Identyfikacja grup organizmów dominujących w zakwitach fitoplanktonu w wodach Morza Bałtyckiego metodami niekontaktowymi

Identification of the dominant phytoplankton groups in the algal blooms in the waters of the Baltic Sea using remote sensing methods

Μονικά Ψοźνιακ

Promotor: Prof. dr hab. Adam Krężel

Promotor pomocniczy: Dr Mirosław Darecki



Zakład Oceanografii Fizycznej Wydział Oceanografii i Geografii UNIWERSYTET GDAŃSKI

Gdynia, 2014

(wersja zawierająca poprawki edytorskie zaproponowane przez recenzentów)

Praca współfinansowana w ramach:

• projektu POIG.01.01.02-22-011/09 "Satelitarna kontrola środowiska Morza Bałtyckiego (SatBałtyk)"





UNIA EUROPEJSKA EUROPEJSKI FUNDUSZ ROZWOJU REGIONALNEGO



projektu systemowego "InnoDoktorant – stypendia dla doktorantów, V edycja".
 Projekt jest współfinansowany przez Unię Europejską z Europejskiego Funduszu Społecznego (Program Operacyjny Kapitał Ludzki, Priorytet VIII, Działanie 8.2, Poddziałanie 8.2.2: "Regionalne Strategie Innowacji").









• programu Visby (*Visby Programme Scholarships for PhD Studies and Postdoctoral Reasearch*) fundowanego przez Instytut Szwedzki

Podziękowania

Praca badawcza najczęściej jest pracą zespołową, także ta praca nie powstałaby bez pomocy i wsparcia wielu osób.

Chciałabym podziękować moim promotorom, Prof. Adamowi Krężelowi oraz Dr Mirosławowi Dareckiemu, za wiele lat wspólnej pracy, oraz za godziny poświęcone dyskusji i konsultacji.

Składam też podziękowania Dr Susanne Kratzer za serdeczne przyjęcie mnie w swojej grupie na Uniwersytecie Sztokholmskim oraz Dr Susanne E. Craig z Uniwersytetu Dalhousie za owocną współpracę.

Chciałabym również podziękować moim koleżankom i kolegom z Zakładu Oceanografii Fizycznej za stworzenie miłej atmosfery w miejscu pracy. Szczególne podziękowania chciałabym skierować do Kasi Bradtke, za wiele cennych wskazówek merytorycznych, a także za bycie wspaniałym pedagogiem; Janeczce Repińskiej, za ciepło jakie tworzy w naszym zakładzie; Bożence Wojtasiewicz, za wiele godzin wspólnie spędzonych na morzu i pomoc w pomiarach laboratoryjnych; a także Agnieszce Herman i Kubie Zdroikowi, za nieustanną chęć do pomocy.

Dziękuję Asi Stoń-Egiert i Monice Sobiechowskiej-Sasim za pomoc w określeniu stężeń barwników, oraz koleżankom z Pracowni Ekologii Biochemicznej Mikroorganizmów za pomoc w pracach laboratoryjnych.

Dziękuję moim przyjaciołom i rodzinie za ochoczą pomoc. Szczególne podziękowania za pomoc edytorską i dobre słowo należą się Maciejowi Soji, Szałwii Karasińskiej i mojej mamie Ani Musiał.

Streszczenie

W rozprawie wykorzystano metody teledetekcji optycznej do bezkontaktowej oceny zjawiska często określanego mianem zakwitów, tj. występowania fitoplanktonu w zwiększonej biomasie, w Morzu Bałtyckim. W pracy skupiono się na letnich zakwitach cyjanobakterii, z uwagi na powszechne zainteresowanie możliwością monitoringu tego zjawiska, spowodowane ich negatywnym wpływem na wiele aspektów gospodarki morskiej oraz warunków życia w strefie przybrzeżnej.

Zbadane zostały charakterystyki widm reflektancji zdalnej dla wód Zatoki Gdańskiej zmierzonych za pomocą nowoczesnych mierników optycznych z wysoką rozdzielczością spektralną. Uzyskane wyniki wykorzystano do opracowania pierwszych lokalnych algorytmów umożliwiających bezkontaktową ocenę biomasy cyjanobakterii w wodach bałtyckich, poprzez estymację stężenia fikocyjaniny. Algorytmy te dostosowane zostały do danych uzyskiwanych przez radiometry satelitarne typu MERIS i OLCI, co umożliwiło ich wykorzystanie do badań w skali makroregionalnej. Opracowane one zostały dwiema metodami, przy wykorzystaniu funkcji analitycznych oraz Analizy Głównych Składowych, z wysokimi współczynnikami determinacji uzyskanymi w drodze walidacji krzyżowej (odpowiednio $R^2 = 0.73$ i $R^2 = 0.89$).

W dalszej części, wykorzystując wyniki ze zmodyfikowanego na potrzeby pracy modelu Hydrolight-Ecolight 5.2, pokazano możliwość identyfikacji gatunku dominującego w wodzie z kontrolowanym składem gatunkowym glonów na podstawie charakterystyk spektralnych reflektancji zdalnej. Do opracowania i kalibracji wskazanego modelu wykorzystano zmierzone laboratoryjnie unikatowe widma reflektancji zdalnej charakterystyczne dla trzech gatunków fitoplanktonu z grupy cyjanobakterii, często pojawiających się w letnich zakwitach w wodach Morza Bałtyckiego: *Nodularia spumigena, Aphanizomenon flos-aquae* i *Anabaena* sp. Na podstawie analizy kształtów uzyskanych widm reflektancji zdalnej wnioskowano, że w przypadku badanych gatunków otrzymane widma najbardziej różnią się w zakresie spektralnym pomiędzy 560 a 660 nm i wykorzystanie indeksu podobieństwa w tym zakresie pozwala wyróżnić gatunek dominujący pod warunkiem posiadania widma referencyjnego.

Abstract

In this dissertation, optical remote sensing methods are used for the assessment of algal blooms, i.e., the phenomenon of increased biomass of phytoplankton, in the Baltic Sea. The main focus is put on the summer algal blooms, as they are potentially harmful to the marine ecosystems and the economy of the Baltic Sea region, and therefore their monitoring is of large interest.

Remote sensing reflectance spectra measured using modern, hyperspectral optical sensors in the waters of the Gulf of Gdansk have been studied. The obtained results have been used to develop the first local algorithms for remote estimation of the cyanobacterial biomass, from phycocyanin concentration. The algorithms have also been adapted to be used with data acquired with spaceborne sensors, such as MERIS and OLCI, making large-scale mapping possible. The algorithms have been developed based on two different methods: using analytical functions and Pricipal Component Analysis, with cross-validation R^2 of 0.73 and 0.89, respectively.

In the latter part of the thesis, it has been shown using the model Hydrolight-Ecolight 5.2 that it is possible to identify the dominant cyanobacterial species in a controlled environment using the characteristics of the remote sensing reflectance spectra of each species. For the development and calibration of the proposed model, unique remote sensing reflectance spectra measured in lab for the three most common species in the Baltic Sea have been used: *Nodularia spumigena, Aphanizomenon flos-aquae*, and *Anabaena* sp. On the basis of the shape and height of the modelled remote sensing reflectance spectra, it is concluded that largest dissimilarity can be observed between 560 and 660 nm and the use of the similarity index makes the determination of the dominant cyanobacterial species possible, provided that a reference spectrum is available.

Spis treści

Li	sta s	krótów	7	vii					
\mathbf{Li}	sta s	ymboli	i ·	viii					
1	Wp	rowadz	zenie	1					
2	Definicje badanych wielkości optycznych i ich wzajemne relacje								
	2.1	Wielko	ości fizyczne stosowane w optycznych badaniach bezkontaktowych .	5					
	2.2	Rzeczy	wiste właściwości optyczne wody morskiej	7					
		2.2.1	Współczynnik absorpcji światła przez wodę morską	7					
		2.2.2	Współczynnik rozpraszania światła przez wodę morską	12					
		2.2.3	Funkcja fazowa rozpraszania światła	15					
	2.3	Wpływ	v rzeczywistych właściwości optycznych na widmo reflektancji zdalnej	18					
3	Mat	teriały	i metody	21					
	3.1	Obsza	r badań	21					
	3.2	Apara	tura badawcza	23					
	3.3	Pomia	ry właściwości optycznych w morzu	24					
		3.3.1	Miejsce i czas pobierania próbek	24					
		3.3.2	Pomiary radiometryczne	26					
		3.3.3	Pomiary biooptyczne	29					
	3.4	Labora	atoryjne pomiary reflektancji monokultur fitoplanktonu morskiego .	30					
		3.4.1	Charakterystyka badanych kultur oraz warunki hodowli	31					
		3.4.2	Stanowisko pomiarowe	32					
		3.4.3	Wykonane pomiary laboratoryjne	34					
	3.5	Model	Hydrolight-Ecolight wersja 5.2	35					
		3.5.1	Model "Case2 IOPs" \ldots \ldots	36					
		3.5.2	Model "Measured IOPs"	39					
	0.0	3.5.3	Określenie warunków brzegowych	39					
	3.0	Metod	y statystyczne wykorzystane w pracy	40					
		3.0.1 2.6.9	Matamataana ania Angling Clémenth Chiladanach	41					
		3.6.2	Matematyczny opis Analizy Głównych Składowych	43					
		3.0.3	Indeks podobienstwa	45					
4	Ana	aliza re	eflektancji zdalnej charakterystycznej dla Zatoki Gdańskiej						
	pod	kątem	i jej wykorzystania do zdalnego wyznaczania stężenia fikocy-	16					
	Jani	ny Charai	litomatula polloliton cii adale ci ancienzon ci zu modo ch 7-t-l-: Od-:	40					
	4.1	Unara.	kterystyka renektancji zdainej zmierzonej w wodach Zatoki Gdanskiej	41					

	4.2	Wyzna	aczenie stężenia fikocyjaniny za pomocą funkcji analitycznych w ob- Zatoki Gdańskiej	58
		4 2 1	Ocena istniejacych algorytmów	. 58 58
		422	Optymalizacia postaci funkcyjnych algorytmów do zdalnego wy-	. 00
		1.2.2	znaczenia steżenia fikocyjaniny w wodach Zatoki Gdańskiej	. 60
		4.2.3	Walidacja opracowanych i istniejacych algorytmów	. 69
		4.2.4	Analiza czułości algorytmu na zmiany stężenia chl-a	. 74
		4.2.5	Praktyczne zastosowanie wyznaczonego algorytmu przy wykorzy-	
			staniu zdjęć satelitarnych z miernika MERIS	. 75
	4.3	Wyzna	aczenie stężenia fikocyjaniny metodą PCA w obszarze Zatoki Gdań-	
		skiej		. 76
		4.3.1	Adaptacja metody PCA do danych satelitarnych	. 83
5	Ider	ntyfika	cja gatunku dominującego w mieszaninie glonów metoda	mi
	bezl	kontak	towymi	86
	5.1	Chara	kterystyki widm reflektancji zdalnej wybranych gatunków fitoplank-	
	•	tonu	· · · · · · · · · · · · · · · · · · ·	. 87
	5.2	Model	owanie widm reflektancji zdalnej przy pomocy modelu Hydrolight-	
		Ecolig	nt HE52	. 90
		0.2.1	modelu	. 90
		5.2.2	Funkcja fazowa wykorzystana w modelu	. 94
		5.2.3	Weryfikacja poprawności modelu	. 98
		5.2.4	Symulacje widm reflektancji zdalnej dla badanych gatunków fito- planktonu	. 101
		5.2.5	Zmiany w kształcie widm modelowanej reflektancji zdalnej dla	-
			kontrolowanych mieszanin fitoplanktonu	. 105
	5.3	Możliv	vość rozróżnienia składnika dominującego przy wykorzystaniu in-	
		deksu	podobieństwa	. 107
6	Pod	sumov	vanie i wnioski końcowe	113
Bi	bliog	rafia		116
$\mathbf{S}_{\mathbf{F}}$	ois ry	sunkó	w	130
Sr	nie to	blic		134
Ъŀ	15 ta			104
Za	ıłączı	niki		135

Lista skrótów

Skrót:	Opis:
AOP	Apparent Optical Properties
CDOM	Chromophoric/Colored Dissolved Organic Matter
DESAMBEM	DEvelopment of a SAtellite Method for Baltic Ecosystem Monitoring
DIN	Dissolved Inorganic Nitrogen
DIP	Dissolved Inorganic Phosphorus
ENVISAT	ENVIronmental SATellite
\mathbf{FF}	funkcja fazowa Fourniera-Foranda
HE52	Hydrolight-Ecolight 5.2
IOP	Inherent Optical Properties
MERIS	MEdium Resolution Imaging Spectroradiometer
NAP	Non-Algal Particles
OSCs	Optically Significant Constituents
OLCI	Ocean and Land Color Instrument
PC	Phycocyanin Concentration
PCA	Principal Component Analysis
POC	Particulate Organic Carbon
RAMSES	RAdiation Measurement Sensor with Enhanced Spectral resolution
RMSE	Root Mean Square Error
RTE	Radiative Transfer Equation
SD	Secchi Depth
SI	Similarity Index
SPM	Suspended Particle Matter

Lista symboli

Symbol:	Opis:	Jednostka:
a	Całkowity objętościowy współczynnik ab-	$[m^{-1}]$
	sorpcji światła przez wodę morską i jej optycz-	
	nie znaczące składniki	
a^*	Specyficzny współczynnik absorpcji światła	
	względem stężenia chl- $a\&~[{\rm m^2mg^{-1}}]$	
$a_{ m CDOM}$	Współczynnik absorpcji światła przez orga-	$[m^{-1}]$
	niczne substancje rozpuszczone (CDOM)	
$a_{ m fito}$	Współczynnik absorpcji światła przez barw-	$[\mathrm{m}^{-1}]$
	niki fitoplanktonu	
$a_{ m NAP}$	Współczynnik absorpcji światła przez cząstki	$[m^{-1}]$
	niebędące fitoplanktonem (NAP)	
$a_{ m w}$	Współczynnik absorpcji światła przez czystą	$[m^{-1}]$
	wodę	
b	Całkowity objętościowy współczynnik rozpra-	$[\mathrm{m}^{-1}]$
	szania światła przez wodę morską i jej optycz-	
	nie znaczące składniki	
b^*	Specyficzny współczynnik rozpraszania świa-	$\left[\mathrm{m}^2\mathrm{mg}^{-1}\right]$
	tła względem stężenia chl- a	
$b_{ m b}$	$\operatorname{Współczynnik}$ rozpraszania światła wstecz	$[m^{-1}]$
b_{fito}	Współczynnik rozpraszania światła przez	$[m^{-1}]$
	cząstki fitoplanktonu	
$b_{ m p}$	Współczynnik rozpraszania światła przez	$[\mathrm{m}^{-1}]$
	cząstki zawieszone	

b_{w}	Współczynnik rozpraszania światła przez czy-	$[m^{-1}]$
	sta wode	
В	Stosunek współczynnika rozpraszania światła	bezwymiarowe
	wstecz do całkowitego współczynnika rozpra-	U
	szania światła	
β	Objętościowa funkcja rozpraszania światła	$\left[\mathrm{m}^{-1}\mathrm{sr}^{-1}\right]$
$\widetilde{\beta}$	Funkcja fazowa rozpraszanja	$\left[\mathrm{sr}^{-1}\right]$
с С	Całkowity objętościowy współczynnik osła-	$[m^{-1}]$
0	biania światła przez wode morska i jej optycz-	
	nie znaczące skłądniki	
chl-a	Steżenie chlorofilu a	$\left[m\sigma m^{-3}\right]$
chl $a^{N.spumigena}$	Stożonie chlorofilu a zawartogo w N czewni	$\left[mg m^{-3} \right]$
ciii-a	stężenie chloroniu u zawartego w 1v. spunie-	
abl a A.flos-aquae	Stożenie chlorofilu z zawartego w A floo	[mgm=3]
ciii-a-ujuu ujuu	Stężenie cmoroniu <i>a</i> zawartego w <i>A. Jtos</i> -	
11 Anabaenasp		Г — 31
chl-a ^{masachasp.}	Stęzenie chlorofilu a zawartego w Anaba-	[mg m ⁻⁹]
	ena sp.	5 0 15
E_d	Oświetlenie odgórne	$\left[\mathrm{Wm^{-2}nm^{-1}}\right]$
E_d^{insitu}	Oświetlenie odgórne dochodzące do po-	$[{\rm Wm^{-2}nm^{-1}}]$
	wierzchni wody podczas pomiarów in situ	
$E_d^{ m lab}$	Oświetlenie odgórne dochodzące do po-	$[{\rm Wm^{-2}nm^{-1}}]$
	wierzchni wody w trakcie pomiarów labora-	
	toryjnych	
E_u	Oświetlenie oddolne	$[{\rm Wm^{-2}nm^{-1}}]$
K_d	Współczynnik dyfuzyjnego osłabiania oświe-	$[m^{-1}]$
	tlenia odgórnego	
K_L	Współczynnik dyfuzyjnego osłabiania radiacji	$[\mathrm{m}^{-1}]$
λ	Długość fali światła	[nm]
L_u	Radiacja oddolna	$[Wm^{-2}nm^{-1}sr^{-1}]$
PC	Stężenie fikocyjaniny	$[\mathrm{mg}\mathrm{m}^{-3}]$
PC_{insitu}	Wartość stężenia fikocyjaniny występująca w	$[\mathrm{mg}\mathrm{m}^{-3}]$
	badanych wodach	-

$\mathrm{PC}_{\mathrm{lin}}$	Wartość stężenia fikocyjaniny policzona ze	$\left[\mathrm{mg}\mathrm{m}^{-3} ight]$
	wzoru (4.6)	
PC _{OLCI}	Wartość stężenia fikocyjaniny policzona ze	$[\mathrm{mg}\mathrm{m}^{-3}]$
	wzoru (4.7)	
PC_{PCA}	Wartość stężenia fikocyjaniny policzona przy	$[\mathrm{mg}\mathrm{m}^{-3}]$
	wykorzystaniu modelu opartego na metodzie	
	PCA	
R	Reflektancja	bezwymiarowe
R R _{rs}	Reflektancja Reflektancja zdalna	bezwymiarowe $[sr^{-1}]$
R $R_{ m rs}$ $R_{ m rs}^{ m lab}$	Reflektancja zdalna Reflektancja zdalna zmierzona w laborato-	bezwymiarowe $[sr^{-1}]$ $[sr^{-1}]$
R $R_{ m rs}$ $R_{ m rs}^{ m lab}$	Reflektancja zdalna Reflektancja zdalna zmierzona w laborato- rium	bezwymiarowe $[sr^{-1}]$ $[sr^{-1}]$
R $R_{\rm rs}$ $R_{\rm rs}^{\rm lab}$ $R_{\rm rs}^{ m mod}$	Reflektancja zdalna Reflektancja zdalna zmierzona w laborato- rium Modelowana reflektancja zdalna	bezwymiarowe $[sr^{-1}]$ $[sr^{-1}]$ $[sr^{-1}]$
$egin{aligned} R & & \ R_{ m rs} & & \ R_{ m rs}^{ m lab} & & \ R_{ m rs}^{ m mod} & & \ \langle R_{ m rs} angle & & \ \end{pmatrix}$	Reflektancja zdalna Reflektancja zdalna zmierzona w laborato- rium Modelowana reflektancja zdalna Reflektancja zdalna normowana zgodnie z wy-	bezwymiarowe $[sr^{-1}]$ $[sr^{-1}]$ $[sr^{-1}]$ bezwymiarowe

Rozdział 1

Wprowadzenie

Introduction

W ostatnich latach, w związku ze zwiększającą się eutrofizacją wód oraz w wyniku obserwowanych zmian ekosystemu morskiego, wzrost biomasy fitoplanktonu i tworzenie tzw. zakwitów nasila się (Kononen 2001, Paerl 1988). W Morzu Bałtyckim największy problem stanowią letnie zakwity zdominowane przez gatunki fitoplanktonu z grupy cyjanobakterii: *Aphanizomenon flos-aquae*, *Nodularia spumigena* i *Anabaena* sp. (Błaszczyk i in. 2010, Kahru i in. 1994, Karjalainen i in. 2007, Mazur-Marzec i in. 2006, Sivonen i in. 2007). Gatunki te są potencjalnie toksyczne (Mazur-Marzec i in. 2006). Powoduje to wiele szkód w rybołówstwie, negatywnie wpływa na strukturę oraz równowagę ekosystemu, prowadzi do pogorszenia stanu sanitarnego wód, spadku wartości rekreacyjnej kąpielisk, a tym samym ich atrakcyjności (Błaszczyk i in. 2010, Ferguson i in. 1996, Mazur-Marzec 2011). W związku z ich potencjalnie silnym, negatywnym wpływem społecznym, ekonomicznym, oraz zdrowotnym, monitorowanie zakwitów jest niezwykle ważne (Kutser 2004, Subramaniam i in. 2000).

Prowadzony obecnie monitoring wód tradycyjną metodą opartą na analizie mikroskopowej jest dokładny i szczegółowy, jednak ma ograniczony zasięg czasowy i przestrzenny, gdyż jest kosztowny, czasochłonny, wymaga szerokiej wiedzy i doświadczenia, a często jest również subiektywny (Rantajärvi i in. 1998). Dodatkowo, przestrzenny rozkład koncentracji cyjanobakterii w przypadku występowania zjawiska zakwitu bardzo często charakteryzuje się tzw. plamistością (efekt *patchiness*), co może skutkować błędną oceną skali tego zjawiska przy punktowym pobieraniu próbek (Mazur-Marzec i in. 2006, Sagan 2008). Dlatego możliwość identyfikacji organizmów tworzących zakwity metodami niekontaktowymi jest obiektem powszechnego zainteresowania wielu oceanografów na całym świecie (Metsamaa i in. 2006, Schofield i in. 1999). Wykorzystanie danych satelitarnych pozwala śledzić miejsca pojawiania, rozwoju, oraz przemieszczania się zakwitów fitoplanktonu, a także ich struktury przestrzennej na dużym obszarze. Dodatkowo informację jaką daje zdalny monitoring satelitarny można wykorzystać jako wskazówki dotyczące optymalnego rozmieszczenia miejsc prowadzonego monitoringu *in situ*. Pomimo że pomiary z poziomu satelitarnego obarczone są błędem z powodu wpływu atmosfery na mierzone parametry oraz ograniczone przez konieczność kalibracji uzyskanych wyników względem danych *in situ*, to wskazane wyżej powody i szybko postępujący rozwój aparatury pomiarowej uzasadniają rozwój badań w tym zakresie.

Parametrem często wykorzystywanym w monitoringu wód metodami bezkontaktowymi jest reflektancja zdalna $R_{\rm rs}$ (Craig i in. 2006, 2012, Darecki i in. 2003, Ficek 2013, Ficek i in. 2011, 2012, Kratzer i in. 2000, Kutser i in. 2006a). Wynika to ze stosunkowej łatwości jej pomiaru (Dera 2003). Pomiar $R_{\rm rs}$ może być wykonywany z pokładu statku, samolotu, a także z poziomu satelitarnego. Ten ostatni, dzięki wysokiej rozdzielczości czasowej i dużemu zasięgowi przestrzennemu przy zachowaniu rozdzielczości od 250 m do 1000 m, pozwala szybko uzyskać informacje dla dużego obszaru. Zróżnicowanie wartości $R_{\rm rs}$ determinowane jest zarówno przez rzeczywiste właściwości optyczne wody morskiej, które warunkowane są przez optycznie znaczące składniki wody morskiej, jak i przez czynniki zewnętrzne, m.in. położenie Słońca czy stopień zachmurzenia.

Spektrofotometryczne pomiary prowadzone in situ, wraz z laboratoryjnymi pomiarami parametrów biooptycznych dają silne narzędzie do optycznej identyfikacji składników dominujących w wodzie morskiej, a także do zdalnego określenia koncentracji optycznie znaczących składników wody (OSCs, ang. optically significant constituents), tj. fitoplanktonu, substancji żółtych (CDOM, ang. chromophoric/colored dissolved organic matter), czy substancji zawieszonych (SPM, ang. suspended particle matter). Widma R_{rs} mierzone z wysoką rozdzielczością spektralną (multispektralne lub hiperspektralne) wykorzystywane są do tworzenia algorytmów służących zdalnej identyfikacji m.in. stężenia barwników, węgla organicznego (POC, ang. particulate organic carbon) czy współczynnika absorpcji światła przez substancje żółte, do oceny jakościowej wód przybrzeżnych, a także określania biomasy fitoplanktonu (Darecki i Stramski 2004, Dekker i in. 1991, Gons i in. 1992, Jupp i in. 1994, Kutser i in. 2006a, Simis i in. 2005, Taylor i in. 2013). Na ich podstawie dostarczana jest cenna informacja o produkcji pierwotnej, globalnym obiegu wegla, a także o procesach dynamicznych morza na szeroka skalę. Tego typu pomiary użyte mogą być także jako dane kalibracyjne oraz walidacyjne do pomiarów prowadzonych z poziomu satelitarnego, a także do tworzenia modeli matematycznych (Harvey i in. 2014, Kratzer i in. 2008, Mobley i in. 2005, Neil i in. 2012, Nezlin 2004, Tucker i Sellers 1986).

Istniejące algorytmy satelitarne do oceny parametrów biooptycznych dobrze sprawdzają się dla wód oceanicznych I rodzaju (wg. optycznej klasyfikacji wód morskich Morela i Prieura (1977)), gdzie właściwości optyczne dobrze korelują się ze stężeniem chloro-filu *a* (Gordon i Morel 1983). Jednak w wodach II rodzaju, o złożonym składzie substancji optycznie czynnych, zależności pomiędzy właściwościami optycznymi a koncentracją OSCs nie są uniwersalne i muszą być rozpatrywane lokalnie, a często także sezonowo (Dera 2003, Mueller i Austin 1992).

Morze Bałtyckie jest szczególnym morzem wśród wód II rodzaju. Duża liczba dopływających wód rzecznych, ograniczona wymiana wód z Atlantykiem oraz względnie niewielka głębokość powodują zwiększony wpływ substancji żółtych na całkowitą absorpcję. Wysoka zawartość substancji żółtych, zwłaszcza w wodzie przybrzeżnej, powoduje silną absorpcję światła niebieskiego, co zakłóca wiele algorytmów satelitarnych (Darecki i Stramski 2004). Także zmienność koncentracji substancji zawieszonych powoduje znaczną zmienność w widmach reflektancji zdalnej (Darecki i in. 2003).

Pomiary reflektancji zdalnej, także z poziomu satelitarnego, powszechnie wykorzystywane sa do oceny ilościowej fitoplanktonu (Kahru i in. 1982, Kutser 2004, Kutser i in. 2006a). Jako wskaźnik ilościowy biomasy całego fitoplanktonu przyjmuje się powszechnie steżenie chlorofilu a wraz z feopigmentami (chl-a) (Ahn i in. 2007, Gons i in. 2002, Kutser i in. 2006a). Jednak przy ocenie ilości cyjanobakterii stężenie chl-a nie zawsze jest dobrym wskaźnikiem, gdyż zawarty jest on we wszystkich grupach fitoplanktonu (Ahn i in. 2007). Fikocyjanina (PC), która jest barwnikiem z grupy fikobilin dominującym w nitkowatych gatunkach cyjanobakterii, między innymi takich jak Nodularia Spumigena czy Aphanizomenon flos-aquae (Sobiechowska-Sasim i in. 2014), może być efektywnie użyta jako wskaźnik ilościowy biomasy dla gatunków z grupy cyjanobakterii (Ruiz-Verdú i in. 2008, Simis i in. 2005). Fikocyjanina wykazuje silną korelację z biomasą cyjanobakterii (Dekker 1993, Duan i in. 2012, Hunter i in. 2010, Mishra i in. 2009, Ogashawara i in. 2013, Schalles i Yacobi 2000, Simis i in. 2005, Song i in. 2013). W wodach Morza Bałtyckiego fikocyjanina może być uważana za biomarker cyjanobakterii (Sobiechowska-Sasim i in. 2014), gdyż jedynie gatunki z tej grupy zawierają PC w znaczących ilościach, zatem zakwity innych organizmów planktonowych nie wpływaja na oszacowanie biomasy cyjanobakterii. Fikocyjanina silnie absorbuje światło w zakresie 620–625 nm (Bryant 1981, Sobiechowska-Sasim i in. 2014), tym samym dając możliwość jej ilościowej oceny metodami bezkontaktowymi (Ruiz-Verdú i in. 2008, Simis i in. 2005), z wykorzystaniem czujników rejestrujących sygnał w zakresie widzialnym.

Celem prezentowanej pracy jest:

- zbadanie charakterystyk spektralnych reflektancji zdalnej i ich zależności od optycznie znaczących komponentów wody morskiej, pod kątem możliwości ich wykorzystania do ulepszenia monitoringu zakwitów fitoplanktonu zdominowanych przez gatunki z grupy cyjanobakterii w Morzu Bałtyckim,
- identyfikacja w widmach reflektancji zdalnej takich cech spektralnych, które pozwalają na określenie stężenia fikocyjaniny w wodzie metodami zdalnymi, w tym metodami satelitarnymi,
- stworzenie i weryfikacja metody umożliwiającej bezkontaktową identyfikację podstawowych grup organizmów dominujących w zakwitach fitoplanktonu.

Dla osiągnięcia tego celu wykonano szereg badań obejmujących:

- 1. Analizę widm reflektancji zdalnej zmierzonych *in situ* oraz stężenia fikocyjaniny w pobranych próbkach wody morskiej podczas rejsów badawczych statkiem Oceanograf-II w rejonie Zatoki Gdańskiej. Dane te posłużyły do wyznaczenia algorytmu do określenia stężenia fikocyjaniny metodami bezkontaktowymi, w tym metodami satelitarnymi.
- 2. Laboratoryjne badania właściwości optycznych, w tym widm reflektancji wyselekcjonowanych monokultur gatunków cyjanobakterii z Morza Bałtyckiego: Nodularia spumigena, Anabaena sp, Aphanizomenon flos-aquae.
- Opracowanie i kalibrację (na podstawie kontrolowanych pomiarów laboratoryjnych) biooptycznego modelu reflektancji, gdzie wykorzystano zmienne spektralnie funkcje fazowe.
- 4. Symulację, za pomocą opracowanego modelu, widm reflektancji jakie mogą pojawić się w warunkach naturalnych, oraz analizę tych widm pod kątem możliwości identyfikacji gatunku dominującego w badanej mieszaninie glonów.

Rozdział 2

Definicje badanych wielkości optycznych i ich wzajemne relacje

Definitions of the studied optical parameters and relations between them

W rozdziale tym podano definicje wielkości fizycznych stosowanych w optycznych badaniach zdalnych, tj. reflektancji oraz reflektancji zdalnej, a także scharakteryzowano rzeczywiste właściwości optyczne wody morskiej. Przedstawiono również zależności reflektancji zdalnej od rzeczywistych właściwości optycznych. Ponadto poruszono tu problem związany z metodyką wykonywania pomiarów rzeczywistych właściwości optycznych, w szczególności współczynnika rozpraszania.

2.1 Wielkości fizyczne stosowane w optycznych badaniach bezkontaktowych

Physical parameters used in optical remote sensing

Preisendorfer (1961) wprowadził podział właściwości optycznych w naturalnych wodach na rzeczywiste i pozorne. Pozorne właściwości optyczne AOP (ang. *apparent optical properties*) zależą od rzeczywistych właściwości optycznych IOP (ang. *inherent optical properties*), a także od rozkładu kierunkowego radiacji światła wchodzącego z atmosfery do morza (Dera 2003). Do analizowanych w tej pracy pozornych właściwości optycznych zalicza się współczynnik dyfuzyjnego osłabiania oświetlenia K, funkcję dyfuzyjnego odbicia R, oraz funkcję kierunkowego rozkładu strumienia światła D. Poniżej zostanie omówiona funkcja dyfuzyjnego odbicia, zwana też reflektancją (R) oraz reflektancja bezkontaktowa, nazywana również reflektancją zdalną $(R_{\rm rs})$.

Reflektancja R (ang. *irradiance reflectance*) jest ważnym parametrem w badaniach oceanograficznych. Określona jest jako stosunek wektorowego oświetlenia oddolnego do wektorowego oświetlenia odgórnego tuż pod powierzchnią wody, wyrażona zależnością:

$$R(\lambda, z) = \frac{E_u(\lambda, z)}{E_d(\lambda, z)} = \frac{\int_0^{2\pi} \frac{\pi}{2} L(\theta, \phi, z) \cdot \cos \theta \cdot \sin \theta d\theta d\phi}{\int_0^{2\pi} \frac{\pi}{2} L(\theta, \phi, z) \cdot \cos \theta \cdot \sin \theta d\theta d\phi}$$
(2.1)

Funkcja (2.1) jest wielkością bezwymiarową.

Obecnie, ze względów praktycznych (takich jak stosunkowa łatwość pomiaru) w pracach badawczych, szczególnie w badaniach teledetekcyjnych morza, częściej używana jest reflektancja zdalna $R_{\rm rs}$ (ang. *remote sensing reflectance*). Definiowana jako stosunek radiacji oddolnej L_u (ang. *upwelling radiance*) do oświetlenia odgórnego E_d (ang. *downwelling irradiance*):

$$R_{\rm rs}(\lambda) = \frac{L_u(\lambda)}{E_d(\lambda)} \qquad \left[{\rm sr}^{-1} = \frac{{\rm W}\,{\rm m}^{-2}\,{\rm sr}^{-1}\,{\rm nm}^{-1}}{{\rm W}\,{\rm m}^{-2}\,{\rm nm}^{-1}}\right] \tag{2.2}$$

i wyrażana w $[sr^{-1}]$.

Reflektancja zdalna jest funkcją długości fali, a jej spektralny rozkład w sposób ilościowy opisuje "kolor morza" (ang. *ocean colour*), dlatego jej pomiary określane są często mianem pomiaru koloru morza. $R_{\rm rs}$ wyznaczana może być przy wykorzystaniu pomiarów z mierników z poziomu pokładu statków badawczych, obiektów latających, a także satelitów.

Do określenia $R_{\rm rs}$ używany jest pomiar radiacji $L(\theta, \phi, \lambda)$. Jest to podstawowa wielkość w radiometrii opisująca strumień energii promieniowania o długości fali λ w kierunku (θ : kąt zenitalny, ϕ : azymut) przypadający na jednostkę rzutu powierzchni źródła na płaszczyznę prostopadłą do kierunku (θ, ϕ) i na jednostkę kąta bryłowego wokół tego kierunku (Dera 2003). Wyrażana jest w [W m⁻² sr⁻¹ nm⁻¹].

Całkując radiację po wszystkich kierunkach otrzymujemy całkowite oświetlenie wektorowe, mierzone w $[\rm W\,m^{-2}\,nm^{-1}]$ i określone zależnością:

$$E(\lambda) = \int_{0}^{2\pi} \int_{0}^{\pi} L(\theta, \phi, \lambda) \cdot \cos \theta \cdot \sin \theta d\theta d\phi$$
(2.3)

Jeżeli oświetlenie zdefiniowane we wzorze (2.3) ograniczymy do oświetlenia padającego z górnej półsfery ($\theta \in (0, \frac{\pi}{2})$), otrzymamy wówczas tzw. oświetlenie odgórne E_d (Dera 2003, Højerslev 1986, IOCCG 2000, Kirk 1984, Mobley 1994).

2.2 Rzeczywiste właściwości optyczne wody morskiej

Inherent optical properties of sea water

Optyczna charakterystyka wody morskiej jest wypadkową optycznych charakterystyk poszczególnych jej składników. Na wielkość pozornych właściwości optycznych (AOP) wody morskiej bezpośredni wpływ mają rzeczywiste właściwości optyczne (IOP), na które w głównej mierze wpływa rodzaj i ilość zawieszonych i rozpuszczonych w niej substancji absorbujących i rozpraszających światło, a także same cząsteczki wody. Do IOP wody morskiej zaliczane są: współczynnik osłabiania światła c, który jest sumą współczynnika absorpcji a i współczynnika rozpraszania b, oraz objętościowa funkcja rozpraszania β , która jest iloczynem fazowej funkcji rozpraszania $\tilde{\beta}$ i współczynnika rozpraszania ϵ i współczynnika elektromagnetycznego.

2.2.1 Współczynnik absorpcji światła przez wodę morską

Absorption coefficient of sea water

Absorpcja światła jest wielkością addytywną; można więc rozpatrywać charakterystykę spektralną widma absorpcji każdego ze składników wody morskiej oddzielnie:

$$a(\lambda) = a_{\rm w}(\lambda) + a_{\rm CDOM}(\lambda) + a_{\rm NAP}(\lambda) + a_{\rm fito}(\lambda)$$
(2.4)

gdzie indeksy w, CDOM, NAP i fito oznaczają kolejno wodę, organiczne substancje rozpuszczone, cząstki nie będące fitoplanktonem (ang. *non-algal particles*, NAP) oraz fitoplankton.

Czysta woda absorbuje światło widzialne w sposób spektralnie selektywny. Współczynnik absorpcji wzrasta znacząco dla fal dłuższych niż 550 nm, a dla fal powyżej 700 nm jest wielkością dominującą współczynnik osłabiania światła przez molekuły wody. Widmo absorpcji światła przez czystą wodę jest trudne do zmierzenia i choć próby takie były



RYSUNEK 2.1: Widmo współczynnika absorpcji światła przez czystą wodę. Dla długości fali z przedziału 340–380 nm wg. Soganderes i Fry (1997), dla fal z zakresu 380– 725 nm wg. Pope i Fry (1997), natomiast dla zakresu 725–800 nm wg. Smith i Baker (1981).

FIGURE 2.1: Absorption coefficient of pure water. Based on Soganderes i Fry (1997) for the interval 340–380 nm, Pope i Fry (1997) for the interval 380–725 nm, and Smith i Baker (1981) for the interval 725–800 nm.

kilkukrotnie podejmowane (rys. 2.1) (Morel 1974, Pope i Fry 1997, Smith i Baker 1981), wyniki obarczone są znaczącym błędem, szczególnie dla krótkofalowej części widma, gdzie woda oprócz pochłaniania również silnie rozprasza światło. Oprócz czystej wody, woda morska zawiera też rozpuszczone sole nieorganiczne, które mają zaniedbywalny wpływ na absorpcję światła w zakresie widzialnym. Pegau i Zaneveld (1993) pokazali natomiast zależność współczynnika absorpcji od temperatury wody dla fal z zakresu bliskiej podczerwieni ($\frac{\partial a}{\partial T} = 0.0015 \,[\text{m}^{-1} \,\text{K}^{-1}]$ dla $\lambda = 600 \,\text{nm}$ i $\frac{\partial a}{\partial T} = 0.01 \,[\text{m}^{-1} \,\text{K}^{-1}]$ dla $\lambda = 750 \,\text{nm}$).

Substancje żółte to powszechna nazwa dla absorbującej światło w zakresie widzialnym frakcji rozpuszczonych w wodzie substancji organicznych takich jak kwasy huminowe i kwasy fulwowe, nazywane też CDOM. Powstają one w wyniku metabolizmu i rozpadu obumarłych organizmów. Substancje żółte znajdują się we wszystkich wodach naturalnych. Z powodu zwiększonego wpływu materiału z rozkładu substancji organicznych z lądu, najwyższe stężenia CDOM występują w rzekach, jeziorach i wodach przybrzeżnych. Wody zdominowane przez substancje żółte mają barwę od żółtej po ciemno brunatną. CDOM silnie absorbuje światło w niebieskim zakresie widma, z wykładniczym spadkiem wartości współczynnika absorpcji przy rosnących długościach fali. Zakłada się, że widmo absorpcji światła przez CDOM spełnia warunki określone przez funkcję zależną od długości fali i wyrażoną zależnością:

$$a_{\text{CDOM}}(\lambda) = a_{\text{CDOM}}(\lambda_0) \exp(-S(\lambda_0 - \lambda))$$
(2.5)

Znając współczynnik absorpcji dla jednej, referencyjnej długości fali (λ_0) i współczynnik nachylenia *S*, oraz korzystając z funkcji (2.5) można określić współczynnik absorpcji dla dowolnej długości fali z przedziału fal widzialnych. Według informacji zawartych w literaturze, parametr *S* dla europejskich mórz i wód Atlantyku przyjmuje wartości od 0.011 do 0.025 (Babin i in. 2003b), natomiast dla wód Bałtyku waha się pomiędzy 0.004 do 0.036 dla różnych rejonów i sezonów, w zależności od stopnia eutrofizacji wody (Babin i in. 2003b, Bricaud i in. 1981, Kowalczuk i Kaczmarek 1996, Kowalczuk i in. 2005, Samuła-Koszałka i Woźniak 1979). W konsekwencji współczynnik absorpcji dla wybranej długości fali, przykładowo $\lambda_0 = 400$ nm, także zmienia się sezonowo i terytorialnie, a jego wartości dla Morza Bałtyckiego wahają się od 0.16 do 4.60 m⁻¹.

Przez tzw. cząstki nie będące fitoplanktonem (NAP) rozumie się detrytus, czyli nieożywioną materię organiczną i inne cząstki organiczne nie będące żywym fitoplanktonem, a także cząstki mineralne. Rozkład spektralny widma absorpcji światła przez NAP przybliża taka sama funkcja, co rozkład spektralny absorpcji światła przez CDOM (Roesler i in. 1989):

$$a_{\rm NAP}(\lambda) = a_{\rm NAP}(\lambda_0) \exp(-S(\lambda_0 - \lambda))$$
(2.6)

To co odróżnia spektralny rozkład współczynnika absorpcji światła przez CDOM od współczynnika absorpcji światła przez NAP to wielkość współczynnika nachylenia *S* (Babin i in. 2003b, Darecki i in. 2003). W wodach Morza Bałtyckiego współczynnik absorpcji światła przez substancje żółte jest wyższy niż dla cząstek nie będących żywym fitoplanktonem, szczególnie w krótkofalowych pasmach światła. Babin i in. (2003b) zbadali zmienność wartości współczynnika nachylenia dla widm absorpcji światła przez NAP w europejskich morzach i wodach Atlantyku i według tych autorów dla Bałtyku mieści się on w granicach od 0.011 do 0.015. Jednak w procesie osłabiania światła w wodzie przez NAP, z powodu mało znaczącego udziału barwników w tych cząstkach, zdecydowanie większe znaczenie ma proces rozpraszania aniżeli absorpcji (Król 1998).

Fitoplankton jest jednym ze składników zawiesiny organicznej. Z powodu dużej różnorodności jego komórek, pod względem zarówno zawartości barwników, jak i kształtu i wielkości, jest on głównym czynnikiem wpływającym na zmienność optycznych charakterystyk naturalnych wód. Fitoplankton występujący w wodach bałtyckich jest różnorodny pod względem kompozycji taksonomicznej, kształtu, formy, a także miejsca i czasu występowania. Jak pokazała Wojtasiewicz (2012), widmo absorpcji światła przez



RYSUNEK 2.2: Widma specyficznych współczynników absorpcji światła przez wybrane barwniki. Widma fotosyntetycznych i niefotosyntetycznych karotenoidów przedstawione są odpowiednio na czerwono i niebiesko (Bricaud i in. 2004).

FIGURE 2.2: Weight-specific absorption spectra of the selected pigments. Absorption spectra of photosynthetic and nonphotosynthetic carotenoids are shown in red and blue, respectively (Bricaud i in. 2004).

poszczególne gatunki jest na tyle różne, że może stanowić podstawę do rozróżnienia gatunku dominującego w wodzie na podstawie widm mierzonych zdalnie. Na właściwości absorpcyjne światła przez fitoplankton głównie wpływa skład fotosyntetycznych i fotoochronnych barwników zawartych w jego komórkach (tab. 2.1), wśród których wyróżnia się trzy główne grupy: chlorofile, karotenoidy i fikobiliny (Rowan 1989). Każdy barwnik ma swoje charakterystyczne widmo absorpcji (rys. 2.2).

O charakterystyce spektralnej współczynnika absorpcji $a_{\rm fito}$ może decydować nie tylko gatunek występującego fitoplanktonu, ale także faza jego wzrostu. Dodatkowo skład występujących barwników pomocniczych może zmieniać się w zależności od dostępności światła oraz substancji odżywczych (Bidigare i in. 1990, Bricaud i Stramski 1990, Bricaud i in. 2004, Ciotti i in. 2002, Hoepffner i Sathyendranath 1991, Mobley 1994).

			Grupa fitoplanktonu										
				Cyanophyceae (sinice)	Cryptophyceae (kryptofity)	Dinophyceae (bruzdnice)	Chrysophyceae (złotowiciowce)	Prymnesiophyceae (klasa haptofitów)	Diatomophyceae (okrzemki)	Euglenophyceae (eugleniny)	Chlorophyta (zielenice)	Xanthophytes (różnowiciowce)	Maksimum absorpcji $\lambda_{\max} \ [nm]$
			a	+	+	+	+	+	+	+	+	+	430-432, 662-666
	C	hlorofile	b	_	_	—	_	_	_	+	+	_	459-470, 646-652
			c	—	+	+	+	+	+	-	—	+	442-457, 628-634
			α -karoten	_	+	-	—	-	—	—	_	—	441-449, 471-477
		β -karoten		+	—	+	+	+	+	+	+	+	451-454, 475-480
			γ -karoten	—	—	—	—	—	—	—	—	—	459-463, 489-493
			alloksantyna	—	+	—	-	—	—	—	_	_	450-454, 478-484
			antraksantyl	—	—	_	+	-	_	_	+	-	444-448, 472-475
			diadinoksantyna	_	—	+	_	+	+	+	_	+	445-449, 475-479
	dy		diatoksantyna	—	—	+	—	+	+	+	—	+	451-453, 478-480
iki	ioi		dinoksantyna	—	—	+	—	_	—	_	—	—	416-418, 438-443, 467-472
vn	ter		fukoksantyna	—	—	—	-	+	+	-	_	—	444 - 449, 467 - 475
arv	arc		krokoksantyna	—	+	—	—	—	—	—	—	—	443-445, 472-475
q	k	ksantofile	luteina	—	—	—	—	—	—	—	+	_	443-448, 470-476
			monodoksantyna	—	+	—	—	—	—	_	—	—	445-447, 475-477
			myksoksantofil	+	—	—	—	—	—	_	—	—	472-478, 502-510
			neoksantyna	—	—	—	—	—	—	—	+	_	411-416, 435-442, 463-471
			perydynina	—	—	+	—	—	—	—	—	—	465-475
			wiolaksantyna	_	_	_	+	_	_	_	+	_	415-417, 436-440, 466-470
			zeoksantyna	+	_	+	+	_	—	_	+	_	449-454, 475-481
			fikocyjanina	+	+	_	_	—	—	—	_	_	620
	f	ikobiliny	allofikocyjanina	+	_	—	—	—	—	—	—	—	650
			fikoerytryna	+	+	—	—	—	—	—	—	—	550

TABLICA 2.1: Główne barwniki występujące w poszczególnych grupach fitoplanktonu (na podstawie Roy i in. 1989).TABLE 2.1: The main pigments occurring in phytoplankton groups (based on Roy i in. 1989).

11



RYSUNEK 2.3: Widmo współczynnika rozpraszania światła przez czystą wodę na podstawie pracy Morela (1974).

FIGURE 2.3: Scattering coefficient of pure water, based on Morel (1974).

2.2.2 Współczynnik rozpraszania światła przez wodę morską

Scattering coefficient of sea water

W wodzie morskiej na wielkość współczynnika rozpraszania światła wpływają cząstki zawieszone (NAP i fitoplankton) oraz cząsteczki czystej wody. Przyjmuje się, że substancje żółte nie wpływają na właściwości rozpraszające. Podobnie jak absorpcja, jest to wielkość addytywna i można ją przedstawić jako sumę współczynników rozpraszania światła przez poszczególne składniki:

$$b(\lambda) = b_{\rm w}(\lambda) + b_{\rm p}(\lambda) \tag{2.7}$$

gdzie indeksy w, p oznaczają kolejno czystą wodę oraz cząstki zawieszone.

Morel (1974) oszacował wartości współczynnika rozpraszania światła przez czystą wodę morską na podstawie rozważań elektrodynamiki klasycznej i termodynamiki (rys. 2.3). Dodatkowo, na właściwości rozpraszające czystej wody, zwłaszcza w zakresie małych kątów, wpływ mają turbulencje. Są to wielkoskalowe zmiany współczynnika załamania światła, wywołane głównie fluktuacjami temperatury i zasolenia, które po uśrednieniu w długim okresie czasu dają efekt rozproszenia światła (Bogucki i in. 1998, Wells 1973). Wprowadzenie do czystej wody nawet niewielkiej ilości cząstek zawieszonych zwiększa wartość współczynnika rozpraszania nawet dziesięciokrotnie (Mobley 1994). Na widmo rozpraszania, które ma duży wpływ na widmo radiacji oddolnej, wpływa kształt i wielkość cząstek rozpraszających światło. Przyjmuje się, że rozpraszanie światła przez cząstki NAP spełnia warunki określone przez funkcję potęgową zależną od długości fali, a na wartość wykładnika wpływa rozkład rozmiarów rozpraszających cząstek. Im więcej jest w zawiesinie małych cząstek, tym nachylenie funkcji jest bardziej strome. Komórki fitoplanktonu mogą mieć przeróżny kształt i wielkość, od małych kulistych czy też cylindrycznych po długie, cienkie nici (rys. 2.4). Powoduje to zróżnicowanie widm radiacji oddolnej w zależności od składu taksonomicznego fitoplanktonu. Rozpraszanie światła w kąty od 0 do 90° to rozpraszanie w przód (ang. forward scattering) i współczynnik rozpraszania w przód oznacza się $b_{\rm f}$, natomiast w kąty pomiędzy 90° a 180° określa się jako rozpraszanie wstecz (ang. backscattering) i współczynnik rozpraszania wstecz oznacza się $b_{\rm b}$.

Widmo reflektancji zdalnej zdeterminowane jest przez stosunek rozpraszania wstecz do absorpcji (Gordon i in. 1975). Z powodu trudności pomiaru współczynnika rozpraszania wstecz (b_b) jest on głównie badany na podstawie symulacji z wykorzystaniem teoretycznych modeli. Początkowe prace zakładały, że cząstka rozpraszająca ma sferyczny kształt i jest homogeniczna (Meyer 1979). Wiele modeli nadal wykorzystuje takie założenie (m.in. Kitchen i Zaneveld 1992, Quirantes i Bernard 2004), ale są też przykłady uwzględnienia cząstek o niesferycznym kształcie (Clavano i in. 2007, Quirantes i Bernard 2004). W przeprowadzonych badaniach zauważono, że przyjmując w modelu cząstkę sferyczną i homogeniczną, wartość b_b może być zaniżona nawet o jeden rząd wielkości. Pomimo tego, w wielu badaniach wpływu fitoplanktonu na b_b wykorzystywano teorię Mie rozpraszania cząstek, która zakłada sferyczność i homogeniczność cząstek (Bricaud i Morel 1986, Morel i Ahn 1990, Morel i Bricaud 1981, Stramski i Mobley 1997, Stramski i in. 2001). Właściwości współczynnika rozpraszania wstecz fitoplanktonu zostały zbadane w laboratorium przez Voltena i in. (1998) oraz przez Vaillancourta i in. (2004).

Volten i in. (1998) przeprowadzili badania b_b dla kilku gatunków fitoplanktonu w jednej długości fali 633 nm. Zauważyli oni, że morfologia komórki znacznie wpływa na b_b , ale nie w sposób w jaki przypuszczano. Dla przykładu, dwie komórki o takim samym kształcie dawały zupełnie inne wartości współczynnika b_b , podczas gdy dwa gatunki o komórkach innych kształtów, sferycznym i cylindrycznym dawały wartości podobne. Spostrzegli oni także wpływ struktury wewnętrznej komórki (m.in. takie jak obecność wakuoli gazowych występujące w komórkach cyjanobakterii) na wartości b_b . W ich pracy porównano wyniki z wynikami modelowymi przeprowadzonymi przy użyciu modelu Mie z założeniem o sferyczności i homogeniczności komórki i wnioskowano, że model Mie nie daje dobrego przybliżenia współczynnika b_b dla fitoplanktonu.



RYSUNEK 2.4: Różnorodność kształtów i wielkości komórek fitoplanktonu. Mikroskopowe zdjęcia próbek wody z pomiarów *in situ* w Zatoce Gdańskiej latem 2013 roku (fot. J. Kobos).

FIGURE 2.4: Diversity of shapes and sizes of phytoplankton cells. Microscopic pictures of water sample from summer 2013 in situ measurements from the Gulf of Gdansk.

Natomiast Vaillancourt i in. (2004) zauważyli, że model Mie nie był w stanie wygenerować wartości współczynnika b_b przez nich zmierzonego dla badanej kultury fitoplanktonu przy wprowadzeniu do modelu tzw. typowych dla fitoplanktonu wartości współczynnika załamania n (n = 1.06-1.08). W wielu publikacjach można znaleźć założenia o spektralnej niezmienności współczynnika rozpraszania wstecz (np. Whitmire i in. 2007).

Huot i in. (2008) studiowali zależność współczynnika $b_{\rm b}$ od wartości stężenia chl-a, a także współczynnika $B = b_{\rm b}/b$ od długości fali w wodach I rodzaju, wschodniopołudniowego Pacyfiku, gdzie zakres wartości stężenia chl-a wahał się od 0.2 do 2 mg m⁻³. Uzyskali oni współczynnik *B* równy 0.01, stały względem długości fali, i zauważyli słabą zależność tego współczynnika od stężenia chl-a. Natomiast zależność $b_{\rm b}$ od stężenia chl-a opisali funkcją potęgową:

$$b_{\rm b} = A(\lambda) \cdot chla^{B(\lambda)} \tag{2.8}$$

gdzie A i B to współczynniki regresji, zależne od długości fali; podobna zależność pokazana jest w pracy Reynoldsa i in. (2001).

Natomiast Ahn i in. (1992) także badali spektralną zależność współczynnika B, ale w warunkach laboratoryjnych na 9 kulturach fitoplanktonu, zróżnicowanych pod względem wielkości, kształtu, a także zawartości barwników. W odróżnieniu od wcześniejszych badań, pokazują oni spektralną zależność współczynnika B.

W pracy Ulloa i in. (1994) symulowano B przy użyciu modelu Mie, oraz badano wpływ wielkości cząstek na ten współczynnik. Uzyskali oni stałą zależność B od długości fali i kontrastują swoje wyniki z wynikami badań przeprowadzonymi przez Morela i Bricaud (1981, 1986), którzy pokazują dużą zmienność spektralną współczynnika B w zależności od wielkości komórek.

McKee i Cunningham (2005) dowodzą spektralnej zmienności funkcji fazowej rozpraszania parametryzowanej za pomocą współczynnika B; pokazują, że zmierzony stosunek B(470)/B(676) jest różny od 1. Nie pokazują jednak jak ta zależność miałaby wyglądać. W większości publikacji badania dowodzą o małej zmienności spektralnej współczynnika B w zależności od długości fali, natomiast zależność b_b od stężenia chl-a może być opisana przy użyciu funkcji potęgowej, której współczynniki zależą od długości fali.

2.2.3 Funkcja fazowa rozpraszania światła

Scattering phase function

Funkcja fazowa jest ważną właściwością optyczną wody, jednak z uwagi na trudność wykonania jej dokładnych pomiarów jest parametrem rzadko mierzonym w badaniach *in situ* prowadzonych w morzu (Freda 2011). Funkcja fazowa równa jest stosunkowi objętościowej funkcji rozpraszania do współczynnika rozpraszania: $\tilde{\beta} = \frac{\beta}{b}$. Opisuje ona kątowy rozkład rozpraszania bez informacji o wielkości tego rozpraszania. Dla cząstek zawieszonych, w tym cząstek fitoplanktonu, znanych jest kilka przybliżeń funkcji fazowych, które mogą być użyte w numerycznych symulacjach przenoszenia światła w morzu. Kilka z nich opartych jest na pomiarach przeprowadzonych w morzu (m.in. Petzold 1972) lub numerycznie obliczonych przy zastosowaniu teorii Mie dla znanego współczynnika załamania badanego ośrodka, a także rozkładu rozmiarów rozpraszających cząstek. Wykorzystywane są także analityczne postacie funkcji fazowych ze względu na ich matematyczną użyteczność. Znane funkcje rozpraszania światła często przyjmowane w numerycznych symulacjach światła w morzu to m.in.:

- funkcja fazowa Petzolda, wyznaczona dla średnich cząstek z pomiarów objętościowej funkcji rozpraszania β wykonanych w San Diego przez Petzolda (Mobley i in. 2002, Petzold 1972),
- funkcje fazowe dla małych i dużych cząstek w wodach I rodzaju wyznaczone przez Morela i in. (2002),
- funkcja Henyey'a-Greensteina (OTHG) wyrażona za pomocą jednego parametru swobodnego, którą można przedstawić następującym zapisem matematycznym:

$$\tilde{\beta}_{\text{OTHG}}(\Psi) = \frac{1}{4\pi} \frac{1 - g^2}{(1 + g^2 - 2g\cos\Psi)^{3/2}}$$
(2.9)

gdzie gjest średnim kosinusem kąta rozpraszania $\Psi,$

 funkcja fazowa Fourniera-Foranda (FF), która jest analityczną postacią funkcji fazowej, oparta na teorii Mie. Funkcja ta zaproponowana została przez Fourniera, Foranda i Jonasza (Fournier i Forand 1994, Fournier i Jonasz 1999) i można ją przedstawić następującym zapisem matematycznym:

$$\widetilde{\beta}_{FF}(\Psi) = \frac{\left[\nu(1-\delta) - (1-\delta^{\nu}) + \left[\delta(1-\delta^{\nu}) - \eta(1-\delta)\right]\sin^{-2}\left(\frac{\Psi}{2}\right)\right]}{4\pi(1-\delta)^{2}\delta v} + \frac{1-\delta_{180}^{\nu}}{16\pi(\delta_{180}-1)\delta_{180}^{\nu}}\left(3\cos^{2}\Psi - 1\right)$$
(2.10)

gdzie $\nu = \frac{3-\mu}{2}, \, \delta = \frac{4}{3(n-1)^2} \sin^2\left(\frac{\Psi}{2}\right), \, n$ to część rzeczywista współczynnika załamania cząstki, μ to współczynnik nachylenia hiperbolicznego rozkładu (Junge'a) którym przybliża się rozkład rozmiarów cząstek, a δ_{180} jest to współczynnik δ dla kąta półpełnego.

Funkcja fazowa FF po scałkowaniu daje wartość współczynnika B zdefiniowanego jako stosunek współczynnika rozpraszania wstecz do całkowitego współczynnika rozpraszania:

$$B(\mu, n) = \frac{b_{\rm b}}{b} = 1 - \frac{1 - \delta_{90}^{\nu+1} - 0.5(1 - \delta_{90}^{\nu})}{(1 - \delta_{90})\delta_{90}^{\nu}}$$
(2.11)

gdzie δ_{90} jest to współczynnik δ dla kąta prostego.

Jak zostało pokazane w pracy Mobleya i in. (2002), jest ona najlepszym ze znanych przybliżeń empirycznie zmierzonej funkcji fazowej i dla pary współczynników n = 1.10 i $\mu = 3.5835$ ma przebieg w przybliżeniu zgodny z wyznaczoną empirycznie funkcją fazową Petzolda. Rysunek 2.5 prezentuje kątowy przebieg funkcji Fourniera-Foranda dla parametrów określonych w tab. 2.2.

Jednakże stosunek pomiędzy μ , n i B nie jest jednoznaczny. Na rys. 2.6 wykreślone są zależności pomiędzy μ i n dla wybranych współczynników B określone



RYSUNEK 2.5: Porównanie funkcji FF dla wybranych wartości współczynnika B. FIGURE 2.5: Fournier-Forand phase functions for selected backscatter fractions B.

TABLICA 2.2: Wartości n i μ użyte w równaniu określonym zależnością (2.10) do wygenerowania funkcji fazowych FF zaprezentowanych na rys. 2.5.

TABLE 2.2 :	The <i>n</i> and μ	values	used in	equation	(2.10)	to	generate	the	Fournier	Forand	phase
	functions	of Fig.	2.5.								

Współczynnik załamania \boldsymbol{n}	Współczynnik nachylenia μ	Współczynnik ${\cal B}$
1.021	3.0742	0.0001
1.040	3.2010	0.001
1.08	3.483	0.01
1.175	4.065	0.1
1.15	4.874	0.4

przy użyciu równania (2.10). Na krzywej dla której B = 0.0183 zaznaczono punkt, gdzie n = 1.10 a $\mu = 3.5835$, dla którego zależność (2.10) daje najlepsze dopasowanie do empirycznie wyznaczonej funkcji fazowej Petzolda. Dla każdej pary n i μ leżących na krzywej dla stałej wartości B, wyznaczona z zależności (2.10) funkcja FF przyjmie inny kształt. Jednakże Mobley i in. (2002) zauważyli, że nawet dla skrajnych wartości n i μ , z końców krzywej, gdzie B = 0.0183, funkcja FF wciąż daje dobre dopasowanie do krzywej Petzolda (średni błąd kwadratowy jest mniejszy niż 7% dla kątów od 90° do 180°, a dla kątów od 5° do 180° mniej niż 20%). Autorzy wnioskują, że dokładne określenie n i μ dla danego współczynnika B nie jest istotne w zastosowaniu tej funkcji do symulacji $R_{\rm rs}$ i przyjmują prostą zależność liniową pomiędzy n i μ :

$$n = 1.01 + 0.1542 \cdot (\mu - 3) \tag{2.12}$$

Obecnie funkcja FF jest najczęściej stosowaną postacią funkcji fazowej w symulacjach numerycznych.



- RYSUNEK 2.6: Zależność pomiędzy współczynnikiem załamania (n) i współczynnikiem nachylenia rozkładu Junge'a rozmiarów cząstek (μ) dla kilku wybranych współczynników B. Wartość B podana na każdej krzywej. Zaznaczony punkt przestawia parę n i μ , dla których funkcja FF daje najlepsze dopasowanie do funkcji Petzolda. Prosta przerywana przedstawia zależność (2.12) pomiędzy n i μ , podaną przez Mobleya i in. 2002.
- FIGURE 2.6: The Fournier-Forand backscatter fraction as a function of index of refraction (n)and Junge slope (μ) . The black dot shows the n and μ value used to generate the closest FF phase functions to Petzold's phase function. The dotted line shows equation (2.12) based on Mobley i in. (2002).

2.3 Wpływ rzeczywistych właściwości optycznych na widmo reflektancji zdalnej

Influence of inherent optical properties on remote sensing reflectance

Parametry omówione w podrozdziale 2.1 zależą od rzeczywistych właściwości optycznych (IOP), takich jak: współczynnik osłabiania światła c (który jest sumą współczynnika absorpcji a i współczynnika rozpraszania b) oraz objętościowa funkcja rozpraszania β , a zależność ta jest opisana równaniem przenoszenia energii promienistej (ang. radiative transfer equation, RTE):

$$\cos\theta \frac{dL(z,\theta,\phi)}{dz} = -c(z)L(z,\theta,\phi) + L_{\psi}(z,\theta,\phi) + L_{\nu}(z,\theta,\phi)$$
(2.13)

gdzie

$$L_{\psi} = \int_{0}^{2\pi} \int_{0}^{\pi} L(\theta', \phi', z) \beta(\theta, \phi, \theta', \phi', z) \sin \theta' d\theta' d\phi'$$

to funkcja drogowa, $\beta(\theta, \phi, \theta', \phi', z)$ to funkcja rozpraszania z kierunku (θ', ϕ') w kierunek (θ, ϕ) , a $L_{\nu}(z, \theta, \phi)$ to funkcja źródłowa. Z powodu braku analitycznego rozwiązania równania przenoszenia energii promienistej, w praktyce przyjmowane są różne jego przybliżenia. Przybliżenia te oparte są na wynikach z analiz danych rzeczywistych lub na podstawie numerycznych symulacji.

W przypadku reflektancji wyznaczonej tuż pod powierzchnią wody $R(z = 0^{-})$ zakłada się, że jest ona wprost proporcjonalna do współczynnika rozpraszania wstecz i odwrotnie proporcjonalna do współczynnika absorpcji:

$$R(\lambda, 0) = \alpha \frac{b_{\rm b}}{a} \tag{2.14}$$

gdzie α jest współczynnikiem proporcjonalności zależnym od rozkładu kierunkowego radiacji światła, wynikającego m.in. z: położenia Słońca (opisanego za pomocą kąta zenitalnego), promieniowania rozproszonego w atmosferze, stanu powierzchni morza, oraz kształtu fazowej funkcji rozpraszania. Gordon i in. (1975) a także Morel i Prieur (1977) pokazali, że dla Słońca w zenicie współczynnik proporcjonalności $\alpha \approx 0.33$. W pracy Kirka 1984 zaprezentowane są numeryczne rozwiązania zależności pomiędzy współczynnikiem α , a wysokością Słońca, i zaproponowana jest zależność:

$$\alpha \approx 0.975 - 0.629\mu_0 \tag{2.15}$$

gdzie μ_0 to kosinus kąta zenitalnego Słońca. Współczynnik α przyjmuje wartości od 0.35 do 0.56 w zależności od wysokości na której znajduje się Słońce. Inna numeryczna symulacja, przeprowadzona przez Morela i Gentili 1991, dała kolejne przybliżenie współczynnika α w postaci:

$$\alpha \approx (0.6279 - 0.2227\eta_b - 0.0513\eta_b^2) + (-0.3119 + 0.2465\eta_b)\mu_0 \tag{2.16}$$

Dla tego przybliżenia współczynnik α przyjmuje wartości z zakresu 0.29–0.63. Współczynnik η_b to stosunek rozpraszania wstecz przez cząsteczki wody do całkowitego rozpraszania wstecz. Parametr ten jest funkcją długości fali i zależny jest także od współczynnika rozpraszania światła przez cząstki zawiesiny, a w związku z tym od ilości zawiesiny w wodzie i rozkładu rozmiaru cząstek. Przyjmuje wartości od 1 dla bardzo czystej wody w niebieskim przedziale widma do wartości bliskich 0 w czerwonym zakresie widma w wodach o wysokiej zawartości zawiesiny. Gordon (1989) zbadał zależność reflektancji od stanu powierzchni morza oraz kształtu funkcji fazowej. Zauważył on, że stan morza nie wpływa na funkcję R(0) dla kąta zenitalnego Słońca $\theta_s < 60^\circ$. Natomiast związek pomiędzy R(0) a θ_s zależy od kształtu funkcji fazowej dla kąta rozpraszania większego od 40°. Także w pracy Gordona i in. (1988) zaprezentowana jest zależność reflektancji zdalnej od rzeczywistych właściwości optycznych:

$$R_{\rm rs}(\lambda) = C \frac{b_{\rm b}}{a + b_{\rm b}} \tag{2.17}$$

gdzie C to stała wyznaczana empirycznie. Gordon i Ding (1992) zbadali także wpływ pionowej stratyfikacji optycznej na widmo reflektancji. Zauważyli, że dla jednocześnie zmieniających się współczynników absorpcji a(z) i rozpraszania wstecz $b_b(z)$ wraz z głębokością, współczynnik odbicia R(0) w uwarstwionej wodzie nie różni się więcej niż kilka procent od R(0) dla wody homogenicznej. W takim przypadku współczynniki ai b_b mogą być obliczone jako średnie ważone współczynników a i b_b z profilu z i użycie zależności (2.14) jest właściwe. Jednakże dla a i b_b , które nie zmieniają się jednakowo z głębokością, użycie zależności (2.14) może powodować błędy większe niż 20% dla R(0). W takich przypadkach przewidywanie reflektancji R(0) wymaga bardziej szczegółowych kalkulacji opartych na równaniu przenoszenia energii promienistej.

Pomimo wielu ulepszeń, zależność (2.14) oraz jej dalsze modyfikacje nie dają dobrych rezultatów w przybrzeżnych wodach II rodzaju, gdzie często ilość substancji zawieszonych jest znacznie większa niż w wodach I rodzaju, a także inne są wzajemne powiązania pomiędzy nimi.

Morze Bałtyckie jest szczególnym wśród wód II rodzaju. W wodach bałtyckich, w odróżnieniu od innych wód II rodzaju, wartości współczynnika absorpcji światła przez CDOM utrzymują się na wysokim poziomie przez cały rok. W konsekwencji tego, w paśmie światła niebieskiego obniżona zostaje wartość radiacji oddolnej. Dlatego też, algorytmy satelitarne wykorzystywane dla innych akwenów nie sprawdzają się w Bałtyku. Dostosowując znane algorytmy satelitarne do wykorzystania w wodach Morza Bałtyckiego, kanały spektralne z zakresu światła niebieskiego przesunięto w kierunku fal dłuższych (Darecki i in. 2003, Kowalczuk i in. 2005). Ponadto, wody Morza Bałtyckiego, w odróżnieniu od innych mórz europejskich, mają wysoki udział cząstek organicznych w całkowitej masie zawiesiny (TSM, ang.: *total suspended matter*, Babin i in. 2003b). Jest to kolejna osobliwość tego morza powodująca konieczność tworzenia specjalnych algorytmów satelitarnych dla jego wód (Sagan 2008).

Rozdział 3

Materiały i metody

Materials and methods

W niniejszym rozdziale przedstawiono charakterystykę wykorzystywanej do pomiarów aparatury badawczej. Opisano sposób pobierania materiału eksperymentalnego, zarówno *in situ* jak i w warunkach laboratoryjnych. Przedstawiono model, który posłużył do generowania widm reflektancji zdalnej $R_{\rm rs}$, a także metody statystyczne wykorzystane do analizy danych.

3.1 Obszar badań

Study area

Przeprowadzone w pracy badania dotyczą wód Morza Bałtyckiego, a w szczególności Zatoki Gdańskiej. Morze Bałtyckie jest jednym z największych na świecie śródlądowych zbiorników wody słonawej. W klasyfikacji optycznej (Morel i Prieur 1977) są to typowe wody II rodzaju (ang. *Case2 waters*). Słaba wymiana wód z Morzem Północnym, duży dopływ wód śródlądowych w połączeniu z konsekwencjami intensywnej działalności gospodarczej gęsto zaludnionych obszarów zlewiska Bałtyku, powoduje zwiększoną eutrofizację wód, co wpływa na zwiększoną intensywność zakwitów fitoplanktonu.

Występowanie powierzchniowych zakwitów w obszarze Morza Bałtyckiego ma podobny przebieg każdego roku. Gatunki z grup okrzemek i bruzdnic dominują skład taksonomiczny fitoplanktonu w okresie wiosenno-jesiennym, natomiast w okresie letnim są to gatunki z grupy cyjanobakterii. Pierwsze wiosenne zakwity obserwowane są pod koniec kwietnia w południowo-zachodniej części Bałtyku. Od początku lipca do wczesnej jesieni, kiedy stosunek azotu do fosforu (DIN:DIP, ang. dissolved inorganic nitrogen : dissolved inorganic phosphorus) jest niski, zaczynają dominować gatunki z grupy cyjanobakterii (np. Nodularia spumigena i Aphanizomenon flos-aquae), które dzięki obecności heterocytów posiadają zdolność pobierania azotu z atmosfery. Obszar pokryty przez letnie zakwity fitoplanktonu cechuje się dużą zmiennością międzyletnią i może przekraczać nawet 25% całej powierzchni wód Bałtyku (Rud i Kahru 1995).

Zakres wartości parametrów optycznych jest zmienny w czasie i przestrzeni. Według raportów HELCOM (1996), średnia wartość stężenia chl-*a* jest równa 2.9 mg m^{-3} wiosną, 2.3 mg m^{-3} latem, oraz 2.2 mg m^{-3} jesienią. Najwyższa wartość zaobserwowana w okresie wiosennych zakwitów wynosi 70 mg m^{-3} , natomiast w trakcie występowania letnich zakwitów stężenie chl-*a* może wynosić nawet do 120 mg m^{-3} (Darecki i in. 2003, Kutser 2004, Mazur-Marzec i in. 2006).

Współczynnik absorpcji w wodach Morza Bałtyckiego zdominowany jest głównie przez CDOM. Według Kowalczuka (1999) wartość współczynnika absorpcji przez CDOM dla światła o długości fali $\lambda_0 = 400$ nm, wynosi od 0.23 do 1.84 m^{-1} dla obszarów morza otwartego, oraz od 0.26 do 2.39 m^{-1} dla obszarów przybrzeżnych. Najwyższe wartości $a_{\text{CDOM}}(400)$ są obserwowane wiosną z uwagi na największy wpływ wód rzecznych w tym okresie. Współczynnik S (2.5) wynosi od 0.004 do 0.032 dla wód morza otwartego, oraz od 0.007 do 0.031 dla wód zatokowych, i nie wykazuje zmienności sezonowej. Ponadto na wartość całkowitego współczynnika absorpcji wpływa obecność zawiesiny. Według Woźniaka i in. (2011) wartości koncentracji SPM wynoszą pomiędzy 0.36 a 15.7 g m⁻³, ze średnią wartością równą 2.42 g m⁻³.

Zakres zmienności pozornych właściwości optycznych w Morzu Bałtyckim zbadany został przez Dareckiego i in. (2003). Autorzy podają, że w okresie wczesnej wiosny, kiedy wartość stężenia chl-*a* wynosiła od 0.81 do $3.23 \,\mathrm{g}\,\mathrm{m}^{-3}$, ze średnią wartością równą 1.66 g m⁻³, wartości współczynnika $K_d(550)$ wahały się pomiędzy 0.2 a $0.8 \,\mathrm{m}^{-1}$, a $R_{\rm rs}(440)$, $R_{\rm rs}(550)$ oraz $R_{\rm rs}(660)$ wynosiły odpowiednio od 0.002 do $0.006 \,\mathrm{sr}^{-1}$, od 0.002 do $0.017 \,\mathrm{sr}^{-1}$ oraz od 0.0005 do $0.007 \,\mathrm{sr}^{-1}$. Natomiast podczas występowania wiosennego zakwitu (koniec maja), kiedy stężenie chl-*a* wynosiło od 0.6 do 70 mg m⁻³, ze średnią wartością równą 14 mg m⁻³, wartości wskazanych parametrów wynosiły odpowiednio: $K_d(550)$ od 0.2 do $1.4 \,\mathrm{m}^{-1}$, natomiast $R_{\rm rs}(440)$, $R_{\rm rs}(550)$ oraz $R_{\rm rs}(660)$ wahały się od 0.001 do $0.004 \,\mathrm{sr}^{-1}$, od 0.002 do 0.01 sr⁻¹ oraz od 0.001 do 0.007 sr⁻¹.

Darecki (1998) dokonał oceny algorytmów satelitarnych do szacowania stężenia chl-a, $a_{\rm CDOM}$, oraz SPM na podstawie reflektancji zdalnych z bogatego materiału eksperymentalnego zebranego w wodach zatokowych, przybrzeżnych, a także w otwartym morzu. Na jej podstawie wskazał on, że w przypadku wykorzystania odpowiednio dobranych kanałów spktralnych, zaproponowane algoryty nie wykazują różnic pomiędzy badanymi obszarami, a także sezonami, dla których przeprowadzone były pomiary. Występujące różnice w wielkościach badanych parametrów bardziej wpływały na błąd estymacji, aniżeli na generalną postać zależności pomiędzy analizowanymi wielkościami.

Wody Zatoki Gdańskiej łączą się z otwartym morzem, a jednocześnie są pod silnym wpływem wód rzecznych. Jest to obszar różnorodny pod względem hydro-geomorfologicznym, w jego obrębie znajdują się laguny, ujścia rzek, osłonięte i otwarte obszary przybrzeżne. Zatoka Gdańska znajduje się pod silną presją antropogeniczną.

3.2 Aparatura badawcza

Measurement equipment

Badania charakterystyk spektralnych reflektancji wymagają specjalistycznej aparatury pomiarowej, która umożliwia pomiar radiacji oddolnej L_u [W m⁻² sr⁻¹ nm⁻¹] i oświetlenia odgórnego E_d [W m⁻² nm⁻¹] z odpowiednią dokładnością oraz rozdzielczością spektralną. W ramach prezentowanej pracy, pomiary L_u i E_d wykonywane były przy użyciu hiperspektralnych radiometrów firmy TriOS z serii RAMSES. Mierniki te posiadają 190 kanałów spektralnych, o rozdzielczości 3.3 nm, mierzących promieniowanie elektromagnetyczne w zakresie od 320 do 950 nm. Dokładność spektralna przyrządu podczas pomiaru oświetlenia i radiacji to 0.3 nm. Mierniki wyposażone są w detektory, którymi są fotodiody krzemowe. Niewielkie wymiary przyrządów (średnica przyrządu wynosi od 1.5 do 5 cm, długość 30 cm, a masa 1 kg) pozwalają na swobodne ich użycie podczas pomiarów w morzu, ale także w pomiarach laboratoryjnych.

Hiperspektralny miernik do pomiaru oświetlenia RAMSES-ACC Miernik oświetlenia wektorowego wykorzystany podczas pomiarów wyposażony jest w kolektor Lamberta rozpraszający światło (zwany także dyfuzorem optycznym) (rys. 3.1a). Kolektor ten wykonany jest z mlecznego szkła krzemionkowego w kształcie płaskiego krążka, które charakteryzuje się niskim współczynnikiem absorpcji i załamania światła względem wody oraz silnym rozpraszaniem światła.

Hiperspektralny miernik radiacji RAMSES-MRC Okno detektora w mierniku RAMSES-MRC (rys. 3.1b) ma średnicę równą 1.5 cm, co istotnie minimalizuje efekt samozacieniania (Mueller i Austin 1992). Jego system optyczny zbudowany jest ze światłowodu oraz soczewki wykonanej ze szkła kwarcowego. Światłowód umieszczony jest względem soczewki w odległości mniejszej niż ogniskowa soczewki, dając kąt detekcji (ang. *Field of View* FOV) równy w powietrzu 20°.



RYSUNEK 3.1: Optyczny układ mierników. FIGURE 3.1: Optical layout of the sensors.

Oba mierniki połączone były z zasilaczem, ten zaś z komputerem na którym zainstalowane było oprogramowanie MSDA_XE (Multi Sensor Data Acquisition System - EXtended Edition) pozwalające na stałą kontrolę podłączonych mierników, a także na wybór odpowiedniej kalibracji w zależności od warunków pomiaru.

3.3 Pomiary właściwości optycznych w morzu

Measurements of optical properties within the aquatic environment

Część materiału eksperymentalnego zebrano w ramach jednodniowych rejsów statkiem badawczych k/h Oceanograf-2. W ich trakcie wykonano pomiary radiometryczne oraz biooptyczne próbek wody. Poniżej opisano czas i miejsce, a także metodykę ich wykonywania. Przedstawiono również mierzone parametry biooptyczne.

3.3.1 Miejsce i czas pobierania próbek

Measuring time and place

Pomiary wykonano w trakcie 19 jednodniowych rejsów badawczych przeprowadzonych w latach 2012 i 2013, w miesiącach od maja do września, łącznie uzyskując ponad 80 zestawów danych (rys. 3.2).



RYSUNEK 3.2: Liczba pomiarów przeprowadzonych w poszczególnych miesiącach w latach 2012 i 2013.

FIGURE 3.2: Number of the measurements carried on at different months in 2012 and 2013.

3.1:	Coordina	tes of the	e measuring	s
	Stacja	φ [°]	λ [°]	
	P101	54.54	18.61	
	P104	54.58	18.79	
	P110c	54.50	18.94	

54.50

54.44

54.44

18.79 18.92

18.75

P110d

P115c

P115d

TABLICA 3.1: Współrzędne stacji pomiarowych. TABLE 3.1: Coordinates of the measuring stations.

Pomiary wykonywane były na Zatoce Gdańskiej, na 6 równomiernie rozmieszczonych stacjach (tab. 3.1), których usytuowanie przedstawione jest na rys. 3.3. Dla każdej stacji, pomiary powtarzano wielokrotnie. Pomimo iż obszar badań jest stosunkowo niewielki, stacje rozmieszczono w różnorodnych miejscach, pod względem ich charakterystyk optycznych. Reprezentują one obszary o różnej głębokości, w rejonie otwartego morza, wód przybrzeżnych, w tym także będących pod dużym wpływem wód rzecznych.


RYSUNEK 3.3: Rozmieszczenie stacji pomiarowych w obszarze Zatoki Gdańskiej. FIGURE 3.3: Distribution of the measuring stations in the Gulf of Gdansk.

3.3.2 Pomiary radiometryczne

Radiometric measurements

Podstawowym parametrem mierzonym w trakcie zbierania materiału eksperymentalnego do niniejszej pracy była radiacja oddolna $L_u(0^-)$ [mW m⁻² sr⁻¹ nm⁻¹] mierzona za pomocą hiperspektralnego miernika RAMSES TriOS (opis podano w podrozdziale 3.2). Dodatkowo w tym samym czasie wykonywano pomiary oświetlenia odgórnego E_d [mW m⁻² nm⁻¹] (rys. 3.4).

Miernik radiacji przymocowano do stelaża wykonanego z rur PCV, unoszącego się na powierzchni wody (rys. 3.5). Umieszczono go na takim poziomie względem stelaża, aby detektor zanurzony był tuż pod powierzchnią wody. Natomiast, miernik oświetlenia umieszczono na pokładzie statku z detektorem skierowanym pionowo do góry (rys. 3.5). Według Muellera i Austina (1992), dla uniknięcia negatywnego wpływu cienia statku na mierzone pole światła, pomiary radiacji oddolnej powinny być wykonane po stronie słonecznej jego kadłuba, w odległości co najmniej ξ_L , określonej zależnością:

$$\xi_L = \frac{1.5}{K_L(\lambda)} \tag{3.1}$$



RYSUNEK 3.4: Oświetlenie odgórne dochodzące do powierzchni wody podczas przeprowadzonych pomiarów *in situ* (wartość średnia — linia ciągła, zakres zmienności określony za pomocą odchylenia standardowego — linia przerywana).

FIGURE 3.4: Downwelling irradiance during in situ measurements (the average — solid line, and the one-sigma confidence intervals —dashed lines).



RYSUNEK 3.5: Zdjęcia mierników RAMSES TriOS podczas wykonywania pomiarów na jednostce badawczej k/h Oceanograf-2.

FIGURE 3.5: Pictures of RAMSES TriOS sensors placed on r/v Oceanograf-2 during in situ measurements.

gdzie K_L to współczynnik osłabiania radiacji oddolnej. W materiale badawczym użytym w niniejszej pracy wartości współczynnika osłabiania oświetlenia odgórnego K_d były minimalne dla $\lambda \approx 580$ nm i mieściły się w zakresie 0.1 do 0.46 m⁻¹. Z wystarczającą w tym przypadku dokładnością można przyjąć, że wartości współczynników K_L są tej samej

wielkości co wartości współczynników K_d . Szacowana na tej podstawie odległość przy której pomiar może być wykonany bez wpływu cienia statku to 3.3 do 15 m. Wszystkie pomiary radiacji oddolnej wzięte do analiz wykonane były po słonecznej stronie kadłuba statku w odległości co najmniej 30 m, dzięki czemu można założyć, że są one wolne od błędu spowodowanego wpływem jego cienia.

Kolejnym istotnym do rozważenia efektem, który może wpłynąć na dokładność pomiaru radiacji oddolnej jest tzw. efekt samozacienienia się przyrządu. Gordon i Ding (1992) definiują błąd wynikający z tego efektu jako:

$$\varepsilon \equiv \frac{L_u^R - L_u^P}{L_u^R} \tag{3.2}$$

gdzie L_u^R to rzeczywista wielkość radiacji oddolnej, a L_u^P to wartość zmierzona. Na podstawie zależności geometrycznych wspartych modelowaniem Monte Carlo otrzymali oni wyrażenie na ten błąd w postaci:

$$\varepsilon = 1 - \exp(-k \cdot K_L \cdot r) \tag{3.3}$$

gdzie r to promień przyrządu, K_L współczynnik osłabiania radiacji oddolnej, a współczynnik k, który według modyfikacji zaproponowanej przez Zibordiegio i Ferrariego (1995), zależny jest od średnicy detektora oraz obudowy miernika i opisany jest równaniem:

$$k \cdot \operatorname{tg} \theta_{0w} = (1 - f) \cdot k_p \cdot \operatorname{tg} \theta_{0w} + f \cdot k_c \cdot \operatorname{tg} \theta_{0w}$$
(3.4)

gdzie f to stosunek średnicy detektora do średnicy przyrządu, θ_{0w} to kąt zenitalny Słońca (θ_0) w wodzie. Natomiast k_p i k_c to odpowiednio współczynniki k dla detektora punktowego, oraz dla detektora zajmującego całą średnicę przyrządu, opisane równaniami:

$$k_p \cdot \mathrm{tg}\,\theta_{0w} = 2.07 + 0.0056 \cdot \theta_0 \tag{3.5}$$

$$k_c \cdot \mathrm{tg}\,\theta_{0w} = 1.59 + 0.0063 \cdot \theta_0 \tag{3.6}$$

Dla miernika RAMSES MRC, gdzie średnica detektora równa jest zaledwie 1.5 cm, spodziewany jest niewielki wpływ efektu samozacienienia przyrządu na wartość L_u^P . Średni błąd ε policzony dla danych eksperymentalnych (rys. 3.6) wynosi mniej niż 1% dla radiacji z zakresu spektralnego pomiędzy 500 a 600 nm, oraz mniej niż 3% dla danych z zakresu 400–720 nm. Dla zakresu spektralnego z bliskiej podczerwieni błąd jest większy niż 3%, ale wciąż nie przekracza 10%. Dlatego uznano, że błąd wynikający z samozacieniania się przyrządu ma zaniedbywalny wpływ na wartość L_u^P i w dalszej części pracy zmierzone wartości L_u^P wzięto do analiz bezpośrednio z pomiaru.



RYSUNEK 3.6: Spektralna zależność błędu wywołanego efektem samozacieniania się miernika radiacji oddolnej (wartość średnia — linia ciągła, zakres zmienności określony za pomocą odchylenia standardowego — linia przerywana).

FIGURE 3.6: Spectral dependence of the self-shading error of radiance sensor (the average — solid line, and the one-sigma confidence intervals —dashed lines).

Przy wykorzystaniu zmierzonych wartości $L_u(0^-)$ i $E_d(0^+)$ obliczona została reflektancja zdalna $R_{\rm rs}$ z zależności:

$$R_{\rm rs}(0^+,\lambda) = \frac{L_u(0^+,\lambda)}{E_d(0^+,\lambda)}$$
(3.7)

Radiację oddolną $L_u(0^-)$ zmierzono tuż pod powierzchnią wody. W celu wyznaczenia $R_{\rm rs}$ wymagana była radiacja oddolna określona nad powierzchnia wody. Osiągnięto to przeliczając radiację zmierzoną pod powierzchnia wody zgodnie ze standardowymi procedurami (przy wykorzystaniu tzw. *immersion factor*, Mueller i Austin 1992). Następnie, dzieląc obie wielkości przez siebie wyznaczone zostało $R_{\rm rs}$.

3.3.3 Pomiary biooptyczne

Biooptical measurements

W trakcie wykonywania pomiarów radiometrycznych pobierano próbki wody powierzchniowej do późniejszej analizy laboratoryjnej w celu wyznaczenia następujących parametrów: stężenia chl-*a* (wykonane w laboratorium Optyki Morza IO UG według standardowych metod proponowanych przez HELCOM (1996)), stężenia barwników z grupy fikobilin (wykonane w Pracowni Biofizyki Morza IO PAN według metodyki proponowanej przez Sobiechowską i in. (2014)), składu taksonomicznego fitoplanktonu (wykonane w Pracowni Ekologii Biochemicznej Mikroorganizmów IO UG według metod proponowanych przez HELCOM (1988)). W trakcie trwania rejsów badawczych próbki wody przygotowywano i konserwowano do późniejszej analizy laboratoryjnej.

Do analizy spektrofotometrycznej w celu wyznaczenia stężenia chl-a wodę morską pobraną z powierzchni (w objętościach od 1000 do 2000 ml, w zależności od zawartości zawiesiny organicznej), filtrowano na sączkach z włókna szklanego GF/F (Whatman) o średnicy 47 mm, pod ciśnieniem nie przekraczającym 0.4 atm. Po zakończeniu filtracji z sączka usuwano nadmiar wody, następnie składano go materiałem biologicznym do środka, wkładano do opisanego pojemnika, i zamrażano w ciekłym azocie (-196°C).

Przygotowanie próbek do wyznaczenia stężenia fikobilin przeprowadzano podobnie jak próbki do analizy stężenia chl-*a*, jedyną różnicą był rozmiar sączka (średnica 25 mm) oraz ilość filtrowanej wody (od 200 do 500 ml wody, w zależności od zawartości zawiesiny organicznej).

W celu określenia składu gatunkowego fitoplanktonu, powierzchniową wodę morską przenoszono do butelek o pojemności $250 \,\mathrm{cm}^3$ oraz konserwowano płynem Lugola bezpośrednio po pobraniu.

Po zakończonych rejsach badawczych wszystkie próbki przechowywane były w warunkach głębokiego zamrożenia (-80°C) do czasu podjęcia analiz laboratoryjnych.

3.4 Laboratoryjne pomiary reflektancji monokultur fitoplanktonu morskiego

Laboratory measurements of the reflectance of phytoplankton monocultures

W celu pozyskania unikatowych widm reflektancji wody charakterystycznych dla poszczególnych wybranych gatunków fitoplanktonu morskiego przeprowadzono pomiary pozornych właściwości optycznych wody morskiej w kontrolowanych warunkach laboratoryjnych. Mierzono widma radiacji oddolnej L_u wraz z oświetleniem odgórnym E_d . Przeprowadzone badania umożliwiły pomiar właściwości optycznych determinowanych przez poszczególne gatunki fitoplanktonu przy znanych i stałych warunkach zewnętrznych, m.in. oświetlenia, temperatury, zasolenia. Uzyskane charakterystyki widmowe reflektancji poszczególnych gatunków wykorzystano do opracowania i kalibracji modelu, który posłużył do generowania widm $R_{\rm rs}$ determinowanych przez kontrolowany skład wybranych glonów morskich, dalej skrótowo określanym mieszaniną glonów. Na ich podstawie zbadano możliwość rozpoznania gatunku fitoplanktonu dominującego w badanej mieszaninie glonów.

3.4.1 Charakterystyka badanych kultur oraz warunki hodowli

Characteristics of the studied monocultures and growth conditions

Do badań wybrano 3 gatunki fitoplanktonu z grupy cyjanobakterii, czesto występujące w letnich zakwitach w wodach Morza Bałtyckiego: Nodularia spumigena, Aphanizomenon flos-aquae i Anabaena sp. (m.in. Kahru i in. 1994, Karjalainen i in. 2007, Mazur-Marzec i in. 2006, Sivonen i in. 2007). W porze letniej, kiedy występują najkorzystniejsze dla nich warunki rozwojowe, cyjanobakterie wypierają inne gatunki (Mej i Lechowski 2000). Dzięki posiadaniu heterocytów mają one zdolność rozwoju przy niskim stosunku azotu do fosforu (DIN:DIP) w wodzie. Obecność w ich komórkach barwników pomocniczych sprawia, że mogą wykorzystywać szerokie spektrum promieniowania słonecznego, a zdolność wytwarzania wodniczek gazowych (tzw. aerotopów) umożliwia regulację natężenia światła i soli odżywczych poprzez zmianę położenia komórki w toni wodnej (Chorus i Bartram 1999, Mazur i Pliński 2009, Mej i Lechowski 2000, Paerl i Fulton 2006). Barwniki zawarte w komórkach cyjanobakterii to: chlorofil a (brak chlorofilu bi c), beta-karoten, fikocyjanina, oraz w mniejszej ilości: flawicyna, miksoksantyna, fikoksantyna, miksoksantofin, fikoerytryna i inne (Pliński 1988). N. spumigena (tab. 3.2) jest gatunkiem toksycznym, często dominującym w czasie letnich zakwitów w wodach Morza Bałtyckiego, bardzo szeroko opisanym w literaturze (m.in. Edler i in. 1985, Hajdu i in. 2007, Mazur i Pliński 2003, Mazur-Marzec i in. 2005, 2006, Nehring 1993, Pliński i Jóźwiak 1996, Sivonen i in. 1989). Warunkami optymalnymi dla jej rozwoju jest woda o temperaturze 25–28°C, wysoki poziom promieniowania fotosyntetycznie aktywnego oraz zasolenie w zakresie 5–13‰. N. spumigena występuje i współtworzy zakwity jednocześnie z nietoksycznym gatunkiem Aphanizomenon flos-aquae, dla którego optimum temperaturowe to $16-22^{\circ}$ C (Mazur-Marzec i in. 2006). Natomiast Anabaena sp. jest gatunkiem potencjalnie toksycznym, ale nie dominującym w biomasie fitoplanktonu podczas zakwitu w wodach Morza Bałtyckiego. Najlepsze warunki do wzrostu tego gatunku to temperatura około 18°C i zasolenie 7‰.

Wybrane do badań gatunki pochodziły z kolekcji Pracowni Ekologii Biochemicznej Mikroorganizmów Instytutu Oceanografii Uniwersytetu Gdańskiego, gdzie hodowane były w szklanych kolbach o pojemności 1000 cm³. Hodowle zakładano w komorze z laminarnym przepływem sterylnego powietrza (firmy Heraeus HeraSafe). Jako podłoża użyto



TABLICA 3.2: Zdjęcia badanych gatunków fitoplanktonu (www.sinice.pl). TABLE 3.2: Pictures of the studied phytoplankton species (www.sinice.pl).

płynnej pożywki BG11 o zasoleniu 7‰, sterylizowanej w autoklawie. Szczep hodowano w komorze fitotronowej w świetle o natężeniu 14 μ E m⁻² s⁻¹ w cyklu dobowym: 10 godzin światła i 14 godzin ciemności, w temperaturze 22°C.

3.4.2 Stanowisko pomiarowe

Experimental setup

Pomiary radiometryczne monokultur fitoplanktonu o różnych koncentracjach przeprowadzono w cylindrycznym zbiorniku wykonanym z laminatu poliestrowo-szklanego, wewnątrz wykończonym kolorem czarnym, matowym w celu uniknięcia odblasków światła (rys. 3.7). Dla stężeń chl-*a* poniżej 100 mg m⁻³ użyto dużego zbiornika o średnicy 1.2 m i wysokości 1.4 m, natomiast przy stężeniach wyższych niż 100 mg m⁻³ pomiary wykonano w mniejszym zbiorniku, gdzie średnica i wysokość były równe odpowiednio 0.5 m i 0.4 m. Aby zminimalizować do wartości nieistotnych wpływ ścianek i dna na wartości mierzonych parametrów optycznych, rozmiar i kształt zbiornika dobrano odpowiednio do stosowanych koncentracji fitoplanktonu. Dla pomiarów wykonanych przy najniższym stężeniu chl-*a* (8 mg m⁻³) minimalna wartość współczynnika osłabiania odgórnego oświetlenia dyfuzyjnego K_d występowała dla długości fali 540 nm i wynosiła 0.62 m⁻¹. Nawet w takim skrajnym wypadku, prawie 90% odbitej do góry i mierzonej radiacji pochodzi z warstwy wody nad dnem zbiornika, przy hipotetycznym założeniu że dno jest "świecące" lub lustrzane. W praktyce, dno zbiornika było czarne, ze współczynnikiem odbicia



RYSUNEK 3.7: Schemat ustawienia stanowiska pomiarowego. FIGURE 3.7: Experimental setup.

dla 540nm równym około 1%. Powyższy wywód pozwolił przyjąć założenie, że w wypadku badanych w laboratorium wysokich stężeń fitoplanktonu, efekt odbicia od dna i skończona głębokość zbiornika nie miały wpływu na wielkość mierzonej radiacji oddolnej. Warto jeszcze zaznaczyć, że gdy opracowywany model był weryfikowany, wprowadzono do niego parametry zbiornika i funkcję odbicia jego dna, co w praktyce nie zmieniło rezultatów, ale dało pewność, że nie miał on wpływu na otrzymane wielkości.

Podczas wykonywania pomiarów optycznych ważnym było stworzenie odpowiednich, stałych warunków oświetlenia. Dlatego pomiary wykonywano w zaciemnionym pomieszczeniu, a zbiornik był oświetlony jednym stabilnym źródłem światła sztucznego o znanej charakterystyce widmowej (rys. 3.8). Pozwalało to wykonywać pomiary w kolejnych seriach przy takim samym oświetleniu. Stanowisko pomiarowe oświetlono lampą żarową, przymocowaną do stabilnego stelaża o wysokości 2.95 m ustawionego w odległości 1.9 m od środka zbiornika w linii prostej (rys. 3.7), która emitowała ciągłe i gładkie widmo (rys. 3.8). Do wody w zbiorniku dodano chlorek sodu (NaCl), w ilości koniecznej do uzyskania zasolenia wody w przybliżeniu 7‰, które odpowiada średniej wartości zasolenia wody powierzchniowej w Morzu Bałtyckim (Mazur-Marzec 2011).

W trakcie pomiarów zmierzono także reflektancję oświetlenia R dna dla dwóch wykorzystywanych zbiorników (rys. 3.9); pomiar ten był w późniejszym etapie wykorzystany do modelowania warunków brzegowych.



RYSUNEK 3.8: Widmo oświetlenia zewnętrznego stosowanego podczas pomiarów laboratoryjnych, oraz wprowadzone do modelu.

FIGURE 3.8: Irradiance spectrum used in laboratory measurements.



RYSUNEK 3.9: Reflektancja dna małego i dużego zbiornika używanego podczas pomiarów laboratoryjnych i wprowadzona do modelu.

FIGURE 3.9: Irradiance reflectance of the bottom of the small and large tank used in laboratory measurements.

3.4.3 Wykonane pomiary laboratoryjne

Laboratory measurements

W trakcie pomiarów laboratoryjnych mierzono radiację oddolną $L_u(0^-)$, tuż pod powierzchnią wody, radiometrem skierowanym pionowo w dół, umieszczonym na środku zbiornika, oraz oświetlenie odgórne E_d , tuż nad powierzchnią wody, z czujnikiem skierowanym pionowo do góry. Miernik oświetlenia w dużym zbiorniku umieszczono na środku, zaś w małym zbiorniku bezpośrednio przy jego zewnętrznej ściance. Wszystkie pomiary wykonywano pięciokrotnie, a następnie uśredniano. Parametry radiometryczne zmierzono dla każdej badanej monokultury fitoplanktonu przy kilku stężeniach chl-a. Jedna seria pomiarowa trwała około 3–4 godziny, w trakcie których mieszano wodę w celu zachowania homogeniczności słupa wody w zbiorniku. Podczas wykonywania pomiarów radiometrycznych pobierano próbki wody do laboratoryjnego określenia współczynnika osłabiania c i absorpcji a światła, a także stężenia chl-a przy użyciu spektrofotometru UV-VIS Perkin Elmer Lambda 850. Pomiar współczynników c i a wykonywano według metodyki zaproponowanej w pracach Stramskiego i Piskozuba (2003) oraz Stramskiego i in. (2002), natomiast stężenie chl-a według metodyki zaproponowanej przez HELCOM (1988).

3.5 Model Hydrolight-Ecolight wersja 5.2

Hydrolight-Ecolight model version 5.2

Opisane w podrozdziale 3.4 pomiary laboratoryjne posłużyły do modyfikacji i weryfikacji modeli Hydrolight-Ecolight. Hydrolight-Ecolight 5.2 (HE52) to pakiet oprogramowania składający się z numerycznych modeli przenoszenia energii promienistej, które rozwiązują bezczasowe równania przenoszenia energii promienistej (RTE) obliczając przestrzenne zmiany radiacji w naturalnych zbiornikach wodnych w zależności od rzeczywistych właściwości optycznych (IOP). Dane wejściowe do modeli zawierają informacje o absorpcyjnych oraz rozpraszających właściwościach badanego zbiornika wody, oraz o warunkach zewnętrznych, takich jak prędkość wiatru, stan powierzchni wody, reflektancja dna zbiornika, oświetlenie, oraz stan zachmurzenia. Pakiet oprogramowania HE52 zawiera kilka wbudowanych modeli, definiujących odpowiednimi zależnościami rzeczywiste właściwości optyczne wody, takie jak współczynnik absorpcji a, współczynnik rozpraszania b, oraz fazową funkcję rozpraszania (Mobley 1994, Mobley i Sundman 2013).

W niniejszej pracy, do przeprowadzonych analiz w zakresie spektralnym 400–700 nm, wykorzystane zostały dwa z wbudowanych modeli: model "Case2 IOPs" oraz "Measured IOPs" (tab. 3.3).

Nazwa modelu	Składniki	Opis		
"Case2 IOPs"	1. czysta woda	Czteroskładnikowy model o sze-		
	2. fitoplankton	rokim zakresie zastosowań. Stwo-		
	3. CDOM	rzony głównie z myślą o wodach		
	4. zawiesina mineralna	II rodzaju.		
"Measured IOPs"		Model pozwalający na bezpośred-		
	1. czysta woda	nie wykorzystanie pomiarów wy-		
	2. suma wszystkich	konanych przy użyciu miernika		
	składników wody	typu ac-9 jako danych wejścio-		
	mających wpływ na	wych. Umożliwia wprowadzenie		
	właściwości optyczne	do obliczeń funkcji fazowej FF za-		
		leżnej od długości fali światła.		

TABLICA 3.3: Wykorzystane w pracy modele HE52 (Mobley i Sundman 2013) TABLE 3.3: *HE52 models used in the thesis (Mobley i Sundman 2013)*

3.5.1 Model "Case2 IOPs"

 $``Case 2 \ IOPs" \ model$

"Case2 IOPs" to czteroskładnikowy model o szerokim zakresie zastosowań, stworzony z myślą o wodach II rodzaju, gdzie oprócz fitoplanktonu znaczącym optycznie składnikiem jest CDOM. Wymaga wprowadzenia IOP dla każdego ze składników modelu oddzielnie.

A. Czysta woda

W modelu wykorzystano widmo absorpcji światła przez czystą wodę morską (rys. 3.10) oparte na wcześniej opublikowanych badaniach (Pope i Fry 1997). Współczynnik rozpraszania (rys. 3.10) określony został zależnością zaproponowaną przez Morela (1974):

$$b = 16.06 \cdot 1.80 \cdot 10^{-4} \cdot (500/\lambda)^{4.32}$$
(3.8)

Funkcja fazowa w modelu czystej wody wyznaczona była za pomocą zależności:

$$\tilde{\beta} = 0.06225 \cdot (1 + 0.835 \cos^2 \psi)$$

(równanie 3.30 w Mobley 1994).



RYSUNEK 3.10: Współczynniki absorpcji i rozpraszania światła przez czystą wodę wykorzystane w modelu HE52.
FIGURE 3.10: The pure water IOPs used in the HE52 model.

B. Fitoplankton

W celu określenia rzeczywistych właściwości optycznych cząstek fitoplanktonu, do modelu wprowadzano zmierzone widma specyficznych współczynników absorpcji a^* i rozpraszania b^* jako funkcje długości fali oraz wartości stężenia chl-a wyrażonych odpowiednio w $[m^2 mg^{-1}]$ oraz $[mg m^{-3}]$. Następnie współczynnik absorpcji światła przez fitoplankton obliczany był z zależności:

$$a_{\text{fito}}(z,\lambda) = a^*(\lambda) \cdot C_a(z) \tag{3.9}$$

natomiast współczynnik rozpraszania z zależności:

$$b_{\rm fito}(z,\lambda) = b^*(\lambda) \cdot C_a(z) \tag{3.10}$$

gdzie $a_{\rm fito}$ i $b_{\rm fito}$ są to współczynniki absorpcji i rozpraszania światła przez cząstki fitoplanktonu w funkcji głębokości z i długości fali λ , $a^*(\lambda)$ i $b^*(\lambda)$ to specyficzne współczynniki absorpcji i rozpraszania w funkcji długości fali, natomiast $C_a(z)$ to funkcja opisująca zależność stężenia chl-a od głębokości. Gdy brak jest zmierzonych widm absorpcji, w modelu HE52, jako domyślne przyjmowane jest widmo $a^*_{\rm fito}(\lambda)$ uzyskane na podstawie pracy Prieur i Sathyendranath (1981) (rys. 3.11). Natomiast domyślne widmo rozpraszania b^*_p nie zostało zaproponowane w modelu HE52 i musi ono być zdefiniowane przez użytkownika.



 RYSUNEK 3.11: Widmo specyficznego współczynnika absorpcji a^{*}_{fito}(λ) proponowane w modelu "Case2 IOPs" HE52 na podstawie pracy Prieur i Sathyendranath (1981).
 FIGURE 3.11: Chlorophyll-specific absorption coefficient used as a default a^{*}_{fito}(λ) in the "Case2 IOPs" HE52 model based on Prieur i Sathyendranath (1981).

Kolejnym z parametrów wejściowych do modelu, charakteryzującym właściwości optyczne fitoplanktonu i mającym znaczny wpływ na poprawność wyników symulacji, jest fazowa funkcja rozpraszania światła. Dla cząstek zawieszonych, w tym cząstek fitoplanktonu, znanych jest kilka przybliżeń funkcji fazowych, które mogą być użyte w numerycznych symulacjach światła w morzu. W modelu "Case2 IOPs" istnieje możliwość wyboru jednej z kilku różnych funkcji fazowych dla całego widma. Wszystkie z nich opisano w podrozdziale 2.2.3. Funkcje fazowe Fourniera–Foranda użyte w modelach HE52 parametryzowane są za pomocą współczynnika B, zgodnie z formułą (2.11) zaproponowaną przez Mobleya i in. (2002), opisaną w podrozdziale 2.2.3. Parametryzacja ta może nie być uniwersalną i posiadać ograniczenia w wykorzystywaniu do wód Morza Bałtyckiego (Freda 2011). Dlatego też w niniejszej pracy dokonano walidacji funkcji fazowych FF sparametryzowanych współczynnikiem B przy wykorzystaniu wyników z przeprowadzonych pomiarów laboratoryjnych.

C. CDOM

Przyjmuje się, że CDOM nie ma właściwości rozpraszających, natomiast właściwości absorpcyjne w modelu HE52 wyznaczone są przez zależność:

$$a_{\text{CDOM}}(z,\lambda) = a_{\text{CDOM}}(z,\lambda_0) \exp\left[-S(\lambda-\lambda_0)\right]$$
(3.11)

gdzie $a_{\text{CDOM}}(z, \lambda)$ to współczynnik absorpcji światła przez CDOM w funkcji głębokości i długości fali, $a_{\text{CDOM}}(z, \lambda_0)$ to wartość współczynnika absorpcji dla λ_0 na badanej głębokości, natomiast S to nachylenie widma absorpcji. W niniejszej pracy $a_{\text{CDOM}}(z, \lambda_0)$ oraz S wykorzystane w modelowaniu zaczerpnięto z badań Kowalczuka dotyczących właściwości absorpcyjnych CDOM w Morzu Bałtyckim (Kowalczuk i Kaczmarek 1996, Kowalczuk i in. 2005).

D. Zawiesina mineralna

Dla zawiesiny mineralnej właściwości IOP określać należy w ten sam sposób, jak dla cząstek fitoplanktonu, z tą różnicą, że w przypadku substancji mineralnych nie zawierających chl-*a* ilość zawiesiny wyznacza się poprzez określenie koncentracji cząstek zawieszonych w $[g m^{-3}]$ (Mobley i Sundman 2013).

3.5.2 Model "Measured IOPs"

"Measured IOPs" model

W modelu "Measured IOPs" rzeczywiste właściwości optyczne wody wprowadzone są jako suma właściwości optycznych wszystkich zawieszonych i rozpuszczonych składników wody morskiej, w odróżnieniu od "Case2 IOPs", gdzie każdy składnik scharakteryzowany jest osobno. Model ten został stworzony głównie z myślą o wykorzystaniu w nim danych z mierników takich jak ac-9, które mierzą całkowity współczynnik absorpcji *a* oraz osłabiania *c* w wodzie. Wprowadzone dane zostają "rozdzielone" na dwa składniki: czystą wodę i pozostałe optycznie znaczące komponenty wody morskiej. IOP czystej wody, zdefiniowano tak jak w modelu "Case2 IOPs". Natomiast IOP dla drugiego składnika wprowadza się jako całkowity współczynnik $a(z, \lambda)$ i $c(z, \lambda)$, w zależności od głębokości i długości fali promieniowania. Ważną zaletą modelu "Measured IOPs" i jego przewagą nad "Case2 IOPs" jest możliwość wprowadzenia fazowej funkcji rozpraszania zależnej od długości fali, co też zostało wykorzystane w proponowanej modyfikacji modelu.

3.5.3 Określenie warunków brzegowych

Determination of boundary conditions

A. Modelowanie optycznych charakterystyk dna

Wykorzystując HE52 można modelować $R_{\rm rs}$ dla zbiornika wodnego, gdzie dno jest nieskończenie głębokie, jak również na zadanej głębokości. Dla zbiornika, gdzie dno nie wpływa na wielkość $R_{\rm rs}$ w modelu przyjmowane jest dno nieskończenie głębokie. Natomiast przy symulacji dla dna na skończonej głębokości przyjmuje się, że jest ono powierzchnią matową spełniającą prawo Lamberta, której reflektancja jest definiowana przez użytkownika. HE52 ma wbudowanych kilkanaście widm reflektancji dla różnych typów dna, jak również posiada możliwość samodzielnego wprowadzenia wartości R dla dna zbiornika wody wykorzystywanego w symulacjach.

B. Modelowanie optycznych charakterystyk powierzchni wody

Oprogramowanie HE52 uwzględnia wpływ stanu powierzchni wody na reflektancję wykorzystując statystyczne rozkłady prędkości wiatru i wysokości fal (Cox i Munk 1954a,b), równanie Fresnela wiążące rzeczywistą część współczynnika załamania światła z temperaturą i zasoleniem wody, oraz symulacje Monte Carlo (Mobley i Sundman 2013).

C. Modelowanie oświetlenia zewnętrznego

Do poprawnej symulacji $R_{\rm rs}$, model HE52 musi "znać" radiację dochodzącą do toni wodnej ze wszystkich kierunków dla każdej długości fali, dla której wykonywana jest symulacja. W tym celu w modelu określano widmo całkowitego oświetlenia odgórnego w $[W m^{-2} nm^{-1}]$ jako funkcję długości fali, które rozdzielano na bezpośrednie oświetlenie promieniami słonecznymi oraz oświetlenie dyfuzyjne (promieniowanie rozproszone w atmosferze). W HE52 modelowana jest także transmitancja atmosfery. W tym celu wymagane jest wskazanie pozycji Słońca na niebie. Dodatkowo należy określić wielkość zachmurzenia w procentach. Wszystkie powyższe dane model HE52 wykorzystuje do wyznaczenia funkcji rozkładu kątowego dopływu radiacji światła z całej półsfery nieboskłonu do powierzchni morza (Mobley i Sundman 2013).

3.6 Metody statystyczne wykorzystane w pracy

Statistical methods

W poniższym podrozdziale przedstawione zostaną wszystkie wielkości i metody statystyczne wykorzystane do analizy danych w niniejszej pracy.

3.6.1 Opracowanie i ocena algorytmów

Development of the algorithms and evaluation criteria

Algorytmy na stężenie fikocyjaniny (PC) tworzone były przy wykorzystaniu regresji liniowej funkcji typu:

$$Y = k + l \cdot X \tag{3.12}$$

gdzie zmienną zależną (Y) było stężenie PC, natomiast zmienną niezależną (X) była wartość $R_{\rm rs}$ lub stosunek jej wartości dla różnych długości fali, a k i l to współczynniki regresji. Badano też związki pomiędzy logarytmicznymi transformacjami zmiennych X i Y. Regresja liniowa wykonywana była przy użyciu funkcji **regress** w oprogramowaniu MATLAB. Zauważono, że wartości stężenia PC dobrze korelują się z wieloma różnymi stosunkami pomiędzy wartościami $R_{\rm rs}$ w wybranych kanałach spektralnych.

W celu stworzenia algorytmu na stężenie PC z kombinacji liniowej, wartości stosunków $R_{\rm rs}$ różnych długości fali wykorzystano regresję krokową (ang. *stepwise regression*) funkcji typu:

$$Y = k_0 + k_1 X_1 + k_2 X_2 + \dots + k_n X_n$$
(3.13)

gdzie zmienną X_i była wartość stosunku $R_{\rm rs}$ dla różnych długości fali, a $k_0, k_1, k_2, ..., k_n$ to współczynniki regresji. Metoda ta pozwala na dobór odpowiednich zmiennych niezależnych z pominięciem tych słabo lub nie wpływających na zmienną zależną. Procedura regresji krokowej opiera się na krokowym (jedna zmienna — jeden krok) wprowadzaniu zmiennych do modelu. W każdym kroku liczono statystykę błędu i w oparciu o wartości progowe p (ang. *p-value*, *probability value*) oceniano istotność wprowadzonej zmiennej w kontekście predykcji wartości oczekiwanej. Następnie zmienna dołączana była do modelu lub odrzucana. Metoda ta wykorzystywana była przy użyciu funkcji **stepwisefit** w oprogramowaniu MATLAB.

Szacowanie wartości współczynników k i l w (3.12) oraz k_i w (3.13) przeprowadzono metodą najmniejszych kwadratów. Dla każdej z uzyskanych zależności obliczano także statystykę błędów do oceny algorytmu, taką jak współczynnik determinacji R^2 oraz błąd średniokwadratowy RMSE.

Dane biooptyczne (m.in. współczynnik absorpcji, rozkład rozmiarów cząstek, stężenia barwników, radiacja oddolna L_u) mają najczęściej rozkład logarytmiczno-normalny (Campbell 1995), dlatego wykonywane w pracy analizy regresji przeprowadzane były na zmiennych zlogarytmowanych. Tak jak sugerowane jest w wielu wcześniejszych pracach dotyczących pomiarów "koloru morza" (Campbell 1995, Craig i in. 2012, Darecki i Stramski 2004, O'Reilly i in. 1998), ocena błędów takich analiz powinna być wykonana przy wykorzystaniu statystyki w skali logarytmicznej. W pracy do oceny błędów wykorzystano standardowe parametry statystyczne:

 R² — współczynnik determinacji, który określa stosunek zmienności wyjaśnianej przez model regresji do zmienności całkowitej, określony zależnością:

$$R^{2} = 1 - \frac{\sum_{i=1}^{N} \varepsilon_{i}^{2}}{\sum_{i=1}^{N} \left(\log_{10} \left[x_{i,insitu} \right] - \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} \log_{10} \left[x_{i,insitu} \right] \right)^{2}}$$
(3.14)

• błąd systematyczny (ang. bias) wyznaczany z zależności:

$$\langle \varepsilon \rangle = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} \varepsilon_i \tag{3.15}$$

 błąd statystyczny — błąd średni kwadratowy (ang. root mean square error, RMSE) wyznaczany z zależności:

$$RMSE = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} \varepsilon_i^2}$$
(3.16)

gdzie $\varepsilon_i = \log_{10} [x_{i,\text{model}}] - \log_{10} [x_{i,\text{insitu}}]$, a $x_{i,\text{model}}$ i $x_{i,\text{insitu}}$ to odpowiednio parametr wymodelowany i zmierzony. Jednostki wykorzystywanych błędów są w skali logarytmicznej \log_{10} , i nie są łatwo transponowane do skali liniowej. Dlatego dodatkowo obliczana była bezwymiarowa odwrotność błędu systematycznego z zależności:

$$F_{\rm med} = 10^{\langle \varepsilon \rangle} \tag{3.17}$$

gdzie F_{med} jest medianą stosunku: $x_{i,\text{model}}/x_{i,\text{insitu}}$ (Campbell i in. 2002, Friedrichs i in. 2009). Dla przykładu, jeżeli F_{med} jest równe 1, model dobrze przybliża wartości, jeżeli F_{med} równe jest 2 model zawyża wartości dwukrotnie, natomiast jeżeli F_{med} jest równe 0.5, model zaniża wartości dwukrotnie.

Do walidacji utworzonych algorytmów wykorzystano metodę walidacji krzyżowej (ang. cross-validation). W tym celu cały zbiór danych podzielono na dwie grupy: treningową i testową. Losowo wybrano 70% zmierzonych widm $R_{\rm rs}$, używając funkcji randsample w programie MATLAB i na tym zbiorze wykonano regresję liniową bądź krokową, szukając współczynników najlepszego dopasowania. Następnie korzystając z ustalonego modelu na pozostałych 30% danych obliczano stężenie fikocyjaniny i odpowiednie statystyki błędów do oceny modelu. W celu zmniejszenia wpływu jaki może mieć "źle" wybrany przypadkowy podział danych na treningowe i testowe, powyższe kroki (trening na 70%)

danych i test na 30% danych) wykonano 5000 razy, za każdym razem z innymi, losowo wybranymi danymi treningowymi i testowymi, a następnie uśredniono wyniki statystyki błędów (R^2 , $\langle \varepsilon \rangle$, RMSE oraz F_{med}). Oczekuje się, że otrzymane wyniki będą nieznacznie różne od wyników dla modelu opartego na całym zestawie danych, co sugeruje stabilność modelu.

3.6.2 Matematyczny opis Analizy Głównych Składowych

Mathematical description of Principal Component Analysis

Głównym celem Analizy Składowych Głównych PCA (ang. *Principal Component Analysis*) jest opisanie zbioru danych, składającego się z dużej liczby powiązanych ze sobą zmiennych, przy pomocy jak najmniejszej liczby niezależnych składników. Polega to na wprowadzeniu nowego układu niezależnych zmiennych, Składowych Głównych, takich że pierwszych kilka Składowych zawiera większość informacji o oryginalnych zmiennych. W tym celu wykorzystuje się bazę wektorów własnych rozpatrywanej przestrzeni (Jolliffe 1986).

Dane wejściowe zapisane są w postaci macierzy $X(n \times k)$:

$$X = \begin{bmatrix} X_1 & X_2 & \dots & X_k \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x_{11} & x_{12} & \dots & x_{1k} \\ x_{21} & x_{22} & \dots & x_{2k} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ x_{n1} & x_{n2} & \dots & x_{nk} \end{bmatrix}$$
(3.18)

gdzie liczba wierszy n to liczba obserwacji, a liczba kolumn k to liczba zmiennych.

Podstawą analizy jest macierz kowariancji $\mathsf{Cov}(k\times k)$ dla zmiennych, która wyraża się wzorem:

$$\mathsf{Cov} = \begin{bmatrix} c_{11} & c_{12} & \dots & c_{1k} \\ c_{21} & c_{22} & \dots & c_{2k} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ c_{k1} & c_{k2} & \dots & c_{kk} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathsf{Var}[X_1] & \mathsf{Cov}[X_1, X_2] & \dots & \mathsf{Cov}[X_1, X_k] \\ \mathsf{Cov}[X_2, X_1] & \mathsf{Var}[X_2] & \dots & \mathsf{Cov}[X_2, X_k] \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \mathsf{Cov}[X_k, X_1] & \mathsf{Cov}[X_k, X_2] & \dots & \mathsf{Var}[X_k] \end{bmatrix}$$
(3.19)

i pokazuje zależności między zmiennymi X_i oraz wyznacza kierunki nowych osi. Macierz kowariancji można rozłożyć na iloczyn macierzy wektorów własnych i wartości własnych:

$$\mathsf{Cov} = EV \cdot E \cdot EV^T \tag{3.20}$$

gdzie $E(k \times k)$ to macierz wartości własnych, ułożonych tak, że $\lambda_1 > \lambda_2 > ... > \lambda_k$:

$$E = \begin{bmatrix} \lambda_1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \lambda_2 & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \dots & \lambda_k \end{bmatrix}$$
(3.21)

a $EV(k \times k)$ to macierz wektorów własnych, której kolumny zwane też są ładunkami (ang. loadings):

$$EV = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1k} \\ a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2k} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ a_{k1} & a_{k2} & \dots & a_{kk} \end{bmatrix}$$
(3.22)

Macierz głównych składowych $P(n \times k)$ definiuje się jako:

$$P = X \cdot EV = \begin{bmatrix} P_1 & P_2 & \dots & P_k \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} p_{11} & p_{12} & \dots & p_{1k} \\ p_{21} & p_{22} & \dots & p_{2k} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ p_{n1} & p_{n2} & \dots & p_{nk} \end{bmatrix}$$
(3.23)

Każdą z k zmiennych $X_1, X_2, ..., X_k$ można opisać jako kombinację liniową parametrów $P_1, P_2, ..., P_k$. Każdy element macierzy X można przedstawić w postaci kombinacji liniowej L pierwszych Głównych Składowych:

$$x_{kn} = \sum_{l=1}^{L} a_{kl} \cdot p_{nl}$$
 (3.24)

Chcąc odzwierciedlić w nowym układzie współrzędnych dokładnie to samo rozproszenie punktów, musi on zawierać tyle samo wymiarów co oryginalny. Jedynie *k* nowych Składowych da nam pełen obraz zmienności, jednak w ich skład wchodzi również losowy szum. Celem PCA jest redukcja liczby zmiennych przy jednoczesnym zachowaniu jak największej ilości informacji o opisywanych wartościach; stąd analizujemy tylko część Głównych Składowych, zazwyczaj te które opisują największe zmiany wartości oryginalnych. Często jednak Składowe wyjaśniające nawet niewielką ilość zmienności oryginalnych danych mogą mieć znaczący wpływ do tworzenia poprawnego modelu. Metoda PCA została zastosowana do danych przy użyciu funkcji princomp w programie MATLAB.

3.6.3 Indeks podobieństwa

Similarity Index

W pracy podjęto próbę identyfikacji gatunku dominującego w mieszaninie glonów na podstawie analizy widm reflektancji zdalnej $R_{\rm rs}$. W tym celu wykorzystano indeks podobieństwa *SI* (ang. *similarity index*). Wskaźnik ten znany jest z wcześniejszych prac (Craig i in. 2006, Kirkpatrick i in. 2000, Millie i in. 1997, Torrecilla i in. 2012), gdzie wykorzystywany był do identyfikacji dominującego gatunku w wodzie z mieszaniną glonów. W odróżnieniu od prac wcześniejszych, gdzie wykorzystywano widma absorpcji, tutaj wykorzystano widma $R_{\rm rs}$. *SI* liczono z zależności:

$$SI = 1 - \frac{2\arccos(C)}{\pi} \tag{3.25}$$

gdzie $C = \cos(A_{\text{ref}}, A_{R_{\text{rs}}}) = \frac{A_{\text{ref}} \cdot A_{R_{\text{rs}}}}{|A_{\text{ref}}||A_{R_{\text{rs}}}|}$ to kosinus kąta pomiędzy dwoma wektorami, A_{ref} i $A_{R_{\text{rs}}}$, które stanowią odpowiednio czwartą pochodną widma referencyjnego oraz czwartą pochodną widma nieznanej mieszkanki glonów Butler i Hopkins (1970). Operator (·) jest to iloczyn skalarny dwóch wektorów, a |A| jest długością wektora A. Wartości SI mieszczą się w przedziale [0, 1], gdzie 0 to brak podobieństwa, natomiast 1 świadczy o tym, że widma są identyczne. Wskaźnik ten mierzy przede wszystkim różnice w kształcie widm, a nie ich wysokości.

Rozdział 4

Analiza reflektancji zdalnej charakterystycznej dla Zatoki Gdańskiej pod kątem jej wykorzystania do zdalnego wyznaczania stężenia fikocyjaniny

Analysis of remote sensing reflectance spectra characteristic for the Gulf of Gdansk and their use for the estimation of phycocyanin concentration by means of remote sensing

W poniższym rozdziale omówiono zmienność zmierzonych *in situ* charakterystyk spektralnych $R_{\rm rs}$ oraz ich wykorzystanie w bezkontaktowych metodach wyznaczania stężenia fikocyjaniny (PC). Oceniono znane z literatury zależności określające wartość stężenia PC dostosowane do wód bałtyckich. Następnie korzystając z danych empirycznych zebranych w Zatoce Gdańskiej, znaleziono najlepszą zależność stężenia fikocyjaniny od reflektancji zdalnej. Zostało to wykonane dwiema metodami. W pierwszej z nich, reflektancję zdalną określoną w wybranych kanałach spektralnych wykorzystano do opracowania algorytmu wyznaczającego stężenie PC, opartego na odpowiednio dostosowanej funkcji analitycznej. Jako drugą metodę wykorzystano analizę PCA, gdzie do oceny stężenia PC wykorzystywano całe widmo mierzonej reflektancji zdalnej.

4.1 Charakterystyka reflektancji zdalnej zmierzonej w wodach Zatoki Gdańskiej

Characteristics of the remote sensing reflectance measured in the Gulf of Gdansk

Materiał eksperymentalny wykorzystany do estymacji stężenia PC zebrano w wodach Zatoki Gdańskiej, gdzie znaczny wpływ na mierzone parametry optyczne ma udział wód rzecznych, niosących ze sobą duże ilości substancji rozpuszczonych i zawieszonych. Można zauważyć, że całkowity współczynnik absorpcji dla $\lambda = 443$ nm w wodach Zatoki Gdańskiej jest zdominowany przez $a_{\rm CDOM}$. Widać to na rysunku 4.1, przedstawiającym relatywny udział poszczególnych składników wody morskiej absorbujących światło w całkowitym współczynniku absorpcji, gdzie wszystkie punkty mieszczą się blisko wierzchołka osi CDOM. Natomiast dla $\lambda = 665$ nm, gdzie fitoplankton ma swoje drugie maksimum absorpcji, natomiast absorpcja światła przez substancje żółte i detrytus jest już minimalna, na całkowity współczynnik absorpcji najsilniej wpływa $a_{\rm fito}$, mniejszy, chociaż wciąż dostrzegalny wpływ ma $a_{\rm CDOM}$, a udział $a_{\rm NAP}$ jest minimalny (rys. 4.1). Podobne rezultaty dla wód Morza Bałtyckiego otrzymał Babin i in. (2003b) w badaniach współczynnika absorpcji w wodach mórz europejskich.

Najwięcej pomiarów przeprowadzono w lipcu, kiedy gatunki z rodzaju cyjanobakterii dominowały kompozycje taksonomiczną fitoplanktonu. Zaobserwowany cykl zmienności udziału liczby komórek cyjanobakterii w całkowitej liczbie komórek fitoplanktonu dla prowadzonych pomiarów (rys. 4.2) nie odbiega od informacji zamieszczonych w literaturze (Pliński i Jóźwiak 1996).

Zakres stężenia PC dla badanych wód wahał się pomiędzy 0.05 mg m^{-3} a 18.95 mg m⁻³, ze średnią wartością równą 2.14 mg m^{-3} i medianą równą 0.84 mg m^{-3} (rys. 4.3–4.4). Wartość minimalną odnotowano na początku maja, kiedy występowanie cyjanobakterii jest sporadyczne, a kompozycję taksonomiczną fitoplanktonu dominują grupy okrzemek bądź bruzdnic, natomiast wartość maksymalną w ostatnim tygodniu czerwca, kiedy w składzie taksonomicznym fitoplanktonu zaczynają dominować gatunki z grupy cyjanobakterii. Na rysunku 4.4, poza zakresem wartości PC dla porównania przedstawiono także zakres wartości chl-*a* zaobserwowany w badanych wodach, który wynosił od 0.93 do 30.91 mg m⁻³ z wartością średnią równą 7.3 mg m⁻³ oraz medianą równą 4.6 mg m⁻³. Wartości $a_{\text{CDOM}}(400)$ dla badanych wód mieściły się w zakresie od 0.72 do 2.1 m⁻¹ z medianą równą 1.02 m⁻¹ oraz średnią równą 1.13 m⁻¹. Jest to zgodne z charaktery-styką wartości $a_{\text{CDOM}}(400)$ dla wód przybrzeżnych podaną przez Kowalczuka (1999).



RYSUNEK 4.1: Relatywny udział CDOM, fitoplanktonu oraz NAP w całkowitym współczynniku absorpcji dla dwóch długości fali, $\lambda = 443 \text{ nm}$ i $\lambda = 665 \text{ nm}$, dla próbek analizowanych w pracy. Udział (w skali od 0 do 1) danego składnika obliczany był wg: a_x/a_{tot} , gdzie a_x to współczynnik absorpcji światła przez dany składnik, a_{tot} to całkowity współczynnik absorpcji. (Im wyższy udział danego składnika w całkowitej absorpcji tym punkt na wykresie leży bliżej danego wierzchołka).

FIGURE 4.1: Ternary plots illustrating the relative contribution of CDOM, phytoplankton, and NAP to the total absorption coefficient a_{tot} , for all samples in two wavelengths, $\lambda = 443 \text{ nm}$ and $\lambda = 665 \text{ nm}$. The fraction (within a 0–1 scale) of a given absorption component a_x was calculated as a_x/a_{tot} . (The higher the relative contribution of a given component for a given sample is, the closer to the corresponding apex the data point is).

Obserwowane wartości zasięgu widzenia krążka Secchiego, dalej skrótowo nazywane głębokością Secchiego SD (ang. Secchi depth) wahały się pomiędzy 1.5 a 7 m, ze średnią wartością równą 3.75 m oraz medianą równą 3.5 m, co może świadczyć o rozkładzie normalnym zmierzonych wartości SD. Najwyższe wartości (zazwyczaj powyżej 5 m) obserwowano na stacji pomiarowej P104, która była najgłębszą z badanych stacji (63 m), zaś maksymalną wartość SD zaobserwowano na stacji pomiarowej P115d w drugiej połowie sierpnia, kiedy absorpcja światła przez CDOM była bardzo niska, bliska wartości minimalnej ($a_{\text{CDOM}}(400) = 0.79 \text{ m}^{-1}$).

Zróżnicowanie wartości badanych parametrów biooptycznych wpływa na zróżnicowanie wielkości i kształtu badanych widm $R_{\rm rs}$ (rys. 4.5). Maksimum widm występuje pomiędzy 550 a 560 nm i przesuwa się w stronę fal czerwonych wraz z całkowitym wzrostem wartości $R_{\rm rs}$. Dla większości przypadków obserwuje się także silne obniżenie wartości w kierunku fal niebieskich, co wiąże się ze wzrostem absorpcji światła przez CDOM i detrytusu w tym zakresie spektralnym. Zaobserwować można także minimum lokalne w okolicy 660 nm oraz maksimum lokalne w okolicy 680 nm, odpowiadające maksimum absorpcji oraz fluorescencji światła przez chl-*a*. Na rysunku 4.5, przedstawiającym zebrane widma $R_{\rm rs}$, zaznaczono długości fali, gdzie występuje maksimum absorpcji (620 nm, kolor czerwony) oraz emisji (650 nm, kolor zielony) światła przez fikocyjaninę. Dla $\lambda = 650$ nm



- RYSUNEK 4.2: Średni udział liczby komórek z grupy cyjanobakterii w całkowitej liczbie komórek fitoplanktonu w próbkach badanych w różnych okresach (wysokość kolumn). Liczba wskazana nad każdą kolumną informuje o procentowym udziale cyjanobakterii w całkowitej liczbie komórek fitoplanktonu.
- FIGURE 4.2: The mean contribution of the number of cyanobacteria cells to the total number of phytoplankton cells for the studied samples. The number shown above each column indicates the percentage of cyanobacteria to the total number of phytoplankton cells.

wyraźnie widać pojawiające się maksimum lokalne. W tym zakresie spektralnym rozrzut wartości jest dwukrotnie większy niż np. dla $\lambda = 440$ nm, gdzie występuje maksimum absorpcji światła przez chl-a.

Zmierzone widma $R_{\rm rs}$ scharakteryzowano pod względem wartości badanych parametrów biooptycznych. Biorąc pod uwagę wartość stężenia chl-*a* w badanych wodach (rys. 4.6– 4.7), zarówno wody o wysokim jak i niskim stężeniu chl-*a* charakteryzują się widmami $R_{\rm rs}$ z maksimum występującym w okolicy 560 nm. Jednak dla wód o wartościach stężeń chl-*a* powyżej przeciętnej (rys. 4.7), stosunek wartości $R_{\rm rs}$ z zakresu spektralnego 500–570 nm do 450–500 nm był znacznie wyższy aniżeli dla wód o niższych wartościach stężeń chl-*a* (rys. 4.6). Dla tych wód (rys. 4.7) zmierzone widma $R_{\rm rs}$ charakteryzują się wyraźniejszym minimum lokalnym dla $\lambda \approx 660$ nm, gdzie występuje drugie maksimum absorpcji światła przez chl-*a*, oraz maksimum dla $\lambda \approx 680$ nm, gdzie obserwuje się fluorescencję



RYSUNEK 4.3: Histogram wartości stężenia PC dla wykorzystanego materiału eksperymentalnego.

FIGURE 4.3: Histogram of PC concentration in the experimental data used.



Rysunek 4.4: Rozkład wartości stężenia chl-
aoraz PC dla wykorzystanego materiału eksperymental
nego.

 $\label{eq:Figure 4.4: Distribution of PC and chl-a \ concentrations \ in \ the \ experimental \ data \ used.$



RYSUNEK 4.5: Zakres zmienności badanych wid
m $R_{\rm rs}$ z zaznaczonymi zakresami spektralnymi, gdzie występuje maksimum absorpcji (kolor czerwony) oraz emisji (kolor zielony) światła przez fikocyjaninę.

FIGURE 4.5: The range of studied R_{rs} spectra. The spectral bands of the maximum absorption and emission of phycocyanin are highlighted in red and green, respectively.

światła przez chl-a. Natomiast mało zauważalny jest wpływ absorpcji światła przez chl-a w zakresie fal niebieskich, z maksimum dla $\lambda \approx 440$ nm, zarówno w wodach o niskim, jak i wysokim stężeniu chl-a, prawdopodobnie z powodu silnego wpływu absorpcji światła przez CDOM w tym zakresie spektralnym. Zauważyć można także wzrost wariancji widm $R_{\rm rs}$ dla $\lambda \approx 560$ nm wraz ze wzrostem wartości stężenia chl-a. Może się to wiązać z tym, że w wodach, gdzie odnotowuje się niższe wartości chl-a, występuje mniejsza ilość substancji zawieszonych, wpływających na wzrost wartości współczynnika rozpraszania, a tym samym na wzrost wartości $R_{\rm rs}$.

Biorąc pod uwagę stężenie PC, to zarówno dla wód poniżej (rys. 4.8) jak i powyżej (rys. 4.9) wartości przeciętnej (0.84 mg m⁻³), wariancja wartości $R_{\rm rs}$ dla $\lambda \approx 550$ nm w obu przypadkach jest do siebie zbliżona, inaczej niż w przypadku zróżnicowania wód ze względu na wartość stężenia chl-a. Natomiast zauważyć można pojawienie się lokalnego maksimum w zakresie spektralnym około 650 nm w widmach $R_{\rm rs}$ dla wód, gdzie wartości stężeń PC są większe od wartości przeciętnej (rys. 4.9). Pik w tym zakresie spektralnym jest charakterystyczny dla maksimum fluorescencji światła przez PC i rośnie generalnie ze wzrostem udziału liczby komórek cyjanobakterii w całkowitej liczbie komórek fitoplanktonu (rys. 4.10–4.11).

W badanych wodach scharakteryzowano także zmienność wid
m $R_{\rm rs}$ w zależności od zmienności wartości współczynnika absorpcji światła przez substancje ż
ółte dla λ =

400 nm (rys. 4.12–4.13). Wartości widm $R_{\rm rs}$ są mniejsze, a maksima bardziej spłaszczone dla wód, gdzie wartość $a_{\rm CDOM}(400)$ jest mniejsza bądź równa wartości przeciętnej. Natomiast w wodach o wysokiej wartości współczynnika $a_{\rm CDOM}(400)$, gdzie przypuszczalnie dużo jest rozpuszczonych substancji organicznych, wartości $R_{\rm rs}$ w zakresie spektralnym pomiędzy 500 a 650 nm są wyższe, a nachylenie widm w zakresie fal niebieskich bardziej strome.

Scharakteryzowano też widma $R_{\rm rs}$ biorąc pod uwagę przezroczystość wody wyrażoną głębokością Secchiego SD (rys. 4.14–4.15), na które wpływ mają charakterystyki wszystkich powyżej wymienionych wielkości. Z uwagi na to, że współczynnik absorpcji badanych wód zdominowany jest przez CDOM, można zauważyć podobieństwo widm $R_{\rm rs}$ zmierzonych w wodach scharakteryzowanych przez wysokie wartości $a_{\rm CDOM}(400)$ oraz niskie wartości SD, i odwrotnie, niską wartością $a_{\rm CDOM}(400)$ i wysoką SD. Można przypuszczać, że wody o wysokich wartościach SD charakteryzują się małą ilością substancji rozpuszczonych i zawieszonych.



- RYSUNEK 4.6: Średnie wartości $R_{\rm rs}$ (linia ciągła) oraz średnie wartości pomniejszone i powiększone o odpowiadające im odchylenia standardowe (linia przerywana) dla sytuacji gdy wartość stężenia chl-*a* jest mniejsza bądź równa wartości przeciętnej $(4.6 \text{ mg m}^{-3}).$
- FIGURE 4.6: Mean value of $R_{\rm rs}$ (solid line) and the one-sigma confidence intervals (dashed line) for the case of chl-a concentration equal or less than median (4.6 mg m⁻³).



RYSUNEK 4.7: Średnie wartości R_{rs} (linia ciągła) oraz średnie wartości pomniejszone i powiększone o odpowiadające im odchylenia standardowe (linia przerywana) dla sytuacji gdy wartość stężenia chl-a jest większa od wartości przeciętnej (4.6 mg m⁻³).
FIGURE 4.7: Mean value of R_{rs} (solid line) and the one-sigma confidence intervals (dashed line) for the case of chl-a concentration is greater than median (4.6 mg m⁻³).



- RYSUNEK 4.8: Średnie wartości $R_{\rm rs}$ (linia ciągła) oraz średnie wartości pomniejszone i powiększone o odpowiadające im odchylenia standardowe (linia przerywana) dla sytuacji gdy wartość stężenia PC jest mniejsza bądź równa wartości przeciętnej $(0.84 \,{\rm mg}\,{\rm m}^{-3}).$
- FIGURE 4.8: Mean value of $R_{\rm rs}$ (solid line) and the one-sigma confidence intervals (dashed line) for the case of PC concentration equal or less than median (0.84 mg m⁻³).



RYSUNEK 4.9: Średnie wartości $R_{\rm rs}$ (linia ciągła) oraz średnie wartości pomniejszone i powiększone o odpowiadające im odchylenia standardowe (linia przerywana) dla sytuacji gdy wartość stężenia PC jest większa od wartości przeciętnej (0.84 mg m⁻³). FIGURE 4.9: Mean value of $R_{\rm rs}$ (solid line) and the one-sigma confidence intervals (dashed line) for the case of PC concentration equal or less than median (0.84 mg m⁻³).



- RYSUNEK 4.10: Średnie wartości $R_{\rm rs}$ (linia ciągła) oraz średnie wartości pomniejszone i powiększone o odpowiadające im odchylenia standardowe (linia przerywana) dla sytuacji gdy wartość stosunku liczby komórek cyjanobakterii do liczby komórek wszystkich grup fitoplanktonu jest mniejsza bądź równa 0.5.
- FIGURE 4.10: Mean value of R_{rs} (solid line) and the one-sigma confidence intervals (dashed line) for the case of the ratio of the number of cyanobacteria cells to the number of phytoplankton cells less or equal than 0.5.



- RYSUNEK 4.11: Średnie wartości $R_{\rm rs}$ (linia ciągła) oraz średnie wartości pomniejszone i powiększone o odpowiadające im odchylenia standardowe (linia przerywana) dla sytuacji gdy wartość stosunku liczby komórek cyjanobakterii do liczby komórek wszystkich grup fitoplanktonu jest większa niż 0.5.
- FIGURE 4.11: Mean value of R_{rs} (solid line) and the one-sigma confidence intervals (dashed line) for the case of the ratio of the number of cyanobacteria cells to the number of phytoplankton cells greater than 0.5.



RYSUNEK 4.12: Średnie wartości $R_{\rm rs}$ (linia ciągła) oraz średnie wartości pomniejszone i powiększone o odpowiadające im odchylenia standardowe (linia przerywana) dla sytuacji gdy wartość $a_{\rm CDOM}(400)$ jest mniejsza bądź równa wartości przeciętnej $(1.02 \, {\rm m}^{-1})$.

FIGURE 4.12: Mean value of $R_{\rm rs}$ (solid line) and the one-sigma confidence intervals (dashed line) for the case of $a_{\rm CDOM}(400)$ concentration equal or less than median $(1.02\,{\rm m}^{-1})$.



RYSUNEK 4.13: Średnie wartości R_{rs} (linia ciągła) oraz średnie wartości pomniejszone i powiększone o odpowiadające im odchylenia standardowe (linia przerywana) dla sytuacji gdy wartość a_{CDOM}(400) jest większa od wartości przeciętnej (1.02 m⁻¹).
FIGURE 4.13: Mean value of R_{rs} (solid line) and the one-sigma confidence intervals (dashed line) for the case of a_{CDOM}(400) concentration greater than median (1.02 m⁻¹).



- RYSUNEK 4.14: Średnie wartości $R_{\rm rs}$ (linia ciągła) i odpowiadające im odchylenia standardowe (linia przerywana) dla sytuacji gdy wartość SD jest mniejsza bądź równa wartości przeciętnej (3.5 m).
- FIGURE 4.14: Mean value of R_{rs} (solid line) and the one-sigma confidence intervals (dashed line) for the case of SD equal or less than median (3.5 m).



- RYSUNEK 4.15: Średnie wartości $R_{\rm rs}$ (linia ciągła) i odpowiadające im odchylenia standardowe (linia przerywana) dla sytuacji gdy wartość SD jest większa od wartości przeciętnej (3.5 m).
- FIGURE 4.15: Mean value of R_{rs} (solid line) and the one-sigma confidence intervals (dashed line) for the case of SD greater than median (3.5 m).

4.2 Wyznaczenie stężenia fikocyjaniny za pomocą funkcji analitycznych w obszarze Zatoki Gdańskiej

Estimation of phycocyanin concentration using analytical functions in the area of the Gulf of Gdansk

W literaturze opisanych jest kilka algorytmów wykorzystujących reflektancję zdalną do wyznaczenia stężenia PC (Dekker 1993, Hunter i in. 2010, Mishra i in. 2009, Ogashawara i in. 2013, Schalles i Yacobi 2000, Simis i in. 2005), jednak żadne z nich nie są opracowane dla wód Morza Bałtyckiego. Algorytmy znane z literatury oceniono dla wód Zatoki Gdańskiej. Następnie, znaleziono najlepszą zależność do estymacji stężenia PC korzystając ze zmierzonych *in situ* hiperspektralnych widm $R_{\rm rs}$.

4.2.1 Ocena istniejących algorytmów

Assessment of known algorithms

Dla wybranych algorytmów znanych z literatury (tab. 4.1) wyznaczono współczynniki najlepszego dopasowania metodą najmniejszych kwadratów i estymowano stężenie PC za pomocą regresji liniowej:

$$PC = k + l \cdot X \tag{4.1}$$

gdzie za X podstawiano kolejno zależności zestawione w tab. 4.1.

TABLICA 4.1: Zestawienie weryfikowanych algorytmów znanych z literatury.TABLE 4.1: A summary of the algorithms evaluated here and known from the literature.

Oznaczenie algorytmu	Proponowana zależność	Źródło
SY00	$R_{ m rs}(650)/R_{ m rs}(625)$	Schalles i Yacobi (2000)
DA93	$0.5 \cdot (R_{\rm rs}(600) + R_{\rm rs}(648) - R_{\rm rs}(624))$	Dekker (1993)
MM09	$R_{ m rs}(700)/R_{ m rs}(600)$	Mishra i in. (2009)
MS12	$R_{ m rs}(709)/R_{ m rs}(600)$	Mishra~(2012)
HP10	$(R_{\rm rs}(615)^{-1} + R_{\rm rs}(600)^{-1}) \cdot R_{\rm rs}(725)$	Hunter i in. (2010)

Przedstawione zależności opracowane były na podstawie zbiorów danych, gdzie wartości stężeń PC były znacznie wyższe niż w wodach bałtyckich (np. średnia wartość PC= 241 mg m⁻³ (Ogashawara i in. 2013) lub 68.9 mg m⁻³ (Hunter i in. 2010)). W porównaniu z nimi, w wodach Zatoki Gdańskiej przeważają niskie wartości stężenia PC (średnia wartość PC na podstawie zebranych danych eksperymentalnych równała się

 2.14 mg m^{-3}), a wysokie wartości (maksymalna wartość PC na podstawie zebranych danych eksperymentalnych wynosiła 18.95 mg m^{-3}) występują sporadycznie. Prawdopodobnie dlatego błędy oszacowania stężenia PC przy wykorzystaniu tych algorytmów są tak znaczące (tab. 4.2).

TABLICA 4.2: Współczynniki najlepszego dopasowania zależności (4.1) dla wód Zatoki Gdańskiej oraz statystyka błędów.

Oznaczenie algorytmu	Współczynniki		R^2	RMSE
SY00	k = -37.12	l = 43.19	0.5145	0.4495
DA93	k = -1.2	l = 9260	0.0744	0.5300
MM09	k = -7.13	l = 19.37	0.4636	0.4749
MS12	k = -5.05	l = 18.54	0.5245	0.4049
HP10	k = -5.34	l = 82.45	0.3327	0.4669

TABLE 4.2: Estimated parameters for the model in equation (4.1) and received for the Gulf of Gdansk, together with the corresponding error statistics.

Wartości stężeń PC charakteryzują się rozkładem logarytmiczno - normalnym. Wzorując się na algorytmach wykorzystywanych do oceny stężenia chl-a o podobnej charakterystyce rozkładu wartości w wodach Morza Bałtyckiego (Darecki i Stramski 2004), gdzie zmienne są logarytmowane, przedstawione w tablicy 4.1 zależności X wykorzystano do estymacji stężenia PC metodą najmniejszych kwadratów za pomocą regresji liniowej przy użyciu funkcji postaci:

$$\log_{10}(PC) = a + b \cdot \log_{10}(X) \tag{4.2}$$

W każdym przypadku, zlogarytmowanie zmiennych poprawiło wynik statystyki błędów (tab. 4.3), dając tym samym wskazówkę do dalszych poszukiwań najlepszej zależności do oceny stężenia PC w wodach Zatoki Gdańskiej.

TABLICA 4.3: Współczynniki najlepszego dopasowania zależności (4.2) dla wód Zatoki Gdańskiej oraz statystyka błędów.

TABLE 4.3: Estimated parameters for the model in equation (4.2) and received for the Gulf of Gdansk, together with the corresponding error statistics.

Oznaczenie algorytmu	Współczynniki		R^2	RMSE
SY00	k = 0.7263	l = 16.63	0.6636	0.2932
DA93	k = 3.8227	l = 1.6429	0.1691	0.4608
MM09	k = 1.3290	l = 3.9344	0.5712	0.3310
MS12	k = 1.3579	l = 3.0884	0.6196	0.3118
HP10	k = 2.7405	l = 2.5694	0.3441	0.4094

4.2.2 Optymalizacja postaci funkcyjnych algorytmów do zdalnego wyznaczenia stężenia fikocyjaniny w wodach Zatoki Gdańskiej

Optimization of the functional forms for the estimation of the phycocyanin concentration in the Gulf of Gdansk

W celu wyboru odpowiednich kanałów spektralnych, które wykorzystane będą w opracowywanych algorytmach, w pierwszej kolejności sprawdzono wartości współczynników korelacji pomiędzy wartością $R_{\rm rs}$ w poszczególnych długościach fali a wartościami stężeń PC zmierzonymi w wodach powierzchniowych. Wyniki dla kilku wybranych długości fali znajdują się na rysunku (4.16), gdzie wyszczególnione zostały dane z lipca z uwagi na większe prawdopodobieństwo wystąpienia w tym miesiącu gatunków fitoplanktonu z grupy cyjanobakterii (Pliński i Jóźwiak 1996).

Dla większości długości fali brak jest istotnej korelacji pomiędzy wskazanymi parametrami. Jedynie dla długości fali większej niż 700 nm korelacja wynosi więcej niż 0.6, jednak w tym zakresie spektralnym większy wpływ na zmienność wartości widma reflektancji ma rozpraszanie światła na cząstkach zawieszonych, niż sama absorpcja światła przez barwniki zawarte w fitoplanktonie. Ponadto, w tym przedziale spektralnym można się także spodziewać znaczącego wpływu na wartości $R_{\rm rs}$ z rozpraszania światła przez inne, poza fitoplanktonem, składniki zawieszone w wodzie morskiej. Dodatkowym argumentem przeciwko wykorzystywaniu tutaj długości fal powyżej 700 nm jest stosunkowo niski poziom radiacji wychodzącej z wody w tym zakresie spektralnym. Mogłoby się to przyczyniać, w wypadku wykorzystania tego zakresu w teledetekcji satelitarnej, do większych błędów estymowanych stężeń PC wynikających z niepewności w procesie korekcji atmosferycznej charakterystycznego dla tego typu akwenów. Dlatego ten zakres spektralny nie wydaje się odpowiedni do oceny stężenia PC.

Następnie przeprowadzono estymację stężenia PC metodą najmniejszych kwadratów w zależności od wartości $R_{\rm rs}$ dla poszczególnych długości fal, postaci:

$$\log_{10}(PC) = k + l \cdot \log_{10}(R_{\rm rs}(\lambda_i)),$$

gdzie k i l to współczynniki regresji, PC to stężenie fikocyjaniny, a $R_{\rm rs}(\lambda_i)$ to wartość reflektancji dla długości fali λ_i . Najlepsze parametry statystyczne dopasowania uzyskano dla $\lambda = 735$ nm, gdzie $R^2 = 0.42$, a RMSE = 0.38, jednak, jak zauważono wcześniej, długość fali 735 nm nie wydaje się dobrym zakresem spektralnym do wykorzystania w estymacji stężenia PC. Przyczyn osiągnięcia najlepszych parametrów statystycznych przez korelację dla tej długości fali można doszukać się w "naturalnym", bezpośrednim



RYSUNEK 4.16: Zależność zlogarytmowanych wartości stężenia fikocyjaniny od zlogarytmowanych wartości reflektancji zdalnej w wybranych długościach fali. N to liczba prób, R to współczynnik korelacji pomiędzy wskazanym kanałem reflektancji zdalnej, a powierzchniowym stężeniem PC, p to graniczny poziom istotności (p-wartość). Kolorem czerwonym zaznaczono dane zebrane w lipcu, szarym wszystkie pozostałe dane zebrane w 2012 i 2013 roku. Statystyki policzono dla całego zbioru danych.

FIGURE 4.16: Scatter plots showing the correlation between the logarithms of phycocyanin concentration and the logarithms of the remote sensing reflectance for the selected spectral bands. N is the number of samples, R is the coefficient of correlation, and p is the probability that the observed correlation is accidental. Measurements acquired in July are shown in red, whereas the remaining measurements acquired in 2012 and 2013 are shown in grey.


Rysunek 4.16: (Kont.) Figure 4.16: (Cont.)

związku stężenia PC z ilością cząstek fitoplanktonu. Jest ona proporcjonalna do rozpraszania, przy jednoczesnym braku wpływów na $R_{\rm rs}$ od absorpcji, co ma zwykle miejsce dla krótszych fal.

Przestawione powyżej wyniki, dla regresji uzależnionej tylko od $R_{\rm rs}$ dla jednej długości fali, są gorsze od algorytmów wybranych z literatury i prezentowanych w tablicy 4.1, nawet przed wprowadzeniem modyfikacji w postaci logarytmicznej transformacji zmiennych. Potencjalnie lepszą i powszechnie stosowaną metodą w tworzeniu algorytmów zdalnych jest wykorzystanie stosunku wartości reflektancji dla dwóch różnych długości fali. W celu sprawdzenia jakie kombinacje kanałów są najbardziej wrażliwe na zmienność stężenia PC zbadane zostały wszystkie kombinacje kanałów spektralnych w zakresie 400-750 nm z krokiem 5 nm. Oryginalne dane posiadają rozdzielczość 3.3 nm, dlatego zastosowano interpolację metodą najbliższego sąsiada. Uzyskano 5041 kombinacji i dla każdej z nich estymowano stężenie PC metodą najmniejszych kwadratów dla regresji (dalej skrótowo oznaczonej PC_{ratio}), postaci:

$$\log_{10}(\text{PC}) = k + l \cdot \log_{10} \left(\frac{R_{\text{rs}}(\lambda_i)}{R_{\text{rs}}(\lambda_j)} \right)$$
(4.3)

gdzie PC to stężenie fikocyjaniny, k i l to współczynniki regresji, $R_{\rm rs}(\lambda_i)$ i $R_{\rm rs}(\lambda_j)$ to wartości reflektancji zdalnej, odpowiednio dla długości fali λ_i i λ_j . Analizując wartości współczynnika determinacji R^2 ocenianych regresji dla wszystkich kombinacji kanałów spektralnych (rys. 4.17) zauważono, że najwyższe wartości tego współczynnika są dla stosunków reflektancji z zakresu 640–660 nm do reflektancji z zakresu 600–620 nm, tam gdzie występuje maksimum absorpcji oraz emisji światła przez PC. Natomiast dla długości fali ze standardowych stosunków wykorzystywanych w badaniach teledetekcyjnych (np. 440/555, 490/555 tudzież 510/555) wartości R^2 były niskie i równały się około 0.3.

Spośród wszystkich analizowanych kombinacji kanałów spektralnych $R_{\rm rs}$ wyszczególnionych zostało dziesięć (tab. 4.4) z najlepszymi wynikami statystyk błędów (RMSE < 0.3 i $R^2 \ge 0.6$) dla regresji PC_{ratio} (4.3).

Długości fal we wskazanych kombinacjach mieszczą się w przedziale 590–710 nm, gdzie absorpcja i emisja światła przez fikocyjaninę oraz chlorofil *a* mają swój istotny wpływ na widmo $R_{\rm rs}$. W zakresie tym, absorpcja światła przez CDOM nieznacznie wpływa na widmo $R_{\rm rs}$, co ma szczególne znaczenie w wodach Morza Bałtyckiego, gdzie jest ona dominującym składnikiem całkowitego współczynnika absorpcji światła. Zależności zlogarytmowanej wartości stężenia fikocyjaniny od logarytmu stosunków wartości $R_{\rm rs}$ (rys. 4.18) z tablicy 4.4 wskazują znaczną poprawę estymowanej wielkości względem wcześniej pokazanych zależności (rys. 4.16). Na rys. 4.18 dla każdej zależności pokazano również widma $R_{\rm rs}$ z zaznaczonymi długościami fali wykorzystanymi w badanej regresji.



RYSUNEK 4.17: Współczynnik determinacji R^2 zależności opisanej (4.3) dla kombinacji kanałów $R_{\rm rs}(\lambda_i)/R_{\rm rs}(\lambda_j)$ w zakresie spektralnym 400–750 nm.

FIGURE 4.17: Determination coefficient R^2 for the (4.3) for all possible band ratios $R_{\rm rs}(\lambda_i)/R_{\rm rs}(\lambda_j)$ in the spectral range 400–750 nm.

TABLICA 4.4: Wartości współczynników oraz podstawowa statystyka dla regresji opisanej (4.3) dla wybranych kombinacji kanałów λ_i i λ_j .

TABLE 4.4: Estimated parameter values and basic error statistics for the linear regression (4.3) for the chosen channels λ_i and λ_j .

Lp.	Stosunek $R_{\rm rs}(\lambda_i)/R_{\rm rs}(\lambda_j)$	Współ	łczynniki	R^2	RMSE
1	$R_{ m rs}(595)/R_{ m rs}(660)$	k = 2.4952	l = -7.8331	0.6734	0.2889
2	$R_{\rm rs}(625)/R_{\rm rs}(645)$	k = 0.7659	l = -20.5767	0.6728	0.2891
3	$R_{ m rs}(660)/R_{ m rs}(600)$	k = 2.4564	l = 8.9935	0.6699	0.2904
4	$R_{ m rs}(625)/R_{ m rs}(650)$	k = 0.7263	l = -16.6351	0.6636	0.2932
5	$R_{\rm rs}(630)/R_{\rm rs}(645)$	k = 0.6032	l = -21.6371	0.6597	0.2949
6	$R_{ m rs}(600)/R_{ m rs}(655)$	k = 2.1574	l = -8.9421	0.6581	0.2956
$\overline{7}$	$R_{ m rs}(660)/R_{ m rs}(590)$	k = 2.4100	l = 6.0379	0.6418	0.3032
8	$R_{ m rs}(610)/R_{ m rs}(710)$	k = 1.1968	l = -3.5895	0.6342	0.3057
9	$R_{\rm rs}(615)/R_{\rm rs}(710)$	k = 1.0850	l = -3.5850	0.6349	0.3055
10	$R_{\rm rs}(620)/R_{\rm rs}(710)$	k = 1.033	l = -3.5534	0.6330	0.3064

W literaturze znane jest także wykorzystywanie wyższych potęg ze stosunku $R_{\rm rs}$ dla dwóch długości fali do tworzenia algorytmów na wyznaczenie stężenia barwników. W wielu znanych zależnościach do oceny stężenia chl-*a* (np. OC3, OC4) stosuje się kombinację liniową stosunku $R_{\rm rs}$ dla dwóch długości fali z kolejnych potęg tego stosunku (Cannizzaro i Carder 2006, Darecki i Stramski 2004, O'Reilly i in. 2000). Dla stosunków reflektancji



RYSUNEK 4.18: Po lewej: zależność zlogarytmowanej wartości stężenia fikocyjaniny od logarytmu ze stosunku reflektancji zdalnej w dwóch różnych długościach fali. Na wykresie podano wartości współczynnika determinacji R^2 oraz błąd średni kwadratowy RMSE. Po prawej: widma $R_{\rm rs}$ brane pod uwagę w analizie z zaznaczonymi kanałami spektralnymi wykorzystanymi w regresji.

FIGURE 4.18: On the left: the dependence between the logarithm of PC concentration and the logarithm of the remote sensing reflectance band ratio. The determination coefficient R^2 and root mean square error RMSE are shown. On the right: the $R_{\rm rs}$ spectra used in the analysis with the highlighted spectral bands used in the regression.



RYSUNEK 4.18: (Kont.) FIGURE 4.18: (Cont.)



FIGURE 4.18: (Cont.)

zaprezentowanych w tablicy 4.4 przeprowadzono estymację stężenia PC metodą najmniejszych kwadratów dla równań (dalej skrótowo oznaczanych, odpowiednio: PC_{quad} i PC_{pow}) postaci:

$$\log_{10}(\text{PC}) = k + l \cdot X + m \cdot X^2 \tag{4.4}$$

$$\log_{10}(PC) = k + l \cdot X + m \cdot X^{2} + n \cdot X^{3} + p \cdot X^{4}$$
(4.5)

gdzie $X = \log_{10} \left(\frac{R_{rs}(\lambda_i)}{R_{rs}(\lambda_j)} \right)$, a k, l, m, n i p to współczynniki regresji.

Wartości współczynników najlepszego dopasowania dla zależności PC_{pow} oraz PC_{quad} oraz obliczone statystyki błędów, z uwagi na ich obszerność, zostały zaprezentowane w tablicy A.1 w załączniku A. Wykorzystanie zależności PC_{pow} polepszyło wyniki statystyk względem PC_{ratio} . Wartość współczynnika determinacji R^2 oraz błąd średni kwadratowy RMSE polepszają się dla każdej badanej zależności z kanałami spektralnymi z tablicy 4.4. Tutaj najlepszy wynik ($R^2 = 0.7152$, RMSE = 0.2698) występował dla drugiego w kolejności przedstawionego stosunku R_{rs} z tablicy 4.4, 625/645, gdzie występują długości fali obejmujące maksimum absorpcji (w liczniku) i maksimum emisji (w mianowniku) światła przez fikocyjaninę. Natomiast statystyki błędów dla PC_{quad} , wskazywały na gorszą ocenę stężenia fikocyjaniny niż za pomocą PC_{pow} , a niekiedy nawet gorszą niż z wykorzystaniem PC_{ratio} .

Kolejnym krokiem do ewentualnego zmniejszenia błędów estymowanej wielkości było zastosowanie algorytmu z kombinacji liniowej stosunków z wielu kanałów. W celu wybrania najlepszej kombinacji liniowej zastosowana została regresja krokowa dla wybranych wcześniej stosunków $R_{\rm rs}$ (tab. 4.4). W wyniku regresji krokowej otrzymano kombinację liniową (dalej skrótowo oznaczaną $\rm PC_{lin}$):

$$\log_{10}(PC) = k + l \cdot X_1 + m \cdot X_2 + n \cdot X_3$$
(4.6)

gdzie $X_1 = \log_{10} \left(\frac{R_{\rm rs}(595)}{R_{\rm rs}(660)} \right)$, $X_2 = \log_{10} \left(\frac{R_{\rm rs}(625)}{R_{\rm rs}(650)} \right)$, $X_3 = \log_{10} \left(\frac{R_{\rm rs}(620)}{R_{\rm rs}(710)} \right)$, a współczynniki regresji wynosiły: k = 1.3881, l = -1.9699, m = -7.7489, n = -1.4629. Statystyki błędów estymacji stężenia PC równaniem (4.6) wynoszą: $R^2 = 0.7389$ i RMSE = 0.2583, dając tym samym najlepsze wyniki wśród analizowanych algorytmów (rys. 4.19).

O ile w badaniach prowadzonych w morzu mierniki hiperspektralne znajdują coraz szersze zastosowanie, to w badaniach z poziomu satelitarnego nadal przeważają mierniki rejestrujące sygnał w zaledwie kilku do kilkunastu przedziałów spektralnych. Dlatego sprawdzono, jak wpłynie na wynik algorytmu PC_{lin} (4.6) zamiana wskazanych długości fali na te, najbliższe w kanałach czujników satelitarnych typu MERIS i OLCI. W tym celu zamieniono kanały 595 nm na 560 nm, 625 nm na 620 nm, 650 nm i 660 nm na 665 nm, oraz 710 nm na 708.25 nm i sprawdzono wyniki dla poniższej zależności (dalej skrótowo



RYSUNEK 4.19: Zależność pomiędzy wartościami stężenia PC zmierzonymi in situ, a obliczonymi przy wykorzystaniu algorytmu PC_{lin} .

FIGURE 4.19: Scatter plots showing the correlation between the PC concentrations measured in situ and estimated using the PC_{lin} algorithm.

oznaczanej PC_{OLCI}):

$$\log_{10}(PC) = k + l \cdot X_1 + m \cdot X_2 + n \cdot X_3 \tag{4.7}$$

gdzie $X_1 = \log_{10} \left(\frac{R_{rs}(560)}{R_{rs}(665)} \right)$, $X_2 = \log_{10} \left(\frac{R_{rs}(620)}{R_{rs}(665)} \right)$, $X_3 = \log_{10} \left(\frac{R_{rs}(620)}{R_{rs}(708.25)} \right)$, a współczynniki regresji wynosiły odpowiednio: k = 1.6944, l = 0.0880, m = -5.0926, n = -2.9566. Jak pokazała analiza błędów ($R^2 = 0.7285$, RMSE = 0.2634), zamiana długości fali nie wpłynęła znacząco na wynik algorytmu (rys. 4.20), co daje możliwość zastosowania algorytmu PC_{OLCI} (4.7) do danych satelitarnych z czujnika MERIS, a w przyszłości z czujnika OLCI.

4.2.3 Walidacja opracowanych i istniejących algorytmów

Validation of the developed, as well as known algorithms

W poprzednim podrozdziale opisany został sposób poszukiwania modelu najlepiej opisującego zależność stężenia PC od wartości $R_{\rm rs}$. Wszystkie opisane analizy przeprowadzono na całym dostępnym zestawie danych empirycznych. Jednak, aby móc ocenić czy określony algorytm jest stabilny i nie został "przetrenowany" należy zbiór danych treningowych oddzielić od zbioru danych walidacyjnych. W tym celu zastosowano walidację



RYSUNEK 4.20: Zależność pomiędzy wartościami stężenia PC zmierzonymi in situ, a obliczonymi przy wykorzystaniu algorytmu PC_{OLCI} .

FIGURE 4.20: Scatter plots showing the correlation between the PC concentrations measured in situ and estimated using the PC_{OLCI} algorithm.

krzyżową, opisaną w podrozdziale 3.6.1, którą przeprowadzono 5000 razy z losowo wybranymi danymi, w trakcie których mierzono i zapisywano liczone statystyki, a na końcu otrzymane wyniki uśredniono i porównano z wynikami statystyk dla modeli trenowanych i ocenianych na podstawie całego zestawu danych (tab. B.1 w załączniku B). Ocenia się, że model jest stabilny, jeżeli wyniki statystyk z walidacji krzyżowej nie odbiegają od tych uzyskanych dla całego zestawu danych (Craig i in. 2012). Ocenione zależności, uzyskane na podstawie własnych badań (podrozdział 4.2.2), a także rozważane wcześniej algorytmy znane z literatury (podrozdział 4.2.1) zestawiono w tablicy 4.5.

Oznaczenie al-	Postać algorytmu	Źródło
gorytmu		
$\mathrm{PC}_{\mathrm{ratio}}$	$\log (\mathbf{PC}) = k + l \log (R_{\rm rs}(\lambda_i)) \text{ advis } R_{\rm rs}(\lambda_i) \text{ to below atomytic } (1, 10)$	badania
(1 - 10)	$\log_{10}(\text{FC}) = k + i \cdot \log_{10}\left(\frac{R_{\text{rs}}(\lambda_j)}{R_{\text{rs}}(\lambda_j)}\right)$, guzle $\frac{R_{\text{rs}}(\lambda_j)}{R_{\text{rs}}(\lambda_j)}$ to kolejno stosunki (1–10)	własne
	z tab. 4.4	
$\mathrm{PC}_{\mathrm{pow}}$	$\log_{10}(\text{PC}) = k + l \cdot X + m \cdot X^2 + n \cdot X^3 + n \cdot X^4$ gdzie $X = \log_{10}\left(\frac{R_{\text{rs}}(\lambda_i)}{2}\right)$	badania
(1 - 10)	$\log_{10}(1 \text{ C}) = n + i + i + m + m + n + m + p + m + galie = 10g_{10} \left(R_{rs}(\lambda_j) \right),$	własne
	a $\frac{R_{\rm rs}(\lambda_i)}{R_{\rm rs}(\lambda_j)}$ to kolejno stosunki (1–10) z tab. 4.4	
DC	$\log (\mathbf{PC}) = h + l \cdot \mathbf{V} + m \cdot \mathbf{V} + m \cdot \mathbf{V} \text{rdrig} \mathbf{V} = \log \left(R_{\text{rs}}(595) \right)$	badania
PO_{lin}	$\log_{10}(PC) = k + l \cdot \Lambda_1 + m \cdot \Lambda_2 + n \cdot \Lambda_3, \text{ gdzle } \Lambda_1 = \log_{10}\left(\frac{1}{R_{rs}(660)}\right),$	własne
	$X_2 = \log_{10} \left(\frac{R_{\rm rs}(625)}{R_{\rm rs}(650)} \right), \ X_3 = \log_{10} \left(\frac{R_{\rm rs}(620)}{R_{\rm rs}(710)} \right)$	
DC	$\log (\mathbf{PC}) = k + l \cdot \mathbf{Y}_{1} + m \cdot \mathbf{Y}_{2} + m \cdot \mathbf{Y}_{3} \cdot \operatorname{rdzio} \mathbf{Y}_{1} = \log \left(R_{\mathrm{rs}}(560) \right)$	badania
r Colci	$\log_{10}(\mathbf{FC}) = k + l \cdot A_1 + m \cdot A_2 + n \cdot A_3, \text{ gdzle } A_1 = \log_{10} \left(\frac{R_{rs}(665)}{R_{rs}(665)} \right),$	własne
	$X_2 = \log_{10} \left(\frac{R_{\rm rs}(620)}{R_{\rm rs}(665)} \right), \ X_3 = \log_{10} \left(\frac{R_{\rm rs}(620)}{R_{\rm rs}(708.25)} \right)$	
DA93	$\log_{10}(PC) = k + l \cdot \log_{10} \left(R_{\rm rs}(600) + R_{\rm rs}(648) - R_{\rm rs}(624) \right)$	Dekker (1993)*
MM09	$\log_{10}(PC) = k + l \cdot \log_{10}\left(\frac{R_{rs}(700)}{R_{rs}(600)}\right)$	Mishra i in. $(2009)^*$
MS12	$\log_{10}(PC) = k + l \cdot \log_{10}\left(\frac{R_{rs}(709)}{R_{rs}(600)}\right)$	Mishra $(2012)^*$
HP10	$\log_{10}(PC) = k + l \cdot \log_{10} \left[\left(R_{rs}(615)^{-1} + R_{rs}(600)^{-1} \right) \cdot R_{rs}(725) \right]$	Hunter i in. $(2010)^*$

TABLICA 4.5: Zestawienie algorytmów ocenionych metodą walidacji krzyżowej.TABLE 4.5: Summary of the algorithms evaluated using cross-validation.

* zależności zmodyfikowane logarytmiczną transformacją zmiennych

W tablicy 4.5 pominięto zależności PC_{quad} , gdyż analiza błędów wskazywała na ich nieprzydatność w wodach Zatoki Gdańskiej, oraz zależność SY00, proponowaną przez Schallesa i Yacobiego (2000), która jest jednoznaczna z równaniem $PC_{ratio}(4)$. Łącznie ocenionych zostało 26 algorytmów, w tym 22 pochodzących z badań własnych oraz 4 znane z literatury. Z uwagi na objętość wyników analizy walidacji krzyżowej, tablicę B.1 ze współczynnikami najlepszego dopasowania oraz wynikami statystyk błędów dla wszystkich zbadanych zależności zamieszczono w załączniku B.

Wśród algorytmów PC_{ratio} wyniki błędów RMSE pomiędzy tymi wyznaczonymi dla calego zestawu danych, a tymi z walidacji krzyżowej najbardziej różniły się dla PC_{ratio4} i PC_{ratio5}, ale wciąż różnica ta była mniejsza niż 3.5%, stąd ocenia się, że algorytmy PC_{ratio} są stabilne. Wśród algorytmów PC_{pow} różnice w RMSE były już większe i wynosiły nawet około 20% dla PC_{pow2}, PC_{pow4}, PC_{pow8}, PC_{pow9} i PC_{pow10}, a dla pozostałych różnice te były mniejsze i wynosiły mniej niż 10%. Poza tym, algorytmy te generowały znaczną liczbę wartości odstających, przez co są mniej stabilne. Dla najlepszych wśród analizowanych algorytmów, PC_{lin} i PC_{OLCI}, różnica w RMSE wynosiła mniej niż 5%. Można zatem przyjąć, że algorytmy PC_{lin} i PC_{OLCI} są stabilne i mogą być stosowane do zdalnej estymacji wielkości stężenia PC. Natomiast dla algorytmów, znanych z literatury różnice w RMSE także były niewielkie (między 2% a 8%), zaś RMSE sam w sobie był znacznie wyższy dla każdego z tych algorytmów niż dla algorytmów z literatury, najmniejszy błąd był dla MS12 (RMSE = 0.3191), jednak błąd ten jest większy niż dla PC_{lin}, który daje najlepsze rezultaty ze wszystkich ocenianych algorytmów.

Na rysunku 4.21 przedstawiono rozkłady wartości współczynnika determinacji R^2 z przeprowadzonej 5000 krotnie walidacji krzyżowej dla dwóch najlepszych algorytmów postaci PC_{ratio} , a także dla PC_{lin} i PC_{OLCI} , oraz dwóch najlepszych algorytmów z literatury. Wartość średnia jest najwyższa dla PC_{lin} , a zakres wartości R^2 dla tego algorytmu jest najmniejszy. Inaczej jest dla algorytmów znanych z literatury, gdzie R^2 zmienia się praktycznie w całym możliwym zakresie wartości. Podobnie zaprezentowano rozkład wartości dla RMSE z walidacji krzyżowej dla tych samych algorytmów (rys. 4.22). Na rysunkach 4.21 i 4.22 zaprezentowano wykresy rozkładu dla wartości średniej z odchyleniem standardowym. Wykresy te były bardzo podobne do wykresów rozkładu dla mediany z pierwszym i trzecim kwartylem, co może świadczyć o normalnym rozkładzie wartości R^2 oraz RMSE.



RYSUNEK 4.21: Wykres rozkładu współczynnika determinacji z walidacji krzyżowej dla wybranych algorytmów. Zakres nieodstających to [średnia $\pm 3 * \text{odch.std.}$].

FIGURE 4.21: Box plots showing statistics of the coefficient of determination obtained during cross-validation of the selected algorithms. Range of non-outliers is $[mean \pm 3 * std.dev.].$



 $\label{eq:Rysunek} \begin{array}{l} \mbox{Rysunek 4.22: Wykres rozkładu błędu RMSE z walidacji krzyżowej dla wybranych algorytmów; zakres nieodstających to [średnia <math display="inline">\pm$ 3 * odch.std.] \end{array}

FIGURE 4.22: Box plots showing statistics of the RMSE obtained during cross-validation of the selected algorithms. Range of non-outliers is $[mean \pm 3 * std.dev.]$.

4.2.4 Analiza czułości algorytmu na zmiany stężenia chl-a

Sensitivity of the algorithm to the changes in chl-a concentration

Oczywistym jest, że przy wzroście stężenia PC, rosło będzie także stężenie chl-a, gdyż gatunki fitoplanktonu zawierające fikocyjaninę zawierają także chlorofil a, lecz odwrotna zależność nie koniecznie musi mieć miejsce. W przypadku gdy biomasa fitoplanktonu jest wysoka, ale w jego składzie nie występują gatunki z grupy cyjanobakterii, czyli te zawierające fikocyjaninę, stężenie chl-a może być wysokie, natomiast PC w tym samym czasie niskie. Na opracowanym na podstawie zebranych danych rysunku 4.23 pokazującym zależność stężenia PC od stężenia chl-a zaznaczono kolorem czerwonym takie właśnie przypadki, gdzie stężenie chl-a było wysokie, natomiast PC niskie.



RYSUNEK 4.23: Związek pomiędzy stężeniem PC a chl-a. Kolorem czerwonym oznaczono przypadki (#1–#5) gdy stężenie chl-a było wysokie, zaś PC niskie.



Dla tych przypadków policzono stężenie PC z wyznaczonych algorytmów PC_{lin} oraz PC_{OLCI} , aby sprawdzić czy algorytmy te dobrze sprawdzają się w wyżej opisanych przypadkach. Dla porównania policzono także stężenie PC z następującej zależności pomiędzy chl-*a* i PC:

$$\log_{10}(\text{PC}) = -0.7159 + 1.10118 \cdot \log_{10}(\text{chl-}a) \tag{4.8}$$

Wyniki tych obliczeń zaprezentowano w tablicy 4.6. Błąd RMSE dla obliczonych stężeń PC wynosił odpowiednio 0.1912, 0.2685, 0.5285 dla algorytmów PC_{lin} , PC_{OLCI} , oraz dla zależności (4.8).

TABLICA	4.6:	Stężenie	PC obli	czone	przy	wykorzyst	aniu (odpowiednich	algorytı	nów dla	ι sytu-
		acji, gd	y stężeni	e chl-a	ı było	wysokie.	#1-#	≠5 oznaczają	punkty v	wyróżnie	one na
		rys. 4.2	3.								

TABLE 4.6: P	C concentration	calculated by	y means	of the	e algorithms	for the	$ne \ cases$	when	chl-a
	concentration w	as high. #1–	#5 are	points .	highlighted is	$n \ the$	Fig. 4.23	3.	

	#1	#2	#3	#4	#5
$PC(in \ situ)[mg m^{-3}]$	0.42	1.51	3.46	3.01	3.09
chl-a (in situ) $[mg m^{-3}]$	22.27	20.01	30.91	26.55	24.85
$PC_{lin} [mg m^{-3}]$	0.19	2.09	2.19	3.53	2.98
$PC_{OLCI} [mg m^{-3}]$	0.50	4.65	4.67	5.76	4.29
PC z (4.8) $[mg m^{-3}]$	4.44	3.99	6.19	5.31	4.97

Wysokie wartości stężenia chl-*a* nie wpływają na zawyżanie wartości stężenia fikocyjaniny obliczonej z PC_{lin} . Może to wynikać z tego, że algorytm wykorzystuje kanały spektralne gdzie występuje maksimum absorpcji i fluorescencji światła przez fikocyjaninę, i przez to bardziej znaczący jest wpływ obecności PC, aniżeli chl-*a*. Natomiast wartości obliczone przy wykorzystaniu PC_{OLCI} są zawyżone, co może wynikać z faktu, że wśród kanałów MERIS i OLCI brak jest kanałów czułych na fluorescencję światła przez fikocyjaninę i zostały one zastąpione tymi, które są bardziej czułe na obecność chl-*a*. Wartości obliczone ze wzoru (4.8) także są znacznie zawyżone, ponieważ zakłada on liniową zależność pomiędzy zlogarytmowanymi wartościami PC i chl-*a*.

4.2.5 Praktyczne zastosowanie wyznaczonego algorytmu przy wykorzystaniu zdjęć satelitarnych z miernika MERIS

Practical use of the algorithm with optical spaceborne imagery acquired using MERIS

W niniejszej pracy, jako przykład zastosowania algorytmu PC_{OLCI} (4.7) przedstawiono mapy przestrzennego rozkładu stężenia PC otrzymane na podstawie danych z miernika MERIS umieszczonego na satelicie ENVISAT, które dostępne były raz na dobę. Z uwagi na fakt, że algorytm ten trenowany i walidowany był na reflektancji mierzonej z pokładu statku, zaprezentowane wartości mogą posiadać błędy z uwagi na wpływ atmosfery na wartości rejestrowane przez radiometry satelitarne. Jednak już teraz daje on informację o rozkładzie przestrzennym mierzonego parametru, a także możliwość porównania rozkładu stężenia PC z rozkładem przestrzennym stężenia chl-*a*.

Wykonano przykładowe mapy RGB, oraz rozkładu stężenia chl-a i PC dla trzech różnych dat (rys. 4.24). Stężenie obu barwników zostało policzone na podstawie reflektancji zmierzonej radiometrem satelitarnym MERIS. Do określenia stężenia chl-a skorzystano ze wzoru $C_a(0)_{\rm MD}$ zaproponowanego w programie DESAMBEM (zależność AIII.3 w Darecki i in. 2008, Woźniak i in. 2008) oraz ocenionego jako najlepszy do badania stężenia chl-*a* w Morzu Bałtyckim (Woźniak i in. 2014). Natomiast stężenie PC policzone zostało przy wykorzystaniu wzoru PC_{OLCI} (4.7).

Wybrane sceny na rysunku 4.24a przedstawiają rozkład stężeń barwników w kwietniu, kiedy wody Morza Bałtyckiego zdominowane są przez fitoplankton z grup okrzemek i bruzdnic, które nie posiadają w swoich komórkach fikocyjaniny. Dlatego po wschodniej stronie morza można zauważyć wysokie wartości steżenia chl-a. Przeważaja wartości z zakresu $6-10 \text{ mg m}^{-3}$, ale są też wartości dochodzące do 17 mg m^{-3} . Tymczasem steżenie PC na tym samym obszarze nie przekracza 1 mg m^{-3} , co mieści się w granicach błędu algorytmu PC_{OLCI}. Na zdjęciach zarejestrowanych w lipcu (rys. 4.24b), gdzie jest duże prawdopodobieństwo wystąpienia cyjanobakterii, rozkład chl-a różni się od rozkładu przestrzennego PC. W części centralnej otwartego morza wysokie wartości chl-a pokrywają się z wysokimi wartościami PC, jednak wzdłuż wybrzeży wschodnich wartości stężenia chl-a także są wysokie, natomiast wartości PC niskie. Może to sugerować niską zawartość cyjanobakterii w całkowitej biomasie fitoplanktonu w tym obszarze, tym samym dając błędne wyniki w ocenie biomasy cyjanobakterii, jeżeli w tym celu wykorzystywane byłoby stężenie chl-a. Natomiast na zdjęciach zarejestrowanych na początku sierpnia (rys. 4.24c), rozkład przestrzenny wartości stężenia PC oraz stężenia chl-a jest podobny, co może dawać informację o dominacji gatunków z grupy cyjanobakterii w biomasie fitoplanktonu.

Wszystkie kanały spektralne radiometru MERIS będą dostępne w nowym radiometrze satelitarnym–OLCI, który zainstalowany będzie na podkładzie satelitów Europejskiej Agencji Kosmicznej typu SENTINEL–3. Dlatego algorytm PC_{OLCI} będzie mógł wyko-rzystywać dane z obu radiometrów.

4.3 Wyznaczenie stężenia fikocyjaniny metodą PCA w obszarze Zatoki Gdańskiej

Estimation of phycocyanin concentration using the PCA-based method in the Gulf of Gdansk

Jak pokazane zostało w podrozdziale 4.2, wielkość reflektancji zdalnej (zawierającej informację o składzie wody morskiej) może być wykorzystana do opracowania algorytmów wyznaczających stężenie PC na podstawie funkcji reflektancji w wybranych kanałach spektralnych. W poniższym podrozdziale przedstawione jest inne podejście statystyczne



(c) 2004-08-06

RYSUNEK 4.24: Dane satelitarne z radiometru MERIS, w kolejności od lewej: zdjęcie RGB, rozkład przestrzenny PC, rozkład przestrzenny chl-a.

FIGURE 4.24: MERIS image; left: RGB image, center: spatial distribution of PC concentration, right: spatial distribution of chl-a concentration. do zagadnienia, a mianowicie analiza wykorzystująca informację zawartą w całym widmie $R_{\rm rs}$, a nie jedynie w dyskretnych kanałach spektralnych.

Wartości $R_{\rm rs}$ w wielu kanałach spektralnych są ze sobą silnie skorelowane, przez co niosą podobną informacje (rys. 4.25). W zakresie światła niebieskiego i czerwonego można zaobserwować wysoką korelację (bliską 1) w przedziale spektralnym o szerokości około 100 nm. Natomiast w zakresie światła zielonego, silna korelacja występuje w nieco węż-szym zakresie, około 50–75 nm. Pozwala to wnioskować, że wartości $R_{\rm rs}$ z przedziału $\Delta\lambda$ o szerokości nawet do 100 nm niosą podobną informację.



RYSUNEK 4.25: Krzywe określające stopień korelacji R_{ij} zmiennych $R_{rs}(\lambda_i)$ i $R_{rs}(\lambda_j)$. Przedstawiono jedynie dla kilku wybranych długości fali względem całego widma dla zachowania przejrzystości obrazu.

FIGURE 4.25: Plots showing the correlation R_{ij} between $R_{rs}(\lambda_i)$ and $R_{rs}(\lambda_j)$.

W celu wyróżnienia mniejszej liczby składowych zmienności widma $R_{\rm rs}$ zastosowano Analizę Głównych Składowych PCA (metoda ta opisana jest w podrozdziale 3.6.2). Ma ona na celu zamianę *n*-elementowego zbioru danych o *k* zmiennych, które są ze sobą skorelowane, w zbiór danych liniowo niezależnych nazywanych Głównymi Składowymi (Jolliffe 1986). Zastosowanie metody PCA pozwala na zmniejszenie ilości zmiennych, poprzez wybranie jedynie kilku Głównych Składowych mających znaczenie dla modelu. Metoda ta była już wykorzystywana z powodzeniem w fizyce (Rayner i in. 2003, Smith i in. 1996), w optyce morza (Fichot i in. 2008, Garver i in. 1994, Otero i Siegel 2004), a także w badaniach określających biooptyczne parametry z wykorzystaniem hiperspektralnych widm reflektancji zdalnej w wodach II rodzaju (Craig i in. 2012), do których zaliczane jest Morze Bałtyckie. W niniejszej pracy wykorzystano widma reflektancji zdalnej zmierzone w Zatoce Gdańskiej (podrozdział 4.1). Macierzą wejściową $X(n \times k)$ był *n*-elementowy zbiór hiperspektralnych unormowanych widm reflektancji zdalnej (n = 73 to liczba pomiarów) o k długościach fali (k = 121) (rys. 4.26). Widma reflektancji zdalnej unormowano w celu skupienia analizy na zmienności w kształcie widm reflektancji zdalnej, które mają bezpośrednio związek z właściwościami optycznymi fitoplanktonu korzystając z zależności:

$$\langle R_{\rm rs}(\lambda) \rangle = \frac{R_{\rm rs}(\lambda)}{\int_{400}^{800} R_{\rm rs}(\lambda) d\lambda}$$
(4.9)

gdzie $\langle R_{\rm rs}(\lambda) \rangle$ symbolizuje unormowane (bezwymiarowe) widma reflektancji zdalnej. Unormowanie danych zgodnie ze wzorem (4.9) spowodowało, że zminimalizowano wpływ wysokości widma na wariancję i przeprowadzona analiza PCA bardziej obrazuje czynniki wpływające na zmienność kształtu widma reflektancji, aniżeli na jego wysokość.



RYSUNEK 4.26: Unormowane widma reflektancji zdalnej wykorzystane w analizie PCA. FIGURE 4.26: Integral-normalised R_{rs} used in the PCA analysis.

Już pierwsze cztery Główne Składowe wyjaśniają łącznie 98.44% wariancji oryginalnego zbioru danych (rys. 4.27). Rodzaj oscylacji zaprezentowany dla ich wektorów własnych (kształt ładunków, rys. 4.27) można interpretować jako sygnaturę zmian we właściwościach optycznych komponentów wody morskiej. Na przykład, kształt ładunku pierwszej Składowej Głównej wskazuje na proces bądź procesy, które działają odwrotnie (zwiększenie bądź zmniejszenie wartości $R_{\rm rs}$) w zakresie fal niebieskich aniżeli na te w zakresie fal czerwonych. Kształt ładunku drugiego przypomina oscylacje w amplitudzie $\langle R_{\rm rs} \rangle$, ale nie pokazuje piku fluorescencji światła przez chl-*a* około 683 nm, sugerując brak związku z jego stężeniem. Ponadto w zakresie 400–550 nm prezentuje kształt przypominający kształt funkcji wykładniczej, co może wynikać z absorpcji światła przez CDOM. Takie próby interpretacji kształtu ładunków są jedynie rozważaniem hipotetycznego wpływu



RYSUNEK 4.27: Kształt ładunków (wektorów własnych) czterech pierwszych Składowych Głównych zmienności unormowanych widm $\langle R_{\rm rs} \rangle$ wraz z informacją jaki procent zmienności danych wejściowych one wyjaśniają.

FIGURE 4.27: The shape of loadings for modes 1–4 of PCA of $\langle R_{rs} \rangle$; the percentage of the explained variability of the input data is shown.

jaki mogą mieć składniki wody morskiej na Główne Składowe, nie stanowią jednak same w sobie rezultatów tej analizy.

Wyznaczone Główne Składowe użyte zostały jako zmienne objaśniające (niezależne) do estymacji stężenia PC przy użyciu regresji. Jak sugeruje Morrison (1990), czasami specyficzne, niezależne zmienne istotne dla badanego parametru mają duży udział w ostatnich Głównych Składowych, gdzie procentowa zawartość informacji jest bardzo mała i Składowa taka nie jest brana do analizy regresji przy tradycyjnym wykorzystaniu pierwszych kilku Głównych Składowych. Toteż zamiast regresji liniowej dla pierwszych kilku Składowych Głównych, śledząc prace Barnesa i in. (2014), wykorzystano metodę regresji krokowej. Z uwagi na logarytmiczno - normalny rozkład wartości zmiennej zależnej (PC), w regresji wykorzystano jej zlogarytmowaną transformację, otrzymując następującą zależność (dalej skrótowo oznaczaną PC_{PCA}):

$$\log_{10}(PC) = k_0 + k_1 \cdot P_1 + \dots + k_n \cdot P_n \tag{4.10}$$

gdzie $P_1, ..., P_n$, to odpowiednie, wybrane podczas regresji krokowej Główne Składowe, a $k_0, ..., k_n$ to współczynniki regresji. Zauważono, że w pierwszym kroku do modelu dodana została pierwsza Główna Składowa wyjaśniająca 88.24% zmienności danych wejściowych. Natomiast w drugim kroku wybrana została szósta Główna Składowa, która



RYSUNEK 4.28: Kształt ładunków generujących Główne Składowe wziętych ostatecznie do modelu. Pokazane w kolejności dołączania do modelu według wartości p.
FIGURE 4.28: The shape of loadings for modes of PCA used in model. Modes are shown in order of being included into the model with increasing p-value.

w tradycyjnym zastosowaniu metody PCA z wyborem pierwszych kilku Głównych Składowych mogłaby zostać pominięta (rys. 4.28). Zaś druga składowa dodana została do modelu dopiero w szóstym kroku.

Wykorzystując Główne Składowe określone podczas regresji krokowej, oraz wyznaczone współczynniki najlepszego dopasowania, obliczono stężenie PC i porównano z danymi zmierzonymi (rys. 4.29).

Widać, że wykorzystanie modelu PCA do estymacji stężenia PC daje bardzo dobre wyniki, $R^2 = 0.95$ oraz RMSE = 0.12, lepsze niż dla algorytmu PC_{lin}. Jednak metoda PCA jest metodą czysto statystyczną. Oznacza to, że jej wynik zależy od reprezentatywności danych treningowych na jakich model był "uczony" i jest poprawny dla warunków, jakie te dane pokrywają. Jest to model lokalny dla obszaru na którym zbierane były dane referencyjne, czyli dla Zatoki Gdańskiej.

Walidację stworzonego modelu przeprowadzono przy wykorzystaniu walidacji krzyżowej, opisanej w podrozdziale 3.6.1, a jej wyniki przedstawiono w tablicy 4.7.



RYSUNEK 4.29: U góry: zależność pomiędzy wartościami stężenia PC_{insitu} , a PC_{PCA} ; na wykresie przedstawiona jest podstawowa statystyka błędów, a także dodana jest prosta y = x dla lepszego zobrazowania zależności. Na dole: histogram stosunku PC_{PCA} do PC_{insitu} .

FIGURE 4.29: Above: PC_{insitu} vs. PC_{PCA} . Below: the histogram of the ratio of PC_{PCA} to PC_{insitu} .

Statystyki te ($R^2 = 0.89$, RMSE = 0.17) nie odbiegają znacznie od statystyk wyznaczonych dla modeli wykonanych na całym zbiorze danych ($R^2 = 0.95$, RMSE = 0.12), co świadczy o tym, że model jest stabilny. Oznacza to, że zebrany zbiór danych $R_{\rm rs}$ jest na tyle reprezentatywny dla danego obszaru, że wyznaczone tutaj ładunki mogą być wykorzystane do utworzenia nowych Głównych Składowych mając nowe widmo $R_{\rm rs}$ zmierzone w Zatoce Gdańskiej (szczegółowy opis w podrozdziale 3.6.2). I dalej przy wykorzystaniu opracowanej zależności z regresji można określić stężenie PC. Jednak należy mieć na uwadze wskazane powyżej ograniczenia metody PCA. Nowe zmierzone widmo $R_{\rm rs}$ musi mieścić się w zbiorze zmienności widm generujących powstałe ładunki.

- TABLICA 4.7: Wyniki uśrednionych statystyk z walidacji krzyżowej wykonanej 5000 razy dla modelu PCA.
- TABLE 4.7: Mean statistics of the cross-validation procedure conducted 5000 times for PCA model.

	R^2	RMSE	$\langle \varepsilon \rangle$	$F_{\rm med}$
walidacja krzyżowa	0.89	0.17	$3.92 \cdot 10^{-3}$	1.015



RYSUNEK 4.30: Symulowane widma reflektancji z kanałów spektralnych czujnika OLCI. FIGURE 4.30: Simulated R_{rs} spectra for the channels of the OLCI sensor.

4.3.1 Adaptacja metody PCA do danych satelitarnych

Adaptation of the PCA method to a satellite data set

Zaprezentowana powyżej metoda dobrze sprawdza się przy wykorzystaniu danych hiperspektralnych, jednak z uwagi na duże zainteresowanie możliwością wykorzystania modelu PCA do danych satelitarnych przeprowadzono zaprezentowane w podrozdziale 4.3 analizy na symulowanych multispektralnych danych satelitarnych. Symulacje takich danych z kanałami odpowiadającymi kanałom czujnika OLCI (Sentinel-3) wykonano wykorzystując zebrane widma hiperspektralne. Każdy z kanałów utworzono przez pomnożenie wartości reflektancji hiperspektralnych z zakresu danego kanału OLCI przez funkcję odpowiedzi spektralnej kanału, którą dobrze opisuje funkcja Gaussa, gdzie μ to długość fali środka kanału, a σ to szerokość kanału czujnika OLCI. W tym celu wykorzystano funkcję **gaussmf** w programie MATLAB. Stworzone w ten sposób widma przedstawiono na rysunku 4.30.



RYSUNEK 4.31: U góry: zależność pomiędzy wartościami stężenia PC_{insitu} , a PC_{PCA} ; na wykresie przedstawiona jest podstawowa statystyka błędów, a także dodana jest prosta y = x dla lepszego zobrazowania zależności Na dole: histogram stosunku PC_{PCA} do PC_{insitu} .

FIGURE 4.31: Above: PC_{insitu} vs. PC_{PCA} Below: the histogram of the ratio of PC_{PCA} to PC_{insitu} .

Następnie wszystkie kroki analizy PCA przeprowadzono jak poprzednio dla danych hiperspektralnych, tutaj zmieniła się jedynie wielkość macierzy wejściowej X z (73 × 121) na (73 × 15). Po zawężeniu zakresu spektralnego danych błąd RMSE przy zastosowaniu analizy PCA wzrósł około dwukrotnie, z 0.12 do 0.21 (rys. 4.31), jednak nadal jest to błąd akceptowalny w badaniach satelitarnych, mniejszy od błędu generowanego przy wykorzystaniu zależności PC_{OLCI} , gdzie $R^2 = 0.72$ i RMSE = 0.26.

Dla oceny stabilności modelu przeprowadzono, tak jak poprzednio, 5000-krotną walidację krzyżową. Wyniki przestawione w tablicy 4.8 sugerują stabilność modelu PCA do TABLICA 4.8: Wyniki uśrednionych statystyk z walidacji krzyżowej wykonanej 5000 razy dla modelu PCA na symulowanych danych satelitarnych.

 TABLE 4.8: Mean statistics of the cross-validation procedure conducted 5000 times for PCA model with satellite data set.

	R^2	RMSE	$\langle \varepsilon \rangle$	$F_{\rm med}$
walidacja krzyżowa	0.78	0.24	$4.29 \cdot 10^{-3}$	1.024

badania stężenia PC przy wykorzystaniu reflektancji z kanałów spektralnych czujnika OLCI.

Przedstawione modele PCA nie miały na celu tworzenia modelu do stosowania w zakresie globalnym, a raczej jest to prezentacja prostej i skutecznej metody na tworzenie modeli lokalnych, także na innych obszarach przybrzeżnych, gdzie przeprowadzono pomiary reflektancji zdalnej wody i zebrano odpowiednią ilość danych referencyjnych.

Rozdział 5

Identyfikacja gatunku dominującego w mieszaninie glonów metodami bezkontaktowymi

Identification of the dominant species in the mixed assemblages of phytoplankton by means of remote sensing

Jak zostało pokazane w rozdziale 4 pomiary reflektancji zdalnej $R_{\rm rs}$ ze zwiększoną rozdzielczością spektralną mogą być z powodzeniem wykorzystywane do zdalnego określania stężenia fikocyjaniny, które z kolei jest dobrze skorelowane z biomasą cyjanobakterii. Jednak informacja ta nie jest wystarczająca do określenia gatunku dominującego podczas występowania zakwitu cyjanobakterii. Jak pokazano na rysunku 5.1, dla trzech sytuacji, w których stężenie PC było w przybliżeniu podobne, skład taksonomiczny cyjanobakterii znacznie się od siebie różnił. Dlatego w kolejnej części pracy podjęto próbę identyfikacji gatunku dominującego w mieszaninie glonów na podstawie analizy widm reflektancji zdalnej $R_{\rm rs}$. W tym celu niezbędna była znajomość widm reflektancji bezkontaktowej charakterystycznych dla poszczególnych gatunków. Uzyskanie w warunkach naturalnych takich widm byłoby niemożliwe, dlatego za jedyne możliwe rozwiazanie uznano wykonanie pomiarów radiacyjnych w laboratorium na monokulturach fitoplanktonu. Przyjęto, że właściwości optyczne monokultur fitoplanktonu odpowiadają właściwościom optycznym badanych gatunków w środowisku naturalnym. Otrzymane w ten sposób widma $R_{\rm rs}^{\rm lab}$ poszczególnych gatunków wykorzystane zostały do opracowania odpowiedniego modelu matematycznego. Model ten, dzięki odpowiednim symulacjom, pozwolił na rozszerzenie analizowanego zbioru danych charakteryzujących zakwity badanych gatunków o widma reflektancji odpowiadające warunkom naturalnym, zarówno pod względem analizowanego zakresu stężeń, jak i warunków świetlnych panujących w naturalnych akwenach. Symulacje modelowe pozwoliły także na wygenerowanie odpowiednich zestawów danych z określonymi wzajemnymi proporcjami pomiędzy poszczególnymi grupami taksonomicznymi, które też wykorzystane zostały do oceny gatunku dominującego w mieszaninie.



- RYSUNEK 5.1: Skład taksonomiczny cyjanobakterii w próbach wody pobranych na stacji pomiarowej p104, w trzech kolejnych dniach, kiedy to wartości stężenia PC utrzymywały się na poziomie 4 mg m^{-3} . Na wykresach wskazano procentowy udział danego gatunku w biomasie cyjanobakterii.
- FIGURE 5.1: Comparison of taxonomic composition of cyanobacteria species in water samples taken in three days in row at the same station (p104) when the PC concentration was around 4 mg m^{-3} .

5.1 Charakterystyki widm reflektancji zdalnej wybranych gatunków fitoplanktonu

Characteristics of the remote sensing reflectance spectra for selected phytoplankton species

Wyniki pomiarów radiacji oddolnej L_u oraz oświetlenia odgórnego E_d wykonanych w laboratorium posłużyły do obliczenia widm R_{rs}^{lab} charakterystycznych dla badanych gatunków fitoplanktonu na podstawie zależności (3.7). Pomiary wykonano dla kilku koncentracji badanych glonów. Podczas pomiarów radiometrycznych pobierana była próbka wody do analizy spektrofotometrycznej w celu precyzyjnego określenia stężenia chl-*a* (tab. 5.1). Do ilościowej oceny koncentracji fitoplanktonu wybrano stężenie chl-*az* uwagi na to, że przeprowadzone pomiary radiometryczne wykorzystywane były jako dane walidacyjne do wyników symulacji z modelu HE52, gdzie parametrem określającym ilość fitoplanktonu na jednostkę objętości wody jest właśnie stężenie chl-*a*.

Gatunek	Chl- $a [\mathrm{mg} \mathrm{m}^{-3}]$
	20
Anabaena sp.	38
	81
	50
A floo amuao	97
A. Juos-aquae	130
	390
	8
	17
N. spumigena	23
	130
	260

TABLICA 5.1: Stężenie chl-*a* badanych glonów. TABLE 5.1: chl-*a concentration of the studied algae.*

Każdy z analizowanych gatunków charakteryzuje się innym składem i proporcjami barwników, co istotnie różnicuje absorpcję światła przez fitoplankton w różnych zakresach spektralnych. Także różne kształty i wielkość komórek poszczególnych gatunków, powodują zróżnicowanie właściwości rozpraszających, co razem z różnicami w absorpcji, istotnie zmienia kształt widm reflektancji zdalnej badanych gatunków fitoplanktonu (rys. 5.2). Wszystkie analizowane tutaj gatunki fitoplanktonu wykazują maksimum lokalne $R_{\rm rs}^{\rm lab}$ dla $\lambda\approx 550\,{\rm nm}$ oraz dla $\lambda\approx 660\,{\rm nm}.$ Maksimum dla długości fali $650\text{--}660\,{\rm nm}$ i towarzyszące mu minimum lokalne w $R_{\rm rs}^{\rm lab}$ dla długości fali $620{-}630\,{\rm nm}$ spowodowane są występowaniem fikocyjaniny, barwnika z grupy fikobilin, charakterystycznego jedynie dla cyjanobakterii. Dla N. spumigena wartości $R_{\rm rs}^{\rm lab}$ rosną wraz ze wzrostem ilości glonów w jednostce objętości wody w całym zakresie spektralnym, natomiast dla gatunku Anabaena sp. wzrost ten jest widoczny jedynie dla fal czerwonych ($\lambda > 650$ nm), a dla mniejszych długości fali zależność ta jest odwrotna, tj. $R_{\rm rs}^{\rm lab}$ maleje przy rosnącej ilości glonów w jednostce objętości wody. Dla gatunku A. flos-aquae, podobnie jak dla Anabaenasp. wzrost wartości $R_{\rm rs}^{\rm lab}$ wraz ze wzrostem koncentracji fitoplanktonu występuje jedynie w niewielkim zakresie spektralnym, od około 500 do 600 nm. Dla pozostałych długości fali wartości R_{rs}^{lab} maleją wraz ze wzrostem koncentracji fitoplanktonu. Może to wynikać z różnic jakie występują w kształcie i wielkości specyficznych współczynników absorpcji i rozpraszania dla badanych gatunków. W celu lepszego zobrazowania zmienności kształtu widm $R_{\rm rs}^{\rm lab}$, zostały one unormowane przy wykorzystaniu zależności (4.9). Zauważono, że lokalne maksima wyostrzają się wraz ze wzrostem ilości glonów w jednostce objętości wody, szczególnie dla $\lambda = 550 \,\mathrm{nm}$ (rys. 5.2, prawa kolumna). Zmierzone laboratoryjnie widma $R_{\rm rs}^{\rm lab}$ dla badanych gatunków fitoplanktonu w pierwszej kolejności posłużyły, jako dane do modyfikacji i walidacyji modelu Hydrolight-Ecolight HE52.



RYSUNEK 5.2: Zależność reflektancji zdalnej od długości fali światła przy wzrastającej koncentracji badanych gatunków fitoplanktonu; lewa kolumna—wartości rzeczywiste; prawa kolumna—wartości unormowane zgodnie z wyrażeniem (4.9).

FIGURE 5.2: The spectral dependence of the remote sensing reflectance for the studied phytoplankton species with increasing concentration, left: actual values, right: values normalized with equation (4.9).

5.2 Modelowanie widm reflektancji zdalnej przy pomocy modelu Hydrolight-Ecolight HE52

Remote sensing reflectance spectra modeling using Hydrolight-Ecolight HE52

Z uwagi na ograniczone możliwości uzyskania w wykonywanych laboratoryjnie pomiarach zakresów stężeń odpowiadających szerokiemu przedziałowi zmienności badanych gatunków fitoplanktonu w warunkach naturalnych, w pracy wykorzystano model Hydrolight-Ecolight HE52. Dane wejściowe do modelu dostosowano do specyficznych warunków bałtyckich. Model ten posłużył do symulacji zmienności widm reflektancji zdalnej w zależności od składu taksonomicznego zawartych w wodzie gatunków fitoplanktonu, przy dowolnym zakresie koncentracji badanych składników wody, a także dowolnej kombinacji wzajemnych proporcji stężeń tych składników.

Istotnymi danymi wejściowymi do modelu, były widma specyficznych współczynników absorpcji, rozpraszania i osłabiania, a także odpowiednio zdefiniowana funkcja fazowa. W początkowej fazie korzystano z czteroskładnikowego modelu "Case2 IOPs" (opis w podrozdziale 3.5.1), do określenia i dopasowania odpowiednich danych wejściowych, w szczególności funkcji fazowej. Następnie przy użyciu modelu "Measured IOPs" (opis w podrozdziale 3.5.2) dokonano weryfikacji oraz modelowano widma reflektancji zdalnej pojedynczych gatunków fitoplanktonu oraz ich kontrolowanych mieszanin.

5.2.1 Specyficzne widma absorpcji i rozpraszania światła przez składniki modelu

Chlorophyll-specific absorption and scattering coefficients of the model components

Jako dane wejściowe do modelu wykorzystano widma specyficznych współczynników absorpcji a i rozpraszania b światła przez podstawowe składniki optycznie znaczące.

A. Czysta woda

Właściwości optyczne czystej wody przyjęto zgodnie z opisem przedstawionym w podrozdziale 3.5.1.

B. Fitoplankton

Widma współczynników absorpcji i osłabiania światła przez *N. spumigena* i *A. flosaquae* uzyskane zostały na podstawie pomiarów laboratoryjnych przy użyciu spektrofotometru UV-VIS Perkin Elmer Lambda 850. Widmo rozpraszania światła przez badane gatunki uzyskano jako różnicę widm współczynników osłabiania i absorpcji. Dla gatunku *Anabaena* sp., dla którego nie było możliwe wykonanie pomiaru *a* i *c*, skorzystano z opublikowanych wyników wcześniejszych badań (Kutser i in. 2006b, Wojtasiewicz 2012). Każde z zaprezentowanych widm specyficznych współczynników absorpcji a^* oraz rozpraszania b^* światła przez badane gatunki fitoplanktonu (rys. 5.3–5.5) ma nieco inny kształt, charakterystyczny dla danego gatunku.



RYSUNEK 5.3: Widma specyficznych współczynników absorpcji (Wojtasiewicz 2012) i rozpraszania (Kutser i in. 2006b) światła przez Anabaena sp. wykorzystane w modelu.
 FIGURE 5.3: Chlorophyll-specific absorption (Wojtasiewicz 2012) and scatteting (Kutser i in. 2006b) coefficient for Anabaena sp. used in the model.

Pokazane tutaj widma specyficznych współczynników absorpcji różnią się kształtem od widm a^* prezentowanych w pracy Babina i in. (2003b), a zmierzonych w wodach Bałtyku, gdzie występuje mieszanina różnych gatunków fitoplanktonu. W prezentowanych przez nich wynikach wartości a^* były co najmniej dwa razy mniejsze niż w badaniach przeprowadzonych w ramach niniejszej pracy (rys. 5.3–5.5). U Babina i in. (2003b) maksimum lokalne dla $\lambda \approx 620$ nm było znacznie mniej zauważalne, przez co stosunek wartości $a^*(660 \text{ nm})/a^*(620 \text{ nm})$ był około 3 razy większy niż w pokazanych tu widmach a^* (rys. 5.3–5.5). Prezentowane widma a^* różnią się także od widma a^*_{fito} proponowanego jako domyślne dla fitoplanktonu w HE52 (rys. 3.11). Również widma b^* znane z literatury



- RYSUNEK 5.4: Widma specyficznych współczynników absorpcji i rozpraszania światła przez N. spumigena zmierzone podczas pomiarów laboratoryjnych i wykorzystane w modelu.
- FIGURE 5.4: Chlorophyll-specific absorption and scattering coefficient for N.spumigena used in the model.



RYSUNEK 5.5: Widma specyficznych współczynników absorpcji i rozpraszania światła przez A. flos-aquae zmierzone podczas pomiarów laboratoryjnych i wykorzystane w modelu.

FIGURE 5.5: Chlorophyll-specific absorption and scattering coefficient for A.flos-aquae used in the model.

(Babin i in. 2003a) mają inny kształt niż prezentowane tutaj, szczególnie dla gatunków *N. spumigena* i *Anabaena* sp., których kształt odbiega od kształtu funkcji potęgowej. Funkcja ta najczęściej wykorzystywana jest w modelach współczynnika rozpraszania (Boss i in. 2001, Mobley 1994). Różnice te wynikają prawdopodobnie z nakładania się widm *a* i *b* różnych składników optycznie czynnych w wodach naturalnych.

C. CDOM

Właściwości absorpcyjne substancji żółtych a_{CDOM} w modelu wyznaczone zostały przy użyciu zależności (3.11), gdzie przyjęto $\lambda_0 = 400 \text{ nm}$ oraz średnią wartość S = 0.0213 na podstawie prac Kowalczuka i Kaczmarka (1996), oraz Kowalczuka i in. (2005) dla wód Bałtyku. Na rysunku 5.6 przedstawiony jest typowy dla Bałtyku zakres widm a_{CDOM} wykorzystanych w modelu (Kowalczuk i Kaczmarek 1996, Kowalczuk i in. 2005).



RYSUNEK 5.6: Zakres wartości współczynnika absorpcji światła przez substancje żółte $a_{\text{CDOM}}(\lambda)$ wykorzystanych w modelowaniu ($\lambda_0 = 400 \text{ nm}$).

FIGURE 5.6: The range of the CDOM absorption coefficients $a_{\text{CDOM}}(\lambda)$ used in the model ($\lambda_0 = 400 \text{ nm}$).

D. Zawiesina mineralna

W Morzu Bałtyckim udział zawiesiny mineralnej w całkowitej masie cząstek jest stosunkowo niewielki w porównaniu do udziału zawiesiny organicznej (Babin i in. 2003b). Dodatkowo udział zawiesiny mineralnej nie wpływa istotnie na zmianę charakterystyk spektralnych $R_{\rm rs}$, a raczej na proporcjonalne zmiany wartości w całym omawianym w pracy zakresie spektralnym. Dlatego w modelu pominięto udział zawiesiny mineralnej i przyjęto jej koncentrację równą 0.

5.2.2 Funkcja fazowa wykorzystana w modelu

Phase function used in the model

Wymagane w modelu dane wejściowe: widma specyficznych współczynników absorpcji i rozpraszania zostały uzyskane na podstawie wykonanych pomiarów laboratoryjnych. Natomiast funkcja fazowa rozpraszania światła, która jest jednym z istotniejszych parametrów wejściowych do modelu, mająca znaczny wpływ na poprawność wyników, była nieznana. W literaturze brak jest przykładów funkcji, które można byłoby tu zastosować i które dawałyby zgodność pomiędzy wynikami symulacji $R_{\rm rs}^{\rm mod}$, a widmami zmierzonymi $R_{\rm rs}^{\rm lab}.$ W ramach poszukiwania najbardziej odpowiedniej funkcji fazowej dla każdego badanego gatunku fitoplanktonu wykonano ponad 1000 symulacji w HE52 przy wykorzystaniu czteroskładnikowego modelu "Case 2 IOPs". Pierwszym składnikiem modelu była czysta woda, jako drugi składnik przyjęto jeden gatunek fitoplanktonu, a trzeci i czwarty składnik pominięto, przyjmując ich koncentracje równe zero. Następnie symulowane widmo $R_{\rm rs}^{\rm mod}$ porównywano z odpowiednim widme
m $R_{\rm rs}^{\rm lab}$ zmierzonym w laboratorium. Symulacje $R_{\rm rs}^{\rm mod}$ dla każdego gatunku fitoplanktonu wykonywano przy stałych wartościach współczynników a i b, jedynie zmieniając funkcję fazową. Oświetlenie odgórne oraz reflektancję dna podczas tych symulacji przyjęto takie jak występowały w trakcie wykonywania pomiarów laboratoryjnych (rys. 3.8-3.9). Sprawdzono wpływ każdej z dostępnych w modelu "Case
2 IOPs" funkcji fazowych na widmo $R_{\rm rs}^{\rm mod}.$ Dodatkowo testowano szereg funkcji FF parametryzowanych różnymi wartościami współczynnika $B = b_{\rm b}/b$ (jak podano w podrozdziale 2.2.3), które nie były dostępne jako standardowe w HE52, zgodnie z zależnością (2.11). Wybrany zakres wartości B od 0.0010 do 0.1 z krokiem 0.0005, odpowiada wartościom tego współczynnika dla zawiesiny (Mobley i in. 2005).

Do zautomatyzowania wykonywanych symulacji użyto skryptu napisanego w programie MATLAB według wskazówek umieszczonych w dokumentacji do HE52 (Mobley i Sundman 1994). Zauważono, że po wprowadzeniu do modelu funkcji fazowych innych niż funkcje FF, symulowane widma reflektancji znacznie różniły się od widm zmierzonych podczas badań laboratoryjnych. Dlatego w kolejnych etapach skupiono się jedynie na doborze odpowiednich parametrów funkcji FF.

Podczas analizy wyników z symulacji zauważono, że zmiana współczynnika B określającego wartości parametrów μ i n funkcji FF wpływa znacząco na kształt widm $R_{\rm rs}(\lambda)$. Wartości współczynnika B powinny zmieniać się nie tylko dla zmieniającego się stężenia chl-a, ale także wraz ze zmianą długości fali, czego model "Case2 IOPs" nie uwzględnia, przyjmując jedną wartość współczynnika *B* parametryzującą funkcję fazową FF dla całego widma. W dalszej części pracy wyrażenie "funkcje fazowe FF" oznaczać będzie funkcję postaci (2.10) z różnymi parametrami μ i *n* określonymi wartością współczynnika *B*, zgodnie z zależnością (2.11). Na przykładzie gatunku *N. spumigena* dla dwóch różnych stężeń chl-*a*, odpowiednio 8 i 23 mg m⁻³, pokazano jak znaczne mogą być różnice w kształcie widma $R_{\rm rs}^{\rm mod}$ w zależności od wybranej funkcji fazowej FF (rys. 5.7–5.8).



RYSUNEK 5.7: Widma reflektancji zdalnej dla gatunku *N.spumigena* dla stężenia chl- $a=8 \text{ mg m}^{-3}$ uzyskane przy użyciu modelu "Case2 IOPs" dla kilku wybranych funkcji fazowych FF; wartości wybranych współczynników *B* parametryzujących funkcję FF przedstawione są w legendzie.

FIGURE 5.7: Remote sensing reflectance spectra for N.spumigena with chl- $a = 8 \text{ mg m}^{-3}$ obtained from the "Case2 IOPs" model for a few selected FF phase function.

Porównując wyniki z modelowania przeprowadzonego dla *N. spumigena* dla kilku wybranych funkcji fazowych FF z widmem zmierzonych w trakcie eksperymentu laboratoryjnego dla stężenia chl- $a = 17 \text{ mg m}^{-3}$ (rys. 5.9) zauważono, że $R_{\rm rs}^{\rm mod}$ z funkcją fazową FF określoną przez B = 0.0085 daje dobre przybliżenie w zakresie długości fali od 560 do 580 nm, natomiast zupełnie odbiega od $R_{\rm rs}^{\rm lab}$ w innych przedziałach. Podobnie jest dla funkcji fazowych FF parametryzowanych przez inne wartości współczynnika *B*. Na przykład dla B = 0.016, $R_{\rm rs}^{\rm mod}$ odpowiada $R_{\rm rs}^{\rm lab}$ w zakresie długości fali pomiędzy 640 a 670 nm, natomiast dla B = 0.011 poprawne przybliżenie jest widoczne jedynie dla długości fali 520 i 605 nm.

W omawianym przykładzie (rys. 5.9) przedstawiono zaledwie trzy z około dwustu analizowanych widm $R_{\rm rs}^{\rm mod}$ dla danego gatunku przy określonej wartości stężenia chl-a. Taką



RYSUNEK 5.8: Widma reflektancji zdalnej dla gatunku N.spumigena dla stężenia chl-a= 23 mg m^{-3} uzyskane przy użyciu modelu "Case2 IOPs" dla kilku wybranych funkcji fazowych FF; wartości wybranych współczynników B parametryzujących funkcję FF przedstawione są w legendzie.

FIGURE 5.8: Remote sensing reflectance spectra for N.spumigena with $chl-a = 23 \text{ mg m}^{-3}$ obtained from the "Case2 IOPs" model for a few selected FF phase function.

analizę porównawczą pomiędzy odpowiednimi widmami $R_{\rm rs}^{\rm lab}$ i $R_{\rm rs}^{\rm mod}$ wykonano dla każdego z badanych gatunków fitoplanktonu przy wszystkich stężeniach chl-*a* dla których przeprowadzono pomiary laboratoryjne i posiadano dane referencyjne. W wyniku przeprowadzonych analiz uzyskano wartości współczynników *B* zależne od długości fali określające parametry funkcji fazowych FF badanych gatunków fitoplanktonu dla których symulacje $R_{\rm rs}^{\rm mod}$ dają dobre dopasowanie do $R_{\rm rs}^{\rm lab}$ (rys. 5.10).

Na przykładzie charakterystyki spektralnej współczynnika B wyznaczonej dla N. spumigena (rys. 5.10), widać wyraźną zmienność wartości współczynnika B wraz ze zmianą długości fali, która nie spełnia warunków określonych przez funkcję potęgową, jak często się zakłada w modelach (Mobley i Sundman 1994). Wyniki te częściowo potwierdzają wcześniejsze obserwacje (np. Ahn i in. 1992, Whitmire i in. 2010) z badań przeprowadzonych na innych gatunkach fitoplanktonu. Zakres wartości współczynników B określonych w niniejszej pracy mieści się w zakresie przedstawionym przez Whitmire'a i in. (2010), jednak kształt całego widma jest inny. W wodach I rodzaju przyjmuje się najczęściej, że współczynnik B jest stały przy zmieniającej się długości fali (np. Whitmire i in. 2007).

W celu przeprowadzenia symulacji dla dowolnej wartości stężenia chl-a konieczne jest dalej znalezienie związku pomiędzy $B(\lambda)$, a stężeniem chl-a. Aby uzyskać te zależności, zbadano regresję liniową metodą najmniejszych kwadratów pomiędzy zlogarytmowaną



- RYSUNEK 5.9: Widma reflektancji zdalnej dla gatunku N.spumigena dla stężenia chl-a= 17 mg m⁻³ zmierzone w trakcie eksperymentu laboratoryjnego oraz uzyskane przy użyciu modelu "Case2 IOPs" dla kilku wybranych funkcji fazowych FF. Wartości wybranych współczynników B parametryzujących funkcję FF przedstawione są w legendzie.
- FIGURE 5.9: Remote sensing reflectance spectra for N.spumigena with chl-a= 17 mg m^{-3} measured in the laboratory conditions and obtained from the "Case2 IOPs" model for a few selected FF phase function.



RYSUNEK 5.10: Opracowane charakterystyki spektralne współczynnika Bna przykładzie $N.\ spumigena$ przy kilku stężeniach chl-a.

FIGURE 5.10: Spectrally dependent B coefficient for a few chl-a concentration for N.spumigena.
wartością chl-a, a współczynnikiem B osobno dla każdej badanej długości fali, wykorzystując zależność:

$$B(\lambda) = k(\lambda) + l(\lambda) \cdot \log_{10}(C_a)$$
(5.1)

gdzie k i l to zmienne spektralnie współczynniki regresji, przedstawione w tablicy C.1 w załączniku C. Wyznaczone zależności posłużyły do określenia zmiennych spektralnie funkcji fazowych FF w modelu. Podobną postać zależności współczynnika B od stężenia chl-a można znaleźć w literaturze (np. Ulloa i in. 1994), ale przy założeniu, że współczynnik B jest stały spektralnie.

5.2.3 Weryfikacja poprawności modelu

Verification of the model

Symulowane widma $R_{\rm rs}^{\rm mod}$ dla badanych gatunków fitoplanktonu zweryfikowano na podstawie pomiarów laboratoryjnych $R_{\rm rs}^{\rm lab}$. W tym celu wykorzystano model "Measured IOPs". Danymi wejściowymi do modelu były całkowite współczynniki $a(\lambda)$ i $c(\lambda)$ zmierzone w laboratorium (podrozdział 5.2.1), odpowiedni współczynnik $B(\lambda)$ określający funkcje fazowe FF (podrozdział 5.2.2) oraz zdefiniowane warunki brzegowe odpowiadające warunkom występującym podczas pomiarów laboratoryjnych. Porównanie pomiędzy $R_{\rm rs}^{\rm lab}$ i $R_{\rm rs}^{\rm mod}$, zaprezentowane na przykładzie *N. spumigena* (rys. 5.11–5.15), pokazuje poprawność dopasowania funkcji fazowej FF (podrozdział 5.2.2) dla badanego gatunku fitoplanktonu w modelu odtwarzającym widma reflektancji zdalnych.

Zauważyć można, że model nie daje poprawnego odwzorowania dla długości fali w okolicach 680 nm, które odpowiada zakresowi spektralnemu fluorescencji światła przez chl-a(rys. 5.11–5.15). Może to świadczyć o niewystarczającym uwzględnieniu w modelu zjawiska fluorescencji, które może powodować podwyższenie wartości $R_{\rm rs}$. Jednak standardowy model fluorescencji w HE52 nie odpowiada specyficznym warunkom bałtyckim, a określenie parametru wydajności fluorescencji wykracza poza zakres tej pracy. Warto tu dodać, że prezentowane w pracy wyniki obejmują zakres spektralny do 650 nm, dlatego też to względnie niewielkie niedopasowanie, w tym zakresie spektralnym, nie wpływa na ich poprawność.



RYSUNEK 5.11: Porównanie widma $R_{\rm rs}$ zmierzonego w laboratorium oraz symulowanego za pomocą modelu "Measured IOPs" na przykładzie *N. spumigena* dla stężenia chl- $a = 8 \,\mathrm{mg}\,\mathrm{m}^{-3}$.

FIGURE 5.11: Comparison of the $R_{\rm rs}$ measured in the laboratory and obtained from "Measured IOPs" model for N.spumigena for chl-a = $8 \,{\rm mg \, m^{-3}}$.



RYSUNEK 5.12: Porównanie widma $R_{\rm rs}$ zmierzonego w laboratorium oraz symulowanego za pomocą modelu "Measured IOPs" na przykładzie *N. spumigena* dla stężenia chl- $a = 17 \,{\rm mg \, m^{-3}}$.

FIGURE 5.12: Comparison of the $R_{\rm rs}$ measured in the laboratory and obtained from "Measured IOPs" model for N.spumigena for chl-a = 17 mg m⁻³.



- RYSUNEK 5.13: Porównanie widma $R_{\rm rs}$ zmierzonego w laboratorium oraz symulowanego za pomocą modelu "Measured IOPs" na przykładzie *N. spumigena* dla stężenia chl- $a = 23 \,{\rm mg \, m^{-3}}$.
- FIGURE 5.13: Comparison of the $R_{\rm rs}$ measured in the laboratory and obtained from "Measured IOPs" model for N.spumigena for chl-a = $23 \,{\rm mg \, m^{-3}}$.



RYSUNEK 5.14: Porównanie widma $R_{\rm rs}$ zmierzonego w laboratorium oraz symulowanego za pomocą modelu "Measured IOPs" na przykładzie *N. spumigena* dla stężenia chl- $a = 130 \,{\rm mg}\,{\rm m}^{-3}$.

FIGURE 5.14: Comparison of the R_{rs} measured in the laboratory and obtained from "Measured IOPs" model for N.spumigena for chl-a = $130 \,\mathrm{mg \, m^{-3}}$.



RYSUNEK 5.15: Porównanie widma $R_{\rm rs}$ zmierzonego w laboratorium oraz symulowanego za pomocą modelu "Measured IOPs" na przykładzie *N. spumigena* dla stężenia chl- $a = 260 \,{\rm mg}\,{\rm m}^{-3}$.

FIGURE 5.15: Comparison of the R_{rs} measured in the laboratory and obtained from "Measured IOPs" model for N.spumigena for chl-a = 260 mg m^{-3} .

5.2.4 Symulacje widm reflektancji zdalnej dla badanych gatunków fitoplanktonu

Simulations of the remote sensing reflectance for studied phytoplankton species

Do symulacji widm $R_{\rm rs}^{\rm mod}$ wykorzystano model "Measured IOPs", który daje dobrą zgodność z pomiarami laboratoryjnymi (podrozdział 5.2.3). Podczas modelowania widm $R_{\rm rs}^{\rm mod}$ w środowisku naturalnym wprowadzano takie jak wcześniej parametry zmienne spektralnie tj.: całkowite współczynniki absorpcji $a(\lambda)$ i osłabiania $c(\lambda)$, oraz współczynnik $B(\lambda)$, natomiast oświetlenie odgórne przyjęto średnie z przeprowadzonych pomiarów *in situ* (rys. 3.4). Symulacje wykonano zakładając, że w Morzu Bałtyckim dla głębokości powyżej 15 m dno nie wpływa na wartości reflektancji wychodzącej z wody. W pierwszej kolejności wykonano symulacje $R_{\rm rs}$ osobno dla każdego z badanych gatunków. We wszystkich przypadkach można zauważyć mocny wzrost wartości dla fal dłuższych niż 660 nm, gdzie występuje zjawisko fluorescencji. Częściowo wynika to z różnic w charakterystykach spektralnych pomiędzy $E_d^{\rm lab}$ (rys. 3.4) dochodzącymi do powierzchni wody podczas pomiarów *in situ* w morzu.

Dla N. spumigena występuje wzrost wartości $R_{\rm rs}^{\rm mod}$ wraz ze wzrostem stężenia chl- $a^{N.spumigena}$

w zakresie całego badanego widma (rys. 5.16). Szczególnie wzrost ten jest widoczny w zakresach spektralnych około 550 nm i 680 nm, gdzie występują największe różnice pomiędzy wartościami $R_{\rm rs}$, podczas gdy dla światła niebieskiego widmo $R_{\rm rs}^{\rm mod}$ prawie w ogóle nie zmienia się ze zmianą stężenia chl- $a^{N.spumigena}$. Natomiast dla gatunku Anabaena sp. (rys. 5.16), odwrotnie niż w przypadku N. spumigena, występuje spadek wartości $R_{\rm rs}^{\rm mod}$ wraz ze wzrostem stężenia chl- $a^{Anabaenasp.}$ w zakresie spektralnym do 630 nm; dla fal dłuższych wartości $R_{\rm rs}^{\rm mod}$ wzrastają przy rosnących wartościach stężeń chl- $a^{Anabaenasp.}$. Jeszcze inaczej zachowują się widma $R_{\rm rs}^{\rm mod}$ dla A. flos-aquae (rys. 5.16). Dla zakresu spektralnego poniżej 510 nm, wartości $R_{\rm rs}^{\rm mod}$ zmniejszają się wraz ze wzrostem stężenia chl- $a^{A.flos-aquae}$, natomiast dla fal dłuższych zależność jest odwrotna. Największe różnice w widmach $R_{\rm rs}^{\rm mod}$ dla badanych gatunków występują w zakresach spektralnych 400–460 nm oraz 550–650 nm. Oznacza to, że te obszary mogą być wykorzystane w analizie widm w celu ich rozróżnienia i dalej wskazania gatunku dominującego.

W kolejnym kroku sprawdzono wpływ zróżnicowania ilości CDOM w wodzie na charakterystyk
i $R_{\rm rs}^{\rm mod}.$ Do poszczególnych gatunków fitoplanktonu o wysokim stężeniu chl-
 a (50 mg m^{-3}) dodano CDOM w trzech koncentracjach, niskiej $(a_{\text{CDOM}}(400) = 0.2 \text{ m}^{-1}),$ umiarkowanej $(a_{\text{CDOM}}(400) = 1.5 \text{ m}^{-1})$, oraz wysokiej $(a_{\text{CDOM}}(400) = 3.5 \text{ m}^{-1})$ (rys. 5.17). Niski poziom zawartości substancji żółtych nie wpływał na kształt widm $R_{\rm rs}^{\rm mod}$ generowanych przez fitoplankton o tak wysokim stężeniu chl-a, ale już dla umiarkowanej, a jeszcze wyraźniej dla wysokiej zawartości CDOM w wodzie, kształt widm R_{rs}^{mod} dla fal z zakresu 400-560 nm, znacznie się zmieniał. W tym zakresie, wraz ze wzrostem ilości CDOM, obniżone zostały wartości $R_{\rm rs}^{\rm mod}$, oraz wygładzone wszystkie piki, które były widoczne dla widm $R_{\rm rs}^{\rm mod}$ poszczególnych gatunków fitoplanktonu. Widać też niewielkie różnice w wysokości piku dla długości fali około 690 nm spowodowane wpływem fluorescencji światła przez CDOM. Zauważono, że udział CDOM w wodzie minimalizuje różnice w widmach $R_{\rm rs}^{\rm mod}$ symulowanych dla pojedynczych gatunków fitoplankto
nu w zakresie spektralnym pomiędzy 400 a 500 nm. Oznacza to, że ten zakres spektralny, wskazany wcześniej jako potencjalnie użyteczny przy identyfikacji gatunku dominującego, w wodach zawierających CDOM nie wykazuje już takiego potencjału, i tym samym identyfikacja staje się trudniejsza.





FIGURE 5.16: Remote sensing reflectance spectra $R_{\rm rs}^{\rm mod}$ for N. spumigena, Anabaena sp. and A. flos-aquae, respectively for increasing chl-a concentration from 10 to $100\,{\rm mg\,m^{-3}}$ simulated by means of 'Measured IOPs' HE52 model.



- RYSUNEK 5.17: Widma reflektancji zdalne
j $R_{\rm rs}^{\rm mod}$ dla badanych gatunków fitoplanktonu: N. spumigena, Anabaena sp., A. flos-aquae przy stężeniu chl-a równym 50 mg m $^{-3}$ i obecności CDOM, modelowane przy wykorzystaniu modelu "Measured IOPs" HE52.
- FIGURE 5.17: Remote sensing reflectance spectra R_{rs}^{mod} for N. spumigena, Anabaena sp. and A. flos-aquae, respectively for chl-a =50 mg m⁻³ with increasing CDOM concentration simulated by means of "Measured IOPs" HE52 model.

5.2.5 Zmiany w kształcie widm modelowanej reflektancji zdalnej dla kontrolowanych mieszanin fitoplanktonu

Analysis of changes in the shape of the modelled remote sensing reflectance spectra for the controlled phytoplankton assemblages

W kolejnym kroku sprawdzono jak zmienia się kształt widm $R_{\rm rs}^{\rm mod}$, gdy w wodzie znajduje się nie tylko jeden gatunek cyjanobakterii, ale ich mieszaniny. Początkowo analizowano zmiany w kształcie widm R_{rs}^{mod} generowanych przez wodę zawierającą mieszaninę glonów dla wzrastającej wartości stężenia chl-a^{N.spumigena}, gdzie dodano A. flos-aquae o stężeniu chl- $a^{A.flos-aquae}$ równym 20 mg m⁻³ (rys. 5.18a). Widać, że wariancja wartości $R_{\rm rs}^{\rm mod}$ jest mniejsza niż dla przypadku prezentowanego na pierwszym wykresie rysunku 5.16. Szczególnie widać wpływ A. flos-aquae w przedziale fal niebieskich, gdzie dla symulowanych widm reflektancji przy udziale jedynie N. spumigena wartość $R_{\rm rs}^{\rm mod}$ wzrastała wraz ze wzrostem stężenia chl- $a^{N.spumigena}$. Tutaj jest odwrotnie, wartości R_{rs}^{mod} maleją wraz ze wzrostem stężenia chl-a^{N.spumigena}. Wpływ obecności A. flos-aquae przestaje być widoczny dopiero dla stężenia chl- $a^{N.spumigena}$ większego od $70 \,\mathrm{mg \, m^{-3}}$. Następnie analizowano podobną sytuację — określoną też przez wzrastający udział stężenia $chl-a^{N.spumigena}$ przy stałej wartości stężenia $chl-a^{A.flos-aquae}$, ale dodatkowo dodano do modelu CDOM $(a_{\text{CDOM}}(400) = 1.5 \text{ m}^{-1})$ (rys. 5.18b). Zgodnie z oczekiwaniami, widać silny wpływ w zakresie fal 400–500 nm, gdzie udział CDOM w mieszaninie znacznie obniżył wartości $R_{\rm rs}^{\rm mod}$. Dalej (rys. 5.18c), do mieszaniny dodano także Anabaena sp. o stałym stężeniu chl- $a^{Anabaena}$ sp. równym 20 mg m^{-3} , a wartość stężenia chl- $a^{A.flos-aquae}$ podniesiono do $50 \,\mathrm{mg}\,\mathrm{m}^{-3}$. Te zmiany jeszcze silniej wpłynęły na zmniejszenie się wariancji wartości widm $R_{\rm rs}^{\rm mod}$. Wzrosły wartości $R_{\rm rs}^{\rm mod}$ dla fal dłuższych niż 650 nm, co prawdopodobnie jest spowodowane udziałem Anabaena sp. w mieszaninie, gdyż ten gatunek wykazywał wysokie wartości widm $R_{\rm rs}^{\rm mod}$ w tym zakresie. Natomiast dla takiej samej mieszaniny glonów (rys. 5.18d), ale z zawartością CDOM, kształt widm zmienia się w zakresie 400–500 nm, gdzie wartości $R_{\rm rs}^{\rm mod}$ obniżają się.

Dla widm $R_{\rm rs}^{\rm mod}$ modelowanych dla kontrolowanej mieszaniny glonów, przy wzrastającej wartości chl- $a^{A.flos-aquae}$ oraz przy stałym udziale *N. spumigena* w mieszanie, gdzie stężenie chl- $a^{N.spumigena}$ równe było 20 mg m⁻³, widać zmniejszenie wariancji wartości $R_{\rm rs}^{\rm mod}$ w zakresie 400–500 nm, prawdopodobnie spowodowane wpływem *N. spumigena* (rys. 5.19a). Wzrost stężenia chl- $a^{A.flos-aquae}$ w całkowitym stężeniu chl-*a* nie zwiększa wariancji wartości $R_{\rm rs}^{\rm mod}$ i pozostają one bardzo zbliżone do siebie w tym zakresie. Udział CDOM w składzie prezentowanej mieszaniny spowodował znaczny spadek wartości $R_{\rm rs}^{\rm mod}$ w zakresie 400–500 nm, a szczególnie w zakresie 400–440 nm (rys. 5.19b). A także wpłynął na zmianę kształtu widm $R_{\rm rs}^{\rm mod}$. Następnie zbadano zmiany w kształcie widm $R_{\rm rs}^{\rm mod}$



RYSUNEK 5.18: Zmiany w kształcie R_{rs}^{mod} dla wzrastającego stężenia chl- $a^{N.spumigena}$ przy stałych wartościach stężeń pozostałych składników wody ujętych w modelu. FIGURE 5.18: Changes in the shape of R_{rs}^{mod} for increasing concentration of chl- $a^{N.spumigena}$

and constant concentration of the other components of model.

przy wzrastającym udziale A. flos-aquae oraz dla stałej wartości koncentracji N. spumigena (chl- $a^{N.spumigena} = 50 \text{ mg m}^{-3}$) i Anabaena sp. (chl- $a^{Anabaena \text{ sp.}} = 20 \text{ mg m}^{-3}$) (rys. 5.19c). Tak jak poprzednio, zmniejszyła się wariancja wartości $R_{\rm rs}^{\rm mod}$, a wpływ udziału N. spumigena i Anabaena sp. w mieszaninie najbardziej zauważalny jest w zakresie fal niebieskich. Jednak nadal można tutaj zauważyć cechy charakterystyczne dla widm $R_{\rm rs}^{\rm mod}$ symulowanych przy udziale jedynie A. flos-aquae, nawet gdy wartość stężenia chl- $a^{N.spumigena}$ jest tak duża. Dla fal dłuższych niż 530 nm, kształt widm praktycznie się nie zmienił od widm $R_{\rm rs}^{\rm mod}$ przy udziale jedynie A. flos-aquae.



RYSUNEK 5.19: Zmiany w kształcie R^{mod}_{rs} dla wzrastającego stężenia chl-a^{A.flos-aquae} przy stałych wartościach stężeń pozostałych składników wody ujętych w modelu.
 FIGURE 5.19: Changes in the shape of R^{mod}_{rs} for increasing concentration of chl-a^{A.flos-aquae} and constant concentration of the other components of model.

5.3 Możliwość rozróżnienia składnika dominującego przy wykorzystaniu indeksu podobieństwa

Identification of the dominant component by means of similarity index

Wykorzystując widma $R_{\rm rs}^{\rm mod}$ (podrozdział 5.2.5) zaproponowano metodę na rozróżnienie składnika dominującego w mieszaninie glonów przy użyciu indeksu podobieństwa (SI) (podrozdział 3.6.3). Przykładowo zaprezentowano możliwość wyróżnienia mieszanin glonów, w których gatunkiem dominującym jest *N. spumigena*, który jest gatunkiem toksycznym i możliwość jego zdalnej identyfikacji budzi największe zainteresowanie. Dlatego też widmem referencyjnym we wszystkich zaprezentowanych przykładach było widmo $R_{\rm rs}^{\rm mod}$ dla maksymalnego stężenia chl- $a^{N.spumigena}$ używanego podczas symulacji, równego 100 mg m⁻³. Widmo referencyjne $R_{\rm rs}^{\rm mod}$ wybrano dla wartości stężenia chl-*a*odpowiadającego rzeczywistym wartościom uzyskanym w trakcie zakwitów cyjanobakterii w Morzu Bałtyckim (np. Kutser 2004).

W pierwszym kroku sprawdzono wartości SI, jakie otrzymano dla dwóch skrajnych przypadków: widm $R_{\rm rs}$ generowanych przez wodę morską jedynie z zawartością N. spumigena oraz przez wodę morską z A. flos-aquae, ze wzrastającym stężeniem chl-a (rys. 5.20). Jako drugi gatunek wybrano A. flos-aquae, jako że oba te gatunki najczęściej występują razem, a często też razem współtworzą zakwity w wodach Morza Bałtyckiego. Zauważono, że dla stężeń chl-a poniżej 20 mg m^{-3} różnice w kształcie widm są tak niewielkie, że brak jest zmian w wartościach SI. Dla wyższych stężeń chl-a, różnice SI dla obu przypadków się zwiększają i dla stężenia chl-a powyżej 50 mg m^{-3} dla gatunku N. spumigena, wartość SI mocno wzrasta, podczas gdy dla A. flos-aquae pozostaje prawie niezmieniona, a wartością maksymalną jest 0.4.



RYSUNEK 5.20: Indeks podobieństwa dla *N. spumigena* oraz *A. flos-aquae*, gdzie widmem referencyjnym jest $R_{\rm rs}^{\rm mod}$ dla *N. spumigena* o stężeniu chl- $a = 100 \,{\rm mg \, m^{-3}}$.

FIGURE 5.20: Similarity index for N.spumigena and A.flos-aquae where reference spectrum is $R_{\rm rs}^{\rm mod}$ for N.spumigena for chl-a = 100 mg m⁻³.

Wykorzystanie indeksu SI obliczonego dla całego zakresu spektralnego może prowadzić do mylnych wniosków (rys. 5.20), jako że, nawet dla wysokich stężeń chl-*a* (równych 40– 50 mg m^{-3}) różnice wartości SI dla widm $R_{\rm rs}^{\rm mod}$ generowanych przez różne zawartości *A. flos-aquae* lub *N. spumigena* w wodzie są zbyt małe. Dlatego znaleziono przedział spektralny, gdzie widma $R_{\rm rs}^{\rm mod}$ uzyskane dla *N. spumigena* i *A. flos-aquae* wykazują maksymalne różnice w kształcie. W tym celu zbadano cały szereg różnych zakresów



RYSUNEK 5.21: Indeks podobieństwa liczony w zakresie spektralnym: 560–660 nm dla N. spumigena oraz A. flos-aquae, gdzie widmem referencyjnym jest $R_{\rm rs}^{\rm mod}$ dla N. spumigena o stężeniu chl-a = 100 mg m⁻³.

FIGURE 5.21: Similarity index calculated for spectral range from 560 to 660 nm for N.spumigena and A.flos-aquae where reference spectrum is $R_{\rm rs}^{\rm mod}$ for N.spumigena for chl-a = 100 mg m⁻³.

spektralnych i dla każdego liczono SI dla wskazanych wcześniej dwóch przypadków. Stwierdzono, że SI wykazuje największe różnice, pozwalające rozróżnić oba badane gatunki, w przedziale 560–660 nm. W tym zakresie spektralnym, już dla najniższych stężeń chl-a, wartość SI jest dwukrotnie wyższa w przypadku dominacji N. spumigena w stosunku do sytuacji, gdzie dominuje A. flos-aquae (rys. 5.21). Dla rosnącej koncentracji N. spumigena SI silnie wzrasta, osiągając wartość 0.6 już dla stężenia chl-a równego $20 \,\mathrm{mg}\,\mathrm{m}^{-3}$. Natomiast w przypadku A. flos-aquae wartość SI pozostaje praktycznie niezmienna i równa jest 0.2 dla wszystkich wartości badanych stężeń chl-a. Biorąc pod uwagę wnioski z analizy widm $R_{\rm rs}^{\rm mod}$ prezentowanych w podrozdziale 5.2.4 nie jest zaskakującym, że najlepszym zakresem spektralnym do rozróżnienia gatunku dominującego jest przedział od 560 do 660 nm. We wskazanym zakresie spektralnym występują małe różnice w kształcie widma specyficznego współczynnika absorpcji (rys. 5.3–5.5), co może być spowodowane podobnym składem barwników podstawowych, a jedynie zróżnicowaniem barwników pomocniczych. Natomiast znacznie różni się kształt i wielkość specyficznego współczynnika rozpraszania (rys. 5.3–5.5) na który wpływ ma wielkość i kształt komórek badanych gatunków fitoplanktonu, ale też to w jaki sposób komórki te łączą się (agregują) w wodzie (rys. 2.4, tab. 3.2).

Wskazane okno spektralne, wykazujące największe różnice w kształtach widm badanych dwóch gatunków, ma jeszcze jedną zaletę przy wykorzystaniu w wodach II rodzaju —

w zakresie tym występuje minimalny wpływ udziału CDOM (rys. 5.22). Nawet wysokie zawartości CDOM, które znacznie wpływają na zmianę kształtu widm $R_{\rm rs}$, co zaprezentowano w poprzednim podrozdziale, mają niewielki wpływ na wartości SI we wskazanym oknie spektralnym (rys. 5.23).



RYSUNEK 5.22: Widma współczynników absorpcji światła przez poszczególne składniki wody morskiej z wyróżnieniem zakresu spektralnego, gdzie liczono SI. Przedstawiono tu średnie wartości współczynnika a uzyskane na podstawie materiału eksperymentalnego zebranego na Zatoce Gdańskiej.

FIGURE 5.22: The shape of the absorption coefficients of the optically significant seawater components with highlighted spectral range where SI was calculated.

Następnie policzono SI we wskazanym przedziale spektralnym dla kontrolowanej mieszaniny glonów, gdzie udział chl- $a^{N.spumigena}$ w całkowitym stężeniu chl-a wzrastał liniowo (rys. 5.24). Przy 30–50 procentowym udziale chl- $a^{N.spumigena}$ w całkowitym stężeniu chl-aSI wynosi około 0.5 i wzrasta wraz ze wzrostem udziału chl- $a^{N.spumigena}$ w całkowitym stężeniu chl-a. Jest to przykład zastosowania SI do identyfikacji gatunku dominującego w mieszaninie. Podobnie można zastosować wskaźnik SI przy identyfikacji innego dominanta w mieszaninie, który różni się optycznie we wskazanym zakresie spektralnym. Jak zauważono powyżej, duży wpływ na możliwość identyfikacji wykorzystując SI mają właściwości rozpraszające tych organizmów. Można więc oczekiwać, że podobnie łatwo można zidentyfikować inny gatunek dominujący w mieszaninie glonów, które różnią się kształtem i rozmiarami komórek bądź ich agregatów. W przedstawionej metodzie, kluczowym jest posiadanie widma referencyjnego.

Indeks podobieństwa wykorzystywano z powodzeniem we wcześniejszych badaniach do identyfikacji gatunku dominującego w mieszaninie glonów (Craig i in. 2006, Kirkpatrick



RYSUNEK 5.23: Indeks SI dla wzrastającej wartości stężenia chl- $a^{N.spumigena}$ z różną zawartością CDOM, od niskiej ($a_{\text{CDOM}}(400) = 0.2 \text{ m}^{-1}$) przez średnią ($a_{\text{CDOM}}(400) = 1.5 \text{ m}^{-1}$) po wysoką ($a_{\text{CDOM}}(400) = 3.5 \text{ m}^{-1}$) w zakresie spektralnym 560–660 nm.

FIGURE 5.23: Similarity index calculated for increasing chl- $a^{N.spumigena}$ with different CDOM concentration (low- $a_{CDOM}(400) = 0.2 \text{ m}^{-1}$, medium- $a_{CDOM}(400) = 1.5 \text{ m}^{-1}$, and high- $a_{CDOM}(400) = 3.5 \text{ m}^{-1}$) within selected spectral range 560–660 nm.

i in. 2000, Millie i in. 1997, Torrecilla i in. 2012, Wojtasiewicz 2012). Jednak w poprzednich badaniach wektorami na podstawie których liczono wskaźnik SI były widma absorpcji. W niniejszej pracy z powodzeniem wykorzystano widma $R_{\rm rs}$, jako parametr możliwy do zdalnego określenia, nawet z poziomu satelitarnego.

Zmodyfikowany na potrzeby tej pracy model "Measured IOPs" HE52 może być w przyszłości wykorzystany także w analogicznych zagadnieniach, mających na celu opracowanie algorytmów na zdalne określanie stężenia czy dominacji innych gatunków fitoplanktonu lub wybranych pozostałych komponentów wody morskiej.



RYSUNEK 5.24: SI dla mieszaniny glonów ze wzrastającym udziałem chl- $a^{N.spumigena}$ w całkowitym stężeniu chl-a, gdzie widmem referencyjnych jest $R_{\rm rs}^{\rm mod}$ dla N. spumigena o stężeniu chl- $a = 100 \,{\rm mg}\,{\rm m}^{-3}$.

FIGURE 5.24: SI calculated for algae assemblages for increasing concentration of chl- $a^{N.spumigena}$ where reference spectrum is $R_{\rm rs}^{\rm mod}$ for N.spumigena for chl- $a = 100 \,{\rm mg \, m^{-3}}$.

Rozdział 6

Podsumowanie i wnioski końcowe

Summary and final conclusions

W prezentowanej pracy skupiono się na bezkontaktowej ocenie zjawiska określanego mianem zakwitów, występujących w porze letniej w Morzu Bałtyckim. Zakwity te najczęściej zdominowane są przez gatunki cyjanobakterii. Zbadano możliwość ilościowej oceny biomasy cyjanobakterii metodami zdalnymi, poprzez estymację stężenia fikocyjaniny przy wykorzystaniu odpowiednio dobranych funkcji reflektancji zdalnej, a także opracowano i zaprezentowano metodę identyfikacji gatunku dominującego w mieszaninie fitoplanktonu w wodzie.

Podsumowując przedstawione w pracy wyniki można stwierdzić, że pomimo trudności wynikających ze złożoności optycznych charakterystyk wód Zatoki Gdańskiej istnieją realne możliwości zdalnego określania stężenia fikocyjaniny, które dobrze koreluje się z biomasą cyjanobakterii. Dla tego parametru opracowano, przedstawiono i oceniono pierwsze lokalne algorytmy. Zaproponowane algorytmy oparto na funkcji wykorzystującej odpowiednio dobrane kanały spektralne, jak i statystyczną metodę PCA opartą na analizie widm reflektancji zdalnej w całym rozważanym zakresie spektralnym. Przedstawiono także wersję algorytmu dostosowaną do kanałów spektralnych dostępnych w radiometrach satelitarnych typu MERIS i OLCI z zastrzeżeniem, że dają one gorsze wyniki od tych proponowanych z użyciem pierwotnie rekomendowanych w pracy kanałów spektralnych. Otrzymane rezultaty potwierdzają postulat o konieczności wprowadzenia nowych kanałów spektralnych do radiometrów satelitarnych, m.in. kanału czułego na fluorescencję światła przze fikocyjaninę.

W oparciu o wyniki analizy modelowanych charakterystyk spektralnych reflektancji zdalnych stwierdzono, że możliwa jest identyfikacja gatunku dominującego w mieszaninie glonów przy wykorzystaniu indeksu podobieństwa. W tym celu konieczne jest posiadanie widma referencyjnego. Zaprojektowane i wykonane pomiary radiacyjne w laboratorium na monokulturach fitoplanktonu pozwoliły uzyskać widma reflektancji bezkontaktowej charakterystyczne dla poszczególnych gatunków. Otrzymane w ten sposób widma wykorzystano następnie do opracowania modelu, który pozwala na rozszerzenie analizowanego zbioru danych charakteryzujących zakwity badanych gatunków o widma reflektancji odpowiadające warunkom naturalnym, zarówno pod względem analizowanego zakresu stężeń, jak i warunków świetlnych panujących w naturalnych akwenach. Przeprowadzone symulacje modelowe pozwoliły także na wygenerowanie odpowiednich zestawów danych z określonymi wzajemnymi proporcjami pomiędzy poszczególnymi grupami taksonomicznymi, które wykorzystane zostały do zdalnej oceny gatunku dominującego w mieszaninie.

Główne wnioski z pracy można sformułować następująco:

- Opracowano algorytm wykorzystujący kanały spektralne: 595 nm, 620 nm, 625 nm, 650 nm, 660 nm oraz 710 nm, pozwalający na bezkontaktową ocenę ilościową stężenia fikocyjaniny, biomarkera cyjanobakterii, w wodach Zatoki Gdańskiej.
- Spośród wykorzystanych w pracy metod statystycznych do opracowywania algorytmów, najlepszą dokładność estymacji stężenia fikocyjaniny uzyskano wykorzystując statystyczną metodę PCA oraz dane hiperspektralne.
- Zaproponowano metodykę laboratoryjnych pomiarów widm reflektancji zdalnej dla monokultur fitoplanktonu, pozwalającą na uzyskanie wzorcowych danych dla potrzeb identyfikacji gatunku dominującego.
- Ustalono, że dla potrzeb modelowania widm reflektancji zdalnej na podstawie rzeczywistych właściwości optycznych w wodach Zatoki Gdańskiej można wykorzystać zaproponowane w pracy funkcje fazowe Fourniera-Foranda sparametryzowane współczynnikiem $B = b_b/b$, jednak uwzględniając jego zmienność względem długości fali. Stanowi to istotną innowację w porównaniu do parametryzacji proponowanej w standardowej wersji modelu Hydrolight-Ecolight 5.2.
- Stwierdzono, że określone w pracy wartości współczynnika $B(\lambda)$ i jego zależności od stężenia chl-*a* dla badanych gatunków cyjanobakterii pozwalają na opracowanie modelu poprawnie symulującego widma $R_{\rm rs}$ wody z udziałem cyjanobakterii dominujących podczas letnich zakwitów w Morzu Bałtyckim.
- Identyfikacja gatunku dominującego w mieszaninie glonów przy wykorzystaniu widm $R_{\rm rs}^{\rm mod}$ jest możliwa na podstawie wskaźnika SI.

Przedstawiony w pracy model poprawnie symulujący widma $R_{\rm rs}$ wody z udziałem cyjanobakterii często dominujących letnie zakwity w Morzu Bałtyckim w przyszłości może być wykorzystany do stworzenia tablic, tzw. LUT (ang. *look-up table*), w których zgromadzono by widma charakterystyczne dla różnych warunków występujących w danym akwenie. Posiadanie takich tablic umożliwiło by porównanie widma $R_{\rm rs}$ zmierzonego *in situ* z widmem $R_{\rm rs}^{\rm mod}$ z tablic. Przy wykorzystaniu np. metody najmniejszych kwadratów możliwe byłoby znalezienie widma $R_{\rm rs}^{\rm mod}$ o najbardziej zbliżonym kształcie i wysokości, oraz parametrów wejściowych, określających IOP wody, generujących to widmo $R_{\rm rs}$. Metoda ta umożliwiłaby określenie ilości najbardziej prawdopodobnych składników wody morskiej. Analiza odpowiednich tablic LUT, wygenerowanych na podstawie opracowanego w pracy modelu, może stanowić kolejne zadania badawcze realizowane w przyszłości.

Spis rysunków

2.1	Widmo współczynnika absorpcji światła przez czystą wodę	8
2.2	Widma specyficznych współczynników absorpcji światła przez wybrane	
	barwniki	10
2.3	Widmo współczynnika rozpraszania	12
2.4	Różnorodność kształtów i wielkości komórek fitoplanktonu	14
$2.5 \\ 2.6$	Porównanie funkcji FF dla wybranych wartości współczynnika B Zależność pomiędzy współczynnikiem załamania (n) i współczynnikiem nachylenia rozkładu Junge'a rozmiarów cząstek (μ) dla kilku wybranych	17
	współczynników B	18
3.1	Optvczny układ mierników	24
3.2	Liczba pomiarów przeprowadzonych w poszczególnych miesiącach w la- tach 2012 i 2013	25
33	Rozmieszczenie stacji pomiarowych w obszarze Zatoki Gdańskiej	26
3.4	Oświetlenie odgórne dochodzące do powierzchni wody podczas przepro- wadzonych pomiarów <i>in situ</i>	-0 97
3.5	Zdjęcia mierników RAMSES TriOS podczas wykonywania pomiarów na iednostec bedowzej k/h Oceanograf 2	21
3.6	Spektralna zależność błędu wywołanego efektem samozacieniania się mier-	21
97	nika radiacji oddolnej	29
3.7 3.8	Widmo oświetlenia zewnętrznego stosowanego podczas pomiarów labora-	33
3.9	toryjnych, oraz wprowadzone do modelu	34
	laboratoryjnych i wprowadzona do modelu	34
3.10	Współczynnik absorpcji i rozpraszania światła przez czystą wodę wyko- rzystany w modelu HE52	37
3.11	Widmo specyficznego współczynnika absorpcji $a_{\text{fito}}^*(\lambda)$ proponowane w modelu "Case2 IOPs" HE52	38
4.1	Relatywny udział CDOM, fitoplanktonu oraz NAP w całkowitym współ- czynniku absorpcji dla dwóch długości fali	48
4.2	Średni udział liczby komórek z grupy cyjanobakterij w całkowitej liczbie	10
	komórek fitoplanktonu w próbkach badanych w różnych okresach	49
4.3	Histogram wartości stężenia PC dla wykorzystanego materiału ekspery-	50
ΛΛ	Rozkład wartości stażenia chla oraz PC dla wykorzystanego materiału	50
4.4	eksperymentalnego	50

4.5	Zakres zmienności badanych widm $R_{\rm rs}$ z zaznaczonymi zakresami spek- tralnymi, gdzie występuje maksimum absorpcji oraz emisji światła przez fikocyjanino	51
4.6	Średnie wartości $R_{\rm rs}$ oraz średnie wartości pomniejszone i powiększone o odpowiadające im odchylenia standardowe dla sytuacji gdy wartość ste-	91
4.7	żenia chl-a jest mniejsza bądź równa wartości przeciętnej (4.6 mg m-3) Średnie wartości $R_{\rm rs}$ oraz średnie wartości pomniejszone i powiększone	53
	o odpowiadające im odchylenia standardowe dla sytuacji gdy wartość stężenia chl-a jest większa od wartości przeciętnej $(4.6 \mathrm{mg}\mathrm{m}^{-3})$	53
4.8	Średnie wartości $R_{\rm rs}$ oraz średnie wartości pomniejszone i powiększone o odpowiadające im odchylenia standardowedla sytuacji gdy wartość stę-	
4.9	żenia PC jest mniejsza bądź równa wartości przeciętnej (0.84 mg m^{-3}) Średnie wartości $R_{\rm rs}$ oraz średnie wartości pomniejszone i powiększone o odpowiadające im odchylenia standardowe dla sytuacji gdy wartość ste-	54
4.10	żenia PC jest większa od przeciętnej $(0.84 \mathrm{mg}\mathrm{m}^{-3})$	54
	o odpowiadające im odchylenia standardowe dla sytuacji gdy wartość sto- sunku liczby komórek cyjanobakterii do liczby komórek wszystkich grup fitoplanktonu jest mniejsza bądź równa 0.5	55
4.11	Średnie wartości $R_{\rm rs}$ oraz średnie wartości pomniejszone i powiększone o odpowiadające im odchylenia standardowe dla sytuacji gdy wartość sto- sunku liczby komórek cyjanobakterij do liczby komórek wszystkich grup	
4.12	fitoplanktonu jest większa niż 0.5	55
4 13	o odpowiadające im odchylenia standardowe dla sytuacji gdy wartosc $a_{\text{CDOM}}(400)$ jest mniejsza bądź równa wartości przeciętnej $(1.02 \text{ m}^{-1}))$.	56
1.10	o odpowiadające im odchylenia standardowe dla sytuacji gdy wartość $a_{\text{CDOM}}(400)$ jest większa od wartości przeciętnej (1.02 m^{-1})	56
4.14	Średnie wartości $R_{\rm rs}$ i odpowiadające im odchylenia standardowe dla sy- tuacji gdy wartość SD jest mniejsza bądź równa wartości przeciętnej (3.5 m)	57
4.15	Srednie wartości $R_{\rm rs}$ i odpowiadające im odchylenia standardowe dla sy- tuacji gdy wartość SD jest większa od wartości przeciętnej $(3.5 \mathrm{m})$	57
4.10	mowanych wartości reflektancji zdalnej w wybranych długościach fali \ldots	61
4.17	Wspołczynnik determinacji R^2 zależności opisanej (4.3) dla kombinacji kanałów $R_{\rm rs}(\lambda_i)/R_{\rm rs}(\lambda_j)$ w zakresie spektralnym 400–750 nm	64
4.18	Po lewej: zależność zlogarytmowanej wartości stężenia fikocyjaniny od wartości logarytmu ze stosunku reflektancji zdalnej w dwóch różnych dłu- rościach fali. Po prawaj: widma <i>B</i> brane pod uware w analizie z zazna-	
4 10	czonymi kanałami spektralnymi wykorzystanymi w regresji	65
4.19	Zależność pomiędzy wartościami stężenia PC zmierzonymi $in situ,$ a ob- liczonymi przy wykorzystaniu algorytmu PC_{lin}	69
4.20	Zależność pomiędzy wartościami stężenia PC zmierzonymi <i>in situ</i> , a ob- liczonymi przy wykorzystaniu algorytmu PC _{OLCI}	70
4.21	Wykres rozkładu współczynnika determinacji z walidacji krzyżowej dla wybranych algorytmów	73
4.22	Wykres rozkładu błędu RMSE z walidacji krzyżowej dla wybranych algo- rytmów	73

4.23	Związek pomiędzy stężeniem PC a chl- a	. 74
4.24	Dane satelitarne z radiometru MERIS, w kolejności od lewej: zdjęcie RGB,	
4.95	rozkład przestrzenny PC, rozkład przestrzenny chl- a	. 77
4.25	Krzywe okresiające stopien koreiacji R_{ij} zmiennych $R_{rs}(\lambda_i)$ i $R_{rs}(\lambda_j)$. 78 70
4.20	Kaztalt ladunków (waktorów własnych) aztoroch pierwszych Składowych	. 19
4.27	Głównych zmienności unormowanych widm B_{rec}	80
4.28	Kształt ładunków generujących Główne Składowe wzietych ostatecznie	. 00
1.20	do modelu	. 81
4.29	U góry: zależność pomiędzy wartościami stężenia PC_{insitu} , a PC _{PCA} . Na	
	dole: histogram stosunku PC_{PCA} do PC_{insitu}	. 82
4.30	Symulowane widma reflektancji z kanałów spektralnych czujnika OLCI .	. 83
4.31	U góry: zależność pomiędzy wartościami stężeni a $PC_{insitu},$ a $\mathrm{PC}_{\mathrm{PCA}}.$ Na	
	dole: histogram stosunku PC_{PCA} do PC_{insitu}	. 84
5.1	Skład taksonomiczny cyjanobakterij w próbkach wody pobranych na stacij	
0.1	pomiarowej p104, w trzech kolejnych dniach, kiedy to wartości stężenia	
	PC utrzymywały się na poziomie 4 mg m^{-3}	. 87
5.2	Zależność reflektancji zdalnej od długości fali światła przy wzrastającej	
	koncentracji badanych gatunków fitoplanktonu $\ \ldots\ \ldots\ \ldots\ \ldots\ \ldots$. 89
5.3	Widma specyficznych współczynników absorpcji i rozpraszania światła	
	przez Anabaena sp. wykorzystane w modelu	. 91
5.4	Widma specyficznych współczynników absorpcji i rozpraszania światła	
	przez <i>N. spumigena</i> zmierzone podczas pomiarów laboratoryjnych i wy-	0.9
ББ	Widma angerfiggnych wzpółgzwpików abgorneji i rozprogrania świetla	. 92
0.0	przez A flos-aguae zmierzone podczas pomiarów laboratoryinych i wy-	
	korzystane w modelu	. 92
5.6	Zakres wartości współczynnika absorpcji światła przez substancje żółte	-
	$a_{\rm CDOM}(\lambda)$ wykorzystanych w modelowaniu	. 93
5.7	Widma reflektancji zdalnej dla gatunku N. spumigena dla stężenia chl-a=	
	$8{\rm mg}{\rm m}^{-3}$ uzyskane przy użyciu modelu "Case 2 ${\rm IOPs}$ " dla kilku wybra-	
	nych funkcji fazowych FF	. 95
5.8	Widma reflektancji zdalnej dla gatunku $N.spumigena$ dla stężenia chl- $a=$	
	23 mg m ⁻⁵ uzyskane przy uzyciu modelu "Case2 IOPs" dla kilku wybra-	06
5.0	Nidma reflektancji zdalnoj dla gatunku N grumigene dla stoženja chl q	. 90
0.9	17 mg m^{-3} zmierzone w trakcje ekspervmentu laboratorvinego oraz uzv-	
	skane przy użyciu modelu "Case2 IOPs" dla kilku wybranych funkcii	
	fazowych FF	. 97
5.10	Opracowane charakterystyki spektralne współczynnik a ${\cal B}$ na przykładzie	
	N. spumigena przy kilku stężeniach chl-a	. 97
5.11	Porównanie widma $R_{\rm rs}$ zmierzonego w laboratorium oraz symulowanego	
	za pomocą modelu "Measured IOPs" na przykładzie $N.$ spumigena dla	
F 10	stężenia chl- $a = 8 \text{ mg m}^{-3}$. 99
5.12	Porownanie widma $K_{\rm rs}$ zmierzonego w laboratorium oraz symulowanego	
	za pomocą modelu "Measured IOFS na przykładzie <i>N. spumigena</i> dla steżenia chl. $a = 17 \mathrm{mg}\mathrm{m}^{-3}$	00
	$\operatorname{support}_{2}\operatorname{cm}$. 39

5.13	Porównanie widma $R_{\rm rs}$ zmierzonego w laboratorium oraz symulowanego za pomoca modelu. Mossured IOPs" na przykładzie N. crumiacna dla
	stężenia chl- $a = 23 \text{ mg m}^{-3} \dots \dots$
5.14	Porównanie widma $R_{\rm rs}$ zmierzonego w laboratorium oraz symulowanego
	za pomocą modelu "Measured IOPs" na przykładzie <i>N. spumigena</i> dla
F 1F	stężenia chl- $a = 130 \mathrm{mg m^{-3}}$
5.15	Porownanie widma $R_{\rm rs}$ zmierzonego w laboratorium oraz symulowanego za pomoca modelu. Measured IOPs" na przykładzie N snumigeną dla
	steżenia chl- $a = 260 \text{ mg m}^{-3} \dots \dots$
5.16	Widma reflektancji zdalnej $R_{\rm rs}^{\rm mod}$ odpowiednio dla, N. spumigena, Ana-
	baena sp. i A. flos-aquae przy stężeniu chl-a wzrastającym od 10 do
	$100 \mathrm{mg}\mathrm{m}^{-3}$ modelowane przy wykorzystaniu modelu "Measured IOPs"
517	HE52
0.17	<i>N.spumiaena, Anabaena</i> sp., <i>A. flos-aquae</i> przy steżeniu chl- <i>a</i> równym
	50 mg m^{-3} i obecności CDOM, modelowane przy wykorzystaniu modelu
	"Measured IOPs" HE52
5.18	Zmiany w kształcie $R_{\rm rs}^{\rm mod}$ dla wzrastającego stężenia chl- $a^{N.spumigena}$ przy
F 10	stałych wartościach stężeń pozostałych składników wody ujętych w modelu 106
5.19	Zimany w kształcie R_{rs}^{max} dla wzrastającego stężenia cni- <i>a</i> nyce wywe przy stałych wartościach steżeń pozostałych składników wody ujetych w modelu 107
5.20	Indeks podobieństwa dla <i>N. spumigena</i> oraz <i>A. flos-aquae</i> , gdzie widmem
	referencyjnym jest $R_{\rm rs}^{\rm mod}$ dla <i>N. spumigena</i> o stężeniu chl- <i>a</i> = 100 mg m ⁻³ 108
5.21	Indeks podobieństwa liczony w zakresie spektralnym: 560–660 nm dla $N\!.$
	spumigena oraz A. flos-aquae, gdzie widmem referencyjnym jest $R_{\rm rs}^{\rm mod}$ dla
5 99	<i>N. spumigena</i> o stężeniu chl- $a = 100 \text{ mg m}^{-5}$
0.22	wody morskiej z wyróżnieniem zakresu spektralnego gdzie liczono SI 110
5.23	Indeks SI dla wzrastającej wartości stężenia chl- $a^{N.spumigena}$ z różną
	zawartością CDOM, od niskiej $(a_{\rm CDOM}(400) = 0.2{\rm m}^{-1})$ przez średnią
	$(a_{\text{CDOM}}(400) = 1.5 \text{ m}^{-1})$ po wysoką $(a_{\text{CDOM}}(400) = 3.5 \text{ m}^{-1})$ w zakresie
5.04	spektralnym $560-660$ nm \ldots
5.24	SI ula illeszaniny glonow ze wzrastającym udziałem chl- $a^{1,spannigena}$ w całkowitym steżeniu chl- a gdzie widnem referencyjnych jest R^{mod} dla
	<i>N. spumiqena</i> o stężeniu chl- $a = 100 \text{ mg m}^{-3}$

Spis tablic

$2.1 \\ 2.2$	Główne barwniki występujące w poszczególnych grupach fitoplanktonu . . 11 Wartości n i μ użyte do wygenerowania funkcji fazowych FF zaprezento-	Ĺ
	wanych na rys. 2.5	7
3.1	Współrzędne stacji pomiarowych	5
3.2	Zdjęcia badanych gatunków fitoplanktonu	2
3.3	Wykorzystane w pracy modele HE52	3
4.1	Zestawienie weryfikowanych algorytmów znanych z literatury 58	3
4.2	Współczynniki najlepszego dopasowania zależności (4.1) dla wód Zatoki	
	Gdańskiej oraz statystyka błędów)
4.3	Współczynniki najlepszego dopasowania zależności (4.2) dla wód Zatoki	
	Gdańskiej oraz statystyka błędów)
4.4	Wartości współczynników oraz podstawowa statystyka dla regresji opisa-	
	nej (4.3) dla wybranych kombinacji kanałów λ_i i λ_i	1
4.5	Zestawienie algorytmów ocenionych metodą walidacji krzyżowej 71	L
4.6	Steżenie PC obliczone przy wykorzystaniu odpowiednich algorytmów dla	
	sytuacji gdy stężenie chl- <i>a</i> było wysokie	5
4.7	Wyniki uśrednionych statystyk z walidacji krzyżowej wykonanej 5000 razy	
	dla modelu PCA	3
4.8	Wyniki uśrednionych statystyk z walidacji krzyżowej wykonanej 5000 razy	
	dla modelu PCA na symulowanych danych satelitarnych	5
5.1	Stężenie chl- a badanych glonów	3
A.1	Wyniki z analiz regresji dla tworzonych algorytmów $\mathrm{PC}_{\mathrm{quad}}$ i $\mathrm{PC}_{\mathrm{pow}}$ od-	
	powiednio opisanych zależnościami (4.4) i (4.5)	3
B.1	Wyniki z walidacji krzyżowej algorytmów przedstawionych w pracy w tab. 4.513	38
C.1	Opracowane wartości współczynników najlepszego dopasowania dla za-	
	leżności opisanej wzorem $B(\lambda) = k(\lambda) + l(\lambda) \cdot \log_{10}(C_a)$ (C_a to stężenie	
	chl- a) dla poszczególnych długości fali w zakresie od 400 do 700 nm dla	
	badanych gatunków fitoplanktonu.	Ĺ

Załączniki

W poniższych załącznikach umieszczono wyniki analiz, które z racji zbyt dużej objętości nie zostały umieszczone w tekście niniejszej dysertacji. Natomiast z uwagi na ich duże znaczenie i unikatowy charakter uznano za celowe umieszczenie ich w tej pracy. Znajdują się tu:

- Załącznik A: Wyniki z analiz regresji dla tworzonych algorytmów PC_{quad} i PC_{pow} odpowiednio opisanych zależnościami (4.4) i (4.5).
- Załącznik B: Wyniki z walidacji krzyżowej algorytmów przedstawionych w pracy w tab. 4.5.
- Załącznik C: Opracowane wartości współczynników najlepszego dopasowania dla zależności opisanej wzorem (5.1) dla poszczególnych długości fali w zakresie od 400 do 700 nm dla badanych gatunków fitoplanktonu.

Załącznik A

		PC _{quad}			PC_{quad}		
Lp.	$\frac{R_{\rm rs}(\lambda_i)}{R_{\rm rs}(\lambda_i)}$	Współczynniki	R^2	RMSE	Współczynniki	R^2	RMSE
1	$\frac{R_{\rm rs}(595)}{R_{\rm rs}(660)}$	k = 3.58 l = -14.6 m = 10.1	0.664	0.299	k = 27.1 l = -371 m = 1950 n = -4510 p = 3810	0.711	0.272
2	$\frac{R_{\rm rs}(625)}{R_{\rm rs}(645)}$	k = 0.716 l = -12.6 m = -151	0.679	0.297	k = 0.943 l = -17.8 m = -533 n = -533 p = -77600	0.715	0.270
3	$\frac{R_{\rm rs}(660)}{R_{\rm rs}(600)}$	k = 3.63 l = 17.6 m = 15.4	0.661	0.305	k = 9.29 l = 141 m = 917 n = 2710 p = 2870	0.704	0.275
4	$rac{R_{ m rs}(625)}{R_{ m rs}(650)}$	k = 0.671 l = -15.1 m = -7.70	0.663	0.311	k = 0.868 l = -10.7 m = -317 n = 1820 p = 13000	0.715	0.270

Tablica A.1: Wyniki z analiz regresji dla tworzonych algorytmów $\rm PC_{quad}$ i $\rm PC_{pow}$ odpowiednio opisanych zależnościami (4.4) i (4.5)

5	$\frac{R_{\rm rs}(630)}{R_{\rm rs}(645)}$	k = 0.598 l = -18.6 m = -87.3	0.655	0.311	k = 0.781 l = -23.9 m = -405 n = 9860 p = -48000	0.703	0.275
6	$\frac{R_{\rm rs}(600)}{R_{\rm rs}(655)}$	k = 2.46 l = -11.6 m = 5.53	0.649	0.307	k = 10.5 l = -180 m = 1260 n = -3990 p = 4560	0.692	0.280
7	$\frac{R_{\rm rs}(660)}{R_{\rm rs}(590)}$	k = 2.75 l = -8.35 m = 3.53	0.628	0.313	k = 34.7 l = 383 m = 1600 n = -2920 p = 1950	0.686	0.283
8	$\frac{R_{\rm rs}(610)}{R_{\rm rs}(710)}$	k = 1.38 l = -5.03 m = 2.62	0.639	0.317	k = 1.45 l = -11.7 m = 71.4 n = -222 p = 221	0.694	0.280
9	$\frac{R_{\rm rs}(615)}{R_{\rm rs}(710)}$	k = 1.34 l = -5.35 m = 2.96	0.639	0.315	k = 1.15 l = -7.83 m = 50.9 n = -190 p = 217	0.700	0.277
10	$\frac{R_{\rm rs}(620)}{R_{\rm rs}(710)}$	k = 1.20 l = -5.40 m = 3.99	0.642	0.307	k = 1.05 l = -6.24 m = 40.9 n = -170 p = 207	0.698	0.278

Załącznik B

	Wszystł	kie dane		Walidacja krzyżowa		
Oznaczenie	Współczynniki	R^2	RMSE	Współczynniki	R^2	RMSE
DC	k = 2.50	0.672	0.280	k = 2.23	0.672	0.204
r U _{ratio1}	l = -7.83	0.075	0.269	l = -6.86	0.075	0.294
DC	k = 0.766	0.672	0.280	k = 0.770	0.691	0.208
r U _{ratio2}	l = -20.6	0.075	0.269	l = -20.7	0.001	0.298
DC	k = 2.46	0.670	0.200	k = 2.46	0.670	0.207
r U _{ratio3}	l = 8.99	0.070	0.290	l = 9.03	0.070	0.297
PC	k = 0.726	0.664	0.203	k = 0.729	0.676	0.303
1 Uratio4	l = -16.6	0.004	0.295	l = -16.7	0.070	0.505
PC	k = 0.603	0 660	0.295	k = 0.606	0.672	0.304
1 Uratio5	l = -21.6	0.000		l = -21.7	0.072	0.304
PC	k = 2.16	0.658	0.296	k = 2.16	0.658	0.302
1 Oratio6	l = -8.94	0.000		l = -8.96	0.000	0.502
PC	k = 2.41	0.649	0 202	k = 2.41	0.641	0.308
I Uratio7	l = 6.04	0.042	0.505	l = 6.04	0.041	0.508
PC	k = 1.20	0.634	0.306	k = 1.28	0.641	0 313
I Uratio8	l = -3.59	0.034	0.500	l = -3.78	0.041	0.515
PC	k = 1.09	0.635	0.306	k = 1.03	0.644	0.312
▪ ∪ratio9	l = -3.59	0.000	0.000	l = -3.39	0.044	0.012
PC	k = 1.03	0.633	0.206	k = 1.08	0.643	0.315
• Uratio10	l = -3.55	0.000	0.000	l = -3.82	0.040	0.919

Tablica B.1: Wyniki z walidacji krzyżowej algorytmów przedstawionych w pracy w tab.4.5

	k = 27.1			k = 26.3		
	l = -371			l = -360		
PC_{pow1}	m = 1950	0.711	0.272	m = 1900	0.685	0.286
	n = -4500			n = -4390		
	p = 3810			p = 3710		
	k = 0.943			k = 1.01		
	l = -17.8			l = -13.0		
PC_{pow2}	m = -533	0.715	0.270	m = -658	0.618	0.327
	n = 11800			n = 5340		
	p = -77600			p = 40200		
	k = 9.29			k = 7.95		
	l = 141			l = 124		
PC_{pow3}	m = 917	0.704	0.275	m = 849	0.671	0.298
	n = 2710			n = 2620		
	p = 2870			p = 2850		
	k = 0.868			k = 0.931		
	l = -10.7			l = -15.2	1	
PC_{pow4}	m = -317	0.715	0.270	m = -352	0.637	0.328
	n = 1820			n = 5760		
	p = 13000			p = -22700		
	k = 0.781			k = 0.780		
	l = -23.9			l = -25.0		
PC_{pow5}	m = -405	0.703	0.275	m = -223	0.627	0.321
	n = 9860			n = 6460		
	p = -48000			p = -57800		
	k = 10.5			k = 8.22		
	l = -180			l = -132		
PC_{pow6}	m = 1260	0.692	0.280	m = 904	0.661	0.299
	n = -3990			n = -2860		
	p = 4560			p = 3270		
	k = 34.7			k = 32.3		
	l = 383			l = 352		
PC_{pow7}	m = 1600	0.686	0.283	m = 1460	0.662	0.294
	n = 2920			n = 2650		
	p = 1950			p = 1760		

	k = 1.45			k = 1.60		
	l = -11.7			l = -15.3		
PC_{pow8}	m = 71.4	0.694	0.280	m = 94.0	0.584	0.345
	n = -222			n = -274		
	p = 221			p = 261		
	k = 1.15			k = 1.14		
	l = -7.83			l = -5.685		
PC_{pow9}	m = 50.9	0.700	0.277	m = 35.1	0.594	0.342
	n = -190			n = -150		
	p = 217			p = 182		
	k = 1.05			k = 1.084		
	l = -6.24		0.278	l = -7.47		
PC _{pow10}	m = 40.9	0.698		m = 47.5	0.590	0.341
	n = -170			n = -176		
	p = 207			p = 200		
	k = 1.39			k = 1.38		
DC	l = -1.97	0.739	0.258	l = -1.92	0 720	0.965
POlin	m = -7.75			m = -7.91	0.729	0.205
	n = -1.46			n = -1.47		
	k = 1.69			k = 1.65		
DC	l = 0.0880	0.700	0.000	l = 0.236	0.710	0.975
PCOLCI	m = -5.09	0.729	0.205	m = -5.26	0.719	0.275
	n = -2.96			n = -3.35		
DA02	k = 4.50	0.180	0.459	k = 4.49	0.200	0.465
DA95	l = 1.75	0.160	0.456	l = 1.75	0.208	0.405
MM00	k = 1.33	0.571	0.991	k = 1.33	0.575	0.228
1111109	l = 3.93	0.571	0.331	l = 3.94	0.575	0.000
MG19	k = 1.36	0.620	0.219	k = 1.36	0.697	0.210
W1512	l = 3.09	0.020	0.312	l = 3.09	0.027	0.319
HD10	k = -1.29	0.419	0.386	k = 2.75	0.365	0.417
111 10	l = 14.5	0.418	0.380	l = 2.58	0.302	0.417

Załącznik C

	N. spumigena		Anabaa	ena sp.	A. flos-aquae		
λ [nm]	k	l	k	l	k	l	
400	0.01	0.0061	0.0176	-0.0083	0.0272	-0.0064	
410	0.0178	0.0026	0.0176	-0.0083	0.028	-0.0066	
420	0.0083	0.0072	0.0206	-0.01	0.0282	-0.0066	
430	0.0071	0.0076	0.0183	-0.0083	0.0297	-0.0073	
440	0.0071	0.0076	0.0213	-0.01	0.0301	-0.0074	
450	0.006	0.0075	0.0213	-0.01	0.0301	-0.0074	
460	0.0044	0.0067	0.0123	-0.005	0.0182	-0.0028	
470	0.0036	0.0066	0.0123	-0.005	0.0161	-0.0022	
480	0.0023	0.0071	0.0123	-0.005	0.0105	-7.78E-05	
490	0.0018	0.0073	0.0123	-0.005	0.0105	-7.78E-05	
500	0.0007	0.0076	0.0123	-0.005	0.0102	4.48E-05	
510	0.0008	0.0071	0.0103	-0.0042	0.0069	0.0012	
520	0.0016	0.0062	0.0087	-0.0033	0.0025	0.0028	
530	0.0019	0.0053	0.0082	-0.0033	0.0004	0.0034	
540	0.0015	0.0051	0.0065	-0.0025	-0.0014	0.0039	
550	0.0005	0.0053	0.0065	-0.0025	-0.0052	0.0055	
560	0.0007	0.005	0.0065	-0.0025	-0.0056	0.0056	
570	0.0005	0.0051	0.008	-0.0033	-0.009	0.007	
580	0.0003	0.0053	0.0097	-0.0042	-0.0113	0.0082	
590	-0.0003	0.006	0.0111	-0.005	-0.0122	0.0089	
600	-6.20E-05	0.0063	0.0111	-0.005	-0.0124	0.0092	
605	0.0028	0.0053	0.0113	-0.005	-0.0101	0.0083	
610	0.0035	0.0051	0.0113	-0.005	-0.008	0.0077	

Tablica C.1: Opracowane wartości współczynników najlepszego dopasowania dla zależności opisanej wzorem $B(\lambda) = k(\lambda) + l(\lambda) \cdot \log_{10}(C_a)$ (C_a to stężenie chl-a) dla poszczególnych długości fali w zakresie od 400 do 700 nm dla badanych gatunków fitoplanktonu.

615	0.0031	0.0056	0.0102	-0.0042	-0.0053	0.0066
620	0.0031	0.0058	0.0116	-0.005	-0.0037	0.0061
625	0.0028	0.006	0.0118	-0.005	-0.0004	0.0051
630	0.0033	0.0061	0.0112	-0.0042	0.004	0.0034
635	0.0046	0.0059	0.012	-0.0042	0.0069	0.0027
640	0.0077	0.0048	0.0112	-0.0025	0.018	-0.0018
645	0.01	0.0037	0.0148	-0.0042	0.0209	-0.0027
650	0.0099	0.0039	0.0142	-0.0033	0.0231	-0.0024
655	0.0096	0.0042	0.016	-0.0042	0.0293	-0.0043
660	0.0094	0.0043	0.0163	-0.0042	0.0303	-0.0042
665	0.0094	0.0043	0.0175	-0.005	0.0308	-0.0041
670	0.0097	0.0038	0.0163	-0.005	0.0308	-0.0041
675	0.0112	0.0008	0.0135	-0.0042	0.0331	-0.006
680	0.0033	0.0033	0.0113	-0.0042	0.0242	-0.0031
685	0.0009	0.0042	0.01475	-0.00501	0.0165	-0.0009
690	0.0004	0.0043	0.014787	-0.00519	0.0092	0.0019
695	0.0004	0.0043	0.014823	-0.00537	0.0023	0.0048
700	0.0016	0.0041	0.01486	-0.00556	0.0023	0.0048