



Geostatistische und statistische Methoden und Auswerte- verfahren für Geodaten mit Punkt- bzw. Flächenbezug

Abschlussbericht

Teil 1: Grundlagen

Auftraggeber

Bund-Länder-Arbeitsgemeinschaft Boden-
schutz (LABO),
vertreten durch das geschäftsführende Land
Mecklenburg-Vorpommern, endvertreten
durch den Leiter der Abteilung „Wasser
und Boden“ des Umweltministeriums
Mecklenburg-Vorpommern

Auftragnehmer

Institut für Geoinformatik der
Westfälischen Wilhelms-Universität
Münster

A. Hinterding, A. Müller,
N. Gerlach, F. Gabel

Projektbegleitung

Ad hoc Unterausschuss Flächenhafte Dar-
stellung punktbezogener Daten über
Stoffgehalte in Böden im Ständigen Aus-
schuss Informationsgrundlagen (StäA2) der
LABO



November 2003



INHALTSVERZEICHNIS

INHALTSVERZEICHNIS	I
ABBILDUNGSVERZEICHNIS	III
1 EINLEITUNG	1
2 GRUNDLAGEN.....	4
2.1 Bodenschutzrechtlicher Vollzug.....	4
2.2 Räumliche Verteilung der Stoffgehalte im Boden.....	4
2.3 Statistische und geostatistische Grundlagen.....	5
2.3.1 Begriffsdefinitionen	5
2.3.2 Verteilungsanalyse.....	6
2.3.2.1 Vergleich von zwei oder mehr Verteilungen.....	6
2.3.2.2 Tests auf Güte der Anpassung	8
2.3.2.3 Räumlich geclusterte Stichproben	9
2.3.3 Repräsentativität	11
2.3.4 Ausreißeranalyse.....	12
2.3.5 Korrelationsanalyse	13
2.3.6 Erhebung statistischer Kennwerte	14
2.3.6.1 Statistische Kennwerte.....	14
2.3.6.2 Aussagesicherheit	15
2.3.7 Räumliche Interpolationsverfahren.....	16
2.3.7.1 Ordinary Kriging.....	17
2.3.7.2 External Drift Kriging.....	19
2.3.7.3 Kriging mit lokalen Mittelwerten	20
2.3.7.4 Cokriging	20
2.3.7.5 Indikator Kriging	21
2.3.7.6 Kriging-Verfahren für nicht normalverteilte Prozesse	21
2.3.7.7 Variogrammermittlung	24
2.3.7.8 Aussagesicherheit	27
2.3.8 Kreuzvalidierung	30
3 CHARAKTERISIERUNG HÄUFIG ANGEWENDETER VERFAHREN IN DEN LÄNDERN UND IM BUND	33
3.1 Charakterisierung von Verfahren zur Erhebung statistischer Kennwerte	33
3.1.1 Datengrundlage.....	34
3.1.2 Verteilungsanalyse.....	34
3.1.3 Repräsentativität	34
3.1.4 Ausreißeranalyse.....	35
3.1.5 Statistische Kennwerte.....	35
3.1.6 Angewendeter Maßstab	36
3.1.7 Aussagesicherheit und Validierung	36
3.1.8 Ergebniskarten	37
3.2 Charakterisierung räumlicher Interpolationsverfahren.....	37
3.2.1 Datengrundlage.....	37
3.2.2 Verteilungsanalyse.....	38
3.2.3 Repräsentativität	38
3.2.4 Ausreißeranalyse.....	39



3.2.5	Räumliche Interpolationsverfahren.....	39
3.2.5.1	Kriging mit lokalen Mittelwerten (Medianen).....	40
3.2.5.2	Kriging mit externer Drift und Indikator Kriging.....	43
3.5.2.3	Cokriging	44
3.5.2.4	Inverse-Distanz-Gewichtung (IDW).....	44
3.2.6	Angewendeter Maßstab	44
3.2.7	Aussagesicherheit und Validierung	44
3.2.8	Ergebniskarten	45
4	GRUNDSÄTZLICHE VORGEHENSWEISE.....	46
5	FAZIT DER ERGEBNISSE DER ERSTEN PROJEKTPHASE	48
6	LITERATUR.....	51
	ANHANG.....	53



ABBILDUNGSVERZEICHNIS

Abb. 2- 1: Schema eines Box-Whisker-Plots.	15
Abb. 2- 2: Experimentelles oder empirisches Variogramm.	24
Abb. 2- 3: Anpassung des theoretischen Variogramms an die Punktwolke des experimentellen Variogramms.....	25



1 EINLEITUNG

Das Institut für Geoinformatik hat im Auftrag der Bund-Länder-Arbeitsgemeinschaft Bodenschutz (LABO) das Projekt mit dem Titel „Geostatistische und statistische Methoden und Auswerteverfahren für Geodaten mit Punkt- bzw. Flächenbezug“ durchgeführt. Dieser Bericht stellt die Ergebnisse des Projektes vor.

Zweck des 1999 in Kraft getretenen Bundes-Bodenschutzgesetzes (BBodSchG) und der darauf aufbauenden Bundes-Bodenschutz- und Altlastenverordnung (BBodSchV) ist die nachhaltige Sicherung und Wiederherstellung der Funktionen des Bodens. Das BBodSchG und die BBodSchV haben zu neuen Vollzugsaufgaben u.a. in Bereichen der Vorsorge, der Gefahrenabwehr, Sanierung und Bewertung von Böden geführt.

Zur Umsetzung der Vollzugsaufgaben ist eine Darstellung und Analyse der flächenhaften Verteilung der Stoffgehalte in Böden notwendig. Hierbei werden die den Boden potentiell schädigenden Stoffe betrachtet. Zu ihnen zählen Schwermetalle wie Blei, Cadmium sowie persistente organische Stoffe wie polyzyklische aromatische Kohlenwasserstoffe (PAK) u.a. Im Bereich der Vorsorge von Böden gegen schädliche Bodenveränderungen sind beispielsweise Flächen mit überschrittenen Vorsorgewerten zu kennzeichnen. Zur Gefährdungsabschätzung von schädlichen Bodenveränderungen sind Schadstoffanreicherungen räumlich abzugrenzen.

Stoffgehalte werden punktuell durch Entnahme von Bodenproben erfasst. Es ist nicht möglich, Stoffgehalte direkt flächendeckend zu messen. Um die für den bodenschutzrechtlichen Vollzug notwendigen Aussagen über die flächenhafte Verteilung von Stoffgehalten im Boden zu erhalten, sind daher Methoden für die flächenhafte Darstellung punktbezogener Daten notwendig.

In den letzten Jahren sind eine Reihe von Methoden zur Ermittlung des Flächenbezugs punktbezogener Daten über Stoffgehalte in Böden entstanden. Die in den Bundesländern und im Bund angewendeten Methoden können in zwei Methodenkomplexe eingeteilt werden. Zum einen sind dies Methoden zur Bestimmung von flächenbezogenen Kenngrößen (statistische Kennwerte, hierzu gehören auch die Hintergrundwerte), zum anderen Methoden zur Schätzung der räumlichen Verteilung von Stoffgehalten im Boden. Eine erste Bestandsaufnahme der entwickelten Methoden fand im Rahmen eines Workshops zur flächenhaften Darstellung punktbezogener Daten über Stoffgehalte in Böden statt (UBA 2000).

Die beispielhaft genannten Hintergrundwerte geben die Ausstattung des Bodens mit dem naturbedingten Grundgehalt und der allgemein vorhandenen anthropogenen Zusatzbelastung eines Stoffes wieder. Im Rahmen des Bodenschutzes bilden Hintergrundwerte eine wichtige Grundlage zur Beschreibung des aktuellen Hintergrundniveaus der stofflichen Belastung, zur Bewertung von gemessenen Bodenbelastungen, wie z.B. bei Stoffeinträgen durch Deposition über den Luftpfad. Zur Ableitung und Darstellung von Hintergrundwerten werden Verfahren eingesetzt, die auf statistischen Analysen der Stoffgehaltsverteilung innerhalb homogener Raumeinheiten beruhen. Eine Übersicht über länderübergreifende und länderspezifische Hintergrundwerte gibt die Bund-Länder-Arbeitsgemeinschaft Bodenschutz LABO (1998, 2003).

Ist nicht der Vergleich von aktuellen Messungen mit Hintergrundwerten von Interesse, sondern die flächendeckende räumliche Verteilung aktuell gemessener Stoffgehalte, werden vielfach Interpolationsverfahren angewendet. Neben der Inverse-Distance-Methode wird das geostatistische Verfahren Kriging (Heidbrink 2000; Murschel 2000) eingesetzt. Wie bei der Bestimmung



von Hintergrundwerten wird auch bei der Bestimmung von räumlichen Verteilungen von Stoffgehalten i.A. das Vorhandensein homogener Raumeinheiten angenommen und diese zur Standardisierung des Datenbestandes genutzt.

Mit der Anwendung der beschriebenen Methoden sind bestimmte Mindestanforderungen an die verwendete Datengrundlage gebunden. Diese beziehen sich sowohl auf Punkt- als auch auf Flächendaten (Thiele 2000; Adler 2000).

Bis heute werden in den verschiedenen Bundesländern erhebliche finanzielle Mittel zur Entwicklung von Auswerteverfahren unter Einbeziehung der beschriebenen Methoden im Rahmen des bodenschutzrechtlichen Vollzugs aufgewendet. Zur Zeit gibt es nur ein in geringem Maße abgestimmtes Vorgehen. Neben der erwähnten finanziellen Last ergeben sich dadurch große Probleme bei der Vergleichbarkeit der erzielten Ergebnisse. Aus heutiger Sicht sollte daher die Arbeit der verschiedenen Instanzen gebündelt werden und eine Harmonisierung der Auswerteverfahren über Ländergrenzen hinweg angestrebt werden. Dabei ist gerade die Zuordnung von Auswerteverfahren zu den einzelnen bodenschutzrechtlichen Vollzugsaufgaben sowie die Aussagesicherheit ihrer Ergebnisse von Bedeutung.

Übergeordnete Zielsetzung des Projekts ist eine Harmonisierung der im bodenschutzrechtlichen Vollzug eingesetzten Auswerteverfahren in den verschiedenen Verwaltungsebenen von Bund und Ländern. Hierzu sollen Empfehlungen für die Anwendung von Auswerteverfahren zur flächenhaften Darstellung der Stoffgehalte im Boden erarbeitet werden. Besonderer Fokus liegt dabei auf der Evaluierung von (geo-)statistischen Methoden im Hinblick auf ihre Anwendbarkeit in Auswerteverfahren im bodenschutzrechtlichen Vollzug, der Beschreibung der erforderlichen Datengrundlage, der Aussagesicherheit und der zu erreichenden Flächenschärfe sowie der Konzeption eines einheitlichen Vorgehensmodells.

Innerhalb dieses Projektes war es nicht möglich, Empfehlungen für die Verwendung von Methoden für den gesamten Umfang der Vollzugsaufgaben des Bodenschutzes zu erarbeiten. Dieses ist Aufgabe des Ad hoc Unterausschusses Flächenhafte Darstellung punktbezogener Daten über Stoffgehalte in Böden (Ad hoc UA Punkt zu Fläche) im Ständigen Ausschuss Informationsgrundlagen (StäA2) der Bund-Länder-Arbeitsgemeinschaft Bodenschutz (LABO). Es sollte vielmehr beispielhaft gezeigt werden, welche Methoden geeignet sind, die räumliche Verteilung von Stoffgehalten in Böden zu ermitteln und die Aussagesicherheit festzustellen.

Das Projekt wurde begleitet von dem Ad hoc UA Punkt zu Fläche und der Projektarbeitsgruppe (Projekt AG) für die Durchführung des Vorhabens Geostatistische und statistische Methoden und Auswerteverfahren für Geodaten mit Punkt- bzw. Flächenbezug. Die Mitglieder des Ad hoc UA Punkt zu Fläche sind Herr Backes (Ministerium für Umwelt und Forsten des Landes Rheinland-Pfalz), Herr Böttcher (Landesamt für Umwelt, Natur und Geologie Mecklenburg-Vorpommern, Vertretung StäA4), Herr Glante (Umweltbundesamt), Frau Kardel (Sächsisches Landesamt für Umwelt und Geologie), Herr Martin (Bayerisches Geologisches Landesamt), Herr Thiele (Landesumweltamt Nordrhein-Westfalen, Vorsitzender), Herr Utermann (Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe), Herr Vorderbrügge (Hessisches Landesamt für Umwelt und Geologie, Vertretung StäA3), Herr Wolf (Ministerium für Umwelt und Verkehr Baden-Württemberg). Die Mitglieder der Projekt AG sind Herr Backes, Herr Glante, Herr Thiele, Herr Utermann, Herr Wolf sowie eine Vertreterin des Auftragnehmers (Frau Hinterding, IfGI).



Der Projektbericht ist aus drei Teilen aufgebaut. In diesem ersten Teil werden die Grundlagen der statistischen und geostatistischen Methoden, die für die Auswertung von Stoffgehalten im Oberboden von Bedeutung sind und die in den einzelnen Ländern entwickelten Auswerteverfahren vorgestellt. Im zweiten Teil werden geostatistische Auswertungen von zwei Untersuchungsgebieten erläutert, anhand derer der Einsatz der statistischen und geostatistischen Methoden analysiert wurde. Der dritte Teil des Berichts enthält Empfehlungen für die statistische und geostatistische Auswertung von Stoffgehalten im Oberboden für den bodenschutzrechtlichen Vollzug.

Der erste Teil ist folgendermaßen aufgebaut. In Kapitel 2 werden die für die weitere Betrachtung der Verfahren zur Ermittlung der flächenhaften Verteilung der Stoffgehalte in Böden erforderlichen Grundlagen zur Statistik und Geostatistik und zum Vollzug des Bodenschutzes beschrieben.

Die in den einzelnen Bundesländern und im Bund angewendeten Verfahren zur Ermittlung der flächenhaften Verteilung der Stoffgehalte im Boden werden in Kapitel 3 charakterisiert. Einen Überblick über die in den Bundesländern und im Bund eingesetzten Verfahren geben die im Anhang angeführten Steckbriefe. Die einzelnen Verfahren sind dort systematisch im Hinblick auf Anwendungsbereich, Datengrundlage, (geo-)statistische Methoden, Ergebnisse etc. dokumentiert.

In Kapitel 4 wird als Ergebnis der Analyse der bereits in den Ländern und beim Bund eingesetzten Verfahren eine Übersicht über die grundsätzliche Vorgehensweise innerhalb der beiden Methodenkomplexe „Erhebung statistischer Kennwerte“ und „Interpolationsverfahren“ dargestellt. Dieses Vorgehensmodell ist das Ergebnis der Analyse der in den Ländern und im Bund eingesetzten Methoden sowie der in Kapitel 2 erarbeiteten (geo-)statistischen Grundlagen. Dieses Vorgehen wurde innerhalb des Projektes überarbeitet und führte zu den im dritten Teil dieses Berichts beschriebenen Empfehlungen zur statistischen und geostatistischen Auswertung von Stoffgehalten im Oberboden.

Schließlich wird in Kapitel 5 ein erstes Fazit gezogen und in Kapitel 6 die Literatur aufgelistet.



2 GRUNDLAGEN

In diesem Kapitel werden die in der ersten Projektphase erarbeiteten Grundlagen beschrieben, die für die im weiteren Projekt zu erarbeitende Vorgehensweise zur Ermittlung der flächenhaften Verteilung von Stoffgehalten im Boden notwendig sind.

Zunächst wird eine Übersicht über die bodenschutzrechtlichen Vollzugsaufgaben gegeben. Das darauffolgende Unterkapitel enthält einen Überblick über die die räumliche Verteilung der Stoffgehalte im Boden beeinflussenden Faktoren. In Unterkapitel 2.3 werden statistische und geostatistische Grundlagen vorgestellt, auf die zur flächenhaften Beschreibung der Stoffgehalte in Böden zurückgegriffen werden kann.

2.1 Bodenschutzrechtlicher Vollzug

Im Anhang ist eine Übersicht über Vollzugsaufgaben im Bodenschutz aufgeführt. Diese Tabelle wurde vom Ad hoc UA Punkt zu Fläche erarbeitet und wird daher hier nicht näher erläutert.

2.2 Räumliche Verteilung der Stoffgehalte im Boden

Der Boden wird sowohl durch anorganische Stoffe, wie Schwermetalle, als auch durch persistente organische Stoffe, wie z.B. polyzyklische aromatische Kohlenwasserstoffe (PAK) belastet. Die räumliche Verteilung der Stoffgehalte im Boden hängt von verschiedenen Faktoren ab. Diese Einflussfaktoren lassen sich in zwei Gruppen unterteilen. Zum einen sind es natürliche und zum anderen anthropogene Einflussfaktoren.

Anthropogene Einflüsse bestimmen die Verteilung sowohl der organischen als auch der anorganischen Stoffe. Die Verteilung der anorganischen Stoffe wird zusätzlich durch den geogenen Einfluss bestimmt.

Die geogenen Einflüsse sind durch die Art des Ausgangsgesteins geprägt. Zu den anthropogenen Einflüssen gehören die Landnutzung und der Gebietstyp (Immissionssituation). Die einzelnen Einflussfaktoren werden im folgenden erläutert.

„Anders als bei organischen Schadstoffen sind die potentiell toxisch wirkenden Metalle bereits primär auf natürliche Weise in Böden als Bestandteile von Mineralien im Ausgangsgestein vorhanden“ (Schimming 1992). Dies bedeutet, dass in vielen Böden eine natürliche Grundbelastung durch anorganische Stoffe vorliegt. Die Grundbelastung schwankt mit dem Stoffgehalt des Ausgangsgesteins. So enthalten Sandsteine z.B. wenig Zink, Tonstein hingegen besitzt einen hohen Anteil an Zink (Scheffer & Schachtschabel 1998).

Die Verbreitung der anorganischen und insbesondere der organischen Stoffe hängt in großem Maße von der Landnutzung ab. Die Stoffgehalte sind in Waldgebieten (Laub- und Nadelwälder), auf Grünland, Ackerstandorten und Siedlungsflächen unterschiedlich.

Während der letzten Jahrzehnte hat ein steigender direkter und indirekter Säure- und Schwermetalleintrag stattgefunden, und zwar insbesondere in Waldböden. Das hängt damit zusammen, dass Waldbäume, besonders ganzjährig benadelte Koniferen, verstärkt Aerosole aus der Luft ausfiltern. Aufgrund der größeren relativen Oberfläche von Nadeln gegenüber Blättern und durch die längere Vegetationsperiode ist die trockene Deposition und damit die Abwaschung bei Koniferen größer als bei Laubbäumen. Bei Laubbäumen gibt es darüber hinaus auch Unterschiede. Bei einigen Holzarten (v.a. Rotbuchen) findet ein starker Stammabfluss der nassen



Deposition statt, aus dem dann ein bis zu zehnfacher Säure- und Schwermetalleintrag im unmittelbaren Stammbereich folgt (Blume 1992).

Auf Grünland werden meist keine großen Mengen an Dünger ausgebracht, so dass die Stoffgehalte oft geringer sind als auf Ackerstandorten. Bei Äckern ist besonders zu berücksichtigen, womit diese gedüngt werden und welche Pflanzenschutzmittel benutzt werden. Die Ausbringung von Gülle, Klärschlämmen und anderen Düngemitteln beeinflusst den Stoffgehalt und die -verteilung stark.

Die jahrzehntelange Ausbringung von kupferhaltigen Pflanzenschutzmitteln im Hopfen- und Weinanbau erhöhten den Kupfergehalt dort deutlich. Kupfer gelangt auch durch Schweinegülle auf die Felder, wenn z.B. kupferangereichertes Fertigfutter verfüttert wird. Die Verteilung von Kohleaschen erhöht den Anteil an z.B. Selen nicht unwesentlich.

Die Immissionssituation hängt stark von der Lage des Gebietes ab. Es ist zwischen ländlichen und siedlungsgeprägten Gebieten zu unterscheiden. Viele Stoffe werden besonders durch Industrie und Kraftfahrzeugverkehr emittiert. Aus diesem Grunde hängt die Verteilung der Stoffe in nicht unerheblichem Maße von der Siedlungs- und Industriestruktur ab.

Viele Schwermetalle, wie z.B. Zink und Selen, werden durch Verbrennungsprozesse freigesetzt und über die Luft verbreitet. Auch organische Stoffe werden durch z.T. unvollständige Verbrennung freigesetzt. Aus diesem Grunde befinden sich für z.B. PAK „deutliche Belastungsmaxima in Ballungsgebieten“ (Schimming 1992). Die Werte sind ebenfalls in Straßennähe erhöht.

Diese Ausführungen zeigen die Vielfalt an Belastungen, denen der Boden ausgesetzt ist.

2.3 Statistische und geostatistische Grundlagen

In diesem Abschnitt werden statistische und geostatistische Grundlagen, die zur flächenhaften Beschreibung der Stoffgehalte im Boden notwendig sind, vorgestellt.

2.3.1 Begriffsdefinitionen

In den folgenden Ausführungen wird zwischen der räumlichen Verteilung eines Stoffgehalts und der (raumunabhängigen) Werteverteilung der Stichprobe oder der Grundgesamtheit eines Stoffgehalts unterschieden. Als räumliche Verteilung eines Stoffgehalts wird die Menge der ortsabhängigen Werte des betrachteten Stoffgehalts $\{st(\mathbf{u}), \mathbf{u} \in U\}$ im Untersuchungsgebiet U bezeichnet. Der Begriff der Werteverteilung der Stichprobe entspricht dem statistischen Begriff der Häufigkeitsverteilung der Stichprobenwerte, die Werteverteilung der Grundgesamtheit eines Stoffgehalts entspricht dem statistischen Begriff der Wahrscheinlichkeitsverteilung des betrachteten Stoffgehalts.

Im Folgenden wird der Begriff des Schwellenwertes für Werte verwendet, für die Unter- bzw. Überschreitungswahrscheinlichkeiten untersucht werden sollen. Dieser Begriff ist der statistischen Nomenklatur entnommen. Darüber hinaus wird der Begriff des Schwellenwertes im geostatistischen Zusammenhang für den Wert verwendet, den ein Variogramm asymptotisch erreicht.



2.3.2 Verteilungsanalyse

Die Methoden der Verteilungsanalyse werden zum einen dazu benötigt, die Verteilungsfunktionen der Grundgesamtheiten von zwei oder mehr Gruppen miteinander zu vergleichen. Zum anderen dient eine Verteilungsanalyse häufig dem Zweck zu überprüfen, ob eine Grundgesamtheit normalverteilt ist. In den nachfolgenden Abschnitten 2.3.2.1 und 2.3.2.2 werden diese Fragestellungen betreffende Methoden vorgestellt, die für die häufig nicht normalverteilten Bodendaten der Stoffgehalte anwendbar sind. In Abschnitt 2.3.2.3 wird auf räumlich geclusterte Stichproben eingegangen.

2.3.2.1 Vergleich von zwei oder mehr Verteilungen

Wird der Frage nachgegangen, ob sich die Grundgesamtheiten von mindestens zwei von c Gruppen hinsichtlich ihrer Verteilungsfunktionen signifikant voneinander unterscheiden, so beschäftigt man sich mit dem c -Stichprobenproblem. Um zu überprüfen, von welchem Typ die Verteilung der Stoffgehalte ist, wie z.B., ob signifikante Unterschiede zwischen den Verteilungsfunktionen der Gruppen bestehen, muss zunächst ein globaler Test, mit dessen Hilfe sich die Unterschiede bezüglich aller Stichproben simultan aufdecken lassen, herangezogen werden. In der Praxis wird häufig der Fehler gemacht, statt einen simultanen Test durchzuführen, paarweise Stichproben mit einem Zweistichproben-Test zu vergleichen. Damit wird aber u.U. das vorgegebene Testniveau α in erheblichem Maße überschritten (Büning & Trenkler 1994).

Wenn der globale Test auf Gleichheit der Verteilungen die Hypothese abgelehnt hat, können Zweistichprobentests nachträglich durchgeführt werden, um herauszufinden, zwischen welchen Stichproben signifikante Unterschiede auftreten.

Für den globalen Test besteht zunächst folgende Problemstellung:

Es seien X_{i1}, \dots, X_{in} , $i=1, \dots, c$ unabhängige Stichprobenvariablen aus einer Grundgesamtheit mit unbekannter Verteilungsfunktion F_i .

Zu testen ist die Hypothese:

$$H_0: F_1(z) = F_1(z) = \dots = F_1(z) \text{ für alle } z \in \mathbb{R} \text{ gegen die Alternative}$$

$$H_1: F_i(z) = F_i(z - \theta_i) \text{ für alle } z \in \mathbb{R} \text{ und mit } \theta_i \neq \theta_j \text{ für mindestens ein Paar } (i,j), 1 \leq i, j \leq c.$$

Ein bekannter parametrischer Test für diese Hypothese ist der F-Test auf signifikante Lokationsunterschiede (Hartung et al. 1999). Dieser Test basiert allerdings zum einen auf der Annahme der Normalverteilung innerhalb der Grundgesamtheiten und zum anderen auf der Gleichheit der Varianzen.

Da die in diesem Projekt interessierenden Stoffdaten in der Regel schief verteilt sind, wird dieser Test an dieser Stelle nicht weiter betrachtet.

Test von Kruskal-Wallis:

Der wohl bekannteste nichtparametrische Test für das c -Stichproben Problem ist der Test von Kruskal-Wallis.

Ohne eine Normalverteilung vorauszusetzen (lediglich eine stetige Verteilung wird gefordert) prüft er, ob sich die Mittelwerte der c Messreihen signifikant voneinander unterscheiden.



Es sei $N = \sum_{i=1}^c n_i$ die Gesamtsumme aller Stichprobenelemente. Man kombiniert nun alle c Stichproben, ordnet sämtliche N Elemente der Größe nach und weist ihnen Ränge $1, 2, \dots, N$ zu. Dabei wird mit R_{ij} der Rang des Stichprobenelementes X_{ij} in der kombinierten geordneten Stichprobe und mit $R_i = \sum_{j=1}^{n_i} R_{ij}$ die Rangsumme in der i -ten Stichprobe bezeichnet. Dann lautet die Teststatistik:

$$H = \frac{12}{N(N+1)} \sum_{i=1}^c \frac{R_i^2}{n_i} - 3(N+1).$$

Sie ist mit einer geeigneten Prüfgröße zu vergleichen, damit eine Entscheidung zugunsten oder gegen die Hypothese der Gleichheit aller Mittelwerte gefällt werden kann. Da die Teststatistik H für $c \geq 3$ und $n_i \geq 5$ eine Approximation durch die Chi-Quadratverteilung mit $(c-1)$ Freiheitsgraden FG gewährleistet (Büning & Trenkler 1994), kann sie mit dem entsprechenden Quantil der Chi-Quadratverteilung, welche in vielen Statistikbüchern vertafelt ist, verglichen werden. Ist sie zu groß, muss die Hypothese der Gleichheit aller Mittelwerte verworfen werden.

Der Test von Kruskal-Wallis ist ein globaler Test auf Gleichheit aller c Mittelwerte. Er vermag also nur aufzudecken, dass Unterschiede zwischen mehreren Verteilungen bestehen, nicht aber zwischen welchen sie bestehen. Wird H_0 abgelehnt, dann kann für den Zweck weiterer Vergleiche durch Anwendung des Kruskal-Wallis Tests eine Gruppe von zwei oder mehr Stichproben analysiert werden, bis schließlich die Differenzen zwischen den Stichproben genügend aufgedeckt sind. Allerdings wird für solche wiederholten Einzeltests das Testniveau α verzerrt bzw. es verliert jegliche Bedeutung.

K-S-Test für c Stichproben:

Ein weiterer globaler Test für das c -Stichproben Problem ist der Kolmogoroff-Smirnov- (K-S)-Test, der sich vom Kruskal-Wallis-Test darin unterscheidet, dass er neben Unterschieden in den Lageparametern auch Abweichungen in der Variabilität aufzudecken vermag.

Im Zweistichprobenfall kann der K-S-Test als das nichtparametrische Pendant zum t -Test angesehen werden.

Der K-S-Test überprüft die Hypothesen:

$$H_0: F_1(z) = F_1(z) = \dots = F_1(z) \text{ für alle } z \in \mathbb{R} \text{ gegen die Alternative}$$

$$H_1: F_i(z) \neq F_j(z) \text{ für mindestens ein } z \in \mathbb{R} \text{ und ein Paar } (i,j), i \neq j.$$

Für die Teststatistik K wird zunächst in jeder Stichprobe die größte Beobachtung bestimmt. Es sei Z_i der größte Wert der i -ten Stichprobe, $1 \leq i \leq c$. Es werden nun die Z_i der Größe nach $Z_{(1)} \leq Z_{(2)} \leq \dots \leq Z_{(c)}$ geordnet.

Die empirischen Verteilungsfunktionen der zu $Z_{(1)}$ und $Z_{(c)}$ gehörenden Stichproben werden mit $S_{(1)}$ bzw. $S_{(c)}$ bezeichnet.

Unter der Voraussetzung stetiger Verteilungsfunktionen lautet die zugehörige Teststatistik:

$$K = \sup_z (S_{(1)}(z) - S_{(c)}(z)); \text{ mit } \sup = \text{supremum.}$$



K misst also den größten vertikalen Abstand zwischen zwei (in ein Koordinatensystem gezeichneten) Verteilungsfunktionen. Dabei werden die Verteilungsfunktionen der beiden Stichproben gewählt, von welchen die eine den kleinsten größten gemessenen Wert und die andere den größten größten gemessenen Wert in der Gruppe aller größten Stichprobenwerten hat. Ist dieser Abstand „zu groß“ um noch die Annahme vertreten zu können, dass selbst die beiden verschiedensten der Stichproben derselben Grundgesamtheit entstammen, wird die Hypothese der Gleichheit aller Stichproben zugunsten der Alternative verworfen.

Das Problem der K-S-Teststatistik besteht darin, dass die exakten Verteilungen von K für $c > 2$ bislang nur für gleiche Stichprobenumfänge in den einzelnen Gruppen vorliegen.

Kritische Werte für den Zweistichprobentest bei gleichen und ungleichen Stichprobenumfängen und für Tests für $c > 2$ bei gleichen Stichprobenumfängen sind Büning et al. (1994) zu entnehmen.

2.3.2.2 Tests auf Güte der Anpassung

Soll überprüft werden, ob die unbekannte Verteilungsfunktion $F(x)$ der durch die Stichprobenentnahme betrachteten Grundgesamtheit mit einer Normalverteilungsfunktion $N(\mu_0, \sigma^2_0)$ übereinstimmt, so werden der Chi-Quadrat-Test und der Kolmogoroff-Smirnov-Anpassungstest häufig verwendet.

Kolmogoroff-Smirnov-Anpassungstest: (K-S-Test)

Der K-S-Test, bei welchem die hypothetische Verteilungsfunktion keine Normalverteilungsfunktion, sondern lediglich stetig sein muss, testet die Hypothese:

$$H_0: F(x) = F_0(x) \text{ für alle } x$$

gegen die Alternative

$$H_1: F(x) \neq F_0(x) \text{ für wenigstens einen Wert von } x.$$

Die zugehörige Prüfgröße lautet:

$$\sqrt{n}D_n, \text{ mit } D_n = \sup_x |F_0(x) - S_n(x)|,$$

wobei $S_n(x)$ die empirische Verteilungsfunktion der Beobachtungen x_1, \dots, x_n und $F_0(x)$ die hypothetische Verteilungsfunktion bezeichnet. Die Größe D_n gibt demnach den größten vertikalen Abstand zwischen der (in ein Koordinatensystem gezeichneten) hypothetischen und empirischen Verteilungsfunktion an.

Die Prüfgröße D_n wird mit den kritischen Werten für den K-S-Test verglichen. Die Nullhypothese muss verworfen werden, wenn die Teststatistik den kritischen Wert übersteigt. Im Falle einer hypothetischen Normalverteilung entsprechen die kritischen Werte den Perzentilen der Normalverteilung.

Für den Test ist es notwendig, die hypothetische Verteilungsfunktion genau zu spezifizieren, d.h. eine feste Vorstellung von Lageparameter und Varianz der hypothetischen Verteilungsfunktion zu haben. Ist dies nicht der Fall, so müssen letztgenannte erst aus der Stichprobe geschätzt werden. In diesem Fall sind andere kritische Werte für den Vergleich hinzuzuziehen. Die Testentscheidung wird dadurch allerdings stark konservativ (Hartung et al. 1999).



Chi-Quadrat-Anpassungstest:

Mit Hilfe des Chi-Quadrat-Anpassungstests wird die Hypothese

H_0 : Die Grundgesamtheit ist $N(\mu_0, \sigma_0^2)$ -verteilt

gegen die Alternative

H_1 : Die Grundgesamtheit ist nicht $N(\mu_0, \sigma_0^2)$ -verteilt

zum Signifikanzniveau α getestet.

Für die Teststatistik müssen die Daten zunächst in k Klassen eingeteilt werden. Dann wird die Anzahl der Stichprobenelemente O_i , $i=1, \dots, k$ jeder einzelnen Klasse ermittelt, und die unter der hypothetischen Verteilung zu erwartende Anzahl an Stichprobenelementen, $E_i = n \cdot p_i$, $i=1, \dots, k$ (wobei p_i die unter der Nullhypothese gegebene Wahrscheinlichkeit ist, dass ein Stichprobenelement in die i -te Klasse fällt), berechnet.

Die Teststatistik

$$T = \sum_{i=1}^k \frac{1}{E_i} (O_i - E_i)^2$$

ist unter H_0 asymptotisch Chi-Quadrat verteilt mit $k-1$ Freiheitsgraden und wird deshalb mit dem $1-\alpha$ Quantil der Chi-Quadratverteilung mit $k-1$ Freiheitsgraden verglichen und im Falle der Überschreitung dieses Wertes verworfen.

Möchte man μ und σ^2 nicht auf bestimmte Werte festlegen, sondern allgemein testen, ob die Grundgesamtheit irgendeiner Normalverteilung entspricht, so ist es auch möglich, den Chi-Quadrat Test zu verwenden. Hierzu schätzt man die unbekannt Parameter zuvor mit der Maximum-Likelihood-Methode aus den Klassenhäufigkeiten. Dadurch reduziert sich die Anzahl der Freiheitsgrade um 2.

Der Chi-Quadrat-Test hat also in diesem Punkt einen entscheidenden Vorteil gegenüber dem K-S-Test. Allerdings ist das Aufstellen der Teststatistik aufgrund der notwendigen Klasseneinteilung etwas aufwendiger.

2.3.2.3 Räumlich geclusterte Stichproben

Häufig sind die Punktdaten einer Stichprobe nicht regelmäßig über die Fläche des Untersuchungsgebietes oder einer homogenen Raumeinheit verteilt, weil Gebietsteile nur schwer oder gar nicht beprobt werden können, oder weil Gebiete mit hohen oder niedrigen Werten häufiger beprobt werden. Möchte man für das gesamte Untersuchungsgebiet oder Teile davon einen Mittelwert bestimmen, müssen die Stichprobenwerte abhängig von ihrer Nähe zu den anderen Punktdaten gewichtet (entclustert) werden, um die Schätzung nicht zu verzerren.

Bei der eigentlichen Krige-Interpolation haben geclusterte Werte keine negative Auswirkung. Das liegt an dem sogenannten Screeneffekt: Der nächstgelegene Wert bekommt ein sehr großes Gewicht und schirmt dadurch die dahinterliegenden Werte in ihrem Einfluss ab.

Die beiden in der Geostatistik schon sehr lange eingesetzten Methoden zur Entclustering sind die Thiessen-Polygonbildung und die Zellenentclusteringmethode (cell declustering method). Beide Verfahren verwenden eine gewichtete Linearkombination der zur Verfügung stehenden Stichprobenwerte zur Schätzung des Mittelwertes der Fläche (Dubois & Saisana 2002).



Thiessen-Polygonbildung

Durch die Thiessen-Polygone wird für jeden Punkt der Stichprobe ein Polygon aus den Nachbarpunkten erstellt. Der Polygonzug für einen Messwert setzt sich dabei aus allen beprobten Punkten zusammen, deren Abstand im Raum zu ihm geringer ist, als zu allen anderen Messwerten. Zur Ermittlung eines globalen Mittelwertes werden dann die Stichprobenwerte nach den Flächenanteilen der Polygonzüge gewichtet.

Der globale Mittelwert $F(x)$ wird bestimmt durch

$$F(x) = \frac{\sum_{i=1}^n w_i x_i}{\sum_{i=1}^n w_i}.$$

Die Nachteile dieser Methode sind zum einen, dass sich die statistischen Berechnungen oft nur auf den Rahmen, den das Messnetz vorgibt, beschränken können, weil den äußeren Punkten sonst wegen mangelnder Beschränkung zu große Polygone zukommen.



Zellenentclusteringmethode

Die Zellenentclusteringmethode verwendet ein Moving-Window-System, bei welchem das Untersuchungsgebiet zunächst in gleich große Rechtecke aufgeteilt wird. Jede Messung bekommt dann das Gewicht, das invers proportional zu der Anzahl der Messungen im Rechteck ist.

Die Nachteile dieser Methode liegen darin, dass die Rechteckgröße und die Lage im Raum (durch setzen des ersten Rechteckes) willkürlich festgelegt werden und damit das Ergebnis beeinflussen.

Repräsentativitätskoeffizient

Eine weitere Möglichkeit der Gewichtung bietet der Repräsentativitätskoeffizient (Coefficient of Representativity (CR)), welcher die Thiessen-Polygon- mit der Nearest-Neighbour-Methode verbindet.

Der Repräsentativitätskoeffizient ist ein Produkt zweier Terme:

$$CR = \frac{S_{th}}{S_m} * \frac{NN^2_{dist}}{S_m}$$

Der erste Term entspricht dem Verhältnis der Fläche des Thiessen-Polygons (S_{th}) zur mittleren Oberfläche der Thiessen-Polygone S_m .

S_m wird errechnet als Gesamtfläche des Untersuchungsgebietes S_{total} dividiert durch den Stichprobenumfang.

Der zweite Term entspricht dem Verhältnis der quadrierten Distanz zwischen einem Punkt und seinem nächsten Nachbarn zur mittleren Oberfläche der Thiessen-Polygone.

Für einen isolierten Punkt ist $CR > 1$. Falls der Punkt einem Nachbarn näher liegt, als die theoretische Distanz beträgt, ist $CR < 1$.

Der Vorteil des CR liegt darin, dass er ohne subjektive Entscheidungen auskommt und Informationen über die Grenzen des Untersuchungsgebietes mit einbezieht.

2.3.3 Repräsentativität

Zur Analyse von Stoffgehalten in Böden sollte eine für die Grundgesamtheit repräsentative Stichprobe verwendet werden. Die Repräsentativität einer Stichprobe wird zum einen durch einen hinreichend großen Stichprobenumfang n , zum anderen durch ein geeignetes Stichprobenverfahren gewährleistet.

Je näher der Stichprobenumfang dem Umfang der Grundgesamtheit kommt, desto besser wird die Grundgesamtheit in der Regel durch die Stichprobe repräsentiert („Gesetz der großen Zahl“). In den speziellen Anwendungsbereichen der räumlichen Statistik ist allerdings auch die räumliche Verteilung der Stichprobe von entscheidender Bedeutung für ihre Repräsentativität (Streit 2002). Die Stichprobenauswahl kann beispielsweise nach flächengewichteten Anteilen oder einem Rasterverfahren durchgeführt werden (LABO 1998). Außerdem ist darauf zu achten, dass die Stichprobenpunkte im Raum gleichmäßig verteilt sind und nicht in einem Bereich gelustert vorliegen.

Utermann et al. (1999) stellen ein Verfahren vor, mit dem die pedoregionale Repräsentanz der Datengrundlage zur Ausweisung von Hintergrundwerten überprüft werden kann. Die Repräsen-



tanzanalyse hat zum Ziel, nur Einheiten (Bodenausgangsgestein, Landnutzung) mit Hintergrundwerten zu belegen, die durch vorhandene Profilinformatoren „mindestens ausreichend“ repräsentiert werden. Das Verfahren ist länderübergreifend und länderspezifisch anwendbar, bisher aber nur auf anorganische Stoffe in Oberböden (siehe Steckbrief im Anhang). Dieses Verfahren ermöglicht die Prüfung der Repräsentanz einer vorhandenen Datengrundlage und gibt damit Hinweise auf den zusätzlichen Datenbedarf.

2.3.4 Ausreißeranalyse

Im Rahmen des GSE Vorhabens („Kennzeichnung von Gebieten mit großflächig siedlungsbedingt erhöhten Schadstoffgehalten im Boden“) wurden eine Reihe von in der Literatur häufig verwendeten Ausreißertests vorgestellt und an den punktuell gemessenen Stoffdaten eines Untersuchungsgebietes hinsichtlich ihrer Schärfe verglichen (UBA 2002).

Einige der Ausreißertests setzen die Normalverteilung voraus, andere kommen ohne jegliche Verteilungsannahmen aus.

Der Vergleich der Testergebnisse erleichterte die Entscheidung, sich auf einen Ausreißertest festzulegen. Innerhalb des GSE Vorhabens wurde der Median-5-Interquartil-Test ausgewählt. Zwei weitere Tests, die ebenfalls innerhalb der Untersuchung gute Ergebnisse erzielten, werden im nachfolgenden vorgestellt.

3-Sigma:

Der 3-Sigma-Test ist ein parametrischer Test, der die Normalverteilung des Datensatzes voraussetzt und deshalb eine vorhergehende Transformation der Daten erforderlich macht. Es sollte aber stets berücksichtigt werden, dass eine Transformation eine Veränderung der Charakteristik des Datensatzes mit sich bringt.

Die Teststatistik kennzeichnet alle Werte außerhalb des Intervalls zwischen arithmetischem Mittel ± 3 Standardabweichungen als Ausreißer.

Die Teststatistik sieht wie folgt aus:

$$x^* \text{ ist Ausreißer, wenn gilt: } x^* > \bar{x} + 3s \text{ oder } x^* < \bar{x} - 3s.$$

Median-3- Interquartil-Test:

Die Teststatistik lautet:

$$x^* \text{ ist Ausreißer, wenn } x^* > \text{Median} + 3 \cdot (75.\text{Perzentil} - 25.\text{Perzentil}) \text{ oder} \\ x^* < \text{Median} - 3 \cdot (75.\text{Perzentil} - 25.\text{Perzentil}).$$

Median-5- Interquartil-Test:

Die Teststatistik lautet:

$$x^* \text{ ist Ausreißer, wenn } x^* > \text{Median} + 5 \cdot (75.\text{Perzentil} - 25.\text{Perzentil}) \text{ oder} \\ x^* < \text{Median} - 5 \cdot (75.\text{Perzentil} - 25.\text{Perzentil}).$$

Der Median-3 (bzw. 5)-Interquartil-Test ist ein Beispiel für einen nichtparametrischen Ausreißertest, der demnach keine bestimmte Verteilung der Daten voraussetzt. Als Ausreißer werden Werte außerhalb des Intervalls von Median ± 3 (bzw. 5) mal dem Interquartilsabstand ausgewiesen.



Der Median-3-Interquartilttest ist in der Literatur sehr gebräuchlich und erwies sich auch für die punktuell gemessenen Stoffdaten als sehr geeignet, allerdings noch ein wenig zu scharf. Deshalb wurde die Teststatistik in Form eines Median-5-Interquartil-Test ein wenig abgeschwächt (UBA 2002).

2.3.5 Korrelationsanalyse

Aus bodenkundlich fachbezogener Sicht beeinflussen verschiedene Faktoren die räumliche Verteilung der Stoffgehalte im Boden. Zu diesen gehören das Ausgangssubstrat, die Überschwemmung oder die Landnutzung. Durch diese Faktoren werden homogene Raumeinheiten definiert, in denen die Werteverteilung der Gehalte des betrachteten Stoffs als homogen angesehen werden kann. Aus statistischer Sicht ist zu prüfen, ob anhand der vorliegenden Stichprobe ein signifikanter Zusammenhang der gerade beschriebenen Faktoren zum betrachteten Stoffgehalt sichtbar ist.

Ein Zusammenhang zwischen zwei Variablen wird mit Hilfe der so genannten Korrelationsanalyse untersucht. Da die betrachteten Einflussfaktoren, wie beispielsweise die Landnutzung, nominale Variablen sind, wird nach Methoden der Korrelationsanalyse für nominale Variablen gesucht.

Um zu überprüfen, ob zwei nominale Variablen X und Y unabhängig voneinander sind, kann der Chi-Quadrat-Test auf Unabhängigkeit (Bünig&Trenkler S. 238 ff) verwendet werden. Dabei wird angenommen, dass die Variable X in k und die Variable Y in l disjunkte Klassen aufgeteilt ist. Die Nullhypothese dieses Tests ist die der Unabhängigkeit der Variablen X und Y. Dieser Test beruht auf der Auswertung einer Kontingenztafel und hat die Teststatistik

$$X^2 = \sum_{i=1}^k \sum_{j=1}^l \frac{(n_{ij} - \tilde{n}_{ij})^2}{\tilde{n}_{ij}}$$

Dabei bezeichnet k die Anzahl der Zeilen und l die Anzahl der Spalten in der Kontingenztafel, n_{ij} die beobachtete Häufigkeit des Ausprägungspaares (X_i, Y_j) und \tilde{n}_{ij} die erwartete theoretische Häufigkeit des Ausprägungspaares (X_i, Y_j) , wenn die Variablen X und Y unabhängig sind. Die Nullhypothese wird verworfen, wenn

$$X^2 \geq \chi_{1-\alpha; (k-1)(l-1)}$$

gilt. Dabei wird mit χ die Chi-Quadrat-Verteilung bezeichnet. Dieser Test sollte nur angewendet werden (siehe Bünig&Trenker S. 242), wenn kein n_{ij} kleiner als 1 ist und höchstens 20% der Felder keine Werte \tilde{n}_{ij} aufweisen, die kleiner als 5 sind.

Wenn die zwei Variablen X und Y nicht als unabhängig voneinander getestet wurden, kann mit Hilfe eines Kontingenzkoeffizienten die Stärke des Zusammenhangs beschrieben werden. Der Kontingenzkoeffizient nach Pearson ist definiert als

$$c = \sqrt{\frac{X^2}{X^2 + n}}$$

Dabei bezeichnet n die Stichprobenanzahl.



Es gilt $0 \leq c < 1$. Je stärker der Zusammenhang zwischen den beiden Variablen, desto größer ist c . c nimmt den Wert 1 jedoch nie an, da mit $a = \min(k, l)$ gilt

$$c \leq \sqrt{\frac{a-1}{a}} = c_{\max}$$

Man kann daher mit dem korrigierten Pearsonschen Kontingenzkoeffizienten arbeiten:

$$c = \frac{c}{c_{\max}}$$

Soll, wie im Fall der Stoffgehalte, der Zusammenhang eine metrische Variable mit einer nominalen Variable untersucht werden, ist die metrische vorab herunter zu skalieren.

2.3.6 Erhebung statistischer Kennwerte

Die flächenhafte Verteilung von Stoffgehalten in Böden kann durch statistische Kennwerte, die als typisch für verschiedene Bodeneinheiten angesehen werden, bestimmt werden. Im folgenden werden wesentliche statistische Kennwerte und Methoden zur Analyse der Aussagesicherheit vorgestellt.

2.3.6.1 Statistische Kennwerte

Eine zu analysierende Stichprobe eines Stoffgehalts kann durch einige charakteristische Größen gekennzeichnet werden. Ein solches Charakteristikum ist z.B. eine Maßzahl, die in geeigneter Weise ein „Zentrum“ der Beobachtungswerte x_1, \dots, x_n angibt (Hartung et al. 1999).

Die hier in Betracht gezogenen Lagemaße sind der Median (Zentralwert) und die $q\%$ -Quantile x_q . Der Median x_m ist derjenige Wert, der die der Größe nach aufsteigend geordnete Stichprobe (STP) in zwei gleich große Wertintervalle teilt; oberhalb wie unterhalb des Median liegen also 50% der STP-Werte. Der Median hat gegenüber dem arithmetischen Mittel den Vorteil, dass er weniger empfindlich gegenüber Ausreißern in der Stichprobe ist. Zudem ist die Bestimmung des arithmetischen Mittels nur bei Normalverteilung der Werte sinnvoll. Dies ist für die Stoffgehalte in Böden in der Regel nicht gegeben.

Das $q\%$ -Quantil x_q ist derjenige Wert, der die der Größe nach aufsteigend geordnete STP so teilt, daß $q\%$ der Werte unterhalb von x_q liegen bzw. $(100-q)\%$ oberhalb. Der Median ist ein spezielles $q\%$ -Quantil, nämlich gerade das 50%-Quantil der Stichprobe. Quantile eignen sich zur Charakterisierung von nicht normalverteilten Stichproben. Ist $x_{(1)} \leq \dots \leq x_{(n)}$ eine aufsteigend geordnete Stichprobe mit dem Umfang n , so wird das $q\%$ -Quantil x_q ($0 < q < 100$) dieser Stichprobe folgendermaßen ermittelt (Streit 2002):

Fall 1: $x_q = (q * x_{(k+1)} + (100 - q)x_k) / 100$, falls $k = n * q / 100$ eine ganze Zahl ist.

Fall 2: $x_q = x_{k+1}$, falls $k = n * q / 100$ keine ganze Zahl ist (in diesem Fall wird von k die Nachkommastelle abgeschnitten).

Die Quantile werden in den bodenspezifischen Anwendungen der Länder und der LABO auch Perzentile genannt. Neben dem Median werden vor allem das 90. Perzentil sowie das 25. und 75. Perzentil erhoben. Das 90. Perzentil dient häufig als Orientierungs- oder Hintergrundwert zur Abgrenzung von merklicher anthropogener Belastung. Aus dem 25. Perzentil und dem 75. Perzentil lässt sich der Interquartilsabstand ableiten (LABO 1998, 2003; Utermann 1999; Minis-



terium für Umwelt und Forsten 1998). Der Interquartilsabstand ist ein Streuungsmaß für die Streuung der STP-Werte und ist definiert als die Differenz zwischen dem 75. und 25. Perzentil. Der Interquartilsabstand ist weniger stark abhängig von Ausreißern als z.B. die Spannweite, die als Differenz zwischen dem Minimum- und Maximumwert der Stichprobe definiert ist (Hartung 1999).

Der Box-Whisker-Plot ist eine gute Möglichkeit zur graphischen Darstellung der beschriebenen Maße. Anhand des Box-Whisker-Plots lässt sich auf einen Blick der Median, das 25. und 75. Perzentil, der Minimum- und Maximumwert ablesen (Streit 2002):

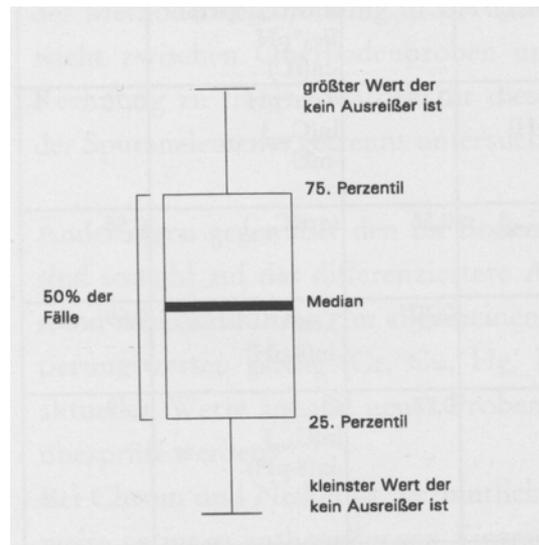


Abb. 2- 1: Schema eines Box-Whisker-Plots.

2.3.6.2 Aussagesicherheit

Eine auf Basis einer Stichprobe getroffene Aussage besitzt keine 100%-ige Sicherheit. Statistische Aussagen sind immer nur mit einer Irrtumswahrscheinlichkeit $\alpha > 0$ möglich.

Um eine möglichst hohe statistische Sicherheit der aus statistischen Analysen abgeleiteten fachlichen Aussagen zu gewährleisten, ist eine repräsentative Stichprobe aus der betreffenden Grundgesamtheit erforderlich. Die Repräsentativität einer Stichprobe hängt, wie bereits angeführt, von zwei wichtigen Faktoren ab. Zum einen von der Größe (Umfang) n der Stichprobe und zum anderen von der Methode der Stichprobenauswahl. Je größer die Stichprobe ist, desto besser ist in der Regel ihre Repräsentativität („Gesetz der großen Zahl“). Zudem ist auch die Flächenrepräsentanz der Stichprobe von entscheidender Bedeutung.

Die Variabilität der Stichprobenwerte kann ebenfalls einen Hinweis auf die Aussagesicherheit geben. Die Streuung kann, wie oben angegeben, mit Hilfe von Perzentilabständen und gegebenenfalls mittels Boxplots ermittelt werden. Streuen die Werte stark, ist die Schätzung mit einer größeren Unsicherheit behaftet. Mit Zunahme der Variabilität der Werte sollte auch der Stichprobenumfang zunehmen (Streit 2002).

Konfidenzintervalle für Quantile:

Unter der Voraussetzung, dass die Verteilungsfunktion F streng monoton wachsend ist, lässt sich ein Konfidenzintervall für das p -te Quantil a_p angeben.



Zur Ermittlung dieses Konfidenzintervalls sind natürliche Zahlen k und l so zu bestimmen, dass gilt $k < l$ und:

$$P(X_{(k)} < a_p < X_{(l)}) = 1 - \alpha \text{ (Büning \& Trenkler 1994).}$$

Dabei sind $X_{(k)}$ und $X_{(l)}$ das k -te bzw. l -te Element in der ihrer Größe nach geordneten Stichprobe.

Um k und l zu bestimmen, muss die für spezielle p vertafelte Verteilungsfunktion F einer binomialverteilten Zufallsvariablen mit den Parametern n und p betrachtet werden.

Die gesuchten Intervallgrenzen ergeben sich aus den Forderungen

$$1 - k \text{ minimal}$$

und

$$F(l-1) - F(k-1) \approx 1 - \alpha .$$

2.3.7 Räumliche Interpolationsverfahren

Durch Interpolationsverfahren werden Werte einer Beobachtungsvariable an nicht beprobten Orten aus den umliegenden Messwerten geschätzt. Je genauer das räumliche Verhalten der betrachteten Beobachtungsvariable bekannt ist und je detaillierter dieses Wissen in das Interpolationsverfahren integriert werden kann, desto zuverlässiger können unbekannte Werte geschätzt werden.

Es gibt eine Reihe unterschiedlicher Interpolationsverfahren. Neben einfachen Verfahren wie dem Thiessen-Polygon-Verfahren oder dem Inverse-Distance-Verfahren haben statistische und numerische Verfahren eine breite Anwendung gefunden. In diesem Projekt sollen die Möglichkeiten der geostatistischen Kriging-Verfahren aufgezeigt werden.

Im Mittelpunkt der Betrachtung liegen die Stoffgehalte in Oberböden, die mit Hilfe des Kriging räumlich interpoliert werden sollen. Hierbei ist der meist rechtsschiefen Verteilung der Stoffgehalte besondere Aufmerksamkeit zu widmen, denn hierdurch ergeben sich spezielle Anforderungen an die geostatistischen Methoden. So kann es z.B. sinnvoll sein, vor der eigentlichen Interpolation die Daten auf Normalverteilung zu transformieren (vgl. Abschnitt 2.3.7.6). Alternativ könnte die Ermittlung des räumlichen Zusammenhangs zwischen den Daten mit Hilfe eines robusten Variogrammschätzers erfolgen (vgl. Abschnitt 2.3.7.7). Die Variogrammschätzung ist ein sehr bedeutender Teil der räumlichen Interpolation, da auf Basis des Variogramms die Kriging-Gewichte bestimmt werden. Von der Variogrammermittlung hängt entscheidend die Güte der Interpolation ab.

Ist der Erwartungswert der Zufallsvariablen des Gesamtprozesses im Untersuchungsgebiet nicht konstant, ist also der Prozess nicht stationär, können spezielle Kriging-Verfahren, wie z.B. das Kriging mit lokalen Mittelwerten oder das External Drift Kriging, eingesetzt werden. Hinsichtlich bodenkundlicher Fragestellungen werden in einem Untersuchungsraum oft homogene Raumeinheiten, z.B. auf Basis von Bodeneinheiten und Landnutzungen, gebildet. In diesen unterliegen die Stoffgehalte vergleichbaren Einflüssen und können daher für die weiteren statistischen Analysen jeweils als eine Grundgesamtheit angesehen werden. Bestehen zwischen diesen homogenen Raumeinheiten Stetigkeitssprünge, sind also die Mittelwerte zwischen den Einheiten signifikant verschieden, müssen die jeweiligen Einflüsse vor der Interpolation herausgerechnet werden (vgl. Abschnitt 2.3.7.3 Kriging mit lokalen Mittelwerten).



Im folgenden werden die für bodenkundliche Fragestellungen bedeutsamen und in den verschiedenen Bundesländern verwendeten bzw. getesteten Kriging-Verfahren vorgestellt. Zunächst wird das Ordinary Kriging näher beschrieben, um die Grundidee des Kriging aufzuzeigen. Das Ordinary Kriging setzt einen konstanten Erwartungswert der Zufallsvariablen des Prozesses im Untersuchungsraum voraus. Anschließend werden weitere Kriging-Verfahren kurz erläutert. Dabei handelt es sich um das External Drift Kriging, das Kriging mit lokalen Mittelwerten sowie um das Cokriging. Diese Kriging-Verfahren ermöglichen die Integration von Einflussfaktoren auf die zu betrachtende Zufallsvariable. Außerdem werden das Indikator Kriging, das Lognormal Kriging und das Multi-Gaußian Kriging vorgestellt. Das Indikator Kriging ermöglicht die Ermittlung von Über- und Unterschreitungswahrscheinlichkeiten. Das Lognormal Kriging und das Multi-Gaußian Kriging eignen sich für nicht normalverteilte Prozesse.

2.3.7.1 Ordinary Kriging

Das Kriging wurde in den 60er-Jahren des 20. Jahrhunderts von G. Matheron, L. S. Gandin und anderen für unterschiedliche Aufgabenbereiche nach Vorarbeiten von Krige entwickelt. Kriging ist ein Oberbegriff für eine Reihe von Schätzverfahren. Gemeinsam ist ihnen, dass es Regressionsstechniken sind, die eine Minimierung der Schätzvarianz zum Ziel haben (Heinrich 1992).

Das Interpolationsverfahren Kriging ist ein lineares Schätzverfahren mit gewichteter räumlicher Mittelwertbildung. Die Gewichte werden im geostatistischen Modell so optimiert, dass der Schätzer im Mittel den wahren Wert schätzt und keinen systematischen Fehler aufweist (Armstrong 1998).

Im Kriging wird angenommen, dass der zu schätzende Prozess aus einer deterministischen und einer stochastischen Komponente zusammengesetzt ist (Heinrich 1992). Die Zufallsvariable $Z(u)$ wird als eine Summe von zwei Komponenten angesehen,

$$Z(u) = m(u) + R(u) \quad \text{mit } u \in U \text{ (Untersuchungsgebiet), } U \subset \mathbb{R}^2.$$

Die Funktion $m(u)$ stellt den großskaligen Anteil des Prozesses dar, die Funktion $R(u)$ den kleinskaligen (Deutsch & Journal 1998). Durch die unterschiedliche Definition des großskaligen Anteils werden verschiedene Kriging-Varianten festgelegt. Der kleinskalige Anteil wird immer als intrinsisch stationär oder stationär zweiter Ordnung angenommen.

Im Ordinary Kriging wird die zu interpolierende Beobachtungsvariable als räumlicher stochastischer Prozess $Z = \{Z(u), u \text{ in Untersuchungsgebiet}\}$ mit einem unbekanntem konstanten Mittelwert $m(u) = \text{konst.}$ modelliert. Es seien $z(u_1), \dots, z(u_n)$ Werte der Beobachtungsvariable an den beprobten Orten u_1, \dots, u_n . Diese werden als Realisationen der Zufallsvariablen $Z(u_1), \dots, Z(u_n)$ angesehen. Auch für die unbeprobten Orte werden Zufallsvariablen angenommen, dessen Realisationen in einer räumlichen Interpolation aus den bekannten Realisationen geschätzt werden (Wackernagel 1998; Hinterding 1998). Der stochastische Prozess wird auch als Zufallsfunktion bezeichnet.

Der stochastische Prozess Z wird als intrinsisch stationär angesehen. Das bedeutet zum einen, dass der Erwartungswert der Zufallsvariablen dieses Prozesses konstant ist,

$$E[Z(u)] = \text{const.}$$



für alle u im Untersuchungsgebiet. Zum anderen hängt der räumliche Zusammenhang zwischen zwei Zufallsvariablen dieser Zufallsfunktion nicht von deren absoluter Lage, sondern nur von deren Abstandvektor h ab (Hinterding 1998).

Unter der Annahme der intrinsischen Stationarität kann der räumliche Zusammenhang zwischen zwei Zufallsvariablen $Z(u_1)$ und $Z(u_2)$ des stochastischen Prozesses an den Orten u_1 und u_2 mit $u_1 - u_2 = h$ durch das wie folgt definierte so genannte Semivariogramm beschrieben werden (Armstrong 1998):

$$\gamma(h) = \frac{1}{2} \text{Var}[Z(u_1) - Z(u_2)].$$

Das Semivariogramm ist eine Funktion des Abstandsvektors h . Es variiert mit dem Abstand und der Richtung. Ist das Semivariogramm unabhängig von der Richtung, gilt also $\gamma(h) = \gamma(|h|)$, wird es isotrop genannt. Das Semivariogramm wird aus den Stichproben-Daten geschätzt, um den räumlichen Zusammenhang der vorliegenden Daten zu bestimmen (Hinterding 1998). Die Variogrammschätzung wird in Abschnitt 2.3.7.7 näher erläutert. Dabei wird auch auf die mit bodenkundlichen Fragestellungen einhergehenden Probleme eingegangen.

Um einen Wert $z(u_0)$ an dem unbeprobten Ort u_0 aus den Probenwerten $z(u_i)$ an den Orten u_1, \dots, u_n der Beobachtungsvariable zu schätzen, wird im Ordinary Kriging der folgende Krige-Schätzer verwendet:

$$z^*(u_0) = \sum_{i=1}^n w_i z(u_i).$$

Die Gewichte w_i des Krige-Schätzers für einen Punkt u_0 werden so bestimmt, dass

1. der Schätzfehler $F(u_0) = Z^*(u_0) - Z(u_0) = \sum w_i Z(u_i) - Z(u_0)$ im Mittel gleich 0 ist:

$$E[F(u_0)] = 0 \text{ und}$$

2. die Varianz des Schätzfehlers minimal ist:

$$\text{Var}[F(u_0)] = \min \{F(u_0), w_1, \dots, w_n \text{ reelle Zahlen}\}.$$

$\text{Var}[F(u_0)]$ heißt die Kriging-Varianz. Da der Krige-Schätzer im Mittel richtig (unbiased, erwartungstreu) schätzt, dabei den Schätzfehler minimiert (best) und als gewichtetes Mittel linear ist, wird er auch BLUE (best linear unbiased estimator) genannt (Heinrich 1992).

Um die Gewichte des Krige-Schätzers für einen Punkt u_0 zu bestimmen, wird die Extremwertaufgabe

$$\text{Var}[F(u_0)] = \min \{F(u_0), w_1, \dots, w_n \text{ reelle Zahlen}\}$$

unter der Nebenbedingung

$$E[F(u_0)] = 0$$

gelöst.

Die Nebenbedingung kann vereinfacht werden zu (Hinterding 1998):

$$0 = E[F(u_0)] = E[Z(u_0) - \sum_{i=1}^n w_i Z(u_i)] = E[Z(u_0)] - \left(\sum_{i=1}^n w_i E[Z(u_i)]\right) = E[Z(u_0)] \left(1 - \sum_{i=1}^n w_i\right).$$



Daraus folgt:

$$1 = \sum_{i=1}^n w_i .$$

Dabei wurde die Stationarität des stochastischen Prozesses und die Linearität des Erwartungswertes ausgenutzt. Ohne auf die Einzelheiten der Berechnung einzugehen, gilt für die Varianz des Schätzfehlers $\text{Var}[F(u_0)]$:

$$\text{Var}[F(u_0)] = 2 \sum_{i=1}^n w_i \gamma(u_i - u_0) - \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n w_i w_j \gamma(u_i - u_j) - \gamma(0) .$$

Die Extremwertaufgabe mit Nebenbedingung wird mit der Methode der Lagrange-Multiplikatoren gelöst. Diese soll hier nicht weiter erläutert werden. Die Extremwertaufgabe führt zu einem linearen Gleichungssystem, dessen eindeutige Lösung die Gewichte des Krige-Schätzers sind:

$$(1) \sum w_i \gamma(u_i - u_j) + \lambda = \gamma(u_i - u_0) \text{ mit } i, j = 1, \dots, n.$$

$$(2) \sum_{i=1}^n w_i = 1 .$$

Dabei ist λ eine Hilfsvariable, die aus der Methode der Lagrange-Multiplikatoren stammt und für den Schätzer keine Bedeutung hat. In Matrix-Schreibweise sieht das Gleichungssystem wie folgt aus:

$$\begin{bmatrix} \gamma_{11} & \cdots & \gamma_{1n} & 1 \\ \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ \gamma_{n1} & \cdots & \gamma_{nn} & 1 \\ 1 & \cdots & 1 & 0 \end{bmatrix} * \begin{bmatrix} w_1 \\ \vdots \\ w_n \\ \lambda \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \gamma_{10} \\ \vdots \\ \gamma_{n0} \\ 1 \end{bmatrix}$$

=C =w =D

Dabei ist $\gamma_{ij} = \gamma(u_i - u_j)$. Die Matrix ist aufgrund der Definitheit von γ invertierbar. Die Lösung des Gleichungssystems ist daher:

$$w = C^{-1}D .$$

Die Gewichte des Krige-Schätzers sind damit für den Ort u_0 bestimmt. Es ist zu beachten, dass für jeden zu schätzenden Wert die Gewichte des Krige-Schätzers neu zu berechnen sind.

Das Simple Kriging unterscheidet sich vom Ordinary Kriging insofern, als dass der Mittelwert $m(u)$ des stochastischen Prozesses Z als bekannt angenommen wird.

2.3.7.2 External Drift Kriging

Das External Drift Kriging wird als instationärer Prozess mit einer externen Drift angesetzt. Die externe Drift beschreibt dabei die Abhängigkeit des zu untersuchenden Prozesses von Einflussfaktoren auf die betreffende Beobachtungsvariable. Die Einflussfaktoren liegen flächendeckend vor, wie z.B. die Geländehöhe.

Die Funktion $m(u)$ beschreibt die externe Drift des Prozesses und ist im folgenden dargestellt (Deutsch & Journal 1998):



$$m(u) = a_0 + a_1 f_1(u),$$

wobei f_1 den Einflussfaktor beschreibt.

2.3.7.3 Kriging mit lokalen Mittelwerten

Auch das Kriging mit lokalen Mittelwerten erlaubt die Behandlung nichtstationärer Prozesse. Das Kriging mit lokalen Mittelwerten wird bei kategoriellen Einflussfaktoren verwendet. Ein Einflussfaktor (s) ist in verschiedene Kategorien (k) unterteilt, beispielsweise der Einflussfaktor Landnutzung in die Kategorien Acker, Wald und Grünland. Für jede Kategorie lässt sich ein lokaler Mittelwert $m^*(u_{sk})$ aus den zur Kategorie zugehörigen Beobachtungswerten $z(u_{sk})$ der Beobachtungsvariable $Z(u)$ bestimmen.

An jedem beprobten Ort u wird der Residualwert $r(u)$ dadurch ermittelt, dass die durch den entsprechenden lokalen Mittelwert $m^*(u_{sk})$ ausgedrückte Trendkomponente vom Beobachtungswert $z(u)$ abgezogen wird:

$$r(u) = z(u) - m^*(u_{sk}).$$

Der stochastische Prozess der Residuen $R(u)$ wird als intrinsisch stationär angesehen und kann mit Hilfe des Simple Kriging modelliert werden. Der Wert z^* an einem nicht beprobten Ort u_0 wird aus dem an diesem Ort geschätzten Residualwert $r^*(u_0)$ und dem entsprechenden lokalen Mittelwert $m^*(u_{0sk})$ wie folgt ermittelt (Goovaerts 1997):

$$z^*(u_0) = r^*(u_0) + m^*(u_{0sk}).$$

2.3.7.4 Cokriging

Das Cokriging wird verwendet, wenn eine (oder mehrere) Zusatzinformation(en) über die Beobachtungsvariable $Z_1(u)$ existiert und diese in die Interpolation einbezogen werden soll, aber nicht flächendeckend sondern nur punktuell vorliegt. Diese Zusatzinformation wird als sekundäre Variable $Z_2(u)$ betrachtet und ist mit der Beobachtungsvariable korreliert.

Die Zufallsvariable $Z_1(u)$ wird aus den beiden Variablen $Z_1(u)$ und $Z_2(u)$ wie folgt geschätzt:

$$Z_1^*(u) = \sum_{i=1}^n w_i Z_1(u_i) + \sum_{j=1}^m w_j Z_2(u_j).$$

Dabei stellen n und m die Anzahl der Nachbarn dar, die in die Schätzung der Beobachtungsvariable $Z_1(u)$ einbezogen werden. $Z_1(u_i)$ und $Z_2(u_j)$ sind die gemessenen Werte der jeweiligen Nachbarschaft. Die Schätzung ist eine gewichtete Summe der Nachbarwerte beider Variablen $Z_1(u)$ und $Z_2(u)$. Die Gewichte w_i und w_j werden unter den Bedingungen bestimmt, dass die Schätzung erwartungstreu ist und die Varianz des Schätzfehlers minimiert wird (vgl. Abschnitt 2.3.7.1).

Um das zugehörige Gleichungssystem zu lösen, muss der räumliche Zusammenhang zwischen den Variablen Z_1 und Z_2 mit Hilfe eines Kreuz-Variogramms modelliert werden. Dabei stellen u_1 und u_2 Orte des stochastischen Prozesses mit dem Abstand $u_1 - u_2 = h$ dar. Das Kreuz-Variogramm wird wie folgt beschrieben (Deutsch & Journal 1998; Goovaerts 1997):

$$\gamma_{Z_1 Z_2}(h) = E[(Z_1(u_1) - Z_1(u_2))(Z_2(u_1) - Z_2(u_2))],$$

wobei E den Erwartungswert darstellt.



2.3.7.5 Indikator Kriging

Mit Hilfe des Indikator Kriging werden keine Messwerte interpoliert, sondern Indikatorwerte, so z.B. Wahrscheinlichkeiten, mit denen ein Grenzwert z_k einer Beobachtungsvariable $Z(u)$ unterschritten wird. Die Wahrscheinlichkeit wird mit $I(u)$ bezeichnet. Der interpolierte Wert einer Wahrscheinlichkeit $i^*(u; z_k)$ liegt stets zwischen 0 und 1. Ein gegebener Wahrscheinlichkeitswert an einem Ort $i(u; z_k)$ nimmt den Wert 1 an, wenn der Messwert z der Beobachtungsvariable an diesem Ort u kleiner oder gleich dem Grenzwert z_k ist, andernfalls nimmt die Wahrscheinlichkeit $i(u; z_k)$ den Wert 0 an.

Das Indikator Kriging bietet eine Kleinste-Quadrate-Schätzung der bedingten Verteilungsfunktion an dem Grenzwert z_k :

$$I^*(u; z_k) = \text{Prob}^* \{Z(u) \leq z_k | (n)\}.$$

Die geschätzte Wahrscheinlichkeit Prob^* wird unter der Bedingung der Nachbarschaft (n) des Ortes u erhoben. Der Indikator-Schätzer sieht wie folgt aus:

$$I^*(u; z_k) = \sum_{i=1}^n w_{i; z_k} I(u_i; z_k).$$

Zur Bestimmung der Gewichte w_i wird auch hier der räumliche Zusammenhang zwischen zwei Wahrscheinlichkeiten $I(u_1)$ und $I(u_2)$ mit $u_1 - u_2 = h$ durch das Variogramm bestimmt (vgl. Abschnitte 2.3.7.1 und 2.3.7.7) (Deutsch & Journé 1998; Schaeben & Lindner 2000).

2.3.7.6 Kriging-Verfahren für nicht normalverteilte Prozesse

Ein zu interpolierender Prozess sollte normalverteilt sein. Ist dies nicht der Fall, wird oft eine Transformation des Prozesses anhand der Beobachtungswerte festgelegt. Zwei Gründe sprechen für die Transformation der den Interpolationen zugrunde liegenden Werte. Zum einen ergeben sich bei nicht normalverteilten Prozessen Probleme bei der Variogrammermittlung. Der klassische Variogrammschätzer liefert in diesem Fall schlechte Ergebnisse (vgl. Abschnitt 2.3.7.7). Ein weiterer Grund besteht darin, dass bei einer positiven Schiefe, wie sie bei Bodenparametern oft auftritt, nur sehr wenig hohe Werte existieren und damit eine starke Unterschätzung in den Bereichen hoher Werte auftritt.

Hierzu können verschiedene Transformationen herangezogen werden, abhängig davon, wie die Beobachtungswerte verteilt sind. Eine oft verwendete Transformation ist die lognormale Transformation, die innerhalb des Lognormal Kriging Verwendung findet. Eine weitere Transformation stellt die Normal-Score-Transformation dar, die innerhalb des Multi-Gaußian Kriging verwendet wird.

Goovaerts & Saito (2000) stellten bei einem Vergleich der Interpolationsverfahren Ordinary Kriging, Lognormal Kriging, Multi-Gaußian Kriging und Indikator Kriging für Bodendaten mit einer positiven Schiefe fest, dass das Lognormal Kriging die besten Schätzergebnisse in ihrem Untersuchungsfall lieferte.

Das Lognormal Kriging und das Multi-Gaußian Kriging werden im folgenden beschrieben. Anschließend werden weitere Transformationen kurz erläutert.



Lognormal Kriging

Mit dem Lognormal Kriging werden Schätzungen von Zufallsvariablen $Z(u)$ vorgenommen, die im betrachteten Raum log-normalverteilt vorliegen, also insbesondere eine positive Schiefe aufweisen.

Zunächst werden die Zufallsvariablen $Z(u)$ durch Logarithmieren in die normalverteilten Zufallsvariablen $Y(u)$ transformiert:

$$Y(u) = \log Z(u).$$

Die Zufallsvariable $Y^*(u)$ wird folgendermaßen geschätzt (Cressie 1991):

$$Y^*(u) = \sum_{i=1}^n w_i \log Z(u_i) = \sum_{i=1}^n w_i Y(u_i).$$

Die bekannten Zufallsvariablen $Z(u)$ werden also logarithmiert und anschließend wird ein Ordinary Kriging auf Basis der logarithmierten Werte vorgenommen, w_i sind die Gewichte.

Die geschätzten Zufallsvariablen $Y^*(u)$ werden auf die ursprüngliche Verteilung wie folgt rücktransformiert:

$$Z^*(u) = \exp\left\{Y^*(u) + \frac{1}{2}\sigma_{Y,k}^2(u) - \lambda\right\}.$$

Dabei sind $\sigma_{Y,k}^2(u)$ und λ die Kriging-Varianz und der Lagrange-Multiplikator aus dem Ordinary Kriging der logarithmierten Werte (Cressie 1991).

Durch die angegebene Formel der Rücktransformation wird eine erwartungstreue Schätzung sichergestellt, jedoch bleiben Fragen über die Bedingung eines optimalen Schätzers offen (Chilès & Delfiner 1999).

Bei der Transformation der Werte ist besonders darauf zu achten, dass die logarithmierten Werte tatsächlich eine Normalverteilung aufweisen bzw. die Abweichung von der Normalverteilung vernachlässigbar ist (Chilès & Delfiner 1999).

Um Probleme mit Nullwerten zu vermeiden, sollten diese Werte minimal heraufgesetzt werden (Armstrong 1998). Eine Möglichkeit der Behandlung von Messwerten unter der Nachweisgrenze zeigt z.B. das Ministerium für Umwelt und Forsten (1998) auf. Danach werden zur Berechnung von Zahlenwerten die Messwerte unter der Nachweisgrenze auf die halbe Nachweisgrenze gesetzt. Auch im GSE-Bericht wird vorgeschlagen, die Werte unter der Nachweisgrenze auf die halbe Nachweisgrenze zu setzen (UBA 2002).

Multi-Gaussian Kriging

Die Normal-Score-Transformation ist eine graphische Transformation, die eine Normalisierung beliebiger Verteilungen zulässt, unabhängig von ihrer Form. Die Normal-Score-Transformation erfolgt in drei Schritten:

1. Die wahren Werte $z(u_i)$ werden zunächst in eine aufsteigende Rangfolge geordnet:

$$[z(u_i)]^{(1)} \leq \dots \leq [z(u_i)]^{(k)} \leq \dots \leq [z(u_i)]^{(n)},$$

wobei k den Rang des Wertes $z(u_i)$ unter allen Werten (n =Anzahl) angibt.



2. Die kumulative Häufigkeit des Wertes $z(u_i)$ mit dem Rang k wird dann nach $p_k^* = k/n - 0.5/n$ berechnet.

3. Der Wert $z(u)$ mit dem Rang k wird über das p_k^* -Quantil an die kumulative Standardnormalverteilung angepasst:

$$y(u_i) = G^{-1}[F(z(u_i))] = G^{-1}(p_k^*),$$

dabei stellt F die Verteilungsfunktion der Daten und G die Verteilungsfunktion der Standardnormalverteilung dar.

Es wird ein Semivariogramm der transformierten Werte ermittelt und die transformierten Werte $y(u)$ werden dann beispielsweise mit dem Ordinary Kriging interpoliert. Auch hier ergibt sich das Problem der Rücktransformation. Johnston et al. (2001) oder Deutsch & Journé (1998) z.B. transformieren die interpolierten Werte $y^*(u)$ mittels der Inversen der Normal-Score-Transformation direkt zurück. Dieses führt aber dazu, dass die Schätzung nicht mehr erwartungstreu ist (Goovaerts & Saito 2000). Goovaerts & Saito (2000) schlagen alternativ einen anderen Weg vor, bei dem sie allerdings ein anderes Optimalitätsprinzip verfolgen als das der Erwartungstreue:

1. Zunächst wird die Gaußsche Wahrscheinlichkeitsverteilung der Zufallsvariable Y an dem Ort u über den Mittelwert und die Varianz ermittelt. Der Mittelwert ist der mit dem Ordinary Kriging geschätzte Wert $y^*(u)$ und die Varianz ist die über das Simple Kriging ermittelte Kriging-Varianz $\sigma^2(u)$.

2. Diese Wahrscheinlichkeitsverteilung wird diskretisiert, indem 100 Quantile $y_p(u)$ gebildet werden, die den Wahrscheinlichkeiten $p = k/100 - 0.5/100$ mit $k = 1, 2, \dots, 100$ entsprechen.

3. Die entsprechenden Quantile der lokalen Wahrscheinlichkeitsverteilung der Zufallsvariable Z werden ermittelt ($F(u; z|(n)) = \text{Prob}\{Z(u) \leq z|(n)\}$). Es wird folgende Rücktransformation von $y_p(u)$ genutzt:

$$z_p(u) = F^{-1}[G(y_p(u))].$$

4. Die Kriging-Schätzung $z^*(u)$ wird aus dem Mittelwert der Verteilungsfunktion $F(u; z|(n))$ gebildet, in diesem Fall wie folgt:

$$z^*(u) = \frac{1}{100} \sum_{k=1}^n z_p(u) \text{ mit } p = k/100 - 0.5/100.$$

Eine Annahme des Multi-Gaußian Kriging ist, dass die n -dimensionale Verteilung der Zufallsfunktion $Z(u)$ normalverteilt ist. Diese Annahme lässt sich in der Praxis nicht überprüfen, so dass nur die zweidimensionale Verteilung auf Bi-Normalverteilung überprüft wird (Goovaerts & Saito 2000).

Generelle Transformation

Der Lognormal Kriging-Ansatz kann für verschiedene Transformationen generalisiert werden. Der stochastische Prozess $Z = \{Z(u), u \text{ in Untersuchungsgebiet}\}$ wird beschrieben durch:

$$Z(u) = \varphi(Y(u)).$$

Dabei stellt Y einen normalverteilten stochastischen Prozess dar, der intrinsisch stationär ist. φ ist eine zweifach differenzierbare Funktion und invertierbar. Die transformierten y -Werte lassen



sich mit einem linearen Schätzer interpolieren, die interpolierten Werte müssen anschließend auf die Ursprungsskala rücktransformiert werden. Mit Hilfe der Taylor Entwicklung wird eine erwartungstreue Rücktransformation der Zufallsvariablen $Y(u)$ erreicht:

$$Z^*(u) = \varphi(Y^*(u)) + \varphi''(\mu_Y^*) \left\{ \frac{1}{2} \sigma_{Y,k}^2(u) - \lambda \right\}.$$

Dabei sind $\sigma_{Y,k}^2(u)$ und λ die Kriging-Varianz und der Lagrange-Multiplikator aus dem Kriging der transformierten Werte, μ_Y ist gleich $E(Y(u))$ (Cressie 1991; Chilès & Delfiner 1999).

2.3.7.7 Variogrammermittlung

Die Variogrammschätzung ist ein sehr bedeutender Teil der räumlichen Interpolation, da auf Basis des Variogramms die Kriging-Gewichte bestimmt werden. Von der Variogrammermittlung hängt entscheidend die Güte der Interpolation ab.

Zunächst wird die Variogrammermittlung unter Einbeziehung des klassischen Variogrammschätzers nach Matheron ausführlich beschrieben. Die Anwendung des klassischen Variogrammschätzers ist aber bei nicht normalverteilten Variablen problematisch (Dutter 1996), daher werden im Anschluss an die Beschreibung weitere robuste Variogrammschätzer vorgestellt, die sich bei schiefen Verteilungen der zu interpolierenden Variablen oder aber bei Auftreten von Ausreißern eignen.

Unter der Annahme der intrinsischen Stationarität wird der räumliche Zusammenhang zwischen zwei Zufallsvariablen $Z(u_1)$ und $Z(u_2)$ des stochastischen Prozesses an den Orten u_1 und u_2 mit $u_1 - u_2 = h$ durch das wie folgt definierte so genannte Semivariogramm beschrieben (Armstrong 1998):

$$\gamma(h) = \frac{1}{2} \text{Var}[Z(u_1) - Z(u_2)].$$

Das Semivariogramm, das im folgenden kurz Variogramm genannt wird, ist unabhängig vom Ort und gibt die mittlere Streuung der Differenzen zwischen zwei Zufallsvariablen mit Abstandvektor h an. Damit ist es ein Maß für den räumlichen Zusammenhang der beiden Zufallsvariablen. Das Variogramm ist Kennwert des intrinsisch stationären stochastischen Prozesses, der Menge aller Zufallsvariablen im Untersuchungsgebiet (Hinterding 1998). Die folgende Abb. 2- 2 verdeutlicht das prinzipielle Verhalten eines isotropen Variogramms.

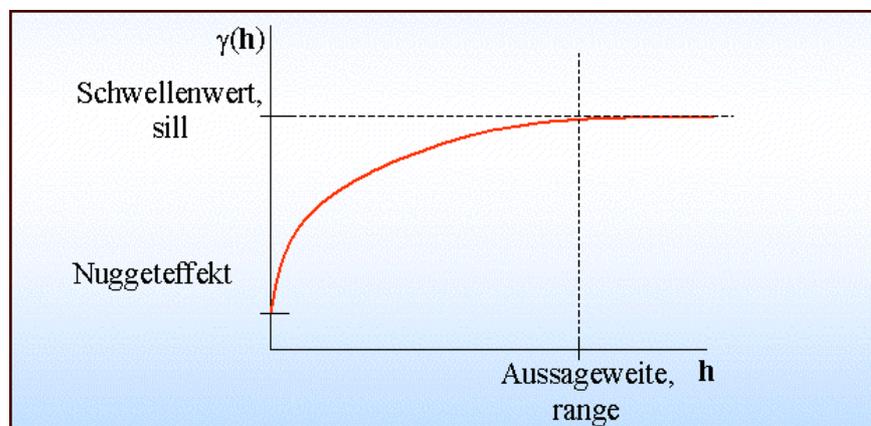


Abb. 2- 2: Experimentelles oder empirisches Variogramm.



In der Regel stellt das Variogramm eine monoton wachsende Funktion dar. Mit zunehmendem räumlichen Abstand zwischen zwei Zufallsvariablen des stochastischen Prozesses nimmt ihr Zusammenhang ab und entsprechend die Varianz der Differenz der beiden Zufallsvariablen zu. Der Abstand, bei dem das Variogramm asymptotisch einen Schwellenwert (sill) erreicht, wird als Aussageweite (range) bezeichnet. Armstrong (1998) bezeichnet diese Aussageweite als „[...] zone of influence“. Die Zufallsvariablen, die in einem größeren räumlichen Abstand als die Aussageweite zueinander stehen, werden als voneinander unabhängig angesehen (Armstrong 1998; Hinterding 1998). Verläuft die Variogrammkurve nicht durch den Ursprung, sondern schneidet sie die y-Achse an einem von Null abweichenden Wert, spricht man von einem so genannten Nugget-Effekt. Das Auftreten eines Nugget-Effektes kann aus Messfehlern oder einer nicht berücksichtigten Mikrovariabilität des Prozesses resultieren (Heinrich 1992).

Das Variogramm ist also eine Funktion des Abstandsvektors h . Es variiert mit dem Abstand und der Richtung. Ist das Variogramm unabhängig von der Richtung, gilt also $\gamma(h) = \gamma(|h|)$, wird es isotrop genannt. Das Variogramm wird aus den Stichproben-Daten geschätzt, um den räumlichen Zusammenhang der vorliegenden Daten zu bestimmen (Hinterding 1998).

Zunächst wird das experimentelle bzw. empirische Variogramm aus den Stichprobenwerten geschätzt. Das Variogramm wird also für Abstandsvektoren geschätzt, die in den gemessenen Daten vorkommen. Dazu werden Tupel der beobachteten Werte betrachtet und deren Abstandsvektor bestimmt. Da aber in der Praxis oft nur wenige Tupel von beobachteten Werten denselben Abstand haben, werden Abstandsklassen gebildet.

Das Variogramm für einen Abstand h wird mit dem klassischen Variogrammschätzer nach Matheron aus den quadrierten Differenzen einzelner Punktepaare, die innerhalb einer Abstandsklasse liegen, geschätzt:

$$2\hat{\gamma}(h) = \frac{1}{|N(h)|} \sum_{N(h)} (Z(u_i) - Z(u_j))^2$$

mit $N(h) = \{(u_i, u_j), u_i - u_j = h, i, j = 1, \dots, n\}$.

An das experimentelle Variogramm ist das theoretische Variogramm anzupassen, um auch Varianzen für die Abstandsvektoren h zu ermitteln, für die keine Tupel in den beobachteten Daten vorliegen. Es wird angenommen, dass das experimentelle Variogramm den groben Verlauf des räumlichen Zusammenhanges in dem gesamten Untersuchungsgebiet widerspiegelt. Um die fehlenden Werte zu schätzen, wird dem experimentellen Variogramm eine Funktion angepasst, die den Verlauf des experimentellen Variogramms möglichst gut wiedergibt.

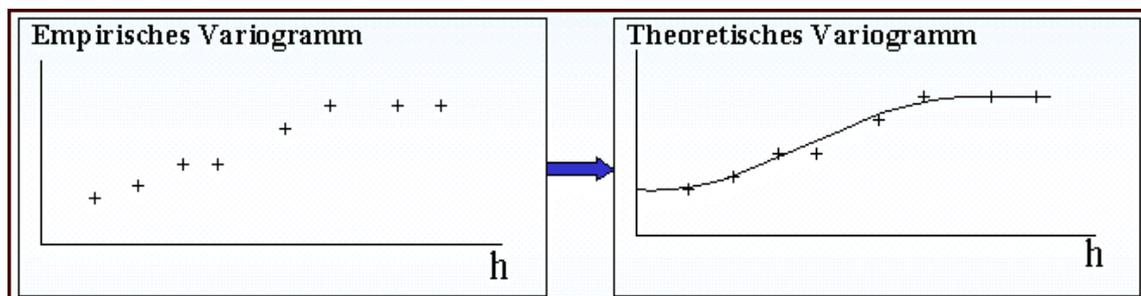


Abb. 2- 3: Anpassung des theoretischen Variogramms an die Punktwolke des experimentellen Variogramms.



Dazu dürfen aber nicht beliebige Funktionen verwendet werden, sondern nur solche, die konditional bedingt negativ semidefinit sind, damit die Varianz von $Z(u)$ für alle $u \in U$ nicht negativ wird. Beispiele für Familien solcher Funktionen sind das Sphärische, das Gaußsche und das Exponentielle Variogrammodell (Deutsch & Journé 1998, Chilès & Delfiner 1999).

Robuste Variogrammschätzer

Der beschriebene klassische Variogrammschätzer nach Matheron ist erwartungstreu, aber er liefert schlechte Ergebnisse, wenn Ausreißer in den Daten vorkommen oder die Daten nicht normalverteilt sind. Schon ein Ausreißer kann die Schätzung komplett zerstören (Genton & Furrer 1998).

In der Literatur werden verschiedene Vorschläge zu robusten Variogrammschätzern unter der Annahme eines intrinsisch stationären stochastischen Prozesses $Z = \{Z(u), u \in U\}$ gemacht, die mehr oder weniger für die Fälle geeignet sind, in denen die Daten von der Normalverteilung abweichen oder Ausreißer auftreten. Oft verwendete robuste Variogrammschätzer sind die beiden folgenden, die auf Hawkins und Cressie basieren (Cressie 1991):

$$2\bar{\gamma}(h) = \left\{ \frac{1}{|N(h)|} \sum_{N(h)} |Z(u_i) - Z(u_j)|^2 \right\}^{\frac{1}{4}} / \left(\frac{0.457 + 0.494}{|N(h)|} \right)$$

und

$$2\tilde{\gamma}(h) = [\text{med}\{|Z(u_i) - Z(u_j)|^2 : (u_i, u_j) \in N(h)\}]^{\frac{1}{2}} / B(h)$$

mit $N(h) = \{(u_i, u_j), u_i - u_j = h, i, j = 1, \dots, n\}$.

Dabei bezeichnet $\text{med}\{\}$ den Median der Sequenz $\{\}$ und $B(h)$ ist der Korrekturfaktor für die Erwartungstreue ($B(h) = 0.457$).

Nach Genton (1998) ist der angegebene robuste Variogrammschätzer $2\bar{\gamma}(h)$ nach Cressie und Hawkins nicht ausreichend, da auch hierbei ein einzelner Ausreißer in den Daten die Schätzung verschlechtern kann. Er entwickelte basierend auf Rousseeuw und Croux den folgenden robusten Skalenschätzer:

$$Q_{N_h} = 2.2191 \{ |V_i(h) - V_j(h)| ; i < j \}_{(k)}$$

Dabei sind $V(h) = Z(u_1) - Z(u_2)$ und $\{V_1(h), \dots, V_{N_h}(h)\}$ die Menge der zu einer Stichprobe $\{Z_1(u), \dots, Z_n(u)\}$ gehörenden Differenzen. Für eine Menge $M \subset \mathbb{R}$ und ein $k \in \{1, \dots, |M|\}$ ist $M_{(k)}$ als das k -te Element der nach der Größe geordneten Menge M definiert. Die Konstante ist so gewählt, dass der Schätzer im Fall der Normalverteilung annähernd erwartungstreu ist. k ist als

$$k = \binom{[N_h / 2] + 1}{2}$$

definiert. Dieser Schätzer weist einen Bruchpunkt von 50% auf und hat eine beschränkte Einflusskurve (Rousseeuw & Croux 1993). Auf Basis dieses Skalenschätzers wird der robuste Variogrammschätzer von Genton als

$$2\hat{\gamma}(h) = (Q_{N_h})^2$$



definiert.

2.3.7.8 Aussagesicherheit

Bisher stand die Herleitung und Anwendung eines optimalen Schätzers und seiner Schätzfehler-Varianz im Vordergrund. In diesem Abschnitt werden Methoden vorgestellt, mit denen sich die Unsicherheit einer Schätzung und damit ihre Aussagesicherheit modellieren lässt. Dabei handelt es sich um die Erhebung der Schätzfehler-Varianz, um lokale Konfidenzintervalle und um lokale Verteilungen zur Abschätzung der Unsicherheit einer Schätzung.

Die Modellierung der Unsicherheit einer Schätzung wird in Entscheidungsprozessen genutzt. Ziel der Modellierung der lokalen Unsicherheit ist dabei beispielsweise die Bestimmung und kartenmäßige Darstellung der Wahrscheinlichkeit, dass lokal ein vorgegebener Grenzwert überschritten wird oder des Bedarfs an zusätzlichen Probenahmen (Goovaerts 1997; Schaeben & Lindner 2000).

Schätzfehler-Varianz als Index der Unsicherheit einer Schätzung

Faktoren, die die Unsicherheit von Schätzungen beeinflussen, sind die Anzahl und die Entfernung der Stichproben zum zu schätzenden Ort, die Messnetzkonfiguration (Vorkommen geclusterter Stichproben) und die Variabilität des zu schätzenden Prozesses.

Die Schätzfehler-Varianz $\tilde{\sigma}_Z^2$ (Krige-Varianz) einer Zufallsvariable $Z(u)$ ist ein Index der Unsicherheit einer Schätzung:

$$\tilde{\sigma}_Z^2 = \tilde{C}_{00} + \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n w_i w_j \tilde{C}_{ij} - 2 \sum_{i=1}^n w_i \tilde{C}_{i0}.$$

Dabei steht \tilde{C}_{00} für die Varianz der Punktdaten mit Abstand 0, \tilde{C}_{ij} für die Kovarianz zwischen den Stichproben i und j und \tilde{C}_{i0} für die Kovarianz zwischen der i -ten Stichprobe und dem unbekannten zu schätzenden Wert.

Der erste Term drückt die Variabilität des Gesamtprozesses aus. Ist die Variabilität des Prozesses groß, nimmt der erste Term einen großen Wert an und verursacht damit eine große Schätzfehler-Varianz.

Der zweite Term drückt die Güte der Messnetzkonfiguration aus. Liegen die Stichproben sehr nahe beieinander und sind damit stark geclustert, steigt die mittlere Kovarianz zwischen den Stichproben an. Geclusterte Stichproben führen zu einer Zunahme der Unsicherheit einer Schätzung.

Der dritte Term drückt die Entfernung der Stichproben zum zu schätzenden Wert aus. Wenn die mittlere Distanz zu den Stichproben sinkt, steigt die mittlere Kovarianz an und aufgrund des negativen Vorzeichens verursacht dieser Term eine Abnahme der Schätzfehler-Varianz. Dies bedeutet, dass die Unsicherheit über den geschätzten Wert kleiner wird.

Die Schätzfehler-Varianz berücksichtigt also die zuvor angeführten Faktoren, die die Unsicherheit einer Schätzung beeinflussen (Isaaks & Srivastava 1989). Die Schätzfehler-Varianz ist aber unabhängig von den Stichprobenwerten (Goovaerts 1997).



Lokale Konfidenzintervalle

Ein Konfidenzintervall zum Niveau α ist ein Intervall, in welchem ein gesuchter Parameter mit der Wahrscheinlichkeit $1 - \alpha$ zu finden ist.

Zur Beurteilung der Aussagesicherheit der Krige-Schätzung werden häufig Konfidenzintervalle für die gesuchten lokalen Mittelwerte angegeben.

Im Falle normalverteilter Residuen der Krige-Schätzung lässt sich ein solches Konfidenzintervall zum Niveau $\alpha = 0,05$ durch

$$[Z^* - 2\sigma_k, Z^* + 2\sigma_k]$$

angeben (Chilès & Delfiner 1999).

In die Berechnung des Konfidenzintervalls geht neben dem Wert der Parameterschätzung auch die Krige-Varianz ein. Deshalb muss stets berücksichtigt werden, dass nicht die lokale Streuung der Werte, sondern lediglich die Messnetzkonfiguration ausschlaggebend für die Breite des Intervalls ist. Die Krige-Varianz ist an zwei unterschiedlichen Punkten grundsätzlich gleich, wenn die lokalen Messnetzkonfigurationen gleich sind, unabhängig von der Streuung der jeweiligen Nachbarwerte.

Wenn die aus der Kriging-Interpolation resultierenden Residuen nicht normalverteilt sind, stimmt das Signifikanzniveau des oben genannten Konfidenzintervalls nicht mehr. Es müsste um die Längen von zwei Standardabweichungen breiter gewählt werden, d.h. die Gestalt

$$[Z^* - 3\sigma_k, Z^* + 3\sigma_k]$$

haben, um noch mit einer 95%-igen Sicherheit den wahren Parameter der Grundgesamtheit zu überdecken (Chilès & Delfiner 1999). Diese Feststellung ergibt sich aus der Tschebyscheffschen Ungleichung (Hartung et al. 1999).

Dieser Fall kann auch eintreten, wenn schiefe Ausgangsdaten zur Interpolationsschätzung nicht transformiert, sondern stattdessen ein robuster Variogrammschätzer eingesetzt wird, denn dann sind die resultierenden Fehler in der Regel auch schief verteilt. (Dies ergibt sich aus der Glättungseigenschaft des Kriging-Verfahrens, welches dazu neigt, Gebiete mit kleinen Werten zu überschätzen und Gebiete mit großen Werten zu unterschätzen).

Burnham et al. (1987) schlagen für logschiefe Daten die alternative Berechnung der Konfidenzgrenzen durch

$$\hat{\theta}_L = \hat{\theta} / C \quad \text{und} \quad \hat{\theta}_u = \hat{\theta} * C$$

mit

$$C = \exp(z_{\alpha/2} \sqrt{\ln(1 + cv(\hat{\theta})^2)})$$

vor.

Hierbei bezeichnet $\hat{\theta}$ den Schätzwert des Parameters, $\hat{\theta}_L$ bzw. $\hat{\theta}_u$ die unteren bzw. oberen Konfidenzgrenzen.



Im Falle nichtnormalverteilter Ausgangsdaten, die zur Variogrammschätzung transformiert worden sind, ist es fraglich, ob das Konfidenzintervall der transformierten Daten einfach rücktransformiert werden kann.

Für Konfidenzintervalle von Parametern einer linearen Regression wurde festgestellt, dass eine einfache Transformation der Konfidenzgrenzen zu extrem verzerrten Intervallen führen kann. Um zu unverzerrten Konfidenzgrenzen zu gelangen, wird vielfach das Bootstrap-Verfahren durchgeführt (Carpenter et al. 1999).

Für Prognoseintervalle einer Regression ist eine einfache Transformation der Konfidenzgrenzen dagegen unbedenklich. Unter bestimmten, im Projektverlauf noch zu klärenden Bedingungen, kann das Prognoseintervall einer linearen Regressionsschätzung als das Konfidenzintervall einer Interpolationsschätzung angesehen werden. In diesem Falle müsste keine Bootstrap-Schätzung durchgeführt werden.

Modellierung lokaler Verteilungen durch das Indikator Kriging

Der zentrale Begriff dieses Vorgehens ist die lokale Verteilung, auch bedingte Verteilung genannt. Es sei der stochastische Prozess $Z = \{Z(u), u \text{ in Untersuchungsgebiet}\}$ gegeben, $z(u_i)$ mit $i = 1, \dots, n$ bezeichnet die gemessenen Werte. Die bedingte Verteilungsfunktion wird wie folgt definiert:

$$F(u; z | (n)) = \text{Prob}\{Z(u) \leq z | (n)\}.$$

Die Verteilungsfunktion ist durch die den Messwerten u_i mit $i = 1, \dots, n$ inwohnende Information (n) bedingt, z bezeichnet den Grenzwert. Mit der lokalen Verteilung lässt sich für jeden Ort die Unsicherheit einer Schätzung beschreiben.

Indikatortransformierte Zufallsvariablen bzw. Messwerte ermöglichen die Modellierung der lokalen Verteilungsfunktion $F(u; z | (n))$. Die lokalen Wahrscheinlichkeiten für die Unterschreitung verschiedener Grenzwerte an einem Ort werden aus den benachbarten und bekannten indikatortransformierten Wahrscheinlichkeiten der verschiedenen Grenzwerte interpoliert. Diesbezüglich wird auf den Abschnitt 2.3.7.5 über das Indikator Kriging verwiesen.

Die Wahrscheinlichkeit, dass an einem Ort ein unbekannter Wert innerhalb eines Intervalls $(a, b]$, auch Wahrscheinlichkeitsintervall genannt, liegt, wird als Differenz der Wahrscheinlichkeiten für die Grenzwerte b und a modelliert:

$$\text{Prob}\{Z(u) \in (a, b] | (n)\} = F(u; b | (n)) - F(u; a | (n)).$$

Ein beispielsweise 50%-Wahrscheinlichkeitsintervall sagt aus, dass der unbekannte Wert mit gleicher Wahrscheinlichkeit sowohl außerhalb als auch innerhalb des Intervalls $(a, b]$ liegen kann.

Setzt man den oberen Grenzwert b des Intervalls auf $+\infty$, erhält man die Überschreitungswahrscheinlichkeit für den Grenzwert a :

$$\text{Prob}\{Z(u) \in (a, +\infty] | (n)\} = \text{Prob}\{Z(u) > a | (n)\} = 1 - F(u; a | (n)).$$

Diese beschriebene Überschreitungswahrscheinlichkeit ist sehr wichtig für umweltbezogene Anwendungen, in denen oft das Risiko des Überschreitens von vorgegebenen Grenzwerten abgeschätzt werden muss (Goovaerts 1997; Schaeben & Lindner 2000).



Auch die Streuung der bedingten Verteilung gibt Auskunft über die Unsicherheit eines Wertes an einem Ort u . Die bedingte Varianz $\sigma^2(u)$ gibt die Streuung um den Mittelwert $z_E^*(u)$ der bedingten Wahrscheinlichkeitsverteilung an. Die bedingte Varianz wird näherungsweise ermittelt durch:

$$\sigma^2(u) \cong \sum_{k=1}^{K+1} [\bar{z}_k - z_E^*(u)]^2 * [F(u; z_k | (n)) - F(u; z_{k-1} | (n))].$$

Die Werte z_k ($k = 1, \dots, K$) sind die K -vielen Grenzwerte, die die Spannweite der z -Werte diskretisieren. Es wird festgelegt, dass $F(u; z_0 | (n)) = 0$ und $F(u; z_{K+1} | (n)) = 1$ sind. Die anderen Grenzwerte z_k werden durch $q\%$ -Quantile ausgedrückt, diese müssen Verteilungsincrementen mit gleichem Abstand entsprechen:

$$z_k = F^{-1}(u; k/[K + 1] | (n)).$$

Der Wert \bar{z}_k ist der Mittelwert der Klasse $(z_{k-1}, z_k]$ und wird ermittelt durch $\bar{z}_k = (z_{k-1} + z_k)/2$. $z_E^*(u)$ ist der Erwartungswert der näherungsweise ermittelten bedingten Wahrscheinlichkeitsverteilung:

$$z_E^*(u) \cong \sum_{k=1}^{K+1} \bar{z}_k * [F(u; z_k | (n)) - F(u; z_{k-1} | (n))].$$

Für stark asymmetrische Verteilungen sollte ein robustes Streuungsmaß gewählt werden. Hierzu eignet sich der Interquartilsabstand q_R , der über die Differenz des 75. ($q_{0.75}$) und 25. Quartils ($q_{0.25}$) wie folgt definiert ist:

$$q_R(u) = q_{0.75}(u) - q_{0.25}(u) = F^{-1}(u; 0.75 | (n)) - F^{-1}(u; 0.25 | (n)).$$

Da in diesem Fall keine Mittelwerte extremer Klassen verwendet werden, ist der Interquartilsabstand von der Wahl des Modells zur Extrapolation des oberen Teils der Verteilung weniger beeinflusst (Goovaerts 1997).

Eine weitere Möglichkeit zur Überprüfung der Aussagesicherheit einer Schätzung stellen Simulationen dar. Diese werden allerdings in diesem Projekt nicht behandelt und daher auch nicht näher erläutert. Nähere Informationen hierzu finden sich beispielsweise bei Goovaerts (1997) und Chilès & Delfiner (1999).

2.3.8 Kreuzvalidierung

Eine gebräuchliche Methode zur Prüfung der Qualität einer Interpolation ist die so genannte Kreuzvalidierung. Die Grundidee der Kreuzvalidierung besteht darin, aus einer vorhandenen Stichprobe eines Parameters einen gemessenen Wert herauszunehmen und diesen mittels der anderen Werte der Stichprobe unter Verwendung des Interpolationsverfahrens zu schätzen (Cressie 1991). Die Differenz zwischen wahren $z(u_i)$ und geschätztem $z^*(u_i)$ Wert bildet den lokalen Fehler der Schätzung SF am Ort u_i (Isaaks & Srivastava 1989):

$$SF(u_i) = z(u_i) - z^*(u_i) \quad \text{mit } i = 1, \dots, n.$$

Die Schätzfehler SF werden auch als Residuen bezeichnet. Die Ergebnisse der Kreuzvalidierung können mit Hilfe der Erhebung verschiedener statistischer Kennwerte analysiert werden. Diese Analyse gibt Aufschluss über die Güte eines Interpolationsverfahrens. Ist der mittlere Schätz-



fehler SF einer Stichprobe (n) und damit das arithmetische Mittel \bar{x} annähernd Null, liegt keine Tendenz und damit eine erwartungstreue (unbiased) Schätzung vor. Dagegen kann ein starker negativer (oder positiver) mittlerer Schätzfehler eine systematische Überschätzung (bzw. Unterschätzung) repräsentieren (Wackernagel 1998).

Ein weiteres aussagekräftiges Maß ist die Schiefe, denn eine schiefe Verteilung impliziert ebenfalls eine Verzerrung der geschätzten Werteoberfläche. Ein in der Statistik gebräuchliches Maß der Schiefe ist der Schiefekoeffizient g . Er wird über das Potenzmoment 3. Ordnung und die Standardabweichung definiert und kann bei Hartung et al. (1999) eingesehen werden. Ist $g = 0$, bedeutet das, dass die Häufigkeitsverteilung symmetrisch ist. Je stärker negativ g ist, desto linksschiefer bzw. negativ schiefer ist die Verteilung. Sie ist umso rechtsschiefer bzw. positiv schiefer, je stärker positiv g ist.

Weiterhin erhofft man sich eine geringe Streuung der Residuenwerte um ihren Mittelwert. Die Standardabweichung s ist ein geeignetes Maß für die Abschätzung der Streuung der Werte (Hartung et al. 1999). Je größer der Wert der Standardabweichung s ist, umso weiter streuen die Residuenwerte um ihren Mittelwert (Isaaks & Srivastava 1989).

Laut Isaaks & Srivastava (1989) ist eine Schätzung mit einer geringen Abweichung von der Erwartungstreue und einer geringen Standardabweichung der Residuenwerte gegenüber einer erwartungstreuen Schätzung mit einer großen Standardabweichung der Residuenwerte vorzuziehen.

Die Größe des mittleren quadrierten Schätzfehlers (MQS) ist ein statistischer Kennwert für den Vergleich verschiedener Schätzungen (Wackernagel 1998):

$$\text{MQS} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (z(u_i) - z^*(u_i))^2.$$

Je kleiner der Wert des MQS ist, umso besser ist auch die entsprechende Schätzmethode. Neben dem mittleren quadrierten Schätzfehler MQS ist auch der mittlere absolute Schätzfehler (MAS) ein wichtiger statistischer Kennwert zur Abschätzung der Güte einer Methode. Auch hier gilt, je kleiner der Wert des MAS ist, umso besser ist die entsprechende Schätzmethode (Isaaks & Srivastava 1989):

$$\text{MAS} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n |z(u_i) - z^*(u_i)|.$$

Die beiden angeführten Kennwerte der Schätzfehler unterscheiden sich dadurch, dass bei der Berechnung des MQS durch das Quadrieren höhere Residuenwerte stärker gewichtet werden. Außerdem werden Residuenwerte, die einen Wert von kleiner 1 annehmen, in ihrer Gewichtung stark minimiert. In die Berechnung des MAS gehen die verschiedenen Residuenwerte gleichgewichtet ein.

Optisch gute Einblicke in die Qualität der vorgenommenen Schätzung vermitteln auch Korrelationsdiagramme. In diese werden die geschätzten gegen die wahren Werte eingetragen. Bei einer optimalen Schätzung würden die wahren und geschätzten Werte exakt an einer in einem Winkel von 45° stetig ansteigenden Geraden liegen. In der Realität werden aber bei jeder Interpolation Fehlschätzungen auftreten. Daher ist bei jedem Korrelationsdiagramm dieser Art die Hauptdiagonale von einer mehr oder minder gut an sie angepassten Punktwolke flankiert. Je



genauer die Schätzungen der gewählten Methode sind und damit die wahren und geschätzten Werte so nahe wie möglich an der Hauptdiagonalen „Wahrer Wert = Geschätzter Wert“ verlaufen, umso besser geeignet ist die Methode für die Interpolation (Isaaks & Srivastava 1989).

Die Güte der betreffenden Methode kann in diesem Zusammenhang über die Ermittlung beispielsweise des Rangkorrelationskoeffizienten r_s nach Spearman zwischen den wahren und geschätzten Werten quantifiziert werden. Der nichtparametrische Rangkorrelationskoeffizient r_s hat den Vorteil, dass die wahren und geschätzten Werte nicht auf Normalverteilung getestet werden müssen. Er gibt Aufschluss über die Stärke des Zusammenhangs zwischen den beiden Variablen und leistet gute Dienste als Maßzahl für die Nähe der Punkte zur Diagonalen „Wahrer Wert = Geschätzter Wert“. Eine Interpolation mit hohem Koeffizienten wird im allgemeinen anderen, durch niedrigere Werte gekennzeichnete Schätzungen, vorzuziehen sein. Der Wert des Koeffizienten liegt stets im Intervall $[-1; +1]$. Ist $r_s = +1$, liegen die Punkte exakt an der aufsteigenden Geraden „Wahrer Wert = Geschätzter Wert“. Ist $r_s = -1$, liegen sie exakt an der absteigenden Geraden „Wahrer Wert \neq Geschätzter Wert“. Je näher r_s an $+1$ liegt, umso besser ist die Punktwolke an die Hauptdiagonale des Korrelationsdiagrammes angepasst. Je näher sich r_s der 0 annähert, umso diffuser erscheint die Punktwolke (Lorup 2000).

Der Quotient zwischen der Spannweite der wahren und der geschätzten Werte gibt einen vergleichenden Aufschluss über die Variabilität dieser Werte:

$$\text{Quotient} = \frac{\max(z(u_i)) - \min(z(u_i))}{\max(z^*(u_i)) - \min(z^*(u_i))}$$

Nimmt der Quotient einen Wert von größer 1 an, liegen die geschätzten Werte innerhalb des von den wahren Werten vorgegebenen Werteintervalls. Ist der Quotient kleiner 1, geht die Schätzung über das wahre Werteintervall hinaus.



3 CHARAKTERISIERUNG HÄUFIG ANGEWENDETER VERFAHREN IN DEN LÄNDERN UND IM BUND

In diesem Kapitel werden die in den Bundesländern und im Bund angewendeten Verfahren zur Beschreibung der flächenhaften Verteilung der Stoffgehalte in Böden charakterisiert. Diese Ausführungen basieren auf Befragungen der Länder. Nicht alle Bundesländer haben Berichte über ihre Vorgehensweise bei der Ermittlung der flächenhaften Verteilung der Stoffgehalte im Boden geschickt. Zu diesen Ländern zählen Bremen, Hamburg und Berlin. Bremen wird vom Land Niedersachsen mitbearbeitet. Schleswig-Holstein hat gerade begonnen, ein Verfahren zur Beschreibung der räumlichen Verteilung der Stoffgehalte im Boden zu entwickeln und konnte daher keine näheren Angaben machen. Dieses Verfahren wird sich an dem Verfahren aus NRW orientieren. Die in den Ländern und beim Bund angewendeten Verfahren sind in den im Anhang aufgeführten Steckbriefen ausführlich beschrieben. Die einzelnen Verfahren der Länder beziehen sich zwar jeweils auf ein Bundesland, sie sind aber nicht immer landesweit entwickelt.

Die Befragung hat ergeben, dass im Grundsatz zwei Methodenkomplexe zur flächenhaften Beschreibung der Stoffgehalte im Boden zur Anwendung kommen. Dabei handelt es sich um die Methodenkomplexe „Erhebung statistischer Kennwerte“ und „Räumliche Interpolationsverfahren“.

Für beide Methodenkomplexe ist die Abgrenzung von homogenen Raumeinheiten von besonderer Bedeutung. Auf Basis von Einflussfaktoren wie z.B. den Bodeneinheiten und der Landnutzung werden dabei homogene Raumeinheiten gebildet. In diesen unterliegen die Stoffgehalte vergleichbaren Einflüssen und können daher für die weiteren statistischen Analysen jeweils als eine Grundgesamtheit angesehen werden.

Im folgenden werden die in den Bundesländern und beim Bund angewendeten Verfahren getrennt nach den beiden Methodenkomplexen charakterisiert. Zur Charakterisierung der Verfahren werden verschiedene Aspekte herangezogen. Hierzu zählen die Datengrundlage, Verteilungsanalyse, Repräsentativität, Ausreißeranalyse, Statistische Kennwerte/Räumliche Interpolationsverfahren, Angewendeter Maßstab, Aussagesicherheit und Validierung sowie Ergebniskarten.

3.1 Charakterisierung von Verfahren zur Erhebung statistischer Kennwerte

Die Länder Rheinland-Pfalz und Saarland erheben statistische Kennwerte zur Beschreibung der Stoffgehalte im Boden. Die Ableitung von Hintergrundwerten für Stoffgehalte in Böden ist ein Spezialfall der Erhebung statistischer Kennwerte. Das hier berücksichtigte Verfahren zur Ableitung der Hintergrundwerte in Böden basiert auf der Beschreibung der LABO (1998, 2003). Weitere Informationen hierzu und zur Flächenrepräsentanz liefern Utermann et al. (1999).

Aus dem Bericht der LABO (2003) geht hervor, dass alle Bundesländer länderspezifische Hintergrundwerte für Böden ableiten. Die Länder Mecklenburg-Vorpommern, Niedersachsen und Sachsen-Anhalt nutzen die Hintergrundwerte zur Beschreibung der flächenhaften Verteilung der Stoffgehalte im Boden. Diese Informationen wurden hier nicht explizit ausgewertet, da mit dem LABO-Bericht schon ein abgestimmtes Vorgehen vorliegt.



3.1.1 Datengrundlage

Statistische Kennwerte werden für anorganische und persistente organische Stoffe erhoben.

Voraussetzung ist eine einheitliche Vorgehensweise für die Bestimmung der Stoffgehalte in Böden von der Probennahme über Aufschluss/Extraktion, Aufbereitung der Probe bis zur Analyse (Thiele 2000, LABO 1998, 2003, Utermann et al 1999). Darüber hinaus können auch Daten unterschiedlicher Bestimmungsverfahren genutzt werden, wenn die Vergleichbarkeit gesichert wurde bzw. wenn die Umrechnung auf Grundlage geprüfter Regressionen möglich ist.

Informationen über Bezugsgrößen gehen aus der punktbezogenen Standortbeschreibung und Probenentnahme hervor. Die Informationen über die Bezugsgrößen ermöglichen eine Klassifikation der Punktdaten. Für die anorganischen Stoffe sind die Landnutzung und das Substrat die Bezugsgrößen, für organische Stoffe wird das Substrat nicht berücksichtigt, da die organischen Stoffe fast ausschließlich durch anthropogene Verursachung in die Böden gelangen und ein geogenes Vorkommen dieser Stoffe im wesentlichen nicht bekannt ist. Das LABO-Vorgehen berücksichtigt für beide Stoffgruppen außerdem die Siedlungsstruktur.

Flächendaten gehen in Form von Karten in die Verfahren der Länder Rheinland-Pfalz und Saarland ein. In Rheinland-Pfalz dienen die Substrat- und Landnutzungskarten als Hintergrundkarten der thematischen Karten für den Flächenbezug. Die Gehalte an organischen und anorganischen Stoffgehalten werden punktuell dargestellt. Saarland verschneidet die Punktdaten über die Rechts- und Hochwerte mit der BÜK 100, um den Bezug zu den Bodeneinheiten herzustellen. Im LABO-Bericht werden keine Karten benannt, in die Flächenrepräsentanzanalyse nach Utermann et al. (1999), nach der auch Hintergrundwerte abgeleitet werden, werden Karten wie die der Bodenausgangsgesteine und der Landnutzung einbezogen.

3.1.2 Verteilungsanalyse

Häufig wird festgestellt, dass die Datenkollektive meist nicht normalverteilt sind, sondern überwiegend unimodale rechtsschiefe Verteilungskurven aufweisen. Das Vorgehen der Verteilungsanalyse wird in den Berichten aber nicht näher beschrieben.

3.1.3 Repräsentativität

Die Beprobungen werden nach verschiedenen Stichprobenverfahren durchgeführt. Rheinland-Pfalz nimmt horizontbezogene Beprobungen der oberen 30 cm des Oberbodens in einem 1km²-Raster vor. Mindestens ein Standort wird innerhalb einer Rasterzelle beprobt, die Verteilung der Entnahmepunkte innerhalb einer Rasterzelle orientiert sich an den Flächenteilen der naturräumlichen Gegebenheiten und der Landnutzungsverteilung des jeweiligen Kartenblatts. Damit wird eine repräsentative Stichprobenauswahl angestrebt. Auch das Saarland nimmt in 4 von 5 Schwerpunkträumen eine Rasterbeprobung (750 m * 750 m) des Oberbodens vor, gewichtet dabei aber anscheinend nicht nach Flächenanteilen. Die Beprobung erfolgt tiefenstufenbezogen. In einem der 5 Schwerpunkträume werden die untersuchten Flächen nicht nach dem festgesetzten rasterförmigen Schema, sondern nach der räumlichen Struktur (Flussläufe) angeordnet. Auch die LABO (1998, 2003) schlägt eine Auswertung nach (flächen-)gewichteten Anteilen und Rasterverfahren als Möglichkeiten zur Konkretisierung der erhobenen Daten hinsichtlich einer repräsentativen Angabe vor. Es werden aber hierzu keine genaueren Angaben gemacht.



Nach dem von Utermann et al. (1999) beschriebenen Verfahren lässt sich die pedoregionale Repräsentanz der Datengrundlage zur Ausweisung von Hintergrundwerten überprüfen. Die Repräsentanzanalyse hat zum Ziel, nur Einheiten (Bodenausgangsgestein, Landnutzung) mit Hintergrundwerten zu belegen, die durch vorhandene Profilinformatoren „mindestens ausreichend“ repräsentiert werden. Das Verfahren ist länderübergreifend und länderspezifisch anwendbar. Einbezogen werden die Bezugsgrößen Bodenausgangsgestein und Landnutzung. Das Verfahren ist bisher nur auf anorganische Stoffe in Oberböden anwendbar (vgl. Steckbrief im Anhang). Wünschenswert ist sicherlich eine vor der Erhebung statistischer Kennwerte festgelegte repräsentative Beprobung. Dies ist aber häufig nicht möglich, so dass eine im Nachhinein geprüfte Repräsentanz der Datengrundlage sinnvoll ist. Mit diesem Verfahren ist eine flächenhafte Ausweisung der Hintergrundwerte anorganischer Stoffe in Oberböden abhängig vom Bodenausgangsgestein und der Landnutzung möglich.

Das Saarland beschreibt ein Verfahren zur Bewertung der räumlichen Repräsentanz von anorganischen und organischen Messdaten und der Homogenität der Stoffbelastung innerhalb von Bodendauerbeobachtungsflächen. Zur Prüfung der stoffbezogenen räumlichen Repräsentativität werden die Mittelwerte der Mischproben (aus flächenhafter Beprobung der Kernflächen der Bodendauerbeobachtungsflächen) mit flächendeckenden Daten anderer Messungen im selben Gebiet verglichen. Zur Charakterisierung der stoffbezogenen räumlichen Homogenität der einzelnen Bodendauerbeobachtungsflächen werden die einzelnen Mischproben (s.o.) mit dem Mittelwert aller Bodendauerbeobachtungsflächen derselben Landnutzung durch Angabe der mittleren relativen Abweichung verglichen (vgl. Steckbrief Saarland im Anhang). Dieses Verfahren ist adäquat. Es bleibt aber die Frage offen, was für ein Vorgehen zur Überprüfung der räumlichen Repräsentanz geeignet ist, wenn keine weiteren Beprobungen vorliegen.

Zum erforderlichen Stichprobenumfang werden verschiedene Angaben gemacht. Nach dem LABO-Vorgehen (LABO 2003) beträgt der Mindeststichprobenumfang $n = 20$. Rheinland-Pfalz gibt einen Stichprobenumfang von $n \geq 10$ an.

3.1.4 Ausreißeranalyse

Nach den Berichten der LABO und des Landes Rheinland-Pfalz sind Ausreißer diejenigen Werte, die das 75. Perzentil bzw. das 25. Perzentil um mehr als das 1,5-fache des Interquartilsabstands über- bzw. unterschreiten. Nach dem LABO-Vorgehen werden die Ausreißer vor der Ableitung der Hintergrundwerte eliminiert, in Rheinland-Pfalz wird in den Tabellen der statistischen Kennwerte die obere Ausreißergrenze angegeben.

Im Saarland werden die Stoffgehalte aus jeder Gruppe entfernt, die größer als der Mittelwert der Gruppe plus dem 4-fachen der Standardabweichung sind. Danach werden noch einmal genau so viele Daten von der linken Seite der Verteilung gestrichen. Diese Definition der Ausreißer basiert auf der Normalverteilungsannahme.

3.1.5 Statistische Kennwerte

Statistische Kennwerte dienen der Beschreibung eines mittleren zu erwartenden Gehaltes und zur Charakterisierung seiner Variabilität. Um der meist rechtsschiefen Verteilung der Stoffgehalte Rechnung zu tragen, werden Perzentile zur statistischen Charakterisierung erhoben. Nach dem LABO-Bericht (1998, 2003) werden länderspezifisch und länderübergreifend das 50. und das 90. Perzentil erhoben und die Stichprobengröße angegeben. Im Saarland und in Rheinland-



Pfalz werden darüber hinaus der Minimum- sowie Maximumwert angegeben. Rheinland-Pfalz gibt außerdem den prozentualen Anteil der Messwerte unterhalb der Nachweisgrenze, das 25. und 75. Perzentil und die obere Ausreißergrenze an. In den Fällen, in denen für die Berechnung statistischer Parameter konkrete Zahlenwerte benötigt werden, wird bei Unterschreitung der Nachweisgrenze die halbe Nachweisgrenze eingesetzt.

Aus der Differenz von Maximum- und Minimumwert lässt sich die Spannweite ableiten. Die Spannweite ist ein Maß der Streuung der Stoffgehalte. Aus dem 25. Perzentil und 75. Perzentil lässt sich der Interquartilsabstand ableiten, auch ein Maß für die Streuung der Stoffgehalte. Rheinland-Pfalz greift außerdem auf die Darstellung von Boxplots zurück, aus denen sich Streuungs-, Lage- und Schiefemaße ableiten lassen.

Der Mindeststichprobenumfang (n) liegt nach dem LABO-Vorgehen (LABO 2003) bei $n = 20$. Rheinland-Pfalz gibt einen Stichprobenumfang von $n \geq 10$ an, um das 90. Perzentil statistisch abzusichern. Das 90. Perzentil dient häufig als Orientierungs- oder Hintergrundwert zur Abgrenzung von merklicher anthropogener Belastung.

Nach dem LABO-Vorgehen, dem Verfahren des Saarlandes und dem des Landes Rheinland-Pfalz werden die Daten nach den zu berücksichtigenden Bezugsgrößen klassifiziert, um anschließend die Hintergrundwerte bzw. statistischen Kennwerte nach dieser Klassifikation stoffbezogen abzuleiten.

Das Saarland und die LABO (1998, 2003) stellen ihre Ergebnisse nur tabellarisch dar, die kartografische Darstellung für den visuellen Flächenbezug fehlt. Utermann et al. (1999) und Rheinland-Pfalz stellen einen Flächenbezug über kartografische Darstellungen her.

3.1.6 Angewendeter Maßstab

Die Methoden der Statistik sind grundsätzlich maßstabsunabhängig. Einschränkungen dieser Aussage sind durch die Auflösung der Attribute gegeben, die für die Zuordnung der Stoffgehalte zu Kollektiven gleicher Eigenschaften bzw. zur Ausweisung homogener Raumeinheiten herangezogen werden (z.B. Bodenkarte, Karte der Nutzungsarten usw.).

Die LABO (1998, 2003) macht keine konkreten Angaben zum Maßstabsbereich ihrer Erhebungen. Nach dem LABO-Vorgehen werden Hintergrundwerte auf Landes- und Bundesebene abgeleitet. Die Flächenrepräsentanzanalyse nach Utermann (1999) bezieht sich auf die Maßstabsbereiche 1:1.000.000 (Bundesebene) und 1:500.000 (Niedersachsen). Das Verfahren des Saarlandes zur Erhebung statistischer Kennwerte bezieht sich auf den Maßstabsbereich 1:100.000. Großmaßstäbiger ist dagegen das Verfahren des Landes Rheinland-Pfalz angelegt. Die thematischen Karten liegen im Maßstab 1:50.000 vor. Rheinland-Pfalz bearbeitet zahlreiche Blattsschnitte, um landesbezogene Aussagen zu treffen.

3.1.7 Aussagesicherheit und Validierung

Zur Aussagesicherheit werden Aussagen zur Mindeststichprobenzahl gemacht, um die Ergebnisse abzusichern. Nach dem LABO-Vorgehen (LABO 2003) beträgt der Mindeststichprobenumfang $n = 20$. Rheinland-Pfalz gibt einen Stichprobenumfang von $n \geq 10$ an, um das 90. Perzentil statistisch abzusichern.

Auch die Variabilität der Stichprobenwerte gibt einen Hinweis auf die Aussagesicherheit. Die Streuung kann, wie Rheinland-Pfalz ausführt, mit Hilfe von Perzentilabständen und gegebenen-



falls mittels Boxplots ermittelt werden. Streuen die Werte stark, ist die Schätzung mit einer größeren Unsicherheit behaftet.

Die Flächenrepräsentanzanalyse nach Utermann et al. (1999) hat zum Ziel, nur Einheiten (Bodenausgangsgestein, Landnutzung) mit Hintergrundwerten zu belegen, die durch vorhandene Profilinformationen „mindestens ausreichend“ repräsentiert werden.

In den Steckbriefen werden keine Angaben zur Validierung gemacht.

3.1.8 Ergebniskarten

Die in Tabellenform nach Klassen abgelegten erhobenen statistischen Kennwerte lassen sich durch Verschneidung mit den entsprechenden Karten visuell darstellen. Beispiele einer kartenbasierten Visualisierung der für Klassen bzw. Raumeinheiten erhobenen statistischen Kennwerte zeigen Rheinland-Pfalz und Utermann et al. (1999) auf.

In Rheinland-Pfalz geben thematische Karten im Maßstab 1:50.000 die Gehalte anorganischer und organischer Stoffe mit Flächenbezug wieder. Die Substratkarte z.B. dient als Hintergrund für die thematischen Karten der anorganischen Stoffe im Maßstab 1:50.000, da deren natürlicher Gehalt in erster Linie vom Ausgangssubstrat der Bodenbildung abhängt. Die Flächen sind nach der Gehaltsgruppe eingefärbt, in dem der jeweilige substratabhängige Medianwert des Gesamtgehaltes liegt. Es handelt sich um substratspezifische Medianwerte, die aus dem gesamten (landesweiten) Datenbestand berechnet wurden. Überschreitet der Elementgehalt an einer Entnahmestelle den substratabhängigen Medianwert, wird der Gesamt- und der leicht mobilisierbare Gehalt in einem Kreisdiagramm dargestellt. Bei Unterschreitung des Medianwerts wird die Probennahmestelle lediglich markiert.

In dem Bericht nach Utermann et al. (1999) werden die repräsentativen Hintergrundwerte für anorganische Stoffe in Karten flächenhaft visualisiert.

3.2 Charakterisierung räumlicher Interpolationsverfahren

3.2.1 Datengrundlage

Die in den Vergleich eingehenden Methoden der Länder unterscheiden sich z.T. in der Zielsetzung, dem Anwendungsbereich, der Stoffgruppe oder dem eingesetzten Interpolationsverfahren. Demnach variiert auch die Datengrundlage, auf welche die Methoden aufbauen.

Das Messnetz der Punktdaten, der organischen oder anorganischen Stoffe, ist nur in wenigen Fällen ein regelmäßiges Raster. In den meisten Fällen sind die Punktdaten dagegen ungleichmäßig über das jeweilige Untersuchungsgebiet verteilt.

Sofern den Berichten hierüber Informationen entnommen werden können, umfassen die Metadaten der Punktdaten den Zeitpunkt der Messung, die Lage im Raum, die Entnahmetiefe, die Analyse- und Probennahmemethoden, sowie themenbezogene Flächeninformationen, sofern sie im Interpolationsverfahren Verwendung finden.

Die für die eingesetzten Interpolationsverfahren notwendigen Flächeninformationen werden aus Karten gewonnen.

Zu den meistgenutzten Flächenkarten zählen die Karten der Landnutzungen, der geogenen Grundgehalte und die Karte der Überschwemmungsgebiete.



Die Karte der Landnutzung wird einheitlich aus ATKIS-Daten (Amtlich-Topographisches-Kartographisches Informationssystem) im Maßstab von 1:25.000 gewonnen.

Um die Karte der geogenen Grundgehalte zu generieren, wird in NRW die Bodenkarte im Maßstab 1:50.000 mit der Geologischen Karte im Maßstab 1:25.000 verschnitten. Baden-Württemberg verwendet hierzu neben der Bodenkarte BK 25 die Bodenübersichtskarte BÜK 200. Von den übrigen Ländern liegen diesbezüglich keine Angaben vor.

Flächendeckende Angaben zu Überschwemmungsgebieten werden im Methodenvergleich ebenfalls unterschiedlichen Quellen entnommen. Während die Karte der Überschwemmungsgebiete von NRW aus der Karte der gesetzlich festgelegten Überschwemmungsgebiete, Bodenkarten und historischen Karten abgeleitet wird, gewinnt Thüringen seine Informationen aus Luftbildaufnahmen.

Für spezielle Fragestellungen und Anwendungsbereiche, wie insbesondere die von NRW untersuchten Siedlungsbereiche, finden eine Vielzahl weiterer Karten Verwendung.

3.2.2 Verteilungsanalyse

Die Verteilungsanalyse kommt zum einen dann Bedeutung zu, wenn kategorielle Einflussgrößen aggregiert oder homogene Raumeinheiten (vgl. Abschnitt 40) gebildet werden sollen. Zum anderen dient eine Analyse der Verteilung der Überprüfung des zu interpolierenden Datensatzes auf Normalverteilung.

Die Überprüfung auf Normalverteilung betreffend, kann nur dem Bericht Brandenburgs eine genauere Beschreibung oder Bezeichnung der verwendeten Methode entnommen werden. Hier werden Tests nach Sachs durchgeführt, um zu überprüfen, ob die Stoffdaten normalverteilt sind.

3.2.3 Repräsentativität

Bezüglich der Repräsentativität der Stichprobenauswahl machen nur wenige Länder Angaben.

Während Sachsen mit seiner Rasterbeprobung eine repräsentative Stichprobenauswahl anstrebt, beprobt Brandenburg zu diesem Zweck Transekte vertikal zum Flusslauf.

NRW trifft eine geschichtete Stichprobenauswahl, indem die Stichprobenumfänge der homogenen Raumeinheiten einer Mindestanzahl genügen sollen, die sich auch nach dem Anteil richtet, den die betreffende Raumeinheit am Untersuchungsgebiet hat.

In NRW wird in einigen Projekten, die sich mit der Interpolation der punktuellen Bodenbelastung innerhalb von Siedlungsbereichen beschäftigen, ein zweistufiges Vorgehen erprobt, bei dem auf eine Überblicksuntersuchung eine detaillierte Untersuchung folgt. Zunächst wird in diesem Verfahren eine Konzeptkarte durch Verschneiden von aufgearbeiteten Grundlagenkarten erstellt. Um die Übertragbarkeit der Vorgehensweise auf das gesamte Untersuchungsgebiet zu prüfen, wird auf Basis einer solchen Konzeptkarte ein Testgebiet ausgewählt und abgegrenzt, von welchem Nutzungsheterogenität verlangt wird. Es soll zudem 10 - 20% Siedlungsfläche aufweisen.

Nach Erfassung der Bodenbelastung sind ggf. eine verdichtende Probennahme und ergänzende Auswertungen vorzunehmen.



3.2.4 Ausreißeranalyse

Die Länder Hessen, NRW und Brandenburg sehen an bestimmten Stellen ihrer Verfahren Ausreißereliminationen vor. Hessen untersucht den Datensatz zweimal auf Ausreißer. Ein erstes Mal, nachdem die Stoffdaten hinsichtlich aller möglichen Faktorenkombinationen in Gruppen aufgeteilt worden sind. Die an dieser Stelle verwendete Entscheidungsregel wird im Bericht nicht genannt. Nach der Standardisierung des Datensatzes wird wiederum eine Ausreißeranalyse durchgeführt und ein Messwert dann aus der Stichprobe eliminiert, wenn der aus einer Inverse-Distance-Interpolation resultierende Schätzwert mehr als 50% kleiner oder mehr als 100% größer als der Messwert an dieser Stelle ist.

Das Verfahren, welches NRW für den Außenbereich entwickelt hat, sieht nach jedem einzelnen Schritt der Standardisierung Ausreißereliminierungen vor.

Die hierbei verwendete Entscheidungsregel wird nicht genannt.

In Brandenburg wird der Ausgangsdatsatz gleich zu Beginn von extrem hohen lokalen Belastungen bereinigt. Die Entscheidungsregel wurde im Bericht nicht angegeben.

3.2.5 Räumliche Interpolationsverfahren

In den Bundesländern Bayern, Baden-Württemberg, Brandenburg, Thüringen, Sachsen, Hessen und NRW wurden Interpolationsverfahren zur Regionalisierung von Schadstoffen getestet und z.T. auch regelmäßig angewendet (vgl. Steckbriefe im Anhang).

In den meisten Fällen sind diese Interpolationsverfahren Kriging-Verfahren. Eine Ausnahme bildet das Inverse-Distance-Verfahren, das in Sachsen für den Vollzug eingesetzt wird.

Am häufigsten wird das sogenannte Kriging mit lokalen Mittelwerten eingesetzt (vgl. Steckbriefe Bayern, Baden-Württemberg, Brandenburg, Hessen und NRW). Bei diesem Verfahren gehen der Variogrammschätzung und der Interpolation eine Bereinigung des Datensatzes von mittleren Effekten ausgewählter Einflussgrößen voran.

Ein weiteres Kriging-Verfahren, das sogenannte Cokriging, wurde als Methode zur Regionalisierung von Schadstoffen auf Auenböden in Brandenburg und Thüringen in Erwägung gezogen, allerdings aufgrund zu geringer Datenmengen nicht ausgetestet.

Anhand von Waldbodendaten aus Bayern fand zudem ein Vergleich zwischen den speziellen Kriging-Verfahren Indikator Kriging, Kriging mit externer Drift und Kriging mit lokalen Mittelwerten statt.

Der Entwicklungsstand der einzelnen Methoden ist sehr unterschiedlich. Er reicht von einmal für ein einzelnes Untersuchungsgebiet getesteten Ansätzen zur allgemeinen Regionalisierung von Schadstoffen (Bayern, Baden-Württemberg, Brandenburg und Thüringen) bis hin zu Verfahren, die regelmäßig für den Einsatz im Vollzug verwendet werden (Hessen, Sachsen und NRW).

Dabei verfügt NRW über die für den Außenbereich von Siedlungen am detailliertesten ausgearbeitete Vorgehensweise. Sie ist bereits seit 1995 im Boden-Informationssystem NRW (BIS NRW) als Modul integriert und dient zur Erstellung von Bodenbelastungskarten im kommunalen Bereich in NRW.



3.2.5.1 Kriging mit lokalen Mittelwerten (Medianen)

In Hessen, Brandenburg, Baden-Württemberg, NRW und Bayern wurde das Kriging mit lokalen Mittelwerten zur Regionalisierung von Schadstoffen eingesetzt.

Das Kriging mit lokalen Mittelwerten hat die besondere Eigenschaft, dass das Variogramm erst nach Bereinigung des Datensatzes von lokalen Mittelwerten berechnet wird. Die lokalen Mittelwerte, welche aus einer Schätzung mit Hilfe von flächendeckend zur Verfügung stehenden externen Parametern hervorgehen, werden erst nach der Interpolation wieder hinzuaddiert bzw. multipliziert.

Der Anwendungsbereich dieses Verfahrens ist in Bayern auf mineralische Oberböden, die unabhängig von der Nutzung sind, beschränkt, im Fall der übrigen Länder umfasst er den gesamten Bereich der naturnah genutzten Flächen.

In diesem Sinne unterscheiden sich auch die externen Parameter, die zur Schätzung der lokalen Mittelwerte herangezogen werden. Während auf den Waldböden Bayerns die Substrate als einzige erklärende Größe Verwendung finden, wird im Anwendungsbereich der naturnahen Gebiete einheitlich die Nutzung als externer Parameter berücksichtigt. In Hessen wird zudem der Parameter Bodenformen hinzugenommen. Baden-Württemberg, NRW und Bayern wählen als zweite und dritte flächendeckende Einflussgrößen den geogenen Grundgehalt (nur für Schwermetalle) und die Überschwemmungsgebiete.

Aggregation von Gruppen

Um die Werte eines Datensatzes von den Einflüssen externer Parameter zu bereinigen, ist es im Falle kategorialer Einflussgrößen häufig sinnvoll, einzelne Kategorien dieses Parameters, insbesondere wenn sie wenig beprobt wurden, zu aggregieren.

So aggregieren NRW und Brandenburg zuvor Nutzungsarten zu Nutzungstypen, weil einige Nutzungsarten nur wenige Stichprobenelemente aufweisen. Zur Aggregation der Nutzungsarten zu Nutzungstypen stützt sich NRW auf einen Vergleich der geometrischen Mittelwerte, der 50. und 90. Perzentile und der lokalen Hintergrundwerte. Brandenburg verwendet hierzu Tests nach Kolmogorov und Smirnow (K-S-Tests), die dazu dienen, signifikante Unterschiede zwischen zwei Verteilungsfunktionen zu ermitteln. Beide Verfahren sind robust gegenüber Ausreißern und für eine geringe Stichprobenzahl geeignet. Den Methodenbeschreibungen von NRW konnte nicht entnommen werden, wie der Vergleich der statistischen Kennwerte durchgeführt wird. Werden die Daten nach subjektiven Empfindungen den Gruppen zugeordnet, so sind die Entscheidungen statistisch nicht abgesichert.

Mit Hilfe des K-S-Tests kann dagegen zu einem vorgegebenen Signifikanzniveau α eine Entscheidung darüber getroffen werden, ob zwei Stichproben aus derselben Grundgesamtheit stammen, oder sich ihre Verteilungen bzgl. der Lage oder der Streuung signifikant voneinander unterscheiden. Die simultane Durchführung einer Vielzahl von Zweistichprobentests kann dagegen die vorgegebene Irrtumswahrscheinlichkeit beträchtlich verfälschen (vgl. Abschnitt 2.3.1). Stattdessen sollte zunächst ein globaler Test für alle Gruppen durchgeführt werden.

Die Aggregation des Ausgangsgesteins der Bodenbildung zu geogenen Grundgehalten führt NRW analog zu den Nutzungsarten durch.

Baden-Württemberg kommt dagegen zu geogenen Grundgehalten, indem es einen mittleren Gehalt pro Kartiereinheit bestimmt.



Bildung homogener Raumeinheiten

Aus den Einflussgrößen werden Kollektive von Datensätzen gebildet, die sich hinsichtlich der Datenverteilung des interessierenden Stoffes signifikant voneinander unterscheiden. Die Bildung von homogenen Raumeinheiten dient der Übersichtlichkeit über Anzahl und räumlichen Verteilung der den Stoffgehalt bestimmenden Faktorenkombinationen. Auch sollen sie die Überprüfung gewährleisten, dass die einzelnen Raumeinheiten hinreichend oft beprobt worden sind. Zu diesem Zwecke verwendet NRW analog zum Verfahren der Aggregation den Vergleich von Median, geometrischem und arithmetischem Mittel der einzelnen durch Nutzung, Gestein und Überschwemmung gebildeten Faktorengruppen, um solche Kombinationen von Einflussfaktoren zusammenzufassen, welche bezüglich des Belastungsgrades homogene Raumeinheiten bilden. Wie dieser Vergleich durchgeführt wird, ist leider nicht näher beschrieben.

Hessen verwendet zu diesem Zwecke einen statistischen Test, der nicht weiter benannt wird.

Baden-Württemberg beschreibt sein Vorgehen zur Bildung von homogenen Raumeinheiten nur sehr allgemein als Überlagerung von Nutzungs- und Bodenkarten unter Einbeziehung von Kenntnissen über das Relief.

Bereinigung von Einflussgrößen

Die Interpolationsmethoden erfordern homogene Wertebereiche, die stetig verlaufen und keine Grenzen enthalten, an denen die Werte sich sprunghaft ändern. Bei Wechsel von Flächen der durch Ausgangsgestein und Bodenbildung bestimmten geogenen Grundgehalte oder der Nutzungsart sind in der Regel sprunghafte Änderungen zu erwarten, die durch geeignete Korrekturen ausgeglichen werden können (Standardisierung).

Um einen vom Einfluss des Parameters „geogener Grundgehalt“ bereinigten Datensatz zu erhalten, berechnen NRW und Baden-Württemberg jeweils die Differenz zwischen gemessenem und geogen bedingtem Stoffgehalt.

Die Formel zur Bereinigung der Einflussgröße „geogener Grundgehalt“ in NRW lautet:

$$S_G = S - G, \text{ wobei}$$

S_G = vom geogenen Anteils bereinigter Messwert,

S = Stoffgehalt des Bodens,

G = geogen bedingter Stoffgehalt.

Letzterer Wert ergibt sich aus dem Produkt der C-Horizonte und des arithmetischen Mittels der Anreicherungs-faktoren der einzelnen homogenen Raumeinheiten.

Die Formel zur Berechnung des geogenen Anteils in NRW lautet:

$$G = C - \text{Horizont} * \frac{1}{k} \sum_{i=1}^k A f_{pi}$$

k = Anzahl der Nutzungstypen.

Aus diesem neuen Datensatz wird nun der Einfluss des Parameters „Überschwemmung“ mit Hilfe eines Korrekturfaktors statistisch herausgerechnet.

Als Korrekturfaktor findet in NRW der Quotient zwischen dem geometrischen Mittel aller Daten außerhalb und dem geometrischen Mittel aller Daten innerhalb von Überschwemmungsgebieten Verwendung.



Die Formel zur Berechnung des Überschwemmungsfaktors in NRW lautet:

$$\ddot{U}F = \begin{cases} 1 & \text{falls Messwert außerhalb Überschwemmungsgebiet.} \\ \frac{\text{geom. Mittel der Daten ausserhalb Überschwem.}}{\text{geom. Mittel der Daten in Überschwem.}} & \text{falls Messwert in Überschwemmungsgebiet.} \end{cases}$$

Er wird mit allen Daten, die innerhalb von Überschwemmungsgebieten gemessen wurden, multipliziert.

Die Formel zur Bereinigung der Einflussgröße „Überschwemmung“ in NRW stellt sich wie folgt dar:

$$S_{G\setminus\ddot{U}F} = S_G * \ddot{U}F, \text{ wobei}$$

$\ddot{U}F$ = Überschwemmungsfaktor,

S_G = vom geogenen Anteil bereinigter Stoffgehalt,

$S_{G\setminus\ddot{U}F}$ = vom geogenen Anteil und der Überschwemmung bereinigter Stoffgehalt.

Der von Baden-Württemberg verwendete Korrekturfaktor unterscheidet sich von dem NRWs darin, dass er anstelle der geometrischen Mittelwerte die Mediane verwendet. Der Median hat gegenüber dem geometrischen Mittelwert den Vorteil, ausreißerrobust zu sein. Dagegen bietet sich der geometrische Mittelwert gerade für lognormalverteilte Daten an, da er die Eigenschaft besitzt, dass der Logarithmus des geometrischen Mittels dem arithmetischen Mittel der logarithmierten Werte entspricht.

Um nun auch den Einfluss der Landnutzung aus dem (soweit bereinigten) Datensätzen herauszurechnen, werden wiederum Korrekturfaktoren berechnet, die zur Standardisierung auf eine bestimmte Nutzungsklasse, z.B. Grünland, führen.

In NRW berechnet sich ein diesbezüglicher Korrekturfaktor einer Nutzungsklasse aus dem Quotienten des geometrischen Mittels dieser Nutzungsklasse und des geometrischen Mittels aller Nutzungen.

Die Formel zur Bereinigung vom Einfluss der Nutzung in NRW lautet:

$$S_{G\setminus\ddot{U}F\setminus L} = S_{G\setminus\ddot{U}F} * NF, \text{ wobei}$$

$S_{G\setminus\ddot{U}F\setminus L}$ = vom geogenen Anteil, dem Überschwemmungs- und Landnutzungseinfluss bereinigter Stoffgehalt,

$S_{G\setminus\ddot{U}F}$ = vom geogenen Anteil und der Überschwemmung bereinigter Stoffgehalt,

NF = Nutzungsfaktor für Nutzungsklasse.

Die Formel zur Berechnung des Nutzungsfaktors in NRW lautet:

$$NF = \frac{\text{geom. Mittel der vom geogenen Anteil und der Überschwemmung bereinigten Stoffgehalte innerhalb aller Nutzungen}}{\text{geom. Mittel der vom geogenen Anteil und der Überschwemmung bereinigten Stoffgehalte innerhalb Nutzungsklasse X}}$$

Ebenso wie beim Korrekturfaktor des Überschwemmungseinflusses verwendet Baden-Württemberg für den Korrekturfaktor auch hier Mediane anstelle der geometrischen Mittelwerte. Zu ihrer Berechnung werden lediglich die Daten, die außerhalb von Überschwemmungsgebieten erhoben wurden, herangezogen. Es könnte ein Nachteil sein, dass deshalb weniger Daten in seine Berechnung eingehen.



Das Bundesland Hessen, das lediglich die beiden Einflussgrößen Bodenformen und Landnutzung berücksichtigt, standardisiert nicht schrittweise bezüglich der einzelnen Einflussgrößen, sondern berechnet die Mittelwerte der Stoffgehalte aller Kombinationen als Faktoren bezüglich der Gruppe „Lößlehmböden mit Ackernutzung“, und gelangt durch die Multiplikation der Stoffgehalte mit diesen Korrekturfaktoren zur Standardisierung.

Um ein solches Vorgehen statistisch abzusichern, ist allerdings innerhalb jeder Kombination von Einflussgrößen eine große Stichprobenanzahl notwendig.

Brandenburg berechnet zur Einflussbereinigung der Landnutzung keinen Korrekturfaktor, sondern betrachtet die Stoffverteilung in jeder einzelnen Landnutzungs-kategorie für sich. Bei Vorliegen einer schiefen Verteilung wird eine normalisierende Transformation durchgeführt. Zur Standardisierung wird innerhalb jeder Landnutzungs-kategorie eine z-Transformation durchgeführt. Anschließend werden alle Klassen wieder zusammengelegt.

(Nachteil: Der in die z-Transformation eingehende Mittelwert und die Varianz sind nicht robust gegenüber Ausreißern. Allerdings können die Ausreißer auch schon vorher bereinigt werden. Die ausbleibende Berücksichtigung der anderen Einflussfaktoren könnte dazu führen, dass Ausreißer falsch identifiziert werden.)

Die lokalen Mittelwerte der Waldbodendaten aus Bayern beziehen sich auf die Substrate. Es wird pro Substrat der Median der Stoffkonzentrationen berechnet und von den Stoffkonzentrationen subtrahiert. Dieses Vorgehen entspricht dem von NRW für die Bereinigung von Nutzungseinflüssen und geogenen Grundgehalten.

Variogrammschätzung und Interpolation

Der standardisierte Datensatz sollte zunächst auf Normalverteilung hin überprüft werden und ggf. eine normalisierende Transformation durchgeführt werden. Dieser Verfahrensschritt wird allerdings in vielen Berichten nicht erwähnt. Wie Verteilungsbestimmung und Transformation in den anderen Ländern durchgeführt werden, kann Abschnitt 3.2.2 entnommen werden.

Bei der Anpassung des empirischen Variogramms an das theoretische wird i.d.R. der sphärische Variogrammtyp bevorzugt. Brandenburg verwendet einen ausreißerstabilen Schätzer aus einschlägiger Literatur (Cressie et al. 1980):

$$\gamma(h) = \frac{\left[\frac{1}{2n(h)} * \sum_{i=1}^{n(h)} \sqrt{|z(x_i + h) - z(x_i)|} \right]^4}{0,457 + \frac{0,494}{n(h)}}.$$

Zur Interpolation verwenden Baden-Württemberg, Brandenburg, Hessen und NRW das Ordinary Kriging. Auf die Daten der mineralischen Oberböden in Bayern wird das Simple Kriging Verfahren, das sich vom Ordinary Kriging durch den als bekannt angenommenen Mittelwert unterscheidet, angewendet (vgl. auch Abschnitt 2.3.7).

3.2.5.2 Kriging mit externer Drift und Indikator Kriging

Für den Anwendungsbereich „Auflagehorizonte“ führte Bayern für Waldbodendaten einen Vergleich zwischen den beiden Kriging-Verfahren Kriging mit externer Drift und Indikator Kriging



durch. Zum gegenwärtigen Zeitpunkt ist der diesbezügliche Bericht Bayerns noch nicht fertiggestellt. Aus diesem Grunde enthalten die zugehörigen Steckbriefe nur wenig Information.

Beim Kriging mit externer Drift wird der Datensatz in Bezug zu Niederschlag und Relief gesetzt.

Das Indikator Kriging bezieht keine externen Parameter ein. Sein Vorteil liegt darin, dass es eine flächendeckende Bestimmung von Überschreitungswahrscheinlichkeiten etc. ermöglicht.

3.5.2.3 Cokriging

In Brandenburg und Thüringen werden Auengebiete untersucht. Neben den Stoffgehalten im Oberboden werden metrisch skalierte Einflussfaktoren erhoben. Mittels (partieller) Korrelationsanalysen wird der lineare Zusammenhang zwischen der abhängigen Variable, dem Stoffgehalt, und den unabhängigen Variablen untersucht. Erweisen sich ein oder mehrere der unabhängigen Variablen als signifikant einflussreich, ist also der Korrelationskoeffizient signifikant, kann mit ihrer Hilfe ein Kreuzvariogramm aufgestellt und ein Cokriging Verfahren durchgeführt werden.

Die Bestimmung des Pearsonschen bzw. des partiellen Korrelationskoeffizienten setzt allerdings die Normalverteilung der betrachteten Variablen voraus. Gegebenfalls müssen sie zuvor transformiert werden.

3.5.2.4 Inverse-Distanz-Gewichtung (IDW)

Sachsen hat als einziges Land einen Bericht zur Verfügung gestellt, in dem zur Interpolation der Punktdaten die Inverse-Distanz-Gewichtung, ein einfaches Interpolationsverfahren, das nicht zu den Kriging-Verfahren zählt, verwendet und ist auch damit zu zufriedenstellenden Ergebnissen gelangt. Dieses Verfahren wird nicht näher erläutert, da in diesem Projekt die Kriging-Verfahren im Mittelpunkt stehen.

3.2.6 Angewendeter Maßstab

Die beschriebenen Verfahren beziehen sich in der Regel auf den Maßstabsbereich 1:50.000 für den naturnahen Bereich, für den Auenbereich auf 1:25.000 und den Siedlungsbereich auf 1:5.000 – 1:20000. Die eingesetzten Modelle sind unabhängig vom Maßstab. Die Maßstabsabhängigkeit ergibt sich durch die Auflösung der in die Auswertung einzubeziehenden Datengrundlagen.

3.2.7 Aussagesicherheit und Validierung

In einer Untersuchung Bayerns findet das Indikator Kriging Verwendung. Mit Hilfe des Indikator Krigings werden Perzentile einer Verteilung und damit Wahrscheinlichkeiten, einen bestimmten Wert zu überschreiten, interpoliert.

Zu dem selben Zweck wurden in einem Projekt Brandenburgs und für die Siedlungsbereiche in den Projekten NRWs Konfidenzintervalle für lokale Verteilungen berechnet. Ihnen kann entnommen werden, welchen Wert der an einer bestimmten Stelle im Raum betrachtete Parameter mit einer vorgegebenen Irrtumswahrscheinlichkeit α nicht über- bzw. unterschreitet. Konfidenzintervalle sind gegenüber Indikatorgrenzen weniger rechenaufwendig, da letztere für jeden Grenzwert neu erstellt werden müssen.

Zur Validierung der Datensätze werden in vielen Berichten keine Angaben gemacht.



NRW und Baden-Württemberg überprüfen den Datensatz zu Beginn der Analyse bezüglich der Vollständigkeit der Metadaten.

Zudem sieht NRW einen Mindeststichprobenumfang von 10 - 15 Datenpunkten pro homogener Raumeinheit bei einem Maßstab von 1:50.000 als hinreichend vor.

3.2.8 Ergebniskarten

Neben der interpolierten Werteoberfläche des interessierenden Stoffes werden in NRW und Brandenburg z.T. auch in Baden-Württemberg weitere Ergebniskarten erstellt.

Damit zählen zu den Ergebniskarten die Karte „geschätzte Stoffgehalte“, die Karte „standardisierte geschätzte Stoffgehalte“, die Karte „Schätzungsgüte“, die Karte „Hintergrundwertevergleich“ (auf Hintergrundwerte bezogen in Klassen eingeteilt), die jeweils ähnlich erstellt werden.

Für die Matrix des Untersuchungsbedarfs teilt NRW die Varianzen in die drei Klassen gering, mittel, hoch ein, ohne eine Entscheidungsregel zu nennen, und den Schätzwert ebenfalls in gering, mittel, hoch und klassifiziert dabei nach Hintergrundwertevergleich.

Brandenburg dagegen stützt sich in der Klasseneinteilung auf Perzentile der Hintergrundwerte und ordnet die Werte jeweils sechs Klassen zu.

Die Klasseneinteilung der Schätzgenauigkeit wird vorgegeben durch die Breite des Konfidenzintervalls gemessen an der Anzahl der überlagerten Perzentilbereiche.



4 GRUNDSÄTZLICHE VORGEHENSWEISE

Im Folgenden wird ein Überblick über die grundsätzliche Vorgehensweise bei der Erhebung statistischer Kennwerte und bei räumlichen Interpolationsverfahren gegeben. Dieses Vorgehensmodell ist das Ergebnis der Analyse der in den Ländern und beim Bund eingesetzten Methoden sowie der in Kapitel 2 erarbeiteten (geo-)statistischen Grundlagen.

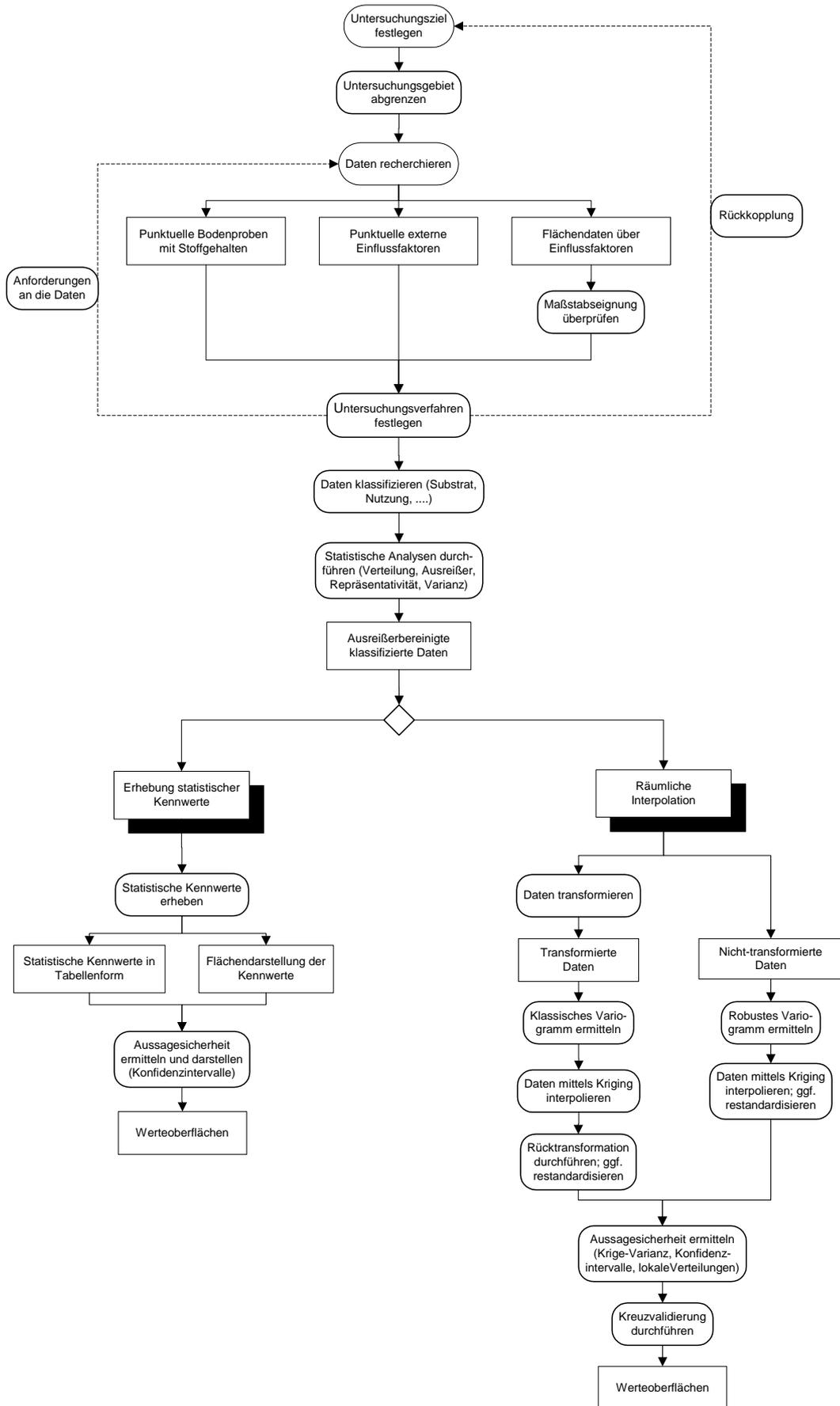
Legende zur nachfolgenden Abbildung:

 Verfahrensschritt

 Methodenkomplex

 Objekt. Daten oder Karten, die Eingangsdaten oder das Hauptergebnis eines Verfahrensschritts darstellen.

 Verbindung zwischen Verfahrensschritten und Objekten.





5 FAZIT DER ERGEBNISSE DER ERSTEN PROJEKTPHASE

In den Ländern und vom Bund werden ähnliche Verfahren zur Erhebung statistischer Kennwerte von Stoffgehalten im Boden - dazu gehört insbesondere die Ableitung von Hintergrundwerten - verwendet. Ziel dieser Verfahren ist die flächenhafte Beschreibung der Stoffgehalte im Boden auf Basis verschiedener Bodeneinheiten. Die Bodeneinheiten werden dabei meist nach Substrat und Landnutzung, z.T. auch nach der Siedlungsstruktur, gebildet.

In den Ländern und im LABO-Bericht werden unterschiedlich viele Kennwerte erhoben. Nach den LABO-Vorgaben werden zur Ableitung länderübergreifender und länderspezifischer Hintergrundwerte das 50. und 90. Perzentil erhoben (LABO 1998, 2003). Die Hintergrundwerte geben die Ausstattung des Bodens mit dem naturbedingten Grundgehalt und der allgemein vorhandenen anthropogenen Zusatzbelastung eines Stoffes wieder. Im Rahmen des Bodenschutzes bilden Hintergrundwerte eine wichtige Grundlage zur Beschreibung des aktuellen Hintergrundniveaus der stofflichen Belastung und zur Bewertung von gemessenen Bodenbelastungen, wie z.B. bei Stoffeinträgen durch Deposition über den Luftpfad.

Neben der Beschreibung von Lokationskennwerten sollten statistische Analysen zur Verteilung, zu Ausreißern und zur Varianz durchgeführt werden. Rheinland-Pfalz und das Saarland verwenden darüber hinaus weitere statistische Kennwerte, so z.B. Rheinland-Pfalz das 25. und 75. Perzentil. Mit diesen kann auch die Variabilität der Stoffgehalte durch den Interquartilsabstand ausgedrückt werden.

In den Berichten werden Angaben zur Ausreißeranalyse gemacht, aber auch hier kommen verschiedene Methoden zur Anwendung (vgl. Abschnitt 3.1.4). Es sollte darauf geachtet werden, dass für die Ausreißeranalyse keine Normalverteilungsannahme notwendig ist (vgl. Abschnitt 2.3.4).

Es wird zwar in verschiedenen Berichten angegeben, dass die Stoffgehalte in den Böden oft nicht normalverteilt sind, sondern eine rechtsschiefe Verteilung aufweisen, eine Verteilungsanalyse sollte aber dennoch durchgeführt werden. Dadurch, dass Quantile als statistische Kennwerte erhoben werden, wird der meist rechtsschiefen Verteilung der Stoffgehalte Rechnung getragen.

Die statistischen Methoden sind maßstabsunabhängig, der Bezug zum Maßstab ergibt sich durch die Auflösung der in die Auswertung einzubeziehenden Datengrundlagen. Es wird auf verschiedenen Maßstabsebenen gearbeitet. Die Ableitung der Hintergrundwerte nach den LABO-Vorgaben bezieht sich auf Bundes- und Länderebene, das Saarland arbeitet im Maßstab 1:100.000 und Rheinland-Pfalz untersucht systematisch Kartenblätter im Maßstab 1:25.000, also großmaßstäbiger. In Rheinland-Pfalz soll durch die Bearbeitung zahlreicher Kartenblätter eine flächendeckende Übertragung der gewonnenen Kennwerte auf die gesamte Landesfläche erfolgen, mit Hilfe der Kennwerte werden landesweite Hintergrundwerte abgeleitet.

Als Datengrundlage sind punkt- und flächenbezogene Daten erforderlich. Punktbezogen sind die anorganischen und organischen Stoffgehalte sowie Informationen über die Bezugsgrößen Substrat, Landnutzung und ggf. Siedlungsstruktur notwendig. In die Analysen sollten auch Flächendaten über das Substrat, die Landnutzung und ggf. über die Siedlungsstruktur einbezogen werden. Flächendaten werden in den Berichten nicht immer genutzt. In dem Bericht nach Utermann et al. (1999) werden die Hintergrundwerte mit den Flächendaten verschnitten, so dass eine



kartenmäßige Visualisierung der für Bodeneinheiten erhobenen Hintergrundwerte möglich wird. Die statistischen Kennwerte sollten nicht nur in Tabellenform abgelegt werden, sondern es sollte auch eine Flächendarstellung der statistischen Kennwerte erfolgen, wie es z.B. auch im GSE-Bericht (2002) für GSE-Hintergrundwerte vorgeschlagen wird.

Die Aussagesicherheit der Schätzungen ist ein wesentlicher Aspekt bei der Abschätzung der Stoffgehalte im Boden. Methoden hierzu werden in den Berichten nicht beschrieben. Lediglich Aussagen zum Mindeststichprobenumfang n werden gemacht, auch die Variabilität der Stoffgehalte wird als Hinweis auf die Aussagesicherheit angegeben. Eine Beschreibung der Aussagesicherheit ist darüber hinaus durch Konfidenzintervalle möglich, wie sie in Abschnitt 2.3.6.2 beschrieben sind. Konfidenzintervalle sollten für statistische Kennwerte erhoben werden.

Die zu analysierenden Stoffgehalte im Boden sollten aus einem repräsentativen Stichprobenverfahren resultieren, hierzu werden von den Ländern und vom Bund Angaben gemacht. Eine Möglichkeit zur Überprüfung der Repräsentativität der Stichprobe zeigen Utermann et al. (1999) auf.

Die in diesem Projekt entwickelte grundsätzliche Vorgehensweise bei der Erhebung statistischer Kennwerte ist in Kapitel 4 angeführt.

Der Großteil der Bundesländer hat in den letzten Jahren Interpolationsverfahren zur Flächen-schätzung von Punktdaten entwickelt, um die stoffliche Bodenbelastung flächenhaft darzustellen.

Die Anwendungsbereiche und Zielsetzungen der Interpolationsverfahren sind breit gefächert. Sie reichen von der Regionalisierung der Schadstoffdaten in naturnahen Bereichen, speziellen Bereichen der Auenböden und Waldböden bis hin zu Siedlungsbereichen.

Aufgrund der unterschiedlichen Anwendungsbereiche unterscheiden sich auch die Datengrundlagen, die angewendeten Maßstäbe und die Interpolationsverfahren der einzelnen Länder deutlich voneinander. Angewendete Interpolationsverfahren sind z.B. das Kriging mit lokalen Mittelwerten, das Cokriging und das Indikator Kriging.

Der am häufigsten gewählte Anwendungsbereich ist der Außenbereich von Siedlungen. Die für diesen Anwendungsbereich gewählten Methoden stimmen in ihrem groben Vorgehen überein. Das für diesen Anwendungsbereich gewählte Interpolationsverfahren ist das Kriging mit lokalen Mittelwerten. Es findet auch auf Waldböden Einsatz. Für Auenböden wird aufgrund der metrischen Skalierung der Einflussgrößen ein Cokriging-Verfahren von den betreffenden Ländern vorgeschlagen.

Nur wenige der zur Verfügung gestellten Berichte enthalten detaillierte Informationen und genaue Angaben über die verwendeten Methoden und Verfahrensschritte.

Große Informationslücken (vielfach auch wegen Nichtberücksichtigung dieser Aspekte beim praktischen Vorgehen) bestehen insbesondere bei Methoden der Analyse der Repräsentativität, der Datenvalidierung und der Ausreißeridentifizierung. Hierzu können beispielsweise die in Abschnitt 2.3 angeführten Methoden verwendet werden.

Oft wurde nicht berücksichtigt, dass die Daten der Stoffgehalte im Boden in der Regel rechtsschief verteilt sind und für das statistisch korrekte Vorgehen bei der Interpolation eine Transformation notwendig ist. Hierbei ist insbesondere die korrekte Rücktransformation der



Daten zu berücksichtigen. In Abschnitt 2.3.7.6 werden Methoden zu diesem Problembereich vorgestellt. Alternativ zur Transformation könnte der Einsatz von robusten Variogrammschätzern in Frage kommen (vgl. Vorgehensmodell Kapitel 4 und Abschnitt 2.3.7.7).

Methoden für einen für die Vollzugsaufgaben sehr wichtigen Aspekt, die Aussagesicherheit, wurden lediglich in den Vorgehensweisen zweier Länder in Form von Methoden basierend auf dem Indikator Kriging und Konfidenzintervallen integriert. Darüber hinaus gibt es weitere Methoden zur Beschreibung verschiedener Aspekte der Aussagesicherheit, die in Abschnitt 2.3.7.8 dokumentiert sind. Die Aussagesicherheit ist ein wesentlicher Aspekt und sollte in die Verfahren der räumlichen Interpolation integriert werden.

Für die Vereinheitlichung der Methoden zur räumlichen Interpolation bleibt viel Spielraum, auch weil die wenigsten Länder ihre Methoden bereits regelmäßig im Vollzug einsetzen.

Ein wesentlicher Aspekt bei der Erarbeitung einheitlicher Vorgehensmodelle bei der Analyse der räumlichen Verteilung der Stoffgehalte im Boden durch statistische Kennwerte und interpolierte räumliche Verteilungen ist die Beseitigung der beschriebenen Methodenlücken in den Verfahrensabläufen der beiden Methodenkomplexe. Ein lückenloser Verfahrensablauf, in dem die erforderlichen (geo-)statistischen Methoden integriert sind, sollte das Ziel sein.

Im weiteren Verlauf des Projekts werden in der 2. Projektphase verschiedene Praxistests vorbereitet. Es werden die zu testenden Auswerteverfahren und Vorgehensweisen festgelegt, die Datenbeschaffung wird abgeschlossen und die Auswertebeispiele festgelegt. In der 3. Projektphase werden die Praxistests durchgeführt und ausgewertet. Die Ermittlung der räumlichen Verteilung von Stoffgehalten in Böden und die Aussagesicherheit der Ergebnisse stellen die Untersuchungsschwerpunkte der Tests dar. Es werden die Ergebnisse der Auswertebeispiele analysiert und die Anforderungen an die Daten, die (geo-)statistischen Methoden und die Ergebnisse und ihre Sicherheit konkretisiert. Es wird ein einheitliches Vorgehensmodell konzipiert. Die 4. Projektphase beinhaltet die Erstellung einer Anleitung zur Anwendung der Verfahren.



6 LITERATUR

- Adler, G. (2000): Anforderungen an Flächendatensätze. In: Flächenhafte Darstellung punktbezogener Daten über Stoffgehalte in Böden, UBA-Text 49|00, Umweltbundesamt, Berlin
- Armstrong, M. (1998): Basic Linear Geostatistics, Berlin/Heidelberg, Springer-Verlag, 1. Aufl
- Booch, G., J. Rumbaugh und I. Jacobson (1999). Das UML-Benutzerhandbuch. 2. Aufl., Addison Wesley Verlag, Bonn.
- Blume, H. P. (1992): Handbuch des Bodenschutzes: Bodenökologie und -belastung; Vorbeugende und abwehrende Schutzmaßnahmen, Landsberg/Lech, 2. Aufl.
- Bünig, H.; Trenkler, G. (1994): Nichtparametrische Statistische Methoden, New York, Walter de Gruyter, 2.Aufl.
- Burnham, R. (1987): Design and Analysis Methods for Survival Experiments based on Release Recapture.
- Carpenter, M. (1987) Improved Confidence Intervals on the Mean Response in Simple Linearizable Regression, University of Alabama, S. 263-25.
- Chilès, J.-P.; Delfiner, P. (1999): Geostatistics - Modeling Spatial Uncertainty, New York/ Toronto, John Wiley & Sons, 1. Aufl.
- Clark, I.; Harper, W. V. (2000): Practical Geostatistics, Columbus, Greyden Press, 1. Aufl.
- Cressie, N. Hawkins, D.M. (1980): Robust Estimation of the Variogram. Mathematical Geology, 12 (2) S. 115-125.
- Cressie, N. A. C. (1991): Statistics for Spatial Data, New York/Toronto, John Wiley & Sons, 1.Aufl.
- Deutsch, C. V.; Journal, A. G. (1998): Geostatistical Software Library and User's Guide, New York/Oxford, Oxford University Press, 2. Aufl.
- Dubois, G. Saisana, M. (2002): Optimizing Spatial Declustering Weights - Comparison of Methods. In: Proceedings of the 8th annual Conference of the International Association for Mathematical Geology, Berlin-Germany, 15 - 20 September 2002, S. 479-484.
- Dutter, R. (1996): In H. Rieder (Hrsg): Robust Statistics, Data Analysis and Computer Intensive Methods, Nr. 109 in Lecture Notes in Statistics, New York, Springer Verlag, S. 153 - 172.
- Genton, M. G. (1998): Highly Robust Variogram Estimation. In: Mathematical Geology, 30 (2): 213 - 221.
- Genton, M. G.; Furrer, R. (1998): Analysis of Rainfall Data by Robust Spatial Statistics using S+SPATIALSTATS. In: Journal of Geographic Information and Decision Analysis, 2 (2): 126 - 136).
- Goovaerts, P. (1997): Geostatistics for Natural Resources Evaluation, New York/Oxford, Oxford University Press, 1. Aufl.
- Hartung, J.; Elpelt, B.; Klösener, K.-H. (1999): Statistik - Lehr- und Handbuch der angewandten Statistik, München/Wien, Oldenbourg-Verlag, 12 Aufl.
- Heidbrink, K. (2000): Erstellung Digitaler Bodenbelastungskarten (BBK) in Nordrhein-Westfalen. In: Flächenhafte Darstellung punktbezogener Daten über Stoffgehalte in Böden, UBA-Text 49|00, Umweltbundesamt, Berlin.
- Heinrich, U. (1992): Zur Methodik der räumlichen Interpolation mit geostatistischen Verfahren - Untersuchungen zur Validität flächenhafter Schätzungen diskreter Messungen kontinuierlicher raumzeitlicher Prozesse, Wiesbaden, Deutscher Universitäts-Verlag, 1.Aufl.



- Hinterding, A. (1998): Räumliche Interpolation, unter:
http://castafiore.uni-muenster.de/vorlesungen/Num_Modellierung/Raum_Interpol/-KrigingSeminar_1_Teil.html. Letzter Zugriff am 12.02.2003
- Isaaks, E. H.; Srivastava, R. M. (1989): Applied Geostatistics, New York/Oxford, Oxford University Press, 1. Aufl.
- Johnston, K. et al. (2001): Using ArcGIS Geostatistical Analyst, Redlands, ESRI, 1. Aufl.
- Bund-Länder-Arbeitsgemeinschaft Bodenschutz (LABO) (1998): Hintergrundwerte für anorganische und organische Stoffe in Böden. 2. überarbeitete Aufl.
- LABO (2003): Hintergrundwerte für anorganische und organische Stoffe in Böden. 3. überarbeitete Aufl.
- Lorup, E. J. (2000): Crossvalidation, unter:
<http://www.geo.sbg.ac.at/staff/lorup/lv/geostats2000/Crossvalidation.htm>. Letzter Zugriff am 19.02.2003
- Ministerium für Umwelt und Forsten (Hrsg.) (1998): Bodenzustandsbericht Rheinland-Pfalz, Blatt 6015 Mainz.
- Murschel, B. (2000): Vom Punkt zur Fläche - digitale Bodenzustandskarten von Schwermetallen und organischen Schadstoffen. In: Flächenhafte Darstellung punktbezogener Daten über Stoffgehalte in Böden, UBA-Text 49|00, Umweltbundesamt, Berlin.
- Rousseuw, P. ; Croux, C. (1993): Alternatives to the median absolute deviation. In: Journal of the American Statistical Association 88: 1273 - 1283.
- Saito, H.; Goovaerts, P. (2000): Geostatistical Interpolation of Positively Skewed and Censored Data in a Dioxin-Contaminated Site. In: Environ. Sci. Technol., 34: 4228 - 4235.
- Schaeben, H.; Lindner, S. (2000): Mathematische Geologie II – Statistik regionalisierter Variablen - Geostatistik, Institut für Geologie, TU Bergakademie Freiberg, Download unter:
<http://www.geologie.tu-freiberg.de/mathe/mathe-2/gm2.pdf>. Letzter Zugriff am 10.02.2003.
- Scheffer, F.; Schachtschabel, P. (1998): Lehrbuch der Bodenkunde, Stuttgart, 14. Aufl.
- Schimming, C.-G. (1992): In H. P. Blume (Hrsg): Handbuch des Bodenschutzes: Bodenökologie und -belastung; Vorbeugende und abwehrende Schutzmaßnahmen, Landsberg/Lech, 2. Aufl.
- Streit, U. (2002): Einführung in die Geostatistik 2.1 (Vorlesung und Übung), unter:
<http://castafiore.uni-muenster.de/vorlesungen/Geostatistik/index.html>. Letzter Zugriff am 20.02.2003
- Thiele, V. (2000): Anforderungen an punktbezogene Daten/Mindestdatensätze. In: Flächenhafte Darstellung punktbezogener Daten über Stoffgehalte in Böden, UBA-Text 49|00, Umweltbundesamt, Berlin.
- Umweltbundesamt UBA (Hrsg.) (2000): Flächenhafte Darstellung punktbezogener Daten über Stoffgehalte in Böden, UBA-Text 49/00, Umweltbundesamt, Berlin.
- UBA (Hrsg.) (2002): GSE-Forschungsbericht 200 71 238: Kennzeichnung von Gebieten mit großflächig siedlungsbedingt erhöhten Schadstoffgehalten im Boden, Berlin.
- Utermann, J. et al. (1999): Methodische Anforderungen an Flächenrepräsentanz von Hintergrundwerten in Oberböden. Forschungsbericht 29771010, UBA-FB 99-066. UBA-Texte 95/99.
- von Baratta, M. (Hrsg.) (2002): Der Fischer Weltatlas, Frankfurt a.M. Fischer
- Wackernagel, H. (1998): Multivariate Geostatistics - An Introduction with Applications, Berlin/Heidelberg, Springer-Verlag, 2. Aufl.



ANHANG



a) Steckbriefe der Länder und des Bundes (S. 53ff.)

Statistische Kennwerte:

- Steckbrief - Rheinland-Pfalz: Statistische Kennwerte
- Steckbrief – Saarland: Statistische Kennwerte
- Steckbrief – Saarland: Bodendauerbeobachtung
- Steckbrief – Hintergrundwerte: Ableitung von Hintergrundwerten für anorganische und organische Stoffe in Böden nach LABO-Vorgaben
- Steckbrief – Hintergrundwerte: Flächenrepräsentanz nach UBA-Text

Räumliche Interpolationsverfahren:

- Steckbrief - Baden-Württemberg
- Steckbrief – Bayern: Immissionsbezogene Bodenbelastung
- Steckbrief – Brandenburg: Regionalisierung von Bodenbelastung
- Steckbrief – Brandenburg: Regionalisierung von Bodenschutzdaten auf Auenstandorten
- Steckbrief – Hessen
- Steckbrief – NRW: Bodenbelastungskarten Außenbereich (BBK_A)
- Steckbrief – NRW: Bodenbelastungskarten Siedlungsbereich (BBK_S)
- Steckbrief – Sachsen
- Steckbrief – Thüringen: Regionalisierung von Bodenschutzdaten auf Auenstandorten

b) Übersicht über Vollzugsaufgaben im Bodenschutz (S. 137ff.)



Steckbrief - Rheinland-Pfalz - Statistische Kennwerte -

1. Ziel

Bodenzustandsberichte beschreiben die stoffliche Beschaffenheit der Böden in ausgewählten Gebieten. Neben der Bestimmung grundlegender Parameter wie Korngrößenzusammensetzung, pH-Wert, Carbonat-, Kohlenstoffgehalt etc. werden die Böden auf den Gesamt- und Mobilgehalt potentiell ökotoxischer Spurenelemente sowie auf die Aktivität künstlicher Radionuklide untersucht. An etwa jedem 3. Standort wird zudem der Gehalt ausgewählter organischer Stoffe im Oberboden bestimmt.

Zielsetzung ist es, klassifiziert nach Substrat und/oder Landnutzung, differenzierte Hintergrundwerte für Rheinland-Pfalz abzuleiten.

Durch systematische Untersuchung von insgesamt ca. 20-25 TK-25-Kartenblättern von Rheinland-Pfalz kann mit hinreichender Genauigkeit eine flächendeckende Übertragung der gewonnenen Kennwerte für die anorganischen Parameter auf die gesamte Landesfläche (ca. 190 TK-Blätter) erfolgen.

Detaillierte Bodenzustandsberichte gibt es von 5 TK-25-Blättern (vgl. auch 10). Mit dem Bodenbelastungskataster (1996) liegt eine zusammenfassende Darstellung von insgesamt 10 weiteren TK-Blättern mit einem leicht reduzierten Untersuchungsumfang vor.

Die Dokumentation des Stoffbestandes des Bodens ist somit nicht nur ein wichtiger Aspekt des vorsorgenden Bodenschutzes, sondern stellt mit den daraus abgeleiteten Hintergrundwerten von Rheinland-Pfalz auch eine wichtige Beurteilungsgrundlage zum nachsorgenden Bodenschutz dar.

2. Untersuchungsparameter

Es werden folgende Bodenparameter und Stoffgruppen betrachtet:

- Bodenparameter: Korngrößenzusammensetzung, pH-Wert, Carbonate, Organischer Kohlenstoff, Gesamtkohlenstoff, Gesamt-Stickstoff, mobile Makroelemente, Kationenaustauschkapazität, Phosphor, Kalium, Eisen
- Spurenelemente (Anorganische Stoffe): Al, As, Ca, Cd, Cr, Cu, Hg, Mg, Ni, Pb, Zn
- Organische Stoffe: Biozide, polychlorierte Biphenyle, Pentachlorphenol, PAK, PCDD/F
- Radionuklide: ^{60}Co , ^{134}Cs , ^{137}Cs , ^{125}Sb

3. Anwendungsbereich

Der Bodenzustandsbericht bezieht sich jeweils auf eine Topographische Karte im Maßstab 1:25.000. Dieser Ausarbeitung lag der Bodenzustandsbericht Blatt 6015 Mainz zu Grunde.

4. Angewandeter Maßstab

Die thematischen Karten liegen im Maßstab 1:50.000 vor.

5. Datengrundlage

Datengrundlage bilden die punktbezogenen Messdaten der **Untersuchungsparameter** in Oberböden (30 cm). Substrat- und Landnutzungskarten dienen als Hintergrundkarten für den Flächenbezug. Die Geometrien der Substratkarte sind aus der unveröffentlichten digitalen Bodenkarte (BK 25) Blatt 6015 Mainz des Landesamtes für Geologie und Bergbau



Rheinland-Pfalz abgeleitet, für einen angrenzenden Blattanteil wurde die Geometrie vom Blatt 6016 Groß-Gerau vom Hessischen Landesamt für Bodenforschung übernommen. Die Karte der obersten bodenbildenden Substrate liegt im Maßstab 1:50.000 vor und wird zur Übertragung der anorganischen Parameter verwendet. Die Landnutzungskarte basiert auf ATKIS-Daten des Digitalen Landschaftsmodells (DLM 25) und liegt ebenfalls im Maßstab 1:50.000 vor.

Die Flächen der Substratkarten, die als Hintergrund für die thematischen Karten der Spurenelemente (Schwermetalle) dienen, sind nach der Gehaltsgruppe, in dem der jeweilige substratabhängige Medianwert des „Gesamt“-Gehaltes liegt, eingefärbt. Hierbei handelt es sich um substratspezifische Mittelwerte, die aus dem gesamten landesweiten Datenbestand berechnet wurden.

Außerdem werden die thematischen Karten mit der TK 50 hinterlegt.

6. Methodenbeschreibung

Eine Beschreibung des Verfahrens zur Bestimmung der statistischen Kennwerte ist in Form eines Ablaufdiagramms mit detaillierter Beschreibung der einzelnen Verfahrensschritte im Abschnitt 12 zu finden.

7. Ergebnisse

Die **statistischen Kennwerte** der Gesamt- und Mobilgehalte der Spurenelemente (anorganische Stoffe) liegen substratspezifisch in tabellarischer Form und als Boxplot vor. Die Klassifizierung erfolgt zunächst nach Horizontgruppen (Organische Auflage, Ober-, Unterboden, Untergrund). Diese werden weiter in Substratklassen untergliedert. Bei ausreichender Fallzahl kann beim Oberboden auch die Landnutzung berücksichtigt werden. Eine rein nutzungsbezogene Auswertung erfolgt nur bei xenobiotischen Stoffen (künstl. Radionuklide, Org. Stoffe). Sofern eine nutzungsbezogene Klassifizierung erfolgt, werden zwischen den aus den ATKIS-Objekten aggregierten Landnutzungen Laubwald, Acker, Wein, Sonderkulturen, Grünland, Ödland und sonstigen Nutzungen unterschieden. Die statistischen Kennwerte der organischen Stoffe und der Radionuklide werden nutzungsspezifisch in tabellierter Form und in Boxplots dargestellt. Die statistischen Kennwerte der allgemeinen Parameter werden nutzungs- und substratspezifisch in tabellierter Form und in Boxplots dargestellt.

Thematische Karten im Maßstab 1:50.000 geben die Gehalte der Spurenelemente und organischen Stoffe mit Flächenbezug wieder. Die Substratkarte dient als Hintergrund für die thematischen Karten der Spurenelemente im Maßstab 1:50.000, da deren natürlicher Gehalt in erster Linie vom Ausgangssubstrat der Bodenbildung abhängt. Die Flächen sind nach der Gehaltsgruppe eingefärbt, in dem der jeweilige substratabhängige Medianwert des Gesamt-Gehaltes liegt. Es handelt sich um substratspezifische Mittelwerte, die aus dem gesamten (landesweiten) Datenbestand berechnet wurden. Überschreitet der Elementgehalt an einer Entnahmestelle den substratabhängigen Medianwert, wird der Gesamt- und der leicht mobilisierbare Gehalt in einem Kreisdiagramm dargestellt. Bei Unterschreitung des Mittelwerts wird die Probennahmestelle lediglich markiert. Die Gehalte an organischen Stoffen und Radionukliden werden in den thematischen Karten punktbezogen dargestellt. Die Gehalte an organischen Stoffen sind mit der Landnutzungskarte hinterlegt.



8. Aussagesicherheit

Statistisch unsichere Daten ($n < 10$) werden in den Tabellen kursiv dargestellt und in den Karten werden die betreffenden Flächen mit Schraffuren überzogen. Einen Hinweis auf die Streuung geben die Perzentilabstände und ggf. die Boxplots.

9. Einsatz im Vollzug

Bei folgenden Fragestellungen des Bodenschutzes werden die statistischen Kennwerte herangezogen:

1. Überschreitung der Grenzwerte der Klärschlammverordnung (AbfKlärV 1992, Merkblatt ALEX-02 (1997) in den bis zum Jahr 2001 erschienen Berichten.
2. Die neuen Berichte ab 2003 (5413 Westerburg und 6312 Rockenhausen) verwenden als Beurteilungsgrößen nur noch die Vorsorgewerte der BBodSchV und nicht mehr die Grenzwerte nach Klärschlammverordnung.
3. Aus dem Datenkollektiv der Bodenzustandsberichte werden die Hintergrundwerte für Rheinland-Pfalz abgeleitet, die im Bodenschutzvollzug zur Beurteilung heranzuziehen sind.
4. Nach dem Erlass des Ministeriums der Finanzen und des Ministeriums für Umwelt und Forsten vom 05.02.2002 „Erlass zur Berücksichtigung von Flächen mit Bodenbelastungen, insbesondere Altlasten, bei der Bauleitplanung und im Baugenehmigungsverfahren“ sind die Ergebnisse der Bodenzustandsberichte bzw. des Bodenbelastungskatasters sowie die Hintergrundwerte von Rheinland-Pfalz für die Bewertung von festgestellten Bodenbelastungen zu berücksichtigen.

10. Bearbeitungsstand

Detaillierte Bodenzustandsberichte gibt es von folgenden TK-Blättern:

- 6015 Mainz (1998)
- 5911 Kisselbach (2000)
- 6711 Pirmasens-Nord (2001)
- 5413 Westerburg (Anfang 2003)
- 6312 Rockenhausen (Ende 2003)

Mit dem Bodenbelastungskataster (1996) liegt eine zusammenfassende Darstellung von insgesamt 10 TK-Blättern mit einem vom Untersuchungsumfang reduzierten Parameterumfang (weniger organische Parameter und keine mobilisierbaren anorganischen Stoffe) vor.

Alle bislang erschienenen Bodenzustandsberichte sowie die aktualisierten thematischen Elementverteilungskarten des Bodenbelastungskatasters werden in 2003 auf einer CD-ROM „Materialien zum Bodenschutz in Rheinland-Pfalz“ erscheinen.

Das Projekt der Bodenzustandsberichte wird forciert bis 2009 mit 6 neuen TK-25-Bearbeitungsgebieten fortgesetzt.

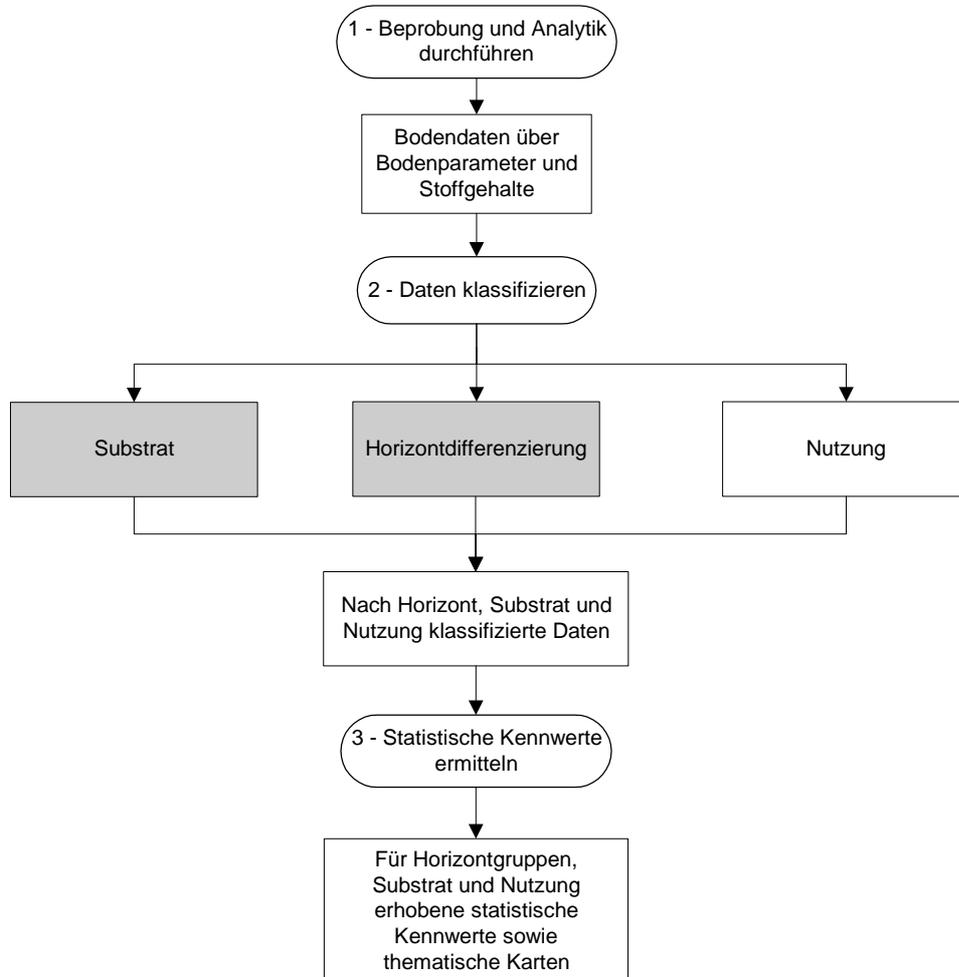
11. Quellen

- Ministerium für Umwelt und Forsten (Hrsg.) (1998): Bodenzustandsbericht Rheinland-Pfalz Blatt 6015 Mainz.
- Ministerium für Umwelt und Forsten (Hrsg.) (1996): Bodenbelastungskataster Rheinland-Pfalz.



- Ministerium für Umwelt und Forsten (Hrsg.) Internetseite: <http://www.muf.rlp.de>
im Bereich Abfallwirtschaft, Bodenschutz, ↪ Vorsorgender Bodenschutz
↪ Bodenzustandsberichte

12. Ablaufdiagramm „Herleitung von statistischen Kennwerten für die Untersuchungsparameter in Böden“



Legende:



Verfahrensschritt. Ist ein Verfahrensschritt mit einer Nummer gekennzeichnet, ist dieser in der untenstehenden Liste detailliert erläutert. Die Verfahrensschritte, die grau unterlegt sind, beziehen sich ausschließlich auf die Anwendung des Verfahrens auf Schwermetalle.



Objekt. Daten oder Karten, die Eingangsdaten oder das Hauptergebnis eines Verfahrensschritts darstellen. Die Objekte, die grau unterlegt sind, beziehen sich ausschließlich auf die Anwendung des Verfahrens auf Schwermetalle.



Verbindung zwischen Verfahrensschritten und Objekten.

Verfahrensschritte zur Herleitung der Statistischen Kennwerte:



Verfahrensschritt 1

- (1) **Inhalt:** Die Beprobung und Analytik liefert die Daten über die Stoffgehalte im Oberboden.
- (2) **Eingangsdaten:** Bodenproben
- (3) **Methodik:** Die horizontbezogene Beprobung der oberen 30 cm des Oberbodens erfolgt im 1km²-Raster. Die Gitterpunkte der TK 25 bilden das räumliche Bezugssystem. Innerhalb einer Rasterfläche liegt – variabel festgelegt – mindestens ein Standort. Die Verteilung der Entnahmepunkte innerhalb einer Rasterzelle orientiert sich an den Flächenanteilen der naturräumlichen Gegebenheiten und der Nutzungsverteilung des jeweiligen Kartenblattes.
- Die Analytik der Bodenproben schließt neben der Erhebung der Gehalte anorganischer und organischer Stoffe sowie der Radionuklide Bodenparameter mit ein. Neben den Gesamtgehalten werden bei den Spurenelementen (anorganische Stoffe) auch die mobilen Anteile ermittelt. Dies ermöglicht eine Abschätzung der Gefährdung, die von Schwermetallen im Boden ausgeht.

Verfahrensschritt 2

- (1) **Inhalt:** Klassifikation der Daten: Anorganische Spurenelemente sind natürliche Bestandteile der Ausgangsgesteine der Bodenbildung und gelangen durch die Verwitterung in die Pedosphäre. Aber auch durch anthropogenen Einfluss, wie die Nutzung, werden die Gehalte an Spurenelementen, wie auch an organischen Stoffen, beeinflusst.
- (2) **Eingangsdaten:** Bodenproben
- (3) **Methodik:** Die Klassifizierung erfolgt zunächst nach Horizontgruppen (Organische Auflage, Ober-, Unterboden, Untergrund). Diese werden weiter in Substratklassen untergliedert. Bei ausreichender Fallzahl wird beim Oberboden eine weitere Untergliederung in Nutzungsklassen durchgeführt. Außerdem werden Gesamtgehalten und mobile Anteile der Spurenelemente getrennt betrachtet. Die organischen Stoffe und Radionuklide werden nur nach der Nutzung klassifiziert.

Verfahrensschritt 3

- (1) **Inhalt:** Herleitung der statistischen Kennwerte für die klassifizierte Bodenproben.
- (2) **Eingangsdaten:** klassifizierte Daten (Stoffgehalte)
- (3) **Methodik:** Die folgenden statistischen Kennwerte werden für die klassifizierte Daten erhoben:
- Anzahl der Messwerte (mindestens STP-Anzahl n = 10)
 - Prozentualer Anteil der Messwerte unterhalb der Nachweisgrenze
 - Minimum und Maximum



- 25., 50., 75., 90. Perzentil: 50. Perzentil = Median; Das 90. Perzentil dient häufig als Orientierungs- oder Hintergrundwert zur Abgrenzung von merklicher anthropogener Belastung
- obere Ausreißergrenze: Wert, der das 75. Perzentil um mehr als das 1,5-fache des Interquartilsabstands überschreitet
- Darstellung von Boxplots (Streuung ablesbar)



Steckbrief – Saarland - Statistische Kennwerte -

1. Ziel

Die flächenhafte Verteilung von Schwermetallgehalten im Oberboden wird durch Kennwerte, die als typisch für die verschiedenen Bodeneinheiten anzusehen sind, bestimmt.

2. Untersuchungsparameter

Es werden Schwermetallgehalte von Pb, Cd, Zn, Ni, Cr, Cu, Hg betrachtet.

3. Anwendungsbereich

Das Verfahren wurde auf den Gesamttraum des Saarlandes angewendet.

4. Angewandeter Maßstab

Durch die Kartengrundlage der BÜK 100 ist der Maßstab, auf den sich dieses Verfahren bezieht, auf 1:100.000 festgelegt.

5. Datengrundlage

Für das Verfahren werden punktuelle Daten der Schwermetalle mit Informationen zur Nutzungsart benötigt. Es ist außerdem eine Bodenübersichtskarte im Maßstab 1:100.000 (BÜK100) zur Beschreibung der Bodeneinheiten notwendig.

6. Methodenbeschreibung

Eine Beschreibung des Verfahrens zur Bestimmung der flächenhaften Stoffgehalte im Boden ist in Form eines Ablaufdiagramms mit detaillierter Beschreibung der einzelnen Verfahrensschritte im Abschnitt 12 zu finden.

Für die Ermittlung des Flächenbezugs wurden verschiedene statistische Kennwerte wie Minimum, Maximum, Median und 90. Perzentil berechnet.

7. Ergebnisse

Das Ergebnis dieses Verfahrens besteht aus verschiedenen statistischen Kennwerten der Stoffgehaltsverteilungen je Bodeneinheit.

8. Aussagesicherheit

Es werden keine Angaben zur Aussagesicherheit gemacht.

9. Einsatz im Vollzug

Nicht bekannt.

10. Bearbeitungsstand

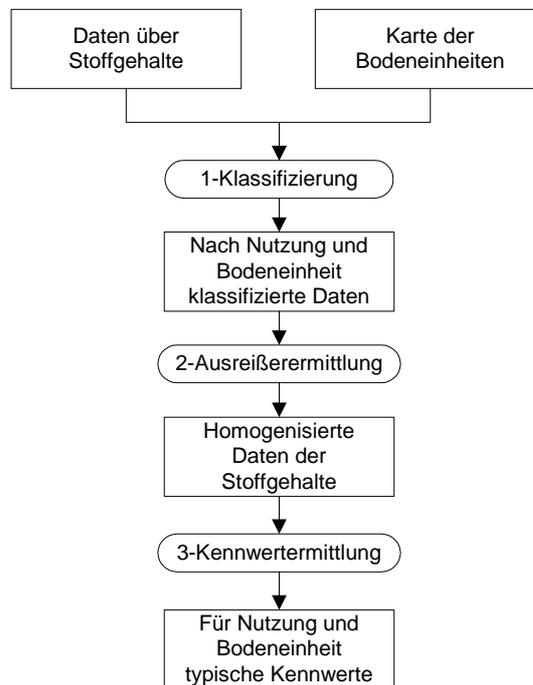
Das Verfahren ist mit ca. 5.000 Datensätze des Schwermetallbelastungskatasters des Saarlands umgesetzt und in der unten stehenden CD dokumentiert.

11. Quellen

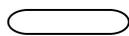
- Bodenübersichtskarte des Saarlands 1:100.000 , CD mit Dokumentation.



12. Ablaufdiagramm „Herleitung von statistischen Kennwerten zur Erstellung des Flächenbezugs“



Legende:



Verfahrensschritt. Ist ein Verfahrensschritt mit einer Nummer gekennzeichnet, ist dieser in der untenstehenden Liste detailliert erläutert.



Objekt. Daten oder Karten, die Eingangsdaten oder das Hauptergebnis eines Verfahrensschritts darstellen.



Verbindung zwischen Verfahrensschritten und Objekten.

Verfahrensschritte:

Verfahrensschritt 1

- | | |
|---------------------------|--|
| (1) Inhalt: | Klassifizierung der Stoffgehalte nach Nutzung und Bodeneinheit |
| (2) Eingangsdaten: | Daten der Stoffgehalte im Oberboden, Karte der Bodeneinheiten |
| (3) Methodik: | Die Daten der Stoffgehalte werden mit der Karte der Bodeneinheiten verschnitten. Dadurch können die Stoffgehalte den einzelnen Bodeneinheiten zugeordnet werden. Innerhalb jeder Bodeneinheit werden sie nach der Nutzungsart klassifiziert. |

Verfahrensschritt 2

- | | |
|---------------------------|-----------------------------|
| (1) Inhalt: | Ermittlung von Ausreißern |
| (2) Eingangsdaten: | Klassifizierte Stoffgehalte |



- (3) Methodik:** Es werden die Stoffgehalte aus jeder Gruppe entfernt, die größer als der Mittelwert der Gruppe + dem 4-fachen der Standardabweichung sind. Es werden danach noch einmal genau so viele Daten von der linken Seite der Verteilung gestrichen.

Verfahrensschritt 3

- (1) Inhalt:** Ermittlung von Kennwerten
- (2) Eingangsdaten:** Klassifizierte Stoffgehalte
- (3) Methodik:** Je Gruppe werden die Stichprobengröße, der Minimum-/Maximumwert (Spanne), der Median und das 90. Perzentil berechnet.



Steckbrief – Saarland - Bodendauerbeobachtung -

1. Ziel

Ziel des im folgenden beschriebenen Verfahrens ist die Bewertung der räumlichen Repräsentanz von Schwermetallmessdaten und der Homogenität der Schwermetallbelastungen innerhalb der Boden-Dauerbeobachtungsflächen.

2. Untersuchungsparameter

Als Untersuchungsparameter stehen Stoffgehalte der Schwermetalle Blei, Cadmium, Chrom, Kupfer, Nickel, Quecksilber, Zink, Kobalt sowie Arsen im Zentrum des Interesses.

3. Anwendungsbereich

Das Verfahren ist auf Bodendauerbeobachtungsflächen begrenzt.

4. Angewandeter Maßstab

Für die Bodendauerbeobachtungsflächen liegen Karten im Maßstab von 1:5.000 vor.

5. Datengrundlage

Für das Verfahren werden alle relevanten Informationen über die festgelegten Bodendauerbeobachtungsflächen benötigt, wie beispielsweise der Nutzungstyp, die Bodenform etc. Darüber hinaus werden punktuelle und flächenhafte Daten von Schwermetallgehalten in den Bodendauerbeobachtungsflächen benötigt. Zur Bestimmung der Repräsentanz der Schwermetallmesswerte auf den Bodendauerbeobachtungsflächen sind außerdem flächendeckende Daten von Schwermetallgehalten aus anderen Beprobungen notwendig.

6. Methodenbeschreibung

Nicht nachweisbare Stoffgehalte werden im folgenden als 0 betrachtet.

6.1 Räumliche Repräsentanz

Zur Prüfung der räumlichen Repräsentanz der Schwermetallgehalte wurden die Mittelwerte der Mischproben auf den Bodendauerbeobachtungsflächen mit den flächendeckenden Daten anderer Messungen im selben Gebiet verglichen.

6.2 Räumliche Homogenität

Zur Charakterisierung der räumlichen Homogenität der einzelnen Bodendauerbeobachtungsflächen werden die einzelnen Mischproben mit ihrem Mittelwert durch Angabe der mittleren prozentualen Abweichung verglichen:

$$e (\%) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \left| 100 - \frac{100x_i}{\bar{x}} \right|$$

wobei: n = Anzahl der Mischproben (Ackerstandorte 4, Grünland- und Waldstandorte 3)
 x_i = Analysewert der Mischprobe i
 \bar{x} = Mittelwert aus allen Mischproben



7. Ergebnisse

Das Ergebnis dieses Verfahrens besteht aus verschiedenen statistischen Kennwerten der Stoffgehaltsverteilungen je Bodendauerbeobachtungsfläche.

8. Aussagesicherheit

Es werden keine Angaben zur Aussagesicherheit gemacht.

9. Einsatz im Vollzug

Nicht bekannt.

10. Bearbeitungsstand

Das Verfahren wurde anhand der Erstbeprobung der Bodendauerbeobachtungsflächen durchgeführt.

11. Quellen

- Boden-Dauerbeobachtungsflächen (BDF) im Saarland, Konzeption und Ergebnisse der Erstuntersuchung. Landesamt für Umweltschutz des Saarlandes, Abt. Geologie Sachbereich Bodenkunde.



Steckbrief - Hintergrundwerte

- Ableitung von Hintergrundwerten für anorganische und organische Stoffe in Böden nach LABO-Vorgaben -

1. Ziel

Die LABO hat Anforderungen an die Erhebung von Hintergrundgehalten und an die Ableitung von Hintergrundwerten erarbeitet. Hintergrundwerte für Böden geben die naturbedingten Grundgehalte sowie die allgemein vorhandene anthropogene Zusatzbelastung der Böden an. Punktuelle Belastungsschwerpunkte gehen nicht in die Ermittlung von Hintergrundwerten ein. Durch die Hintergrundwerte sollen allgemein vorhandene bzw. regionstypische Hintergrundgehalte eines Stoffes oder einer Stoffgruppe in Böden, differenziert nach den Bezugsgrößen Ausgangsgestein, Nutzung und Gebietstyp, flächenhaft repräsentiert werden.

2. Untersuchungsparameter

Es werden zwei Stoffgruppen betrachtet:

- Anorganische Stoffe (Schwermetalle): As, Cd, Cr, Cu, Hg, Ni, Pb, Se, Sb, Tl, Zn
- Persistente organische Stoffe: PAK₁₆, PCB₆, B(a)P, HCH, HCB, PCDD/F (I-TEq)

3. Anwendungsbereich

Angewendet werden die Hintergrundwerte auf Bundes- und Landesebene. Die Erhebung der Hintergrundwerte erfolgt differenziert nach Bodenausgangsgestein, Landnutzung (Acker, Grünland, Wald) und Siedlungsstruktur. So werden z.B. die Hintergrundwerte für Regionen mit großen Verdichtungsräumen, Regionen mit Verdichtungsansätzen und ländlich geprägte Regionen ermittelt.

4. Angewandeter Maßstab

Die Hintergrundwerte werden länderübergreifend (Bundesebene) und länderspezifisch (Landesebene) erhoben.

5. Datengrundlage

Datengrundlage bilden die punktbezogenen Messdaten der **Untersuchungsparameter** in Böden natürlich entwickelter Bodenprofile. Diese werden differenziert nach den Bezugsgrößen Bodenausgangsgestein, (Horizont), Landnutzung und Siedlungsstruktur betrachtet. Folgende Angaben sind notwendig: Standort- und Profilkennzeichnung (Koordinaten, pedologische/lithologische bzw. geogenetische Kennzeichnung, Nutzung), Horizont-/Probenkennzeichnung (Probeentnahmetiefen, Horizontbezeichnung, Bodenart), Analyseergebnisse einschließlich Angaben zur Aufschlussmethode.

6. Methodenbeschreibung

Eine Beschreibung des Verfahrens zur Bestimmung der Hintergrundwerte in Böden ist in Form eines Ablaufdiagramms mit detaillierter Beschreibung der einzelnen Verfahrensschritte im Abschnitt 12 zu finden.



7. Ergebnisse

Mit der Methode der Ableitung von Hintergrundwerten für anorganische und organische Stoffe in Böden können **länderübergreifende und länderspezifische Hintergrundwerte** für die verschiedenen Stoffe differenziert nach Ausgangsgestein, Landnutzung, (Horizont) und Siedlungsstruktur ermittelt werden.

8. Aussagesicherheit

Zur Erhebung der Hintergrundwerte ist für anorganische und organische Stoffe eine Mindestprobenzahl von $n = 20$ erforderlich (LABO 2003). Ansonsten werden keine Aussagen zur Aussagesicherheit gemacht.

9. Einsatz im Vollzug

Hintergrundwerte können zur Beurteilung eines Stoffgehaltes im Boden bzw. einer Bodenbelastung unter Berücksichtigung der entsprechenden Bezugsgrößen genutzt werden. Im einzelnen werden Hintergrundwerte insbesondere bei folgenden Fragestellungen des Bodenschutzes herangezogen:

1. Beschreibung des stoffbezogenen Bodenzustands
2. Bewertung von vorhandenen Bodenbelastungen
3. Ableitung von Beurteilungskriterien
4. Boden-Vorsorge (§12 UVPG, § 10 BBodSchV i.V.m. § 9 Abs. 1 Nr. 2)
5. Bodenwerte für die Verwertung von Reststoffen und Bodenaushub
6. Ableitung maximaler Immissionswerte (Maximale Immissionskonzentration, -dosis, -rate)
7. Statistische Zwecke (Umweltmonitoring, Boden-Dauerbeobachtung, umweltstatistische Berichterstattung)
8. Beurteilung von Bodenbelastungen für den gebietsbezogenen Bodenschutz (BauGB §5 Abs. 3 und §9 Abs. 5, §21 BBodSchG)

10. Bearbeitungsstand

Bundesweite Hintergrundwerte für Böden existieren.

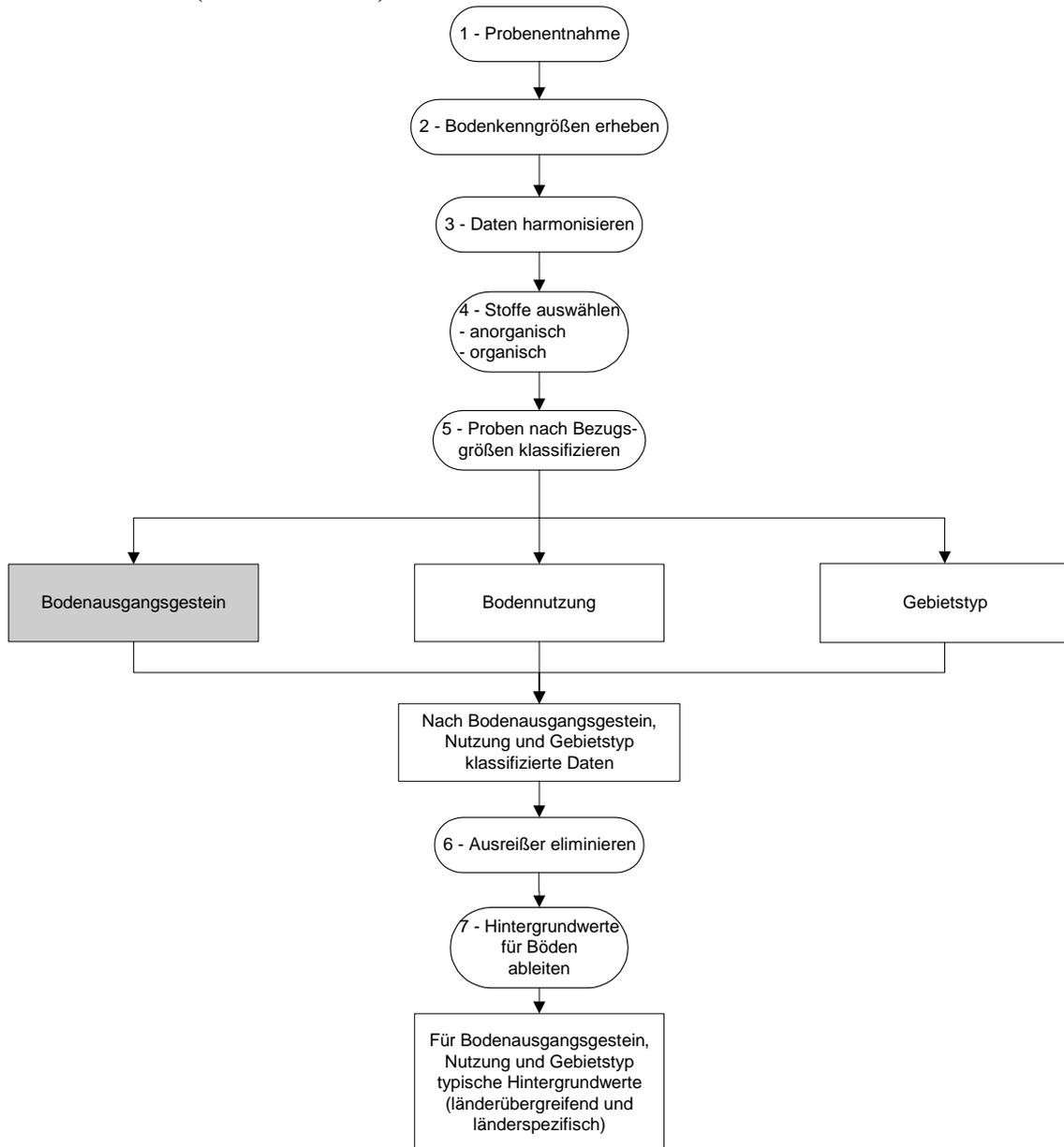
Länderspezifische Hintergrundwerte für Böden aller Länder existieren.

11. Quellen

- LABO (1998): Hintergrundwerte für anorganische und organische Stoffe in Böden. 2. überarbeitete Auflage.
- LABO (2003): Hintergrundwerte für anorganische und organische Stoffe in Böden. 3. überarbeitete Auflage.

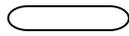


12. Ablaufdiagramm „Ableitung von Hintergrundwerten für anorganische und organische Stoffe in Böden (LABO-Bericht)“





Legende:



Verfahrensschritt. Ist ein Verfahrensschritt mit einer Nummer gekennzeichnet, ist dieser in der untenstehenden Liste detailliert erläutert. Die Verfahrensschritte, die grau unterlegt sind, beziehen sich ausschließlich auf die Anwendung des Verfahrens auf Schwermetalle.



Objekt. Daten oder Karten, die Eingangsdaten oder das Hauptergebnis eines Verfahrensschritts darstellen. Die Objekte, die grau unterlegt sind, beziehen sich ausschließlich auf die Anwendung des Verfahrens auf Schwermetalle.



Verbindung zwischen Verfahrensschritten und Objekten.

Verfahrensschritte zur Ableitung der Hintergrundwerte nach LABO-Bericht:

Verfahrensschritt 1

(1) Inhalt:

Probeentnahme: Im Hinblick auf die Vergleichbarkeit von Hintergrundwerten sind bei Untersuchungen möglichst einheitliche bzw. vergleichbare Probennahmemethoden (Probennahme-Strategie) anzuwenden (Hinweise zu diesen Arbeitsschritten finden sich u.a. in der Bodenkundlichen Kartieranleitung KA4, DIN-ISO 10381-2, -4, -5, DIN ISO 11464). Mindestanforderungen an die Standortbeschreibung und Probenentnahme sind:

- Standort- und Profilkennzeichnung (Koordinaten, pedologische/lithologische bzw. geogenetische Kennzeichnung gemäß KA4 1994, Nutzung)
- Horizont-/Probenkennzeichnung (Probeentnahmetiefen, Horizontbezeichnung, Bodenart)

Weiteres:

- Mit geringstem Aufwand (niedrige Probemenge) einen hohen Grad der Übertragbarkeit auf nicht untersuchte, aber äquivalente Teile der Gesteins- und Bodendecke erreichen (Flächenrepräsentativität)
- Zur Steigerung der Datengenauigkeit sind nachteilige Wechselwirkungen im System Probe-Mensch, Probe-Probennahmebesteck, Probe-Umwelt zu minimieren/auszuschalten
- Umfassende Dokumentation
- Bodenkundliche Ansprache des gesamten Bodenprofils vor der Entnahme von Proben eines Standorts
- Entnahme auch von volumenbezogenen Proben
- Berücksichtigung des Skelettanteils

Es wird außerdem eine flächendeckend systematische, vorzugsweise rasterorientierte Beprobung vorgeschlagen. Die im Verfahrensschritt 1 genannten Aspekte beziehen sich auf die Neuerhebung von Datensätzen.



Verfahrensschritt 2

(1) Inhalt:

Erhebung von Bodenkenngrößen: Zur Interpretation von Hintergrundgehalten, für die Ableitung flächen- bzw. volumenbezogener Angaben (Frachten, Flächenbelegung, Gesamtvorräte, Bilanzierung von Stoffen im Boden) sowie hinsichtlich der Vergleichbarkeit von Hintergrundgehalten/-werten mit den Bodenwerten der BBodSchV ist die Erfassung der wesentlichen Bodenkenngrößen und eine einheitliche bzw. vergleichbare Methodik ihrer Bestimmung erforderlich. Die Bodenkenngrößen werden neben den Stoffgehalten der Untersuchungsparameter (Hintergrundgehalte) im Labor ermittelt. Im folgenden sind die Mindestanforderungen aufgelistet:

- pH-Wert: in CaCl_2 nach BBodSchV Anhang 1: DIN ISO 10390: 05.97; KCl bei forstwirtschaftlich genutzten Böden, vgl. BZE Arbeitsanleitung 1990, 1994
- Corg. und Ableitung des Humusgehalts: Bestimmung nach BBodSchV Anhang 1: DIN ISO 10694: 08.96; Bodenkundliche Kartieranleitung 1994
- Karbonatgehalt: DIN ISO 10693
- Korngrößenverteilung: nach BBodSchV Anhang 1: E DIN ISO 11277: 06.94, DIN 19683-2: 04.97, DIN 18123: 11.96
- Rohdichte: nach BBodSchV Anhang 1: E DIN ISO 11272: 01.94, DIN 19683-12: 04.73
- Skelettgehalt: nach Bodenkundlicher Kartieranleitung

Darüber hinaus ist die Anwendung des „Mindestdatensatz Bodenuntersuchungen“ (SAG Informationsgrundlagen Bodenschutz) erforderlich. Dieser Verfahrensschritt bezieht sich wiederum auf die Neuerhebung von Datensätzen.

Verfahrensschritt 3

(1) Inhalt:

Harmonisierung der Daten: Dieser Schritt führt vorhandene Datengrundlagen unterschiedlicher Quellen zusammen. Unter Harmonisierung der Daten ist die Schaffung eines einheitlichen Datensatzes zu verstehen, der den Anforderungen an eine Prüfung der Repräsentativität der Profile hinsichtlich ihrer Zielaussage, der Ableitung von Hintergrundwerten für Böden, genügt.

Es werden Gesteine mit vergleichbaren geogen bedingten Stoffgehalten zu Einheiten geogener Grundgehalte zusammengefasst.

(2)Eingangsdaten:

Bodenproben

(3) Methodik:

Harmonisierung durch:

- Vereinheitlichung der Datenfeldinhalte; Überprüfung der Datenfeldinhalte bezogen auf problembezogene Mindestanforderungen
- Gewährleistung hinreichender räumlicher Verteilung der Probeentnahmepunkte



- Identifizierung und Eliminierung von Proben mit untypischen Elementgehalten (Ausreißeranalyse)
- Vergleichbarkeit der Analysemethoden (Analytik): Beziehung zwischen Elementgehalten im Königswasserauszug und Totalgehalten (HF-Druckaufschluss, Röntgenfluoreszenz-Analyse). Verwendung substrat- und elementspezifischer, linearer Regressionsfunktionen zur Umrechnung in beide Richtungen
- Einheitliche Analysemethoden für organische Stoffe (empfohlen wird eine einheitliche Vorgehensweise analog der BBodSchV Anhang1)

Verfahrensschritt 4

- (1) Inhalt:** Stoffauswahl: Bei der Erfassung von Hintergrundgehalten sind prioritäre anorganische und organische Stoffe zu berücksichtigen.
- (2) Eingangsdaten:** Bodenproben
- (3) Methodik:** Auswahl anorganischer Stoffe: As, Cd, Cr, Cu, Hg, Ni, Pb, Se, Sb, Tl, Zn
Auswahl organischer Stoffe: PAK₁₆, PCB₆, B(a)P, HCH, HCB, PCDD/F (I-TEq)

Verfahrensschritt 5

- (1) Inhalt:** Klassifikation der Proben nach Bezugsgrößen: Die Überprägung geogener Grundgehalte anorganischer Stoffe durch anthropogene Stoffeinträge in die Böden ist abhängig von den Faktoren Nutzung, Gebietsstruktur und Immissionssituation. Organische Stoffe gelangen fast ausschließlich durch anthropogene Verursachung ubiquitär in die Böden, ein geogenes (natürliches) Vorkommen dieser Stoffe ist im wesentlichen nicht bekannt. Bei der Darstellung von Hintergrundgehalten ist neben dem Substratbezug (Bodenausgangsgestein) und der Horizontdifferenzierung (nur bei anorganischen Stoffen) eine Differenzierung nach den Bezugsgrößen Bodennutzung und Gebietsstruktur zu berücksichtigen.
- (2) Eingangsdaten:** Daten der Stoffgehalte im Boden
- (3) Methodik** Prioritäre Gruppen der Bodenausgangsgesteine (nur für anorganische Stoffe) sind:
- 1) Lockergesteine: Sande; Küstensedimente; Terrassenablagerungen; Löss; Sandlöss; Geschiebemergel und Geschiebelehme; Torf (Hochmoor, Niedermoor)
 - 2) Festgesteine: Tongesteine; Sandsteine; Carbonatgesteine (insb. Kalkstein, Dolomitstein, Mergelstein); Saure Magmatite und Metamorphite; intermediäre Magmatite und Metamorphite; basische Magmatite und Metamorphite; ultrabasische Magmatite und Metamorphite.



Die Bodenausgangsgesteine können mit Hilfe der Bodenkundlichen Kartieranleitung eingeteilt werden. Darüber hinaus werden auch Angaben über die Bodenart empfohlen. Bei der Aufnahme der Bodenprofile im Gelände wird üblicherweise das Ausgangssubstrat der Bodenbildung anhand der Parameter der Profilbeschreibung gekennzeichnet (nach Bodenkundlicher Kartieranleitung) und nach Ausgangsgesteinen eingestuft.

Die Nutzungsarten werden differenziert nach den Hauptnutzungsarten Acker, Grünland und Wald. Dabei sollten die Hintergrundwerte für die nutzungsspezifischen Bodenhorizonte angegeben werden, die in Abhängigkeit der Bodenbearbeitung bzw. der Gründigkeit des mineralischen Oberbodens variieren. Eine Erfassung der Hintergrundgehalte von Oberböden erfolgt nach horizontspezifischer Beprobung. Die Bodennutzungsarten mit den relevanten Bodenhorizonten sind:

- 1) Acker: Ap-Horizont (ca. 0-30 cm)
- 2) Grünland: Ah-Horizont (ca. 0-10 cm)
- 3) Wald: Ah-Horizont (ca. 0-10cm), Of/Oh-Horizont (bis 0 cm)

Die gebietsspezifische Immissionssituation wirkt sich unmittelbar auf die Hintergrundgehalte aus. Daher sollten Hintergrundgehalte unter Berücksichtigung des Gebietstyps erhoben werden. Eine Differenzierung der Gebietstypen unter Berücksichtigung der ubiquitären Stoffverteilung als Folge diffuser Einträge sollte in Anlehnung an die siedlungsstrukturelle Gebietstypisierung der Bundesforschungsanstalt für Landeskunde und Raumordnung (BfLR, 1992) erfolgen. Die Gebietstypen werden folgendermaßen differenziert:

Typ I: Regionen mit großen Verdichtungsräumen (Regionen mit einem Oberzentrum von mindestens 300.000 Einwohnern und/oder einer Bevölkerungsdichte von über 300 E/km²)

Typ II: Regionen mit Verdichtungsansätzen (Regionen mit durchschnittlich über 150 E/km² und i.d.R. einem Oberzentrum von mindestens 100.000 Einwohnern)

Typ III: ländlich geprägter Raum (Kreise und kreisfreie Städte mit zusammen einer Bevölkerungsdichte unter 150 E/km²)

Ländliche Räume der Regionen I und II sind grundsätzlich mit den ländlich geprägten Regionen (Typ III) vergleichbar. Lässt die Datenglage keine Untergliederung nach Regionen zu, sind die Daten dem Typ 0 zuzuordnen.

Empfohlen wird die Horizontdifferenzierung nach folgenden Horizontgruppen (s. Vorgabe Bodenkundliche Kartieranleitung KA4 und Anforderungen bzgl. der Tiefenstufe aus BBodSchV Anhang 1):

- Oberbodenhorizonte



- Unterbodenhorizonte
- Untergrundhorizonte

Die Horizontdifferenzierung ist nur bei anorganischen Stoffen und ausschließlich in Verbindung mit der Bezugsgröße Ausgangsgestein vorzunehmen.

Verfahrensschritt 6

- (1) Inhalt:** Ausreißer eliminieren: Ausreißer sollten aus dem klassifizierten Datenbestand eines Stoffes entfernt werden, damit die Ergebnisse nicht verzerrt werden.
- (2) Eingangsdaten:** klassifizierte Daten der Stoffgehalte im Boden
- (3) Methodik:** Ausreißer sind Werte, die das 75. Perzentil bzw. das 25. Perzentil um mehr als das 1,5-fache des Interquartilsabstands über- bzw. unterschreiten. Extremwerte sind Werte, die das 75. Perzentil bzw. das 25. Perzentil um mehr als das 3-fache des Interquartilsabstands über- bzw. unterschreiten.

Verfahrensschritt 7

- (1) Inhalt:** Ableitung länderübergreifender und länderspezifischer Hintergrundwerte aus den Hintergrundgehalten eines Stoffes auf Basis der klassifizierten Daten der Stoffgehalte.
- (2) Eingangsdaten:** klassifizierte Daten der Stoffgehalte im Boden
- (3) Methodik:** Zur Charakterisierung von Hintergrundwerten und deren Verteilung schlägt die LABO die Angabe des 50. Perzentilwertes (Median) und des 90. Perzentilwertes vor. Dabei ist für anorganische und organische Stoffe eine Mindestprobenzahl von $n = 20$ erforderlich.



Steckbrief - Hintergrundwerte - Flächenrepräsentanz nach UBA-Text -

1. Ziel

Die Flächenrepräsentativität von Hintergrundwerten ist zu gewährleisten. Die BGR (Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe) hat im Auftrag des UBA methodische Anforderungen an die Flächenrepräsentativität von Hintergrundwerten in Oberböden entwickelt (UBA-Texte 95/1999).

2. Untersuchungsparameter

Es wird die folgende Stoffgruppe betrachtet:

- Anorganische Stoffe (Schwermetalle): Cd, Cr, Cu, Ni, Pb, Zn

3. Anwendungsbereich

Die Flächenrepräsentanzanalyse bezieht sich in erster Linie auf die Bundesebene. Am Beispiel Niedersachsen wurde sie auch auf die Landesebene übertragen. Die Erhebung der Hintergrundwerte erfolgt differenziert nach Bodenausgangsgestein und Landnutzung. Die Anforderungen an die Flächenrepräsentanz von Hintergrundwerten werden nur für den ländlich geprägten Raum und für Schwermetalle aufgestellt.

4. Angewandeter Maßstab

Die Flächenrepräsentanzanalyse nach dem UBA-Text wird auf Bundesebene und auf Landesebene angewendet. Die Generierung der entsprechenden Karten mit flächenhafter Darstellung der Hintergrundwerte anorganischer Stoffe basieren auf den Maßstabbereichen 1:1000.000 (Bundesebene) und 1:500.000 (Niedersachsen). Am Beispiel Niedersachsen wurde die Anwendbarkeit der Flächenrepräsentanzanalyse auf Landesebene getestet und bestätigt.

5. Datengrundlage

Datengrundlage bilden zum einen die punktbezogenen Messdaten der **Untersuchungsparameter** in Böden natürlich entwickelter Bodenprofile. Diese werden differenziert nach den Bezugsgrößen Bodenausgangsgestein und Landnutzung betrachtet. Folgende Angaben sind notwendig: Standort- und Profilkennzeichnung (Koordinaten, pedologische/lithologische bzw. geogenetische Kennzeichnung, Nutzung), Horizont-/Probenkennzeichnung (Probeentnahmetiefen, Horizontbezeichnung, Bodenart), Analyseergebnisse einschließlich Angaben zur Aufschlussmethode.

Für die Erhebung der Flächenrepräsentanz von Hintergrundwerten in Oberböden nach dem UBA-Text werden flächenbezogene Daten der Einflussgrößen benötigt. Die Generierung der Karten mit der flächenhaften Darstellung der Hintergrundwerte anorganischer Stoffe basieren auf den Maßstabbereichen 1:1000.000 (Bundesebene) und 1:500.000 (Niedersachsen). Karten, die zur Ermittlung zu Grunde liegen, sind die folgenden: BÜK 1000 (1:1000.000: Bundesebene) und BÜK 50 (1:50.000: Niedersachsen), Bodenausgangsgestein BAG 1000 (1:1000.000: Bundesebene) und BAG Land (1:500.000: Niedersachsen), Hauptlandnutzungen HLN 1000 (1:1000.000: Bundesebene) (CORINE-Landcover), BR – EU 5000 (Karte der Bodenregionen Europas 1:5000.000).



6. Methodenbeschreibung

Eine Beschreibung der Flächenrepräsentanzanalyse der Hintergrundwerte in Oberböden ist in Form eines Ablaufdiagramms mit detaillierter Beschreibung der einzelnen Verfahrensschritte im Abschnitt 12 zu finden.

7. Ergebnisse

Über die Methode der Flächenrepräsentanzanalyse von Hintergrundwerten in Oberböden nach dem UBA-Text lassen sich die repräsentativen Hintergrundwerte für Schwermetalle auf Bundes- und Landesebene in Karten flächenhaft darstellen. Zwischenergebnisse bei dieser Analyse sind folgende Karten: Karte der räumlichen Verbreitung der Legendeneinheiten der BAG 1000 und BAG Land; Karte der räumlichen Verbreitung der Legendeneinheiten der regionalisierten BAG 1000; Karte der inhaltlichen Übereinstimmung der Profilinformatoren mit den Flächeninformationen der BAG 1000 und BAG Land; Karte der pedoregionalen Repräsentanz der Legendeneinheiten der BAG 1000 und BAG Land durch Profile zur Ableitung von Hintergrundwerten.

8. Aussagesicherheit

Im statistischen Sinne werden keine Aussagen zur Aussagesicherheit gemacht. Die Flächenrepräsentanzanalyse hat aber zum Ziel, nur Einheiten (Bodenausgangsgestein, Landnutzung) mit Hintergrundwerten zu belegen, die durch vorhandene Profilinformatoren mindestens ausreichend repräsentiert werden.

9. Einsatz im Vollzug

Hintergrundwerte können zur Beurteilung eines Stoffgehaltes im Boden bzw. einer Bodenbelastung unter Berücksichtigung der entsprechenden Bezugsgrößen genutzt werden. Im einzelnen werden Hintergrundwerte insbesondere bei folgenden Fragestellungen des Bodenschutzes herangezogen:

1. Beschreibung des stoffbezogenen Bodenzustands
2. Bewertung von vorhandenen Bodenbelastungen
3. Ableitung von Beurteilungskriterien
4. Boden-Vorsorge (§12 UVPG, § 10 BBodSchV i.V.m. § 9 Abs. 1 Nr. 2)
5. Bodenwerte für die Verwertung von Reststoffen und Bodenaushub
6. Ableitung maximaler Immissionswerte (Maximale Immissionskonzentration, -dosis, -rate)
7. Statistische Zwecke (Umweltmonitoring, Boden-Dauerbeobachtung, umweltstatistische Berichterstattung)
8. Beurteilung von Bodenbelastungen für den gebietsbezogenen Bodenschutz (BauGB §5 Abs. 3 und §9 Abs. 5, §21 BBodSchG)

10. Bearbeitungsstand

Ausweisung von 90% der Fläche Deutschlands mit Hintergrundwerten für Schwermetalle in Oberböden; 47% der Landesfläche Niedersachsens lassen sich mit Hintergrundwerten belegen.

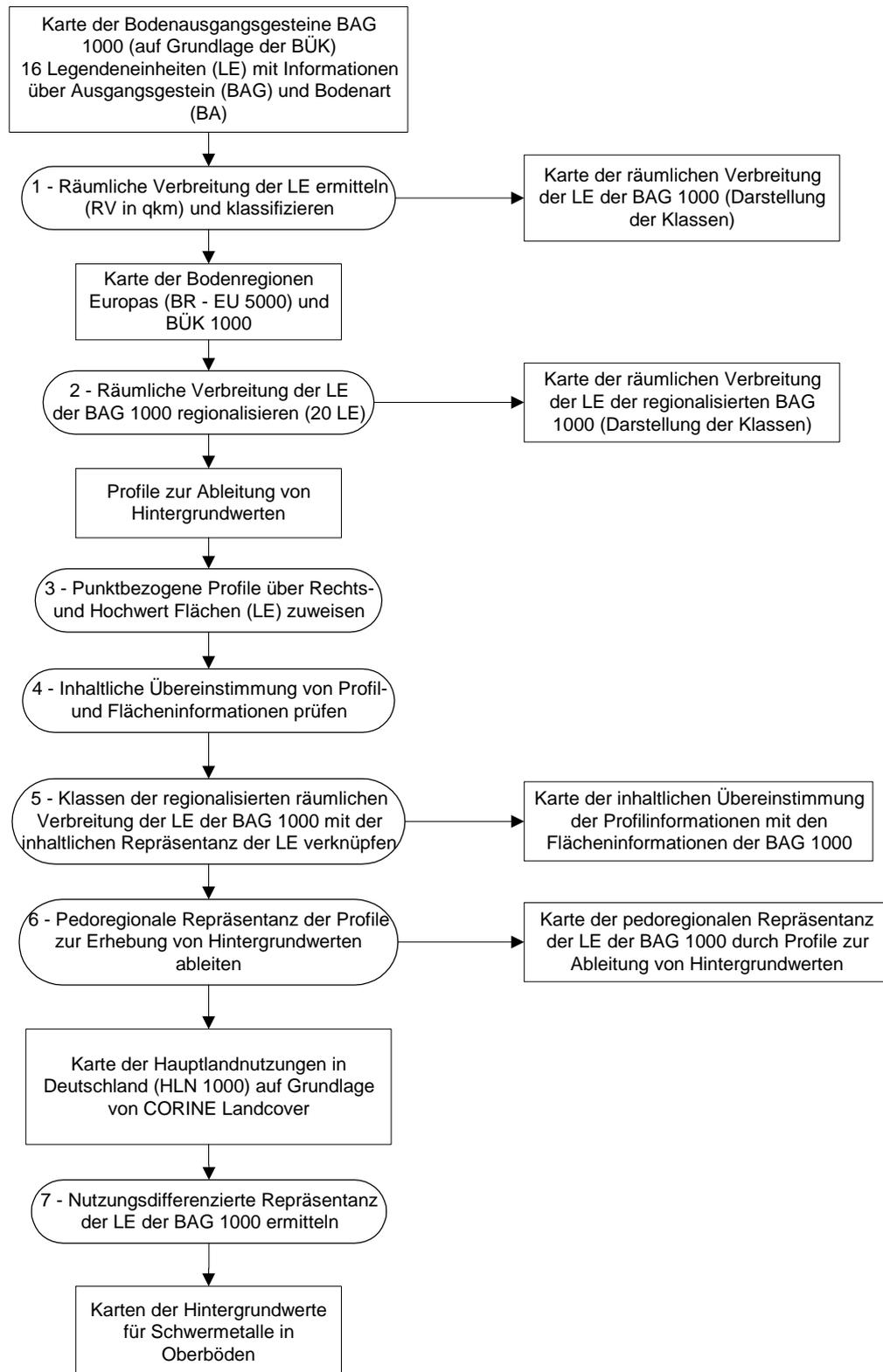


11. Quellen

- Utermann, J. et al. (1999): Methodische Anforderungen an Flächenrepräsentanz von Hintergrundwerten in Oberböden. Forschungsbericht 29771010, UBA-FB 99-066. UBA-Texte 95/99



12. Ablaufdiagramm „Prüfung der pedoregionalen Repräsentanz der Datengrundlage zur Ausweisung von Hintergrundwerten anorganischer Stoffe in Oberböden (UBA-Text)“



Legende:



-  Verfahrensschritt. Ist ein Verfahrensschritt mit einer Nummer gekennzeichnet, ist dieser in der untenstehenden Liste detailliert erläutert.
-  Objekt. Daten oder Karten, die Eingangsdaten oder das Hauptergebnis eines Verfahrensschritts darstellen.
-  Verbindung zwischen Verfahrensschritten und Objekten

Verfahrensschritte zur Prüfung der pedoregionalen Repräsentanz der Datengrundlage zur Ausweisung von Hintergrundwerten anorganischer Stoffe in Oberböden (UBA-Text):

Verfahrensschritt 1

- (1) Inhalt:** Die 16 Legendeneinheiten (LE: Bodenausgangsgesteine) der BAG 1000 werden im Hinblick auf ihre räumliche Verbreitung (RV) bewertet. Hintergrund ist die Überlegung, dass mit zunehmender Verbreitung der LE über beispielsweise das Gebiet Deutschlands die für eine hinreichende Repräsentanz erforderliche Anzahl an Profilen steigen muss, um mutmaßliche großräumige Unterschiede in der Ubiquität der anthropogenen Stoffverteilung zu berücksichtigen.
- (2) Eingangsdaten:** Karte der Bodenausgangsgesteine BAG 1000 (1:1000000): 16 Legendeneinheiten (LE) mit Informationen über Ausgangsgestein (BAG) und Bodenart (BA)
- (3) Methodik:** Über jede LE der BAG 1000 wird ein Vieleck gelegt, welches die auftretenden Teilflächen der LE umspannt. Die Fläche als Maß für die Räumliche Verbreitung RV dieses umspannenden Vielecks entspricht der maximalen räumlichen Verbreitung einer LE. Die Bewertung der RV bezieht sich immer auf ein definiertes Kartenwerk, d.h. es wird immer eine relative Bewertung der LE eines Maßstabs/Kartenwerks durchgeführt. Es wird eine dreistufige Bewertung vorgenommen (drei Bewertungsklassen BW.-Kl.):
- $RV < 100.000 \text{ km}^2$: BW.-Kl 1: geringe räumliche Verbreitung
 - $RV 100.000 - 300.000 \text{ km}^2$: BW.-Kl. 2: mittlere räumliche Verbreitung
 - $RV > 300.000 \text{ km}^2$: BW.-Kl. 3: hohe räumliche Verbreitung

Verfahrensschritt 2

- (1) Inhalt:** Das Konzept der Regionalisierung der LE der BAG 1000 erlaubt es, die räumlich weit verbreiteten LE des betrachteten Kartenwerks auf unterschiedlichen Niveaus räumlich zu differenzieren. Damit können die mit Hintergrundwerten zu belegenden Gruppen der BAG so weit regionalisiert werden, bis sie als räumlich gering verbreitet zu bewerten sind.
- (2) Eingangsdaten:** Karte der Bodenregionen Europas (BR – EU 5000 mit dem Maßstab 1:5000000), die unterschiedliche Bodenregionen und Hauptklimabereiche ausweist. Bodenübersichtskarte BÜK 1000.



- (3) Methodik:** Die Bodenregionen der BR – EU 5000 sind 4 Hauptklimabereichen zugeordnet, die ihrerseits in 19 Gebiete unterschiedlicher Klimatypen gegliedert sind. Der Bereich Deutschlands ist in der BR – EU 5000 durch 31 Bodenregionen Europas gegliedert, die 4 der Klimatypen-Gebiete zuzuordnen sind. Die Grenzen der Klimatypen-Gebiete werden mit den Grenzen der 12 Bodenregionen der BÜK 1000 abgeglichen. Die räumlich hoch verbreiteten Bodenausgangsgesteine der BAG 1000 werden so zunächst regional differenziert. Danach liegen nur noch LE der BW.-Kl. 1 und 2 vor. Die so entstandenen 23 LE der regionalisierten BAG 1000 werden inhaltlich mit Bodenartengruppen belegt (Relativer Anteil in % der Bodenartengruppen an den Legendeneinheiten der BAG 1000).

Verfahrensschritt 3

- (1) Inhalt:** Flächenbezug der Profile herstellen.
(2) Eingangsdaten: Profildaten (Rechts- und Hochwert)
(3) Methodik: Profile unter ihrem konkreten Koordinatenbezug den Flächen (LE) der BAG 1000 zuordnen.

Verfahrensschritt 4

- (1) Inhalt:** Prüfung der inhaltlichen Übereinstimmung von Profil- und Flächen-daten bezogen auf das Bodenausgangsgestein und die Bodenart.
(2) Eingangsdaten: LE der regionalisierten BAG 1000, Profildaten
(3) Methodik: Als Ergebnis des Vergleichs lässt sich den Profilen eines der folgenden drei Attribute zuordnen:
- BAG + BA: Profil entspricht Bodenausgangsgestein (BAG) und einer der in der LE der BAG 1000 vorkommenden Bodenarten (BA)
 - BAG: Profil entspricht nur Bodenausgangsgestein (BAG) der LE der BAG 1000
 - Weder BAG noch BA: Profil entspricht weder Bodenausgangsgestein (BAG) noch Bodenart (BA) der LE der BAG 1000

Für diejenigen LE, in denen mehr als 20 Profile sowohl das Bodenausgangsgestein als auch einer der in der LE vorkommenden Bodenartengruppen richtig treffen, wird für die weitere Bewertung der inhaltlichen Repräsentanz der LE ein Verteilungsindex (VI) berechnet. Hierzu wird geprüft, inwieweit die Bodenarten der Profile zur Ableitung von Hintergrundwerten das LE-spezifische Spektrum von Bodenartengruppen im Oberboden widerspiegeln. Der Verteilungsindex gibt an, zu wieviel Prozent die Verteilung von Bodenartengruppen der Profile der charakteristischen Bodenartengruppen-Verteilung der LE entspricht. Für die Bewertung der inhaltlichen Repräsentanz von Profil- und Flächeninformationen be-



zogen auf das Bodenausgangsgestein und die Bodenart wurden die folgenden 4 Bewertungsklassen aufgestellt:

- BW.-Kl 1: hohe inhaltliche Repräsentanz (BAG+BA ($n \geq 20$), Verteilungsindex $\geq 0,75$)
- BW.-Kl 2: mittlere inhaltliche Repräsentanz (BAG+BA ($n \geq 20$), Verteilungsindex $\geq 0,50$ und $< 0,75$)
- BW.-Kl 3: geringe inhaltliche Repräsentanz (BAG+BA ($n \geq 20$), Verteilungsindex $< 0,50$)
- BW.-Kl. 4: sehr geringe inhaltliche Repräsentanz (alle anderen Fälle mit $n < 20$)

Verfahrensschritt 5

- (1) **Inhalt:** Verschneidung der Bewertungsergebnisse zur räumlichen Verbreitung der LE der BAG 1000 und der inhaltlichen Repräsentanz der Profile bezogen auf BAG-Gruppe und Bodenart.
- (2) **Eingangsdaten:** Räumliche Verbreitung der Legendeneinheiten der BAG 1000. Inhaltliche Repräsentanz der Legendeneinheiten der BAG 1000.
- (3) **Methodik** Die jeder LE für beide Teilaspekte der Repräsentanzbetrachtung zugewiesenen, ordinal skalierten Bewertungsklassen werden verknüpft.

Verfahrensschritt 6

- (1) **Inhalt:** Pedoregionale Repräsentanz der LE der BAG 1000 durch Profile.
- (2) **Eingangsdaten:** Verknüpfungsmatrix aus den Bewertungsklassen zur räumlichen Verbreitung und inhaltlichen Repräsentanz. Kartenwerke: Räumliche Verbreitung der Legendeneinheiten der regionalisierten BAG 1000 und Inhaltliche Übereinstimmung der Profilinformatoren mit Flächeninformationen der BAG 1000.
- (3) **Methodik:** Die pedoregionale Repräsentanz der Hintergrundwerte wird dreistufig ordinal skaliert mit den folgenden Bewertungsklassen ausgewiesen:
- BW.-Kl. 1: hoch (repräsentativ)
 - BW.-Kl. 2: mittel (bedingt repräsentativ)
 - BW.-Kl. 3 : gering (unzureichend repräsentativ)

Verfahrensschritt 7

- (1) **Inhalt:** Prüfung der nutzungsdifferenzierten Repräsentanz der regionalisierten LE der BAG 1000. Berücksichtigte Nutzungsarten sind Acker, Grünland und Forst sowie Sonstige.
- (2) **Eingangsdaten:** BAG 1000 und HLN 1000 (Hauptlandnutzung 1: 1000000, Grundlage: CORINE Land Cover)
- (3) **Methodik:** Die Flächeninformationen „Bodenausgangsgestein“ und „Hauptlandnutzung“ werden miteinander verschnitten und die entsprechenden Landnutzungsanteile für jede BAG-Gruppe ausgewiesen. Bewer-



tungsrelevant und damit vordringlich mit Hintergrundwerten zu belegen sind die Landnutzungsanteile mit mehr als 20 Flächen-%. Die Anzahl der nutzungsdifferenziert zu belegenden LE steigt damit.



Steckbrief Baden - Württemberg

1. Ziel

Abgrenzung von Untersuchungsgebieten mit naturbedingt oder großflächig siedlungsbedingt erhöhten Schadstoffgehalten.

2. Untersuchungsparameter

Als Untersuchungsparameter werden Schwermetalle, PCB, PAK, Dioxine und Pestizide betrachtet. Das Verfahren wird am Beispiel des überwiegend geogenen Schwermetalls Nickel getestet und gilt nur für dieses.

3. Anwendungsbereich

Der Anwendungsbereich ist nicht beschränkt.

4. Angewandeter Maßstab

Die Methode zur Generierung der Bodenbelastungskarten ist generell maßstabs-unabhängig. Da aber in der Regel mit Kartengrundlagen im Maßstab von 1:50.000 (Bsp. Bodenkarte) gearbeitet wird, sind die Ergebnisse auf diesen Maßstabsbereich festgelegt.

5. Datengrundlage

Datengrundlage bilden die punktbezogenen Messdaten der **Untersuchungsparameter** in Oberböden der Nutzungen Siedlungen, Acker, Grünland, Wald, Hopfen, Wein, Obstanbau, sowie sonstiger Nutzungen. Angaben zur Bodennutzung zum Zeitpunkt der Probenahme, Lage im Überschwemmungsgebiet, Ausgangssubstrat der Bodenbildung, Entnahmetiefe, Hinweis auf mögliche Belastungsursachen, 6-stellige Gauß-Krüger-Koordinate, Probenahme- und Analysemethoden sind hierbei notwendig.

Zudem werden flächenbezogene Daten der Einflussfaktoren benötigt. Die **Karte der Bodennutzung** wird anhand von ATKIS-Daten (Amtlich-Topographisches-Kartographisches Informationssystem) gewonnen. Als Bodennutzungen werden die Typen Siedlungen, Acker, Grünland, Wald, Hopfen, Wein, Obstanbau, sowie sonstige Nutzungen definiert. Zur Bestimmung der geogenen Grundgehalte wird die Bodenkarte BK 25 und die aggregierte Bodenkarte der BÜK 200 mit den entsprechenden Angaben zu den Schwermetallgrundgehalten ausgewertet. Die Bildung homogener Raumeinheiten erfolgt durch Überlagerung von analogen Karten der Bodenkarten, Nutzungskarten und den Ergebnissen der Reliefanalyse (Scheitel, Hänge, Überschwemmungsfläche).

6. Methodenbeschreibung

Eine Beschreibung des Verfahrens zur Bestimmung der flächenhaften Bodenbelastung ist in Form eines Ablaufdiagramms mit detaillierter Beschreibung der einzelnen Verfahrensschritte im Abschnitt 12 zu finden.

7. Ergebnisse

Mit dieser Methode können verschiedene Karten erstellt werden, die unterschiedliche, für den bodenschutzrechtlichen Vollzug wichtige Aspekte der großflächigen Bodenbelastung wiedergeben. Die **Karte der standardisierten geschätzten Stoffgehalte** beschreibt die Bodenbelastung, die auf lokale oder regionale Immissionseinflüsse zurückzuführen sind. Nach Restandardisierung stellt die **Karte der geschätzten Stoffgehalte** den geschätzten, flächendeckenden Gesamtgehalt des betrachteten Stoffes dar.



8. Aussagesicherheit

Die **Karte der Krige -Varianz** lässt keine Aussage über den absoluten Fehler zu, sondern beschreibt lediglich den relativen Fehler auf Grundlage der Messnetzkonfiguration und des Variogramms.

9. Einsatz im Vollzug

1. Ermittlung und Abgrenzung von Gebieten mit „geogen / naturbedingt oder großflächig siedlungsbedingt“ erhöhten Stoffgehalten nach § 8 Abs. 2 Nr. 1 BBodSchG in Verbindung mit § 9 Abs. 2 und 3, § 12 Abs. 10 sowie Anhang 2 Nr. 4.1 BBodSchV.

10. Bearbeitungsstand

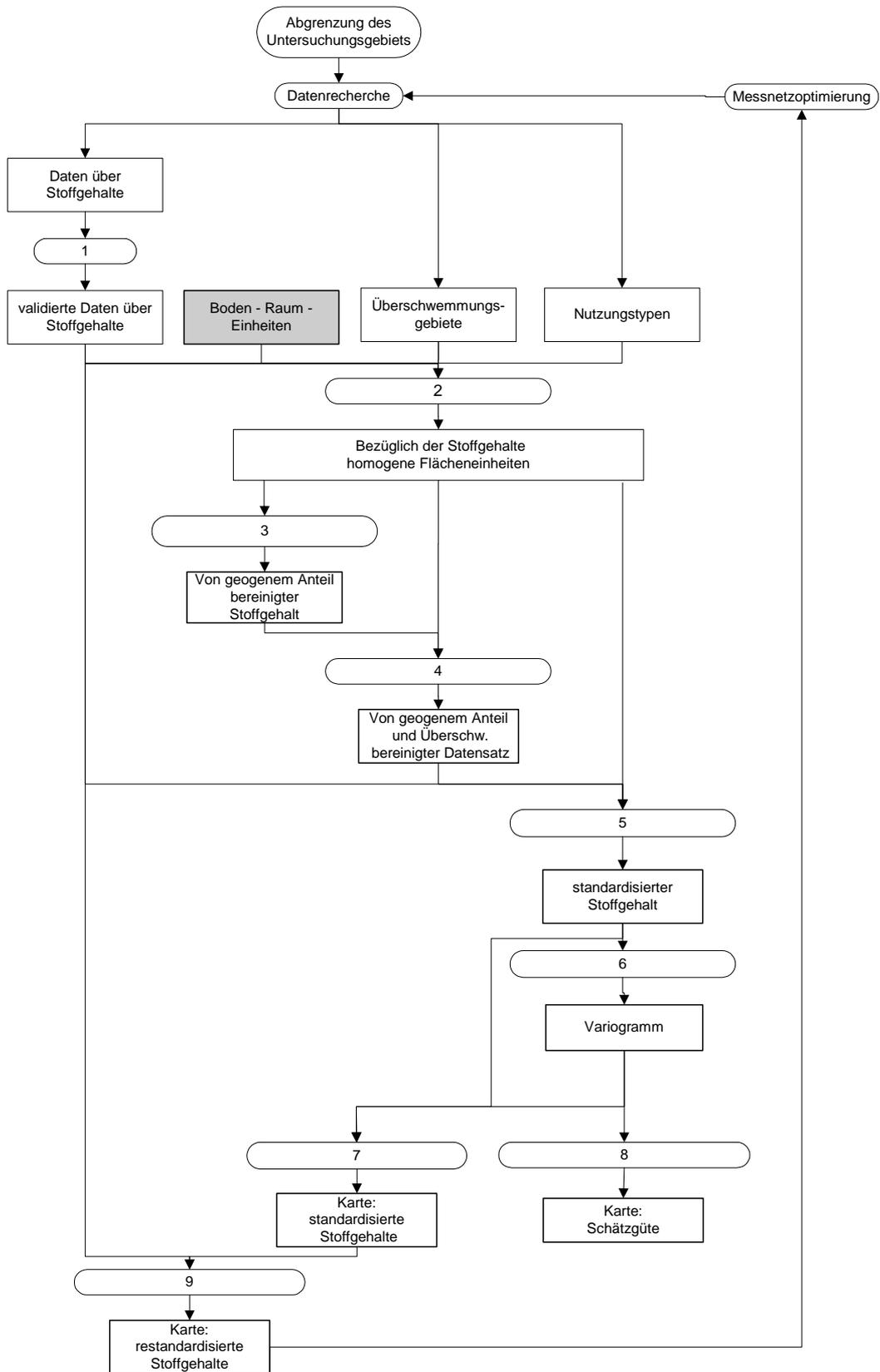
Die Untersuchungen beschränken sich ausschließlich auf den Rhein-Neckar-Raum
(Blatt L 6718)

11. Quellen

- Murschel , Borkowski 2001: Vom Punkt zur Fläche Teil 2. Auswertung Workshop „Flächenhafte Darstellung punktbezogener Daten über Stoffgehalte in Böden“ Auftraggeber. Ministerium für Umwelt und Verkehr Baden-Württemberg, August 2001.

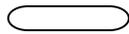


12. Ablaufdiagramm





Legende:



Verfahrensschritt. Ist ein Verfahrensschritt mit einer Nummer gekennzeichnet, ist dieser in der untenstehenden Liste detailliert erläutert. Die Verfahrensschritte, die grau unterlegt sind, beziehen sich ausschließlich auf die Anwendung des Verfahrens auf Schwermetalle.



Objekt. Daten oder Karten, die Eingangsdaten oder das Hauptergebnis eines Verfahrensschritts darstellen. Die Objekte, die grau unterlegt sind, beziehen sich ausschließlich auf die Anwendung des Verfahrens auf Schwermetalle.



Verbindung zwischen Verfahrensschritten und Objekten.

Verfahrensschritte

Verfahrensschritt 1

- (1) **Inhalt:** Validierung der Daten der Stoffgehalte bezüglich ihrer Metadaten
In diesem Verfahrensschritt wird überprüft, ob die für die weitere Auswertung der Messwerte notwendigen Metainformationen bekannt sind. Es werden nur die Datensätze in die weiteren Untersuchungen einbezogen, von denen bestimmte Mindestangaben vorliegen.
- (2) **Eingangsdaten:** Daten der Stoffgehalte im Oberboden
- (3) **Methodik:** Die Messwerte des betrachteten Stoffgehalts werden hinsichtlich der vorhandenen Metainformationen überprüft. Durch diese Validierung wird der Datenbestand in der Regel reduziert.

Verfahrensschritt 2

- (1) **Inhalt:** Bildung homogener Flächeneinheiten, die hinsichtlich bodenkundlicher Eigenschaften, der Landnutzung und der Lage weitgehend einheitlich sind (Klassifikation). Bestimmung geogener Hintergrundwerte
- (2) **Eingangsdaten:** Stoffgehalt im Oberboden, Nutzungsarten, Überschwemmungseinfluss, Bodenkarte.
- (3) **Methodik:** Die Kartiereinheiten der BÜK 200 werden mit Hilfe der Nutzungen und der Lage zu Untereinheiten disaggregiert. Die Bildung homogener Raumeinheiten erfolgt durch die Überlagerung von Nutzungs- und Bodenkarte unter Einbeziehung der Kenntnisse über das Relief. Durch die Auswertungen der Punktdaten in den homogenen Raumeinheiten können jeder homogenen Raumeinheit geogene Hintergrundwerte zugewiesen werden.

Verfahrensschritt 3

- (1) **Inhalt:** **Standardisierung** geogener Grundgehalt
- (2) **Eingangsdaten:** Stoffgehalt im Oberboden außerhalb von Auen, Geologische Karte, BÜK 200

**(3) Methodik:**

Um den geogenen Grundgehalt zu bestimmen, wird zunächst die geologische Karte mit der BÜK 200 verschnitten und die Flächenanteile der geologischen Substrate innerhalb einer BÜK Kartiereinheit bestimmt. Durch Multiplikation der Flächenanteile mit den Stoffgehalten erhält man einen mittleren Gehalt für die Kartiereinheit.

Formel für die Standardisierung des geogenen Anteils:

$$S_G = S - G$$

S_G = vom Einfluss des geogenen Anteils bereinigter Messwert

S = Stoffgehalt des Bodens

G = geogen bedingter Stoffgehalt

Verfahrensschritt 4**(1) Inhalt:**

Standardisierung der Überschwemmung

(2) Eingangsdaten:

Stoffgehalt im Oberboden, um geogenen Anteil bereinigter Stoffgehalt im Oberboden, Informationen über das Relief

(3) Methodik:

Es werden die Mediane der vom geogenen Grundgehalt bereinigten Messwerte außerhalb und innerhalb der Überschwemmungsgebiete berechnet.

Das Verhältnis zwischen diesen beiden Medianen ist der Korrekturfaktor, mit dem alle Daten, die innerhalb von Überschwemmungsgebieten gemessen wurden, multipliziert werden.

Formel für die Standardisierungsbereinigung der Überschwemmung:

$$S_{G\backslash\ddot{U}F} = S_G * \ddot{U}F$$

$\ddot{U}F$ = Überschwemmungsfaktor

S_G = vom geogenen Anteil bereinigter Stoffgehalt

$S_{G\backslash\ddot{U}F}$ = vom geogenen Anteil und der Überschwemmung bereinigter Stoffgehalt

Formel für den Überschwemmungsfaktor:

$$\ddot{U}F = \begin{cases} 1 & \text{falls Messwert außerhalb } \ddot{U}G \\ \frac{\text{geom. Mittel der Daten ausserhalb } \ddot{U}G}{\text{geom. Mittel der Daten innerhalb } \ddot{U}G} & \text{falls Messwert in } \ddot{U}G \end{cases}$$



Verfahrensschritt 5

- (1) **Inhalt:** Standardisierung Landnutzung
- (2) **Eingangsdaten:** Die um die Einflüsse des geogenen Grundgehaltes und der Überschwemmung bereinigten Messwerte, Nutzungsarten
- (3) **Methodik:** Für jede Nutzungsart wird der Median der Stoffgehalte, die außerhalb von Überschwemmungsgebieten erhoben wurden, berechnet. Um die Werte auf eine Nutzungsart (z.B. Grünland) zu standardisieren, wird jeweils das Verhältnis des Medians der Nutzungsart Grünland zu einzelnen Medianen der anderen Landnutzungsklassen berechnet und mit dem aus dem Verfahrensschritt 4 hervorgehenden Kennwert $S_{G\backslash\dot{U}F}$ multipliziert.

Formel für Standardisierung Landnutzung:

$$S_{G\backslash\dot{U}F\backslash L} = S_{G\backslash\dot{U}F} * NF$$

$S_{G\backslash\dot{U}F\backslash L}$ = vom geogenen Anteil, dem Überschwemmungs- und Landnutzungseinfluss bereinigter Stoffgehalt

$S_{G\backslash\dot{U}F}$ = vom geogenen Anteil und der Überschwemmung bereinigter Stoffgehalt

NF = Nutzungsfaktor für Nutzungsklasse

Formel für Nutzungsfaktor:

$$NF = \frac{\text{geom. Mittel der bereinigten}^1 \text{ Stoffgehalte aus der Nutzungsklasse Grünland}}{\text{geom. Mittel der bereinigten}^1 \text{ Stoffgehalte aus der Nutzungsklasse X}}$$

1) vom geogenen Grundgehalt und der Überschwemmung

Verfahrensschritt 6

- (1) **Inhalt:** Berechnung des Variogramms der standardisierten Werte
- (2) **Eingangsdaten:** Standardisierte Werte der Stoffgehalte
- (3) **Methodik:** Es wird automatisiert das experimentelle Variogramm der standardisierten Werte der Stoffgehalte bestimmt (VARIOWIN) und dieses automatisiert dem theoretischen Variogramm (sphärischer Variogrammtyp) angepasst.

Verfahrensschritt 7

- (1) **Inhalt:** Ordinary Kriging der standardisierten Daten
- (2) **Eingangsdaten:** Standardisierte Werte der Stoffgehalte



- (3) **Methodik:** Die standardisierten Werte der Stoffgehalte werden mit Hilfe des Ordinary Kriging Verfahrens interpoliert. So entsteht die Karte der flächenhaften Verteilung der bereinigten Daten ($S_{I(G,ÜF,NF)}$).

Verfahrensschritt 8

- (1) **Inhalt:** Berechnung der Krige-Varianz der standardisierten Daten. Erstellung der Ergebniskarte „Schätzgüte“.
- (2) **Eingangsdaten:** Standardisierte Werte der Stoffgehalte
- (3) **Methodik:** Eine Karte der Schätzgüte durch die Krige-Varianz wird erstellt. Sie zeigt für jede Rasterzelle den Unterschied zwischen berechneter und vorhergesagter Varianz.

Verfahrensschritt 9

- (1) **Inhalt:** Restandardisierung. Erstellung der Ergebniskarte „geschätzte Stoffgehalte“
- (2) **Eingangsdaten:** interpolierte bereinigte Stoffgehalte, Nutzungsarten, Relief, geogener Grundgehalt
- (3) **Methodik:** Die interpolierten standardisierten Stoffgehalte werden nach folgender Formel restandardisiert:

Formel für den geschätzten Stoffgehalt:

$$S_I = (S_{I(G,ÜF,NF)} \setminus NF * ÜF) + G$$

S_I =	restandardisierter Wert des Stoffgehalts
G =	geogener Grundgehalt
$ÜF$ =	Überschwemmungsfaktor
$S_{I(G,ÜF,NF)}$ =	interpolierte (standardisierte) Werteoberfläche
NF =	Landnutzungsfaktor



Steckbrief - Bayern - Immissionbezogene Bodenbelastung -

1. Ziel

In Bayern wurden und werden eine Reihe von Interpolationsverfahren zur flächendeckenden Analyse der Schadstoffimmissionswirkung auf mineralische Oberböden und Auflagenhorizonte untersucht. Ziel ist, ubiquitär atmogene Schadstoffeinträge flächendeckend zu beschreiben.

Diese Verfahren sind bisher nicht als Verfahren für den bodenschutzrechtlichen Vollzug beschrieben.

2. Untersuchungsparameter

Als Untersuchungsparameter wird die Stoffgruppe der überwiegend immissionsgetragenen persistenten Stoffe (Cd, Pb, PCB, PCDD, u.a.) in mg/qm betrachtet.

3. Anwendungsbereich

Es werden Waldböden betrachtet, aufgeteilt in Auflagehorizonten und in mineralische Oberböden.

4. Angewandeter Maßstab

Es wird der Maßstab 1:100.000 bis 1:500.000 betrachtet.

5. Datengrundlage

Datengrundlage sind Punktinformationen (Messungen) über die zu schätzende Größe (primäre Parameter) sowie unter Umständen (je nach verwendeter Interpolationsmethode) flächendeckend vorliegende Hilfs-/Zusatzvariablen wie zum Beispiel: mittlere Jahresniederschlagssumme oder digitale Karten bzgl. Geologie/Boden-Landschaftseinheiten. Letztere müssen sowohl für alle Mess- als auch alle Schätzpunkte vorliegen, d.h. die Rasterweite/-geometrie muss identisch zum Schätzraster sein.

6. Methodenbeschreibung

Es wurden verschiedene Kriging-Varianten zur Ermittlung des Flächenbezugs von Stoffkonzentrationen getestet. Zu ihnen zählen das Ordinary Kriging und das Indikator Kriging als Verfahren, in welche keine Zusatzinformationen eingehen, sowie das Kriging mit externer Drift und das Kriging mit lokalen Mittelwerten als Beispiele für Verfahren, die Flächeninformationen berücksichtigen. Entsprechende Verfahrensbeschreibungen finden sich im Abschnitt 12.

7. Ergebnisse

Die **Karte der geschätzten Stoffkonzentrationen** stellt flächendeckend die interpolierten Stoffkonzentrationen dar. In den **Perzentilkarten** sind flächendeckend die geschätzten Perzentile (50. und das 90. Perzentil) der lokalen Verteilungen der Stoffkonzentrationen aufgetragen. Die **Karte der Überschreitungswahrscheinlichkeit** für verschiedene Grenzwerte beschreibt die Wahrscheinlichkeit, dass die lokale Stoffkonzentration oberhalb des betrachteten Grenzwertes liegt. Die Erstellung der beiden letztgenannten ist ebenso wie eine **Karte der bedingten Varianz** nur möglich, wenn das Indikator Kriging verwendet wird. Je nach verwendeter Methode sind unterschiedliche Kartendarstellungen möglich.



8. Aussagesicherheit

Werden das Ordinary Kriging Verfahren, das Simple Kriging mit External Drift oder das Simple Kriging mit lokalen Mittelwerten verwendet, so können Angaben über die Aussagesicherheit durch die Kriging-Varianz lediglich auf die Messnetzkonfiguration bezogen werden. Die bei Verwendung des Indikator Kriging Verfahrens mögliche Berechnung der bedingten Varianz berücksichtigt auch die Variabilität der gemessenen Werte.

9. Einsatz im Vollzug

Karten dienen als wissenschaftliche Grundlagen und nicht als unmittelbare Grundlage für den Vollzug.

10. Bearbeitungsstand

Es wurden verschiedene Testrechnungen durchgeführt.

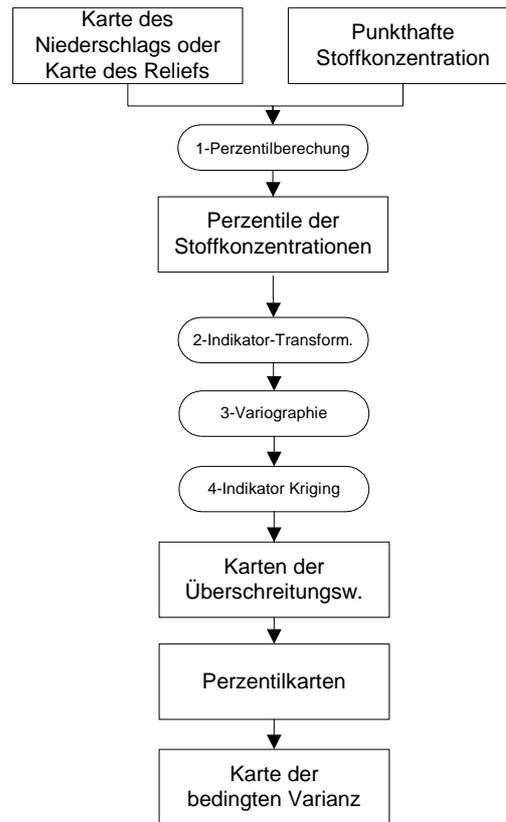
11. Quellen

- Mailkontakt

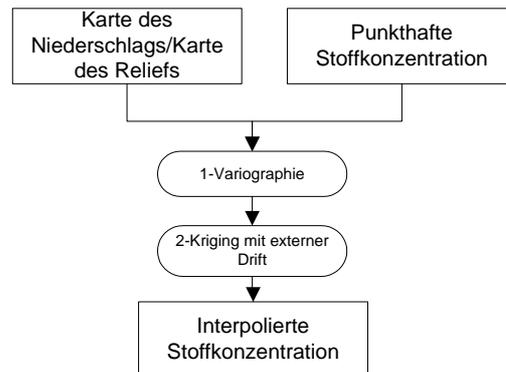


12. Ablaufdiagramme

Ablaufdiagramm Auflagehorizonte Methode 1

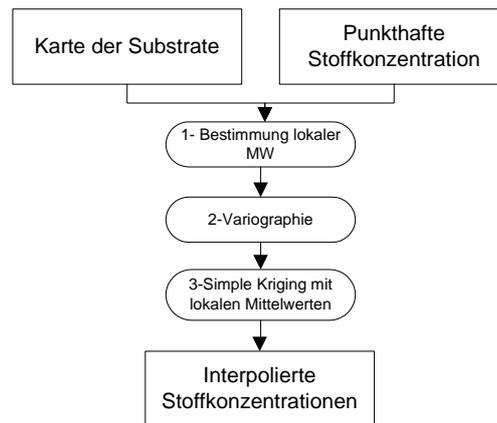


Ablaufdiagramm Auflagehorizonte Methode 2

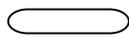




Ablaufdiagramm Mineralische Oberböden



Legende:



Verfahrensschritt. Ist ein Verfahrensschritt mit einer Nummer gekennzeichnet, ist dieser in der untenstehenden Liste detailliert erläutert.



Objekt. Daten oder Karten, die Eingangsdaten oder das Hauptergebnis eines Verfahrensschritts darstellen.



Verbindung zwischen Verfahrensschritten und Objekten.

Verfahrensschritte – Auflagehorizonte Methode 1: Indikator Kriging

Verfahrensschritt 1

- (1) **Inhalt:** Festlegung von Schwellenwerten (hier: Perzentile der Ausgangsdaten)
- (2) **Eingangsdaten:** Daten der Stoffkonzentrationen
- (3) **Methodik:** Es werden das 10., 20., 30., 50., 70., 80. und das 90. Perzentil der Verteilung der Schwermetall-Stoffkonzentrationen berechnet. Es sind aber auch andere Schwellenwert möglich. Die Anzahl sollte zwischen 5 und 15 liegen.

Hinweis:

Wenn die Daten räumlich geclustert vorliegen müssen die cdf-Werte (Summenhäufigkeiten) der o.g. Schwellenwerte für das endgültige Indikator Kriging (Schritt 4) unbedingt korrigiert werden d.h. in entclusterte cdf-Werte umgerechnet werden (Methoden z. B. Zellen- bzw. Polygon-Entclustering).

Verfahrensschritt 2

- (1) **Inhalt:** Transformation der Stoffkonzentrationen in binäre „harte“ Indikatorwerte
- (2) **Eingangsdaten:** Daten der Stoffkonzentrationen



- (3) Methodik:** Für jede Beprobungsstelle wird die Wahrscheinlichkeit berechnet, dass der gemessene Wert den jeweiligen Schwellenwert über-/unterschreitet (hier: 10./20./30./40./50./60./70./80./90. Perzentil). Diese ist 1, falls der Wert an der Beprobungsstelle kleiner als das jeweilige Perzentil ist und sonst 0.

Verfahrensschritt 3

- (1) Inhalt:** Bestimmung der Indikator-Variogramme
(2) Eingangsdaten: „harte“ Indikatordaten (aus Schritt 2)
(3) Methodik: Für jeden Schwellenwert wird das Variogramm der entsprechenden Indikator-Werte berechnet und untersucht, ob die Struktur der räumlichen Abhängigkeiten richtungsabhängig ist. Die Erstellung der Variogramme erfolgt interaktiv mit der Software VarioWin 2.2. Hinweis: Bei der Modellanpassung dürfen nur Übergangsmodelle (d.h. Funktionen mit sill) angepasst werden.

Verfahrensschritt 4

- (1) Inhalt:** Indikator Kriging, evtl. Median Indikator Kriging (wenn alle Schwellenwert ein ähnliches Variogramm aufweisen)
(2) Eingangsdaten: „harte“ Indikatordaten (aus Schritt 2)
(3) Methodik: Für jeden Schwellenwert wird mit Hilfe des Indikator Kriging seine flächendeckende Überschreitungswahrscheinlichkeit berechnet. Dieses Verfahren wird konkret mit der Software WinGslib 1.3.1 durchgeführt.

Hinweis:

Die anhand des Indikator Kriging für den jeweiligen Schwellenwert berechneten ccdf-Werte müssen „nachbehandelt“ werden (z. B. order relation correction). Für die flächenhafte Darstellung der Erwartungs- bzw. Mittelwerte und Perzentile der Schätzung müssen die ccdf-Werte (der einzelnen Schwellenwerte) interpoliert bzw. extrapoliert werden. Wahlweise können dann auch Überschreitungswahrscheinlichkeiten beliebiger Werte oder die bedingten Varianzen flächenhaft dargestellt werden.

Hinweis: Die Auswahl der Verfahrensschritte zur Inter-/Extrapolation ist problematisch.

Verfahrensschritte – Auflagehorizonte Methode 2: Kriging mit externer Drift

Verfahrensschritt 1

- (1) Inhalt:** Bestimmung des Variogramms für das Kriging mit externer Drift
(2) Eingangsdaten: Daten der Stoffkonzentrationen
(3) Methodik: Es wird das Variogramm der Daten der Stoffkonzentrationen berechnet. Hinweis: Die Variogrammberechnung sollte mit Daten erfolgen, deren Variabilität nur gering durch die Sekundärvariable beeinflusst wird.



Verfahrensschritt 2

- (1) **Inhalt:** Kriging mit externer Drift
- (2) **Eingangsdaten:** Daten der Stoffkonzentrationen, Daten der Hilfs-/Sekundärvariable (z. B. Karte des Reliefs oder Karte des Niederschlags). Letztere müssen sowohl für alle Mess- als auch alle Schätzpunkte vorliegen, d.h. die Rasterweite/-geometrie muss identisch zum SchätZRaster sein !)
- (3) **Methodik:** Mit Hilfe des Kriging mit externer Drift mit Bezug auf Niederschlag oder Relief wird die flächendeckende Verteilung der betrachteten Stoffkonzentration berechnet.

Verfahrensschritte – Mineralischer Oberboden Kriging mit lokalen Mittelwerten

Verfahrensschritt 1

- (1) **Inhalt:** Bestimmung lokaler Mittelwerte und Residuen
- (2) **Eingangsdaten:** Daten der Stoffkonzentrationen, Karte der Substrate
- (3) **Methodik:** Da die Verteilungen der Stoffkonzentrationen nicht symmetrisch sind, wird pro Substrat der Median der Stoffkonzentrationen berechnet. Die lokalen Mittelwerte/Mediane werden von den Messwerten abgezogen => Residuen. Hinweis: Bei geclusterten Daten sollten diese entclustert werden (siehe Indikator Kriging), ansonsten sind die Lageparameter verzerrt.

Verfahrensschritt 2

- (1) **Inhalt:** Bestimmung des Variogramms der Residuen (!!) für das Kriging mit lokalen Mittelwerten
- (2) **Eingangsdaten:** Residuen der Stoffkonzentrationen
- (3) **Methodik:** Es wird das Variogramm der Daten der Stoffkonzentrationen subtrahiert vom lokalen Median berechnet.

Verfahrensschritt 3

- (1) **Inhalt:** (Simple) Kriging mit lokalen Mittelwerten
- (2) **Eingangsdaten:** Daten der Stoffkonzentrationen, Raster der lokalen Mittelwerte. Letztere müssen sowohl für alle Mess- als auch alle Schätzpunkte vorliegen, d.h. die Rasterweite/-geometrie muss identisch zum SchätZRaster sein !)
- (3) **Methodik:** Mit Hilfe des Simple Kriging werden die Residuen interpoliert. Die lokalen Mittelwerte/Mediane werden in einem zweiten Schritt addiert. Die daraus resultierende Karte ist die Karte der interpolierten Stoffkonzentrationen. Mit WinGslib erfolgt diese Schätzung und Addition in einem Arbeitsschritt.



Steckbrief - Brandenburg - Regionalisierung von Bodenbelastung -

1. Ziel

Im Bundesland Brandenburg wurden bereits in verschiedenen Vorhaben („Optimierung der Datenerhebung für den Bodenschutz im Land Brandenburg“ (Balla et al. 1996) und „Regionalisierung von Bodenschutzdaten auf Auenstandorten des Landes Brandenburg“ (Monse et al. 1998) Methoden zur flächenbezogenen Bewertung von Bodenschutzdaten erprobt. Diese Verfahren stellen die fachliche Grundlage für das Vorhaben „Regionalisierung von Bodenbelastungen“ nach BBodSchG in Brandenburg (Monse et al. 2000) dar, in welchem sie modifiziert und weiterentwickelt werden.

Ziel des hier beschriebenen Verfahrens ist die Regionalisierung von Bodenschutzdaten in größeren Maßstäben und die Kennzeichnung von Gebieten mit schädlichen Bodenveränderungen auf objektivierter Grundlage.

2. Untersuchungsparameter

Als Untersuchungsparameter wird die Stoffgruppe der Schwermetalle in mg/qm betrachtet.

3. Anwendungsbereich

Außerhalb von Siedlungsstrukturen

4. Angewandeter Maßstab

Landesweiter Maßstab

5. Datengrundlage

Als Datengrundlage sind Bodenproben der betrachteten Schwermetalle und Landnutzungsdaten vorhanden.

6. Methodenbeschreibung

Im Abschnitt 12 befindet sich die Beschreibung des Verfahrens zur Ermittlung des Flächenbezugs von Stoffkonzentrationen.

Es werden Datentransformationen und Standardisierungen durchgeführt und das Ordinary Kriging zur Interpolation der Werteoberfläche verwendet. Als Variogrammschätzer wird ein Schätzer nach Cressie (Cressie et al. 1980) verwendet, der erhöhte Stabilität gegenüber Ausreißern besitzt.

7. Ergebnisse

Die **Karte der geschätzten Stoffkonzentrationen** stellt flächendeckend die interpolierten Absolutwerte der Stoffkonzentrationen dar.

Eine weitere Karte stellt die **Bewertung der Schätzwerte nach Perzentilbereichen von Hintergrundwerten** dar.

Es werden zudem die Karten **Schätzfehler, bewertet gemeinsam mit Schätzwert nach der Lage in Perzentilbereichen** und **Untersuchungsbedarf** erstellt.

8. Aussagesicherheit

Die Krige-Varianz lässt keine Aussagen über den absoluten Fehler der Schätzung zu, sondern beschreibt lediglich den relativen Fehler auf Grundlage der Messnetzkonfiguration und des Variogramms.



9. Einsatz im Vollzug

Das Verfahren zielt auf die Regionalisierung von Bodenschutzdaten im größeren Maßstab und die Kennzeichnung von Gebieten mit schädlichen Bodenveränderungen ab. (Genauer: Überschreitung von Vorsorgewerten für die Bodenart Sand).

10. Bearbeitungsstand

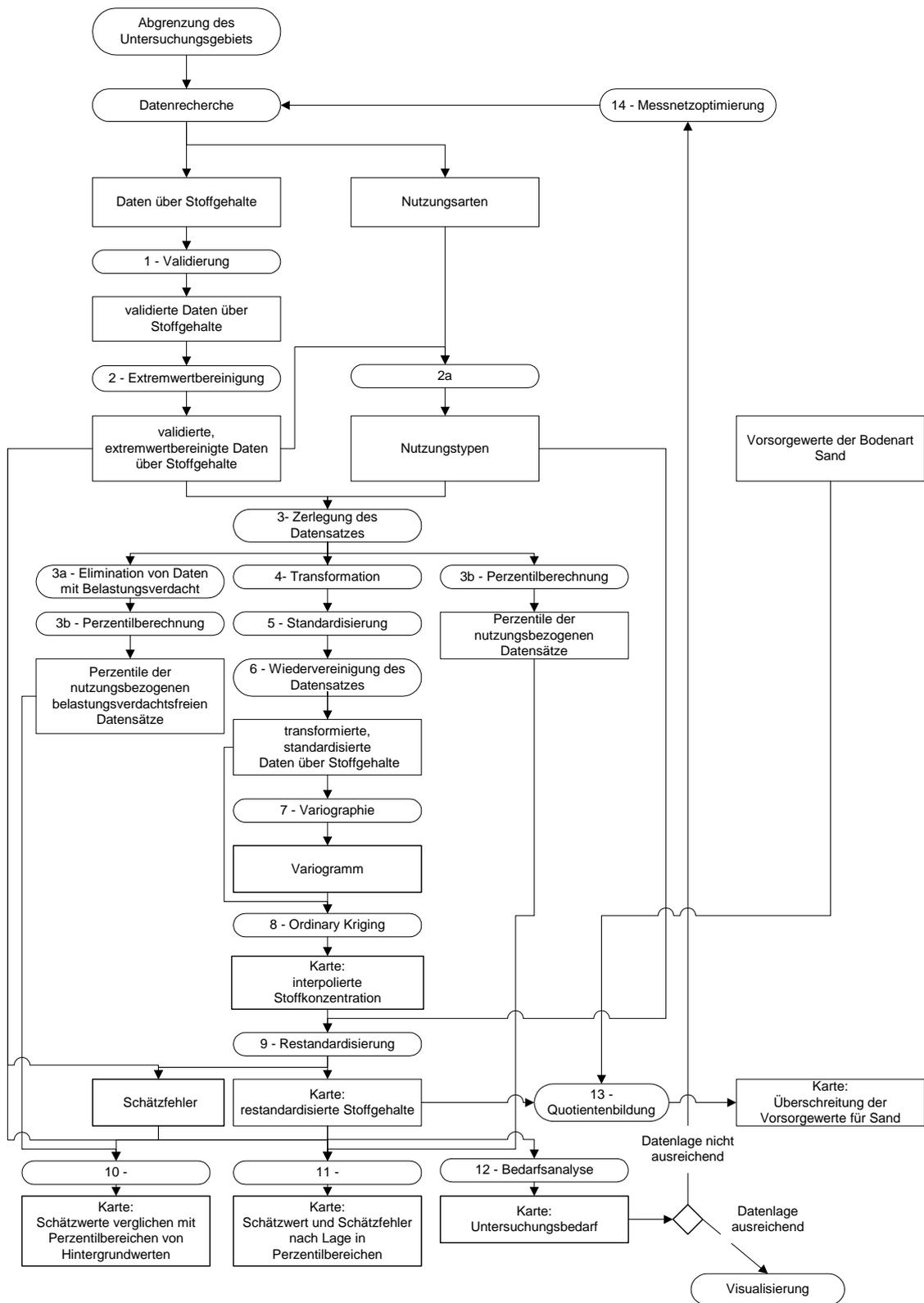
Es wurden Untersuchungen in Gebieten Brandenburgs durchgeführt.

11. Quellen

- Monse et al. (2000): „Regionalisierung von Bodenbelastungen als fachliche Grundlage für gebietsbezogene Maßnahmen nach BBodSchG in Brandenburg“. Forschungsvorhaben A4–1/98. Fachhochschule Eberswalde. Auftraggeber Landesumweltamt Brandenburg.
- Monse et al. (2000): „Methodik der Ausgrenzung von Gebieten mit erhöhten, anthropogen bedingten Schadstoffgehalten in Böden“.
- Cressie, N., D. M. Hawkins (1980): Robust estimation of the variogram. *Mathematical Geology*, 12 (2) S. 115-125
- Monse, M., J. Albert, B. Scholz (1998): Regionalisierung von Bodenschutzdaten auf Auenstandorten. Abschlussbericht zum Forschungsvorhaben A6-2/96, im Auftrag des Landesumweltamtes Brandenburg.
- Sachs, L. (1997): *Angewandte Statistik*. 8. Auflage, Springer-Verlag Berlin Heidelberg

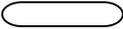


12. Ablaufdiagramm





Legende:

-  Verfahrensschritt. Ist ein Verfahrensschritt mit einer Nummer gekennzeichnet, ist dieser in der untenstehenden Liste detailliert erläutert.
-  Objekt. Daten oder Karten, die Eingangsdaten oder das Hauptergebnis eines Verfahrensschritts darstellen.
-  Verbindung zwischen Verfahrensschritten und Objekten.
-  Verzweigung.

Verfahrensschritte

Verfahrensschritt 1

- (1) **Inhalt:** Validierung der Daten der Stoffgehalte
- (2) **Eingangsdaten:** Daten der Stoffgehalte im Boden
- (3) **Methodik:** Koordinaten der Daten werden verifiziert. Datensätze aus verschiedenen Erhebungen werden einander angeglichen. Die Messwerte des betrachteten Stoffgehalts werden hinsichtlich der Entnahmetiefe überprüft. Messungen außerhalb des Oberbodens werden aus dem Datensatz ausgeschlossen.

Verfahrensschritt 2

- (1) **Inhalt:** Eliminierung von extrem hohen lokalen Belastungen
- (2) **Eingangsdaten:** Daten der Stoffgehalte im Oberboden
- (3) **Methodik:** Extrem hohe lokale Belastungen in Vordeichbereichen werden mit dem Ziel, Hintergrundwerte zu erhalten, eliminiert.

(Verfahrensschritt 2a)

- (1) **Inhalt:** Aggregation der Nutzungsarten zu Nutzungstypen. Im Falle einer geringen Probenanzahl werden ähnliche Nutzungsarten, die sich hinsichtlich des Stoffgehaltes wenig voneinander unterscheiden (gleiche Verteilungsfunktion), zu Nutzungstypen zusammengefasst.
- (2) **Eingangsdaten:** Daten der Stoffgehalte im Oberboden, Nutzungsarten
- (3) **Methodik:** Es werden Tests nach Kolmogoroff und Smirnow durchgeföhrt (vgl. SACHS 1997). Dieser Test erfasst Abweichungen der Verteilungsfunktionen und ist vergleichsweise robust gegenüber Ausreißern.

Verfahrensschritt 3

- (1) **Inhalt:** Zerlegung des Datensatzes nach seinem Nutzungsbezug
- (2) **Eingangsdaten:** Daten der Stoffgehalte im Oberboden, Nutzungstypen
- (3) **Methodik:** Der Datensatz wird nach Nutzungstypen aufgesplittet



Verfahrensschritt 3a

- (1) **Inhalt:** Elimination von Daten mit Belastungsverdacht
- (2) **Eingangsdaten:** Daten der Stoffgehalte im Oberboden
- (3) **Methodik:** Es werden die Beobachtungen mit Belastungsverdacht aus den Datensätzen ausgeschlossen, um in einem weiteren Schritt Parameter zu erhalten, die Hintergrundwerten ähnlich sind.

Verfahrensschritt 3b

- (1) **Inhalt:** Bestimmung der Verteilungsparameter
- (2) **Eingangsdaten:** nutzungsbezogene Daten der Stoffgehalte im Oberboden
- (3) **Methodik:** Es werden Kennwerte der Verteilung, insbesondere die 10 %-, 25 %-, 50 %-, 75 %- und 90 %-Perzentile berechnet.

Verfahrensschritt 4

- (1) **Inhalt:** Überprüfung der Verteilung und Transformation (im Falle der Nicht-Normalverteilung) der nutzungsbezogenen Stoffgehalte
- (2) **Eingangsdaten:** nutzungsbezogene Datensätze der Stoffgehalte im Oberboden
- (3) **Methodik:** Für die Stoffgehalte werden Tests auf Normalverteilung durchgeführt. In der Regel sind die Stoffgehalte schief verteilt und werden mit dem Ziel transformiert, einen normalverteilten Datensatz zu erhalten.

Überprüfung auf Normalverteilung nach Sachs:

Liegt der Quotient aus Median und Mittelwert $\frac{\tilde{x}}{\bar{x}}$ ungefähr bei eins und nimmt der Quotient aus der Standardabweichung und dem Mittelwert $\frac{\tilde{\sigma}}{\sigma}$ ungefähr den Wert $\frac{1}{3}$ an, so kann von einer zugrundeliegenden Normalverteilung der Stichprobe ausgegangen werden.

Verfahrensschritt 5

- (1) **Inhalt:** Standardisierung der nutzungsbezogenen Stoffgehalte
- (2) **Eingangsdaten:** (transformierte) Daten der nutzungsbezogenen Stoffgehalte im Oberboden
- (3) **Methodik:** Zur Standardisierung der Datensätze wird für jeden Messpunkt eine z-Transformation durchgeführt, d.h. der Quotient der Differenz zwischen Beobachtungswert und Mittelwert und der Standardabweichung gebildet.



Formel für die Standardisierung:

$$x_{st} = \frac{x - \tilde{x}}{\sigma}$$

Verfahrensschritt 6

- (1) **Inhalt:** Wiedervereinigung der Datensätze
 (2) **Eingangsdaten:** standardisierte Werte der nutzungsbezogenen Stoffgehalte
 (3) **Methodik:** Die getrennt transformierten und standardisierten (nutzungsbezogenen) Datensätze werden zu einem einzigen Datensatz wiedervereinigt.

Verfahrensschritt 7

- (1) **Inhalt:** Berechnung des Variogramms der standardisierten Werte
 (2) **Eingangsdaten:** standardisierte Werte der Stoffgehalte
 (3) **Methodik:** Es wird das experimentelle Variogramm der standardisierten Werte der Stoffgehalte bestimmt (ausreißerstabiler Schätzer) und dieses dem theoretischen Variogramm (sphärisches und Gaußsches Modell) angepasst.

Verfahrensschritt 8

- (1) **Inhalt:** Ordinary Kriging der standardisierten Werte
 (2) **Eingangsdaten:** standardisierte Werte der Stoffgehalte
 (3) **Methodik:** Die standardisierten Werte der Stoffgehalte werden mit Hilfe des Ordinary Kriging Verfahrens interpoliert. So entsteht die Karte der flächenhaften Verteilung der standardisierten Daten.

Verfahrensschritt 9

- (1) **Inhalt:** Restandardisierung
 (2) **Eingangsdaten:** interpolierte standardisierte Stoffgehalte, Karte der Landnutzungen
 (3) **Methodik:** Die interpolierten standardisierten Stoffgehalte werden nach folgender Formel restandardisiert:

Formel für den geschätzten Stoffgehalt:

$$x = \bar{x} + \sigma * x_{st}$$

Im Falle logarithmierter Ausgangsdaten erfolgt in diesem Schritt auch die Entlogarithmierung.

Verfahrensschritt 10

- (1) **Inhalt:** Erstellung der Karte „Bewertung der Schätzwerte nach Perzentilbereichen von Hintergrundwerten“
 (2) **Eingangsdaten:** Perzentile der nutzungsbezogenen Verteilungen der vom Belastungsverdacht bereinigten Ausgangsdaten, restandardisierte Schätzwerte



- (3) **Methodik:** Die Hintergrundwerte werden aus dem um Daten mit Belastungsverdacht bereinigten Datensatz gebildet. Weitere Methodik unklar.

Verfahrensschritt 11

- (1) **Inhalt:** Erstellung der Karte der Schätzfehler, bewertet gemeinsam mit Schätzwert nach der Lage in Perzentilbereichen
- (2) **Eingangsdaten:** Perzentile der nutzungsbezogenen Verteilungen der Ausgangsdaten, reststandardisierte Schätzwerte, Schätzfehler
- (3) **Methodik:** Methodik nicht genauer spezifiziert.

Verfahrensschritt 12

- (1) **Inhalt:** Bestimmung des Untersuchungsbedarfs
- (2) **Eingangsdaten:** Perzentile der nutzungsbezogenen Verteilungen der Ausgangsdaten, reststandardisierte Schätzwerte, Kriging-Varianzen
- (3) **Methodik:** Zur Festlegung des Untersuchungsbedarfes werden die Kriterien „absolute Höhe des Schätzwertes“ und die „Unsicherheit der Schätzung“ herangezogen. Anhand der aus den nutzungsbezogenen Verteilungen der Ausgangsdaten ermittelten 10-, 25-, 50-, 75- und 90% Perzentilen werden die Wertebereiche in sechs Klassen eingeteilt (vgl. Tabelle 1). Jeder Klasse wird ein Wert der Skala von 1-6 zugeordnet. Der Wert 1 (kleiner Schätzwert) steht dabei für einen geringen, der Wert 6 (hoher Schätzwert) für einen hohen Untersuchungsbedarf.
- Um auch die Unsicherheit der Schätzung mit in die Ermittlung des Untersuchungsbedarfes einzubeziehen, werden für die einzelnen Schätzwerte Konfidenzintervalle $Z^* \pm F_k$ zur Irrtumswahrscheinlichkeit von 5%- errechnet. Zur Bewertung der Breite der Konfidenzintervalle, und damit der Schätzgenauigkeit, werden diese mit den Perzentilbereichen verglichen. Je nachdem, wie viele Perzentilbereiche vom Konfidenzintervall des Schätzwertes überlagert werden, wird dem zugehörigen Beobachtungspunkt wiederum ein Wert der Skala 1- 6 zugeordnet (vgl. Tabelle1).
- Zur endgültigen Beurteilung des Untersuchungsbedarfs werden beide Kriterien miteinander verknüpft (vgl. Tabelle 2). Zur Interpretation: Ein niedriger Schätzwert mit schmalen Konfidenzintervall verlangt kaum nach zusätzlicher Untersuchung seiner Umgebung. Ein hoher Schätzwert, der aus einer sehr unsicheren Schätzung hervorgeht, hat dagegen hohen Untersuchungsbedarf.



Tabelle 1: Bewertung von restandardisierten Schätzwerte und Konfidenzintervallen anhand von Perzentilen der nutzungsbezogenen Verteilungen

Z^*	$Z^* \pm F_K$	Bewertung
< 10 % Pz	0 Pz-Bereiche	1
10 % bis 25 % Pz	1 Pz-Bereiche	2
25 % bis 50 % Pz	2 Pz-Bereiche	3
50 % bis 75 % Pz	3 Pz-Bereiche	4
75 % bis 90 % Pz	4 Pz-Bereiche	5
> 90 % Pz	5 Pz-Bereiche	6

Tabelle 2: Bewertungsmatrix zur Festlegung des Untersuchungsbedarfs

Schätzwert-Bewertung	Schätzfehler-Bewertung					
	1	2	3	4	5	6
1	1	1	2	2	3	3
2	1	2	2	3	3	4
3	2	2	3	3	4	4
4	2	3	3	4	4	5
5	3	3	4	4	5	5
6	3	4	4	5	5	6

Verfahrensschritt 13

- (1) **Inhalt:** Erstellung einer Karte zur Vorsorgewertüberschreitung
- (2) **Eingangsdaten:** restandardisierte, geschätzte Stoffgehalte, Vorsorgewerte der einzelnen Elemente für die Bodenart Sand
- (3) **Methodik:** Es werden Quotienten aus den Mittelwerten der geschätzten Stoffgehalte und den Vorsorgewerten gebildet. Ist der Quotient größer als 1, ist der Vorsorgewert für die empfindlichste Bodenart (Sand) überschritten. Dieser Sachverhalt wird kartografisch dargestellt.

Verfahrensschritt 14

- (1) **Inhalt:** Messnetzplanung
- (2) **Eingangsdaten:** Bewertungsmatrix des Untersuchungsbedarfs
- (3) **Methodik:** Methodik nicht genauer beschrieben.



Steckbrief - Brandenburg **- Regionalisierung von Bodenschutzdaten auf Auenstandorten -**

1. Ziel

Im Projekt „Regionalisierung von Bodenschutzdaten auf Auenstandorten des Landes Brandenburg“ (Monse et al. 1998) werden Methoden zur flächenbezogenen Bewertung von Bodenschutzdaten auf Auenböden erprobt.

2. Untersuchungsparameter

Als Untersuchungsparameter werden Schwermetallgehalte in mg/kg Trockenmasse betrachtet.

3. Anwendungsbereich

Auengebiete, differenziert nach Sedimentationscharakteristiken (Vordeichbereiche, Poldergebiete) und der Lage oberhalb und unterhalb von Einläufen.

4. Angewandeter Maßstab

Großmaßstäbig, Anwendung auf Beispielgebiete

5. Datengrundlage

Bodenproben der betrachteten Schwermetalle, sowie bodenkundliche und vegetationskundliche Daten bilden die Datengrundlage.

6. Methodenbeschreibung

Im Abschnitt 12 befinden sich die Verfahrensbeschreibungen zur Ermittlung des Flächenbezugs der Schwermetallkonzentrationen auf Auenstandorten. Zur Analyse der Beziehungen zwischen den einzelnen Variablen werden für die Daten eines jeden Standortes Pearsonsche Korrelationskoeffizienten berechnet. Zur Interpolation der Werteoberfläche wird das Ordinary Kriging-Verfahren verwendet.

7. Ergebnisse

Die **Karte der geschätzten Stoffkonzentrationen** stellt flächendeckend die interpolierten Absolutwerte der Stoffkonzentrationen dar.

Des weiteren gibt eine Karte des **Untersuchungsbedarfs** Auskunft über die Größe der Schätzfehler in einzelnen Gebieten.

8. Aussagesicherheit

Die Krige-Varianz lässt keine Aussagen über den absoluten Fehler der Schätzung zu, sondern beschreibt lediglich den relativen Fehler auf Grundlage der Messnetzkonfiguration und des Variogramms.

9. Einsatz im Vollzug

Das Verfahren zielt auf die Regionalisierung von Bodenschutzdaten im Auenbereich ab.

10. Bearbeitungsstand

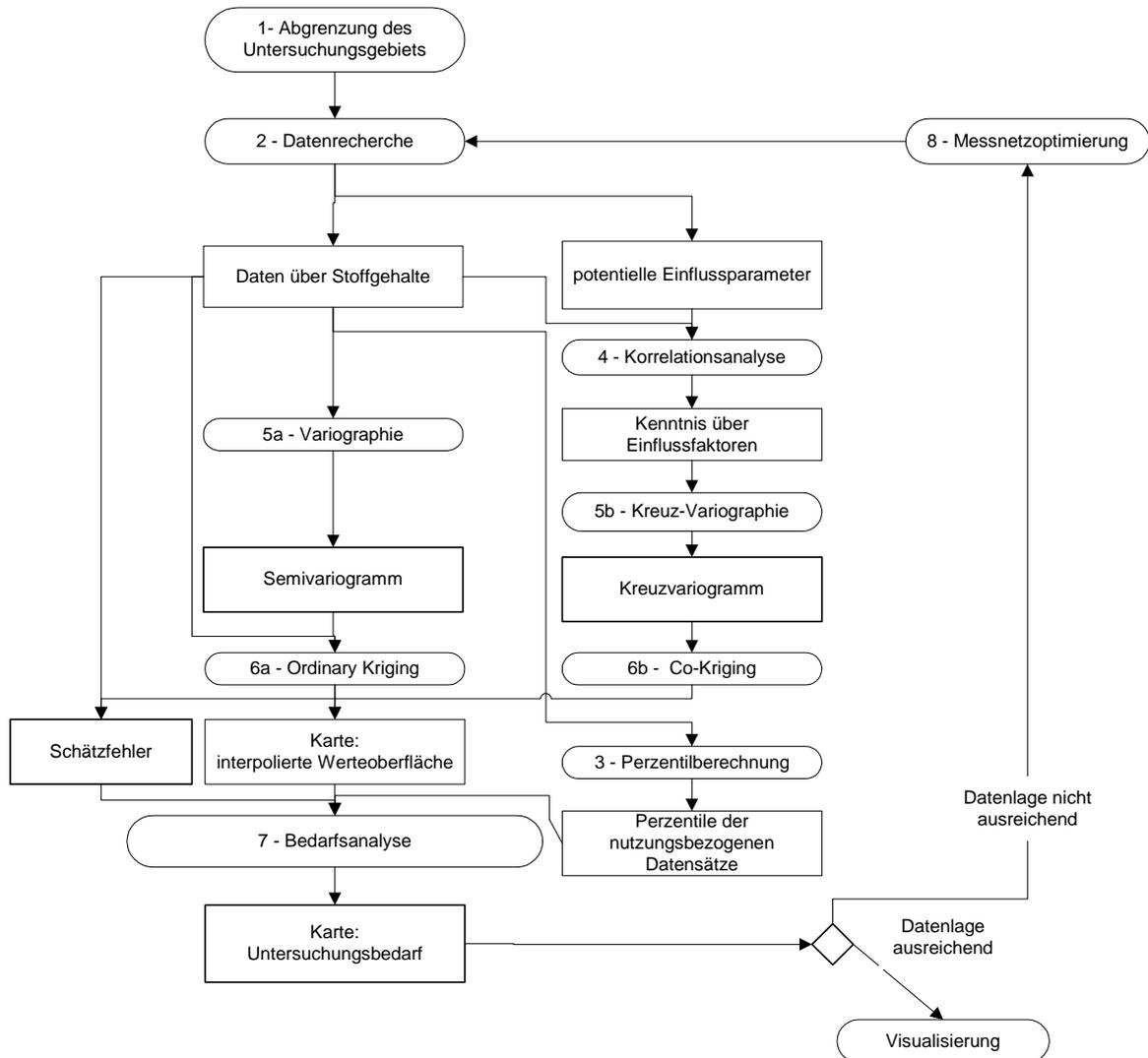
Die Untersuchungen konzentrieren sich auf Auengebiete der Schwarzen Elster und der Elbe. Allerdings waren die Analysen wegen des zu geringen Datenumfangs nur begrenzt durchführbar.



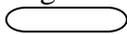
11. Quellen

- Monse, M., J. Albert, B. Scholz (1998): Regionalisierung von Bodenschutzdaten auf Auenstandorten. Abschlussbericht zum Forschungsvorhaben A6-2/96, im Auftrag des Landesumweltamtes Brandenburg.

12. Ablaufdiagramm



Legende:



Verfahrensschritt. Ist ein Verfahrensschritt mit einer Nummer gekennzeichnet, ist dieser in der untenstehenden Liste detailliert erläutert.



Objekt. Daten oder Karten, die Eingangsdaten oder das Hauptergebnis eines Verfahrensschritts darstellen.



Verbindung zwischen Verfahrensschritten und Objekten.



Verzweigung.



Verfahrensschritte

Verfahrensschritt 1

- (1) **Inhalt:** Abgrenzung des Untersuchungsgebietes, Auswahl repräsentativer Vertreter für Auenstandorte
- (2) **Eingangsdaten:** Daten der Stoffgehalte im Boden. Angaben über Gewässergröße, Überflutungskarte, Biotop- und Landnutzungskarten
- (3) **Methodik:** Für verschiedene Typen von Auenstandorten sollen unterschiedliche Methoden zur Regionalisierung erprobt werden, deshalb wird eine qualitative Charakterisierung der Standorte hinsichtlich der Gewässergröße, sowie der Größe und Verteilung der Polder bzw. Flutungsräume vorgenommen. Auch die Güte des Fließgewässers spielt als Typisierungsmerkmal eine wichtige Rolle, wird aber wegen mangelnden Informationen nicht miteinbezogen. Andere charakteristische Standortmerkmale, wie
- Sedimentationscharakteristik,
 - historische und aktuelle Landnutzung sowie
 - spezifische Einleitersituation
- sind für die konkrete Standortwahl von Bedeutung.
- In vorliegender Untersuchung wird das Auengebiet getrennt nach Sedimentationscharakteristiken (Poldergebiete, Vordeichbereiche) und den Bereichen oberhalb und unterhalb von Einleitern analysiert und regionalisiert.

Verfahrensschritt 2

- (1) **Inhalt:** Datenrecherche und Datenerhebung
- (2) **Eingangsdaten:** Daten der Stoffgehalte im Boden
- (3) **Methodik:** Beprobung von Transekten vertikal zum Flusslauf. Es werden mehrere Transekte parallel angelegt, um statistische Aussagen mit Flächenbezug zu ermöglichen.

Verfahrensschritt 3

- (1) **Inhalt:** Perzentilberechnung
- (2) **Eingangsdaten:** Daten der Stoffgehalte im Boden
- (3) **Methodik:** Berechnung der Perzentile der Verteilung, getrennt für Poldergebiete und Vordeichbereiche, sowie oberhalb und unterhalb eines Einleiters.

Verfahrensschritt 4

- (1) **Inhalt:** multivariate Analyse
- (2) **Eingangsdaten:** Daten der Stoffgehalte im Oberboden. Daten über potentielle Einflussfaktoren (pH-Wert, org. Kohlenstoff, Höhe über NN, Entfernung von Gewässer)



- (3) Methodik:** Für jeden Standort werden partielle Korrelationsanalysen durchgeführt und durch die Variation einzelner Variablen ausgetestet, welche Variable signifikanten Einfluss auf die Stoffgehalte haben. Es wird von der Annahme ausgegangen, dass alle Daten normalverteilt sind. Deshalb wird der Korrelationskoeffizient nach Pearson berechnet.

Verfahrensschritt 5a

- (1) Inhalt:** Berechnung des Variogramms
(2) Eingangsdaten: Werte der Stoffgehalte
(3) Methodik: Es wird das experimentelle Variogramm der Werte der Stoffgehalte bestimmt und dieses dem theoretischen Variogramm angepasst.

Verfahrensschritt 5b

- (1) Inhalt:** Berechnung des Kreuzvariogramms
(2) Eingangsdaten: Werte der Stoffgehalte, signifikante Einflussgrößen (siehe 4)
(3) Methodik: Es wird das experimentelle Kreuzvariogramm aufgestellt, um mit Hilfe einer oder mehrerer regionalisierter Einflussvariablen die flächenbezogene Verteilung der Stoffe zu schätzen. Dabei werden genau die Variablen involviert, die sich durch die partielle Korrelationsanalyse (Schritt 4) als signifikant erwiesen haben.

Verfahrensschritt 6a

- (1) Inhalt:** Ordinary Kriging
(2) Eingangsdaten: Werte der Stoffgehalte
(3) Methodik: Die Werte der Stoffgehalte werden mit Hilfe des Ordinary Kriging-Verfahrens interpoliert. So entsteht die Karte der flächenhaften Verteilung der Daten.

Verfahrensschritt 6b

- (1) Inhalt:** Cokriging
(2) Eingangsdaten: Werte der Stoffgehalte, Werte der signifikanten Einflussgrößen
(3) Methodik: Die Werte der Stoffgehalte werden mit Hilfe des Cokriging-Verfahrens interpoliert. So entsteht die Karte der flächenhaften Verteilung der Daten.

Verfahrensschritt 7

- (1) Inhalt:** Bestimmung des Untersuchungsbedarfs
(2) Eingangsdaten: Perzentile der Verteilungen der Ausgangsdaten, Schätzwerte, Schätzfehler
(3) Methodik: Zur Festlegung des Untersuchungsbedarfs werden die Kriterien „absolute Höhe des Schätzwertes“ und die „Unsicherheit der Schätzung“ herangezogen (vgl. Verfahrensschritt 12 der Regionalisierung in Außerenbereichen in Brandenburg). Die Klassifizierung im



Innerrauenbereich umfasst allerdings nicht 6, sondern lediglich 5 Klassen.

Verfahrensschritt 8

- (1) **Inhalt:** Messnetzplanung
- (2) **Eingangsdaten:** Bewertungsmatrix des Untersuchungsbedarfs
- (3) **Methodik:** Empirische Bewertung auf der Grundlage von Schätzwert und Schätzfehler.



Steckbrief - Hessen

1. Ziel

Schon Anfang der 90er Jahre des 20. Jahrhundert entwickelte der Umlandverband Frankfurt ein Verfahren zur Ermittlung der Schwermetallbelastung in seinem Gebiet. Das vorliegende Verfahren zielt darauf ab, die gemeinsame anthropogene und geogene Belastung durch Schwermetalle zu analysieren.

2. Untersuchungsparameter

Es wird die Stoffgruppe der Schwermetalle betrachtet.

3. Anwendungsbereich

Es wurden Karten der Schwermetallbelastung für die Region des Umlandverbandes Frankfurt berechnet.

4. Angewandeter Maßstab

Die Bodenbelastungskarten liegen in einem Maßstab von 1:50.000 vor.

5. Datengrundlage

Punktuelle Bodenproben, eine Karte der Bodennutzung und der Bodenformen wurden als Datengrundlage genutzt.

6. Methodenbeschreibung

Im Abschnitt 12 findet sich ein Ablaufdiagramm und die zugehörigen Verfahrensschritte. Die Ausreißeranalyse wurde mittels des IDW – Verfahrens durchgeführt. Der Flächenbezug wurde durch das Ordinary Kriging hergestellt.

7. Ergebnisse

Aus diesem Verfahren resultiert eine **Karte der Schwermetallbelastung**.

8. Aussagesicherheit

Die Aussagesicherheit der erzielten Ergebnisse wurde nicht betrachtet.

9. Einsatz im Vollzug

Die Karte der Schwermetallbelastung wird in der Landschafts- und Flächennutzungsplanung zur Kennzeichnung von Gebieten mit Vorsorgewertüberschreitungen gemäß BBodSchG und BBodSchV eingesetzt.

10. Bearbeitungsstand

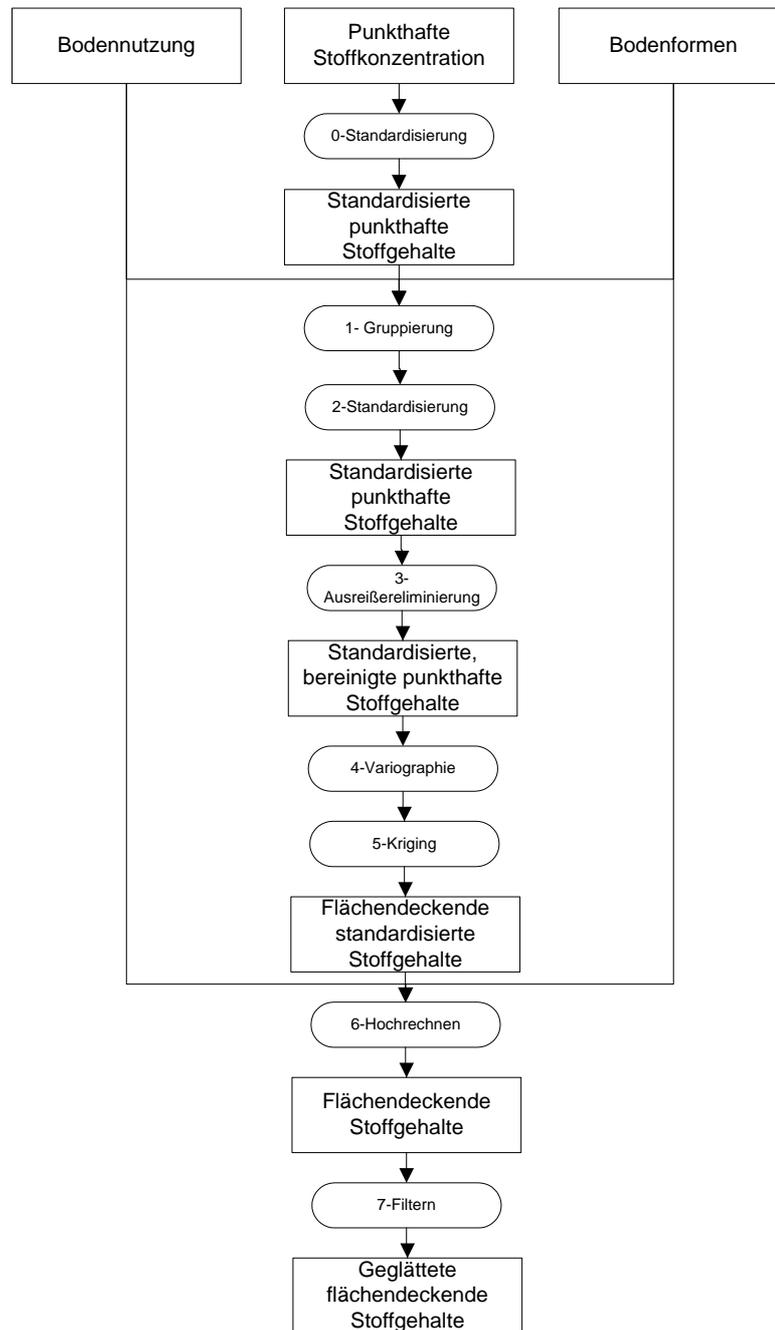
Das Projekt ist abgeschlossen.

11. Quellen

- Umweltschutzbericht, Teil V, Bodenschutz, Band2: Bodenkataster und Bodenschwermetallkarte des Umlandverbandes Frankfurt, Herausgeber: Umlandverband Frankfurt.
- INTERPOL – ein Tool zur Durchführung von Interpolationen bodenkundlicher Daten unter Nutzung der ARC/INFO Makroprogrammierung (AML) und zur Implementierung in das Bodeninformationssystem des Umlandverbands Frankfurt. Version 1.1 AG Umweltinformatik der Univ. Münster

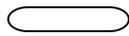


12. Ablaufdiagramm





Legende:



Verfahrensschritt. Ist ein Verfahrensschritt mit einer Nummer gekennzeichnet, ist dieser in der untenstehenden Liste detailliert erläutert.



Objekt. Daten oder Karten, die Eingangsdaten oder das Hauptergebnis eines Verfahrensschritts darstellen.



Verbindung zwischen Verfahrensschritten und Objekten.

Verfahrensschritte

Verfahrensschritt 0

- (1) **Inhalt:** Standardisierung auf einheitliche Bodentiefe
- (2) **Eingangsdaten:** Daten der horizontbezogenen Stoffgehalte
- (3) **Methodik:** Die horizontbezogenen Messwerte der Stoffgehalte werden in Stoffgehalte bis 3 dm Bodentiefe umgerechnet.

Verfahrensschritt 1

- (1) **Inhalt:** Gruppierung
- (2) **Eingangsdaten:** Daten der Stoffgehalte bis 3 dm Bodentiefe, der Bodennutzung und der Bodenform
- (3) **Methodik:** Die Messwerte der Stoffgehalte werden in ca. 120 Gruppen aufgeteilt (30 Bodenformgruppen x max. 5 Nutzungsarten). Es werden Ausreißer eliminiert. Durch einen nicht weiter benannten statistischen Test werden 17 Bodenformgruppen mit Nutzungsart als signifikant unterschiedlich charakterisiert. Es werden die Mittelwerte der Stoffgehalte aller Kombinationen als Faktoren bezüglich der Gruppe „Lößlehmböden mit Ackernutzung“ berechnet.

Verfahrensschritt 2

- (1) **Inhalt:** Standardisierung
- (2) **Eingangsdaten:** Daten der Stoffgehalte, Mittelwert-Faktoren der Gruppen
- (3) **Methodik:** Die Daten der Stoffgehalte werden auf die Gruppe „Lößlehmböden mit Ackernutzung“ standardisiert, indem sie mit den im ersten Verfahrensschritt berechneten Faktoren multipliziert werden.

Verfahrensschritt 3

- (1) **Inhalt:** Ausreißereliminierung
- (2) **Eingangsdaten:** Daten der Stoffgehalte
- (3) **Methodik:** Mit Hilfe des Inverse-Distance-Verfahrens wird jeweils ein Messwert aus seinen Nachbarwerten geschätzt. Ist dieser Schätzwert mehr als 100% zu groß oder mehr als 50% zu klein, wird er als Ausreißer eliminiert.



Verfahrensschritt 4

- (1) **Inhalt:** Variographie
- (2) **Eingangsdaten:** Daten der standardisierten Stoffgehalte
- (3) **Methodik:** Es wird das experimentelle Variogramm der standardisierten Stoffgehalte berechnet und ein theoretisches angepasst.

Verfahrensschritt 5

- (1) **Inhalt:** Kriging
- (2) **Eingangsdaten:** Daten der standardisierten Stoffgehalte
- (3) **Methodik:** Die flächendeckende Verteilung der standardisierten Stoffgehalte wird mittels des Ordinary Kriging berechnet.

Verfahrensschritt 6

- (1) **Inhalt:** Hochrechnen
- (2) **Eingangsdaten:** Flächendeckende Verteilung der standardisierten Stoffgehalte, Karte der Bodennutzung und der Bodenformen
- (3) **Methodik:** Die flächendeckend geschätzten Daten der standardisierten Stoffgehalte werden durch den für die jeweilige Bodennutzung und Bodenform errechneten Mittelwert-Faktor dividiert.

Verfahrensschritt 7

- (1) **Inhalt:** Filtern
- (2) **Eingangsdaten:** Flächendeckende Verteilung der Stoffgehalte
- (3) **Methodik:** Zur Vermeidung von großen Sprüngen in der Werteverteilung der Stoffgehalte werden sie geglättet.



Steckbrief - NRW

- Bodenbelastungskarten Außenbereich (BBK_A) -

1. Ziel

Die digitale Bodenbelastungskarte für den Außenbereich (BBK) ist seit 1995 als Modul im Boden-Informationssystem NRW (BIS NRW) integriert. Mit diesem Modul kann die großflächige stoffliche Belastung durch Schwermetalle und persistente organische Stoffe (PCB, PAK) in naturnahen Böden unter Berücksichtigung lokaler Überprägungen flächenbezogen abgeschätzt werden.

2. Untersuchungsparameter

Es werden zwei Stoffgruppen betrachtet:

- Schwermetalle: As, Cd, Cr, Cu, Hg, Ni, Pb, Ti, Zn
- Persistente organische Stoffe: Poly-Chlorierte Biphenyle (PCB), Poly-Aromatische Kohlenwasserstoffe (PAK) und Dioxine/Furane (PCDD/F).

3. Anwendungsbereich

Der Anwendungsbereich ist auf den Außenbereich von Städten und Gemeinden mit naturnah genutzten Flächen der Nutzungen Acker, Grünland und Wald beschränkt. Keine Anwendung findet die Methode bei Böden in Siedlungsbereichen mit stark anthropogen überprägter Nutzung.

4. Angewandeter Maßstab

Die Methode zur Generierung der Bodenbelastungskarten ist generell maßstabsunabhängig. Da aber in der Regel mit Kartengrundlagen im Maßstab von 1:50.000 (Bsp. Bodenkarte) gearbeitet wird, sind die Ergebnisse auf diesen Maßstabsbereich festgelegt.

5. Datengrundlage

Datengrundlage bilden zum einen die punktbezogenen Messdaten der **Untersuchungsparameter** in Oberböden natürlich entwickelter Bodenprofile der Nutzungen Acker, Grünland und Wald. Hierbei sind Angaben zur Bodennutzung zum Zeitpunkt der Probenahme, Lage im Überschwemmungsgebiet, Ausgangssubstrat der Bodenbildung, Entnahmetiefe, Hinweis auf mögliche Belastungsursachen, 6-stellige Gauß-Krüger-Koordinate, Probenahme- und Analysemethoden notwendig.

Zum anderen werden flächenbezogene Daten der Einflussgrößen benötigt. Die **Karte der Bodennutzung** wird anhand von ATKIS-Daten (Amtlich-Topographisches-Kartographisches Informationssystem) im Maßstab von 1: 25.000 gewonnen. Andere Wege der Gewinnung der Karte der Bodennutzung sind möglich (Nutzungskartierung des KVR, Flächennutzungsplan, Corine Landcover, Luft- und Satellitenbilder). Als Bodennutzungen werden aggregierte Typen von Nutzungen definiert: Grünland, Acker, Wald, Sonstige und Wasserfläche. In der **Karte der „geogenen Grundgehalte“** werden die Ausgangssubstrate des oberflächennahen Gesteins zusammengefasst, die ähnliche geogene Grundgehalte aufweisen. Zu ihrer Erstellung wird die Bodenkarte BK 50 (1:50.000, GLA NRW) und die Geologischen Karte GK 25 (1:25.000) mit den entsprechenden Angaben zu den Schwermetallgrundgehalten ausgewertet. Die **Karte der Überschwemmungsgebiete** wird aus analogen Karten der gesetzlich festgelegten Überschwemmungsgebiete, aus Bodenkarten



und historischen Karten generiert. Zusätzlich kann die Karte der hochwassergefährdeten Gebiete herangezogen werden (liegt im LUA digital vor). Eine **Karte der Topographie** auf Basis der TK 50 (1:50.000) und DGK 5 (1:5.000) wird nicht direkt in die Methode integriert, dient jedoch als Hintergrundinformation bei der Visualisierung der Ergebnisse.

Darüber hinaus sind **Informationen zu lokalen Belastungen** notwendig, die Aussagen über Altlastenverdachtsflächen, Emittentenstandorten, Klärschlammverwertungsflächen, Bergbaugebieten, Halden, Erzgängen, Immissionsgebiete geben.

Eine Zusammenfassung über die für die Erstellung der BBK notwendigen Datengrundlagen gibt Abb.2 des Merkblattes 24 „Leitfaden zur Erstellung digitaler Bodenbelastungskarten. Teil 1: Außenbereich.“ Landesumweltamt NRW, Essen, 2000.

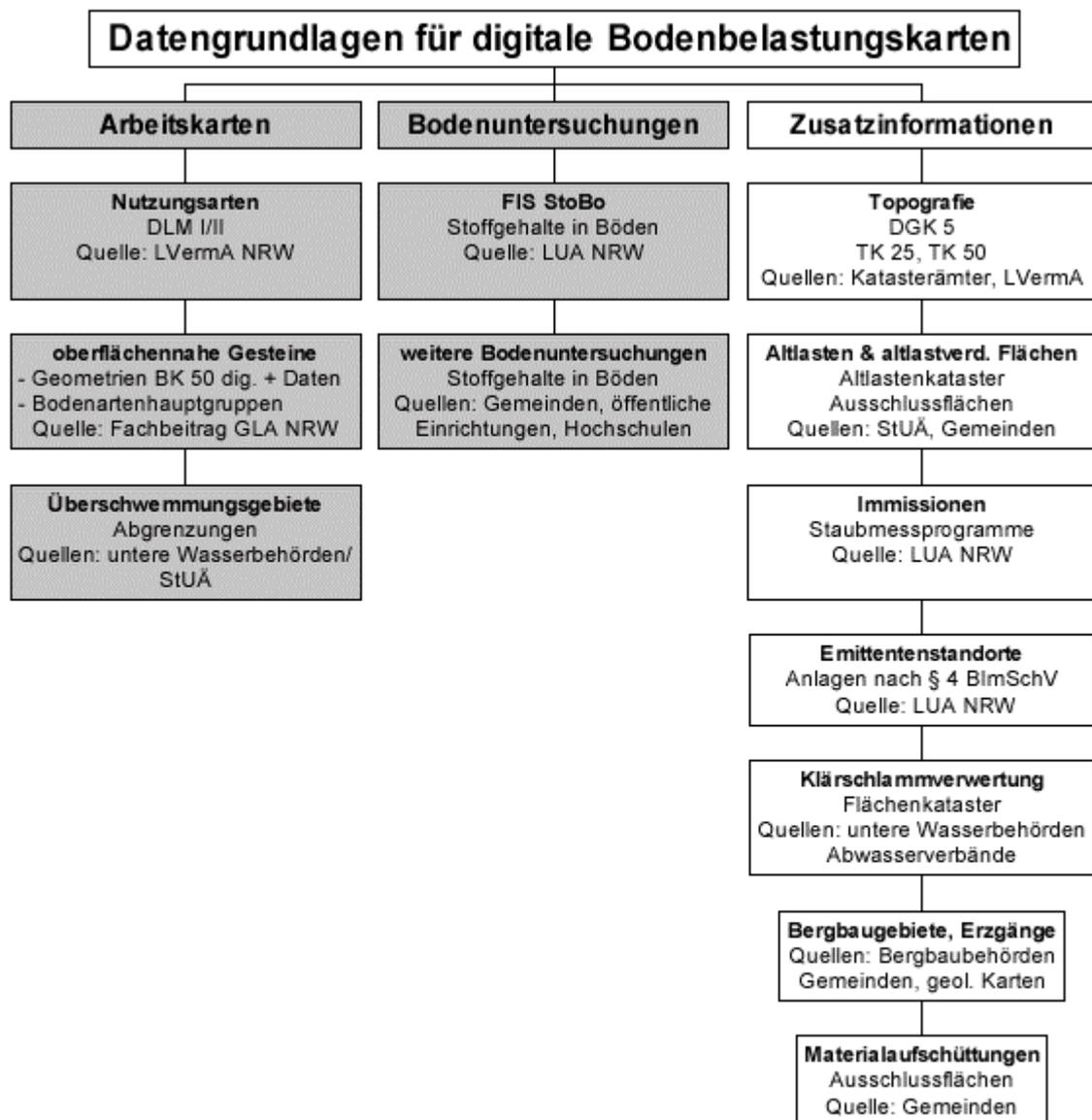


Abb. 2: Datengrundlagen für digitale Bodenbelastungskarten sowie Angabe ihrer Quellen



6. Methodenbeschreibung

Eine Beschreibung des Verfahrens zur Bestimmung der flächenhaften Bodenbelastung ist in Form eines Ablaufdiagramms mit detaillierter Beschreibung der einzelnen Verfahrensschritte im Abschnitt 12 zu finden.

7. Ergebnisse

Mit dieser Methode können verschiedene Karten erstellt werden, die unterschiedliche, für den bodenschutzrechtlichen Vollzug wichtige Aspekte der großflächigen Bodenbelastung wiedergeben. Die **Karte der standardisierten geschätzten Stoffgehalte** beschreibt die Bodenbelastung, die auf lokale oder regionale Immissionseinflüsse zurückzuführen sind. Nach Standardisierung über Einflussgrößen stellt die **Karte der geschätzten Stoffgehalte** den geschätzten flächendeckenden Gesamtgehalt des betrachteten Stoffes dar. Um die aktuelle Belastung im Vergleich zu Hintergrundwerten beurteilen zu können, wird die **Karte der geschätzten Stoffgehalte klassifiziert nach Hintergrundwerten** dargestellt.

Zur Optimierung des Messnetzes stehen die Karte der Schätzgüte und die Karte des Untersuchungsbedarfs zur Verfügung. Die **Karte der Schätzgüte** stellt die Krige-Varianz dar, die Aussagen über die Messnetzkonfiguration, nicht jedoch über die absoluten Schätzfehler zulässt. Eine Kombination von Belastung und dem durch die Krige-Varianz dargestellten relativen Schätzfehler gibt Aufschluss über den weiteren Untersuchungsbedarf. Diese ist in der **Karte des Untersuchungsbedarfs** dargestellt.

8. Aussagesicherheit

Die **Karte der Krige-Varianz** lässt keine Aussage über den absoluten Fehler zu, sondern beschreibt lediglich den relativen Fehler auf Grundlage der Messnetzkonfiguration und des Variogramms.

9. Einsatz im Vollzug

Im Merkblatt Nr. 24 „Erstellung digitaler Bodenbelastungskarten“ sind folgende Anwendungsbereiche aus dem bodenschutzrechtlichen Vollzug, aus Planungs- und Genehmigungsverfahren und der Abfallverwertung aufgeführt und erläutert:

1. Abgrenzung von Gebieten einheitlicher Hintergrundwerte,
2. Ermittlung und Abgrenzung von Gebieten, in denen die Vorsorgewerte nach Anhang 2 Nr. 4 BBodSchV überschritten sind,
3. Ermittlung und Abgrenzung von Gebieten im Hinblick auf das Auf- und Einbringen von Materialien nach § 12 BBodSchV,
4. Ermittlung und Abgrenzung von Gebieten, die für die Verwertung von Abfällen nach BioAbfV und AbfKlärV geeignet sind,
5. Ermittlung und Abgrenzung von Gebieten mit „geogen/ naturbedingt oder großflächig siedlungsbedingt“ erhöhten Stoffgehalten nach § 8 Abs. 2 Nr. 1 BBodSchG in Verbindung mit § 9 Abs. 2 und 3, § 12 Abs. 10 sowie Anhang 2 Nr. 4.1 BBodSchV,
6. Beurteilung der stofflichen Bodenbelastung im Einflussbereich von Emittenten (z.B. geplante Anlagen nach UVPG),
7. Ursachenbezogene Bewertung von Einzelflächen anhand von Hintergrundwerten,
8. Ermittlungen zur Erfassung von schädlichen Bodenveränderungen und Verdachtsflächen nach § 5 LBodSchG und deren Abgrenzung,



9. Abwägungs- und Kennzeichnungsgrundlage für besonders belastete Böden im Rahmen der Bauleitplanung nach §§ 1, 5 und 9 BauGB.

10. Bearbeitungsstand

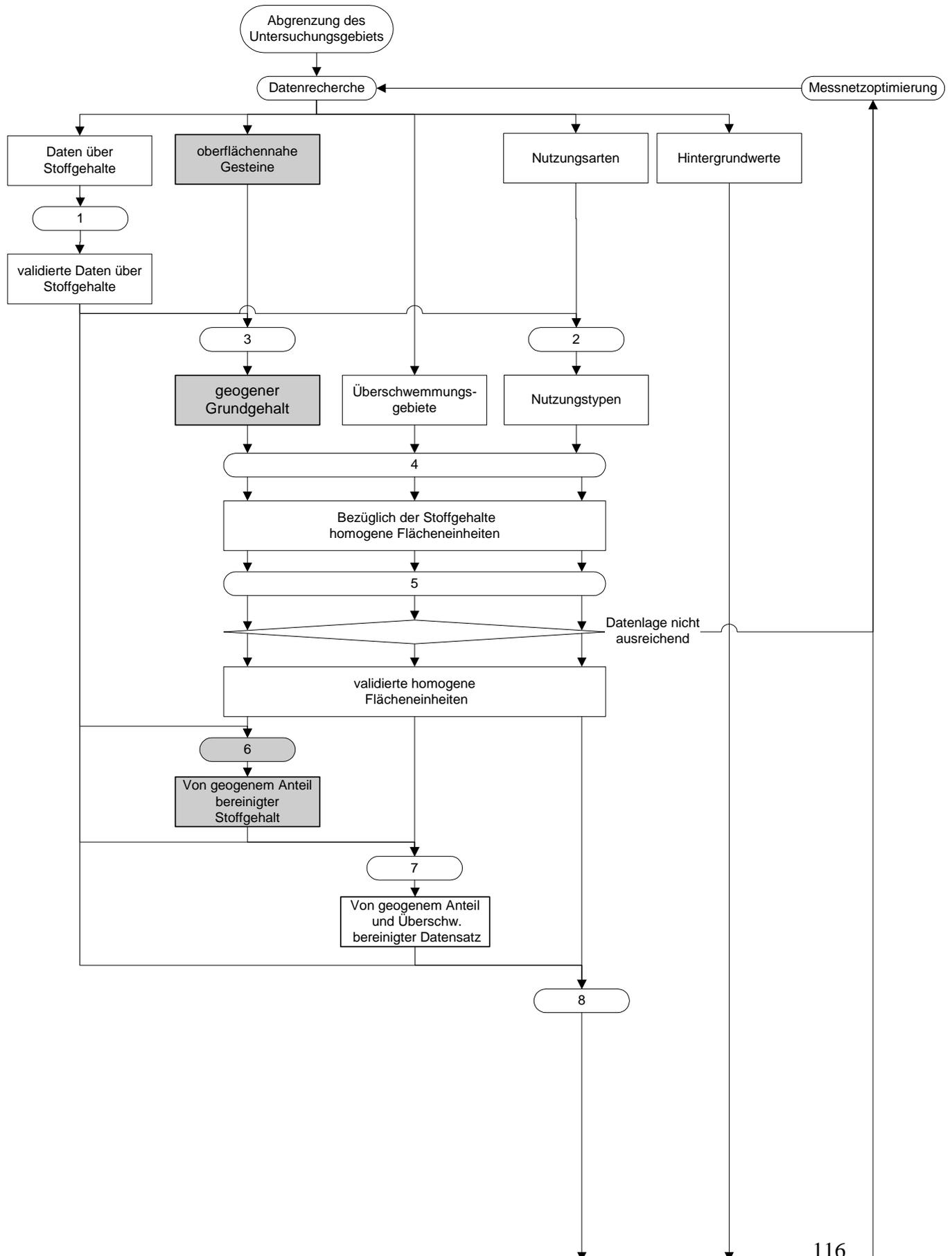
Die Methode zur digitalen Erstellung von Bodenbelastungskarten wird seit 1998 angewendet. Sie wurde bereits in mehreren Untersuchungsgebieten getestet (s.o.). Mittlerweile werden von den unteren Bodenschutzbehörden digitale Bodenbelastungskarten mit Unterstützung des Landes im Rahmen des Förderprogramms Maßnahmen zum Bodenschutz routinemäßig für die Außenbereiche erstellt. Darüber hinaus wird bei einigen Fördermaßnahmen auch die Erstellung von digitalen Bodenbelastungskarten im Siedlungsbereich unterstützt. Hier kann das BBK aufgrund des kleinräumigen Maßstabes nicht angewendet werden.

11. Quellen

- Frieling, C. (2002): BBK-Tutorial. Anleitung zur Erstellung von Bodenbelastungskarten mit den Softwarekomponenten BBK-Datenbankbaustein 4.0 und BBK-Rastertool 4.0. Münster.
- Heidbrink, K. (2000): Erstellung Digitaler Bodenbelastungskarten (BBK) in Nordrhein-Westfalen. In: Flächenhafte Darstellung punktbezogener Daten über Stoffgehalte in Böden, UBA-Text 49/00, Umweltbundesamt, Berlin.
- Landesumweltamt NRW (1995): Digitale Bodenbelastungskarten, Abschlussbericht 1. Teilprojekt, Essen.
- Landesumweltamt NRW (2000): Erstellung digitaler Bodenbelastungskarten, Teil 1: Außenbereiche. Merkblätter Nr. 24, Essen.

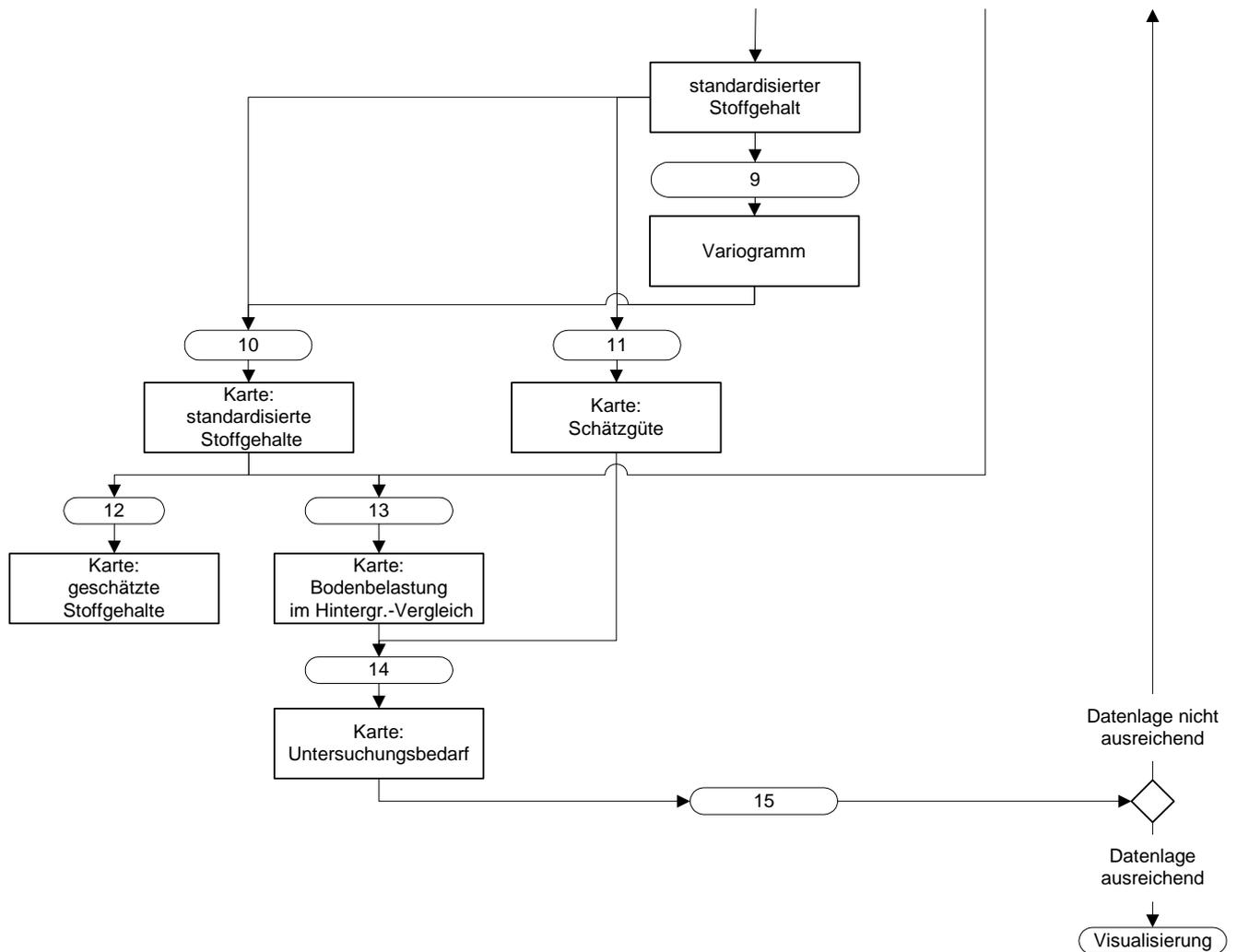


12. Ablaufdiagramm zur Erstellung einer BBK_A

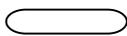




Fortsetzung-



Legende:



Verfahrensschritt. Ist ein Verfahrensschritt mit einer Nummer gekennzeichnet, ist dieser in der untenstehenden Liste detailliert erläutert. Die Verfahrensschritte, die grau unterlegt sind, beziehen sich ausschließlich auf die Anwendung des Verfahrens auf Schwermetalle.



Objekt. Daten oder Karten, die Eingangsdaten oder das Hauptergebnis eines Verfahrensschritts darstellen. Die Objekte, die grau unterlegt sind, beziehen sich ausschließlich auf die Anwendung des Verfahrens auf Schwermetalle.



Verbindung zwischen Verfahrensschritten und Objekten.



Verzweigung.

**Verfahrensschritte:****Verfahrensschritt 1**

- (1) **Inhalt:** Validierung der Daten der Stoffgehalte bezüglich ihrer Metadaten
Es wird überprüft, ob die für die weitere Auswertung der Messwerte des betrachteten Stoffgehalts notwendigen Metainformationen bekannt sind. Es werden nur die Datensätze in die weiteren Untersuchungen einbezogen, von denen bestimmte Mindestangaben vorliegen.
- (2) **Eingangsdaten:** Daten der Stoffgehalte im Oberboden
- (3) **Methodik:** Die Messwerte des betrachteten Stoffgehalts werden hinsichtlich der vorhandenen Metainformationen (Für Mindestangaben für einen vollständigen Datensatz der Datenvalidierung siehe Tabelle 3, S. 41 des LUA Merkblattes Nr. 24) überprüft. Wenn möglich, werden fehlende Angaben ergänzt, wenn nicht, wird der Datensatz nicht weiter betrachtet. Durch diese Validierung wird der Datenbestand in der Regel reduziert.

Verfahrensschritt 2

- (1) **Inhalt:** Aggregation der Nutzungsarten zu Nutzungstypen
Es werden ähnliche Nutzungsarten, die sich hinsichtlich des Stoffgehaltes wenig voneinander unterscheiden, zu einem Nutzungstyp zusammengefasst.
- (2) **Eingangsdaten:** Daten der Stoffgehalte im Oberboden, Karte der Bodennutzungen
- (3) **Methodik:** Auf der Basis eines Vergleichs zwischen den für jede Nutzungsart errechneten geometrischen Mittelwerten der Stoffdaten, sowie den 50. und 90. Perzentilwerten der Stoffgehalte und der lokalen Hintergrundwerte werden Nutzungsarten mit vergleichbaren Stoffgehalten zu einem Nutzungstyp zusammengefasst.

Verfahrensschritt 3

- (1) **Inhalt:** Aggregation des Ausgangsgesteins der Bodenbildung zu Einheiten der oberflächennahen Gesteine.
Es werden Gesteine mit vergleichbaren geogen bedingten Stoffgehalten zu Einheiten der oberflächennahen Gesteine zusammengefasst.
- (2) **Eingangsdaten:** Daten der Stoffgehalte im Oberboden, Bodenkarte
- (3) **Methodik:** Die Zusammenfassung des Ausgangsgesteins der Bodenbildung zu Einheiten oberflächennaher Gesteine basiert auf statistischen Auswertungen. Die in der Bodenkarte verzeichneten Ausgangsgesteine der Bodenbildung werden (unter Berücksichtigung ihrer Entstehungsgeschichte und der Bodenartenschichtung) hinsichtlich ihrer Schwermetallbelastung zusammengefasst. Nach einem Vergleich der geometrischen Mittelwerte, der Mediane und der geometrischen Mittelwerte der Stoffdaten dieser Klassen sowie der zugehörigen



Hintergrundwerte kann die Differenzierung der Einheiten der geogenen Grundgehalte gegebenenfalls noch weiter vereinfacht werden.

Verfahrensschritt 4

- (1) **Inhalt:** Bildung homogener Raumeinheiten (Klassifikation)
- (2) **Eingangsdaten:** Stoffgehalt im Oberboden, aggregierte Nutzungstypen, Überschwemmungseinfluss, Einheiten oberflächennaher Gesteine.
- (3) **Methodik:** Aus den drei Einflussgrößen Geologie, Nutzung und Überschwemmung werden Kollektive von Datensätzen gebildet.

Verfahrensschritt 5

- (1) **Inhalt:** Validierung der Daten der Stoffgehalte bezüglich ihrer Einflussfaktoren Geologie, Nutzung und Überschwemmung.
Es wird überprüft, ob für jede räumlich relevante Kombination aus Nutzungstyp, Überschwemmungseinfluss und Einheiten oberflächennaher Gesteine genügend Daten des betrachteten Stoffgehalts für die weitere Auswertung vorliegen.
- (2) **Eingangsdaten:** Stoffgehalt im Oberboden, aggregierte Nutzungstypen, Überschwemmungseinfluss, Einheiten der geogenen Grundgehalte
- (3) **Methodik** Für jede ausgewiesene homogene Raumeinheit, d.h. für jede als relevant erkannte Kombination aus Nutzungstyp, Überschwemmungseinfluss und lithologischer Einheit sollte eine Mindestanzahl an Messwerten vorliegen. Diese Mindestanzahl ist maßstabsabhängig. Bei einer BK 1:50.000 liegt der Richtwert bei 10 Messwerten pro Raumeinheit. Zudem ergeben sich Gewichtungen nach dem Anteil, den die betreffende Raumeinheit am Untersuchungsgebiet hat. Es kann in diesem Schritt entschieden werden, Raumeinheiten die <1 km² sind, zunächst zu vernachlässigen.

Verfahrensschritt 6

- (1) **Inhalt:** Standardisierung des geogenen Grundgehaltes
- (2) **Eingangsdaten:** Stoffgehalt im Oberboden, Literaturangaben über geogenen Grundgehalt
- (3) **Datenvalidierung:** Entfernen von statistischen Ausreißern
- (4) **Methodik:** Zunächst wird das Schwermetall ausgewählt, das im Untersuchungsgebiet hauptsächlich geogenen Ursprungs ist. Für dieses Schwermetall werden im Rahmen einer explorativen Datenanalyse nach der Eliminierung von Ausreißern geometrische Mittelwerte für jede sich durch ihren Belastungsgrad deutlich von den anderen unterscheidende Kombination aus Einheiten oberflächennaher Gesteine und Nutzungstypen außerhalb der Überschwemmungsgebiete berechnet.
Unter Verwendung der geometrischen Mittelwerte aus den C-Horizonten (Literatur) werden für jede Raumeinheit die pedogenen Anreicherungsfaktoren Af_p berechnet.



Formel für die Anreicherungsfaktoren:

$$Af_p = \frac{\text{geom. Mittelwert (geogener Grundgehalt X / Nutzungstyp A)}}{\text{geogener Hintergrundwert (geogener Grundgehalt X / C - Horizont)}}$$

Bei ungleicher Verteilung der Messpunkte werden die berechneten Anreicherungsfaktoren in den betreffenden Raumeinheiten zu dem Ergebnis aus der aussagefähigsten Raumeinheit in Beziehung gesetzt, d.h. der Korrekturfaktor $Af_{p\text{korrr}}$ errechnet.

Formel für die Korrekturfaktoren:

$$Af_{p\text{korrr}} = \frac{Af_p (\text{geogener Grundgehalt A / Nutzungstyp A})}{Af_p (\text{geogener Grundgehalt X / Nutzungstyp A})}$$

Die so kalibrierten Anreicherungsfaktoren werden dann für alle Einheiten oberflächennaher Gesteine über alle Nutzungen gemittelt. Dieser arithmetische Mittelwert wird mit dem entsprechenden Wert für C-Horizonte multipliziert. Die so errechneten geogenen Anteile werden zur Standardisierung von allen Messwerten subtrahiert.

Formel für geogenen Anteil:

$$G = C - \text{Horizont} * \sum_{i=1}^k Af_{pi}$$

k = Anzahl der Nutzungstypen

Die Kalibrierung der Anreicherungsfaktoren für alle weiteren Schwermetalle orientiert sich im Falle einer nicht ausreichenden statistischen Basis an der dem Anreicherungsfaktor des überwiegend geogen vorhandenen Schwermetalls.

Formel für die Standardisierung des geogenen Anteils:

$$S_G = S - G$$

S_G = vom Einflüsse des geogenen Anteils bereinigter Messwert

S = Stoffgehalt des Bodens

G = geogen bedingter Stoffgehalt

Verfahrensschritt 7

- (1) **Inhalt:** Standardisierung der Überschwemmung
- (2) **Eingangsdaten:** Stoffgehalt im Oberboden, um geogenen Anteil bereinigter Stoffgehalt im Oberboden, Informationen über ehemalige und gegenwärtige Überschwemmungsgebiete
- (3) **Datenvalidierung:** Im Rahmen der Explorativen Datenanalyse innerhalb und außerhalb von Überschwemmungsgebieten werden statistische Ausreißer identifiziert.

**(4) Methodik:**

Nach Abzug der geogenen Ausgangsgehalte werden das geometrische Mittel aller Daten außerhalb der Überschwemmungsgebiete und das geometrische Mittel aller Daten innerhalb der Überschwemmungsgebiete berechnet.

Das Verhältnis zwischen diesen beiden geometrischen Mittelwerten ist der Korrekturfaktor, mit dem alle Daten, die innerhalb von Überschwemmungsgebieten gemessen wurden, multipliziert werden.

Formel für die Standardisierung der Überschwemmung

$$S_{G\backslash\ddot{U}F} = S_G * \ddot{U}F$$

$\ddot{U}F$ = Überschwemmungsfaktor

S_G = vom geogenen Anteil bereinigter Stoffgehalt

$S_{G\backslash\ddot{U}F}$ = vom geogenen Anteil und der Überschwemmung bereinigter Stoffgehalt

Formel für den Überschwemmungsfaktor:

$$\ddot{U}F = \begin{cases} 1 & \text{falls Messwert außerhalb Überschwem.} \\ \frac{\text{geom. Mittel der Daten ausserhalb Überschwem.}}{\text{geom. Mittel der Daten in Überschwem.}} & \text{falls Messwert in Überschwem.} \end{cases}$$

Verfahrensschritt 8**(1) Inhalt:**

Standardisierung der Landnutzung

(2) Eingangsdaten:

Die um die Einflüsse des geogenen Anteils und der Überschwemmung bereinigten Messwerte, aggregierte Nutzungstypen

(3) Methodik:

Für jede Nutzungsart wird das geometrische Mittel der um den geogenen und den Überschwemmungseinfluss korrigierten Werte berechnet. Um die Werte zu standardisieren, wird jeweils das Verhältnis des geometrischen Mittelwertes aller Nutzungen zu dem geometrischen Mittelwert einer Nutzung berechnet und mit dem Kennwert $S_{G\backslash\ddot{U}F}$ multipliziert.

Formel für Standardisierung Landnutzung:

$$S_{G\backslash\ddot{U}F\backslash L} = S_{G\backslash\ddot{U}F} * NF$$

$S_{G\backslash\ddot{U}F\backslash L}$ = vom geogenen Anteil, dem Überschwemmungs- und Nutzungseinfluss bereinigter Stoffgehalt

$S_{G\backslash\ddot{U}F}$ = vom geogenen Anteil und der Überschwemmung bereinigter Stoffgehalt

NF = Nutzungsfaktor für Nutzungsklasse

Formel für Nutzungsfaktor:

$$NF = \frac{\text{geom. Mittel der vom geogenen Anteil und der Überschwemmung bereinigten Stoffgehalte innerhalb der Nutzungsklasse Grünland}}{\text{geom. Mittel der vom geogenen Anteil und der Überschwemmung bereinigten Stoffgehalte innerhalb Nutzungsklasse X}}$$



Verfahrensschritt 9

- (1) **Inhalt:** Berechnung des Variogramms der standardisierten Werte
 (2) **Eingangsdaten:** standardisierte Werte der Stoffgehalte
 (3) **Methodik:** Es wird automatisiert das experimentelle Variogramm der standardisierten Werte der Stoffgehalte bestimmt und dieses automatisiert dem theoretischen Variogramm (Exponentieller Variogrammtyp) angepasst.

Verfahrensschritt 10

- (1) **Inhalt:** Ordinary Kriging der standardisierten Daten
 (2) **Eingangsdaten:** **standardisierte** Werte der Stoffgehalte
 (3) **Methodik:** Die standardisierten Werte der Stoffgehalte werden mit Hilfe des Ordinary Kriging Verfahrens interpoliert. So entsteht die Karte der flächenhaften Verteilung der bereinigten Daten ($S_{I(G|\dot{U}F|NF)}$).

Verfahrensschritt 11

- (1) **Inhalt:** Berechnung der Krige-Varianz der standardisierten Daten
 (2) **Eingangsdaten:** **standardisierte** Werte der Stoffgehalte
 (3) **Methodik:** Eine Karte der Schätzgüte durch die Krige-Varianz wird erstellt. Dabei wird aus den Varianzen in drei Klassen (gering, mittel, hoch) klassifiziert ein Maß für den Schätzfehler ermittelt.

Verfahrensschritt 12

- (1) **Inhalt:** Restandardisierung. Erstellung der Ergebniskarte „geschätzte Stoffgehalte“
 (2) **Eingangsdaten:** interpolierte bereinigte Stoffgehalte, aggregierte Nutzungstypen, Überschwemmungsgebiete, geogener Grundgehalt
 (3) **Methodik:** Die interpolierten standardisierten Stoffgehalte werden nach folgender Formel restandardisiert:

Formel für den geschätzten Stoffgehalt:

$$S_I = (S_{I(G|\dot{U}F|NF)} / NF * \dot{U}F) + G$$

S_I = restandardisierter Wert des Stoffgehalts

G = geogener Grundgehalt

$\dot{U}F$ = Überschwemmungsfaktor

$S_{I(G|\dot{U}F|NF)}$ = interpolierte (standardisierte) Werteoberfläche

NF = Landnutzungsfaktor

Verfahrensschritt 13

- (1) **Inhalt:** Erstellung der Ergebniskarte „Bodenbelastung klassifiziert nach Hintergrundwerten“.
 (2) **Eingangsdaten:** interpolierte bereinigte Stoffgehalte, Überschwemmungsgebiete, geogener Grundgehalt, Hintergrundwerte
 (3) **Methodik:** Die standardisierten Stoffgehalte werden auf die Nutzungsart Grünland bezogen restandardisiert.



Formel für die geschätzten Stoffgehalte bezogen auf Grünland:

$$S_{I(NF)} = (S_{I(G)\{ÜF\}(NF)} / * ÜF) + G$$

$S_{I(NF)}$ = auf die Nutzungsart Grünland bezogener, geschätzter Stoffgehalt des Oberbodens

G = geogener Grundgehalt

ÜF = Überschwemmungsfaktor

$S_{I(G)\{ÜF\}(NF)}$ = interpolierte (standardisierte) Werteoberfläche

Der Bezug zur Nutzungsart Grünland soll als exemplarisch für alle anderen Nutzungen angesehen werden. Von Bedeutung ist in diesem Schritt vielmehr die Einteilung der Stoffgehalte in drei Klassen bezogen auf die (nutzungsspezifischen) Hintergrundwerte:

Klasseneinteilung bezogen auf Hintergrundwerte:

geringe Belastung – Stoffgehalt ist kleiner als das 50. Perz.

mittlere Belastung – Stoffgehalt liegt zwischen dem 50. und dem 90. Perzentil

hohe Belastung – Stoffgehalt ist größer als das 90. Perz.

Aus der Zuordnung der Stoffgehalte zu den Belastungsstufen ergibt sich die Karte der Bodenbelastung klassifiziert nach Hintergrundwerten.

Verfahrensschritt 14

(1) Inhalt:

Bestimmung des Untersuchungsbedarfs

(2) Eingangsdaten:

Karte „Bodenbelastung klassifiziert nach Hintergrundwerten“, Karte „Schätzgüte“

(3) Methodik:

Nach einer Bewertungsmatrix, der die Klasseneinteilungen der Karten der „Bodenbelastung klassifiziert nach Hintergrundwerten“ und der „Schätzgüte“ zugrunde liegen, wird die Klassifizierung des Untersuchungsbedarfs festgelegt.

Tabelle1: Bewertungsmatrix zur Festlegung des Untersuchungsbedarfs

Schätzgüte	geschätzte Stoffgehalte (bewertet nach Hintergrundwerten)		
	gering	mittel	hoch
Hoch	gering	gering	mittel
Mittel	gering	mittel	hoch
Gering	Mittel	hoch	hoch

Verfahrensschritt 15

(1) Inhalt:

Ermittlung des Untersuchungsbedarfs und Messnetzplanung

Zur Erstellung der BBK ist ein Messnetz notwendig, das eine statistisch abgesicherte Aussage in allen im Untersuchungsgebiet



vorkommenden Kombinationen von Belastungsursachen ermöglicht und das zur Interpolation eine gleichmäßige Verteilung der Messpunkte aufweist.

Es sollte pro 4 qkm mindestens ein Probennahmepunkt vorhanden sein, pro Kombination sollten bei einem Maßstab von 1:50.000 mindestens 10 Proben erfolgt sein.

Einen Überblick über den Untersuchungsbedarf und eine Grundlage für die weitere Messnetzplanung in Abhängigkeit zur Höhe der Belastung gibt die Karte des Untersuchungsbedarfs. Der Fachexperte legt auf Grundlage dieser Informationen die weiteren Probennahmestellen fest.

(2) Eingangsdaten:

Karte des Untersuchungsbedarfs

(3) Methodik:

Zunächst wird die Anzahl der noch benötigten Proben für die einzelnen, durch die Kollektive der Einflussgrößen gebildeten Raumeinheiten festgelegt. Anschließend werden die Probennahmepunkte auf Basis der Karte des Untersuchungsbedarfs festgelegt.



Steckbrief - NRW **- Bodenbelastungskarten Siedlungsbereich (BBK_S) -**

1. Ziel

Während die Methode zur Erstellung digitaler Bodenbelastungskarten für den Außenbereich fertiggestellt ist (LUA 2000), wurden zur Erstellung von Bodenbelastungskarten für den Siedlungsbereich (BBK_S) bisher "Grundlagen und Empfehlungen" erarbeitet (BAR-KOWSKI et al. 2002). In den Siedlungsbereichen der Städte Düsseldorf, Duisburg und Wuppertal werden Pilotprojekte durchgeführt, die Hinweise auf eine entsprechende Vorgehensweise geben sollen.

In der BBK_S werden zur Zeit zwei Methoden zur Ermittlung der flächenhaften Bodenbelastung im Siedlungsbereich diskutiert: eine Methode zum Einfluss des immissionsbedingten Anteils an der Bodenbelastung und eine Methode zum Einfluss der Substrate an der Bodenbelastung. Die genannten Einflüsse können in den einzelnen Untersuchungsgebieten eine unterschiedliche Bedeutung haben.

2. Untersuchungsparameter

Als Untersuchungsparameter werden die Stoffgehalte in Böden folgender Stoffgruppen betrachtet:

- Schwermetalle
- Persistente organische Stoffe: PCB (polychlorierte Biphenyle), PAK (polyzyklische aromatische Kohlenwasserstoffe) und Dioxine/Furane (PCDD/F).

3. Anwendungsbereich

Es werden die Siedlungsbereiche untersucht. Gebiete, die bereits in der BBK_A bearbeitet wurden oder Ausschlussflächen sind, werden nicht berücksichtigt.

4. Angewandeter Maßstab

BBK-S werden je nach Qualität und Maßstäben der Datengrundlagen in einem Maßstabsbereich von 1:5.000 bis 1:10.000 (20.000) erstellt.

5. Datengrundlage

Datengrundlagen bilden zum einen die punktbezogen erhobenen Stoffgehalte in Böden.

Des weiteren werden flächendeckende Informationen über die Untersuchungsgebiete in Form von Karten benötigt. Es werden insbesondere folgende **fachspezifischen Karten** benötigt:

- Topographische Basiskarte (empfohlen DGK 5)
- Karte der Nutzungsarten (z.B. ATKIS, Realnutzungskartierung)
- Bodenkarte (BK 50, BK 5) und geologische Karte für Ausgangsgestein, Bodentyp, Bodenart, Grund- und Stauwasserverhältnisse, Humus- und Kalkgehalt
- Weitere Karten zur Hydrologie, Hydrogeologie, Ingenieurgeologie, gegebenenfalls bergbauliche Karten
- Trümmerschuttkataster, Kriegsschadenskarten
- Versiegelungskarten, Generalentwässerungsplan
- Historische (topografische) Karten
- Luftbilder



- kommunale Altstandort-/ Altablagerungsverzeichnisse
- Baugrundkarten

6. Methodenbeschreibung

Das Ablaufdiagramm und die Erläuterungen zur gestuften Vorgehensweise bei der Bearbeitung einer BBK_S sind in Abschnitt 12 dargestellt. Zunächst sind alle relevanten Daten- und Kartengrundlagen zu recherchieren und aufzubereiten. Die daraufhin zu erstellende Konzeptkarte entsteht durch Verschneiden wesentlicher Grundlageninformationen. Schließlich ist ein Testgebiet auszuwählen und abzugrenzen. In den nächsten Arbeitsschritten sollten im Testgebiet gleichzeitig die Methoden zur Erfassung der substratbedingten und der auf Immissionen zurückführenden Bodenbelastungen umgesetzt werden. In Abhängigkeit vom Ergebnis der ersten Auswertungen im Testgebiet sind verdichtende Probennahmen, ergänzende Auswertungen und die Übertragung auf das übrige Untersuchungsgebiet zu planen und umzusetzen.

7. Ergebnisse

Als Ergebnis werden Karten der flächenhaften Bodenbelastung erstellt.

8. Aussagesicherheit

In den Pilotprojekten wurden verschiedene Möglichkeiten angesprochen. Eine abgestimmte Vorgehensweise kann es nicht geben.

9. Einsatz im Vollzug

Bodenbelastungskarten bieten verschiedene Möglichkeiten zur Unterstützung der Bodenschutzbehörden im Vollzug. Dazu zählen insbesondere:

1. Abgrenzung von Gebieten mit einheitlichen Hintergrundwerten
2. Ermittlung und Abgrenzung von Gebieten im Hinblick auf das Einbringen von Materialien (§ 12 BBodSchV)
3. Ermittlung und Abgrenzung von Gebieten mit geogen / naturbedingt oder großflächig siedlungsbedingt erhöhten Stoffgehalten
4. Beurteilung der stofflichen Bodenbelastung im Einflussbereich von Emittenten
5. Ursachenbezogene Bewertung von Einzelflächen anhand von Hintergrundwerten
6. Ermittlungen zur Erfassung von schädlichen Bodenveränderungen und Verdachtsflächen (§ 5 LBodSchG) und deren Abgrenzung
7. Abwägungs- und Kennzeichnungsgrundlage im Rahmen der Bauleitplanung

10. Bearbeitungsstand

BBK_S werden derzeit in 3 Pilotprojekten (Düsseldorf, Duisburg, Wuppertal) sowie in 8 weiteren Städten des Landes NRW erstellt. Die Bearbeitung wird in den Untersuchungsgebieten an die jeweils vorliegenden Gegebenheiten (vorwiegender Einfluss von Immissionen oder Substraten, Größe und Struktur des Gebietes, ...) angepasst.

11. Quellen

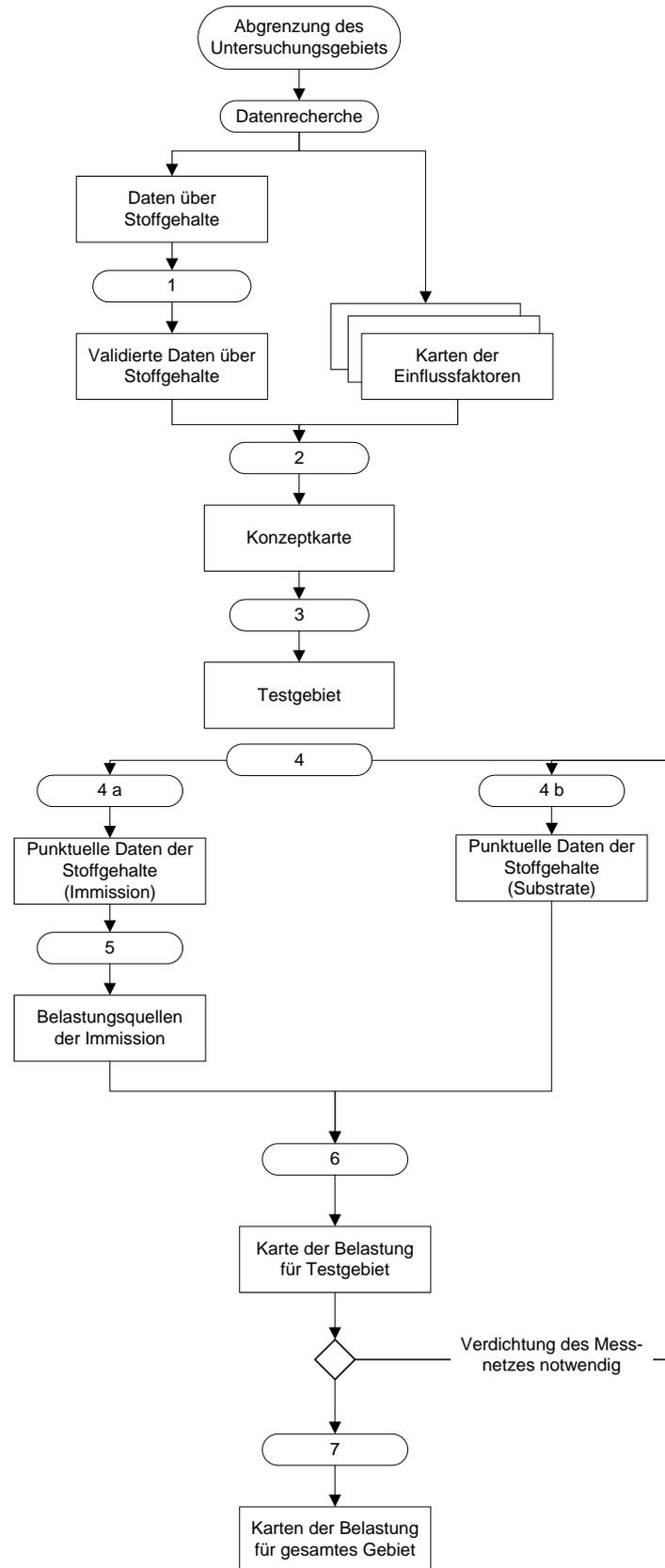
- Landesumweltamt NRW (LUA)(2000): Leitfaden zur Erstellung digitaler Bodenbelastungskarten Teil 1: Außenbereiche. Merkblätter 24. Hrsg.: Landesumweltamt des Landes Nordrhein-Westfalen, Essen.



- Barkowski, D., Bleier, M., Krüger, G. , Meuser, H., Stellmacher, G. (2002): Grundlagen und Empfehlungen zur Erstellung digitaler Bodenbelastungskarten im Siedlungsbereich, Projektbericht P 201082, Auftraggeber Landesumweltamt NRW.

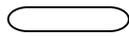


12. Abgestuftes Vorgehen zur Bearbeitung einer BBK_S





Legende:



Verfahrensschritt. Ist ein Verfahrensschritt mit einer Nummer gekennzeichnet, ist dieser in der untenstehenden Liste detailliert erläutert.



Objekt. Daten oder Karten, die Eingangsdaten oder das Hauptergebnis eines Verfahrensschritts darstellen.



Verbindung zwischen Verfahrensschritten und Objekten.

Verfahrensschritte

Verfahrensschritt 1

- (1) Inhalt:** Validierung der Daten der Stoffgehalte anhand ihrer Metadaten
Es wird überprüft, ob die für die weitere Auswertung der Messwerte des betrachteten Stoffgehalts notwendigen Metainformationen bekannt sind. Es werden nur die Datensätze in die weiteren Untersuchungen einbezogen, von denen bestimmte Mindestangaben vorliegen.
- (2) Eingangsdaten:** Daten der Stoffgehalte im Oberboden
- (3) Methodik:** Die Messwerte des betrachteten Stoffgehalts werden hinsichtlich der Metainformationen
- Gauß-Krüger-Koordinaten
 - Nutzung und Nutzungsgeschichte
 - Substrat der Bodenbildung, Art und Anteil technogener Substrate
 - Bodenprofil
 - Probennahme mit Angabe der Tiefenbereiche
 - Datum der Probennahme und Identität des Probenehmers
 - Probenvor- und -aufbereitung
 - Analyse der Fraktion < 2 mm (gem. BBodSchV)
- überprüft. Wenn möglich, werden fehlende Angaben ergänzt, wenn nicht, wird der Datensatz nicht weiter betrachtet. Durch diese Validierung wird der Datenbestand in der Regel reduziert.
- Zur Auswertung des immissionsbedingten Anteils der Schadstoffbelastung werden weitere Angaben über die Punktdaten benötigt:
- Lange Zeit ungestörter Bereich
 - Rasen, Brache, Grünland oder Wiese als Vegetationsbedeckung
 - Einhaltung der Mindestabstände zu Nutzungsgrenzen bzw. die Immission beeinflussenden vertikalen Objekten
 - Flächenbezogene Mischprobe einer Probennahmefläche geringer Ausdehnung (bis 1000 m²)

Verfahrensschritt 2

- (1) Inhalt:** Erstellung einer Konzeptkarte
- (2) Eingangsdaten:** Auswertung aller Grundlagenkarten



- (3) **Methodik:** Alle Grundlagenkarten werden ggf. nach vorheriger Digitalisierung überlagert und verschnitten. Das Ergebnis dieses Schrittes ist eine digitale Konzeptkarte.

Verfahrensschritt 3

- (1) **Inhalt:** Auswahl und Abgrenzung eines Testgebiets
- (2) **Eingangsdaten:** Punktuelle Daten der Stoffgehalte, digitale Konzeptkarte
- (3) **Methodik:** Auf Basis der Konzeptkarte und aller recherchierten Daten wird ein Testgebiet, das Teil des Untersuchungsgebietes ist, festgelegt. Verschiedene Kriterien sind bei der Festlegung des Testgebiets zu beachten. Zum einen sollte es repräsentativ für das gesamte Untersuchungsgebiet sein. Darüber hinaus sollte es sich vom Kerngebiet des Untersuchungsgebiets bis zum Rand erstrecken und eine große Nutzungsheterogenität aufweisen. Es sollte eine Größe zwischen 10-20% des Siedlungsgebiets haben und mindestens 50% Siedlungsbereich überdecken.

Verfahrensschritt 4

- (1) **Inhalt:** Überblicksuntersuchungen im Testgebiet
- (2) **Eingangsdaten:** Stoffdaten
- (3) **Methodik:** Im Zuge der Probennahmekampagne werden sowohl die Proben zur Erfassung der immissionsbezogenen Komponente (4a), als auch die Proben zur Erfassung der substratbezogenen Komponente (4b) der Bodenbelastung genommen.

Verfahrensschritt 4a

- (1) **Inhalt:** Probennahmeplanung und -durchführung zur Erfassung des immissionsbedingten Anteils der Bodenbelastung
- (2) **Eingangsdaten:** Punktuelle Daten der Stoffgehalte, digitale Konzeptkarte
- (3) **Methodik:** Die Probennahmestellen für die räumliche Analyse des immissionsbedingten Anteils der Bodenbelastung werden anhand der folgenden Kriterien ausgewählt:
- Es werden alle relevanten Nutzungsarten beprobt.
 - Es werden möglichst einheitliche Vegetationsverhältnisse gewählt.
 - Es werden ausschließlich Flächen, die lange Zeit unberührt blieben, betrachtet.
 - Die Probennahmeflächen müssen eine Größe von 200-1.000 m² aufweisen.

Verfahrensschritt 4b

- (1) **Inhalt:** Probennahmeplanung und -durchführung zur Erfassung technogener Substrate
- (2) **Eingangsdaten:** Punktuelle Daten der Stoffgehalte, digitale



- (3) Methodik:** Zur Erfassung der technogenen Substrate sollten stadttypische Bodennutzungstypen (z.B. Grünanlagen, Abstandsrünflächen, Sportanlagen, Kleingartenanlagen, Hausgärten) beprobt werden. Können aufgrund der historischen Nutzungsabfolge Flächen mit vergleichbarem technogenen Substrat definiert werden, so sind diese bei der Auswahl der Probennahmeflächen zu berücksichtigen.

Verfahrensschritt 5

- (1) Inhalt:** Ermittlung von Belastungsquellen
a) Immissionen
b) technogene Substrate
- (2) Eingangsdaten:** a) Immissionsdaten, Daten aus Schritt 4a
b) Daten von technogenen Substraten, Daten aus Schritt 4b
- (3) Methodik:** Die Quellen von Bodenbelastungen an einem Standort können vielfältig sein. Wenn auch in den Immissionen und den Ablagerungen technogener Substrate häufig die Hauptbelastungsquellen zu sehen sind, können andere Eintragswege im Einzelfall diese Quellen überdecken, die Belastung erhöhen, aber auch reduzieren.
- a) Zur Beurteilung, inwieweit die Immission zu relevanten Bodenbelastungen geführt hat, dienen in einem ersten Schritt vorhandene Immissionsdaten selbst. Über die Umrechnung z.B. des Cadmium- bzw. Bleieintrags in den Boden (unter Verwendung der Lagerungsdichte) gelingt eine erste Einschätzung des Immissionsanteils für die oberste Bodenschicht. Dabei ist allerdings zu berücksichtigen, dass Messungen zur Immission nur für die letzten Jahrzehnte vorliegen, der immissionsbürtige Schadstoffeintrag aber häufig viel weiter in die Vergangenheit zurückreicht. Den nächsten Schritt stellt die Auswertung der immissionsbezogenen Proben dar; Ziel der dabei gewählten Strategie zur Probennahme ist es, den Einfluss der anderen Belastungsursachen in den Hintergrund treten zu lassen. Dabei liegt das Augenmerk v.a. auf denjenigen Proben, bei denen andere Belastungsursachen nicht zu erkennen sind.
- b) Zur Beurteilung der Relevanz der technogenen Substrate werden zunächst insbesondere vorhandene Bodendaten beurteilt, aber auch aktuelle und historische Betriebe unter dem Aspekt einbezogen, ob sie Quellen solcher technogenen Substrate darstellen. In einem zweiten Schritt werden die Proben der Messkampagne im Hinblick auf Art und Umfang technogener Substrate, Höhe der Bodenbelastung und der Korrelation beider Größen ausgewertet. Die Relevanz des Einflusses technogener Substrate ist statistisch nachzuweisen. Bei der Auswertung ist jedoch zu berücksichtigen, dass Oberböden gleichzeitig erheblich durch Immissionseinfluss belastet sein können und dann gegebenenfalls nicht in die Auswertung einbezogen werden dürfen. Weiterhin ist zu beachten, dass die Ablagerung natürlicher Substrate



(z.B. Sand) den Schadstoffgehalt von Gemengen aus technologischen und natürlichen Substraten auch reduzieren kann.

Verfahrensschritt 6

- (1) Inhalt:** Erstellung der BBK_S im Testgebiet
- (2) Eingangsdaten:** flächenhafte Schätzung im Testgebiet,
- (3) Methodik:** Die Grundlage für die flächenhafte Darstellung der Bodenbelastung stellen die punktbezogenen bzw. stichprobenbasierten Daten zur Bodenbelastung dar, die in die Fläche übertragen werden. Die stoffliche Bodenbelastung ergibt sich dann aus der Überlagerung der immissions- und der substratbezogenen flächenhaften Bodenbelastung.
→ weitere Methodik s. Barkowski et al. 2002.

Verfahrensschritt 7

- (1) Inhalt:** Übertragung auf das gesamte Untersuchungsgebiet
- (2) Eingangsdaten:** punktuell gemessene Bodenwerte
- (3) Methodik:** Eine Übertragung der Methode zur Ermittlung der immissions- und substratbezogenen Bodenbelastung vom Testgebiet auf den gesamten Siedlungsbereich ist dann möglich und angezeigt, wenn innerhalb des Testgebietes, gegebenenfalls nach Verdichtung, sinnvolle Ergebnisse erreicht wurden.

→ weitere Methodik s. Barkowski et al. 2002.



Steckbrief - Sachsen

1. Ziel

Das Bodenmessprogramm des Freistaates Sachsen zielt auf eine flächendeckende Bestandsaufnahme der Bodenbelastungen durch organische und anorganische Schadstoffe ab. Zudem sollen quasi – natürliche Hintergrundwerte einen Nachweis und eine Bewertung der Belastungssituation ermöglichen.

2. Untersuchungsparameter

Es werden organische und anorganische Schadstoffe untersucht.

3. Anwendungsbereich

Es wurden Karten der Schwermetallbelastung für den Freistaat Sachsen berechnet.

4. Angewandeter Maßstab

Die Bodenbelastungskarten liegen in einem Maßstab von 1:750.000 vor.

5. Datengrundlage

Vorhandene stofflich relevante Daten, Bodenmessnetz Raster 4 km x 4 km (Gitterpunkte der TK 25) für das Gesamtgebiet Sachsen, Bodenmessnetz Raster 1 km x 1 km für ausgewählte Teilgebiete, die zu bekannten oder vermuteten Belastungsgebieten zählen.

6. Methodenbeschreibung

Im Abschnitt 12 findet sich ein Ablaufdiagramm und die zugehörigen Verfahrensschritte. Der Flächenbezug wurde durch das IDW – Verfahren hergestellt.

7. Ergebnisse

Aus diesem Verfahren resultieren **Karten der stofflichen Bodenbelastungen**.

8. Aussagesicherheit

Die Aussagesicherheit der erzielten Ergebnisse wurde nicht betrachtet.

9. Einsatz im Vollzug

Die Karten der Bodenbelastungen werden zu einer ersten Überprüfung der Überschreitung von Vorsorge- und Prüf- und Maßnahmenwerten verwendet.

10. Bearbeitungsstand

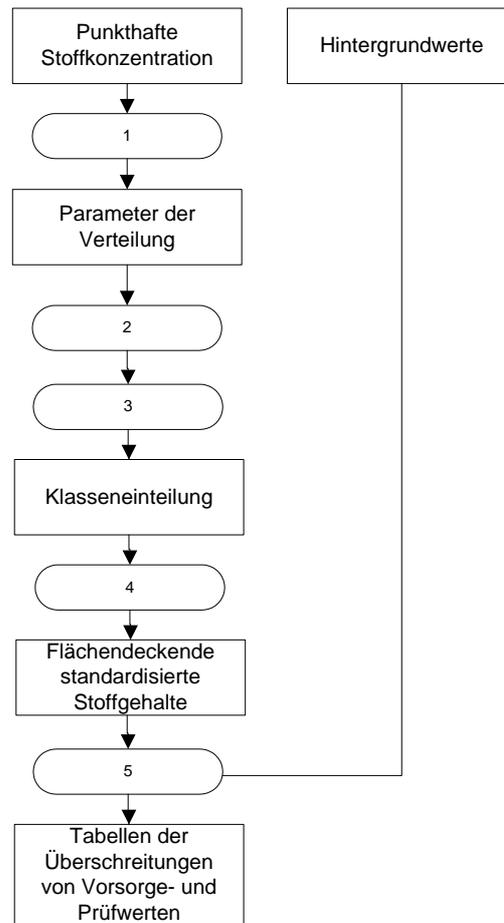
Die Schwermetallbelastungskarte wird zur übersichtsmäßigen Abschätzung der Schwermetallgehalte der Böden im Vollzug und zur Information der interessierten Öffentlichkeit eingesetzt. Weitere Bodenbelastungskarten aus allen in Sachsen derzeit vorliegenden stofflichen Daten im Maßstab 1 : 400 000 sind zur Zeit in Bearbeitung.

11. Quellen

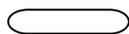
- Bodenatlas des Freistaates Sachsen, Teil 3, Bodenmessprogramm, Bodenmessnetz Raster 4km x 4km, Herausgeber: Sächsisches Landesamt für Umwelt und Geologie.



12. Ablaufdiagramm



Legende:



Verfahrensschritt. Ist ein Verfahrensschritt mit einer Nummer gekennzeichnet, ist dieser in der untenstehenden Liste detailliert erläutert.



Objekt. Daten oder Karten, die Eingangsdaten oder das Hauptergebnis eines Verfahrensschritts darstellen.



Verbindung zwischen Verfahrensschritten und Objekten.

Verfahrensschritte

Verfahrensschritt 1

- (1) **Inhalt:** Ermittlung der deskriptiven statistischen Parameter
- (2) **Eingangsdaten:** Daten der Stoffgehalte
- (3) **Methodik:** Aus den nach Auflage-, mineralischen Oberboden- und Unterbodenhorizonten sortierten Bodenproben und (im Fall der Beprobung in mehreren Schichten) auch über die Horizonte gemittelten Proben werden statistische Kennwerte wie arithm. Mittelwert, Median, Vari-



anz und das 90. Perzentil für die Haupt- und Spurenelemente ermittelt.

Verfahrensschritt 2

- (1) **Inhalt:** Prüfung der Verteilung auf Normal- oder Lognormalverteilung
- (2) **Eingangsdaten:** Daten der Stoffgehalte
- (3) **Methodik:** Die Daten werden mit dem Statistikprogramm SPSS graphisch auf Normal- oder Lognormalverteilung geprüft. Da die geostatistischen Interpolationsverfahren eine Normalverteilung fordern, werden lognormalverteilte Daten vor der Interpolation logarithmiert.

Verfahrensschritt 3

- (1) **Inhalt:** Klasseneinteilung
- (2) **Eingangsdaten:** Daten der Stoffgehalte
- (3) **Methodik:** Auf der Grundlage der Häufigkeitsverteilung der Werte werden diese in max. 11 Klassen eingeteilt. Messwerte unterhalb der Bestimmungsgrenze werden dabei auf den Wert der halben Bestimmungsgrenze angesetzt. Die Klassenteilung für die logarithmierten Daten erfolgt auf der logarithmischen Skala, welche anschließend zur Darstellung in den Karten zurücktransformiert wurde. Organische Auflage, Ober- und Unterboden erhalten zur besseren Vergleichbarkeit pro Element die gleiche Klassenteilung.

Verfahrensschritt 4

- (1) **Inhalt:** Interpolation der Werteoberfläche
- (2) **Eingangsdaten:** Daten der Stoffgehalte (u.U. logarithmiert)
- (3) **Methodik:** Es wird mittels der Inverse-Distanz-Gewichtung eine Interpolation auf eine Rastergröße von 1000m x 1000m durchgeführt. Die interpolierten Originalwerte in den Zellen werden anschließend mit der unter Schritt 3 festgelegten Klassenteilung klassifiziert, d.h. sie bekommen eine Legendenummer zugewiesen.

Verfahrensschritt 5

- (1) **Inhalt:** Bewertung der Belastungssituation
- (2) **Eingangsdaten:** geschätzte Stoffgehalte, Hintergrundwerte
- (3) **Methodik:** Anhand des Vergleich mit Hintergrundwerten wird eine Bewertung der Belastungssituation in tabellarischer Form vorgenommen. Dabei wird insbesondere die Überschreitung von Vorsorge und Prüf- und Maßnahmenwerten untersucht.



Steckbrief - Thüringen

- Regionalisierung von Bodenschutzdaten auf Auenstandorten -

1. Ziel

Im Rahmen des Projektes „Untersuchungen von Böden auf Cadmium im Überschwemmungsgebiet der Werra“ (Thüringer Landesanstalt für Umwelt, 1999) werden Methoden zur flächenbezogenen Bewertung von Bodenschutzdaten auf Auenböden erprobt.

2. Untersuchungsparameter

Untersuchungsparameter ist der Cadmiumgehalt in Oberböden in mg/kg .

3. Anwendungsbereich

Grünland in Auengebieten ohne weitere Differenzierung der Landnutzungen.

4. Angewandeter Maßstab

1: 25.000. Probennahmeraster von 200m*200m.

5. Datengrundlage

Die Datengrundlage wird durch Bodenproben des Cadmiumgehaltes, Luftbildaufnahmen des Frühjahrshochwassers im April 1994, Angaben über mobilitätsbeeinflussende Parameter wie pH-Werte, organischen Substanzen, Tongehalte und Kationenaustauschkapazitäten gebildet. Sie entstammen einer Rasterbeprobung mit 200 m Abstand zwischen den Probennahmeflächen.

6. Methodenbeschreibung

Es werden Korrelationsanalysen durchgeführt, um die Beziehung zwischen den Cadmiumgehalten und mobilitätsbeeinflussenden bodenphysikalischen und bodenchemischen Parametern zu analysieren. Anhand von Variogrammen werden räumliche Abhängigkeiten untersucht und darauf aufbauend das Ordinary Kriging (Programm SURFER) bzw. Verfahren IDW (MapInfo) zur Simulation der Verteilung der Cadmiumgehalte verwendet.

Im Abschnitt 12 befindet sich die Beschreibung des Verfahrens zur Ermittlung des Flächenbezugs der Cadmiumkonzentrationen.

7. Ergebnisse

Es liegt kein signifikanter Zusammenhang zwischen zu bodenphysikalischen/-chemischen Parametern vor. Die **Karte der geschätzten Stoffkonzentrationen** stellt flächendeckend die interpolierten Absolutwerte der Stoffkonzentrationen mittels Kriging bzw. IDW-Verfahren dar.

8. Aussagesicherheit

Es werden zur Aussagesicherheit keine Angaben gemacht.

9. Einsatz im Vollzug

Das Verfahren spezialisiert sich auf die Regionalisierung von Bodenschutzdaten im Auenbereich.

10. Bearbeitungsstand

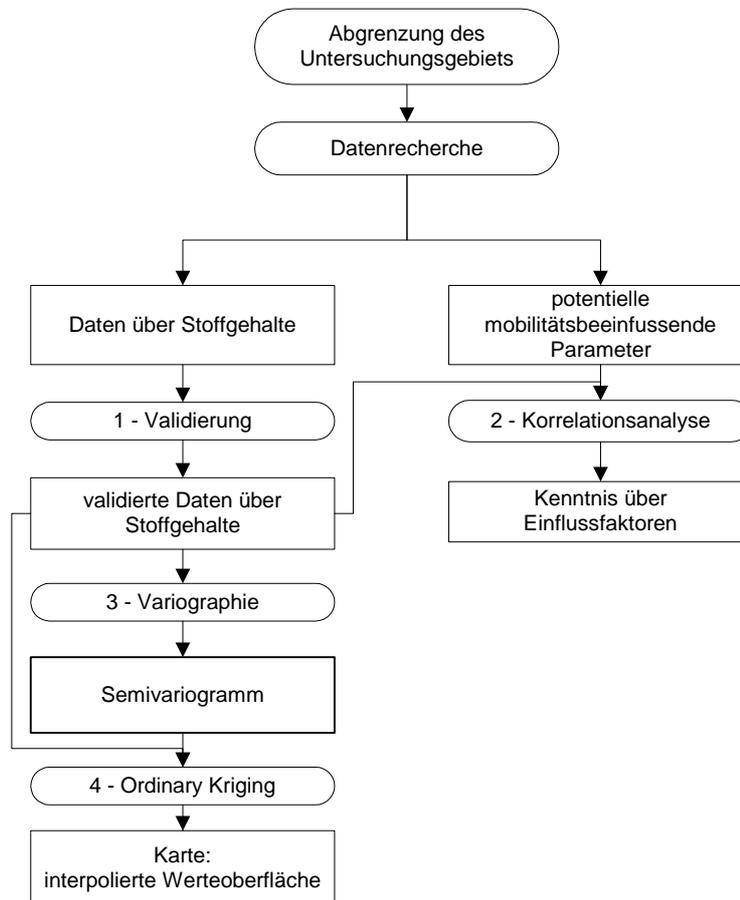
Das Verfahren wurde anhand von Daten aus den Auengebieten der Werra erprobt.



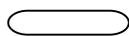
11. Quellen

- Steinert, R: Vom Punkt zur Fläche Teil 2. Auswertung Workshop „Flächenhafte Darstellung punktbezogener Daten über Stoffgehalte in Böden“. Umweltbundesamt, 2000.

12. Ablaufdiagramm



Legende:



Verfahrensschritt. Ist ein Verfahrensschritt mit einer Nummer gekennzeichnet, ist dieser in der untenstehenden Liste detailliert erläutert.



Objekt. Daten oder Karten, die Eingangsdaten oder das Hauptergebnis eines Verfahrensschritts darstellen.



Verbindung zwischen Verfahrensschritten und Objekten.



Verfahrensschritte

Verfahrensschritt 1

- (1) **Inhalt:** Validierung der Daten der Stoffgehalte
- (2) **Eingangsdaten:** Daten der Stoffgehalte im Boden
- (3) **Methodik:** Prüfung auf Normalverteilung und Ausreißertests.

Verfahrensschritt 2

- (1) **Inhalt:** Korrelationsanalyse
- (2) **Eingangsdaten:** Cadmiumwerte im Oberboden. Daten über potentielle Einflussfaktoren (pH-Wert, org. Substanz, Kationenaustauschkapazität, Tongehalt)
- (3) **Methodik:** Der auf Normalverteilung überprüfte, ausreißerbereinigte Gesamtdatensatz wird verwendet, um Korrelationsanalysen durchzuführen. Dabei soll untersucht werden, ob der pH-Wert, die organische Substanz, die Kationenaustauschkapazität oder der Tongehalt die Mobilität des Cadmiums signifikant beeinflussen.

Verfahrensschritt 3

- (1) **Inhalt:** Berechnung des Variogramms
- (2) **Eingangsdaten:** Werte der Stoffgehalte
- (3) **Methodik:** Es wird das experimentelle Variogramm der Cadmiumwerte bestimmt und dieses dem theoretischen, omnidirektionalen Variogramm angepasst.

Verfahrensschritt 4

- (1) **Inhalt:** Ordinary Kriging
- (2) **Eingangsdaten:** Cadmiumwerte
- (3) **Methodik:** Die Cadmiumwerte werden mit Hilfe des Ordinary Kriging Verfahrens interpoliert. So entsteht die Karte der flächenhaften Verteilung der Daten.



Ad hoc UA Punkt zu Fläche: Übersicht über Vollzugsaufgaben im Bodenschutz

1. Vorsorge, Besorgnis schädlicher Bodenveränderungen

Ifd. Nr.	Rechtsgrundlage	Vorgang	Flächentyp	Produkt der BSch-Behörde, Ergebnis	Bemerkung
1	Anhang 2, Nr. 4.1 BBodSchV Vorsorgewerte für Metalle	Prüfen des Vorsorgebereiches	Böden mit naturbedingt (geogenbedingt) und großflächig siedlungsbedingt erhöhten Hintergrundgehalten 1)	<i>Festlegung gebietsbezogener Vorsorgewerte</i>	eine Voraussetzung sind die Hintergrundwerte (Ifd. Nr. 4)
2	Anhang 2, Nr. 4.2 BBodSchV Vorsorgewerte für organische Stoffe	Prüfen des Vorsorgebereiches	Böden mit ≥ 8 % Humusgehalt	Fallbezogene Festsetzungen durch zuständige Behörden	eine Voraussetzung sind die Hintergrundwerte (Ifd. Nr. 4) spezielle Anforderungen für extrem humose Böden
3	§ 11 Abs. 1 u. 2 BBodSchV Zulässige Zusatzbelastung indirekt: BImSchG und UVP	Prüfung zusätzlicher Frachten, wenn a) Vorsorgewert b) zulässige Zusatzbelastung überschritten ist	a) Flächen, bei denen der Vorsorgewert bei einem Schadstoff überschritten ist b) Berücksichtigung der geogenen oder großflächig siedlungsbedingten Vorbelastung	Ablehnung oder Zustimmung bei Verfahren, die nicht nach § 3 Abs. 1 BBodSchG geregelt sind Welche könnten das sein?	wie soll Beachtung aussehen? Höhere Gehalte führen zu höheren oder geringeren zusätzlichen Frachten? sind nur die 7 Parameter der Vorsorgewerte BBodSchV relevant? siehe Ifd. Nr. 1, 2



lfd. Nr.	Rechtsgrundlage	Vorgang	Flächentyp	Produkt der BSch-Behörde, Ergebnis	Bemerkung
4	VwV Datenaustausch, Anhang 2.4 Boden	Ableitung von Hintergrundwerten	Alle Flächen mit naturnaher Nutzung	lokale Hintergrundwerte regionale Hintergrundwerte landesweite Hintergrundwerte bundesweite Hintergrundwerte	Grundlage für verschiedene Fragestellungen
4a		Ableitung von geogenen Grundgehalten	Alle Flächen mit naturnaher Nutzung	Grundgehalte für verschiedene Maßstabsebenen	Grundlage für verschiedene Fragestellungen
5	§ 9 Abs. 1 Satz 1 BBodSchV, Vorsorgewerte überschritten	Prüfen des Entstehens einer schädlichen Bodenveränderung bei div. Verfahren	Flächen, deren Gehalte die Vorsorgewerte überschreiten	Maßnahmen nach Besorgnisgrundsatz, Vorsorgeanforderungen gem. § 10 BBodSchV	einzelfallbezogene Betrachtung
6	§ 9 Abs. 1 Satz 2 BBodSchV, andere Schadstoffe	Abschätzung von Anreicherungsprozess und Stoffauswahl	Flächen mit erheblichen Anreicherungen anderer Schadstoffe	Maßnahmen nach Besorgnisgrundsatz, Vorsorgeanforderungen gem. § 10 BBodSchV	Was ist erheblich? Stoffkatalog? nach § 4 Abs. 1 der GefStoffV? wie lfd. Nr. 5
7	§ 9 Abs. 2 BBodSchV, erhöhte naturbedingte Schadstoffe	Abschätzung und Bewertung von Frachten und Transfers	erhebliche Freisetzung von Schadstoffen in Böden mit naturbedingt erhöhten Schadstoffgehalten	Maßnahmen nach Besorgnisgrundsatz, Vorsorgeanforderungen gem. § 10 BBodSchV	Was ist Freisetzung? ergänzende Untersuchungen zur Mobilität siehe lfd. Nr. 1, 2



lfd. Nr.	Rechtsgrundlage	Vorgang	Flächentyp	Produkt der BSch-Behörde, Folge, Ergebnis	Bemerkung
8	§ 9 Abs. 3 BBodSchV, siedlungsbedingte Schadstoffe	Ermitteln, Prüfen und Bewerten großflächig siedlungsbedingt erhöhter Schadstoffgehalte	erhebliche Freisetzung von Schadstoffen in Böden mit großflächig siedlungsbedingt erhöhten Schadstoffgehalten	Maßnahmen nach Besorgnisgrundsatz, Vorsorgeanforderungen gem. § 10 BBodSchV	Gehalte unterhalb von Prüfwerten Nicht zwingend! siehe lfd. Nr. 7

- 1) siedlungsbedingt erhöhte Gehalte: hierzu wird im UBA ein Vorhaben durchgeführt.
geogenbedingte Gehalte: Abstimmung mit GD erforderlich



2. Gefahrenabwehr

lfd. Nr.	Rechtsgrundlage	Vorgang	Flächentyp	Produkt der BSch-Behörde, Folge, Ergebnis	Bemerkung
9	§ 9 Abs. 1 BBodSchG Sachverhaltsermittlung §3 Abs. 1-3 BBodSchV	Sachverhaltsermittlung schädli. Bodenveränderung, Altlast (ggf. durch orientierende Untersuchung) bei Anfangsverdacht	a) Abgrenzen der Verdachtsfläche b) Möglichkeit der Schadstoffausbreitung in der Umwelt	"Anordnung" zur Gefährdungsabschätzung	einzelfallbezogen Abgrenzung der Flächen nach Grundstücken und Flurgrenzen
10	§ 9 Abs. 2 BBodSchG Gefährdungsabschätzung schädli. Bodenveränderungen u. Altlasten §3 Abs. 4,5 BBodSchV 1)	Detailuntersuchung bei hinreichendem Verdacht einer schädlichen Bodenveränderung, Altlast	a) Räumliche Abgrenzung von Schadstoffanreicherungen (b) Abgrenzen der Fläche	"Anordnung" zur Sanierungsuntersuchung/ Sanierungsplan	einzelfallbezogen Abgrenzung der Flächen nach Grundstücken und Flurgrenzen
11	§§ 13, 14 BBodSchG Sanierungsuntersuchung, Sanierung 2)	Sanierungsuntersuchung Sanierungsplanung	Festlegen des Maßnahmenraums	Sanierungsanordnung, Vertrag, Verbindlicherklärung	einzelfallbezogen Abgrenzung der Flächen nach Grundstücken und Flurgrenzen
12	§ 21 Abs. 2 BBodSchG Kann - Bestimmung der Länder Schädliche Bodenveränderungen	Erfassung von Verdachtsflächen, Umgang mit schädlichen Bodenveränderungen	Verdachtsflächen, Flächen mit schädlichen Bodenveränderungen	"Anordnung" zur Sanierungsuntersuchung, Erstellen von Sanierungsplänen, Anordnung zu Eigenkontrollmaßnahmen	einzelfallbezogen Landesrecht, Flächengröße der Gebiete?



lfd. Nr.	Rechtsgrundlage	Vorgang	Flächentyp	Produkt der BSch-Behörde, Folge, Ergebnis	Bemerkung
13	§ 21 Abs. 3 BBodSchG Kann - Bestimmung der Länder - Schädliche Bodenveränderungen	Prüfen von gebietsbezogenen Maßnahmen	Gebiete, in denen flächenhaft schädliche Bodenveränderungen auftreten oder zu erwarten sind	Bestimmen von Gebieten und Herbeiführen von gebietsbezogenen Maßnahmen	Landesrecht, zwischen Vorsorge- und Prüfwerten? Welche Parameter siehe lfd. Nr. 1, 2

Bezüge zur BBodSchV?

- 1) Es fehlt der Punkt "Bewertung; Feststellung einer schädlichen Bodenveränderung bzw. Altlast"
- 2) Es fehlt der Fall der Festlegung von Maßnahmen ohne Sanierungsuntersuchungen



3. Regelungen nach § 12 BBodSchV

lfd. Nr.	Rechtsgrundlage	Vorgang	Flächentyp	Produkt der BSch-Behörde, Folge, Ergebnis	Bemerkung
14	§ 12 Abs. 3 BBodSchV Auf- und Einbringen von Materialien	Prüfen der Verwertungseignung: Untersuchung der Qualität und Herkunft des Bodenmaterials	Gebiete mit Schadstoffgehalten > Vorsorgewerte (bzw. > 70 % der Vorsorgewerte bei landw. Nutzung) nur durchwurzelbare Bodenschicht	Verzicht auf Notwendigkeit von Materialuntersuchungen bei Stellungnahmen	einzelfallbezogen Reduzierung des notwendigen Untersuchungsumfanges, Abweichung von DIN 19731 sind nur die Parameter der Vorsorgewerte BBodSchV relevant? (nein!)
15	§ 12 Abs. 10 BBodSchV Auf- und Einbringen von Materialien	Prüfung der Verwertungseignung: Verlagerung von Bodenmaterial innerhalb von Gebieten mit erhöhten Schadstoffgehalten	Gebiete erhöhter Schadstoffgehalte in Böden können von Behörde festgelegt werden nur durchwurzelbare Bodenschicht	Stellungnahme in Beteiligungsverfahren bei Auffüllungsantrag nach NatSchG oder BauGB	einzelfallbezogen Reduzierung des notwendigen Untersuchungsumfanges, Abweichung von DIN 19731; sind nur die Parameter der Vorsorgewerte BBodSchV relevant? Sicherheit der Abgrenzung!

bei Berücksichtigung der Vollzugshilfe §12 BBodSchV (LABO-AG; ZU §12 BBodSchV gibt es ggf. mehr Vollzugsaufgaben)



4. Baurecht

lfd. Nr.	Rechtsgrundlage	Vorgang	Flächentyp	Produkt der BSch-Behörde, Folge, Ergebnis	Bemerkung
16	§ 5 Abs. 3, 3 BauGB, Inhalt des FNP Kennzeichnungspflicht	Anhörungsverfahren FNP, Prüfung von Konflikten bei baulicher Nutzung	Darstellung der für bauliche Nutzung vorgesehenen Flächen, deren Böden erheblich mit umweltgefährdenden Stoffen belastet sind	Hinweis zur Kennzeichnungspflicht im FNP	Kriterien der Ausweisung Wirkungspfad Boden-Mensch, Boden-Pflanze Schwelle der Erheblichkeit? Verdachtsflächen?
17	§ 9 Abs. 5, 3 BauGB, Inhalt des Bebauungsplans Kennzeichnungspflicht	Anhörungsverfahren Prüfen von Flächen, deren Böden erheblich mit umweltgefährdenden Stoffen belastet sind	Flächen, deren Böden erheblich mit umweltgefährdenden Stoffen belastet sind	Hinweis zur Pflicht, solche Flächen im Bebauungsplan zu kennzeichnen Mitteilungspflicht über Anhaltspunkte bzgl. Schädlicher Bodenveränderungen	im textlichen Teil (Begründung) sind nähere Hinweise aufzunehmen gilt auch bzgl. Gefahrenabwehr. siehe lfd. Nr. 16
18	§ 51 Abs. 5, 1 BauGB Allgem. Vorschriften Bauleitplanung (auch expl. § 34 Abs. 1)	Anhörungsverfahren Prüfen, ob Bodenverhältnisse gesunde Wohn- und Arbeitsverhältnisse gewähren	Beeinträchtigungen des Menschen über Flächen, deren Böden mit umweltgefährdenden Stoffen belastet sind	Hinweise, Besorgnis	Beurteilung durch die Gesundheitsbehörden siehe lfd. Nr. 16