



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

## **Abschlussbericht**

Teil 2: Auswertebeispiele

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





## INHALTSVERZEICHNIS

<b>INHALTSVERZEICHNIS .....</b>	<b>II</b>
<b>ABBILDUNGSVERZEICHNIS .....</b>	<b>IV</b>
<b>TABELLENVERZEICHNIS.....</b>	<b>VIII</b>
<b>1 EINLEITUNG.....</b>	<b>1</b>
<b>2 FALLBEISPIEL SACHSEN .....</b>	<b>2</b>
2.1 Untersuchungsgebiet und Datengrundlage .....	2
2.2 Untersuchungsverfahren .....	11
2.3 Durchführung und Ergebnisse der statistischen Auswertung von B(a)P.....	11
2.3.1 Datenvorverarbeitung und –exploration .....	11
2.3.1.1 Datengrundlage .....	12
2.3.1.2 Datenvalidierung .....	12
2.3.1.3 Räumliche Visualisierung der Basisdaten .....	12
2.3.1.4 Plausibilität von Raum- und Punktdaten prüfen .....	12
2.3.1.5 Umgang mit Werten unterhalb der Bestimmungsgrenze.....	14
2.3.1.6 Stoffgehalte nach homogenen Raumeinheiten klassifizieren .....	14
2.3.1.7 Repräsentativität der Stichprobe prüfen .....	15
2.3.1.8 Verteilungen analysieren .....	18
2.3.1.9 Signifikanz der Einflussfaktoren überprüfen .....	21
2.3.1.10 Extremwerte untersuchen .....	21
2.3.1.11 Raumeinheiten endgültig festlegen.....	22
2.3.2 Erhebung statistischer Kennwerte .....	22
2.3.3 Räumliche Interpolation .....	25
2.3.3.1 Modell.....	25
2.3.3.2 Indikator Kriging .....	26
2.3.3.3 Interpolation des B(a)P-Gehalts oberhalb der Bestimmungsgrenze...	27
2.3.3.4 Gesamtinterpolation.....	29
2.4 Durchführung und Ergebnisse der statistischen Auswertung von Arsen .....	30
2.4.1 Datenvorverarbeitung und -exploration.....	30
2.4.1.1 Visualisierung der raumbezogenen Basisdaten .....	30
2.4.1.2 Fachliche Datenvalidierung .....	31
2.4.1.3 Bildung von Raumeinheiten .....	31
2.4.1.4 Klassifikation der Stoffgehalte nach Raumeinheiten.....	31
2.4.1.5 Repräsentanzanalyse .....	31
2.4.1.6 Verteilungen analysieren .....	38
2.4.1.7 Ausreißeranalyse.....	44
2.4.1.8 Korrelationsanalyse .....	45
2.4.1.9 Signifikante Einflussfaktoren .....	48
2.4.1.10 Repräsentanzanalyse .....	50
2.4.1.11 Aggregierung von Raumeinheiten .....	52
2.4.2 Erhebung statistischer Kennwerte .....	56
2.4.2.1 Statistische Kennwerte.....	57
2.4.2.2 Konfidenzintervalle .....	57
2.4.3 Räumliche Interpolation der As-Gehalte in Sachsen.....	58
2.4.3.1 Ordinary Kriging nach Standardisierung mit geom. Mittel.....	59
2.4.3.2 Kriging nach Normal-Score-Transformation.....	64



2.4.3.3	Lognormal Kriging mit z-Transformation .....	68
2.4.3.4	Kreuzvalidierung .....	72
<b>3</b>	<b>FALLBEISPIEL BADEN-WÜRTTEMBERG .....</b>	<b>74</b>
3.1	Untersuchungsgebiet und Datengrundlage .....	74
3.2	Durchführung und Ergebnisse der statistischen Auswertung von Blei .....	79
3.2.1	Datenvorverarbeitung und -exploration .....	79
3.2.1.1	Visualisierung der raumbezogenen Basisdaten .....	79
3.2.1.2	Fachliche Datenvalidierung .....	80
3.2.1.3	Bildung von Raumeinheiten .....	80
3.2.1.4	Klassifikation der Stoffgehalte nach Raumeinheiten.....	82
3.2.1.5	Güte- und Repräsentanzanalyse der Stichprobe .....	82
3.2.1.6	Verteilungen analysieren .....	90
3.2.1.7	Extremwertanalyse.....	94
3.2.2	Räumliche Interpolation .....	94
3.2.2.1	Transformation und Standardisierung .....	94
3.2.2.2	Empirisches und theoretisches Variogramm .....	97
3.2.2.3	Kreuzvalidierung .....	100
3.2.2.4	Interpolierte Werteoberfläche der restandardisierten Daten .....	102
3.2.2.5	Konfidenzintervalle .....	103
3.2.3	Aussagesicherheit und Messnetzplanung .....	103
3.2.3.1	Modell.....	103
3.2.3.2	Abschätzung der mittleren Unterschreitungswahrscheinlichkeiten..	104
3.2.3.3	Transformation auf Indikatorwerte .....	106
3.2.3.4	Variogrammanalyse .....	106
3.2.3.5	Bestimmung der lokalen Bleigehalt-Verteilungen .....	107
3.2.3.6	Bestimmung von Überschreitungswahrscheinlichkeiten.....	110
3.2.3.7	Bestimmung von lokalen Varianzen.....	110
3.2.3.8	Messnetzplanung .....	112
<b>4</b>	<b>FAZIT .....</b>	<b>114</b>



## ABBILDUNGSVERZEICHNIS

Abb. 2- 1: Höhenmodell des Landes Sachsen. ....	2
Abb. 2- 2: Geogener Grundgehalt von Arsen. ....	4
Abb. 2- 3: Bodenübersichtskarte von Sachsen (BÜK 400). ....	8
Abb. 2- 4: Karte der Nutzungen in Sachsen. ....	9
Abb. 2- 5: Arsenverteilung der gemessenen Werte im mineralischen Oberboden (A-Horizont) und die Bodenkarte. ....	10
Abb. 2- 6: Verteilung des B(a)P im mineralischen Oberboden (A-Horizont) und Verteilung der Gebietskategorien. ....	11
Abb. 2- 7: Vergleich von Punkt- und Flächeninformationen der Nutzung für die Stichprobe Benzo(a)pyren in Sachsen. ....	13
Abb. 2- 8: Vergleich von Punkt- und Flächeninformationen der Überschwemmung für die Stichprobe Benzo(a)pyren in Sachsen. ....	13
Abb. 2- 9: Homogene Raumeinheiten für die räumliche Analyse des Stoffes B(a)P. ....	14
Abb. 2- 10: Vergleich der Flächenanteile und Stichprobenanteile der homogenen Einheit 205 in der Moving-Window-Methode. ....	18
Abb. 2- 11: Globale Werteverteilung des B(a)P-Stoffgehalts in Sachsen. ....	19
Abb. 2- 12: Stamm-und-Blatt-Plot der Werteverteilung des B(a)P-Gehalts in Sachsen. ....	19
Abb. 2- 13: Box-Plots der B(a)P-Werte in den durch die Siedlungsstruktur und die Nutzung gebildeten homogenen Raumeinheiten (Siedlungsstruktur: 2 = Verdichtungsraum, 3 = Randzone, 4 = Ländlicher Raum mit Verdichtungsansätzen, 5 = Ländlicher Raum Nutzung: 1 = Forst, 2 = Landw. Nutzung). ....	20
Abb. 2- 14: Räumliche Darstellung des Medians der B(a)P-Verteilung in Sachsen. ....	24
Abb. 2- 15: Aussagesicherheit des Medians der B(a)P-Verteilung in Sachsen. ....	24
Abb. 2- 16: Variogramm des Indikator Krigings. ....	26
Abb. 2- 17: Interpolierte Werteoberfläche der Indikatortransformierten B(a)P-Gehalte des Ordinary Krigings. ....	27
Abb. 2- 18: Transformierte und standardisierte B(a)P-Gehalte oberhalb der Bestimmungsgrenze. ....	28
Abb. 2- 19: Variogramm der transformierten und standardisierten B(a)P-Gehalte. ....	28
Abb. 2- 20: Interpolierte Werteoberfläche der transformierten und standardisierten B(a)P-Gehalte oberhalb der Bestimmungsgrenze. ....	29
Abb. 2- 21: Werteoberfläche der B(a)P-Gehalte, die durch die Kombination der Indikatorbasierten Interpolation und der Interpolation der B(a)P-Gehalte oberhalb der Bestimmungsgrenze entstanden ist. ....	30
Abb. 2- 22: Prozentualer Stichproben- und Flächenanteil einer Raumeinheit am Gesamt-STP-Umfang bzw. an Gesamtfläche [%] (Raumeinheiten 1.01 bis 10.02). ....	36
Abb. 2- 23: Prozentualer Stichproben- und Flächenanteil einer Raumeinheit am Gesamt-STP-Umfang bzw. an Gesamtfläche [%] (Raumeinheiten 11.01 bis 19.02). ....	37
Abb. 2- 24: Häufigkeitsverteilung der As-Gehalte [mg/kg]. ....	40
Abb. 2- 25: Boxplot der As-Gehalte [mg/kg]. ....	40
Abb. 2- 26: Boxplots der As-Gehalte in den 19 Klassen der Leitbodengesellschaften. ....	41
Abb. 2- 27: Boxplots der As-Gehalte in den 3 Überschwemmungsklassen. ....	42
Abb. 2- 28: Boxplots der As-Gehalte in den 2 Nutzungsklassen. ....	42
Abb. 2- 29: Boxplots der As-Gehalte in den auf Basis aller Einflussfaktoren gebildeten Raumeinheiten. ....	43





Abb. 2- 30: Homogene Raumeinheiten unter Berücksichtigung der Leitbodengesellschaften und der Überschwemmung (Legende siehe Abb. 2- 9).	49
Abb. 2- 31: Prozentualer Stichproben- und Flächenanteil einer Raumeinheit am Gesamt- STP-Umfang bzw. an Gesamtfläche [%].	51
Abb. 2- 32: Boxplots der As-Gehalte in den Raumeinheiten.	53
Abb. 2- 33: Median der As-Gehalte in den Raumeinheiten sowie punktuelle As-Werte.	56
Abb. 2- 34: Mediane As-Gehalt und Konfidenzintervalle in den Raumeinheiten.	58
Abb. 2- 35: Verteilung der durch die geometrischen Mittel standardisierten Arsengehalte.	61
Abb. 2- 36: Isotropes Variogramm der standardisierten Arsengehalte.	62
Abb. 2- 37: Variogrammoberfläche der standardisierten Arsengehalte.	62
Abb. 2- 38: Anpassung des theoretischen Variogramms für die standardisierten Arsengehalte.	63
Abb. 2- 39: Räumliche Verteilung der standardisierten Arsengehalte.	63
Abb. 2- 40: Normal-Score-Transformation der Arsengehalte in Raumeinheit 1.	65
Abb. 2- 41: Normal-Score-Transformation der Arsengehalte.	65
Abb. 2- 42: Isotrope Variogramme der standardisierten Arsengehalte für verschiedene Lags (links oben: 10 km, rechts oben: 8 km, links unten: 6 km und rechts unten: 5.6 km).	66
Abb. 2- 43: Variogrammoberfläche der durch Normal-Score transformierten Arsengehalte.	67
Abb. 2- 44: Anpassung eines theoretischen Variogramms der transformierten Arsengehalte.	67
Abb. 2- 45: Räumliche Verteilung der mit dem Normal-Score-Kriging interpolierten Arsengehalte.	68
Abb. 2- 46: Histogramme der Verteilungen der Arsengehalte in den einzelnen homogenen Raumeinheiten.	69
Abb. 2- 47: Histogramme der transformierten Arsengehalte in den einzelnen Raumeinheiten.	70
Abb. 2- 48: Gemeinsame Verteilung der transformierten und standardisierten Daten des Arsengehalts.	71
Abb. 2- 49: Isotropes Variogramm und die Variogrammoberfläche der standardisierten und transformierten Arsengehalte.	71
Abb. 2- 50: Anpassung des theoretischen Variogramms der stand. und transf. Arsengehalte.	71
Abb. 2- 51: Räumliche Verteilung des Arsengehalts, interpoliert durch das Lognormal Kriging.	72
Abb. 2- 52: Fehlerverteilungen der unterschiedlichen Interpolationsverfahren.	75
Abb. 2- 53: Streudiagramm der wahren und geschätzten Werte beim Lognormal Kriging.	76
Abb. 2- 54: Q-Q-Plots der Verteilungen wahren und geschätzten Werte der verschiedenen Interpolationsverfahren.	77
Abb. 2- 55: Karte der Über- und Unterschätzungen.	78
Abb. 3- 1: Untersuchungsgebiet Staufener Bucht.	74
Abb. 3- 2: Raumeinheiten der Staufener Bucht.	76
Abb. 3- 3: Bodenkarte der Staufener Bucht.	78
Abb. 3- 4: Erhöhte Schwermetalle.	78



Abb. 3- 5: Verteilung der gemessenen Bleiwerte mit dem Königswasserextraktion. ....	79
Abb. 3- 6: Streudiagramm der Ammoniumnitrat- und Königswasserextrakte. ....	80
Abb. 3- 7: Raumeinheiten des Untersuchungsgebietes. ....	81
Abb. 3- 8: Numerischer Vergleich zwischen Stichproben- und Flächenanteilen. ....	84
Abb. 3- 9: Verteilung der Probennahmestellen. ....	85
Abb. 3- 10: Thiessen-Polygone der Messnetze des Bleigehalts in Raumeinheit 1 und Raumeinheit 2. ....	86
Abb. 3- 11: Verteilung des Bleigehalts in Raumeinheit 1 vor Entclustering. ....	86
Abb. 3- 12: Verteilung des Bleigehalts in Raumeinheit 1 nach Entclustering. ....	87
Abb. 3- 13: Verteilung des Bleigehalts in Raumeinheit 2 vor Entclustering. ....	87
Abb. 3- 14: Verteilung des Bleigehalts in Raumeinheit 2 nach Entclustering. ....	88
Abb. 3- 15: Streuung der Bleigehalte innerhalb der homogenen Raumeinheiten. ....	89
Abb. 3- 16: Vergleich der Bleigehaltverteilungen innerhalb der homogenen Raumeinheiten. ....	89
Abb. 3- 17: Neugebildete homogene Raumeinheiten. ....	91
Abb. 3- 18: Werteverteilung des Stoffgehalts von Blei in Raumeinheit 1. ....	92
Abb. 3- 19: Werteverteilung des Stoffgehalts von Blei in Raumeinheit 2. ....	92
Abb. 3- 20: Werteverteilung des Stoffgehalts von Blei in Raumeinheit 3. ....	92
Abb. 3- 21: Werteverteilung des Stoffgehalts von Blei in Raumeinheit 4. ....	93
Abb. 3- 22: Werteverteilung des Stoffgehalts von Blei in Raumeinheiten 5 und 6. ....	93
Abb. 3- 23: Werteverteilung des Stoffgehalts von Blei in Raumeinheiten 10, 11 und 12. .....	93
Abb. 3- 24: Ergebnisse der Transformationen des Bleigehalts in den homogenen Raumeinheiten. ....	95
Abb. 3- 25: Ergebnis der Standardisierung der Bleigehalte. ....	96
Abb. 3- 26: Verteilung der standardnormalverteilten Werte des Bleigehalts. ....	97
Abb. 3- 27: Variogramm der transformierten und standardisierten Werte des Bleigehalts. ....	98
Abb. 3- 28: Richtungsabhängiges Variogramm der transformierten und standardisierten Werte des Bleigehalts. ....	98
Abb. 3- 29: Variogrammoberfläche des Bleigehalts. ....	99
Abb. 3- 30: Vier Sektoren der Suchellipse für die Interpolation des Bleigehalts. ....	100
Abb. 3- 31: Interpolierte Werteoberfläche der standardisierten Bleigehalte. ....	101
Abb. 3- 32: Kreuzvalidierung der Interpolation des Bleigehalts. ....	101
Abb. 3- 33: Interpolierte Werteoberfläche der reststandardisierten Daten. ....	102
Abb. 3- 34: Räumliche Verteilung der mittleren Unterschreitungswahrscheinlichkeit des Bleigehalts für den Schwellenwerte 1000 mg/kg. ....	105
Abb. 3- 35: Räumliche Verteilung der mittleren Unterschreitungswahrscheinlichkeit des Bleigehalts für den Schwellenwerte 80 mg/kg. ....	105
Abb. 3- 36: Richtungsunabhängiges experimentelles Variogramm des Bleigehalts im Indikator Kriging zum Schwellenwert 300 mg/kg. ....	106
Abb. 3- 37: Variogrammoberfläche des Bleigehalts im Indikator Kriging zum Schwellenwert 300 mg/kg. ....	107
Abb. 3- 38: Theoretisches Variogramm des Bleigehalts im Indikator Kriging zum Schwellenwert 300 mg/kg. ....	107
Abb. 3- 39: Unterschreitungswahrscheinlichkeiten des Bleigehalts für den Schwellenwert 80 mg/kg. ....	108
Abb. 3- 40: Unterschreitungswahrscheinlichkeit des Bleigehalts für den Schwellenwert 1000 mg/kg. ....	108



Abb. 3- 41: Monotonisierung der interpolierten lokalen Verteilung des Bleigehalts am Punkt mit Rechtswert 3399940 und Hochwert 5306320. ....	109
Abb. 3- 42: Vergleich der lokalen Verteilungen des Bleigehalts für den Interpolationspunkt mit Rechtswert 3399940 und Hochwert 5306320 aus Raumeinheit 11 und einem Punkt mit den Koordinaten 3398260 und 5306440 aus Raumeinheit 3. ....	110
Abb. 3- 43: Überschreitungswahrscheinlichkeit des Bleigehalts für den Vorsorgewert für Lehm-Böden 70 mg/kg Pb. ....	111
Abb. 3- 44: Überschreitungswahrscheinlichkeit des Bleigehalts für den Prüfwert für den Direktpfad Boden-Mensch für Park-/Freizeitgebiete von 1000 mg/kg. ....	111
Abb. 3- 45: Lokale Varianzen des Bleigehalts in Raumeinheit 4. ....	112
Abb. 3- 46: Karte des Untersuchungsbedarfs für den Bleigehalt in der Staufender Bucht in der homogenen Raumeinheit 3. ....	113



## TABELLENVERZEICHNIS

Tabelle 2- 1: Daten für die Auswertung des stofflichen Bodenzustands in Sachsen und deren Formate. ....	3
Tabelle 2- 2: Zuordnung der punktuellen Proben „Messnetze in Sachsen“ zu den Leitbodengesellschaften.....	5
Tabelle 2- 3: Stichprobenanzahl der B(a)P-Proben in den homogenen Raumeinheiten. Raumeinheiten sind durch dreistellige Nummer gekennzeichnet: Ziffer1 = Nutzung: Forst = 1, Landw. Nutzung = 2. Ziffer2 = Überschwemmung: Ohne = 0, öElbe = 1, wElbe = 2. Ziffer3 = Siedlungsstruktur: Verdichtungsraum = 2, Randzone = 3, Verdichtansatz = 4, Ländlicher Raum = 5.....	15
Tabelle 2- 4: Vergleich der Flächenanteile und der Stichprobenanteile der Klassen der Siedlungsstruktur für die Messwerte des Stoffes B(a)P. ....	16
Tabelle 2- 5: Vergleich der Flächenanteile und der Stichprobenanteile der Klassen der Überschwemmung für die Messwerte des Stoffes B(a)P. ....	16
Tabelle 2- 6: Vergleich der Flächenanteile und der Stichprobenanteile der Klassen der Nutzung für die Messwerte des Stoffes B(a)P.....	16
Tabelle 2- 7: Vergleich der Flächenanteile und der Stichprobenanteile der Klassen der homogenen Raumeinheiten für die Messwerte des Stoffes B(a)P.....	17
Tabelle 2- 8: Definition der Fenster durch Rechts- und Hochwerte der Eckpunkte, die in der Moving-Window-Methode verwendet wurden. ....	17
Tabelle 2- 9: Marginalverteilungen der Einflussfaktoren des B(a)P-Gehalts.....	21
Tabelle 2- 10: Extremwerte der homogenen Raumeinheiten für B(a)P. ....	22
Tabelle 2- 11: Median und Konfidenzintervall des Medians für den B(a)P-Gehalt in den homogenen Raumeinheiten in Sachsen. ....	23
Tabelle 2- 12: 90.Perzentil und Konfidenzintervall des Medians für den B(a)P-Gehalt in den homogenen Raumeinheiten in Sachsen.....	23
Tabelle 2- 13: Vergleich des 90.Perzentils mit und ohne Einbeziehung extremer Werte für den B(a)P-Gehalt in den homogenen Raumeinheiten in Sachsen.....	23
Tabelle 2- 14: Vergleich der Punkt- und Flächeninformationen über die Leitbodengesellschaft an den Stichprobenstellen. ....	32
Tabelle 2- 15: Vergleich der Punkt- und Flächeninformationen über die Überschwemmung an den Stichprobenstellen.....	33
Tabelle 2- 16: Vergleich der Punkt- und Flächeninformationen über die Nutzung an den Stichprobenstellen.....	34
Tabelle 2- 17: Verteilung der Stichprobenelemente über die Raumeinheiten.....	35
Tabelle 2- 18: Verteilung der Stichprobenelemente über die 19 Klassen der Leitbodengesellschaften.....	38
Tabelle 2- 19: Verteilung der Stichprobenelemente über die 3 Überschwemmungsklassen.....	38
Tabelle 2- 20: Verteilung der Stichprobenelemente über die 2 Klassen der Nutzung. ..	39
Tabelle 2- 21: Deskriptive Statistik (Verarbeitete Fälle und Univariate Statistiken) über alle As-Stichprobenelemente. ....	39
Tabelle 2- 22: Ausreißergrenze und Anzahl der Ausreißer in den homogenen Raumeinheiten. ....	45
Tabelle 2- 23: Perzentile der As-Gehalte.....	46
Tabelle 2- 24: Kontingenzkoeffizienten zwischen LBG und As-Gehalt.....	46
Tabelle 2- 25: Kontingenzkoeffizienten zwischen Überschwemmung und As-Gehalt..	47



Tabelle 2- 26: Kontingenzkoeffizienten zwischen Nutzung und As-Gehalt. ....	48
Tabelle 2- 27: Verteilung der Stichprobenelemente über die Raumeinheiten, die auf Basis der Einflussfaktoren Leitbodengesellschaft und Überschwemmung gebildet wurden. ....	50
Tabelle 2- 28: Globaler Test nach Kruskal-Wallis. ....	53
Tabelle 2- 29: Test nach Kruskal-Wallis: Lokationsvergleich der Raumeinheiten 6.0 und 7.0. ....	54
Tabelle 2- 30: Test nach Kruskal-Wallis: Lokationsvergleich der Raumeinheiten 8.0 und 10.0. ....	54
Tabelle 2- 31: Test nach Kruskal-Wallis: Lokationsvergleich der Raumeinheiten 9.0 und 11.0. ....	54
Tabelle 2- 32: Verteilung der Stichprobenelemente über die aggregierten Raumeinheiten. ....	55
Tabelle 2- 33: Statistische Kennwerte in den aggregierten Raumeinheiten. ....	56
Tabelle 2- 34: Zwei- und einseitige Konfidenzintervalle für den Median und das 90. Perzentil. ....	57
Tabelle 2- 35: Geometrische Mittel des Arsengehalts in verschiedenen Raumeinheiten. .....	60
Tabelle 2- 36: Auswertung der Kreuzvalidierung mit Hilfe statistischer Kennwerte. ...	73
Tabelle 2- 37: Auswertung der Kreuzvalidierung mit Hilfe statistischer Kennwerte der Residuen. ....	74
Tabelle 2- 38: Anzahl der geschätzten Werte des Arsengehalts, die korrekt und nicht korrekt klassifiziert werden. ....	77
Tabelle 3- 1: Daten und deren Formate .....	75
Tabelle 3- 2: Stichprobenanzahl in den Raumeinheiten .....	82
Tabelle 3- 3: Prozentualer STP-Anteil einer Raumeinheit am Gesamtstichprobenumfang. Flächenanteile der homogenen Raumeinheiten an Gesamtfläche. ....	83
Tabelle 3- 4: Raumeinheit 1 vor Entclustering .....	86
Tabelle 3- 5: Raumeinheit 1 nach Entclustering .....	87
Tabelle 3- 6: Raumeinheit 2 vor Entclustering .....	88
Tabelle 3- 7: Raumeinheit 2 nach Entclustering .....	88
Tabelle 3- 8: Vergleich der Bleigehaltverteilungen innerhalb der homogenen Raumeinheiten .....	90
Tabelle 3- 9: Test auf signifikante Mittelwertunterschiede .....	90
Tabelle 3- 10: Ausreißer und der Ausreißergrenze .....	94
Tabelle 3- 11: Ergebnisse des K-S-Tests auf Normalverteilung .....	96
Tabelle 3- 12: Reziproke Transformation .....	102
Tabelle 3- 13: Mittlere Unterschreitungswahrscheinlichkeiten des Bleigehalts für verschiedene Schwellenwerte und verschiedene homogene Raumeinheiten (RE). .....	104



## **1 EINLEITUNG**

Im LABO-Vorhaben „Geostatistische und statistische Methoden und Auswerteverfahren für Geodaten mit Punkt- bzw. Flächenbezug“ wurden die Einsatzmöglichkeiten statistischer und geostatistischer Methoden für die flächenbezogene Abschätzung von Stoffgehalten im Oberboden anhand von zwei Auswertebeispielen untersucht.

Es wurde zum einen eine landesweite Untersuchung der Stoffgehalte von Arsen und B(a)P am Beispiel des Landes Sachsen durchgeführt. Zum anderen wurde der Stoff Blei regional am Beispiel der Staufener Bucht in Baden-Württemberg analysiert.

In den folgenden Kapiteln werden die Ergebnisse dieser statistischen und geostatistischen Auswertungen erläutert.



## 2 FALLBEISPIEL SACHSEN

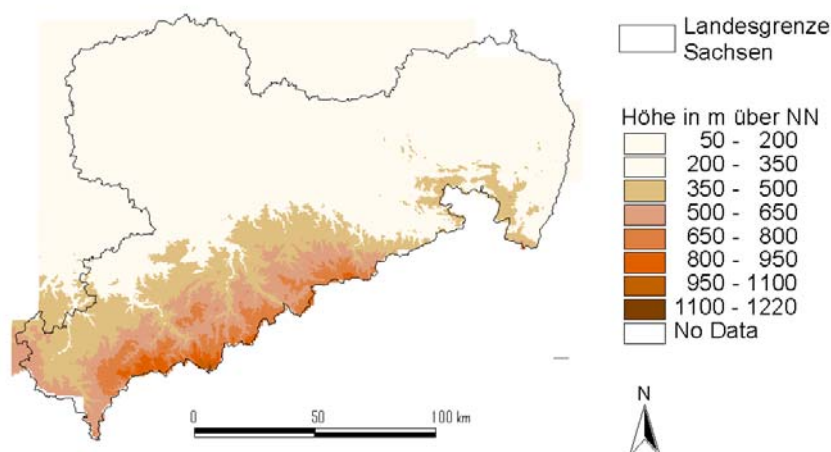
Für das Land Sachsen wurde der stoffliche Zustand des Bodens beispielhaft anhand des persistenten organischen Stoffs Benzo(a)pyren B(a)p und des Spurenmetalls Arsen untersucht. Der durch diese Stoffe hervorgerufene mittlere Bodenzustand wurde durch raumbezogene statistische Kennwerte beschrieben. Darüber hinaus wurde eine Karte der flächendeckenden räumliche Verteilung dieser Stoffe erstellt. Für die Nutzung der Auswertungsergebnisse im bodenschutzrechtlichen Vollzug wurde für diese die jeweilige statistische Aussagesicherheit angegeben.

Die Ergebnisse der Auswertungen sind in den folgenden Abschnitten erläutert. In Abschnitt 2.1 wird das Untersuchungsgebiet und die Datengrundlage beschrieben. Abschnitt 2.2 erläutert die verwendeten Untersuchungsverfahren. In Abschnitt 2.3 werden dann detailliert die Ergebnisse der Auswertung des Stoffes B(a)P und in Abschnitt 2.4 die Ergebnisse der Auswertungen von Arsen vorgestellt.

### 2.1 Untersuchungsgebiet und Datengrundlage

Im Folgenden werden das Untersuchungsgebiet und die Datengrundlage, die zur flächenhaften Darstellung der Stoffgehalte im Boden für das Land Sachsen zur Verfügung gestellt wurde, beschrieben.

Das Land Sachsen umfasst eine Fläche von 18.413,02 km<sup>2</sup> (von Baratta 2002). Die Elbe teilt Sachsen in zwei Gebiete, westlich und östlich der Elbe. Das Gebiet westlich der Elbe umfasst ca. 2/3 der Gesamtfläche des Landes. In dem Gebiet östlich der Elbe liegt die Oberlausitz und Städte wie Bautzen, Görlitz und Hoyerswerda. Im nordwestlichen Teil Sachsens und westlich der Elbe liegt Leipzig. Der süd-westliche Teil Sachsens wird durch das Erzgebirge mit dem Fichtelberg (1214m) als höchste Erhebung bestimmt. Damit zeichnet sich eine starke Reliefzunahme von Norden nach Süden in Sachsen ab (siehe Abb. 2- 1).



**Abb. 2- 1: Höhenmodell des Landes Sachsen.**



Die zur Verfügung gestellten Daten für die Auswertung des stofflichen Bodenzustands in Sachsen und deren Formate sind in Tabelle 2- 1 aufgeführt. Die Werte der Probennahmen anorganischer und organischer Stoffe liegen als punktuelle Daten vor. Als Flächeninformationen stehen digitale Daten zum geogenen Grundgehalt, zur geologischen Situation, zur Nutzung, eine Bodenkarte und ein digitales Höhenmodell des Freistaates Sachsen zur Verfügung. Diese Daten haben einen Maßstab von 1:400.000.

Des weiteren liegt der Bodenatlas des Freistaates Sachsen Teil 3- Bodenmessprogramm in digitaler Form zur Erläuterung der vorhergegangenen Untersuchungen vor, der neben Karten und Tabellen einen Begleittext enthält.

Die Daten sind in verschiedenen Formaten vorhanden. Die punktuellen Daten liegen als dbf-Tabellen (dBASE-file) vor, die Flächendaten sind in ESRI-Formaten (shape, grid) und ebenfalls als dBASE-files vorhanden.

**Tabelle 2- 1: Daten für die Auswertung des stofflichen Bodenzustands in Sachsen und deren Formate.**

Datensatz	Datenformat
Punktdaten im Gauß-Krüger-Koordinaten-system im Vierer-Streifen der Probennahme-stellen (Probennahmetiefe, Horizontbezeichnung, Bodentyp, Bodenausgangsgestein, Bodenart, Fein-/ Grobboden, Nutzung, Lage im Überschwemmungsgebiet, Messwerte der anorganischen Stoffe Na, K, Ca, Mg, Fe, Al, Mn, As, Hg, Cd, Cr, Pb, Cu, Ni, Zn, Th, Ph, N, F, P, Cl, CaCO <sub>3</sub> , SO <sub>4</sub> , Be, Bi, B, Mo, Tl und U, Messwerte von 17 organischen Stoffen, mobile anorganische Stoffgehalte von As, Pb, Cd, Cr, Cu, Mo, Ni, Hg, Tl und Zn, Einheit der Stoffe und Aufschluss- oder extraktionsmethode	DBASE-Files
Bodenübersichtskarte (BÜK 400)	Shape-File
Karten geogener Grundgehalte für die Stoffe As, B, Pb, Cr, Cu, F, Mn, Ni, Th, U, Zn	Shape-Files
Karte der Nutzung	Shape-File
Karte der Siedlungsstruktur	Shape-File
Digitales Höhenmodell	Grid
Gebietsgrenzen der Probennahmestandorte/-gebiete	Shape-File
Vereinfachte Geologische Karte von Sachsen	Shape-File

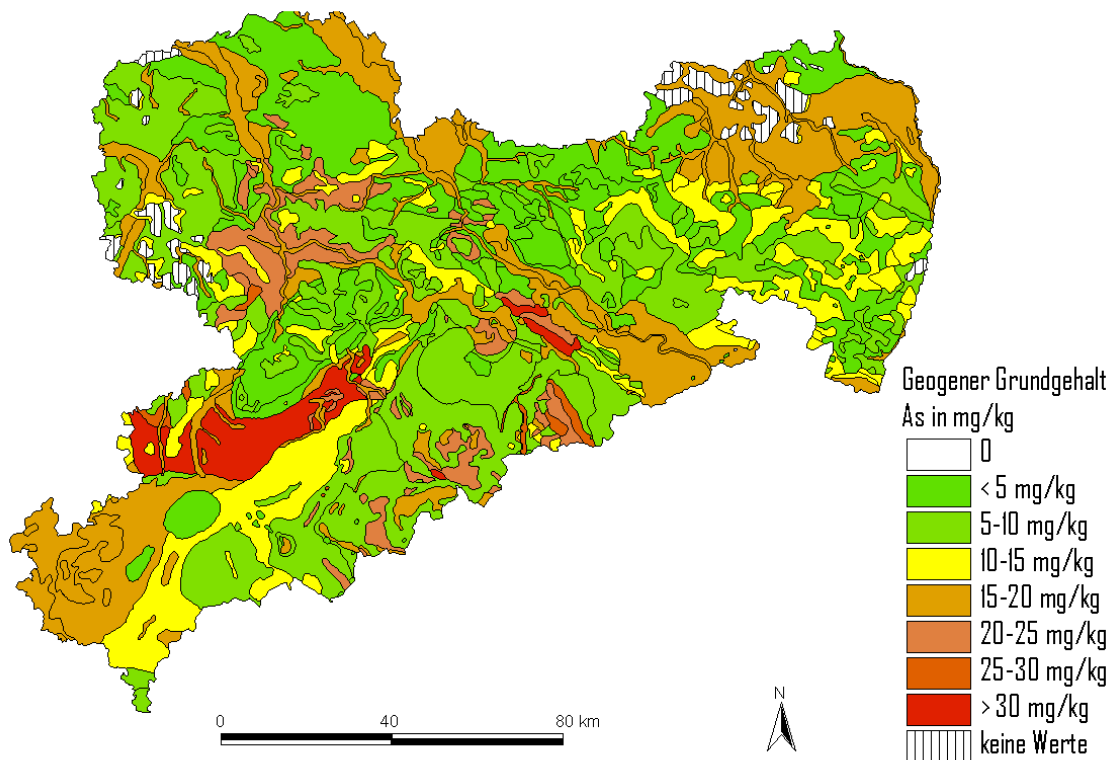
Die punktuellen Daten der Stoffgehalte liegen in Form eines Bodenmessnetzes von Sachsen vor. Die Messwerte wurden in einem Gitter von 4 x 4 km aufgenommen. Die exakte Lage der Probennahmepunkte wird durch Rechts- und Hochwerte im Gauß-Krüger-4-Streifen angegeben. Es werden neben organischen und anorganischen Stoffen auch Daten zur Nutzung, dem Bodentyp, der unterlagernden Petrografie und weiteren Parametern aufgenommen.



Nach Evaluierung der in den Bundesländern angewendeten Methoden zur Beschreibung der Stoffgehalte im Boden sind wesentliche Einflussfaktoren für die Stoffgehaltsverteilung das Bodenausgangsgestein, die Nutzung, das Auftreten von Überschwemmungen (vgl. Steckbriefe in Teil 1 dieses Berichts) und die Siedlungsstruktur.

Informationen zum geogenen Vorkommen von Schwermetallen stehen flächenhaft zur Verfügung. Das Ausgangsgestein enthält einen gewissen Gehalt an Schwermetallen. Dieser hängt von dem anstehenden Gestein und dem Verwitterungsgrad ab. Arsen z.B. ist in der Vorerzgebirgssenkung v.a. an die lithogene Komponente (Mülsener Schichten) gebunden (vgl. Bodenatlas des Freistaates Sachsens Teil 3 –Bodenmessprogramm).

Flächenhafte Daten der geogenen Grundgehalte liegen für die Stoffe Arsen (siehe Abb. 2- 2), Bor, Blei, Chrom, Fluor, Kupfer, Nickel, Quecksilber, Thorium, Uran und Zink vor. Die Werte sind in Klassen eingeteilt und werden in mg/kg angegeben. Die geogenen Grundgehalte wurden auf Basis der Geologischen Übersichtskarte von Sachsen (GÜK 400) hergeleitet. Die geologische Übersichtskarte steht als vereinfachte geologische Karte des Freistaates Sachsen (Petrochemische Einheiten) zur Verfügung.



**Abb. 2- 2: Geogener Grundgehalt von Arsen.**

Die Bodeneinheiten stehen in Form einer Bodenübersichtskarte (BÜK 400 Sachsen) und als punktuelle Werte zur Verfügung. Die Bodenübersichtskarte beschreibt die Lage der Leitbodengesellschaften im Freistaat Sachsen. Diese 19 Leitbodengesellschaften der flächenhaften Bodenübersichtskarte entsprechen der Einteilung der Leitbodengesellschaften der punktuellen Werte, die punktuell vorliegenden Leitbodengesellschaften sind jedoch in feinere Klassen aufgeteilt (siehe Tabelle 2- 2). Die Werte der punktuell vorliegenden Leitbodengesellschaften sind mit einer Zehnerstelle mehr angegeben als die flächenhaften Leitbodengesellschaften. So ent



spricht z.B. der Wert (Podsol und Braunerde-Podsol aus Hangsand über Sandstein) für die flächenhafte Leitbodengesellschaft 5 dem Wert 50 (Podsol und Braunerde-Podsol aus Hangsand über Sandstein) in der Einteilung der punktuellen Leitbodengesellschaften.

**Tabelle 2- 2: Zuordnung der punktuellen Proben „Messnetze in Sachsen“ zu den Leitbodengesellschaften.**

Leitbodenassoziation (LBA)	Nr. LBG	Leitbodengesellschaften (LBG)
Ranker, Braunerden, Podsole und Pseudogleye aus periglazialen Umlagerungsdecken über Festgestein	10	Ranker und Braunerde aus Hanglehm über basenreichem Festgestein
	11	Basalt, Phonolith
	12	Diabas, Amphibolit
	13	Kalkstein
	14	Serpentinit, Gabbro
	20	Braunerde aus Hanglehm über mäßig basenreichem Festgestein
	21	Paragneis
	22	Granodiorit, Monzonitoid
	23	Granulit
	30	Podsol-Braunerde aus Hanglehm über basenarmem Festgestein
	31	Glimmerschiefer
	32	Phyllit
	33	Tonschiefer
	34	Grauwacke
	40	Braunerde-Podsol aus Hanglehm über basenarmem Festgestein
	41	Granit
	42	Metagranitoid/Metarhyolithoid
	43	saure Vulkanite
	44	Quarzit, Quarzitschiefer
	50	Podsol und Braunerde-Podsol aus Hangsand über Sandstein
Schwarzerden, Parabraunerden und Pseudogleye aus Löss und Sand-Löss über glazigenen Ablagerungen, tertiärem Ton oder Festgestein	60	Pseudogley aus Hanglehm über feinklastischen Rotliegendesedimenten
	70	Pseudogley aus Hanglehm übergrobklastischen Rotliegendesedimenten
	80	Schwarzerde aus Löss
	90	Schwarzerde aus Sandlöss, örtlich über tiefem Moränenlehm, Schmelzwasser-sand oder Fluvigeröll
	100	Parabraunerde aus Löss
	110	Parabraunerde aus Sandlöss
Braunerden, Podsole, Pseudogleye und	120	Pseudogley aus Löss
	130	Pseudogley aus Sandlöss
	140	Braunerde aus Kryolehmsand
	150	Braunerde-Podsol aus Fluvisand
	160	Pseudogley aus Kryosand über Geschiebelehm



Gleye aus periglaziären sandigen Decksedimenten über glazigenen Ablagerungen	170	Gley aus Fluvisand
Auenböden, Gleye aus fluviatilen Sedimenten	180	Vega, Gley und Auengley
	181	Elbaue
	182	Auen östlich der Elbe
	183	Auen westlich der Elbe
Rohböden, geogene Bodensubstrate	190	Rohböden, Kippböden der Bergbaufolgelandschaften (Braunkohle)
Anthropogene Böden	200	i. W. Stadtböden, Auffüllungen
Moore	300	Moorböden

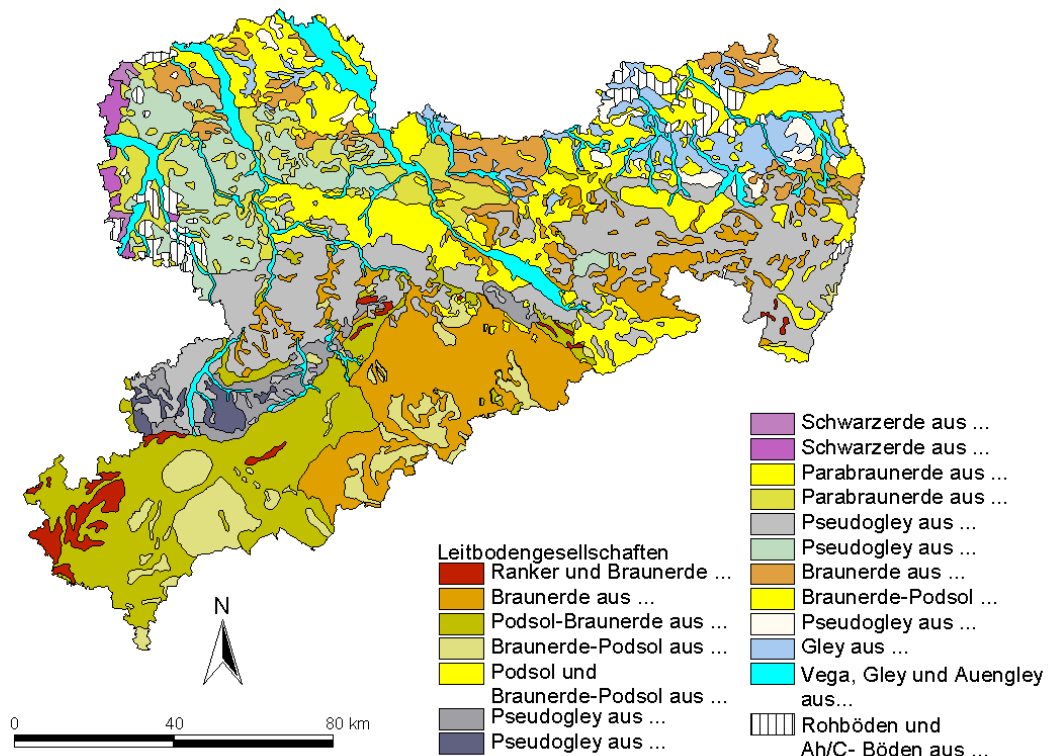
Ferner werden die punktuellen Leitbodengesellschaften weiter aufgesplittet. So wird der Wert 1 der flächenhaften Leitbodengesellschaften weiter in die punktuellen Leitbodengesellschaften 10 bis 14 bzw. der Wert 2 in die Werte 20 bis 23 bzw. der Wert 3 in die Werte 30 bis 34 bzw. der Wert 4 in die Werte 40 bis 44 in den punktuell vorliegenden Leitbodengesellschaften aufgeteilt (vgl. Tabelle 2- 2 und Abb. 2- 3). Auch der flächenhafte Leitbodengesellschaftswert 18 wird in der punktuellen Einteilung der Leitbodengesellschaften in die Werte 180 bis 183 aufgesplittet. Es wird die punktuell vorliegende Leitbodengesellschaft der Auenböden, die der Leitbodengesellschaft 18 in der Bodenübersichtskarte (vgl. Tabelle 2- 2) entspricht, in die punktuellen Leitbodengesellschaften Elbaue (181), Auen östlich der Elbe (182) und Auen westlich der Elbe (183) unterteilt. Für die weiteren Analysen wurde nur zwischen Auen westlich und östlich der Elbe unterschieden, wobei die Elbaue (181) dem Gebiet der Auen westlich der Elbe hinzugefügt wurde, da die westlichen Auen von den Lagerstätten und die Elbaue von den Industrien stark beeinflusst werden, während die östlichen Auen geringer belastet sind (nach Auskunft von Frau Kardel).

Des Weiteren existieren in der Punktinformation zwei weitere Leitbodengesellschaften. Diese sind die Leitbodengesellschaften der i. W. Stadtböden, Auffüllungen (Wert 200) und die Mooreböden (Wert 300) (vgl. Tabelle 2- 2).

Die flächenhaften bzw. punktuellen Leitbodengesellschaften wurden zu 5 (A-E) bzw. 7 Leitbodenassoziationen zusammengefasst (vgl. Abb. 2- 3), wobei die Assoziationen der anthropogenen Böden und der Moore bei den Assoziationen der flächenhaften Leitbodengesellschaften nicht auftreten.

Die Verteilung der einzelnen flächenhaft dargestellten Leitbodengesellschaften soll im folgenden kurz angedeutet werden. Den größten flächenmäßigen Anteil nimmt die Leitbodengesellschaft 12: Pseudogley aus Löss, der örtlich über tiefem Moränenlehm, Schmelzwassersand, Fluvigeröll oder Festgestein vorliegt (17%) gefolgt von 2: Braunerde aus Hanglehm über mäßig basenreichem Festgestein und von 3: Podsol-Braunerde aus Hanglehm über basenarmem Festgestein (jeweils 13 %) ein (vgl. Bodenatlas des Freistaates Sachsens Teil 3 –Bodenmessprogramm).

Nach telefonischer Auskunft von Frau Kardel vom Sächsischen Landesamt für Umwelt und Geologie und Untersuchungen im Freistaat Sachsen (Kardel 2003) enthalten die Sandböden im Norden Sachsens nur einen geringen Stoffanteil der Schwermetalle, wohingegen die Böden im Süden höhere Stoffgehalte aufgrund der starken Verwitterung aufweisen. Anhand der Bodenübersichtskarte lässt sich auch die Verteilung der Überschwemmungsgebiete ablesen. Diese sind an der Elbe, der Mulde und in der Oberlausitz besonders ausgeprägt. Die Überschwemmungen haben starken Einfluss auf die Verteilung der Stoffgehalte, da diese mit den Flüssen transportiert werden.



**A:** Ranker, Braunerden, Podsole und Pseudogleye aus periglaziären Umlagerungsdecken über Festgestein

Ranker und Braunerde aus Hanglehm über basenreichem magmatischem Festgestein

Braunerde aus Hanglehm über mäßig basenreichem metamorphem oder magmatischem Festgestein

Podsol-Braunerde aus Hanglehm über basenarmem metamorphem Festgestein

Braunerde-Podsol aus Hanglehm über basenarmem magmatischem oder metamorphem Festgestein

Podsol und Braunerde-Podsol aus Hangsand über Sandstein

Pseudogley aus lössbeeinflusstem Hanglehm über basenarmen tonig-schluffigen Rotliegendsedimenten

Pseudogley aus lössbeeinflusstem Hanglehm über basenarmen kiesig-sandig-lehmigen Rotliegendsedimenten



**B:** Schwarzerden, Parabraunerden und Pseudogleye aus Löss und Sandlöss über glazigenen Ablagerungen, tertiärem Ton oder Festgestein

Schwarzerde aus Löss, örtlich über tiefem Moränenlehm, Schmelzwassersand, Fluvigeröll o. Festgestein

Schwarzerde aus Sandlöss, örtlich über tiefem Moränenlehm, Schmelzwassersand, Fluvigeröll o. Festgestein

Parabraunerde aus Löss, örtlich über tiefem Moränenlehm, Schmelzwassersand, Fluvigeröll o. Festgestein

Parabraunerde aus Sandlöss, örtlich über tiefem Moränenlehm, Schmelzwassersand, Fluvigeröll o. Festgestein

Pseudogley aus Löss, örtlich über tiefem Moränenlehm, Schmelzwassersand, Fluvigeröll o. Festgestein

Pseudogley aus Sandlöss, örtlich über tiefem Moränenlehm, Schmelzwassersand, Fluvigeröll, tert. Ton o. Festgestein

**C:** Braunerden, Podsole, Pseudogleye und Gleye aus periglaziären sandigen Decksedimenten über glazigenen Ablagerungen

Braunerde aus lehmigen periglazialen Sanden über tiefem Moränenlehm, Schmelzwassersand, Fluvisand oder Fluvigeröll

Braunerde-Podsol aus Fluvisand, untergeordnet Schmelzwassersand, lokal von Flugsand überlagert

Pseudogley aus flachen periglaziären Sanden über Geschiebelehm oder Tertiärton

Gley aus Fluvisand, untergeordnet Schmelzwassersand, lokal von Flugsand überlagert

**D:** Auenböden und Gleye aus fluvialen Sedimenten

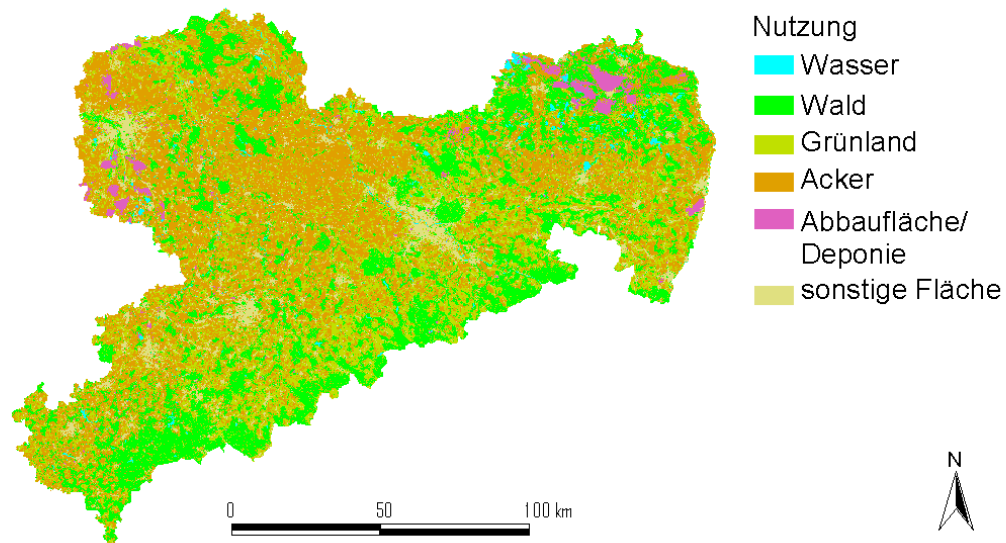
Vega, Gley und Auengley aus Fluviton, -lehm, -schluff oder -sand über Fluvigeröll

**E:** Rohböden und Ah/C-Böden aus anthropogenen Bildungen natürlicher Herkunft

Rohböden und Ah/C-Böden aus anthropogenen Bildungen natürlicher Herkunft (Kippböden der Bergbaufolgelandschaften)

### **Abb. 2- 3: Bodenübersichtskarte von Sachsen (BÜK 400).**

Ein weiterer Einflussfaktor der Verteilung der Schwermetalle ist die Nutzung. Es werden die Nutzungen Wald, Grünland, Acker, Wasser, Abbauflächen/ Deponien und sonstige Flächen in den Daten unterschieden (vgl. Abb. 2- 4). In Sachsen dominiert Acker das Bild. Diese Nutzung wird in Erzgebirgsnähe und anderen vereinzelt Stellen von Wald abgelöst. Im Nordosten Sachsens bei Hoyerswerda und im Nordwesten bei Leipzig befinden sich die größeren Abbauflächen bzw. Deponien. Untersuchungen des Sächsischen Landesamtes für Umwelt und Geologie haben ergeben, dass zwischen Acker und Grünland hinsichtlich der Stoffgehalte kaum Unterschiede bestehen (Kardel 2003). Damit können Flächen mit Ackerland und Grünland bei der weiteren Bearbeitung zusammengefasst werden. Es sollte aber eine Trennung zwischen landwirtschaftlicher Nutzung (Acker und Grünland) und Forst vorgenommen werden, da z.B. für Blei die Werte stark variieren (Kardel 2003).



**Abb. 2- 4: Karte der Nutzungen in Sachsen.**

Die punktuellen Messwerte wurden an Stellen entnommen, die zuvor durch Sondierbohrungen festgelegt worden waren. Zur Beprobung wurde ein Grabloch mittels Spaten angelegt und jeweils eine horizontbezogene Sammelprobe über die Gesamtmächtigkeit entnommen. Die Probenmenge betrug bei mineralischen Böden ca. 1 kg. Als Aufschluss- bzw. Extraktionsmethoden wurden der Totalaufschluss nach RUPPERT (1987), die umgekehrte Königswasserextraktion und die WALDNER-Aufschlussapparatur verwendet (vgl. Bodenatlas des Freistaates Sachsen Teil 3 –Bodenmessprogramm S. 2 f.).

Nach Angabe von Frau Kardel sind die Parameter Arsen und Blei von großem Interesse. Unter den toxisch wirkenden Schwermetallen kommt Arsen aufgrund großflächiger Verbreitung erhöhter Gehalte in den Böden Sachsens wohl die größte Bedeutung zu (vgl. Bodenatlas des Freistaates Sachsens Teil 3 –Bodenmessprogramm S. 11). Beispielhaft wird deshalb im folgenden die Verteilung des Arsens in Sachsen beschrieben. Die Nord- Süd-Differenzierung der Schadstoffgehalte wird bei Arsen wieder besonders deutlich.

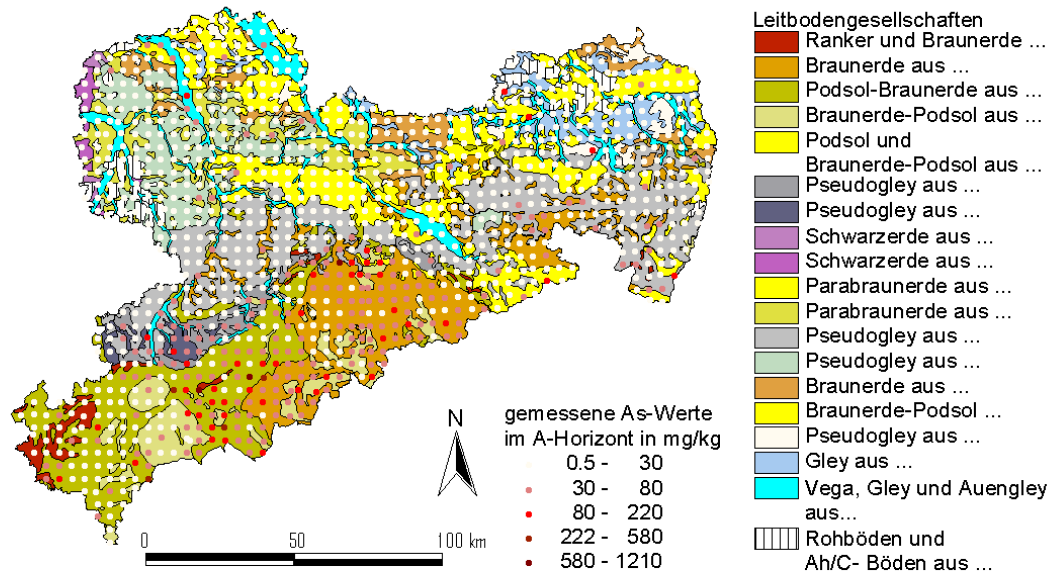
Die höchsten geogenen Arsengehalte sind im Raum Zwickau bis Chemnitz und süd-westlich von Dresden zu finden. Dort erreichen sie Werte über 30 mg/kg. Um Grimma (südöstlich von Leipzig) erreichen die Arsengrundgehalte großflächig Werte von 20 bis 25 mg/kg. Die geringsten Grundgehalte weisen die Gebiete der Dahleiner Heide, das Dreieck zwischen Riesa, Hoyerswerda und Dresden, der nord-östliche Zipfel Sachsens, nordwestlich von Chemnitz, süd-östlich von Zwickau und andere Stellen noch vereinzelt auf. Sie erreichen keine 5 mg/kg.

Auch bei den punktuell gemessenen Arsenwerten ist eine Zunahme von Norden nach Süden erkennbar (vgl. Abb. 2- 5). Bedeutende regionale As-Anomalien befinden sich im Raum Freiberg ( bis zu 1130 mg/kg im mineralischen Oberboden), dem bedeutensten Standort der





Förderung und Verhüttung polymetallischer Erze in Sachsen (vgl. Bodenatlas des Freistaates Sachsens Teil 3 –Bodenmessprogramm S. 11). Weitere stark erhöhte Werte liegen im Westerzgebirge und im Raum Ehrenfriedersdorf vor (vgl. Bodenatlas des Freistaates Sachsens Teil 3 –Bodenmessprogramm S.11). Der höchste gemessene Wert des mineralischen Oberbodens liegt mit 1209 mg/kg südlich von Chemnitz.



Legendenaufschlüsselung der Leitbodengesellschaften: vgl. Legende zu Abb. 2- 3

**Abb. 2- 5: Arsenverteilung der gemessenen Werte im mineralischen Oberboden (A-Horizont) und die Bodenkarte.**

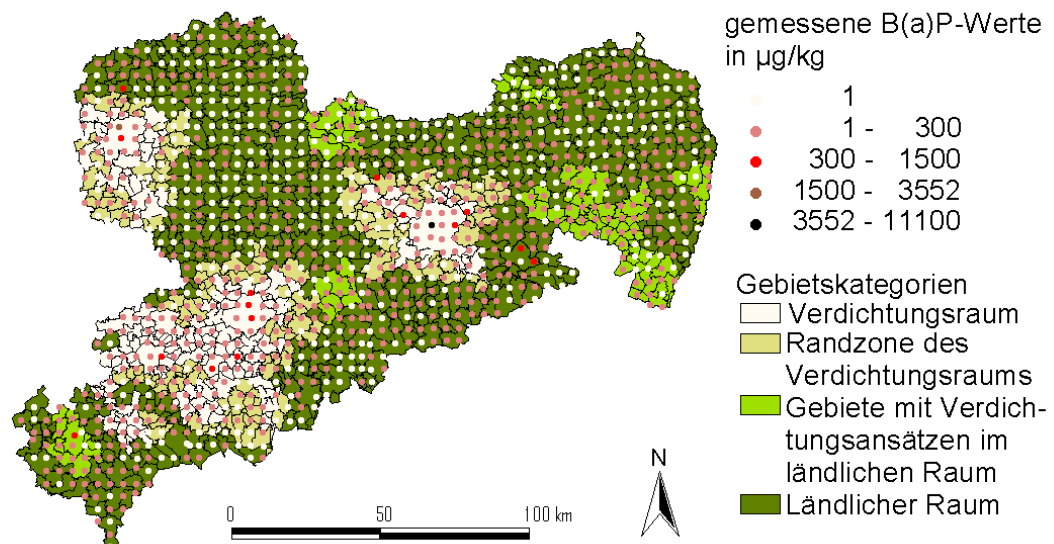
Die Daten zu den Organika liegen als punktuelle Messwerte vor. Es wurden 16 PAK vom Landesamt für Umwelt und Geologie Sachsen horizontspezifisch aufgenommen. Zur weiteren Untersuchung wurde Benzo(a)pyren (B(a)P) beispielhaft ausgewählt, da es toxikologisch besonders relevant ist (vgl. Bodenatlas des Freistaates Sachsens Teil 3 –Bodenmessprogramm).

Insgesamt bewegen sich die B(a)P-Gehalte in der organischen Auflage (OH-Horizont) auf relativ niedrigem Niveau. Der höchste gemessene Wert der organischen Auflage mit 5,7 mg/kg liegt nordwestlich von Torgau im Nordwesten Sachsens. Er steht vermutlich mit dem militärischen Altlastenbereich von Torgau-Elsing in unmittelbarem Zusammenhang (vgl. Bodenatlas des Freistaates Sachsens Teil 3 –Bodenmessprogramm).

Die großflächige Belastung der mineralischen Oberböden durch B(a)P ist ebenfalls relativ gering. In den Verdichtungsgebieten sind die B(a)P-Werte am höchsten und in den ländlichen Gebieten am niedrigsten. Die höchsten Werte treten in den Ballungszentren Dresden, Chemnitz, und Leipzig auf und werden mit hoher Wahrscheinlichkeit durch die Emissionen der Großfeuerungsanlagen, der metallverarbeitenden Industrie und dem Kfz-Verkehr verursacht (vgl. Bodenatlas des Freistaates Sachsens Teil 3 –Bodenmessprogramm). Der höchste gemessene



Wert an B(a)P (11,1 mg/kg) liegt im Stadtgebiet von Dresden. Der zweithöchste Wert (3,552 mg/kg) liegt bei Leipzig (vgl. Abb. 2- 6).



**Abb. 2- 6: Verteilung des B(a)P im mineralischen Oberboden (A-Horizont) und Verteilung der Gebietskategorien.**

## 2.2 Untersuchungsverfahren

Die im ersten Teil dieses Berichts dargestellten Vorgehensweisen für die Erhebung statistischer Kennwerte und für die räumliche Interpolation dienen als Grundlage für die Auswertung von Benzo(a)pyren und Arsen in Sachsen. Benzo(a)pyren wurde zuerst einer Datenvorverarbeitung zugeführt. Danach wurden statistische Kennwerte mit der jeweiligen Aussagesicherheit erhoben und die räumliche Verteilung durch einen Kriging Ansatz geschätzt. Für Arsen wurden ebenfalls diese beiden Auswertungsschritte durchgeführt. Darüber hinaus wurde die flächendeckende räumliche Arsenverteilung und die Verteilung von B(a)P durch ein Kriging mit lokalen Mittelwerten inklusive der zugehörigen Konfidenzintervalle ermittelt.

## 2.3 Durchführung und Ergebnisse der statistischen Auswertung von B(a)P

Im Folgenden werden die in der statistischen Auswertung des persistenten organischen Stoffs B(a)P verwendeten Methoden und die erzielten Ergebnisse beschrieben. Die Auswertung ist in den Bereich der Datenvorverarbeitung und –exploration, in den Bereich der Erhebung statistischer Kennwerte und in den der räumlichen Interpolation aufgeteilt.

### 2.3.1 Datenvorverarbeitung und –exploration

Um fachlich aussagekräftige Ergebnisse bei der Erhebung statistischer Kennwerte und der Bestimmung der flächendeckenden Verteilung von Benzo(a)pyren zu erlangen, ist eine





Validierung und die Bestimmung der wichtigsten statistischen Eigenschaften dieser Daten notwendig. Im Folgenden werden die hierzu durchgeführten Auswertungsschritte für B(a)P beschrieben.

#### **2.3.1.1 Datengrundlage**

Für die weiteren Analysen werden die Punktdaten der Stoffgehalte von B(a)P verwendet. Als Einflussfaktoren auf den Stoffgehalt von B(a)P im Oberboden werden die Nutzung, die Überschwemmung und die Siedlungsstruktur betrachtet. Nach fachlicher Auskunft vom Sächsischen Landesamt für Umwelt und Geologie können die Nutzungsklassen Acker und Grünland zu einer Klasse Landwirtschaftliche Nutzung zusammengefasst werden. Nach Durchführung dieses Auswertbeispiels gelangte man zu der Einschätzung, dass man die Zusammenfassung dieser beiden Nutzungsklassen hätte statistisch absichern sollen. Dieser Aspekt wurde für dieses Auswertbeispiel nicht nachgetragen, er ist aber in der Empfehlung zur Datenvorverarbeitung und –exploration aufgeführt. Die Karte der Überschwemmung wurde aus der Karte der Leitbodengesellschaften generiert, indem alle Auen als Überschwemmungsgebiete gekennzeichnet wurden.

#### **2.3.1.2 Datenvalidierung**

Der Gesamtdatenbestand der punktuellen gemessenen Stoffgehalte von B(a)P umfasst 2586 Stichprobenelemente. Da dieser im Vorfeld dieser Analyse vom Sächsischen Landesamt für Umwelt und Geologie geprüft wurde, wird davon ausgegangen, dass alle Gehalte mit demselben Aufschluss- bzw. Extraktionsverfahren bestimmt worden sind und dass die Bestimmungsgrenze für alle Proben dieselbe, nämlich  $2 \mu\text{g/kg}$  ist. Werte unterhalb der Bestimmungsgrenze wurden  $1 \mu\text{g/kg}$  gesetzt.

Für die geostatistischen Analysen wurden ausschließlich Proben aus dem A-Horizont (Oberboden) verwendet, alle anderen Stichprobenelemente aus dem Bestand der Punktdaten entfernt wurden. Dadurch reduziert sich der Datenbestand auf 1164 Stichprobenelemente.

Die Stichprobenelemente der Nutzungen Park-/Grünanlage, Sportanlage/Spielplatz und Verkehrsfläche werden in der nachfolgenden Analyse nicht berücksichtigt und damit ebenfalls aus dem Datenbestand ausgeschlossen. Damit reduziert sich der Gesamt-Datensatz auf 1142 Stichprobenelemente.

#### **2.3.1.3 Räumliche Visualisierung der Basisdaten**

In Abschnitt 2.1 ist das Untersuchungsgebiet und die Datengrundlage für das Auswertbeispiel Sachsen beschrieben. Die dort aufgeführten Abbildungen Abb. 2-1- Abb. 2-4 stellen die für die Analyse notwendigen und wichtigen Punkt- und Flächeninformationen des Messnetzes der Stoffgehalte, der Nutzung, der Überschwemmung und der Siedlungsstruktur dar. Zur Visualisierung dieser Informationen wurde das GIS ArcView der Firma ESRI Int. verwendet. Die verschiedenen Informationen wurden als Punkt- und Polygonlayer im GIS verwaltet und visualisiert.

#### **2.3.1.4 Plausibilität von Raum- und Punktdaten prüfen**

Um die Qualität der Kartengrundlagen der flächenhaft vorliegenden Einflussfaktoren im Hinblick auf die weiteren Analysen abschätzen zu können, wurde geprüft, in wie weit die punktuell erhobenen Informationen über die Einflussfaktoren der B(a)P-Gehalte mit den Karteninformationen übereinstimmen. Dazu wurden die Flächeninformationen durch die GIS-Funktionalität



„Spatial Join“ den Punktdaten zugeordnet. Begleitinformationen und Flächendaten wurden dann mittels Kreuztabellen miteinander verglichen.

In den Abbildungen Abb. 2- 7 und Abb. 2- 8 ist der Vergleich von Punkt- und Flächeninformationen für die Einflussfaktoren Nutzung und Überschwemmung dargestellt. Ca. 90% der Stichproben der B(a)P-Stoffgehalte werden durch die Nutzungskarte und durch die Begleitparameter der gleichen Klasse zugewiesen. Die gute Übereinstimmung der kleinstrukturierten Nutzung resultiert sehr wahrscheinlich aus der großskaligen Kartengrundlage. Auch bei der Überschwemmung ist eine hohe Übereinstimmung der Punkt- und Flächeninformationen von ca. 91% zu erkennen. Der Grund für diese auf den ersten Blick gute Übereinstimmung liegt jedoch nicht in der Genauigkeit der Kartengrundlage, sondern darin, dass das Nicht-Überschwemmungs-Gebiet den Großteil der Fläche des Untersuchungsgebiets einnimmt. Die Überschwemmungsgebiete werden durch Punkt- und Flächeninformationen sehr unterschiedlich klassifiziert. Beispielsweise werden nur wenig mehr als die Hälfte der Stichprobenelemente, die durch die Flächeninformationen der Aue östlich der Elbe zugeordnet werden auch durch die Punktinformationen dieser Klasse zugeordnet.

Anzahl		NUTZ Fläche		Gesamt
		Forst	Landw. Nutzung	
NUTZ_Punkt	Forst	268	61	329
	Landw. Nutzung	50	709	759
Gesamt		318	770	1088

**Abb. 2- 7: Vergleich von Punkt- und Flächeninformationen der Nutzung für die Stichprobe Benzo(a)pyren in Sachsen.**

Anzahl		SCHWEMM Fläche			Gesamt
		keine Aue	Aue ö Elbe	Aue w Elbe	
SCHWEMM_Punkt	keine Aue	1010	8	18	1036
	Aue ö Elbe	35	12		47
	Aue w Elbe	46		35	81
Gesamt		1091	20	53	1164

**Abb. 2- 8: Vergleich von Punkt- und Flächeninformationen der Überschwemmung für die Stichprobe Benzo(a)pyren in Sachsen.**

Es liegen keine Begleitinformationen der punktuellen Stoffgehalte über den Einflussfaktor Siedlungsstruktur vor. Da die Siedlungsstrukturkarte große zusammenhängende Flächen aufweist, wird davon ausgegangen, dass die durch den Spatial Join geschaffene Zuordnung in vielen Fällen korrekt ist.

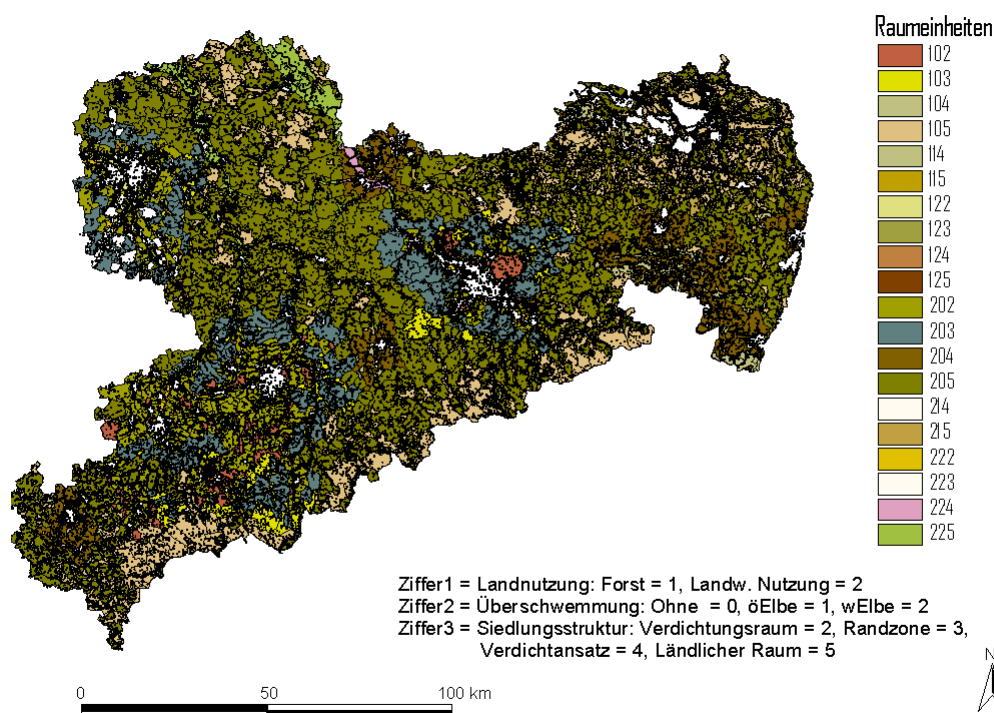
### 2.3.1.5 Umgang mit Werten unterhalb der Bestimmungsgrenze

Knapp die Hälfte der gemessenen B(a)P-Werte im Oberboden liegen unterhalb der Bestimmungsgrenze ( $2 \mu\text{g/kg}$ ) und wurden vom Sächsischen Landesamt für Umwelt und Geologie auf die Hälfte der Bestimmungsgrenze, nämlich  $1 \mu\text{g/kg}$  gesetzt. In den weiteren Analysen wird die Bestimmungsgrenze mitgeführt.

### Potentielle Raumeinheiten bilden

Nach Rücksprache mit Frau Kardel vom Sächsischen Landesamt für Umwelt und Geologie wird die räumliche Verteilung von persistenten Organika vorwiegend durch die Nutzung und die Überschwemmung geprägt. Nach ihrer Kenntnis sind für die Nutzung die zwei Klassen Forst und Acker/Grünland ausschlaggebend. Für die Beschreibung des Einflusses der Überschwemmung sollte zwischen westlich (einschließlich der Elbaue) und östlich der Elbe liegenden Auen unterschieden werden.

Um Raumeinheiten zu bilden, die bezüglich dieser beiden Faktoren homogen sind, wurden im GIS ArcView die entsprechenden Polygonlayer bezüglich der oben genannten Klassen aggregiert und mit der Methode „Merge“ miteinander verschritten. Die daraus resultierende Karte der homogenen Raumeinheiten ist in Abb. 2- 9 dargestellt.



**Abb. 2- 9: Homogene Raumeinheiten für die räumliche Analyse des Stoffes B(a)P.**

### 2.3.1.6 Stoffgehalte nach homogenen Raumeinheiten klassifizieren

Die B(a)P-Stoffgehalte wurden den im letzten Schritt gebildeten Raumeinheiten zugeordnet. Dabei wurde die Klasseneinteilung für die Nutzung und die Überschwemmung auf Grundlage der Begleitinformationen der Punktdaten und für die Siedlungsstruktur auf Grundlage der Flächeninformationen durchgeführt.



### 2.3.1.7 Repräsentativität der Stichprobe prüfen

Die Repräsentativität der Stichprobe der B(a)P-Gehalte wurde nach verschiedenen Kriterien bewertet.

**Tabelle 2- 3: Stichprobenanzahl der B(a)P-Proben in den homogenen Raumeinheiten. Raumeinheiten sind durch dreistellige Nummer gekennzeichnet: Ziffer1 = Nutzung: Forst = 1, Landw. Nutzung = 2. Ziffer2 = Überschwemmung: Ohne = 0, öElbe = 1, wElbe = 2. Ziffer3 = Siedlungsstruktur: Verdichtungsraum = 2, Randzone = 3, Verdichtungsansatz = 4, Ländlicher Raum = 5.**

		Häufigkeit	Prozent	Gültige Prozente	Kumulierte Prozente
Gültig	102,00	32	2,7	2,8	2,8
	103,00	37	3,2	3,2	6,1
	104,00	25	2,1	2,2	8,3
	105,00	225	19,3	19,8	28,0
	112,00	1	,1	,1	28,1
	113,00	1	,1	,1	28,2
	114,00	1	,1	,1	28,3
	115,00	6	,5	,5	28,8
	122,00	7	,6	,6	29,4
	123,00	2	,2	,2	29,6
	124,00	1	,1	,1	29,7
	125,00	2	,2	,2	29,9
	202,00	109	9,4	9,6	39,4
	203,00	104	8,9	9,1	48,6
	204,00	67	5,8	5,9	54,4
	205,00	415	35,7	36,4	90,9
	213,00	4	,3	,4	91,2
	214,00	10	,9	,9	92,1
	215,00	24	2,1	2,1	94,2
	222,00	13	1,1	1,1	95,3
	223,00	6	,5	,5	95,9
	224,00	9	,8	,8	96,7
	225,00	38	3,3	3,3	100,0
	Gesamt	1139	97,9	100,0	
Fehlend	System	25	2,1		
Gesamt		1164	100,0		

Die in Tabelle 2- 3 dargestellte Häufigkeitsverteilung zeigt die Verteilung der Stichprobenelemente über die homogenen Raumeinheiten. Grau markiert sind die homogenen Raumeinheiten innerhalb von Überschwemmungsgebieten. Diese weisen bis auf zwei Ausnahmen weniger als 20 Stichprobenelemente auf. 20 Stichprobenelemente werden als das Minimum für die weiteren Analysen angesehen. Die räumliche Verteilung von B(a)P in Überschwemmungsgebiete wurden daher nicht weiter analysiert.

In den Tabellen Tabelle 2- 4 bis Tabelle 2- 7 wird der Flächenanteil der Klassen der einzelnen Einflussfaktoren mit dem Anteil der Stichprobenelemente in diesen verglichen. Die Anteile stimmen sehr gut überein, so dass von einer bezüglich der verschiedenen Einflussfaktoren flä-



chengewichteten Stichprobe gesprochen werden kann. Dieses Ergebnis ist nicht überraschend, da die Stichprobe durch eine Rasterbeprobung gewonnen wurde.

**Tabelle 2- 4: Vergleich der Flächenanteile und der Stichprobenanteile der Klassen der Siedlungsstruktur für die Messwerte des Stoffes B(a)P.**

	Flächenanteil Absolut [m <sup>2</sup> ]	Flächenanteil in Prozent	Stichproben- anteil absolut	Stichprobenanteil in Prozent
<b>Verdichtungsraum</b>	2.839	15,4	177	15,2
<b>Randgebiet</b>	2.464	13,3	154	13,2
<b>Gebiet mit Ver- dichtungsansatz</b>	1.735	9,4	116	10
<b>Ländlicher Raum</b>	11.441	61,9	714	61,3
<b>Gesamt</b>	18.478	100	1161	100

**Tabelle 2- 5: Vergleich der Flächenanteile und der Stichprobenanteile der Klassen der Überschwemmung für die Messwerte des Stoffes B(a)P.**

	Flächenanteil absolut [m <sup>2</sup> ]	Flächenanteil in Prozent	Stichprobenanteil absolut	Stichprobenanteil in Prozent
<b>Keine Über- schwem.</b>	17.316	93,7	1036	89
<b>Überschw. ö Elbe</b>	313	1,7	47	4
<b>Überschw. w Elbe</b>	849	4,6	81	7
<b>Gesamt</b>	18.478	100	1164	100

**Tabelle 2- 6: Vergleich der Flächenanteile und der Stichprobenanteile der Klassen der Nutzung für die Messwerte des Stoffes B(a)P.**

	Flächenanteil absolut [m <sup>2</sup> ]	Flächenanteil in Prozent	Stichproben- anteil absolut	Stichprobenanteil in Prozent
<b>Forst</b>	4.723	28	341	29,9
<b>Landw. Nut- zung</b>	11.886	72	801	70,1
<b>Gesamt</b>	16.609	100	1142	100

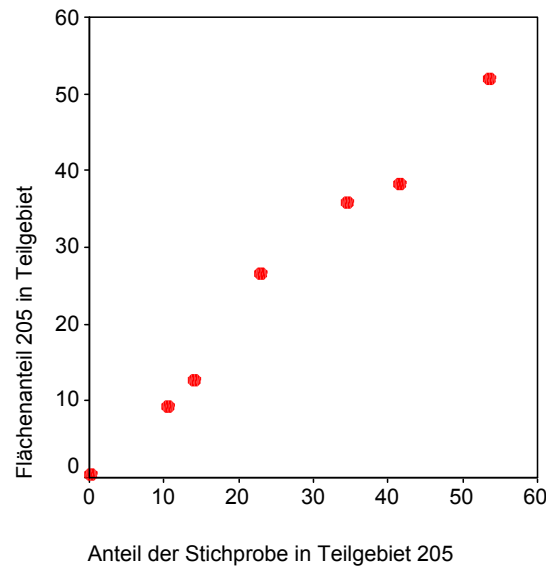


**Tabelle 2- 7: Vergleich der Flächenanteile und der Stichprobenanteile der Klassen der homogenen Raumeinheiten für die Messwerte des Stoffes B(a)P.**

	Flächenanteil absolut [m <sup>2</sup> ]	Flächenanteil in Prozent	Stichprobenanteil absolut	Stichprobenanteil in Prozent
102	470.251.510	2,83	32	2,8
103	512.940.918	3,09	37	3,2
104	333.084.875	2,01	25	2,2
105	3.250.201.991	19,59	225	19,8
112	0	0	1	0,1
113	0	0	1	0,1
114	2.842.098	,02	1	0,1
115	60.180.088	,36	6	0,5
122	41.497.261	,25	7	0,6
123	8.952.362	,05	2	0,2
124	1.288.647	,01	1	0,1
125	34.231.675	,21	2	0,2
202	1.552.077.992	9,35	109	9,6
203	1.674.404.439	10,09	104	9,1
204	1.102.064.054	6,64	67	5,9
205	6.766.556.050	40,78	415	36,4
212	0	0	0	0
213	0	0	4	0,4
214	21.402.788	,13	10	0,9
215	188.634.848	1,14	24	,21
222	127.908.362	,77	13	1,1
223	49.449.958	,30	6	0,5
224	34.754.935	,21	9	0,8
225	358.302.458	2,16	38	3,3
Gesamt	16.591.027.309		1139	100

**Tabelle 2- 8: Definition der Fenster durch Rechts- und Hochwerte der Eckpunkte, die in der Moving-Window-Methode verwendet wurden.**

Rechtswert >	Rechtswert <	Hochwert >	Hochwert <
4488000	4588000	5630000	5730000
4538000	4638000	5630000	5730000
4588000	4688000	5630000	5730000
4638000	4738000	5630000	5730000
4488000	4588000	5540000	5640000
4538000	4638000	5540000	5640000
4588000	4688000	5540000	5640000
4638000	4738000	5540000	5640000



**Abb. 2- 10: Vergleich der Flächenanteile und Stichprobenanteile der homogenen Einheit 205 in der Moving-Window-Methode.**

Mit Hilfe der Moving-Window-Methode wurde überprüft, ob die räumliche Verbreitung der Stichprobenelemente der einzelnen homogenen Raumeinheiten der räumlichen Verbreitung dieser über das Untersuchungsgebiet entspricht. Da davon auszugehen ist, dass dieses Kriterium für eine Rasterbeprobung erfüllt ist, wurde dieses Kriterium nur beispielhaft für die homogene Raumeinheit 205 (Landw. Nutzung, keine Überschwemmung, Ländlicher Raum) durchgeführt. Dazu wurde eine Fenstergröße von 100x100km gewählt und acht Fenster über das Untersuchungsgebiet gelegt. Die Fenster sind definiert durch die in Tabelle aufgeführten Rechts- und Hochwerte. Abb. 2- 10 bestätigt die Vermutung, dass bei Rasterbeprobungen die räumliche Verteilungen ähnlich sind.

Da die Daten der B(a)P-Gehalte in einem Raster beprobt wurden, wurde davon ausgegangen, dass die räumliche Verbreitung der Stichproben in den homogenen Raumeinheiten der räumlichen Verbreitung der Flächen dieser entspricht und wurde dieses Kriterium deshalb nicht getestet. Ebenso musste aufgrund der Rasterbeprobung nicht überprüft werden, ob die Stichprobe räumlich geclustert ist.

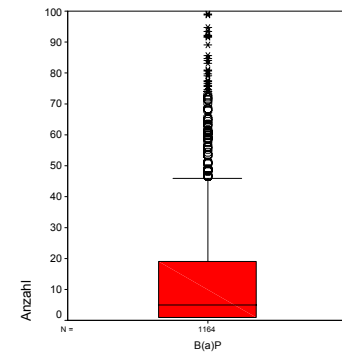
### 2.3.1.8 Verteilungen analysieren

Nachdem in den letzten Schritten die räumlichen Eigenschaften der Stichprobe der B(a)P-Gehalte im Vordergrund standen, wurde mit diesem Schritt ein Überblick über die Werteverteilung der B(a)P-Gehalte gewonnen. Die Werteverteilung wurde zuerst global, dann für die einzelnen Einflussfaktoren und abschließend in den homogenen Raumeinheiten analysiert. Dadurch konnten die Art der Verteilungen bestimmt werden und die Verteilungen konnten hinsichtlich der Lokation und der Streuung der einzelnen Einflussfaktoren und homogenen Einheiten miteinander verglichen werden.



## Univariate Statistiken

			Statistik	Standard fehler
B(a)P	Mittelwert		35,34493	10,18259
	95% Konfidenzintervall des Mittelwerts	Untergrenze Obergrenze	15,36663 55,32323	
	5% getrimmtes Mittel		12,56976	
	Median		5,00000	
	Varianz		120689,5	
	Standardabweichung		347,4039	
	Minimum		1,000	
	Maximum		11100,000	
	Spannweite		11099,000	
	Interquartilbereich		18,10000	
	Schiefe		28,786	,072
	Kurtosis		895,577	,143



**Abb. 2- 11: Globale Werteverteilung des B(a)P-Stoffgehalts in Sachsen.**

B(a)P Stamm-und-Blatt-Plot

Häufigkeit	Stamm & Blatt
1	1
2	2
3	3
4	4
5	5
6	6
7	7
8	8
9	9
10	10
11	11
12	12
13	13
14	14
15	15
16	16
17	17
18	18
19	19
20	20
21	21
22	22
23	23
24	24
25	25
26	26
27	27
28	28
29	29
30	30
31	31
32	32
33	33
34	34
35	35
36	36
37	37
38	38
39	39
40	40
41	41
42	42
43	43
44	44
45	45
46	46
47	47
48	48
49	49
50	50
51	51
52	52
53	53
54	54
55	55
56	56
57	57
58	58
59	59
60	60
61	61
62	62
63	63
64	64
65	65
66	66
67	67
68	68
69	69
70	70
71	71
72	72
73	73
74	74
75	75
76	76
77	77
78	78
79	79
80	80
81	81
82	82
83	83
84	84
85	85
86	86
87	87
88	88
89	89
90	90
91	91
92	92
93	93
94	94
95	95
96	96
97	97
98	98
99	99
100	100

[illegible]

```
Stammbreite: 10,000
Blatt: 11 Werte
```

& bezeichnet nicht vollständige Blätter.

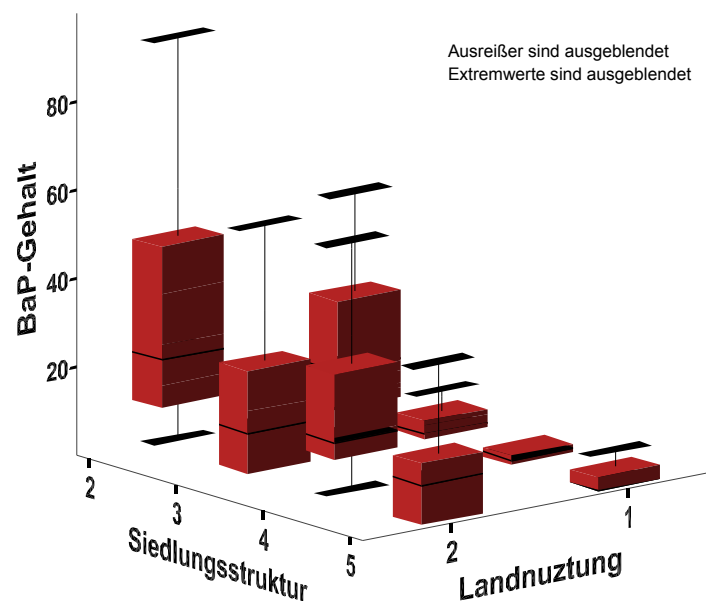
**Abb. 2- 12: Stamm-und-Blatt-Plot der Werteverteilung des B(a)P-Gehalts in Sachsen.**





In den Abbildungen Abb. 2- 11 und Abb. 2- 12 sind verschiedene Ansichten auf die globale Werteverteilung der B(a)P-Gehalte in Sachsen dargestellt. Man erkennt sowohl an der Schiefe von 28.8 als auch an dem unsymmetrischen Boxplot und dem Stamm-und-Blatt-Plot, dass die Verteilung stark rechtsschief ist. Zur Erläuterung eines Stamm-und-Blatt-Plots siehe bspw. Hartung et. al. (1999). Knapp die Hälfte der Stichprobenelemente liegt unterhalb der Bestimmungsgrenze und ist daher auf 1 µg/kg gesetzt. Es gibt einige extreme Werte von bis zu 11.100 µg/kg. Diese wurden in der anschließenden Ausreißeranalyse noch genauer betrachtet.

In Abb. 2- 13 sind die Werteverteilungen der B(a)P-Gehalte in den einzelnen homogenen Raumeinheiten dargestellt. Anhand dieser Darstellung können als erstes die Werteverteilungen bezüglich der Einflussfaktoren Siedlungsstruktur und Nutzung analysiert werden. Man erkennt einen Anstieg der B(a)P-Werte vom der Klasse *Ländlichen Raum* hin zur Klasse *Verdichtungsraum*. Dabei liegen in den Klassen *Randzone* und *Raum mit Verdichtungsansätzen* ähnlich hohe Werte. Gleichzeitig liegen in der Klasse *Landw. Nutzung* im Mittel wesentlich höhere Werte als in der Klasse *Forst*. In der Regel nimmt die Streuung bei Zunahme der mittleren Werte in den Klassen zu. Die mittleren B(a)P-Gehalte in den einzelnen homogenen Raumeinheiten entsprechen den fachlichen Vorstellungen und geben erste Hinweise auf eine statistische Signifikanz der Einflüsse der Siedlungsstruktur und der Nutzung.



**Abb. 2- 13: Box-Plots der B(a)P-Werte in den durch die Siedlungsstruktur und die Nutzung gebildeten homogenen Raumeinheiten (Siedlungsstruktur: 2 = Verdichtungsraum, 3 = Randzone, 4 = Ländlicher Raum mit Verdichtungsansätzen, 5 = Ländlicher Raum Nutzung: 1 = Forst, 2 = Landw. Nutzung).**



### 2.3.1.9 Signifikanz der Einflussfaktoren überprüfen

Die Verteilungsanalyse gab erste Anhaltspunkte dafür, dass die Siedlungsstruktur und die Nutzung einen Einfluss auf die räumliche Verteilung von B(a)P ausüben. Eine Korrelationsanalyse wurde durchgeführt, um zu klären, ob diese Einflüsse signifikant sind. Dazu wurde für diese beiden Einflussfaktoren der Chi-Quadrat-Test auf Unabhängigkeit durchgeführt und wurde der Kontingenzkoeffizient nach Pearson berechnet.

Da man davon ausgehen muss, dass die räumliche Verteilung der B(a)P-Gehalte von beiden Faktoren bestimmt wird, ist es bei der Betrachtung eines Einflussfaktors wichtig, dass die Anteile der Stichprobenelemente des anderen Einflussfaktors in den einzelnen Klassen dieses Faktors ähnlich sind. In Tabelle 2- 9 sind diese Marginalverteilungen dargestellt. Man erkennt, dass die Verteilungen der beiden Einflussfaktoren in den Klassen des jeweils anderen Faktors ähnlich sind. Daher kann man die Korrelationsanalyse für beiden Einflussfaktoren getrennt durchführen.

**Tabelle 2- 9: Marginalverteilungen der Einflussfaktoren des B(a)P-Gehalts.**

			Nutzung		Gesamt
			Forst	Landw. Nutzung	
Siedlungs- struktur	Verdichtungsraum	Anzahl	40	122	162
		% von Siedlung	24,7%	75,3%	100,0%
		% von Nutzung	11,8%	15,3%	14,2%
	Randzone des Verdichtungsraums	Anzahl	40	114	154
		% von Siedlung	26,0%	74,0%	100,0%
		% von Nutzung	11,8%	14,3%	13,5%
	Gebiet mit Verdichtungsansätzen	Anzahl	27	86	113
		% von Siedlung	23,9%	76,1%	100,0%
		% von Nutzung	7,9%	10,8%	9,9%
	Ländlicher Raum	Anzahl	233	477	710
		% von Siedlung	32,8%	67,2%	100,0%
		% von Nutzung	68,5%	59,7%	62,3%
Gesamt	Anzahl	340	799	1139	
	% von Siedlung	29,9%	70,1%	100,0%	
	% von Nutzung	100,0%	100,0%	100,0%	

Das Ergebnis des Chi-Quadrat-Tests auf Unabhängigkeit ist für beide Einflussfaktoren eine signifikante Ablehnung der Null-Hypothese, d.h. beide Einflussfaktoren üben einen signifikanten Einfluss auf den B(a)P-Gehalt aus. Die Kontingenzkoeffizienten sind für den Einflussfaktor Nutzung mit 0.42 und den Einflussfaktor Siedlungsstruktur mit 0.3 allerdings nur mäßig hoch.

Die Korrelationsanalyse bestärkt also das Ergebnis der Verteilungsanalyse, dass die Nutzung und die Siedlungsstruktur aussagekräftige Einflussfaktoren des B(a)P-Gehalts darstellen.

### 2.3.1.10 Extremwerte untersuchen

Extrem hohe Werte sollten nur dann aus dem Datensatz der B(a)P-Gehalte eliminiert werden, wenn fachlich nachgeprüft wurde, dass es sich um Ausreißer handelt. Ansonsten geben sie wichtige Hinweise auf mögliche Belastungen. Bei der Analyse der B(a)P-Gehalte wurde davon ausgegangen, dass der Datenbestand korrekt ist. Daher wurden extreme Werte nur gekennzeichnet.



net, jedoch nicht aus dem Datenbestand entfernt. Extreme Werte wurden für die einzelnen homogenen Raumeinheiten ermittelt. Eine Übersicht hierüber ist in Tabelle 2- 10 dargestellt.

**Tabelle 2- 10: Extremwerte der homogenen Raumeinheiten für B(a)P.**

Hom. Raum- einheit	Gesamtanzahl an Werten	Anzahl extre- mer Werte	Untere Grenze extremer Werte [µg/kg]	Größter Wert [µg/kg]
<b>102</b>	32	1	95,25	357
<b>103</b>	37	2	11	130
<b>104</b>	25	4	12	48
<b>105</b>	225	25	16	160
<b>202</b>	109	7	197.6	1165
<b>203</b>	104	3	127.125	35
<b>204</b>	67	1	155.1	181,8
<b>205</b>	415	12	77	665

Um weitere Informationen über die extremen Werte zu bekommen, wurden beispielhaft Verteilungen der B(a)P-Gehalte in ihrer lokalen Umgebung betrachtet. Diese lokalen Verteilungen geben Auskunft über räumliche Cluster von hohen Werten. Da in diesem Fall diese Analysen keine weiteren Informationen über die betrachteten Extremwerte ergaben, werden hier keine Ergebnisse dargestellt.

#### **2.3.1.11 Raumeinheiten endgültig festlegen**

Die Datenvorverarbeitung und – exploration hat gezeigt, dass die Nutzung und Siedlungsstruktur einen signifikanten Einfluss auf die räumliche Verteilung der B(a)P-Gehalte ausüben. Durch diese werden daher die homogenen Raumeinheiten für die Erhebung statistischer Kennwerte und für die räumliche Interpolation definiert.

#### **2.3.2 Erhebung statistischer Kennwerte**

Der Median wurde als wichtigster statistischer Kennwerte mit der durch das 95%-Konfidenzintervall beschriebenen Aussagesicherheit berechnet. Darüber hinaus wurde für die homogenen Raumeinheiten, die Stichprobenanzahlen von mehr als 50 aufwiesen, das 90. Perzentil inklusive Aussagesicherheit bestimmt. Der Median und das 90. Perzentil sind in Tabelle 2- 11 aufgeführt. Darüber hinaus sind in Abb. 2- 14 die Mediane der homogenen Raumeinheiten räumlich visualisiert. In Abb. 2- 15 ist die zugehörige Aussagesicherheit dargestellt. In Tabelle 2- 13 ist darüber hinaus ein Vergleich des 90.Perzentils mit und ohne Einbeziehung extremer Werte dargestellt.



**Tabelle 2- 11: Median und Konfidenzintervall des Medians für den B(a)P-Gehalt in den homogenen Raumeinheiten in Sachsen.**

Hom. Raum-einheit	Median	Untere Grenze des Konf.-intervalls	Obere Grenze des Konf.-intervalls
102	6.5	2	15.9
103	2	1	4
104	2	1	2
105	1	1	1
202	20.6	15.4	28.9
203	10	1	14.1
204	13.1	10.9	18.9
205	10	1	10

**Tabelle 2- 12: 90.Perzentil und Konfidenzintervall des Medians für den B(a)P-Gehalt in den homogenen Raumeinheiten in Sachsen.**

Hom. Raum-einheit	90.Perzentil	Obere Grenze des Konf.-intervalls
102	-	-
103	-	-
104	-	-
105	18.1	25
202	92.1	135.6
203	62.1	77.1
204	63.1	103.9
205	35.4	43.2

**Tabelle 2- 13: Vergleich des 90.Perzentils mit und ohne Einbeziehung extremer Werte für den B(a)P-Gehalt in den homogenen Raumeinheiten in Sachsen.**

Hom. Raum-einheit	90.Perzentil ohne extr. Werte	90.Perzentil mit extr. Werte
102	-	-
103	-	-
104	-	-
105	6	18.1
202	73.3	92.1
203	43.8	62.1
204	60.7	63.1
205	27.2	35.4

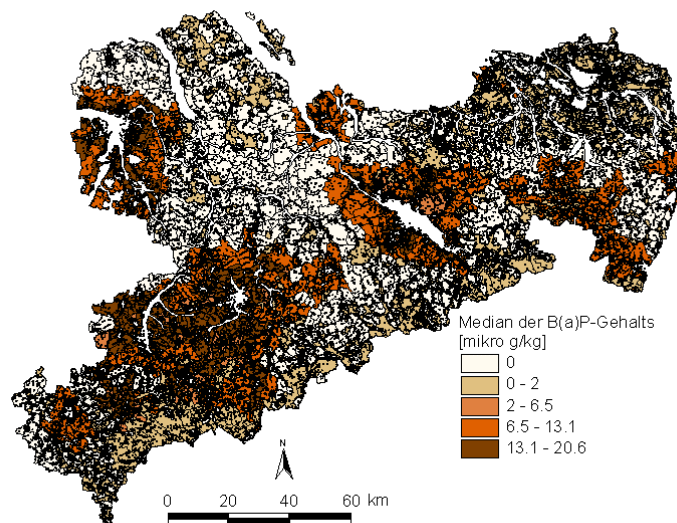


Abb. 2- 14: Räumliche Darstellung des Medians der B(a)P-Verteilung in Sachsen.

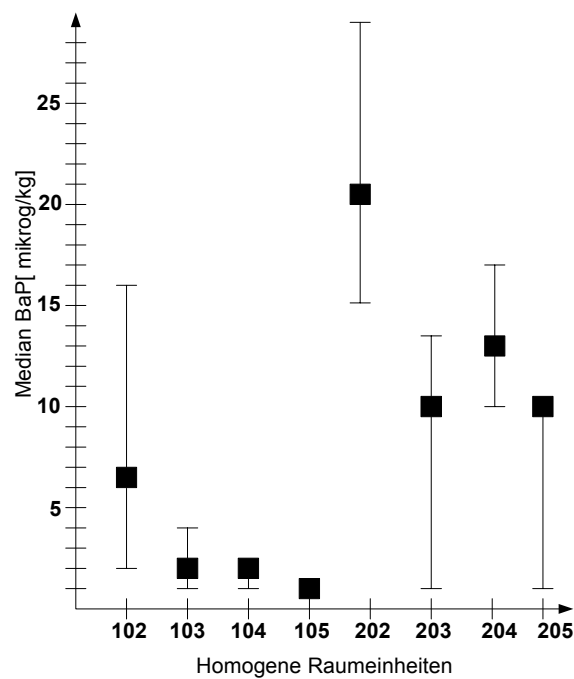


Abb. 2- 15: Aussagesicherheit des Medians der B(a)P-Verteilung in Sachsen.



### 2.3.3 Räumliche Interpolation

Bei der Interpolation des B(a)P-Gehalts wurde die große Anzahl von Werten unterhalb der Bestimmungsgrenze besonders berücksichtigt. Es wurde zuerst das Gebiet abgegrenzt, in dem der B(a)P-Gehalt unterhalb der Bestimmungsgrenze liegt. In einem zweiten Schritt wurde dann für das restliche Gebiet die Werteoberfläche des B(a)P-Gehalts geschätzt. Im Folgenden wird die Schätzung der räumlichen Verteilung des B(a)P-Gehalts mit Hilfe des geostatistischen Interpolationsverfahrens Kriging detailliert beschrieben.

#### 2.3.3.1 Modell

Zum Aufbau des Interpolationsmodells wird angenommen, dass die Verteilung der B(a)P-Gehalte aus zwei Grundgesamtheiten gebildet wird, aus den Werten oberhalb der Bestimmungsgrenze und den Werten unterhalb der Bestimmungsgrenze. Diese Annahme wird in folgendem Interpolationsmodell beschrieben:

$$BaP = P_{>NW} BaP_{>NW} + (1 - P_{>NW}) BaP_{<NW}$$

Dabei bezeichnet  $BaP$  den Gesamtprozess des B(a)P-Gehalts,  $BaP_{<NW}$  den konstanten Prozess, der die Werte unterhalb der Bestimmungsgrenze beschreibt und  $BaP_{>NW}$  den Prozess, der die Werte oberhalb der Bestimmungsgrenze beschreibt.  $P_{<NW}$  bezeichnet die Wahrscheinlichkeit für das Auftreten eines Wertes unterhalb der Bestimmungsgrenze.

Die Interpolation der B(a)P-Gehalte oberhalb der Bestimmungsgrenze basiert auf dem folgenden Modell:

$$BaP_{>NW}(x) = \sum_{i=1}^n \exp(BaP_{std}(x) + a_i) 1_{A_i}(x)$$

Der Prozess der B(a)P-Gehalte oberhalb der Bestimmungsgrenze wird als Summe aus Prozessen der  $n$  homogenen Raumeinheiten aufgefasst. Die homogenen Raumeinheiten werden durch räumliche Indikatorfunktionen  $1_{A_i}(x)$  beschrieben. Die Prozesse der einzelnen homogenen Raumeinheiten basieren auf einem Standardprozess  $BaP_{std}$ . Sie unterscheiden sich durch ihre arithmetischen Mittelwerte  $a_i$  voneinander. Es wird außerdem die schiefe Verteilung der B(a)P-Gehalte durch eine Logarithmus-Transformation berücksichtigt. Der Prozess  $As_{std}$  wird als stationär und autokorrelativ angesehen. Für diesen kann damit das Variogramm bestimmt werden, und er kann unter Verwendung des Simple Kriging interpoliert werden.

Der Interpolationsschätzer  $\hat{bap}_{std}(x)$  verwendet die logarithmierten und durch das arithmetische Mittel standardisierten Nachbarwerte des zu interpolierenden Punktes. Der Gesamtschätzer des Prozesses der B(a)P-Gehalte oberhalb der Bestimmungsgrenze lautet dann

$$\hat{bap}_{>NW}(x) = \sum_{i=1}^n \exp(\hat{bap}_{std}(x) + a_i) 1_{A_i}(x)$$

Die Wahrscheinlichkeit  $P_{>NW}$  wird durch das Indikator Kriging geschätzt. In einer Nachbearbeitung werden alle geschätzten Wahrscheinlichkeiten oberhalb des Wertes 0.7 auf 1 gesetzt, die unterhalb von 0.3 auf 0 und die Wahrscheinlichkeiten im Intervall  $[0.3, 0.7]$  auf den Bereich  $[0, 1]$  transformiert. Dadurch erhält man Gebiete, in denen der B(a)P-Gehalt als größer bzw. kleiner als die Bestimmungsgrenze angesehen werden kann und einen Übergangsbereich.



Der Gesamtschätzer für den B(a)P-Gehalt lautet damit

$$\hat{b}ap = P_{>NW} \hat{b}ap_{>NW} + (1 - P_{>NW}) 1$$

### 2.3.3.2 Indikator Kriging

Für die Berechnung des experimentellen Variogramms der Indikatortransformierten B(a)P-Gehalte wurde eine Lag-Weite von 6 km gewählt. Das isotrope Variogramm der standardisierten Arsengehalte ist im linken Bereich der Abb. 2- 16 dargestellt. Durch die gewählte Lag-Weite wird in allen Klassen die erforderliche Mindestanzahl von 30 Tupeln überschritten. In derselben Abbildung ist die Anpassung eines theoretischen Variogramms an das experimentelle Variogramm dargestellt. Es wurde ein theoretisches Variogramm gewählt, das aus einer exponentiellen und einer sphärischen Variogrammfunktion aufgebaut ist:

$$\gamma(h) = 0.19(1 - \exp(-3h/6100)) + 0.05054(1.5h/33383 - 0.5(h/33383)^3)$$

für  $h \leq 33383$ , sonst

$$\gamma(h) = 0.19(1 - \exp(-3h/6100)) + 0.05054$$

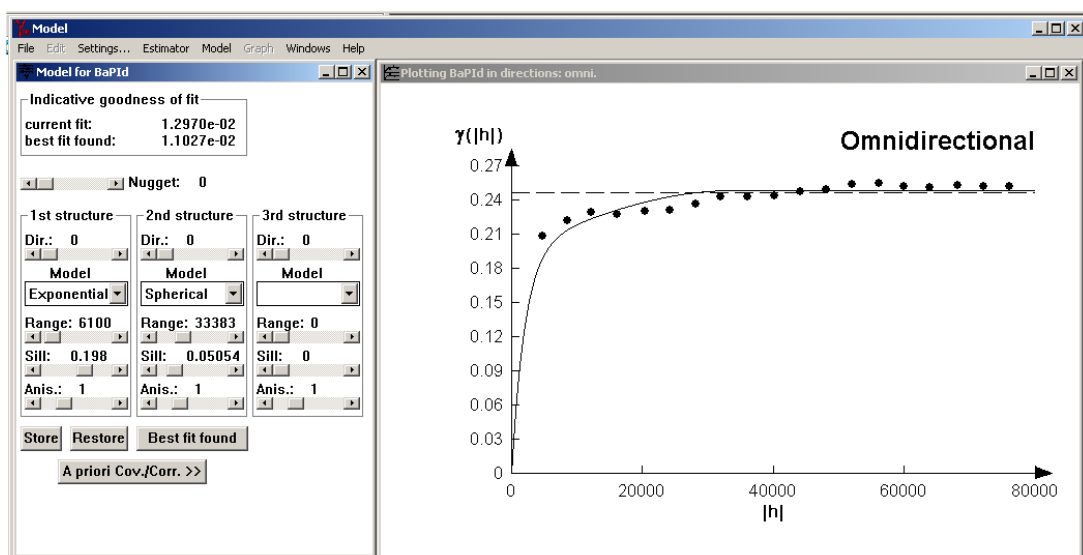
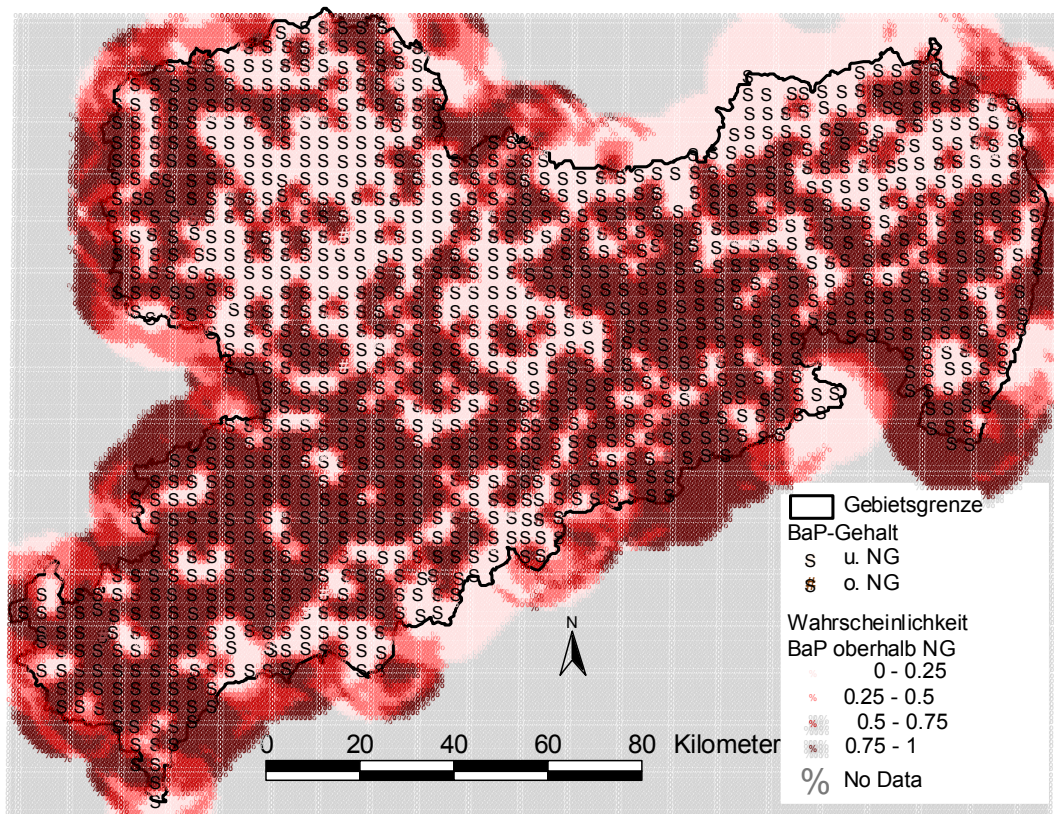


Abb. 2- 16: Variogramm des Indikator Krigings.

Die durch das Ordinary Kriging der Indikatortransformierten B(a)P-Gehalte interpolierte Wertoberfläche ist in Abb. 2- 17 dargestellt. Man erkennt in diese Abbildung die Gebiete, in denen der B(a)P-Gehalt als unterhalb bzw. oberhalb der Bestimmungsgrenze liegend angesehen wird.





**Abb. 2- 17: Interpolierte Werteoberfläche der Indikatortransformierten B(a)P-Gehalte des Ordinary Krigings.**

### 2.3.3.3 Interpolation des B(a)P-Gehalts oberhalb der Bestimmungsgrenze

Die B(a)P-Gehalte oberhalb der Bestimmungsgrenze wurden logarithmiert und bezüglich der durch die Siedlungsstruktur und die Nutzung gegebenen Raumeinheiten durch das arithmetische Mittel standardisiert. Die Verteilung der transformierten und standardisierten Werte ist in Abb. 2- 18 dargestellt. Diese Verteilung ist annähernd symmetrisch und daher für die Bestimmung der räumlichen Autokorrelation des standardisierten Prozesses gut geeignet.

In Abb. 2- 19 ist das experimentelle Variogramm der transformierten und standardisierten B(a)P-Gehalte und die Anpassung eines theoretischen Variogramms an dieses dargestellt. Es wurde ein exponentielles theoretisches Variogramm gewählt:

$$\gamma(h) = 0.94545(1 - \exp(-3h/6500))$$

Das Variogramm hat eine sehr kleine Aussageweite von ca. 6500 m.

Die interpolierte Werteoberfläche der transformierten und standardisierten B(a)P-Gehalte oberhalb der Bestimmungsgrenze ist in Abb. 2- 20 dargestellt. Die Aussagekraft der Interpolation beschränkt sich dabei auf die Gebiete, in denen der B(a)P-Gehalt oberhalb der Bestimmungsgrenze liegt. Diese Gebiete wurden mit dem Indikator Kriging abgeschätzt.



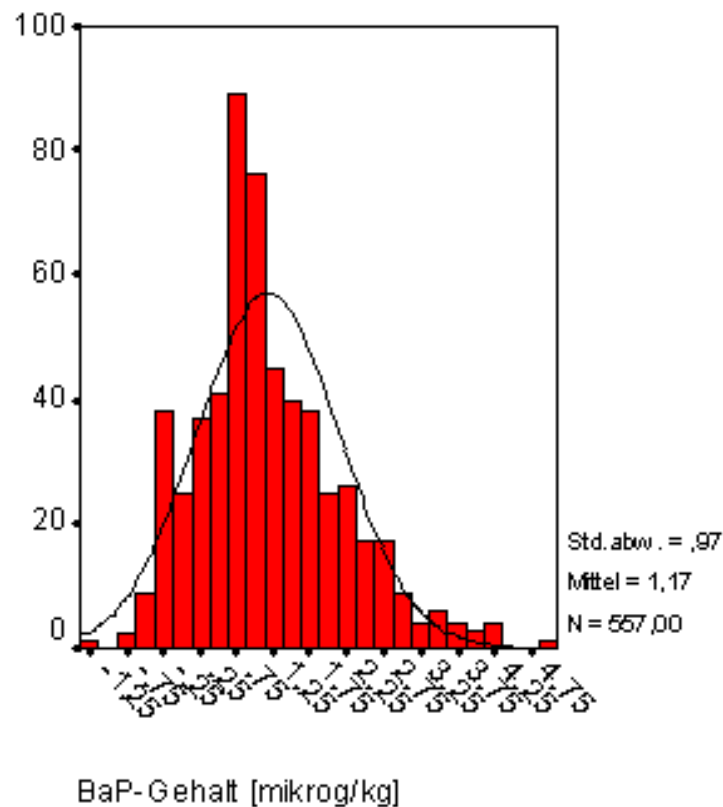


Abb. 2- 18: Transformierte und standardisierte B(a)P-Gehalte oberhalb der Bestimmungsgrenze.

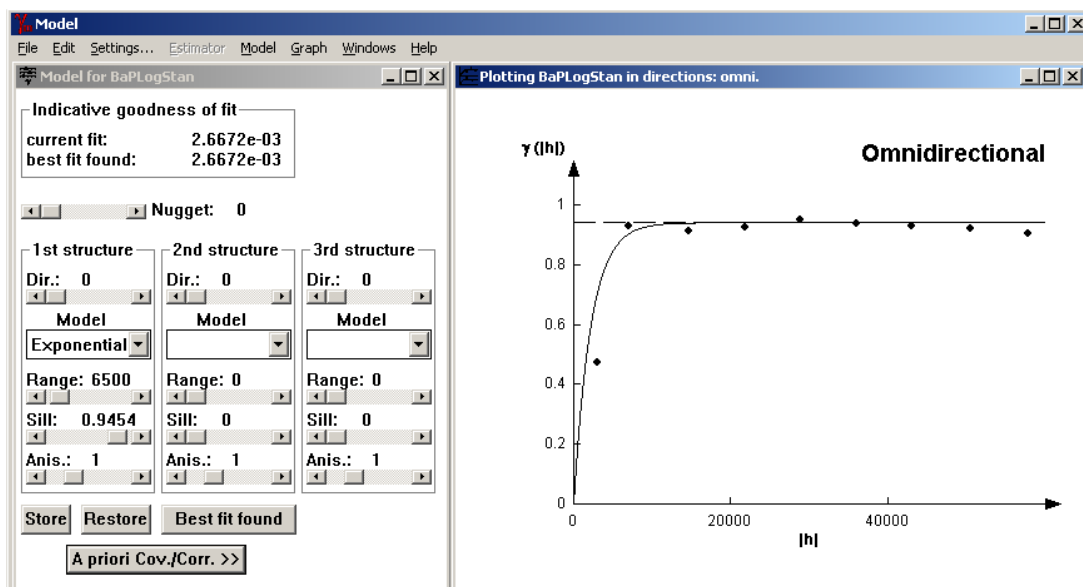
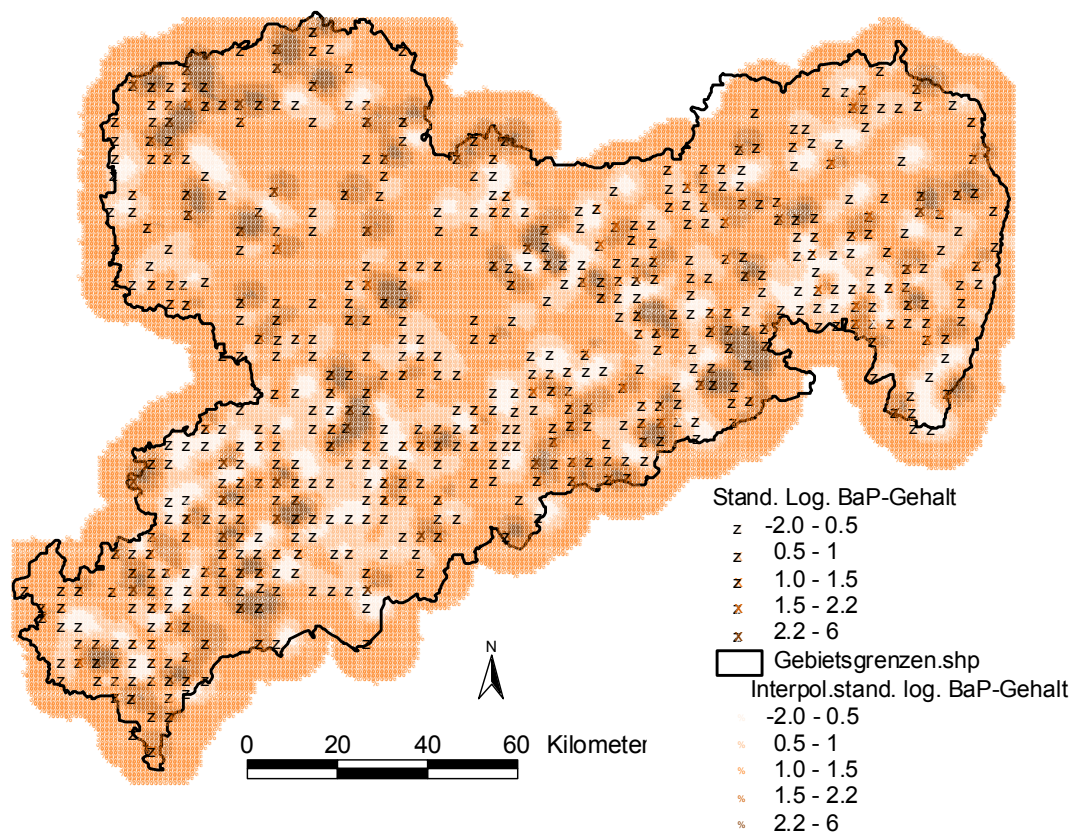


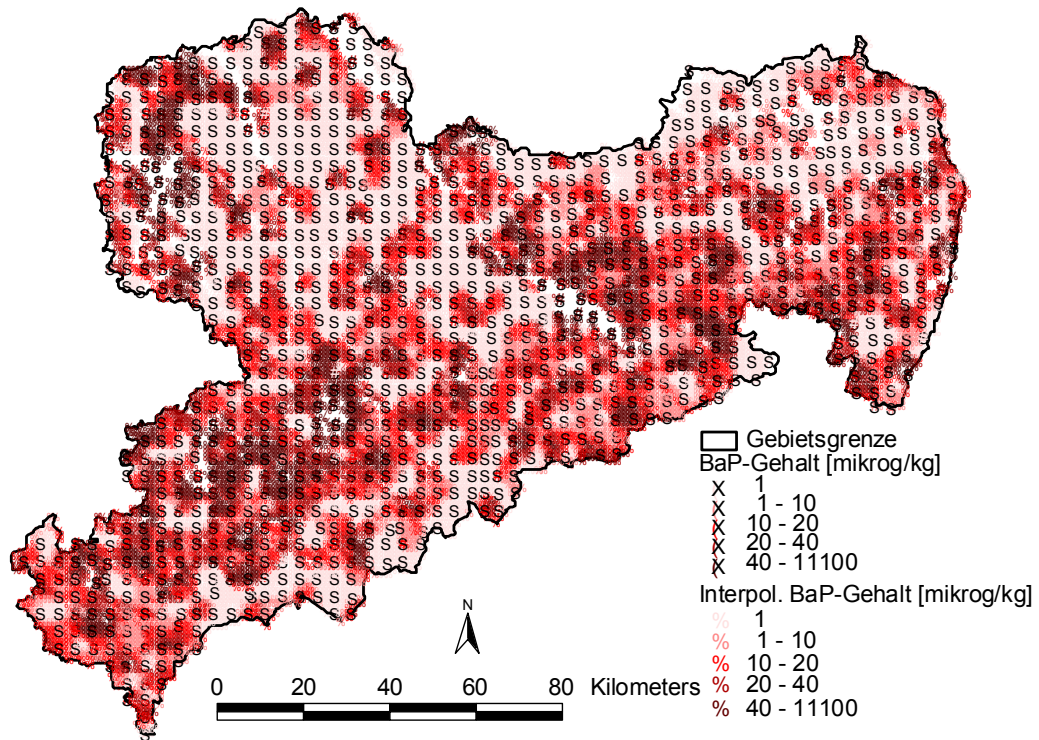
Abb. 2- 19: Variogramm der transformierten und standardisierten B(a)P-Gehalte.



**Abb. 2- 20: Interpolierte Werteoberfläche der transformierten und standardisierten B(a)P-Gehalte oberhalb der Bestimmungsgrenze.**

#### 2.3.3.4 Gesamtinterpolation

In Abb. 2- 21 ist die Werteoberfläche der B(a)P-Gehalte, die durch die Kombination der Indikatorbasierten Interpolation und der Interpolation der B(a)P-Gehalte oberhalb der Bestimmungsgrenze entstanden ist, dargestellt.



**Abb. 2- 21: Werteoberfläche der B(a)P-Gehalte, die durch die Kombination der Indikator-basierten Interpolation und der Interpolation der B(a)P-Gehalte oberhalb der Bestimmungsgrenze entstanden ist.**

## 2.4 Durchführung und Ergebnisse der statistischen Auswertung von Arsen

Im Folgenden werden die in der statistischen Auswertung des anorganischen Stoffes Arsen verwendeten Methoden und die erzielten Ergebnisse beschrieben. Die Auswertung ist in den Bereich der Datenvorverarbeitung und -exploration, die Ableitung von statistischen Kennwerten und in die räumliche Interpolation der Stoffgehalte von Arsen untergliedert.

### 2.4.1 Datenvorverarbeitung und -exploration

In diesem Abschnitt wird eine Datenvorverarbeitung und -exploration vorgenommen, um einen Überblick über die Daten zu erhalten, die Daten zu validieren und homogene Raumeinheiten zu bilden.

#### 2.4.1.1 Visualisierung der raumbezogenen Basisdaten

In Abschnitt 2.1 ist das Untersuchungsgebiet und die Datengrundlage für das Auswertbeispiel Sachsen beschrieben. Die dort aufgeführten Abbildungen Abb. 2- 1 - Abb. 2- 6 stellen die für die Analyse notwendigen und wichtigen Punkt- und Flächeninformationen dar. Zur Visualisierung dieser Informationen wurde das GIS ArcView der Firma ESRI Int. verwendet. Die verschiedenen Informationen wurden als Punkt- und Polygonlayer im GIS verwaltet und visualisiert.



#### 2.4.1.2 Fachliche Datenvalidierung

Für die sich anschließenden (geo-)statistischen Analysen sind nur die Proben aus dem A-Horizont (Oberboden) von Bedeutung, so dass alle anderen Stichprobenelemente aus dem Datenpool entfernt wurden.

Die Stichprobenelemente der Nutzungen Park-/Grünanlage, Sportanlage/Spielplatz und Verkehrsfläche werden in der nachfolgenden Analyse nicht berücksichtigt und damit auch aus dem Datenpool ausgeschlossen.

Die Klasse 184 (Moore und anmoorige Bildungen; 5 Stichprobenelemente) und die Klasse 200 (Stadtböden, Auffülle; 31 Stichprobenelemente) der Leitbodengesellschaften (punktuelle Information, vgl. Tabelle 2- 2 ) wurden aus dem Datenpool ausgeschlossen, die Klasse 300 (Moorböden) kam kein einziges Mal vor.

Damit reduziert sich der Gesamt-Datensatz auf 1120 Stichprobenelemente. Drei Elemente weisen keinen As-Gehalt auf und ein Stichprobenelement dieses Gesamt-Datensatzes weist einen As-Wert unter der Bestimmungsgrenze auf. Dieses Element nimmt den Wert der halben Bestimmungsgrenze an, dieser Wert beträgt 0.5 mg/kg.

#### 2.4.1.3 Bildung von Raumeinheiten

Nach Rücksprache mit Frau Kardel vom Sächsischen Landesamt für Umwelt und Geologie wird die räumliche Verteilung von anorganischen Stoffgehalten vorwiegend durch die Leitbodengesellschaft, die Überschwemmung und die Nutzung geprägt. Für die Beschreibung des Einflusses der Überschwemmung sollte zwischen westlich (einschließlich der Elbaue) und östlich der Elbe liegenden Auen sowie keiner Überschwemmung unterschieden werden. Außerdem sind nach Information von Frau Kardel die zwei Klassen Forst und landwirtschaftliche Nutzung (Acker und Grünland) für die Nutzung ausschlaggebend.

Zunächst werden die Überschwemmung und Nutzung zu den oben genannten Klassen zusammengefasst. Der Polygonlayer der BÜK 400 wurde nicht weiter aggregiert, da die 19 aufgeführten Leitbodengesellschaften (1 bis 19) bereits eine grobe Einteilung darstellen. In einem zweiten Schritt wurden die einzelnen Klassen miteinander verschnitten.

#### 2.4.1.4 Klassifikation der Stoffgehalte nach Raumeinheiten

Die punktuell vorliegenden Informationen über die Überschwemmung, die aus der Leitbodengesellschaften-Tabelle der punktuellen Daten abgeleitet wurden, und die Nutzung wurden auf die im letzten Abschnitt genannten Klassen zusammengefasst. Die punktuell vorliegenden Leitbodengesellschaften (LBG) wurden den in der BÜK 400 vorgegebenen Klassen der Leitbodengesellschaften angepasst (vgl. Abschnitt 2.2: Erläuterung BÜK 400 und LBG). Die punktuell vorliegenden LBG-Klassen 11, 12, 13 und 14 wurden zur Klasse 10, die Klassen 21, 22, 23 zur Klasse 20, die Klassen 31, 32, 33 und 34 zur Klasse 30, die Klassen 41, 42, 43, 44 zur Klasse 40 und die Klassen 181, 182 und 183 zur Klasse 180 aggregiert. Die ursprüngliche Einteilung der Klassen der LBG von 10 bis 190 wurde auf die Klasseneinteilung der BÜK 400 (Klassen 1 bis 19) angepasst.

#### 2.4.1.5 Repräsentanzanalyse

Dieser Abschnitt dient der Analyse der Repräsentativität der Stichprobe. Zunächst werden die Punkt- und Flächeninformationen verglichen. Es wird geprüft, ob die an den Stichprobenstellen



aufgenommen punktuellen Informationen über die Einflussfaktoren mit den für die Probenstellen aus den Flächendaten abgeleiteten Informationen über die Einflussfaktoren übereinstimmen. Weiterhin wird die Stichprobenverteilung über die gebildeten Raumeinheiten betrachtet. Es werden die prozentualen STP-Anteile der Raumeinheiten am Gesamtstichprobenumfang sowie die Flächenanteile der Raumeinheiten an der Gesamtfläche Sachsens erhoben. Diese erhobenen prozentualen Anteile werden daraufhin verglichen, um zu prüfen, ob die Stichprobenanzahl der verschiedenen Raumeinheiten mit den Flächenanteilen der Raumeinheiten an der Gesamtfläche übereinstimmt.

Die punktuellen Informationen über die Einflussfaktoren wurden bei der Probenahme direkt erhoben und spiegeln den wahren Zustand an der Probenahmestelle wider. Die Flächeninformationen über die Einflussfaktoren wurden durch Verschneidung der entsprechenden Polygonlayer mit den Punktdaten ermittelt, so dass diese Informationen nicht immer die richtigen Klassen der Einflussfaktoren für die Probenahmestellen widerspiegeln.

Der Vergleich der Punkt- und Flächeninformation ist für die räumliche Visualisierung der statistischen Kennwerte und v.a. für die räumliche Interpolation von Bedeutung. Denn bei diesen Darstellungen und Analysen werden die Flächeninformationen genutzt und es ist dann zu beachten, dass die den Punktdaten zugewiesenen Flächeninformationen nicht immer den wahren Zustand widerspiegeln.

In den Tabellen Tabelle 2- 14 bis Tabelle 2- 16 sind die Vergleiche der Punkt- und Flächeninformationen über die Einflussfaktoren Leitbodengesellschaft, Überschwemmung und Nutzung an den Stichprobenstellen aufgeführt.

**Tabelle 2- 14: Vergleich der Punkt- und Flächeninformationen über die Leitbodengesellschaft an den Stichprobenstellen.**

BK_LBG					
		Häufigkeit	Prozent	Gültige Prozente	Kumulierte Prozente
Gültig	gleich	697	62,2	62,4	62,4
	ungleich	420	37,5	37,6	100,0
	Gesamt	1117	99,7	100,0	
Fehlend	System	3	,3		
Gesamt		1120	100,0		

Für die 19 Leitbodengesellschaften wurde eine Auswertung vorgenommen, in der die Häufigkeiten ausgezählt wurden, in denen die punktuelle Information über die Leitbodengesellschaft mit der an dem Stichprobenelement ermittelten flächenhaften Information übereinstimmt („gleich“) oder nicht übereinstimmt („ungleich“). Es zeigt sich, dass ca. 62% aller Stichprobenelemente über die gleiche Punkt- und Flächeninformation hinsichtlich der Leitbodengesellschaft verfügen, ca. 38% der Stichprobenelemente weisen verschiedene Punkt- und Flächeninformationen über die Leitbodengesellschaft auf. Demnach stimmen die Punkt- und Flächeninformationen über die Leitbodengesellschaft für mehr als 1/3 aller Stichprobenelemente nicht überein.

Für den Vergleich der Punkt- und Flächeninformationen hinsichtlich der Einflussfaktoren Überschwemmung und Nutzung wurde die Anzahl der Stichprobenelemente in den einzelnen



Klassen der Punkt- und Flächeninformationen gegeneinander abgetragen. Diese Art der Auswertung hätte für die Leitbodengesellschaft zu einer sehr großen unübersichtlichen Tabelle geführt, so dass hierfür die oben angeführte Auswertung gewählt wurde.

**Tabelle 2- 15: Vergleich der Punkt- und Flächeninformationen über die Überschwemmung an den Stichprobenstellen.**

**SCHWEMM \* SCHW\_P Kreuztabelle**

Anzahl		SCHW_P			Gesamt
		keine Überschw.	Aue östl. Elbe	Aue westl. Elbe	
SCHWEMM	keine Überschw.	976	35	44	1055
	Aue östl. Elbe	7	12		19
	Aue westl. Elbe	12		34	46
Gesamt		995	47	78	1120

Die Variable SCHW\_P in der Tabelle 2- 15 stellt die punktuelle Information an den Stichprobenelementen dar, die Variable SCHWEMM die flächenhafte Information. Die Stichprobenelemente mit der punktuellen Information „keine Überschwemmung“ weisen zu- meist auch die Flächeninformation 0 (keine Überschwemmung) auf (ca. 98%). Die Stichprobenelemente in den Auen östlich und westlich der Elbe weisen oft keine entsprechenden Flächeninformationen auf, sondern werden häufig den überschwemmungsfreien Gebieten zugeordnet. Von den 47 Stichprobenelementen in den Auen östlich der Elbe weisen 35 Stichprobenelemente die Flächeninformation 0 (keine Überschwemmung) auf, dies entspricht einem prozentualen Anteil von ca. 74%. Lediglich 12 Stichprobenelemente in den Auen östlich der Elbe weisen die Flächeninformation 1 (Auen östlich der Elbe) auf, dies entspricht einem prozen- tualen Anteil von ca. 26%. Auch von den 78 Stichprobenelementen in den Auen westlich der Elbe werden mehr als die Hälfte der Flächeninformation 0 (keine Überschwemmung) zugeord- net (ca. 56%), die anderen 34 Stichprobenelemente werden der Flächeninformation 2 (Auen westlich der Elbe) zugeordnet.

Bei den weiteren Analysen ist zu berücksichtigen, dass die Stichprobenanzahl in der Klasse „keine Überschwemmung“ mit 995 STP-Elementen deutlich größer ist als die in den Klassen „Aue östlich der Elbe“ mit 47 STP-Elementen und „Aue westlich der Elbe“ mit 78 STP- Elementen.





**Tabelle 2- 16: Vergleich der Punkt- und Flächeninformationen über die Nutzung an den Stichprobenstellen.**

**NUTZUNG \* NUTZ\_P Kreuztabelle**

Anzahl		NUTZ_P		Gesamt
		Forst	Acker/Grünland	
NUTZUNG	Forst	259	49	308
	Acker/Grünland	60	702	762
Gesamt		319	751	1070

Die Variable NUTZ\_P in der Tabelle 2- 16 gibt die punktuelle Information über die Nutzung an den Stichprobenelementen an, die Variable NUTZUNG die flächenhafte Information. Die Stichprobenelemente auf Acker und Grünland weisen häufig die Flächeninformation 2 (Acker/Grünland) auf, etwa 7% dieser Stichprobenelemente werden der Flächeninformation 1 (Forst) zugeordnet. Auch die Stichprobenelemente im Forst werden häufiger der richtigen Flächeninformation, in diesem Fall der Klasse 1 (Forst), zugeordnet, jedoch werden etwa 19% dieser Stichprobenelemente der Flächeninformation 2 (Acker/Grünland) zugewiesen.

Bei der Verschneidung der Nutzungskarte mit den Punktdaten sind einige Stichproben unberücksichtigt geblieben, da sie in Kategorien der Nutzung fallen, die hier nicht berücksichtigt werden. Deshalb ist der Gesamtstichprobenumfang in dieser Auswertung etwas geringer als in den vorherigen Analysen. Es zeigt sich auch in dieser Auswertung eine ungleiche Verteilung der Stichprobenelemente auf die beiden Nutzungsklassen. In die Klasse Forst fallen 319 Stichprobenelemente, in die Klasse Acker und Grünland 751 Stichprobenelemente. Dabei ist aber zu berücksichtigen, dass die Klasse der landwirtschaftlichen Nutzung aus den beiden Nutzungen Acker und Grünland zusammengesetzt ist, die getrennt beprobt werden und für diese Analysen nach Angaben von Frau Kadel zusammengelegt werden konnten.

Wie die gerade beschriebenen Analysen zeigen, liefern Punkt- und Flächendaten oft keine einheitlichen Informationen. Da die an den Messstellen direkt erhobenen Daten in der Regel als genauer angenommen werden können, als die aus Karten extrahierten Informationen, werden den folgenden Analysen die Punktinformationen zugrunde gelegt.

In der folgenden Tabelle 2- 17 ist die Anzahl der Stichprobenelemente in den einzelnen homogenen Raumeinheiten angegeben. Die Raumeinheiten wurden durch die Überlagerung der Klassen aller Einflussfaktoren (Leitbodengesellschaft, Überschwemmung, Nutzung) gebildet. In der ersten Spalte der Tabelle sind die Raumeinheiten angegeben. Die Zahl vor dem Komma gibt die LBG-Klasse an, die erste Dezimalstelle die Nutzung (1=Forst, 2=Acker/Grünland) und die zweite Dezimalstelle die Überschwemmung (0=keine Überschwemmung, 1=Aue östlich der Elbe, 2=Aue westlich der Elbe und Elbaue). Dabei ergibt sich aus der gewählten Art der Klassifikation, dass nur die LBG-Klasse 18 (Auenböden) die Überschwemmungsklassen 1 und 2 annehmen kann, alle anderen LBG-Klassen können nur der Überschwemmungsklasse 0 und damit keiner Überschwemmung zugeordnet werden.





Die LABO (2003) gibt für die Beschreibung der Stoffgehalte im Boden einen Mindeststichprobenumfang von  $n = 20$  an. Von diesem Wert ausgehend zeigt sich in der

**Tabelle 2- 17: Verteilung der Stichprobenelemente über die Raumeinheiten.**

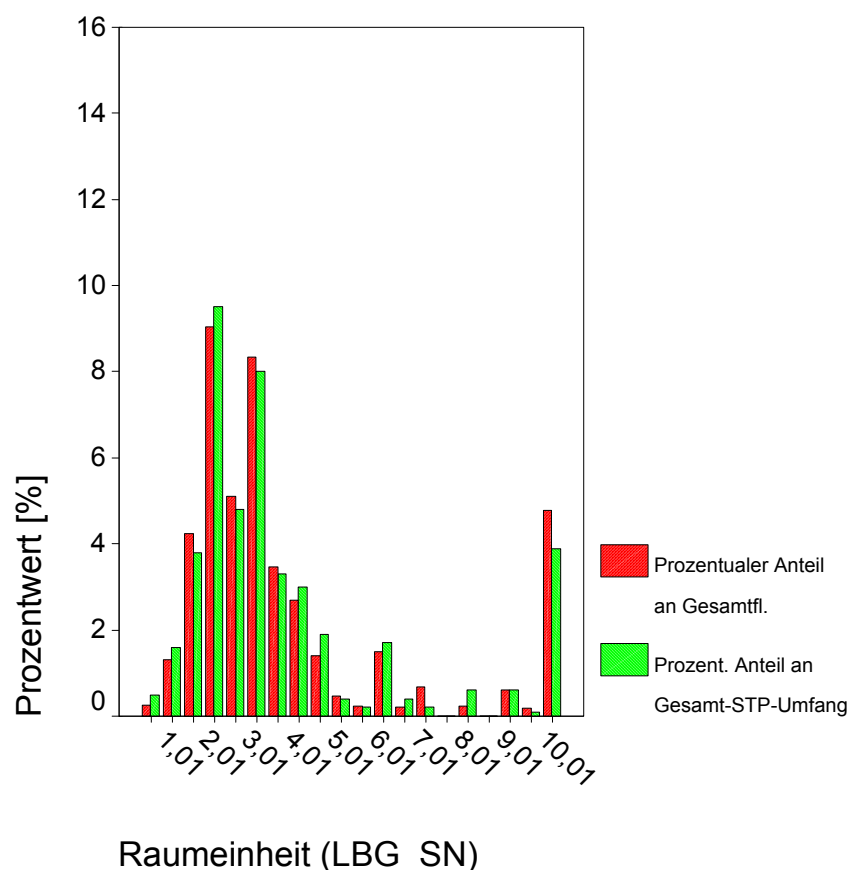
**Verarbeitete Fälle**

LBG_NS	Fälle					
	Gültig		Fehlend		Gesamt	
	N	Prozent	N	Prozent	N	Prozent
AS 1,10	6	100,0%	0	,0%	6	100,0%
1,20	18	100,0%	0	,0%	18	100,0%
2,10	42	100,0%	0	,0%	42	100,0%
2,20	106	100,0%	0	,0%	106	100,0%
3,10	54	100,0%	0	,0%	54	100,0%
3,20	89	100,0%	0	,0%	89	100,0%
4,10	37	100,0%	0	,0%	37	100,0%
4,20	34	100,0%	0	,0%	34	100,0%
5,10	21	100,0%	0	,0%	21	100,0%
5,20	5	100,0%	0	,0%	5	100,0%
6,10	2	100,0%	0	,0%	2	100,0%
6,20	19	100,0%	0	,0%	19	100,0%
7,10	4	100,0%	0	,0%	4	100,0%
7,20	2	100,0%	0	,0%	2	100,0%
8,20	7	100,0%	0	,0%	7	100,0%
9,20	7	100,0%	0	,0%	7	100,0%
10,10	1	100,0%	0	,0%	1	100,0%
10,20	44	100,0%	0	,0%	44	100,0%
11,10	4	100,0%	0	,0%	4	100,0%
11,20	28	100,0%	0	,0%	28	100,0%
12,10	12	100,0%	0	,0%	12	100,0%
12,20	144	100,0%	0	,0%	144	100,0%
13,10	8	100,0%	0	,0%	8	100,0%
13,20	54	100,0%	0	,0%	54	100,0%
14,10	12	100,0%	0	,0%	12	100,0%
14,20	29	100,0%	0	,0%	29	100,0%
15,10	71	100,0%	0	,0%	71	100,0%
15,20	10	100,0%	0	,0%	10	100,0%
16,10	5	100,0%	0	,0%	5	100,0%
16,20	36	100,0%	0	,0%	36	100,0%
17,10	18	100,0%	0	,0%	18	100,0%
17,20	44	100,0%	0	,0%	44	100,0%
18,11	9	100,0%	0	,0%	9	100,0%
18,12	12	100,0%	0	,0%	12	100,0%
18,21	38	100,0%	0	,0%	38	100,0%
18,22	66	100,0%	0	,0%	66	100,0%
19,10	13	100,0%	0	,0%	13	100,0%
19,20	6	100,0%	0	,0%	6	100,0%

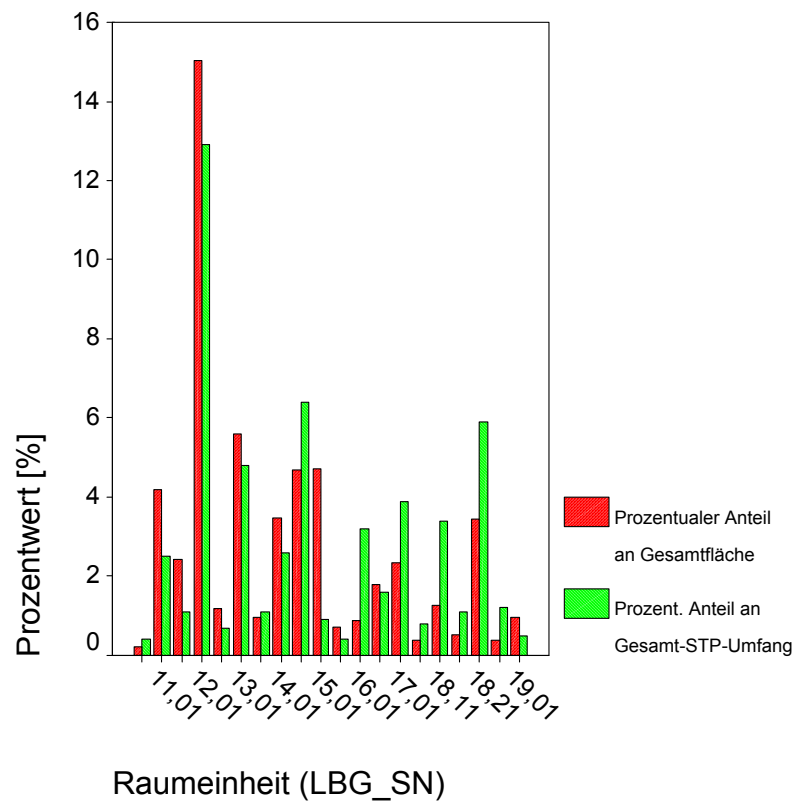


Tabelle 2- 17, dass die Anzahl der Stichprobenelemente verschiedener Raumeinheiten zu gering ist. Für die Raumeinheiten 8.10 und 9.10 liegen keine Stichprobenelemente vor. In der Raumeinheit 10.10 ist nur ein Stichprobenelement vertreten, in den Raumeinheiten 6.10 und 7.20 nur zwei Stichprobenelemente. Auch in anderen Raumeinheiten liegt die Anzahl der Stichprobenelemente weit unter den geforderten 20 (vgl. Tabelle 2- 17). Außerdem variiert die Stichprobenanzahl innerhalb einer Leitbodengesellschaft zwischen den beiden Nutzungen oder auch zwischen den Überschwemmungsklassen z.T. stark. In der Leitbodengesellschaft 10 z.B. gibt es nur ein Stichprobenelement im Wald, wohingegen 44 Stichprobenelemente auf die Klasse Acker und Grünland entfallen.

In den folgenden gruppierten Balkendiagrammen in Abb. 2- 22 und Abb. 2- 23 sind der prozentuale Stichprobenanteil einer Raumeinheit am Gesamtstichprobenumfang und der Flächenanteil einer Raumeinheit an der Gesamtfläche dargestellt. Auf der x-Achse sind die Raumeinheiten angegeben, wobei die Zahl vor dem Komma die Leitbodengesellschaft, die erste Dezimalstelle die Überschwemmungsklasse und die zweite Dezimalstelle die Nutzung kennzeichnet. Im ersten Diagramm sind die Raumeinheiten 1.01 bis 10.02 und im zweiten Diagramm die Raumeinheiten 11.01 bis 19.02 abgetragen. Diese Aufteilung in zwei Diagramme ist aus Gründen der Übersichtlichkeit notwendig, auch aus Gründen der Übersichtlichkeit wurde nur jede zweite Raumeinheit beschriftet.



**Abb. 2- 22: Prozentualer Stichproben- und Flächenanteil einer Raumeinheit am Gesamt-STP-Umfang bzw. an Gesamtfläche [%] (Raumeinheiten 1.01 bis 10.02).**



**Abb. 2- 23: Prozentualer Stichproben- und Flächenanteil einer Raumeinheit am Gesamt-STP-Umfang bzw. an Gesamtfläche [%] (Raumeinheiten 11.01 bis 19.02).**

Die Verteilung der Stichprobenelemente über die Raumeinheiten ist den prozentualen Flächenanteilen der Raumeinheiten an der Gesamtfläche ziemlich ähnlich. Dies spricht für eine repräsentative Stichprobenerhebung, da mit Zunahme des Flächenanteils einer Raumeinheit auch die Stichprobenanzahl zunehmen sollte.

Im einzelnen zeigen sich Abweichungen zwischen dem prozentualen Stichprobenanteil einer Raumeinheit und dem Flächenanteil dieser Raumeinheit. Die Raumeinheit 15.02 z.B. hat mit nahezu 5 % einen großen Anteil an der Gesamtfläche, der Stichprobenanteil an dem Gesamtstichprobenumfang beträgt weniger als 1 %. Diese Raumeinheit ist deutlich unterrepräsentiert und müsste, da die Flächenanteile der Raumeinheiten 15.01 und 15.02 sehr ähnlich sind, ähnlich viele Stichprobenelemente aufweisen wie die Raumeinheit 15.01. Die Raumeinheit 15.01 ist mit einem Stichprobenanteil von über 6 % im Vergleich zum Flächenanteil etwas überrepräsentiert und müsste demnach weniger Stichprobenelemente aufweisen. Weiterhin auffällig sind die Raumeinheiten 7.02, 16.02 und 19.01. Die Raumeinheit 7.02 ist unterrepräsentiert, wohingegen die Raumeinheiten 16.02 und 19.01 überrepräsentiert sind. Die Prozentbeträge der Stichprobenanteile der verschiedenen Raumeinheiten stimmen nicht absolut mit denen der entsprechenden Flächenanteile der Raumeinheiten überein.

Dennoch wird durch das in Sachsen auf einem 4\*4 km-Raster durchgeführte Stichprobenverfahren eine repräsentative Stichprobennahme relativ gut umgesetzt. Allerdings ist zu berücksichtigen, dass für einige homogene Raumeinheiten insgesamt zu wenig Stichprobenelemente vorliegen (siehe oben). Von Vorteil wäre sicherlich eine Rasterbeprobung in Kombination mit einer flächengewichteten Probennahme.



#### 2.4.1.6 Verteilungen analysieren

Die Häufigkeitstabellen Tabelle 2- 18 bis Tabelle 2- 20 zeigen die Verteilungen der Stichprobenelemente über die jeweiligen Klassen der Einflussfaktoren Leitbodengesellschaft, Überschwemmung und Nutzung auf.

**Tabelle 2- 18: Verteilung der Stichprobenelemente über die 19 Klassen der Leitbodengesellschaften.**

Leitbodengesellschaft_aggregiert				
	Häufigkeit	Prozent	Gültige Prozente	Kumulierte Prozente
Gültig 1	24	2,1	2,1	2,1
2	148	13,2	13,2	15,4
3	143	12,8	12,8	28,1
4	71	6,3	6,3	34,5
5	26	2,3	2,3	36,8
6	21	1,9	1,9	38,7
7	6	,5	,5	39,2
8	7	,6	,6	39,8
9	7	,6	,6	40,4
10	45	4,0	4,0	44,5
11	32	2,9	2,9	47,3
12	157	14,0	14,0	61,3
13	64	5,7	5,7	67,1
14	41	3,7	3,7	70,7
15	81	7,2	7,2	77,9
16	41	3,7	3,7	81,6
17	62	5,5	5,5	87,1
18	125	11,2	11,2	98,3
19	19	1,7	1,7	100,0
Gesamt	1120	100,0	100,0	

**Tabelle 2- 19: Verteilung der Stichprobenelemente über die 3 Überschwemmungsklassen.**

Überschwemmung_Punkt (SCHW_P)				
	Häufigkeit	Prozent	Gültige Prozente	Kumulierte Prozente
Gültig keine U.	995	88,8	88,8	88,8
Aue östl.	47	4,2	4,2	93,0
Aue westl.	78	7,0	7,0	100,0
Gesamt	1120	100,0	100,0	

**Tabelle 2- 20: Verteilung der Stichprobenelemente über die 2 Klassen der Nutzung.**

Nutzung_Punkt (NUTZ_P)					
		Häufigkeit	Prozent	Gültige Prozente	Kumulierte Prozente
Gültig	Forst	331	29,6	29,6	29,6
	Acker/Grünland	789	70,4	70,4	100,0
	Gesamt	1120	100,0	100,0	

Die Tabelle der LBG verdeutlicht, dass die Stichprobenanzahl in den LBG-Klassen sehr unterschiedlich ist. So ist z.B. die Anzahl der Stichprobenelemente in den Klassen 7 bis 9 sehr gering. In den Überschwemmungsgebieten gibt es deutlich weniger Stichprobenelemente als in den überschwemmungsfreien Gebieten, da diese einen wesentlich größeren Flächenanteil haben. Auf Acker- und Grünlandstandorten ist die Zahl der Stichprobenelemente höher als im Wald.

### Globale Verteilungsanalyse der As-Gehalte

Tabelle 2- 21 gibt verschiedene statistische Kennwerte zu den punktuell gemessenen Arsen-Gehalten in einer Gesamtübersicht an.

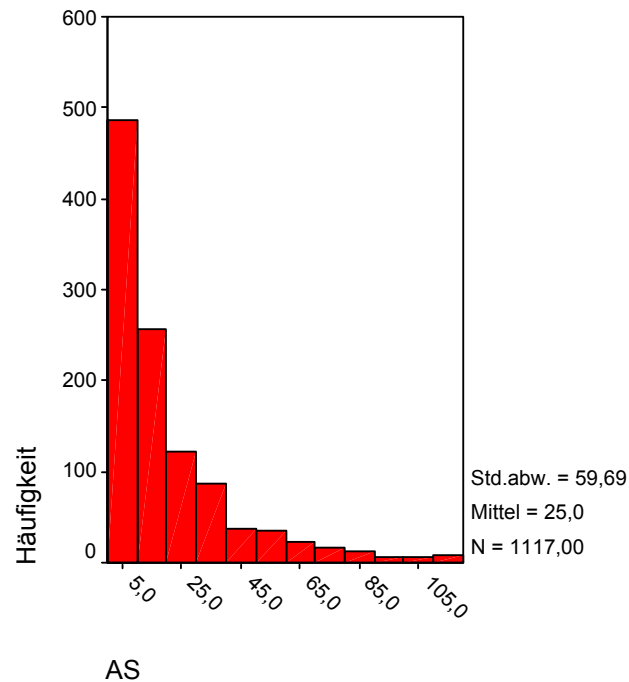
**Tabelle 2- 21: Deskriptive Statistik (Verarbeitete Fälle und Univariate Statistiken) über alle As-Stichprobenelemente.**

Verarbeitete Fälle						
	Fälle					
	Gültig		Fehlend		Gesamt	
	N	Prozent	N	Prozent	N	Prozent
AS	1117	99,7%	3	,3%	1120	100,0%

Univariate Statistiken				Statistik	Standardfehler
AS [mg/kg]	Mittelwert			25,00961	1,785889
	95% Konfidenzintervall des Mittelwerts	Untergrenze		21,50553	
		Obergrenze		28,51368	
	5% getrimmtes Mittel			18,18798	
	Median			12,00000	
	Varianz			3562,558	
	Standardabweichung			59,687170	
	Minimum			,500	
	Maximum			1209,000	
	Spannweite			1208,500	
	Interquartilbereich			20,00000	
	Schiefe			13,962	,073
	Kurtosis			251,146	,146

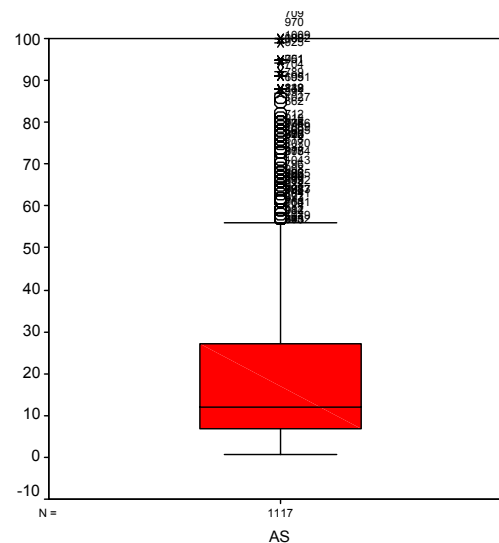


Es zeigt sich, dass drei der 1120 Stichprobenelemente keinen Arsen-Wert (As) aufweisen. Erste wichtige Hinweise über die Charakteristik der Verteilung der As-Gehalte geben der Median (Lagemaß), der Interquartilabstand (Streuungsmaß) und die Schiefe. Der Median des As-Gehalts nimmt einen Wert von 12 mg/kg an, der Interquartilsabstand beträgt 20 mg/kg und die Verteilung der As-Werte weist eine positive Schiefe auf.



**Abb. 2- 24: Häufigkeitsverteilung der As-Gehalte [mg/kg].**

In Abb. 2- 24 ist ein Histogramm mit der Häufigkeitsverteilung der As-Gehalte abgetragen. In dieser Abbildung wird die positive Schiefe der Verteilung der As-Gehalte besonders deutlich. Darüber hinaus lassen sich die Lage-, Streuungs- und Schiefemaße in dem in Abb. 2- 25 aufgeführten Boxplot auf einem Blick ablesen.



**Abb. 2- 25: Boxplot der As-Gehalte [mg/kg].**



### Verteilungsanalyse der As-Gehalte mit Berücksichtigung jeweils eines Einflussfaktors

In diesem Abschnitt werden die Verteilungen der As-Gehalte in Abhängigkeit von jeweils einem Einflussfaktor analysiert. Dabei ist zu berücksichtigen, dass die anderen Einflussfaktoren jeweils einen Einfluss auf die As-Gehalte haben, der hier noch nicht berücksichtigt wird. Erst im nächsten Abschnitt „Verteilungsanalyse der As-Gehalte mit Berücksichtigung aller Einflussfaktoren“ werden alle Einflussfaktoren gemeinsam betrachtet.

#### Leitbodengesellschaft

In Abb. 2- 26 sind die Boxplots der As-Gehalte in den verschiedenen LBG-Klassen dargestellt. Es wird besonders deutlich, dass die mittleren As-Gehalte (vgl. Median) in der Leitbodenassoziation A (Leitbodengesellschaften 1 bis 7) deutlich höher sind als in den Leitbodenassoziationen B, C, und E (B: LBG 8 bis 13; C: LBG 14 bis 17; E: LBG 19). Auch in der Leitbodenassoziation D (LBG 18: Auen) ist der mittlere As-Gehalt deutlich höher als in den Leitbodenassoziationen B, C und E. Außerdem streuen die As-Gehalte in den Leitbodenassoziationen A und D wesentlich stärker als in den Leitbodenassoziationen B, C und E.

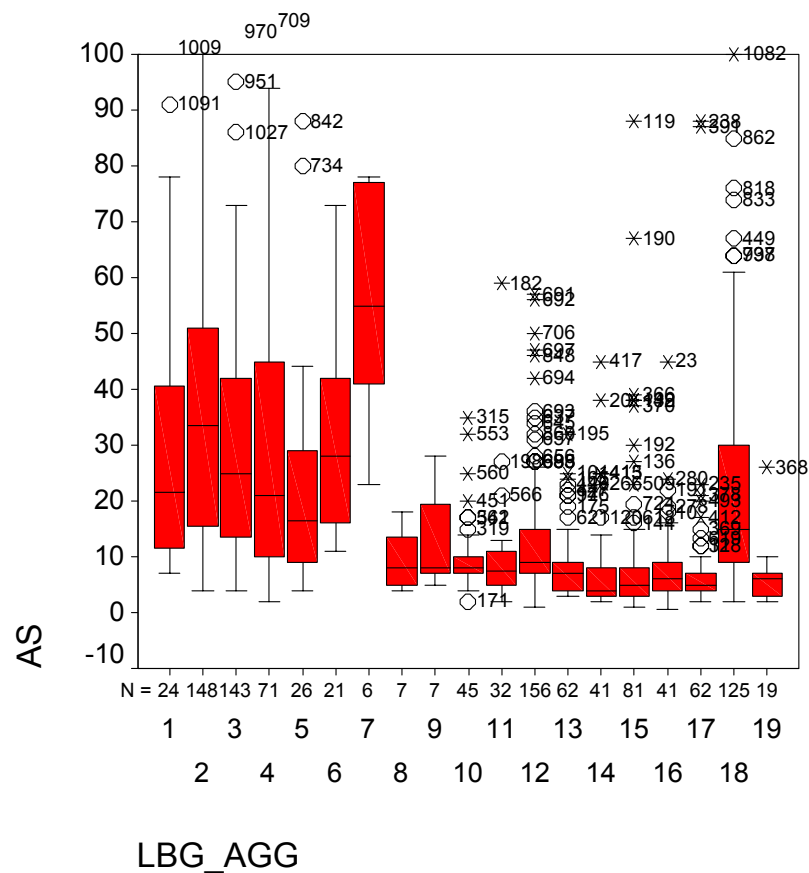
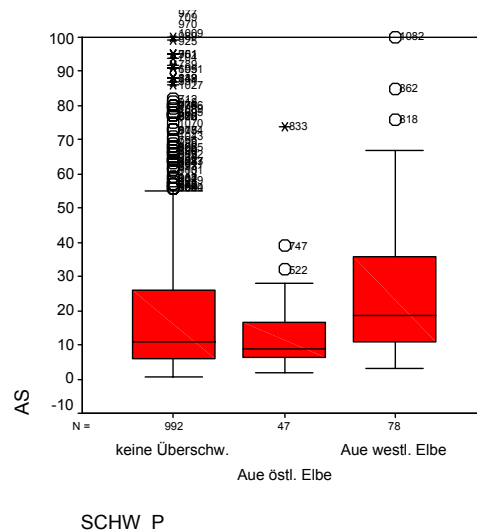


Abb. 2- 26: Boxplots der As-Gehalte in den 19 Klassen der Leitbodengesellschaften.





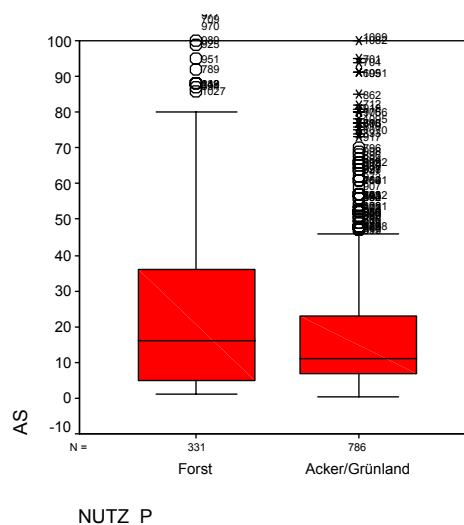
**Abb. 2- 27: Boxplots der As-Gehalte in den 3 Überschwemmungsklassen.**

### Überschwemmung

Die Boxplots der Abb. 2- 27 charakterisieren die As-Gehalte in den einzelnen Überschwemmungsklassen. In den Auen westlich der Elbe (die Elbaue ist eingeschlossen) ist der mittlere As-Gehalt deutlich höher als in den beiden anderen Klassen. Es bestätigt sich somit die Fachinformation vom Sächsischen Landesamt für Umwelt und Geologie, dass in den Auen östlich der Elbe geringere Arsengehalte vorherrschen als in den Auen westlich der Elbe. In den überschwemmungsfreien Gebieten ist der mittlere As-Gehalt etwas größer als in den Auen östlich der Elbe. Die As-Gehalte in den Auen westlich der Elbe und in den überschwemmungsfreien Gebieten streuen stärker als in den Auen östlich der Elbe.

### Nutzung

In Abb. 2- 28 sind die Boxplots der As-Gehalte in den beiden Nutzungsklassen dargestellt. Der mittlere As-Gehalt im A-Horizont ist im Forst größer als auf Acker- und Grünlandstandorten. Auch die Streuung der As-Gehalte ist im A-Horizont im Forst größer als auf Acker- und Grünlandstandorten.

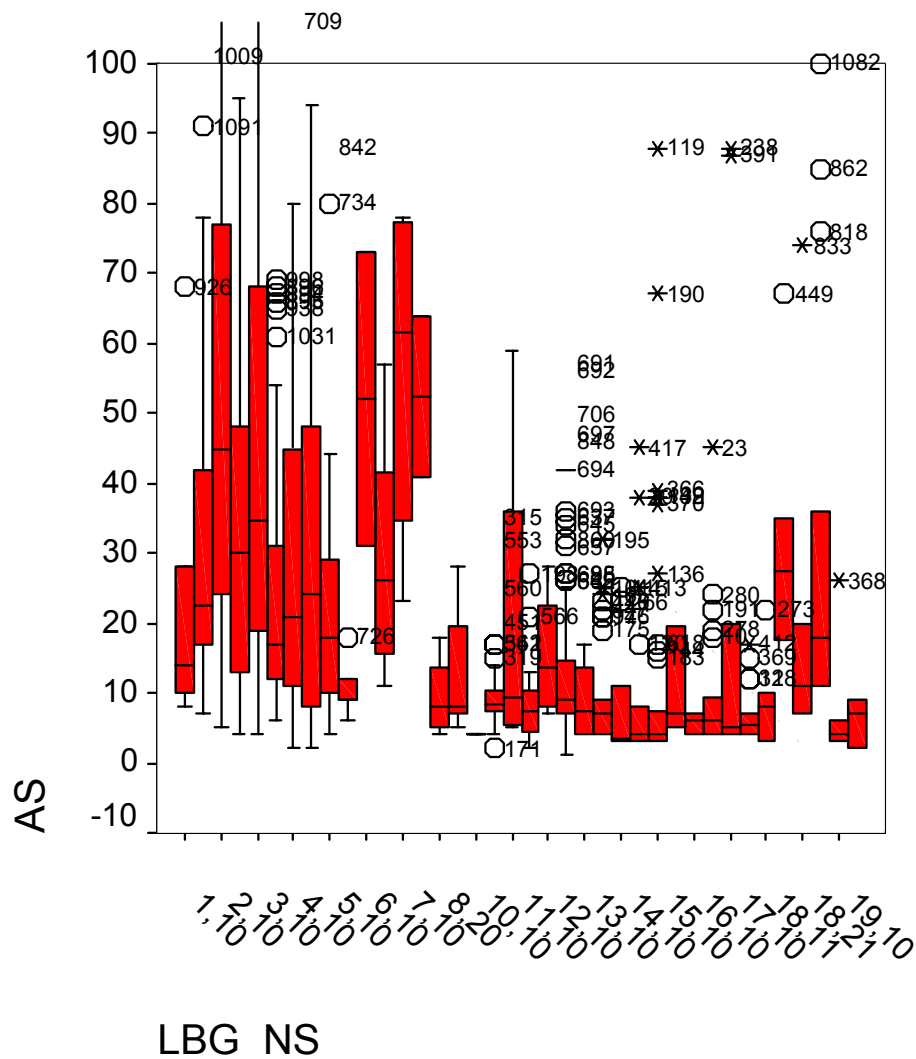


**Abb. 2- 28: Boxplots der As-Gehalte in den 2 Nutzungsklassen.**



### Verteilungsanalyse der As-Gehalte mit Berücksichtigung aller Einflussfaktoren

Die Verteilung der Stichprobenelemente über die verschiedenen Raumeinheiten, die durch Überlagerung der drei Einflussfaktoren entstanden sind, wurde bereits in Abschnitt 2.4.1.4 (Repräsentanzanalyse) dargestellt. Dort hat sich gezeigt, dass für die Charakterisierung der As-Gehalte in den auf Basis aller Einflussfaktoren gebildeten Raumeinheiten die Stichprobenanzahl z.T. sehr gering ist. Die Boxplots der Raumeinheiten mit einer sehr geringen Stichprobenanzahl sind statistisch nicht abgesichert. Insbesondere kann den Klassen 6.10, 7.20 und 10.10 mit zwei bzw. nur einem Stichprobenelement keine große Aussagekraft beigemessen werden.



**Abb. 2- 29: Boxplots der As-Gehalte in den auf Basis aller Einflussfaktoren gebildeten Raumeinheiten.**

In Abb. 2- 29 sind die Boxplots der As-Gehalte in den Raumeinheiten, die auf Basis aller Einflussfaktoren gebildet wurden, dargestellt. Es ist nur jede zweite Raumeinheit beschriftet. Es ist in Abb. 2- 29 eine ähnliche Struktur zu erkennen wie in der Abb. 2- 26, in der die As-Gehalte nur in Bezug zum Einflussfaktor Leitbodengesellschaft ausgewertet wurden. Auch hier zeigt sich, dass die mittleren As-Gehalte in den LBG-Klassen 1 bis 7 (Leitbodenassoziation A, keine



Überschwemmung) größer sind als in den LBG-Klassen 8 bis 17 (Leitbodenassoziationen B und C) sowie in der LBG-Klasse 19 (Leitbodenassoziation E). Auch die Auenböden westlich der Elbe der LBG-Klasse 18 (Leitbodenassoziation D; Auenböden) weisen höhere mittlere As-Gehalte auf als die LBG-Klassen der Leitbodenassoziationen B, C und E. Die mittleren As-Gehalte der Auenböden östlich der Elbe der LBG-Klasse 18 sind meist geringfügig höher als die der LBG-Klassen 8 bis 17 und 19. Die Trennung der Auenböden in westlich und östlich der Elbe wird durch die mittleren As-Gehalte deutlich, denn die mittleren As-Gehalte sind westlich der Elbe (mit Elbaue) wesentlich größer als östlich der Elbe.

Es zeigt sich außerdem, dass unter Konstanzhaltung der LBG-Klasse der Median der As-Gehalte in Forst und Acker/Grünland variabel ist. Es ist z.B. in der LBG-Klasse 3 der mittlere As-Gehalt im Forst höher als auf Acker- und Grünland-Standorten, in der LBG-Klasse 4 hingegen ist der mittlere As-Gehalt auf Acker- und Grünlandstandorten größer als im Forst. Diese Raumeinheiten 3.10, 3.20, 4.10 und 4.20 wurden als Beispiel herangezogen, da sie durch relativ viele Stichprobenelemente vertreten sind. Auch in anderen Raumeinheiten zeigt sich die Variabilität des mittleren As-Gehalts zwischen Forst und Acker/Grünland. Es ist aber stets zu beachten, dass für diese Auswertung unterschiedlich viele Stichprobenelemente in den Raumeinheiten vorkommen. In der LBG-Klasse 11 z.B. repräsentieren nur vier Stichprobenelemente die Klasse Forst und 28 Elemente die Klasse Acker/Grünland, in der LBG-Klasse 16 z.B. repräsentieren nur 5 Stichprobenelemente die Klasse Forst und 36 Elemente die Klasse Acker/Grünland.

#### **2.4.1.7 Ausreißeranalyse**

Die folgende Ausreißeranalyse wurde auf Basis des in Abschnitt 2.3.3 angegebenen Median-5-Interquartil-Tests durchgeführt. Die Ausreißergrenze wurde für jede homogene Raumeinheit ermittelt. Die homogenen Raumeinheiten wurden auf Basis der Einflussfaktoren Leitbodengesellschaft und Überschwemmung gebildet.

In der Tabelle 2- 22 ist für die homogenen Raumeinheiten, die nach den Einflussfaktoren Leitbodengesellschaft und Überschwemmung gebildet wurden, die Anzahl der Nicht-Ausreißer und der Ausreißer sowie die jeweilige Ausreißergrenze angegeben. Die erste Spalte stellt die Raumeinheiten dar, dabei stehen die Zahlen vor dem Komma für die Leitbodengesellschaft und die Dezimalstelle für die Überschwemmung (0=keine Überschwemmung; 1=Auen östlich der Elbe; 2=Auen westlich der Elbe). Von den 1117 Stichprobenelementen des As-Gehalts sind 31 Stichprobenelemente als Ausreißer zu betrachten und aus dem Datenpool zu entfernen. Die oberen Ausreißergrenzen der verschiedenen Klassen sind unterschiedlich groß, da die mittleren As-Gehalte in den Klassen unterschiedlich ausgeprägt sind. Auch hier wird wieder der Einfluss der Leitbodengesellschaften und der Überschwemmung auf die As-Gehalte deutlich. In den Bodenklassen 1 bis 7 und in den Auen westlich der Elbe (18.2; Elbaue eingeschlossen) sind die As-Gehalte deutlich erhöht.



**Tabelle 2- 22: Ausreißergrenze und Anzahl der Ausreißer in den homogenen Raumeinheiten.**

**LBG\_S \* AUSRß**

Anzahl

		AUSRß		Ausreißer grenze [mg/kg]
		kein Ausreißer	Ausreißer	
LBG_S	1,0	24		171,50
	2,0	146	2	212,25
	3,0	139	4	170,00
	4,0	69	2	196,00
	5,0	25	1	116,50
	6,0	21		190,50
	7,0	6		258,75
	8,0	7		78,00
	9,0	7		88,00
	10,0	43	2	25,50
	11,0	31	1	37,50
	12,0	153	3	49,00
	13,0	62		34,50
	14,0	39	2	34,00
	15,0	75	6	30,00
	16,0	40	1	33,50
	17,0	58	4	20,00
	18,1	46	1	69,00
	18,2	76	2	143,50
	19,0	19		26,00
Gesamt		1086	31	

#### 2.4.1.8 Korrelationsanalyse

Die Verteilungsanalyse hat gezeigt, dass unter Konstanthaltung der LBG-Klasse das Verhältnis der As-Mediane in Forst und Acker/Grünland variabel ist (vgl. Abschnitt 2.4.1.5). Das deutet darauf hin, dass die Nutzung als Einflussfaktor auf die As-Gehalte nicht signifikant ist. Um ein Maß für den Zusammenhang zwischen den metrisch skalierten As-Gehalten und den nominal skalierten Einflussfaktoren zu erhalten, wird nach Herabskalierung der metrischen Variable der Kontingenzkoeffizient nach Pearson erhoben. Der Kontingenzkoeffizient ist ein auf der Chi-Quadrat-Statistik basierendes Zusammenhangsmaß. Dieser Koeffizient liegt immer zwischen 0 und 1, wobei Null angibt, dass kein Zusammenhang zwischen Zeilen- und Spaltenvariable besteht und Werte nahe 1 auf einen starken Zusammenhang zwischen den Variablen hindeuten.

Vor der Erhebung des Kontingenzkoeffizienten wird die Variable des As-Gehalts herabskaliert, indem die As-Gehalte in zehn Klassen eingeteilt werden. Die Klasseneinteilung orientiert sich dabei an den Perzentilen der As-Gehalte. In Tabelle 2- 23 sind die Perzentile und damit die Klassen der As-Gehalte dargestellt.

**Tabelle 2- 23: Perzentile der As-Gehalte.**

Statistiken (As in mg/kg)		
AS		
N	Gültig	1086
	Fehlend	0
Perzentile	10	4,00000
	20	5,00000
	30	7,00000
	40	8,00000
	50	11,00000
	60	15,00000
	70	21,00000
	80	30,60000
	90	49,30000

Der Kontingenzkoeffizient zwischen einem Einflussfaktor und dem As-Gehalt wird unter Konstanthaltung der anderen Einflussfaktoren erhoben, damit die anderen Einflussfaktoren das Zusammenhangsmaß nicht verzerren.

Der Zusammenhang zwischen den Leitbodengesellschaften und den As-Gehalten zum einen im Forst und zum anderen auf Acker- und Grünlandstandorten ist in der folgenden Tabelle 2- 24 dargestellt.

**Tabelle 2- 24: Kontingenzkoeffizienten zwischen LBG und As-Gehalt.**

Kontingenzkoeffizient zw. LBG und As-Gehalt	Wert	Näherungsweise Sig- nifikanz
Im Forst	0.72	0.00
Auf Acker- bzw. Grün- landstandort	0.64	0.00

Da in beiden Fällen das Signifikanzniveau mit 0.00 kleiner als die Irrtumswahrscheinlichkeit  $\alpha = 0.05$  ist, sind die berechneten Kontingenzkoeffizienten signifikant. Es besteht sowohl im Forst als auch auf Acker- und Grünlandstandorten mit Kontingenzkoeffizienten von 0.72 und 0.64 ein signifikanter mäßiger bis starker Zusammenhang zwischen den Leitbodengesellschaften und As-Gehalten.

Die Auswertung des Zusammenhangs zwischen den Leitbodengesellschaften mit Berücksichtigung der Überschwemmung (Unterteilung der Leitbodengesellschaft 18 in 18.1 (Überschwemmung östlich der Elbe) und 18.2 (Überschwemmung westlich der Elbe) und den As-Gehalten unter Konstanthaltung der Nutzung führt zu beinahe identischen Ergebnissen. Dieses Vorgehen lässt sich damit rechtfertigen, dass die vorgegebene Einteilung der Leitbodengesellschaften die Überschwemmungsgebiete (LBG 18: Auen) berücksichtigt. Mit Ausnahme der LBG 18 sind alle weiteren Leitbodengesellschaften überschwemmungsfrei.



Eine weitere Auswertung des Zusammenhangs zwischen der Überschwemmung und den As-Gehalten bezieht sich ausschließlich auf die Leitbodengesellschaft 18 und die Nutzungen Forst sowie Acker und Grünland. Denn bei Konstanzhaltung der Einflussfaktoren Leitbodengesellschaft und Nutzung ist eine Korrelationsanalyse zwischen der Überschwemmung und den As-Gehalten nur in der LBG 18 sinnvoll, da in dieser LBG zwei Überschwemmungsklassen vorkommen (1=Auen östl. der Elbe; 2=Auen westl. der Elbe). In den anderen Leitbodengesellschaften ist ausschließlich die Überschwemmungsklasse „keine Überschwemmung“ vertreten, so dass kein Zusammenhangsmaß zwischen der Überschwemmung und den As-Gehalten in den einzelnen LBG-Klassen sinnvoll ist. In der folgenden Tabelle 2- 25 sind die Kontingenzkoeffizienten zwischen der Überschwemmung und den As-Gehalten für die LBG 18 sowohl für Forst als auch für Acker und Grünland dargestellt.

Da in beiden Fällen das Signifikanzniveau über der Irrtumswahrscheinlichkeit  $\alpha = 0.05$  liegt, sind die berechneten Kontingenzkoeffizienten nicht signifikant. Wird die vorgegebene Irrtumswahrscheinlichkeit mit 0.10 angenommen, sind die Kontingenzkoeffizienten signifikant. Damit sind die Kontingenzkoeffizienten aber nur noch mit einer statistischen Sicherheit von 90% signifikant. Der Zusammenhang zwischen der Überschwemmung und den As-Gehalten ist im Forst mit 0.62 mäßig und auf Acker- und Grünlandstandorten schwach ausgeprägt.

In der Tabelle 2- 26 sind die Kontingenzkoeffizienten und Signifikanzniveaus des Zusammenhangs zwischen der Nutzung und den As-Gehalten unter Konstanzhaltung der Einflussfaktoren Leitbodengesellschaft und Überschwemmung aufgelistet.

In den meisten Fällen ist der berechnete Kontingenzkoeffizient nicht signifikant, da das Signifikanzniveau über der Irrtumswahrscheinlichkeit  $\alpha = 0.05$  (bzw.  $\alpha = 0.10$ ) liegt. Nur in wenigen Fällen (LBG 3, (10), 12, 15) ist der Kontingenzkoeffizient signifikant, der Kontingenzkoeffizient ist aber meist nur schwach ausgeprägt. Ein Zusammenhang zwischen der Nutzung und den As-Gehalten kann anhand dieser Analyse nicht bestätigt werden.

**Tabelle 2- 25: Kontingenzkoeffizienten zwischen Überschwemmung und As-Gehalt.**

Kontingenzkoeffizient zw. Überschwemmung und As-Gehalt für LBG 18	Wert	Näherungsweise Signifikanz
Im Forst	0.62	0.09
Auf Acker- bzw. Grünlandstandort	0.37	0.06

**Tabelle 2- 26: Kontingenzkoeffizienten zwischen Nutzung und As-Gehalt.**

Kontingenzkoeffizient zw. Nutzung und As-Gehalt	Wert	Näherungsweise Signifikanz
<b>LBG 1</b>	0.45	0.52
<b>LBG 2</b>	0.25	0.37
<b>LBG 3</b>	0.38	0.00
<b>LBG 4</b>	0.37	0.28
<b>LBG 5</b>	0.52	0.40
<b>LBG 6</b>	0.32	0.79
<b>LBG 7</b>	0.33	0.69
<b>LBG 8</b>	Mindestens eine Variable in jeder 2-Wege-Tabelle, aus denen die Zusammenhangsmaße berechnet werden, ist eine Konstante.	
<b>LBG 9</b>	Mindestens eine Variable in jeder 2-Wege-Tabelle, aus denen die Zusammenhangsmaße berechnet werden, ist eine Konstante.	
<b>LBG 10</b>	0.49	0.06
<b>LBG 11</b>	0.38	0.63
<b>LBG 12</b>	0.31	0.04
<b>LBG 13</b>	0.30	0.64
<b>LBG 14</b>	0.39	0.45
<b>LBG 15</b>	0.43	0.02
<b>LBG 16</b>	0.27	0.87
<b>LBG 17</b>	0.32	0.38
<b>LBG 18.1</b>	0.44	0.22
<b>LBG 18.2</b>	0.29	0.63
<b>LBG 19</b>	0.34	0.47

#### 2.4.1.9 Signifikante Einflussfaktoren

In der explorativen Datenanalyse in Abschnitt 2.4.1.5 wurde der Einfluss der Faktoren Leitbodengesellschaft, Überschwemmung und Nutzung auf den As-Gehalt im Oberboden untersucht. Es hat sich gezeigt, dass bei Betrachtung jeweils eines Einflussfaktors die mittleren As-Gehalte des A-Horizontes in den LBG-Klassen 1 bis 7 und 18 wesentlich höher sind als in den übrigen LBG-Klassen. Außerdem sind in Bezug auf die Überschwemmungsklassen die mittleren As-Gehalte des A-Horizontes in den Auengebieten westlich der Elbe am höchsten und östlich der Elbe am geringsten. Hinsichtlich der Nutzung wurden im Forst höhere mittlere As-Gehalte des A-Horizontes gemessen als auf Acker- und Grünlandstandorten.

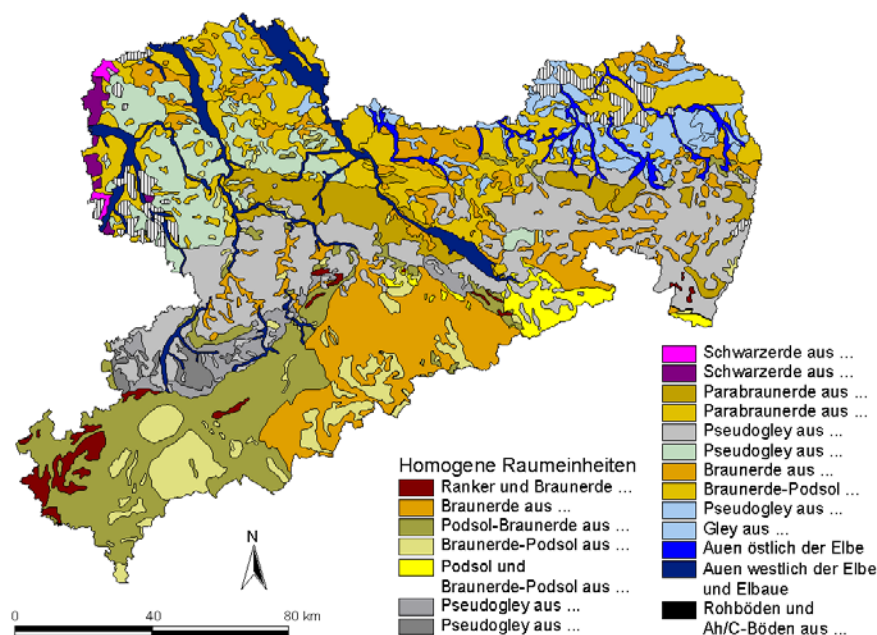


Betrachtet man die Verteilung der As-Gehalte in den einzelnen Raumeinheiten, die sich aus der Überlagerung der drei Einflussfaktoren ergeben, prägen sich die Einflüsse der Leitbodengesellschaften und der Überschwemmung auf die As-Gehalte ähnlich aus wie in den Einzelbetrachtungen der Einflussfaktoren. Der Einfluss der Nutzung auf die As-Gehalte ist variabel. Bei Konstanzhaltung der Einflüsse der Leitbodengesellschaften und der Überschwemmung ist der mittlere As-Gehalt des A-Horizontes im Forst und auf Acker- und Grünlandstandorten variabel. Es kann nicht eindeutig eine Aussage darüber getroffen werden, ob die mittleren As-Gehalte des A-Horizontes im Forst oder auf Acker- und Grünlandstandorten höher sind (vgl. Abschnitt 2.4.1.5).

Die Korrelationsanalyse (vgl. Abschnitt 2.4.1.7) hat gezeigt, dass zwischen der Leitbodengesellschaft und dem As-Gehalt ein mäßiger bis deutlicher Zusammenhang besteht. Die Überschwemmung hat einen schwachen bis mäßigen, bei einer Irrtumswahrscheinlichkeit von  $\alpha = 0.10$  signifikanten Einfluss auf den As-Gehalt. Die Nutzung hat insgesamt betrachtet keinen erkennbaren signifikanten Einfluss auf die As-Gehalte.

Die Leitbodengesellschaft und die Überschwemmung stellen nach diesen Analysen die Haupteinflussfaktoren dar, die Nutzung hat keinen eindeutigen Einfluss auf die As-Gehalte im Oberboden Sachsens. Damit liegt es nahe, die Nutzung in der weiteren Analyse nicht weiter zu betrachten und bei der Bildung der homogenen Raumeinheiten für die Erhebung der statistischen Kennwerte und der Interpolation nur die Leitbodengesellschaften und die Überschwemmung zu berücksichtigen.

Die Polygonlayer der Leitbodengesellschaften (BÜK 400) und der Überschwemmung wurden miteinander verschnitten. Die daraus resultierende Karte der homogenen Raumeinheiten mit Berücksichtigung der signifikanten Einflussfaktoren Leitbodengesellschaft und Überschwemmung ist in Abb. 2- 30 dargestellt.



**Abb. 2- 30: Homogene Raumeinheiten unter Berücksichtigung der Leitbodengesellschaften und der Überschwemmung (Legende siehe Abb. 2- 9).**



#### 2.4.1.10 Repräsentanzanalyse

In der folgenden Tabelle 2- 27 ist die Anzahl der Stichprobenelemente in den einzelnen homogenen Raumeinheiten angegeben. Die Raumeinheiten wurden durch die Überlagerung der Klassen der beiden signifikanten Einflussfaktoren Leitbodengesellschaft und Überschwemmung gebildet. In der ersten Spalte der Tabelle sind die Raumeinheiten angegeben. Die Zahl vor dem Komma gibt die LBG-Klasse und die Dezimalstelle die Überschwemmung (0=keine Überschwemmung, 1=Aue östlich der Elbe, 2=Aue westlich der Elbe und Elbaue) an. Dabei ergibt sich, dass nur die LBG-Klasse 18 (Auenböden) die Überschwemmungsklassen 1 und 2 annehmen kann, alle anderen LBG-Klassen können nur der Überschwemmungsklasse 0 und damit keiner Überschwemmung zugeordnet werden.

Die LABO (2003) gibt für die Beschreibung der Stoffgehalte im Boden einen Mindeststichprobenumfang von  $n = 20$  an. Von diesem Wert ausgehend zeigt sich in der Tabelle 2- 27, dass die Anzahl der Stichprobenelemente in vier Raumeinheiten zu gering ist. Die Raumeinheiten 7.0, 8.0, 9.0 und 19.0 weisen zu wenig STP-Elemente auf, wobei die Raumeinheit 19.0 lediglich ein STP-Element zu wenig hat. Die anderen drei Raumeinheiten weisen nur 6 bzw. 7 STP-Elemente auf.

**Tabelle 2- 27: Verteilung der Stichprobenelemente über die Raumeinheiten, die auf Basis der Einflussfaktoren Leitbodengesellschaft und Überschwemmung gebildet wurden.**

LBG_S				
	Häufigkeit	Prozent	Gültige Prozente	Kumulierte Prozente
Gültig 1,0	24	2,2	2,2	2,2
2,0	146	13,4	13,4	15,7
3,0	139	12,8	12,8	28,5
4,0	69	6,4	6,4	34,8
5,0	25	2,3	2,3	37,1
6,0	21	1,9	1,9	39,0
7,0	6	,6	,6	39,6
8,0	7	,6	,6	40,2
9,0	7	,6	,6	40,9
10,0	43	4,0	4,0	44,8
11,0	31	2,9	2,9	47,7
12,0	153	14,1	14,1	61,8
13,0	62	5,7	5,7	67,5
14,0	39	3,6	3,6	71,1
15,0	75	6,9	6,9	78,0
16,0	40	3,7	3,7	81,7
17,0	58	5,3	5,3	87,0
18,1	46	4,2	4,2	91,3
18,2	76	7,0	7,0	98,3
19,0	19	1,7	1,7	100,0
Gesamt	1086	100,0	100,0	

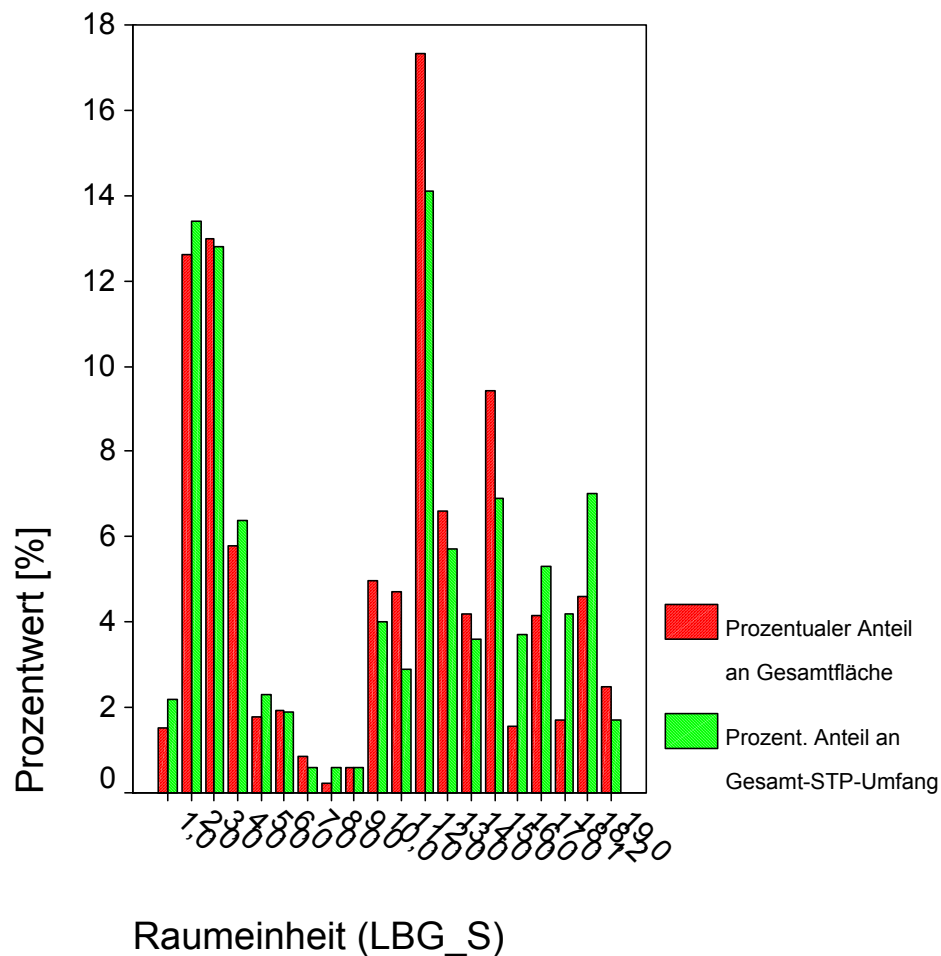


In dem folgenden gruppierten Balkendiagrammen Abb. 2- 31 ist der prozentuale Stichprobenanteil einer Raumeinheit am Gesamtstichprobenumfang und der Flächenanteil einer Raumeinheit an der Gesamtfläche dargestellt. Auf der x-Achse sind die Raumeinheiten angegeben, wobei die Zahl vor dem Komma die Leitbodengesellschaft und die Dezimalstelle die Überschwemmungsklasse kennzeichnet.

Die Verteilung der Stichprobenelemente über die Raumeinheiten ist den prozentualen Flächenanteilen der Raumeinheiten an der Gesamtfläche recht ähnlich. Dies spricht für eine repräsentative Stichprobenerhebung, da mit Zunahme des Flächenanteils einer Raumeinheit auch die Stichprobenanzahl zunehmen sollte.

Im einzelnen zeigen sich aber auch Abweichungen zwischen dem prozentualen Stichprobenanteil einer Raumeinheit und dem Flächenanteil dieser Raumeinheit.

Auffällig sind die Unterschiede zwischen dem prozentualen Stichprobenanteil und dem Flächenanteil z.B. für die Raumeinheiten 16.0 und 18.1. Der prozentuale Stichprobenanteil dieser Raumeinheiten am Gesamtstichprobenumfang ist mehr als doppelt so hoch wie ihr prozentualer Flächenanteil an der Gesamtfläche. Neben der Raumeinheit 18.1 ist auch die Raumeinheit 18.2 überrepräsentiert.



**Abb. 2- 31: Prozentualer Stichproben- und Flächenanteil einer Raumeinheit am Gesamt-STP-Umfang bzw. an Gesamtfläche [%].**



Dennoch wird durch das in Sachsen auf einem 4\*4 km-Raster durchgeführte Stichprobenverfahren eine repräsentative Stichprobennahme relativ gut umgesetzt. Allerdings ist zu berücksichtigen, dass für einige homogene Raumeinheiten insgesamt zu wenig Stichprobenelemente vorliegen (siehe oben). Von Vorteil wäre sicherlich eine Rasterbeprobung in Kombination mit einer flächengewichteten Probennahme.

#### **2.4.1.11 Aggregierung von Raumeinheiten**

Um statistisch abgesicherte Kennwerte für die einzelnen Raumeinheiten berechnen zu können, sollte der Stichprobenumfang innerhalb einer jeden Raumeinheit nach der LABO (2003) mindestens 20 Elemente betragen.

Die Raumeinheiten wurden auf Basis der Einflussfaktoren Leitbodengesellschaft und Überschwemmung gebildet. Da die Überschwemmung in der vorgegebenen Einteilung der Leitbodengesellschaften integriert ist, können die Einflussfaktoren zusammen betrachtet werden. Damit stellt sich hier nicht die Frage nach der Vorgehensweise bei der Aggregierung der Raumeinheiten. Denn bei der Betrachtung mehrerer Einflussfaktoren stellt sich die grundsätzliche Frage, ob bei der Aggregierung der Raumeinheiten sukzessive ein Parameter nach dem anderen behandelt werden sollte, d.h. zunächst werden Klassen des (einflussreichsten) Parameters aggregiert, oder ob alle möglichen Kombinationen von Faktorstufen der zu berücksichtigenden Einflussgrößen gebildet werden. Die zweite Vorgehensweise behandelt alle Einflussgrößen gleichrangig.

Für die folgende Analyse werden die Raumeinheiten, die auf Basis der Einflussfaktoren Leitbodengesellschaft und Überschwemmung gebildet wurden, zugrunde gelegt (vgl. Tabelle 2- 27 in Abschnitt 2.4.1.9). Es muss getestet werden, ob die Lokationen der As-Gehalte für die verschiedenen Raumeinheiten signifikant voneinander verschieden sind. Visuell lassen sich die Verteilungen sehr gut anhand von Boxplots vergleichen (siehe Abb. 2- 32).

Anhand dieser Abbildung wird deutlich, dass die mittleren As-Gehalte des A-Horizontes (vgl. Median) in der Leitbodenassoziation A (Raumeinheiten 1.0 bis 7.0) deutlich höher sind als in den Leitbodenassoziationen B, C, und E (B: 8.0 bis 13.0; C: 14.0 bis 17.0; E: 19.0). Auch in der Leitbodenassoziation D (LBG 18: Auen), insbesondere in der Raumeinheit 18.2 (Auen westlich der Elbe mit Elbaue) ist der mittlere As-Gehalt des A-Horizontes deutlich höher als in den Leitbodenassoziationen B, C und E. Die Raumeinheit 7.0 weist den höchsten Median auf. Außerdem streuen die As-Gehalte in den Raumeinheiten 1.0 bis 7.0 sowie 18.2 stärker als in den Raumeinheiten 8.0 bis 18.1 sowie 19.0.

Für den Lokationsvergleich der As-Gehalte in den verschiedenen Raumeinheiten wird der Kruskal-Wallis-Test durchgeführt. Die Teststatistiken für die Kruskal-Wallis-Tests sind im folgenden angegeben.

Zunächst wird global getestet, ob signifikante Unterschiede zwischen den Verteilungsfunktionen der Raumeinheiten bestehen. Hiermit werden die Unterschiede zwischen den Raumeinheiten bezüglich aller Stichproben simultan aufgedeckt. In der Tabelle 2-28 ist das Testergebnis aufgeführt.

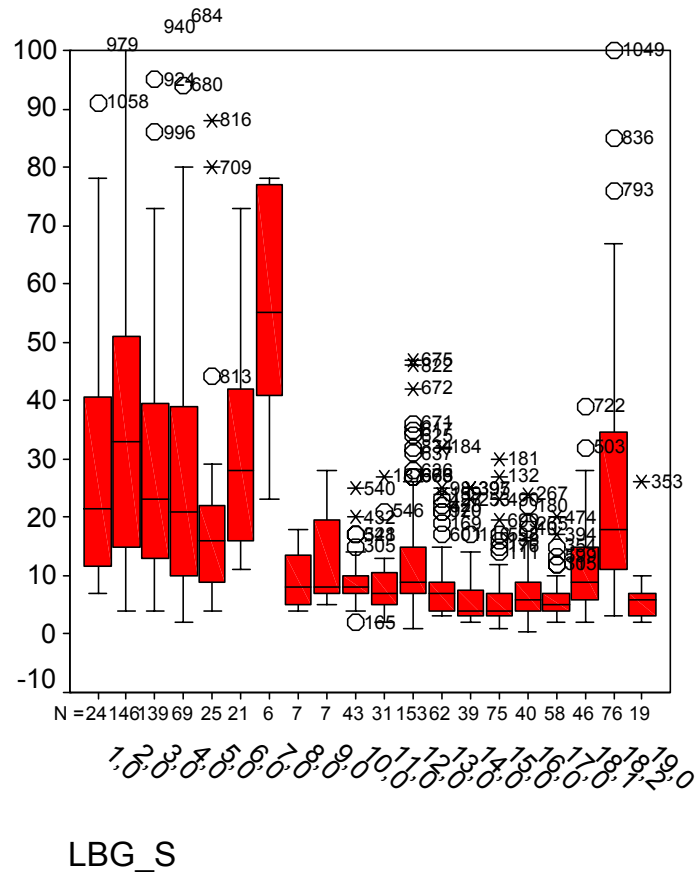


Abb. 2- 32: Boxplots der As-Gehalte in den Raumeinheiten.

Tabelle 2- 28: Globaler Test nach Kruskal-Wallis.

Statistik für Test<sup>a, b</sup>

	AS
Chi-Quadrat	479,819
df	18
Asymptotische Signifikanz	,000

a. Kruskal-Wallis-Test

b. Gruppenvariable: LBG\_S

Die Lokationen der 20 Raumeinheiten unterscheiden sich nach diesem globalen Test signifikant voneinander, da das Signifikanzniveau kleiner als die Irrtumswahrscheinlichkeit  $\alpha = 0,05$  ist.

In Einzeltests lassen sich Lokationsvergleiche für zwei oder mehr Raumeinheiten der Grundgesamtheit durchführen. Der Abb. 2- 30 in Abschnitt 2.4.1.9 ist zu entnehmen, dass die Raumeinheiten 7.0, 8.0 und 9.0 (diese haben auch geringen Flächenanteil an Gesamtfläche, vgl. Abb. 2- 30 Abschnitt 2.4.1.9) sowie 19.0 eine Stichprobenanzahl von unter 20 Elementen aufweisen. Die Klasse 19.0 kann aus fachlicher Sicht nicht mit anderen Klassen aggregiert werden. Die Stichprobenanzahl dieser Klasse von 19 Elementen liegt auch nur knapp unter den geforderten 20 Elementen und wird damit für die weiteren Analysen beibehalten.



Die Klassen 7.0, 8.0 und 9.0 sind einander sowie ihren Nachbarn hinsichtlich des Substrats sehr ähnlich. Bei diesen drei kann ein Test entscheiden, ob und mit welchen Klassen sie aggregiert werden können. Einen geeigneten Test stellt der Kruskal-Wallis-Test dar.

Aus fachlicher Sicht sinnvoll wäre eine Aggregation der Raumeinheiten 6.0 und 7.0 sowie der Raumeinheiten 8.0 und 9.0. Die Aggregation der Klasse 7.0 zur Klasse 6.0 würde zu einer Gesamtstichprobenanzahl von 27 Stichprobenelementen führen, die Aggregation der beiden Raumeinheiten 8.0 und 9.0 würde nur zu einer Gesamtstichprobenanzahl von 14 Stichprobenelementen führen. 14 Stichprobenelemente liegen unter der geforderten Stichprobenanzahl von 20 Stichprobenelementen, so dass andere Kombinationen gewählt werden sollten.

**Tabelle 2- 29: Test nach Kruskal-Wallis: Lokationsvergleich der Raumeinheiten 6.0 und 7.0.**

**Statistik für Test<sup>a,b</sup>**

	AS
Chi-Quadrat	3,597
df	1
Asymptotische Signifikanz	,058

a. Kruskal-Wallis-Test

b. Gruppenvariable: LBG\_S

**Tabelle 2- 30: Test nach Kruskal-Wallis: Lokationsvergleich der Raumeinheiten 8.0 und 10.0.**

**Statistik für Test<sup>a,b</sup>**

	AS
Chi-Quadrat	,156
df	1
Asymptotische Signifikanz	,693

a. Kruskal-Wallis-Test

b. Gruppenvariable: TEST\_KRU

**Tabelle 2- 31: Test nach Kruskal-Wallis: Lokationsvergleich der Raumeinheiten 9.0 und 11.0.**

**Statistik für Test<sup>a,b</sup>**

	AS
Chi-Quadrat	2,008
df	1
Asymptotische Signifikanz	,156

a. Kruskal-Wallis-Test

b. Gruppenvariable: TEST\_KW



Eine weitere Möglichkeit der Aggregierung ergibt sich aus der Kombination der Raumeinheiten 8.0 und 10.0, die eine Stichprobenanzahl von 50 Stichprobenelementen ergeben würde, sowie 9.0 und 11.0, die eine Stichprobenanzahl von 38 Stichprobenelementen ergeben würde. Nach Information von Frau Kardel ist die Zusammenlegung dieser Leitbodengesellschaften fachlich sinnvoll.

In den Tabellen 2-29 bis 2-31 sind die Lokationsvergleiche für die Aggregierung der Raumeinheit 7.0 zur Raumeinheit 6.0, der Raumeinheit 8.0 zur Raumeinheit 10.0 und der Raumeinheit 9.0 zur Raumeinheit 11.0 aufgeführt. Der Lokationsvergleich für die Raumeinheiten 7.0 und 6.0 wird trotz des visuell in Abb. 2-32 festgestellten Unterschiedes der Mediane durchgeführt, da diese Raumeinheiten am ehesten fachlich zusammenpassen.

Die Nullhypothese, dass die Lokationen der Klassen gleich sind, kann zugunsten der Alternativhypothese, dass die Lokationen der Klassen ungleich sind, nicht verworfen werden. Die Kruskal-Wallis-Testergebnisse gestatten daher für den anorganischen Stoff Arsen die Aggregierung der Klasse 7.0 zur Klasse 6.0, der Klasse 8.0 zur Klasse 10.0 und der Klasse 9.0 zur Klasse 11.0.

In Tabelle 2- 32 ist die Anzahl der Stichprobenelemente in den verschiedenen Raumeinheiten, die z.T. aggregiert sind, aufgeführt. Mit Ausnahme der Raumeinheit 19.0, die mit 19 Stichprobenelementen nur knapp unter der geforderten Anzahl von 20 Stichprobenelementen pro Raumeinheit liegt, enthalten alle anderen Raumeinheiten über 20 Stichprobenelemente. Die Raumeinheit 19.0 wird nicht aus den weiteren Analysen herausgenommen.

**Tabelle 2- 32: Verteilung der Stichprobenelemente über die aggregierten Raumeinheiten.**

LBGS_AGG					
		Häufigkeit	Prozent	Gültige Prozente	Kumulierte Prozente
Gültig	1,00	24	2,2	2,2	2,2
	2,00	146	13,4	13,4	15,7
	3,00	139	12,8	12,8	28,5
	4,00	69	6,4	6,4	34,8
	5,00	25	2,3	2,3	37,1
	6,00	27	2,5	2,5	39,6
	10,00	50	4,6	4,6	44,2
	11,00	38	3,5	3,5	47,7
	12,00	153	14,1	14,1	61,8
	13,00	62	5,7	5,7	67,5
	14,00	39	3,6	3,6	71,1
	15,00	75	6,9	6,9	78,0
	16,00	40	3,7	3,7	81,7
	17,00	58	5,3	5,3	87,0
	18,10	46	4,2	4,2	91,3
	18,20	76	7,0	7,0	98,3
	19,00	19	1,7	1,7	100,0
	Gesamt	1086	100,0	100,0	



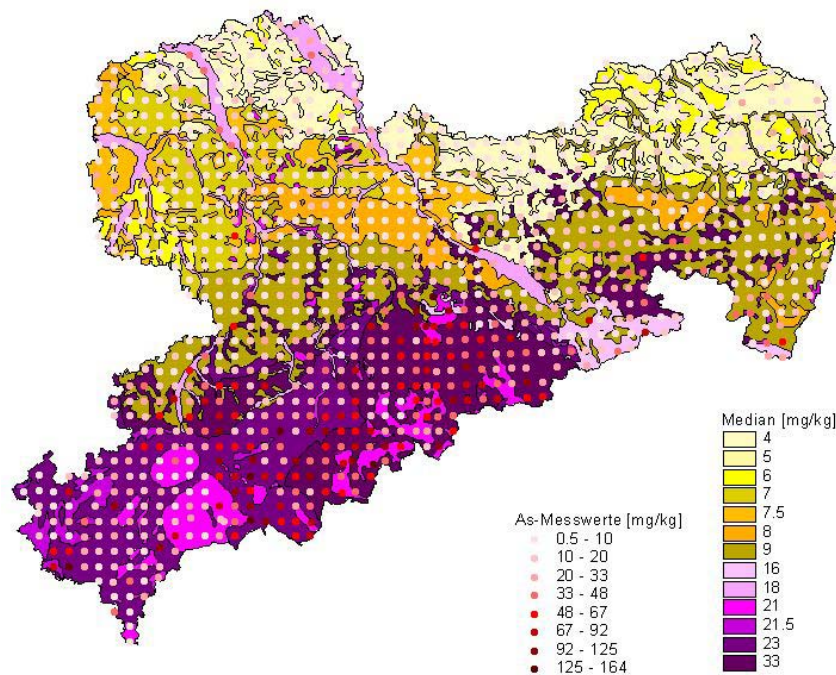


### 2.4.2 Erhebung statistischer Kennwerte

In diesem Abschnitt sind die statistischen Kennwerte für die aggregierten Raumeinheiten und Konfidenzintervalle für den Median und das 90. Perzentil aufgeführt.

**Tabelle 2- 33: Statistische Kennwerte in den aggregierten Raumeinheiten.**

	Anzahl	25. Perzentil	Median	75. Perzentil	Perzentil 90
1,00	24	11,250	21,500	41,250	84,500
2,00	146	15,000	33,000	51,000	81,300
3,00	139	13,000	23,000	40,000	69,000
4,00	69	10,000	21,000	42,000	75,000
5,00	25	9,000	16,000	25,500	58,500
6,00	27	23,000	33,000	56,000	77,200
10,00	50	7,000	8,000	10,000	17,000
11,00	38	5,000	7,500	11,500	21,200
12,00	153	7,000	9,000	15,000	25,600
13,00	62	4,000	7,000	9,500	21,000
14,00	39	3,000	4,000	8,000	17,000
15,00	75	3,000	4,000	7,000	14,400
16,00	40	4,000	6,000	9,000	17,800
17,00	58	4,000	5,000	7,000	12,000
18,10	46	6,000	9,000	15,750	23,900
18,20	76	11,000	18,000	34,750	58,200
19,00	19	3,000	6,000	7,000	10,000



**Abb. 2- 33: Median der As-Gehalte in den Raumeinheiten sowie punktuelle As-Werte.**



#### 2.4.2.1 Statistische Kennwerte

In Tabelle 2- 33 sind die statistischen Kennwerte für die verschiedenen Raumeinheiten aufgeführt. Die Mediane der Raumeinheiten und die punktuellen Messwerte sind in Abb. 2- 33 räumlich visualisiert.

#### 2.4.2.2 Konfidenzintervalle

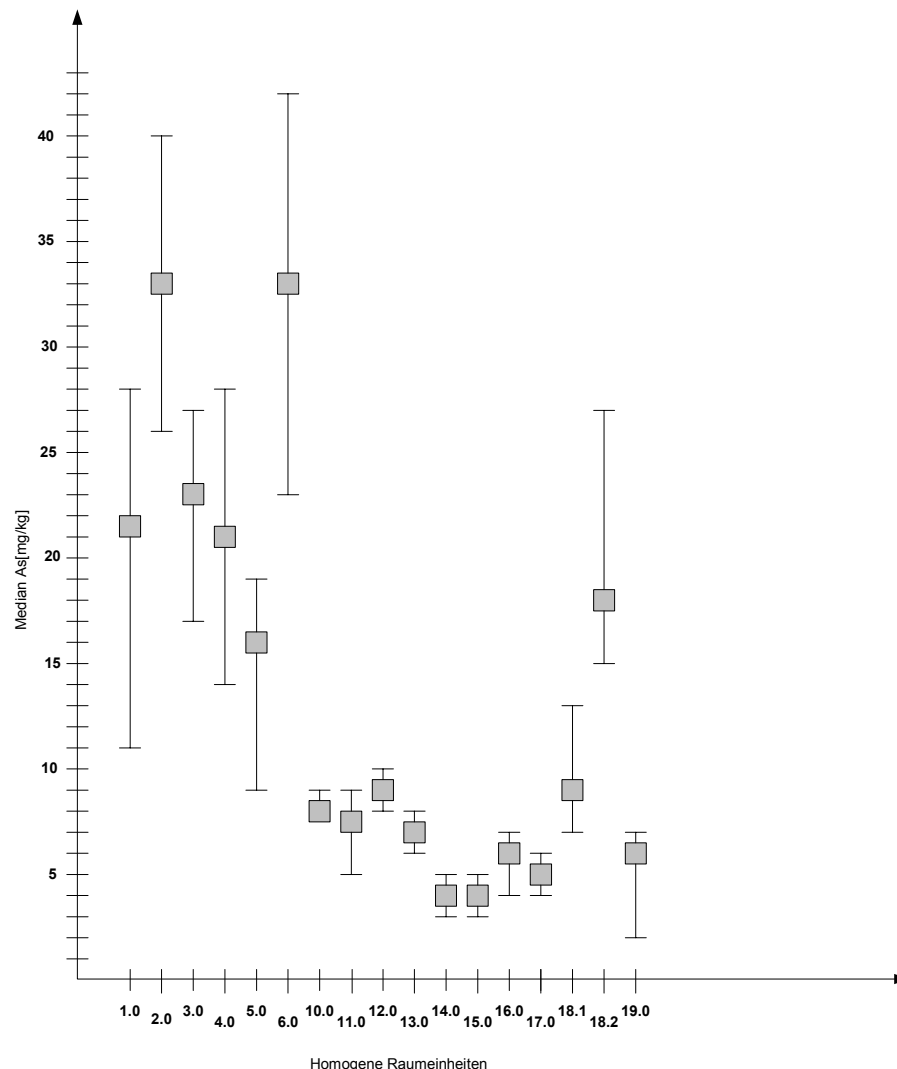
In der Tabelle 2- 34 sind die Konfidenzintervalle für den Median und das 90. Perzentil der verschiedenen Raumeinheiten angegeben. Für den Median wurde ein zweiseitiges Konfidenzintervall bestimmt. Für das 90. Perzentil, das häufig als Orientierungs- oder Hintergrundwert zur Abgrenzung von merklicher anthropogener Belastung dient, wurde sowohl ein zweiseitiges als auch ein einseitiges Konfidenzintervall mit der oberen Schranke bestimmt.

**Tabelle 2- 34: Zwei- und einseitige Konfidenzintervalle für den Median und das 90. Perzentil.**

Raum- einheit	Median (zweiseitig)			90. Perzentil (zweiseitig)			90. Perzentil (einseitig)	
	Unter- grenze	Ober- grenze	Signi- fikanz	Unter- grenze	Ober- grenze	Signi- fikanz	Ober- grenze	Signi- fikanz
1.0	11.0	28.0	0.952	39.0	101.0	0.977	91.0	0.911
2.0	26.0	40.0	0.950	59.0	99.0	0.955	99.0	0.960
3.0	17.0	27.0	0.950	61.0	109.0	0.952	109.0	0.971
4.0	14.0	28.0	0.956	49.0	80.0	0.955	80.0	0.972
5.0	9.0	19.0	0.957	22.0	88.0	0.972	80.0 88.0	0.920 1.0
6.0	23.0	42.0	0.958	56.0	120.0	0.960	78.0 120.0	0.935 1.0
10.0	8.0	9.0	0.953	10.0	18.0	0.955	18.0	0.963
11.0	5.0	9.0	0.950	13.0	27.0	0.952	27.0	0.980
12.0	8.0	10.0	0.950	20.0	35.0	0.950	27.0	0.946
13.0	6.0	8.0	0.954	9.0	23.0	0.950	23.0	0.951
14.0	3.0	5.0	0.957	8.0	25.0	0.950	25.0	0.982
15.0	3.0	5.0	0.953	8.0	19.5	0.951	17.0	0.946
16.0	4.0	7.0	0.962	10.0	24.0	0.963	22.0	0.984
17.0	4.0	6.0	0.952	7.0	15.0	0.958	15.0	0.982
18.1	7.0	13.0	0.956	20.0	32.0	0.960	28.0	0.948
18.2	15.0	27.0	0.958	39.0	67.0	0.950	64.0	0.950
19.0	2.0	7.0	0.951	7.0	26.0	0.972	26.0	1.0



Die Mediane und die entsprechenden zweiseitigen Konfidenzintervalle der Raumeinheiten sind in der folgenden Abb. 2- 34 visualisiert.



**Abb. 2- 34: Mediane As-Gehalt und Konfidenzintervalle in den Raumeinheiten.**

### 2.4.3 Räumliche Interpolation der As-Gehalte in Sachsen

Wie der erste Teil dieses Berichts gezeigt hat, werden in den verschiedenen Bundesländern unterschiedliche Modelle zur räumlichen Interpolation von Stoffgehalten im Oberboden verwendet. Die Güte der mit diesen Modellen verbundenen Interpolationsverfahren hängt entscheidend von den Charakteristika der zu interpolierenden Daten ab. Daher kann aus den bestehenden Verfahren kein allgemein bestes Verfahren ausgewählt werden. Aus diesem Grund sollte nach Methoden gesucht werden, die einen Vergleich von unterschiedlichen Interpolationsverfahren möglich machen. Im Folgenden wird daher beispielhaft der Gehalt des Stoffes Arsen mit drei auf dem Kriging aufbauenden Verfahren interpoliert. Die daraus resultierenden Interpolationsergebnisse werden miteinander verglichen.



Die drei im Folgenden beschriebenen Interpolationsverfahren unterscheiden sich einerseits durch die gewählte Datentransformation andererseits durch die gewählte Datenstandardisierung. Eine Datentransformation wird durchgeführt, um die Verteilung der in der Regel rechtsschiefen Daten der Stoffgehalte zu symmetrisieren. Eine Interpolation von symmetrisierten Daten kann zu besseren Interpolationsergebnissen führen. Insbesondere wird durch die Verwendung symmetrisierter Daten der Schätzer des Variogramms verbessert. Es gibt verschiedene Möglichkeiten, Daten zu transformieren. Im ersten der im Folgenden beschriebenen Interpolationsverfahren wird keine Datentransformation durchgeführt, im zweiten wird zur Transformation die Logarithmusfunktion verwendet und im dritten Beispiel wird eine so genannte Normal-Score-Transformation eingesetzt, die Daten auf eine Standard-Normalverteilung transformiert.

Eine Datenstandardisierung ist notwendig, da die Stoffgehalte der einzelnen homogenen Raumeinheiten in der Regel unterschiedlich hohe Mediane haben und unter Umständen eine unterschiedliche Streuung aufweisen. Daten können mit unterschiedlichen Methoden standardisiert werden. Im ersten der im Folgenden beschriebenen Interpolationsverfahren werden die Daten durch geometrische Mittel standardisiert. Diese Standardisierung bezieht sich also ausschließlich auf die mittlere Höhe der Daten, nicht auf ihre Streuung. Mit der z-Transformation, die im zweiten Beispiel verwendet wird, werden die Daten so transformiert, dass sie einen Mittelwert von 0 und eine Standardabweichung von 1 besitzen. Dies wird auch durch die Normal-Score-Transformation erreicht, die überdies – wie oben beschrieben – die Daten auf eine Normalverteilung transformiert.

Im Folgenden werden die drei ausgewählten Interpolationsverfahren und die mit ihnen erzielten Interpolationsergebnisse detailliert beschrieben. In Abschnitt 2.4.3.1 wird das Ordinary Kriging mit Standardisierung durch geometrische Mittel erläutert, in Abschnitt 2.4.3.2 das Lognormal Kriging mit Standardisierung durch eine z-Transformation und in Abschnitt 2.4.3.3 das Normal-Score Kriging. Abschließend wird die Güte dieser drei Verfahren mit der Methode der Kreuzvalidierung miteinander verglichen.

#### 2.4.3.1 Ordinary Kriging nach Standardisierung mit geom. Mittel

Im Folgenden wird ein Ordinary Kriging Ansatz zur Interpolation der Arsengehalte gewählt, der geometrische Mittel zur Standardisierung verwendet.

##### Interpolationsmodell

Das hier angewendete Interpolationsverfahren basiert auf dem folgenden Modell:

$$As(x) = \sum_{i=1}^n mg_i As_{std}(x) 1_{A_i}(x)$$

Dabei bezeichnet  $As(x)$  den räumlichen Prozess der Arsengehalte. Dieser wird als Summe aus Prozessen der  $n$  homogenen Raumeinheiten aufgefasst. Die homogenen Raumeinheiten werden durch räumliche Indikatorfunktionen  $1_{A_i}(x)$  beschrieben. Die Prozesse der einzelnen homogenen Raumeinheiten basieren auf einem Standardprozess  $As_{std}$ . Sie unterscheiden sich durch ihre geometrischen Mittelwerte  $mg_i$  voneinander. Der Prozess  $As_{std}$  wird als stationär und autokorrelativ angesehen. Für diesen kann also das Variogramm bestimmt werden und er kann unter Verwendung des Ordinary Kriging interpoliert werden. Der Interpolationsschätzer



$\hat{a}s_{\text{std}}(x)$  verwendet die durch das geometrische Mittel standardisierten Nachbarwerte des zu interpolierenden Punktes. Der Gesamtschätzer des Prozesses  $As$  lautet dann

$$\hat{a}s(x) = \sum_{i=1}^n m g_i \hat{a}s_{\text{std}}(x) 1_{A_i}(x)$$

Bei diesem Interpolationsverfahren wird also weder eine mögliche Schiefe der Daten noch werden mögliche Varianzunterschiede zwischen den homogenen Raumeinheiten berücksichtigt.

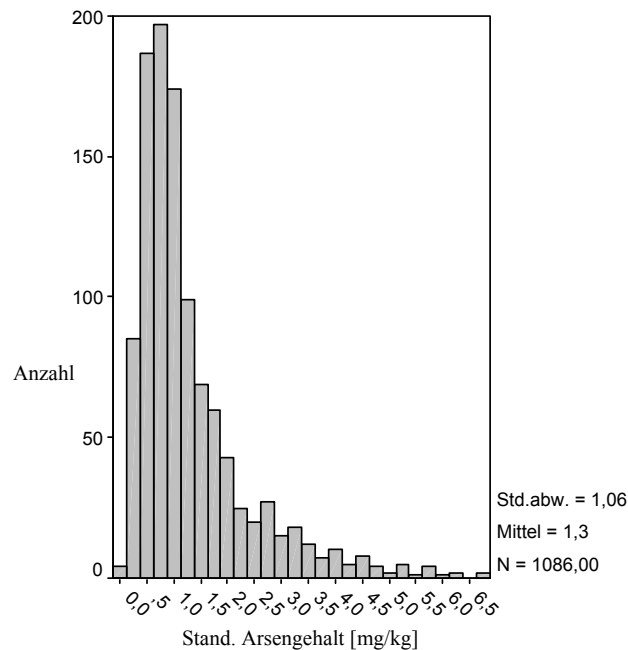
### Standardisierung

Zur Standardisierung werden die geometrischen Mittel der Arsengehalte in den einzelnen Raumeinheiten verwendet. Diese sind in Tabelle 2- 35 aufgeführt. Die Arsengehalte werden durch die geometrischen Mittel geteilt.

In Abb. 2- 35 ist die Verteilung der durch die geometrischen Mittel standardisierten Arsengehalte dargestellt. Die Verteilung der standardisierten Daten ist rechtsschief. In den univariaten Statistiken der standardisierten Arsengehalte ist eine Schiefe von 1.97 angegeben. Durch die Standardisierung mit Hilfe des geometrischen Mittelwertes wird die Schiefe zwar nicht auf Null gesetzt. Sie nimmt jedoch ab. Die Schiefe der Ausgangsdaten ist mit 2.54 höher.

**Tabelle 2- 35: Geometrische Mittel des Arsengehalts in verschiedenen Raumeinheiten.**

Mittelwert	N	Standardabweichung	Geometrisches Mittel
32,29167	24	27,669602	23,67565
38,57436	146	30,232318	27,83535
34,29137	139	32,813422	24,29594
29,95507	69	26,390359	19,91172
21,17200	25	21,199772	15,04386
40,14815	27	25,803553	33,15560
9,36000	50	4,525483	8,43054
9,26316	38	6,382765	7,60545
12,15033	153	8,410341	10,10168
8,96774	62	6,503386	7,27294
6,71795	39	6,227903	5,01332
6,10000	75	5,725122	4,46980
7,43750	40	5,492638	5,83820
6,05666	58	3,546433	5,35140
12,13043	46	8,429073	9,52288
25,80114	76	20,464100	18,99065
6,26316	19	5,424657	4,92621
20,34506	1086	23,633319	12,40941



#### Univariate Statistiken

	Statistik	Standardfehler
Mittelwert	1,3098	,03228
95% Konfidenzintervall des Mittelwerts	Untergrenze Obergrenze	
	1,2465	
	1,3732	
5% getrimmtes Mittel	1,1860	
Median	,9629	
Varianz	1,131	
Standardabweichung	1,06363	
Minimum	,09	
Maximum	6,75	
Spannweite	6,66	
Interquartilbereich	1,0043	
Schiefe	1,973	,074
Kurtosis	4,485	,148

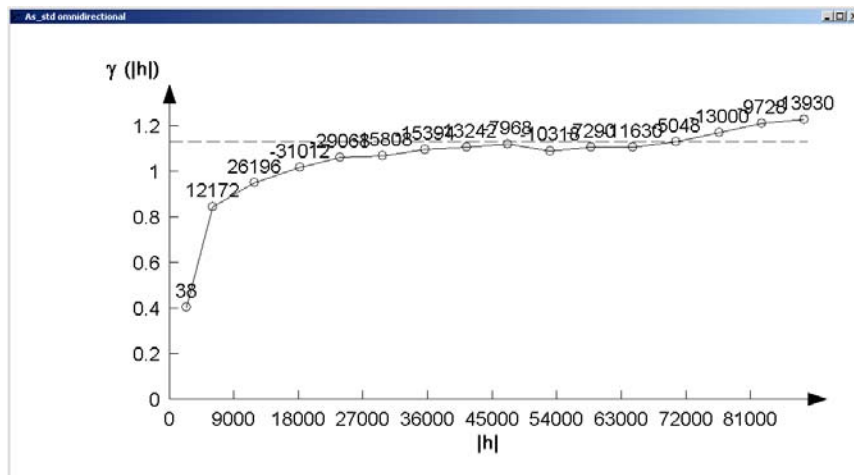
**Abb. 2- 35: Verteilung der durch die geometrischen Mittel standardisierten Arsengehalte.**

#### Variogrammanalyse

Bevor die standardisierten Arsengehalte interpoliert werden, wird deren räumlicher Zusammenhang analysiert. Für die Berechnung des experimentellen Variogramms wurde eine Lag-Weite von 5.9 km gewählt. Das isotrope Variogramm der standardisierten Arsengehalte ist in Abb. 2-36 dargestellt. Durch die gewählte Lag-Weite wird in allen Klassen die erforderliche Mindestanzahl von 30 Tupeln überschritten. Da die Arsengehalte in einem Raster von 4 km Maschenweite gemessen wurden, wurden zur Schätzung des ersten Wertes des experimentellen Variogramms nur 38 Tupel gefunden (siehe Abb. 2- 36). Alle weiteren Werte des experimentellen Variogramms werden mit einer wesentlich größeren Anzahl von Tupeln berechnet. Dies ist

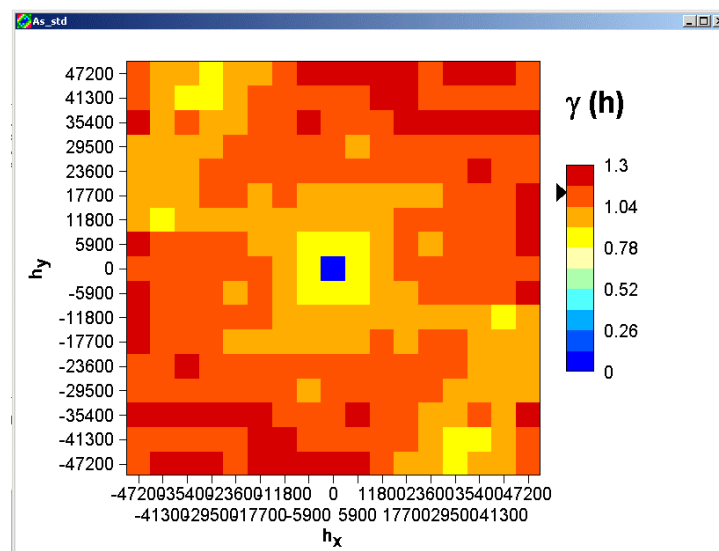


ein Nachteil von Rasterbeprobungen, weil gerade die ersten Variogrammwerte für die Interpolation von Bedeutung sind. In Abb. 2- 36 ist das experimentelle Variogramm bis zu einem Abstand über 81 km dargestellt. Bis zu diesem Abstand ist das experimentelle Variogramm aussagekräftig, da dies ungefähr der Hälfte des Durchschnitts des Untersuchungsgebiets entspricht.



**Abb. 2- 36: Isotropes Variogramm der standardisierten Arsengehalte.**

Durch eine Variogrammoberfläche wurde überprüft, ob das Variogramm der Arsengehalte richtungsabhängig ist. Diese ist in Abb. 2- 37 dargestellt. Man erkennt bis zum Erreichen des Schwellenwertes von ca. 1.15 keine wesentliche Anisotropie. Daher wird im Weiteren mit einem isotropen Variogramm gearbeitet.



**Abb. 2- 37: Variogrammoberfläche der standardisierten Arsengehalte.**

In Abb. 2- 38 ist die Anpassung eines theoretischen Variogramms an das experimentelle Variogramm der standardisierten Arsengehalte dargestellt. Es wurde ein theoretisches Variogramm gewählt, das aus zwei exponentiellen Variogrammfunktionen zusammengesetzt ist:

$$\gamma(h) = 0.77(1 - \exp(-3h/8400)) + 0.35(1 - \exp(-3h/36722))$$



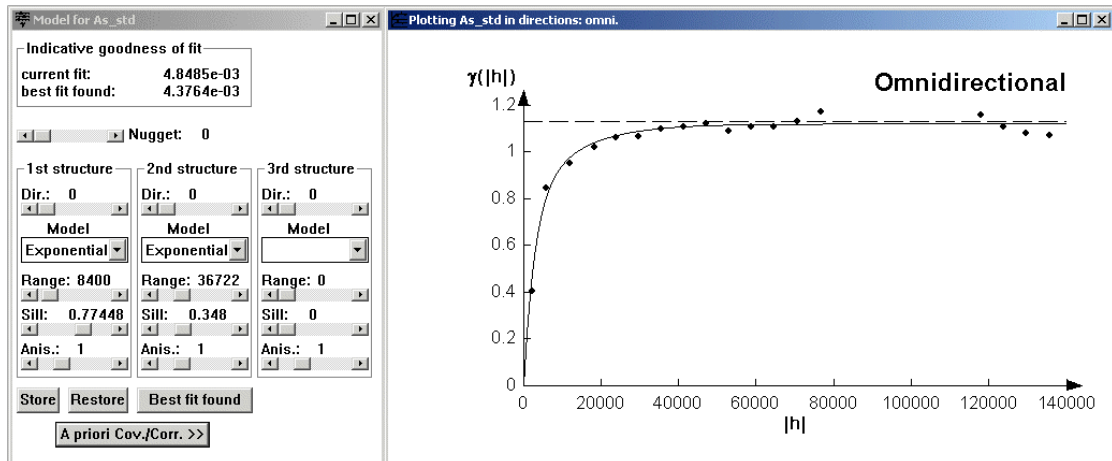


Abb. 2- 38: Anpassung des theoretischen Variogramms für die standardisierten Arsengehalte.

### Interpolation

Die standardisierten Arsengehalte wurden mit Hilfe des Ordinary Kriging interpoliert. Dabei wurde ein maximaler Suchradius von 60 km gewählt. Es wurden mindestens 2 Nachbarn und maximal 6 Nachbarn in die Interpolation einbezogen. Nach der Interpolation wurden die standardisierten Arsengehalte mit den geometrischen Mittelwerten der einzelnen homogenen Raumeinheiten destandardisiert. Die dadurch resultierende Werteoberfläche der Arsengehalte ist in Abbildung 2-39 dargestellt.

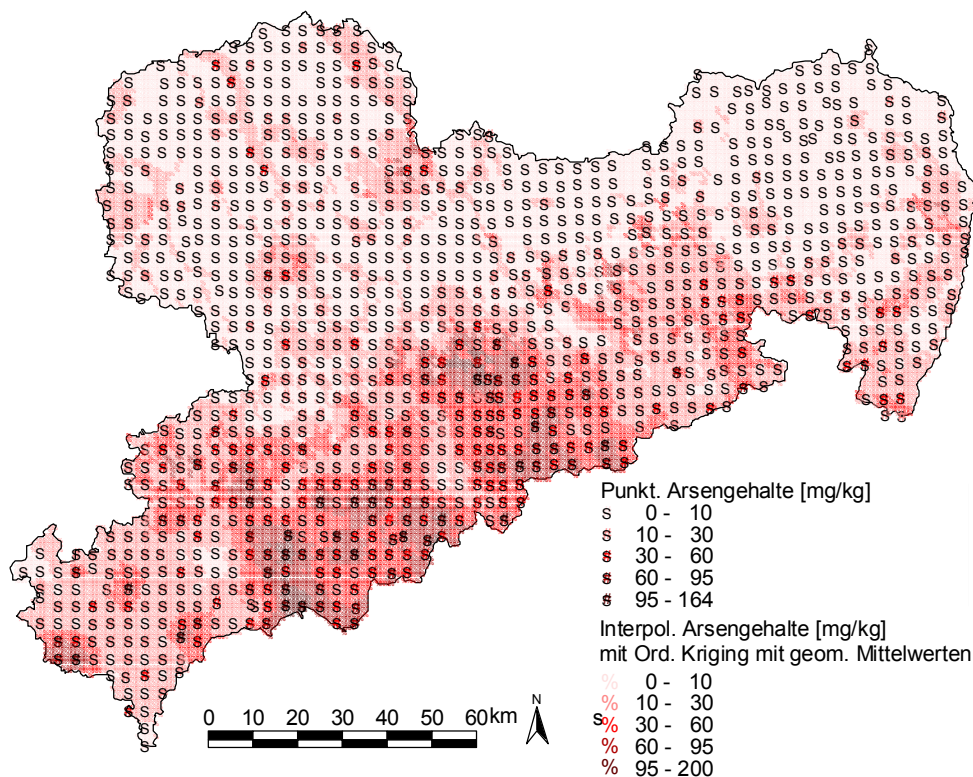


Abb. 2- 39: Räumliche Verteilung der standardisierten Arsengehalte.



### 2.4.3.2 Kriging nach Normal-Score-Transformation

Im Folgenden wird der Arsengehalt durch ein Kriging nach Normal-Score-Transformation interpoliert.

#### Interpolationsmodell

Das hier angewendete Interpolationsverfahren basiert auf dem folgenden Modell:

$$As(x) = \sum_{i=1}^n \varphi_i^{-1}(As_{\text{std}}(x)) 1_{A_i}(x)$$

Dabei bezeichnet  $As(x)$  den räumlichen Prozess der Arsengehalte. Dieser wird als Summe aus Prozessen der  $n$  homogenen Raumeinheiten aufgefasst. Die homogenen Raumeinheiten werden durch räumliche Indikatorfunktionen  $1_{A_i}$  beschrieben. Die Prozesse der einzelnen homogenen Raumeinheiten basieren auf einem Standardprozess  $As_{\text{std}}$ . Sie gehen aus diesem durch Normal-Score-Transformationen  $\varphi_i$  hervor. Die Funktionen  $\varphi_i$  transformieren die Arsenstoffgehalte in den einzelnen Raumeinheiten so, dass ihre transformierte Verteilung eine Standardnormalverteilung ist. Der Prozess  $As_{\text{std}}$  wird als stationär und autokorrelativ angesehen. Für diesen kann also das Variogramm bestimmt werden, und er kann unter Verwendung des Ordinary Kriging interpoliert werden. Der Interpolationsschätzer  $\hat{as}_{\text{std}}(x)$  verwendet die durch die Normal-Score-Transformationen standardisierten Nachbarwerte des zu interpolierenden Punktes. Der Gesamtschätzer des Prozesses  $As$  lautet dann

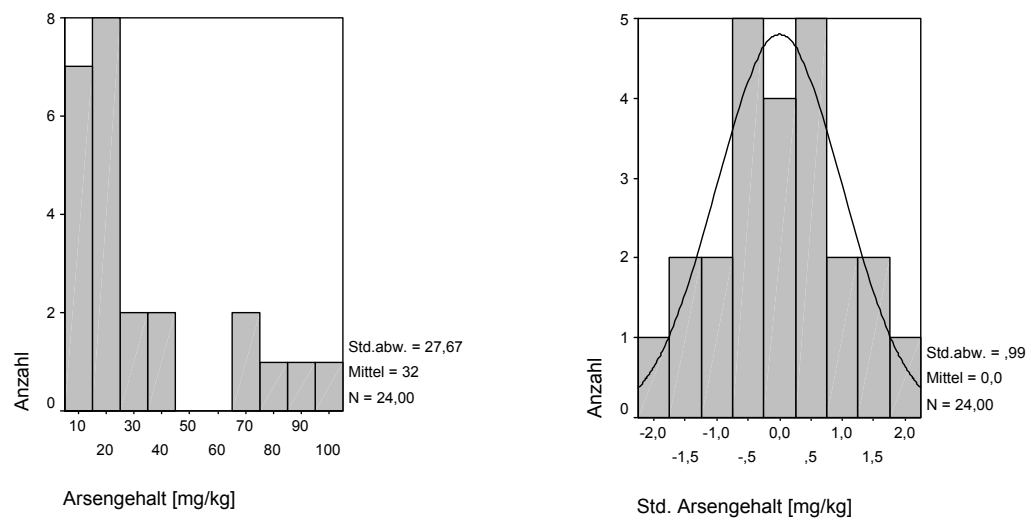
$$\hat{as}(x) = \sum_{i=1}^n \varphi_i^{-1}(\hat{as}_{\text{std}}(x)) 1_{A_i}(x)$$

Bei diesem Interpolationsverfahren werden die in der Regel rechtsschiefen Verteilungen symmetrisiert und auf gleichen Mittelwert und gleiche Standardabweichung standardisiert.

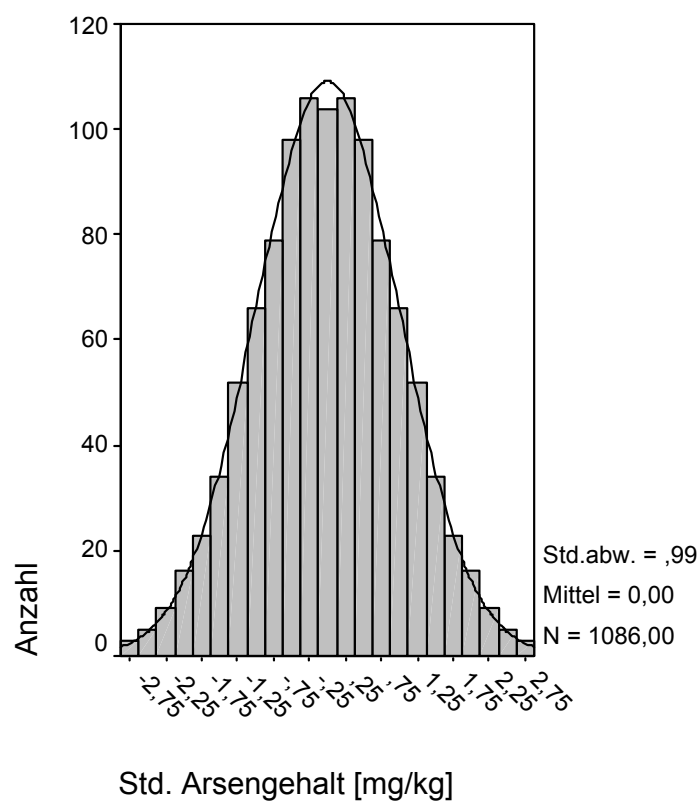
#### Transformation und Standardisierung

Wie oben schon erwähnt, wird durch eine Normal-Score-Transformation die Verteilung der Arsengehalte der einzelnen Raumeinheiten auf eine Standard-Normalverteilung gebracht. Ein Beispiel einer solchen Transformation ist in Abb. 2- 40 dargestellt. Die rechtsschiefe Verteilung der Arsengehalte in Raumeinheit 1 wird auf eine Normalverteilung transformiert.

Die gemeinsame Verteilung aller transformierten Arsengehalte ist in Abb. 2- 41 dargestellt. Man erkennt die gute Übereinstimmung mit einer Normalverteilung mit Mittelwert 0 und Standardabweichung 1.



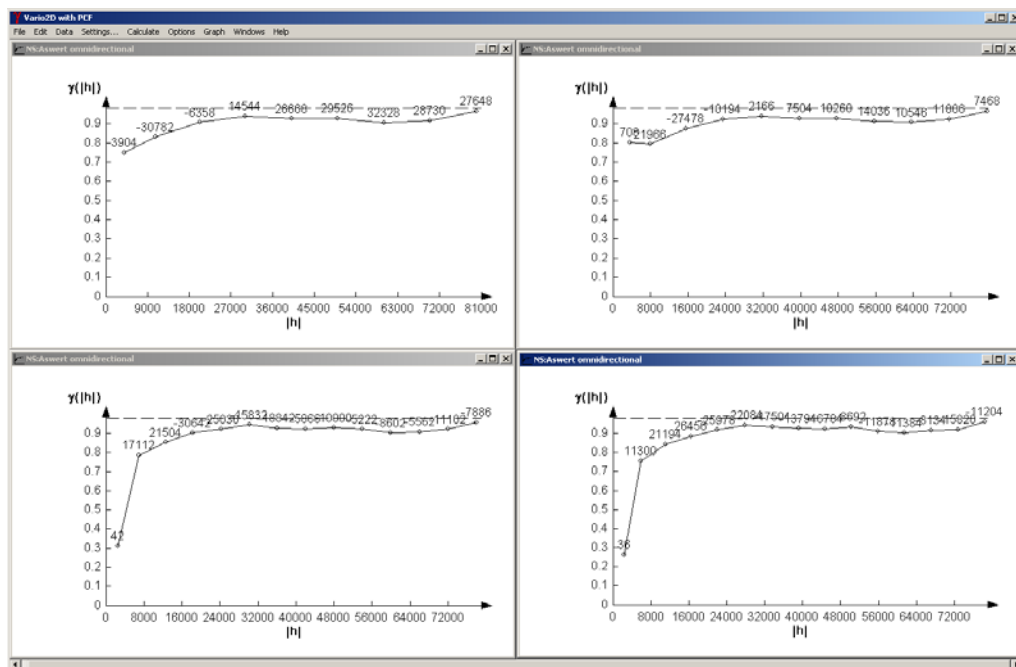
**Abb. 2- 40: Normal-Score-Transformation der Arsengehalte in Raumeinheit 1.**



**Abb. 2- 41: Normal-Score-Transformation der Arsengehalte.**

## Variogrammanalyse

Bevor die transformierten Arsengehalte interpoliert werden, wird deren räumlicher Zusammenhang analysiert. Für die Berechnung des experimentellen Variogramms wurden verschiedene Lag-Weiten gewählt. Die isotropen Variogramme der standardisierten Arsengehalte mit Lag-Weiten von 10 km, 8 km, 6 km und 5.6 km sind in Abb. 2- 42 dargestellt. Durch die gewählten Lag-Weiten werden in allen Klassen die erforderlichen Mindestanzahlen von 30 Tupeln überschritten. Man erkennt in der Abbildung, dass bei Lag-Weiten von 10 km und 8 km die Struktur des Variogramms für kleine Abstände nicht sichtbar wird. Diese wird erst deutlich, wenn man eine Lag-Weite von 5.6 km oder 6 km verwendet. Da die Variogrammwerte für kleine Abstände besonders wichtig für die nachfolgende Interpolation sind, wird das experimentelle Variogramm mit Lag-Weite von 5.6 km für die Anpassung an ein theoretisches Variogramm verwendet.



**Abb. 2- 42: Isotrope Variogramme der standardisierten Arsengehalte für verschiedene Lags (links oben: 10 km, rechts oben: 8 km, links unten: 6 km und rechts unten: 5.6 km).**

Durch eine Variogrammoberfläche wurde überprüft, ob das Variogramm der Arsengehalte richtungsabhängig ist. Diese ist in Abb. 2- 43 dargestellt. Man erkennt eine Anisotropie zwischen den Richtungen Ost-West und Nord-Süd. Da sich diese jedoch nur undeutlich in den richtungsabhängigen experimentellen Variogrammen wieder fand, wurde im Weiteren mit einem isotropen Variogramm gearbeitet.

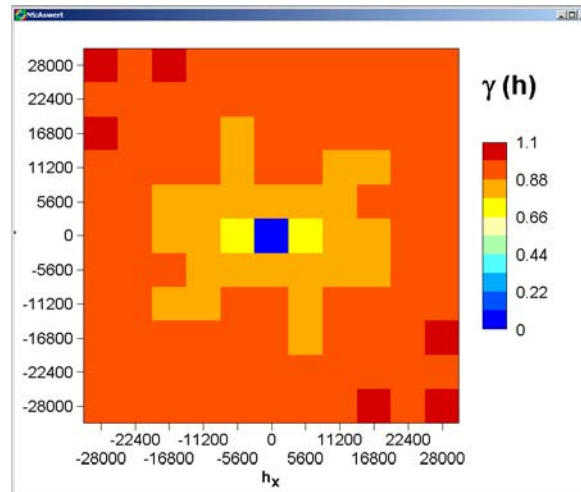


Abb. 2- 43: Variogrammoberfläche der durch Normal-Score transformierten Arsengehalte.

In Abb. 2- 44 ist die Anpassung eines theoretischen Variogramms an das experimentelle Variogramm der transformierten Arsengehalte dargestellt. Es wurde ein theoretisches exponentielles Variogramm gewählt:

$$\gamma(h) = 0.93(1 - \exp(-3h/12000))$$

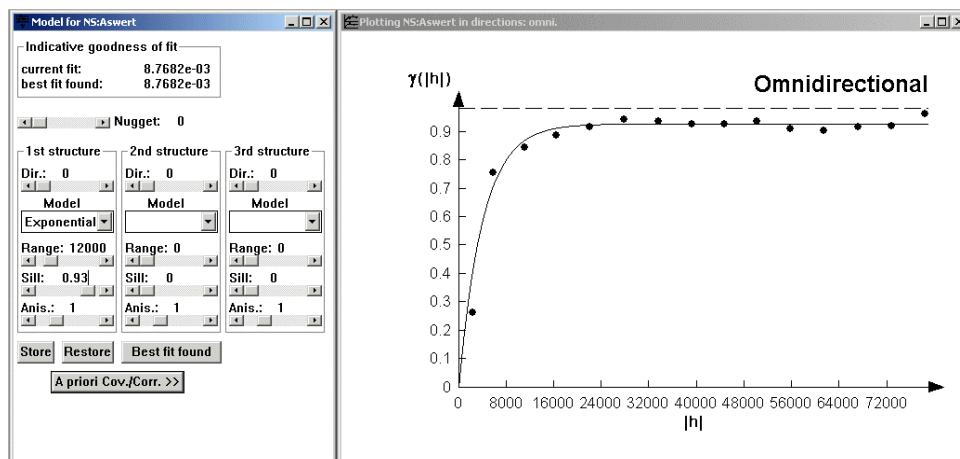
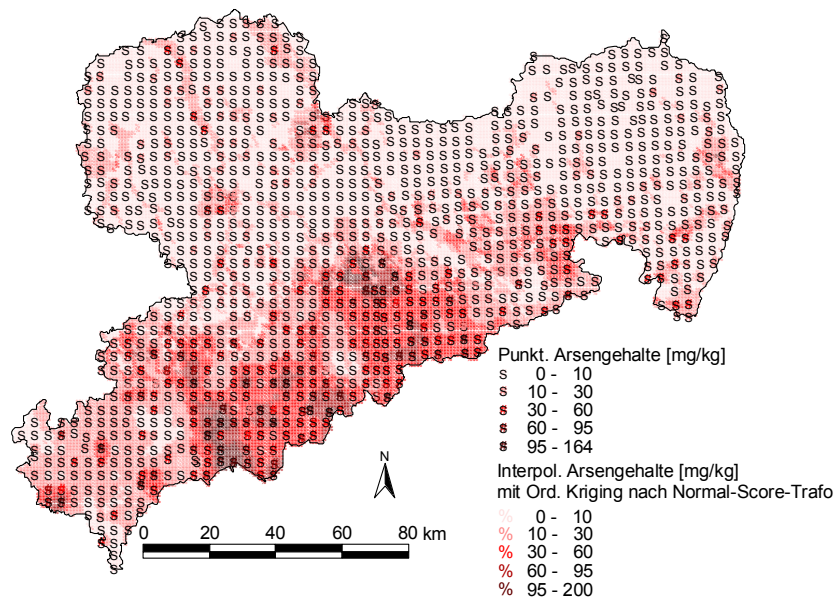


Abb. 2- 44: Anpassung eines theoretischen Variogramms der transformierten Arsengehalte.

### Interpolation

Die transformierten Arsengehalte wurden mit Hilfe des Ordinary Kriging interpoliert. Dabei wurde ein maximaler Suchradius von 20 km gewählt. Es wurden mindestens 2 Nachbarn und maximal 6 Nachbarn in die Interpolation einbezogen. Nach der Interpolation wurden die transformierten Arsengehalte der einzelnen homogenen Raumeinheiten rücktransformiert. Die dadurch resultierende Werteoberfläche der Arsengehalte ist in Abb. 2- 45 dargestellt.



**Abb. 2- 45: Räumliche Verteilung der mit dem Normal-Score-Kriging interpolierten Arsengehalte.**

### 2.4.3.3 Lognormal Kriging mit z-Transformation

Im Folgenden wird das Lognormal Kriging für die Interpolation der Arsengehalte beschrieben.

#### Interpolationsmodell

Das hier angewendete Interpolationsverfahren basiert auf dem folgenden Modell:

$$As(x) = \sum_{i=1}^n (\exp(As_{\text{std}}(x)\sigma_i + a_i)) 1_{A_i}(x)$$

Dabei bezeichnet  $As(x)$  den räumlichen Prozess der Arsengehalte. Dieser wird als Summe aus Prozessen der  $n$  homogenen Raumeinheiten aufgefasst. Die homogenen Raumeinheiten werden durch räumliche Indikatorfunktionen  $1_{A_i}$  beschrieben. Die Prozesse der einzelnen homogenen Raumeinheiten werden als lognormal verteilt mit unterschiedlichen Mittelwerten und Varianzen angesehen. Daher werden sie mit Hilfe der Logarithmusfunktion transformiert und mit der z-Transformation auf gleichen Mittelwert 0 und gleiche Standardabweichung 1 standardisiert. Die Gleichung der z-Transformation lautet dabei:

$$z = (x - a) / \sigma$$

Dabei bezeichnet  $a$  den Mittelwert und  $\sigma$  die Standardabweichung der betrachteten Variable. Da die Arsengehalte in den einzelnen Raumeinheiten unterschiedliche Mittelwerte und Streuungen aufweisen, werden für die z-Transformation die für diese Raumeinheiten spezifischen Mittelwerte  $a_i$  und Standardabweichungen  $\sigma_i$  verwendet.

Der Prozess  $As_{\text{std}}$  wird als stationär und autokorrelativ angesehen. Für diesen kann also das Variogramm bestimmt werden, und er kann unter Verwendung des Ordinary Kriging interpoliert werden. Der Interpolationsschätzer  $\hat{as}_{\text{std}}(x)$  verwendet die durch die Normal-Score-



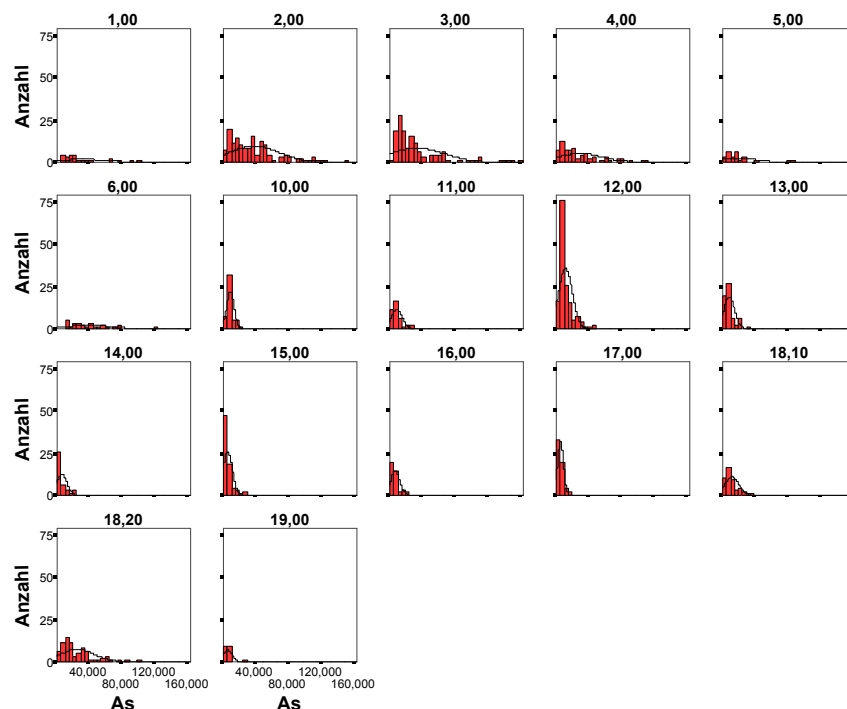
Transformationen standardisierten Nachbarwerte des zu interpolierenden Punktes. Der Gesamt-schätzer des Prozesses  $As$  lautet dann

$$\hat{as}(x) = \sum_{i=1}^n \left( \exp(\hat{as}_{\text{std}}(x) + \frac{1}{2} \sigma_i^2 \sigma_{as}^2(u) - \lambda) \sigma_i + a_i \right) 1_{A_i}(x)$$

Wie in den Grundlagen im ersten Teil dieses Berichts erläutert ist, wird für die Rücktransformation des Lognormal-Kriging-Schätzers sowohl die Krige-Varianz  $\sigma_{as}$  als auch der Lagrange Multiplikator  $\lambda$  benötigt. Bei diesem Interpolationsverfahren werden also die in der Regel rechtsschiefen Verteilungen symmetrisiert und auf gleichen Mittelwert und gleiche Standardabweichung standardisiert.

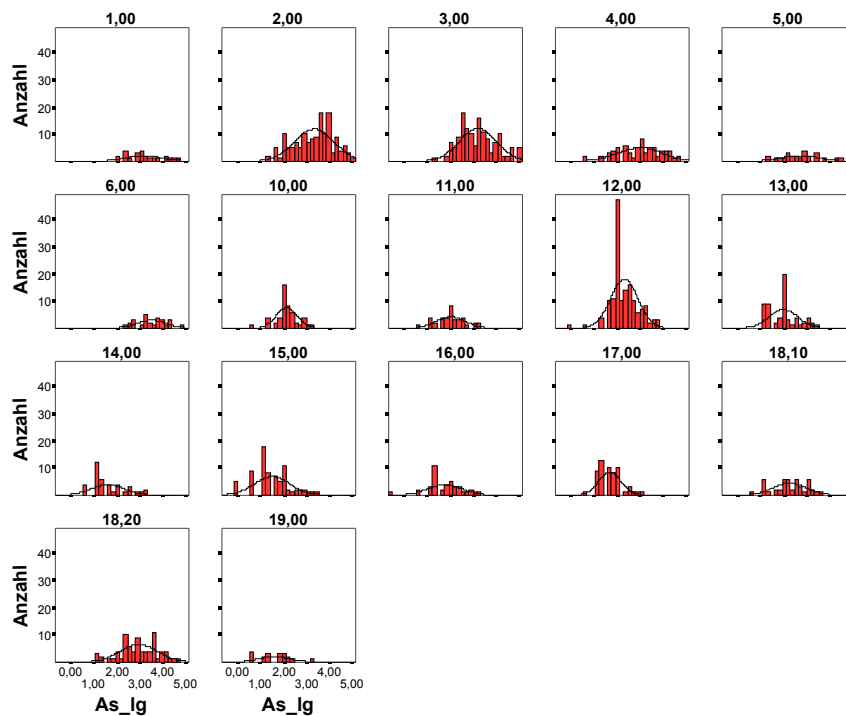
### Transformation und Standardisierung

Die Daten der Arsengehalte werden mit Hilfe der Logarithmusfunktion transformiert. Dadurch wird ihre Verteilung in den einzelnen Raumeinheiten symmetrisiert. In Abb. 2- 46 sind Histogramme der Verteilungen der Arsengehalte in den einzelnen homogenen Raumeinheiten dargestellt. In allen Raumeinheiten sind die Arsengehalte rechtsschief verteilt. Die transformierten Daten sind in Abb. 2- 47 dargestellt. Man erkennt, dass die Verteilungen durch die Transformation wesentlich symmetrischer werden. Mit Hilfe des K-S-Tests wurde geprüft, ob



**Abb. 2- 46:** Histogramme der Verteilungen der Arsengehalte in den einzelnen homogenen Raumeinheiten.





**Abb. 2- 47: Histogramme der transformierten Arsengehalte in den einzelnen Raumeinheiten.**

die transformierten Verteilungen Normalverteilungen entsprechen. Außer für Raumeinheit 12 wurden keine signifikanten Unterschiede zu einer Normalverteilung festgestellt.

Nach der Transformation wurden die Daten mit der z-Transformation standardisiert. Die gemeinsame Verteilung der transformierten und standardisierten Daten ist in Abb. 2- 48 dargestellt. Diese entspricht ebenfalls gut einer Normalverteilung.

### Variogrammanalyse

Bevor die transformierten Arsengehalte interpoliert werden, wird deren räumlicher Zusammenhang analysiert. Für die Berechnung des experimentellen Variogramms wurde eine Lag-Weite von 5.9 km gewählt. Das isotrope Variogramm und die Variogrammoberfläche sind in Abb. 2- 49 dargestellt. Man erkennt eine leichte Anisotropie zwischen den Richtungen Südwest-Nordost und Nordwest-Südost. Da sich diese jedoch nur undeutlich in den richtungsabhängigen experimentellen Variogrammen wieder fand, wurde im Weiteren mit einem isotropen Variogramm gearbeitet.

In Abb. 2- 50 ist die Anpassung eines theoretischen Variogramms an das experimentelle Variogramm der transformierten Arsengehalte dargestellt. Es wurde ein exponentielles theoretisches Variogramm gewählt:

$$\gamma(h) = 0.98(1 - \exp(-3h/11300))$$

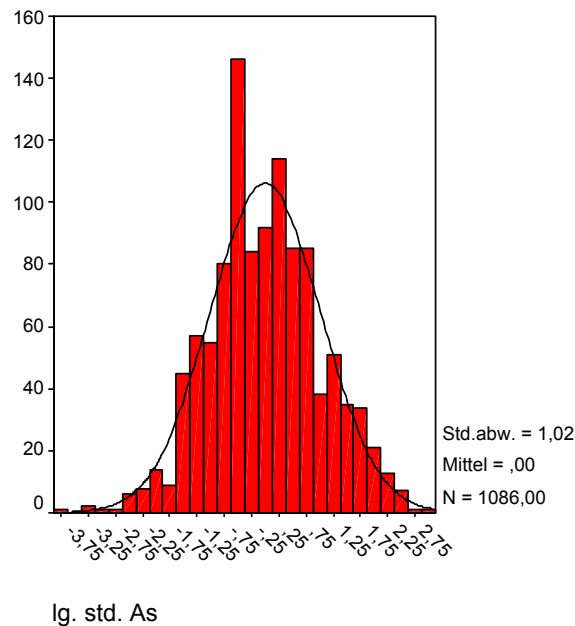


Abb. 2- 48: Gemeinsame Verteilung der transformierten und standardisierten Daten des Arsengehalts.

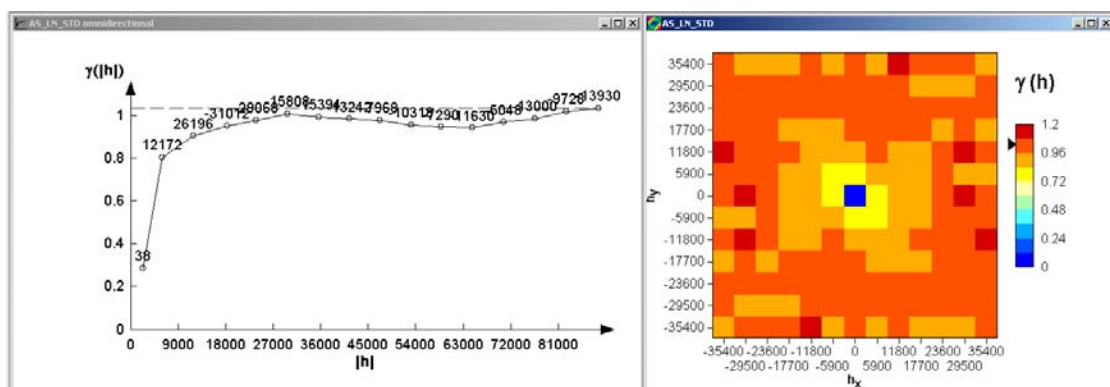


Abb. 2- 49: Isotropes Variogramm und die Variogrammoberfläche der standardisierten und transformierten Arsengehalte.

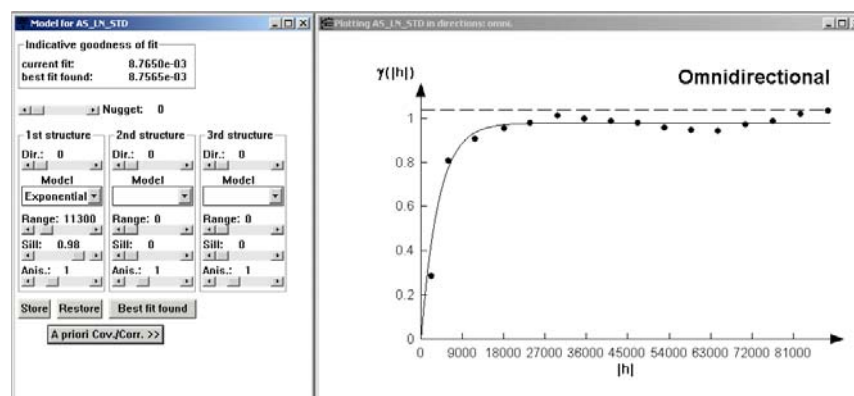
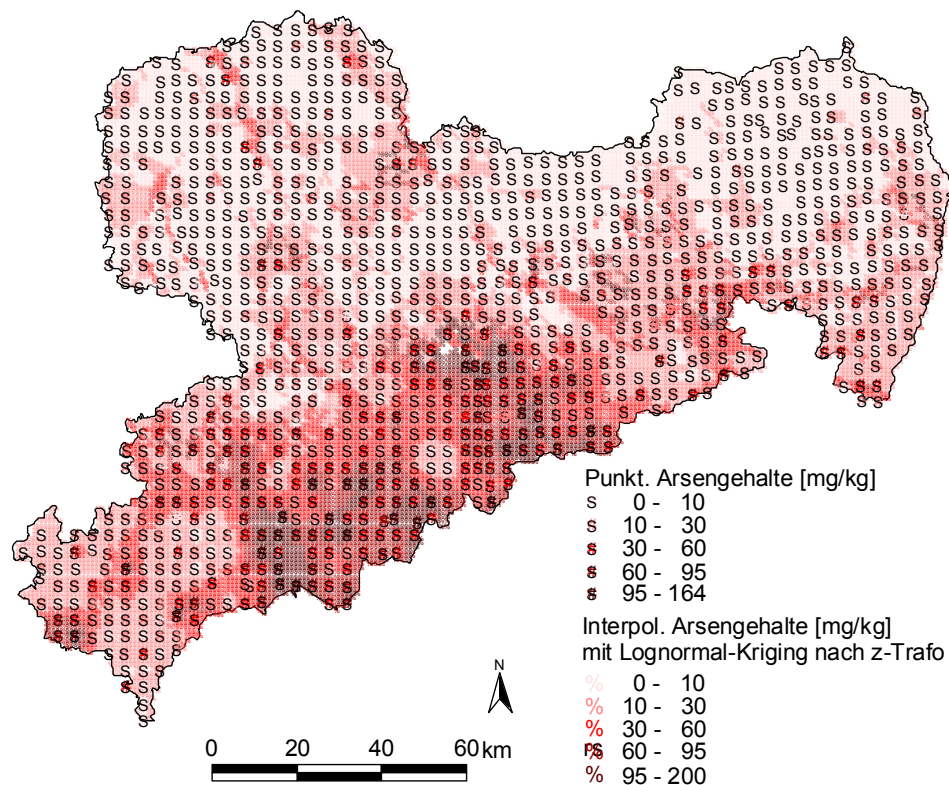


Abb. 2- 50: Anpassung des theoretischen Variogramms der stand. und transf. Arsengehalte.

## Interpolation

Die transformierten Arsengehalte wurden mit Hilfe des Ordinary Kriging interpoliert. Dabei wurde ein maximaler Suchradius von 20 km gewählt. Es wurden mindestens 2 Nachbarn und maximal 6 Nachbarn in die Interpolation einbezogen. Nach der Interpolation wurden die transformierten und standardisierten Arsengehalte der einzelnen homogenen Raumeinheiten rücktransformiert und destandardisiert. Die dadurch resultierende Werteoberfläche der Arsengehalte ist in Abb. 2- 51 dargestellt.



**Abb. 2- 51: Räumliche Verteilung des Arsengehalts, interpoliert durch das Lognormal Kriging.**

### 2.4.3.4 Kreuzvalidierung

In den vorausgegangenen Abschnitten wurden drei Verfahren zur Interpolation von Arsengehalten vorgestellt. Im Folgenden wird deren Güte bestimmt, und sie werden miteinander verglichen. Hierzu wird die im 1. Teil dieses Berichts erläuterte Methode der Kreuzvalidierung verwendet.

Mit Hilfe einer Kreuzvalidierung wird der Arsengehalt an seinen Messpunkten noch einmal geschätzt. Dadurch können die Charakteristika der Schätzwerte eines Interpolationsverfahrens mit den wahren Werten und unterschiedliche Interpolationsverfahren miteinander verglichen werden. In Tabelle 2- 36 sind verschiedene statistische Kennwerte der wahren Werte und der Schätzwerte der drei oben beschriebenen Interpolationsverfahren aufgelistet. Die aufgelisteten statistischen Kennwerte beziehen sich auf Lagemaße (Mittelwert und Median, Minimum und Maximum), Streuungsmaße (Standardabweichung) und verschiedenen Quantile (25%- und



75%-Quartil). Diese geben einen guten Überblick über die Eigenschaften der betrachteten Verteilung. Die Ähnlichkeit der statistischen Kennwerte der geschätzten Werte mit denen der wahren Werte ist ein erstes Maß für die Qualität des verwendeten Interpolationsverfahrens. Wie man aus der Tabelle erkennt, bildet das Lognormal Kriging mit z-Transformation alle aufgeführten Charakteristika bis auf den Median und das 25%-Quartil am besten von den drei Verfahren nach. Das Kriging nach Normal-Score-Transformation scheidet bei diesen beiden statistischen Kennwerten besser ab als das Lognormal Kriging mit z-Transformation. Das Ordinary Kriging mit Standardisierung durch geometrische Mittelwerte ist für keine Kennwert besser als die beiden anderen Verfahren.

**Tabelle 2- 36: Auswertung der Kreuzvalidierung mit Hilfe statistischer Kennwerte.**

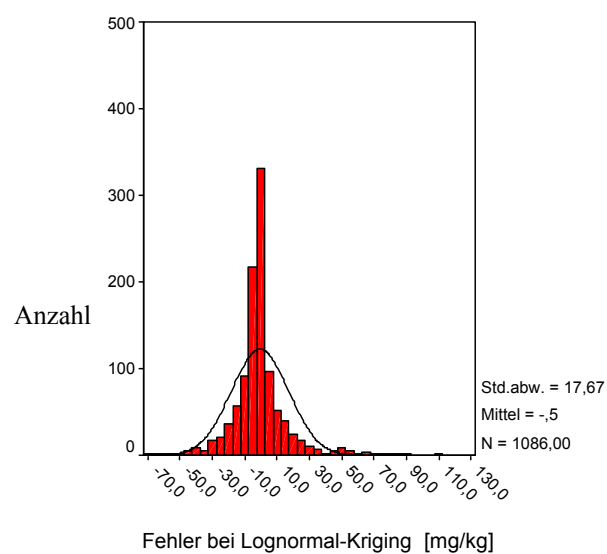
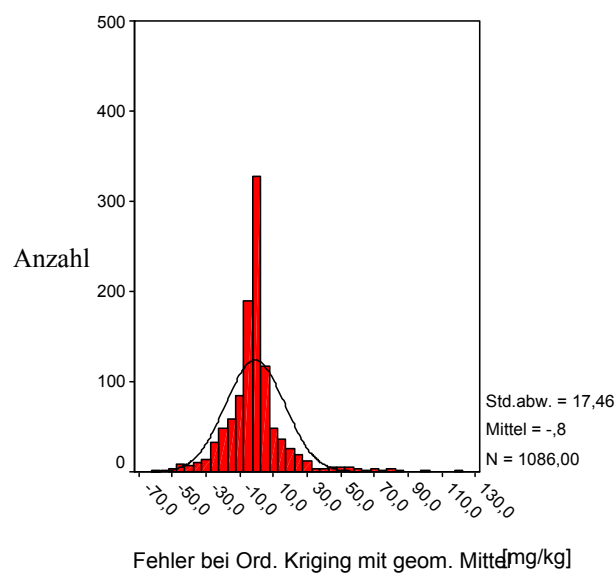
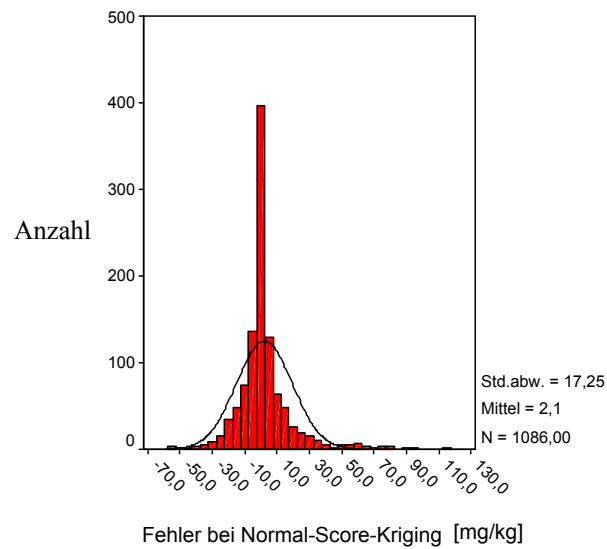
Statistische Kennwerte	Wahre Werte	LogNormal mit z-Trafo	Ordinary Kriging mit geom. Mittel	Normal Score Kriging
<b>Arithmet. Mittel</b>	20.35	20.87	21.17	18.2
<b>Median</b>	11	12.81	13.36	10
<b>Schiefe</b>	2.54	1.88	1.56	1.82
<b>Standardabweichung</b>	23.64	19.6	19.28	17.58
<b>Minimum</b>	0.5	1.63	2.24	2
<b>Maximum</b>	164	153.59	120.83	114
<b>25%-Quartil</b>	6	7.55	7.22	7
<b>75%-Quartil</b>	25	27.41	29.27	24.01

In Tabelle 2- 37 sind statistische Kennwerte der durch die unterschiedlichen Interpolationsverfahren resultierenden Schätzfehler aufgeführt. Eine Interpolationsverfahren ist gut, wenn seine Fehler klein sind. Damit sollte das Mittel und der Median der Fehlerverteilung eines Interpolationsverfahrens nahe bei 0 sein, ebenso die Standardabweichung der Fehler. Eine Schiefe von nahe 0 deutet an, dass keine systematischen Über- bzw. Unterschätzungen auftreten. Je kleiner der mittlere absolute (MAS) und der mittlere quadratische (MQS) Fehler ist, desto besser ist die Qualität des Interpolationsverfahrens. In Tabelle 2- 37 erkennt man, dass das Mittel der Fehler des Lognormal Kriging mit z-Transformation am kleinsten ist, der Median jedoch bei dem Kriging nach Normal-Score-Transformation. Alle Interpolationsverfahren weisen eine Schiefe zwischen 1 und 2 auf. Die Fehlerverteilungen sind rechtsschief. Die Histogramme der Fehler in Abb. 2- 52 zeigen jedoch, dass bei keinem der Interpolationsverfahren eine starke Schiefe vorliegt. Die Standardabweichung der Fehler ist bei dem Lognormal Kriging mit z-Transformation am kleinsten. Der kleinste Fehler tritt bei dem Kriging nach Normal-Score-Transformation auf, der kleinste größter Fehler bei dem Lognormal Kriging mit z-Transformation. Das Kriging nach Normal-Score-Transformation weist sowohl den kleinsten MAS als auch den kleinsten MQS auf. Die Korrelation zu den wahren Werten ist bei den letztgenannten beiden Verfahren gleich groß. Ein auch für die beiden anderen typisches Streudiagramm zwischen wahren und den durch das Lognormal Kriging geschätzten Werten ist in Abb. 2- 53 dargestellt. Das Ordinary Kriging nach Standardisierung mit geometrischen Mittelwerten weist im Allgemeinen die größten Fehler auf.

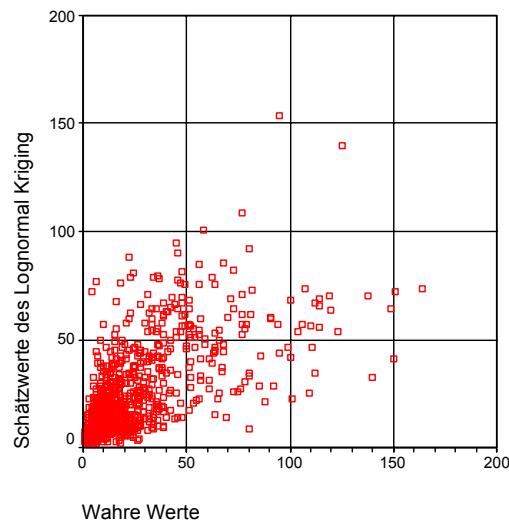


**Tabelle 2- 37: Auswertung der Kreuzvalidierung mit Hilfe statistischer Kennwerte der Residuen.**

Statistische Kennwerte der Residuen	LogNormal mit z-Trafo	Ordinary Kri- ging mit geom. Mittel	Normal Score Kriging
Arithmet. Mittel	-0.52	-0.826	2.14
Median	-1.39	-1,43	0
Schiefe	1.322	1.41	1.85
Standardabweichung	16.67	17.5	17.25
Kleinsten Fehler	-71.03	-62.03	-56,0
Größter Fehler	108.63	120.6	117
MAS	10.6	10.81	9.96
MQS	312.1	305.17	301.98
Andere Kennwerte			
Rangkorrelationskoeffizient	0.744	0.732	0.744
Stichprobenanzahl	1086	1086	1086



**Abb. 2- 52: Fehlerverteilungen der unterschiedlichen Interpolationsverfahren.**



**Abb. 2- 53: Streudiagramm der wahren und geschätzten Werte beim Lognormal Kriging.**

Neben dem Vergleich von bestimmten Verteilungscharakteristika zwischen der Verteilung der wahren und der Verteilung der geschätzten Werte können auch die Verteilungen als ganzes miteinander verglichen werden. Dazu nutzt man so genannten Q-Q-Plots. Bei einem Q-Q-Plot (Quantil-Quantil-Plot) werden zwei Verteilungen in ein Diagramm eingetragen. Man bildet Datenpunkte  $(x_i, y_i)$  so, daß  $P(X < x_i) = P(Y < y_i)$  gilt. Die beiden Koordinaten werden also durch die identische Position in der jeweiligen kumulierten Wahrscheinlichkeitsverteilung bestimmt. In Abb. 2- 54 sind die Q-Q-Plots der Schätzverteilungen der drei Interpolationsverfahren im Vergleich zu den wahren Werten dargestellt. Alle drei Verfahren zeigen im unteren Bereich der Verteilung eine gute Übereinstimmung mit der der wahren Werte. Im oberen Bereich erkennt man bei allen Verfahren die für Interpolationsverfahren typischen Unterschätzungen großer Werte.

Ein für den bodenschutzrechtlichen Vollzug wichtiger Hinweis auf die Güte eines Interpolationsverfahrens ist das korrekte Erkennen einer Überschreitung oder Unterschreitung eines bestimmten Grenzwertes der geschätzten Werte. Am Beispiel der Überschreitung des Wertes von 50 mg/kg, der ungefähr dem 90%-Perzentil der Arsen-Verteilung entspricht, sind in Tabelle 2- 38 die Anzahlen der korrekt und der nicht korrekt klassifizierten Schätzwerte der drei Interpolationsverfahren aufgeführt. Das Lognormal Kriging mit z-Transformation erkennt die meisten der Grenzwert-Überschreitungen, dementsprechend werden mit diesem Verfahren die wenigsten Werte oberhalb des Grenzwertes falsch klassifiziert. Mit dem Kriging nach Normal-Score-Transformation werden die meisten kleinen Werte unterhalb der gewählten Grenzwertes richtig klassifiziert. Da das Erkennen von starken Verschmutzungen eine wichtige Aufgabe des bodenschutzrechtlichen Vollzugs ist, ist das Lognormal Kriging als das beste dieser drei Verfahren anzusehen.



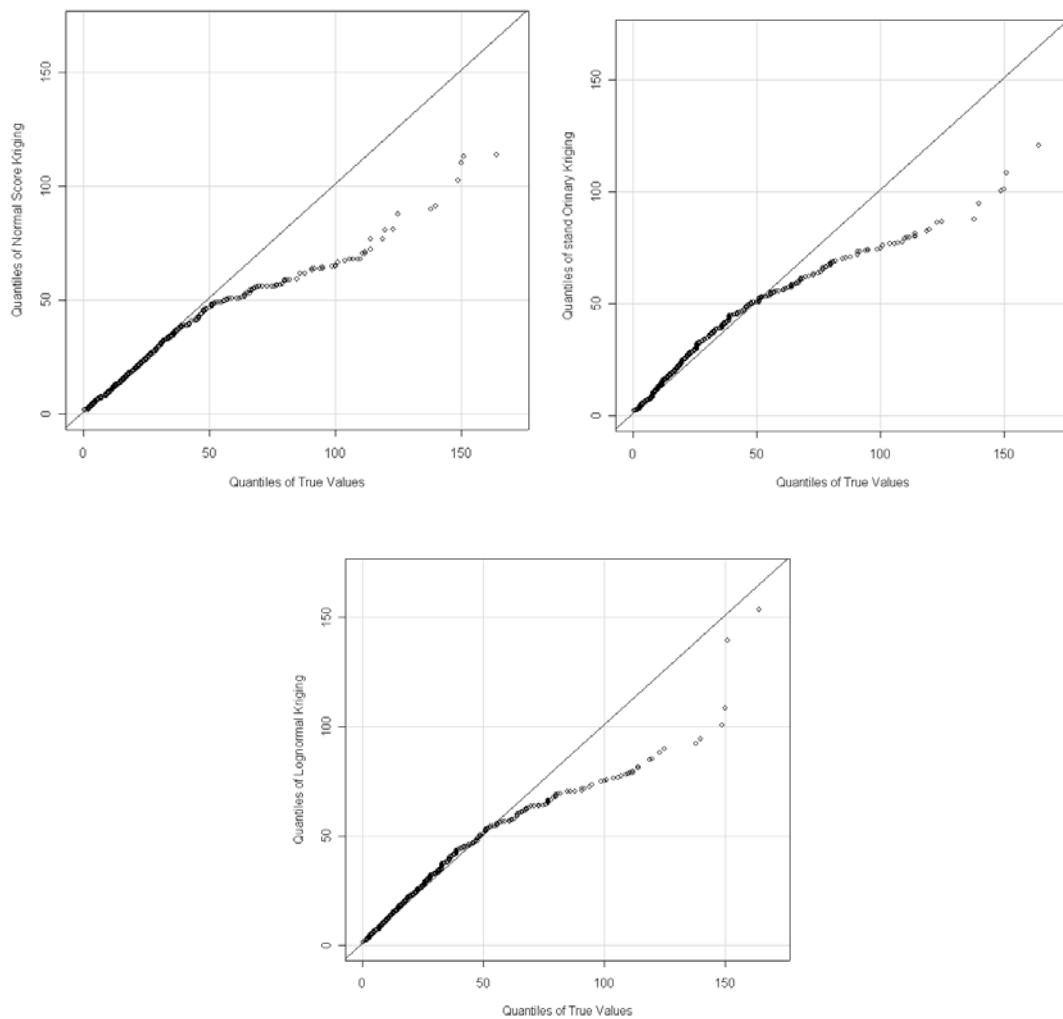
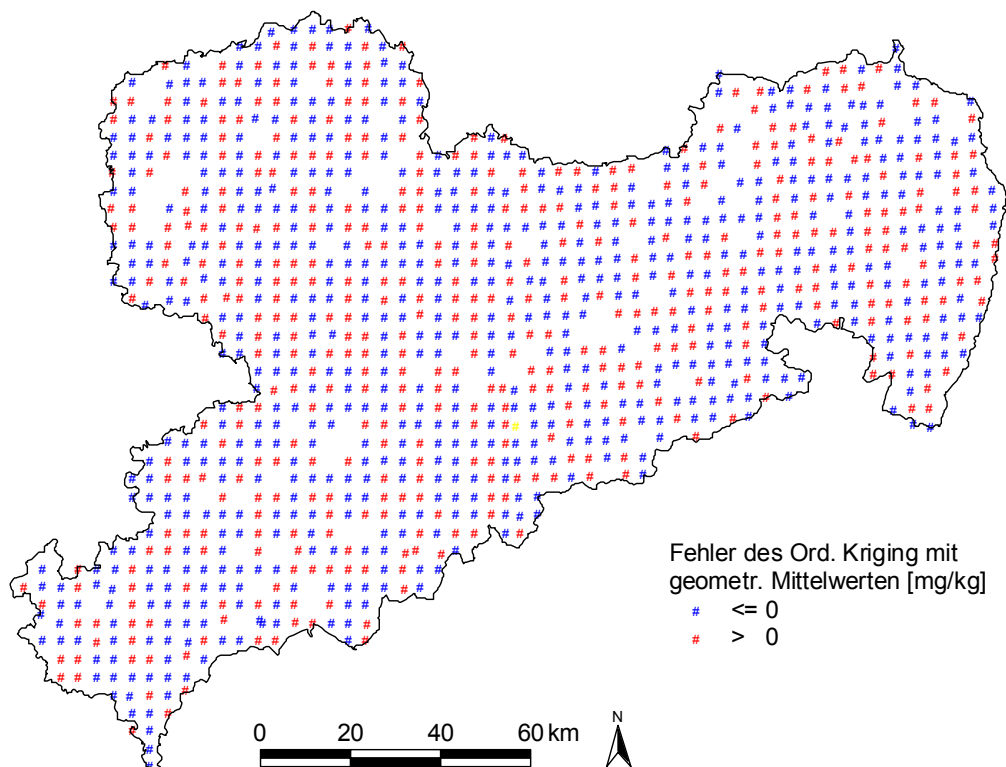


Abb. 2- 54: Q-Q-Plots der Verteilungen wahren und geschätzten Werte der verschiedenen Interpolationsverfahren.

Tabelle 2- 38: Anzahl der geschätzten Werte des Arsengehalts, die korrekt und nicht korrekt klassifiziert werden.

	(true<50) & (est<50)	(true≥50) )& (est≥50)	(true≥50) ) & (est<50)	(true<50) & (est≥50)
<b>Kriging nach Normal-Score Trafo</b>	938	44	64	40
<b>Ordinary Kriging mit geom. Mittel</b>	916	52	56	62
<b>Lognormal Kriging mit z-Trafo</b>	924	56	52	54



**Abb. 2- 55: Karte der Über- und Unterschätzungen.**

Ein weiteres Kriterium zur Abschätzung der Güte eines räumlichen Interpolationsverfahrens kann an der Karte der Über- und Unterschätzungen, wie sie in Abb. 2- 55 dargestellt ist, abgelesen werden. Ein Interpolationsverfahren sollte keine räumlichen Cluster von überschätzten bzw. unterschätzten Werten aufweisen. Wie in der Abbildung zu erkennen ist, treten im Fall des Ordinary Kriging mit geometrischen Mittelwerten keine derartigen räumlichen Cluster auf, die unterschätzten und überschätzten Werte erscheinen zufällig räumlich verteilt. Dieses gilt auch für die anderen beiden Interpolationsverfahren. Hierbei zeichnet sich keines der Verfahren vor den anderen aus.

Für die Verwendung des Lognormal Kriging mit z-Transformation sprechen die meisten der oben untersuchten Kriterien. Es wird daher empfohlen, dieses für die Abschätzung der räumlichen Verteilung des Arsengehalts zu verwenden.

In diesem ersten Auswertebispiel standen die Datenvorverarbeitung, die Ermittlung statistischer Kennwerte mit ihrer Aussagesicherheit und der Vergleich verschiedener Interpolationsverfahren im Mittelpunkt. Im zweiten Auswertebispiel wird im Folgenden ein besonderes Gewicht auf die Beschreibung der Aussagesicherheit von interpolierten Wertebereichen gelegt. Im abschließenden Fazit am Ende dieses Berichts wird ein Resümee aus beiden Auswertebispielen gezogen.

### 3 FALLBEISPIEL BADEN-WÜRTTEMBERG

Im Folgenden wird die statistische und geostatistische Auswertung der räumlichen Verteilung des Bleigehalts in der Staufener Bucht beschrieben. Durch eine Datenvorverarbeitung und -exploration wurden die wichtigsten räumlichen Charakteristika des Bleigehalts und die räumliche Repräsentativität der Stichprobe analysiert. Bei der weiteren räumlichen Untersuchung stand die Beschreibung der Aussagesicherheit der räumlichen Verteilung im Zentrum des Interesses.

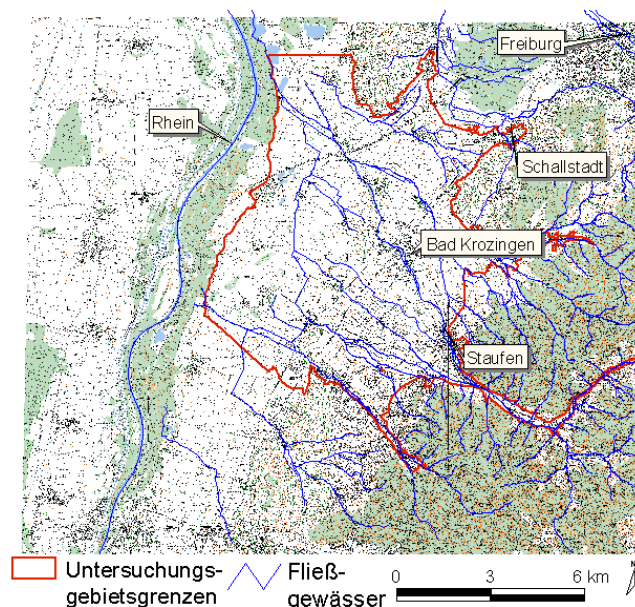
Dieses Kapitel ist folgendermaßen aufgebaut. Abschnitt 3.1 gibt einen Überblick über das Untersuchungsgebiet und die verwendete Datengrundlage. In Abschnitt 3.2 werden die Untersuchungsverfahren, die für die Auswertung des Bleigehalts verwendet wurden. In Abschnitt 3.2.2 werden dann die in der Auswertung gewonnenen Ergebnisse detailliert erläutert.

#### 3.1 Untersuchungsgebiet und Datengrundlage

Im folgenden wird die verwendete Datengrundlage und das Untersuchungsgebiet der Staufener Bucht beschrieben. Die Daten wurden vom Ministerium für Umwelt und Verkehr Baden-Württemberg zur Verfügung gestellt.

Das Untersuchungsgebiet der Staufener Bucht liegt im Süd-Westen von Baden-Württemberg zwischen Freiburg und dem Rhein im Breisgau. Im Osten bildet der Schwarzwald die Grenze, die Westgrenze verläuft entlang des Rheins, die sich ihm jedoch nicht um weniger als 620 m nähert. Das Gebiet hat eine maximale Nord-Südausdehnung von ca. 17 km und misst im Ost-West-Verlauf maximal 18 km. Im Osten und Südosten bildet es drei längere schmale Ausläufer, die sich über die Flussgebiete der Möhlin, des Neumagens und des Sulzbachs erstrecken (vgl. Abb. 3- 1).

Weitere Städte im Untersuchungsgebiet sind Staufen, Bad Krozingen, Eschbach und Schallstadt. Zahlreiche Flüsse durchqueren das Gebiet, wie z. B. der Neumagen und der Seltenbach.



**Abb. 3- 1: Untersuchungsgebiet Staufener Bucht.**



An den Probenahmestellen liegen die punktbasierten Werte der Stoffgehalte und die Begleitinformationen (vgl. Tabelle 3- 1) vor. In flächenhafter Darstellung liegen Angaben über die in der weiteren Analyse verwendete Raumeinheiten, Fließgewässer, Verdachtsflächen, Verteilung der erhöhten Schwermetalle, die Topographie und einer Bodenkarte vor.

Die Punkt- und Flächendaten sind in verschiedenen Formaten abgelegt. Die punktuellen Daten liegen als dbf-Tabellen (dBASE-file), die Flächendaten in den ESRI-Formaten (shape, grid) vor (vgl. Tabelle 3- 1).

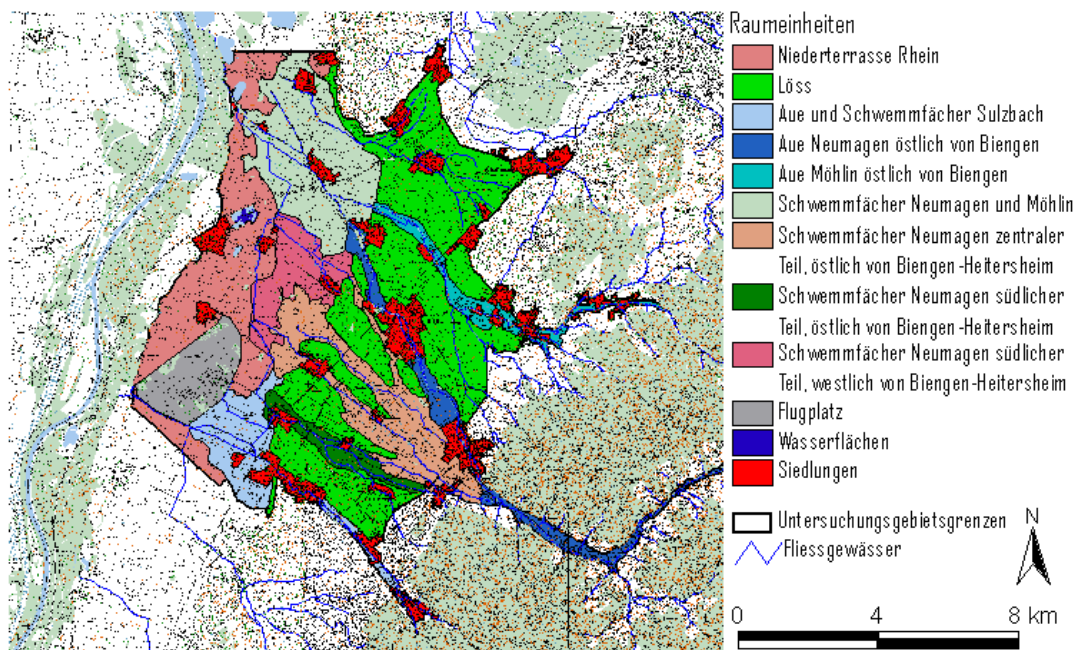
**Tabelle 3- 1: Daten und deren Formate.**

Datensatz	Datenformat
Punktdaten im Gauß-Krüger-Koordinatensystem im Dreier-Streifen der Probenahmestellen (Probennummer, Datum, Bodentyp, Horizontbezeichnung, Bodenart, Ton-, Schluff- und Sandgehalte, Humus- und Karbonatgehalte, Stoffgehalte von As, Pb, Cd, Cr, Cu, Ni, Hg, Zn, Ti, Co, Bi, Ba, Ag, Sb, Ur, Mo, Rb, Sr, Zr nach verschiedenen Aufschluss- bzw. Extraktionsmethoden, PAK, Raumkategorien, Nutzung, Ausgangsgestein)	DBASE-Files
Karte der Raumeinheiten Staufener Bucht	Shape-File
Bodenkarte	Shape-File
Verdachtsflächenkarte	Shape-File
Topographische Karten des Untersuchungsgebietes	Tif-Dateien
Karte der Fließgewässer	Shape-File
Karte der erhöhten Schwermetallgehalte	Shape-File

Die Lage der Probenahmepunkte wird durch die Rechts- und Hochwerte im Gauß-Krüger-Koordinatensystem angegeben. Der Verteilung der Probenahmepunkte liegt kein gleichmäßiges Gitter zu Grunde. Die Proben wurden im Allgemeinen in einer Tiefe von 0-30 cm genommen, unter Grünland beträgt die Probenahmetiefe 0-10 cm. Die Proben zur Analyse der Schwermetallgehalte wurden drei verschiedenen Auswertemethoden unterzogen. Es liegen Ergebnisse zur Königswasser-, Ammoniumnitratextraktion und RFA-Analysen vor.

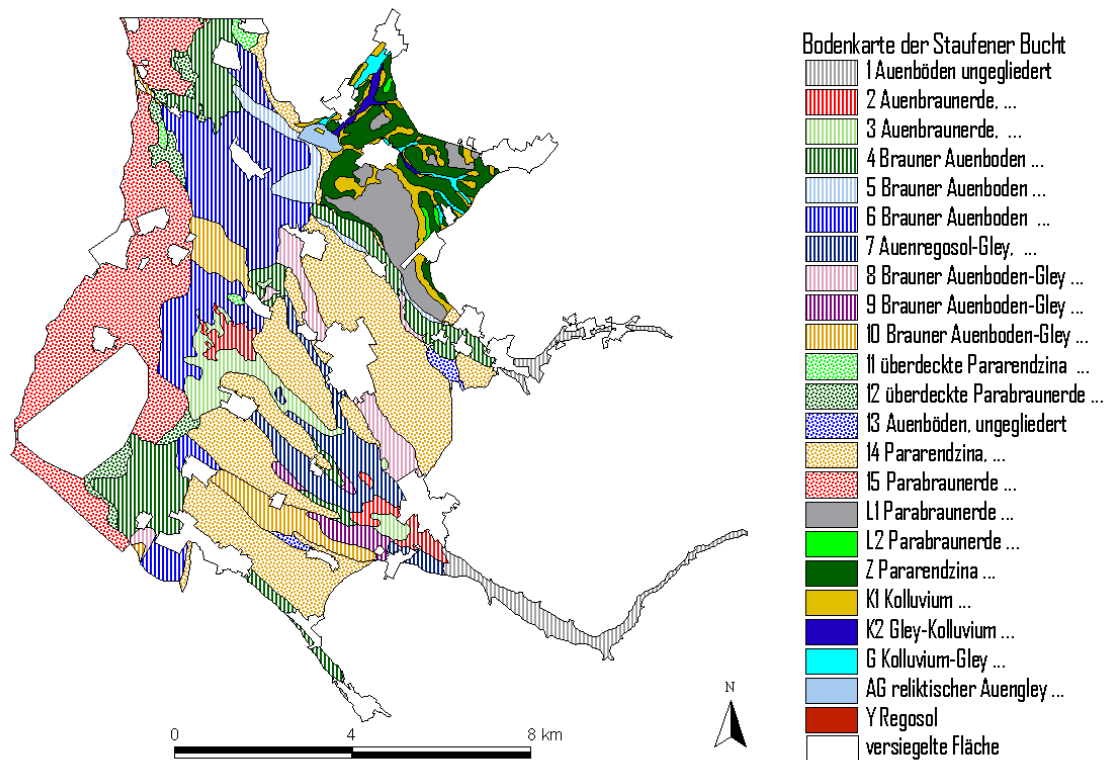
In der Karte der homogenen Raumeinheiten sind Gebiete, in denen mit ähnlichen Stoffgehalten gerechnet werden kann, zusammengefasst. Diese Raumeinheiten sind anhand gleicher oder ähnlicher Einflussfaktoren erstellt worden. Es wurden die Faktoren Bodentyp, Substrat, das Vorkommen von Überschwemmungen und die punktuellen Schwermetallgehalte berücksichtigt.

Es wurden 12 verschiedene Raumeinheiten unterschieden (vgl. Abb. 3- 2). Zum einen sind dies die Auen von der Möhlin, dem Sulzbach und dem Neumagen, des weiteren vier Schwemmfächer, die Niederterrasse des Rheins, eine Löss-Einheit, ein Flugplatz und Siedlungs- und Wasserflächen. Durch die Erstellung der Schwemmfächer- und Aueneinheiten entlang der Flüsse und Bäche wird die Überflutung stark berücksichtigt. Der flächenmäßig größte Teil wurde der Raumeinheit Löss zugewiesen. Er erstreckt sich in der Osthälfte von Norden nach Süden und wird von den Schwemmfächern, Auen und Siedlungsgebieten unterbrochen. Die östliche Hälfte wird von der Niederterrasse des Rheins dominiert, wobei der Schwemmfächer des Neumagens und der Möhlin ebenfalls großräumig vertreten sind.



**Abb. 3- 2: Raumeinheiten der Staufener Bucht.**

Eine Grundlage für die Ermittlung der homogenen Raumeinheiten ist die Bodenkarte der Staufener Bucht. Diese ist differenzierter, als die Karte der Raumeinheiten. Auffällig ist, dass im Nordosten des Gebietes die Bodentypen kleinräumig wechseln. Die Verteilung der anderen Bodentypen hingegen umfassen meist größere Flächen. Im Westen erstreckt sich von Norden nach Süden Parabraunerde aus Kiesen und Sanden der Rheinniederterrasse. Der Osten wird von Pararendzina, Parabraunerde und Kolluvium aus Löss und Schwemmlöss dominiert. Brauner Auenboden und Gley – Brauner Auenboden aus sandigem bis schluffigem Lehm ist in der Mitte des Untersuchungsgebietes zu finden (Abb. 3- 3).



### Legende der Bodenkarten Staufener Bucht

- 1 Auenböden ungegliedert
- 2 Auenbraunerde, untergeordnet Auenregosol und Brauner Auenboden aus kies- und steinreichem lehmigem Sand bis sandigem Lehm über Kies
- 3 Auenbraunerde, untergeordnet Brauner Auenboden aus kiesig-steinigem sandigem Lehm bis sandig-lehmigem Schluff über Kies
- 4 Brauner Auenboden und Gley – Brauner Auenboden aus lehmigem Schluff bis schluffigem Lehm teilweise mit geringen Kiesgehalten, über kiesig-lehmigem Sand oder Kies
- 5 Brauner Auenboden und Gley – Brauner Auenboden aus lehmigem Schluff über schluffigem Lehm, vereinzelt tonreichere Unterböden
- 6 Brauner Auenboden und Gley – Brauner Auenboden aus sandigem bis schluffigem Lehm, teilweise Unterböden aus tonigem Lehm bis lehmigem Ton – dann pseudovergleyt
- 7 Auenregosol-Gley, Brauner Auenboden-Gley und Gley aus kies- und steinreichem sandigem Lehm bis sandig-lehmigem Schluff über Sand und Kies
- 8 Brauner Auenboden-Gley und Gley aus kiesigem sandigem Lehm bis schluffigem Lehm über Kies
- 9 Brauner Auenboden-Gley und Gley aus kiesigem sandigem Lehm bis schluffigem Lehm über Kies
- 10 Brauner Auenboden-Gley und Gley aus lehmigem Schluff bis schluffigem Lehm über kiesig-lehmigem Sand, teilweise Unterböden aus tonigem Lehm bis lehmigem Ton – dann pseudovergleyt
- 11 überdeckte Pararendzina aus schluffigem Lehm bis schluffig-tonigem Lehm über Schluff (Löss, Schwemmlöss)
- 12 überdeckte Parabraunerde aus kiesig-lehmigem Sand bis sandigem Lehm über kiesig-sandig-tonigem Lehm und Kies (Rheinniederterrasse)
- 13 Auenböden, ungegliedert
- 14 Pararendzina, Parabraunerde und Kolluvium aus Löss und Schwemmlöss
- 15 Parabraunerde aus Kiesen und Sanden der Rheinniederterrasse
- L1 Parabraunerde, mäßig tiefgründig bis tiefgründig, aus schluffig bis schluffig-tonigem Lehm (6- >

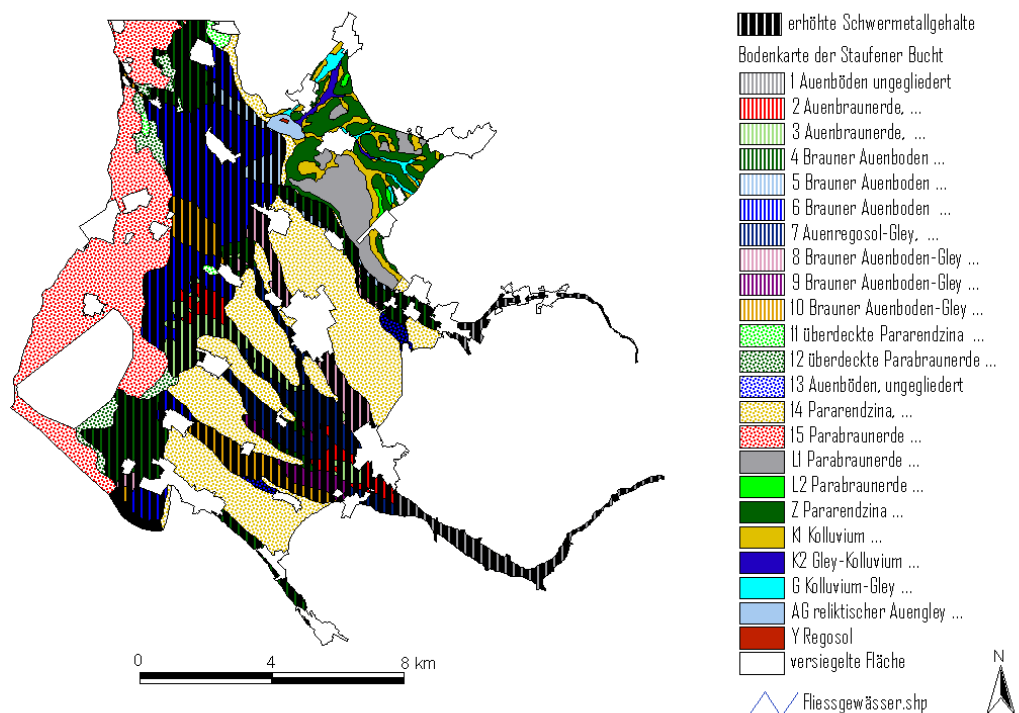


- 10dm) über Schluff; Kalkführung ab 6 bis >10 dm u.GOF
- L2 Parabraunerde, mittelgründig, erodiert, aus schluffigem Lehm (3-5 dm) über schluff; Kalkführung ab 3 bis 5 dm u. GOF
- Z Pararendzina, mäßig tiefgründig bis tiefgründig, aus lehmigem Schluff (0-5 dm) über Lehm; Kalkführung ab GOF
- K1 Kolluvium, tiefgründig, selten mit Vergleungsmerkmalen oberhalb 1 m u. Fl.; aus lehmigem Schluff bis schluffigem Lehm; Kalkführung i.d.R. ab GOF; natürlicher GW-Stand 12-20 dm u. GOF
- K2 Gley-Kolluvium aus schluffigem Lehm bis lehmigem Schluff; Kalkführung ab GOF; natürlicher GW-Stand 6-18 dm u. GOF
- G Kolluvium-Gley und Gley aus schluffig bis schluffig-tonigem Lehm (4-10 dm) über Schluff bis lehmigem Schluff; Kalkführung ab GOF; natürlicher GW-Stand 4-10 dm u. GOF
- AG reliktscher Auengley bis Auenpseudogley-Auengley aus lehmigem Schluff bis schluffig-tonigem Lehm (2-12 dm) über lehmigem Ton; Kalkführung nur im Oberboden (aufgekalkt); natürlicher GW-Stand 4 bis 10 dm u.GOF
- Y Regosol

**Abb. 3- 3: Bodenkarte der Staufener Bucht.**

Auch in der Staufener Bucht sind die Auswirkungen von Überschwemmungen auf die Stoffgehalte im Boden zu sehen. Erhöhte Schwermetallgehalte sind hauptsächlich im Überschwemmungsgebiet der Flüsse zu finden (Abb. 3- 4). Die Auen und Schwemmfächer der Möhlin, dem Neumagen und dem Sulzbach weisen erhöhte Schwermetallgehalte auf.

Die Proben der Stoffgehalte wurden flurstücksbezogen in einer Tiefe von i. d. R. 0-30 cm genommen. Im Grünland betrug die Probennahmetiefe 0-10 cm. Es wurde der Feinboden untersucht.

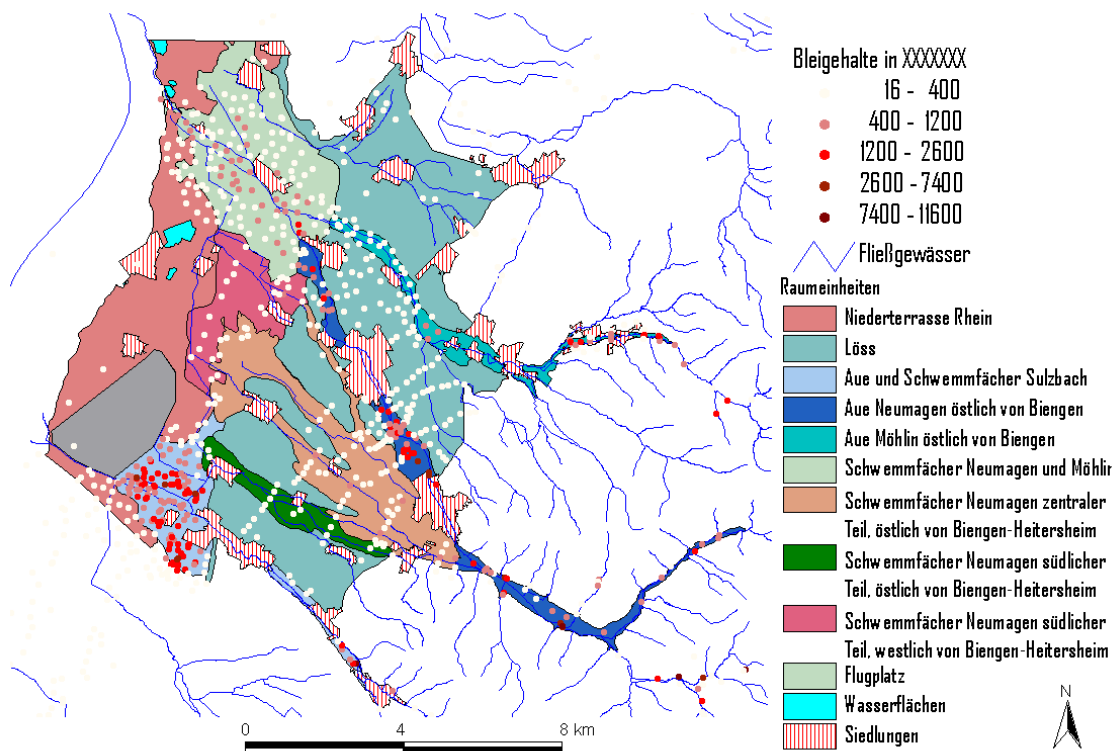


**Abb. 3- 4: Erhöhte Schwermetalle.**



Für die weitere Untersuchung wurde Blei verwendet, da Blei die höchste Untersuchungsdichte in der Staufener Bucht aufweist. Es wurden die Werte genommen, die durch den Königswasserextraktion analysiert worden sind.

In den Flussauen liegen die höchsten Werte von Blei. Besonders die Auen von Sulzbach und Neumagen weisen stark erhöhte Werte auf. Der höchste Wert des Untersuchungsgebietes wurde im Südosten der Aue des Neumagens gemessen. Er beträgt 11600 mg/kg. Der westliche Teil der Möhlinaue ist schwächer belastet. Die Werte reichen von 36 mg/kg bis zu 355 mg/kg. Der niedrigste Wert im Untersuchungsgebiet beträgt 16 mg/kg und liegt im Nordosten an der Grenze des Gebietes (vgl. Abb. 3- 5).



**Abb. 3- 5: Verteilung der gemessenen Bleiwerte mit dem Königswasserextraktion.**

## 3.2 Durchführung und Ergebnisse der statistischen Auswertung von Blei

In den folgenden Kapiteln werden die statistischen Auswertungen und die räumliche Interpolation des Bleigehaltes im Gebiet der Staufener Bucht detailliert beschrieben.

### 3.2.1 Datenvorverarbeitung und –exploration

In der Datenvorverarbeitung und –exploration wurden die betrachteten Daten des Bleigehalts auf die weiteren statistischen und geostatistischen Analysen vorbereitet. Die Daten wurden dazu harmonisiert und es wurde ihre räumliche Repräsentativität untersucht.

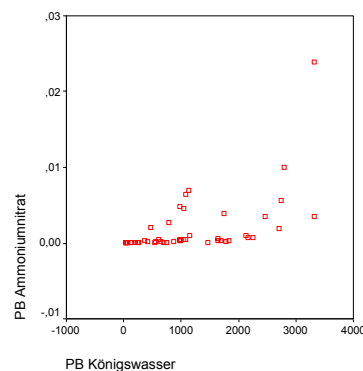
#### 3.2.1.1 Visualisierung der raumbezogenen Basisdaten

Das Untersuchungsgebiet und das den Auswertungen zugrundeliegende Datenmaterial in Form von Punkt- bzw. Flächeninformationen wurde in Abschnitt 3.1 vorgestellt. Zur Visualisierung

und Auswertung der räumlichen Zusammenhänge wurde die Software GIS ArcView der Firma ESRI Int. sowie das Softwarepaket SPSS verwendet.

### 3.2.1.2 Fachliche Datenvalidierung

Die Bodenproben des Bleigehaltes in der Staufener Bucht wurden mittels dreier unterschiedlicher Aufschluss- bzw. Extraktionsverfahren gewonnen. Den größten Teil des Datensatzes bilden mit 641 Beobachtungen die Königswasser-Extrakte. Hinzu kommen 81 Ammoniumnitrat-Extrakte und 2 RFA-Aufschlüsse. Von den Ammoniumnitrat-Extrakten stimmen 58 hinsichtlich der Probennahmestelle mit dem Datensatz der Königswassere-Extrakte überein. Damit liefern 23 der Ammoniumnitrat-Extrakte Informationen über unbekannte Punkte im Gebiet. Es könnte durchaus wertvoll sein, diese Zusatzinformationen zu verwenden. Eine solche Einbindung von Zusatzinformationen kann theoretisch über einen Regressionsansatz erfolgen, der ermöglicht die Werte auf eine andere Skala (hier: Skala der Königswasserextraktion) umzurechnen (vgl. (UBA 2002) S.A-26). Das Streudiagramm Abb. 3- 6 und der Korrelationskoeffizient der entsprechenden Punktwolke der 58 an jeweils derselben Stelle erhobenen Ammoniumnitrat- und Königswasser-Extrakte zeigen aber nur eine sehr schwache lineare Beziehung ( $R^2 = 0,3$ ). Deshalb wird auf eine Einbeziehung der 23 Ammoniumnitrat-Extrakte als Zusatzinformationen für unprobte Punkte im Raum verzichtet.



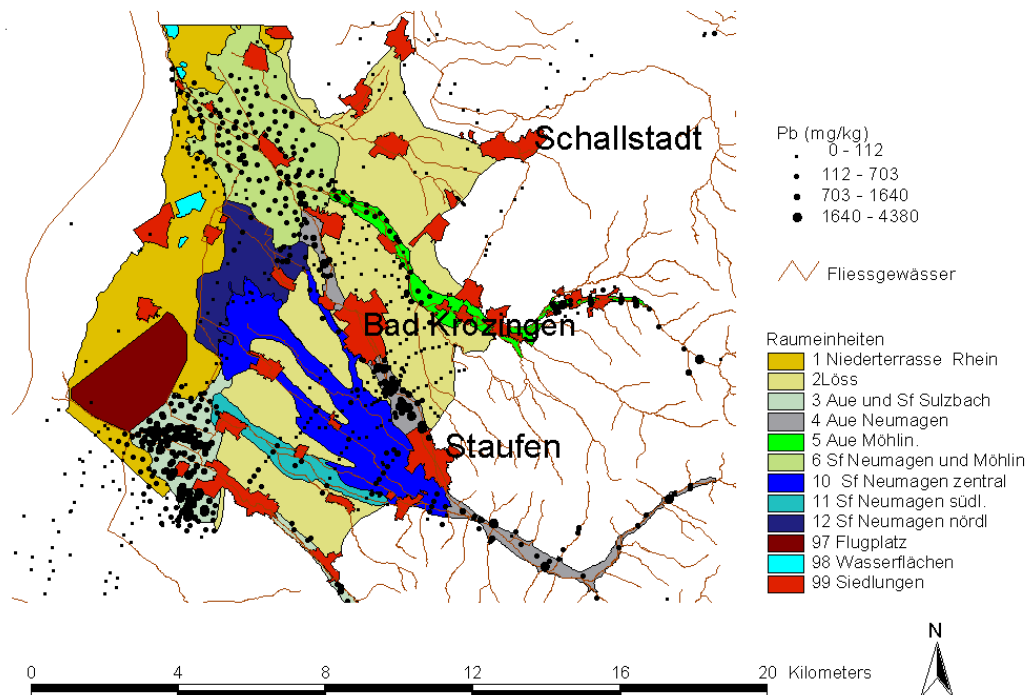
**Abb. 3- 6: Streudiagramm der Ammoniumnitrat- und Königswasserextrakte.**

Das Problem der Behandlung von Werten unterhalb der Bestimmungsgrenze existiert für den Bleidatensatz nicht, da keine Werte unterhalb der Bestimmungsgrenze vorkommen. Die Probenentnahmetiefe liegt zwischen 0-30 cm, speziell auf Grünlandflächen zwischen 0-10 cm. Die tatsächlich beprobte Tiefe wurde nicht dokumentiert, so dass im Hinblick darauf keine Validierung durchgeführt werden kann.

### 3.2.1.3 Bildung von Raumeinheiten

Die Abgrenzung der homogenen Raumeinheiten wurde in diesem Anwendungsfall bereits vom Datenlieferanten (Herr Waldmann) grob vorgegeben (vgl. Abschnitt 3.1). Dieses Vorgehen ist in der Praxis selten. In der Regel werden zunächst alle Kombinationen von Faktorstufen potentieller Einflussfaktoren gebildet. Diese stellen dann die Ausgangsmenge an homogenen Raumeinheiten dar. Auf Basis statistischer Auswertungen werden die homogenen Raumeinheiten anschließend neu definiert. Ein Beispiel für eine solche Vorgehensweise kann dem Fallbeispiel Sachsen (Kapitel 2.3) entnommen werden.

Zur Bildung der homogenen Raumeinheiten wurde die Staufener Bucht nach Auengebieten, Schwemmfächern und grob nach einigen Bodenarten differenziert. Der Faktor Nutzung hat im Falle des stark kontaminierten Bodens in der Staufener Bucht nach Expertenangabe einen vernachlässigbar geringen Einfluss.



**Abb. 3- 7: Raumeinheiten des Untersuchungsgebietes.**

Insgesamt wurde das Untersuchungsgebiet durch den Auftraggeber in 11 Raumeinheiten aufgeteilt (siehe Abbildung 3-7). Die Raumeinheiten Siedlung und Flugplatz werden aus der Analyse ausgeschlossen, da das primäre Untersuchungsinteresse den Außenbereichen von Siedlungen, d.h. den Gebieten gilt, die anthropogen nicht stark überformt wurden. Zudem würde es Schwierigkeiten bereiten, diese Gebiete auszuwerten, da sie unzureichend beprobt wurden.

Eine räumliche Interpolation verlangt, dass das zu interpolierende Gebiet von einer konvexen Hülle umgeben ist, damit die Daten wirklich *interpoliert* werden können und nicht *extrapoliert* werden müssen. Deshalb ist es erforderlich, die östlichen Bereiche der Auen Neumagen und Möhlin aus dem zu interpolierenden Gebiet auszuschließen. Weiterhin besteht der noch nicht näher untersuchte Verdacht, dass der Schwermetallgehalt mit Fließrichtung der Möhlin kontinuierlich abnimmt. Daher wurde entschieden, die oben genannten aus dem Kerngebiet herausragenden Bereiche bereits zu Beginn der Datenvorverarbeitung aus dem Datensatz auszuschließen.

Eine nähere Untersuchung der Entwicklung Schwermetallbelastung mit dem Flusslauf könnte sehr interessant sein und durch Regressionsanalysen ausgewertet werden. Der zeitliche Rahmen dieses Projektes lässt eine solche Untersuchung allerdings nicht zu.



#### 3.2.1.4 Klassifikation der Stoffgehalte nach Raumeinheiten

Die Grundlage der weiteren Analyse stellen die in Tabelle 3- 2 angegebenen, anhand der binären Variable Auengebiet und der nominalen Variable Bodenart gebildeten Raumeinheiten dar.

**Tabelle 3- 2: Stichprobenanzahl in den Raumeinheiten.**

Raumeinheiten	Anzahl der Stichprobenelemente
Niederterrasse	46
Löss	120
Aue S.f. Sultbach	129
Aue Neumagen	49
Aue Möhlin	22
S.f. Neumagen, Möhlin	121
S.f. Neumagen zentral	54
S.f. Neumagen südl.	12
S.f. Neumagen nördl.	24

#### 3.2.1.5 Güte- und Repräsentanzanalyse der Stichprobe

Zur Beurteilung der Repräsentativität der Stichprobe wird zunächst überprüft, ob alle Messwerte unterschiedliche Koordinaten besitzen. Dabei stellte sich heraus, dass acht Punkte jeweils zweimal (zu unterschiedlichen Zeitpunkten) beprobt worden sind. Für diese Probennahmestellen wird der Mittelwert der beiden Messungen berechnet und in den weiteren Auswertungen mitgeführt.

Weitere Fragestellungen sind, ob die einzelnen homogenen Raumeinheiten den Mindeststichprobenumfang einhalten und ob der prozentuale Anteil des Stichprobenumfanges einer homogenen Raumeinheit am Gesamtstichprobenumfang dem prozentualen Flächenanteil der Einheit an der Gesamtfläche des Untersuchungsgebietes entspricht.

Abschließend muss untersucht werden, ob sich die Stichprobe innerhalb der einzelnen Raumeinheiten gleichmäßig verteilt oder Clusterungen vorliegen.

#### Stichprobenumfänge in den homogenen Raumeinheiten

Tabelle 3- 3 enthält den um die doppelten Messungen reduzierten Stichprobenumfang für die Untersuchungsvariable Blei innerhalb der homogenen Raumeinheiten des Untersuchungsgebietes. Mit einer einzigen Ausnahme scheinen alle Raumeinheiten - die absolute Zahl betreffend – ausreichend beprobt worden zu sein. Nur der Stichprobenumfang der Raumeinheit 11 (Schwemmflächen Neumagen südl.) genügt mit 12 Elementen dem auf 20 Elemente festgesetzten Mindeststichprobenumfang nicht.



**Tabelle 3- 3: Prozentuale STP-Anteile der homogenen Raumeinheiten am Gesamtstichprobenumfang und prozentuale Flächenanteile der Raumeinheiten an Gesamtfläche.**

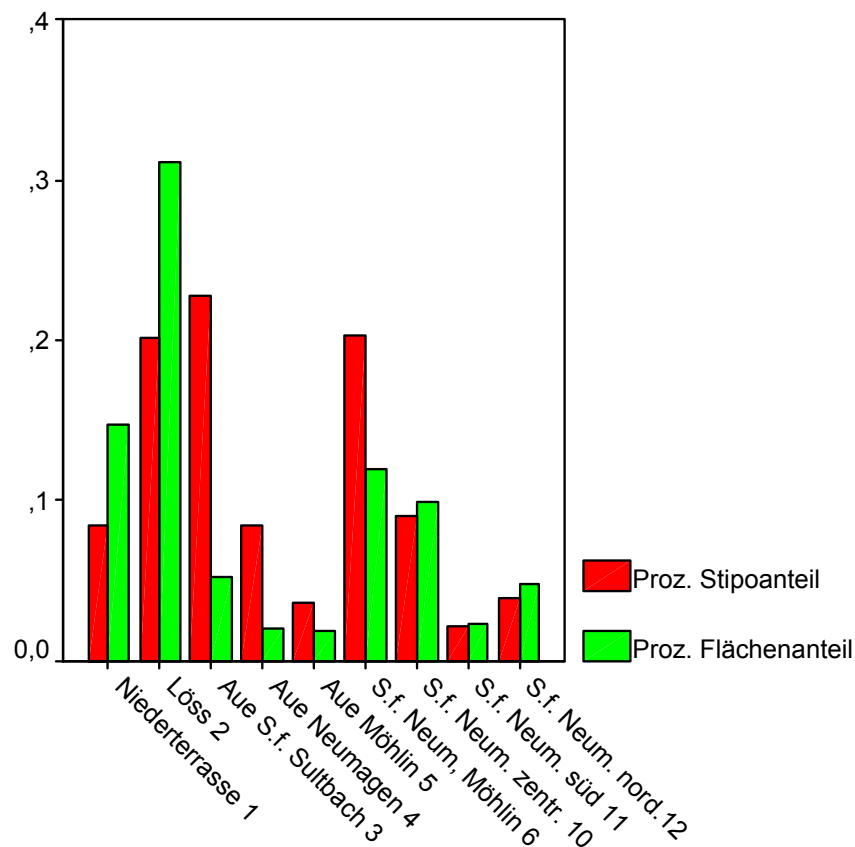
Raumeinheit	Stichproben- anzahl	Proz. Stipoumfang	Proz. Flä- chenanteil (%)	Pr. Fl. / Pr. Stipou.
1 Niederterrasse	46	7,9	14,7	1,86
2 Löss	120	20,1	52	2,6
3 Aue S.f. Sultbach	129	22,3	3,1	0,14
4 Aue Neumagen	49	8,5	2,1	0,25
5 Aue Möhlin	22	3,7	1,9	0,51
6 S.f. Neumagen, Möhlin	121	20,3	11,9	0,59
10 S.f. Neumagen zentral	54	9,0	9,9	1,1
11 S.f. Neumagen südl.	12	2,2	2,3	1
12 S.f. Neumagen nördl.	24	4,0	4,8	1,2

**Prozentualer STP-Anteil einer Raumeinheit am Gesamtstichprobenumfang. Flächenanteile der homogenen Raumeinheiten an Gesamtfläche, sowie Vergleich.**

Wie schon an der flächenhaften Darstellung zu erkennen, bestätigt sich im numerischen Vergleich zwischen Stichproben- und Flächenanteilen in Abb. 3- 8, dass sich die Probenahme hauptsächlich auf den Auengebiete und Schwemmfächern konzentriert. Eine flächengewichtete Beprobung wurde nicht vorgenommen.

Insbesondere Raumeinheiten 3, 4 und 6 (Aue und Schwemmfächer Sultbach und Aue Möhlin/Neumagen) wurden relativ stark beprobt, während die Raumeinheiten 2 und 1 (Lössgebiet und Niederterrasse) im Verhältnis zu ihrer Größe wenige Proben verzeichnen (vgl. Tabelle 3- 3, letzte Spalte).

Entschiede man sich an dieser Stelle für eine Nachbeprobung könnte mit der Methode des Moving Window festgestellt werden, wo die Proben fehlen, um dann gezielt nachzuprobieren.



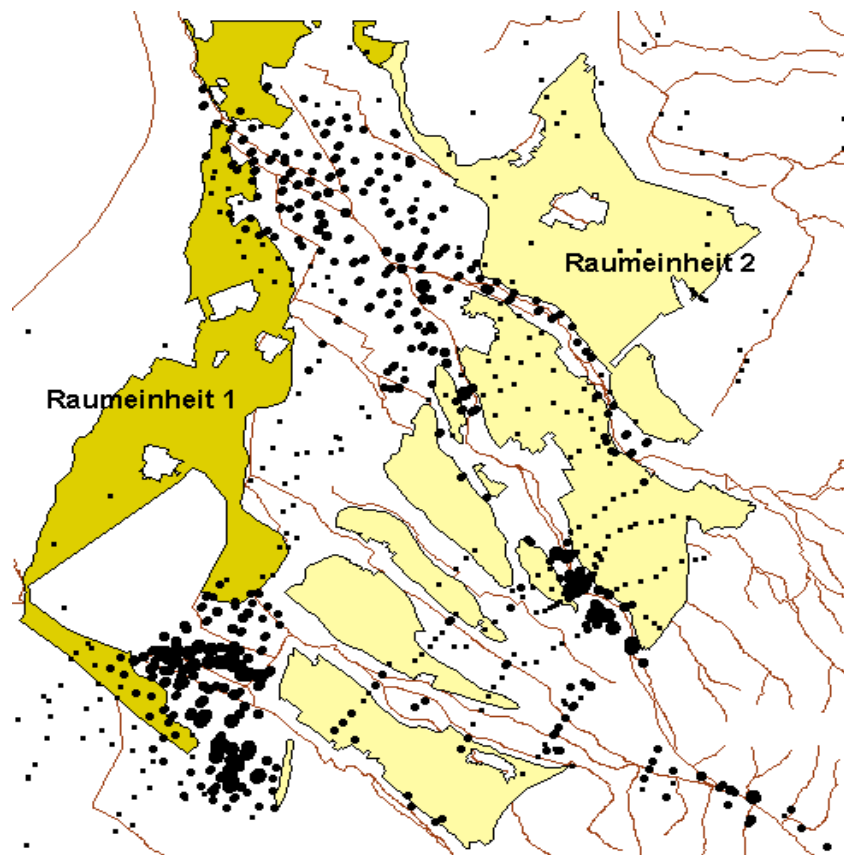
**Abb. 3- 8: Numerischer Vergleich zwischen Stichproben- und Flächenanteilen.**

### Clustering

Zur Überprüfung, ob geclusterte Werte innerhalb einer Raumeinheit der Staufener Bucht vorkommen, werden die Daten in ARC VIEW visualisiert.

Beginnend mit der homogenen Raumeinheit 1 (Niederterrasse Rhein) fällt eine extrem ungleichmäßige räumliche Probenverteilung auf. Die Proben konzentrieren sich hauptsächlich südlich des Schwemmfächers Neumagen sowie südlich des Flugplatzes. Das restliche Gebiet wurde kaum beprobt. Allein schon die Karte deutet darauf hin, dass die Werteverteilung innerhalb der Clusterungen höher ist als außerhalb. Für eine zuverlässige Bestimmung von Kenngrößen der Verteilung innerhalb von Raumeinheit 1 muss deshalb eine Entclustering durchgeführt werden.

Auch in Raumeinheit 2 (Löss) liegt eine räumlich ungleichmäßige Probenverteilung vor. Während das Teilgebiet zwischen den Auen Möhlin und Neumagen relativ stark beprobt worden ist, finden sich in den übrigen Teilgebieten dieser Raumeinheit nur wenige oder auch gar keine Probennahmestellen. Aufgrund des Eindrucks, den die Karte vermittelt, muss innerhalb dieser Raumeinheit allerdings nicht vermutet werden, dass die geclusterten Werte in Bereichen liegen, die stärker belastet sind. Das sollte aber durch genauere statistische Auswertungen überprüft werden. Die Raumeinheiten 3-6 weisen jeweils eine gleichmäßige Probenverteilung auf.



**Abb. 3- 9: Verteilung der Probennahmestellen.**

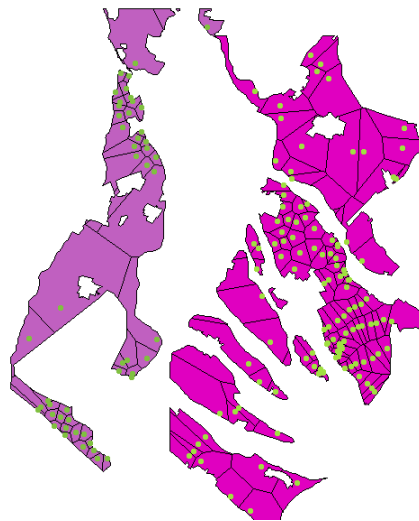
Bei der Betrachtung der drei Raumeinheiten 10-12 (Schwemmfächer Neumagen zentral/ südl. und nördl. fällt auf, dass die Proben linienhaft vertikal zum Flusslauf entnommen worden sind. Eine solche Beprobung stellt ebenfalls eine Clusterung dar. Da sich die Linien der Beprobung innerhalb der Raumeinheiten allerdings gut aufteilen, fällt diese Clusterung weniger stark ins Gewicht.

#### **Entclusterungen der Werteverteilungen in den Raumeinheiten 1 und 2**

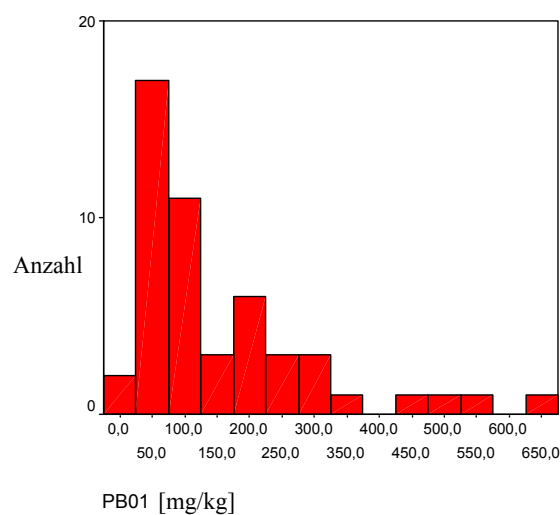
Zur Entclusterung der Verteilungen der Werte innerhalb der Raumeinheiten 1 und 2 werden jeweils Thiessen-Polygone gebildet. Durch die Thiessen-Polygone wird für jeden Punkt der Stichprobe ein Polygon aus den Nachbarpunkten erstellt. Die Polygonfläche für einen Messwert wird durch all die Punkte bestimmt, deren Abstand zu ihm geringer ist, als zu allen anderen Messwerten.

Zur Ermittlung eines globalen Mittelwertes und zur Bestimmung der Verteilungsfunktion wird eine Gewichtung nach Flächenanteilen der Polygonzüge vorgenommen.

In den folgenden Abbildungen zeigt sich ganz deutlich, dass durch die Entclusterung die relativ hohen Werte in den Raumeinheiten 1 innerhalb der Clusterungen weniger Gewicht bekommen. Vielmehr liegt nun das Gewicht stärker auf den einzelnen Punkten im Raum, die relativ niedrige Messwerte verzeichneten. Deshalb nimmt die positive Schiefe der Verteilung durch die Entclusterung zu. Der Interquartilabstand sinkt.



**Abb. 3- 10: Thiessen-Polygone der Messnetze des Bleigehalts in Raumeinheit 1 und Raumeinheit 2.**

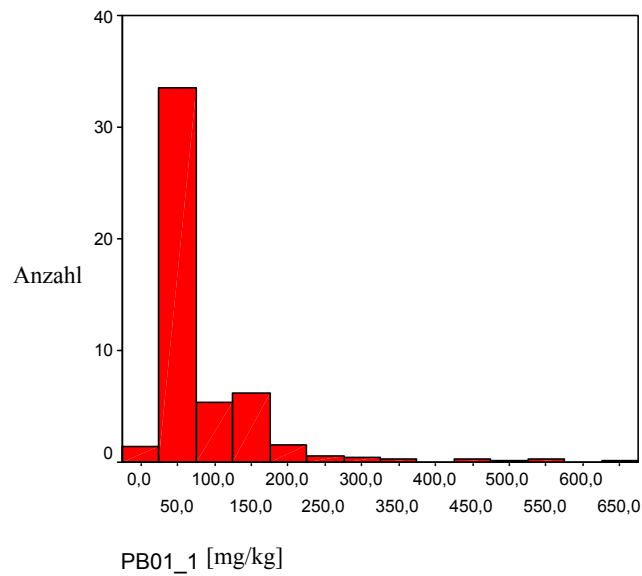


**Abb. 3- 11: Verteilung des Bleigehalts in Raumeinheit 1 vor Entclustering.**

**Tabelle 3- 4: Kennwerte der Verteilung des Bleigehalts in Raumeinheit 1 vor Entclustering.**

Median [mg/kg]	Interquartilabstand [mg/kg]	Schiefe [mg/kg]
100	155	1,8

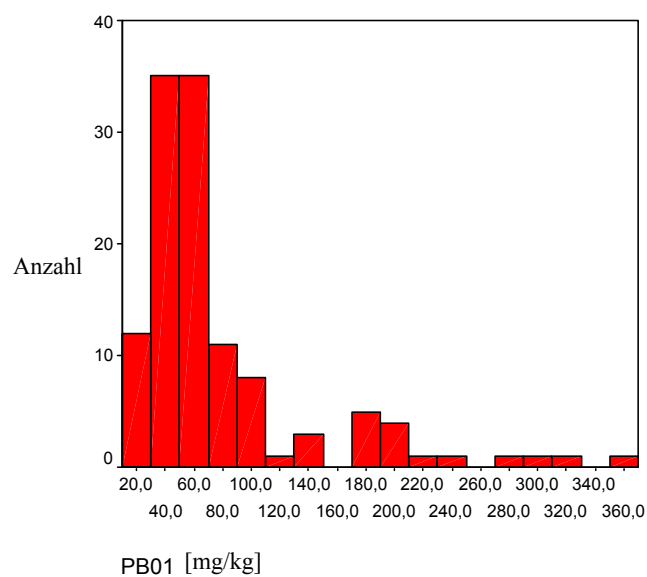




**Abb. 3- 12: Verteilung des Bleigehalts in Raumeinheit 1 nach Entclustering.**

**Tabelle 3- 5: Kennwerte der Verteilung des Bleigehalts in Raumeinheit 1 nach Entclustering.**

Median [mg/kg]	Interquartilabstand [mg/kg]	Schiefe [mg/kg]
47	50	3,19

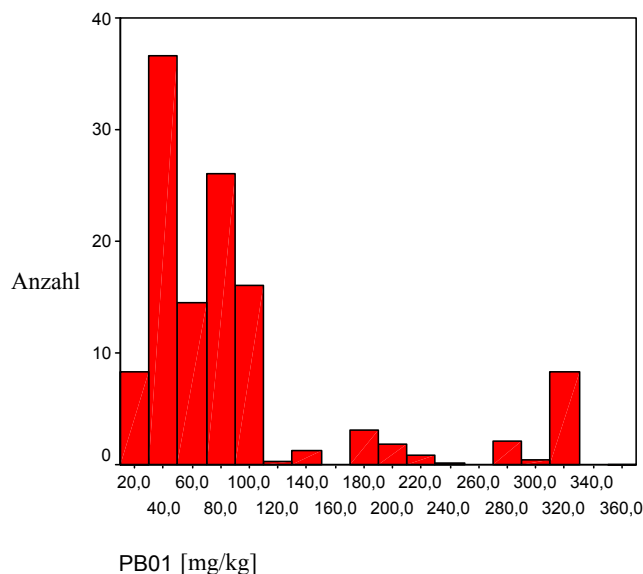


**Abb. 3- 13: Verteilung des Bleigehalts in Raumeinheit 2 vor Entclustering.**



**Tabelle 3- 6: Kennwerte der Verteilung des Bleigehalts in Raumeinheit 2 vor Entclustering.**

Median [mg/kg]	Interquartilabstand [mg/kg]	Schiefe [mg/kg]
56	41	2,2



**Abb. 3- 14: Verteilung des Bleigehalts in Raumeinheit 2 nach Entclustering.**

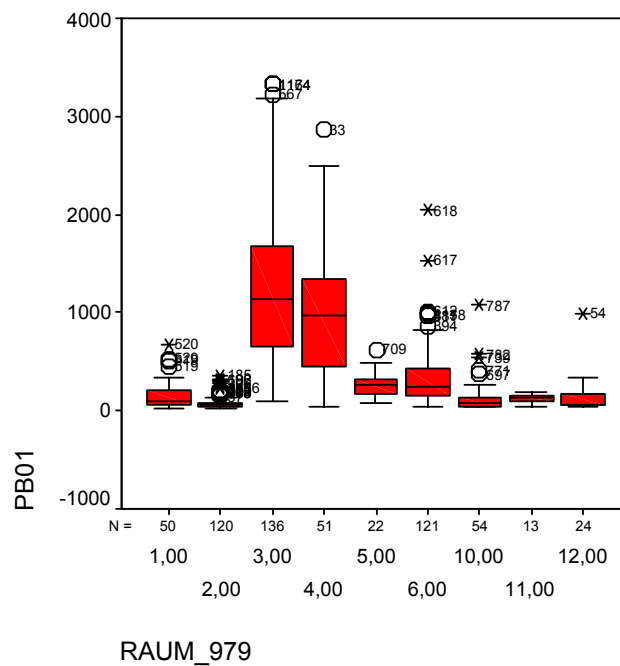
**Tabelle 3- 7: Kennwerte der Verteilung des Bleigehalts in Raumeinheit 2 nach Entclustering.**

Median [mg/kg]	Interquartilabstand [mg/kg]	Schiefe [mg/kg]
72	57	1,97

Für Raumeinheit 2 erweisen sich die Folgen der Entclustering als weniger gravierend. Die Werteverteilung erfährt durch die Neugewichtung eine leichte Verlagerung nach rechts, wie sich aus den Histogramme, dem größeren Median und der leicht abnehmenden Schiefe ablesen lässt.

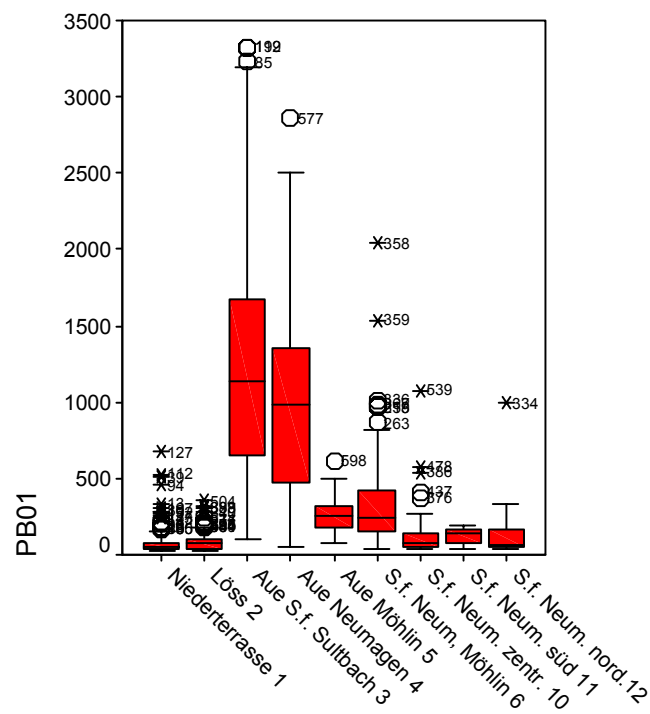
#### Wertestreuung innerhalb der Raumeinheiten:

Ein weiterer Faktor, der zur Festlegung des Stichprobenumfanges herangezogen werden sollte, ist die Streuung der Werte. Die Streuung der Bleigehalte (ggf. entclustert) innerhalb der homogenen Raumeinheiten ist in Abb. 3- 15 dargestellt. Sie zeigt, dass die bzgl. des Flächenanteils festgestellt relativ hohe Stichprobenanzahl in den Einheiten 3, 4 und 6 durch die große Streuung der Werte gerechtfertigt sein könnte.



**Abb. 3- 15: Streuung der Bleigehalte innerhalb der homogenen Raumeinheiten.**

Es kann im Rahmen dieses Projektes nicht weiter analysiert werden, welche Gewichtung den einzelnen Repräsentativitätskriterien zukommen sollten. Damit ist es auch nicht möglich, definitiv über die Repräsentativität der Stichprobe zu urteilen.



**Abb. 3- 16: Vergleich der Bleigehaltverteilungen innerhalb der homogenen Raumeinheiten.**



### 3.2.1.6 Verteilungen analysieren

Beim Vergleich der Verteilungen der Werte innerhalb der 9 homogenen Raumeinheiten in Abb. 3- 16 und Tabelle 3- 8 fällt insbesondere auf, dass die Bleigehalte der Einheiten 3 und 4 (Aue und Schwemmfächer Sultbach und Aue Neumagen) deutlich über den der übrigen Einheiten liegen und sehr viel stärker streuen. Ihre Verteilungen ähneln sich im Hinblick auf Median, Interquartilabstand und Schiefe.

**Tabelle 3- 8: Vergleich der Bleigehaltverteilungen innerhalb der homogenen Raumeinheiten.**

Raumeinheit	Median	Interquartil- abstand [mg/kg]	Schiefe [mg/kg]
1 Niederterrasse	47	50	3,2
2 Löss	72	57	1,98
3 Aue S.f. Sultbach	1135	1022	0,66
4 Aue Neumagen	978	939	0,76
5 Aue Möhlin	261	140	1,05
6 S.f. Neumagen, Möhlin	246	279	2,8
10 S.f. Neumagen zentral	77	94	3,64
11 S.f. Neumagen südl.	142	81	-0,45
12 S.f. Neumagen nördl.	67,5	114	3,87

Diese Aussage trifft auch auf die Mediane der Raumeinheiten 5 und 6 (Aue Möhlin, Schwemmfächer Neumagen Möhlin) zu. Die Raumeinheiten 10 und 12 (Schwemmfächer Neumagen zentral, nördl.) sind in den betrachteten Kennwerten der Verteilung miteinander vergleichbar. Weniger offensichtlich ist die Antwort auf die Frage, ob auch Raumeinheit 11 relativ große Ähnlichkeit zu den Raumeinheiten 10 und 11 aufweist. Fachlich ist ein solcher Zusammenhang allerdings durchaus plausibel.

Da insbesondere der Stichprobenumfang innerhalb der Raumeinheit 11 den geforderten Mindeststichprobenumfang unterschreitet, sollte überprüft werden, ob die Mittelwertunterschiede gering genug sind, um eine Aggregation der Raumeinheiten 10, 11 und 12 zu gestatten. Ein statistischer Test, der an dieser Stelle angewendet werden kann, ist der Kruskal-Wallis-Test.

#### Test auf signifikante Mittelwertunterschiede für 10, 11, 12

Das Testergebnis sagt aus, dass sich die mittleren Ränge der Bleigehalte in den Raumeinheiten 10, 11 und 12 nicht signifikant voneinander unterscheiden, denn die asymptotische Signifikanz ist mit 0,24 größer als das Signifikanzniveau  $\alpha$  von 0,05. Die Gruppen können also aggregiert werden.



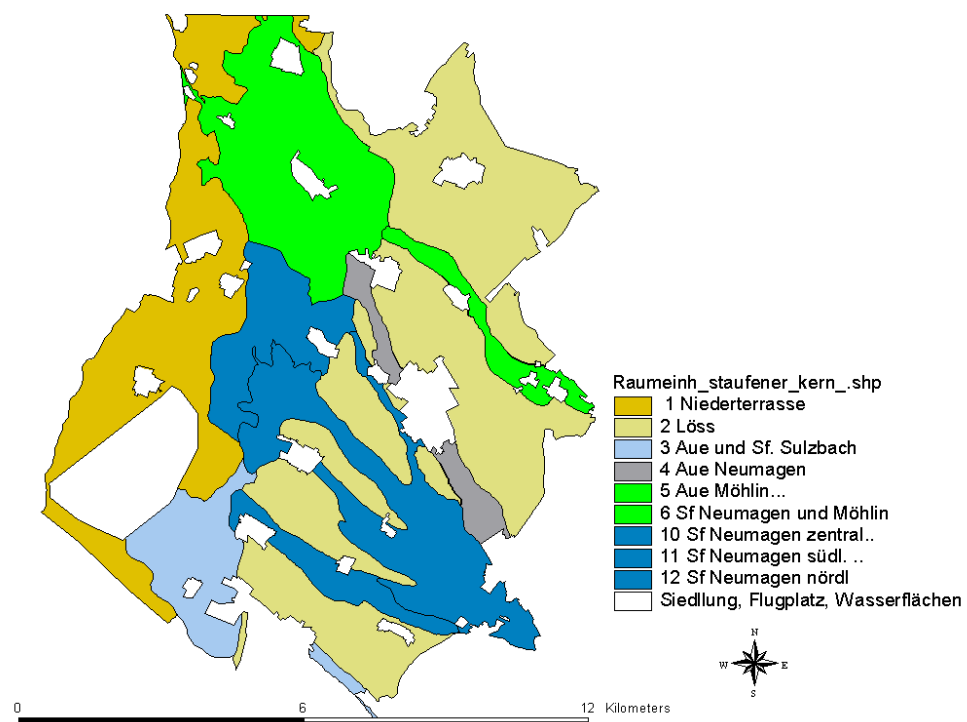
Ebenfalls zu keiner Ablehnung der Hypothese der Gleichheit der Mittelwerte gelangt der Kruskal-Wallis-Test für die Raumeinheiten 3 und 4 und die Raumeinheiten 5 und 6, auch wenn innerhalb dieser Gruppen die Ähnlichkeiten, ausgedrückt durch die niedrigere asymptotische Signifikanz nicht ganz so groß sind (siehe Tabelle 3- 9).

**Tabelle 3- 9: Test auf signifikante Mittelwertunterschiede.**

Teststatistik	3,4	5,6	10,11,12
Chi-Quadrat	3,187	0,016	2,865
Df	1	1	2
Asymptotische Signifikanz	0,074	0,900	0,239

Aus fachlicher Sicht können die Raumeinheiten 5 und 6 zur Raumeinheit 5, 6 (Einflussbereich der Möhlin) aggregiert werden, da sich die Ähnlichkeit der Mittelwerte dieser beiden Raumeinheiten nicht nur im Falle des Schwermetalls Blei, sondern auch in (stichprobenartig durchgeführten) Auswertungen für Cadmium, Kupfer und Zink zeigen. Für die Raumeinheiten 3 und 4 kann dagegen nicht von einem eindeutigen fachlichen Zusammenhang gesprochen werden, da dieselbe Auswertung mit anderen Schwermetallen zu unterschiedlichen Ergebnissen führt. Deshalb werden diese beiden Raumeinheiten nicht aggregiert.

Die neu gebildeten Raumeinheiten sind in Abbildung 3-17, die Werteverteilungen von Blei in diesen Raumeinheiten in den Abbildungen 3-18 bis 3-23 dargestellt



**Abb. 3- 17: Neugebildete homogene Raumeinheiten.**

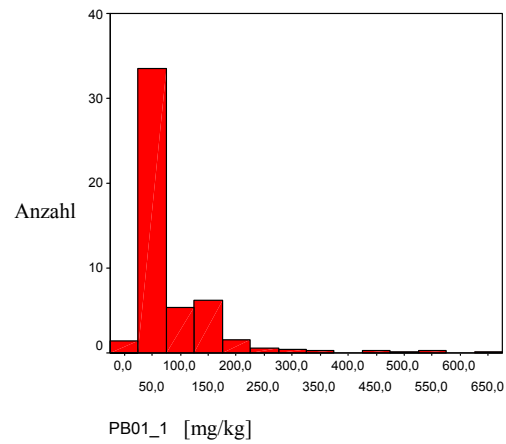


Abb. 3- 18: Werteverteilung des Stoffgehalts von Blei in Raumeinheit 1.

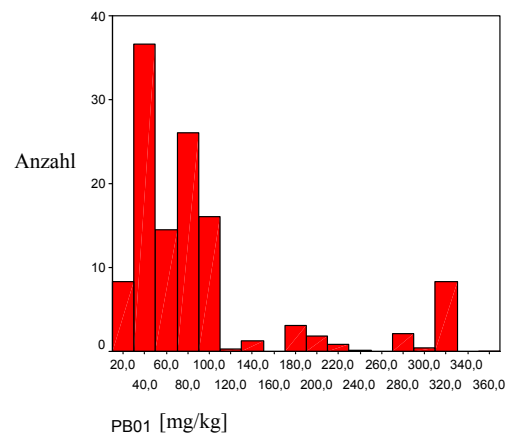


Abb. 3- 19: Werteverteilung des Stoffgehalts von Blei in Raumeinheit 2.

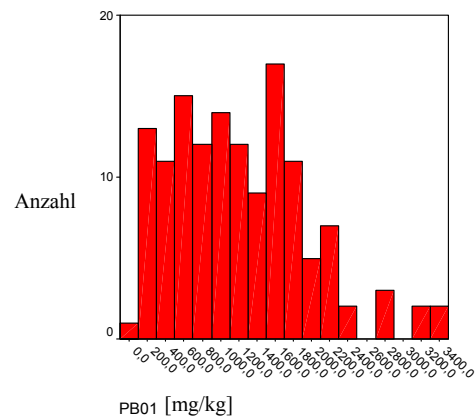


Abb. 3- 20: Werteverteilung des Stoffgehalts von Blei in Raumeinheit 3.

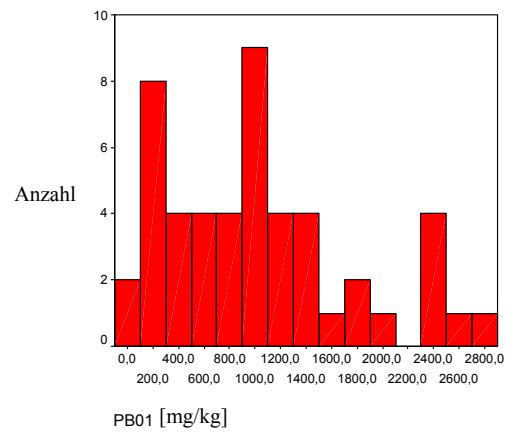


Abb. 3- 21: Werteverteilung des Stoffgehalts von Blei in Raumeinheit 4.

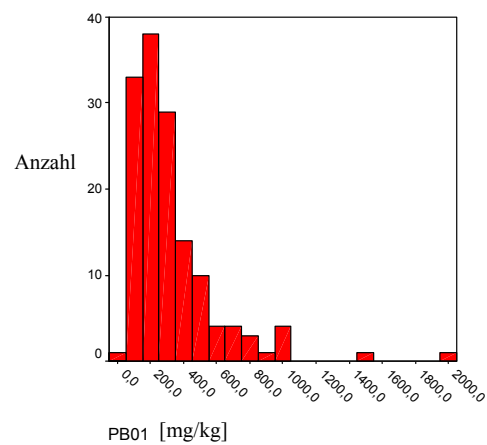


Abb. 3- 22: Werteverteilung des Stoffgehalts von Blei in Raumeinheiten 5 und 6.

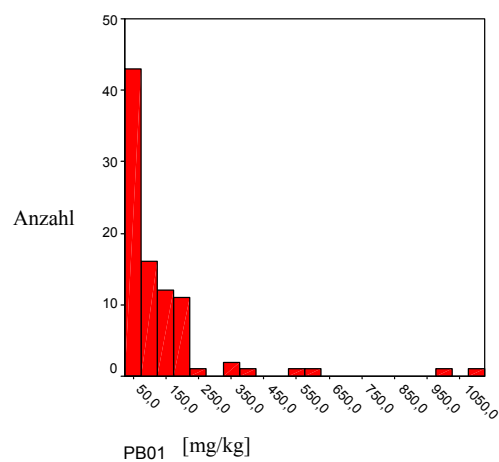


Abb. 3- 23: Werteverteilung des Stoffgehalts von Blei in Raumeinheiten 10, 11 und 12.



### 3.2.1.7 Extremwertanalyse

Zur Analyse von extremen Werten werden alle 9 homogenen Raumeinheiten getrennt einem Median-5-Interquartiltest unterzogen. Bei diesem Test werden solche Werte als Extremwerte markiert, die oberhalb des Median plus dem fünffachen Interquartilabstand liegen. Tabelle 3- 10 gibt Median, sowie 75% und 25% Quartil an. Zudem sind der Wert, oberhalb derer Werte als Extremwerte gelten, und die Anzahl der Extremwerte pro homogener Raumeinheit vermerkt.

**Tabelle 3- 10: Ausreißer und die Ausreißergrenze.**

Raumeinheit	Median PB	75% Quartil	25% Quartil	obere Extremwertgrenze	Extremwerte (Anzahl)
1	47*	82*	32*	297*	4
2	72*	96*	38,25*	357,3*	0
3	1135	1674,5	651,75	6248,8	0
4	967	1360	444	5547,0	0
5	261	315	175	961,0	0
6	246	426	147	1641,0	1
10	77	141	47,5	544,5	2
11	142	163,5	82,5	547,0	0
12	67,5	169,5	55,25	638,8	1

\*Verteilung entclusterter Werte

Es werden keine Extremwerte aus dem Datensatz eliminiert, sondern es wird davon ausgegangen, dass alle Werte plausibel sind. Neben der oberen Extremwertgrenze wurde auch die untere Extremwertgrenze betrachtet. Da es keine Stoffgehalte kleiner als 0 gibt, ist es wahrscheinlich, dass es keine Ausreißer nach unten gibt. Dieses wurde in einer hier nicht weiter beschriebenen Analyse bestätigt.

### 3.2.2 Räumliche Interpolation

Im Folgenden wird die räumliche Verteilung des Bleigehalts mit Hilfe eines Ordinary Kriging Ansatzes geschätzt.

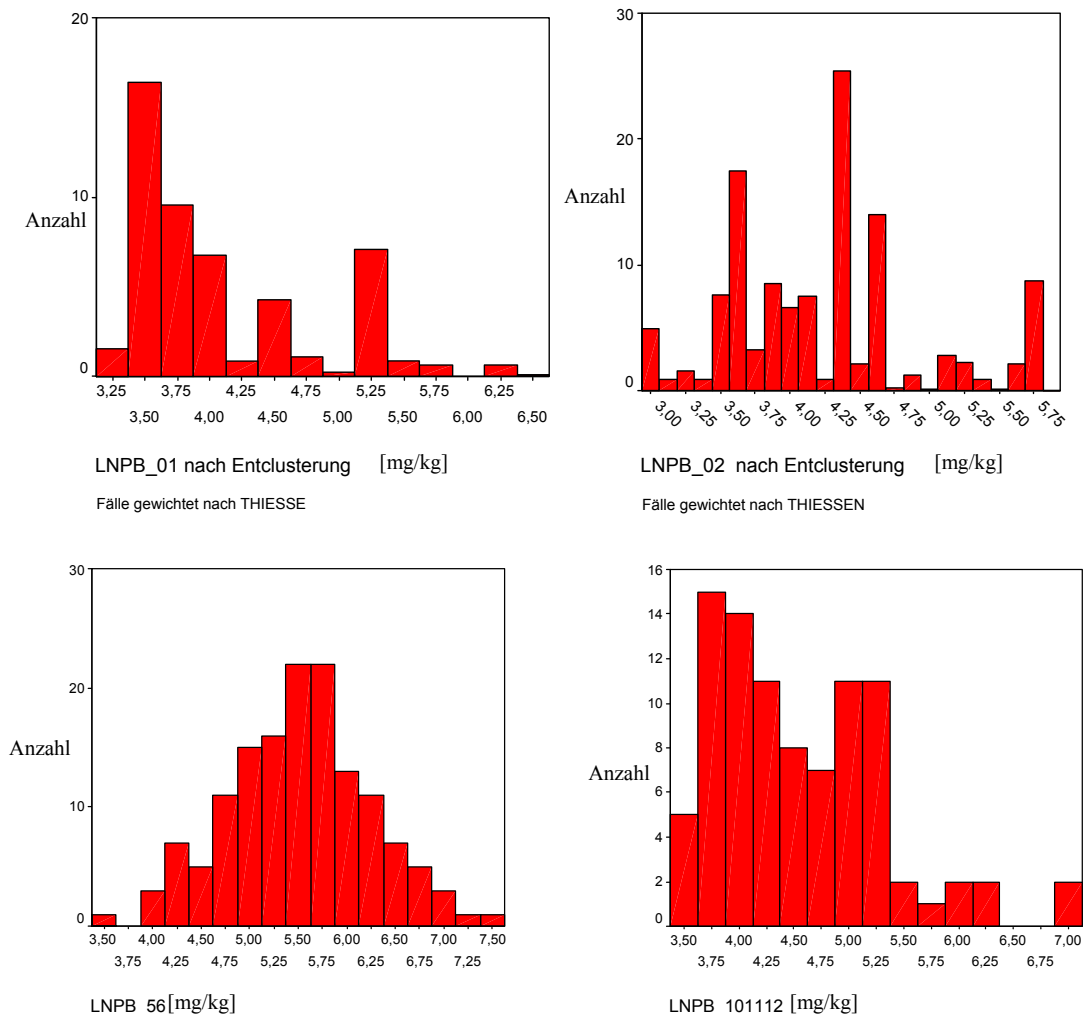
#### 3.2.2.1 Transformation und Standardisierung

Wichtige Voraussetzungen für die Anwendung des Ordinary Kriging sind zum einen ein konstanter Mittelwert der Untersuchungsvariablen im Untersuchungsgebiet zum anderen die Normalverteilung der Werte. Der Blick auf die Werteverteilung in der Karte, sowie die vorangegangenen Analysen zeigen bereits deutlich, dass beide Voraussetzungen nicht erfüllt sind. Die homogenen Raumeinheiten 3, 4 und 6 haben offensichtlich ein deutlich höheres mittleres Wertenniveau, und – mit Ausnahme der Raumeinheiten 3 und 4 - sind die Häufigkeitsverteilungen der Bleigehalte stark rechtsschief.





Um zu einer Normalverteilung zu gelangen, werden die Bleigehalte der Raumeinheiten 1, 2, 5+6 und 10+11+12 mittels der Logfunktion transformiert. Den Graphiken aus Abb. 3- 24 ist das Ergebnis dieser Transformationen zu entnehmen.



**Abb. 3- 24: Ergebnisse der Transformationen des Bleigehalts in den homogenen Raumeinheiten.**

Tabelle 3- 11 können die Ergebnisse der K-S-Tests auf Normalverteilung der betrachteten Verteilungen entnommen werden. Für die Raumeinheiten 1 und 2 ergibt sich, dass die Werteverteilung der Bleigehalte auch nach einer log-Transformation keiner Normalverteilung entspricht, sofern man eine Testentscheidung zum Signifikanzniveau  $\alpha=0,05$  anstrebt. Dennoch wird im Folgenden mit den transformierten Werten gearbeitet, da die Transformation die Daten zumindest symmetrisiert hat.

Für die übrigen Raumeinheiten kann die Hypothese der Normalverteilung nicht verworfen werden. Dieses gilt im Falle der Raumeinheiten 3 und 4 bereits für die Ausgangsdatensätze, für die Raumeinheiten 5,6 und 10,11,12 für die logarithmierten Werte.



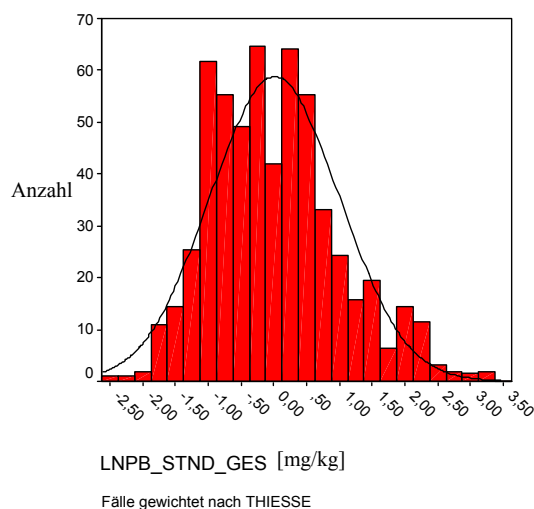
**Tabelle 3- 11: Ergebnisse des K-S-Tests auf Normalverteilung des Bleigehalts in den homogenen Raumeinheiten.**

Raumeinheit	Transformation	Asymptotische Signifikanz (K-S-Test)	Mittelwert	Standardabweichung
1	log (entclusterte Werte)	0,10	4,1	0,7
2	log (entclusterte Werte)	0,007	4,2	0,7
3	keine	0,567	1219	734
4	keine	0,536	1041	737
5,6	log	1,000	5,5	0,73
10,11,12	log	0,202	4,5	0,76

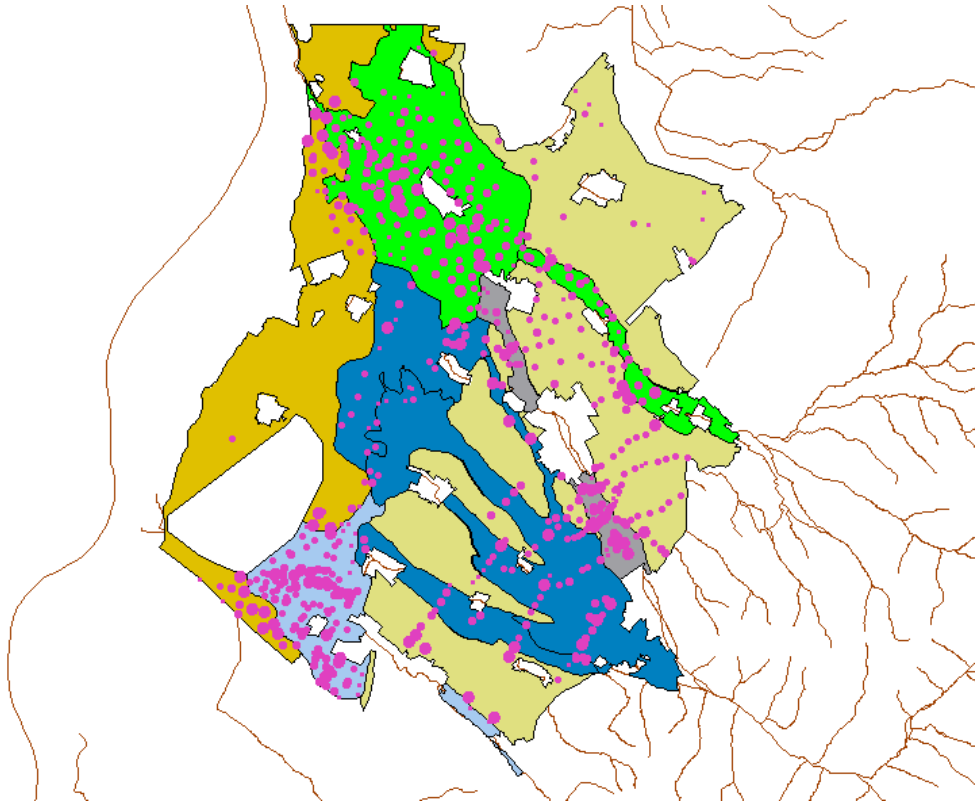
Da sich die Mittelwerte der sechs Raumeinheiten teilweise sehr stark voneinander unterscheiden, müssen diese auf ein einheitliches Niveau standardisiert werden, bevor die Ordinary Kriging Interpolationsschätzung durchgeführt werden kann. Das hier eingesetzte Gesamtverfahren ist in der Literatur unter dem Begriff „Kriging mit lokalen Mittelwerten“ bekannt (vgl. Abschnitt 2.3.5.3 Teil 1). Bei diesem Verfahren werden zunächst die Niveauunterschiede im Untersuchungsgebiet herausgerechnet, die Interpolationsschätzung durchgeführt und abschließend die Gruppenmittelwerte wieder hinzuaddiert.

Die vorliegenden Datensätze werden durch eine z-Transformation, bei welcher der Quotient aus der Differenz zwischen Wert und Gruppenmittelwert und der Standardabweichung gebildet wird, standardisiert.

Die Mittelwerte und Standardabweichungen der einzelnen homogenen Raumeinheiten sind ebenfalls Tabelle 3- 11 zu entnehmen.



**Abb. 3- 25: Ergebnis der Standardisierung der Bleigehalte.**



**Abb. 3- 26: Verteilung der standardnormalverteilten Werte des Bleigehalts.**

Abb. 3- 26 gibt nunmehr nur noch preis, wie sich die standardnormalverteilten Werte innerhalb der einzelnen homogenen Raumeinheiten räumlich verteilen. Mittelwert und Varianz sind nun in jeder Raumeinheit gleich.

### 3.2.2.2 Empirisches und theoretisches Variogramm

Zur Anpassung eines Modells an das empirische Variogramm wird dieses zunächst visualisiert. Dabei ist die Wahl der Größe und Anzahl der Abstandsklassen (Lags), innerhalb welcher der durchschnittliche Variogrammwert bestimmt wird, von großer Bedeutung. Wird ein zu großer Lag festgelegt, könnte die Autokorrelation von nahe beieinanderliegenden Punkten verdeckt werden. Ein zu kleiner Lag könnte wiederum dazu führen, dass zu wenige Punkte innerhalb eines Rasters liegen und damit eine repräsentative Mittelwertbestimmung pro Raster nicht gewährleistet ist. Bei einer unregelmäßigen Stichprobenverteilung, wie sie in diesem Anwendungsbeispiel gegeben ist, gilt als Faustregel, dass das Produkt zwischen Lag und Anzahl der Lags ungefähr die Hälfte des größten Abstandes zwischen den Stichprobenpaaren ausmachen sollte. Deshalb wird an dieser Stelle das Lag zunächst auf 130 m und die Anzahl der Lags auf 7 festgelegt. In der Abbildung der Variogrammoberfläche zeigt sich eine leichte Anisotropie. Der räumliche Zusammenhang zwischen den Daten nimmt in NW-SO-Richtung mit zunehmendem Abstand der Punktepaae nicht so schnell ab wie in der NO-SW-Richtung.

Dieser Sachverhalt lässt sich durch die zugehörigen gerichteten Variogramme (Abb. 3- 27 und Abb. 3- 28) quantifizieren. Das zum Winkel von 315,8 Grad bestimmte gerichtete Variogramm mit einer Bandbreite von 1,8 Lags erreicht den Sill, d.h. den Wert bei dem das Variogramm bei zunehmender Distanz nicht mehr wächst, ungefähr bei einer Distanz (Range) von 500 m.

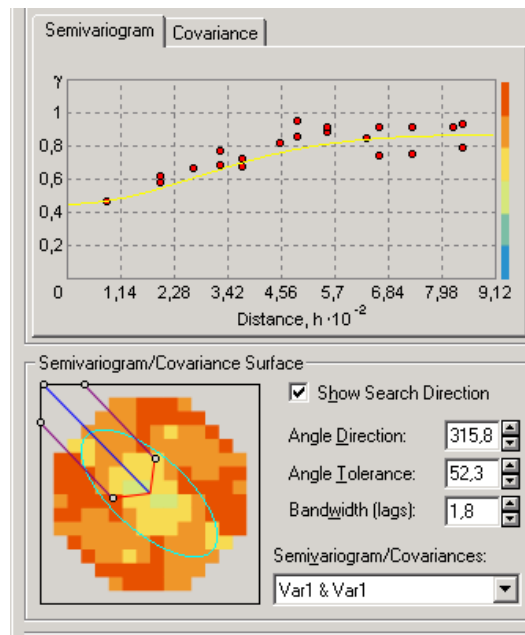


Abb. 3- 27: Variogramm der transformierten und standardisierten Werte des Bleigehalts.

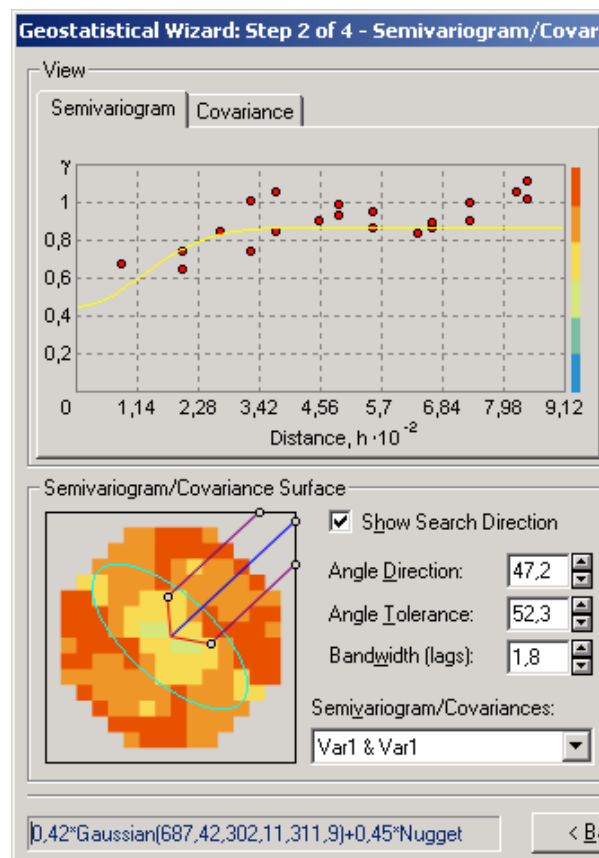


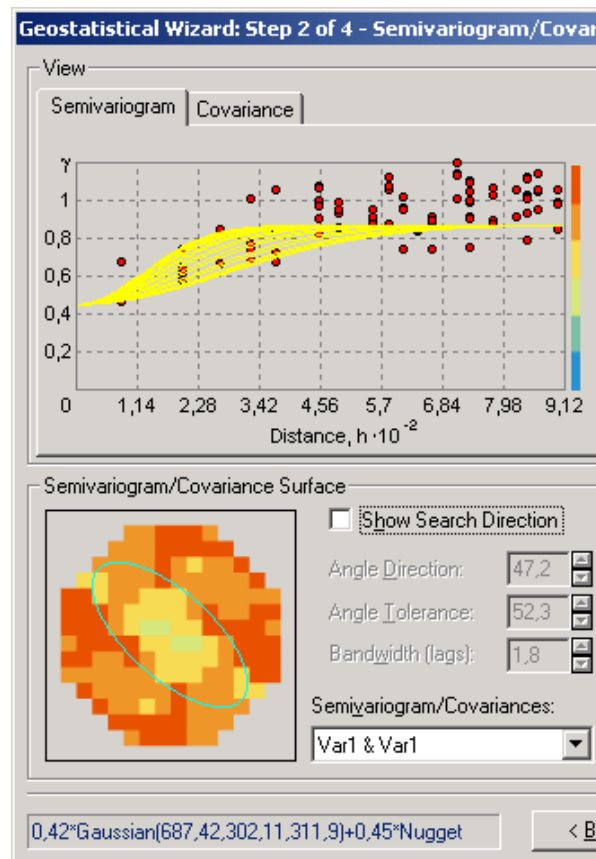
Abb. 3- 28: Richtungsabhängiges Variogramm der transformierten und standardisierten Werte des Bleigehalts.



Das in Abb. 3- 28 wiedergegebene gerichtete Variogramm zum Winkel von 47,2 erreicht den Schwellenwert bereits bei einem Range von 300m. Deshalb ist es sinnvoll, die Anisotropie mit in die Bestimmung des theoretischen Variogramms einzubeziehen.

Unter allen möglichen Variogramm-Modellen wie z.B. das Exponentielle, das Sphärische und das Gaußsche erscheint das Gaußsche am geeignetsten, da der Funktionsverlauf das schnelle Absinken der Autokorrelation und das frühe Erreichen des Schwellenwerts am besten wiedergibt.

Der Schwellenwert wird mit einem Wert von 0,87, der Nugget-Wert, d.h. der Variogrammwert für Punktpaare mit einer Distanz von 0 m, mit 0,45 festgelegt.



**Abb. 3- 29: Variogrammoberfläche des Bleigehalts.**

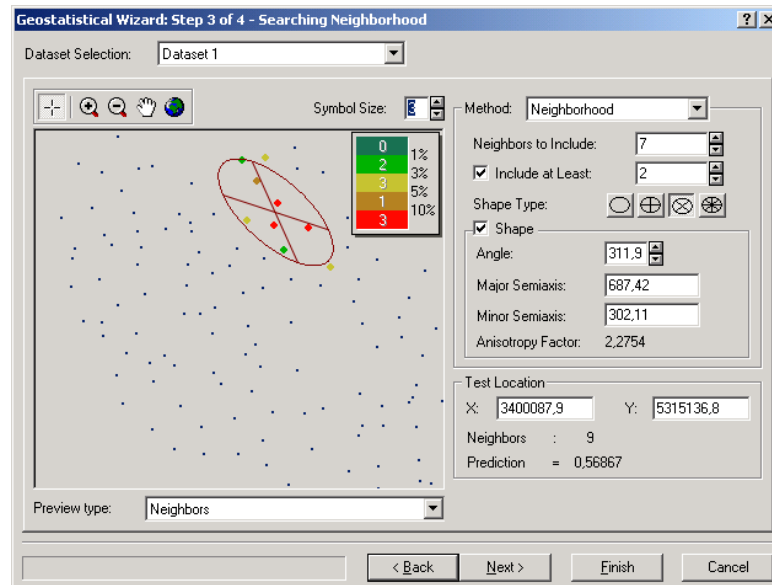
### Bestimmen der einzubeziehenden Nachbarwerte

Ein letzter Schritt, bevor die Krige-Schätzung durchgeführt werden kann, ist die Festlegung der Ellipse, welche die Punkte im Untersuchungsgebiet umfasst, die zur Schätzung des Wertes im Zentrum der Ellipse herangezogen werden sollen (vgl. Abb. 3- 29). Es ist wichtig, diese Punkte räumlich zu begrenzen, da weiter entfernt liegende Punkte ab einer gewissen Distanz nicht mehr mit dem zu schätzenden Wert korrelieren, zudem möglicherweise aus einem sehr anders gearteten Gebiet stammen, und damit einer guten Schätzung im Wege stehen könnten. Anhaltspunkte für die Wahl der Ellipse (bzw. des Kreises bei Isotropie) gibt das empirische Variogramm. Die Lage der Ellipse im Raum sollte mit der Richtung der Anisotropie identisch sein. Ferner legen die Aussageweite des für die Richtung der großen Achse der Ellipse bestimmten Variogramms und die Aussageweite des für die Richtung der kleinen Achse der



Ellipse bestimmten Variogramms die Länge dieser Achsen fest. Da die Korrelation jenseits der Aussageweite aufhört, brauchen die Achsen nur so lang zu sein wie die Aussageweite.

Um eine Verzerrung der Schätzung in eine bestimmte Richtung zu vermeiden, wird die Ellipse ferner in vier Sektoren aufgeteilt und die Bedingung gestellt, dass bis zu sieben Messwerte pro Sektor in eine Schätzung involviert werden können, aber mindestens zwei Messwerte in jedem Sektor liegen sollten. Ist die Mindestanzahl nicht erfüllt, werden zur Schätzung die dem Sektor nächstgelegenen Punkte außerhalb der Ellipse herangezogen. Das Gewicht, das den Messwerten zur Schätzung des Mittelpunktes der Ellipse zukommt, richtet sich nach dem Abstand zu diesem.



**Abb. 3- 30: Vier Sektoren der Suchellipse für die Interpolation des Bleigehalts.**

### Interpolierte Werteoberfläche

In Abbildung 3-31 ist die interpolierte Werteoberfläche der standardisierten und transformierten Werte des Bleigehalts dargestellt.

#### 3.2.2.3 Kreuzvalidierung

Abb. 3- 32 ermöglicht, die Güte des verwendeten Modells durch das Verfahren der Kreuzvalidierung zu beurteilen. Das oben abgebildete Streudiagramm zeigt dabei die Beziehung der standardisierten Fehler der Vorhersage, d.h. die durch die Krige-Standardabweichung dividierte Differenz zwischen vorhergesagten und gemessenen Werten, zu den gemessenen Werten. Die fallende Regressionslinie spiegelt die für die Krigingverfahren typische Eigenschaft wieder, niedrige Messwerte zu über- und hohe Werte zu unterschätzen. Bei einer idealen Schätzung würden allen Punkte eine horizontal verlaufende Linie bilden.

Im linken unteren Bereich der Abb. 3- 32 sind einige zusammenfassende Statistiken der Vorhersagefehler aufgeführt. Der Mittelwert sowie der standardisierte Mittelwert der Prognose haben den Wert -0,001. Die Schätzung ist also nicht verzerrt. Die Quadratwurzel aus den standardisierten Vorhersagefehlern liegt mit 0,937 nahe dem Wert 1 und spricht damit für eine korrekte Schätzung der Variabilität der Werte. Dieser Sachverhalt bestätigt sich auch durch den mittleren

standardisierten Messwert (0,87), welcher der Quadratwurzel des mittleren Prognosefehlers (0,80) sehr ähnlich ist.

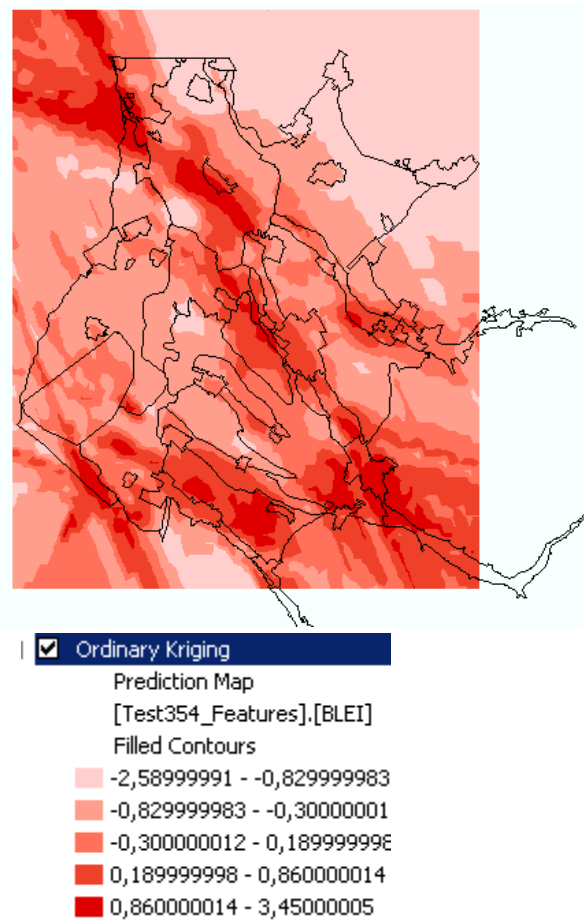


Abb. 3- 31: Interpolierte Werteoberfläche der standardisierten Bleigehalte.

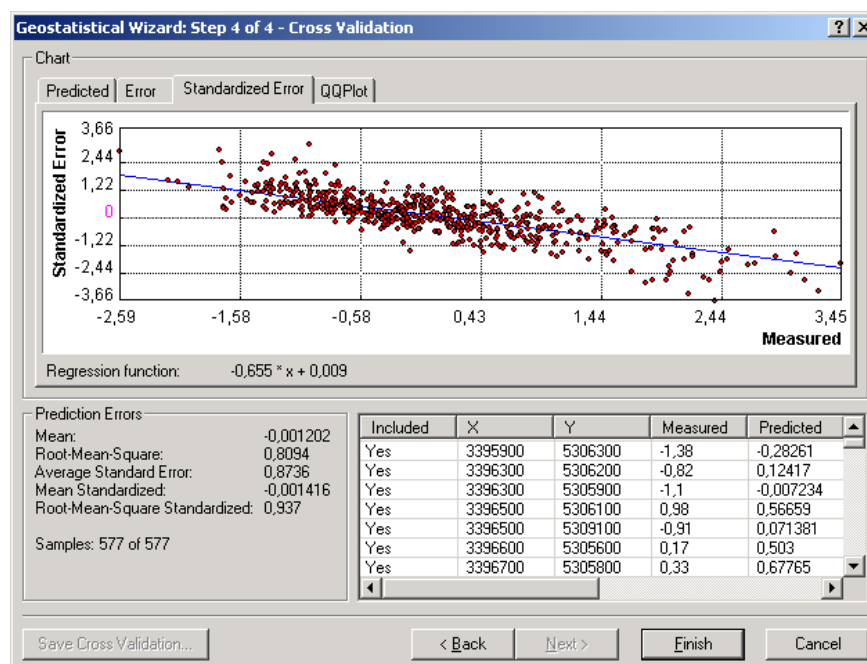


Abb. 3- 32: Kreuzvalidierung der Interpolation des Bleigehalts.

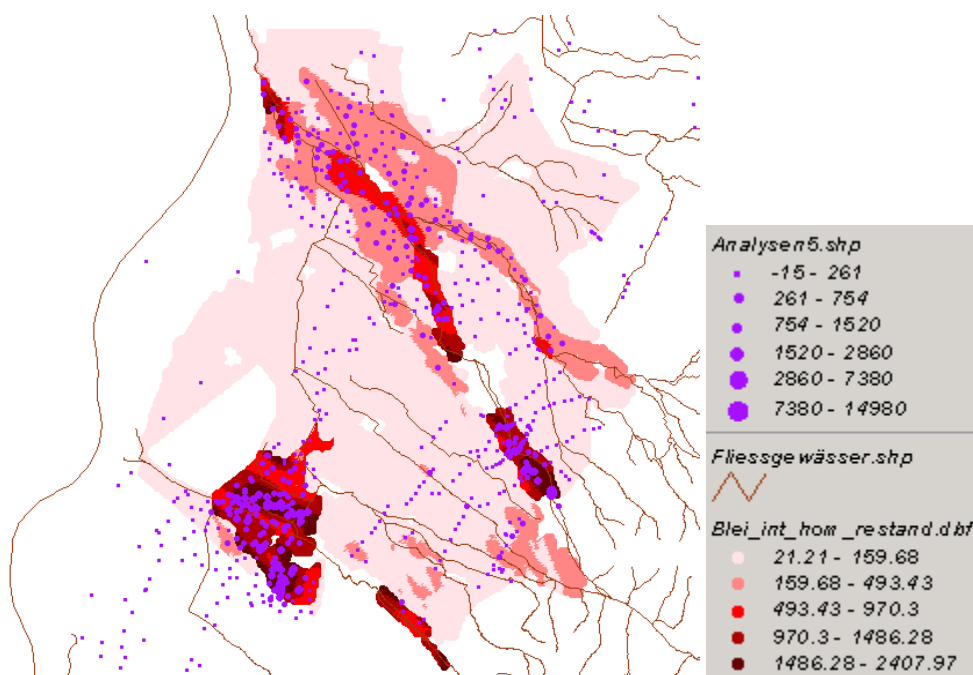
Im Vergleich mit anderen Modellanpassungen erwies sich das beschriebene Gaußsche Variogramm als das beste.

### 3.2.2.4 Interpolierte Werteoberfläche der restandardisierten Daten

Nach der Rücktransformation jeder Rasterzelle, wie sie für die einzelnen homogenen Raumeinheiten der Tabelle 3- 12 zu entnehmen ist, ergibt sich die in Abb. 3- 33 zu findende interpolierte Werteoberfläche der restandardisierten, entlogarithmierten Bleigehalte.

**Tabelle 3- 12: Reziproke Transformation der Bleigehalte.**

Raumeinheit	1. Schritt: multiplizieren mit der Standardabweichung	2. Schritt: subtrahieren des Mittelwertes	3. Schritt: entlogarithmieren durch potenzieren der restandardisierten Werte
1	*0,7	-4,1	Exp
2	*0,7	-4,2	Exp
3	*734	-1219	(entfällt)
4	*737	-1041	(entfällt)
5,6	*0,73	-5,5	Exp
10,11,12	*0,76	-4,5	Exp



**Abb. 3- 33: Interpolierte Werteoberfläche der restandardisierten Daten.**





### 3.2.2.5 Konfidenzintervalle

An dieser Stelle werden Konfidenzintervalle für den Median der Originalwerte bestimmt, da eine Rücktransformation der Konfidenzgrenzen für den Mittelwert sehr aufwendig zu programmieren ist.

Zur Berechnung von 95%-Konfidenzintervallen für die restandardisierten, (entlogarithmierten) Mediane der Prognosewerte werden zwei Formeln unterschieden:

Für jeden restandardisierten Prognosewert, der zu einer homogenen Raumeinheit gehört, deren Messwerte zur Standardisierung logarithmiert wurden, wird das Konfidenzintervall bestimmt, indem die Exponentialfunktion der Differenz (bzw. der Summe) zwischen dem restandardisierten Prognosewert und dem zweifachen Produkt der Standardabweichung des Prognosefehlers und Standardabweichung der Messwerte gebildet wird.

Für die homogenen Raumeinheiten 1, 2, 5+6 und 10+11+12 gilt demnach

$$KI_1 = [\exp(Y^* - 2\sigma_k\sigma_1); \exp(Y^* + 2\sigma_k\sigma_1)]$$

Da die Messwerte der Raumeinheiten 3 und 4 nicht logarithmiert wurden, lautet das Konfidenzintervall eines restandardisierten Prognosewertes innerhalb dieser Raumeinheit:

$$KI_2 = [Y^* - 2\sigma_k\sigma_1; Y^* + 2\sigma_k\sigma_1]$$

### 3.2.3 Aussagesicherheit und Messnetzplanung

Mit dem Indikator Kriging können die lokale Verteilungen einer Variable an jedem Punkt des Untersuchungsgebiets berechnet und damit verschiedene Aussage über die Sicherheit von Schätzungen gemacht werden. Im Folgenden wird die Anwendung des Indikator Kriging auf den Bleigehalt beschrieben. Wichtigstes Ergebnis dieser Untersuchung stellen dabei Karten der Überschreitungswahrscheinlichkeit von vorgegebenen Schwellenwerten dar. (Für die Definition des Schwellenwertes siehe Abschnitt 2.3.1 des ersten Teils dieses Berichts). Darüber hinaus liefert die geschätzte lokale Varianz der Bleigehalte ein Maß für die Aussagesicherheit der Schätzung. Die Ergebnisse des Indikator Kriging können für die Messnetzplanung verwendet werden.

#### 3.2.3.1 Modell

Da in den verschiedenen homogenen Raumeinheiten unterschiedlich hohe Bleigehalte zu erwarten sind (vgl. Kapitel 2.3), sind auch unterschiedliche lokale Werteverteilungen des Bleigehalts in diesen Raumeinheiten zu erwarten. Insbesondere werden sich die mittleren Unterschreitungswahrscheinlichkeiten des Bleigehalts für vorgegebene Schwellenwerte von Raumeinheit zu Raumeinheit unterscheiden. Mit dieser Voraussetzung sieht das Modell des Indikator Kriging für den Bleigehalt folgendermaßen aus:

$$F_{gr}(u) = \sum_{i=1}^n (F_{std}(u) + F_i(gr)) 1_{A_i}$$

Dabei bezeichnet  $gr$  einen vorgegebenen Schwellenwert und  $F_{gr}(u)$  die Unterschreitungswahrscheinlichkeit des Bleigehalts am Ort  $u$  für diesen Schwellenwert.  $F_i(gr)$  bezeichnet die mittlere Unterschreitungswahrscheinlichkeit des Bleigehalts in der Raumeinheit  $i$ . Nach Abzug



dieser geht  $F_{gr}(u)$  auf die Unterschreitungswahrscheinlichkeit eines Standardprozesses  $F_{std}(u)$  zurück.

Der Schätzer für  $F_{gr}(u)$  sieht folgendermaßen aus:

$$\hat{F}_{gr}(u) = \sum_{i=1}^n (\hat{F}_{std}(u) + F_i(gr)) 1_{A_i}$$

Der Schätzer für die Standardunterschreitungswahrscheinlichkeit  $\hat{F}_{std}(u)$  ist durch das Ordinary Kriging gegeben. Die mittlere Unterschreitungswahrscheinlichkeit der Bleigehalte für den vorgegebenen Schwellenwert in den einzelnen Raumeinheiten  $F_i(gr)$  wird als Anteil der Bleigehalte in der jeweiligen Raumeinheit, die unterhalb dieses Schwellenwertes liegen, abgeschätzt.

Durch die Berechnung der lokalen Unterschreitungswahrscheinlichkeiten für verschiedene Schwellenwerte  $gr$  werden die lokalen Verteilungen des Bleigehalts an den Punkten des Untersuchungsgebiets abgeschätzt.

### 3.2.3.2 Abschätzung der mittleren Unterschreitungswahrscheinlichkeiten

Die mittleren Unterschreitungswahrscheinlichkeiten in den einzelnen homogenen Raumeinheiten wurden für die Schwellenwerte 50 mg/kg, 70 mg/kg, 80 mg/kg, 100 mg/kg, 200 mg/kg, 300 mg/kg, 600 mg/kg, 700 mg/kg, 1000 mg/kg, 1500 mg/kg, 1800 mg/kg und 2600 mg/kg geschätzt. Als Schätzer für die Unterschreitungswahrscheinlichkeiten dient der Anteil der Werte des Bleigehalts in den einzelnen Raumeinheiten, die unterhalb des jeweiligen Schwellenwertes liegen. Bei dieser Schätzung wurde wie schon in der Datenanalyse der Bleigehalte die Gewichtung

**Tabelle 3- 13: Mittlere Unterschreitungswahrscheinlichkeiten des Bleigehalts für verschiedene Schwellenwerte und verschiedene homogene Raumeinheiten (RE).**

RE Schwellenwert [mg/kg]	1		3	4	5	6	10	11	12
50	.577	.374	.000	.020	.000	.017	.259	.083	.208
70	.734	.495	.000	.041	.000	.058	.463	.167	.583
80	.739	.645	.000	.041	.045	.083	.519	.250	.583
100	.767	.844	.008	.041	.091	.107	.63	.333	.583
200	.949	.901	.07	.102	.409	.388	.852	1.00	.875
300	.976	.927	.101	.204	.682	.587	.907	1.00	.917
600	.998	1.00	.202	.327	.955	.876	.981	1.00	.958
700	1.00	1.00	.287	.367	1.00	.893	.981	1.00	.958
1000	1.00	1.00	.411	.551	1.00	.975	.981	1.00	1.00
1500	1.00	1.00	.651	.796	1.00	.983	1.00	1.00	1.00
1800	1.00	1.00	.822	.837	1.00	.992	1.00	1.00	1.00
2600	1.00	1.00	.961	.98	1.00	1.00	1.00	1.00	1.00

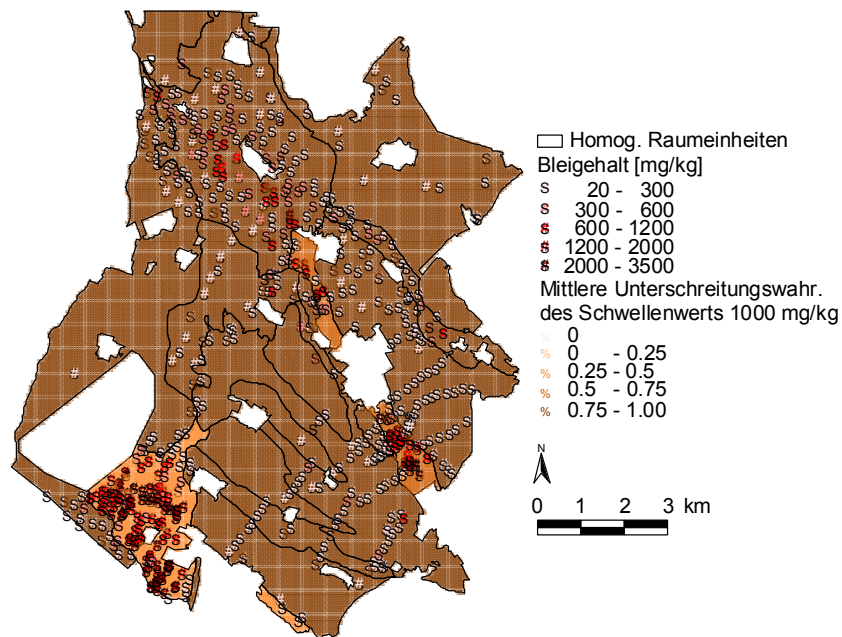


Abb. 3- 34: Räumliche Verteilung der mittleren Unterschreitungswahrscheinlichkeit des Bleigehalts für den Schwellenwerte 1000 mg/kg.

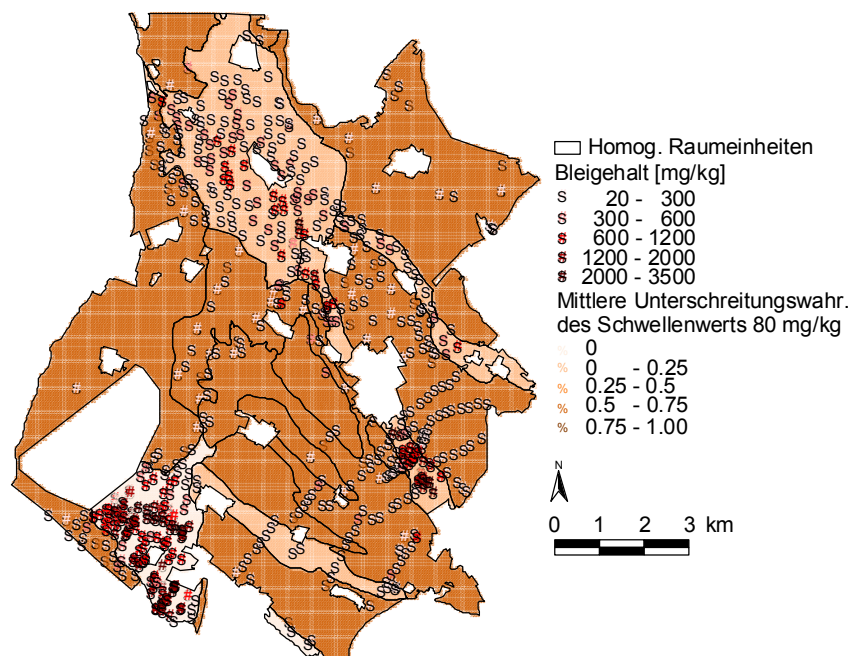


Abb. 3- 35: Räumliche Verteilung der mittleren Unterschreitungswahrscheinlichkeit des Bleigehalts für den Schwellenwerte 80 mg/kg.



der einzelnen Werte nach den Flächenanteilen der zugehörigen Thiessen-Polygone berücksichtigt. In Tabelle 3- 13 sind die Unterschreitungswahrscheinlichkeiten aufgeführt. In den Abbildungen Abb. 3- 34 und Abb. 3- 35 sind beispielhaft die Unterschreitungswahrscheinlichkeiten für die Schwellenwerte 80 mg/kg und 1000 mg/kg dargestellt. Man erkennt in den unterschiedlichen homogenen Raumeinheiten die unterschiedlich hohen Unterschreitungswahrscheinlichkeiten. Generell sind die Unterschreitungswahrscheinlichkeiten der unteren Schwellenwerte kleiner als der oberen.

### 3.2.3.3 Transformation auf Indikatorwerte

Für jeden Schwellenwert und jeden Messpunkt wurden Indikatorwerte (entweder 0 oder 1) ermittelt, die angeben, ob ein Messwert des Bleigehalts diesen Schwellenwert unterschreiten oder nicht. Um auf den in Abschnitt 3.2.3.2 aufgeführten Standardprozess zu kommen, wurden die mittleren Unterschreitungswahrscheinlichkeiten von diesen subtrahiert. Diese Residuen können im Folgenden mit dem Ordinary Kriging interpoliert werden.

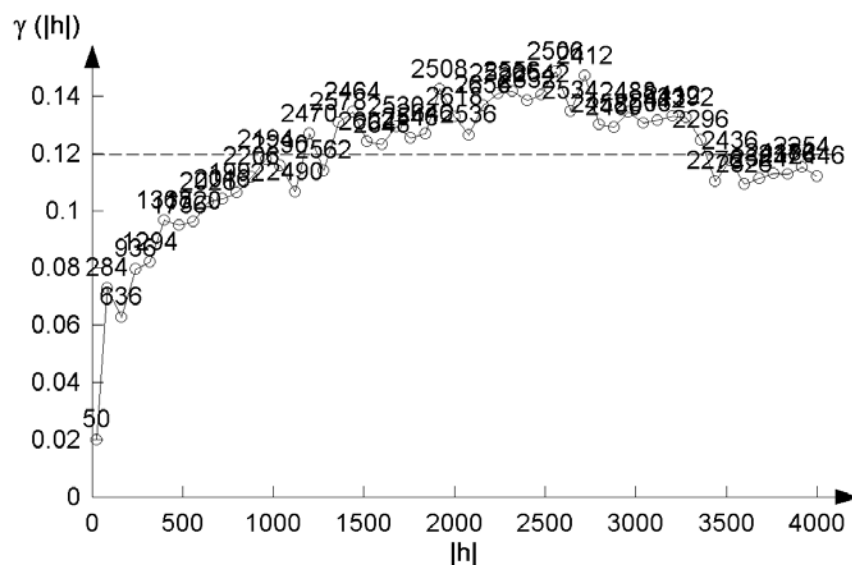
### 3.2.3.4 Variogrammanalyse

Für die Interpolation ist es notwendig, die räumliche Autokorrelation des Standardprozesses zu bestimmen. Das Indikator Kriging wird hier ähnlich wie im Median Kriging unter Verwendung des Variogramms eines mittleren Schwellenwertes angewendet. Als mittlerer Schwellenwert wurde 300 mg/kg gewählt. Das richtungsunabhängige experimentelle Variogramm ist in Abb. 3- 36 dargestellt. In Abb. 3- 37 ist eine richtungsabhängige Variogrammoberfläche dargestellt, die zeigt, dass keine starken Anisotropien vorliegen.

Damit konnte das folgende theoretische Variogramm an das experimentelle angepasst werden:

$$\gamma(h) = 0.066(1 - \exp(-3h/23800)) + 0.07(1 - \exp(-3h/280))$$

Dieses ist auch in Abb. 3- 38 dargestellt.



**Abb. 3- 36: Richtungsunabhängiges experimentelles Variogramm des Bleigehalts im Indikator Kriging zum Schwellenwert 300 mg/kg.**

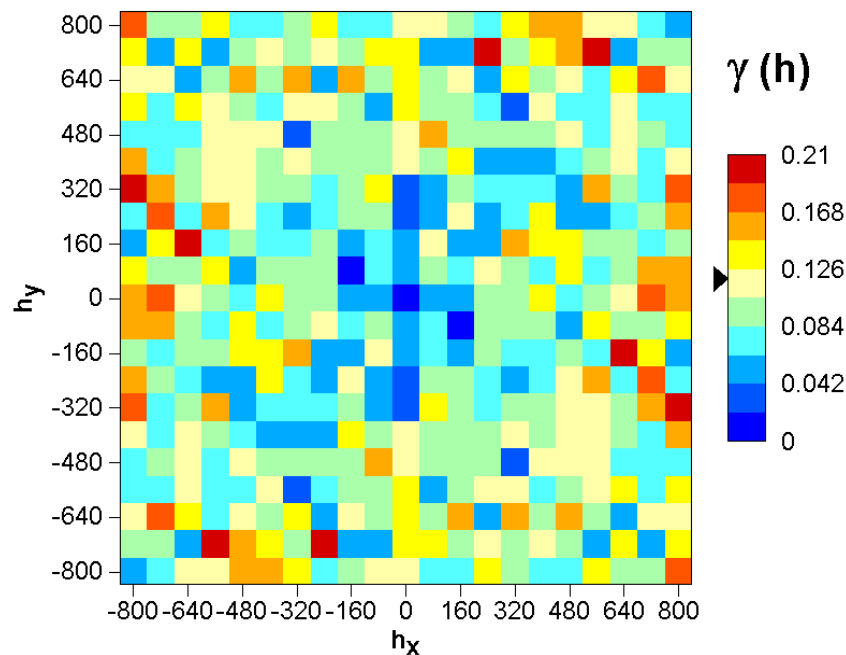


Abb. 3- 37: Variogrammoberfläche des Bleigehalts im Indikator Kriging zum Schwellenwert 300 mg/kg.

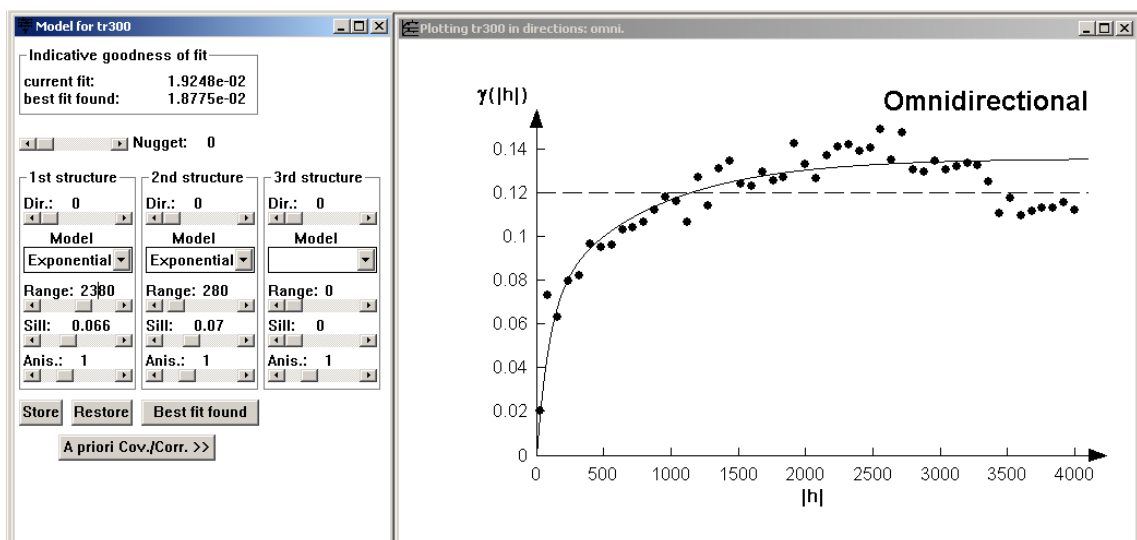


Abb. 3- 38: Theoretisches Variogramm des Bleigehalts im Indikator Kriging zum Schwellenwert 300 mg/kg.

### 3.2.3.5 Bestimmung der lokalen Bleigehalt-Verteilungen

Mit Hilfe des im vorherigen Abschnitt aufgeführten Variogramms werden die transformierten Indikatorwerte für die zwölf Schwellenwerte interpoliert und danach rücktransformiert. Als Ergebnis erhält man zwölf Karten der Unterschreitungswahrscheinlichkeit für den jeweiligen Schwellenwert. Als Beispiele finden sich in den Abbildungen Abb. 3- 39 und Abb. 3- 40 die lokalen Unterschreitungswahrscheinlichkeiten für die Schwellenwerte 80 mg/kg und 1000 mg/kg. Man erkennt hier die Abhängigkeit dieser von der Lage in den homogenen Raumeinheiten.

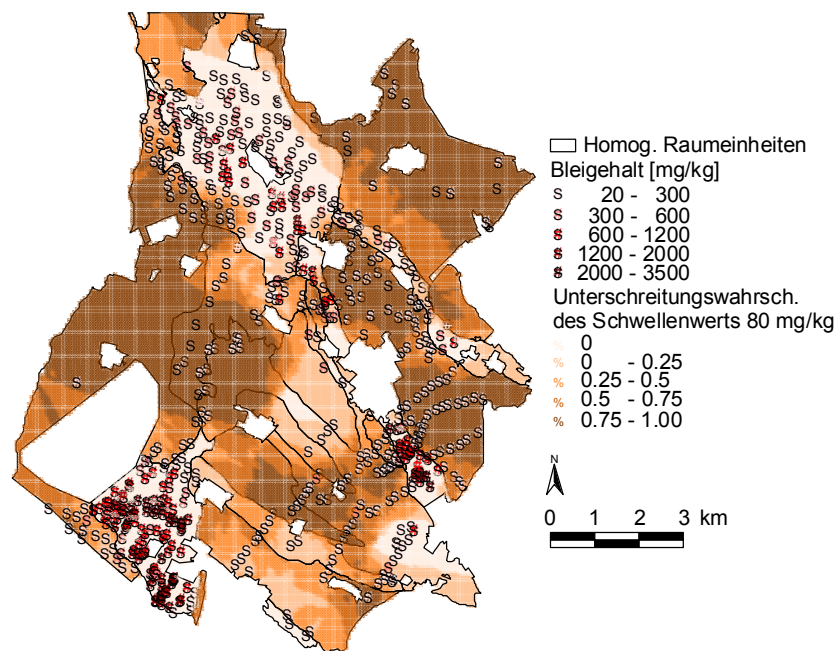


Abb. 3- 39: Unterschreitungswahrscheinlichkeiten des Bleigehalts für den Schwellenwert 80 mg/kg.

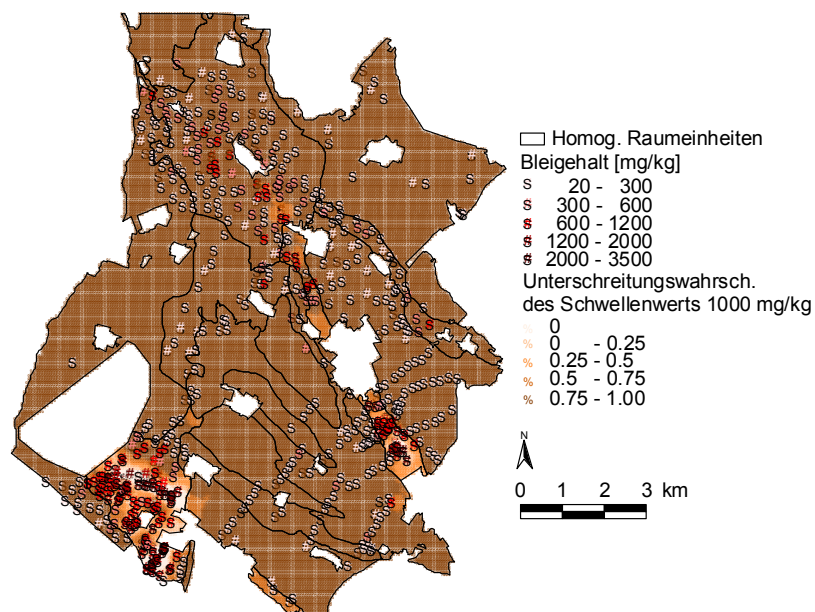


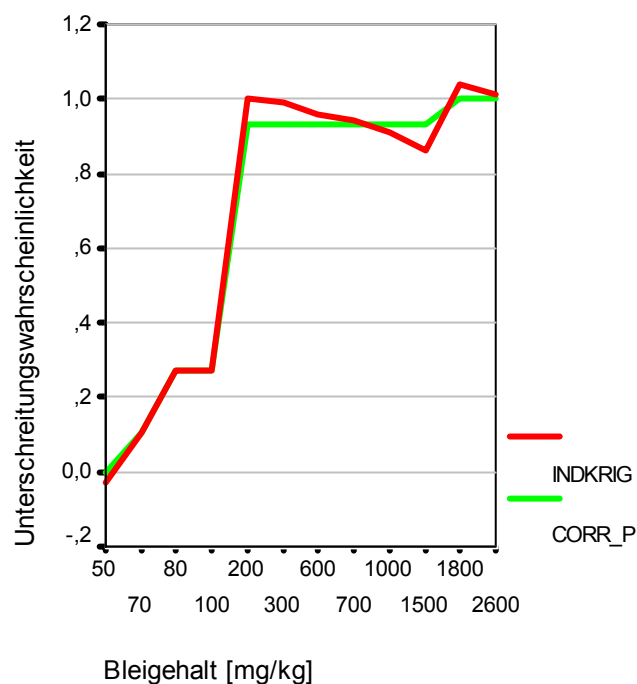
Abb. 3- 40: Unterschreitungswahrscheinlichkeit des Bleigehalts für den Schwellenwert 1000 mg/kg.





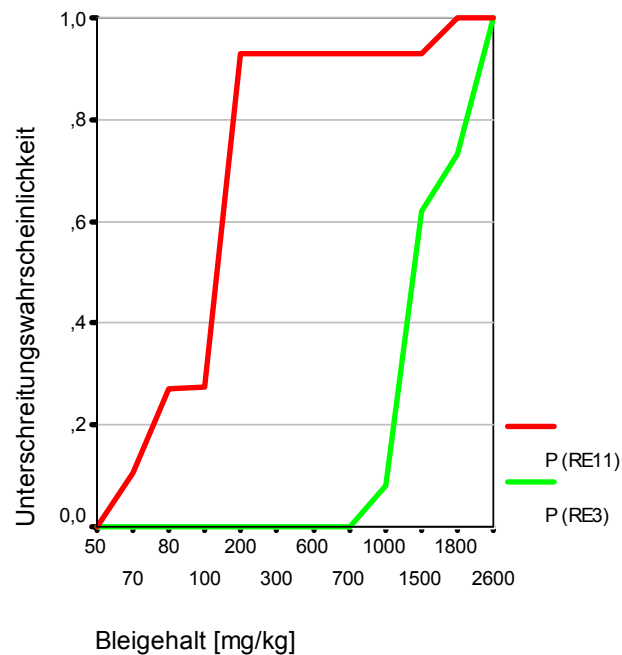
Aus diesen Unterschreitungswahrscheinlichkeiten können die lokalen Verteilungen des Bleigehalts bestimmt werden. Da die Unterschreitungswahrscheinlichkeiten für die unterschiedlichen Schwellenwerte unabhängig voneinander geschätzt worden sind, können Widersprüche zum Modell der Wahrscheinlichkeitsverteilungen entstehen. Es können Unterschreitungswahrscheinlichkeiten auftreten, die kleiner als 0 oder größer als 1 sind. Darüber hinaus können Unterschreitungswahrscheinlichkeiten für größere Schwellenwerte kleiner als für kleinere Schwellenwerte sein. Diese Widersprüche werden durch eine Monotonisierung der lokalen Unterschreitungswahrscheinlichkeiten aufgehoben. Ein Beispiel einer solchen Monotonisierung für den Interpolationspunkt mit Rechtswert 3399940 und Hochwert 5306320 ist in Abb. 3- 41 dargestellt.

Dass sich die lokalen Werteverteilungen des Bleigehalts tatsächlich von Ort und Ort und insbesondere zwischen den einzelnen homogenen Raumeinheiten z.T. stark voneinander unterscheiden, zeigt Abb. 3- 42. In dieser ist die lokale Verteilungen des Bleigehalts für den Interpolationspunkt mit Rechtswert 3399940 und Hochwert 5306320 aus Raumeinheit 11 mit einem Punkt mit den Koordinaten 3398260 und 5306440 aus Raumeinheit 3 verglichen. An dem Punkt der Raumeinheit 11 sind die Wahrscheinlichkeiten für kleine Werte des Bleigehalts wesentlich höher als an dem Punkt der Raumeinheit 3. Dieser Aspekt steht in Übereinstimmung damit, dass in der Raumeinheit 11 im Mittel wesentlich kleinere Werte vorkommen als in Raumeinheit 3.



**Abb. 3- 41: Monotonisierung der interpolierten lokalen Verteilung des Bleigehalts am Punkt mit Rechtswert 3399940 und Hochwert 5306320.**





**Abb. 3- 42: Vergleich der lokalen Verteilungen des Bleigehalts für den Interpolationspunkt mit Rechtswert 3399940 und Hochwert 5306320 aus Raumeinheit 11 und einem Punkt mit den Koordinaten 3398260 und 5306440 aus Raumeinheit 3.**

### 3.2.3.6 Bestimmung von Überschreitungswahrscheinlichkeiten

Aus den lokalen Werteverteilungen des Bleigehalts können nun für beliebige Schwellenwerte Überschreitungswahrscheinlichkeiten abgeleitet werden. Dies ist insbesondere für Vorsorge-, Prüf- und Maßnahmewerte der Bundesbodenschutzverordnung von Bedeutung. In Abb. 3- 43 ist die räumliche Verteilung der Überschreitungswahrscheinlichkeiten für den Vorsorgewert für die Bodenart Lehm-Schluff 70 mg/kg Pb und in Abb. 3- 44 die räumliche Verteilung für den Prüfwert für den Direktpfad Boden-Mensch für Park-/ Freizeitgebiete von 1.000 mg/kg dargestellt. Durch die räumliche Verteilung der Überschreitungswahrscheinlichkeiten können Gebiete mit unterschiedlichem hohem Gefahrenpotential abgegrenzt werden. Die in den beiden Abbildungen mit roter Farbe gekennzeichneten Flächen haben eine Überschreitungswahrscheinlichkeit von über 90%. Es muss davon ausgegangen werden, dass in diesen Gebieten der jeweilige Schwellenwert überschritten wird.

### 3.2.3.7 Bestimmung von lokalen Varianzen

Mit Hilfe des Indikator Kriging kann an jedem Punkt des Untersuchungsgebiets die Streuung der Werte des Bleigehalts geschätzt werden. Ein Maß für die Streuung ist die Varianz. Die Varianz der lokalen Verteilungen des Bleigehalts ist beispielhaft für Raumeinheit 4 in Abb. 3- 45 dargestellt. Auf eine graphische Darstellung der lokalen Varianzen des gesamten Untersuchungsgebiets wurde aufgrund der großen Werteunterschiede der lokalen Varianzen verzichtet. Man erkennt, dass in den Außenbereichen und in den Raumbereichen, in denen sowohl große als auch kleine Werte des Bleigehalts liegen, die lokale Varianz groß ist. In den Bereichen, in denen ähnlich hohe Werte vorliegen, ist die Streuung klein. Man kann daher die lokale Varianz als Maß für die Aussagesicherheit der Schätzung der Bleigehalte nehmen.

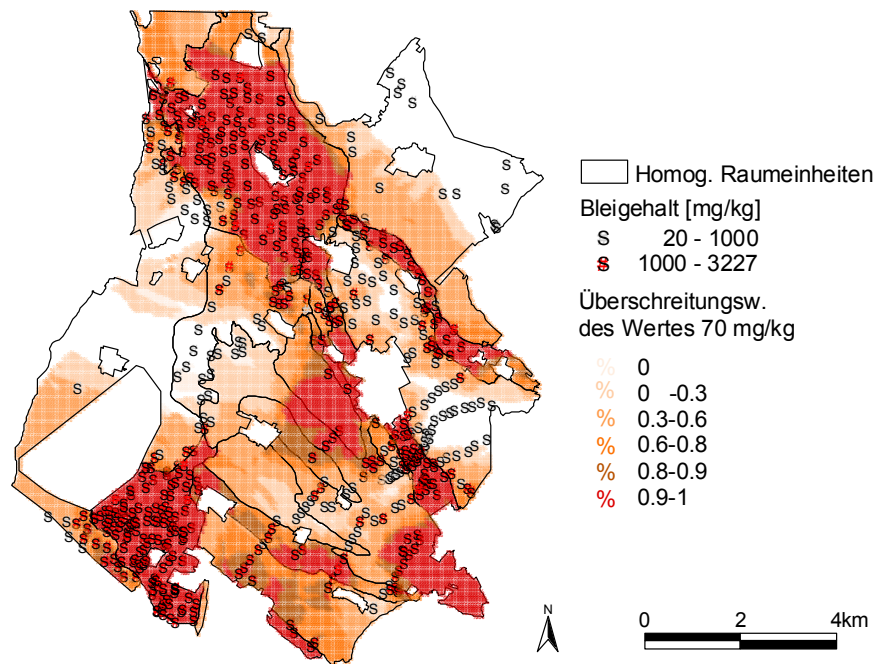


Abb. 3- 43: Überschreitungswahrscheinlichkeit des Bleigehalts für den Vorsorgewert für Lehm-Böden 70 mg/kg Pb.

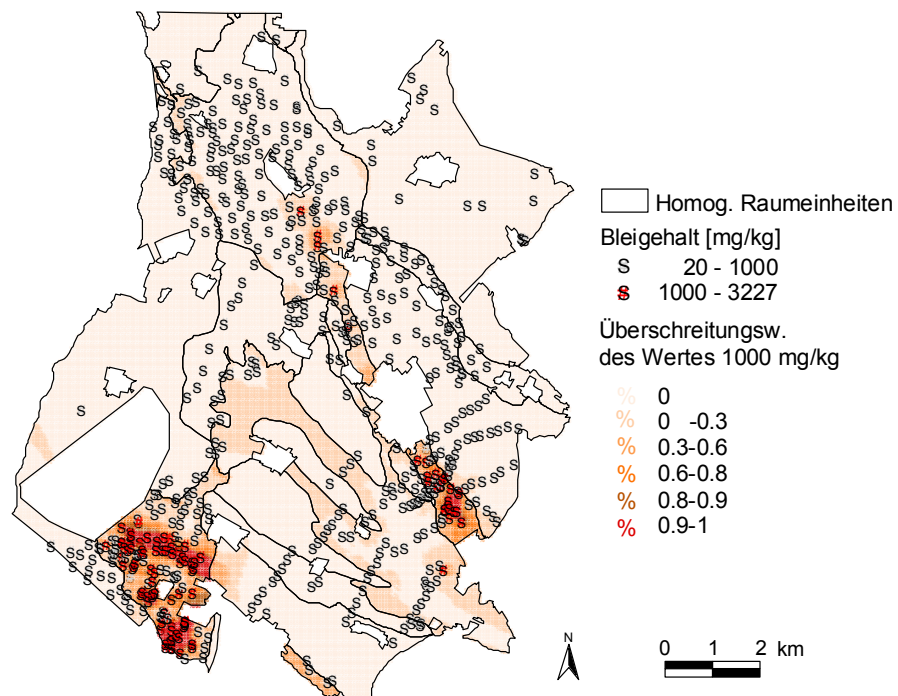
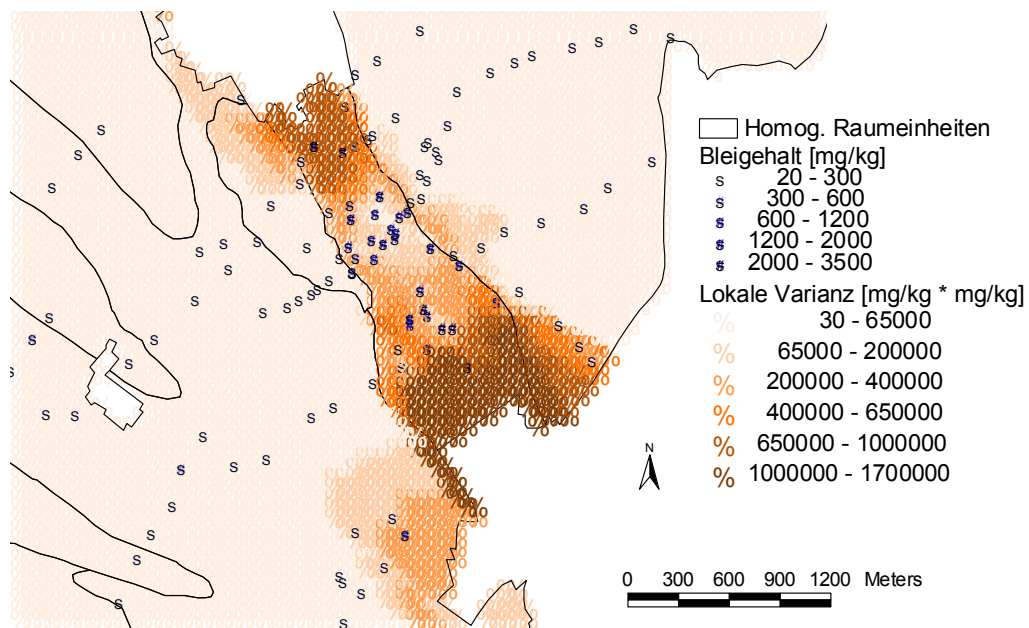


Abb. 3- 44: Überschreitungswahrscheinlichkeit des Bleigehalts für den Prüfwert für den Direktpfad Boden-Mensch für Park-/Freizeitgebiete von 1000 mg/kg.



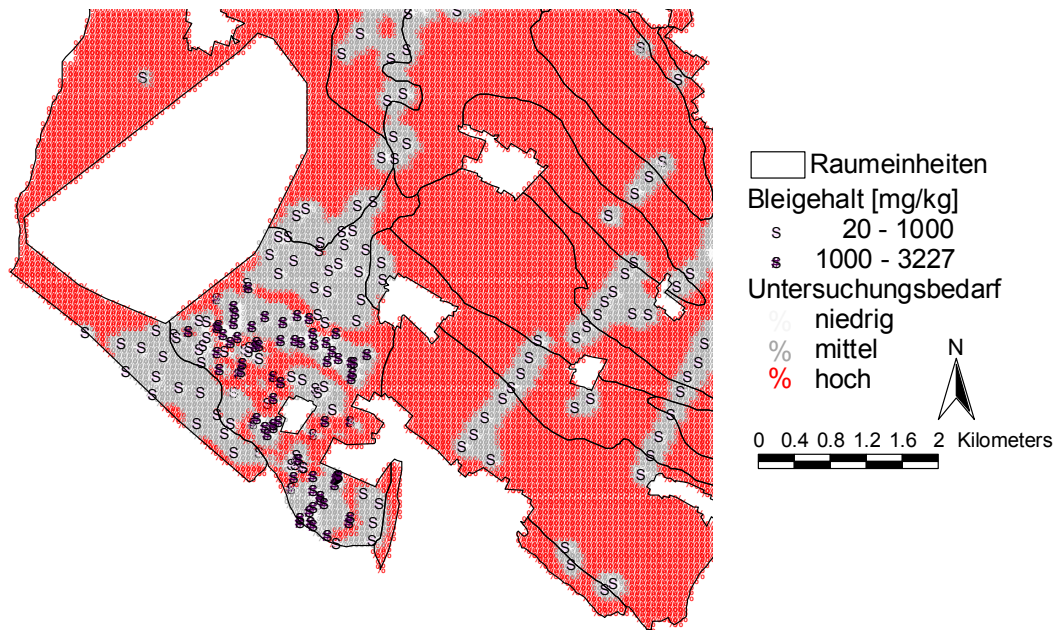
**Abb. 3- 45: Lokale Varianzen des Bleigehalts in Raumeinheit 4.**

### 3.2.3.8 Messnetzplanung

Die Ergebnisse des Indikator Kriging können für die weitere Messnetzplanung verwendet werden. Wie schon in der Datenvorverarbeitung erläutert wurde, kann das Messnetz des Bleigehalts in der Staufener Bucht nicht ohne Einschränkungen als repräsentativ angesehen werden. Für eine Verbesserung der Schätzgüte ist daher eine Verdichtung des Messnetzes zu empfehlen.

Für die Bestimmung weiterer Probennahmestellen werden zwei Aspekte der Aussagesicherheit berücksichtigt. Zum einen soll das Messnetz gerade in großen Gebieten, in denen bisher keine Messungen vorliegen, verdichtet werden. Zum anderen soll mit dem Messnetz eine möglichst genaue Abschätzung der Überschreitung des Bleigehalts bestimmter Schwellenwerte ermöglicht werden. Die Krige-Varianz ist ein aussagekräftiges Maß für den statistischen Abstand eines Punktes vom bestehenden Messnetz. Die räumliche Verteilung der Überschreitungswahrscheinlichkeiten gibt einen Hinweis auf die Genauigkeit der Abschätzung von Überschreitungen. Durch die Kombination dieser beiden Informationen, der Krige-Varianz und der Überschreitungswahrscheinlichkeit, können abgesicherte Empfehlungen für die weiteren Probennahmestellen gemacht werden.

Für die Messnetzplanung des Bleigehalts wurde die Karte der Krige-Varianz des Indikator Kriging für den Schwellenwert 300 mg/kg mit der Karte der Überschreitungswahrscheinlichkeit für den Prüfwert 1000 mg/kg verschnitten. Aus den Werten der Krige-Varianz wurden drei Klassen der Dringlichkeit der Nachbeprobung gebildet: niedrig 0-0.1 mg/kg\*mg/kg, mittel 0.1-0.13 mg/kg\*mg/kg, hoch > 0.13 mg/kg\*mg/kg. Aus den Überschreitungswahrscheinlichkeiten für den Prüfwert 1000 mg/kg wurden zwei Klassen der Dringlichkeit der Nachbeprobung gebildet: niedrig 0-0.5, 0.8-1.0 und hoch 0.5 –0.8. Aus der Kombination dieser beiden Klassifizierungen wurde eine Karte der Dringlichkeit der Nachbeprobung gemacht. Diese ist in Abb. 3- 46 dargestellt. Man erkennt, dass nicht nur in Gebieten, in denen wenige Messwerte vorliegen, der



**Abb. 3- 46: Karte des Untersuchungsbedarfs für den Bleigehalt in der Staufender Bucht in der homogenen Raumeinheit 3.**

Untersuchungsbedarf hoch ist, sondern auch in den Gebieten, in denen der Bleigehalt ungefähr dem Schwellenwert 1000 mg/kg entspricht. Hier sollte nachbeprobet werden, um eine sichere Aussage über den Verlauf der Grenze zwischen Werten oberhalb und unterhalb des Grenzwertes zu bekommen. In Abb. 3- 46 sind auch Gebiete für eine Nachbeprobung gekennzeichnet, in denen der Bleigehalt kleine Werte aufweist. Dies ist nach Experteneinschätzung nicht notwendig. Durch die Einbeziehung der Größe der Bleigehalte in der Klassifizierung des Untersuchungsbedarfs könnte dieser Aspekt berücksichtigt werden.



## 4 FAZIT

In den beiden vorgestellten Auswertebeispielen wurde ein Überblick darüber gegeben, welche statistischen und geostatistischen Methoden zur Beschreibung der räumlichen Eigenschaften von Stoffgehalten im Oberboden notwendig sind und unter welchen Voraussetzungen sie angewendet werden dürfen. Die Ergebnisse der Auswertebeispiele liefern wichtige Anhaltspunkte für die im folgenden 3. Teil des Berichts beschriebenen Empfehlungen für die Anwendung von statistischen und geostatistischen Methoden im Bodenschutzrecht. Insbesondere geben sie einen Überblick über die Möglichkeiten zur Beschreibung der Aussagesicherheit von räumlichen Schätzungen. Es hat sich gezeigt, dass sowohl statistische als auch geostatistische Methoden notwendig sind, um die räumlichen Charakteristika von Stoffgehalten in Böden umfassend zu analysieren. Innerhalb der Auswertebeispiele konnten natürlich nicht alle räumlichen Charakteristika der betrachteten Stoffgehalte untersucht werden. Darüber hinaus können in anderen Untersuchungen weitere, hier nicht aufgeführte Methoden und Datengrundlagen notwendig sein.

Aus den Voruntersuchungen zu den von den Ländern eingesetzten Auswerteverfahren (Teil 1 des Abschlussberichts) wurde eine Schrittfolge für die Durchführung der einzelnen Arbeitsschritte aufgestellt, welches Grundlage für die Vorgehensweise in den Auswertebeispielen war. Das Schrittschema hat sich in den Auswertebeispielen bewährt.

Es hat sich gezeigt, dass die statistischen und geostatistischen Auswerteverfahren nicht voneinander unabhängige nebeneinander stehende Verfahren sind, sondern dass sie aufeinander aufbauen. In der Schrittfolge stellt die statistische Auswertung der punktbezogenen Daten über Stoffgehalte in Böden den ersten Auswerteschritt dar, um die Daten in geeigneter Form zu klassifizieren und die jeweiligen Klassen mit Hilfe der statistischen Kenngrößen zu charakterisieren, auf den letztendlich die geostatistischen Verfahren zur Bestimmung der räumlichen Verteilungsmuster aufsetzen. Andererseits kann wie im Falle der Bestimmung der Hintergrundwerte die Schrittfolge nach der statistischen Auswertung der Daten abgebrochen werden.

Weiterhin hat sich herausgestellt, dass die Visualisierung von Daten und Ergebnissen während der gesamten Durchführung der statistischen und geostatistischen Analysen von großer Bedeutung ist. Nach Aufbereitung und Validierung der Daten- und Kartengrundlagen sollten diese deshalb in einem GIS-Projekt zur Visualisierung der Datenlage zusammengeführt werden. Das GIS Projekt sollte während der gesamten Analysen um die raumbezogenen Ergebnisse der jeweiligen Untersuchungsschritte ergänzt und mit den statistischen Ergebnissen verlinkt werden. Am Ende der Untersuchung sollte das GIS-Projekt alle relevanten Ergebnisse beinhalten und kann dadurch Ausgangspunkt für weitergehende Auswertungen sein.

Die Visualisierung ist insbesondere ein wichtiges Hilfsmittel bei der Aufdeckung von Fehlerquellen. Da es eine ganze Reihe von Fehlerquellen gibt, durch die die Ergebnisse der statistischen und geostatistischen Analysen verfälscht werden können, sollte nach jedem Analyseschritt eine Plausibilitätsprüfung durchgeführt werden.