>	0.64	1165.46	0.09	2.35	84.26	0.11	5693.73	24.77	1.18	1.51	14.97
Terrassen	<i>n</i>	63	63	63	63	63	63	63	63	63	63	
	<i>Min</i>	0.12	1516.40	0.27	2.68	21.40	0.01	4093.00	11.54	0.50	1.36	9.36
	<i>Max</i>	4.83	10462.20	1.05	12.49	458.75	0.44	31911.00	103.58	4.20	7.70	56.29
	<i>Mean</i>	2.95	3242.37	0.39	5.52	66.33	0.16	14324.62	37.51	2.09	2.97	21.80
	<i>Std. dev</i>	0.73	1508.28	0.10	2.06	85.49	0.11	5078.34	19.19	0.89	1.15	10.80
Plateaus	<i>n</i>	57	57	57	57	57	57	57	57	57	57	
	<i>Min</i>	1.19	1666.70	0.28	2.60	19.91	0.01	6418.00	13.28	0.75	1.27	8.28
	<i>Max</i>	5.63	8996.50	0.58	12.32	254.31	0.57	26556.00	114.88	4.61	10.71	51.43
	<i>Mean</i>	2.95	3373.89	0.38	5.61	56.87	0.17	14533.02	35.88	2.03	3.32	21.12
	<i>Std. dev</i>	0.83	1367.47	0.07	2.14	50.31	0.14	4325.36	19.58	0.85	1.47	9.11

diese Darstellung keine elementübergreifenden Vergleiche. Die gleichmäßige Akkumulation von As auf den Senken, Terrassen und Plateaus kann anhand der Boxplots in Abbildung 6-23 sehr gut nachvollzogen werden. Ein ebenfalls sehr homogenes Bild ergibt sich hinsichtlich der Verteilung der Cu-Konzentrationen. Der Median der Senken liegt für Ca und Fe unterhalb des Lageparameters der höher gelegenen Standorte. Ferner sind bei den Plots für Fe zahlreiche Ausreißer erkennbar. Für Cd ist der Zentralwert auf den Terrassen am höchsten, wenngleich der Interquartilsabstand auf den beiden anderen Bezugseinheiten größer ist. Die angesprochene höhere Akkumulation von K und Ni der Senkenvegetation ist offensichtlich. Hier überschreitet der Median in einzelnen Fällen das oberste Quartil der anderen Klassen. Bei Mn und Zn sind die Abweichungen geringer und für Hg ist der Median der Terrassen größer als die

Mediane anderer Bezugseinheiten. Neben Ca repräsentiert Pb das einzige Metall, dessen Zentralwert auf den Plateaus am höchsten ist. Zusätzlich zu dieser simplifizierten Darstellung der Gesamtgehalte können die Originalwerte der Elemente im Anhang der Arbeit unter A6-16 eingesehen werden.

Einen differenzierteren Blick auf die Belastung der Vegetation innerhalb der beiden Untersuchungsgebiete ermöglicht die Tabelle 6-9. In dieser sind die analysierten Gesamtgehalte von As, Cd, Cu, Hg und Pb enthalten und nach Untersuchungsgebiete und Probenahmepunkte geordnet. Generell konnten auf der zweiten Testfläche mehr Pflanzenproben entnommen werden. Die mittleren As-Konzentrationen sind im U2 auf jeder morphologischen Klasse höher ausgeprägt als im U1. Dabei wurde der höchste As-Wert im U1 mit 4.40 $\mu\text{g/g}$ auf einer Terrasse und im U2 mit 5.63 $\mu\text{g/g}$ auf einem Plateau bestätigt. Die Aufnahme von Cd durch die Vegetation ist auf beiden Standorten ähnlich. Derweil sich die Durchschnittswerte auf den Terrassen und Plateaus noch geringfügig unterscheiden, ist der Mean in den Senken mit 0.40 $\mu\text{g/g}$ konvergent. Eine merklich höhere Cu-Belastung existiert in der Vegetation des U2. Die größten Abweichungen waren dabei auf den Terrassen evident, wo die Pflanzen des U1 im Schnitt 1.62 $\mu\text{g/g}$ weniger Cu akkumulierten. Die Differenz auf den Plateaus beträgt 1.49 $\mu\text{g/g}$. Enorme Unterschiede ließen sich auch bei den Hg-Werten feststellen. Der Maximalwert der Senken des U2 (0.70 $\mu\text{g/g}$) überschreitet den korrespondierenden Wert des U1 (0.16 $\mu\text{g/g}$) um mehr als das Vierfache. Folglich ist der Mean im U2 mit 0.18 $\mu\text{g/g}$ auch doppelt so groß wie der Durchschnittswert im U1 (0.09 $\mu\text{g/g}$). Innerhalb der beiden Untersuchungsgebiete

Gesamtgehalte auf den Bezugseinheiten (Vegetation, 2015 & 2016, U1 & U2)

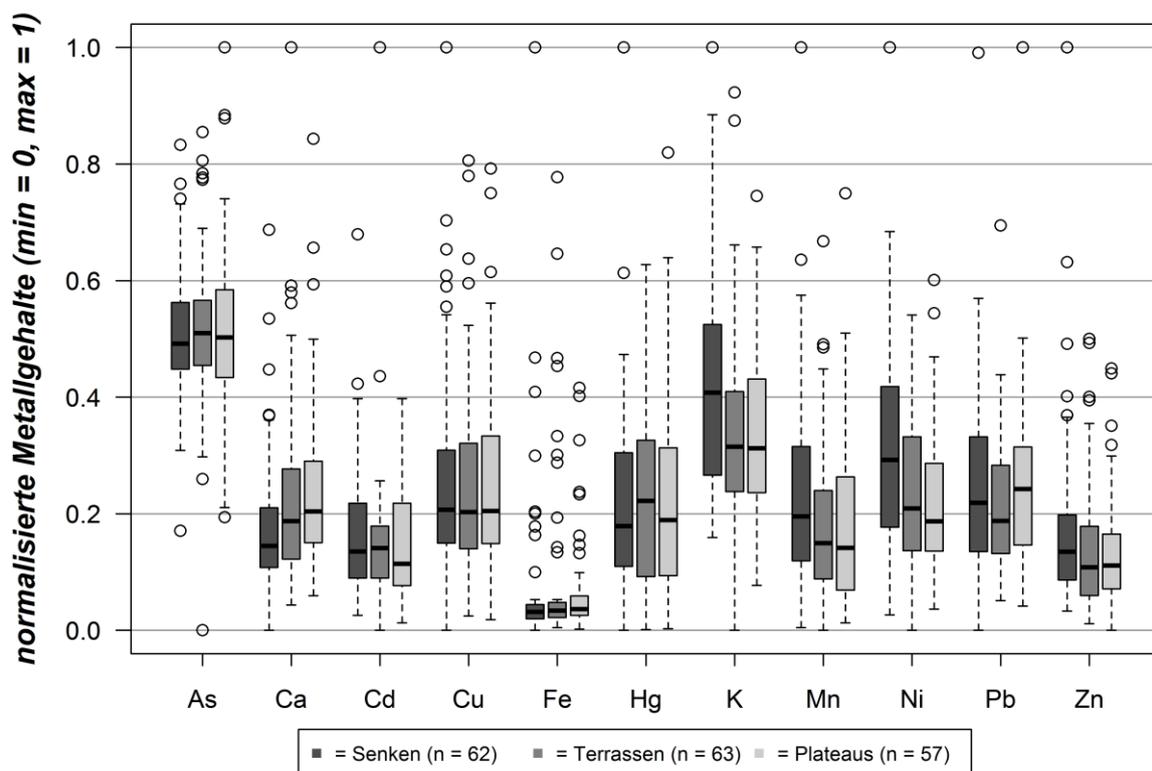


Abbildung 6-23: Gegenüberstellung der normalisierten Gesamtgehalte in der Vegetation der Bezugseinheiten, unabhängig von den Untersuchungsgebieten und -jahren

6 Ergebnisse

Tabelle 6-9: Statistiken zu ausgewählten Gesamtgehalten in der Vegetation der Bezugseinheiten (in µg/g) beider Untersuchungsgebiete, unabhängig von den Untersuchungsjahren

	As	Cd	Cu	Hg	Pb	
	U1 / U2	U1 / U2	U1 / U2	U1 / U2	U1 / U2	
Senken	<i>n</i>	20 / 42	20 / 42	20 / 42	20 / 42	
	<i>Min</i>	1.06 / 1.82	0.29 / 0.29	2.91 / 2.37	0.01 / 0.01	0.86 / 1.56
	<i>Max</i>	3.27 / 4.71	0.58 / 0.80	7.68 / 14.93	0.16 / 0.70	10.62 / 6.47
	<i>Mean</i>	2.67 / 3.01	0.40 / 0.40	5.03 / 5.87	0.09 / 0.18	3.43 / 3.23
	<i>Std. dev</i>	0.52 / 0.67	0.07 / 0.10	1.28 / 2.69	0.05 / 0.13	2.21 / 1.06
Terrassen	<i>n</i>	18 / 45	18 / 45	18 / 45	18 / 45	
	<i>Min</i>	1.99 / 0.12	0.27 / 0.29	2.68 / 2.78	0.01 / 0.01	1.36 / 1.42
	<i>Max</i>	4.40 / 4.83	0.43 / 1.05	6.59 / 12.49	0.20 / 0.44	4.54 / 7.70
	<i>Mean</i>	2.94 / 2.96	0.37 / 0.39	4.36 / 5.98	0.11 / 0.18	2.85 / 3.02
	<i>Std. dev</i>	0.54 / 0.80	0.05 / 0.12	0.89 / 2.22	0.06 / 0.12	0.95 / 1.23
Plateaus	<i>n</i>	18 / 39	18 / 39	18 / 39	18 / 39	
	<i>Min</i>	1.28 / 1.19	0.32 / 0.28	2.97 / 2.60	0.01 / 0.01	1.27 / 1.38
	<i>Max</i>	3.42 / 5.63	0.58 / 0.54	7.38 / 12.32	0.36 / 0.57	5.28 / 10.71
	<i>Mean</i>	2.76 / 3.04	0.42 / 0.37	4.59 / 6.08	0.12 / 0.19	2.89 / 3.51
	<i>Std. dev</i>	0.47 / 0.94	0.07 / 0.07	1.06 / 2.35	0.08 / 0.15	0.97 / 1.62

weichen die mittleren Hg-Konzentrationen auf den übrigen Bezugseinheiten nur minimal voneinander ab. Berücksichtigt man alle in der Tabelle enthaltenen Elemente, so ist einzig in den Senken des U1 die Std.dev für Pb mit 2.21 µg/g größer, als der Vergleichswert der zweiten Testfläche. Hier beträgt der Wert für das Streuungsmaß 1.06 µg/g. Die erläuterten Relationen sind in Abbildung 6-24 auf Grundlage der normalisierten Gesamtgehalte der Elemente nochmals visualisiert. Während für As der Median der Senken im U1 den kleinsten Wert aller Probenahmepunkte vereinigt, ist er im U2 auf den Senken am größten. Unverkennbar ist in dem Gebiet eine klare Abnahme bei den Medianwerten mit ansteigender Geländehöhe. Dies ist bei den verbleibenden Elementen nicht der Fall. Bei Cd überschreitet der Median der Plateaus im U1 das oberste Quartil der Senken. Bemerkenswert ist, dass demgegenüber der Zen-

tralwert der Plateaus im U2 kleiner ausfällt, als auf den niedriger gelegenen Standorten. Wie bei As und Cd zuvor bestehen zwischen den Untersuchungsgebieten auch für Cu markante gegenteilige Tendenzen. So nehmen die Konzentrationen des Elementes, ausgehend von den Senken, im U2 stetig zu, wohingegen der Median der gleichen Bezugseinheit im U1 am größten ist. Die Boxplots veranschaulichen zudem die zuvor geschilderte höhere Cu-Belastung im U2. Dies stimmt auch mit den Hg-Werten überein, bei denen die Gesamtgehalte der zweiten Testfläche auch eine erheblich größere Spannweite aufweisen. Pb hingegen repräsentiert bei der in Abbildung 6-24 wiedergegebenen Auswahl das einzige Element, bei welchem der Median der Plateaus in beiden Untersuchungsgebieten am höchsten ist. Im Verhältnis zu den vorhergehenden Gehalten wirkt die Verteilung des Elementes im U1 und U2 homogener. Im Anhang der Arbeit können die Plots der nicht-normalisierten Gesamtgehalte für alle Elemente eingesehen werden (vgl. Abbildung A6-17). Wie schon bei den Böden in Kapitel 6.1 ersichtlich, variieren die ermittelten Gesamtgehalte zwischen den beiden Auenstandorten erheblich. Der Einfluss der Feinmorphologie ist jedoch geringer. Etwaige Ursachen hierfür werden im Diskussionsteil der Arbeit betrachtet. Abschließend sei auf die Abbildungen A6-18, A6-19, A6-20 und A6-21 verwiesen, in denen detailliert die normalisierten Gesamtgehalte der Auenböden und der -vegetation für jede Bezugseinheit, jedes Untersuchungsgebiet und jedes Untersuchungs-jahr nochmals aufgeschlüsselt sind. Die unterschiedlichen Jahre der Probenahme sind farblich gekennzeichnet und die jeweilige Probenanzahl ist in den Grafiken ebenfalls enthalten.

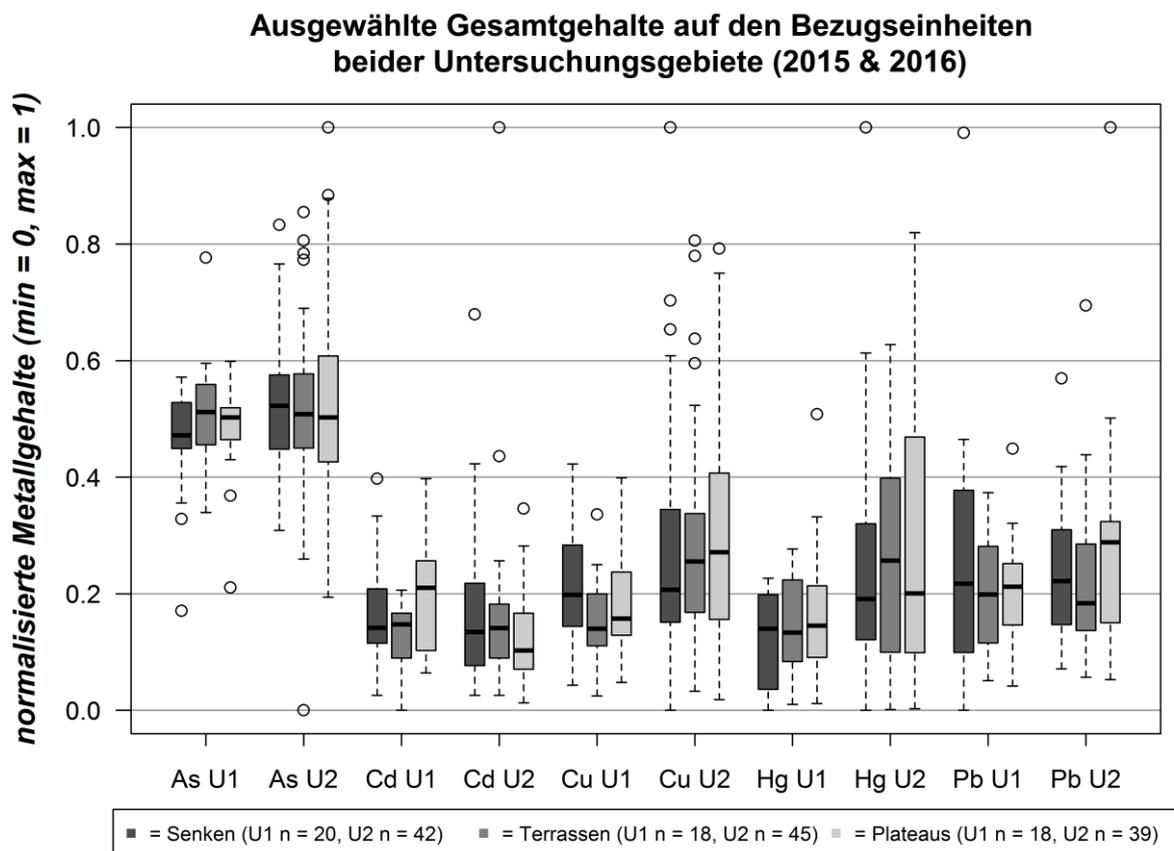


Abbildung 6-24: Gegenüberstellung ausgewählter normalisierter Gesamtgehalte in der Vegetation der Bezugseinheiten beider Untersuchungsgebiete, unabhängig von den Untersuchungsjahren

6.5 Abschätzung der Metallgehalte in der Auenv egetation

Zur Abschätzung der Metallgehalte wurden die, aus den im Gelände aufgezeichneten Vegetationsspektren abgeleiteten, Spektralparameter eingesetzt (vgl. Kapitel 5.2 Tabelle 5-1). Diese wurden zunächst elementspezifisch mittels RF selektiert und in zwei Modellansätze implementiert (MLR, SVM, SVMtune), wobei Modelldurchläufe mit diversen Setups angewandt wurden. Wie in Tabelle 6-10 veranschaulicht, wurde die Prognosefähigkeit der Modelle mit insgesamt acht unterschiedlichen Setups getestet. Neben der Anzahl an Eingangsdaten und deren Aufteilung in Kalibrierungs- und Validierungsdaten ist eine Beschreibung des Modellinputs in der Tabelle enthalten. Im Wesentlichen sind die Setups durch eine abnehmende Anzahl an Proben- und Messpaare charakterisiert, die aus verschiedenen Aufnahmezeitpunkten und Untersuchungsjahren resultiert. Folglich wurden für jedes Element drei Modelle mit jeweils acht Setups berücksichtigt, was 24 Modelldurchläufen entspricht.

Die Güte der Kalibrierung und Validierung aller Durchläufe ist, unabhängig von der Art des genutzten Modells, für die ermittelten Gesamtgehalte in Abbildung 6-25 anhand der abgeleiteten R^2 -Werte dargestellt. Es ist ersichtlich, dass die Resultate der Kalibrierung und Validierung stark voneinander abweichen. Unter Berücksichtigung des Medians wurden für K, Mn und Ni die besten Kalibrierungsergebnisse erzielt. Der höchste R^2 -Einzelwert wurde bei der Kalibrierung mit 0.99 für Fe generiert. Weitere gute Modellergebnisse wurden mit vereinzelt R^2 -Werten von über 0.80 für Cd, Mn, Ni und Zn erzielt. Demgegenüber lagen alle R^2 -Werte für As und Hg unter 0.60. Betrachtet man die Resultate der Validierung, so fällt die Modellgüte deutlich ab. Hier ist der Median für Pb und Cd am höchsten ausgeprägt. Für die

Güte aller Modelle zur Abschätzung der Metallgehalte

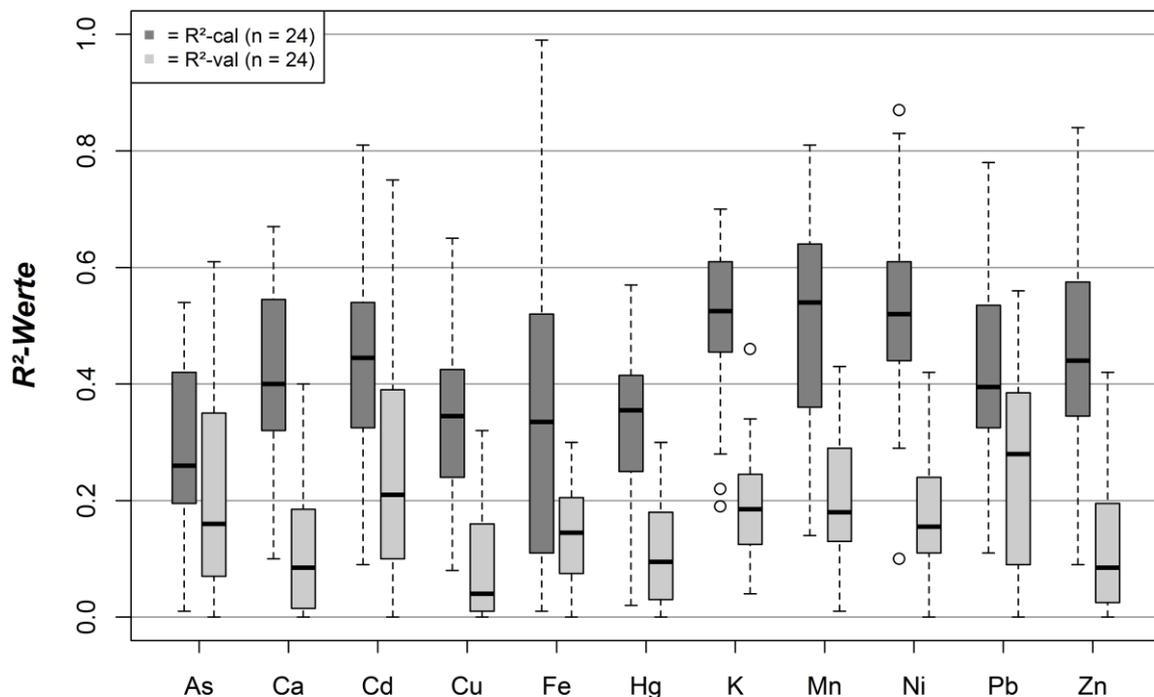


Abbildung 6-25: Güte der Kalibrierung und Validierung bei der Abschätzung der Gesamtgehalte in der Vegetation, unabhängig von der Art der Modelle

Tabelle 6-10: Übersicht zu den angewandten Modellsetups zur Abschätzung der Gesamtgehalte in der Auenvegetation

Modellsetup	Beschreibung des Modellinput*	Input gesamt (n)	Input Kalibrierung (n_{cal})	Input Validierung (n_{val})
A	alle Messungen in 2015 & 2016	142	95	47
B	alle Messungen in 2015 & 2016, ohne 2016-07-16	121	81	40
C	alle Messungen in U2, 2015 & 2016	105	70	35
D	alle Messungen in 2015 & 2016, ohne 2016-06-07 & 2016-07-16	100	67	33
E	alle Messungen in 2016	84	56	28
F	alle Messungen in 2015 & 2016 im August	79	53	26
G	alle Messungen in U2, 2016	63	42	21
H	alle Messungen in 2015	58	39	19

* Vergleich Kapitel 5.3 Tabelle 5-2

beiden Elemente liegt das obere Quartil knapp unter 0.40. Bei allen anderen Elementen unterschreiten die Zentralwerte ein R^2 von 0.20 und für nahezu jedes Element wurden bei einzelnen Modelldurchläufen R^2 -Werte von 0.00 erzeugt. Auffällig ist, dass für Ca, Cu, Hg und Zn 50 % der Werte des Bestimmtheitsmaßes unter 0.10 liegen.

Neben diesem allgemeinen Überblick ist die Verteilung der R^2 -Werte innerhalb der einzelnen Modellsetups bedeutsam. Tabelle 6-11 bietet in diesem Kontext eine detaillierte Übersicht darüber, wie der Determinationskoeffizient in den jeweiligen MLR-, SVM- und SVMtune-Modellen und Setups der Kalibrierung ausgebildet ist. Für jede Spalte sind die niedrigsten Werte rot und die höchsten Werte blau gekennzeichnet. Mit vereinzelt Ausnahmen generierten die optimierten SVM- (SVMtune) Modelle die besten Ergebnisse. Betrachtet man das Setup mit den meisten Eingangsdaten (A), so wurden vergleichsweise gute Resultate für Ca ($R^2 = 0.53$), K ($R^2 = 0.66$) und Zn ($R^2 = 0.63$) ermittelt. Für Mn wurde bei allen Modelldurchläufen mit Hilfe des zweiten Setups die beste Vorhersage für das Element getroffen ($R^2 = 0.81$). Unter Verwendung von Setup C, bei dem alle Messungen innerhalb des zweiten Untersuchungsgebietes genutzt wurden, lagen die R^2 -Werte der SVMtune-Modelle für Cd, Fe, Mn, Pb und Zn über 0.63. Zudem wurde für Cd modellübergreifend das beste Resultat erreicht ($R^2 = 0.81$). Die Güte der MLR-Modelle war für alle angesprochenen Elemente deutlich schlechter. Tendenziell treten mehr blaue Farben und somit bessere Modellergebnisse im unteren Bereich der Tabelle 6-11 auf. Mit Setup D, in welchem 100 Analysewerte und Messun-

gen zur Verfügung standen, lag das Bestimmtheitsmaß der optimalen Modelle für Ca, Fe, K, Mn, Ni und Pb über 0.55. Mit maximalen R^2 -Werten von 0.38 bis 0.44 waren die Modelle für die Gesamtgehalte von As, Hg und Zn weniger robust. Alle Messungen aus dem Jahr 2016 wurden in Setup E berücksichtigt. Die daraus entwickelten SVMtune-Modelle bilden für Ca, Cu und Hg zugleich die Streuung der Daten am besten ab ($R^2 = 0.67$, $R^2 = 0.65$, $R^2 = 0.57$). Daneben war die Qualität der Ergebnisse mit denen der nicht optimierten SVM-Modelle vergleichbar. Eine gute Übereinstimmung zwischen den gemessenen und geschätzten Metallgehalten zeigte sich auch bei den Elementen Cd, K, Pb und Zn ($R^2 \geq 0.54$). Unter Setup F wurden alle im August erhobenen Daten zusammengefasst, was einem Modellinput von 79 Parametern entspricht. Hier sind die R^2 -Werte für Fe, K und Mn höher als 0.70. Beim vorletzten Modellsetup erreichte der Determinationskoeffizient für sechs Elemente (As, Ca, Cd, Hg, K, Zn) Werte von ≥ 0.53 . Das höchste R^2 existierte mit 0.84 für Zn, was zugleich das beste Ergebnis für das Element repräsentiert. Im letzten Setup, welches sich durch die wenigsten Inputdaten auszeichnet ($n = 58$), wurde die Anwendbarkeit der Messungen aus dem ersten Untersuchungsjahr geprüft. Ein nahezu perfekt kalibriertes SVMtune-Modell wurde für Fe erzeugt ($R^2 = 0.99$). Auffällig ist, dass für Ni alle drei Modellansätze mit R^2 -Werten von 0.70, 0.83 und 0.87 die beste Modellgüte für das Element darstellen. Im Vergleich zu den vorhergehenden Setups fällt die Qualität der Hg- und K-Modelle deutlich ab. In diesem Zusammenhang werden in Abbildung 6-26 die optimalen Kalibrierungsergebnisse für die Gesamtgehalte der Elemente As, Cd, Hg und Pb wiedergegeben. Die Plots enthalten neben dem zugrundeliegenden Modellsetup auch die ausgewählten Spektralparameter. Es wird ersichtlich, dass Flächen und Banden innerhalb der Vegetationsspektren mehrfach als Input selektiert und entsprechende Merkmale um 983, 2103 und 2304 nm häufig in die Modelldurchläufe integriert wurden. Daneben variiert die Anzahl an Parametern zwischen den einzelnen Elementen merklich. Während etwa, wie in Abbildung 6-26 visualisiert, für Cd neun Spektralparameter als notwendige Variablen ausgewiesen wurden, sind für die Modelle von Hg und Pb vier Parameter weniger benötigt worden. Weiterhin schwankt die Anzahl an eliminierten Ausreißer-Werten bei den Gesamtgehalten. So wurden bei As fünfmal mehr Analysewerte bei der Modellentwicklung ausselektiert als bei Pb, obwohl für die Plots beider Elemente das gleiche Setup und somit auch der identische Pool an Eingangsdaten genutzt wurde.

Im nächsten Schritt wurden die Setups der Kalibrierung auf die Validierungsdaten angewendet. Die daraus generierten 264 Modellergebnisse beziehungsweise -genauigkeiten können aus Tabelle 6-12 entnommen werden, wobei das Farbschema den zuvor beschriebenen Resultaten der Kalibrierung entspricht. Unter Verwendung aller Analyse- und Messpaare konnten vergleichsweise gute Übereinstimmungen für Mn und Pb erzielt werden. Im Detail übertrifft bei Mn das R^2 des MLR-Modells mit 0.35 die korrespondierenden Werte der SVM-Verfahren. Bei Pb war die Performance des optimierten SVM-Modells mit 0.42 am besten. Für die übrigen Elemente waren die Ergebnisse sichtbar schlechter und bei Ca, Fe, Ni und Zn war der Determinationskoeffizient für keines der drei Modelle größer als 0.08. Für die ersten drei Gehalte ist eine leichte Verbesserung der Modellgüte bei Modellsetup B erkennbar, wohingegen bei Zn das R^2 der beiden SVM-Modelle auf 0.01 fällt. Die Bestimmtheitsmaße der SVM-Verfahren sind bei Pb ähnlich ausgeprägt wie bei Setup A zuvor. Die Aussagekraft der Modelle für Zn konnte mit dem Setup C deutlich gesteigert werden. Ein R^2 von 0.42 bei

Tabelle 6-11: Vergleich der Kalibrierungsergebnisse zur Abschätzung der Gesamtgehalte in der Vegetation, unter Berücksichtigung aller Modellschätzungen und Modellarten

Modellsetup*	Modellgüte (R^2) der Kalibrierung										
	As	Ca	Cd	Cu	Fe	Hg	K	Mn	Ni	Pb	Zn
A_MLR	0.11	0.25	0.09	0.16	0.01	0.23	0.48	0.28	0.34	0.15	0.45
A_SVM	0.15	0.47	0.43	0.29	0.07	0.31	0.59	0.55	0.54	0.38	0.56
A_SVMtune	0.22	0.53	0.46	0.34	0.19	0.35	0.66	0.59	0.56	0.42	0.63
B_MLR	0.17	0.32	0.18	0.19	0.01	0.22	0.22	0.34	0.42	0.11	0.27
B_SVM	0.24	0.40	0.53	0.36	0.07	0.32	0.45	0.63	0.57	0.37	0.38
B_SVMtune	0.25	0.65	0.58	0.39	0.15	0.38	0.58	0.81	0.60	0.38	0.48
C_MLR	0.27	0.32	0.42	0.22	0.09	0.15	0.46	0.24	0.29	0.25	0.43
C_SVM	0.45	0.39	0.59	0.28	0.47	0.36	0.60	0.57	0.48	0.59	0.54
C_SVMtune	0.54	0.40	0.81	0.35	0.63	0.41	0.54	0.63	0.48	0.78	0.65
D_MLR	0.07	0.17	0.22	0.23	0.10	0.14	0.28	0.46	0.40	0.20	0.15
D_SVM	0.38	0.42	0.41	0.43	0.45	0.36	0.51	0.65	0.56	0.49	0.31
D_SVMtune	0.44	0.61	0.51	0.47	0.81	0.40	0.63	0.67	0.66	0.55	0.38
E_MLR	0.31	0.36	0.32	0.39	0.12	0.44	0.49	0.14	0.29	0.26	0.35
E_SVM	0.40	0.61	0.52	0.57	0.23	0.52	0.59	0.31	0.52	0.38	0.40
E_SVMtune	0.46	0.67	0.58	0.65	0.38	0.57	0.60	0.38	0.52	0.54	0.59
F_MLR	0.12	0.11	0.22	0.08	0.52	0.12	0.46	0.53	0.48	0.39	0.09
F_SVM	0.23	0.24	0.33	0.23	0.65	0.34	0.62	0.73	0.62	0.53	0.27
F_SVMtune	0.25	0.39	0.42	0.25	0.81	0.50	0.70	0.78	0.69	0.59	0.34
G_MLR	0.25	0.41	0.36	0.30	0.29	0.27	0.51	0.15	0.10	0.30	0.54
G_SVM	0.44	0.55	0.52	0.42	0.40	0.42	0.69	0.41	0.46	0.35	0.67
G_SVMtune	0.53	0.54	0.62	0.36	0.46	0.56	0.66	0.39	0.47	0.53	0.84
H_MLR	0.01	0.10	0.26	0.30	0.13	0.02	0.19	0.40	0.70	0.40	0.38
H_SVM	0.39	0.39	0.55	0.44	0.52	0.30	0.34	0.59	0.83	0.48	0.55
H_SVMtune	0.34	0.62	0.47	0.48	0.99	0.38	0.33	0.67	0.87	0.55	0.59

* Vergleich Tabelle 6-10

SVMtune repräsentiert zugleich das beste Ergebnis für das Element. Selbiges gilt für Hg, wenn das SVM-Modell betrachtet wird ($R^2 = 0.30$). Gleichzeitig wurden bei sechs Durchläufen mit Setup C R^2 -Werte ≤ 0.01 sichtbar. Das höchste Bestimmtheitsmaß für Fe wurde mit Hilfe von Setup D generiert ($R^2 = 0.30$). Die Resultate für As, Ca, Cu, Hg und Zn sind hingegen durchweg unbefriedigend und durch R^2 -Werte zwischen 0.00 und 0.15 gekennzeichnet.

6 Ergebnisse

Mit einer geringeren Anzahl an Eingangsdaten konnten für einzelne Gesamtgehalte zunehmend bessere Prognosen getroffen werden. In Setup E wurden 84 Datenpaare als Input genutzt und im Verhältnis zu den vorhergehenden Modellen waren die Differenzen zwischen den gemessenen und abgeschätzten Werten für As und Pb geringer. Demgegenüber stehen sehr niedrige R^2 -Werte für Cu und K. Generell weichen die Ergebnisse signifikant von den eingangs erläuterten Resultaten der Kalibrierung ab. Die Qualität der auf Setup F gestützten Modelle, in denen alle Augustmessungen vereinigt wurden, ist für Hg und Ca am besten, wobei für kein Metall R^2 -Werte ≥ 0.28 ermittelt wurden. Ungenügende Ergebnisse sind zudem für Pb und Zn evident. Eine unverkennbare Verbesserung der Modellgüte konnte durch die Daten des Modellsetup G, welches alle Messungen im zweiten Untersuchungsgebiet im Jahr 2016 beinhaltet, erreicht werden. Für As, Cd und Pb ist der beste Determinationskoeffizient ≥ 0.56 . Neben As und Pb wurden auch für Cu ($R^2 = 0.32$), K ($R^2 = 0.46$) und Ni ($R^2 = 0.42$) die besten Resultate aller Modelldurchläufe mit dem Setup generiert. Während die Ergebnisse

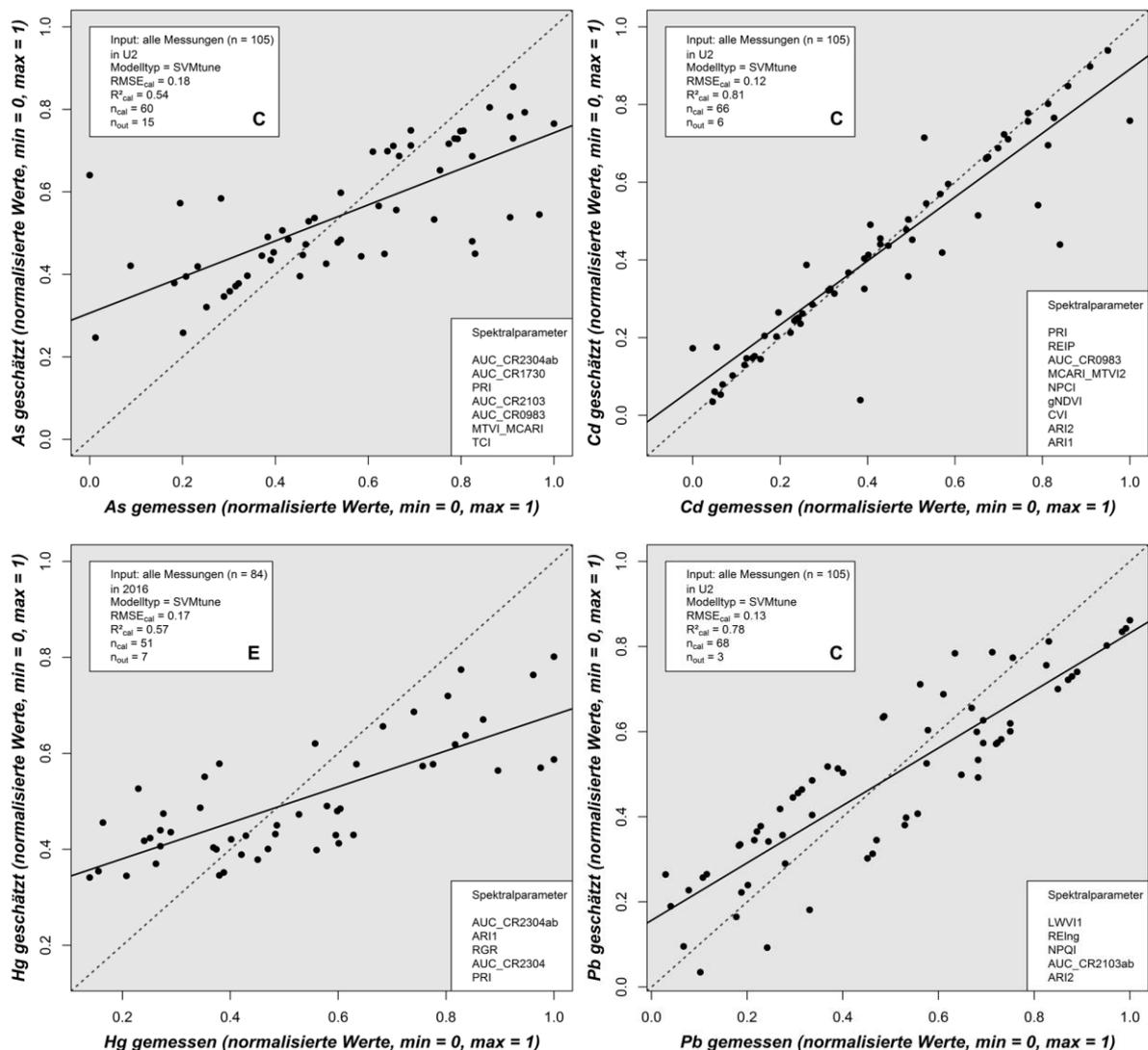


Abbildung 6-26: Optimale Kalibrierungsergebnisse für die Gesamtgehalte der Elemente As, Cd, Hg und Pb

Tabelle 6-12: Vergleich der Validierungsergebnisse zur Abschätzung der Gesamtgehalte in der Vegetation, unter Berücksichtigung aller Modellschätzungen und Modellarten

Modellsetup*	Modellgüte (R^2) der Validierung										
	As	Ca	Cd	Cu	Fe	Hg	K	Mn	Ni	Pb	Zn
A_MLR	0.11	0.08	0.10	0.01	0.05	0.03	0.15	0.35	0.01	0.34	0.08
A_SVM	0.24	0.07	0.19	0.16	0.07	0.14	0.16	0.34	0.04	0.38	0.03
A_SVMtune	0.22	0.08	0.18	0.18	0.08	0.16	0.17	0.32	0.05	0.32	0.02
B_MLR	0.12	0.03	0.00	0.11	0.10	0.03	0.26	0.20	0.13	0.23	0.14
B_SVM	0.08	0.17	0.14	0.04	0.10	0.06	0.21	0.23	0.16	0.35	0.01
B_SVMtune	0.09	0.23	0.10	0.03	0.16	0.08	0.25	0.23	0.15	0.31	0.01
C_MLR	0.05	0.01	0.03	0.00	0.00	0.04	0.10	0.17	0.00	0.22	0.33
C_SVM	0.20	0.00	0.21	0.24	0.13	0.30	0.28	0.12	0.19	0.28	0.37
C_SVMtune	0.07	0.01	0.27	0.17	0.12	0.11	0.18	0.17	0.14	0.39	0.42
D_MLR	0.07	0.12	0.00	0.01	0.19	0.01	0.19	0.18	0.21	0.15	0.06
D_SVM	0.00	0.15	0.31	0.04	0.24	0.03	0.27	0.31	0.38	0.19	0.00
D_SVMtune	0.00	0.03	0.23	0.07	0.30	0.07	0.34	0.27	0.39	0.02	0.06
E_MLR	0.26	0.02	0.08	0.02	0.03	0.08	0.04	0.04	0.33	0.42	0.08
E_SVM	0.35	0.13	0.27	0.01	0.22	0.27	0.09	0.18	0.30	0.55	0.19
E_SVMtune	0.35	0.14	0.26	0.01	0.21	0.19	0.06	0.15	0.24	0.43	0.11
F_MLR	0.08	0.20	0.02	0.03	0.10	0.16	0.08	0.09	0.10	0.00	0.05
F_SVM	0.06	0.23	0.20	0.13	0.16	0.28	0.20	0.19	0.11	0.07	0.00
F_SVMtune	0.25	0.09	0.21	0.04	0.18	0.17	0.20	0.17	0.13	0.04	0.02
G_MLR	0.37	0.01	0.47	0.16	0.21	0.17	0.18	0.01	0.20	0.47	0.20
G_SVM	0.61	0.00	0.63	0.32	0.20	0.21	0.46	0.02	0.24	0.56	0.39
G_SVMtune	0.58	0.01	0.60	0.26	0.17	0.28	0.24	0.02	0.42	0.28	0.24
H_MLR	0.03	0.33	0.75	0.01	0.27	0.02	0.15	0.14	0.20	0.03	0.09
H_SVM	0.38	0.40	0.61	0.00	0.02	0.00	0.21	0.41	0.14	0.07	0.12
H_SVMtune	0.55	0.35	0.55	0.00	0.04	0.00	0.10	0.43	0.11	0.11	0.15

* Vergleich Tabelle 6-10

für Cu, Hg und Pb bei den letzten Modelldurchläufen wieder merklich schlechter ausfallen, repräsentieren die R^2 -Werte für Cd und Mn die besten Werte aller getesteten Setups für beide Elemente. Interessanterweise liefert das MLR-Modell für Cd den höchsten R^2 -Wert aller Gesamtgehalte und Modellsetups. Diesbezüglich sind in Abbildung 6-27 die optimalen Validierungsergebnisse für die potentiell toxisch wirkenden Metalle As, Cd, Hg und Pb enthalten.

6 Ergebnisse

Bezogen auf die Anzahl des Modellinputs wurden für den Großteil der Elemente die bestmöglichen Ergebnisse mit weniger komplexen Modellen abgeleitet, was sich auch in der Anzahl der benötigten Spektralparameter widerspiegelt. So nutzt etwa das beste Modell für Pb lediglich den LWV11 und den R1048_1021. Dies steht in Kontrast zu den vorherigen Plots der Kalibrierung. Gleichzeitig sind Flächenanteile und Bandentiefpunkte auch in anderen Modellsetups bedeutsam. So können beispielsweise für As und dem Setup G vier von sechs Parametern der entsprechenden Kategorie zugeordnet werden. In dem idealen Validierungsmodell für Hg wird die Hälfte der Variablen durch Flächenberechnungen repräsentiert. Da im Rahmen der Ergebnisdarstellung lediglich eine Auswahl an Modellergebnissen präsentiert werden kann, können für alle anderen Elemente die optimalen Kalibrierungs- und Validierungsergebnisse im Anhang der Arbeit eingesehen werden (vgl. Abbildung A6-22, A6-23, A6-24, A6-25). Ergänzend sind in A6-26 und A6-27 die Resultate für As, Cd, Hg und Pb unter Verwendung des umfangreichsten Modellsetups (A) gegenübergestellt.

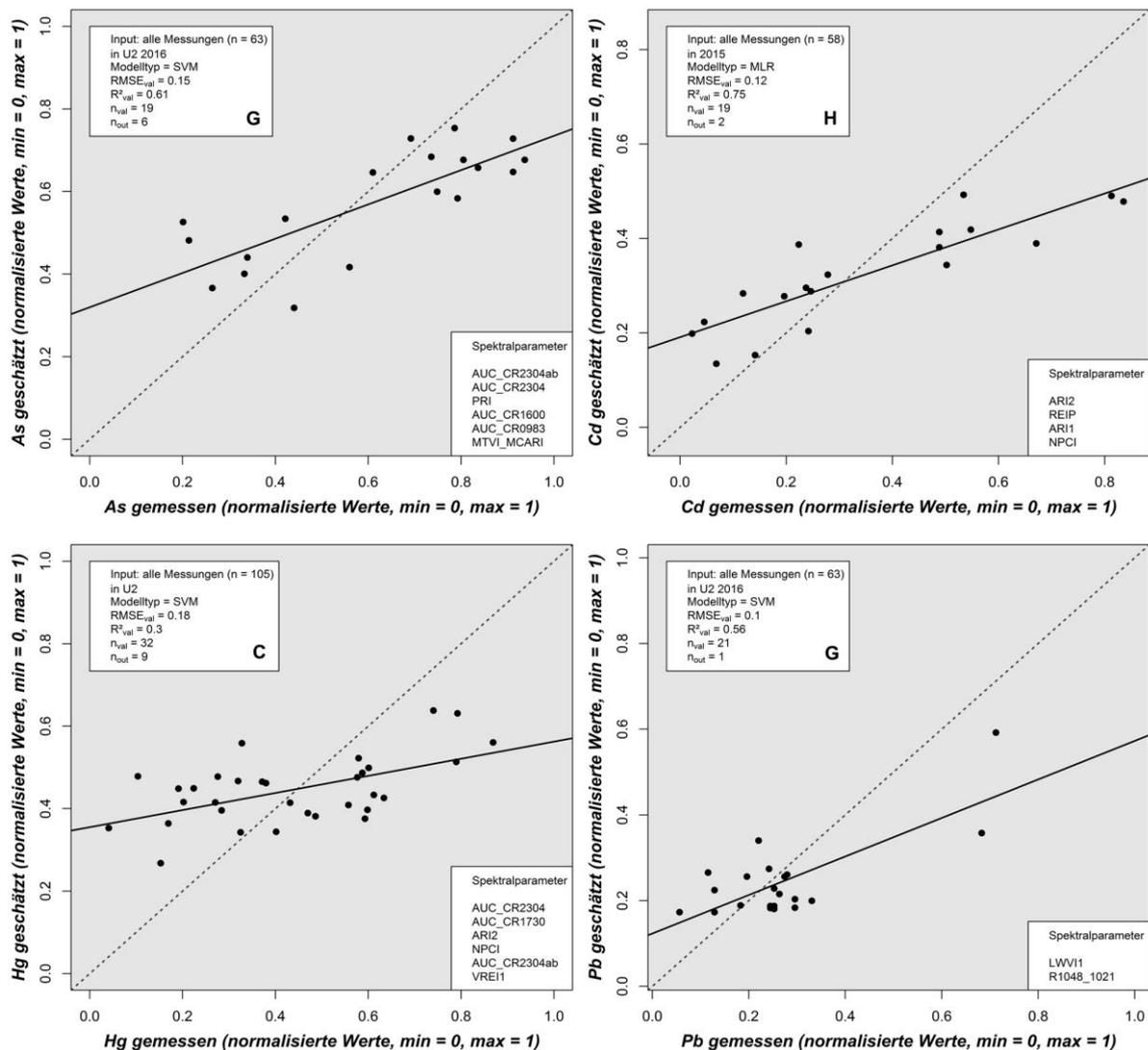


Abbildung 6-27: Optimale Validierungsergebnisse für die Gesamtgehalte der Elemente As, Cd, Hg und Pb

Einzelne Plots erlauben jedoch keine Aussagen darüber, wie oft Spektralparameter elementspezifisch in den acht Modellsetups berücksichtigt wurden. Diese Information kann aus Abbildung 6-28 abgelesen werden, in welcher für jedes Metall die drei am häufigsten selektierten Parameter abgebildet sind. Während für einzelne Metalle wie As, Cu oder Hg Flächenberechnungen essentiell sind und diese in nahezu jedem Setup eingebunden wurden, dominieren bei anderen Elementen wie Ca, Cd oder Zn einfache Ratios und Indizes. In sieben von

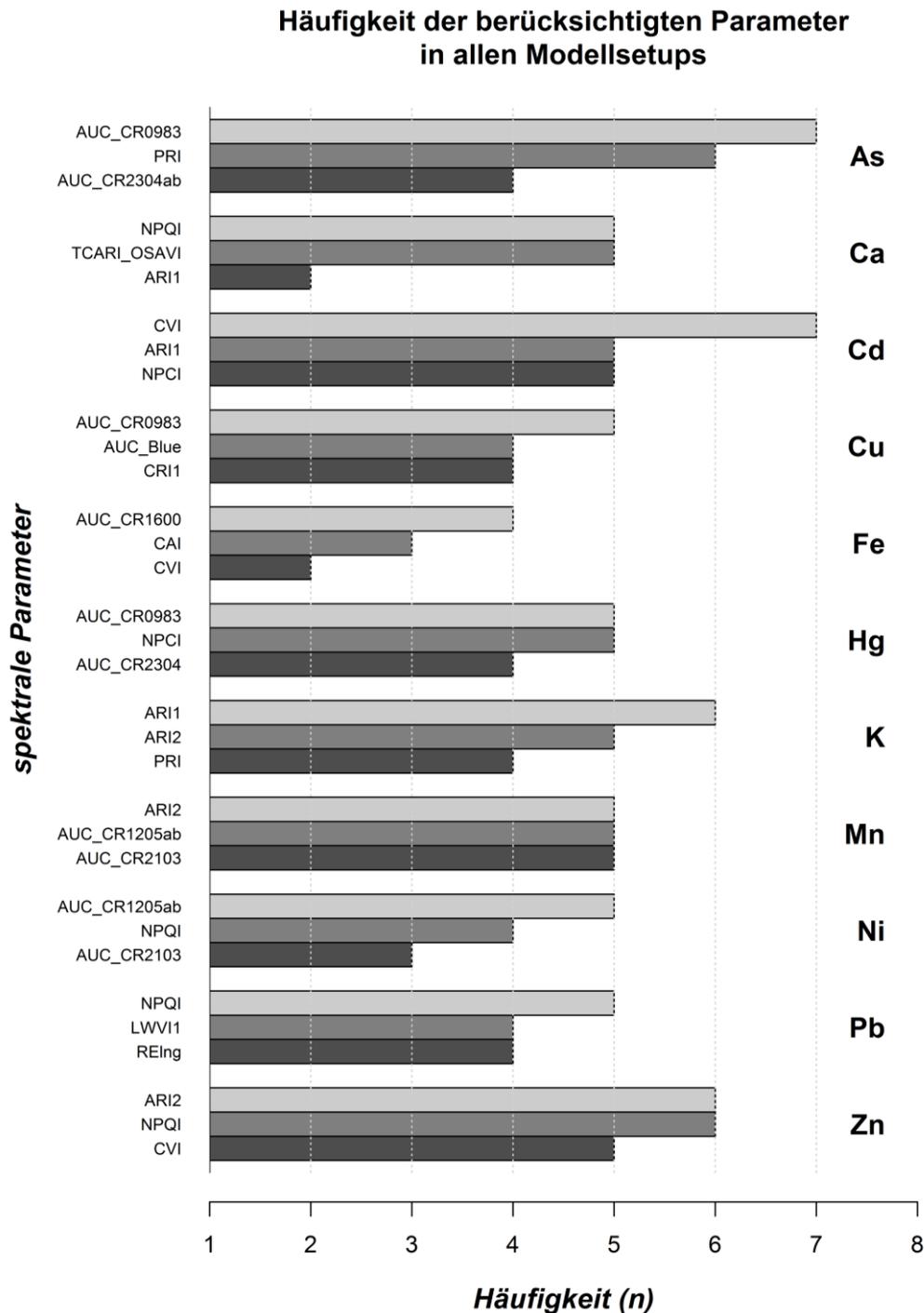


Abbildung 6-28: Darstellung der in den Modellsetups am häufigsten selektierten Parameter zur Abschätzung der Gesamtgehalte

acht Modelldurchläufen wurde die AUC_CR0983 bei As und der CVI bei Cd als erforderliche Variable selektiert. Die angesprochene Fläche führt zudem die Rangliste bei Cu und Hg an und der CVI wurde mehrmals in den Modellen für Fe und Zn eingesetzt. Wiederholt wurden auch der ARI1, ARI2, NPQI und PRI genutzt. Eine ausführliche Auflistung und Benennung der Variablen, die elementbezogen in den einzelnen Modellsetups implementiert wurden, wird in den Tabellen A6-5, A6-6, A6-7 und A6-8 vorgenommen. Ergänzend dazu ist in Abbildung 6-29 die allgemeine Anzahl an Parametern für jedes Setup und Metall veranschaulicht. Während in den ersten drei Modellsetups, die durch 142, 121 und 105 Inputdaten charakterisiert sind, im Durchschnitt über sechs Variablen relevant waren, ist eine Abnahme des Mittelwertes hin zu den weniger komplexen Modellen deutlich. Im Schnitt wurden in den Setups G und H etwa 4.5 Spektralparameter eingesetzt. Die meisten Parameter wurden mit einer Gesamtanzahl von 14 für Mn in Setup B benötigt. Es folgen K (Setup C) und Zn (Setup A) mit jeweils 13 Parametern. Demgegenüber gab es bei Ca, Fe, Mn, Ni und Pb Modelldurchläufe mit ≤ 2 Variablen. Um Prognosen über die räumliche Verteilung der Gesamtgehalte ableiten zu können, erfolgte in einem letzten Schritt die Adaption der entwickelten Modelle auf die HySpex-Daten. Abbildung 6-30 beinhaltet die entsprechenden Karten für As, Cd, K und Mn, bezogen auf das erste Untersuchungsgebiet und -jahr. Neben einer Prognose über die Höhe der Pflanzengehalte ist das zugrundeliegende Modellsetup, die erforderlichen Spektralparameter sowie die Güte der Kalibrierung und Validierung in den Grafiken enthalten. In der

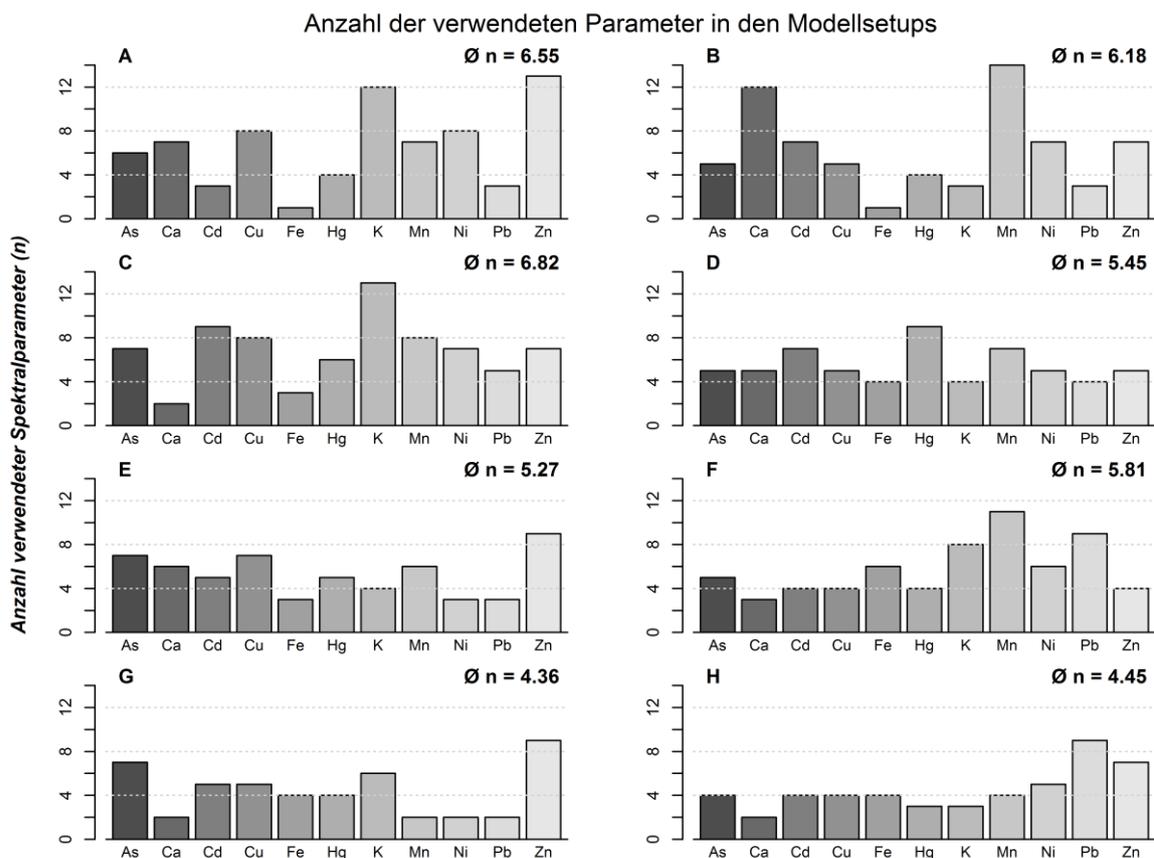


Abbildung 6-29: Vergleich der Anzahl der verwendeten Parameter in den Modellsetups für alle Gesamtgehalte

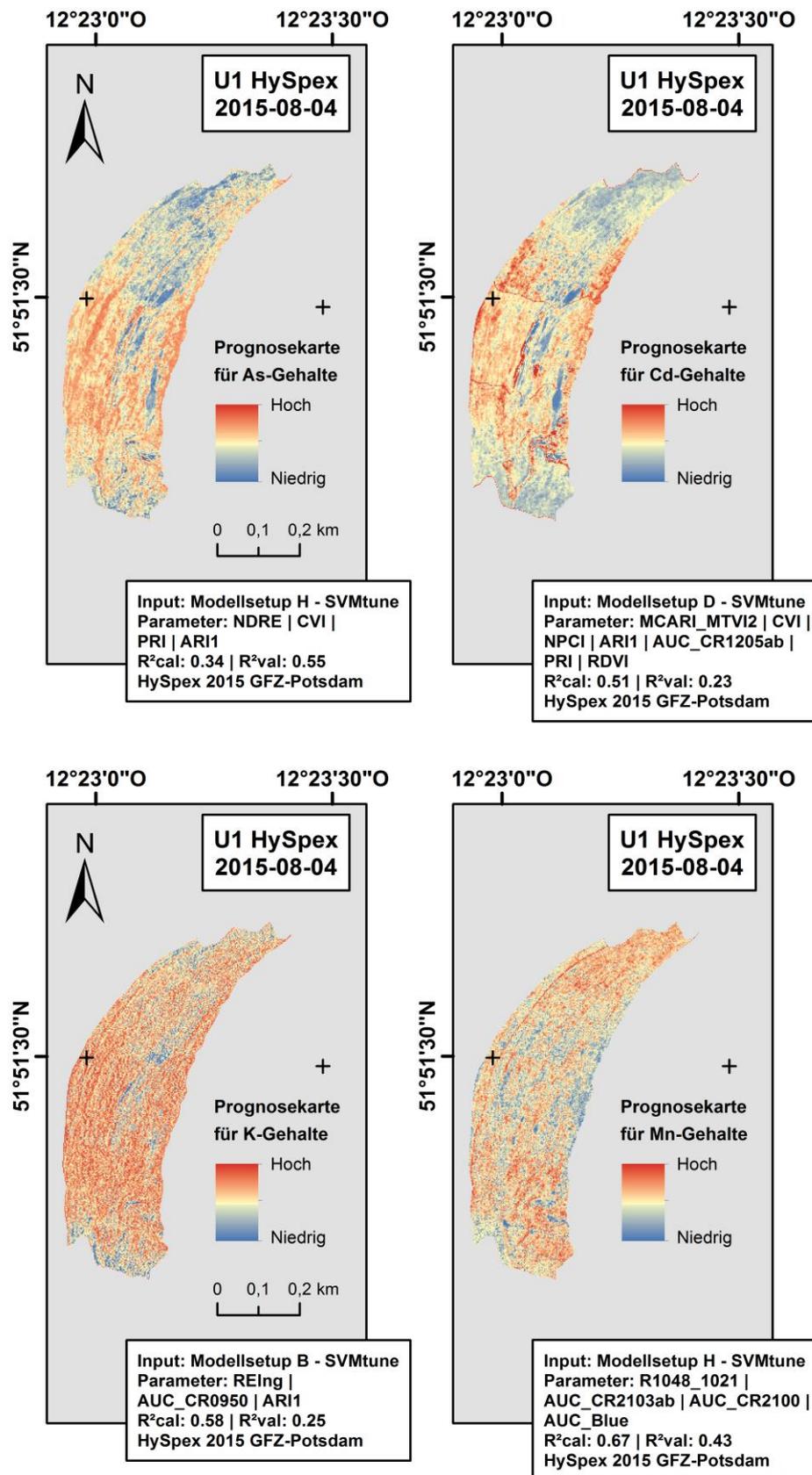


Abbildung 6-30: Prognosekarten für die Gesamtgehalte der Elemente As und Cd (oben) sowie K und Mn (unten) im Untersuchungsgebiet 1 für das Jahr 2015

Karte für As und Cd sind analoge Muster erkennbar, mit potentiell geringeren Belastungen im Norden und Zentrum des Testgebietes. Höhere Cd-Werte werden in den westlichen und östlichen Randbereichen der Auenfläche ersichtlich. Die Prognosen für K und Mn deuten auf eine gleichmäßigere Verteilung der Elementkonzentrationen hin, wobei großflächig hohe Belastungswerte modelliert wurden. Bei beiden Elementen existieren niedrigere Gehalte lediglich punktuell und etwaige Rinnenstrukturen, wie bei As und Cd zuvor, sind schwächer ausgeprägt. In Abbildung 6-31 sind exemplarisch die Modellergebnisse für Cd und Cu der gleichnamigen Fläche im zweiten Untersuchungsjahr dargestellt. Wie im Jahr zuvor werden für die nördlichen und zentralen Bereiche des Untersuchungsgebietes niedrigere Cd-Gehalte prognostiziert. Strukturen, die auf höhere Cd-Werte hinweisen, treten im südlichen Teil der Fläche hervor. Lokale Belastungsschwerpunkte sind in der Karte für Cu erkennbar. Sie verteilen sich überwiegend auf das Zentrum des Untersuchungsgebietes und stehen in Kontrast zu den umliegenden und tendenziell geringer belasteten Standorten. Weitere Modellergebnisse, die auch Gesamtgehalte der zweiten Testfläche beinhalten, werden im Anhang unter A6-28, A6-29 und A6-30 bereitgestellt. Durch verschiedene Artefakte und Ungenauigkeiten in den Befliegungsdaten, woraus Fehler in relevanten Spektralparametern wie Flächen und Banden resultierten, wurde die Übertragbarkeit der Modelle auf die HySpex-Szenen erschwert. Dadurch konnten optimale Modellsetups nicht übertragen und Prognosekarten für einzelne Elemente nicht generiert werden. Diese Problematik sowie weitere Vor- und Nachteile des mehrstufigen Modellansatzes werden ausführlich im Diskussionsteil der Arbeit erörtert.

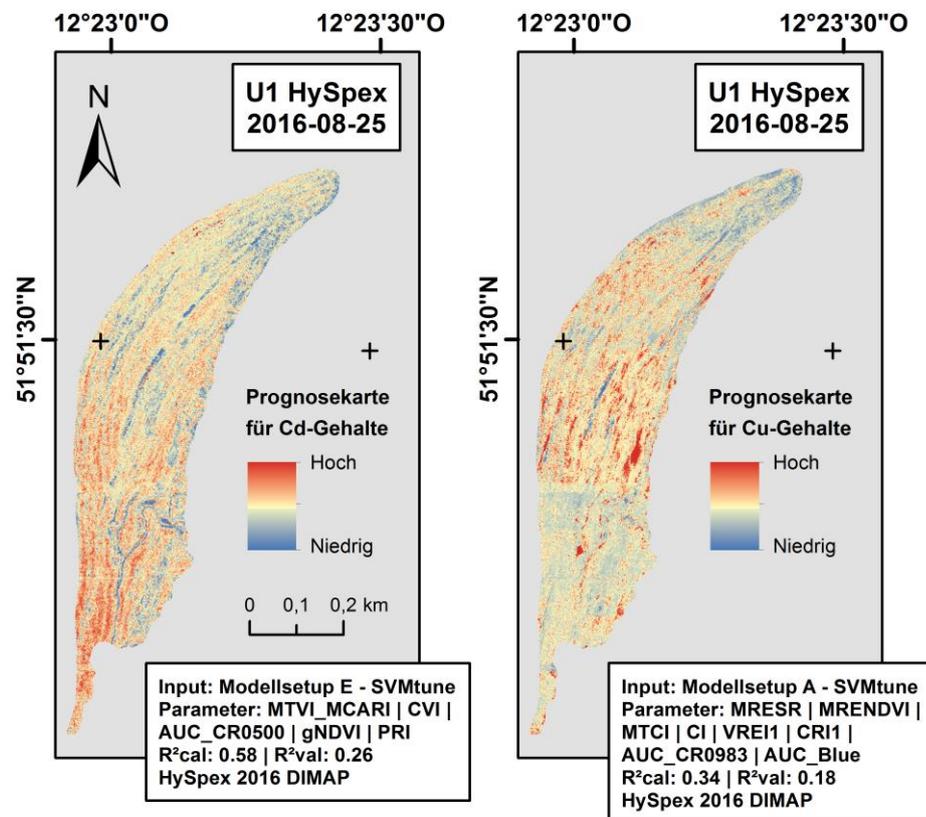


Abbildung 6-31: Prognosekarten für die Gesamtgehalte der Elemente Cd und Cu im Untersuchungsgebiet 1 für das Jahr 2016

7 Diskussion

In diesem Teil der Arbeit werden zunächst die Wertebereiche der ermittelten Schwermetallgehalte in den Böden und Pflanzen betrachtet und im Kontext der Richtlinien der Bundesbodenschutz- und Futtermittelverordnung interpretiert. Neben der Beurteilung des Schadpotentials ökotoxikologisch relevanter Elemente werden die Gesamtgehalte mit Ergebnissen anderer, im Einzugsgebiet der Elbe angelegter, Studien gegenübergestellt. Weiterhin werden Mobilitäts- und Standortfaktoren erläutert, welche die zeitliche und räumliche Dynamik der Schadstoffakkumulation auf den untersuchten Auenflächen beeinflussen. Im dritten und vierten Abschnitt der Diskussion wird der Fokus auf die modellierten Gesamtgehalte gelegt. Analog zu den vorhergehenden Kapiteln wird mit den Resultaten der Böden begonnen. Die Vor- und Nachteile der gewählten Verfahren und Algorithmen werden zusammengetragen, mit den Erfahrungen diverser Studien abgeglichen und etwaige daten- und prozessbezogene Unsicherheiten sowie Fehlerquellen aufgedeckt. Auf Grundlage der in der Arbeit gewonnen Erkenntnisse wird das Potential hyperspektraler Daten für entsprechende Fragestellungen abgeschätzt und es werden zukünftige Herausforderungen beziehungsweise Themenschwerpunkte in dem Forschungsfeld angesprochen.

7.1 Bewertung der Metallbelastungen in den Auenböden

Die Schadstoffdeposition in Flussauen wird maßgeblich durch Hochwasser und die damit einhergehenden Sedimentationsraten in den Überschwemmungsbereichen reguliert (vgl. Kapitel 2.2). Die partikuläre Bindung an Schwebstoffe und die Verlagerung dieser durch Fließgewässer stellen den Haupteintragspfad von Schwermetallen in Auenstandorte dar. Da das Einzugsgebiet der Elbe in den vergangenen Jahren immer wieder von extremen Hochwasserereignissen betroffen war (vgl. IKSE 2016:1 Tabelle 1), kann von einem regelmäßigen Schwermetalleintrag in die Untersuchungsgebiete ausgegangen werden. Die im Rahmen dieser Arbeit bestimmten Gesamtgehalte der Auenböden und -vegetation können dennoch als moderat beschrieben werden. Tabelle 7-1 ermöglicht eine Gegenüberstellung der Medianwerte der in dieser Ausarbeitung ermittelten Metallkonzentrationen mit den in KRÜGER et al. (2005b) und KRÜGER & GRÖNGRÖFT (2003) abgeleiteten Gesamtgehalten für Oberböden. Während die von KRÜGER et al. (2005b) erhobenen Proben auf Grünlandstandorte in Elbauen entnommen wurden, repräsentieren die Daten von KRÜGER & GRÖNGRÖFT (2003) Kennzahlen für Gehalte im gesamten deutschen Elbabschnitt. In Anlehnung an die Bundesbodenschutzverordnung sind in der Tabelle zusätzlich die Maßnahmewerte für den Transferpfad Boden-Nutzpflanze, bezogen auf Grünlandflächen, enthalten. Im Falle einer Überschreitung dieser Kenngrößen muss die Pflanzenqualität kritisch beurteilt werden.

Generell liegt für die meisten Metalle der Median aus den beiden Testgebieten dieser Arbeit deutlich unter den Vergleichswerten. Wie in KRÜGER et al. (2005b:461) dargestellt, sind die Bodenbelastungen auf den Standorten, welche stromabwärts der Mulde gelegen sind, hö-

Tabelle 7-1: Gegenüberstellung der ermittelten Gesamtgehalte in den Auenböden (in µg/g) mit Vergleichswerten anderer Studien und Maßnahmewerten der BBodSchV

<i>Referenz</i>	<i>As</i>	<i>Cd</i>	<i>Cr</i>	<i>Cu</i>	<i>Hg</i>	<i>Ni</i>	<i>Pb</i>	<i>Zn</i>
<i>Median (Elbe U1 + U2) n = 84</i>	3.63	1.75	83.43	69.85	0.68	44.17	103.83	284.53
<i>Median (KRÜGER et al. 2005b:461, Elbe stromabwärts der Mulde) n = 39</i>	55.00	7.50	127.00	146.00	6.10	58.00	163.00	941.00
<i>Median (KRÜGER et al. 2005b:461, Elbe stromaufwärts der Mulde) n = 28</i>	43.00	2.80	91.00	66.00	0.90	41.00	94.00	377.00
<i>Median (KRÜGER & GRÖNGRÖFT 2003:437, deutscher Elbabschnitt) n = 122 - 205</i>	50.00	3.10	82.00	96.00	3.50	38.00	110.00	482.00
<i>Maßnahmewerte nach § 8 Abs. 1 Satz 2 Nr.2 des BBodSchG (BBODSCHV 1999:28)</i>	50.00	20.00	-	1300.00	2.00	1900.00	1200.00	-

her ausgeprägt als auf den stromaufwärts gelegenen Flächen. So wurden in der Studie stromabwärts die Maßnahmewerte für As, Cu und Hg in 59 %, 12 % und 85 % der Fälle überschritten. Oberhalb der Muldemündung waren ähnliche Tendenzen nur für As erkennbar, wo etwa ein Drittel der Gehalte über den Grenzwerten lag (KRÜGER et al. 2005b:464). KRÜGER et al. (2005a) schildern diesbezüglich, dass „[f]ür die Elbe [...] die Mulde die bedeutendste Punktquelle von Schadstoffen [ist], obwohl sie nur drittgrößter Zufluss ist“ (KRÜGER et al. 2005a:14). Ausschlaggebend hierfür ist der Eintrag von Schadstoffen aus dem „Erzgebirge und [...] den Industriegebieten um Bitterfeld“ (KRÜGER et al. 2005a:14). Dennoch kann der Zufluss der Mulde nicht als alleinige Hauptimmissionsquelle von Schwermetallen in die stromabwärts positionierten Elbflächen angesehen werden. Die in KRÜGER (2005c:53) skizzierten plötzlichen Anstiege der Hg-Belastungen in den Böden entlang der deutschen Elbe sind auf den Zufluss der Saale zurückzuführen (vgl. KRÜGER 2005c:53 Abbildung 5-11). Der Autor beschreibt weiter, „[d]ass der Einfluss der Mulde auf die Schwermetallqualität der Böden an der Elbe von untergeordneter Bedeutung ist, [...] obwohl die Muldesedimente und Böden deutlich höher [...] belastet sind als Elbsedimente und Böden“ (KRÜGER 2005c:53). Grund dafür ist der ungleiche Schwebstoffanteil in den Fließgewässern, welcher in der Mulde vergleichsweise gering und in der Saale zehnmals höher ausgebildet ist (KRÜGER et al. 2005b:460). Die genannten Zusammenhänge sind somit insbesondere für die überwiegend

partikulär gebundenen Metalle, wie Cd, Cr, Pb oder Hg, relevant (vgl. Kapitel 2.2 Abbildung 2-1). Da die Höhe und Quelle des Schadstoffeintrages elementabhängig variiert, verläuft die Streuung der Elementkonzentrationen in den Böden der Elbe unterschiedlich und nicht immer sprunghaft. Die Cd-Bodenkonzentrationen nehmen beispielsweise „im Verlauf der Fließstrecke der Elbe mehr oder weniger gleichmäßig“ zu (KRÜGER 2005c:53). Vor diesem Hintergrund ist die verhältnismäßig geringe Ausprägung der meisten Gesamtgehalte in dieser Arbeit plausibel. Die größten Abweichungen werden in Tabelle 7-1 bei den As-Konzentrationen deutlich, wo die korrespondierenden Zentralwerte der anderen Studien um mehr als das Vierzehnfache höher ausgeprägt sind. Eine denkbare Erklärung hierfür könnte die verstärkte Mobilisierung, Reaktivierung und Verlagerung von As im Einzugsgebiet der Elbe während des extremen Hochwassers von 2002 sein. Eine entsprechende Zunahme an gelösten As in der Hochwasserwelle von 2002 nahe Magdeburg wurde von BABOROWSKI et al. (2004:142) bestätigt. Weiterhin könnten Unterschiede aus der angewandten Methodik zur Extraktion der Gesamtgehalte resultieren. Während etwa die Werte in KRÜGER (2005b) mittels Königswasser-aufschluss ermittelt wurden (vgl. KRÜGER et al. 2005b:459 Tabelle 2), basieren die As-Konzentrationen dieser Arbeit auf Perchlorsäure und ICP-MS (vgl. Kapitel 4.2.2.3 Tabelle 4-5). Rein methodisch begründete Variationen in dieser Größenordnung erscheinen dennoch unrealistisch, da beide Aufschlussverfahren ähnliche Ergebnisse liefern sollten.

Die Cd-, Cr-, Hg- und Zn-Gehalte sind hingegen mit den stromaufwärts gemessenen Daten in KRÜGER et al. (2005b:461) vergleichbar, auch wenn alle Medianwerte unterhalb der Referenz positioniert sind. Demgegenüber liegen die Mediane von Cu, Ni und Pb oberhalb der von KRÜGER et al. (2005b:461) genannten Zahlen für den Bereich der Elbe und die Cr- und Ni-Konzentrationen fallen höher aus als die von KRÜGER & GRÖNGRÖFT (2003:437) beschriebenen Gehalte für den gesamten deutschen Elbabschnitt. Obwohl die in Tabelle 7-1 aufgeführten Vergleichswerte der Studien vor mehr als zehn Jahren erfasst wurden, fügen sich die in der Arbeit erhobenen Gehalte, mit Ausnahme von As, gut in das Gesamtbild der Oberbodenbelastungen für Grünflächenstandorte ein. Die Konzentrationen der anderen Elemente liegen knapp unter oder über den damaligen Messwerten. Von einer Verbesserung der Belastungssituation innerhalb der letzten Dekade kann in dem untersuchten Elbabschnitt nicht gesprochen werden, wenngleich Maßnahmewerte für Cd, Cu, Ni und Pb nicht überschritten wurden. Eine Besonderheit stellen die Hg-Gehalte des ersten Untersuchungsgebietes dar, wo acht der 42 Messwerte oberhalb des Grenzwertes von 2 µg/g lagen (vgl. Abbildung A6-2). Das Maximum wurde mit 3.77 µg/g in einer Senke im Jahr 2015 nachgewiesen (vgl. Tabelle 6-3). Kritisch müssen auch die Cd-Konzentrationen betrachtet werden, da das Element durch eine hohe Mobilität und systemische Aufnahme gekennzeichnet ist. So wurden bei KRÜGER & GRÖNGRÖFT (2003) in Pflanzenproben die Grenzwerte der Futtermittelverordnung überschritten, obwohl die Maßnahmewerte der BBODSCHV (1999) für Cd mit ≤ 20 µg/g eingehalten wurden. Insbesondere bei pH-Werten < 6 ist die Pflanzenverfügbarkeit des Elementes nahezu unabhängig von den Gesamtgehalten im Boden. Sie wird in erster Linie durch den pH-Wert reguliert (KRÜGER & GRÖNGRÖFT 2003:441f.). Dies ist auch für die Böden der beiden Untersuchungsflächen bedeutsam, in denen pH-Werte zwischen 3.98 und 5.98 bestimmt wurden (vgl. Abbildung 6-1 und Tabelle 6-1). Die Staatliche Betriebsgesellschaft für Umwelt und Landwirtschaft des Freistaates Sachsen empfiehlt für Cd einen Grenzwert von 2 µg/g für Böden bei

Nutzung in Form von Grünlandflächen (SMUL 2015:4, KRÜGER 2015:47). Diesen Wert überschreiten 37 der 84 Bodenproben und ebenso die Mittelwerte der Senken und Terrassen (vgl. Tabelle 6-3). Die höchste Cd-Konzentration liegt mit 7.63 µg/g in einer Senke des U1 im Jahr 2016 vor.

Zugleich spiegeln die unverkennbaren Differenzen der Bodengesamtgehalte zwischen den beiden Testflächen und Untersuchungsjahren die räumliche und zeitliche Dimension des Schadstoffeintrages in die Auengebiete wider. Obwohl beide Flächen nur wenige Flusskilometer voneinander entfernt und linkselbisch ausgerichtet sind, ist die Spannweite der Metallkonzentrationen im U1 um ein Vielfaches größer als im U2 (vgl. Tabelle 6-4, Abbildung A6-2). Der angesprochenen räumlichen Dimension schreibt KRÜGER (2013) standortspezifische, lokale und regionale Besonderheiten zu, wie etwa Mäanderschleifen im Flussverlauf. Der zeitlichen Komponente sind beispielsweise ereignisbezogene oder rezente Prozesse untergeordnet (KRÜGER 2013:8). Als Parameter, welche die Deposition von Sedimenten und Schadstoffen in die Auengebiete steuern, benennt KRÜGER (2015) die Zeit und Sedimentvorräte während eines Hochwasserereignis, den Abfluss, die Höhenlage und Überflutungsdauer, die Nutzung sowie die morphologische Exposition und Entfernung zum Fließgewässer (KRÜGER 2015:58ff.). Folglich können Abweichungen innerhalb dieser Steuergrößen unterschiedliche Belastungssituationen auf den Testflächen herbeiführen. Betrachtet man die Morphologie beider Gebiete, so ist das U2 höher gelegen und die dortigen Senken sind sichtbar kleiner ausgebildet als im U1 (vgl. Abbildung 4-4). KRÜGER (2015) beschreibt in diesem Kontext die Überflutungssituation in Auen als „sehr variabel“ und stützt sich dabei auf Modellergebnisse von BÜTTNER et al. (2006), die gezeigt haben, dass „gerade in tiefgelegenen Flutrinnen derartig hohe Fließgeschwindigkeiten [...] [existieren], [...] [wodurch] mit einer Sedimentation von Partikeln kaum zu rechnen ist“ (KRÜGER 2015:63). Während eines Hochwassers führen schmalere Rinnenstrukturen im U2 zu höheren Fließgeschwindigkeiten und einer verminderten Sedimentationsrate. Darüber hinaus hat die Studie von BABOROWSKI et al. (2004) belegt, „dass die größten Sedimentfrachten in der Regel vor dem eigentlichen Hochwasserscheitel auftreten“ (KRÜGER 2015:63). Demnach könnte das niedriger gelegene U1 früher überflutet werden und höhere Sedimenteinträge erfahren. Mittlere Hochwasser, die tendenziell das erste Untersuchungsgebiet häufiger betreffen, können ebenso hohe Sedimenteinträge beinhalten wie extreme Überschwemmungsereignisse (KRÜGER 2015:60).

Über belastete Sedimente werden die Verunreinigungen in den Boden eingearbeitet und in bodenbildende Prozesse eingebunden, wobei „die Sedimentation als wesentlicher bodenbildender Faktor“ in den Auengebieten betrachtet werden kann (HOFACKER 2007:92). BABOROWSKI (2007) verweist darauf, dass die Sedimentationsraten einzelner Überschwemmungsereignisse die heutige Bodenqualität nur marginal beeinflussen, da der Kontaminationsgrad in Böden das Resultat von Einträgen über Jahrzehnten und Jahrhunderten hinweg ist (BABOROWSKI 2007:776f.). Ebenso gibt KRÜGER (2015) zu bedenken, „dass eine Qualitätsverbesserung von Böden der Elbauen nur lokal schnell voranschreiten kann, in der Regel jedoch sehr lange andauern wird“ (KRÜGER 2015:73). Dies begründet die gute Übereinstimmung der Cd-, Cr-, Hg- und Zn-Gehalte dieser Arbeit mit den vor mehreren Jahren stromaufwärts der Mulde gemessenen Werten in Tabelle 7-1. Aus diesem Grund wäre es fehlerhaft, die unterschiedlichen Gesamtgehalte zwischen den beiden Untersuchungsjahren alleine auf

die Höhe des Schwermetalleintrages in 2015 und 2016 zu reduzieren, zumal zwischen den beiden Jahren kein bedeutsames Hochwasserereignis stattgefunden hat. Vielmehr dürften variierende Bodenparameter die Bindung und Mobilität der Metalle beeinflusst haben, wodurch auf den Flächen die Elementkonzentrationen 2016 höher als 2015 waren. Gegenteilige Tendenzen traten im U2 bei As, Cd und Hg auf (vgl. Abbildung A6-18 und A6-19). Ein Teil dieser zwischenjährlichen Dynamiken ist auch durch die verschiedenen Probenahmepunkte und Transekte in beiden Jahren erklärbar. Die Morphologie als alleinige Ursache für die abweichenden Metallgehalte in beiden Untersuchungsgebieten zu benennen, ist ebenfalls ungenügend, da in Abhängigkeit von der Distanz zum Fließgewässer sowohl Senken als auch Plateaus geringe Sedimentationsraten aufweisen können (KRÜGER 2015:90). In dieser Hinsicht besitzen beide Gebiete eine ähnliche Entfernung zur Elbe. Einen weiteren Einfluss könnte die stärkere Mäandrierung des Flusses in der Nähe des U2 nehmen. Die während des Juni-Hochwassers von 2013 visualisierten Überschwemmungsgebiete in Abbildung A4-4 zeigen eine weiträumige Überflutung der Auenstandorte östlich respektive stromaufwärts der zweiten Untersuchungsfläche (vgl. Abbildung A4-4). Konsequenterweise wird auch der Auwald bis zu dem nördlich von Wörlitz verlaufenden Deich hin überflutet. Ein Großteil des Wassers und der darin enthaltenen potentiellen Schadstoffe kann somit unterhalb des U2 abfließen, ehe es in unmittelbarer Nähe zum U1 wieder in die Elbe mündet. Zudem zeigt eine Karte des Zentrums für Satellitengestützte Kriseninformation, welche die Hochwassersituation an der Elbe sechs Tage später als in Abbildung A4-4 veranschaulicht, die Überschwemmung der westlich des U2 gelegenen Auenfläche (vgl. DLR 2013). Dies entspricht der natürlichen Fließrichtung des Gewässers und könnte ebenso zu einer verminderten Sedimentation und Schadstoffakkumulation auf der zweiten Testfläche führen. Zugleich wird die Bedeutung der von KRÜGER (2013:8) thematisierten standortspezifischen Besonderheiten hervorgehoben.

Auch wenn mehrere Faktoren die Schwermetallverteilung in den Untersuchungsgebieten steuern, waren klare Interaktionen zwischen den Gesamtgehalten und den morphologischen Einheiten erkennbar (vgl. Abbildung 6-4). Dies stimmt mit der eingangs aufgestellten Hypothese I, dass mit Variationen der Schwermetallkonzentrationen im Oberboden in Abhängigkeit von der Feinmorphologie und einer stärkeren Akkumulation in den Senken gerechnet werden kann, überein (vgl. Kapitel 1.2). Die Relationen sind jedoch nicht linear und lassen sich nur schwer generalisieren. Einerseits existieren kleinräumige Unterschiede zwischen und innerhalb der Höhenstufen und andererseits variieren die Abweichungen elementspezifisch. Der höchste As-Wert wurde etwa auf einem Plateau und der kleinste Cr-Wert in einer Senke ermittelt (vgl. Tabelle 6-3). Der Zusammenhang zwischen den Metallkonzentrationen und der Geländehöhe war im U1 stärker ausgeprägt als im U2 (vgl. Abbildung 6-5). Dies erklärt auch die deutlichen Differenzen zwischen den Interpolationsergebnissen. Während die Einzelkarten des U1 miteinander komparabel sind, zeigen die Interpolationen des U2 für nahezu jedes Element eine andere räumliche Verteilung. Aus diesem Anlass ist eine summarische Darstellung der Gesamtgehalte sinnvoll (vgl. Abbildung 6-7). Dennoch konnten die Senken als höher belastete Standorte, die durch eine größere Schwermetallakkumulation in den Oberboden gekennzeichnet sind, herausgearbeitet werden, was mit den Ausführungen von OVERESCH et al. (2007:800) übereinstimmt. KRÜGER (2015) ergänzt treffend, „dass Schadstoff-Hot Spots in Senkenlagen zu finden sind“ (KRÜGER 2015:93).

Berücksichtigt man die in der vorliegenden Arbeit erhobenen Bodenparameter, so waren die Plateaus durch höhere Sand- und geringere Ton- und Schluffanteile charakterisiert, wengleich der höchste Tonanteil ebenfalls auf dieser morphologischen Einheit bestimmt wurde (vgl. Tabelle 6-1). Die Körnung der Senken und Terrassen war feiner (vgl. Abbildung 6-3), womit diese Standorte ein potentiell höheres Schadstoffspeichervermögen besitzen (YAO et al. 2015:6726). Ebenso war mehr Wasser und organische Substanz in den Proben der Senken enthalten (vgl. Tabelle 6-1). DU LAING et al. (2009) beschreiben in diesem Kontext, dass langsame Durchflussraten und stagnierendes Wasser in niedrig gelegenen Terrassen und Senken zur Ablagerung feinkörniger Sedimente und beträchtlicher Mengen an organischer Substanz führen (DU LAING et al. 2009:3974, nach RINKLEBE 2004). Zudem begünstigen entsprechende Substanzen die Retention von Spurenmetallen in der Bodenmatrix (vgl. Kapitel 2.2). Die von KRÜGER et al. (2005b) durchgeführten Korrelationsanalysen zwischen Schwermetallgehalten und verschiedenen Standort- und Bodenparametern an der Mittleren Elbe signalisieren zudem, dass die Elementkonzentrationen stärker mit dem organischen Kohlenstoffgehalt als beispielsweise mit der Geländehöhe korrelieren (vgl. KRÜGER et al. 2005b:463 Tabelle 7). Die Autoren sehen dies als Indiz dafür, dass die Sedimentationsrate nicht strikt an die Geländehöhe gebunden ist. Sie wird zusätzlich durch andere morphologische Merkmale reguliert (KRÜGER et al. 2005b:463).

Die Überschwemmungsdynamik und die damit verbundene Wechselwirkung der Erosions- und Sedimentationsprozesse führt auf den Untersuchungsgebieten zur Herausbildung unterschiedlicher Bodentypen (vgl. Kapitel 4.1), deren Merkmale sich in den zuvor beschriebenen Bodenparametern widerspiegeln. Vegen, die auf Basis der VBK und der Detailkarten des RIVA-Modellprojektes auf beiden Standorten großflächig vorzufinden sind (vgl. Abbildung A4-1), besitzen hohe Bindungskapazitäten, wodurch bei Hochwasser nicht nur Schadstoffe, sondern auch Nährstoffe in den Böden angereichert werden können. Das enorme „Filter-, Puffer- und Transformationsvermögen“ dieser Böden wirkt zugleich einer Verlagerung der Metalle in das Grundwasser entgegen (SCHOLZ et al. 2009:80). Durch die „hohe[n] Ton- und Kohlenstoffgehalte“ der Auengleye, die überwiegend in den Flutrinnen und Senken des U1 vorkommen, kann mit noch größeren Nährstoff- und Schwermetallkonzentrationen in diesen Böden gerechnet werden (RINKLEBE et al. 2009:151). Letzteres stimmt mit den Ergebnissen der vorliegenden Arbeit überein. RINKLEBE et al. (2009) fügen gleichzeitig hinzu, dass „die Heterogenität der Stoffkonzentrationen innerhalb [dieser Bodenform] [...] hoch“ ist (RINKLEBE et al. 2009:151). Demnach können aus der Verteilung der Auenböden Prognosen über Stoffgehalte abgeleitet werden, weshalb RINKLEBE et al. (2009) „[m]ittel- bis langfristig [...] eine flächendeckende und großmaßstäbige bodenkundliche Erkundung der Auenökosysteme Deutschlands“ als notwendig erachten (RINKLEBE et al. 2009:153).

7.2 Einordnung der Metallbelastungen in der Auenvegetation

Adäquat zu den vorhergehend betrachteten Bodenkonzentrationen werden in Tabelle 7-2-die Gesamtgehalte der Auenvegetation mit korrespondierenden Werten früherer Studien gegenübergestellt. Als Vergleichswerte dienen die in KRÜGER & GRÖNGRÖFT (2003) abgebildeten Gehalte, welche auf Grünlandvegetation im deutschen Elbabschnitt erhoben wurden. In den

Tabelle 7-2: Gegenüberstellung der ermittelten Gesamtgehalte in der Auenvegetation (in µg/g) mit Vergleichswerten anderer Studien und Höchstgehalten der FuttmV

Referenz		As	Cd	Hg	Ni	Pb	Zn
<i>Elbe U1 + U2</i> <i>n = 182</i>	<i>Min</i>	0.12	0.27	0.01	0.50	0.86	8.28
	<i>Mean</i>	2.93	0.39	0.16	2.25	3.19	22.88
	<i>Max</i>	5.63	1.05	0.70	7.34	10.71	104.31
<i>KRÜGER & GRÖNGRÖFT</i> <i>(2003:439),</i> <i>deutscher Elbabschnitt</i> <i>n = 45 - 134</i>	<i>Min</i>	0.01	0.04	0.01	1.10	0.06	22.00
	<i>Mean</i>	0.50	0.50	0.15	3.90	1.30	134.00
	<i>Max</i>	5.70	3.00	1.60	13.50	18.20	705.00
<i>Zulässige Höchstgehalte</i> <i>nach Anhang 1 der Richtlinie</i> <i>2002/32/EG der FuttmV</i> <i>(FUTTMV 1981:9)</i>		2.00	1.00	0.10	-	40.00	-

Statistiken der Veröffentlichung wurden Informationen aus verschiedenen Ausarbeitungen berücksichtigt (vgl. KRÜGER & GRÖNGRÖFT 2003:439 Tabelle 2). Weiterhin sind in Tabelle 7-2 die von der Futtermittelverordnung festgelegten Höchstwerte für die kritischen Elemente As, Cd, Hg und Pb enthalten (vgl. FUTTMV 1981:9). Diese Grenzwerte dürfen in Futtermittel-Ausgangserzeugnissen nicht überschritten werden, was im Hinblick auf die weitverbreitete Grünlandnutzung der Auenwiesen an der Mittleren Elbe von enormer Bedeutung ist (vgl. SCHOLZ et al. 2009:80ff.). Vor diesem Hintergrund treten die Messwerte der Elemente As und Hg unverkennbar hervor. Während die visualisierten Wertebereiche und insbesondere die Maximalwerte von As mit 5.63 und 5.70 µg/g nahezu identisch sind, weichen die beiden Mittelwerte des Elementes stark voneinander ab. Der in dieser Arbeit errechnete Mittelwert übertrifft den Wert in KRÜGER & GRÖNGRÖFT (2003:439) nahezu um das Sechsfache. Konkret wurde in 169 von 182 Proben der zulässige Höchstgehalt für As (2.00 µg/g) überschritten und die Durchschnittswerte der Bezugseinheiten lagen ebenso allesamt oberhalb des Wertes der Futtermittelverordnung (vgl. Tabelle 6-8). Somit liegen mehr als 90 % der Gehalte und gleichzeitig alle Pflanzenproben aus dem Jahr 2016 (n = 84) über dem erlaubten Grenzwert.

Dies ist insoweit erstaunlich, da die zuvor erläuterten As-Gehalte der Böden deutlich unter dem Maßnahmewert der BBODSCHV (1999:28) und auch unterhalb der von KRÜGER et al. (2005b:461) und KRÜGER & GRÖNGRÖFT (2003:437) publizierten Messwerte einzuordnen waren. Zugleich ist der in Tabelle 7-1 enthaltene Median der As-Bodenkonzentrationen beider Untersuchungsgebiete mit 3.63 µg/g nur geringfügig größer als der Mittelwert der Pflanzenproben in Tabelle 7-2 (vgl. Tabelle 7-1). Dies würde einen hohen Transferkoeffizienten zwischen dem Boden-Pflanze-System für das Element implizieren. Obwohl das Metall überwiegend in gelöster Form und durch Hochwasserereignisse in die Auengebiete eingetragen wird, ist As gegenüber anderen Schwermetallen durch eine verhältnismäßig geringe Mobilität gekennzeichnet (vgl. Tabelle 2-1). Ursache hierfür sind die starken Bindungsmechanismen im

Boden und KRÜGER (2005c) fügt hinzu, dass „die Aufnahme [von As] über die Wurzeln [...] vernachlässigt werden [kann]“ (KRÜGER 2005c:55). Dies stimmt mit den in GRÖNGRÖFT et al. (2005:466) und OVERESCH et al. (2007:804) vorgenommenen Bewertungen zur Pflanzenverfügbarkeit diverser Elemente überein. Folglich wären höhere Bodenkonzentrationen zur Herausbildung der in dieser Arbeit nachgewiesenen Pflanzengehalte notwendig gewesen. Die Unstimmigkeiten zwischen den Boden- und Pflanzenwerten bestätigen demnach die zuvor angesprochene Vermutung, dass die angewandte ICP-MS Methodik zur Quantifizierung der As-Bodengehalte unzureichende Ergebnisse generierte, wobei eine gewisse Messunsicherheit allen Laboranalysen anhaftet. Die As-Belastung in der Auenvegetation der Testgebiete ist somit in höchstem Maße bedenklich. Eine weitere Überschreitung der Höchstgehalte der Futtermittelverordnung wird in Tabelle 7-2 bei Hg sichtbar. Auch hier liegt der Mittelwert mit 0.16 µg/g über den gesetzlichen Grenzwert von 0.10 µg/g und der Mean weicht nur minimal von dem in KRÜGER & GRÖNGRÖFT (2003) veröffentlichten Durchschnitt ab, wenngleich die hier veranschaulichten Maximalwerte nicht erreicht werden. Insgesamt wurde in 116 Proben der festgeschriebene Höchstwert überschritten und das ermittelte Maximum war mit 0.70 µg/g um das Siebenfache höher ausgeprägt als der Richtwert der Verordnung. In Anlehnung an die Grenzwerte der FUTTMV (1981) und der BBODSCHV (1999) muss an dieser Stelle festgehalten werden, dass der Anteil an Pflanzenproben mit erhöhten Hg-Gehalten bei 63 % liegt, wohingegen nur 9 % der Bodenproben zu hohe Hg-Konzentrationen aufweisen. Diese Diskrepanzen gilt es zu hinterfragen.

Einen Einfluss auf die Ausprägung der Gesamtgehalte in beiden Kompartimenten haben die variierende Häufigkeit und die unterschiedlichen Zeitpunkte der Probenahme. Während die Böden jeweils im Frühjahr eines jeden Untersuchungsjahres beprobt wurden, erfolgte zu mehreren Zeitpunkten im Jahr die Entnahme von Pflanzenmaterial. Dadurch können nur zwischen aber nicht innerhalb der Untersuchungsjahre Aussagen über wechselnde Metallkonzentrationen im Boden getroffen werden. Entsprechende saisonale Dynamiken wurden etwa in der Studie von MOROS et al. (2009) nachgewiesen. Die Autoren ermittelten für As, Cu, Zn und Sn die höchsten Konzentrationen im Frühjahr und Sommer eines Jahres und abnehmende Tendenzen in den übrigen Monaten (MOROS et al. 2009:9315). Als eine Konsequenz dessen wären auch zu späteren Zeitpunkten im Jahresverlauf höhere Metallkonzentrationen in den Auenböden denkbar, wobei diese Relationen standortspezifisch und unter Berücksichtigung der jeweiligen Haupteintragspfade der Elemente geprüft werden müssen. Hier besteht auch zukünftig und im Speziellen für Auenstandorte noch enormes Forschungspotential, derweil die extrem variablen Überschwemmungsdynamiken und der schwankende Wasserhaushalt der Auenflächen generalisierte Aussagen verkomplizieren. Unter dem Aspekt, dass in beiden Untersuchungsgebieten und -jahren bedenkliche Hg-Konzentrationen in den Pflanzen nachgewiesen wurden, könnten auch die Maßnahmewerte der BBODSCHV (1999) für das Element zu niedrig angesetzt sein. Auf Basis der Bodengehalte konnte mit einer Belastung der Auenvegetation in dieser Größenordnung nicht gerechnet werden. Letztlich repräsentieren die analysierten Gesamtgehalte den immobilen Anteil an Metallionen in der Bodenmatrix und sie gestatten keine Aussagen darüber, wieviel Schwermetalle tatsächlich von den Pflanzen aufgenommen und akkumuliert werden können. Erschwerend kommt in den Überschwemmungsbereichen

hinzu, dass selbst mobile Elementkonzentrationen nur unzureichende Prognosen für derartige Fragestellungen erlauben.

In Auengebieten und gerade bei immobilen Elementen, wie Hg, sind neben dem systemischen Pfad, welcher die Anreicherung von im Bodenwasser gelösten Metallen über die Wurzeln veranschaulicht, auch andere Transferpfade bedeutsam (vgl. Kapitel 2.3). Dies ist eine Erklärung für die ungleichen Tendenzen in den Boden- und Pflanzengehalten. Zwar findet die Verlagerung von Hg in erster Linie durch die partikuläre Bindung an Sedimente statt, das Element ist allerdings ähnlich stark im Boden gebunden wie As, weshalb der systemische Eintrag des Metalls ebenfalls außer Acht gelassen werden kann (KRÜGER 2005c:55). Bezogen auf weniger mobile Spurenmetalle, ordnen GRÖNGRÖFT et al. (2005) dem *“leaf-soil contact and dust impact“* einen dominanten Einfluss auf den Kontaminationsgrad von Flussauenvegetation zu (GRÖNGRÖFT et al. 2005:472). Die in der Studie präsentierten geringen Zusammenhänge zwischen der Oberboden- und Pflanzenbelastung stützen diese Annahme (GRÖNGRÖFT et al. 2005:472). Weiterhin wurden in Pflanzenmischproben, die unmittelbar nach dem Sommerhochwasser 2002 an der Elbe entnommen wurden, erhöhte Schwermetallanreicherungen ersichtlich. In den darauffolgenden Monaten war hingegen ein Rückgang der Metallkonzentrationen zu beobachten. Die Autoren sehen dies als Indiz für die Aufnahme partikulär gebundener Metalle über die Blattoberfläche in Folge von Hochwasserereignissen (GRÖNGRÖFT et al. 2005:471). SCHULZ-ZUNKEL & KRÜGER (2009) gelangen ebenso zu dem Schluss, dass diese Art des Schadstofftransfers in Flussauen berücksichtigt werden muss (SCHULZ-ZUNKEL & KRÜGER 2009:1356). Aufgrund der regelmäßigen Überflutung der Untersuchungsgebiete in den vergangenen Jahren kann der sogenannte „Verschmutzungspfad“ (LUA 2010:12) als eine erklärende Variable für die erhöhten Hg-Belastungen herangezogen werden. Durch die Wirksamkeit verschiedener Transferpfade verwundert es nicht, dass auf den Untersuchungsgebieten die Grenzwerte zweier immobilere Elemente (As, Hg) mit unterschiedlichen Bindungsaffinitäten überschritten wurden. Abschließend soll in diesem Kontext nicht unerwähnt bleiben, dass Schadstoffe ebenso durch die Prozesse der „Inhalation und Ingestion“ von Tieren aufgenommen werden können (KRÜGER & GRÖNGRÖFT 2003:31). Dies spielt für die Untersuchungsgebiete in dieser Arbeit eine untergeordnete Rolle, ist aber für die Auenflächen der Elbe und der auf zahlreichen Standorten praktizierte Weideviehhaltung durchaus von Bedeutung. Nach Überschwemmungen wären beispielsweise das Aussprechen von Beweidungsverböten oder das Aussetzen der Bewirtschaftung von Flutrinnen vorstellbar (GRÖNGRÖFT et al. 2005:473). Eine analoge Vorgehensweise wird auch von OVERESCH et al. (2007:800) als notwendig erachtet und KRÜGER & GRÖNGRÖFT (2003) geben zu bedenken, dass Schadstoffe trotz Einhaltung der Grenzwerte der Futtermittelverordnung durch Beweidung in die Nahrungskette gelangen können (KRÜGER & GRÖNGRÖFT 2003:442).

Vergleichbare und mehrfache Überschreitungen, wie bei As und Hg, sind bei den übrigen Schwermetallen in Tabelle 7-2 nicht erkennbar. Cd weist zwar die höchsten Mobilitätsraten auf und wird „von den Pflanzen überwiegend über den Wurzelpfad aufgenommen“ (KRÜGER 2005c:56), der mit 1.00 µg/g festgeschriebene Höchstgehalt der FUTTMV (1981) wurde aber nur an einem Probenahmepunkt nicht eingehalten. Dies zeigt allerdings, dass auf den Auenflächen mit einer Überschreitung kritischer Cd-Pflanzenwerte gerechnet werden muss, obwohl der Maßnahmewert der BBODSCHV (1999) für die Bodengesamtgehalte auf allen Stand-

orten erfüllt wurde. Dennoch lag auf den beiden, oberhalb der Saale- und Muldemündung gelegenen, Testgebieten keine schwerwiegende Cd-Belastung vor. In 169 Pflanzenproben war die Cd-Konzentration $\leq 0.50 \mu\text{g/g}$. Folglich müssen 13 Proben den von SCHEFFER & SCHACHTSCHABEL (2010:467) angegebenen kritischen Wertebereich für Tierfutter, der sich von 0.50 bis 1.00 $\mu\text{g/g}$ erstreckt, zugesprochen werden (vgl. Tabelle 2-1). Einerseits begünstigen die gemessenen niedrigen Boden pH-Werte die Pflanzenverfügbarkeit des Elementes, andererseits können die niederschlagsreichen Sommermonate eine Cd-Aufnahme gehemmt haben (vgl. Abbildung 4-5). Bei zunehmend trockenen Bodenverhältnissen „erhöht sich die Ionenkonzentration in der verbliebenen Bodenlösung“ und das Schwermetall kann systemisch leichter aufgenommen werden (KRÜGER 2005c:56). Längere Trockenphasen waren in den beiden Untersuchungsjahren nicht wahrnehmbar und der errechnete Cd-Mittelwert ist in dieser Ausarbeitung um 0.11 $\mu\text{g/g}$ kleiner als die in KRÜGER & GRÖNGRÖFT (2003:439) angegebene durchschnittliche Cd-Konzentration.

Interessanterweise ist der Mean der Pb-Gehalte mehr als doppelt so hoch wie in der angesprochenen Studie (vgl. Tabelle 7-2). Ein ähnliches Maximum wird aber nicht erreicht und die Analysen liegen innerhalb des Wertebereiches der FUTTMV (1981). Dies ist in Einklang mit der zuvor erläuterten Belastungssituation der Auenböden, deren Pb-Werte deutlich unterhalb der Regularien der BBODSCHV (1999) einzuordnen waren. Durch die starke Fixierung des Metalls im Boden kann nur ein geringer Anteil von den Pflanzenwurzeln absorbiert werden. Mutmaßlich schädigende Effekte des Elementes werden abgeschwächt. Resultierend aus der bevorzugten partikulären Bindung des Schwermetalls wäre, ähnlich wie bei Hg, die Aufnahme von Pb durch oberirdische Pflanzenbestandteile möglich. Untersuchungen von Hochwassersedimenten entlang der Fließstrecke der Elbe haben aber gezeigt, dass gemäß der BBODSCHV (1999) keine Überschreitungen des Pb-Maßnahmewertes nachgewiesen werden konnten. Hohe Elementkonzentrationen waren nur in älteren Proben erkennbar, welche vor dem August 2002 entnommen wurden (vgl. KRÜGER 2005c:54 Abbildung 5-14). Während Verunreinigungen durch As, Cd und Hg auch heute noch an der Mittleren Elbe relevant sind und eine ökotoxikologische Wirkung entfalten können, ist das Gefahrenpotential von Pb gering. Demgegenüber ist die Pb-Belastung entlang der Mulde und insbesondere nahe Freiberg um ein Vielfaches höher ausgebildet (KRÜGER 2005c:54). Auffällig ist, dass die Statistiken zu den Ni- und Zn-Konzentrationen in Tabelle 7-2 allesamt unter den korrespondierenden Werten von KRÜGER & GRÖNGRÖFT (2003:439) liegen. Markante Abweichungen sind bei den durchschnittlichen Zn-Gehalten evident, die sich um das Sechsfache voneinander unterscheiden. Bedenkliche Werte hinsichtlich des Pflanzenwachstums oder für Tierfutter werden bei Ni und Zn nicht übertroffen (vgl. Tabelle 2-1). Berücksichtigt man, dass die Daten von KRÜGER & GRÖNGRÖFT (2003:439) aus dem gesamten deutschen Elbabschnitt stammen und eine variierende Probenanzahl beinhalten, so sind die Pflanzenbelastungen des U1 und U2 mit denen früherer Messreihen konsistent. Als positiv ist sicherlich hervorzuheben, dass alle Extremwerte der älteren Daten nicht überschritten wurden.

Trotz zahlreicher zufriedenstellender Befunde für Ni, Pb und Zn, kann davon ausgegangen werden, dass in anderen Pflanzenbestandteilen höhere Belastungswerte existieren. Konkret sind höhere Schwermetallkonzentrationen in den Wurzeln, Stängeln und Sprosse der Pflanzen denkbar (LUA 2003:33, vgl. Kapitel 2.3). Da schon in den Blättern der Auenvegetation

Grenzwerte der FUTTMV (1981) für As, Cd und Hg missachtet wurden, müssen zunehmende Überschreitungen angenommen werden, wenn die Laboranalysen auf andere Pflanzenbestandteile ausgeweitet werden würden. Weiterhin sei darauf hingewiesen, dass während der Mahd oder bei der späteren Herstellung von Futtermittelerzeugnissen nicht nur die Blätter einer Pflanze genutzt werden, weshalb die Verwendung von Grassilage aus den hier untersuchten Auenflächen kritisch bewertet und idealerweise überprüft werden muss. So ist nachvollziehbar, dass das „Monitoring auf relevante unerwünschte Stoffe in Futtermitteln der Flussauengebiete“ ein fester Bestandteil im landwirtschaftlichen Untersuchungswesen der Landesanstalt für Landwirtschaft und Gartenbau (LLG) in Sachsen-Anhalt ist (LLG 2015:1). Zudem wurden seitens der LLG bereits in der Vergangenheit Empfehlungen zur landwirtschaftlichen Nutzung von Flussauen ausgesprochen, um Schadstoffe in Böden und Futtermitteln zu vermeiden beziehungsweise zu minimieren (LLG 2007). Das Samplingdesign zur Entnahme von Blattproben ist unter Berücksichtigung der Spektromettermessungen und Befliegungsdaten konzipiert wurden. Der Aufbau und die Struktur der Blätter prägen das Reflexionsverhalten der Vegetation (vgl. Kapitel 3.2). Im Rahmen der Arbeit wurden aus den aufgezeichneten Pflanzensignaturen Spektralparameter abgeleitet, die wiederum in Relation zu den Blattgehalten gesetzt wurden. Daneben detektieren optische Fernerkundungssensoren wie HySpex vordergründig die Blattoberfläche und darunterliegende Bestandteile werden nicht erfasst. Insofern ist die Beprobung der Blätter nachvollziehbar und aus methodischer Sicht konsistent.

Der Gesamtgehalt der Blätter variiert, neben der Art des Elementes, dem Tag der Probenahme und dem jeweiligen Pflanzenbestandteil, auch in Abhängigkeit von der beprobten Pflanzenspezies (SCHULZ-ZUNKEL & KRÜGER 2009:1356). Eine der wenigen Studien, in welcher diese Problematik für Elbauenstandorte aufgearbeitet wurde, stellt die Veröffentlichung von OVERESCH et al. (2007) dar. Die Autoren konnten nachweisen, dass im Beifuß (*Artemisia vulgaris*) die höchsten Konzentrationen an Cd, Cu und Hg vorlagen. Im Vergleich dazu vereinigte der Wiesen-Fuchsschwanz (*Alopecurus pratensis*) die höchsten Gehalte an As und das Rohrglanzgras (*Phalaris arundinacea*) akkumulierte am stärksten Ni, Pb und Zn (OVERESCH et al. 2007:800). Beide Pflanzengesellschaften prägen das Erscheinungsbild der Untersuchungsgebiete und wurden innerhalb des RIVA-Projektes großflächig im U1 ausgewiesen (vgl. Abbildung A4-3). Die pflanzenspezifische Schwermetallanreicherung in Überflutungsbereichen muss weiterhin erforscht werden, da diese Untersuchungen essentiell sind, um die Mechanismen und Transferpfade der Schadstoffaufnahme in Auenökosysteme präzisieren und den Verständniskern darüber erweitern zu können. Mischproben ermöglichen hingegen generelle Aussagen über die Belastungssituation der Auenstandorte und es sei angemerkt, dass oftmals die gesamte Artenvielfalt bei der Mahd oder in späteren Produktionsprozessen eingebunden wird. In diesem Kontext ist die Adaption der abgeleiteten Spektralparameter und Modellansätze auf die Befliegungsdaten ebenso relevant. Die Pixel der HySpex-Daten mit einer räumlichen Auflösung von einem bis zwei Metern beinhalten ein Mischsignal, welches sich aus der Reflexion verschiedener Pflanzenarten und Landbedeckungen zusammensetzt. Die Gegebenheiten sind gerade für andere Fernerkundungsdaten mit einer geringeren geometrischen Auflösung bedeutungsvoll, wie beispielsweise dem zukünftigen hyperspektralen ENMAP-Sensor, der mit einer räumlichen Auflösung von 30 x 30 m operieren wird (vgl. KAUF-

MANN et al. 2012). Die Entwicklung robuster multiskalärer Modelle unter Verwendung von aus Mischproben extrahierten Analysewerten kann demnach auch vorteilhaft sein.

Die eingangs in dieser Arbeit gestellte Hypothese I, in welcher ein Zusammenhang zwischen der Höhe der Schwermetallkonzentrationen und der Feinmorphologie angenommen wird, kann bei der Vegetation, anders als bei den Auenböden, nur in Einzelfällen verifiziert werden (vgl. Abbildung 6-23). Etwaige Effekte könnten durch die Mischproben abgeschwächt worden sein. Die insgesamt, im Vergleich zu Industrie- oder Bergbaugebieten, moderate Belastung der Auenböden, könnte genauso eine ausgeglichene Metallakkumulation bedingen. GRÖNGRÖFT et al. (2005) schildern etwa, dass die As-Gehalte ihrer Pflanzenproben weder mit der Topografie, noch mit der Entfernung zur Elbe korrelierten (GRÖNGRÖFT et al. 2005:472). Davon abgesehen repräsentiert die Verfügbarkeit der Bodengehalte, die an einer Vielzahl von Bodenparameter geknüpft ist (vgl. Kapitel 2.2), nur einen von zahlreichen Faktoren, welcher die Schadstoffaufnahme der Vegetation reguliert (SCHULZ-ZUNKEL & KRÜGER 2009:1356). Gerade die Quantifizierung der Metallmobilisierung, hervorgerufen durch wechselnde geochemische Verhältnisse, kann allenfalls unter standardisierten Laborbedingungen nachvollzogen werden (SCHULZ-ZUNKEL & KRÜGER 2009:1358). Anhand der Analysen konnte herausgearbeitet werden, dass erhöhte Bodenkonzentrationen, wie sie in den Senken und Flutrinnen vorliegen, nicht zwangsläufig zu einer verstärkten systemischen Aufnahme und zu höheren Pflanzengehalten führen. Dies veranschaulicht, dass die Metallaufnahme der Vegetation keinesfalls linear verläuft. Konträre Zusammenhänge zwischen Oberboden- und Pflanzenbelastungen werden auch von KRÜGER & GRÖNGRÖFT (2003:442) für As, Cd und Hg beschrieben. Während in den Böden unverkennbare Belastungsunterschiede zwischen den bei-

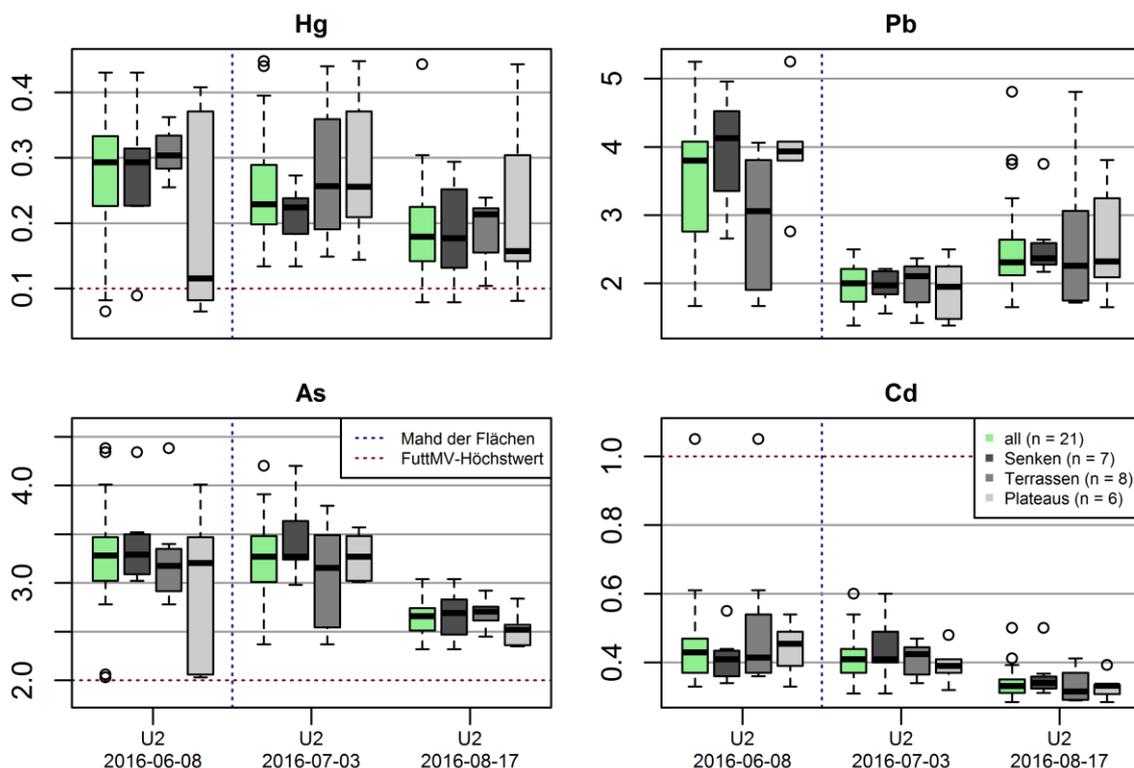


Abbildung 7-1: Veränderung der Pflanzengehalte ($\mu\text{g/g}$) ausgewählter Schwermetalle im Untersuchungsgebiet 2 für das Jahr 2016, unter Berücksichtigung der Mahd

den Untersuchungsgebieten existierten (vgl. Abbildung 6-5), waren die Differenzen in den Blattgehalten deutlich schwächer ausgeprägt (vgl. Abbildung 6-24). Dies könnte in Verbindung mit einsetzenden Sättigungseffekten stehen. Interessanterweise konnten höhere Pflanzewerte auf Standorten mit geringeren Bodengehalten ermittelt werden. Jenes stimmt mit der Aufnahmeeffizienz oder dem Akkumulationsfaktor der Pflanzen überein, welcher höher ist, wenn geringere Metallkonzentrationen im Boden vorhanden sind (GREGER 2004:11). Darüber hinaus muss der Einfluss der mehrmaligen Mahd der Auenflächen auf den saisonalen Verlauf der Pflanzengehalte diskutiert werden.

Abbildung 7-1 beinhaltet die Pflanzengehalte von Hg, Pb, As und Cd auf dem zweiten Untersuchungsgebiet im Jahr 2016, in Abhängigkeit des Zeitpunktes der Probenahme und der morphologischen Einheiten. Während die blaue Linie die Mahd zwischen den ersten beiden Zeitpunkten kennzeichnet, signalisiert die rote Linie die zuvor thematisierten Grenzwerte der FUTTMV (1981). Es wird deutlich, dass die Unterschiede zwischen den Monaten Juni und Juli für Hg, As und Cd gering ausfallen und die Mahd zu keiner signifikanten Verringerung der Metallkonzentrationen führt. Vorstellbar ist, dass durch die Mahd oberirdische Pflanzenbestandteile bis zu einer gewissen Höhe abgeschnitten werden, in Sprosse und Wurzeln angereicherte Schadstoffe aber erhalten bleiben. Die hier sichtbar werdenden Differenzen können ebenfalls durch andere Parameter verursacht worden sein, wie beispielsweise ein sich veränderndes Bodenmilieu (vgl. Kapitel 2.2). Dafür spricht, dass die Abweichungen zwischen Juli und August, während das U2 nicht gemäht wurde, größer ausfallen. Eine Ausnahme stellen die in Abbildung 7-1 gezeigten Pb-Gehalte dar, welche kurz nach der Mahd absinken und im August wieder ansteigen. Gegenteilige Entwicklungen konnten für 2015 beobachtet werden (vgl. Abbildung A7-1), was auch als Indiz für die Einflussnahme anderer Standortfaktoren angesehen werden kann. Die Bedeutsamkeit der Mahd würde sich verstärken, wenn die Auenflächen unmittelbar vor dem Erntezeitpunkt von einem Hochwasser betroffen gewesen wären. Dies hätte temporär zu einer Reaktivierung und Steigerung des systemischen und partikulären Schadstofftransfers geführt. Entsprechende Interaktionen wurden von KRÜGER (2005c:56) und GRÖNGRÖFT et al. (2005:471) wahrgenommen.

Die Analysen der Boden- und Pflanzenproben haben die Vielschichtigkeit und Komplexität der Mobilitäts- und Aufnahmefaktoren von Schwermetallen in Auenökosystemen verdeutlicht. Während die Morphologie die Verteilung der Bodengehalte prägt und Flutrinnen und Senken als Belastungsschwerpunkte herausgearbeitet werden konnten, erfordern die Pflanzengehalte eine differenzierte Betrachtung. Hier wird die Schadstoffanreicherung maßgeblich von den Eigenschaften der Metalle bestimmt und mehrere Teilpfade sind im Boden-Pflanze-Wirkungspfad aktiv. Dies erklärt die Überschreitungen elementspezifischer Grenzwerte seitens der Bodenschutz- und Futtermittelverordnung, sowohl von mobilen, als auch von immobil Elementen. Insofern muss die Qualität des Elbwassers und der Elbsedimente, insbesondere bei Hochwasserereignissen, regelmäßig geprüft werden. Gleichzeitig gilt es, Langzeitstudien mit einem konsistenten Probenahmekonzept und repräsentativen Vergleichsflächen zu etablieren. Innerhalb weniger Flusskilometer können die Metallkonzentrationen starken räumlichen und zeitlichen Schwankungen unterlegen sein. Die Gegenüberstellung solcher Messungen kann nur durch eine valide Datengrundlage gewährleistet werden.

7.3 Genauigkeit der modellierten Gesamtgehalte der Böden

Für die Quantifizierung der Metallkonzentrationen ist die Bindung derer an spektral sensitive Bodenbestandteile essentiell (vgl. Kapitel 3.1). Die Korrelationskoeffizienten zwischen den Gesamtgehalten der Auenböden liefern dahingehend Indizien über analoge Bindungsmechanismen und dem geochemischen Charakter der analysierten Elemente (vgl. Abbildung 6-6, Tabelle A6-1). Hohe Korrelationen zwischen den siderophilen Elementen Fe und Ni ($r = 0.87$) wurden ebenso in den Studien von WU et al. (2005b:1054) ($r = 0.84$) und RIEDEL et al. (2018:193) ($r = 0.83$) nachgewiesen. Der Korrelationskoeffizient zwischen Fe und Cu war mit 0.65 ähnlich ausgebildet wie in WU et al. (2005b:1054) ($r = 0.63$) und REN et al. (2009:723) ($r = 0.74$). Die korrespondierenden Werte in VOHLAND et al. (2009:203) und RIEDEL et al. (2018:193) lagen hingegen nur zwischen 0.21 und 0.25. Die in WU et al. (2007:923) beschriebenen Korrelationen zwischen Fe und anderen Metallen (As, Cu, Ni, Zn), mit r -Werten zwischen 0.81 und 0.98, konnten in der vorliegenden Arbeit lediglich für Ni nachvollzogen werden. Demgegenüber war der lineare Zusammenhang zwischen Fe und Pb mit 0.76 bedeutungsvoller als in den Studien von WU et al. (2005b:1054), WU et al. (2007:923), VOHLAND et al. (2009:203) und RIEDEL et al. (2018:193). R -Werte von über 0.90, wie sie zwischen Cr und Cu, Cr und Hg sowie zwischen Cu und Zn errechnet wurden, sind in WU et al. (2005b) nicht existent. In der Studie wurden für diese Elementkombinationen Korrelationskoeffizienten zwischen 0.36 und 0.77 abgeleitet (WU et al. 2005b:1054). Die signifikanten Korrelationen zwischen Cu und Pb ($r = 0.88$) respektive Cu und Zn ($r = 0.94$) stimmen mit den Ergebnissen in RIEDEL et al. (2018:193) überein, wenngleich die r -Werte in VOHLAND et al. (2009:203), wo auch Auenböden beprobt wurden, für diese Elemente mit 0.67 und 0.73 merklich geringer ausfallen. Dieser Wertebereich ist in Einklang mit den Resultaten von DONG et al. (2011:595), bei denen Werte von 0.68 und 0.76 beschrieben werden. Der schwache Zusammenhang zwischen Cd und Fe ($r = 0.54$) war auch in WU et al. (2007:923) ($r = 0.52$) evident und starke Korrelationen, wie zwischen Cd und Ni ($r = 0.82$) beziehungsweise Cd und Zn ($r = 0.95$), wurden in SIEBIELEC et al. (2004:2059) ersichtlich. Dagegen konnte der hohe r -Wert zwischen Cd und Cu ($r = 0.94$) in den Ausarbeitungen von PANDIT et al. (2010:4120) und SIEBIELEC et al. (2004:2059) nicht bestätigt werden. Die hohen Korrelationskoeffizienten zwischen den chalcophilen Elementen Cu, Pb und Zn ($r \geq 0.85$) verdeutlichen den generellen Zusammenhang dieser Metalle untereinander (e.g. PANDIT et al. 2010:4120, DONG et al. 2011:595, RIEDEL et al. 2018:193). Die genannten Diskrepanzen sind durch divergierende Standortfaktoren und Bodenparameter erklärbar. Daneben beeinflusst der Belastungsgrad die Bindungsmechanismen der Schwermetalle in der Bodenmatrix. Dies zeigt, dass die Interkorrelationen immer ökosystemabhängig und standortspezifisch bewertet werden müssen. Interessant ist nun, inwieweit sich die Relationen der Metallgehalte untereinander in den Korrelationsspektren und späteren Modellergebnissen widerspiegeln.

Die Quantifizierung von Metallen innerhalb des spektralen Wellenlängenbereiches von 350 bis 2500 nm erfolgt bekanntlich auf Grundlage von Eisenoxiden, Tonmineralen und organischen Bodenbestandteilen (vgl. Kapitel 3.3), weshalb diagnostische Merkmale in Verbindung mit den Metallen in der VIS-, NIR- und SWIR-Region hervortreten können. Im Allgemeinen war der Verlauf aller Korrelationsspektren miteinander vergleichbar. Lediglich die

Intensität der Korrelationen variierte elementspezifisch, wobei für alle Metalle die stärksten Zusammenhänge im SWIR-Bereich zwischen 1500 und 2250 nm detektiert werden konnten (vgl. Abbildung 6-9 und 6-10). Die Korrelationen nehmen nahe den durch OH-Banden hervorgerufenen Absorptionsmerkmalen um 1400, 1900 und 2100 nm ab (WHITING et al. 2004:537, SHI et al. 2014:167). Folglich scheinen diese Features andere Merkmale oder potentielle spektrale Wechselwirkungen mit den Metallionen zu überlagern. HE et al. (2009) skizzieren starke Korrelationen zwischen Bodenspektren und SOM nahe 574, 849, 1543, 1681 und 2187 nm (HE et al. 2009:39f.), aber in keinem dieser Wellenlängenbereiche waren Zusammenhänge zu den Metallgehalten der Auenflächen erkennbar. Nennenswerte Interaktionen wären durch die Komplexierung von Schwermetallen an SOM denkbar gewesen (vgl. SCHEFFER & SCHACHTSCHABEL 2010:42, SHI et al. 2014:168). Zudem wurden in diversen Untersuchungen Relationen zwischen organischen Bodenbestandteilen auf Auenstandorten und Schwermetallen erörtert. KOOISTRA et al. (2001) errechneten etwa positive r-Werte von 0.74 für die Korrelationen zwischen SOM und Cd beziehungsweise SOM und Zn (KOOISTRA et al. 2001:101). Die in VOHLAND et al. (2009) analysierten Elemente Cu, Fe, Pb und Zn korrelierten stärker als 0.60 mit diesem Bodenparameter (VOHLAND et al. 2009:203).

Daneben wurden auch gegensätzliche Tendenzen veröffentlicht. So beschreiben REN et al. (2009) lediglich schwach negative Zusammenhänge zwischen SOM und As ($r = -0.21$), Cu ($r = -0.27$) und Fe ($r = -0.18$) (REN et al. 2009:722). Die Korrelationen in RIEDEL et al. (2018), bezogen auf TOC und mehrere Elemente (As, Ca, Cu, Ni, Pb, Zn), waren ebenfalls schwach und durch r-Werte zwischen 0.20 und 0.47 gekennzeichnet (RIEDEL et al. 2018:193). Zwar ist das in den Korrelationsspektren von XIA et al. (2007:3451) und VOHLAND et al. (2009:204) enthaltene C_{org} -Merkmal zwischen 400 und 530 nm in einzelnen Plots vorhanden, es ist allerdings nur schwach ausgeprägt und führt zu keinem nennenswerten Anstieg im Korrelationskoeffizienten (vgl. Abbildung 6-9 und 6-10). SONG et al. (2012) ordnen diesem Wellenlängenbereich Features zwischen Bodenelementen und Fe_2O_3 und Al_2O_3 zu. As und Cu korrelierten beispielsweise nahe 428 und 538 nm am stärksten und die Autoren benennen die Fe^{3+} -Absorption als Ursache für diese Wechselwirkungen (SONG et al. 2012:78). Konkret verweisen die Autoren auf ein spektrales Feature nahe 600 nm, welches mit Cd-, Hg- und Pb-Gehalten korrelierte und auf das Vorhandensein von organischem Kohlenstoff zurückgeführt werden konnte (SONG et al. 2012:79). Übereinstimmende Korrelationsmerkmale waren in den Bodenspektren der Auen nicht präsent. Demnach muss davon ausgegangen werden, dass die erläuterten Parameter für die Bindung und Freisetzung der Metallionen in den Böden der beiden Untersuchungsgebiete nur von geringer Relevanz sind oder zumindest spektral nicht in Erscheinung treten. Die Trocknung und Homogenisierung der Bodenproben kann Einfluss auf das Reflexionsverhalten der Böden genommen und mutmaßlich zu einer Abschwächung bestimmter Merkmale, wie den OH-Banden, geführt haben.

Dies würde den geringen Wertebereich der Bodenreflexionen (vgl. Abbildung 6-8) und den identischen Verlauf der Korrelationsspektren erklären. Auf Grundlage der Korrelationsspektren nahmen SONG et al. (2012) eine Gruppierung in As, Cu, Cr sowie Hg, Cd, Pb vor (vgl. SONG et al. 2012:79 Abbildung 3), wobei sich die Spektren erheblich von den korrespondierenden Plots in dieser Arbeit unterscheiden (vgl. Abbildung 6-9 und 6-10). Selbiges gilt für die in XIA et al. (2007) visualisierten Korrelationskoeffizienten für Cd (vgl. XIA et al.

2007:3452 Abbildung 5). Anhand der in VOHLAND et al. (2009) verwendeten Daten konnten die Spektren von Fe, Mn und Cu, Pb, Zn differenziert werden (vgl. VOHLAND et al. 2009:204 Abbildung 3 und 4). Die Koeffizienten von Cu, Pb und Zn ähneln in ihrem Erscheinungsbild den Korrelationen der jeweiligen Elemente in der vorliegenden Ausarbeitung, wenngleich die Zusammenhänge im Bereich der Wasserbanden gegensätzlich ausgebildet sind. Demgegenüber sind die Fe-Plots in VOHLAND et al. (2009:204) und RIEDEL et al. (2018:194) nahezu identisch, obwohl in den Studien Standorte mit ungleichen Bodeneigenschaften beprobt wurden. Letztere gruppierten die Messungen in Al, Fe, Ni und Cu, Pb, Zn, As (vgl. RIEDEL et al. 2018:194 Abbildung 3a und b). Die Graphen von Cu, Pb, Zn und As sind mit denen in Abbildung 6-9 und 6-10 komparabel. Zugleich zeigen die Plots, dass sich die Interkorrelationen nur bedingt in den Korrelationsspektren widerspiegeln. So korrelieren etwa die siderophilen Metalle Fe und Ni stark miteinander, die Korrelationsspektren weichen aber unverkennbar voneinander ab. Ein Beispiel für auf die Absorption der Böden beruhende Korrelationsspektren liefert die Studie von SIEBIELEC et al. (2004). Die Autoren kategorisierten die Spektren in Ni, Fe, Cu und Cd, Zn, Pb (vgl. SIEBIELEC et al. 2004:2066 Abbildung 9).

Die ungleichen Einteilungen zeigen, dass die Korrelationsspektren keinesfalls als allgemeingültig betrachtet werden dürfen und standortspezifischen Variationen unterlegen sind. Sie können zur Identifikation und Interpretation spektral sensitiver Wellenlängenbereiche und Bodenbestandteile eingesetzt werden. Die mangelnde Generalisierbarkeit kann einerseits als nachteilig angesehen werden, andererseits liegt der Vorteil reflexionsspektrometrischer Messungen genau darin, diese Differenzen detektieren zu können. Es ist nachvollziehbar, dass in anthropogen geprägten Gebieten andere Eintragspfade und Bindungsmechanismen aktiv sind (e.g. KEMPER & SOMMER 2002, WU et al. 2005a, CHOE et al. 2008, CHOE et al. 2009, PANDIT et al. 2010, LIAN et al. 2015), als auf naturnahen Standorten (e.g. MALLEY & WILLIAMS 1997, KOOISTRA et al. 2001, VOHLAND et al. 2009) und unterschiedliche Bodenregionen divergente Schadstoffdynamiken aufweisen. Weiterhin erachten SHI et al. (2014) Metallkonzentrationen von mindestens 4000 mg/kg als erforderlich, damit Elemente wie Cu, Cr oder Ni Absorptionsfeatures in Böden hervorrufen (SHI et al. 2014:167). Derartige Belastungsniveaus konnten in den beiden Untersuchungsgebieten nicht erwartet und folglich kann eine direkte Quantifizierung der Schwermetallgehalte mit Hilfe der Spektromettermessungen nicht vorgenommen werden (vgl. RATHOD et al. 2013:408). Die moderaten Bodengehalte sind somit ein weiterer Grund für den vergleichsweise homogenen Verlauf der Korrelationsspektren. Dennoch sind die starken Zusammenhänge mit r -Werten < -0.60 , die für nahezu jedes Element im NIR- und SWIR-Bereich sichtbar wurden, ein erster Hinweis darauf, dass spektral aktive Bodenbestandteile in Verbindung mit den Metallkonzentrationen stehen und die Reflexionen möglicherweise als Prädiktoren zur Bestimmung der Gehalte verwendet werden können.

Zur Quantifizierung der Bodengehalte wurde die PLSR eingesetzt, welche sich in den vergangenen Jahren als multivariates Regressionsverfahren in diesem Forschungsfeld etabliert und in zahlreichen Studien Anwendung gefunden hat (e.g. SIEBIELEC et al. 2004, WU et al. 2007, MOROS et al. 2009, SONG et al. 2012). Im Vergleich zur MLR sehen WU et al. (2005b) die Vorteile der PLSR darin, dass sie mit Multikollinearität und einer relativ geringen Probenanzahl gegenüber den Inputvariablen umgehen kann. Da die Komponenten der PLSR gleichermaßen die Spektraldaten und die *response*-Parameter berücksichtigen, kann sie häufig ein-

fachere und präzisere Modelle als eine PCR generieren. Ferner wird durch die Bereitstellung der Regressionskoeffizienten dem *Black Box*-Charakter, welcher vielen Ansätzen, wie etwa neuronalen Netzwerken, anhaftet, entgegengewirkt (WU et al. 2005b:1052). Basierend auf der PLSR konnten im Allgemeinen die Gesamtgehalte der Böden in beiden Untersuchungsgebieten sehr gut abgeschätzt werden. Damit kann die im einleitenden Kapitel gestellte Hypothese II, in welcher robuste Modelle auf Grundlage der Bodenspektren postuliert wurden, bestätigt werden. Eine Ausnahme stellen lediglich die prognostizierten As-Konzentrationen dar, wobei, wie im vorhergehenden Kapitel thematisiert, etwaige Ungenauigkeiten bei den Laboranalysen die Modellgenauigkeit negativ beeinflusst haben könnten. Ungeachtet dessen wurden in den Studien von REN et al. (2009), SONG et al. (2012) und RIEDEL et al. (2018), unter Verwendung von PLSR-Modellen, mit 0.62, 0.46 und 0.28 auch verhältnismäßig niedrige Determinationskoeffizienten für As ermittelt (vgl. REN et al. 2009:724, SONG et al. 2012:82, RIEDEL et al. 2018:195). Für alle anderen Elemente lagen die besten R^2 -Werte der Kalibrierung zwischen 0.78 und 0.94 und das optimale Bestimmtheitsmaß der Validierung zwischen 0.67 und 0.89 (vgl. Tabelle 6-5 und 6-6). Zwar wurde die Praktikabilität multivariater Modelle in Kombination mit Spektrometermessungen in der Vergangenheit nachgewiesen (vgl. RATHOD et al. 2013:412 Tabelle 1, SHI et al. 2014:172 Tabelle 2), die Anwendung derer in vergleichbaren Auenökosystemen ist bisher aber selten. Zu Untersuchungen, welche PLSR-Verfahren zur Quantifizierung von Metallkonzentrationen in Auenböden genutzt haben, zählen die Veröffentlichungen von KOOISTRA et al. (2001) und VOHLAND et al. (2009). KOOISTRA et al. (2001) errechneten R^2 -Werte von 0.88 und 0.90 für Cd und Zn (KOOISTRA et al. 2001:104). Ähnlich gute Prognosen konnten für beide Elemente auf den Flächen der Mittleren Elbe getroffen werden, mit R^2 -Werten von 0.86 für Cd und 0.84 für Zn (vgl. Tabelle 6-6). Konträr dazu liegt das R^2 für Zn in VOHLAND et al. (2009) bei 0.56. Auch die Modelle für Cu ($R^2 = 0.71$) und Pb ($R^2 = 0.62$) waren weniger robust, da für die Elbflächen R^2 -Werte von 0.85 für Cu und 0.89 für Pb abgeleitet wurden (vgl. Tabelle 6-6). Das R^2 für Fe (0.67) ist hingegen mit dem Resultat in VOHLAND et al. (2009) identisch (VOHLAND et al. 2009:206). Unabhängig von der Lokalität der Testgebiete fügen sich die Ergebnisse der Arbeit sehr gut in das Gesamtbild bisheriger Untersuchungen ein (vgl. SCHWARTZ et al. 2011:76, SHI et al. 2014:172) und generell konnten zwei wesentliche Faktoren herausgearbeitet werden, welche auf die Güte der Regressionsmodelle eingewirkt haben.

Zum einen haben die angewandten Vorprozessierungstechniken zur Normalisierung der Spektren (OR, OR-d1, OR-d2, MSC, MSC-d1, MSC-d2, SNV, SNV-d1, SNV-d2, CR, CR-1, CR-2, vgl. Kapitel 5.1.2) die Qualität der Ergebnisse positiv beeinflusst. Insbesondere CR-, MSC- und SNV-korrigierte Spektren führten zu einer Verbesserung der Modellgenauigkeit, wobei die Differenzen gegenüber den Originalspektren oftmals gering waren. KOOISTRA et al. (2001) nutzten ebenfalls verschiedenartig normalisierte Spektren (MSC, SNV, d1), wodurch die Anzahl an benötigten PLSR-Faktoren reduziert werden konnte. Die Fehlerrate der Modelle war aber unter Verwendung der Originalspektren geringer (KOOISTRA et al. 2001:103). Laut KOOISTRA et al. (2001) ist die adäquate Korrektur von Bodenspektren vielmehr bei der direkten Datenaufnahme im Gelände bedeutsam, um Einflüsse, wie die Oberflächenrauigkeit oder den Feuchtegehalt des Bodens, zu minimieren (KOOISTRA et al. 2001:105). Auch in der Veröffentlichung von MOROS et al. (2009) wurden für einzelne Elemente, wie Al, Cu und Ni,

bessere Modelldurchläufe mit unkorrigierten Spektren erzielt. Dennoch waren die Vorteile einer Vorprozessierung für den überwiegenden Anteil der Prognosen erkennbar (MOROS et al. 2009:9317). Dies stimmt mit den Resultaten von VOHLAND et al. (2009) überein, in denen der Mehrwehrt einer MSC offensichtlich war. Zugleich bewerten die Autoren die Ableitung des Referenzspektrums aus den Kalibrierungsdaten kritisch, da dies eventuell die Modellqualität affizieren könnte (VOHLAND et al. 2009:206). Entgegen anderen Ableitungen (CR, d1, d2) bevorzugten ZHENG et al. (2011) MSC-Spektren für die Vorhersage von As (ZHENG et al. 2011:173). RIEDEL et al. (2018) empfehlen SNV- und SNV-d1-Spektren als Eingangsdaten für PLSR-Modelle. Die Autoren erzielten mit diesen Normalisierungen die höchsten Genauigkeiten (RIEDEL et al. 2018:197). Die Studien und die vorliegende Arbeit zeigen, dass eine Vorprozessierung der Bodenreflexionen auf jeden Fall sinnvoll ist, aber keine allgemeingültigen Empfehlungen hinsichtlich der idealen Korrekturmethode ausgesprochen werden können. Das Ermitteln der optimalen Datenvorverarbeitungs- und Kalibrierungsmethode wurde schon von CHANG et al. (2001:487) als größte Herausforderung und Limitation bei solchen Verfahren angesehen. Ergänzend dazu konnten für die Schwermetalle mit den stärksten Zusammenhängen in den Korrelationsspektren ($Cr > Zn > Cd > Cu > Ni$) auch zufriedenstellende Modellergebnisse abgeleitet werden ($R^2 = 0.79 - 0.85$) (vgl. Tabelle 6-6), sodass derartige Analysen im Vorfeld der Modellentwicklung zu empfehlen sind und Hinweise über die Vorhersagefähigkeit der jeweiligen Elemente liefern können.

Andererseits haben die Validierungsstrategien ($U1_{kal} \rightarrow U2_{val}$, $U2_{kal} \rightarrow U1_{val}$, KS) auf die Statistiken der PLSR-Modelle Einfluss genommen, was hauptsächlich in Relation zu den unterschiedlichen Belastungsniveaus auf den beiden Testflächen gesehen werden muss (vgl. Tabelle 6-4, Abbildung A6-2). Dies veranschaulicht, wie wichtig ein vergleichbarer Wertebereich bei den Kalibrierungs- und Validierungsmodellen ist, besonders wenn die Quantifizierung der Metalle indirekt über deren Bindung an spektral wirksame Bodenbestandteile vorgenommen wird. Daher wird die mangelnde Übertragbarkeit entsprechender Modellansätze häufig als weitere Limitation genannt (e.g. SIEBIELEC et al. 2004:2068, VOHLAND et al. 2009:207). KOOISTRA et al. (2001:105) halten hingegen eine Anwendung ihrer kalibrierten Modelle auf andere Auenstandorte für möglich. Zudem verdeutlichen etwa die Studien von CHANG et al. (2001) und RIEDEL et al. (2018), dass die Genauigkeit von Regressionsmodellen sehr gut sein kann, wenn diese auf einer sehr heterogenen Datengrundlage und einer Vielzahl von Bodentypen basieren. Dahingehend ist es essentiell Störfaktoren, welche die Bodenreflexionen beeinflussen können, zu minimieren und analoge Rahmenbedingungen für die Spektrometermessungen zu gewährleisten. Dies schließt den Messaufbau, die Vorverarbeitung der Bodenproben, die Erfassung und Normalisierung der Spektren sowie die Modellentwicklung ein, welche dadurch, wie von LIAN et al. (2015:7) kritisiert, sehr zeitaufwendig sein kann. Weiterhin muss der Einsatz der VIS-, NIR- und SWIR-Spektrometrie in Verbindung mit multivariaten Modellen zur in situ Bestimmung von Metallkonzentrationen in Böden weiter getestet und ausgebaut werden. Die Entwicklung könnte durch die Etablierung von Messstandards vorangetrieben werden. Ein Protokoll mit denkbaren Richtlinien für die Beprobung und Bemessung von kontaminierten Böden ist beispielsweise in HORTA et al. (2015:193) abgebildet. Ferner würden einheitliche Standards die Gegenüberstellung zukünftiger Studien vereinfachen und die Methoden anwendungsfreundlicher gestalten. Durch die Implementierung von

Routinen kann eine MSC- oder SNV-Korrektur der Bodenspektren problemlos im Gelände erfolgen. Im Hinblick auf die Elbstandorte verdeutlichen gerade die sehr guten Modellergebnisse für die ökotoxikologisch wirksamen Elemente Cd und Pb, dass mittels hyperspektraler Bodeninformationen die Beprobung und das Monitoring der Auenstandorte unterstützt und Verunreinigungen wirksam detektiert werden können.

7.4 Einschätzung der modellierten Gesamtgehalte der Vegetation

Ähnlich wie bei den Böden zuvor, können in Pflanzenbestandteilen angereicherte Metalle Anomalien im Reflexionsverhalten hervorrufen. Relationen zwischen vegetativen Spektralparametern und Elementkonzentrationen ließen sich im Rahmen diverser Studien ermitteln. In CLEVERS et al. (2004) korrelierte die REP mit Pb-Bodenkonzentrationen und Zusammenhänge zwischen verschiedenen Indizes und Ratios (e.g. NDVI, OSAVI, R550, R1048_1021, RVI) zu As-, Cr- und Hg-Gehalten in Pflanzen wurden etwa in DUNAGAN et al. (2007), SRIDHAR et al. (2007a), BANDARU et al. (2010) und LIU et al. (2011b) sichtbar. Folglich wurde der Nutzen etablierter sowie bisher nicht verwendeter Spektralparameter zur Abschätzung der Metallgehalte in der Auenvegetation getestet (vgl. Tabelle 5-1). Daneben bietet diese methodische Herangehensweise weitere Vorteile. Zum einen können, je nach Art der Indizes, atmosphärische Effekte minimiert und der Einfluss unerwünschter Hintergrundstreuungen reduziert werden (HABOUDANE et al. 2004:338), was die Modellentwicklung robuster gestaltet. Andererseits wird durch die Normalisierung der Spektren deren Vergleichbarkeit erhöht. Dies ist für die Arbeit von enormer Bedeutung, da die Untersuchungsgebiete mehrmals im Jahr spektrometriert und befliegen wurden.

Darüber hinaus wurden mit den HySpex-Aufnahmen und den *ASD Fieldspec pro FR*-Geländemessungen Datensätze mit abweichenden spektralen Auflösungen verwendet. Gleichzeitig stehen die Spektralparameter in direkter Verbindung mit Pflanzen- und Blatteigenschaften, wie dem Wassergehalt oder der Chlorophyllkonzentration (e.g. PEÑUELAS & FILELLA 1998, GITELSON et al. 2002, GALVAO et al. 2005, HUNT et al. 2013), was die Interpretation der genutzten Variablen erleichtert. Bezogen auf die Quantifizierung von Metallkonzentrationen mittels hyperspektraler Fernerkundungsdaten empfehlen SHI et al. (2014) in ihrer Veröffentlichung, im Hinblick auf zukünftige Fragestellungen und Anforderungen, verstärkt Methoden zur Variablenselektion einzubinden (SHI et al. 2014:173). Dieser Vorschlag wurde durch die Integration eines RF-Ansatzes im Vorfeld der Modelldurchläufe berücksichtigt. Da verschiedene Transferpfade in Kombination mit zahlreichen Faktoren die Schadstoffakkumulation der Pflanzen beeinflussen (vgl. Kapitel 2.2, SCHULZ-ZUNKEL & KRÜGER 2009:1356), wurde angenommen, dass zu unterschiedlichen Messzeitpunkten andere Parameter sensitiv auf die Metallgehalte reagieren und diese Zusammenhänge elementspezifisch ausgeprägt sind. Dies wurde auch im Rahmen des Literaturreviews ersichtlich, wo je nach konzeptionellem Aufbau, analysiertem Schwermetall, Pflanzenart und Testgebiet die angewandten Spektralparameter variierten. Zudem erforschten bisher nur wenige Studien, inwieweit Metallgehalte in Auenvegetation spektral abgeschätzt werden können, weshalb keine Einschränkungen oder Präferenzen bezüglich der abgeleiteten Spektralparameter vorgenommen wurden. Insofern ist ein au-

tomatisierter Ansatz zur Variablenselektion, wie er in der vorliegenden Ausarbeitung gewählt wurde, absolut nachvollziehbar.

KOOISTRA et al. (2004) und CLEVERS et al. (2004) wählten als Untersuchungsgebiet eine Auenfläche in den Niederlanden. Die dort aufgenommenen Vegetationsspektren wurden allerdings in Verbindung mit den Gesamtgehalten der Böden betrachtet. In diesem Kontext konnte die Bedeutung der REP und der NIR-Region herausgearbeitet werden (KOOISTRA et al. 2004:287, CLEVERS et al. 2004:3891). Weitere Variationen im *Red Edge*-Bereich, verursacht durch Metallgehalte in Böden oder Pflanzen, wurden von DUNAGAN et al. (2007), SRIDHAR et al. (2007b), REN et al. (2008) und LIU et al. (2008) nachgewiesen. Häufig wurden diese Änderungen durch eine Verschiebung der *Red Edge*, dem sogenannten *blue shift*, sichtbar (SRIDHAR et al. 2007b:1050, REN et al. 2008:324). Weitere Anomalien traten beim NDVI, OSAVI und anderen Indizes (e.g. SRIDHAR et al. 2007b, REN et al. 2010, LIU et al. 2011b, VAN DEVENTER & CHO 2014), bei diversen Ratios oder wellenlängenspezifischen Reflexionen (e.g. SRIDHAR et al. 2007a, SRIDHAR et al. 2007b, SLONECKER et al. 2009, BANDARU et al. 2010), bei Absorptionsmerkmalen (e.g. REN et al. 2008, GÖTZE et al. 2010) und bei Flächenanteilen unterhalb der Reflexionskurve (e.g. LIU et al. 2008, WANG et al. 2015) auf. Wenn gleich alle benannten Merkmale in den Modelldurchläufen eingebunden wurden, können die erzielten Resultate nur schwer mit den vorhergehenden Veröffentlichungen gegenübergestellt werden. Der Großteil der Arbeiten sind als Labor- oder Gefäßversuche charakterisiert, bei denen die Pflanzenspektren unter standardisierten Bedingungen aufgezeichnet wurden. Oftmals wurden die Metallkonzentrationen künstlich hinzugefügt oder der Belastungsgrad kontinuierlich erhöht (e.g. SLONECKER et al. 2009, BANDARU et al. 2010, GÖTZE et al. 2010), bis die Spektralparameter sensitiv auf die Metallgehalte reagierten. Auch wenn solche Studien essentiell sind, um den Einfluss von Schwermetallen auf die Pflanzenphysiologie und spektrale Pflanzensignaturen zu ergründen, sind die Resultate nur eingeschränkt auf naturnahe Ökosysteme übertragbar, da beispielsweise Transferpfade oder Mobilitätsfaktoren in ihrer vollen Komplexität nicht abgebildet werden können. Vereinfachte Annahmen müssen aber auch bei Geländemessungen getroffen werden.

Als problematisch ist zu bewerten, dass die genannten Parameter nur bei sehr hohen Metallkonzentrationen direkt in Relation mit den Pflanzengehalten stehen. Vielfach korrelieren sie indirekt durch die Entstehung von Stressmerkmalen mit den Schadstoffen. DUNAGAN et al. (2007) beobachteten einen Hg-induzierten Vegetationsstress, welcher die Chlorophyllkonzentration und den Stoffwechsel der Pflanzen beeinflusste (DUNAGAN et al. 2007:309). Aus der Akkumulation von Metallen (As, Cr) resultierten in SRIDHAR et al. (2007a) strukturelle und physiologische Blattveränderungen, die sich in Stressmerkmalen widerspiegelten. Die Identifizierung einzelner stressinduzierender Elemente war jedoch nicht möglich (SRIDHAR et al. 2007a:1064). Sinkende Chlorophyllgehalte in Folge steigender Elementkonzentrationen in Pflanzen wurden von LIU et al. (2008:205), LIU et al. (2010:226) sowie WANG et al. (2015:15348) beschrieben. SLONECKER et al. (2009:655) notierten eine gehemmte Biomasseproduktion und toxische Symptome, welche durch die Aufnahme von As verursacht wurden. Das Element führte ebenso in BANDARU et al. (2010:4169) zu einem verminderten Pflanzenwachstum und abnehmende Blattwassergehalte. Ein metallbedingter Einfluss auf die Lignin- und Proteinproduktion wird in GÖTZE et al. (2010:136) vermutet. Die genannten Symptome

stimmen mit den einleitend geschilderten potentiellen Schädigungsmerkmalen, welche Metalle bei Pflanzen hervorrufen können, überein (vgl. Kapitel 2.3 Tabelle 2-2).

Vergleichbare Stressmerkmale, wie sie in der Tabelle aufgelistet sind oder in den vorangegangenen Studien observiert wurden, waren auf den beiden Auenstandorten nicht ersichtlich oder höchstens kleinräumig ausgebildet. Sowohl die Ergebnisse der nicht-abbildenden Spektrometrie, als auch der HySpex-Daten, offenbarten für diverse Pflanzenbestandteile keinen schwerwiegenden Vegetationsstress (vgl. Abbildung 6-14 - 6-19). Vielmehr erscheinen die Auenflächen als hochvitale Ökosysteme. Variationen in Bezug zur Morphologie existierten ebenfalls nicht (vgl. Abbildung 6-22). Dies könnte mehrere Ursachen haben. Einerseits begünstigten innerhalb der Untersuchungsjahre die niederschlagsreichen Sommermonate die Pflanzenvitalität der Auengebiete (vgl. Abbildung 4-5), was etwa durch sehr hohe NDVI- oder NDWI-Werte veranschaulicht wurde (vgl. Abbildung 6-14 - 6-19). Andererseits könnten die höheren Bodenwassergehalte in den Senken und Flutrinnen (vgl. Abbildung 6-1) etwaige negative Effekte der Schwermetalle überlagert haben. In der Freilandstudie von CLEVERS et al. (2004) waren ebenfalls keine negativen Auswirkungen von Schwermetallen (Ni, Cd, Cu, Zn, Pb) auf die Biomasse von Grünland feststellbar. Die Autoren verweisen auf die Einflussnahme von Parametern, wie die Bodenfeuchte oder die Menge an organischer Substanz (CLEVERS et al. 2004:3888f.). Weiterhin besitzen Pflanzen die Fähigkeit, Metalle bis zu einem gewissen Grad zu akkumulieren (SCHULZ-ZUNKEL & KRÜGER 2009:1351) und es ist davon auszugehen, dass die beprobte Vegetation sehr gut an die Standortbedingungen der Auen, wie die fluktuierenden Wasserstände der Mittleren Elbe, angepasst ist. Ergänzend dazu muss beachtet werden, dass die analysierten Metalle Ca, K, Mn und Zn allesamt Hauptnähr- oder Spurennährelemente repräsentieren und sie gleichermaßen einen essentiellen Nutzen für Pflanzen und Tiere besitzen (vgl. Kapitel 2.1). Die Aufnahme dieser Elemente kann somit positiv auf die Pflanzenvitalität einwirken. Stresssymptome treten eher durch einen Mangel an diesen Elementen auf.

Letztlich waren die ermittelten Pflanzengehalte zu gering, um flächendeckenden Vegetationsstress auslösen zu können. Die fehlenden Stressmerkmale beeinflussen folglich auch die Qualität der MLR- und SVM-Modelle. Interessanterweise streuten die spektralen Parameter im Bereich der *Red Edge* und der Ratio aus 1048 und 1021 nm am stärksten (vgl. Abbildung 6-20 und 6-21). Beides sind Merkmale, welche in Verbindung mit Metallgehalten variieren können (vgl. CLEVERS et al. 2004:3891, BANDARU et al. 2010:4174). Eine Verbindung zu den analysierten Schwermetallen kann nur vermutet werden, da diese Parameter gar nicht (REPI_spec) oder nur selten (R1048_1021, vgl. Tabelle A6-5 - A6-8) beim RF ausgewählt und in den Modellsetups integriert wurden. Obwohl die Ableitung einer Vielzahl an Spektralparametern erfolgte, wurden, sowohl für einzelne Elemente, als auch elementübergreifend, wiederholt identische Parameter bei der Variablenselektion ausgewiesen (vgl. Abbildung 6-28). Dies würde für konsistente Wirkungszusammenhänge sprechen. So sind die AUC_CR0983, der ARI1, der ARI2, der CVI, der NPQI und der PRI am häufigsten in Modelldurchläufen berücksichtigt worden. Die Fläche und die Indizes reagieren im Allgemeinen auf Veränderungen in der Zellstruktur und biochemischer Blatteigenschaften und im Detail auf Anthocyan, Chlorophyll und dem Wassergehalt (vgl. Tabelle A5-1 - A5-5). Während variierende Chlorophyll- und Wassergehalte in Zusammenhang mit Metallkonzentrationen in

Pflanzen hinreichend belegt sind (e.g. LIU et al. 2008, BANDARU et al. 2010, WANG et al. 2015), wurden spektrale Interaktionen zu Anthocyanen bisher nicht konkretisiert. MOURATO et al. (2015:17984) verweisen auf die Studien von MOBIN & KHAN (2007) und HALE et al. (2001), in denen Anthocyangehalte durch Cd und Molybdän (Mo) affektiert wurden. Gleichwohl sind in den Arbeiten keine Spektren verwendet und Pflanzenspezies betrachtet worden, die in Auengebiete vorkommen. Obwohl ein Zusammenhang zwischen der Schwermetallbelastung und der Pflanzenvitalität anhand von Stressmerkmalen nicht sichtbar wurde und Hypothese IV somit falsifiziert werden muss, lassen die Resultate Wechselwirkungen zwischen den Spektralparametern und Elementkonzentrationen erahnen. RATHOD et al. (2013) geben zu bedenken, dass der Rückgang der Chlorophyllkonzentration eine generelles Symptom von Pflanzen auf zahlreiche Stressoren sein kann und daraus resultierender Vegetationsstress nicht zwingend Schwermetallstress charakterisiert (RATHOD et al. 2013:417). Eine Separierung natürlicher und anthropogener Stressoren ist oftmals nicht möglich, da diese Faktoren sich überlagern oder simultan wirken und identische Pflanzenreaktionen hervorrufen können. Auffällig ist, dass die Berechnung der zuvor genannten Parameter auf den VIS- oder dem NIR-Bereich beruht und die SWIR-Region für diese Merkmale unbedeutend ist. Am sensitivsten reagierten in diesem Wellenlängenbereich die Features AUC_CR1600 und AUC_CR2304ab. Zukünftig sollte diese Kategorie der Spektralparameter bei ähnlichen Fragestellungen vermehrt genutzt werden.

Zudem zeigen die Modellergebnisse, dass der Fokus eher auf Merkmalskombinationen mit mehreren Indikatoren als Input gelegt werden sollte. Dies erscheint plausibel, da Metalle auf die Pflanzenphysiologie in vielfältiger Weise einwirken und diverse Bestandteile gleichzeitig beeinflussen können. Lediglich für Fe wurde in zwei Fällen (Modellsetup A und B) nur ein Parameter für die Modelldurchläufe als notwendig erachtet. Die Wichtung mehrerer Variablen nimmt zu, je mehr Zeitpunkte bei der Modellkalibrierung und -validierung beachtet werden (vgl. Abbildung 6-29). Dies veranschaulicht, dass kein universell anwendbarer Spektralparameter existiert, welcher saisonal unabhängig und gebietsübergreifend zur Quantifizierung von Schwermetallkonzentrationen auf den Auenflächen eingesetzt werden konnte. Fehlende Stressmerkmale und geringe Metallgehalte haben diese Problematik sicherlich verstärkt. Wie in Kapitel 7.2 angesprochen, wird die Metallakkumulation von Pflanzen durch zahlreiche Faktoren determiniert, weswegen angenommen werden muss, dass zu den unterschiedlichen Beprobungs- und Messzeitpunkten andere Transport- und Aufnahmemechanismen wirksam waren. Insofern ist es stimmig, dass häufig mehr als ein Spektralparameter mit dem jeweiligen Schwermetall korreliert und die Modelle zuverlässiger sind, wenn der Schwerpunkt auf ein Untersuchungsjahr, ein Untersuchungsgebiet oder einen Untersuchungszeitpunkt gelegt wird. Je heterogener die Datenbasis, wie in den Modellsetups mit den meisten Samples (vgl. Tabelle 6-10), desto mehr Spektralparameter und komplexere Ansätze sind erforderlich, um diese Variabilität abbilden zu können.

Oftmals konnte selbst durch die Optimierung der SVM die Modellgüte nicht gesteigert werden. In Einzelfällen war die Performance der Standard SVM scheinbar besser als die der SVMtune. Dies ist allerdings lediglich auf den abweichenden cost-Werten zurückzuführen (vgl. Kapitel 5.3.2), da ansonsten die Qualität der angepassten Modelle immer besser als die der unangepassten Modelle sein muss. Generell ist die SVM bevorzugt gegenüber der MLR

anzuwenden. In diesem Kontext muss die Modellperformance für einzelne Elemente positiv und vielversprechend bewertet werden. Bei den besten Resultaten für As, Cd und Pb lagen die R^2 -Werte der Validierung zwischen 0.56 und 0.75 (vgl. Abbildung 6-27) und für die Hauptnähr- oder Spurennährelemente Ca, K, Mn und Zn zwischen 0.40 und 0.46. Wenngleich die Resultate weniger robust gegenüber den Modellierungen der Bodenkonzentrationen sind, konnten für einzelne Pflanzengehalte durchaus zuverlässige Prognosen generiert werden. Hypothese III der Arbeit kann entsprechend bestätigt werden. Die Ableitung vielfältiger Spektralparameter diverser Kategorien (vgl. Tabelle 5-1) ist demnach der enorme Vorteil, den hyperspektrale Fernerkundungsdaten für derartige Forschungsfragen beinhalten. Bei der Auswahl von bis zu 14 Variablen (Mn, Modellsetup B) muss dennoch kritisch hinterfragt werden, ob tatsächlich eine kausale Verbindung zwischen den Spektren und den Metallen vorliegt, oder ob die Modelle lediglich einen statistischen Zusammenhang herstellen. Dies wird von WU et al. (2007) als generelle Limitation bei solchen Verfahren angesehen, „[as] most of the predictions have been based largely on mathematical relationships between spectra and chemical data, but did not show the physical relationship between them“ (WU et al. 2007:919). Große Diskrepanzen zwischen den Genauigkeiten einzelner Kalibrierungs- und Validierungsmodelle deuten darauf hin, dass solche Phänomene auch in der vorliegenden Arbeit auftraten. Ein *Overfitting* der Modelle konnte nicht immer vermieden werden. Bei der Adaption der Modellansätze auf die HySpex-Szenen wurde zudem offensichtlich, dass die Güte der Prognosekarten entscheidend von der Qualität der Befliegungsdaten abhängig ist.

In Abbildung 7-2 sind aus beiden Untersuchungsgebieten und -jahren exemplarisch vier Spektralparameter visualisiert, welche für bestimmte Modellübertragungen zwar notwendig, aber fehlerhaft waren. Es ist unverkennbar, dass die Artefakte aus sensorbedingten Bewegungen und Aufnahmefehlern sowie Helligkeitsunterschieden zwischen den Befliegungsstreifen resultieren. Folglich würden sich diese Fehler in den Prognosekarten widerspiegeln und die Ergebnisbilder verfälschen respektive unbrauchbar machen. Derartige Ungenauigkeiten sind auch in einzelnen Kartendarstellungen sichtbar (vgl. Abbildung A6-28 - A6-30). Nachteilig

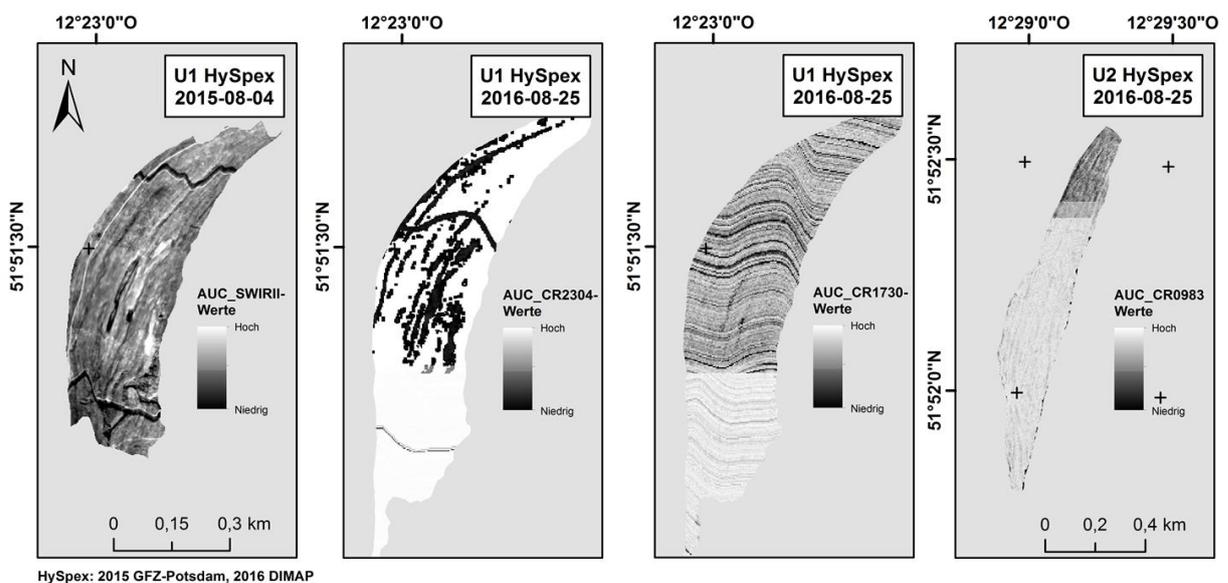


Abbildung 7-2: Auswahl an fehlerhaften Spektralparametern und Artefakten in den HySpex-Befliegungsdaten, die eine Quantifizierung der Metallgehalte erschweren

ist, dass die entwickelten Modelle enorm sensibel auf die geometrischen und radiometrischen Diskrepanzen reagieren. Dies erschwerte eine Übertragung der MLR- und SVM-Verfahren auf die HySpex-Daten, sobald einer der bedeutenden Spektralparameter fehlerhaft war. Gerade bei Setups mit einer Vielzahl an Inputvariablen war dies ein häufiges Hindernis und Artefakte traten vermehrt bei wellenlängenspezifischen Ratios und Indizes sowie bei Absorptionsbanden und Flächenberechnungen auf. Diese stellen Merkmale dar, die in nahezu jedem Modelldurchlauf benötigt wurden (vgl. Abbildung 6-28). Daraus resultierend konnten für einzelne Schwermetalle nicht die besten Modellsetups auf die HySpex-Szenen angewendet werden, wodurch die Güte der auf den Befliegungsdaten basierenden Modelle reduziert wurde. Eine akkurate radiometrische und atmosphärische Korrektur hyperspektraler Aufnahmen ist bei skalenübergreifenden Anwendungen essentiell (e.g. KEMPER & SOMMER 2002:2746, SHI et al. 2014:173, LIAN et al. 2015:9), um Abweichungen zwischen Punkt- und Bildspektren zu minimieren und um beide Aufnahmesysteme synergetisch nutzen und gegenüberstellen zu können. Da die Wirksamkeit von Schwermetallen auf die Pflanzenphysiologie oftmals nur in kleinen Spektralbereichen oder durch spezifische Absorptionsbanden sichtbar wird, können kontinuierliche Aufnahmefehler zu Fehlinterpretationen führen. Trotz häufiger Rücksprachen mit den Datenlieferanten und bereitgestellter Referenzspektren konnten Pixelfehler und Artefakte in den HySpex-Szenen nicht vollständig korrigiert werden. Dies schränkt den operationellen Nutzen der Aufnahmen ein. Hier müssen zukünftig, neben bestehenden Korrekturverfahren wie MODTRAN oder LOWTRAN (SHI et al. 2014:173), weitere Lösungsstrategien entwickelt werden, um die Praktikabilität und Qualität hyperspektraler Aufnahmen weiter verbessern zu können. Von daher sind tendenziell Spektralparameter besser geeignet, in deren Berechnung beispielsweise Extrem- oder Mittelwerte größerer Wellenlängenbereiche eingebunden werden. Neben diesen externen Einflüssen werden üblicherweise der geringe *signal-to-noise ratio* und die räumliche Auflösung beziehungsweise die Mischpixelproblematik bei abbildenden Sensoren als Faktoren genannt, welche die Datenqualität weiter beeinträchtigen können (KEMPER & SOMMER 2002:2746, SHI et al. 2014:173). Bezogen auf die an der Mittleren Elbe gelegenen Auenflächen ist die Korrektur einzelner Befliegungsstreifen für Sensoren von Satelliten weniger relevant, da diese Systeme Untersuchungsräume mit einer großen Schwadbreite aufnehmen können, sodass mehrere Testgebiete simultan und unter vergleichbaren Aufnahmebedingungen detektiert werden können. Dies wiederum erleichtert die Vorprozessierung der Szenen.

Letztlich stehen den genannten Herausforderungen zahlreiche Vorteile gegenüber, die fernerkundungsbasierte Techniken beinhalten, wie etwa der zerstörungsfreien und schnellen Erfassung großer Areale oder der enorme Informationsgehalt der Daten. Durch den Einsatz nichtabbildender und abbildender hyperspektraler Fernerkundungsdaten konnten im Rahmen dieser Arbeit, sowohl punktuell, als auch flächendeckend für Böden und Pflanzen, zu verschiedenen Zeitpunkten zuverlässige Prognosen über Schwermetallgehalte an der Mittleren Elbe abgeleitet werden. Die Messungen können leicht in verschiedene Software- und Programmierumgebungen integriert und durch weitere Vektor- und Rasterdaten ergänzt werden. So sollten Fernerkundungsdaten in das langfristige Monitoring der Elbflächen und in das Auenmanagement integriert werden. Sind robuste Modelle entwickelt, sind diese problemlos auf andere Gebiete übertragbar. Dies ist in Abbildung 7-3 visualisiert, in welcher die erstellten

Cd-Modelle des U1 und U2 (Modellsetup E, SVMtune) auf eine Auenfläche westlich von Lutherstadt Wittenberg zur Prognose der dortigen Pflanzengehalte angewendet wurden. Dies wäre auch für andere Standorte denkbar. Gleichzeitig hat die Arbeit die essentielle Bedeutung exakter Referenzmessungen hervorgehoben, ohne die Modellentwicklungen und skalenübergreifende Anwendungen nicht realisiert werden können.

Die Interpretation von Datensätzen, welche komplexe Ökosysteme, wie Flusslandschaften, abbilden, sollte demnach nie unabhängig von Geländebegehungen und interdisziplinär erfolgen. Forschungsbedarf besteht nach wie vor bei der Detektion von Metallgehalten in Pflanzen auf Grundlage spektraler Signaturen oder Parameter. Dies wird in der bisher verhältnismäßig geringen Anzahl von Freilandstudien im Vergleich zu Laborexperimenten sichtbar, sodass in diesem Anwendungsbereich weiterhin Grundlagenforschung betrieben wird und betrieben werden muss, um automatisierte Auswerteverfahren etablieren zu können. Zukünftig soll auf Grundlage der in dieser Arbeit analysierten und prognostizierten Schwermetallgehalte getestet werden, inwieweit die Qualität der Vorhersagen gesteigert werden kann, wenn in den Modellsätzen neben Spektralparametern weitere Ökosystemvariablen, wie Temperatur- und Niederschlagswerte oder Flächeninformationen zu Bodentypen und Pflanzengesellschaften, berücksichtigt werden. Darüber hinaus könnte der einzelne oder kombinierte Nutzen anderer Wellenlängenbereiche, wie die MIR-Region, für derartige Problem- und Fragestellungen geprüft werden. Unmittelbar nach Hochwasserereignissen wären etwa das Spektrometrieren verunreinigter Sedimentablagerungen auf Böden und Pflanzen in einer Flussaue und die anschließende Aufnahme des Gebietes mit hyperspektralen Sensoren zur flächendeckenden Schwermetalldetektion interessant. Auch wenn die entwickelten Methoden zeitintensive Laboranalysen oder Geländemessungen zur Bestimmung von Metallkonzentrationen nicht vollständig ersetzen können, so können sie diese Arbeiten unterstützen und dabei helfen, den Probenumfang zu reduzieren und Datenlücken zu schließen.

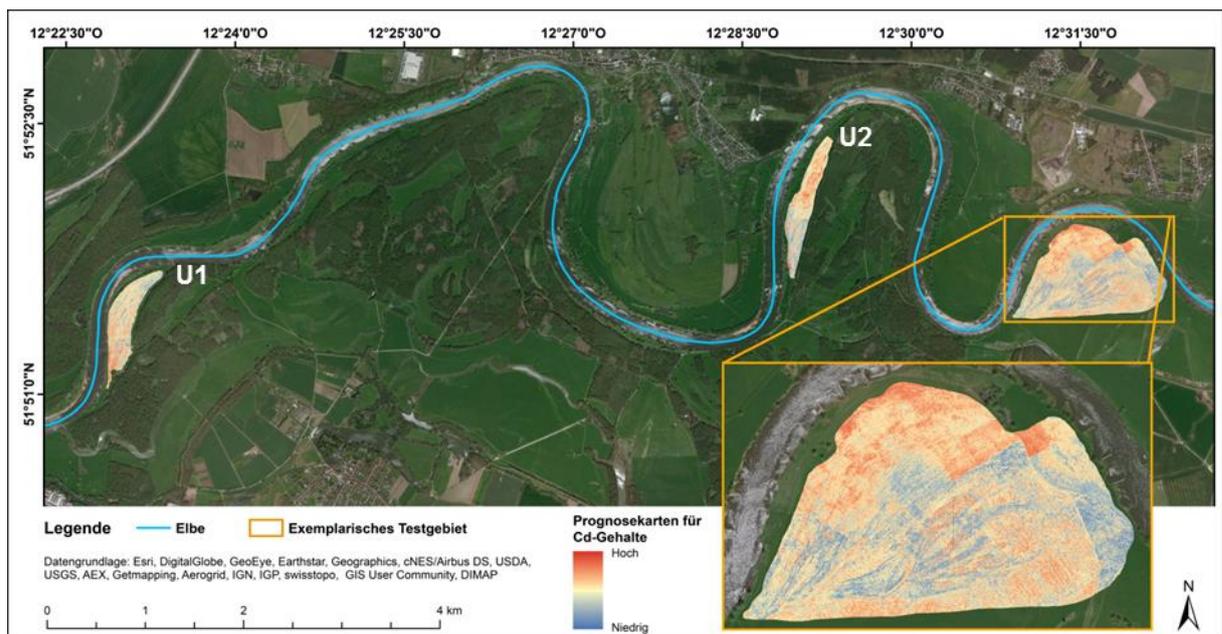


Abbildung 7-3: Abgeleitete Prognosekarten für Cd-Pflanzengehalte in den beiden Untersuchungsgebieten mit anschließender Übertragung der Modellsätze auf eine neue Auenfläche

Zusammenfassung und Ausblick

Im Rahmen dieser Arbeit wurde der aktuelle Schwermetallbelastungszustand zweier Auengebiete an der Mittleren Elbe in Sachsen-Anhalt untersucht und die Anwendbarkeit hyperspektraler Fernerkundungsdaten zur Detektion der Elementkonzentrationen in Böden und Pflanzen geprüft. Während die Deposition von Schadstoffen eng mit der Hochwasserdynamik verknüpft ist, beeinflusst die Auenmorphologie die Fließgeschwindigkeit des Wassers und die Sedimentationsraten auf den Überschwemmungsflächen. Folglich wurde die Bedeutung des Reliefs auf die räumliche Verteilung der Metallgehalte herausgearbeitet. Die Höheninformationen sind aus einem hochaufgelösten DGM entnommen worden. Auf Grundlage nicht-abbildender und abbildender Spektrometrie wurden verschiedene Modellansätze implementiert (PLSR, MLR, SVM), anhand derer die Metallkonzentrationen in den Kompartimenten abgeschätzt worden. Während Laborspektren zur Entwicklung der Bodenmodelle genutzt wurden, basieren die Vorhersagen der Vegetationsgehalte auf, aus Feldspektren und HySpex-Befliegungsdaten abgeleiteten, Spektralparametern. Diese stehen in Verbindung mit Pflanzen- und Blatteigenschaften. Alle Hyperspektraldaten haben den Wellenlängenbereich zwischen 350 und 2500 nm aufgezeichnet. Als Referenz dienten 84 Boden- und 182 Pflanzenproben, die in den Jahren 2015 und 2016 auf den Standorten erhoben und aus denen die Gesamtgehalte diverser Metalle extrahiert wurden. Die Datengrundlage wurde durch weitere Boden- und Pflanzenparameter, wie etwa der Korngröße oder dem Chlorophyllgehalt, vervollständigt.

Im Allgemeinen können die ermittelten Bodengehalte als moderat beschrieben werden. Bedeutsame Grenzwerte wurden nur für einzelne Elemente missachtet. In acht Proben konnte der Maßnahmewert der Bundes-Bodenschutzverordnung für Hg nicht eingehalten werden und der häufig empfohlene Richtwert von 2 µg/g für Cd wurde in 37 Fällen überschritten. Wie in Hypothese I der Arbeit vermutet, traten Belastungsschwerpunkte in Flutrinnen und Senken auf, die niedrigere pH-Werte als die umliegenden Hochflächen aufwiesen. Differenzen zwischen den Metallkonzentrationen in beiden Untersuchungsgebieten und -jahren spiegeln die räumliche und zeitliche Variabilität des Schadstoffeintrages in die Auengebiete wider. Bei den Vegetationsproben lagen mehr als 90 % der As- und 63 % der Hg-Gehalte über den zulässigen Höchstwerten der Futtermittelverordnung für Grünlandstandorte. Innerhalb eines kritischen Wertebereiches für Tierfutter lagen 13 Cd-Gehalte. Mit Hilfe der Analysen konnte die Wirksamkeit verschiedener Transferpfade nachgewiesen werden. Anders als bei den Böden zuvor waren Zusammenhänge zwischen den Elementkonzentrationen und der Feinmorphologie nicht evident, weshalb Hypothese I für die Auenvegetation nicht bestätigt werden konnte. Die Schadstoffaufnahme muss hier differenziert und elementspezifisch betrachtet werden, da zahlreiche Mobilitäts- und Aufnahmefaktoren sowie die Eigenschaften der Metalle diesen Prozess affizieren. Sie kann keinesfalls auf die vorhandenen Gesamtgehalte im Boden oder auf die Topographie reduziert werden. Darüber hinaus offenbarten die Spektralparameter keine nennenswerten Stressmerkmale in der Vegetation. Vielmehr waren die Auen hochvital und spektrale Variationen in Abhängigkeit von der Morphologie oder den Schwermetallgehalten waren nicht erkennbar. Hypothese IV der Arbeit muss demnach falsifiziert werden.

Die Praktikabilität der Boden- und Pflanzenmodelle ist zusammenfassend, unter Bezugnahme der optimalen Validierungsergebnisse, für alle Elemente in Tabelle Z-1 dargestellt.

Tabelle Z-1: Zusammenfassende Darstellung der erzielten Modellgenauigkeiten bei der Abschätzung der Metallgehalte in den Auenböden und der -vegetation

Ansatz	Kompartiment	Elemente (Gesamtgehalte)	Modellgenauigkeit*	Empfehlungen**
PLSR (Partial Least Square Regression)	Boden	As	--	CR
		Cd	++	MSC
		Cr	+	CR
		Cu	++	CR
		Fe	o	SNV
		Hg	+	SNV
		K	+	OR
		Ni	+	SNV
		Pb	++	MSC
Zn	+	CR		
MLR (Multiple Linear Regression)	Vegetation	As	--	Setup G
		Ca	--	Setup H
		Cd	+	Setup H
		Cu	--	Setup G
		Fe	--	Setup H
		Hg	--	Setup G
		K	--	Setup B
		Mn	--	Setup A
		Ni	--	Setup E
		Pb	-	Setup G
Zn	--	Setup C		
SVM / SVMtune (Support Vector Machine)	Vegetation	As	o	Setup G
		Ca	-	Setup H
		Cd	o	Setup G
		Cu	--	Setup G
		Fe	--	Setup D
		Hg	--	Setup C
		K	-	Setup G
		Mn	-	Setup H
		Ni	-	Setup G
		Pb	o	Setup G
Zn	-	Setup C		

* optimale R^2_{val} -Werte ++ = ≥ 0.85 + = $0.70 - 0.85$ o = $0.55 - 0.70$ - = $0.40 - 0.55$ -- = ≤ 0.40

** vgl. Kapitel 5.1.2 für Abkürzungen Boden und Tabelle 6-10 für Modellsetups Vegetation

Weiterhin sind Empfehlungen zur Vorprozessierung der Bodenspektren und über Modellsetups zur Bestimmung der Metallkonzentrationen in der Auenvegetation enthalten. Mit Hilfe der PLSR-Modelle konnten sehr gute Vorhersagen für die Mehrzahl der analysierten Elemente in den Auenböden getroffen werden. Dies geht mit Hypothese II konform. Für die aus ökotoxikologischer Sicht relevanten Schwermetalle Cd und Pb lag das R^2 der Validierung zwischen 0.86 und 0.89. Ein Bestimmtheitsmaß von 0.73 respektive 0.79 wurde für Hg und Cr ermittelt. Dabei haben verschiedene Vorprozessierungstechniken zur Normalisierung der

Spektren und diverse Validierungsstrategien die Güte der Regressionsmodelle beeinflusst. Für die Vegetation wurde im Vorfeld der Modelldurchläufe eine elementspezifische Selektion der Spektralparameter mittels eines RF-Ansatzes vorgenommen. Mehrere Setups wurden auf Grundlage der Probenahme- und Messzeitpunkte gebildet. Da für unterschiedliche Szenarien wiederholt identische Parameter ausgewiesen wurden (AUC_CR0983, ARI1, ARI2, CVI, NPQI, PRI), werden konsistente Wirkungszusammenhänge vermutet. Im Wesentlichen war die Performance der SVM besser als die der MLR und mit steigender Komplexität der Eingangsdaten erhöhte sich die Anzahl der Spektralparameter in den Modellen. Ein universell einsetzbarer Spektralparameter, welcher saisonal unabhängig und gebietsübergreifend zur Quantifizierung der Schwermetallkonzentrationen auf den Auenflächen angewendet werden kann, existiert demnach nicht. Dies ist in der Vielschichtigkeit des Metalltransportes und der Schadstoffakkumulation begründet. Daher sollte der Fokus verstärkt auf spektrale Merkmalskombinationen gelegt werden. Wenngleich die Modelle weniger robust als die der Bodenkonzentrationen waren, konnten für As, Cd und Pb zuverlässige Prognosen (R^2_{val} 0.56 - 0.75) erstellt und Hypothese III der Arbeit verifiziert werden. Die vergleichsweise geringen Pflanzengehalte und fehlende Stressmerkmale in der Vegetation minderten die Qualität der Modellansätze. Durch eine Interpolation der Bodengehalte und der Adaption der Pflanzen-Modelle auf die HySpex-Szenen konnten Prognosekarten erstellt und die räumliche Verteilung der Schwermetalle abgebildet werden. Dabei erschwerten Artefakte und sensorbedingte Aufnahmefehler die Übertragbarkeit der Modelle auf die Befliegungsdaten.

Obwohl sich die Wasserqualität der Elbe in den vergangenen Jahrzehnten verbessert hat und die auf den Überschwemmungsbereichen eingetragenen Sedimente weniger stark mit Schwermetallen angereichert sind, kommt es weiterhin zur Überschreitung elementspezifischer Grenzwerte im Rahmen der Bundes-Bodenschutz- und Futtermittelverordnung. Dies betrifft sowohl mobile (Cd) als auch immobile (As, Hg) Metalle, die durch abweichende Bindungsaffinitäten und Transferpfade gekennzeichnet sind. Mittels hyperspektraler Messungen können punktuelle und räumliche Aussagen über die Belastungssituation in Auengebieten getroffen werden. Während in Freilandstudien spektrometrische Reflexionsmessungen zur Detektion von Kontaminanten in Böden etabliert sind und in Kombination mit statistischen Auswerteverfahren hohe Genauigkeiten erzielen, müssen die Relationen zwischen Spektralparametern und Pflanzengehalten weiter untersucht werden. In Modellansätzen sollten verstärkt Ökosystemvariablen und Standortinformationen eingebunden werden. Gerade in Flussauen, wo die Sedimentbelastung gleichermaßen durch historische und aktuelle Einträge, wie einer regelmäßigen Schadstoffzufuhr durch Hochwasser, geprägt ist, müssen Langzeitstudien zur Ableitung von Belastungstrends etabliert werden. Hierfür müssen konsistente Probenahmekonzepte erarbeitet, repräsentative Vergleichsflächen ausgewiesen und Kooperationen zwischen Institutionen verschiedener Fachbereiche gewährleistet werden, damit die entwickelten Methoden auf andere Auen- und Flusseinzugsgebiete übertragbar sind. Da zukünftig mit immer häufigeren Starkniederschlägen und Hochwasserereignissen gerechnet werden muss, wird es zu einer zunehmenden Mobilisierung und Reaktivierung von Schwermetallen kommen. Umso wichtiger ist es, dass der enorme Informationsgehalt hyperspektraler Daten zur Identifikation von Schadstoffquellen genutzt wird, um den schützenswerten Charakter und die Funktionalität von Flussauen erhalten zu können.

Literaturverzeichnis

- ADAM, E., O. MUTANGA & D. RUGEGE (2010):** Multispectral and hyperspectral remote sensing for identification and mapping of wetland vegetation: a review. - *Wetlands Ecology and Management*, 18, 281-296.
- ADRIANO, D.D. (2001):** Biogeochemical processes regulating metal behavior. In: D.D ADRIANO (ed.): Trace elements in terrestrial environments: Biogeochemistry, bioavailability and risks of metals. *New York: Springer*, 1-867.
- AdV (Arbeitsgemeinschaft der Vermessungsverwaltungen der Länder der Bundesrepublik Deutschland) (2008):** Dokumentation zur Modellierung der Geoinformationen des amtlichen Vermessungswesen (GeoInfoDok). ATKIS-Katalogwerke. ATKIS-Objektartenkatalog Basis-DLM. - <http://www.geodatenzentrum.de/docpdf/ATKIS-OK%20Basis-DLM%206_0.pdf> (Stand: 2008-04-11) (Zugriff: 2016-10-26).
- AG (Arbeitsgruppe) Boden (1994):** Bodenkundliche Kartieranleitung (KA 4). Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe und Geologische Landesämter der BRD (Hrsg.). *Hannover, Schweizerbart'sche Verlagsbuchhandlung*, 1-392.
- AKAIKE, H. (1974):** A new look at the statistical model identification. - *IEEE Transactions on Automatic Control*, 19, 6, 716-723.
- ALLOWAY, B.J. (1997):** The mobilisation of trace elements in soils. In: R. PROST (ed.): Contaminated Soils, Proc. of the 3rd Int. Conf. on the Biogeochemistry of Trace Elements, Paris. 15-19 May 1995. Paris: INRA.
- ALLOWAY, B.J. (1999):** Einleitung. In: ALLOWAY, B.J. (Hrsg.): Schwermetalle in Böden. Analytik, Konzentration, Wechselwirkungen. *Berlin: Springer*, 1-385.
- AMARELL, U. & S. KLOTZ (2009):** 6 Biologische Indikatoren. In: SCHOLZ, M., K. HENKE, F. DZIOCK, S. STAB & F. FOECKLER (Hrsg.): Entwicklung von Indikationssystemen am Beispiel der Elbaue. *Stuttgart: Eugen Ulmer Verlag*, 1-482.
- BABOROWSKI, M., W. von TÜMPLING & K. FRIESE (2004):** Behaviour of suspended particulate matter (SPM) and selected trace metals during the 2002 summer flood in the River Elbe (Germany) at Magdeburg monitoring station. - *Hydrology and Earth System Sciences*, 8, 2, 135-150.
- BABOROWSKI, M., O. BÜTTNER, P. MORGENSTERN, F. KRÜGER, I. LOBE, H. RUPP & W. v. TÜMPLING (2007):** Spatial and temporal variability of sediment deposition on artificial-lawn traps in a floodplain of the River Elbe. - *Environmental pollution*, 148, 770-778.

- BANDARU, V., D.J. HANSEN, E.E. CODLING, C.S. DAUGHTRY, S. WHITE-HANSEN & C.E. GREEN (2010):** Quantifying arsenic-induced morphological changes in spinach leaves: implications for remote sensing. - *International Journal of Remote Sensing*, 31, 15, 4163-4177.
- BARNES, R.J., M.S. DHANOA & S. LISTER (1989):** Standard normal variate transformation and De-trending of Near-Infrared Diffuse Reflectance Spectra. - *Applied Spectroscopy*, 43, 5, 772-777.
- BARNES, E.M., T.R. CLARKE & S.E. RICHARDS (2000):** Coincident detection of crop water stress, nitrogen status and canopy density using ground-based multispectral data. - *Proceedings of the Fifth International Conference on Precision Agriculture, 16-19 July 2000, Bloomington, MN USA*.
- BBODSCHV (Bundes-Bodenschutz- und Altlastenverordnung) (1999):** Bundes-Bodenschutz- und Altlastenverordnung vom 12. Juli 1999 (BGBl. I S. 1554), die durch Artikel 3 Absatz 4 der Verordnung vom 27. September 2017 (BGBl. I S. 3465) geändert worden ist. - <http://www.gesetze-im-internet.de/bbodschv/BBodSchV.pdf> (Stand: 1999-07-12) (Zugriff: 2017-12-07).
- BEN-DOR, E. & A. BANIN (1995):** Near-infrared analysis as a rapid method to simultaneously evaluate several soil properties. - *Soil Science Society of America Journal*, 59, 364-372.
- BEN-DOR, E., D. HELLER & A. CHUDNOVSKY (2008):** A Novel Method of Classifying Soil Profiles in the Field using Optical Means. - *Soil Science Society of America Journal*, 72, 4, 918-926.
- BFG (Bundesanstalt für Gewässerkunde) (2016):** Undine. Datengrundlagen zur Einordnung und Bewertung hydrologischer Extreme. - <http://undine.bafg.de/servlet/is/12096/#Extreme> (Stand: 2016) (Zugriff: 2017-02-06).
- BLACKBRIDGE (2015):** Satellite Imagery Specifications. - http://web-dev.rapideye.de/rapideye/upload/RE_Product_Specifications_ENG.pdf (Stand: April 2015) (Zugriff: 2016-10-24).
- BLACKBURN, G.A. (1998):** Quantifying Chlorophylls and Carotenoids at Leaf and Canopy Scales: An Evaluation of Some Hyperspectral Approaches. - *Remote Sensing of Environment*, 66, 272-285.
- BMU (Bundeministerium für Umwelt, Naturschutz und Reaktorsicherheit) & BfN (Bundesamt für Naturschutz) (2009):** Auenzustandsbericht. Flussauen in Deutschland. - <https://www.bfn.de/fileadmin/MDB/documents/themen/wasser/Auenzustandsbericht.pdf> (Stand: 2009) (Zugriff: 2018-01-29).
- BÖHNKE, R. & S. GEYER (2009):** 5 Veränderung von Umweltfaktoren in Auen. In: SCHOLZ, M., K. HENKE, F. DZIOCK, S. STAB & F. FOECKLER (Hrsg.): Entwicklung von Indikationssystemen am Beispiel der Elbaue. Stuttgart: Eugen Ulmer Verlag, 1-482.

- BRALLIER, S., R.B. HARRISON, C.L. HENRY & X. DONGSEN (1996):** Liming effects on availability of Cd, Cu, Ni and Zn in a soil amended with sewage sludge 16 years previously. - *Water Air Soil Pollution*, 86, 195-206.
- BREIMAN, L. & A. CUTLER (2004):** Random Forests. -
<https://www.stat.berkeley.edu/%7Ebreiman/RandomForests/cc_manual.htm> (Stand: 2004) (Zugriff: 2017-11-06).
- BROWN, D.J., K.D. SHEPHERD, M.G. WALSH, M.D. MAYS & T.G. REINSCH (2006):** Global soil characterization with VNIR diffuse reflectance spectroscopy. - *Geoderma*, 132, 273-290.
- BRUZZONE, L., F. ROLI & S.B. SERPICO (1995):** An extension to multiclass cases of the Jefferys-Matusita distance. - *IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence*, 33, 1318-1321.
- BÜTTNER, O., K. OTTE-WITTE, F. KRÜGER, G. MEON & M. RODE (2006):** Numerical modeling of floodplain hydraulics and suspended sediment transport and deposition at the event scale in the middle river Elbe, Germany. - *Acta hydrochimica et hydrobiologica*, 34, 265-278.
- CHANG, C.-C. & C.-J. LIN (2013):** LIBSVM: A Library for Support Vector Machines. -
<<https://www.csie.ntu.edu.tw/~cjlin/papers/libsvm.pdf>> (Stand: 2013-03-04, Zugriff: 2017-11-06).
- CHANG, C.-W., D.A. LAIRD, M.J. MAUSBACH & C.R. HURBURGH JR. (2001):** Near-Infrared Reflectance Spectroscopy–Principal Components Regression Analyses of Soil Properties. - *Soil Science Society of America Journal*, 65, 480-490.
- CHENG, H., Y. HU, J. LUO, B. XU & J. ZHAO (2009):** Geochemical processes controlling fate and transport of arsenic in acid mine drainage (AMD) and natural systems. - *Journal of Hazardous Materials*, 165, 13-26.
- CHIBUIKE, G.U. & S.C. OBIORA (2014):** Heavy Metal Polluted Soils: Effect on Plants and Bioremediation Methods. - *Applied and Environmental Soil Science*, 2014, 1-12.
- CHOE, E., F. VAN DER MEER, F. VAN RUITENBEEK, H. VAN DER WERFF, B. DE SMETH & K.-W. KIM (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, 3222-3233.
- CHOE, E., K.W. KIM, S. BANG, I.H. YOON & K.Y. LEE (2009):** Qualitative analysis and mapping of heavy metals in an abandoned Au–Ag mine area using NIR spectroscopy. - *Environmental Geology*, 58, 477-482.
- CHRISTENSEN, J.H. & O.B. CHRISTENSEN (2003):** Severe Summertime Flooding in Europe. - *Nature*, 421, 805-806.

- CIPAR, J., T. COOLEY, R. LOCKWOOD & P. GRIGSBY (2004):** Distinguishing between coniferous and deciduous forests using hyperspectral imagery. - *Geoscience and Remote Sensing Symposium, 2004. IGARSS '04. Proceedings. 2004 IEEE International*, 4, 2348-2351.
- CLARK, R.N. & T.L. ROUSH (1984):** Reflectance Spectroscopy: Quantitative Analysis Techniques for Remote Sensing Applications. - *Journal of Geophysical Research*, 89, 6329-6340.
- CLARK, N. (1999):** Spectroscopy of rocks and minerals, and principles of spectroscopy. In: RENCZ, A.N. (ed.): *Manual of Remote Sensing, Volume 3, Remote Sensing for the Earth Sciences. New York: John Wiley and Sons*, 3-58.
- CLARK, M.L., D.A. ROBERTS & D.B. CLARK (2005):** Hyperspectral discrimination of tropical rain forest tree species at leaf to crown scales. - *Remote Sensing of Environment*, 96, 375-398.
- CLEFF, T. (2008):** Bivariate Zusammenhänge. In: CLEFF, T. (Hrsg.): *Deskriptive Statistik und moderne Datenanalyse. Eine computergestützte Einführung mit Excel, SPSS und STATA. Heusenstamm: Wilhelm & Adam*, 1-202.
- CLEVERS, J.G.P.W., L. KOOISTRA & E.A.L. SALAS (2004):** Study of heavy metal contamination in river floodplains using the red-edge position in spectroscopic data. - *International Journal of Remote Sensing*, 25, 19, 3883-3895.
- CLEVERS, J.G.P.W. & A.A. GITELSON (2013):** Remote estimation of crop and grass chlorophyll and nitrogen content using red-edge bands on Sentinel-2 and -3. - *International Journal of Applied Earth Observation and Geoinformation*, 23, 344-351.
- CORTES, C. & V. VAPNIK (1995):** Support-Vector network. - *Machine Learning*, 20, 1-25.
- DATT, B. (1999):** A New Reflectance Index for Remote Sensing of Chlorophyll Content in Higher Plants: Tests Using Eucalyptus Leaves. - *Journal of Plant Physiology*, 154, 30-36.
- DAUGHTRY, C.S.T. (2001):** Discriminating Crop Residues from Soil by Shortwave Infrared Reflectance. - *Agronomy Journal*, 93, 125-131.
- DEMATTÊ, J.A., R.C. CAMPOS, M.C. ALVES, P.R. FIORIO & M.R. NANNI (2004):** Visible–NIR reflectance: a new approach on soil evaluation. - *Geoderma*, 121, 1-2, 95-112.
- DLR (Deutsches Zentrum für Luft- und Raumfahrt) (2013):** Deutschland - Elbe - Dresden - Dessau Hochwassersituation am 12. Juni 2013 - Betroffene Fläche - Übersicht. - https://www.zki.dlr.de/de/system/files/product/map/medium/DLR-ZKI-DE-005-deutschland-hochwasser-2013-betroffene-flaeche-uebersicht-elbe-dresden-dessau-P43-V01_medium.jpg (Stand 2013-06-13) (Zugriff: 2017-12-13).

- DONG, Y.-W., S.-Q. YANG, C.-Y. XU, Y.-Z. LI, W. BAI & Z.-N. FAN (2011):** Determination of Soil Parameters in Apple-Growing Regions by Near- and Mid-Infrared Spectroscopy. - *Pedosphere*, 21, 5, 591-602.
- DRUCKER, H., C.J.C. BURGESS, L. KAUFMAN, A. SMOLA & V. VAPNIK (1996):** Support Vector Regression Machines. In: MOZER, M.C., M.I. JORDAN & T. PETSCHKE (Eds.): Advances in Neural Information Processing Systems 9. Cambridge: MIT Press, 155-161.
- DU LAING, J. RINKLEBE, B. VANDECASTEELE, E. MEERS & F.M.G. TACK (2009):** Trace metal behaviour in estuarine and riverine floodplain soils and sediments: A review. - *Science of the total Environment*, 407, 3972-3985.
- DUNAGAN, S.C., M.S. GILMORE & J.C. VAREKAMP (2007):** Effects of mercury on visible/near-infrared reflectance spectra of mustard spinach plants (*Brassica rapa* P.) - *Environmental Pollution*, 148, 301-311.
- DWD (Deutscher Wetterdienst) (2017a):** Niederschlag: monatliche Stationswerte. - ftp://ftp-cdc.dwd.de/pub/CDC/observations_germany/climate/daily/more_precip/recent/ (Stand: 2017-02-17) (Zugriff: 2017-05-31).
- DWD (Deutscher Wetterdienst) (2017b):** Niederschlag: tägliche Stationswerte. - ftp://ftp-cdc.dwd.de/pub/CDC/observations_germany/climate/daily/more_precip/recent/ (Stand: 2017-02-17) (Zugriff: 2017-05-31).
- DWD (Deutscher Wetterdienst) (2017c):** Temperatur: monatliche Stationswerte. - ftp://ftp-cdc.dwd.de/pub/CDC/observations_germany/climate/monthly/kl/recent/ (Stand: 2017-02-17) (Zugriff: 2017-05-31).
- DWD (Deutscher Wetterdienst) (2017d):** Temperatur: tägliche Stationswerte. - ftp://ftp-cdc.dwd.de/pub/CDC/observations_germany/climate/daily/kl/recent/ (Stand: 2017-02-17) (Zugriff: 2017-05-31).
- EKVALL, L. & M. GREGER (2003):** Effects of environmental biomass-producing factors on Cd uptake in two Swedish ecotypes of *Pinus sylvestris* (L.). - *Environmental Quality*, 121, 401-411.
- EVANS, J.S. & K. RAM (2017):** Package 'spatialEco'. Spatial Analysis and Modelling. R package version 0.1-7. - <https://cran.r-project.org/web/packages/spatialEco/spatialEco.pdf> (Stand: 2017-04-10) (Zugriff: 2017-10-20).
- FERGUSON, J.E. (1990):** The heavy elements: chemistry, environmental impact, and health effects. Michigan: Pergamon Press, 1-614.
- FITTSCHEN, R. & A. GROENGROEFT (2000):** Eisen- und Manganverteilung in eingedeichten Auenböden der Mittelelbe. In FRIESE, K., B. WITTER, G. MIEHLICH & M. RODE (eds.)

Stoffhaushalt von Auenökosystemen. Böden und Hydrologie. Schadstoffe. Bewertungen. Berlin: Springer, 1-433.

- FUTTMV** (Futtermittelverordnung) (**1981**): Futtermittelverordnung in der Fassung der Bekanntmachung vom 29. August 2016 (BGBl. I S. 2004), die zuletzt durch Artikel 1 der Verordnung vom 12. Juli 2017 (BGBl. I S. 2378) geändert worden ist. - https://www.gesetze-im-internet.de/futtmv_1981/FuttMV_1981.pdf (Stand: 2017-07-12) (Zugriff: 2017-12-19), Höchstgehalte nach Anhang 1 der Richtlinie 2002/32/EG http://eur-lex.europa.eu/resource.html?uri=cellar:aca28b8c-bf9d-444f-b470-268f71df28fb.0002.02/DOC_1&format=PDF (Stand:2002-05-30) (Zugriff: 2017-12-19).
- GALVAO, L.S., A.R. FORMAGGIO & D.A. TISOT (2005)**: Discrimination of sugarcane varieties in Southeastern Brazil with EO-1 Hyperion data. - *Remote Sensing of Environment*, 94, 523-534.
- GAMON, J.A., J. PEÑUELAS & C.B. FIELD (1992)**: A Narrow-Waveband Spectral Index That Tracks Diurnal Changes in Photosynthetic Efficiency. - *Remote Sensing of Environment*, 41, 35-44.
- GAMON, J.A. & J.S. SURFUS (1999)**: Assessing leaf pigment content and activity with a reflectometer. - *New Phytologist*, 143, 105-117.
- GAO, B.-C. (1996)**: NDWI - A Normalized Difference Water Index for Remote Sensing of Vegetation Liquid Water From Space. - *Remote Sensing of Environment*, 58, 257-266.
- GELADI, P. & B.R. KOWALSKI (1986)**: Partial least-squares regression: a tutorial. - *Analytica Chimica Acta*, 185, 1-17.
- GENUER, R., J.-M. POGGI & C. TULEAU-MALOT (2010)**: Variable selection using random forest. - *Pattern Recognition Letters*, 31, 2225-2236.
- GENUER, R., J.-M. POGGI & C. TULEAU-MALOT (2014)**: Variable Selection Using Random Forests. The VSURF R package. - *Rencontres R 2014, Montpellier, 2014-06-27*, 1-23.
- GENUER, R. J.-M. POGGI & C. TULEAU-MALOT (2015)**: VSURF: An R Package for Variable Selection Using Random Forests. - *The R Journal Vol. 7, 2*, 19-33.
- GITELSON, A. & M.N. MERZLYAK (1994)**: Quantitative estimation of chlorophyll-a using reflectance spectra: experiments with autumn chestnut and maple leaves. - *Journal of Photochemistry and Photobiology B Biology*, 93, 1011 - 1344.
- GITELSON, A.A., M.N. MERZLYAK & O. B. CHIVKUNOVA (2001)**: Optical Properties and Nondestructive Estimation of Anthocyanin Content in Plant Leaves. - *Photochemistry and Photobiology*, 74, 1, 38-45.
- GITELSON, A.A., Y.J. KAUFMAN, R. STARK & D. RUNDQUIST (2002)**: Novel Algorithms for Remote Estimation of Vegetation Fraction. - *Remote Sensing of Environment*, 80, 76-78.

- GITELSON, A., Y. GRITZ & M.N MERZLYAK (2003):** Relationships between leaf chlorophyll content and spectral reflectance and algorithms for non-destructive chlorophyll assessment in higher plant leaves. - *Journal of Plant Physiology*, 160, 271-282.
- GOVENDER, M., K. CHETTY & H. BULCOCK (2007):** A review of hyperspectral remote sensing and its application in vegetation and water resource studies. - *Water SA*, 33, 2, 145-152.
- GÖTZE, C., A. JUNG, I. MERBACH, R. WENNRICH & C. GLÄBER (2010):** Spectrometric analyses in comparison to the physiological condition of heavy metal stressed floodplain vegetation in a standardised experiment. - *Central European Journal of Geosciences*, 2, 2.
- GREGER, M. (2004²):** Metal Availability, Uptake, Transport and Accumulation in Plants. In: PRASAD, M.N.V. (ed.): Heavy Metal Stress in Plants. From Biomolecules to Ecosystems. Berlin-Heidelberg: Springer-Verlag, 1-462.
- GROSJEAN, P. & F. IBANEZ (2014):** pastecs: Package for Analysis of Space-Time Ecological Series. R package version 1.3.18. - <<https://cran.r-project.org/web/packages/pastecs/pastecs.pdf>> (Stand: 2014-03-02) (Zugriff: 2017-07-04).
- GRÖNGRÖFT, A., F. KRÜGER, K. GRUNEWALD, R. MEIBNER & G. MIEHLICH (2005):** Plant and Soil Contamination with Trace Metals in the Elbe Floodplains: A Case Study after the Flood in August 2002. - *Acta hydrochimica et hydrobiologica*, 33, 5, 466-474.
- GUYOT, G., F. BARET & D.J. MAJOR (1988):** High spectral resolution: determination of spectral shifts between the red and near infrared. - *International Archives of Photogrammetry*, 27, 7, 750-760.
- GÜNTHER, J., U. LANGE & H. NAGEL (1994):** Color-Infrarot-Befliegung für das Land Sachsen-Anhalt - Luftbildeinsatz im Naturschutz. In: Landesamt für Umweltschutz Sachsen-Anhalt (Hrsg.): Naturschutz im Land Sachsen-Anhalt. Dessau: Druckhaus Dessau GmbH, 1-68.
- HABOUDANE, D. J.R. MILLER, E. PATTEY, P.J. ZARCO-TEJADA & I.B. STRACHAN (2004):** Hyperspectral vegetation indices and novel algorithms for predicting green LAI of crop canopies: Modeling and validation in the context of precision agriculture. - *Remote Sensing of Environment*, 90, 337-352.
- HAENLEIN, M. & A.M. KAPLAN (2004):** A Beginner's Guide to Partial Least Squares Analysis. - *Understanding statistics*, 3, 4, 283-297.
- HAHN, J. (2014):** Schwermetall-Status und Schwermetallmobilität in Auenböden und Stauseesedimenten unter besonderer Berücksichtigung von Durchfeuchtungs- und Wasserstandsänderungen. - *Dissertation*, 1-292.

- HALE, K.L., S.P. MCGRATH, E. LOMBI, S.M. STACK, N. TERRY, I.J. PICKERING, G.N. GEORGE & E.A. PILON-SMITS (2001):** Molybdenum sequestration in Brassica species. A role for anthocyanins? - *Journal of Plant Physiology*, 126, 1391-1402.
- HAMILTON-TAYLOR, J. & W. DAVISON (1995):** Redox-driven cycling of trace elements in lakes. In: LERMAN, A., D.M. IMBODEN & J.R. GAT (eds.): *Physics and chemistry of lakes*. Berlin: Springer, 63-217.
- HARREL, F.E. (2017):** Package ‚Hmisc‘. Harrel Miscellaneous. R package version 3.17-4. - <<https://cran.r-project.org/web/packages/Hmisc/Hmisc.pdf>> (Stand: 2017-04-30) (Zugriff: 2017-07-04).
- HATTERMANN, F.F., Z. KUNDZEWICZ, S. HUANG, T. VETTER, F.-W. GERSTENGARBE & P. WERNER (2013):** Climatological Drivers of Changes in Flood Hazard in Germany. - *Acta Geophysica*, 61, 2, 463-477.
- HE, T., J. WANG, Z. LIN & Y. CHENG (2009):** Spectral features of soil organic matter. - *Geospatial Information Science*, 12:1, 33-40.
- HECKER, C., V.D. MEIJDE, M. & F.D. V.D. MEER (2010):** Thermal infrared spectroscopy on feldspars - successes, limitations and their implications for remote sensing. - *Earth-Science Reviews*, 103, 60-70.
- HEINRICH, K., J. RINKLEBE & H.U. NEUE (2000):** Einfluß des heißwasserlöslichen Kohlenstoffs auf Redoxpotentialänderungen während simulierter Hochwassereignisse. In FRIESE, K., B. WITTER, G. MIEHLICH & M. RODE (eds.) *Stoffhaushalt von Auenökosystemen. Böden und Hydrologie. Schadstoffe. Bewertungen*. Berlin: Springer, 1-433.
- HERMS, U. & G. BRÜMMER (1984):** Einflussgrößen der Schwermetalllöslichkeit und -bindung in Böden.- *Zeitschrift für Pflanzenernährung und Bodenkunde*, 147, 400-424.
- HERTEL, J. (2012):** Support Vector Machines. Kapitel 2. Spezialvorlesung Modul 10-202-2206 (Fortgeschrittene Methoden der Bioinformatik). - <http://www.bioinf.uni-leipzig.de/Leere/WS1213/MachineLearning_EvoAlg/10-202-2206_BioinfSpezialVO_04.pdf> (Stand: 2012) (Zugriff: 2017-11-06).
- HIEMSTRA, P. (2015):** Package ‚automap‘. Automatic interpolation package. R package version 1.0-14. - <<https://cran.r-project.org/web/packages/automap/automap.pdf>> (Stand:2013-08-27) (Zugriff:2017-07-06).
- HOFACKER, A. (2007):** Abschätzung von Sedimentationsraten anhand von geochemischen Tracern und Geländehöhenvergleichen - Eine Studie im Vorland der Mittleren Elbe. - *Diplomarbeit*, 1-167.
- HORTA, A., B. MALONE, U. STOCKMANN, B. MINASNY, T.F.A. BISHOP, A.B. MCBRATNEY, R. PALLASSER & L. POZZA (2015):** Potential of integrated field spectroscopy and spatial anal-

- ysis for enhanced assessment of soil contamination: A prospective review. - *Geoderma*, 241-242, 180-209.
- HSU, C.-W., C.-C. CHANG & C.-J. LIN (2016)**: A Practical Guide to Support Vector Classification. - <<https://www.csie.ntu.edu.tw/~cjlin/papers/guide/guide.pdf>> (Stand: 2016-05-19) (Zugriff: 2017-11-06).
- HUNT, E.R. & B.N. ROCK (1989)**: Detection of Changes in Leaf Water Content Using Near- and Middle-Infrared Reflectances. - *Remote Sensing of Environment*, 30, 43-54.
- HUNT, E.R., C.S.T. DAUGHTRY, J.U.H. EITEL & D.S. LONG (2011)**: Remote Sensing Leaf Chlorophyll Content Using a Visible Band Index. - *Agronomy Journal*, 103, 4, 1090-1099.
- HUNT, E.R., P.C. DORAISWAMY, J.E. MCMURTREY, C.S.T. DAUGHTRY, E.M. PERRY & B. AKHMEDOV (2013)**: A visible band index for remote sensing leaf chlorophyll content at the canopy scale. - *International Journal of Applied Earth Observation and Geoinformation*, 21, 103-112.
- IKSE (Internationale Kommission zum Schutz der Elbe) (1994)**: Ökologische Studie zum Schutz und zur Gestaltung der Gewässerstrukturen und der Uferandregionen der Elbe. Unveröffentl. Bericht, Magdeburg.
- IKSE (Internationale Kommission zum Schutz der Elbe) (1995)**: Aktionsprogramm Elbe. Unveröffentl. Broschüre, Magdeburg.
- IKSE (Internationale Kommission zum Schutz der Elbe) (2005)**: Die Elbe und ihr Einzugsgebiet. Ein geographisch-hydrologischer und wasserwirtschaftlicher Überblick. - <http://www.ikse-mkol.org/fileadmin/media/user_upload/D/06_Publikationen/07_Verschiedenes/2005_IKSE-Elbe-und-ihr-Einzugsgebiet.pdf> (Stand: 2005) (Zugriff: 2016-08-15).
- IKSE (Internationale Kommission zum Schutz der Elbe) (2016)**: Informationsblatt der IKSE zur europäischen Hochwasserrisikomanagementrichtlinie. - <http://www.ikse-mkol.org/fileadmin/media/user_upload/D/06_Publikationen/02_Hochwasserschutz/2016_IKSE-Infoblatt_IHWRMP_2015.pdf> (Stand: 2016) (Zugriff: 2016-09-21).
- JANIK, L.J., R.H. MERRY & J.O. SKJEMSTAD (1998)**: Can mid infra-red diffuse reflectance analysis replace soil extractions? - *Australian Journal of Experimental Agriculture* 38, 7, 681-696.
- Ji, J., Y. SONG, X. YUAN & Z. YANG (2010)**: Diffuse reflectance spectroscopy study of heavy metals in agricultural soils of the Changjiang River Delta, China. - *19th World Congress of Soil Science. Soil Solutions for a changing world*. 1-6. August 2010, Brisbane, Australia.
- JONES, H.G. & R.A. VAUGHAN (2010)**: Remote Sensing of Vegetation. Principles, techniques, and applications. *New York: Oxford University Press*, 1-353.

- KABATA-PENDIAS, A. & H. PENDIAS (2001³):** Trace Elements in Soils and Plants. *Florida: CRC Press, 1-403.*
- KALBITZ, K. & S. KNAPPE (1997):** Influence of soil properties on the release of dissolved organic matter (DOM) from the topsoil. - *Zeitschrift für Pflanzenernährung und Bodenkunde, 160, 5,475-483.*
- KALBITZ, K. & R. WENNRICH (1998):** Mobilization of heavy metals and arsenic in polluted wetland soils and its dependence on dissolved organic matter. - *Science of the Total Environment, 209, 27-39.*
- KAUFMAN, Y.J. & L.A. REMER (1994):** Detection of Forests Using Mid-IR Reflectance: An Application for Aerosols Studies. - *IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing, 32, 3, 672-683.*
- KAUFMANN, H., S. FÖRSTER, H. WULF, K. SEGL, L. GUANTER, M. BOCHOW, U. HEIDEN, A. MÜLLER, W. HELDENS, T. SCHNEIDERHAN, P.J. LEITÃO, S. VAN DER LINDEN, P. HOSTERT, J. HILL, H. BUDDENBAUM, W. MAUSER, T. HANK, H. KRASEMANN, R. RÖTTGERS, N. OPPELT & B. HEIM (2012):** Scientific Plan of the Environmental Mapping and Analysis Program (EnMAP). -
<http://www.enmap.org/sites/default/files/pdf/pub/121026_EnMAP_SciencePlan_dpi150.pdf> (Stand: 2012) (Zugriff: 2018-01-11).
- KEMPER, T. & S. SOMMER (2002):** Estimate of Heavy Metal Contamination in Soils after a Mining Accident Using Reflectance Spectroscopy. - *Environmental Science & Technology, 36, 12, 2742-2747.*
- KENNARD, R.W. & L.A. STONE (1969):** Computer aided design of experiments. - *Technometrics, 11, 137-148.*
- KOKALY, R.F., G.P. ASNER, S.V. OLLINGER, M.E. MARTIN & C.A. WESSMAN (2009):** Characterizing canopy biochemistry from imaging spectroscopy and its application to ecosystem studies. - *Remote Sensing of Environment, 113, S78-S91.*
- KOMSTA, L. (2011):** Package ‘outliers’. Tests for outliers. A collection of some tests commonly used for identifying outliers. R package version 0.14. - <<https://cran.r-project.org/web/packages/outliers/outliers.pdf>> (Stand: 2011-01-23) (Zugriff: 2017-11-06).
- KOOISTRA, L., R. WEHRENS, R.S.E.W. LEUVEN & L.M.C. BUYDENS (2001):** Possibilities of visible–near-infrared spectroscopy for the assessment of soil contamination in river floodplains. - *Analytica Chimica Acta, 446, 97-105.*
- KOOISTRA, L., R.S.E.W. LEUVEN, R. WEHRENS, P.H. NIENHUIS & L.M.C. BUYDENS (2003):** A comparison of methods to relate grass reflectance to soil metal contamination. - *International Journal of Remote Sensing, 24, 24, 4995-5010.*

- KOOISTRA, L., E.A.L. SALAS, J.G.P.W. CLEVERS, R. WEHRENS, R.S.E.W. LEUVEN, P.H. NIENHUIS & L.M.C. BUYDENS (2004):** Exploring field vegetation reflectance as an indicator of soil contamination in river floodplains. - *Environmental Pollution* 127, 281-290.
- KRÜGER, F. & A. GRÖNGRÖFT (2003):** The Difficult Assessment of Heavy Metal Contamination of Soils and Plants in Elbe River Floodplains. - *Acta hydrochimica et hydrobiologica*, 31, 4-5, 436-443.
- KRÜGER, F., A. GROENGROEFT, K. GRUNEWALD, R. MEIBNER, G. MIEHLICH, H. PETZOLD & C. UNGER (2004):** Auswirkungen der Schadstoffgehalte und Keimbelastung von Hochflut-sedimenten auf Böden und Pflanzen. In GELLER, W. K. OCKENFELD, M. BÖHME & A. KNÖCHEL (eds.): Schadstoffbelastung nach dem Elbe-Hochwasser 2002, Endbericht des Ad-hoc-Projekts: Schadstoffuntersuchungen nach dem Hochwasser vom August 2002-Ermittlung der Gefährdungspotentiale an Elbe und Mulde. *Nürnberg: KDD GmbH*, 1-662.
- KRÜGER, F. (2005a):** Abschnitt 3. Schadstoffe in der Hochwasserwelle. In: BÖHME, M., F. KRÜGER, K. OCKENFELD & W. GELLER (Hrsg.): Schadstoffbelastung nach dem Elbe-Hochwasser 2002. Eine Kurz-Darstellung der Fakten und Hilfen zu deren Bewertung. *Aschersleben: Druckerei Mahnert*, 1-101.
- KRÜGER, F. (2005b):** Abschnitt 4. Schadstoffe im Schlamm. In: BÖHME, M., F. KRÜGER, K. OCKENFELD & W. GELLER (Hrsg.): Schadstoffbelastung nach dem Elbe-Hochwasser 2002. Eine Kurz-Darstellung der Fakten und Hilfen zu deren Bewertung. *Aschersleben: Druckerei Mahnert*, 1-101.
- KRÜGER, F. (2005c):** Abschnitt 5. Welches sind langfristige Folgen für die Gewässerbelastung? In: BÖHME, M., F. KRÜGER, K. OCKENFELD & W. GELLER (Hrsg.): Schadstoffbelastung nach dem Elbe-Hochwasser 2002. Eine Kurz-Darstellung der Fakten und Hilfen zu deren Bewertung. *Aschersleben: Druckerei Mahnert*, 1-101.
- KRÜGER, F., W. KLEMM, A. THIEKEN, H. WEISS & P. WYCISK (2005a):** Abschnitt 2. Schadstoff - Definition, Herkunft? In: BÖHME, M., F. KRÜGER, K. OCKENFELD & W. GELLER (Hrsg.): Schadstoffbelastung nach dem Elbe-Hochwasser 2002. Eine Kurz-Darstellung der Fakten und Hilfen zu deren Bewertung. *Aschersleben: Druckerei Mahnert*, 1-101.
- KRÜGER, F., R. MEISSNER, A. GRÖNGROFT & K. GRUNEWALD (2005b):** Flood Induced Heavy Metal and Arsenic Contamination of Elbe River Floodplain Soils. - *Acta Hydrochimica et Hydrobiologica*, 33, 5, 455-465.
- KRÜGER, F. (2013):** Hochwassergebundener Sediment- und Schadstoffeintrag in die Auen der Mittelelbe. Ergebnisse aus den Forschungsprojekten RAMWASS und Klimzug-Nord. - https://lau.sachsen-anhalt.de/fileadmin/Bibliothek/Politik_und_Verwaltung/MLU/LAU/Wir_ueber_uns/Veranstaltungen/Archiv/2013/Dateien/Hochwassergebundener_Sediment-

- _und_Schadstoffeintrag_in_die_Auen_der_Mittellelbe.pdf*> (Stand: 2013-02) (Zugriff: 2017-12-11).
- KRÜGER, F. (2015):** Hochwassergebundener Sediment- und Schadstoffeintrag in die Auen der Mittellelbe. - *Dissertation, 1-179*.
- KUNTZE, H., U. HERMS & E. PLUQUET (1984):** Schwermetalle in Böden- Bewertung und Gegenmaßnahmen. *Geologische Jahrbücher. - Reihe A, 75, 715-736*.
- KUNTZE, H. & U. HERMS (1986):** Bedeutung geogener und pedogener Faktoren für die weitere Belastung der Böden mit Schwermetallen. - *Naturwissenschaften, 73, 195-205*.
- LAGB (Landesamt für Geologie und Bergwesen) (2011):** Metadatenübersicht zur VBK50. - *Internes HTML-Dokument (Stand: 2011-01-14) (Zugriff: 2016-10-11)*.
- LAGB (Landesamt für Geologie und Bergwesen) (2014):** Mitteilungen zu Geologie und Bergwesen von Sachsen-Anhalt. *Bodenbericht Sachsen-Anhalt 2014. Grundlagen, Parameter und Hintergrundwerte. - <http://www.lagb.sachsen-anhalt.de/fileadmin/Bibliothek/LaGB/boden/pdf/bodenbericht_2014.pdf> (Stand: 2014-07-31) (Zugriff: 2016-10-11)*.
- LAU (Landesamt für Umweltschutz Sachsen-Anhalt) (1994):** Katalog der Biotoptypen und Nutzungstypen für die CIR-luftbildgestützte Biotoptypen und Nutzungstypenkartierung im Land Sachsen-Anhalt. - *<http://www.lau.sachsen-anhalt.de/fileadmin/Bibliothek/Politik_und_Verwaltung/MLU/LAU/Naturschutz/Publikationen/Dateien/berichte_4-92_BTNT-Katalog.pdf> (Stand: 1992-08-14) (Zugriff: 2016-09-22)*.
- LfUG (Sächsisches Landesamt für Umwelt und Geologie) (2000):** Materialien zum Bodenschutz. *Bodenatlas des Freistaates Sachsen. Text - Bodenatlas Teil 3. - <<https://www.umwelt.sachsen.de/umwelt/download/boden/texte.pdf>> (Stand: 2000) (Zugriff: 2017-03-22)*.
- LIAN, S., J. JI, T. DE-JUN, X. HOMG-BING, L. ZHEN-FU & G. BO (2015):** Estimate of heavy metals in soil and streams using combined geochemistry and field spectroscopy in Wansheng mining area, Chongqing, China. - *International Journal of Applied Earth Observation and Geoinformation, 34, 1-9*.
- LIAW, A. & M. WIENER (2002):** Classification and Regression by randomForest. - *R News, 2, 3, 18-22*.
- LICHTENHALER, H.K. (1996):** Vegetation Stress: an Introduction to the Stress Concept in Plants. - *Journal of Plant Physiology, 148, 4-14*.
- LINDSAY, W. (1979):** Chemical equilibria in soils. *New York: John Wiley & Sons, 1-578*.

- LIU, S.H., X.H. LIU, G.Y. CHI & B.S. CUI (2008):** Study on the spectral response of Brassica Campestris L. leaf to the copper pollution. - *Science in China Series E: Technological Sciences*, 51, 2, 202-208.
- LIU, M., X. LIU, M. LI, M. FANG & W. CHI (2010):** Neural-network model for estimating leaf chlorophyll concentration in rice under stress from heavy metals using four spectral indices. - *Biosystems Engineering*, 106, 223-233.
- LIU, Y., W. LI, G. WU & X. XU (2011a):** Feasibility of estimating heavy metal contaminations in floodplain soils using laboratory-based hyperspectral data - A case study along Le'an River, China. - *Geo-Spatial Information Science*, 14, 1, 10-16.
- LIU, M., X. LIU, M. WU, L. LI & L. XIU (2011b):** Integrating spectral indices with environmental parameters for estimating heavy metal concentrations in rice using a dynamic fuzzy neural-network model. - *Computers & Geosciences*, 37, 1642-1652.
- LLG (Landesanstalt für Landwirtschaft und Gartenbau) (2007):** Merkblatt Landwirtschaftliche Nutzung von Flussauen in Sachsen-Anhalt. - https://llg.sachsen-anhalt.de/fileadmin/Bibliothek/Politik_und_Verwaltung/MLU/LLFG/Dokumente/mb_bwempfehl_flussaue_gekuerzt.pdf (Stand: 2007-05-31) (Zugriff: 2018-01-10).
- LLG (Landesanstalt für Landwirtschaft und Gartenbau) (2015):** LANDESANSTALT FÜR LANDWIRTSCHAFT UND GARTENBAU. Landwirtschaftliches Untersuchungswesen. - https://llg.sachsen-anhalt.de/fileadmin/Bibliothek/Politik_und_Verwaltung/MLU/LLFG/Dokumente/01_aufgaborgani-kontakt/llg_flyer_luw.pdf (Stand: 2015) (Zugriff: 2018-01-10).
- LONE, M.I., Z. HE, P.J. STOFFELLA & X. YANG (2008):** Phytoremediation of heavy metal polluted soils and water: Progresses and perspectives. - *Journal of Zhejiang University SCIENCE B*, 9, 3, 210-220.
- LUA (Landesumweltamt Brandenburg) (2003):** Untersuchung und Bewertung von altlastverdächtigen Flächen und Verdachtsflächen. Wirkungspfad Boden - Pflanze - Tier. http://www.lugv.brandenburg.de/cms/media.php/lbm1.a.3310.de/lua_bd81.pdf (Stand: 2003) (Zugriff: 2017-05-30).
- LUA (Landesumweltamt Brandenburg) (2010):** Materialien zur Altlastenbearbeitung im Land Brandenburg. http://www.lfu.brandenburg.de/cms/media.php/lbm1.a.3310.de/lua_bd_4_1.pdf (Stand: 2010) (Zugriff: 2017-05-30).
- MALLEY, D.F. & P.C. WILLIAMS (1997):** Use of Near-Infrared Reflectance Spectroscopy in Prediction of Heavy Metals in Freshwater Sediment by Their Association with Organic Matter. - *Environmental Science & Technology*, 31, 3461-3467.

- MARSCHNER, H. (1995²):** Mineral Nutrition of Higher Plants. *Cambridge: Academic Press, 1-889.*
- MARTENS & NÆS (1989):** Multivariate Calibration. *John Wiley & Sons : Chichester, 1-419.*
- MATAGI, S., D. SWAI, & R. MUGABE (1998):** A review of heavy metal removal mechanisms in wetlands. - *African Journal of Tropical Hydrobiology and Fisheries, 8, 23-35.*
- MCCARTOR, A. & D. BECKER (2010):** Blacksmith Institute's World's Worst Pollution Problems Report 2010. Top Six Toxic Threats. Six pollutants that jeopardize the health of tens of millions of people. Lead, Mercury, Chromium, Arsenic, Pesticides, Radionuclides. Produced in collaboration with Green Cross Switzerland. - https://www.greencross.ch/wp-content/uploads/uploads/media/pollution_report_2010_top_six_wwpp.pdf (Stand: 2010) (Zugriff: 2018-01-29).
- MERTON, R. & J. HUNTINGTON (1999):** Early Simulation Results Of The ARIES-1 Satellite Sensor For Multi-Temporal Vegetation Research Derived From AVIRIS. - *Proceedings of the Eighth Annual JPL Airborne Earth Science Workshop. NASA, Jet Propulsion Laboratory, Pasadena, California, USA. 8 - 14 February 1999.*
- MERZLYAK, M.N., A.A. GITELSON, O.B. CHIVKUNOVA & V.Y. RAKITIN (1999):** Non-destructive optical detection of pigment changes during leaf senescence and fruit ripening. - *Physiologia Plantarum, 106, 135-141.*
- MEVIK, B.-H., R. WEHRENS & K.H. LILAND (2015):** pls: Partial Least Squares and Principal Component Regression. R package version 2.5-0. - <https://cran.r-project.org/web/packages/pls/pls.pdf> (Stand: 2016-12-18) (Zugriff: 2017-07-04).
- MEYER, D., E. DIMITRIADOU, K. HORNIK, A. WEINGESSEL & F. LEISCH (2017):** Package 'e1071'. Misc Functions of the Department of Statistics, Probability Theory Group (Formerly: E1071), TU Wien. R package version 1.6-8. - <https://cran.r-project.org/web/packages/e1071/e1071.pdf> (Stand: 2017-02-02) (Zugriff: 2017-11-06).
- MOBIN, M. & N.A. KHAN (2007):** Photosynthetic activity, pigment composition and antioxidative response of two mustard (*Brassica juncea*) cultivars differing in photosynthetic capacity subjected to cadmium stress. - *Journal of Plant Physiology, 2007, 164, 601-610.*
- MOEYS, J. (2016):** Package 'soiltexture'. The soil texture wizard: R functions for plotting, classifying, transforming and exploring soil texture data. R package version 1.4.1. - https://cran.r-project.org/web/packages/soiltexture/vignettes/soiltexture_vignette.pdf (Stand: 2016-06-07) (Zugriff: 2017-07-11).
- MOROS, J., S.F.-O. DE V., A. DE D., J.M. MADARIAGA, S. GARRIGUES & M. DE LA GUARDIA (2009):** Use of Reflectance Infrared Spectroscopy for Monitoring the Metal Content of the Estuarine Sediments of the Nerbioi-Ibaizabal River (Metropolitan Bilbao, Bay of Biscay, Basque Country). - *Environmental Science & Technology, 43, 24, 9314-9320.*

- MOURATO, M.P., I.N. MOREIRA, I. LEITÃO, F.R. PINTO, J.R. SALES & L.L. MARTINS (2015):** Effect of Heavy Metals in Plants of the Genus Brassica. - *International Journal of Molecular Sciences*, 16, 17975-17998.
- MUSTAFA, G. & S. KOMATSU (2016):** Toxicity of heavy metals and metal-containing nanoparticles on plants. - *Biochemica et Biophysica Acta*, 2016, 932-944.
- NEO (Norsk Elektro optikk) (2016a):** HySpex Cameras. HySpex VNIR-1600. - http://www.hyspex.no/products/vnir_1600.php (Stand: 2016) (Zugriff: 2016-10-19).
- NEO (Norsk Elektro optikk) (2016b):** HySpex Cameras. HySpex SWIR-320m-e. - <http://www.hyspex.no/products/disc/swir-320m-e.php> (Stand: 2016) (Zugriff: 2016-10-19).
- OLIVIE-LAUQUET, G., G. GRUAU, A. DIA, C. RIOU, A. JAFFREZIC & O. HENIN (2001):** Release of trace elements in wetlands: Role of seasonal variability. - *Water Research*, 35, 943-952.
- OPP, C. (1999²):** Schwermetalle. In: BASTIAN, O. & K.F. SCHREIBER (Hrsg.): Analyse und ökologische Bewertung der Landschaft. Berlin: Spektrum Akademischer Verlag Heidelberg, 239-246.
- OVERESCH, M., J. RINKLEBE, G. BROLL & H.U. NEUE (2007):** Metals and arsenic in soils and corresponding vegetation at Central Elbe river floodplains (Germany). - *Environmental Pollution*, 145, 800-812.
- PALMER, T.N. & J. RÄISÄNEN (2002):** Quantifying the risk of extreme seasonal precipitation events in a changing climate - *Nature*, 415, 512-514.
- PANDIT, C.M., G.M. FILIPPELLI & L. LI (2010):** Estimation of heavy-metal contamination in soil using reflectance spectroscopy and partial least squares regression. - *International Journal of Remote Sensing*, 31, 15, 4111-4123.
- PANIGADA, C., M. ROSSINI, M. MERONI, R. MARZUOLI, G. GEROSA & R. COLOMBO (2009):** Indicators of ozone effects on *Fagus sylvatica* L. by means of spectroradiometric measurements. - *Italian Journal of Remote Sensing*, 41, 2, 3-20.
- PEÑUELAS, J., F. BARET & I. FILELLA (1995):** Semi-empirical indices to assess carotenoids/Chlorophyll a ratio from leaf spectral reflectance. - *Photosynthetica*, 31, 2, 221-230.
- PEÑUELAS, J. & I. FILELLA (1998):** Visible and near-infrared reflectance techniques for diagnosing plant physiological status - *trends in plant science*, 3, 4, 151-155.
- PURE EARTH & GREEN CROSS (2016):** 2016 World's Worst Pollution Problems. The Toxics Beneath Our Feet. - <http://www.worstpolluted.org/docs/WorldsWorst2016Spreads.pdf> (Stand: 2016) (Zugriff: 2018-01-29).
- R CORE TEAM (2016):** R: A language and environment for statistical computing. - *R Foundation for Statistical Computing, Vienna, Austria*.

- RATHOD, P.H., D.G. ROSSITER, M.F. NOOMEN & F.D. VAN DER MEER (2013):** Proximal Spectral Sensing to Monitor Phytoremediation of Metal-Contaminated Soils. - *International Journal of Phytoremediation*, 15, 5, 405-426.
- REIMANN, C. & P. DE CARITAT (1998):** Chemical Elements in the Environment. Factsheets for the Geochemist and Environmental Scientist. *Berlin-Heidelberg: Springer*, 1-398.
- REN, H.-Y., D.-F. ZHUANG, J.-J. PAN, X.-Z. SHI & H.J. WANG (2008):** Hyper-spectral remote sensing to monitor vegetation stress. - *Journal of Soils and Sediments*, 8, 323-326..
- REN, H.-Y., D.-F. ZHUANG, A.N. SINGH, J.-J. PAN, D.-S. QIU & R.-H. SHI (2009):** Estimation of As and Cu Contamination in Agricultural Soils Around a Mining Area by Reflectance Spectroscopy: A Case Study. - *Pedosphere*, 19, 6, 719-726.
- REN, H.-Y., D.-F. ZHUANG, J.-J. PAN, X.-Z. SHI, R.-H. SHI & H.-J. WANG (2010):** Study on Canopy Spectral Characteristics of Paddy Polluted by Heavy Metals. - *Spectroscopy and Spectral Analysis*, 30, 2.
- RICHARDS, J.A. & X. JIA (2006⁴):** Remote Sensing Digital Image Analysis. An Introduction. 4th Edition. *Springer Verlag: Berlin*.
- RIEDEL, F., M. DENK, I. MÜLLER, N. BARTH & C. GLÄBER (2018):** Prediction of soil parameters using the spectral range between 350 and 15,000 nm: A case study based on the Permanent Soil Monitoring Program in Saxony, Germany. - *Geoderma*, 315, 188-198.
- RINKLEBE, J. (2004):** Differenzierung von Auenböden der Mittleren Elbe und Quantifizierung des Einflusses von deren Bodenkennwerten auf die mikrobielle Biomasse und die Bodenenzymaktivitäten von b-Glucosidase, Protease und alkalischer Phosphatase. - *Dissertation*, 1-113.
- RINKLEBE, J., C. FRANKE & H.-U. NEUE (2009):** Veränderung von Umweltfaktoren in Auen. 5.2 Verbreitung, Eigenschaften und Klassifikation von Auenböden - Auenbodenformen als Indikatoren für Nähr- und Schadstoffkonzentrationen. In: SCHOLZ, M., K. HENKE, F. DZILOCK, S. STAB & F. FOECKLER (Hrsg.): Entwicklung von Indikationssystemen am Beispiel der Elbaue. *Stuttgart: Eugen Ulmer Verlag*, 1-482.
- RIVAS-PEREA, P., J. COTA-RUIZ, D.G. CHAPARRO, J.A.P. VENZOR, A.Q. CARREÓN & J.G. ROSILES (2013):** Support Vector Machines for Regression: A Succinct Review of Large-Scale and Linear Programming Formulations. - *International Journal of Intelligence Science*, 3, 5-14.
- SCHEFFER, F. & P. SCHACHTSCHABEL (1989¹²):** Lehrbuch der Bodenkunde. Neu bearbeitet: SCHACHTSCHABEL, P., H.P. BLUME, G.W. BRÜMMER, K.H. HARTGE & U. SCHWERTMANN. Unter Mitarbeit von: FISCHER, W.R., M. RENGER & O. STREBEL. *Stuttgart:Enke*, 1- 491.
- SCHEFFER, F. & P. SCHACHTSCHABEL (2002¹⁵):** Lehrbuch der Bodenkunde. Neu bearbeitet: BLUME, H.P., G. W. BRÜMMER, U. SCHWERTMANN, R. HORN, I. KÖGEL-KNABNER, K.

- STAHR, K. AUERSWALD, L. BEYER, A. HARTMANN, N. LITZ, A. SCHEINOST, H. STANJEK, G. WELP & B.-M. WILKE. *Stuttgart: Enke, 1- 593.*
- SCHEFFER, F. & P. SCHACHTSCHABEL (2010¹⁶):** Lehrbuch der Bodenkunde. Neu bearbeitet: BLUME, H.P., G.W. BRÜMMER, R. HORN, E. KANDELER, I. KÖGEL-KNABNER, R. KRETSCHMAR, K. STAHR & B.M. WILKE. *Heidelberg: Spektrum Akademischer Verlag, 1-578.*
- SCHLERF, M., C. ATZBERGER & J. HILL (2005):** Remote sensing of forest biophysical variables using HyMap imaging spectrometer data. - *Remote Sensing of Environment, 95, 177-194.*
- SCHOLZ, M., R. SCHWARTZ & M. WEBER (2005):** Flusslandschaft Elbe - Entwicklung und heutiger Zustand. In: SCHOLZ, M., S. STAB, F. DZIOCK & K. HENLE (Hrsg.): Lebensräume der Elbe und ihrer Auen. Band 4 der Reihe: „Konzepte für eine nachhaltige Entwicklung der Flusslandschaft“. *Berlin: Weißensee Verlag, 1-380.*
- SCHOLZ, M., U. AMARELL, R. BÖHNKE, J. GLÄSER, J. RINKLEBE & S. STAB (2009):** RIVA- ein Modellprojekt für die Elbauen. 4.2 Charakterisierung der Untersuchungsgebiete. In: SCHOLZ, M., K. HENKE, F. DZIOCK, S. STAB & F. FOECKLER (Hrsg.): Entwicklung von Indikationssystemen am Beispiel der Elbaue. *Stuttgart: Eugen Ulmer Verlag, 1-482.*
- SCHULZ-ZUNKEL, C. & F. KRÜGER (2009):** Trace metal dynamics in Floodplain Soils of the River Elbe: A Review. - *Journal of Environmental Quality, 38, 1349-1362.*
- SCHWALB, B., A. TRESCH, P. TORKLER, S. DUEMCKE & C. DEMEL (2015):** Package ‘LSD’. Lots of Superior Depictions. Package version 3.0. - <https://cran.r-project.org/web/packages/LSD/LSD.pdf> (Stand: 2015-01-02) (Zugriff: 2017-10-20).
- SCHWARTZ, R. (2001):** Die Böden der Elbaue bei Lenzen und ihre möglichen Veränderungen nach Rückdeichung. - *Dissertation, 1-391.*
- SCHWARTZ, G., G. ESHEL & E. BEN-DOR (2011):** Reflectance Spectroscopy as a Tool for Monitoring Contaminated Soils. In: PASCUCCI, S. (ed.): Soil Contamination. *Rijeka: InTech Europe, 67-90.*
- SEOS (Science education for through Earth observation for High Schools) (2011):** Introduction to Remote Sensing. Spectral Reflectance Properties. - <http://www.seos-project.eu/modules/remotesensing/remotesensing-c01-p05.html> (Stand: 2011) (Zugriff: 2015-10-27).
- SERRANO, L. S.L. USTIN & J. PENUELAS (2002):** Remote sensing of nitrogen and lignin in Mediterranean vegetation from AVIRIS data. - *Remote Sensing of Environment, 81, 355-364.*
- SHAW, B.P., S.K. SAHU & R.K. MISHRA (2004²):** Heavy Metal Induced Oxidative Damage in Terrestrial Plants. In: PRASAD, M.N.V. (ed.): Heavy Metal Stress in Plants. From Biomolecules to Ecosystems. *Berlin-Heidelberg: Springer-Verlag, 1-462.*

- SHI, T., Y. CHEN, Y. LIU & G. WU (2014):** Visible and near-infrared reflectance spectroscopy - An alternative for monitoring soil contamination by heavy metals. - *Journal of Hazard Materials*, 265, 166-176.
- SIEBIELEC, G., G.W. MCCARTY, T.I. STUCZYNSKI & J.B. REEVES (2004):** Near- and Mid-Infrared Diffuse Reflectance Spectroscopy for Measuring Soil Metal Content. - *Journal of Environmental Quality*, 33, 2056-2069.
- SIMS, D.A. & J.A. GAMON (2002):** Relationships between leaf pigment content and spectral reflectance across a wide range of species, leaf structures and developmental stages. - *Remote Sensing of Environment*, 81, 337-354.
- SIMS, D.A. & J.A. GAMON (2003):** Estimation of vegetation water content and photosynthetic tissue area from spectral reflectance: a comparison of indices based on liquid water and chlorophyll absorption features. - *Remote Sensing of Environment*, 84, 526-537.
- SLONECKER, T., B. HAACK & S. PRICE (2009):** Spectroscopic Analysis of Arsenic Uptake in *Pteris* Ferns. - *Remote Sensing*, 1, 644-67.
- SLONECKER, E.T. & G.B. FISHER (2014):** An evaluation of remote sensing technologies for the detection of fugitive contamination at selected Superfund hazardous waste sites in Pennsylvania: U.S. - *Geological Survey Open-File Report 2014-1081*, 23 p., <http://dx.doi.org/10.3133/ofr20141081/>.
- SMOLA, A.J. & B. SCHÖLKOPF (1998):** A Tutorial on Support Vector Regression. - *NeuroCOLT2 Technical Report Series, NC2-TR-1998-30*, 1-71.
- SMUL (Sächsisches Staatsministerium für Umwelt und Landwirtschaft) (2015):** Hinweise und Empfehlungen zum Umgang mit arsen- und schwermetallbelasteten landwirtschaftlich und gärtnerisch genutzten Böden. - <https://www.smul.sachsen.de/bful/download/Faltblatt-2015-G.pdf> (Stand: 2015-07) (Zugriff: 2017-12-12).
- SONG, Y., F. LI, Z. YANG, G.A. AYOKO, R.L. FROST & J. JI (2012):** Diffuse reflectance spectroscopy for monitoring potentially toxic elements in the agricultural soils of Changjiang River Delta, China. - *Applied Clay Science*, 64, 75-83.
- SRIDHAR, M.B.B., F.X. HAN, S.V. DIEHL, D.L. MONTS & Y. SU (2007a):** Monitoring the effects of arsenic and chromium accumulation in Chinese brake fern (*Pteris vittata*). - *International Journal of Remote Sensing*, 28, 5, 1055-1067.
- SRIDHAR, M.B.B., F.X. HAN, S.V. DIEHL, D.L. MONTS & Y. SU (2007b):** Spectral reflectance and leaf internal structure changes of barley plants due to phytoextraction of zinc and cadmium. - *International Journal of Remote Sensing*, 28, 5, 1041-1054.
- STENBERG, B., R.A.V. ROSSEL, A.M. MOUAZEN & J. WETTERLIND (2010):** Visible and near infrared spectroscopy in soil science. -

<http://pub.epsilon.slu.se/5165/1/stenberg_b_etal_100907.pdf> (Stand: 2010) (Zugriff: 2015-11-15).

STEVENS, A. & L. RAMIREZ-LOPEZ (2015): Package ‘prospectr’. Miscellaneous functions for processing and sample selection of vis-NIR diffuse reflectance data. R package version 0.1.3. - <<https://cran.r-project.org/web/packages/prospectr/prospectr.pdf>> (Stand: 2013-12-11) (Zugriff: 2017-07-07).

ST-BIS (Bodenschutz- und Altlasteninformationssystem) (2015): CIR-Biototypen und Nutzungstypenkartierung. - <http://www.lau.sachsen-anhalt.de/fileadmin/Bibliothek/Politik_und_Verwaltung/MLU/LAU/Bodenschutz/Informationssysteme/Dateien/st-bis-40.pdf> (Stand: 2015-12-02) (Zugriff: 2016-09-22).

SYMONDS, M.R.R. & A. MOUSSALLI (2011): A brief guide to model selection, multimodel inference and model averaging in behavioural ecology using Akaike’s information criterion. - *Behavioral Ecology Sociobiology*, 65, 13-21.

TANGAHU, B.V., S.R.S. ABDULLAH, H. BASRI, M. IDRIS, N. ANUAR & M. MUKHLISIN (2011): A Review on Heavy Metals (As, Pb, and Hg) Uptake by Plants through Phytoremediation. - *International Journal of Chemical Engineering*, 2011, 1-31.

TRIVEDI, P. & L. AXE (2000): Modeling Cd and Zn sorption to hydrous metal oxides. - *Environmental Science & Technology*, 34, 2215-2223.

UDELHOVEN, T., C. EMMERLING & T. JARMER (2003): Quantitative analysis of soil chemical properties with diffuse reflectance spectrometry and partial least-square regression: A feasibility study. - *Plant Soil*, 251, 319-329.

UMG (Umwelt-Medizin-Gesellschaft) (2010): Umweltgiftbericht 2010. - *umg 2010*, 23, 4, 1-2.

VANDERWAL, J., L. FALCONI, S. JANUCHOWSKI, L. SHOO & C. STORLIE (2013): Package ‘SDMTools’. Species Distribution Modelling Tools: Tools for processing data associated with species distribution modelling exercises. R package version 1.1-13. - <<http://www2.uaem.mx/r-mirror/web/packages/SDMTools/SDMTools.pdf>> (Stand: 2012-11-08) (Zugriff: 2017-10-20).

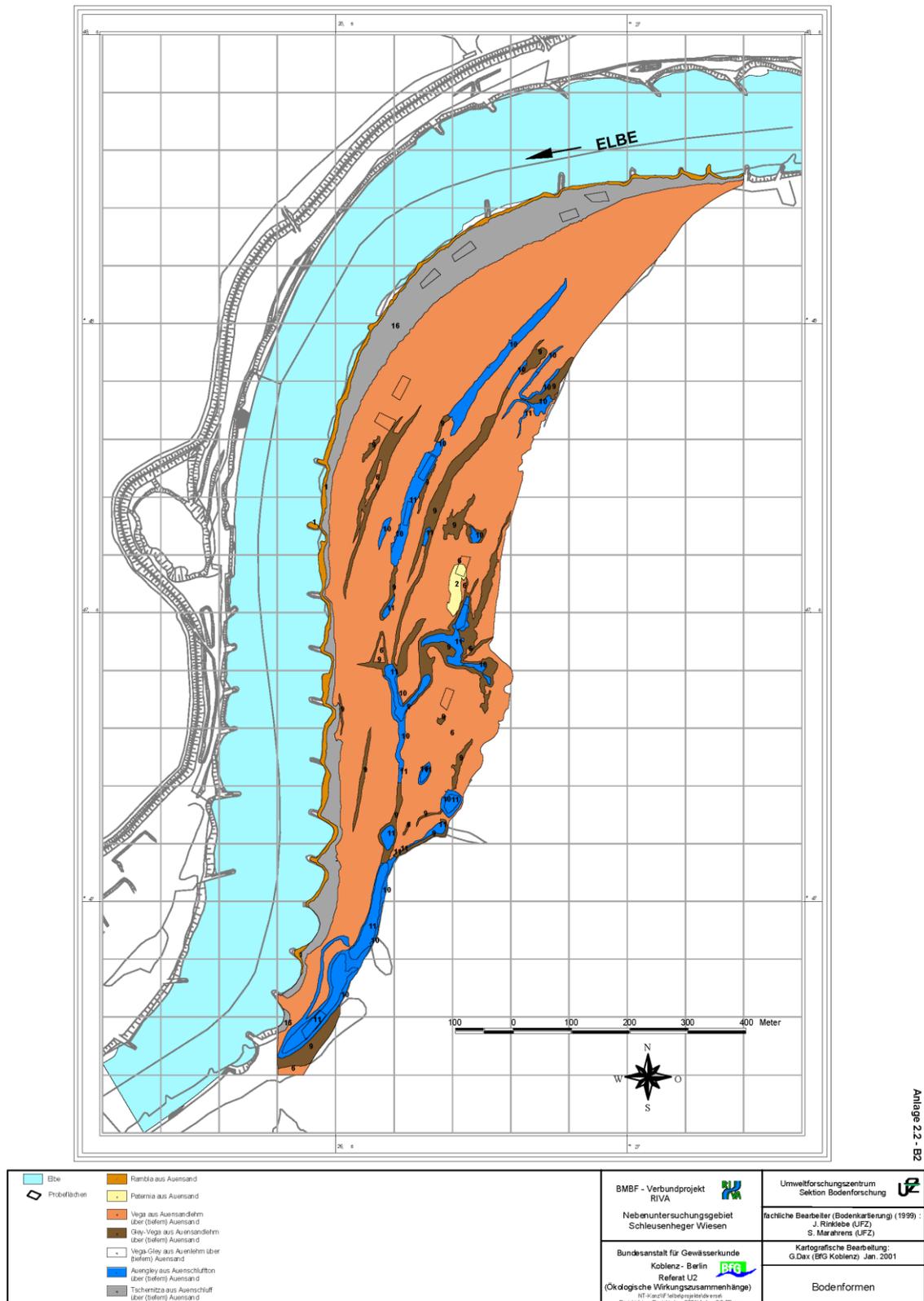
VAN DEVENTER, H. & M.A. CHO (2014): Assessing leaf spectral properties of *Phragmites australis* impacted by acid mine drainage. - *South African Journal of Science*, 110, 7/8, 1-12.

VAN GRIETHUYSEN, C., M. LUITWIELER, J. JOZIASSE, & A.A. KOELMANS (2005): Temporal variation of trace metal geochemistry in floodplain lake sediment subject to dynamic hydrological conditions. - *Environmental Pollution*, 137, 281-294.

- VINCINI, M., E. FRAZZI & P. D'ALESSIO (2008): A broad-band leaf chlorophyll vegetation index at the canopy scale. - *Precision Agriculture*, 9, 303-319.
- VISCARRA ROSSEL, R.A., D.J.J. WALVOORT, A.B. MCBRATNEY, L.J. JANIK & J.O. SKJEMSTAD (2006): Visible, near infrared, mid infrared or combined diffuse reflectance spectroscopy for simultaneous assessment of various soil properties. - *Geoderma*, 131, 59-75.
- VOGELMANN, J., B. ROCK & D. MOSS (1993): Red Edge Spectral Measurements from Sugar Maple Leaves. - *International Journal of Remote Sensing*, 14, 1563-1575.
- VOHLAND, M., C. BOSSUNG & H.C. FRÜND (2009): A spectroscopic approach to assess trace-heavy metal contents in contaminated floodplain soils via spectrally active soil components. - *Journal of Plant Nutrition and Soil Science*, 172, 201-209.
- VOHLAND, M., M. LUDWIG, S. THIELE-BRUHN & B. LUDWIG (2014): Determination of soil properties with visible to near- and mid-infrared spectroscopy: Effects of spectral variable selection. - *Geoderma*, 223-225, 88-96.
- WANG, L. & J.J. QU (2007): NMDI: A normalized multi-band drought index for monitoring soil and vegetation moisture with satellite remote sensing. - *Geophysical Research Letters*, 34, 1-5.
- WANG, J., T. WANG, T. SHI, G. WU & A.K. SKIDMORE (2015): A Wavelet-Based Area Parameter for Indirectly Estimating Copper Concentration in Carex Leaves from Canopy Reflectance. - *Remote Sensing*, 7, 15340-15360.
- WEI, T. & V. SIMKO (2016): Package 'Corrplot'. Visualization of a Correlation Matrix. R package version 0.77. - <<https://cran.r-project.org/web/packages/corrplot/corrplot.pdf>> (Stand: 2016-04-21) (Zugriff: 2017-07-04).
- WEIDONG, L., F. BARET, G. XINGFA, T. QINGXI, Z. LANFEN & Z. BING (2002): Relating soil surface moisture to reflectance. - *Remote Sensing of Environment*, 81, 238-246.
- WHITE, J.C., C. COOPS, T. HILKER, M.A. WULDER & A.L. CARROLL (2007): Detecting mountain pine beetle red attack damage with EO-1 Hyperion moisture indices. - *International Journal of Remote Sensing*, 28, 10, 2111-2121.
- WHITING, M.L., L. LI & S.L. USTIN (2004): Predicting water content using Gaussian model on soil spectra. - *Remote Sensing of Environment*, 89, 535-552.
- WILSON, M.D., S.L. USTIN & D.M. ROCKE (2004): Classification of Contamination in Salt Marsh Plants Using Hyperspectral Reflectance. - *IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing*, 42, 5, 1088-1095.
- WU, Y.Z., J. CHEN, J.F. JI, Q.J. TIAN & X.M. WU (2005a): Feasibility of Reflectance Spectroscopy for the Assessment of Soil Mercury Contamination. - *Environmental Science & Technology*, 39, 3, 873-878.

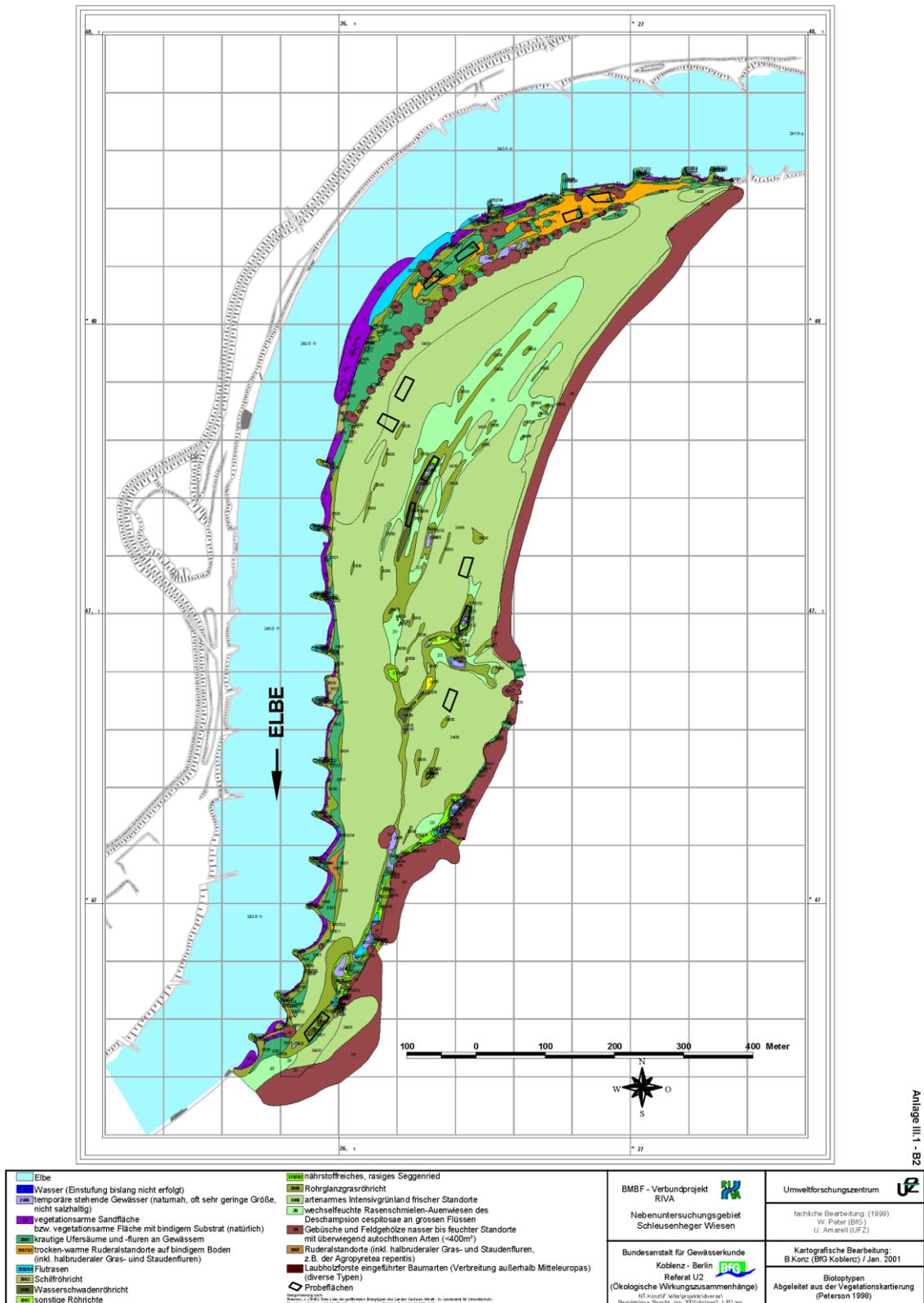
- WU, Y., J. CHEN, X. WU, Q. TIAN, J. JI & Z. QIN (2005b):** Possibilities of reflectance spectroscopy for the assessment of contaminant elements in suburban soils. - *Applied Geochemistry*, 20, 1051-1059.
- WU, Y., J.C.J. JI, P. GONG, Q. LIAO, Q. TIAN & H. MA (2007):** A Mechanism Study of Reflectance Spectroscopy for Investigating Heavy Metals in Soils. - *Soil Science Society of America Journal*, 71, 3, 918-926.
- XIA, X.Q., Y.Q. MAO, J.F. JI, H.R. MA, J. CHEN & Q.L. LIAO (2007):** Reflectance Spectroscopy Study of Cd Contamination in the Sediments of the Changjiang River, China. - *Environmental Science and Technology*, 41, 10, 3449-3454.
- YAO, Q., X. WANG, H. JIAN, H. CHEN & Z. YU (2015):** Characterization of the Particle Size Fraction associated with Heavy Metals in Suspended Sediments of the Yellow River. - *International Journal of Environmental Research and Public Health*, 12, 6725-6744.
- YAU, C. (2017):** R Tutorial. An R Introduction to Statistics. Multiple Linear Regression. - <http://www.r-tutor.com/elementary-statistics/multiple-linear-regression> (Stand: 2017) (Zugriff: 2017-11-3).
- ZERLING, L., C. HANISCH & F.W. JUNGE (2006):** Heavy metal inflow into the floodplains at the mouth of the river Weiße Elster (Central Germany). - *Acta hydrochimica et hydrobiologica*, 34, 234-244.
- ZHENG, G.H., S.L. ZHOU & S.H. WU (2011):** Prediction of As in soil with reflectance spectroscopy (article in Chinese). - *Guang Pu Xue Yu Guang Pu Fen Xi*, 31, 1, 173-176.
- ZIADI, N. & T. SEN TRAN (2006²):** Chapter 7. Mehlich 3-Extractable Elements. In: CARTER, M.R. & E.G. GREGORICH (eds.): Soil Sampling and Methods of Analysis. Boca Raton: CRC Press, 1-198.
- ZINNERT, J.C., S.M. VIA & D.R. YOUNG (2013):** Distinguishing natural from anthropogenic stress in plants: physiology, fluorescence and hyperspectral reflectance. - *Plant Soil*, 366, 133-141.
- ZORNOZA, R., C. GUERRERO, J. MATAIX-SOLERA, K.M. SCOW, V. ARCENEGUI & J. MATAIX-BENEYTO (2008):** Near infrared spectroscopy for determination of various physical, chemical and biochemical properties in Mediterranean soils. - *Soil Biology & Biochemistry*, 40, 7, 1923-1930.

Anhang



Anlage 2.2 - B2

Abbildung A4-1: Im Rahmen des RIVA-Projektes kartierte Bodenformen der Schleusenheger Wiesen (SCHOLZ et al. 2009:Anlage II.2-B2)



Anlage III.1 - B2

Abbildung A4-2: Im Rahmen des RIVA-Projektes kartierte Biotypen der Schleusenheger Wiesen (SCHOLZ et al. 2009:Anlage III.1-B2)

RapidEye-Aufnahme des Hochwassers an der Mittleren Elbe

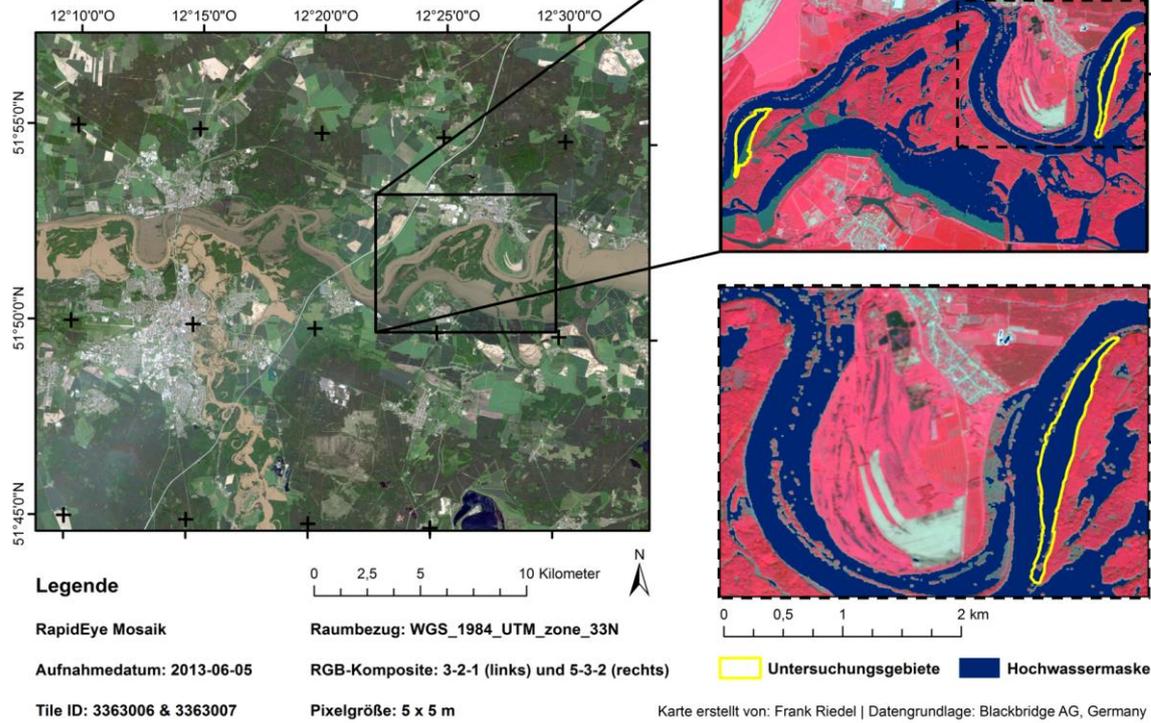


Abbildung A4-4: RapidEye-Mosaik des Juni Hochwassers 2013 an der Mittleren Elbe und die daraus abgeleitete Hochwassermaske (Datengrundlage: BlackBridge)

Darstellung der beflogenen Elbe und Mulde Flächen in den Jahren 2015 und 2016

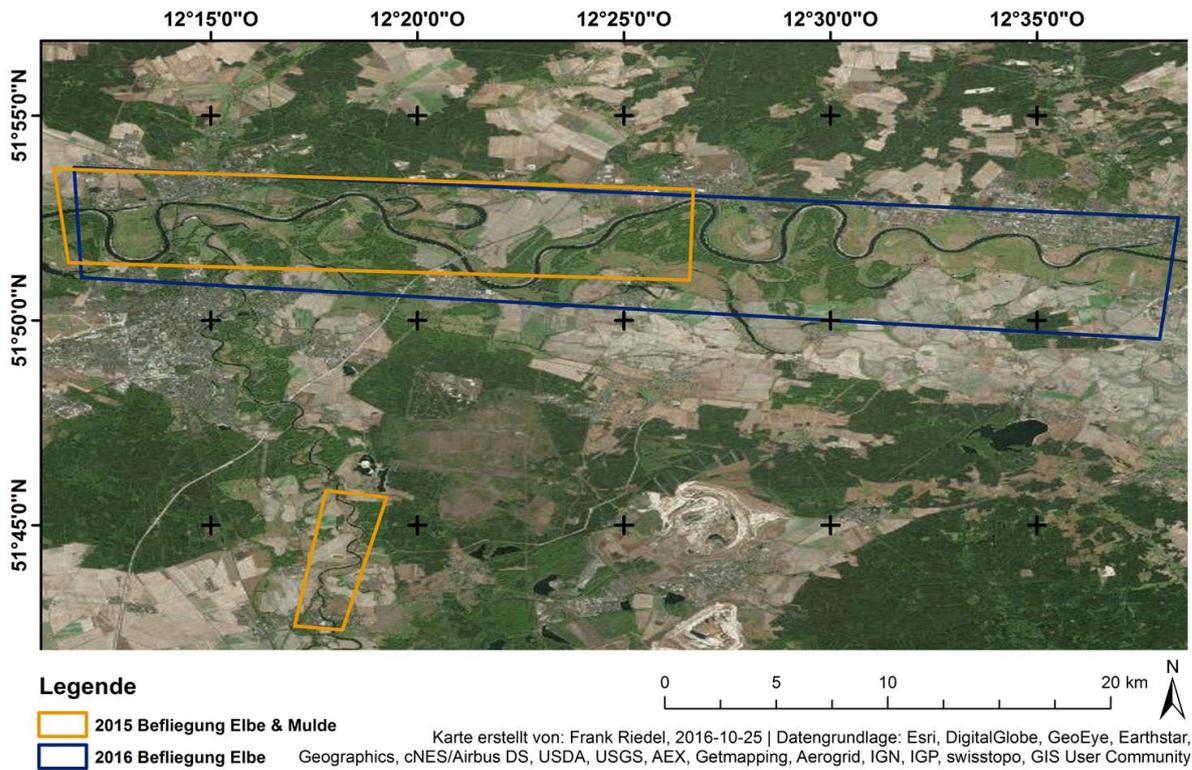


Abbildung A4-5: Darstellung der mit dem HySpex-Sensor beflogenen Gebiete an der Mittleren Elbe und Mulde

Monatliche meteorologische Daten für die Klimastation Wittenberg (2015)

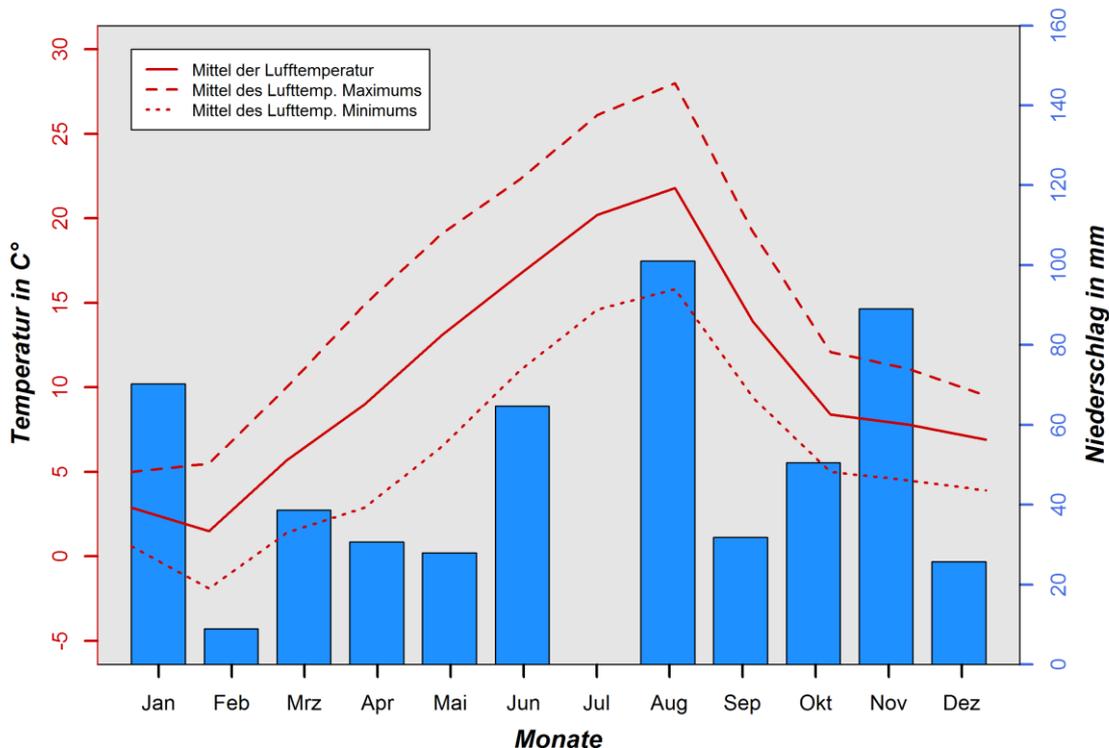


Abbildung A4-6: Monatliche Temperatur- und Niederschlagsdaten der Klimastation Wittenberg für das Jahr 2015
(Datengrundlage: DWD 2017a, DWD 2017c)

Monatliche meteorologische Daten für die Klimastation Wittenberg (2016)

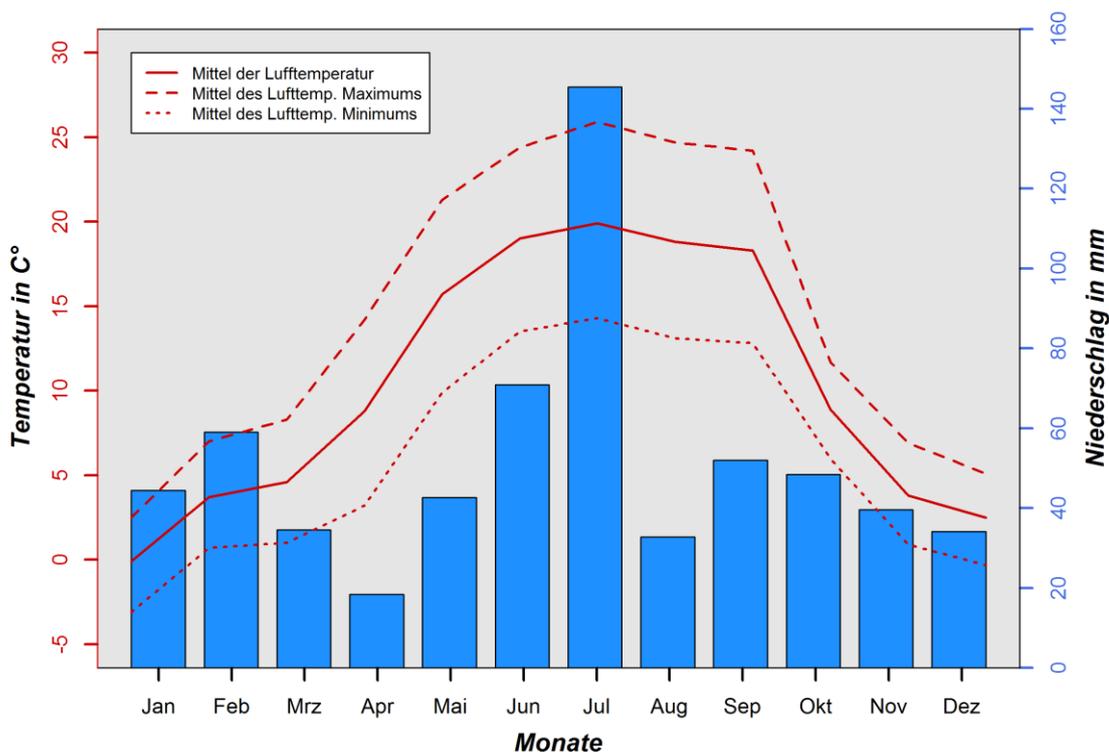


Abbildung A4-7: Monatliche Temperatur- und Niederschlagsdaten der Klimastation Wittenberg für das Jahr 2016
(Datengrundlage: DWD 2017a, DWD 2017c)

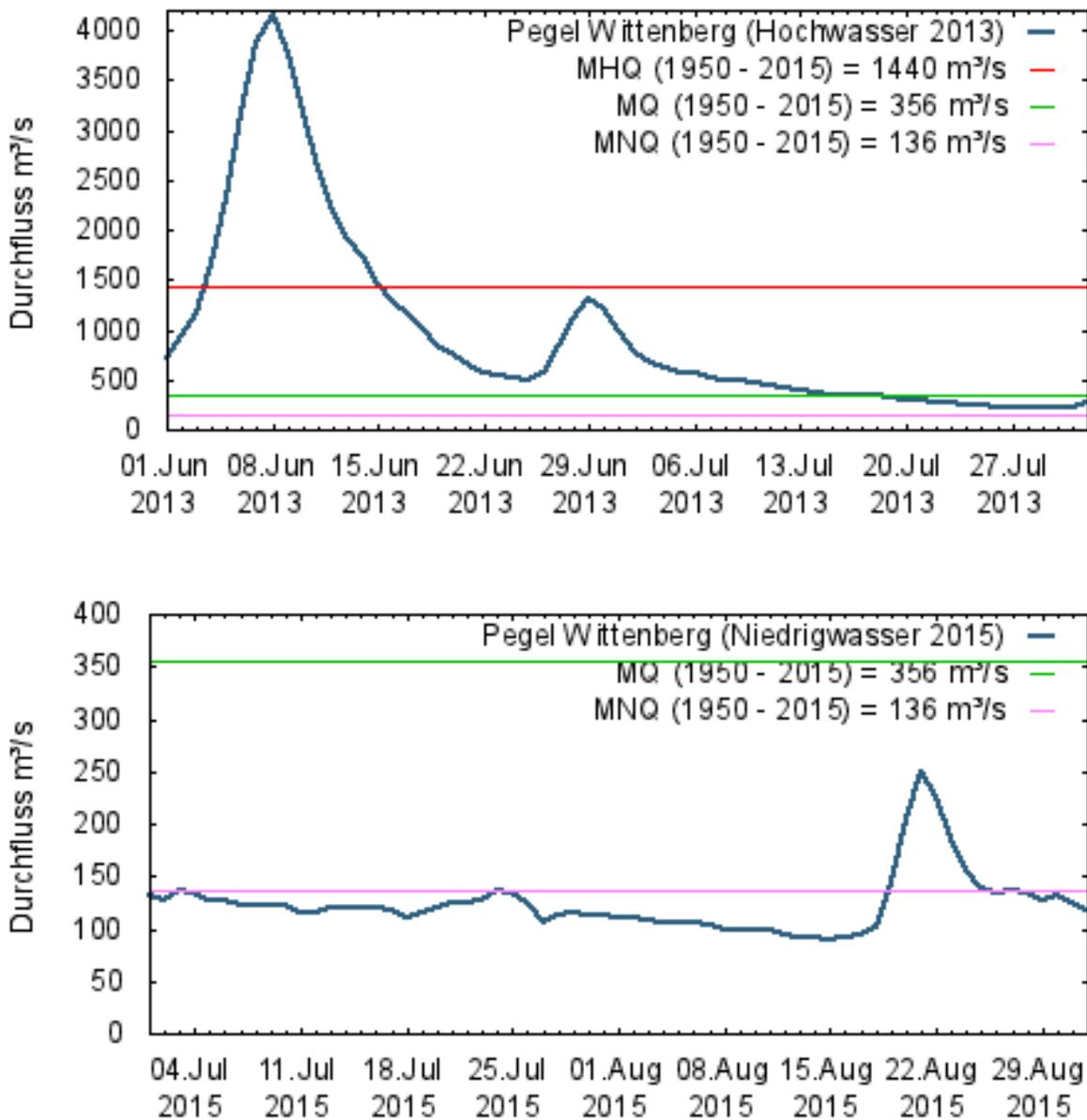


Abbildung A4-8: Vergleich der täglichen mittleren Abflusswerte des Pegels Wittenberg für ein Hochwasser- (oben, Jahr 2013) und ein Niedrigwasserereignis (unten, Jahr 2015) (MQ = durchschnittlicher Abfluss, MNQ = mittlerer Niedrigwasserabfluss, MHQ = mittlerer Hochwasserabfluss) (BfG 2016)

Tabelle A4-1: Übersicht zu allen Probenahmepunkten in den Untersuchungsgebieten 2015 und 2016

Gebiet / Jahr	Punkt	Koordinaten	Höhe im DGM (ü. NN)	Bezugseinheit
U1 2015	<i>P-0</i>	51° 51' 35,591" N 12° 23' 09,689" O	62.02	<i>Plateau</i>
U1 2015	<i>S-0</i>	51° 51' 33,977" N 12° 23' 12,371" O	60.18	<i>Senke</i>
U1 2015	<i>T-0</i>	51° 51' 33,038" N 12° 23' 14,136" O	61.34	<i>Terrasse</i>
U1 2015	<i>P-1</i>	51° 51' 33,542" N 12° 23' 07,677" O	61.84	<i>Plateau</i>
U1 2015	<i>P2-1</i>	51° 51' 34,720" N 12° 23' 05,647" O	62.02	<i>Plateau</i>
U1 2015	<i>P3-1</i>	51° 51' 30,394" N 12° 23' 13,217" O	61.81	<i>Plateau</i>
U1 2015	<i>S-1</i>	51° 51' 32,136" N 12° 23' 09,875" O	59.88	<i>Senke</i>
U1 2015	<i>P-2</i>	51° 51' 30,163" N 12° 23' 04,933" O	61.72	<i>Plateau</i>
U1 2015	<i>S-2</i>	51° 51' 29,303" N 12° 23' 07,285" O	59.97	<i>Senke</i>
U1 2015	<i>T-2</i>	51° 51' 28,189" N 12° 23' 10,217" O	61.46	<i>Terrasse</i>
U1 2015	<i>P-3</i>	51° 51' 25,507" N 12° 23' 01,253" O	61.80	<i>Plateau</i>
U1 2015	<i>P2-3</i>	51° 51' 26,007" N 12° 22' 58,408" O	61.83	<i>Plateau</i>
U1 2015	<i>S-3</i>	51° 51' 25,278" N 12° 23' 02,691" O	60.36	<i>Senke</i>
U1 2015	<i>T-3</i>	51° 51' 24,350" N 12° 23' 08,335" O	60.95	<i>Terrasse</i>

Fortsetzung der Tabelle auf der nächsten Seite

Gebiet / Jahr	Punkt	Koordinaten	Höhe im DGM (ü. NN)	Bezugs- einheit
U1 2015	<i>P-4</i>	<i>51° 51' 22,656" N 12° 23' 00,001" O</i>	<i>61.75</i>	<i>Plateau</i>
U1 2015	<i>S-4</i>	<i>51° 51' 22,392" N 12° 23' 03,461" O</i>	<i>59.96</i>	<i>Senke</i>
U1 2015	<i>T-4</i>	<i>51° 51' 21,982" N 12° 23' 08,556" O</i>	<i>61.57</i>	<i>Terrasse</i>
U1 2015	<i>P-5</i>	<i>51° 51' 27,410" N 12° 23' 02,900" O</i>	<i>61.74</i>	<i>Plateau</i>
U1 2015	<i>P2-5</i>	<i>51° 51' 28,006" N 12° 22' 59,007" O</i>	<i>62.05</i>	<i>Plateau</i>
U1 2015	<i>S-5</i>	<i>51° 51' 26,218" N 12° 23' 07,463" O</i>	<i>60.38</i>	<i>Senke</i>
U1 2015	<i>T-5</i>	<i>51° 51' 26,186" N 12° 23' 08,963" O</i>	<i>61.24</i>	<i>Terrasse</i>
U1 2016	<i>P-6</i>	<i>51° 51' 38,039" N 12° 23' 13,609" O</i>	<i>61.75</i>	<i>Plateau</i>
U1 2016	<i>S-6</i>	<i>51° 51' 36,757" N 12° 23' 16,218" O</i>	<i>60.05</i>	<i>Senke</i>
U1 2016	<i>T-6</i>	<i>51° 51' 35,969" N 12° 23' 18,508" O</i>	<i>61.04</i>	<i>Terrasse</i>
U1 2016	<i>P-7</i>	<i>51° 51' 36,922" N 12° 23' 11,920" O</i>	<i>61.88</i>	<i>Plateau</i>
U1 2016	<i>S-7</i>	<i>51° 51' 35,724" N 12° 23' 14,604" O</i>	<i>60.04</i>	<i>Senke</i>
U1 2016	<i>T-7</i>	<i>51° 51' 34,592" N 12° 23' 17,036" O</i>	<i>60.80</i>	<i>Terrasse</i>
U1 2016	<i>P-8</i>	<i>51° 51' 20,401" N 12° 23' 08,680" O</i>	<i>61.63</i>	<i>Plateau</i>
U1 2016	<i>P2-8</i>	<i>51° 51' 21,098" N 12° 22' 59,389" O</i>	<i>61.65</i>	<i>Plateau</i>
U1 2016	<i>S-8</i>	<i>51° 51' 20,752" N 12° 23' 02,855" O</i>	<i>59.94</i>	<i>Senke</i>
U1 2016	<i>T-8</i>	<i>51° 51' 20,558" N 12° 23' 06,366" O</i>	<i>60.78</i>	<i>Terrasse</i>

Fortsetzung der Tabelle auf der nächsten Seite

Gebiet / Jahr	Punkt	Koordinaten	Höhe im DGM (ü. NN)	Bezugs- einheit
U1 2016	<i>P-9</i>	51° 51' 19,004" N 12° 22' 58,674" O	61.76	<i>Plateau</i>
U1 2016	<i>T-9</i>	51° 51' 18,484" N 12° 23' 09,399" O	60.96	<i>Terrasse</i>
U1 2016	<i>T2-9</i>	51° 51' 18,915" N 12° 23' 08,556" O	60.84	<i>Terrasse</i>
U1 2016	<i>T3-9</i>	51° 51' 19,448" N 12° 23' 04,177" O	60.58	<i>Terrasse</i>
U1 2016	<i>P-10</i>	51° 51' 17,299" N 12° 22' 58,700" O	61.70	<i>Plateau</i>
U1 2016	<i>P2-10</i>	51° 51' 16,961" N 12° 23' 07,720" O	61.66	<i>Plateau</i>
U1 2016	<i>S-10</i>	51° 51' 17,316" N 12° 23' 03,902" O	60.40	<i>Senke</i>
U1 2016	<i>T-10</i>	51° 51' 17,399" N 12° 23' 00,806" O	60.90	<i>Terrasse</i>
U1 2016	<i>S-11</i>	51° 51' 13,289" N 12° 23' 06,935" O	60.35	<i>Senke</i>
U1 2016	<i>S2-11</i>	51° 51' 13,787" N 12° 23' 03,652" O	60.36	<i>Senke</i>
U1 2016	<i>S3-11</i>	51° 51' 13,833" N 12° 23' 00,505" O	60.42	<i>Senke</i>
U2 2015	<i>P-0</i>	51° 52' 18,793" N 12° 29' 10,417" O	63.97	<i>Plateau</i>
U2 2015	<i>P2-0</i>	51° 52' 19,819" N 12° 29' 05,684" O	64.04	<i>Plateau</i>
U2 2015	<i>S-0</i>	51° 52' 19,139" N 12° 29' 08,826" O	62.55	<i>Senke</i>
U2 2015	<i>P-1</i>	51° 52' 14,452" N 12° 29' 04,429" O	63.91	<i>Plateau</i>
U2 2015	<i>P2-1</i>	51° 52' 14,861" N 12° 29' 01,452" O	64.09	<i>Plateau</i>

Fortsetzung der Tabelle auf der nächsten Seite

Gebiet / Jahr	Punkt	Koordinaten	Höhe im DGM (ü. NN)	Bezugs- einheit
U2 2015	<i>T-1</i>	<i>51° 52' 13,961" N 12° 29' 08,036" O</i>	<i>63.80</i>	<i>Terrasse</i>
U2 2015	<i>P-2</i>	<i>51° 52' 11,401" N 12° 29' 01,803" O</i>	<i>64.12</i>	<i>Plateau</i>
U2 2015	<i>P2-2</i>	<i>51° 52' 11,799" N 12° 28' 59,260" O</i>	<i>64.24</i>	<i>Plateau</i>
U2 2015	<i>S-2</i>	<i>51° 52' 10,680" N 12° 29' 05,579" O</i>	<i>61.97</i>	<i>Senke</i>
U2 2015	<i>T-2</i>	<i>51° 52' 10,407" N 12° 29' 07,396" O</i>	<i>63.68</i>	<i>Terrasse</i>
U2 2015	<i>P-3</i>	<i>51° 52' 04,195" N 12° 28' 58,963" O</i>	<i>63.95</i>	<i>Plateau</i>
U2 2015	<i>S-3</i>	<i>51° 52' 03,920" N 12° 29' 00,642" O</i>	<i>62.36</i>	<i>Senke</i>
U2 2015	<i>T-3</i>	<i>51° 52' 03,620" N 12° 29' 03,216" O</i>	<i>63.74</i>	<i>Terrasse</i>
U2 2015	<i>T2-3</i>	<i>51° 52' 04,375" N 12° 28' 57,060" O</i>	<i>63.56</i>	<i>Terrasse</i>
U2 2015	<i>S-4</i>	<i>51° 52' 01,143" N 12° 29' 00,093" O</i>	<i>62.23</i>	<i>Senke</i>
U2 2015	<i>T-4</i>	<i>51° 52' 01,262" N 12° 28' 59,049" O</i>	<i>63.32</i>	<i>Terrasse</i>
U2 2015	<i>T2-4</i>	<i>51° 52' 00,991" N 12° 29' 02,858" O</i>	<i>63.48</i>	<i>Terrasse</i>
U2 2015	<i>S-5</i>	<i>51° 51' 51,873" N 12° 29' 02,347" O</i>	<i>61.99</i>	<i>Senke</i>
U2 2015	<i>S2-5</i>	<i>51° 51' 52,222" N 12° 28' 59,397" O</i>	<i>62.56</i>	<i>Senke</i>
U2 2015	<i>T-5</i>	<i>51° 51' 52,053" N 12° 29' 01,005" O</i>	<i>63.64</i>	<i>Terrasse</i>
U2 2016	<i>P-6</i>	<i>51° 52' 18,361" N 12° 29' 03,777" O</i>	<i>64.17</i>	<i>Plateau</i>
U2 2016	<i>S-6</i>	<i>51° 52' 17,926" N 12° 29' 06,591" O</i>	<i>62.30</i>	<i>Senke</i>

Fortsetzung der Tabelle auf der nächsten Seite

Anhang - Kapitel 4

Gebiet / Jahr	Punkt	Koordinaten	Höhe im DGM (ü. NN)	Bezugs- einheit
U2 2016	<i>T-6</i>	<i>51° 52' 17,039" N 12° 29' 10,142" O</i>	<i>63.78</i>	<i>Terrasse</i>
U2 2016	<i>P-7</i>	<i>51° 52' 16,456" N 12° 29' 01,878" O</i>	<i>64.27</i>	<i>Plateau</i>
U2 2016	<i>S-7</i>	<i>51° 52' 15,475" N 12° 29' 07,041" O</i>	<i>62.35</i>	<i>Senke</i>
U2 2016	<i>T-7</i>	<i>51° 52' 14,900" N 12° 29' 09,234" O</i>	<i>63.65</i>	<i>Terrasse</i>
U2 2016	<i>T2-7</i>	<i>51° 52' 15,862" N 12° 29' 04,975" O</i>	<i>63.61</i>	<i>Terrasse</i>
U2 2016	<i>P-8</i>	<i>51° 52' 07,792" N 12° 29' 06,186" O</i>	<i>63.88</i>	<i>Plateau</i>
U2 2016	<i>P2-8</i>	<i>51° 52' 08,771" N 12° 29' 00,545" O</i>	<i>64.19</i>	<i>Plateau</i>
U2 2016	<i>S-8</i>	<i>51° 52' 07,940" N 12° 29' 05,452" O</i>	<i>62.50</i>	<i>Senke</i>
U2 2016	<i>T-8</i>	<i>51° 52' 09,113" N 12° 28' 58,034" O</i>	<i>63.66</i>	<i>Terrasse</i>
U2 2016	<i>P-9</i>	<i>51° 52' 06,370" N 12° 28' 59,580" O</i>	<i>64.01</i>	<i>Plateau</i>
U2 2016	<i>T-9</i>	<i>51° 52' 06,776" N 12° 28' 57,296" O</i>	<i>63.37</i>	<i>Terrasse</i>
U2 2016	<i>S-9</i>	<i>51° 52' 05,129" N 12° 29' 07,308" O</i>	<i>62.47</i>	<i>Senke</i>
U2 2016	<i>S2-9</i>	<i>51° 52' 05,746" N 12° 29' 03,243" O</i>	<i>62.37</i>	<i>Senke</i>
U2 2016	<i>P-10</i>	<i>51° 51' 58,284" N 12° 28' 59,106" O</i>	<i>64.00</i>	<i>Plateau</i>
U2 2016	<i>S-10</i>	<i>51° 51' 57,716" N 12° 29' 05,149" O</i>	<i>62.38</i>	<i>Senke</i>
U2 2016	<i>T-10</i>	<i>51° 51' 58,088" N 12° 29' 01,911" O</i>	<i>63.45</i>	<i>Terrasse</i>

Fortsetzung der Tabelle auf der nächsten Seite

Gebiet / Jahr	Punkt	Koordinaten	Höhe im DGM (ü. NN)	Bezugs- einheit
U2 2016	S-11	51° 51' 53,775" N 12° 29' 01,827" O	62.46	Senke
U2 2016	T-11	51° 51' 53,513" N 12° 29' 03,587" O	63.39	Terrasse
U2 2016	T2-11	51° 51' 53,964" N 12° 28' 59,479" O	63.14	Terrasse

Tabelle A5-1: Verwendete Vegetationsindizes zur Bewertung der Pflanzenvitalität auf den Auenstandorten, basierend auf spezifische Reflexionswerte

Index & sensitiver Pflanzenparameter	Formel*	Quelle
ARI1 (Anthocyanin Reflectance Index 1) Anthocyan, Chlorophyll	$\frac{1}{R550} - \frac{1}{R700}$	GITELSON et al. (2001)
ARI2 (Anthocyanin Reflectance Index 2) Anthocyan, Chlorophyll	$R800 * \frac{1}{R550} - \frac{1}{R700}$	GITELSON et al. (2001)
CAI (Cellulose Absorption Index) Zellulose	$0.5 * (R2000 + R2200) - R2100$	DAUGHTRY (2001)
CI (Chlorophyll Index) Chlorophyll, Zellstruktur	$\frac{R750 - R705}{R750 + R705}$	PANIGADA et al. (2009)
CI_RE (Chlorophyll Index Red Edge) Chlorophyll, Zellstruktur	$\frac{R783}{R705} - 1$	CLEVERS & GITELSON (2013)
CRI1 (Carotenoid Reflectance Index 1) Carotinoide, Chlorophyll	$\frac{1}{R510} - \frac{1}{R550}$	GITELSON et al. (2002)
CRI2 (Carotenoid Reflectance Index 2) Carotinoide, Chlorophyll	$\frac{1}{R510} - \frac{1}{R700}$	GITELSON et al. (2002)
DSWI (Disease Water Stress Index) Wassergehalt, Zellstruktur	$\frac{R803 + R549}{R1659 + R681}$	GALVAO et al. (2005)
LCI (Leaf Chlorophyll Index) Chlorophyll, Zellstruktur	$\frac{R850 - R710}{R850 - R680}$	DATT (1999)
LWVI1 (Leaf Water Vegetation Index 1) Wassergehalt	$\frac{R1094 - R983}{R1094 + R983}$	GALVAO et al. (2005)
LWVI2 (Leaf Water Vegetation Index 2) Wassergehalt	$\frac{R1094 - R1205}{R1094 + R1205}$	GALVAO et al. (2005)
MCARI (Modified Chlorophyll Absorption Ratio Index) Chlorophyll	$[(R700 - R670) - 0.2 * (R700 - R550)] * (R700 / R670)$	LIU et al. (2010)

*RXXX = Reflexionswert im Vegetationsspektrum bei Wellenlänge XXX in nm

Fortsetzung der Tabelle auf der nächsten Seite

Index & sensitiver Pflanzenparameter	Formel*	Quelle
MCARI1 (Modified Chlorophyll Absorption Ratio Index 1) Chlorophyll, Zellstruktur	$1.2 * [2.5 * (R800 - R670) - 1.3 * (R800 - R550)]$	HABOUDANE et al. (2004)
MCARI2 (Modified Chlorophyll Absorption Ratio Index 2) Chlorophyll, Zellstruktur	$\frac{1.2 * [2.5 * (R800 - R670) - 1.3 * (R800 - R550)]}{\sqrt{(2 * R800 + 1)^2 - (6 * R800 - 5 * \sqrt{R670}) - 0.5}}$	HABOUDANE et al. (2004)
MRENDVI (Modified Red Edge Normalized Difference Vegetation Index) Chlorophyll, Zellstruktur	$\frac{R750 - R705}{R750 + R705 - 2 * R445}$	SIMS & GAMON (2002)
MRESR (Modified Red Edge Simple Ratio) Chlorophyll, Zellstruktur	$\frac{R750 - R445}{R750 + R445}$	SIMS & GAMON (2002)
MSAVI (Modified Soil Adjusted Vegetation Index) Chlorophyll, Zellstruktur, Minimierung des Einflusses der Bodenreflexion	$\frac{0.5 * (2 * R800 + 1)}{\sqrt{(2 * R800 + 1)^2 - 8 * (R800 - R670)}}$	HABOUDANE et al. (2004)
MSI (Moisture Stress Index) Wassergehalt, Zellstruktur	$\frac{R1599}{R819}$	HUNT & ROCK (1989)
MTCI (MERIS Total Chlorophyll Index) Chlorophyll, Zellstruktur	$\frac{R750 - R710}{R710 - R680}$	HUNT et al. (2013)
MTVI (Modified Triangle Vegetation Index) Chlorophyll	$1.5 * [1.2 * (R712 - R550) - 2.1 * (R670 - R550)]$	RATHOD et al. (2013)
MTVI2 (Modified Triangular Vegetation Index 2) Chlorophyll, Zellstruktur	$\frac{1.5 * [1.2 * (R800 - R550) - 2.5 * (R670 - R550)]}{\sqrt{(2 * R800 + 1)^2 - (6 * R800 - 5 * \sqrt{R670}) - 0.5}}$	HABOUDANE et al. (2004)

*RXXX = Reflexionswert im Vegetationsspektrum bei Wellenlänge XXX in nm

Fortsetzung der Tabelle auf der nächsten Seite

Index & sensitiver Pflanzenparameter	Formel*	Quelle
NDII (Normalized Difference Infrared Index) Wassergehalt, Zellstruktur	$\frac{R819 - R1649}{R819 + R1649}$	WHITE et al. (2007)
NDLI (Normalized Difference Lignin Index) Lignin	$\frac{\log\left(\frac{1}{R1754}\right) - \log\left(\frac{1}{R1680}\right)}{\log\left(\frac{1}{R1754}\right) + \log\left(\frac{1}{R1680}\right)}$	SERRANO et al. (2002)
NDNI (Normalized Difference Nitrogen Index) Stickstoff	$\frac{\log\left(\frac{1}{R1510}\right) - \log\left(\frac{1}{R1680}\right)}{\log\left(\frac{1}{R1510}\right) + \log\left(\frac{1}{R1680}\right)}$	SERRANO et al. (2002)
NDRE (Normalized Difference Red Edge Index) Chlorophyll	$\frac{R790 - R720}{R790 + R720}$	BARNES et al. (2000)
NDVI_a (Normalized Difference Vegetation Index a) Chlorophyll, Zellstruktur	$\frac{R800 - R670}{R800 + R670}$	HABOUDANE et al. (2004)
NDVI_510_810 (Normalized Difference Vegetation Index 510_810) Chlorophyll, Zellstruktur	$\frac{R810 - R510}{R810 + R510}$	REN et al. (2010)
NDVI_510_870 (Normalized Difference Vegetation Index 510_870) Chlorophyll, Zellstruktur	$\frac{R870 - R510}{R870 + R510}$	REN et al. (2010)
NDVI_660_870 (Normalized Difference Vegetation Index 660_870) Chlorophyll, Zellstruktur	$\frac{R870 - R660}{R870 + R660}$	REN et al. (2010)
NDWI (Normalized Difference Water Index) Wassergehalt, Zellstruktur	$\frac{R857 - R1241}{R857 + R1241}$	GAO (1996)
NMDI (Normalized Multi-band Drought Index) Wassergehalt, Zellstruktur, Chlorophyll	$\frac{R860 - (R1640 - R2130)}{R660 + (R1640 + R2130)}$	WANG & QU (2007)

*RXXX = Reflexionswert im Vegetationsspektrum bei Wellenlänge XXX in nm

Fortsetzung der Tabelle auf der nächsten Seite

Index & sensibler Pflanzenparameter	Formel*	Quelle
NPCI (Normalized Pigment Chlorophyll Index) Chlorophyll	$\frac{R680 - R430}{R680 + R430}$	PEÑUELAS & FILELLA (1998)
NPQI (Normalized Phaeophytinization Index) Chlorophyll	$\frac{R415 - R435}{R415 + R435}$	PEÑUELAS & FILELLA (1998)
OSAVI (Optimized Soil-Adjusted Vegetation Index) Chlorophyll, Zellstruktur, Minimierung des Einflusses der Bodenreflexion	$\frac{(1 + 0.5) * (R800 - R670)}{(R800 + R670 + 0.5)}$	LIU et al. (2010)
PRI (Photochemical Reflectance Index) Chlorophyll	$\frac{R531 - R570}{R531 + R570}$	PEÑUELAS & FILELLA (1998)
PSND_a (Pigment Specific Normalized Difference a) Chlorophyll, Zellstruktur	$\frac{R800 - R680}{R800 + R680}$	BLACKBURN (1998)
PSND_b (Pigment Specific Normalized Difference b) Chlorophyll, Zellstruktur	$\frac{R800 - R635}{R800 + R635}$	BLACKBURN (1998)
PSND_c (Pigment Specific Normalized Difference c) Chlorophyll, Zellstruktur	$\frac{R800 - R470}{R800 + R470}$	BLACKBURN (1998)
PSRI (Plant Senescence Reflectance Index) Carotinoide, Chlorophyll	$\frac{R680 - R500}{R750}$	SIMS & GAMON (2002)
PSSR_a (Pigment Specific Simple Ratio a) Chlorophyll, Zellstruktur	$\frac{R800}{R680}$	BLACKBURN (1998)
PSSR_b (Pigment Specific Simple Ratio b) Chlorophyll, Zellstruktur	$\frac{R800}{R635}$	BLACKBURN (1998)

*RXXX = Reflexionswert im Vegetationsspektrum bei Wellenlänge XXX in nm

Fortsetzung der Tabelle auf der nächsten Seite

Index & sensitiver Pflanzenparameter	Formel*	Quelle
PSSR_c (<i>Pigment Specific Simple Ratio c</i>) Chlorophyll, Zellstruktur	$\frac{R800}{R470}$	BLACKBURN (1998)
R430, R448, R471, R550, R662 (Reflexion jeweils bei 430, 448, 471, 550, 662 nm) Chlorophyll	R430, R448, R471, R550, R662	DUNAGAN et al. (2007)
R460, R560, R660, R1100 (Reflexion jeweils bei 460, 560, 660, 1100 nm) Chlorophyll, Zellstruktur	R460, R560, R660, R1100	REN et al. (2010)
R1048_1021 (Ratio aus 1048 und 1021 nm) Zellstruktur	$\frac{R1048}{R1021}$	BANDARU et al. (2010)
R1100_810 (Ratio aus 1100 und 810 nm) Zellstruktur	$\frac{R1100}{R810}$	SRIDHAR et al. (2007a)
RVSI (<i>Red Edge Vegetation Stress Index</i>) Chlorophyll, Zellstruktur	$\frac{R714 - R752}{2} - R733$	MERTON & HUNTINGTON (1999)
SAVI_a (<i>Soil Adjusted Vegetation Index a</i>) Chlorophyll, Zellstruktur, Minimierung des Einflusses der Bodenreflexion mit L = 0.5	$\frac{(1 + L) * (R800 - R670)}{R800 + R670 + L}$	HABOUDANE et al. (2004)
SIPI (<i>Structure Insensitive Pigment Index</i>) Zellstruktur, Chlorophyll, Carotinoide	$\frac{R800 - R445}{R800 - R680}$	PEÑUELAS & FILELLA (1998)
TCARI (<i>Transformed Chlorophyll Absorption Reflectance Index</i>) Chlorophyll	$3 * [(R700 - R670) - 0.2 * (R700 - R550) * \left(\frac{R700}{R670}\right)]$	HUNT et al. (2013)
TCI (<i>Triangular Chlorophyll Index</i>) Chlorophyll	$1.2 * (R700 - R550) - 1.5 * \sqrt{\frac{R700}{R670}}$	HUNT et al. (2013)

*RXXX = Reflexionswert im Vegetationsspektrum bei Wellenlänge XXX in nm

Fortsetzung der Tabelle auf der nächsten Seite

Index & sensitiver Pflanzenparameter	Formel*	Quelle
TGI (<i>Triangular Greenness Index</i>) Chlorophyll	$-0.5 * [(670 - 480) * (R670 - R550) - (670 - 550) * (R670 - R480)]$	HUNT et al. (2011)
TVI (<i>Triangular Vegetation Index</i>) Chlorophyll, Zellstruktur	$0.5 * [120 * (R750 - R550) - 200 * (R670 - R550)]$	HABOUDANE et al. (2004)
VREI1 (<i>Vogelmann Red Edge Index 1</i>) Chlorophyll, Zellstruktur	$\frac{R740}{R720}$	VOGELMANN et al. (1993)
VREI2 (<i>Vogelmann Red Edge Index 2</i>) Chlorophyll, Zellstruktur	$\frac{R734 - R747}{R715 + R726}$	VOGELMANN et al. (1993)
WI (<i>Water Index</i>) Wassergehalt	$\frac{R900}{R970}$	PEÑUELAS & FILELLA (1998)
MCARI_MTVI2 (Ratio aus MCARI und MTVI_2 , siehe Berechnung der beiden Indizes)	$\frac{MCARI}{MTVI_2}$	HUNT et al. (2013)
MTVI_MCARI (Ratio aus MTVI und MCARI , siehe Berechnung der beiden Indi- zes)	$\frac{MTVI}{MCARI}$	LIU et al. (2010)
MTVI_OSAVI (Ratio aus MTVI und OSAVI , siehe Berechnung der beiden Indi- zes)	$\frac{MTVI}{OSAVI}$	LIU et al. (2010)
TCARI_OSAVI (Ratio aus TCARI und OSAVI , siehe Berechnung der beiden Indi- zes)	$\frac{TCARI}{OSAVI}$	HUNT et al. (2013)

*RXXX = Reflexionswert im Vegetationsspektrum bei Wellenlänge XXX in nm

Tabelle A5-2: Verwendete Vegetationsindizes zur Bewertung der Pflanzenvitalität auf den Auenstandorten, basierend auf spezifische Wellenlängenbereiche

Index & sensitiver Pflanzenparameter	Formel*	Quelle
CI_G (Chlorophyll Index Green) Chlorophyll, Zellstruktur	$\frac{NIR}{Green} - 1$	HUNT et al. (2013)
CVI (Chlorophyll Vegetation Index) Chlorophyll, Zellstruktur	$\frac{NIR}{Green} * \frac{Red}{Green}$	VINCINI et al. (2008)
DVI (Difference Vegetation Index) Chlorophyll, Zellstruktur	$\frac{NIR}{Green} * \frac{Red}{Green}$	SHI et al. (2014)
EVI (Enhanced Vegetation Index) Chlorophyll, Zellstruktur	$\frac{2.5 * (NIR - Red)}{NIR + 6 * Red - 7.5 * Blue + 1}$	HUNT et al. (2013)
GLI (Green Leaf Index) Chlorophyll	$\frac{2 * Green - Red - Blue}{2 * Green + Red + Blue}$	HUNT et al. (2013)
gNDVI (green Normalized Difference Vegetation Index) Chlorophyll, Zellstruktur	$\frac{NIR - Green}{NIR + Green}$	HUNT et al. (2013)
IPVI (Infrared Percentage Vegetation Index) Chlorophyll, Zellstruktur	$\frac{NIR}{NIR - Red}$	SHI et al. (2014)
MSAVI2 (Modified Soil Adjusted Vegetation Index 2) Chlorophyll, Zellstruktur, Minimierung des Einflusses der Bodenreflexion	$2 * NIR + - \frac{\sqrt{(2 * NIR + 1)^2 - 8 * (NIR - Red)}}{2}$	SHI et al. (2014)
MSR (Modified Simple Ratio) Chlorophyll, Zellstruktur	$\frac{(NIR - Red) - 1}{\sqrt{(NIR + Red) + 1}}$	SHI et al. (2014)
NDVI_b (Normalized Difference Vegetation Index b) Chlorophyll, Zellstruktur	$\frac{NIR - Red}{NIR + Red}$	SHI et al. (2014)

*Blue = Minimum im Vegetationsspektrum zwischen 450 und 520 nm
 Green = Maximum im Vegetationsspektrum zwischen 520 und 600 nm
 Red = Minimum im Vegetationsspektrum zwischen 600 und 700 nm
 NIR = Maximum im Vegetationsspektrum zwischen 700 und 800 nm

Fortsetzung der Tabelle auf der nächsten Seite

Index & sensitiver Pflanzenparameter	Formel*	Quelle
NGRDI (Normalized Green Red Difference Index) Chlorophyll	$\frac{Green - Red}{Green + Red}$	HUNT et al. (2013)
RDVI (Ratio Difference Vegetation Index) Chlorophyll, Zellstruktur	$\frac{NIR - Red}{\sqrt{NIR + Red}}$	SHI et al. (2014)
RGR (Red Green Ratio) Chlorophyll, Anthocyan	$\frac{mean\ Red}{mean\ Green}$	GAMON & SURFUS (1999)
RVI (Ratio Vegetation Index) Chlorophyll, Zellstruktur	$\frac{NIR}{Red}$	SHI et al. (2014)
SAVI_b (Soil Adjusted Vegetation Index b) Chlorophyll, Zellstruktur, Minimierung des Einflusses der Bodenreflexion mit L = 0.5	$\frac{(1 + L) * (NIR - Red)}{(NIR + Red + L)}$	SHI et al. (2014)
VARI (Visible Atmospherically Resistant Index) Chlorophyll	$\frac{Green - Red}{Green + Red - Blue}$	HUNT et al. (2013)

*sofern nicht anders gekennzeichnet:

Blue = Minimum im Vegetationsspektrum zwischen 450 und 520 nm
 Green = Maximum im Vegetationsspektrum zwischen 520 und 600 nm
 Red = Minimum im Vegetationsspektrum zwischen 600 und 700 nm
 NIR = Maximum im Vegetationsspektrum zwischen 700 und 800 nm

Tabelle A5-3: Red Edge spezifische Vegetationsindizes zur Bewertung der Pflanzenvitalität auf den Auenstandorten

Index* & sensitiver Pflanzenparameter	Beschreibung oder Formel	Quelle
R780 Zellstruktur	Reflexion innerhalb der Red Edge bei 780 nm	CLEVERS et al. (2004)
R800 Zellstruktur	Reflexion innerhalb der Red Edge bei 800 nm	DUNAGAN et al. (2007)
REIP (Red Edge Inflection Point) Zellstruktur	$R700 + 40 * \frac{R670 + R780}{R740 - R700}$	GUYOT et al. (1988)
REIng (Red Edge Länge) Chlorophyll, Zellstruktur	Länge der Red Edge zwischen 655 und 767 nm, basierend auf der ersten Ableitung der Spektren $Min(R750 - R767) - Min(R655 - R700)$	-
REPI_spec (Red Edge Position Index Spectra) Zellstruktur	Maximum innerhalb der Red Edge zwischen 690 und 740 nm, basierend auf der ersten Ableitung der Spektren $Max(R690 - R740)$	CLEVERS et al. (2004)
REP_wvl1, REP_wvl2 (Red Edge Position Wavelength 1, Red Edge Position Wavelength 2) Zellstruktur	Wellenlängen innerhalb der Red Edge, zwischen denen der Anstieg (siehe REPI_spec) Maximal ist	nach CLEVERS et al. (2004)

*Red Edge = Anstieg der Reflexion innerhalb der Vegetationsspektren zwischen 650 und 770 nm
RXXX = Reflexionswert im Vegetationsspektrum bei Wellenlänge XXX in nm
Max = Maximum
Min = Minimum

Tabelle A5-4: Abgeleitete Anstiege innerhalb der Vegetationsspektren zur Bewertung der Pflanzenvitalität auf den Auenstandorten

Index* & sensitiver Pflanzenparameter	Beschreibung	Quelle
SLALL_slopes Chlorophyll, Zellstruktur	Summe der Anstiege innerhalb der Vegetationsspektren zwischen 400 - 960 nm	KOOISTRA et al. (2003)
SLPA_slopes Chlorophyll	Summe der Anstiege innerhalb der Vegetationsspektren zwischen 400 - 690 nm	KOOISTRA et al. (2003)
SL4_slopes Chlorophyll	Anstiege innerhalb der Vegetationsspektren, jeweils 2 nm links und 2 nm rechts von 690 nm	KOOISTRA et al. (2003)
SL8_slopes Chlorophyll	Anstiege innerhalb der Vegetationsspektren, jeweils 4 nm links und 4 nm rechts von 690 nm	KOOISTRA et al. (2003)
SL16_slopes Chlorophyll	Anstiege innerhalb der Vegetationsspektren, jeweils 8 nm links und 8 nm rechts von 690 nm	KOOISTRA et al. (2003)
SL32_slopes Chlorophyll	Anstiege innerhalb der Vegetationsspektren, jeweils 16 nm links und 16 nm rechts von 690 nm	KOOISTRA et al. (2003)
SL64_slopes Chlorophyll	Anstiege innerhalb der Vegetationsspektren, jeweils 32 nm links und 32 nm rechts von 690 nm	KOOISTRA et al. (2003)
SL128_slopes Chlorophyll	Anstiege innerhalb der Vegetationsspektren, jeweils 64 nm links und 64 nm rechts von 690 nm	KOOISTRA et al. (2003)

*slopes = Anstiege

Tabelle A5-5: Abgeleitete Flächen und Banden innerhalb der Vegetationsspektren zur Bewertung der Pflanzenvitalität auf den Auenstandorten

Index* & sensitiver Pflanzenparameter	Beschreibung	Quelle
AUC_Blue, AUC_Green, AUC_Red, AUC_Pa, AUC_NIR, AUC_NIRII, AUC_SWIR, AUC_SWIRII Chlorophyll, Zellstruktur, Wassergehalt	Fläche unterhalb der Vegetationsspektren im jeweiligen Wellenlängenbereich	KOOISTRA et al. (2003)
AUC_CR0500 Chlorophyll	Fläche unterhalb der Vegetationsspektren, basierend auf CR-Spektren zwischen 400 und 650 nm	-
AUC_CR0671 Chlorophyll, Zellstruktur	Fläche unterhalb der Vegetationsspektren, basierend auf CR-Spektren zwischen 569 und 763 nm	nach CLARK & ROUSH (1984)
AUC_CR0671ab Chlorophyll, Zellstruktur	Bandentiefe bei 671 nm, basierend auf CR-Spektren mit Schultern bei 569 und 763 nm	CLARK & ROUSH (1984)
AUC_CR0700 Chlorophyll, Zellstruktur	Fläche unterhalb der Vegetationsspektren, basierend auf CR-Spektren zwischen 550 und 800 nm	-
AUC_CR0950 Zellstruktur, Wassergehalt	Fläche unterhalb der Vegetationsspektren, basierend auf CR-Spektren zwischen 850 und 1050 nm	-
AUC_CR0983 Wassergehalt, Zellstruktur, biochemische Blatteigenschaften	Fläche unterhalb der Vegetationsspektren, basierend auf CR-Spektren zwischen 933 und 1094 nm	nach CLARK & ROUSH (1984)
AUC_CR0983ab Wassergehalt	Bandentiefe bei 983 nm, basierend auf CR-Spektren mit Schultern bei 933 und 1094 nm	CLARK & ROUSH (1984)
AUC_CR1200 Wassergehalt, biochemische Blatteigenschaften,	Fläche unterhalb der Vegetationsspektren, basierend auf CR-Spektren zwischen 1100 und 1300 nm	-

*AUC = Area Under the Curve

Blue = Vegetationsspektrum zw. 450 und 520 nm

Green = Vegetationsspektrum zw. 520 und 600 nm

Red = Vegetationsspektrum zw. 600 und 700 nm

NIR = Vegetationsspektrum zw. 700 und 800 nm

NIRII = Vegetationsspektrum zw. 800 und 1300 nm

Pa = Vegetationsspektrum zw. 400 und 700 nm

SWIR = Vegetationsspektrum zw. 1500 und 1800 nm

SWIRII = Vegetationsspektrum zw. 1500 und 1800 nm

CR = Continuum Removal Spektren

ab = Absorptionsbande

Fortsetzung der Tabelle auf der nächsten Seite

Index* & sensitiver Pflanzenparameter	Beschreibung	Quelle
AUC_CR1205 Wassergehalt, biochemische Blatteigenschaften	Fläche unterhalb der Vegetationsspektren, basierend auf CR-Spektren zwischen 1094 und 1286 nm	nach CLARK & ROUSH (1984)
AUC_CR1205ab Wassergehalt	Bandentiefe bei 1205 nm, basierend auf CR-Spektren mit Schultern bei 1094 und 1286 nm	CLARK & ROUSH (1984)
AUC_CR1600 Wassergehalt, biochemische Blatteigenschaften	Fläche unterhalb der Vegetationsspektren, basierend auf CR-Spektren zwischen 1500 und 1750 nm	-
AUC_CR1730 Lignin, Protein	Fläche unterhalb der Vegetationsspektren, basierend auf CR-Spektren zwischen 1685 und 1740 nm	GOETZE et al. (2010)
AUC_CR2100 Lignin-Zellulose	Fläche unterhalb der Vegetationsspektren, basierend auf CR-Spektren zwischen 2000 und 2300 nm	-
AUC_CR2103 Lignin-Zellulose	Fläche unterhalb der Vegetationsspektren, basierend auf CR-Spektren zwischen 2052 und 2214 nm	nach CLARK & ROUSH (1984)
AUC_CR2103ab Lignin-Zellulose	Bandentiefe bei 2103 nm, basierend auf CR-Spektren mit Schultern bei 2052 und 2214 nm	CLARK & ROUSH (1984)
AUC_CR2304 Lignin-Zellulose	Fläche unterhalb der Vegetationsspektren, basierend auf CR-Spektren zwischen 2214 und 2385 nm	nach CLARK & ROUSH (1984)
AUC_CR2304ab Lignin-Zellulose	Bandentiefe bei 2304 nm, basierend auf CR-Spektren mit Schultern bei 2214 und 2385 nm	CLARK & ROUSH (1984)

*AUC = Area Under the Curve
 CR = Continuum Removal-Spektren
 ab = Absorptionsbande

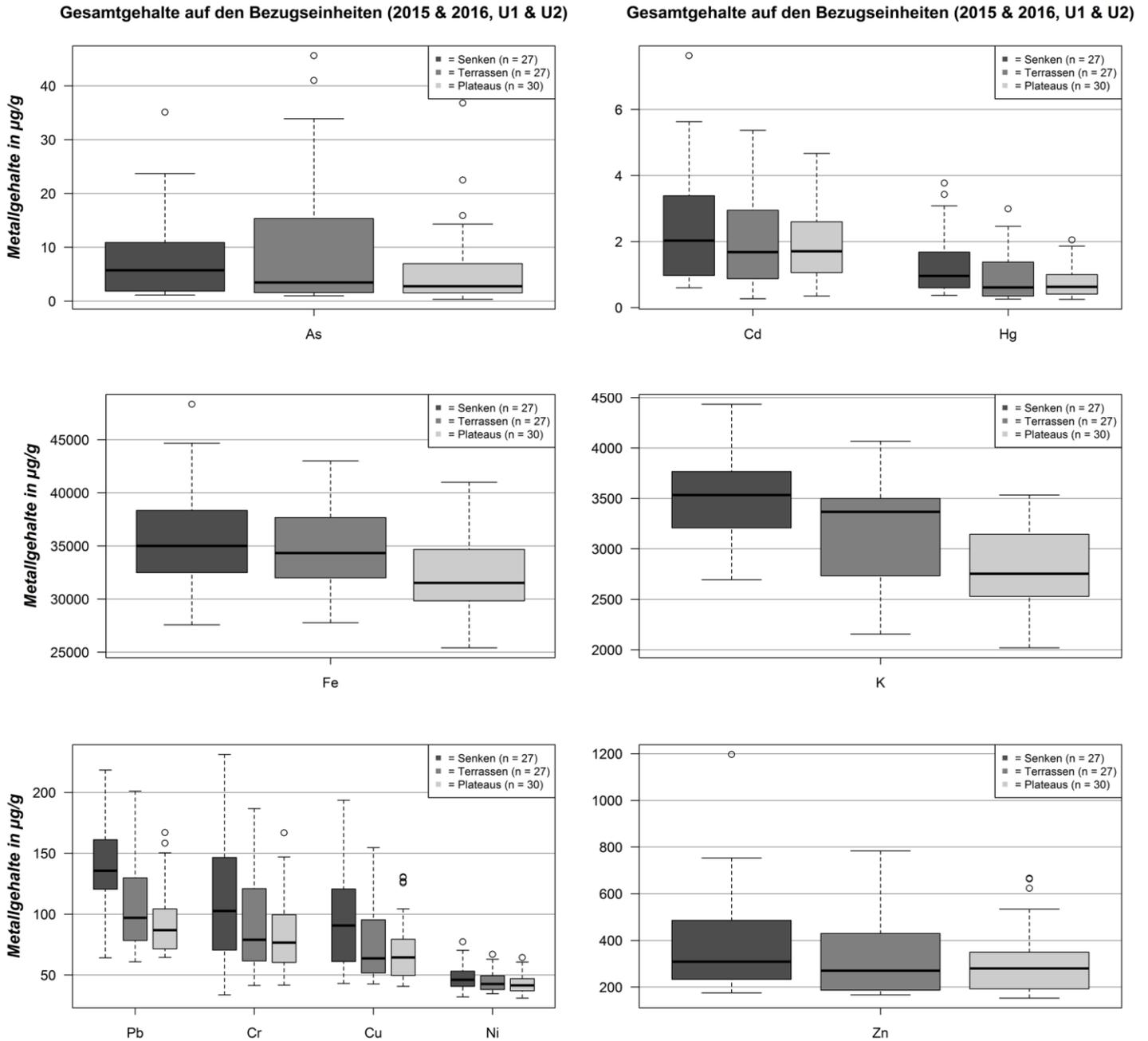


Abbildung A6-1: Gegenüberstellung der Gesamtgehalte in den Böden der Bezugseinheiten, unabhängig von den Untersuchungsgebieten und -jahren

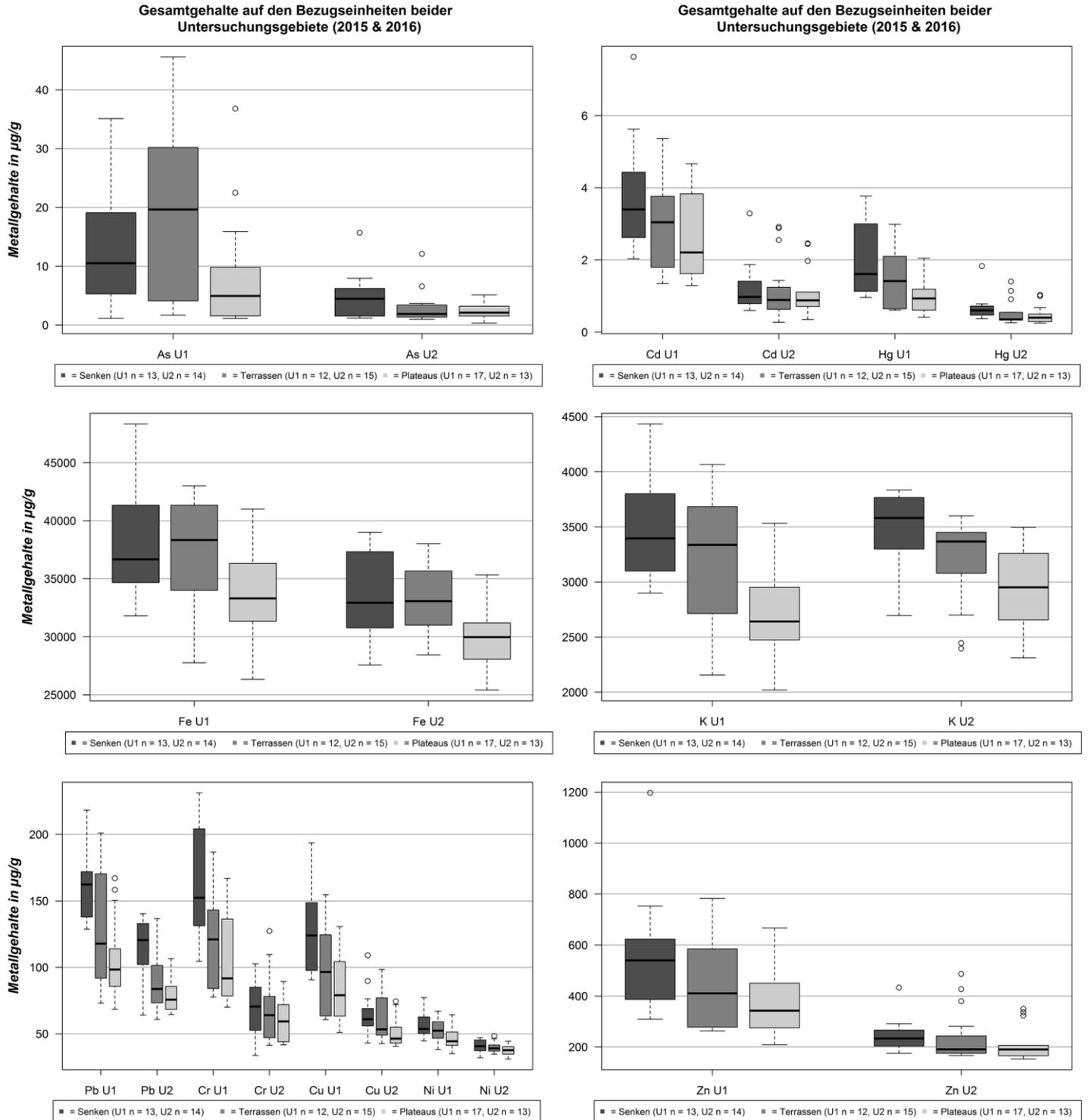


Abbildung A6-2: Gegenüberstellung der Gesamtgehalte in den Böden der Bezugseinheiten beider Untersuchungsgebiete, unabhängig von den Untersuchungsjahren

Interpolierte Gesamtgehalte der Auenböden für das Untersuchungsgebiet 1

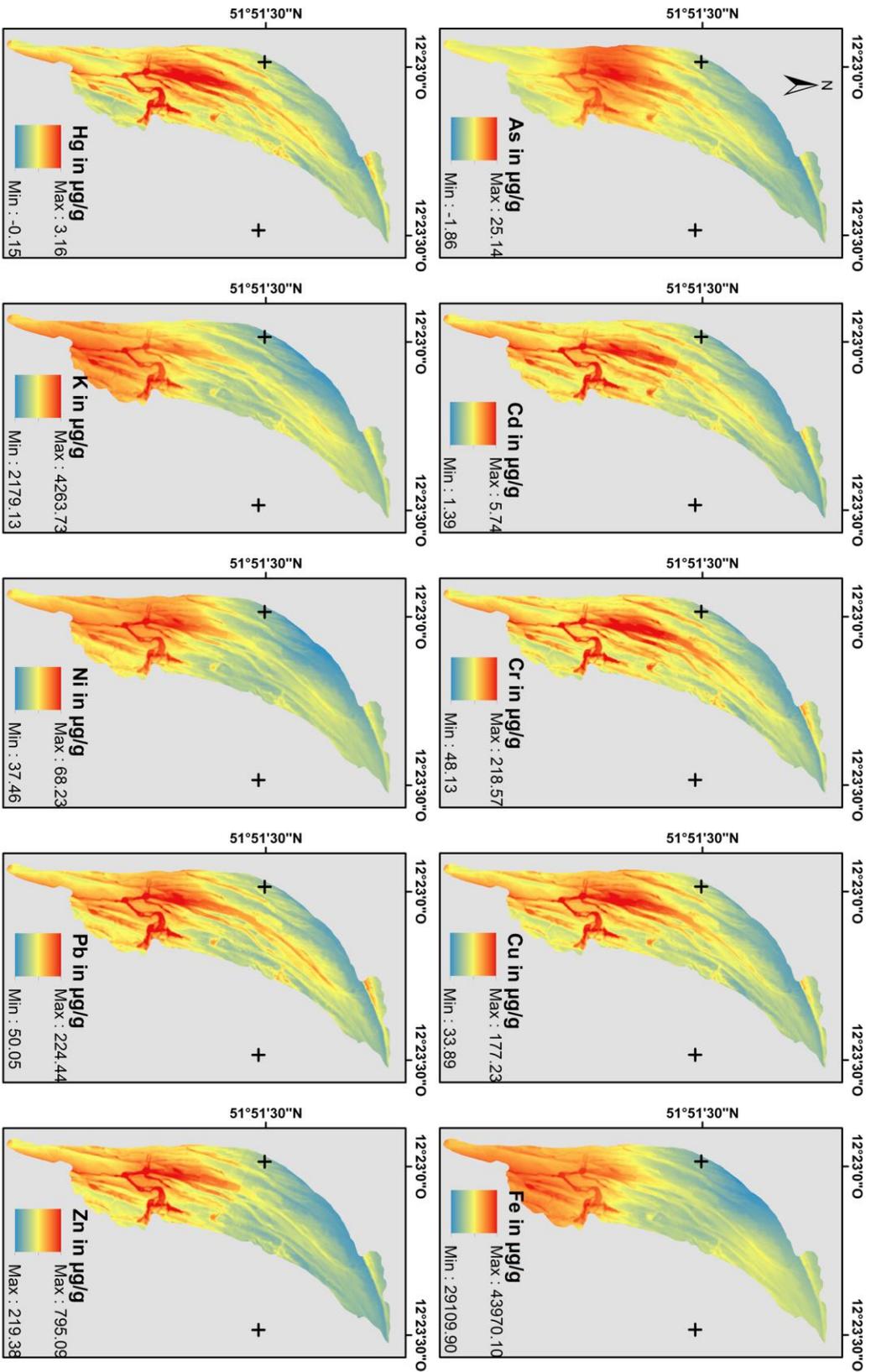


Abbildung A6-3: Interpolierte Gesamtgehalte in den Böden des Untersuchungsgebietes 1, basierend auf 42 Probenahmepunkten

Karte erstellt von: Frank Riedel | 2017-07-14 | basierend auf 42 Probenpunkten und DGM (LVermeGeo) | Karten mittels Interpolationsverfahren (kriging, R-Package automap) generiert

Interpolierte Gesamtgehalte der Auenböden für das Untersuchungsgebiet 2

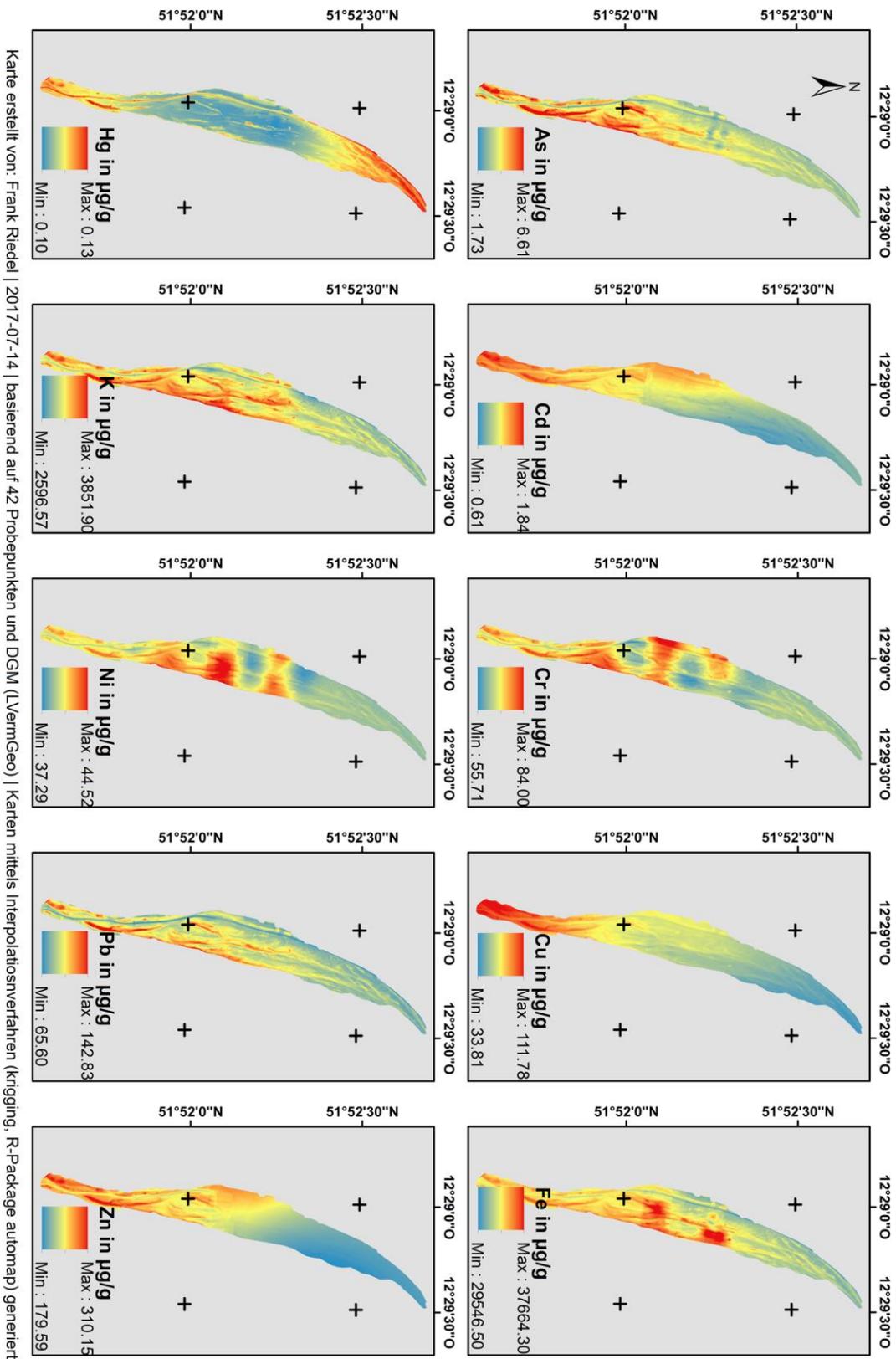


Abbildung A6-4: Interpolierte Gesamtgehalte in den Böden des Untersuchungsgebietes 2, basierend auf 42 Probenahme Punkten

Tabelle A6-1: Korrelationsmatrix zu den untersuchten Gesamtgehalten

	As¹	Cd	Cr	Cu	Fe	Hg¹	K	Ni	Pb	Zn
As¹		0.66***	0.63***	0.69***	0.46***	0.77***	0.21	0.60***	0.63***	0.66***
Cd	0.66***		0.91***	0.94***	0.54***	0.89***	0.26*	0.82***	0.76***	0.95***
Cr	0.63***	0.91***		0.95***	0.64***	0.91***	0.35**	0.86***	0.81***	0.89***
Cu	0.69***	0.94***	0.95***		0.65***	0.94***	0.44***	0.88***	0.88***	0.94***
Fe	0.46***	0.54***	0.64***	0.65***		0.55***	0.70***	0.87***	0.76***	0.68***
Hg¹	0.77***	0.89***	0.91***	0.94***	0.55***		0.35**	0.80***	0.83***	0.89***
K	0.21	0.26*	0.35**	0.44***	0.70***	0.35**		0.55***	0.66***	0.43***
Ni	0.60***	0.82***	0.86***	0.88***	0.87***	0.80***	0.55***		0.86***	0.89***
Pb	0.63***	0.76***	0.81***	0.88***	0.76***	0.83***	0.66***	0.86***		0.85***
Zn	0.66***	0.95***	0.89***	0.94***	0.68***	0.89***	0.43***	0.89***	0.85***	

¹Analysen von AM Universität Posen, alle anderen Analysen von MLU Halle-Wittenberg
Korrelationen signifikant bei p-Wert < 0.001 (***), p-Wert < 0.01 (**) und p-Wert < 0.05 (*)

Tabelle A6-2: Übersicht zu den besten PLSR-Ergebnissen für die Gesamtgehalte der Auenböden, basierend auf $U1_{kal}$ (n = 42) und $U2_{val}$ (n = 42)

Metall	Spektrentyp	n Anzahl an Faktoren	R^2_{cal}	RMSE_{cal} $\mu\text{g/g}$	Spektrentyp	n Anzahl an Faktoren	R^2_{val}	RMSE_{val} $\mu\text{g/g}$	Art der Validierung
As*	OR d1	1	0.17	11.15	CR	1	0.11	6.06	$U1_{kal} \rightarrow U2_{val}$
Cd	CR	8	0.86	0.52	OR d1	2	0.46	0.87	$U1_{kal} \rightarrow U2_{val}$
Cr	MSC	6	0.84	17.82	OR d1	4	0.51	29.54	$U1_{kal} \rightarrow U2_{val}$
Cu	SNV	5	0.87	13.31	MSC d2	5	0.58	18.21	$U1_{kal} \rightarrow U2_{val}$
Fe	OR	5	0.66	2799.880	SNV	4	0.67	4193.12	$U1_{kal} \rightarrow U2_{val}$
Hg*	SNV	5	0.76	0.42	CR	3	0.53	0.81	$U1_{kal} \rightarrow U2_{val}$
K	SNV	8	0.79	267.27	OR	4	0.59	374.21	$U1_{kal} \rightarrow U2_{val}$
Ni	CR	7	0.84	3.77	OR	5	0.45	9.38	$U1_{kal} \rightarrow U2_{val}$
Pb	MSC	5	0.90	13.08	MSC	5	0.80	11.66	$U1_{kal} \rightarrow U2_{val}$
Zn	CR	8	0.86	73.87	OR	4	0.38	138.29	$U1_{kal} \rightarrow U2_{val}$

*Analysen von AM Universität Posen, alle anderen Analysen von MLU Halle-Wittenberg

Abkürzungen: OR = Originalspektrum | d1 = erste Ableitung | d2 = zweite Ableitung |

MSC = Multi Scatter Correction | SNV = Standard Normal Variate | CR = Continuum Removal |

KS = Kennard-Stone sampling

Tabelle A6-3: Übersicht zu den besten PLSR-Ergebnissen für die Gesamtgehalte der Auenböden, basierend auf $U2_{kal}$ (n = 42) und $U1_{val}$ (n = 42)

Metall	Spektrentyp	n Anzahl an Faktoren	R^2_{cal}	RMSE_{cal} $\mu\text{g/g}$	Spektrentyp	n Anzahl an Faktoren	R^2_{val}	RMSE_{val} $\mu\text{g/g}$	Art der Validierung
As*	OR	1	0.18	3.19	OR	1	0.20	14.82	$U2_{kal} \rightarrow U1_{val}$
Cd	CR	6	0.68	0.43	MSC	8	0.76	1.05	$U2_{kal} \rightarrow U1_{val}$
Cr	CR	7	0.86	7.81	MSC	3	0.54	46.74	$U2_{kal} \rightarrow U1_{val}$
Cu	MSC d1	2	0.56	11.01	SNV	4	0.84	25.95	$U2_{kal} \rightarrow U1_{val}$
Fe	OR	4	0.78	1614.57	SNV	4	0.64	5363.63	$U2_{kal} \rightarrow U1_{val}$
Hg*	CR	3	0.43	0.25	MSC	2	0.62	0.92	$U2_{kal} \rightarrow U1_{val}$
K	OR	4	0.50	295.77	OR	4	0.75	372.13	$U2_{kal} \rightarrow U1_{val}$
Ni	OR	4	0.55	3.03	SNV	3	0.79	10.36	$U2_{kal} \rightarrow U1_{val}$
Pb	SNV	5	0.85	9.84	MSC	5	0.89	14.87	$U2_{kal} \rightarrow U1_{val}$
Zn	CR	6	0.62	50.82	CR	6	0.73	154.74	$U2_{kal} \rightarrow U1_{val}$

*Analysen von AM Universität Posen, alle anderen Analysen von MLU Halle-Wittenberg
 Abkürzungen: OR = Originalspektrum | d1 = erste Ableitung | MSC = Multi Scatter Correction |
 SNV = Standard Normal Variate | CR = Continuum Removal | KS = Kennard-Stone sampling

Tabelle A6-4: Übersicht zu den besten PLSR-Ergebnissen für die Gesamtgehalte der Auenböden, basierend auf KS zur Kalibrierung (n = 42) und Validierung (n = 42)

Metall	Spektrentyp	n Anzahl an Faktoren	R²cal	RMSEcal µg/g	Spektrentyp	n Anzahl an Faktoren	R²val	RMSEval µg/g	Art der Validierung
As*	SNV d1	1	0.31	7.28	CR	1	0.27	10.61	KS
Cd	MSC	6	0.78	0.78	MSC	6	0.86	0.52	KS
Cr	MSC	6	0.86	18.04	CR	3	0.79	19.51	KS
Cu	MSC	8	0.92	10.70	CR	5	0.85	12.72	KS
Fe	SNV	4	0.66	2827.31	OR	4	0.64	2943.58	KS
Hg*	MSC	6	0.82	0.34	SNV	5	0.73	0.42	KS
K	SNV	4	0.66	309.23	OR	4	0.72	286.13	KS
Ni	MSC	4	0.81	4.71	CR	2	0.68	5.76	KS
Pb	MSC	5	0.94	10.78	MSC	5	0.86	12.32	KS
Zn	CR	5	0.70	108.73	CR	5	0.84	77.78	KS

*Analysen von AM Universität Posen, alle anderen Analysen von MLU Halle-Wittenberg
 Abkürzungen: OR = Originalspektrum | d1 = erste Ableitung | MSC = Multi Scatter Correction |
 SNV = Standard Normal Variate | CR = Continuum Removal | KS = Kennard-Stone sampling

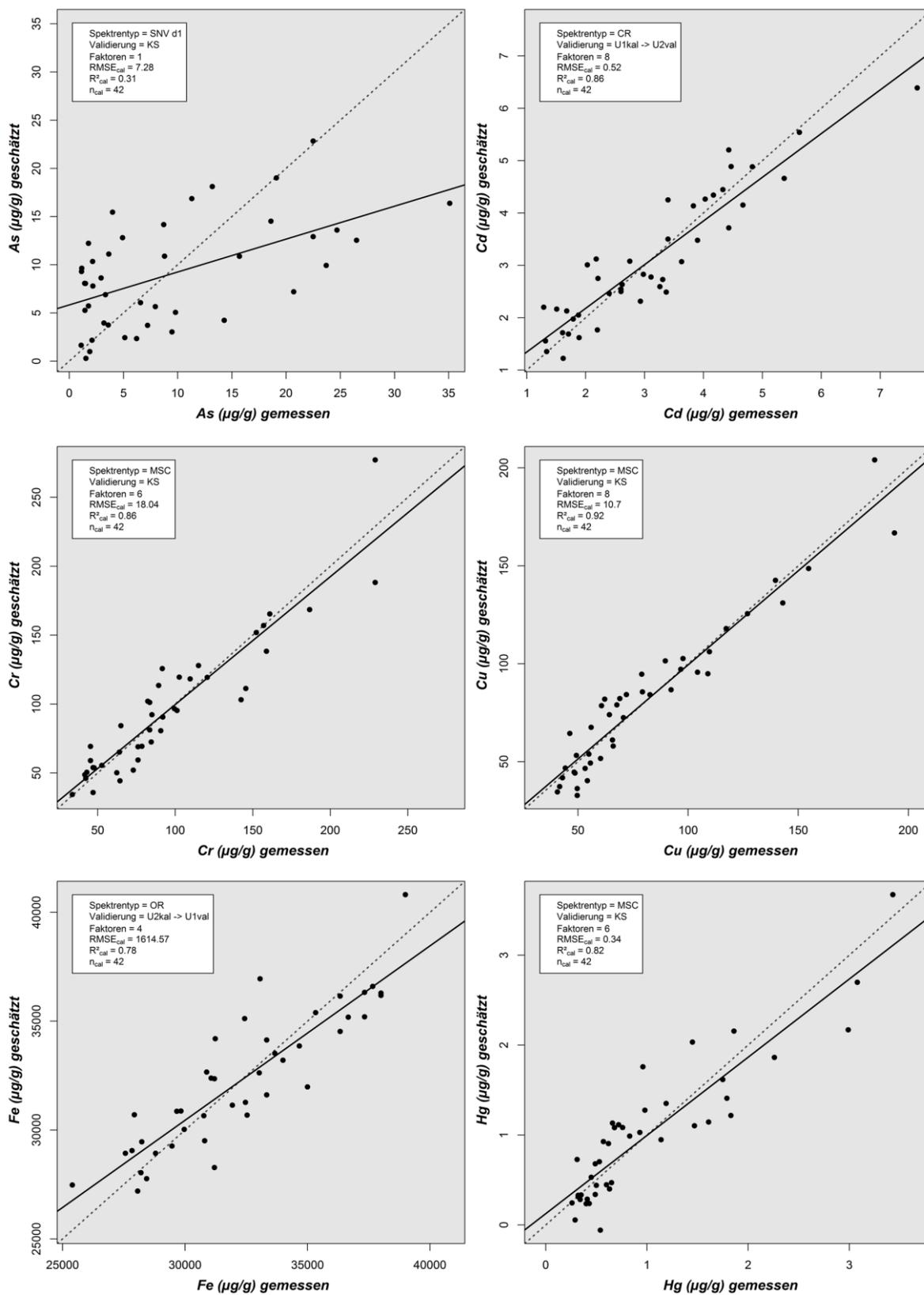


Abbildung A6-5: Optimale PLSR-Kalibrierungsergebnisse für die Gesamtgehalte der Elemente As, Cd, Cr, Cu, Fe, und Hg

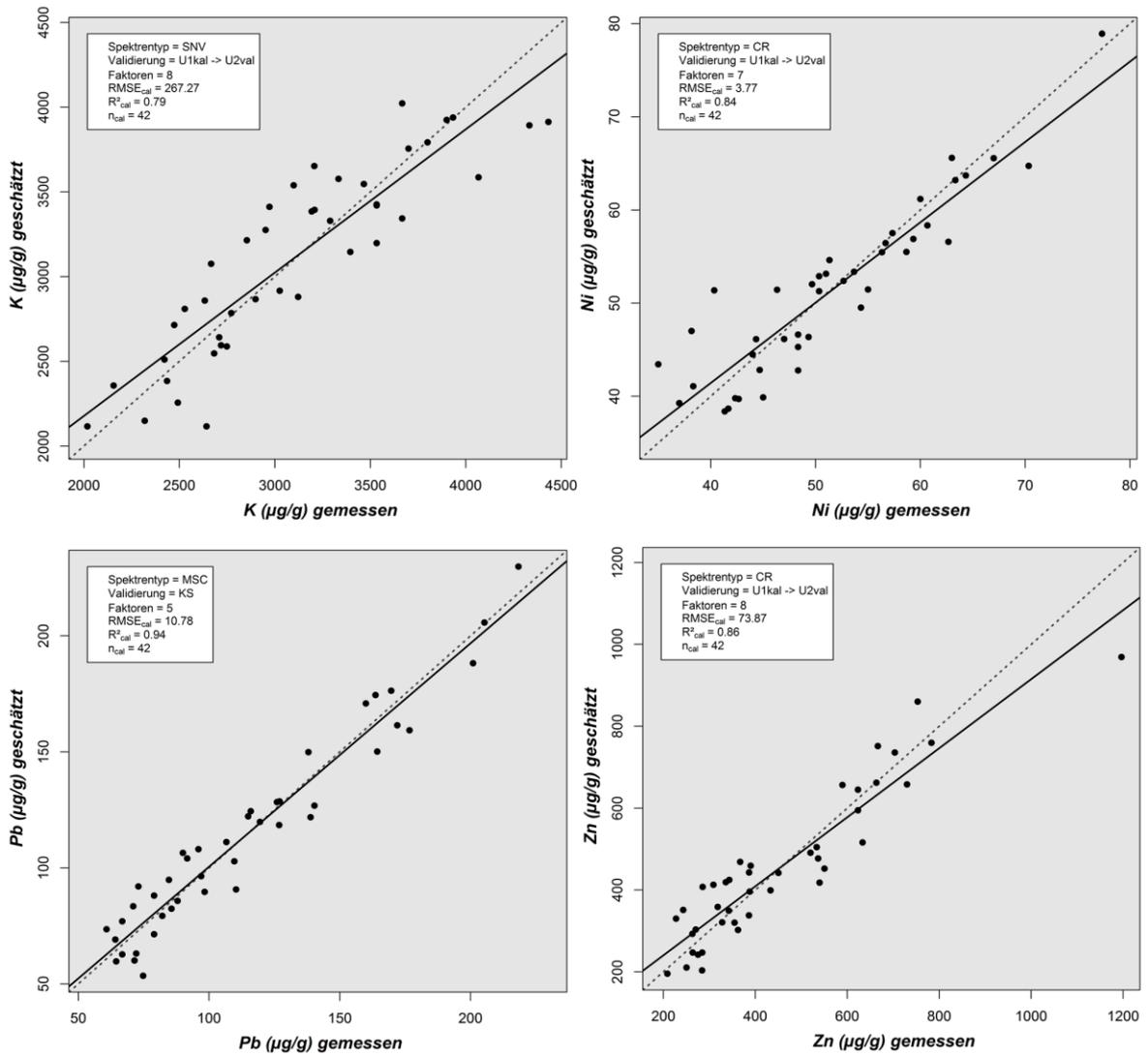


Abbildung A6-6: Optimale PLSR-Kalibrierungsergebnisse für die Gesamtgehalte der Elemente K, Ni, Pb und Zn

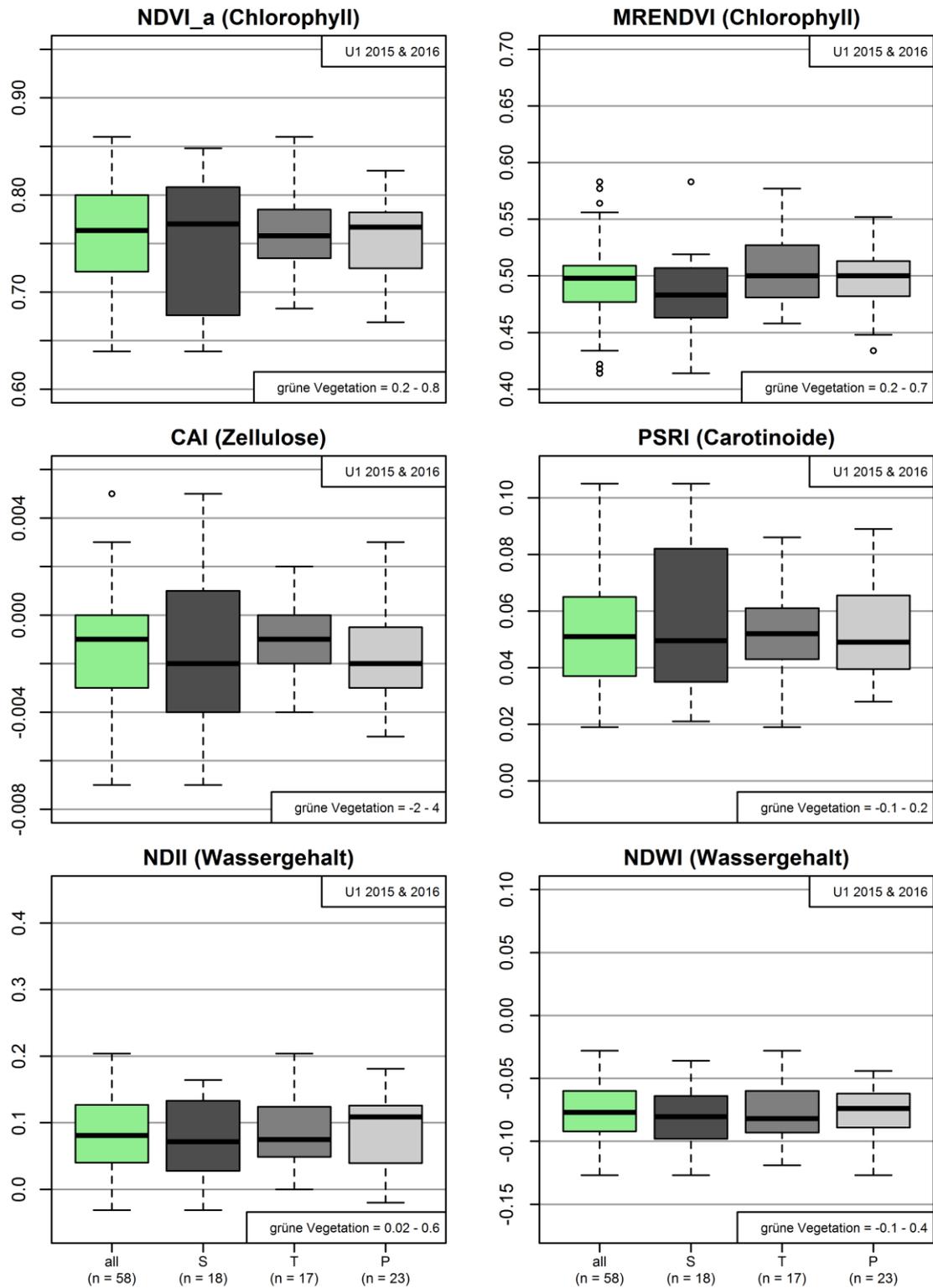


Abbildung A6-8: Charakterisierung der Pflanzenvitalität auf Grundlage der Spektrometermessungen und ausgewählten Indizes im Untersuchungsgebiet 1, unabhängig von den Untersuchungsjahren

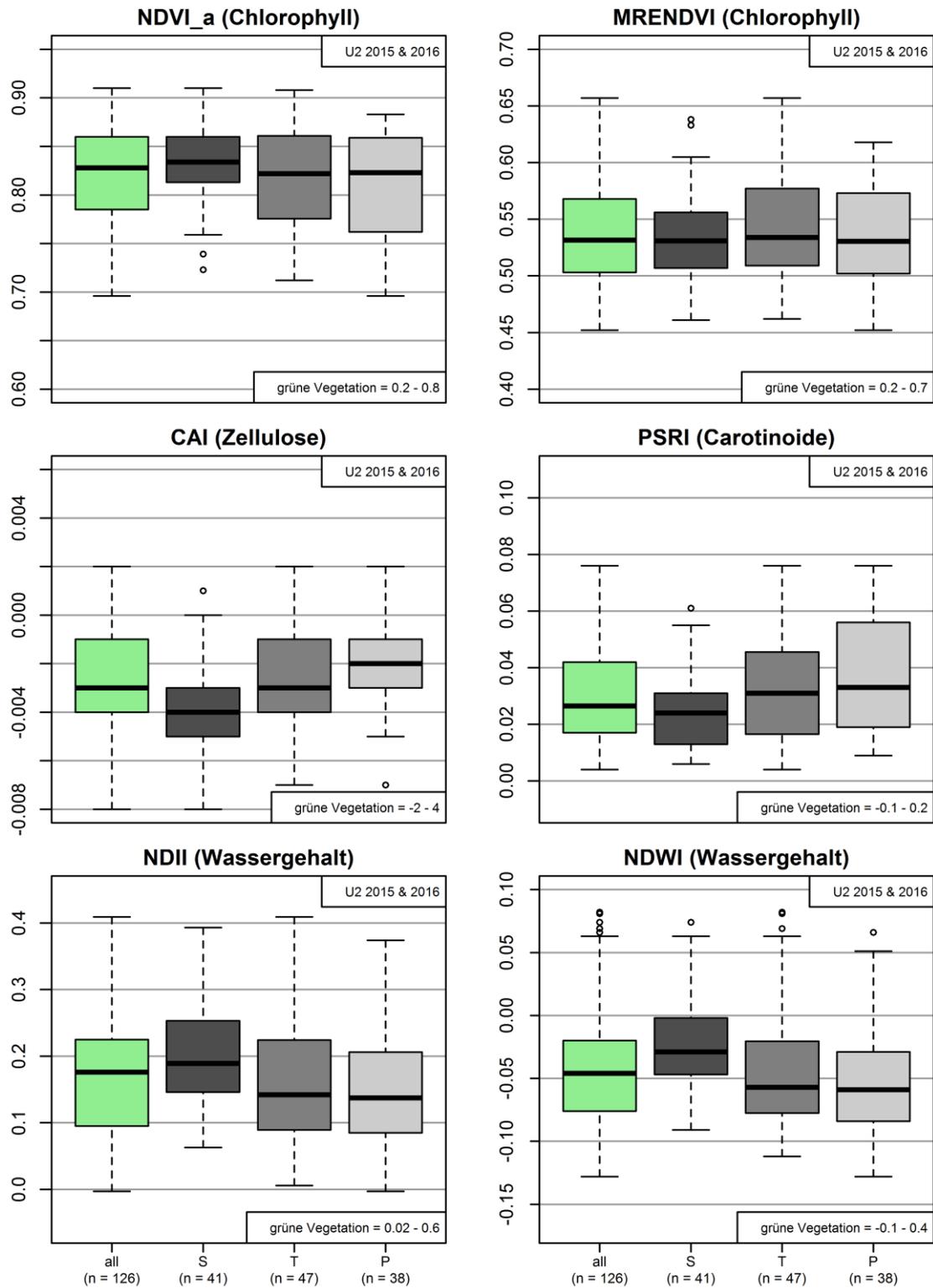


Abbildung A6-9: Charakterisierung der Pflanzenvitalität auf Grundlage der Spektrometermessungen und ausgewählten Indizes im Untersuchungsgebiet 2, unabhängig von den Untersuchungsjahren

Generative Pflanzenhöhe auf den Bezugseinheiten (2015 & 2016, U1 & U2)

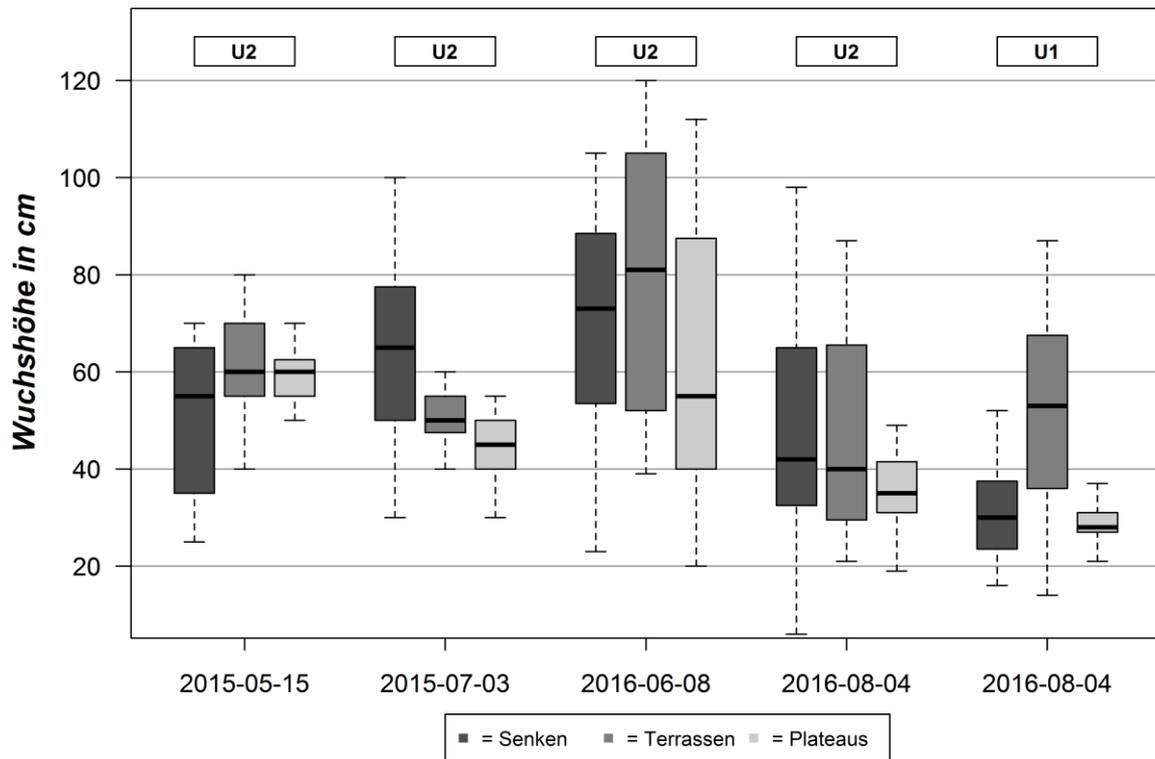


Abbildung A6-7: Ermittelte Pflanzenhöhen auf den Bezugseinheiten beider Untersuchungsgebiete

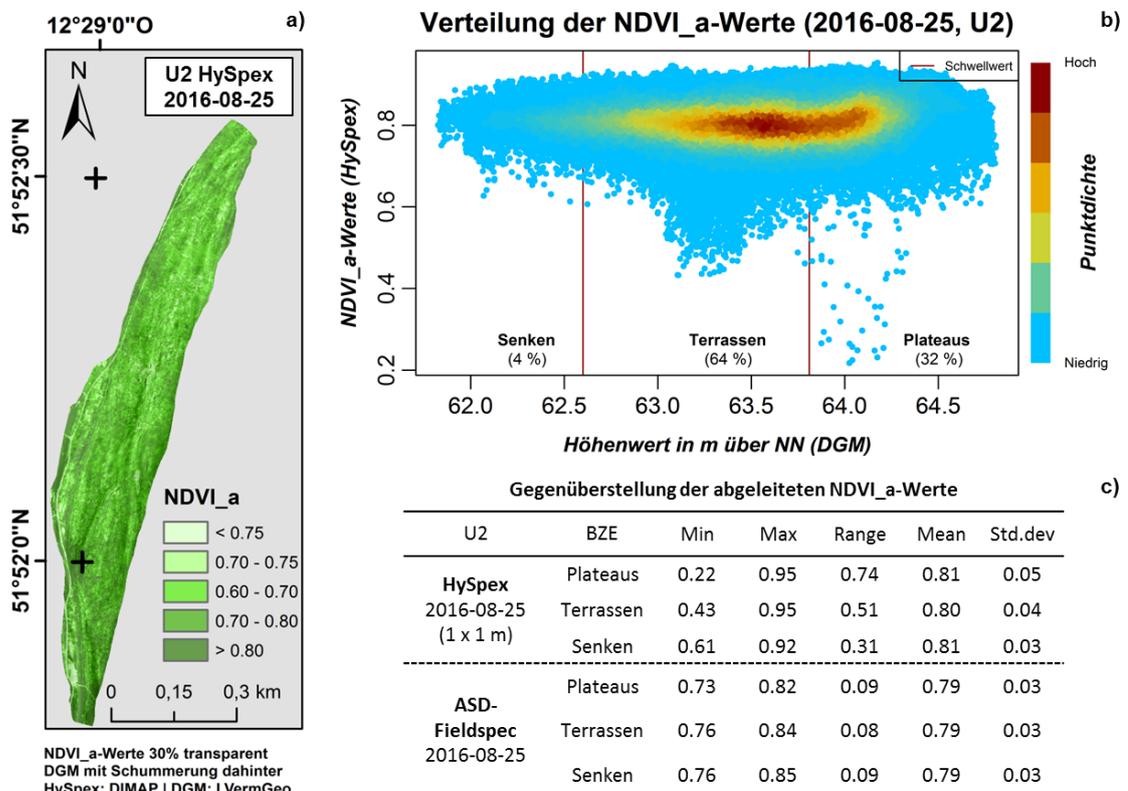


Abbildung A6-10: NDVI_a-Werte im Untersuchungsgebiet 2, abgeleitet aus HySpex (a), in Relation zum DGM (b) und in Vergleich zu den Geländemessungen (c) (b nach SCHWALB et al. 2015:24f., VANDERWAL et al. 2013:28f.)

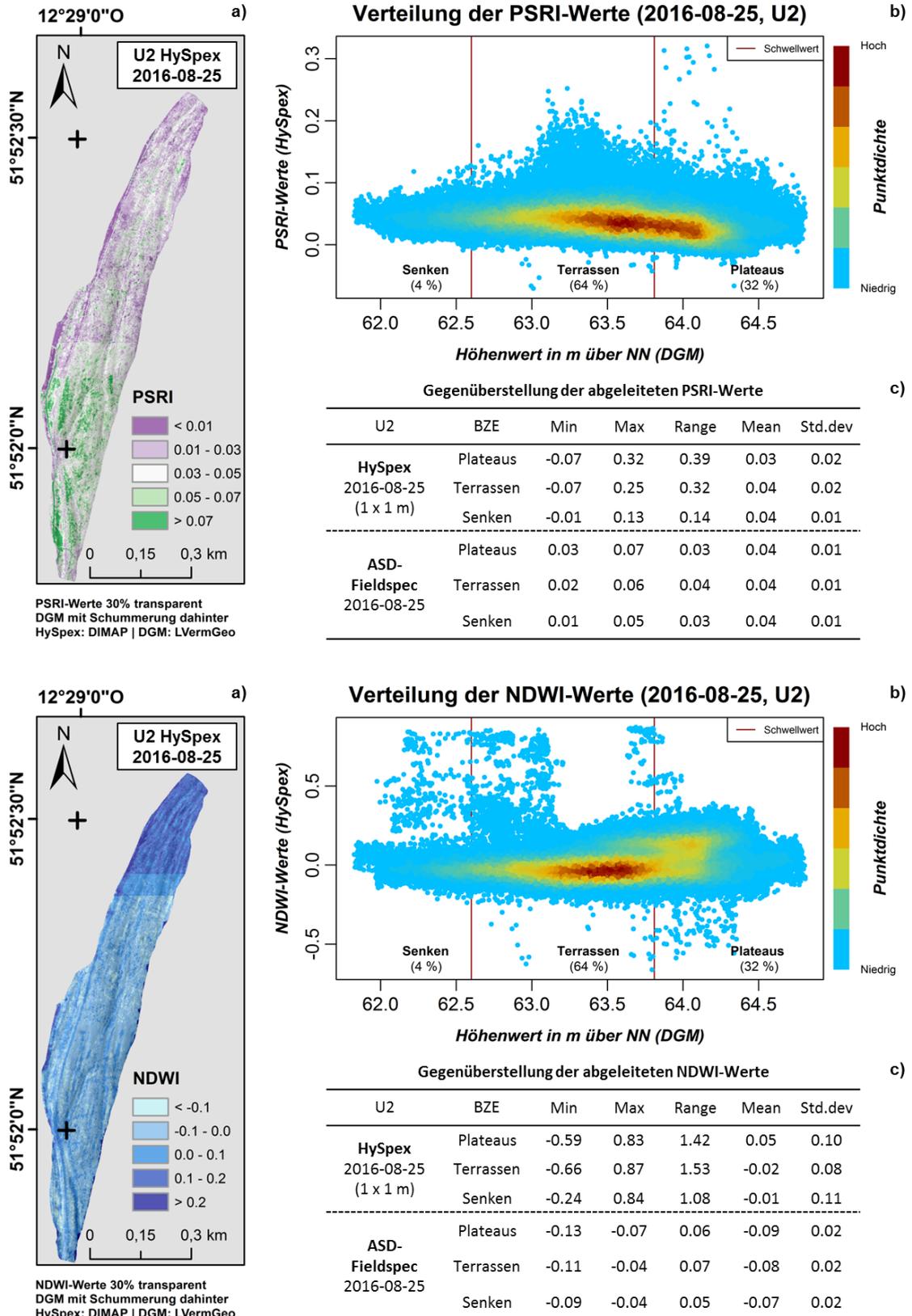


Abbildung A6-11: PSRI- (oben) und NDWI-Werte (unten) im Untersuchungsgebiet 2, abgeleitet aus HySpex (a), in Relation zum DGM (b) und in Vergleich zu den Geländemessungen (c) (b nach SCHWALB et al. 2015:24f., VANDERWAL et al. 2013:28f.)

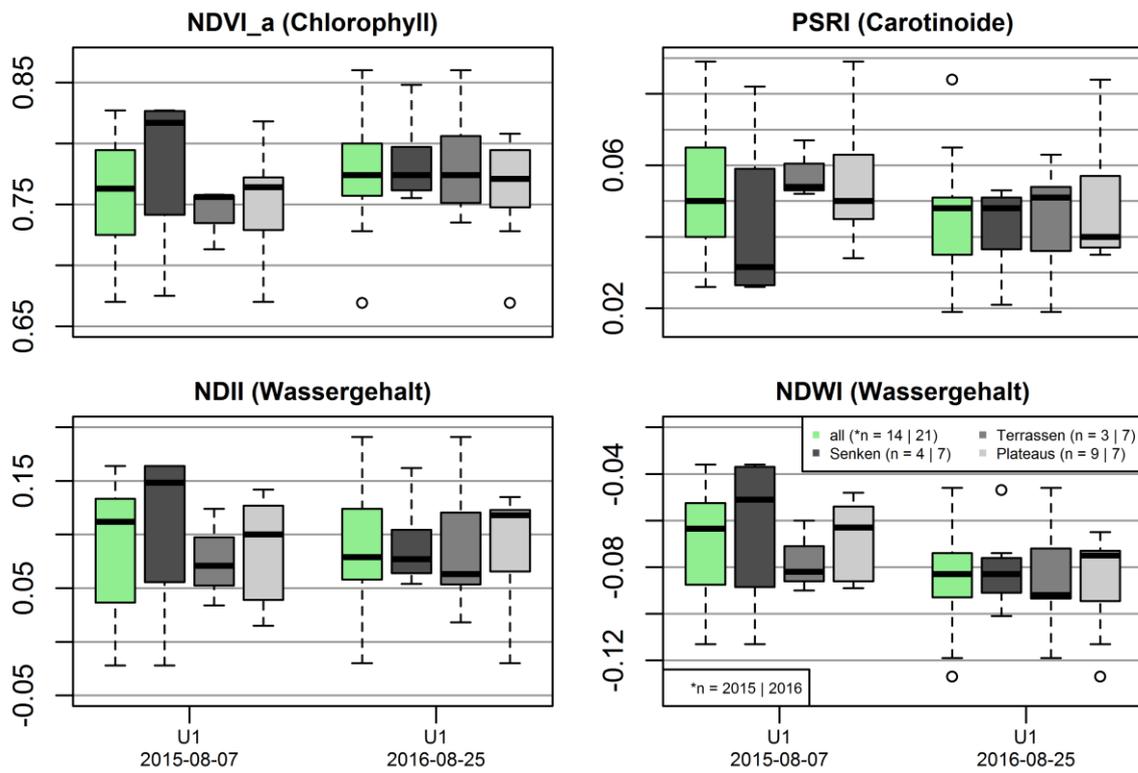


Abbildung A6-12: Veränderung der Pflanzenvitalität im Untersuchungsgebiet 1 für das Jahr 2015 und 2016, auf Grundlage der Spektrometermessungen und ausgewählten Indizes (eigene Abbildung)

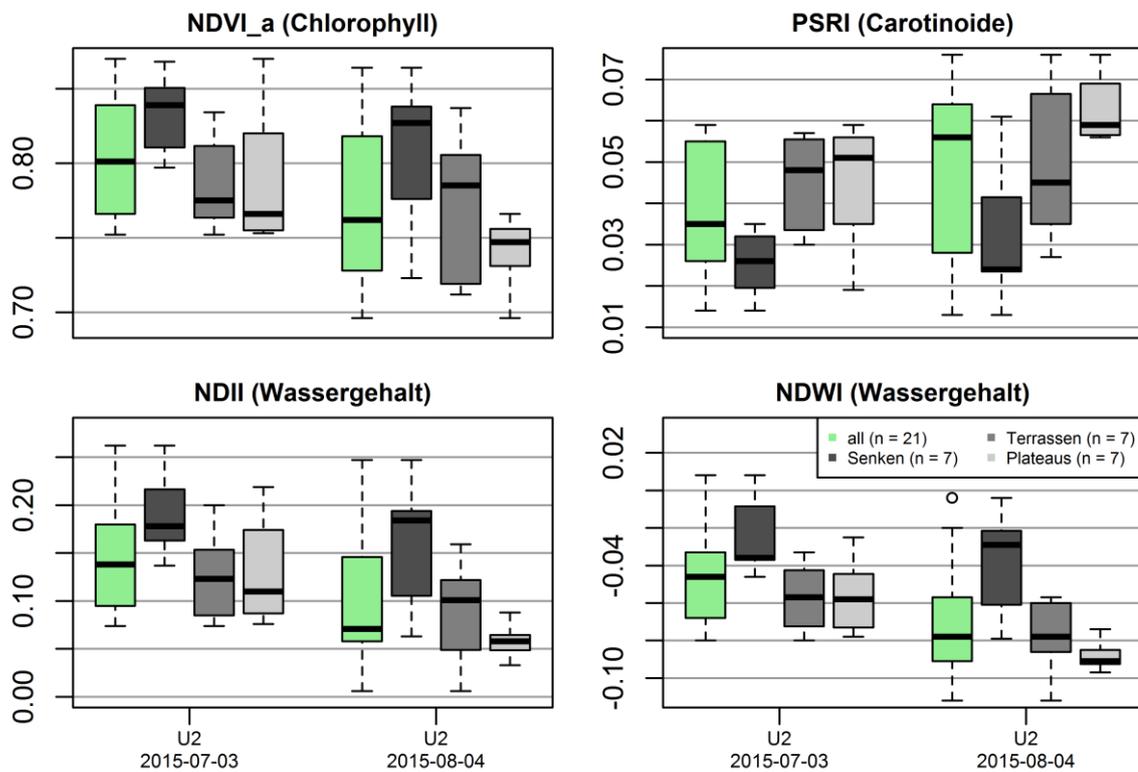


Abbildung A6-13: Veränderung der Pflanzenvitalität im Untersuchungsgebiet 2 für das Jahr 2015, auf Grundlage der Spektrometermessungen und ausgewählten Indizes

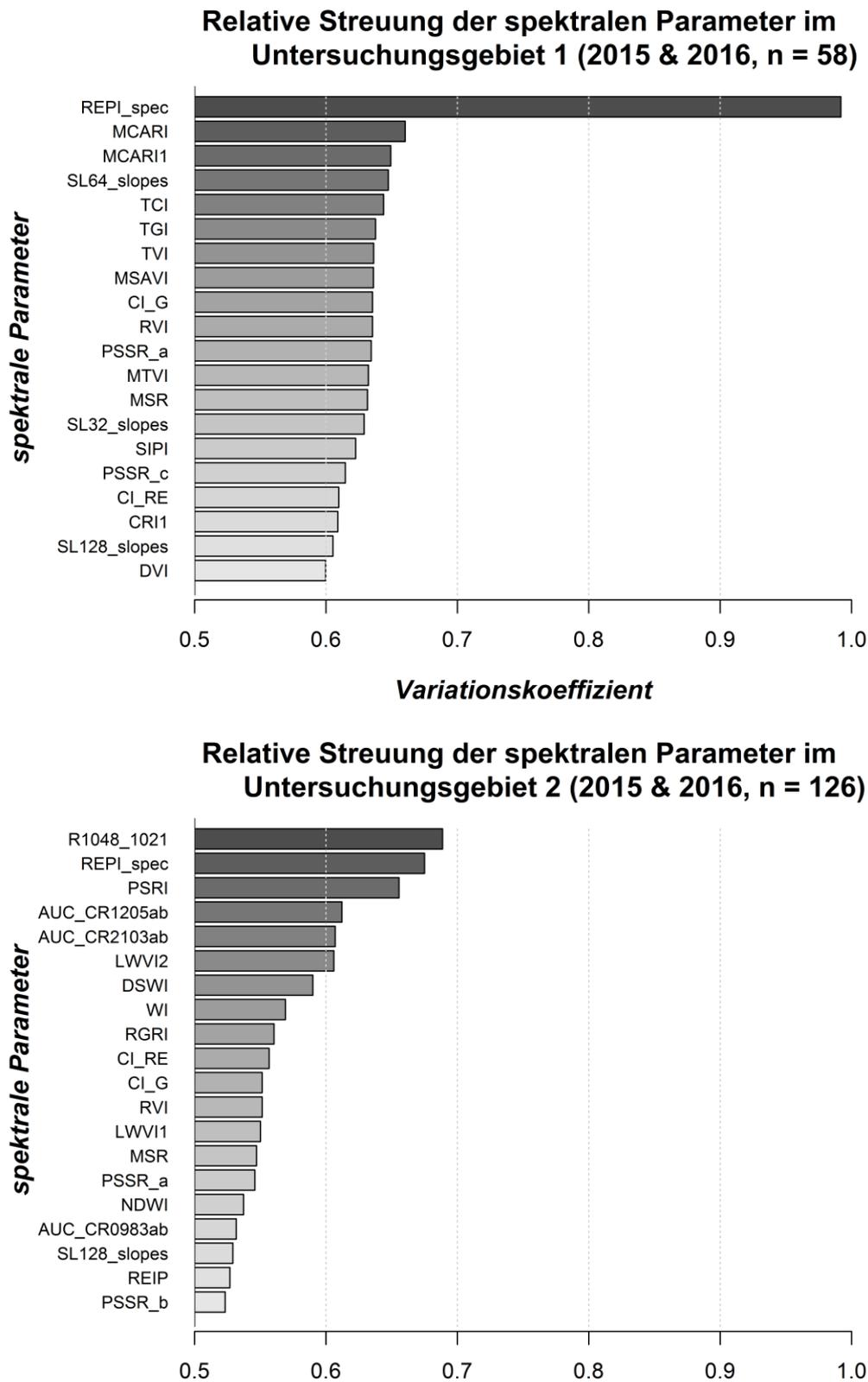


Abbildung A6-14: Rangliste der 20 Parameter mit der höchsten relativen Streuung im Untersuchungsgebiet 1 (oben) und im Untersuchungsgebiet 2 (unten), auf Grundlage der Spektrometermessungen und unabhängig von den Untersuchungsjahren

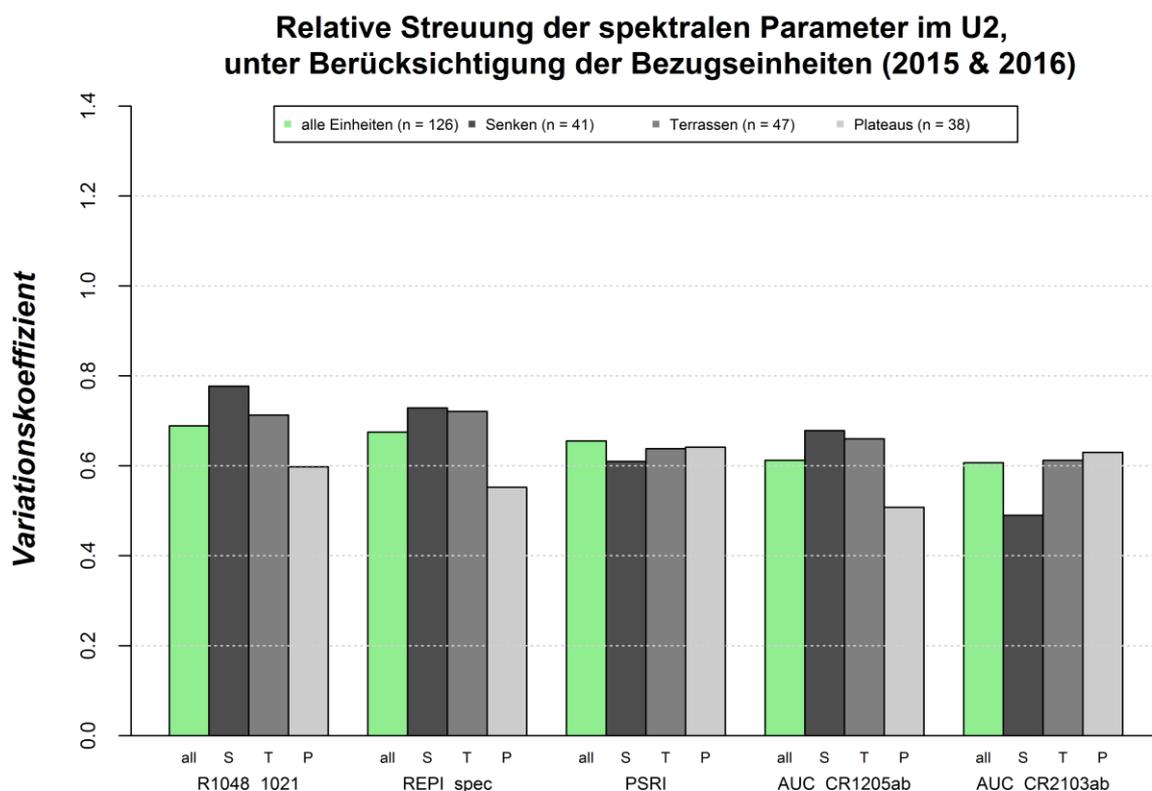
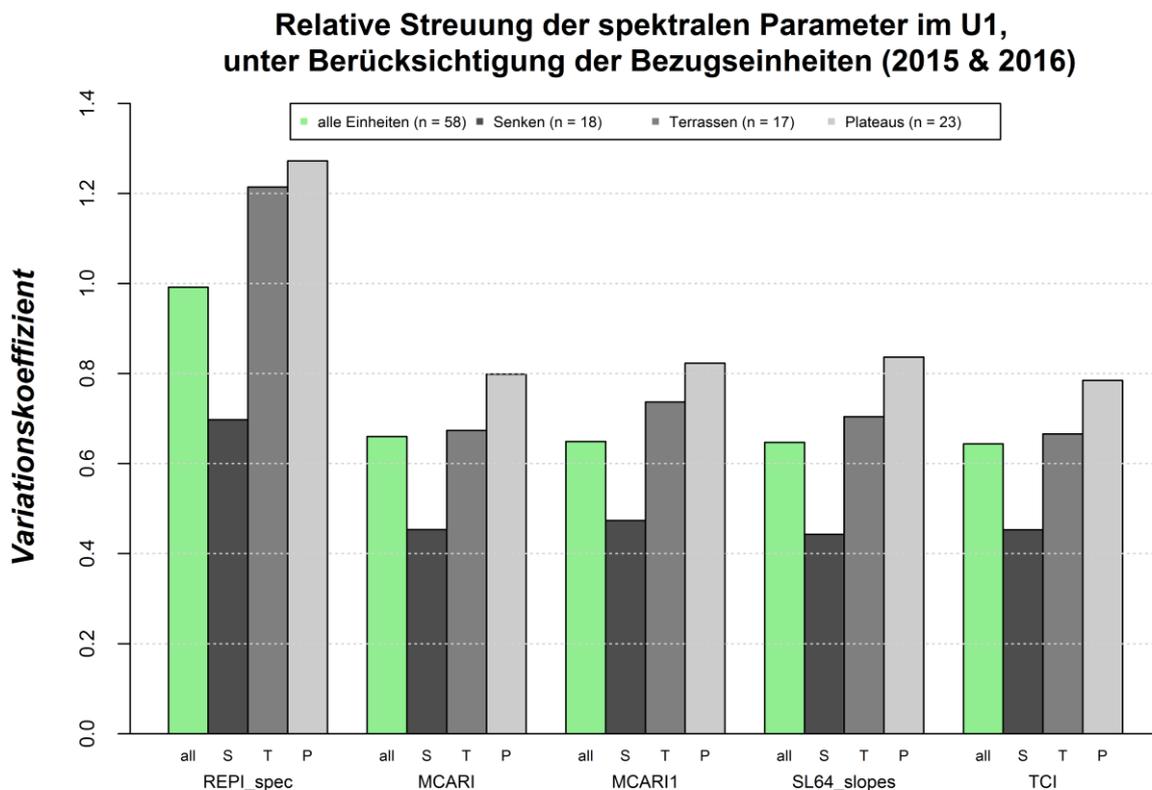


Abbildung A6-15: Darstellung der fünf Parameter mit der höchsten relativen Streuung unter Berücksichtigung der Feinmorphologie im Untersuchungsgebiet 1 (oben) und Untersuchungsgebiet 2 (unten), unabhängig von den Untersuchungsjahren

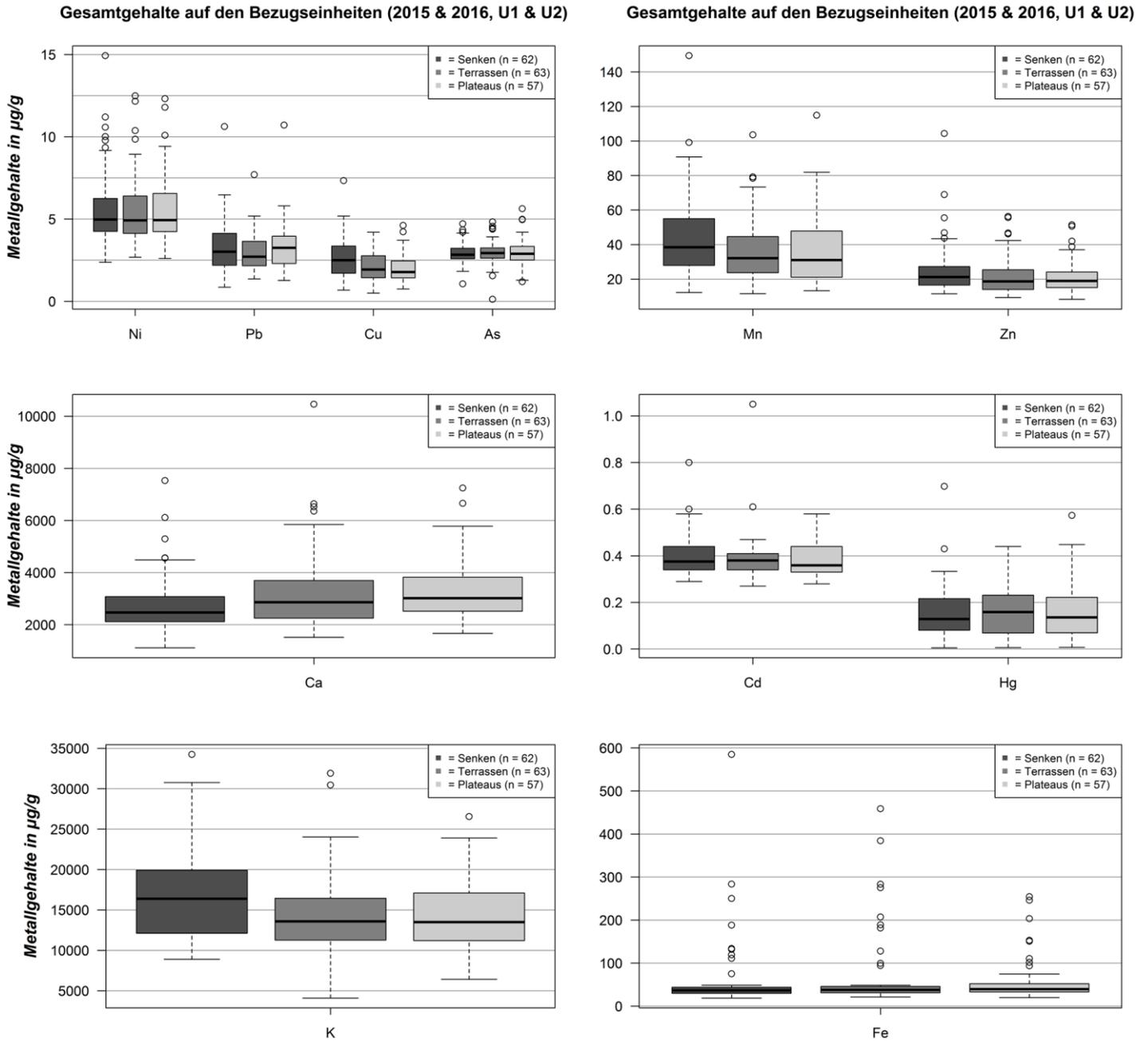


Abbildung A6-16: Gegenüberstellung der Gesamtgehalte in der Vegetation der Bezugseinheiten, unabhängig von den Untersuchungsgebieten und -jahren

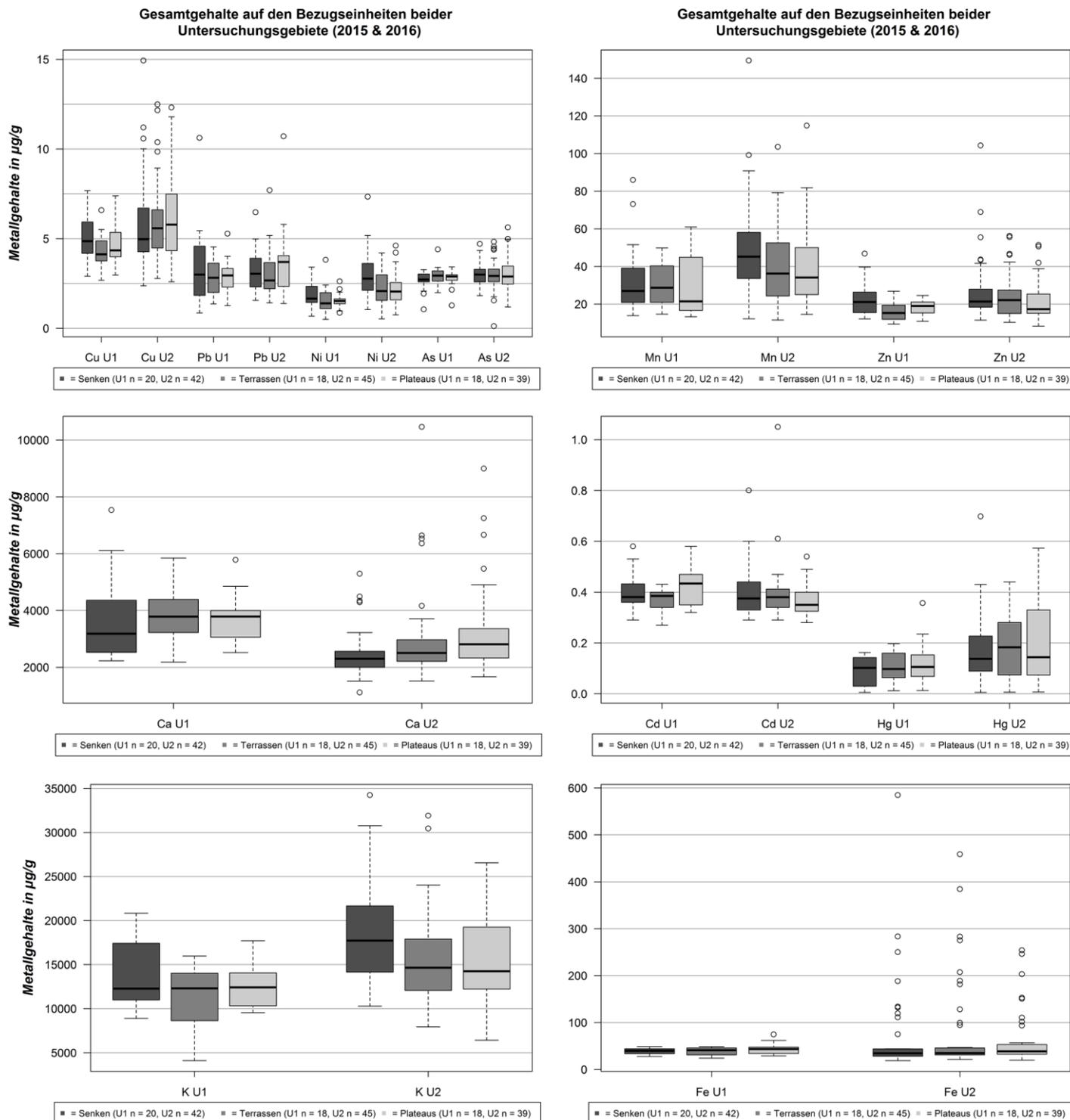


Abbildung A6-17: Gegenüberstellung der Gesamtgehalte in der Vegetation der Bezugseinheiten beider Untersuchungsgebiete, unabhängig von den Untersuchungsjahren

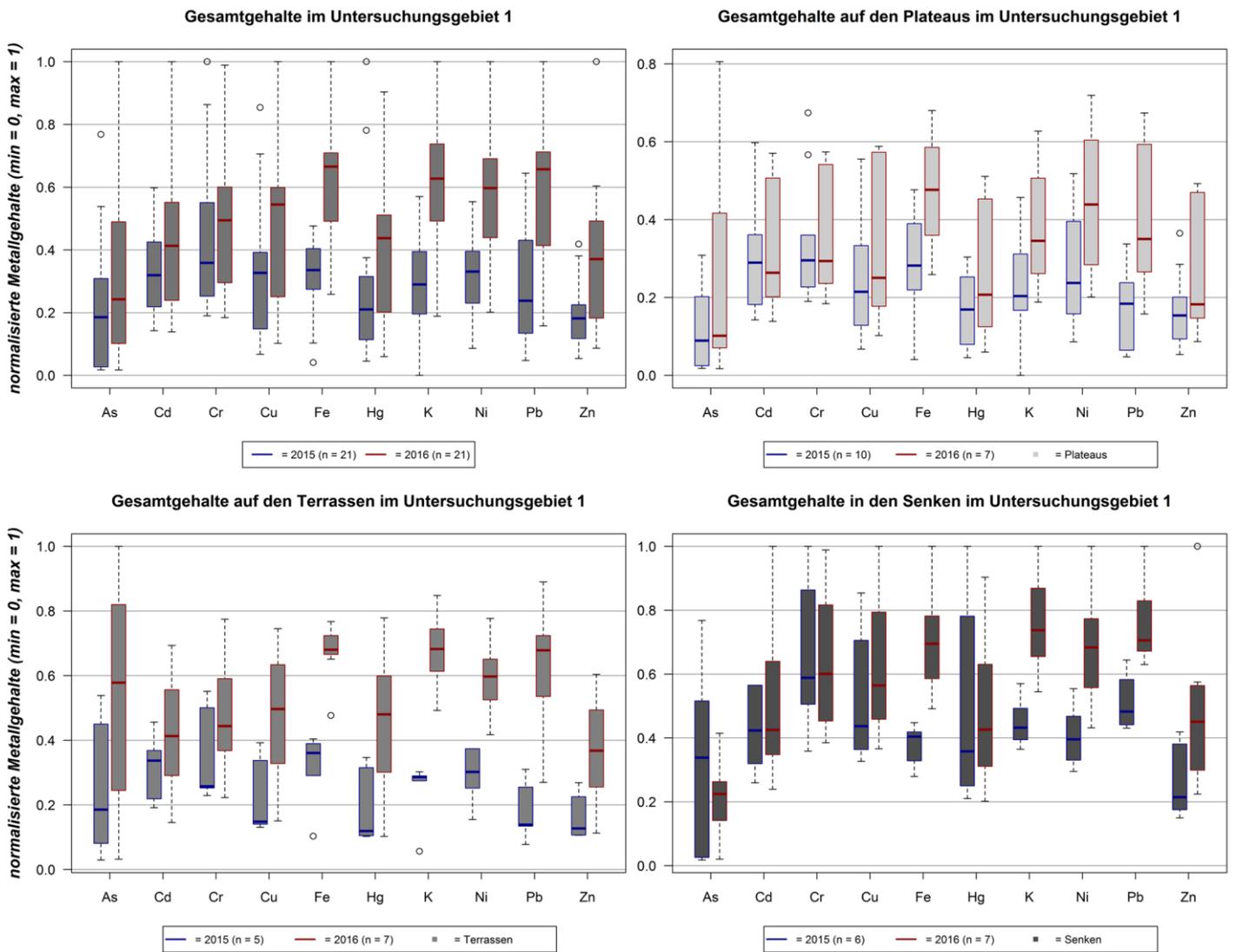


Abbildung A6-18: Gegenüberstellung der normalisierten Gesamtgehalte in den Böden der Bezugseinheiten in den Jahren 2015 und 2016 im Untersuchungsgebiet 1

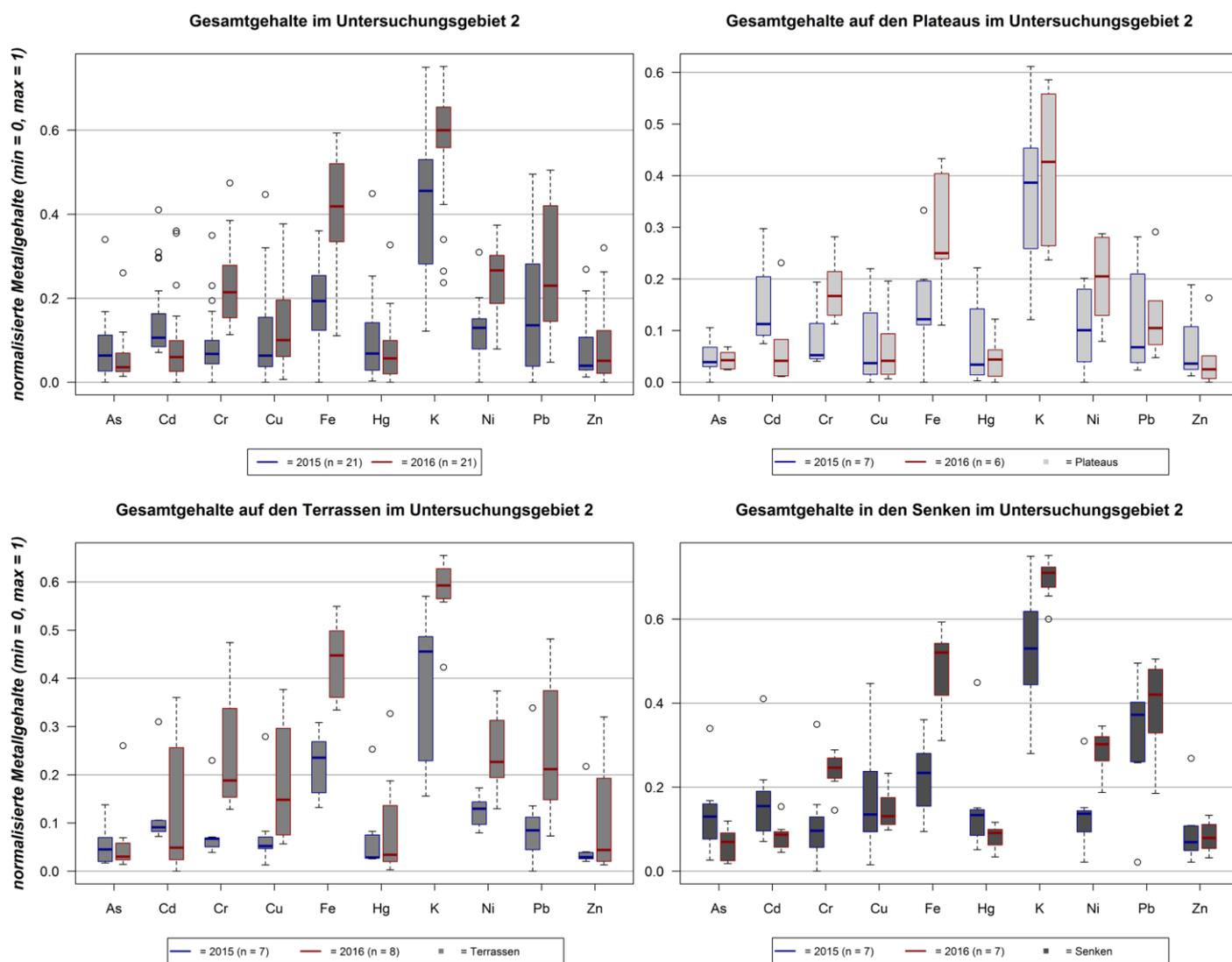


Abbildung A6-19: Gegenüberstellung der normalisierten Gesamtgehalte in den Böden der Bezugseinheiten in den Jahren 2015 und 2016 im Untersuchungsgebiet 2

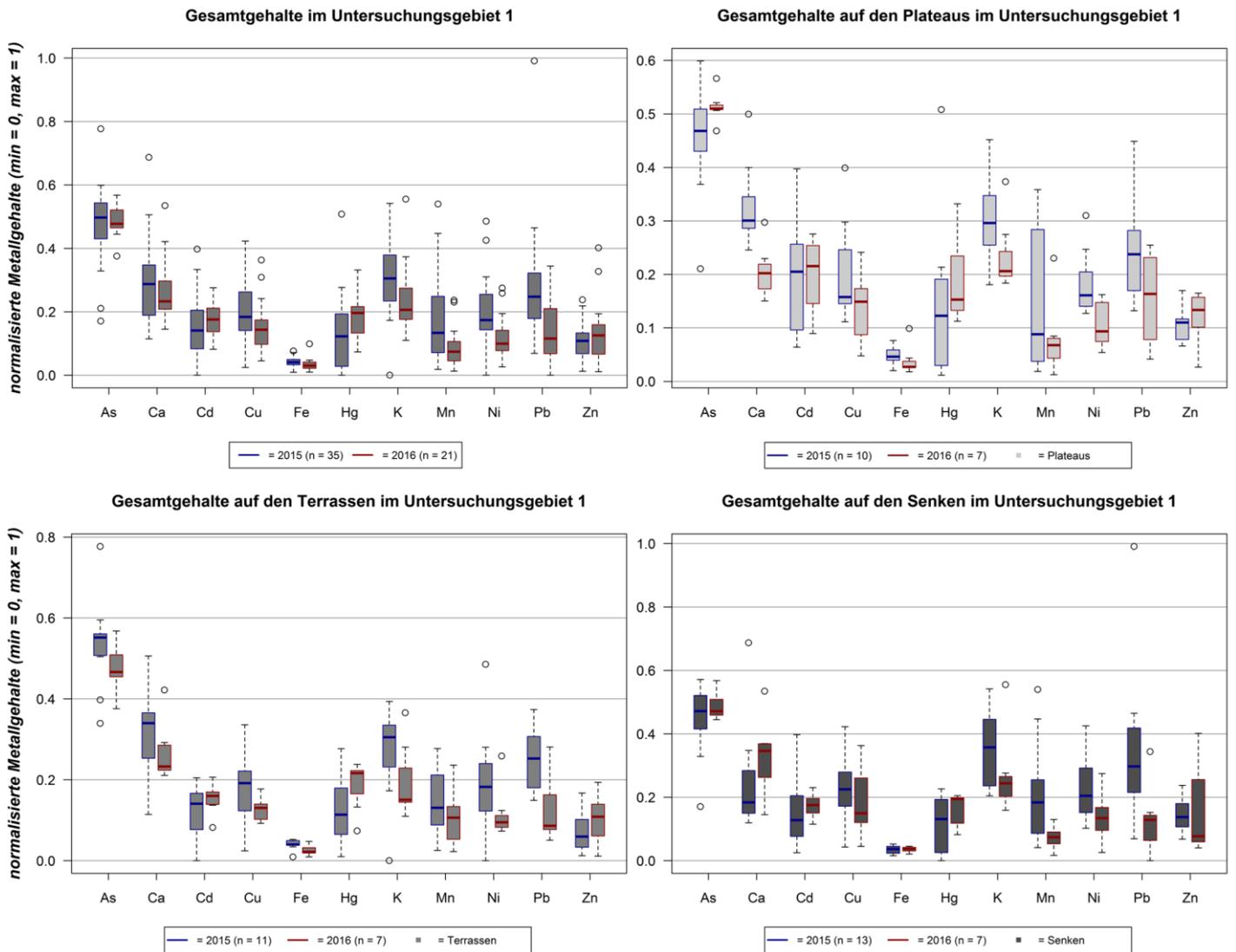


Abbildung A6-20: Gegenüberstellung der normalisierten Gesamtgehalte in der Vegetation der Bezugsseinheiten in den Jahren 2015 und 2016 im Untersuchungsgebiet 1

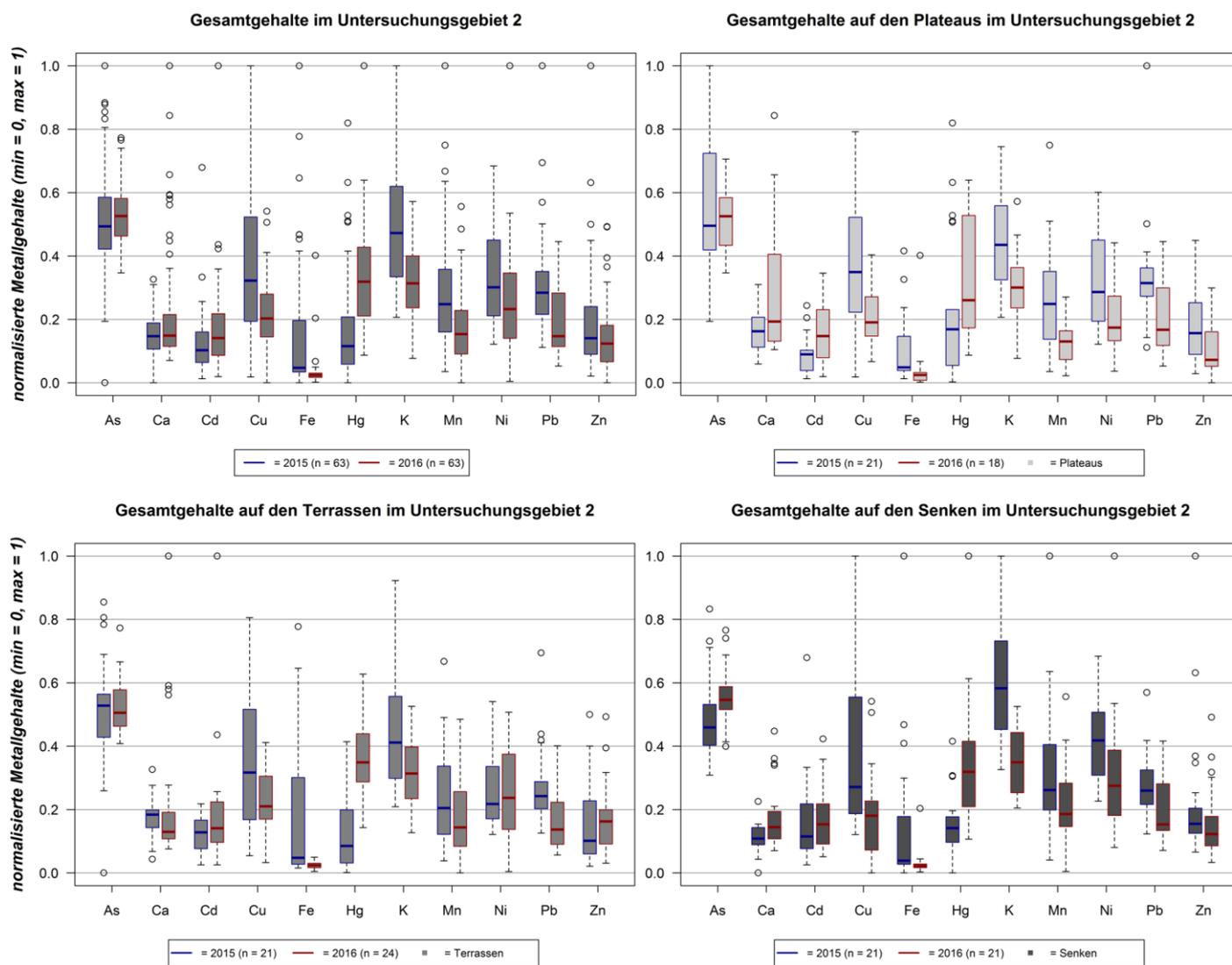


Abbildung A6-21: Gegenüberstellung der normalisierten Gesamtgehalte in der Vegetation der Bezugsseinheiten in den Jahren 2015 und 2016 im Untersuchungsgebiet 2

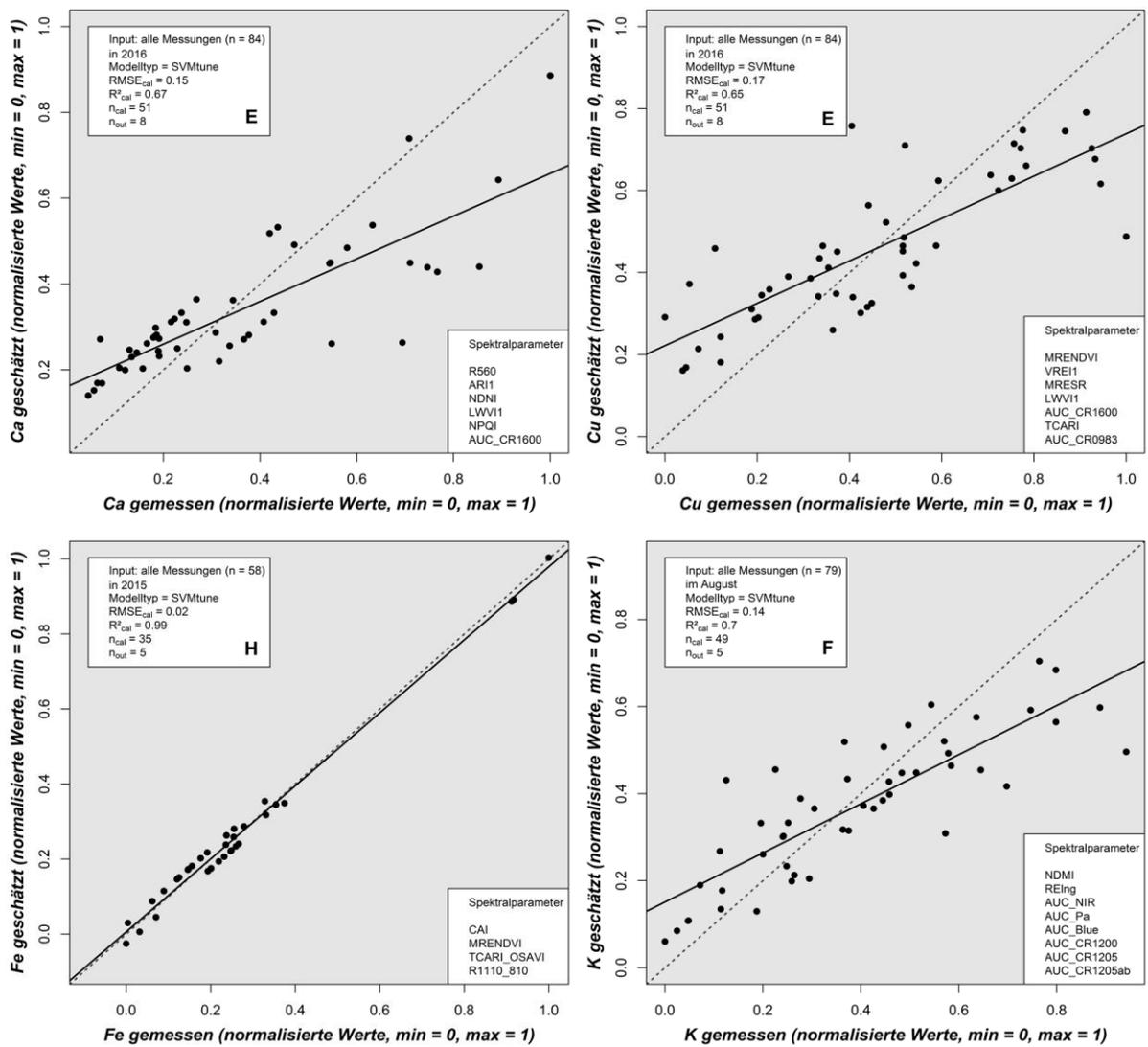


Abbildung A6-22: Optimale Kalibrierungsergebnisse für die Gesamtgehalte der Elemente Ca, Cu, Fe und K

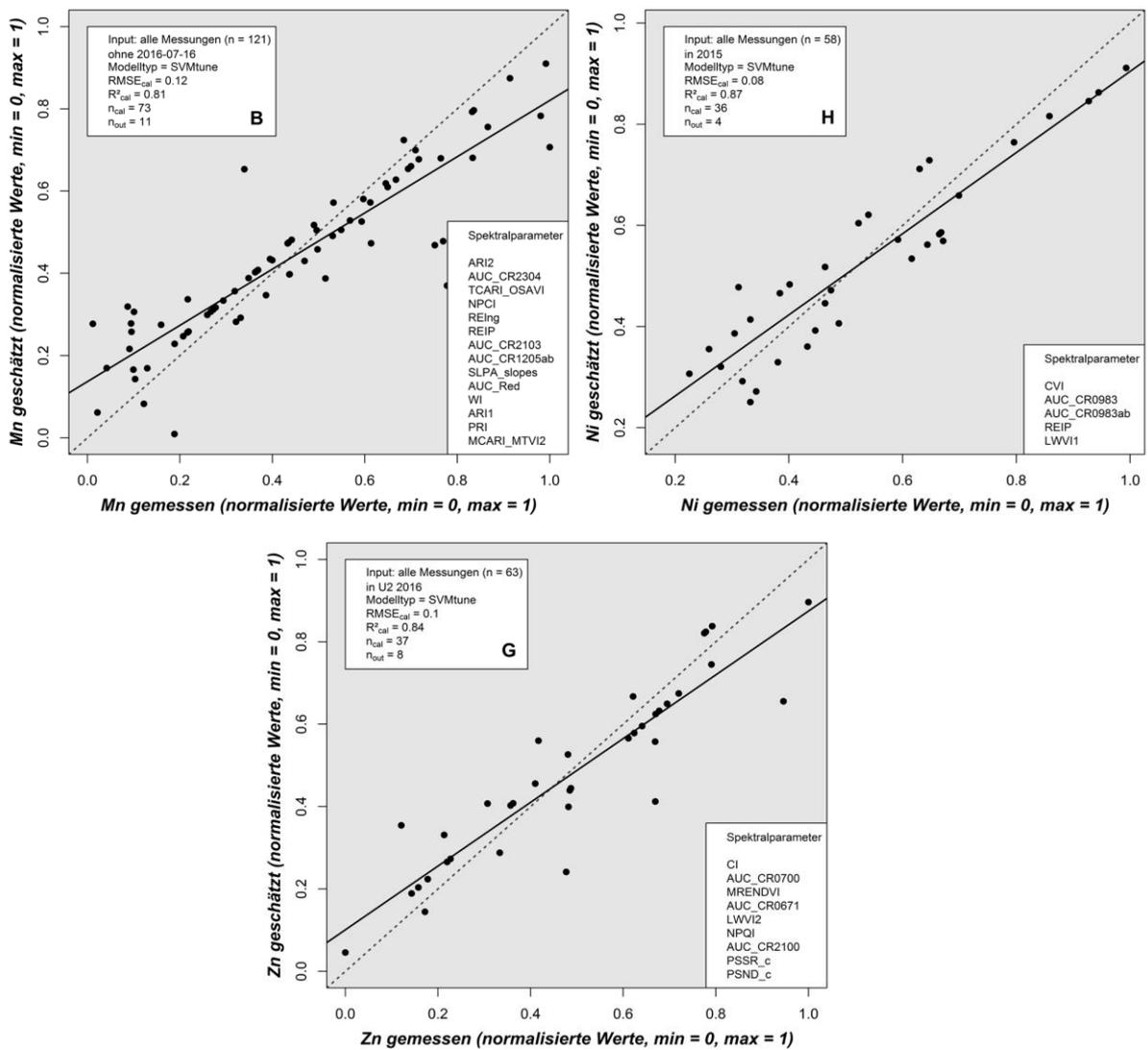


Abbildung A6-23: Optimale Kalibrierungsergebnisse für die Gesamtgehalte der Elemente Mn, Ni und Zn

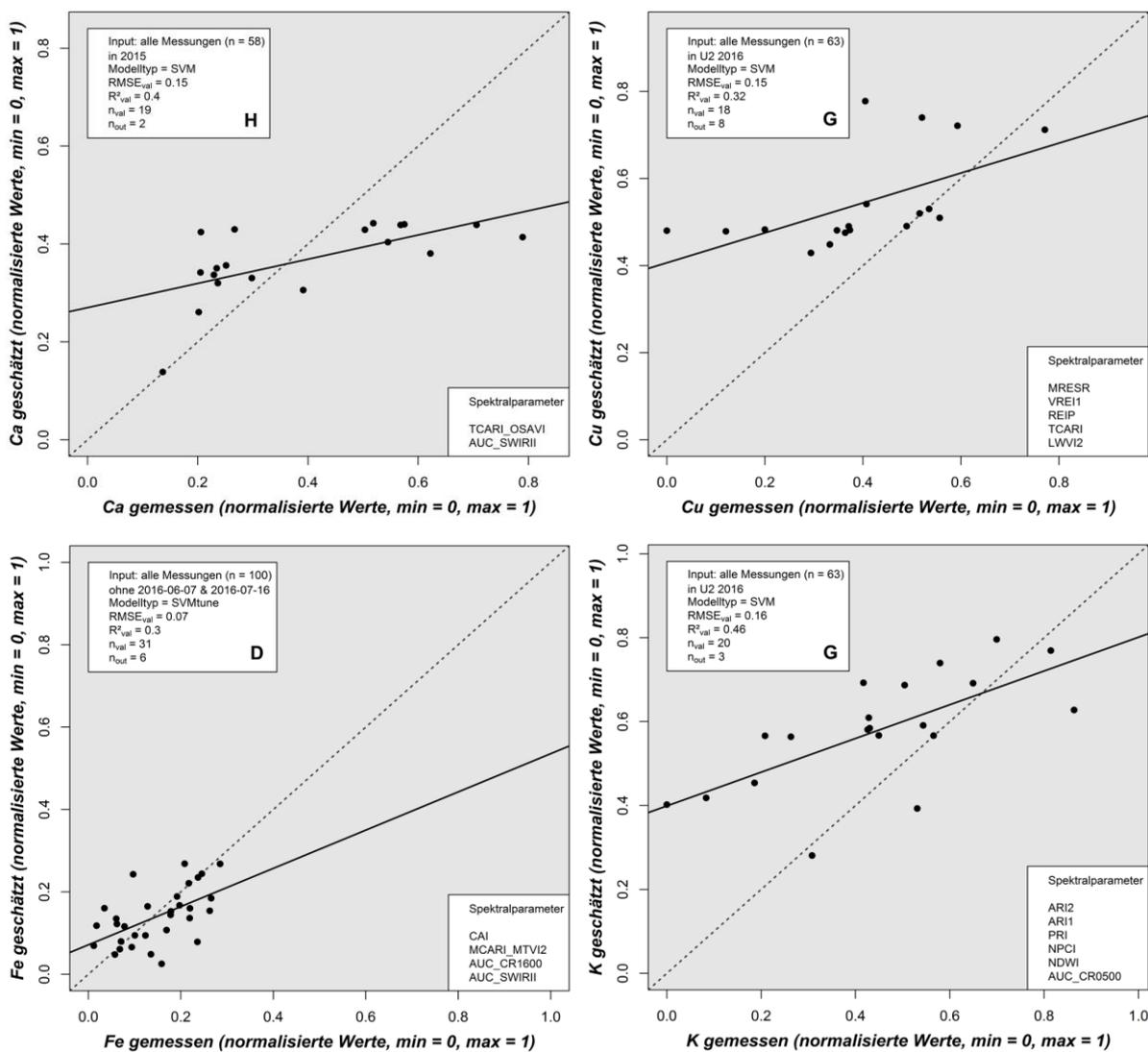


Abbildung A6-24: Optimale Validierungsergebnisse für die Gesamtgehalte der Elemente Ca, Cu, Fe und K

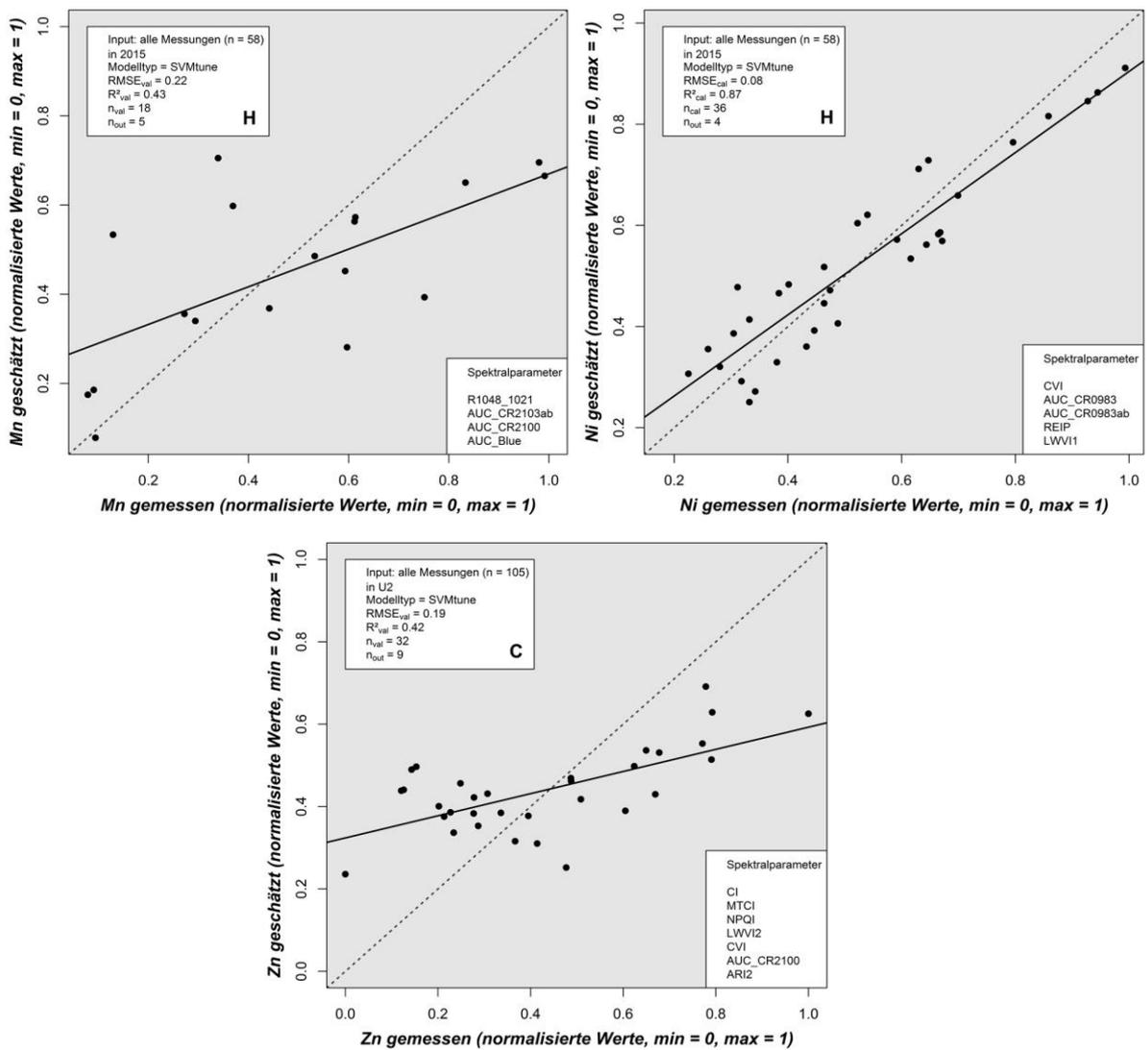


Abbildung A6-25: Optimale Validierungsergebnisse für die Gesamtgehalte der Elemente Mn, Ni und Zn

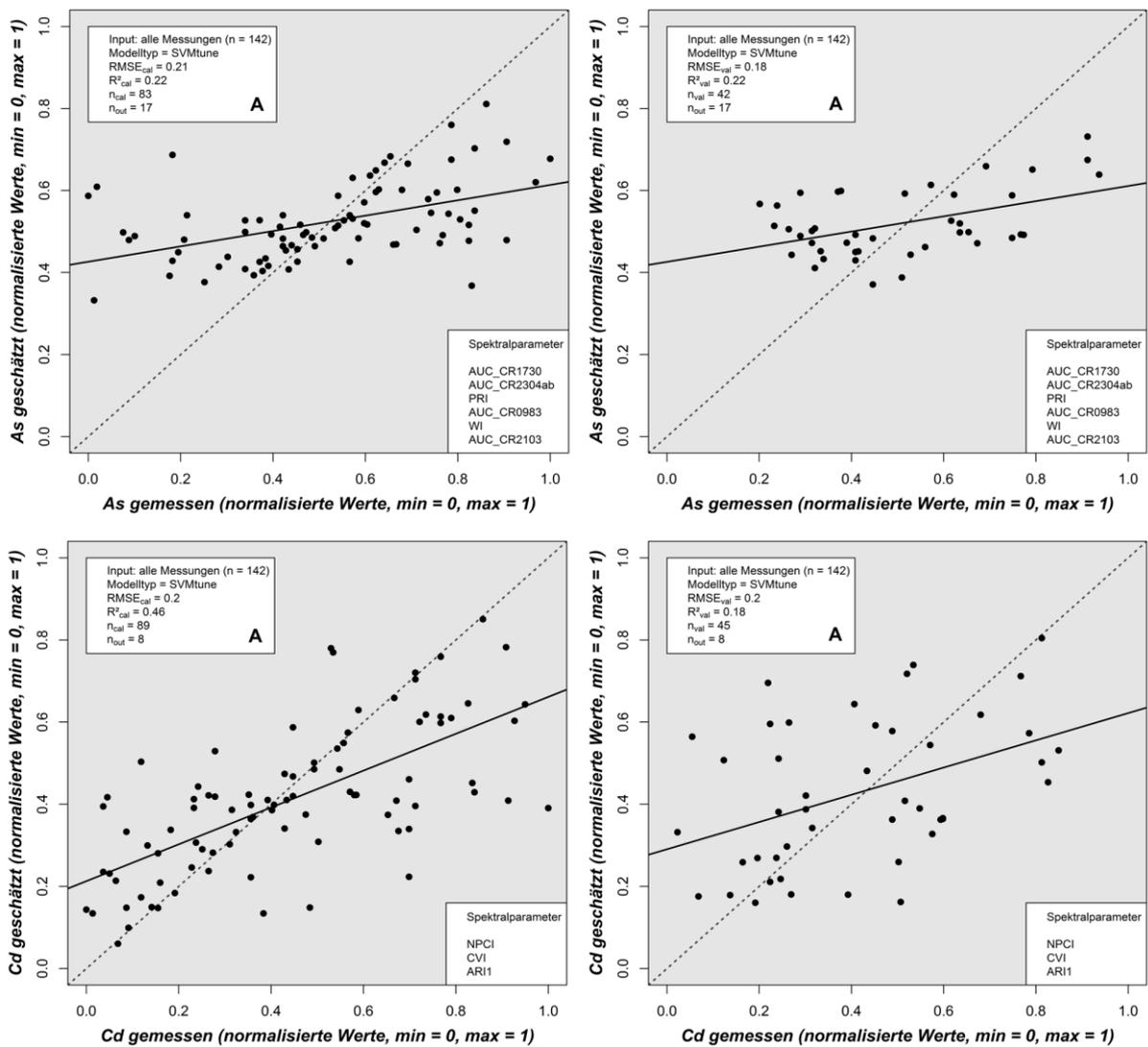


Abbildung A6-26: Optimale Kalibrierungs- und Validierungsergebnisse für die Gesamtgehalte der Elemente As und Cd, unter Verwendung aller Messungen als Modellinput (Setup A)

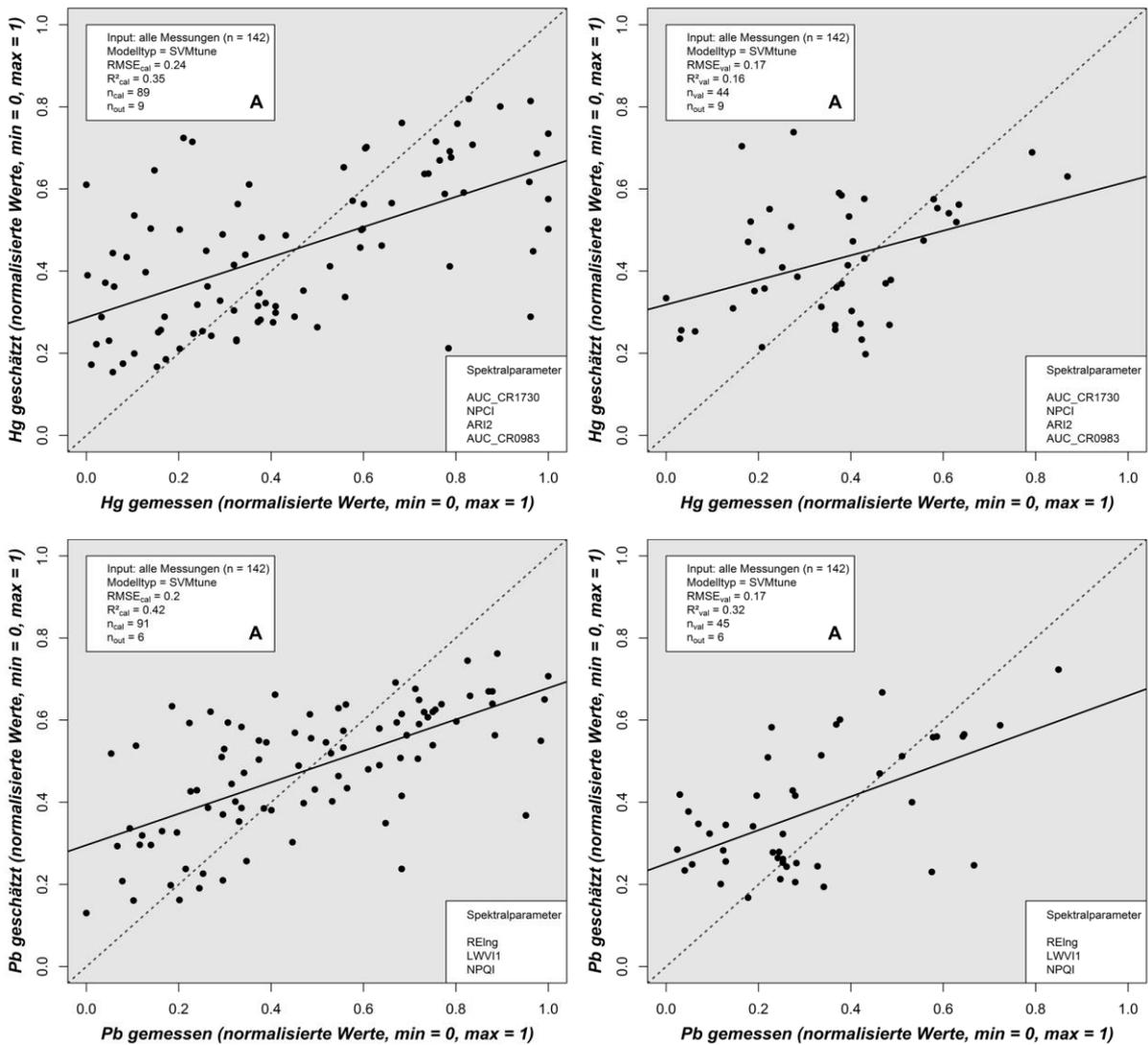


Abbildung A6-27: Optimale Kalibrierungs- und Validierungsergebnisse für die Gesamtgehalte der Elemente Hg und Pb, unter Verwendung aller Messungen als Modellinput (Setup A)

Tabelle A6-5: In den Modellsetup A und B berücksichtigte Spektralparameter zur Abschätzung der Gesamtgehalte in der Auenvegetation

Gesamtgehalt	Modellsetup A Spektralparameter	Modellsetup B Spektralparameter
As	AUC_CR1730, AUC_CR2304ab, PRI, AUC_CR0983, WI, AUC_CR2103	AUC_CR0983, AUC_CR0983ab, WI, NDWI, LWVI2
Ca	ARI2, CVI, TCARI_OSAVI, AUC_CR0983, NPQI, REIP, NDRE	ARI1, TGI, CVI, TCARI_OSAVI, AUC_CR2304, AUC_CR1600, MCARI_MTVI2, SL32_slopes, MTVI_OSAVI, AUC_CR2100, NPQI, NDRE
Cd	NPCI, CVI, ARI1	MCARI_MTVI2, CVI, NPCI, REIP, PRI, ARI1, AUC_CR1205ab
Cu	MRESR, MRENDVI, MTCI, CI, VREI1, CRI1, AUC_CR0983, AUC_Blue	CRI1, TGI, NDMI, AUC_Blue, NPQI
Fe	AUC_CR1600	AUC_CR1600
Hg	AUC_CR1730, NPCI, ARI2, AUC_CR0983	NPCI, AUC_CR0983, AUC_CR2304, ARI2
K	ARI1, ARI2, AUC_CR0950, AUC_CR1200, AUC_CR1205, R550, PRI, NPQI, R560, NPCI, AUC_CR2100, REIng	REIng, AUC_CR0950, ARI1
Mn	AUC_CR2304, ARI2, REIP, TCARI_OSAVI, AUC_CR1205ab, PRI, AUC_CR2103	ARI2, AUC_CR2304, TCA- RI_OSAVI, NPCI, REIng, REIP, AUC_CR2103, AUC_CR1205ab, SLPA_slopes, AUC_Red, WI, ARI1, PRI, MCARI_MTVI2
Ni	AUC_CR1205ab, NDWI, WI, AUC_CR0950, MCARI_MTVI2, AUC_CR2103, NPQI, LWVI1	AUC_CR1205ab, RVSI, SLPA_slopes, AUC_CR2304, NDNI, LCI, AUC_CR2304ab
Pb	REIng, LWVI1, NPQI	NPQI, REIng, LWVI1
Zn	MRENDVI, MRESR, MTCI, CI, AUC_CR0983, NPQI, MCARI, AUC_CR1730, WI, AUC_NIR, ARI2, CVI, RVSI	MCARI, AUC_CR0983, WI, NDWI, NPQI, CVI, ARI2

Tabelle A6-6: In den Modellsetup C und D berücksichtigte Spektralparameter zur Abschätzung der Gesamtgehalte in der Auenvegetation

Gesamtgehalt	Modellsetup C Spektralparameter	Modellsetup D Spektralparameter
As	AUC_CR2304ab, AUC_CR1730, PRI, AUC_CR2103, AUC_CR0983, MTVI_MCARI, TCI	CVI, ARI1, AUC_CR0983, AUC_CR0983ab, gNDVI
Ca	ARI2, NPQI	DSWI, TCARI_OSAVI, MCARI_MTVI2, LWVI2, AUC_CR2100
Cd	PRI, REIP, AUC_CR0983, MCARI_MTVI2, NPCI, gNDV, CVI, ARI2, ARI1	MCARI_MTVI2, CVI, NPCI, ARI1, AUC_CR1205ab, PRI, RDVI
Cu	CI, MTCI, MRENDVI, VREI1, AUC_Pa, CRI2, AUC_CR1730, AUC_CR0983	CRI1, TGI, AUC_Blue, AUC_CR0983, MSI
Fe	AUC_CR1600, CAI, AUC_CR2304	CAI, MCARI_MTVI2, AUC_CR1600, AUC_SWIRII
Hg	AUC_CR2304, AUC_CR1730, ARI2, NPCI, AUC_CR2304ab, VREI1	AUC_CR0983, AUC_CR0983ab, NDLI, CVI, AUC_Blue, VREI1, AUC_CR2103, NDRE, NPCI
K	ARI2, ARI1, NPCI, CRI2, PRI, AUC_CR0500, NDWI, NPQI, PSRI, LWVI2, NDRE, PSSR_c, NDVI510_870	REIng, AUC_CR0950, AUC_CR1200, NPQI
Mn	AUC_CR1205ab, CVI, TCARI_OSAVI, NPCI, REIP, LWVI1, PRI, ARI2	ARI2, AUC_CR2304, REIP, AUC_CR1205ab, AUC_CR2103, TCARI_OSAVI, MCARI_MTVI2
Ni	NPQI, AUC_CR1205ab, AUC_CR1200, LWVI1, NDNI, MCARI_MTVI2	AUC_CR1205ab, REIP, LWVI2, CAI, SLPA_slopes
Pb	LWVI,1 REIng, NPQI, AUC_CR2103ab, ARI2	NPQI, REIng, NPCI, GLI
Zn	CI, MTCI, NPQI, LWVI2, CVI, AUC_CR2100, ARI2	MCARI, AUC_CR1730, CVI, NPQI, WI

Tabelle A6-7: In den Modellsetup E und F berücksichtigte Spektralparameter zur Abschätzung der Gesamtgehalte in der Auenvegetation

Gesamtgehalt	Modellsetup E Spektralparameter	Modellsetup F Spektralparameter
As	AUC_CR2304ab, AUC_CR1730, PRI, WI, AUC_CR0983, MTVI_MCARI, MCARI_MTVI2	PRI, AUC_CR0983, AUC_CR0983ab, WI, MCARI
Ca	R560, ARI1, NDNI, LWVI1, NPQI, AUC_CR1600	NDNI, DSWI, TCARI_OSAVI
Cd	MTVI_MCARI, CVI, AUC_CR0500, gNDVI, PRI	MCARI_MTVI2, CVI, RDVI, AUC_CR2304
Cu	MRENDVI, VREI1, MRESR, LWVI1, AUC_CR1600, TCARI, AUC_CR0983	CRI1, AUC_Green, MSI, AUC_Blue
Fe	MTVI_MCARI, CVI, PRI	R660, NPQI, AUC_Blue, NDVI660_870, AUC_CR0500, SLALL_slopes
Hg	AUC_CR2304ab, ARI1, RGR, AUC_CR2304, PRI	AUC_CR0983, AUC_CR2103, AUC_CR1730, NPCI
K	PRI, ARI1, ARI2, NDWI	NDMI, REIng, AUC_NIR, AUC_Pa, AUC_Blue, AUC_CR1200, AUC_CR1205, AUC_CR1205ab
Mn	AUC_CR1730, PRI, NDWI, AUC_CR0500, AUC_CR2103, AUC_CR0983	AUC_CR2304, ARI2, LCI, REIP, SLPA_slopes, AUC_CR2103, CVI, REIng, AUC_Green, AUC_CR1205ab, R1048_1021
Ni	PRI, NPQI, AUC_CR2103	AUC_CR1205ab, MTVI_OSAVI, CAI, LCI, NDRE, SLPA_slopes
Pb	R1048_1021, AUC_CR1205ab, MTVI_MCARI	NPQI, VREI2, NPCI, AUC_CR0983ab, TCARI, EVI, SL64_slopes, MCARI1, AUC_CR2103ab
Zn	MTCI, CI, AUC_CR0700, AUC_CR0671, PSSR_b, AUC_CR1730, ARI2, PSSR_c, PSND_c	AUC_SWIRII, AUC_CR1730, ARI2, MCARI

Tabelle A6-8: In den Modellsetup G und H berücksichtigte Spektralparameter zur Abschätzung der Gesamtgehalte in der Auenvegetation

Gesamtgehalt	Modellsetup G Spektralparameter	Modellsetup H Spektralparameter
As	AUC_CR2304ab, AUC_CR2304, PRI, AUC_CR1600, AUC_CR0983, MTVI_MCARI	NDRE, CVI, PRI, ARI1
Ca	NPQI, AUC_blue	TCARI_OSAVI, AUC_SWIRII
Cd	PRI, CVI, MTVI_MCARI, LWVI1, ARI2	ARI2, REIP, ARI1, NPCI
Cu	MRESR, VREI1, REIP, TCARI, LWVI2	AUC_CR0983, MCARI_MTVI2, AUC_CR1600, PRI
Fe	PRI, MTVI_MCARI, CVI, ARI2	CAI, MRENDVI, TCARI_OSAVI, R1110_810
Hg	AUC_CR2304ab, AUC_CR2304, CAI, PRI	NDLI, VREI1, AUC_CR0983
K	ARI2, ARI1, PRI, NPCI, NDWI, AUC_CR0500	ARI2, ARI1, MTVI_OSAVI
Mn	AUC_CR1730, NPQI	R1048_1021, AUC_CR2103ab, AUC_CR2100, AUC_Blue
Ni	NPQI, AUC_CR2103	CVI, AUC_CR0983, AUC_CR0983ab, REIP, LWVI1
Pb	LWVI1, R1048_1021	AUC_CR0983, MTCI, PRI, NPCI, CAI, R448, GLI, MRESR, CI
Zn	CI, AUC_CR0700, MRENDVI, AUC_CR0671, LWVI2, NPQI, AUC_CR2100, PSSR_c, PSND_c	RGR, CRI1, WI, AUC_CR2304, ARI2, CVI, NPQI

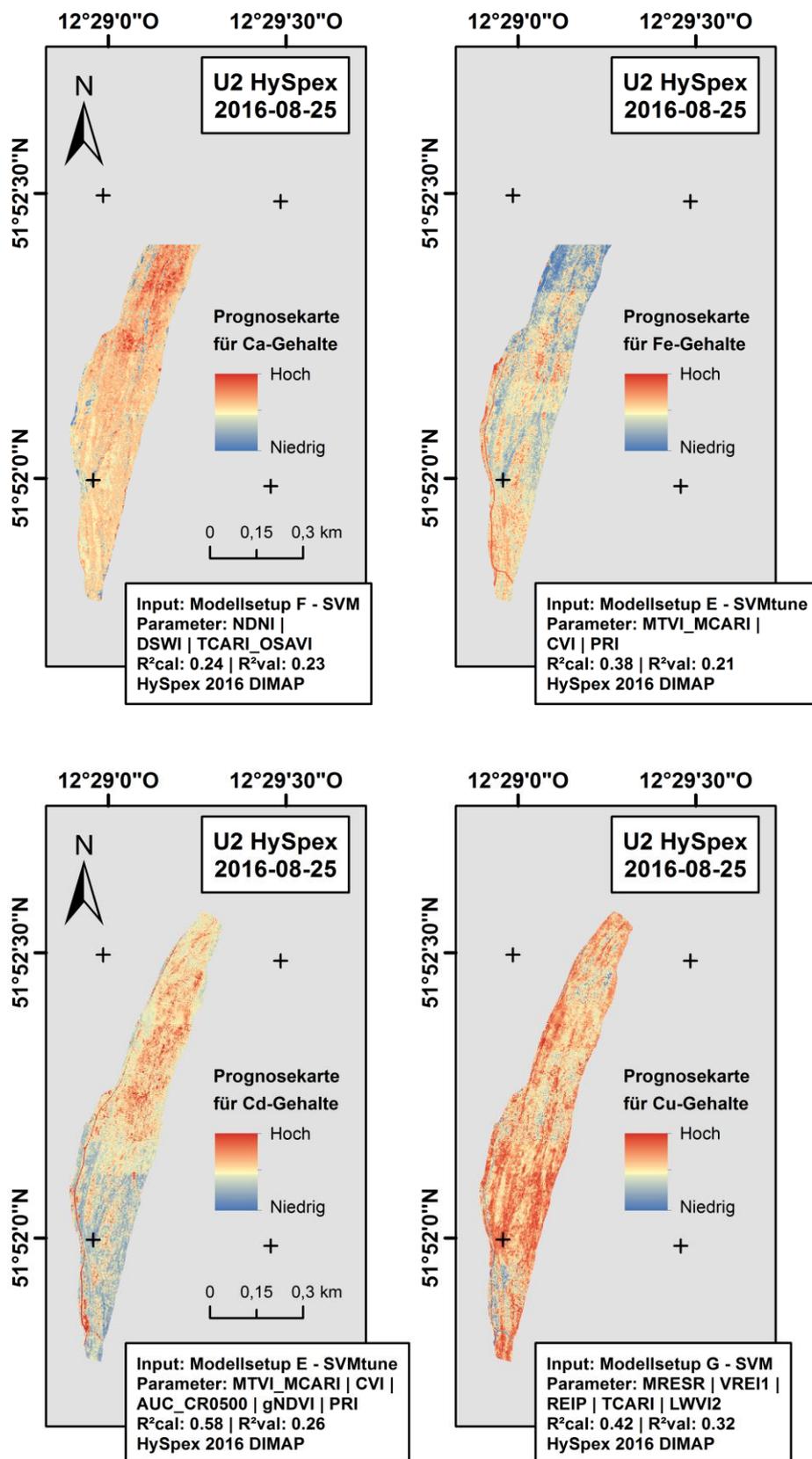


Abbildung A6-28: Prognosekarten für die Gesamtgehalte der Elemente Ca und Fe (oben) sowie Cd und Cu (unten) im Untersuchungsgebiet 2 für das Jahr 2016

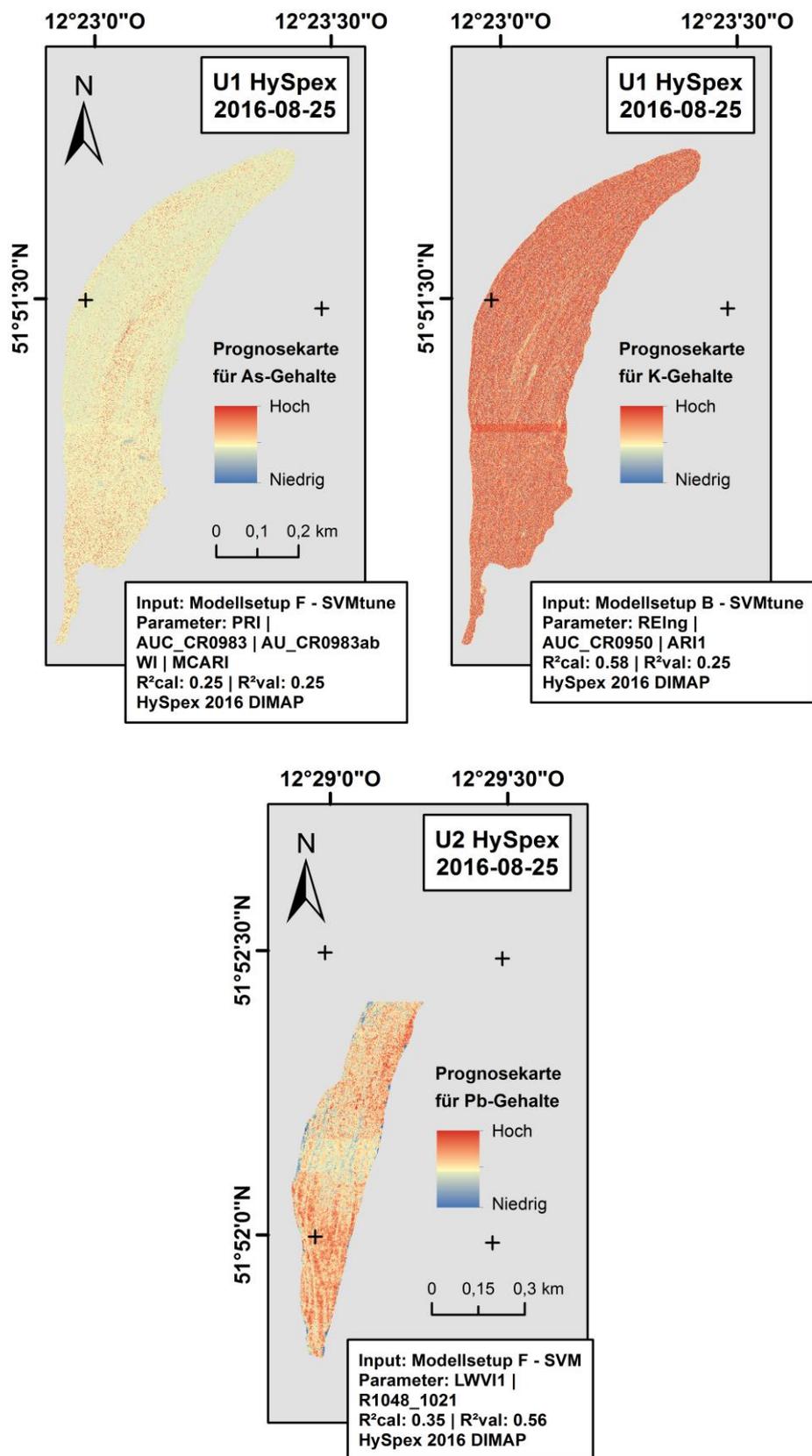


Abbildung A6-29: Prognosekarten für die Gesamtgehalte der Elemente As und K (oben) im Untersuchungsgebiet 1 sowie Pb(unten) im Untersuchungsgebiet 2 für das Jahr 2016

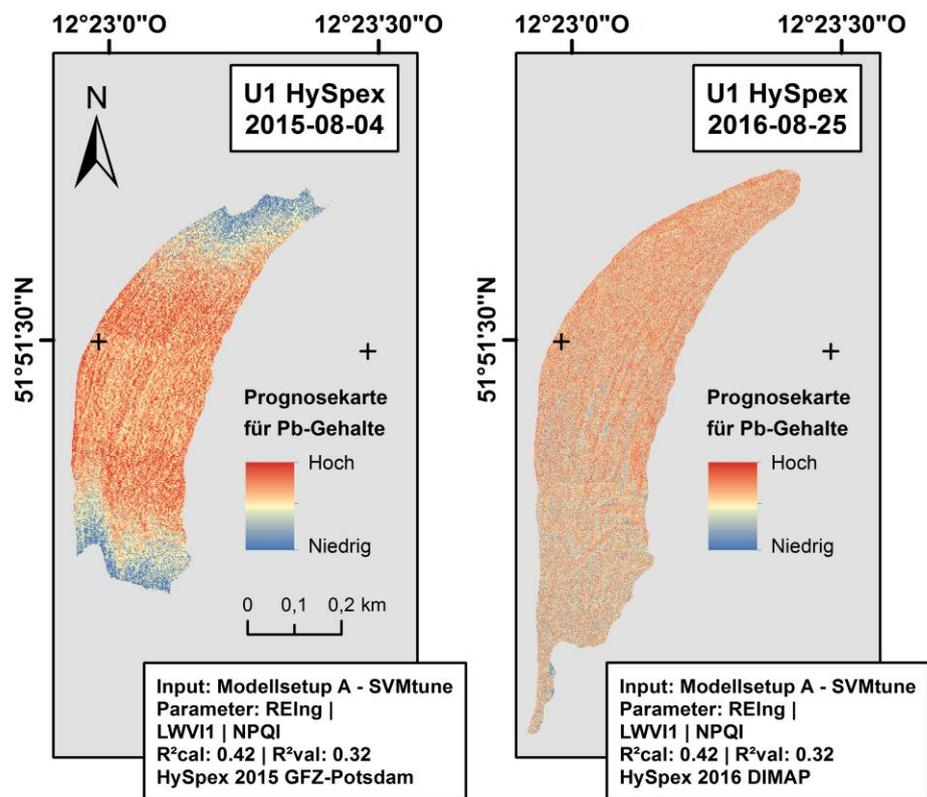


Abbildung A6-30: Prognosekarten für die Gesamtgehalte des Elementes Pb im Untersuchungsgebiet 1 für die Jahre 2015 und 2016

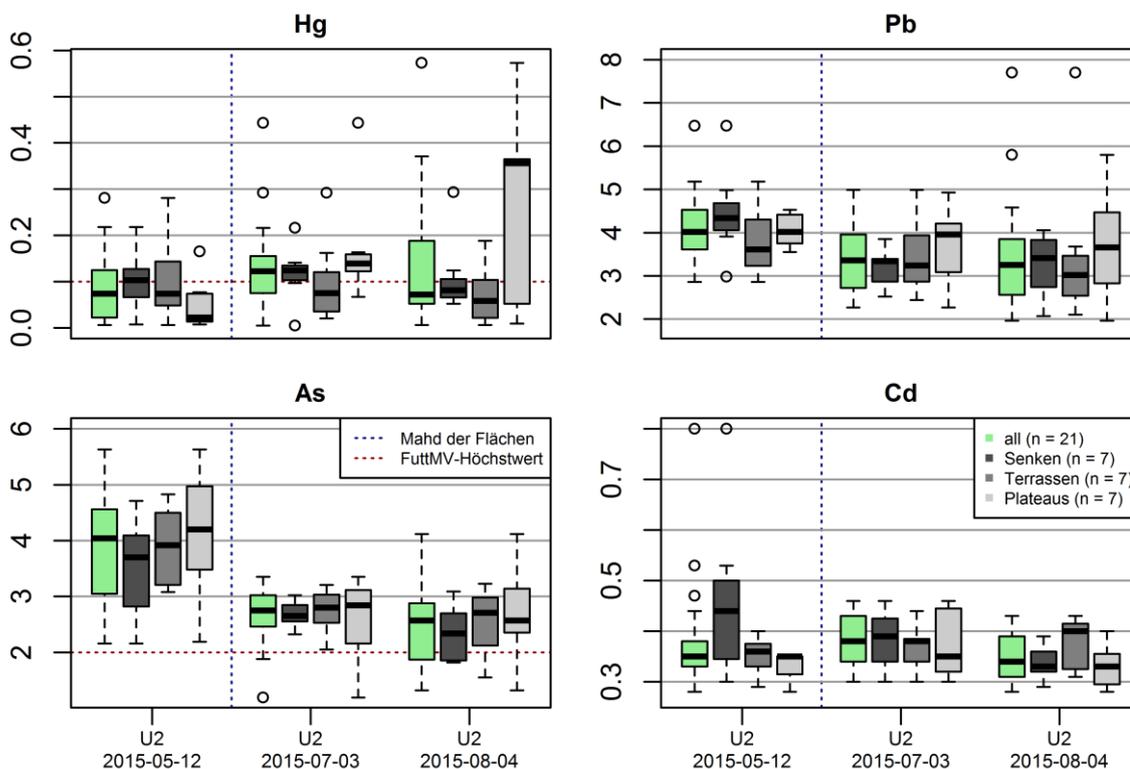


Abbildung A7-1: Veränderung der Pflanzengehalte ($\mu\text{g/g}$) ausgewählter Schwermetalle im Untersuchungsgebiet 2 für das Jahr 2015, unter Berücksichtigung der Mahd

Lebenslauf

Name

Frank Riedel



Adresse

Ludwig-Wucherer Straße 14
06108 Halle (Saale)

Geburtsdatum

07.11.1988

Geburtsort

Sonneberg

Familienstand

ledig, keine Kinder

E-Mail

frank.riedel@geo.uni-halle.de

Berufliche Praxis

seit 01/2015

Wissenschaftlicher Mitarbeiter am Lehrstuhl für Fernerkundung und thematische Kartografie im EnviMetal-Projekt, MLU Halle

- Beurteilung des Kontaminationsgrades von Flussauen durch Schwermetalle im Bereich der Mittleren Elbe
- Quantifizierung von Metallgehalten in Böden und Vegetation mittels spektrometrischer Reflexionsmessungen
- Multiskalare Analyse der Pflanzenvitalität

05/2014 - 12/2014

Wissenschaftliche Hilfskraft im EO-LDAS-App Projekt, FSU Jena

- wöchentliche Datenerfassung durch Feldmessungen um Gebesee
- Datenaufbereitung und Wartung der Messinstrumente

06/2013 - 08/2013

Tutor für das Modul GEO 112 - Geoinformatik B, FSU Jena

- Vermittlung theoretischer Grundlagen zur Luftbildinterpretation
- stereoskopischen Auswertung von Luftbildern und digitale Bildverarbeitung mit ERDAS IMAGINE

&
06/2012 - 08/2012

03/2013 - 05/2013

Praktikant und Teilnehmer am Data Fusion Contest 2013, FSU Jena

- Modellierung des städtischen Mikroklimas mit ENVI-met
- Parametrisierung eines numerischen 3D Mikroklimamodells

03/2013	Tutor eines Blockpraktikums für GIS, FSU Jena <ul style="list-style-type: none">• Vermittlung theoretischer Kenntnisse in GIS und Kartographie• vektor- und rasterbasierte Berechnungen und räumliche Analysen
03/2011 - 04/2011	Praktikant im FRA-SAR 2010 Projekt, FSU Jena <ul style="list-style-type: none">• Prozessierung von TerraSAR-X Daten für eine globale Waldinventur im Auftrag der FAO• Datenakquisition und Datenbankmanagement• Erstellung von Kartenprojekten mit ArcGIS und eCognition
Bildungsweg seit 01/2015	Promotionsstudent, Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg <ul style="list-style-type: none">• Schwerpunkt: Fernerkundung, Geoinformatik• Abschlussarbeit: Der Einsatz hyperspektraler Fernerkundungsdaten zur Analyse schwermetallbedingter Boden- und Pflanzenbelastungen in einem Auenökosystem• Abschluss: Doktor der Naturwissenschaften
10/2011 - 09/2014	Masterstudium Geoinformatik, Friedrich-Schiller-Universität Jena <ul style="list-style-type: none">• Schwerpunkt: Fernerkundung• Abschlussarbeit: Semiautomatische Ableitung von Baumkronenobjekten aus hochauflösenden Multispektraldaten (1,0)• Abschluss: Master of Science Geoinformatik (Ø 1,2)
10/2008 - 09/2011	Bachelorstudium Geographie, Friedrich-Schiller-Universität Jena <ul style="list-style-type: none">• Schwerpunkt: Fernerkundung, Geoinformatik, Bodenkunde• Abschlussarbeit: Ableitung des Blattflächenindex (LAI) und vergleichende Analyse mit grob aufgelösten FE-Produkten (1,1)• Abschluss: Bachelor of Science Geographie (Ø 1,9)
08/1999 - 05/2008	Hochschulreife, Hermann-Pistor-Gymnasium Sonneberg <ul style="list-style-type: none">• Hauptfächer: Deutsch, Geographie• Abschluss: Allgemeine Hochschulreife (Ø 1,7)

Technische Fähigkeiten

Digitale Bildverarbeitung

eCognition, ENVI, ERDAS, Geomatica

SAR und LiDAR Software

Gamma, Nest, PolSARpro, MapReady

GIS und Datenbankmanagement

ArcGIS, GRASS GIS, QGIS, ENVI-met

Programmierung und Skriptierung

R, IDL, HTML, PHP

Publikationen

RIEDEL, F., M. DENK, I. MÜLLER, N. BARTH & C. GLÄßER (2018): Prediction of soil parameters using the spectral range between 350 and 15000 nm: A case study based on the Permanent Soil Monitoring Program in Saxony, Germany. - *Geoderma*, 315, 188-198.

GÖTZE, C., M. DENK, F. RIEDEL & C. GLÄßER (2017): Interlaboratory Comparison of Spectrometric Laboratory Measurements of a Chlorite Rock Sample. - *PFG, Journal of Photogrammetry, Remote Sensing and Geoinformation Science*, 85, 5, 307-316.

BERGER, C., F. RIEDEL, J. ROSENRETER, E. STEIN, S. HESE & C. SCHMULLIUS (2014): Fusion of airborne hyperspectral and LiDAR remote sensing data to model the thermal characteristics of environments. In: **HELBICH, M., J. ARSANJANI & M. LEITNER (Eds.):** Computational Approaches for Urban Environments, Geotechnologies and the Environment. - *Heidelberg, Germany: Springer*.

Vorträge

RIEDEL, F., M. DENK, I. MÜLLER & C. GLÄßER (2017): Prediction of Metal Contents in Soils Using the Spectral Range Between 350 and 15 000 nm. - *10th EARSeL SIG Imaging Spectroscopy Workshop, 19.-21. April, Zurich*.

RIEDEL, F. C. GLÄßER, C. GÖTZE & A. LAUSCH (2017): EnviMetal - Vegetationsstress als Bio-Indikator von Bodenkontamination in Flussauen. - *Nationales Forum für Fernerkundung und Copernicus 2017, 14.-16. März, Berlin*.

Sprachkenntnisse

Deutsch (Muttersprache)

Englisch (kompetente Sprachverwendung)

Latein (kleines Latinum)

Führerschein

Klasse (B)

Halle, den 26.02.2018

Eidesstattliche Erklärung / *Declaration under Oath*

Ich erkläre an Eides statt, dass ich die Arbeit selbstständig und ohne fremde Hilfe verfasst, keine anderen als die von mir angegebenen Quellen und Hilfsmittel benutzt und die den benutzten Werken wörtlich oder inhaltlich entnommenen Stellen als solche kenntlich gemacht habe.

I declare under penalty of perjury that this thesis is my own work entirely and has been written without any help from other people. I used only the sources mentioned and included all the citations correctly both in word or content.

Datum / *Date*

Unterschrift des Antragstellers / *Signature of the applicant*