



Karten der Schwermetallgehalte in Oberböden Nordrhein-Westfalens.

Materialien zur Altlastensanierung und zum Bodenschutz **MALBO 21**

Materialien zur Altlastensanierung und zum Bodenschutz
Band 21

**Karten der Schwermetallgehalte
in Oberböden Nordrhein-Westfalens**

Dipl. Geogr. Kathrin Heidbrink, Dipl. Ing. (FH) Jörg Leisner-Saaber

Landesumweltamt Nordrhein-Westfalen
Essen 2005

Impressum

- Herausgeber Landesumweltamt Nordrhein-Westfalen
Wallneyer Str. 6 • 45133 Essen
Telefon 0201 7995 - 0
Telefax 0201 7995 - 1446
E-Mail: poststelle@lua.nrw.de
Essen 2005
- Redaktion: Dipl. Geogr. Kathrin Heidbrink,
Dipl. Ing. (FH) Jörg Leisner-Saab
- ISSN **1432-3575** (Materialien zur Altlastensanierung
und zum Bodenschutz)

Informationsdienste: **Umweltdaten und Fakten** aus NRW sowie **Fachinformationen** zu Umweltthemen (Wasser, Boden, Luft, Abfall, Altlasten, Anlagen / Umwelttechnik, Lärm / Erschütterungen, Radioaktivität, Licht / Elektromog, Gentechnik, Stoffdaten):

- Internet unter www.landesumweltamt.nrw.de
- Aktuelle Luftqualitätswerte zusätzlich im
 - Telefonansagedienst (02 01) 1 97 00
 - WDR-Videotext (3. Fernsehprogramm, Tafeln 177 bis 179)

Bereitschaftsdienst: Nachrichtensbereitschaftszentrale des LUA NRW (24-Std.-Dienst):
Telefon (0201) 71 44 88

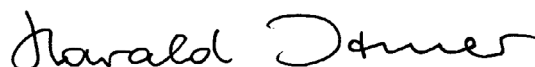
Vorwort

Gemäß § 6 Landesbodenschutzgesetz (LbodSchG NRW) führt das Landesumweltamt das Fachinformationssystem Stoffliche Bodenbelastung (FIS StoBo) und wertet die darin enthaltenen Daten über die Schadstoffgehalte nordrhein-westfälischer Böden aus. Dies erfolgte in der Vergangenheit bereits u. a. durch die Auswertungen zur Aktualisierung der Hintergrundwerte, die in der in 2004 erschienenen Schrift „FIS StoBo – Das Fachinformationssystem Stoffliche Bodenbelastung in NRW“ dokumentiert sind.

In einem weitergehenden Schritt wurden nun die im FIS StoBo als Punktdaten vorliegenden Informationen über Schwermetallgehalte in Böden unter Anwendung geostatistischer Verfahren so ausgewertet, dass eine Übertragung „vom Punkt in die Fläche“ ermöglicht wird. Im Ergebnis konnten so erstmals flächendeckende Karten über die geschätzten Schwermetallgehalte der Oberböden in Nordrhein-Westfalen außerhalb der Siedlungsgebiete erstellt werden. Grundsätzlich wurden dabei weitgehend die Erfahrungen genutzt, die bereits aus der vom Landesumweltamt früher entwickelten und von den Unteren Bodenschutzbehörden angewendeten Methodik zur Erstellung digitaler Bodenbelastungskarten vorliegen.

Das Landesumweltamt versteht die entwickelten Übersichtskarten in erster Linie als Beitrag zur Beschreibung der Umweltsituation in Nordrhein-Westfalen. Aus dem zwangsläufig sehr kleinen Maßstab, in dem sie erstellt wurden, ergibt sich, dass sie selbstverständlich nicht direkt für Vollzugsaufgaben der Bodenschutzbehörden geeignet sein können. Dafür sind die detaillierten Informationen aus den mit Landesförderung von den Unteren Bodenschutzbehörden selbst erstellten digitalen Bodenbelastungskarten im größeren Maßstab erforderlich. Aus den landesweiten Übersichtskarten können jedoch potenzielle Belastungsgebiete erkannt werden, in denen detailliertere Untersuchungen vorrangig sind. Daneben lassen sich aus den Karten bestehende Datenlücken erkennen, die sich in Gebieten mit hoher Schätzunsicherheit zeigen bzw. auf Grund derer generell keine sinnvolle geostatistische Auswertung möglich ist. Um solche bisher nur lückenhaft vorliegenden Informationen zu ergänzen, können auf dieser Basis systematische Ergänzungsuntersuchungen eingeleitet werden. So werden zur Zeit der Herausgabe dieser Schrift durch das Landesumweltamt in Zusammenarbeit mit dem Geologischen Dienst NRW unterrepräsentierte Gebietseinheiten gezielt nachuntersucht. Dabei werden neben den hier dargestellten Elementen weitere Schadstoffe, wie Thallium, PAK, PCB und PCDD/F einbezogen, so dass die Karten zukünftig ergänzt und fortgeschrieben werden können.

Essen 2005



Dr.-Ing. Harald Irmer
Präsident des
Landesumweltamtes NRW

Inhaltsverzeichnis

Impressum	2
Vorwort	3
Inhaltsverzeichnis.....	5
1. Hintergrund, Einleitung.....	7
2. Datengrundlagen und Datenselektion aus dem Fachinformationssystem Stoffliche Bodenbelastung.....	9
3. Berücksichtigung geogener und anthropogener Einflüsse auf die Stoffgehalte in Oberböden.....	10
3.1 Nutzung	10
3.2 Bodenausgangsgesteine in NRW	11
4. Vorbereitung der FIS StoBo-Daten.....	12
5. Ergebnisse	14
5.1 Statistische Auswertungen.....	14
5.2 Geostatistische Auswertungen.....	16
6. Diskussion und Ausblick.....	25
7. Literatur.....	31
Anhang	33
1. Prüfung der Daten	33
1.1 Allgemeine Anforderungen an die Datenqualität.....	33
1.2 Definition spezifischer Belastungen.....	34
1.3 Statistische Ausreißerdefinition.....	38
2. Statistische und geostatistische Methoden zur Kartenerstellung	39
2.1 Statistische Kennwerte	39
2.2 Räumliche Interpolation	39
2.2.1 Methode.....	40
2.2.2 Korrekturfaktoren.....	41
2.2.3 Modelloptimierung und Variogrammanalyse.....	42
2.2.4 Erstellung der Karten der Schwermetallgehalte	50
2.2.5 Rückrechnung und Weiterverarbeitung der Ergebnisse	52

1. Hintergrund, Einleitung

Kenntnisse über die Stoffgehalte von Böden sind für den Bodenschutz von zentraler Bedeutung. Dazu gehören zunächst qualitative wie quantitative Informationen beispielsweise zu Vorkommen, Verhalten und Wirkungen einzelner Stoffe. Eine wichtige Rolle spielt jedoch auch die räumliche Verteilung der Stoffe oder Stoffgruppen. Allerdings weisen auf Grund der hohen räumlichen Heterogenität aller Bodeneigenschaften auch die Stoffgehalte eine hohe Variabilität im Raum auf. Die Möglichkeit, Rückschlüsse aus gemessenen Gehalten an einem Untersuchungspunkt auf benachbarte, nicht untersuchte Flächen zu ziehen, ist dadurch erheblich eingeschränkt.

Auf konventionellem Wege lassen sich Informationen über die Gehalte einzelner Stoffe auf der Fläche nur durch deren analytische Bestimmung erlangen. Es ist jedoch offensichtlich, dass sich umfangreiche Aufgaben im Bodenschutz allein mit messtechnischen Mitteln, d.h. mit der Erhebung neuer Daten kaum mit vertretbarem Aufwand lösen lassen. Man ist daher vielfach auf Schätzungen und Prognosen unter Zuhilfenahme mathematischer und statistischer Verfahren angewiesen. Dabei können vorliegende Kenntnisse über Zusammenhänge mit anderen Flächeneigenschaften, die die Gehalte in Böden beeinflussen, genutzt werden.

Zur Beurteilung der Stoffgehalte nicht untersuchter Flächen gibt es unterschiedliche Möglichkeiten. So können mit Hilfe bestimmter Konventionen statistisch repräsentative Werte für fest definierte Flächeneinheiten abgeleitet werden (HINDEL UND FLEIGE 1991; SPÄTE UND WERNER 1991; FLIEGNER UND REINIRKENS 1993; JONECK UND PRINZ 1995). Diese Methode wurde für die Ermittlung von Hintergrundwerten angewendet. Alternativ können aber auch Stoffgehalte mit Hilfe statistischer und geostatistischer Verfahren aus den vorhandenen Informationen der Umgebungssituation abgeschätzt werden. Beide Methoden bieten die grundsätzliche Möglichkeit zur kartographischen Darstellung der Bodenwerte über eine definierte Fläche.

Zur Ermittlung flächenbezogener Kenngrößen wurden für NRW Hintergrundwerte abgeleitet, die die statistische Verteilung der Schadstoffgehalte innerhalb homogener Raumeinheiten beschreiben. Diese Werte dienen z.B. in einer Vielzahl von Planungsaufgaben als Vergleichsmöglichkeit aktueller Messungen oder Zielgrößen planerischer Ausweisungen mit definierten Referenzwerten, soweit keine gebietspezifischen Hintergrundwerte bekannt sind.

Erstmals wurden Hintergrundwerte für Oberböden in NRW im Jahr 1994 (Ergänzungen 1996) ermittelt (LABO 1998). Für deren Aktualisierung im Jahr 2003 wurde der Datenbestand des Fachinformationssystems Stoffliche Bodenbelastung NRW (FIS StoBo) genutzt (LABO 2003). Dabei wurde die Berechnung der Hintergrundwerte für Schwermetalle erstmals differenziert nach Ausgangsgesteinen durchgeführt. Die Raumeinheiten wurden nach den Bezugsgrößen „Siedlungsstruktur“, „Ausgangsgestein“ und „Nutzung“ klassifiziert. Raumeinheiten, die durch spezifische Belastungsursachen, wie durch Überschwemmungen oder Immissionen, beeinflusst werden, wurden bei der Auswertung nicht berücksichtigt. Neben der tabellarischen Darstellung wurden die Hintergrundwerte auch flächenhaft in NRW-Übersichtskarten (Maßstab 1: 200.000) visualisiert. Dazu wurden die Hintergrundwerte (hier Perzentilwerte) der jeweiligen Raumeinheiten klassifiziert, den entsprechenden Flächen zugeordnet und so kartographisch veranschaulicht (MUNLV NRW 2004).

Bei einer solchen Darstellungsform werden die Stoffgehalte für verschiedene Nutzungsklassen und Klassen siedlungsstruktureller Einheiten gleichartig dargestellt. Darüber hinausgehende räumliche Strukturen können keine Berücksichtigung finden. So ist es bei dieser Darstellung prinzipiell unmöglich, die Belastungssituation benachbarter, jedoch unter anderer Nutzung stehender Flächen in die Betrachtung einzubeziehen. Als einheitlich ausgewiesene Bereiche werden gleich dargestellt, unabhängig davon, ob dort auch Messwerte von anders zugeordneten Proben vorliegen. Soll also die flächendeckende und räumliche Verteilung der aktuellen Stoffgehalte visualisiert werden, sind weitaus aufwändigere Methoden zur Flächeninterpolation über die Landesfläche anzuwenden. Zu den Verfahren liegen in NRW bereits umfassende Erfahrungen aus der Erstellung und Bearbeitung von digitalen Bodenbelastungskarten auf kommunaler Ebene (LUA NRW 2000) vor. Diese mit Hilfe geostatistischer Interpolationsverfahren (Kriging) erstellten Karten bieten zudem weitere Anwendungsmöglichkeiten, wie z.B. die Ermittlung und Visualisierung von Defiziten in den Datengrundlagen (Punktdaten).

Eine flächenhafte Darstellung der Stoffgehalte in Böden für die gesamte Landesfläche mit Hilfe von Interpolationstechniken liegt bisher nicht vor. Sie ist jedoch erforderlich, um z.B. Gebiete auf Landesebene identifizieren zu können, die bezüglich des vorherrschenden Belastungsniveaus relevant sind. Des Weiteren vermögen nur solche Verfahren bestehende Unsicherheiten bei der räumlichen Modellierung vorliegender Bodengehalte zu visualisieren und abzugrenzen.

Die Basis für die Entwicklung landesweiter Karten sind Daten zu Stoffgehalten in naturnah genutzten Böden der flächenrelevanten Nutzungsarten Wald, Acker und Grünland. In Siedlungsbereichen, insbesondere städtisch-industriellen Verdichtungsräumen werden an Böden grundsätzlich andere und kleinräumig sehr stark wechselnde Funktionsanforderungen gestellt. Das hat dazu geführt, dass durch verschiedene anthropogene Einflüsse auch die Eigenschaften der Böden in sehr spezifischer Weise, jedoch in unterschiedlichem Ausmaß, verändert wurden. Es verbleiben in diesen Gebieten häufig nur sehr kleine Flächen naturnaher Nutzung. Aus diesem Grund wurden Siedlungsbereiche für die vorliegende Auswertung bei der Darstellung der Stoffgehalte ausgeschlossen. Hierzu zählen alle städtisch geprägten Flächen, Industrie-, Gewerbe- und Verkehrsflächen sowie städtische Grünflächen, Sport und Freizeitflächen. Des Weiteren wurden Abbauf Flächen und Deponien nicht berücksichtigt.

Unter Berücksichtigung des sehr kleinen Maßstabes, in dem die Karten erstellt werden, ergibt sich daraus, dass sie selbstverständlich für planerische Aufgaben auf kommunaler Ebene nicht geeignet sein können. Die detaillierten Informationen aus den in kommunaler Bearbeitung entstandenen digitalen Bodenbelastungskarten (BBK) werden dadurch keinesfalls ersetzt.

Für das Verständnis sowie die Interpretationsfähigkeit der im vorliegenden Bericht entwickelten Karten ist die Kenntnis der angewandten Methodik von besonderer Bedeutung. Es wird daher ausdrücklich auf die Dokumentation der durchgeführten Arbeitsschritte verwiesen. Im Sinne einer besseren Lesbarkeit des Berichtes wird die Beschreibung der Methoden einschließlich der Begründung für deren Anwendung im Anhang des Berichtes dargestellt.

2. Datengrundlagen und Datenselektion aus dem Fachinformationssystem Stoffliche Bodenbelastung

Als Datengrundlage für die Berechnung und Darstellung flächenhafter Stoffgehalte in Böden Nordrhein-Westfalens steht das Fachinformationssystem Stoffliche Bodenbelastung NRW (FIS StoBo) zur Verfügung. Im Landesbodenschutzgesetz NRW (ANONYM 2000) vom Mai 2000 wird das Landesumweltamt NRW (LUA NRW) mit der Führung und Auswertung dieses Informationssystems beauftragt. Es sollen darin die Daten zur stofflichen Belastung von Böden in Nordrhein-Westfalen zentral gesammelt werden. Die Datenbank bildet somit die umfassendste Informationsgrundlage zu Stoffgehalten in Böden Nordrhein-Westfalens. Auf dieser Datengrundlage wurden auch die Auswertungen zu Hintergrundgehalten sowie zu deren räumlicher Darstellung (MUNLV NRW 2004) vorgenommen.

Das FIS StoBo enthält mit derzeit ca. 60.000 Einzeldatensätzen und den zugehörigen Metainformationen umfassende, punktbezogene Informationen zu persistenten Schadstoffen, insbesondere zu toxikologisch relevanten Schwermetallen und schwer abbaubaren organischen Verbindungen. In geringerem Umfang sind im FIS StoBo Daten über Parameter eingestellt, die die Mobilität der Schadstoffe beeinflussen können, wie beispielsweise pH-Wert, organische Substanz und Bodenart oder einzelne Nährstoffe wie z.B. Phosphat, Magnesium und Kalium. Untersuchungsergebnisse über leicht abbaubare oder flüchtige Stoffe werden im FIS StoBo nicht gespeichert.

Eingestellt sind Daten über Stoffgehalte der Böden, die aus unterschiedlichen Messprogrammen verschiedener Städte und Kreise sowie Landes- und Forschungseinrichtungen bzw. Verbände in NRW stammen und mit unterschiedlichen Zielsetzungen untersucht wurden. An den meisten Probenahmestandorten wurden dabei nur die oberen Bodenschichten bzw. -horizonte untersucht. Durch die Einstellung von Daten aus neueren Untersuchungsprogrammen wird das FIS StoBo fortlaufend erweitert und aktualisiert.

Die Konzeption des FIS StoBo als zentrale Datenbank heterogener Einzeldatenbestände bedingt, dass die vorliegenden Daten von sehr unterschiedlicher Qualität sein können. Die Auswertung des Gesamtbestandes erfordert deshalb sehr umfangreiche Vorarbeiten zur Selektion und Validierung.

Nicht alle im FIS StoBo vorliegenden Daten genügen den Qualitätsansprüchen zur Vergleichbarkeit der Daten, die für die Berechnung der Karten notwendig sind. Die durchgeführten Auswertungen beschränkten sich daher auf einen Teildatenbestand des FIS StoBo. Zur Berechnung der Karten der Schwermetallgehalte für Oberböden in NRW wurden die Daten nach bestimmten Kriterien (Genauigkeit des Raumbezuges, Nutzung, Probenahmetiefe, etc.) selektiert. Es wurden nur Daten in die Auswertungen einbezogen, deren Lagemaße der definierten Anforderung von mindestens 100m Genauigkeit entsprach. Des Weiteren wurden ausschließlich Daten der flächenrelevanten Nutzungsarten Acker, Grünland und Wald berücksichtigt. Die Stoffauswahl musste auf die Elemente beschränkt werden, für die Daten in ausreichendem Umfang vorliegen. Das sind zurzeit die Schwermetalle Blei, Cadmium, Zink, Kupfer, Chrom, Nickel und Quecksilber sowie das Halbmetall Arsen. Messwerte, die auf Grund der angewandten Analytik keine „Gesamtgehalte“ repräsentieren, wurden vernachlässigt.

Unter Berücksichtigung der dargestellten Zielsetzung der Auswertung und der Ansprüche an die Datenqualität standen zunächst 28.436 Datensätze als Eingangsgröße für die weiteren Betrachtungen zur Verfügung.

3. Berücksichtigung geogener und anthropogener Einflüsse auf die Stoffgehalte in Oberböden

Die räumliche Verteilung von Stoffgehalten in Böden hängt von unterschiedlichen Einflussfaktoren ab. So bestimmen sowohl geogene Faktoren, insbesondere das bodenbildende Ausgangsgestein, als auch anthropogene Einflüsse, wie Landnutzung und Stoffeinträge über Immissionen, die Gehalte. Um der Realität angepasste Darstellungen zu erreichen, aber auch um geeignete Interpolationsmethoden anwenden zu können, müssen diese Einflussfaktoren bei der Durchführung der einzelnen Schritte berücksichtigt werden.

3.1 Nutzung

Die nutzungsbedingte Bodenbearbeitungstiefe sowie nutzungsspezifische Stoffeinträge machen eine Differenzierung der Böden nach Nutzungsarten notwendig. So bewirkt beispielsweise das Pflügen der Äcker eine Durchmischung des Bodens und die Ausbildung eines einheitlichen Pflughorizontes. Unter Wald führt die Ausbildung einer Streuauflage und die Entwicklung bestimmter Bodeneigenschaften, z.B. pH-Wert, zur charakteristischen Bodenausbildung. Nutzungsbedingte Stoffeinträge, z.B. durch Düngung oder Kalkung, oder der Eintrag luftbürtiger Schadstoffe beeinflussen zudem die Verteilung der Schadstoffe im Boden.

Die Differenzierung im Hinblick auf die folgenden Auswertungen wurde für die Nutzungsarten Acker, Grünland und Wald nach den jeweiligen nutzungsspezifischen Entnahmetiefen (Tabelle 1) vorgenommen. Für die Auswahl der Daten nach Horizontmerkmalen und Entnahmetiefe wurde die Definition für Oberboden der LABO-Redaktionsgruppe berücksichtigt (LABO 2003):

- Oberboden = oberster Mineralbodenhorizont und weitere A-Horizonte, deren Untergrenze ≤ 30 cm für Acker und ≤ 10 cm für Grünland und Wald ist.

Tabelle 1: Bodennutzungsarten und relevante Bodenhorizonte bzw. Entnahmetiefen

Nutzung	Horizont	Entnahmetiefe
Acker	A-Horizont	0-30 cm
Grünland	A-Horizont	0-10 cm
Wald	A-Horizont	ca. 0-10 cm

Als Grundlage für die vorliegende Auswertung wurden die Landnutzungen aus den Daten zur Bodenbedeckung des CORINE Landcover (Stat. Bundesamt) herangezogen (CORINE = CoORDination of INformation on the Environment).

3.2 Bodenausgangsgesteine in NRW

Die Gehalte anorganischer Stoffe in Oberböden werden neben diffus eingetragenen Stoffen (anthropogen) auch von den Gehalten des oberflächennahen Ausgangsgesteines (lithogen) und den durch die Bodenentwicklung bedingten Stoffan- und -abreicherungen (pedogen) beeinflusst. Die geogene (lithogen + pedogen) Komponente beeinflusst die Gehalte der Schwermetalle im Oberboden in Abhängigkeit von der Zusammensetzung des Ausgangsgesteines. Dieser Einfluss kann durch ein mögliches Auftreten unterschiedlich mächtiger Deckschichten variieren.

Auf Flächen, die geogen bedingt für bestimmte Stoffe (z.B. Ni, Cr) erhöhte Gehalte aufweisen, reduziert sich der Einfluss anthropogener Einträge. Aus diesem Grund ist insbesondere bei diesen Elementen das Ausgangsgestein von besonderer Bedeutung.

Da die Informationen zum Bodenausgangsgestein bzw. zum Substrat nur in einigen Fällen im FIS StoBo abgelegt sind, wurde eine Verschneidung mit der Bodenkarte 1:50.000 (BK 50) und der Geologischen Karte 1:100.000 (GK 100) durch den Geologischen Dienst NRW vorgenommen. Auf diese Weise wurden die benötigten Zusatzinformationen zum oberflächennahen Gestein den einzelnen Probenahmepunkten des FIS StoBo zugewiesen.

Für die Auswertung war eine Aggregierung der vorliegenden 172 Einheiten der oberflächennahen Gesteine notwendig. Die von der Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe vorgeschlagene Aggregierung (UTERMANN ET AL. 1999) erscheint nach Aussage des GD für die vorliegende NRW-Auswertung nicht sinnvoll bzw. nicht nachvollziehbar. Aus diesem Grund wurde in Anlehnung an vorhandene Aggregierungen ein Vorschlag zur einheitlichen Zusammenfassung der Einheiten der oberflächennahen Gesteine von LUA und GD erarbeitet. Dieser Vorschlag wurde auch bereits für die Ermittlung der Hintergrundwerte eingesetzt.

Nach einem ersten Aggregierungsvorschlag liegen nun 13 Einheiten vor (vgl. Tabelle 2). Die Aggregierungseinheit *Vulkanite* ist vom Flächenanteil so unbedeutend, dass eine Auswertung sinnvoll nicht möglich ist.

Tabelle 2: Einheiten oberflächennaher Gesteine nach Aggregation

Einheit	NRW-Name	Weitere Aggregation
1	Flugsand, Sandlöss	
2	(Schwemm-) Löss	
3	Karbonathaltiges Festgestein	
4a	Fluss-, Bach-, Hochflutablagerung, (Wiesen-) Kalkausfällung, Schwemmlöss	Fluviatile Ablagerungen
4b	Terrassenablagerungen	
5	Fluvioglaziale Ablagerungen	
6	Moräne	
7a	Hochmoor	Moor
7b	Niedermoor	
8	Präquartäres Lockergestein	
9	Sandiges Festgestein	
10	Tonig-schluffiges Festgestein	
11	Fließerde und Verwitterungsbildung	
12a	Basische Vulkanite	Vulkanite
12b	Saure Vulkanite	
13	Technogene und natürliche Substrate¹	

¹ Die Einheit *Technogene und natürliche Substrate* wird für die Auswertung nicht berücksichtigt.

4. Vorbereitung der FIS StoBo-Daten

Die Anwendung statistischer und geostatistischer Methoden stellt bestimmte Qualitätsanforderungen an den auszuwertenden Datenbestand. Zur Validierung und Harmonisierung der Datengrundlage ist deshalb eine umfangreiche Datenvorverarbeitung und –exploration notwendig. Ziel ist dabei der weitestgehende Ausschluss eventuell fehlerhafter Messwerte unter Berücksichtigung fachlicher Plausibilitätskontrollen und statistischer Methoden zur Ausreißeridentifizierung.

Die vorliegenden Datenkollektive für verschiedene Stoffe in NRW weisen in der Regel extrem linksschiefe Verteilungen der Analysenwerte auf. Die hier angewandten Verfahren erfordern jedoch in der Regel normalverteilte Datenbestände. Eine vorbehaltlose statistische Beurteilung ist somit zunächst nicht ohne weiteres zulässig.

Extrem hohe oder niedrige Werte können über zwei grundsätzlich verschiedene Wege als Ausreißer erkannt werden:

1. Flächen mit punktuell erhöhten Stoffkonzentrationen können durch Auswertung ursachenbezogener Kriterien identifiziert werden. So ist davon auszugehen, dass Datensätze, bei denen die Untersuchung Hinweise auf Altstandorte oder Altablagerungen ergeben hat, für die Umgebungssituation untypische Stoffgehalte aufweisen. Solche Daten müssen daher von der Auswertung ausgenommen werden, soweit dieses aus den Metainformationen des Untersuchungsprogrammes zu entnehmen ist. Gleiches gilt für Datensätze, denen nach Verschneidung mit BK 50 und Geologischer Karte als bodenbildendes Ausgangssubstrat die Einheit „technogene oder natürliche Substrate“ zugeordnet wurde. Punktuelle oder kleinräumig höhere Konzentrationen liegen in relevanten Ausmaßen auf Altstandorten oder Altablagerungen vor. Daneben finden sich entsprechende Flächen insbesondere in Gebieten mit kleinräumig und oberflächennah anstehenden erzführenden Gesteinen, in Überschwemmungsgebieten einiger Flüsse sowie in Gebieten kleinräumig erhöhter Immissionsbelastung. Auch solche Daten sind im Rahmen räumlicher Auswertungen gesondert zu betrachten.
2. Außergewöhnlich hoch belastete Flächen bzw. Punktdaten können auch anhand verschiedener statistischer Ausreißertests ermittelt werden. Im Rahmen dieser Auswertung wurden Extremwerte mit Hilfe von Interquartiltests (50.P-5) (UMWELTBUNDESAMT 2002) identifiziert. Auf Grund der sehr hohen Probenzahl und Varianz der Werte empfiehlt sich dieses auf Median und Interquartil der Originaldaten basierende Verfahren, das Extremwerte relativ sicher erkennt.

Bei den Auswertungen zeigte sich, dass die auf statistischem Weg erkannten Ausreißer i.d.R. den über inhaltliche Merkmale definierten Ausschlussflächen entsprachen. Für die weitere Bearbeitung wurde daher in einem iterativen Prozess zunächst der Ausreißerbehandlung nach inhaltlichen Kriterien der Vorzug gegeben. Die so eingeschränkte Datenbasis wurde in anschließenden statistischen Prüfungen auf Plausibilität und Konsistenz untersucht.

Anhand definierter Kriterien (Anhang 1.1) für spezifisch belastete Flächen (s.o.) wurden 2.796 Datensätze von der weiteren Auswertung ausgeschlossen. Bei weiteren Auffälligkeiten wurde anschließend versucht „untypische“ Werte innerhalb des Datenkollektives zu identifizieren, die zu Verzerrungen der Ergebnisse führen können.

Die Ursachen für solche untypischen Werte können vielfältiger Art und Ursprungs sein. Der Grund für eine untypische Belastung kann sowohl in lokalen Kontaminationen, die nicht über die definierten Ausschlussflächen eliminiert wurden, als auch in nicht dokumentierten, angewandten Methoden der Probenahme oder Analytik liegen. Um Analysenwerte zu identifizieren, die auch nach der Berücksichtigung der Ausschlussflächen offensichtlich nicht zum Datenkollektiv gehören, wurden weitergehende Ausreißerkorrekturen durchgeführt (Anhang 1.2). Auf diesem Wege wurden 211 weitere Datensätze als Ausreißer erkannt und von der Auswertung ausgeschlossen.

Damit standen nach Durchführung aller Selektionsschritte ca. 25.000 Datensätze für die abschließende Kartenerstellung zur Verfügung.

5. Ergebnisse

5.1 Statistische Auswertungen

Wie sich diese Probenzahlen auf die Einheiten oberflächennaher Gesteine sowie auf die Nutzungseinheiten verteilen, ist aus den Tabellen 3 und 4 zu entnehmen.

Tabelle 3: Verteilung der Proben auf die Einheiten oberflächennaher Gesteine

Oberflächennahes Gestein	%-Anteil Fläche NRW	Anzahl der Proben	%-Anteil Proben
Flugsand, Sandlöss	16,5	3.092	12,2
(Schwemm-) Löss	27,0	10.204	40,1
Karbonathaltiges Festgestein	0,4	103	0,4
Fluviatile Ablagerungen	22,9	5.584	21,9
Fluvioglaziale Ablagerungen	2,3	641	2,5
Moräne	7,4	1.508	5,9
Moor	0,9	123	0,5
Präquartäres Lockergestein	<0,1	9	<0,1
Sandiges Festgestein	0,1	15	0,1
Tonig-schluffiges Festgestein	<0,1	16	0,1
Fließerde und Verwitterungsbildung	15,2	4.134	16,3

Es ist zu erkennen, dass die Substrateinheit „(Schwemm-) Löss“ sowie die Nutzung „Acker“ im gesamten Datenbestand tendenziell überrepräsentiert sind. Das liegt insbesondere daran, dass ein bedeutender Anteil der gesamten Datenbasis aus den Daten der Abwasserverbände und deren Überwachung der Klärschlammaufbringung stammt. Hingegen sind insbesondere Bodenproben unter der Nutzung „Wald“ tendenziell unterrepräsentiert.

Tabelle 4: Verteilung der Proben auf die Nutzungseinheiten

Nutzung	%-Anteil Fläche NRW	Anzahl der Proben	%-Anteil Proben
Acker	42,6	21.332	88,9
Grünland	10,2	2.327	9,1
Wald	23,2	1.770	7,0

Die wichtigsten statistischen Kenngrößen für den gesamten ausgewerteten Datenbestand gibt Tabelle 5 wieder. Auf differenziertere Auswertungen nach verschiedenen Einflussfaktoren wird an dieser Stelle verzichtet. Es wird hierzu auf die detaillierten Ausführungen im Zusammenhang mit der Ableitung von Hintergrundwerten in NRW verwiesen (LUA 2002).

Tabelle 5: Statistische Kenngrößen des ausgewerteten Datenbestandes

Kenngröße	Cadmium	Blei	Kupfer	Chrom	Nickel	Quecksilber	Zink	Arsen
n (Probenanzahl)	24566	25105	25006	24748	24819	22992	25072	3641
Spannweite (mg/kg)	43,68	1132	216	240	296	1,76	1423	126,7
Minimum (mg/kg)	0,15	6	1	4	1	0,24	6	0,4
Maximum (mg/kg)	43,83	1137	217	245	297	2,00	1429	127,0
Mittelwert (mg/kg)	1,22	47	20	38	20	0,43	98	15,6
Median (mg/kg)	1,11	39	18	36	18	0,42	85	14,7
Standardabweichung (mg/kg)	0,71	41	10	14	11	0,08	62	7,5

Um Aussagen über die inhaltlichen Abhängigkeiten zwischen den Gehalten verschiedener Stoffe in den untersuchten Proben treffen zu können, wurde eine Korrelationsanalyse für die acht betrachteten Metalle unter Einbeziehung des Einflusses von Nutzung und geogener Komponente durchgeführt (Tabelle 6). Wie zu erwarten, bestehen zum Teil deutliche und signifikante Korrelationen zwischen unterschiedlichen Stoffkonzentrationen. Dies betrifft mit Korrelationskoeffizienten von $>0,5$ insbesondere die Zusammenhänge zwischen den Schwermetallen Kupfer, Zink, Blei, Chrom und Nickel. Cadmium zeigt deutliche Abhängigkeiten lediglich zu den Blei- und Zinkgehalten, Arsen und Quecksilber weisen nur relativ geringe Wechselwirkungen mit anderen Stoffen auf.

Die Einbeziehung kategorialer Variablen wie Ausgangsgestein und Nutzungsart ergab im Vergleich dazu nur relativ geringe Einflüsse.

Tabelle 6: Korrelationskoeffizienten (r) der Stoffgehalte im Boden (logarithmiert)

		Arsen	Blei	Cadmium	Chrom	Kupfer	Nickel	Quecksilber	Zink
Arsen	r*		0,44(**)	0,22(**)	0,35(**)	0,48(**)	0,42(**)	0,23(**)	0,34(**)
	n		3641	3158	3618	3641	3557	3150	3641
Blei	r*	0,44(**)		0,43(**)	0,45(**)	0,62(**)	0,54(**)	0,40(**)	0,72(**)
	n	3641		24474	24742	25004	24817	22762	25067
Cadmium	r*	0,22(**)	0,43(**)		0,31(**)	0,38(**)	0,40(**)	0,23(**)	0,52(**)
	n	3158	24474		24200	24410	24234	22532	24472
Chrom	r*	0,35(**)	0,45(**)	0,31(**)		0,56(**)	0,68(**)	0,23(**)	0,59(**)
	n	3618	24742	24200		24737	24647	22676	24738
Kupfer	r	0,48(**)	0,62(**)	0,38(**)	0,58(**)		0,63(**)	0,38(**)	0,70(**)
	n	3641	25004	24410	24737		24815	22749	25002
Nickel	r*	0,42(**)	0,54(**)	0,40(**)	0,68(**)	0,63(**)		0,26(**)	0,66(**)
	n	3557	24817	24234	24647	24815		22742	24814
Quecksilber	r*	0,23(**)	0,40(**)	0,23(**)	0,23(**)	0,38(**)	0,26(**)		0,36(**)
	n	3150	22762	22532	22676	22749	22742		22758
Zink	r*	0,34(**)	0,72(**)	0,52(**)	0,59(**)	0,70(**)	0,66(**)	0,36(**)	
	n	3641	25067	24472	24738	25002	24814	22758	

* r= Korrelationskoeffizient nach Pearson
** Die Korrelation ist auf dem Niveau von 0,01 (2-seitig) signifikant.

5.2 Geostatistische Auswertungen

Um räumliche Strukturen von Stoffgehalten in Böden erkennen zu können, eignen sich verschiedene geostatistische Schätzverfahren. Solche Verfahren erlauben es unter bestimmten Bedingungen, aus Messwerten untersuchter Proben Rückschlüsse auf nicht untersuchte benachbarte Flächen zu ziehen. Dazu werden zunächst mit Hilfe einer so genannten Variogrammanalyse die Gesetzmäßigkeiten der räumlichen Strukturen untersucht. Anschließend wird, unter Anwendung dieser Gesetzmäßigkeiten, nicht untersuchten Flächen über ein so genanntes Krigingverfahren ein interpolierter Wert zugewiesen. Die gewählte Vorgehensweise wird ausführlich im Anhang 2.2 beschrieben.

Für die Beurteilung der prognostizierten Bodenkonzentrationen sind neben den eigentlichen Stoffgehalten auch Aussagen zur Sicherheit der Prognose von Interesse. Dazu bestehen unterschiedliche Möglichkeiten der Visualisierung. Für die vorliegenden Auswertungen wurde der Zellenvariationskoeffizient V ($\frac{s}{\bar{x}}$ in Prozent), also der Quotient aus Standardabweichung und Mittelwert der Werte aus einer Rasterzelle, als Maß für die relative Streuung kartographisch dargestellt. Überschreitet dieser Variationskoeffizient eine bestimmte Schwelle, wird die Schätzung für den Bereich als relativ unsicher gekennzeichnet. Diese Bereiche werden für jedes Element in einer separaten Übersichtskarte abgebildet. In der Regel wird davon ausgegangen, dass eine Schwelle von 35 % nicht überschritten werden sollte (SACHS 1972). Diese feste Schwelle ist auf Grund der Datenlage jedoch nicht auf alle Stoffe anwendbar. So wurden abweichend bei Nickel und Arsen die Anforderungen auf 50 % reduziert, beim Quecksilber liegen hingegen auf Grund der relativ geringen Standardabweichung alle Bereiche unter dieser Schwelle, so dass hier zur Differenzierung ein Wert von 15 % dargestellt werden konnte.

Die räumlichen Verteilungen werden nachfolgend für jeden Einzelstoff in Karten dargestellt. Um die Verteilung der Stoffe auch im Vergleich zueinander darstellen zu können, wurde für alle Stoffe eine einheitliche Klassifizierungsvorschrift entwickelt. Unter dem Aspekt, das allgemein vorliegende Niveau in Form der Hintergrundwerte zu berücksichtigen, wurde die Klasseneinteilung über das 95. Perzentil des Gesamtdatenbestandes durchgeführt. Die Klassengrenzen wurden mit Hilfe fester Faktoren festgelegt. Die Wahl der Faktoren wurde den Verteilungscharakteristiken angepasst. Konkret wurden die Klassengrenzen bei den Werten gezogen, die sich nach Multiplikation des jeweiligen 95.-P-Wertes mit den Faktoren 0,5; 0,75; 1,0; 2,0; und 3,0 ergaben. Die Vorgehensweise führt einerseits zwar zu zunächst willkürlich erscheinenden Klassengrenzen, ermöglicht jedoch in der räumlichen Darstellung der Werte und im Vergleich der Einzelstoffe auch die Wahrnehmung bestimmter Charakteristiken des Wertekollektivs wie Abweichungen der Verteilungskurve in Schiefe und Exzess. So zeigt sich im Vergleich der Karten, dass von den 6 Klassen, die für alle Stoffe festgelegt wurden, bei einigen Stoffen nur 5, bei Arsen und Nickel nur 4 Klassen besetzt sind, was auf unterschiedliche Verteilungscharakteristiken der Stoffdaten hinweist.

Nachfolgend werden die Karten der Schwermetallgehalte in Oberböden abgebildet und beschrieben.

Cadmium

Die prognostizierten Gehalte streuen in der Landesfläche zwischen Werten von 0,1 bis 8,7 mg/kg. Deutlich zeigt sich der bekannte Bereich mit ausgeprägten Cadmiumanreicherungen im ehemaligen Erzabbaugebiet Stolberg. Großflächige Bereiche relativ hoher Stoffkonzentrationen finden sich daneben vor allem im Bergischen Land, der Eifel und dem Nordrand des Sauerlandes. Im Konzentrationsniveau niedriger liegende Bereiche finden sich auch im Eggegebirge, dem östlichen Rand der Westfälischen Bucht, entlang des Rheines sowie in den Randlagen der Ballungszentren von Rheinland und Ruhrgebiet. Wie bei allen Stoffen finden sich hingegen niedrige Konzentrationen in weiten Teilen des Münsterlandes, im Niederrheinischen Tiefland, nördlich des Wiehengebirges, im Bereich der Senne und der Warburger Börde sowie in den südlichen Teilen von Sauerland und Rothaargebirge. Insbesondere die im Vergleich zu Blei recht niedrigen Gehalte in den letztgenannten Bereichen deuten darauf hin, dass das als relativ mobil bekannte Cadmium auf Grund der niedrigen pH-Werte der dort vorrangig vorkommenden Waldböden sich großflächig bereits in tiefere Bodenschichten verlagert hat. Anhand der Übersichtskarte zur Aussagesicherheit (in der Abb. oben links) ist erkennbar, dass insbesondere im Kreis Siegen-Wittgenstein, dem Kreis Olpe sowie dem Märkischen Kreis auf Grund der relativ schlechten Datenlage auch die größten Bereiche geringerer Aussagesicherheit zu finden sind.

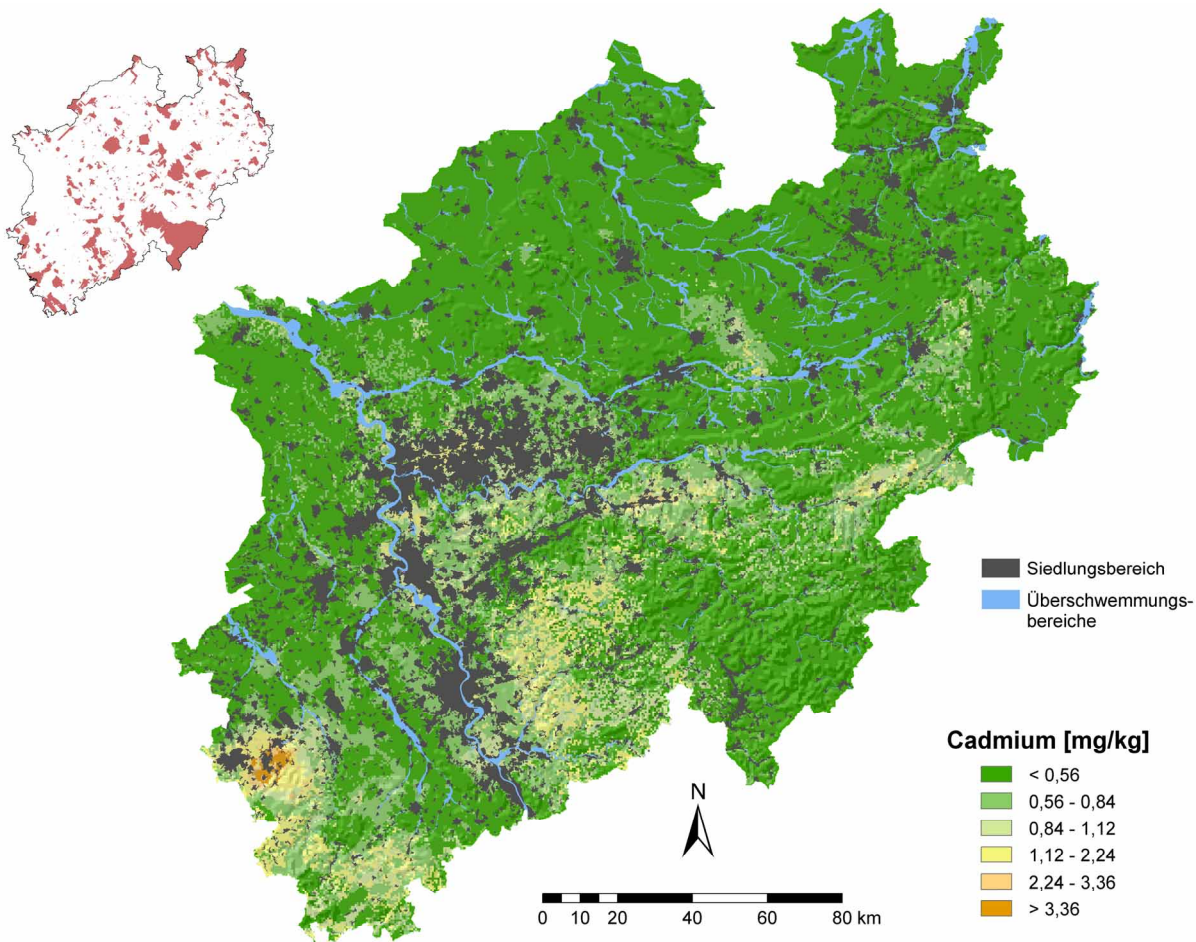


Abbildung 1: Geschätzte Cadmiumgehalte der Oberböden Nordrhein-Westfalens
(Bereiche unsicherer Aussage $V > 35\%$ = rot markierte Flächen in der Übersichtskarte links oben)

Blei

Gegenüber Cadmium zeigt sich beim Blei ein etwas anderes Verteilungsmuster. Wie beim erstgenannten Stoff erweist sich der Raum Stolberg, zusätzlich jedoch auch der Raum Mechernich mit Werten von über 1.000 mg/kg als großflächiger Belastungsschwerpunkt. Zwar ist auch beim Blei zu erkennen, dass die Ballungszentren mit hoher Industrialisierung durch entsprechenden Immissionseinfluss die Stoffkonzentrationen in den Randbereichen prägen, von besonderer Bedeutung auf die räumliche Verteilung der Gehalte erweisen sich hier jedoch die Waldflächen und die Topographie des Landes. So ist insbesondere in den waldreichen Höhenlagen von Bergischem Land, Sauerland und Eifel, jedoch auch im Eggegebirge sowie den Höhenzügen des Weserberglandes mit Bleigehalten von mehr als 200 bzw. 100 mg/kg zu rechnen. Hingegen liegen die Gehalte in den übrigen Teilen des Landes, vor allem in weiten Teilen der Westfälischen Bucht, des Niederrheinischen Tieflandes und der Niederrheinischen Bucht zumeist deutlich unter 50 mg/kg. Gebiete relativ unsicherer Datenlage sind wie beim Cadmium vor allem in den Kreisen Siegen-Wittgenstein und Olpe sowie im Märkischen und Hochsauerland-Kreis und in den Kreisen Soest, Warendorf und Coesfeld vorhanden. Darüber hinaus finden sie sich auch in den Kreisen Steinfurt und Borken, dem Rhein-Sieg-Kreis sowie in kleineren Bereichen der bergreichen Regionen von Eifel und Weserbergland. Da die Bleigehalte in Böden offensichtlich in relativ starkem Maße auch von der Topographie geprägt werden, ist damit zu rechnen, dass für sichere Prognosen in Regionen mit kleinräumig stark wechselndem Relief eine höhere Probendichte notwendig wäre.

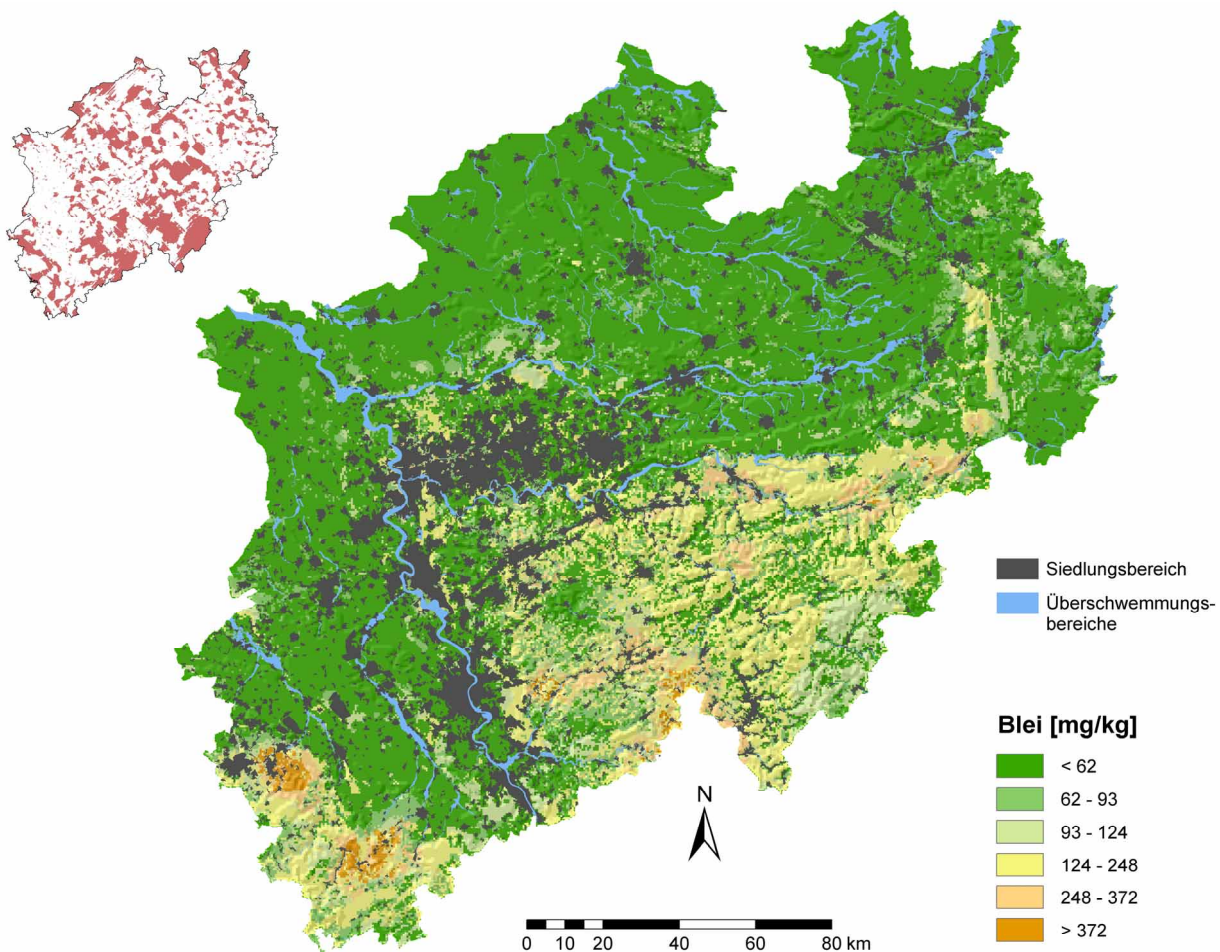


Abbildung 2: Geschätzte Bleigehalte der Oberböden Nordrhein-Westfalens
(Bereiche unsicherer Aussage $V > 35\%$ = rot markierte Flächen in der Übersichtskarte links oben)

Kupfer

Die räumliche Verteilung des Elementes Kupfers ist in NRW sehr homogen und zeigt geringere Schwankungen als bei den Elementen Cadmium und Blei. In weiten Teilen des Landes ist mit Gehalten unter 20 bzw. 10 mg/kg zu rechnen. Neben kleineren Bereichen etwas höherer Konzentrationen im unmittelbaren Randbereich des Ruhrgebietes und im Nahbereich des Rheines gibt es drei ausgeprägte Gebiete höherer Konzentration. Auch beim Kupfer finden sich deutlich höhere Gehalte in der Eifel mit Schwerpunkt im Raum Stolberg. Ein zweiter Bereich höherer Konzentration findet sich im Oberbergischen Kreis und dem Siegerland, der dritte Bereich am Nordrand des Sauerlandes mit Schwerpunkt im Raum Marsberg. Hier ist jeweils mit flächenhaften Gehalten von mehr als 50 mg/kg zu rechnen. Alle drei Bereiche sind durch Erzvorkommen und kleinräumige Ansiedlung metallverarbeitender Industrie geprägt. Bereiche unsicherer Aussage finden sich methodenbedingt in allen Randbereichen der Karte, zusätzlich in den Kreisen Coesfeld, Warendorf und Soest, den Kreisen Siegen-Wittgenstein und Olpe sowie dem Märkischen und dem Rhein-Sieg-Kreis.

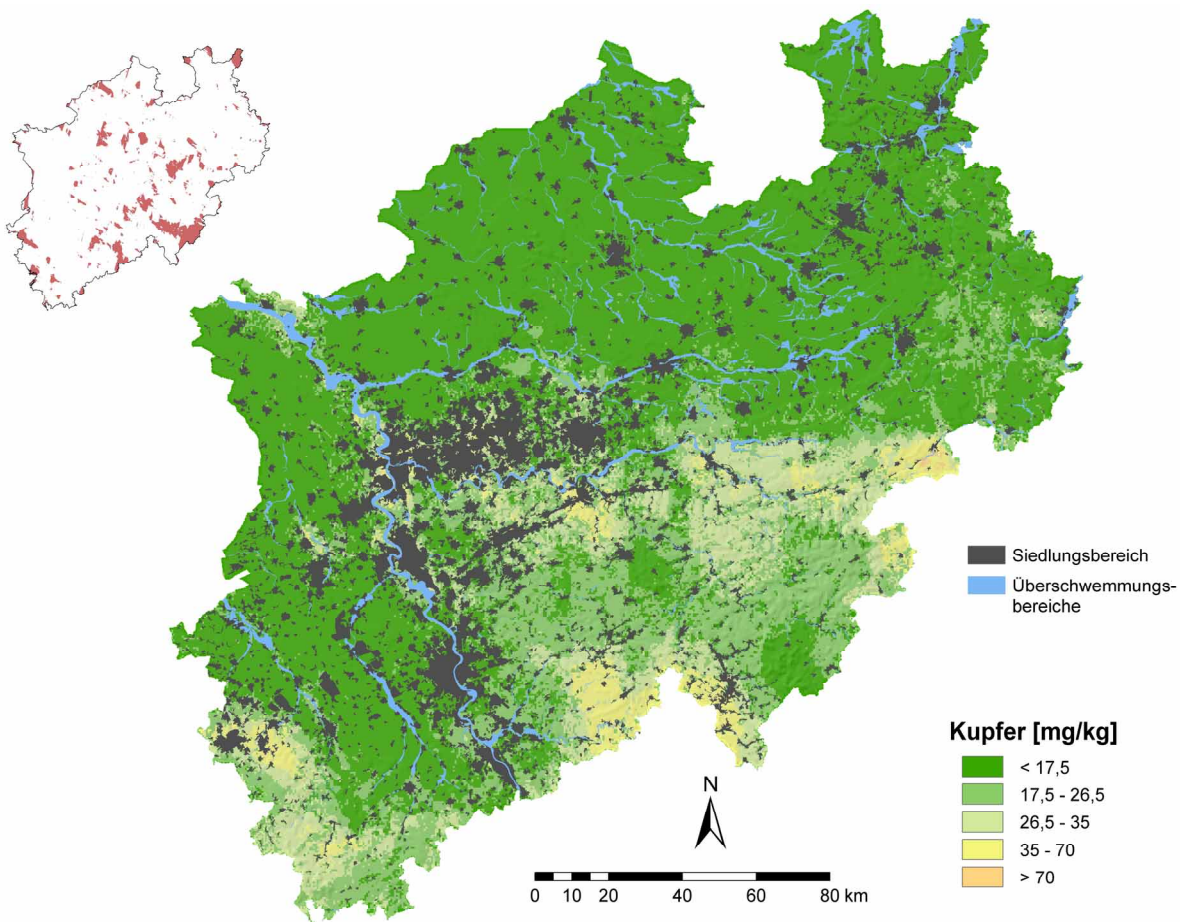


Abbildung 3: Geschätzte Kupfergehalte der Oberböden Nordrhein-Westfalens
(Bereiche unsicherer Aussage $V > 35\%$ = rot markierte Flächen in der Übersichtskarte links oben)

Chrom

Auch die Chromgehalte in NRW sind relativ einheitlich. Nutzungseinflüsse spielen beim Chrom im Gegensatz zu den bisher genannten Stoffen nur eine geringe Rolle. Im Wesentlichen zeigt sich daher ein leichter naturbedingter Nord-Süd-Gradient mit etwas höheren Gehalten in Eifel und Siegerland. Dort können flächenhaft Gehalte über 100 mg/kg auftreten, während sie in den nördlichen Landesteilen weitestgehend unterhalb von 25 mg/kg liegen. Wie bereits aus den Ergebnissen der beschreibenden Statistik für den Gesamtdatenbestand erkennbar, ist der Variationskoeffizient von Chrom im Unterschied zu den beiden räumlich sich ähnlich verhaltenden Metallen Kupfer und Nickel relativ niedrig. In der räumlichen Darstellung sind bei einer Schwelle von 35 % nur sehr wenige Randbereiche als Bereiche geringer Aussagegesicherheit zu definieren.

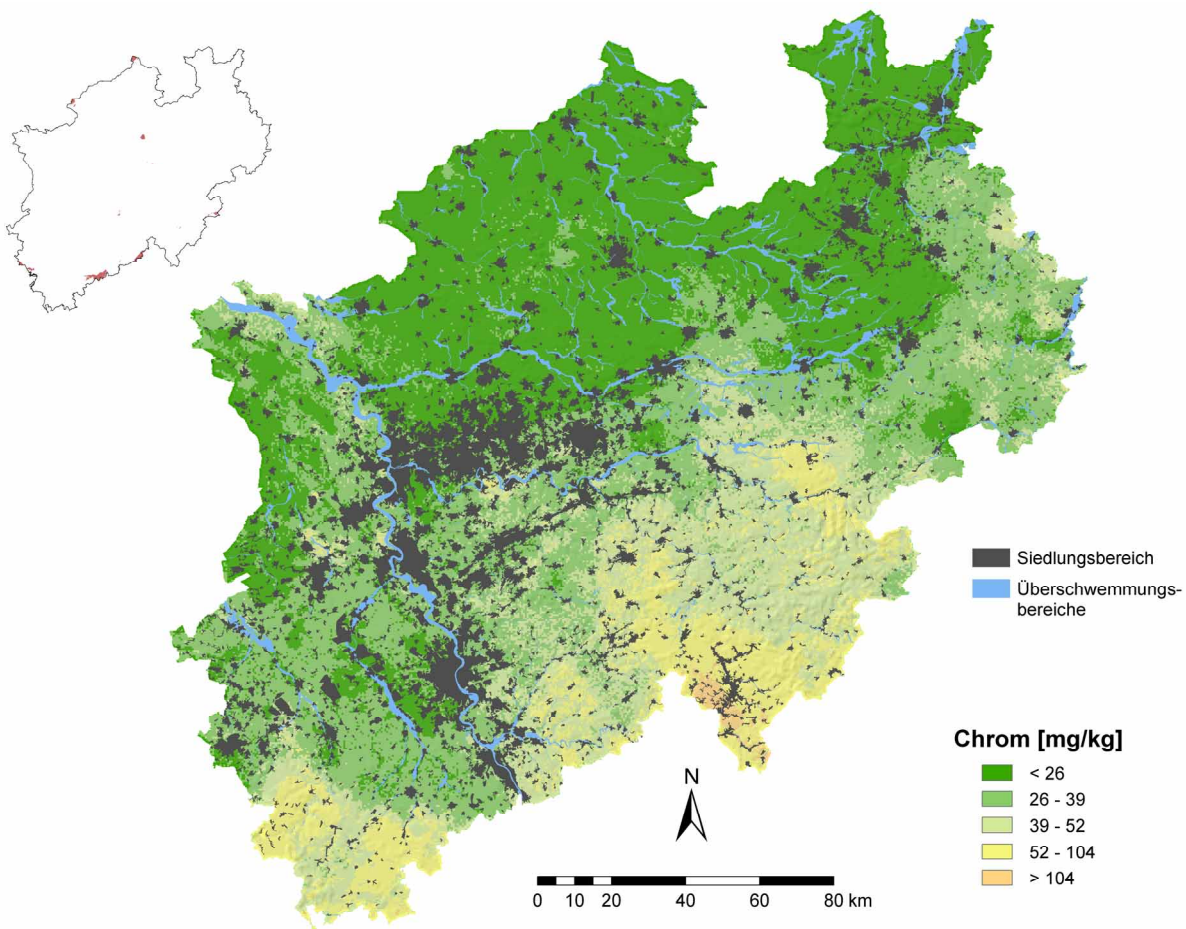


Abbildung 4: Geschätzte Chromgehalte der Oberböden Nordrhein-Westfalens
(Bereiche unsicherer Aussage $V > 35\%$ = rot markierte Flächen in der Übersichtskarte links oben)

Nickel

Wie bereits der relativ hohe Korrelationskoeffizient zwischen den Stoffkonzentrationen von Chrom und Nickel angedeutet hat, zeigen die räumlichen Verteilungen dieser Metalle ein sehr ähnliches Muster. Allerdings ist die räumliche Schwankungsbreite der mittleren Gehalte des Nickels über die gesamte Landesfläche noch niedriger. Während in den nördlichen Landesteilen zumeist Gehalte unter 20 mg/kg vorkommen, liegen diese in Eifel, Bergischem Land und Sauerland stellenweise bei 50 mg/kg. Dies deutet ebenso wie bei Chrom auf eher geogenen Ursprung der Stoffgehalte hin. Im Gegensatz zum Chrom ist jedoch die kleinräumige Variation bei Nickel deutlich höher. Der Variationskoeffizient der Rasterzellen bewegt sich in einer Spanne zwischen ca. 40 und 90 %. Es wurde daher abweichend ein Schwellenwert zur Definition der Bereiche geringer Aussagesicherheit von 50 % gewählt.

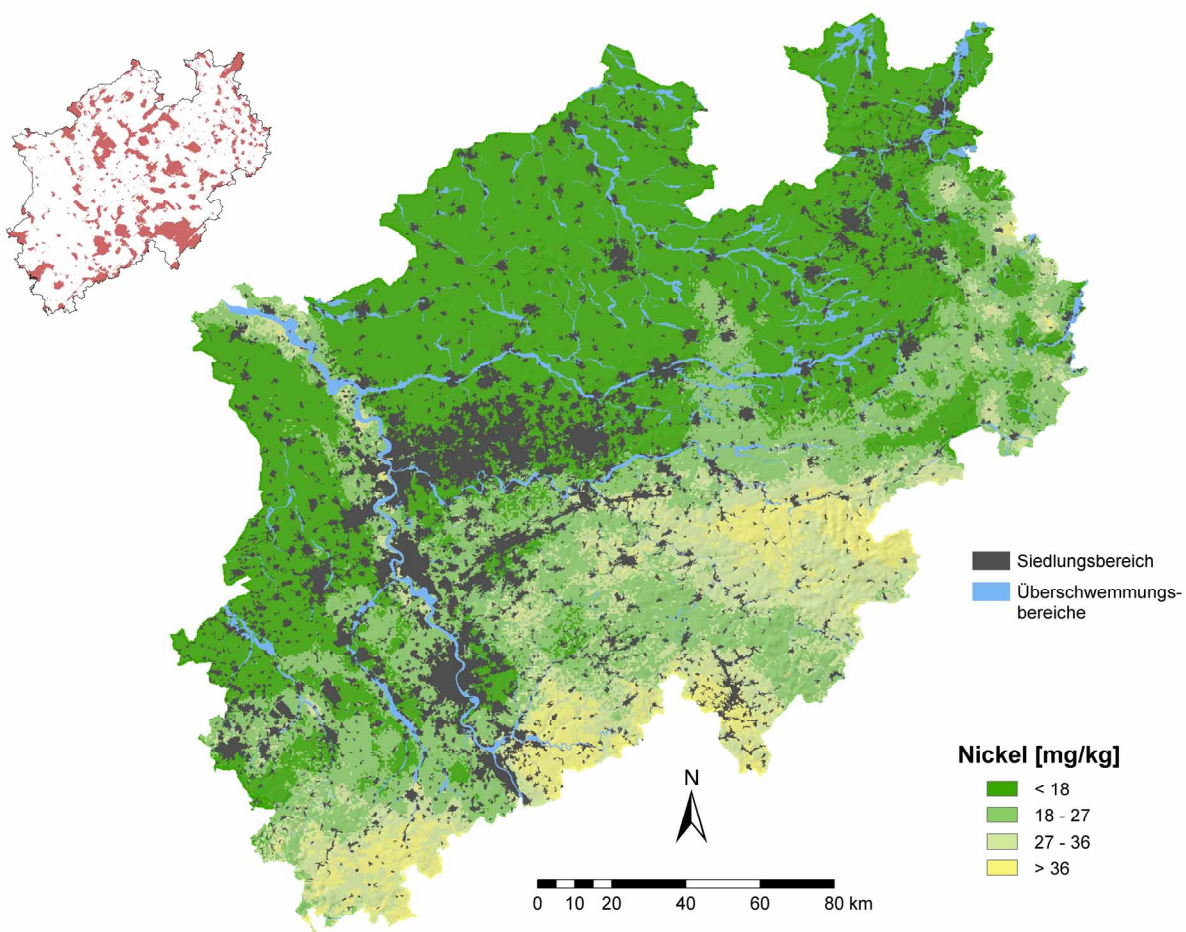


Abbildung 5: Geschätzte Nickelgehalte der Oberböden Nordrhein-Westfalens
(Bereiche unsicherer Aussage $V > 50\%$ = rot markierte Flächen in der Übersichtskarte links oben)

Quecksilber

Die Quecksilbergehalte in Oberböden werden offenbar in ausgeprägtem Maße durch die Waldstandorte bestimmt. Erkennbar ist ein deutlich höheres Niveau in Höhen- und Kammlagen der Mittelgebirge. Jedoch auch in topografisch weniger exponiert gelegenen zusammenhängenden Waldgebieten, wie beispielsweise der Haardt im Kreis Recklinghausen, sind tendenziell höhere Werte zu finden als in nahe gelegenen grünland- und ackerbaulich genutzten Flächen. Die höchsten Gehalte von mehr als 0,9 mg/kg werden im Bereich Stolberg erreicht. In Übereinstimmung mit den Auswertungen zu Hintergrundgehalten, die relativ starke Anreicherungen in den Waldauflagen aufzeigen, lässt sich vermuten, dass Quecksilber vor allem über Depositionen in Böden eingetragen wird. Auf Grund der geringen Streuung wird bei Anwendung einer Schwelle von 35 % für den Variationskoeffizient die gesamte Landesfläche als ausreichend genau hinsichtlich der Aussagefähigkeit der Karte definiert. Um die Aussage-sicherheit differenziert darstellen zu können, wurde daher beim Quecksilber abweichend gegenüber den anderen Elementen eine Schwelle von 15 % festgesetzt.

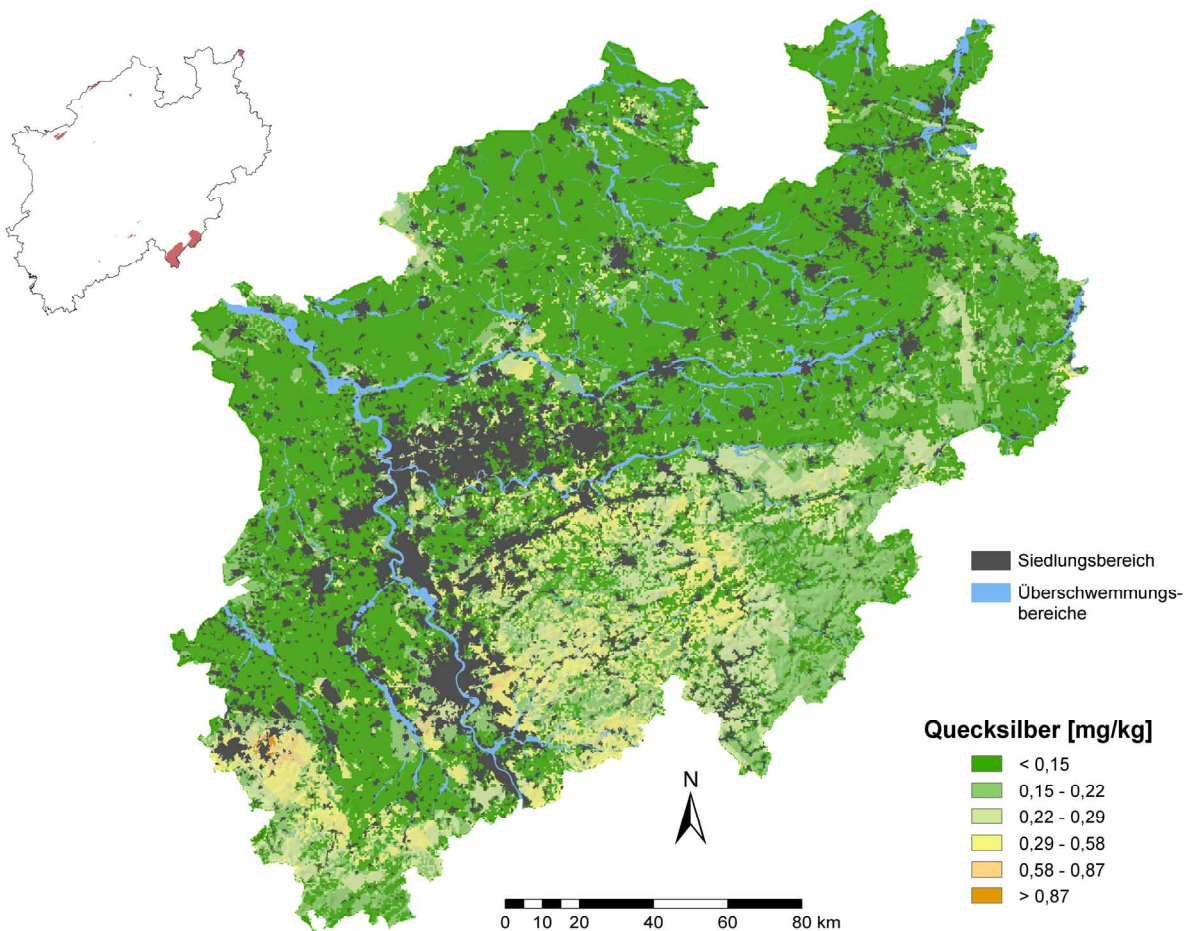


Abbildung 6: Geschätzte Quecksilbergehalte der Oberböden Nordrhein-Westfalens (Bereiche unsicherer Aussage $V > 15\%$ = rot markierte Flächen in der Übersichtskarte links oben)

Zink

Zink ähnelt im räumlichen Verteilungsmuster dem Cadmium. Dies erklärt sich daraus, dass beide Metalle häufig vergesellschaftet vorkommen und sich auch im Mobilitätsverhalten ähneln. Allerdings sind beim Zink die Nutzungseinflüsse deutlich weniger stark ausgeprägt. Auch beim Zink ist sehr deutlich der landesweite Belastungsschwerpunkt im Raum Stolberg erkennbar. Daneben finden sich wiederum Bereiche höherer Gehalte über 200 mg/kg in der Eifel, dem Bergischen Land, dem Nordrand des Sauerlandes und dem Eggegebirge. Ähnliche Gehalte sind auch in den Randbezirken der Ballungsräume und entlang des Rheines zu erwarten. Die niedrigsten Gehalte finden sich mit Werten unter 25 mg/kg im nördlichen Münsterland, allerdings häufig in Bereichen unsicherer Aussage. Etwas weniger deutlich ausgeprägt als beim Cadmium ist auch beim Zink ein größerer Bereich in den walddreichen Höhenlagen des Rothaargebirges mit relativ niedrigen prognostizierten Gehalten auffällig, der darauf hindeutet, dass dieses ebenfalls recht mobile Schwermetall in stark versauerten Waldböden aus den oberen Bodenschichten bereits verlagert wurde.

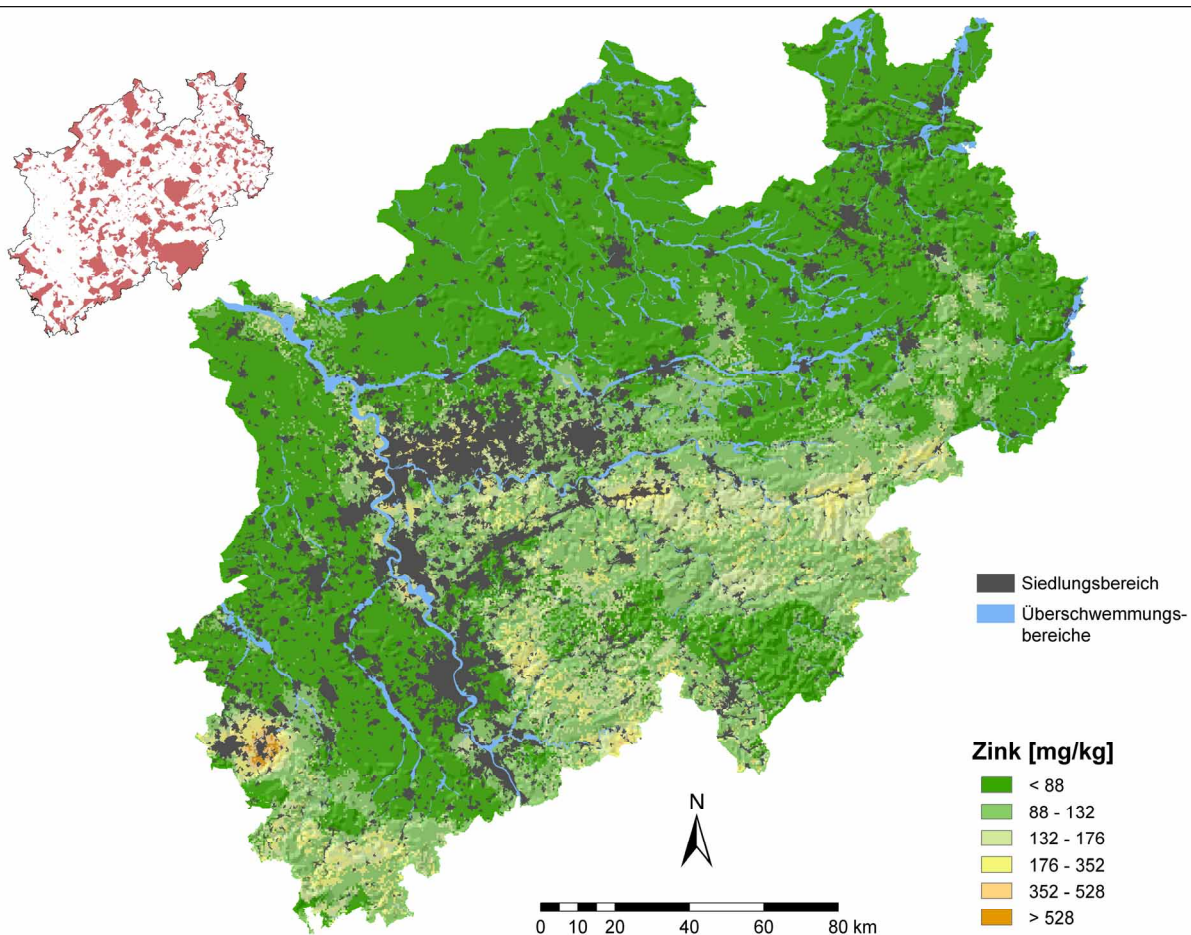


Abbildung 7: Geschätzte Zinkgehalte der Oberböden Nordrhein-Westfalens
(Bereiche unsicherer Aussage $V > 35\%$ = rot markierte Flächen in der Übersichtskarte links oben)

Arsen

Auch bei der Verteilung von Arsen spiegelt sich der bekannte Nord-Süd-Gradient wider. Neben den bereits bekannten Bereichen höherer Gehalte ist ein ausgeprägter Schwerpunkt bei Arnsberg, sowie in geringerem Maße im ansonsten eher unauffälligen Wiehengebirge erkennbar. Zu beachten ist bei der Interpretation der Arsengehalte, dass auf Grund der geringeren Probenzahl die Aussagesicherheit wie bei Nickel deutlich reduziert werden muss und nur ab einer Schwelle von 50 % darstellbar ist.

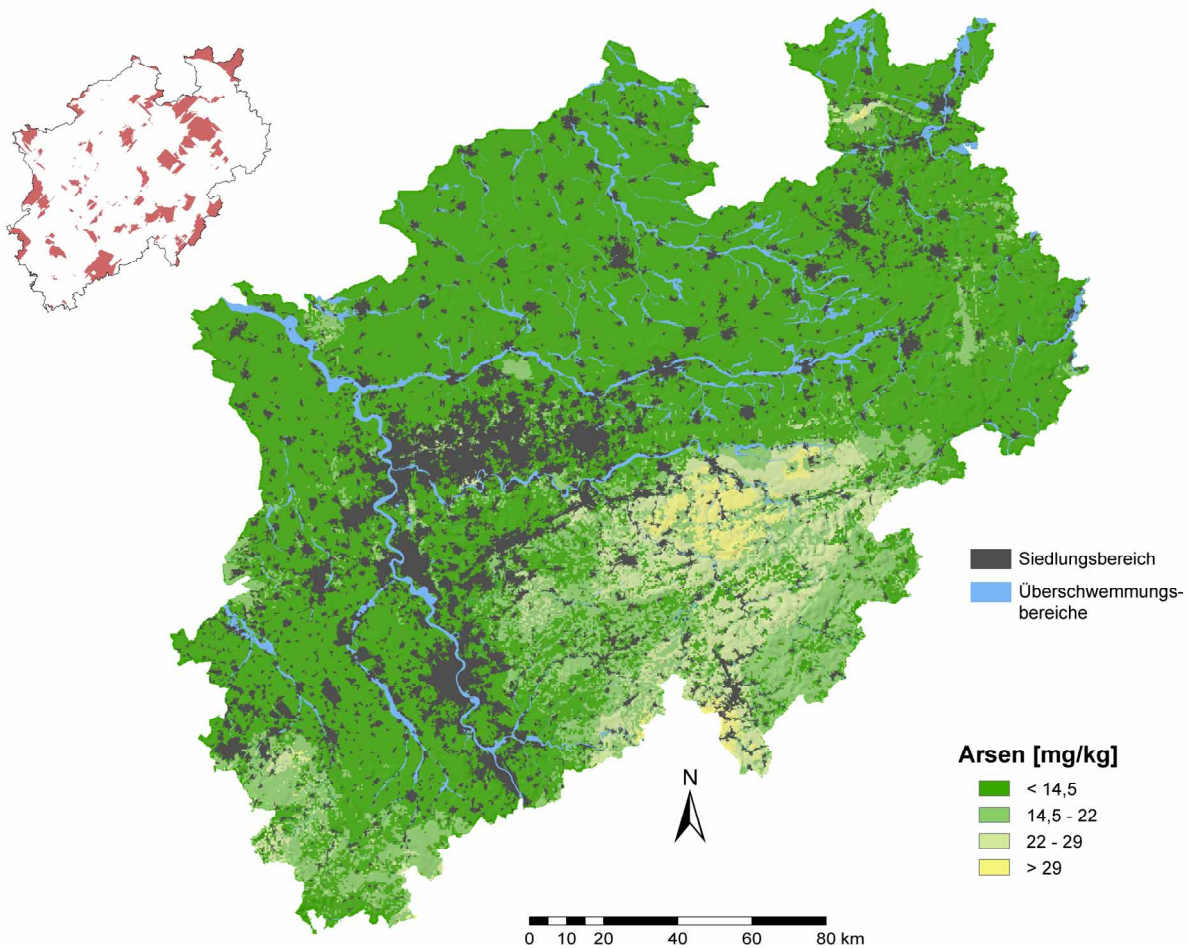


Abbildung 8: Geschätzte Arsengehalte der Oberböden Nordrhein-Westfalens
(Bereiche unsicherer Aussage $V > 50\%$ = rot markierte Flächen in der Übersichtskarte links oben)

6. Diskussion und Ausblick

Die vorliegenden Karten bieten eine gute Übersicht der geschätzten Stoffgehalte in Oberböden Nordrhein-Westfalens. Es werden Bereiche dargestellt, in denen mit bestimmten Stoffgehalten im Oberboden zu rechnen ist. Diese Informationen betreffen sowohl Aussagen zum Gehaltsniveau als auch zur Sicherheit der Aussage. Auf Grund des Maßstabes können Angaben lediglich für Mittelwerte eines 500x500 m-Rasters erfolgen.

Der für kommunale Vollzugsaufgaben notwendige Darstellungsmaßstab kann somit naturgemäß nicht erreicht werden. Die gegenüber den hier gezeigten Übersichtskarten deutlich differenzierteren Aussagemöglichkeiten digitaler Bodenbelastungskarten auf kommunaler Ebene werden schematisch in der Abbildung 9 gezeigt.

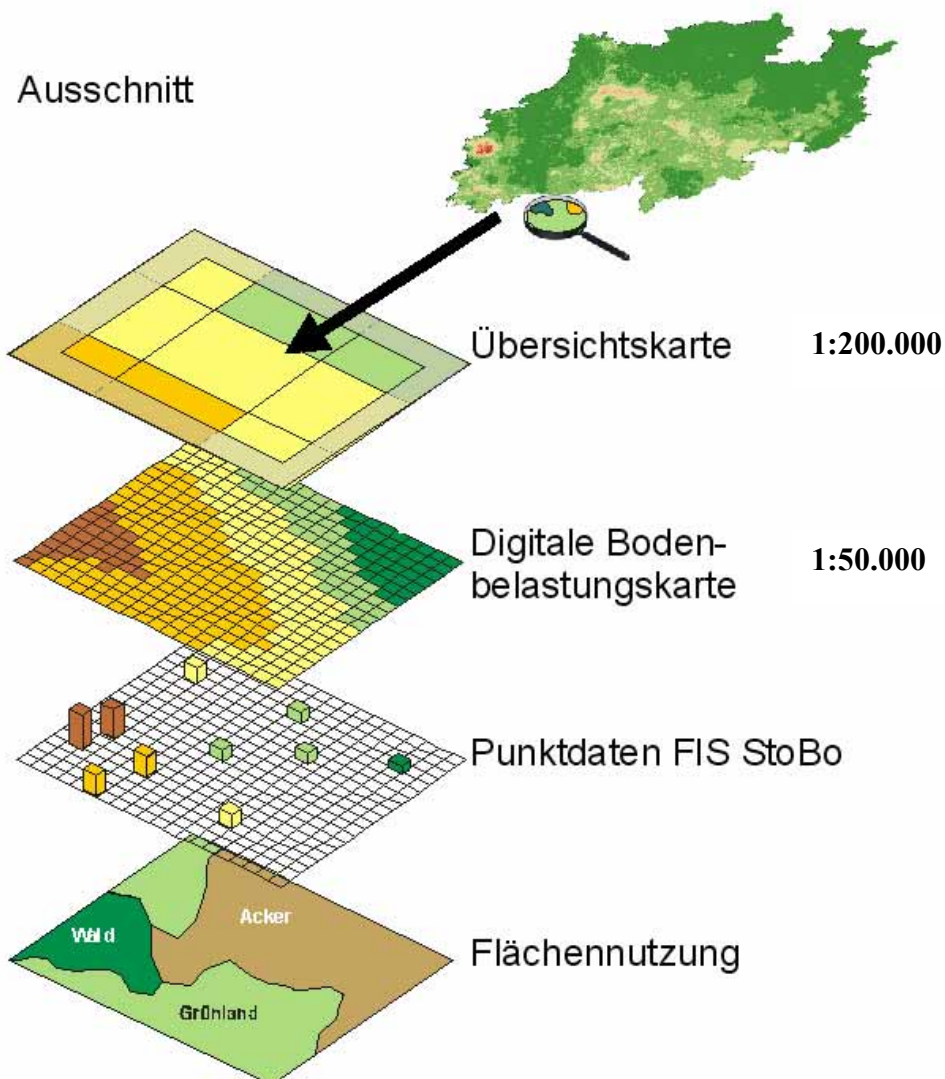


Abbildung 9: Schematische Darstellung maßstabsbedingter Unterschiede von Eingangsdaten und Auswertekarten

Als prägend für die landesweite räumliche Stoffverteilung haben sich vor allem Nutzungseinflüsse erwiesen. Das bedeutet gleichermaßen, dass die einer Rasterzelle zugewiesene Hauptnutzungsart weit reichenden Einfluss auf die prognostizierten Gehalte hat. Die Berücksichtigung dieser Erkenntnis ist insofern grundsätzlich bei der Visualisierung gewünscht, da so die tatsächlichen Verhältnisse bezüglich der Verteilung über den gesamten betrachteten Raum am besten wiedergespiegelt werden. Implizit bedeutet das, dass es im Einzelfall zur Fehleinschätzung kommen kann, wenn die geschätzten Konzentrationen aus der kartographischen Darstellung kritiklos auf Einzelflächen übertragen werden, die von der Hauptnutzungsart der räumlichen Einheit abweichen.

Das wird deutlich anhand der nachfolgenden, beispielhaft für Cadmium ausgewählten Ausschnittsvergrößerung (Abb. 10). Dargestellt werden die flächenhaft geschätzten Konzentrationen eines relativ heterogenen Teilbereiches der Landesfläche. Die kleinräumig wechselnde Nutzungsstruktur prägt hier die uneinheitlichen erwarteten Stoffkonzentrationen. Darüber liegend werden die Messwerte, die in die Schätzung eingegangen sind, differenziert nach Nutzungsarten dargestellt. Schätzwerte wie Messwerte sind anhand gleicher Klassengrenzen kategorisiert. Es ist zwar tendenziell eine recht gute Übereinstimmung zwischen geschätzten und gemessenen Werten zu erkennen, im Einzelfall werden jedoch auch offensichtliche Abweichungen deutlich. Eine potenzielle Erklärung dafür kann darin liegen, dass im FIS StoBo natürlich auch Proben aufgenommen sind, deren aktuelle Nutzung nicht mit der überwiegenden Nutzung der jeweiligen Rasterzelle übereinstimmt. In diesen Fällen werden unterschiedliche Korrekturfaktoren bei der Hin- und Rückrechnung für das Interpolationsverfahren verwandt, was dann zwangsläufig zu Abweichungen führt.

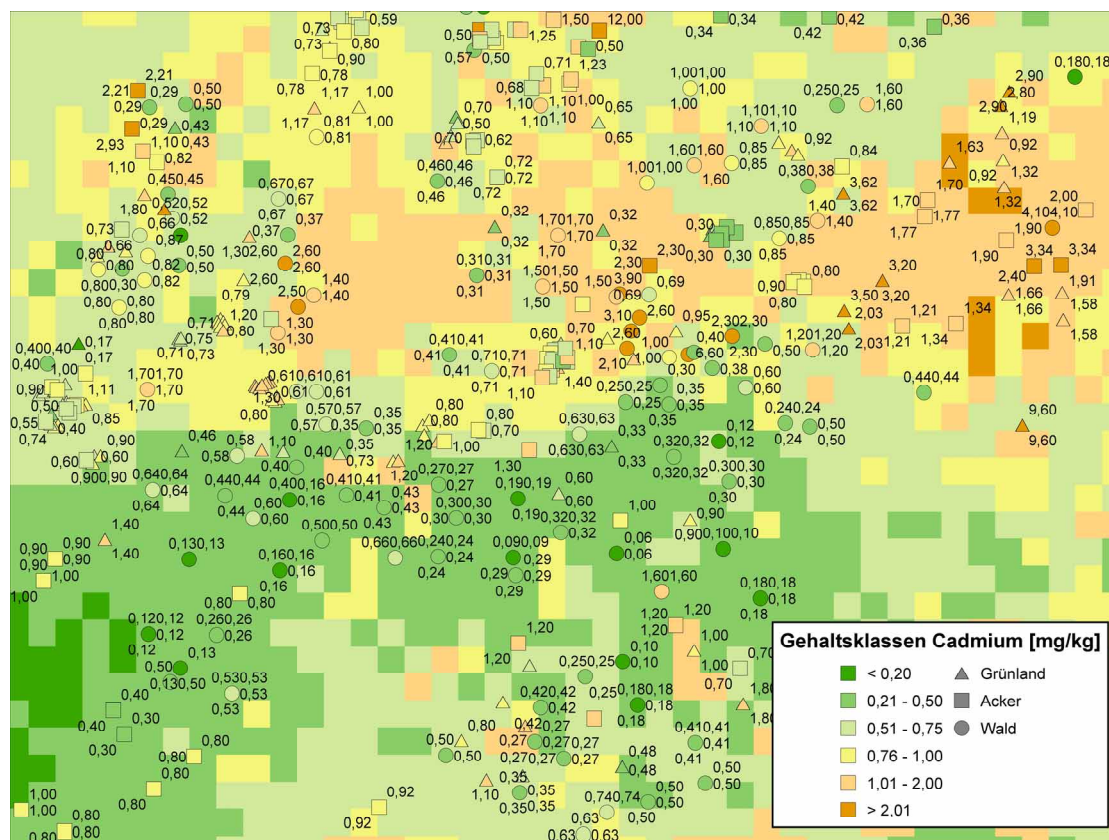


Abbildung 10: Vergleich der unter Berücksichtigung der tatsächlich vorkommenden Hauptnutzung prognostizierten Cadmiumgehalte mit gemessenen Werten aller Nutzungen

Um auch diese Fälle abdecken zu können, kann man zusätzlich die Rückrechnung für die gesamte Landesfläche mit jeweils nur einem einheitlichen Nutzungsfaktor für jeden Stoff durchführen, also quasi Karten potenziell einheitlicher Nutzung erstellen. Gleichzeitig besteht damit die Möglichkeit für eine weitere Plausibilitätskontrolle, indem nämlich in einem weiteren Prüfschritt diese Karten der Schwermetallgehalte unter potenziell gleicher Nutzung den gemessenen Werten ebendieser Nutzungsart analog der oben gezeigten Darstellung gegenüber gestellt werden.

Auf diese Weise wurden auch für den oben gezeigten Bereich drei Kartenausschnitte für die Nutzungen Acker, Grünland, Wald erstellt (Abb. 11-13). Der Vergleich der drei Darstellungen zeigt anschaulich das unterschiedliche prognostizierte Gehaltsniveau in Abhängigkeit von der angenommenen Nutzung. Deutlich wird auch die durch die fehlende Differenzierung höhere Homogenität des Bereiches bezüglich der Konzentrationen. Noch deutlicher wird dies in Bereichen einheitlicherer Nutzung wie in den ackerbaulich geprägten Regionen des Münsterlandes und der Niederrheinischen Bucht. Für die einzelnen Nutzungen bestehen bei dieser Art der Darstellung auf Grund der aktuellen Struktur erklärlicherweise verschieden große Bereiche ohne vorhandene Messwerte. Dennoch existieren auch in diesen Bereichen häufig Differenzierungen, die sich dann aus den vorliegenden Werten anderer Nutzungsarten ableiten lassen.

Im Hinblick auf Abweichungen zwischen gemessenen und geschätzten Werten ist festzustellen, dass zwar gegenüber der Darstellung über alle Nutzungsarten eine weitere Verbesserung der Übereinstimmung erreicht wurde, weiterhin jedoch auch mit Differenzen zu rechnen ist. Dies ist auf Grund der in Kapitel 4 dargestellten statistischen Fehler der Modellrechnungen jedoch auch zu erwarten.

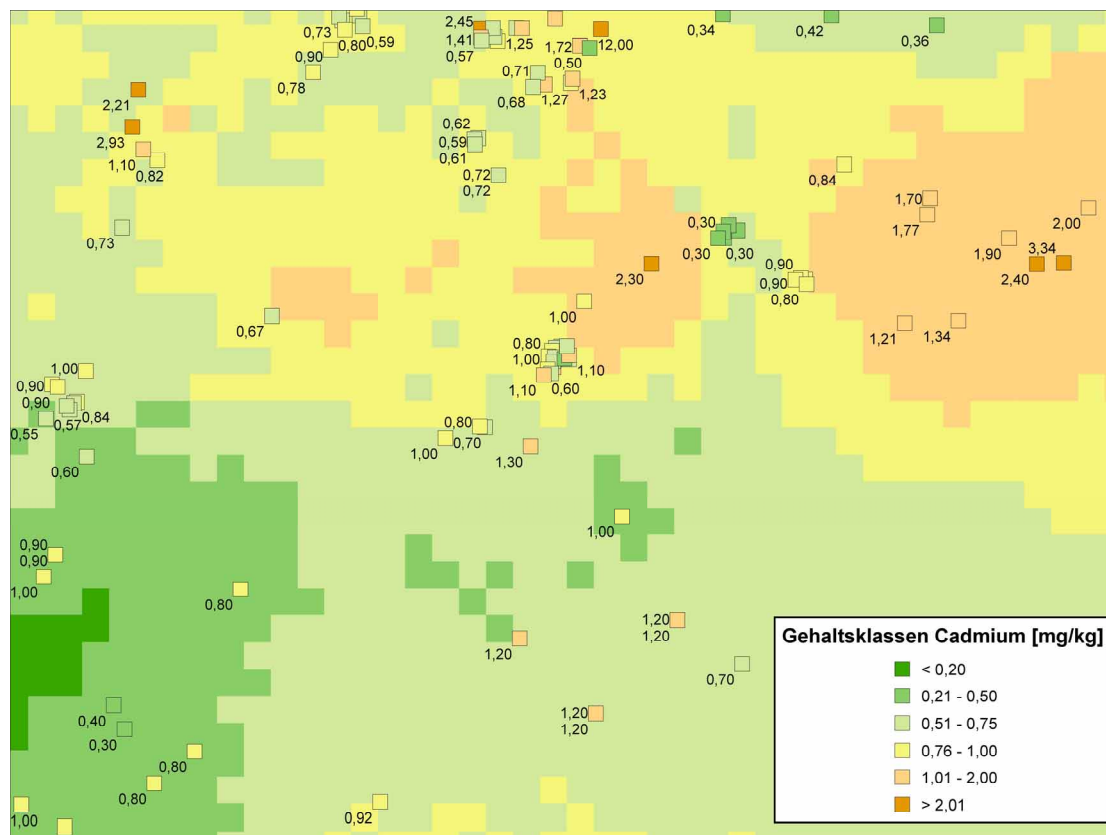


Abbildung 11: Vergleich der unter der Annahme vorliegender **Ackernutzung** prognostizierten Cadmiumgehalte mit gemessenen Werten dieser Nutzungsart

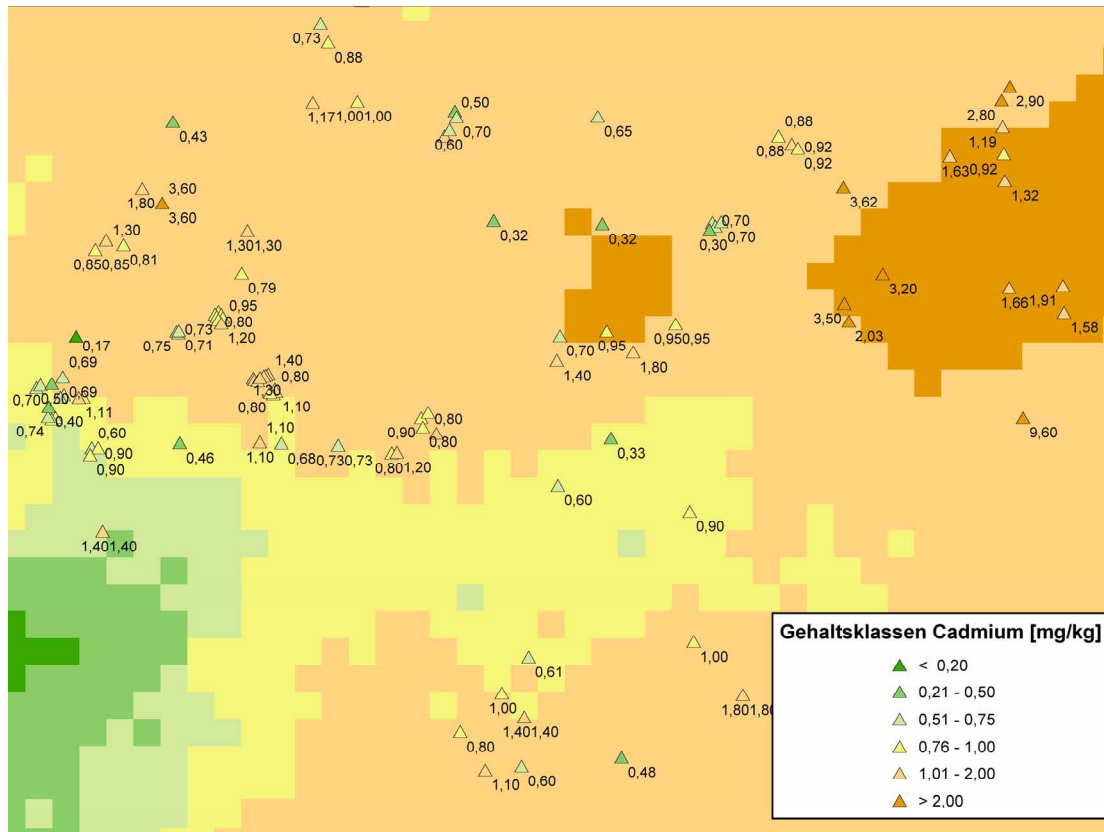


Abbildung 12: Vergleich der unter der Annahme vorliegender **Grünlandnutzung** prognostizierten Cadmiumgehalte mit gemessenen Werten dieser Nutzungsart

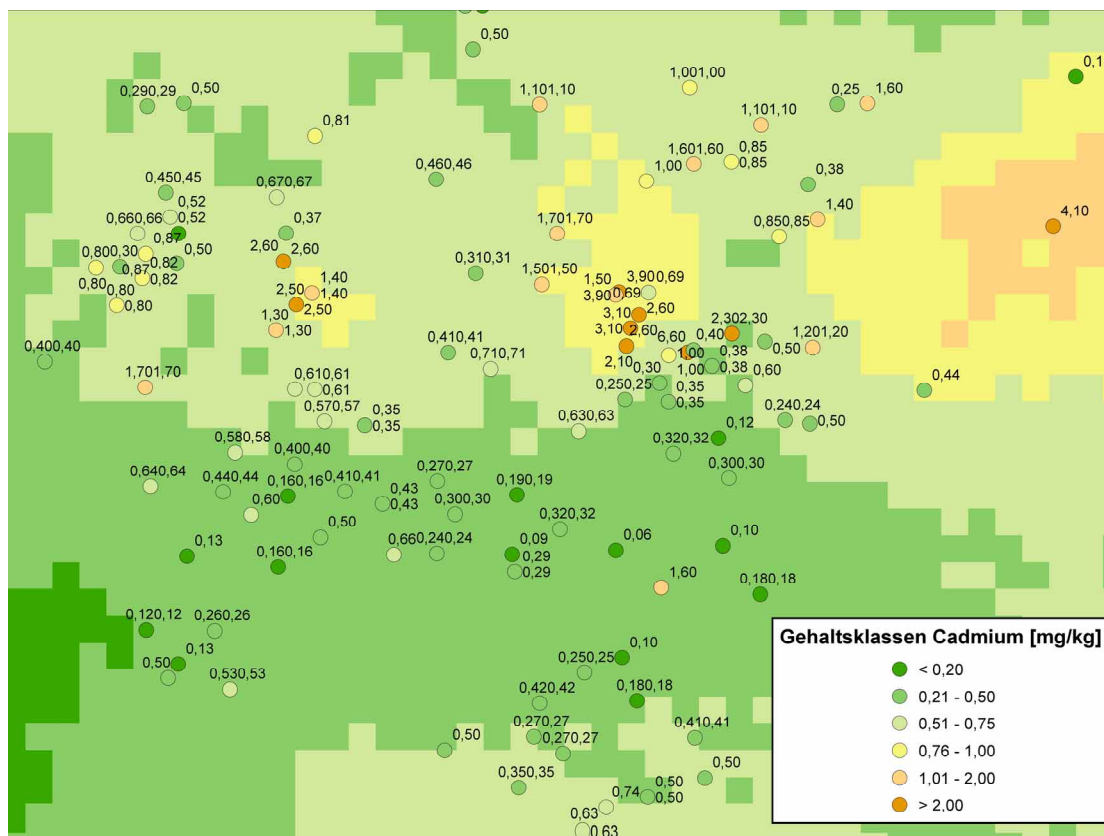


Abbildung 13: Vergleich der unter der Annahme vorliegender **Waldnutzung** prognostizierten Cadmiumgehalte mit gemessenen Werten dieser Nutzungsart

Damit werden auch die Grenzen der Interpretationsfähigkeit einer Karte im relativ kleinen Maßstabsbereich aufgezeigt. Die Übersichtskarten für NRW geben die zu erwartenden mittleren Gehalte einer Rasterzelle für die dort vorliegende überwiegende Nutzung wieder und bieten damit erstmals die Möglichkeit, einen schnellen und anschaulichen Überblick über die Verteilung der geschätzten Schwermetallgehalte in der Landesfläche zu erlangen. Für Bewertungsfragen, insbesondere im Hinblick auf Fragestellungen zur Gefahrenabwehr, sind unmittelbare Aussagen aus den Karten jedoch nicht möglich. Diesbezüglich können lediglich potenzielle Belastungsgebiete erkannt werden, in denen im großmaßstäbigeren Bereich detailliertere Untersuchungen vorrangig sind. Dabei bilden die Karten die Grundlagen für die Festlegung relevanter Bereiche sowohl zum Gehaltsniveau wie auch zum Darstellungsfehler.

Daneben können die Karten genutzt werden, um bestehende Kenntnislücken zu schließen. Dies betrifft die Identifizierung:

- von Gebieten, in denen die Datenlage der Stoffe noch unzureichend ist und
- von Stoffen, für die kartographische Darstellungen bisher generell nicht möglich waren.

Um solche bisher nur lückenhaft vorliegenden Informationen zu ergänzen, können auf dieser Basis systematisch Nachuntersuchungen eingeleitet werden, so dass zukünftig Karten auch für eine breitere Stoffpalette erstellt werden können. So werden zurzeit durch das Landesumweltamt NRW in Zusammenarbeit mit dem Geologischen Dienst NRW unterrepräsentierte Gebietseinheiten gezielt nachuntersucht. Dabei werden neben den hier dargestellten Elementen weitere Schadstoffe wie Thallium, PAK, PCB und PCDD/F analysiert, so dass die Karten zukünftig fortlaufend ergänzt und überarbeitet werden können.

Die Datengrundlage für landesweite Auswertungen wird insbesondere auch durch die Daten aus fertig gestellten digitalen Bodenbelastungskarten ergänzt. Abbildung 14 gibt einen Überblick über den derzeitigen Bearbeitungsstand der digitalen Bodenbelastungskarten im Außenbereich. Im Gegensatz zu Bodenbelastungskarten für den Siedlungsbereich werden im Außenbereich gleichfalls ausschließlich naturnah genutzte Böden der Nutzungsarten Acker, Grünland und Wald betrachtet.

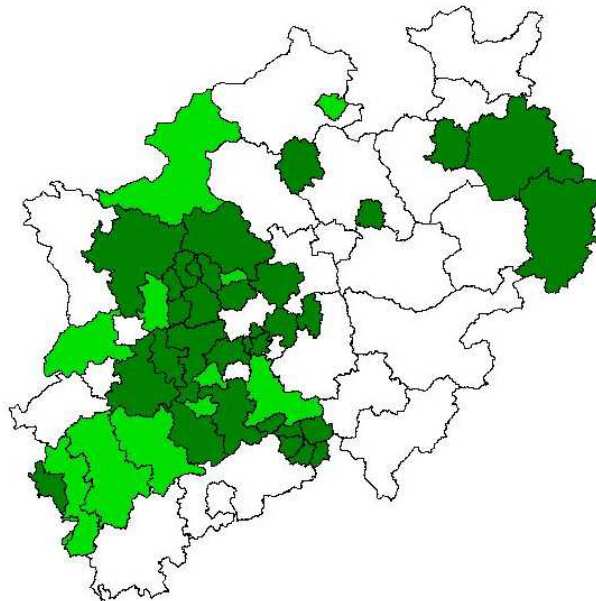


Abbildung 14: Bearbeitungsstand digitaler Bodenbelastungskarten im Außenbereich (dunkelgrün: BBK abgeschlossen; hellgrün: BBK in Bearbeitung)

Auch in die Entwicklung von Bewertungsmodellen können die vorgestellten Auswertungen zukünftig Eingang finden. So ist es unter dem Gesichtspunkt von Expositions-betrachtungen wichtig, gemessene oder auch geschätzte Werte regionalen Szenarien zuordnen zu können, repräsentative Bereiche zu erkennen und so auch zu übergeordneten Einschätzungen kommen zu können.

Nicht zuletzt bieten die Karten die Möglichkeit, überregionale Analogien im Vergleich mit anderen Bundesländern oder Nachbarstaaten der EU zu erkennen. Dies erfordert jedoch eine intensive Abstimmung hinsichtlich der Untersuchungsstrategien und der anzuwendenden Praktiken zur Darstellung der punktbezogenen Daten in der Fläche. Auf Bundesebene wurden dazu weitgehende Vorarbeiten begonnen (LABO 2004). Die vorliegende Auswertung kann auch als weiterführender Beitrag zur praktischen Anwendung der dort diskutierten Methoden dienen.

7. Literatur

ANONYM 1989: BEKANNTMACHUNG DER NEUFASSUNG DES GESETZES ZUR LANDESENTWICKLUNG (LANDESENTWICKLUNGSPROGRAMM – LEPRO) VOM 05. OKTOBER 1989, GV.NW.1989 S. 485, BER. S.648

ANONYM 2000: GESETZ ZUR AUSFÜHRUNG UND ERGÄNZUNG DES BUNDES-BODENSCHUTZGESETZES IN NORDRHEIN-WESTFALEN VOM 30. MAI 2000. LANDESBODENSCHUTZGESETZ FÜR DAS LAND NORDRHEIN-WESTFALEN (LBODSCHG). GV.NW. 29, S.439-444

ANONYM 2002: ERSTE ALLGEMEINE VERWALTUNGSVORSCHRIFT ZUM BUNDES-IMMISSIONSSCHUTZGESETZ (TECHNISCHE ANLEITUNG ZUR REINHALTUNG DER LUFT – TA LUFT); GMBL. 2002, 25-29, S. 511-605

E DIN 38 402–42 2004: DEUTSCHE EINHEITSVERFAHREN ZUR WASSER-, ABWASSER- UND SCHLAMMUNTERSUCHUNG – ALLGEMEINE ANGABEN, TEIL 42 - RINGVERSUCHE ZUR VERFAHRENSVALIDIERUNG UND ZUR AUSWERTUNG

FLIEGNER, M., REINIRKENS, P. 1993: VORLIEGENDE REFERENZWERTE FÜR PAK IN BÖDEN NORDRHEIN-WESTFALENS. HRSG: BODENSCHUTZZENTRUM NRW (JETZT: LUA NRW)

GRUBBS, F.E., BECK, G. 1972: EXTENSION OF SAMPLE SIZES AND PERCENTAGE POINTS FOR SIGNIFICANCE TESTS OF OUTLYING OBSERVATIONS, TECHNOMETRICS, VOL. 14, S. 847-854

HINDEL,R., FLEIGE, H. 1991: SCHWERMETALLE DER BÖDEN DER BUNDESREPUBLIK DEUTSCHLAND – GEOGENE UND ANTHROPOGENE ANTEILE (TEIL 1). UBA-F+E 107 01 001; UBA-TEXTE 10/91, BERLIN

JONECK, M., PRINZ, R. 1995: NUTZUNGS- UND RAUMSPEZIFISCHE HINTERGRUNDGEHALTE ORGANISCHER SCHADSTOFFE IN BÖDEN. WASSER & BODEN, 47. JG., HEFT 11, S. 28-42

JOHNSTON, K., VER HOEF, J.M., KRIVORUCHKO, K., LUCAS, N. 2001: USING ARC GIS GEOSTATISTICAL ANALYST, ESRI (HRSG.) NEW YORK

LABO - BUND-LÄNDER-ARBEITSGEMEINSCHAFT BODENSCHUTZ 1994: BUNDESWEITE BODENZUSTANDSERHEBUNG IM WALD (BZE). ARBEITSANLEITUNG.- BUNDESMINISTERIUM FÜR ERNÄHRUNG, LANDWIRTSCHAFT UND FORSTEN, BONN.

LABO - BUND-LÄNDER-ARBEITSGEMEINSCHAFT BODENSCHUTZ 1998: HINTERGRUND- UND REFERENZWERTE FÜR BÖDEN. IN: ROSENKRANZ, D., EINSELE, G., HARRESS, H.-M. (HRSG.): BODENSCHUTZ – ERGÄNZBARES HANDBUCH. KENNZIFFER 9006, ERICH-SCHMIDT-VERLAG, BERLIN

LABO - BUND-LÄNDER-ARBEITSGEMEINSCHAFT BODENSCHUTZ 2003: HINTERGRUNDWERTE FÜR ANORGANISCHE UND ORGANISCHE STOFFE IN BÖDEN. IN: ROSENKRANZ, D., EINSELE, G., HARRESS, H.-M. (HRSG.): BODENSCHUTZ – ERGÄNZBARES HANDBUCH. KENNZIFFER 9006, ERICH-SCHMIDT-VERLAG, BERLIN (AUCH VERÖFFENTLICHT UNTER [HTTP://WWW.LABO-DEUTSCHLAND.DE/LABO-HGW-TEXT.PDF](http://www.labo-deutschland.de/LABO-HGW-TEXT.PDF))

LABO - BUND-LÄNDER-ARBEITSGEMEINSCHAFT BODENSCHUTZ 2004: GEOSTATISTISCHE UND STATISTISCHE METHODEN UND AUSWERTEVERFAHREN FÜR GEODATEN MIT PUNKT ZU FLÄCHENBEZUG – ABSCHLUSSBERICHT (VERÖFFENTLICHUNG UNTER [HTTP://WWW.LABO-DEUTSCHLAND.DE](http://www.labo-deutschland.de) IN VORBEREITUNG)

LANDESAMT FÜR DATENVERARBEITUNG UND STATISTIK NRW (HRSG.) 2001: STATISTISCHES JAHRBUCH NORDRHEIN-WESTFALEN 2001, 43. JG. (CD-ROM)

LUA (LANDESUMWELTAMT) NRW (HRSG.) 1999: EMISSIONSKATASTER LUFT NORDRHEIN-WESTFALEN 1996/97, 43 S. + ANHANG, ESSEN

LUA (LANDESUMWELTAMT) NRW (HRSG.) 2000: LEITFADEN ZUR ERSTELLUNG DIGITALER BODENBELASTUNGSKARTEN TEIL 1:AUßENBEREICHE; MERKBLÄTTER NR. 24, ESSEN

LUA (LANDESUMWELTAMT) NRW 2002: HINTERGRUNDWERTE FÜR ANORGANISCHE UND ORGANISCHE SCHADSTOFFE IN OBERBÖDEN NORDRHEIN-WESTFALENS – AUSWERTUNGEN AUS DEM FACHINFORMATIONSSYSTEM STOFFLICHE BODENBELASTUNG (FIS StoBo);

[HTTP://WWW.LUA.NRW.DE/BODEN/BODENSCHUTZ/HGW_INTERNET_2003-3.PDF](http://www.lua.nrw.de/BODEN/BODENSCHUTZ/HGW_INTERNET_2003-3.PDF)

MURL (MINISTERIUM FÜR UMWELT, RAUMORDNUNG UND LANDWIRTSCHAFT) NRW (HRSG.)1991: NRW-MESSPROGRAMM: CHLORAROMATEN-HERKUNFT UND TRANSFER, ABSCHLUßBERICHT, DÜSSELDORF

MUNLV (MINISTERIUM FÜR UMWELT UND NATURSCHUTZ, LANDWIRTSCHAFT UND VERBRAUCHERSCHUTZ) NRW (HRSG.) 2004: FIS StoBo – DAS FACHINFORMATIONSSYSTEM STOFFLICHE BODENBELASTUNG, DÜSSELDORF

SACHS, L. 1972: STATISTISCHE AUSWERTUNGSMETHODEN, 3.AUFL., SPRINGER-VERLAG, BERLIN

SPÄTE, A., WERNER, W. 1991: ERFASSUNG UND AUSWERTUNG DER HINTERGRUNDGEHALTE AUSGEWÄHLTER SCHADSTOFFE IN BÖDEN NORDRHEIN-WESTFALENS. HRSG: LANDESAMT FÜR WASSER UND ABFALL DES LANDES NRW. MATERIALIEN ZUR ERMITTLUNG UND SANIERUNG VON ALTLASTEN 4: 109 S. + ANHANG, DÜSSELDORF

TOBLER, W., 1970: A COMPUTER MOVIE SIMULATING URBAN GROWTH IN THE DETROIT REGION; ECONOMIC GEOGRAPHY VOL. 46 NO.2, S. 234-240

UMWELTBUNDESAMT (HRSG.) 2002: KENNZEICHNUNG VON GEBIETEN MIT GROßFLÄCHIG SIEDLUNGSBEDINGT ERHÖHTEN SCHADSTOFFGEHALTEN IN BÖDEN, UBA-FORSCHUNGSBERICHT 200 71 238

UTERMANN, J., DÜWEL, O., FUCHS, M., GÄBLER, H.-E., GEHRT, E., HINDEL, R., SCHNEIDER, J. 1999: METHODISCHE ANFORDERUNGEN AN DIE FLÄCHENREPRÄSENTANZ VON HINTERGRUNDWERTEN IN OBERBÖDEN. UBA-F+E 99-066; UBA-TEXTE 95/99, BERLIN

UTERMANN, J., DÜWEL, O., GÄBLER, H.E., HINDEL, R. 2000: BEZIEHUNG ZWISCHEN TOTALGEHALTEN UND KÖNIGSWASSER-EXTRAHIERBAREN GEHALTEN VON SCHWERMETALLEN IN BÖDEN. IN: ROSENKRANZ, D., EINSELE, G., HARRESS, H.-M. (HRSG.): BODENSCHUTZ – ERGÄNZBARES HANDBUCH. KENNZIFFER 1600, ERICH-SCHMIDT-VERLAG, BERLIN

WEBSTER, R., OLIVER, M. 2001: GEOSTATISTICS FOR ENVIRONMENTAL SCIENTISTS. JOHN WILEY & SONS, LTD, CHICHESTER, ISBN 0-471-96553-7

Anhang

1. Prüfung der Daten

Der Eingangsdatenbestand des FIS StoBo ist bezüglich der Datenqualität und –verteilung sehr heterogen. Aus Gründen der Vergleichbarkeit und um die Repräsentativität sicher zu stellen waren umfangreiche Bearbeitungsschritte zur Datenprüfung und –auswahl erforderlich.

1.1 Allgemeine Anforderungen an die Datenqualität

Vor der eigentlichen Auswertung wurde die Datenbasis des FIS StoBo vorselektiert. Dabei wurden insbesondere folgende Kriterien berücksichtigt:

- **Genauigkeit des Raumbezuges**

Im FIS StoBo sind zahlreiche Daten eingestellt, die aus unterschiedlichen Gründen nur einen 4-stelligen Gauß-Krüger-Koordinatenbezug aufweisen, was einer Genauigkeit von 1 km entspricht. Um zu starke Ungenauigkeiten bei Verschneidungen mit thematischen Karten zu vermeiden, wurden nur Datensätze selektiert, die mindestens 5-stellige Gauß-Krüger-Koordinaten aufweisen, was einer Genauigkeit von mindestens 100m entspricht. Nach der Datenselektion stehen weiterhin ca. 35.000 Datensätze zur Verfügung. Bei der Verschneidung mit der BK50 des GD konnten ca. 5.000 Datensätze nicht berücksichtigt werden, da sie in sog. Randbereiche der BK50 fallen und ihnen somit keine Information über das oberflächennahe Gestein zugeordnet werden konnte.

- **Auswahl von Stoffen bzw. Stoffgruppen**

Bei der Stoffgruppe der Schwermetalle wurden die Parameter Blei (Pb), Cadmium (Cd), Kupfer (Cu), Zink (Zn), Chrom (Cr), Nickel (Ni), Quecksilber (Hg) und Arsen (As) berücksichtigt.

- **Analysemethoden:**

Als Analyseverfahren für die Schwermetalle wurde die Bestimmung im Königswasserextrakt (Messung AAS oder ICP-OES) gewählt. Mit Ausnahme von Cadmium wurden auch Daten aus Röntgenfluoreszenzanalysen in die Auswertung aufgenommen. Weiterhin gingen vereinzelt Daten mit Totalaufschluss in die Auswertung mit ein. Die Vergleichbarkeit mit in Königswasser extrahierten Analysenwerten wurde regressionsanalytisch geprüft (UTERMANN ET AL. 2000).

- **Probenahmeverfahren bzw. -art:**

Anhand der im FIS StoBo vorliegenden Meta-Informationen wurde geprüft, ob bestimmte Datensätze abweichende bzw. nicht geeignete Probenahmestrategien aufweisen. Dieses war nicht der Fall.

1.2 Definition spezifischer Belastungen

Flächen mit punktuellen oder kleinräumig außergewöhnlichen Stoffbelastungen sollen für Karten im vorliegenden Maßstabbereich als Ausschlussflächen definiert werden. Für die damit verbundene ursachenbezogene Datenauswertung wurden zusätzliche Informationsquellen ausgewertet und wie folgt berücksichtigt :

Geogene Belastungen

Um kleinräumige geogene Belastungen (Erzabbaugebiete) abzugrenzen, reicht die Berücksichtigung der Einheiten der oberflächennahen Gesteine (s. Kap. 3.2) nicht aus, da die Karte der oberflächennahen Gesteine bzw. die Bodenkarte hierzu keine Angaben enthält. Aus diesem Grund wurden zusätzlich Informationen über „verlassene Tagesöffnungen“, die das ehemalige Landesoberbergamt (jetzt Bezirksregierung Arnsberg) in einer Datenbank digital vorhält, hinzugezogen. Die Angaben in dieser Datenbank können Hinweise auf geförderte Erze geben. Es wurden daher hieraus Bergwerksfelder der relevanten Schwermetallerze selektiert und Flächen, die im Umkreis von 200 m um den Mittelpunkt einer solchen verlassenen Tagesöffnung liegen, von der weiteren Auswertung ausgeschlossen.

Überschwemmungsgebiete

Erste Datenauswertungen ergaben, dass Stoffgehalte innerhalb von Überschwemmungsbereichen der Flüsse in vielen Fällen deutlich höher lagen als außerhalb. Um die Belastung der Böden in Überschwemmungsgebieten zu berücksichtigen, wurde ein Abgleich mit der Karte der hochwassergefährdeten Bereiche in NRW 1:50.000 (Stand April 2001) durchgeführt. Grundlage waren ausgewiesene Überschwemmungs- und Überflutungsbereiche aller in die Karte der hochwassergefährdeten Bereiche eingegangenen Festlegungsverfahren. Für das Überschwemmungsgebiet des Rheines wurden die Bereiche 100-jähriger Überschwemmung ohne Deiche berücksichtigt. Auf diese Weise wurden die Flächen aller Überschwemmungsgebiete der Karte der hochwassergefährdeten Gebiete zusammengefasst und mit den Punktdaten verschnitten.

Im Rahmen der weiteren Bearbeitung (Anhang 2.2.3) zeigte sich, dass im unmittelbaren Umgebungsbereich der Überschwemmungsbereiche diese Vorgehensweise für einen sicheren Ausschluss von Extremwerten nicht ausreicht. Aus diesem Grunde wurden auch Punkte, die einen Abstand von weniger als 100 Metern zu einem potenziellen Überschwemmungsgebiet aufweisen, in diese Belastungskategorie einbezogen. Insgesamt waren 2.624 Datensätze vom Einfluss möglicher Überschwemmungen betroffen. Es besteht die Möglichkeit, die Daten aus Überschwemmungsgebieten zu einem späteren Zeitpunkt gesondert auszuwerten.

Immissionsbelastungen

Grundsätzlich können Immissionsgebiete anhand der Emissionssituation oder anhand von Angaben zur Immission abgegrenzt und definiert werden. Daten ausreichender Lagegenauigkeit sind für die Darstellung der Emissionssituation allerdings nicht landesweit verfügbar. Weiterhin reichen die aggregierten Informationen zu den einzelnen Gemeinden (vgl. Daten des Emissionskatasters Luft 1996/97, LANDESUMWELTAMT 1999) für eine Abgrenzung nicht aus.

Aus diesem Grund wurden großräumige Immissionsgebiete anhand von Zuordnungen der Gemeinden zu den siedlungsstrukturellen Gebietstypen differenziert bzw. abgegrenzt.

Sondergebiete mit erhöhten eher kleinräumigen Immissionsbelastungen gehen hingegen nicht in die Auswertung ein. Zur Darstellung der langjährig vorherrschenden Immissionssituation und zur Abgrenzung solcher Belastungsgebiete konnte auf diskontinuierliche Luftqualitätsmessungen des LUA bzw. seiner Vorläuferinstitutionen zurückgegriffen werden. Da i.d.R. über längere Zeiträume Depositionsmessungen zu Staubbiederschlag und Inhaltsstoffen vorliegen, wurden auf dieser Basis spezifische Immissionsgebiete als Belastungsgebiete abgegrenzt. Als Kriterium wurde die Überschreitung eines oder mehrerer Grenzwerte der TA-Luft für Staub, Blei und Cadmium (ANONYM 2002) im mehrjährigen Mittel des jeweiligen Untersuchungszeitraumes gewählt. Auch wenn diese u. a. im Dateninformationssystem des MUNLV (DIM) verfügbaren Daten nicht flächendeckend für NRW vorliegen, konnte auf Grund der langjährigen und schwerpunktmäßigen Untersuchungsreihen definierter Rastereinheiten von einer ausreichenden Datengrundlage für die Berücksichtigung der Immissionssituation ausgegangen werden. Zusammenhängende Gebiete der so definierten Ausschlussflächen finden sich in Nordrhein-Westfalen im Wesentlichen in Teilen des Stadtgebietes Duisburg.

Die ermittelten Teildatenkollektive wurden deskriptiv-statistisch untersucht und ihre Verteilung bezüglich der Konzentration einzelner Stoffe mit Hilfe von Box-and-Whisker-Plots dargestellt (Abb. 15 - 22). In den Plots werden als Balken das 25. und 75. Perzentil mit dem Median als Querlinie sowie als Spannweitenlinie Minimum und Maximum jeweils ohne Ausreißer und Extremwerte dargestellt.

Die einzelnen Schwermetalle verhalten sich für die jeweiligen potenziellen spezifischen Belastungsursachen durchaus unterschiedlich, tendenziell höhere Gehalte gegenüber den Flächen ohne diese Einflüsse (Gruppe Kontrolle) sind jedoch für alle drei Kategorien erkennbar.

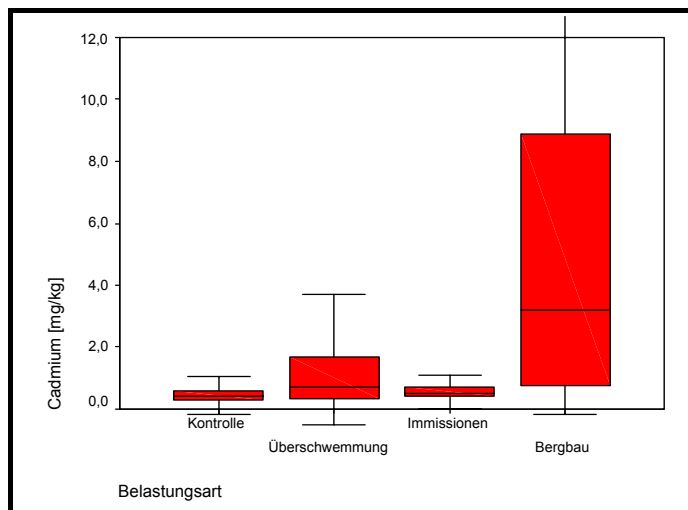


Abbildung 15: Box-and-Whisker-Plots der **Cadmium**gehalte von Böden der nach potenziellen Belastungsursachen differenzierten Teildatenbestände

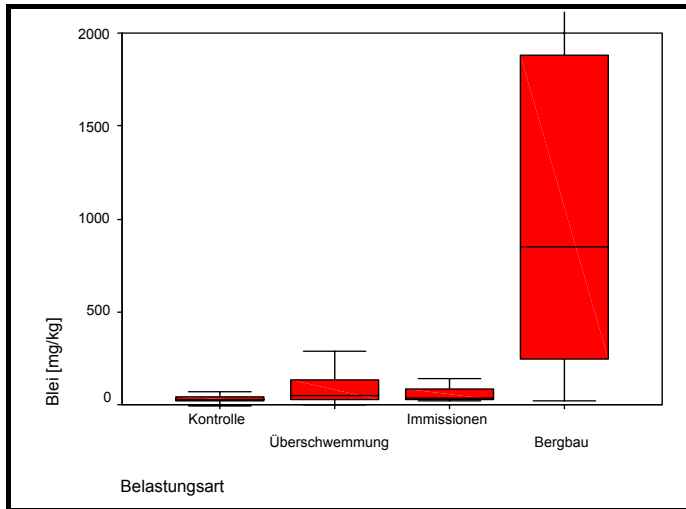


Abbildung 16: Box-and-Whisker-Plots der **Blei**gehalte von Böden der nach potenziellen Belastungsursachen differenzierten Teildatenbestände

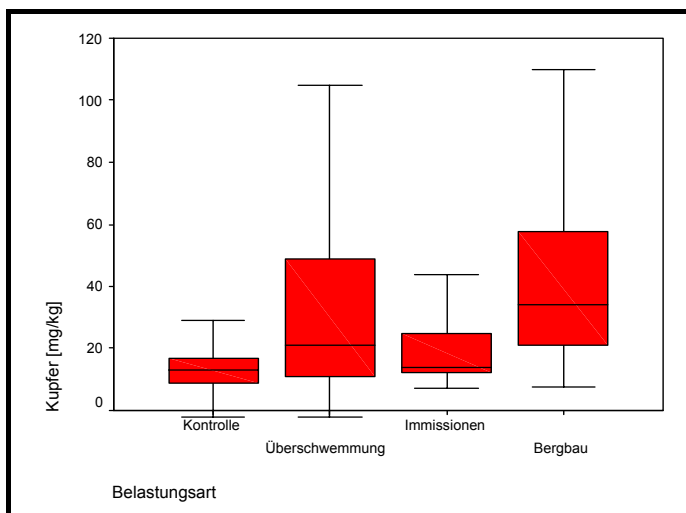


Abbildung 17: Box-and-Whisker-Plots der **Kupfer**gehalte von Böden der nach potenziellen Belastungsursachen differenzierten Teildatenbestände

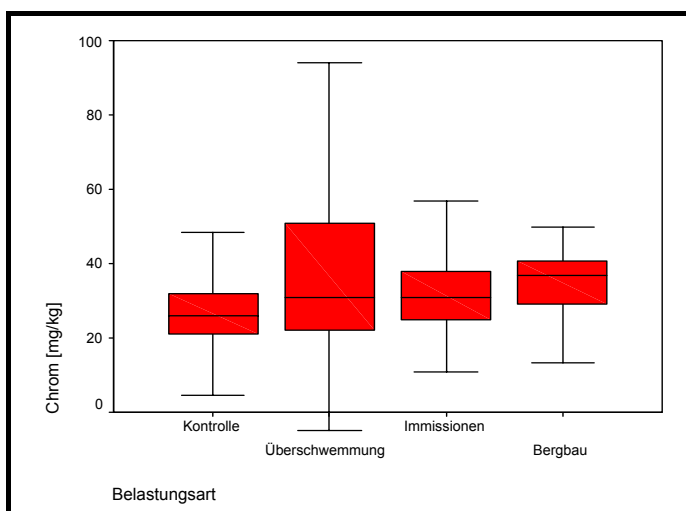


Abbildung 18: Box-and-Whisker-Plots der **Chrom**gehalte von Böden der nach potenziellen Belastungsursachen differenzierten Teildatenbestände

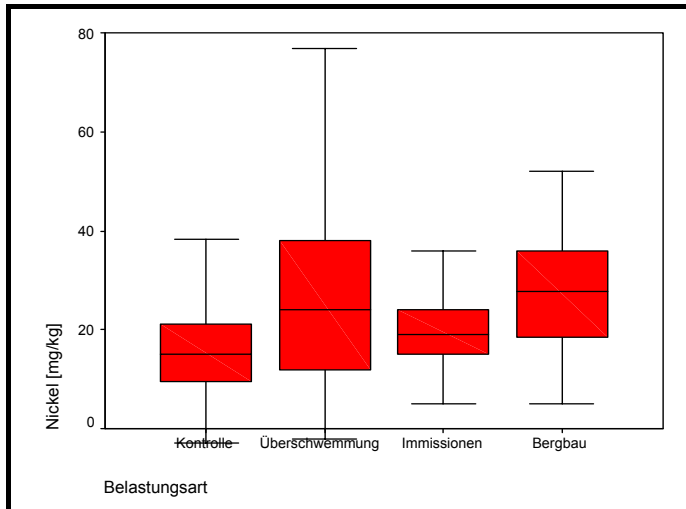


Abbildung 19: Box-and-Whisker-Plots der **Nickel**gehalte von Böden der nach potenziellen Belastungsursachen differenzierten Teildatenbestände

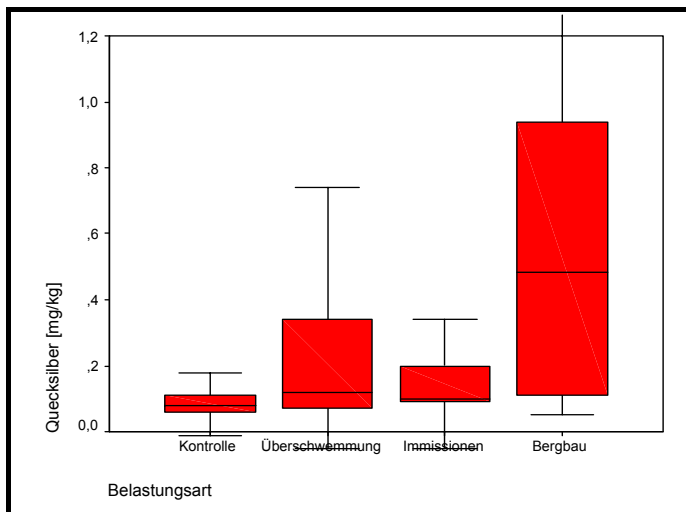


Abbildung 20: Box-and-Whisker-Plots der **Quecksilber**gehalte von Böden der nach potenziellen Belastungsursachen differenzierten Teildatenbestände

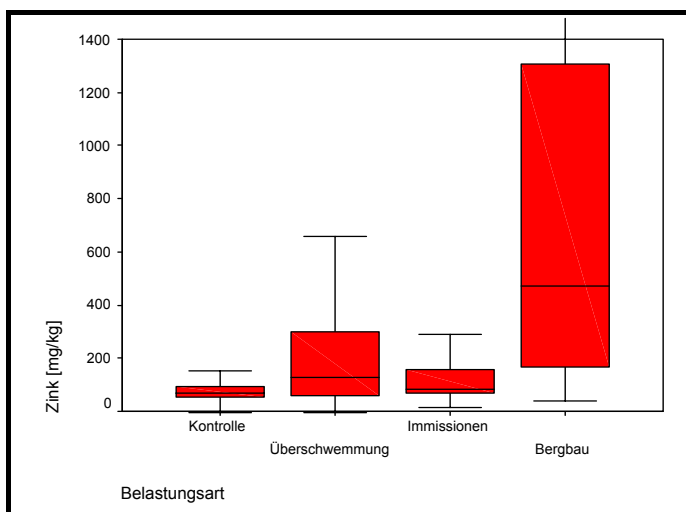


Abbildung 21: Box-and-Whisker-Plots der **Zink**gehalte von Böden der nach potenziellen Belastungsursachen differenzierten Teildatenbestände

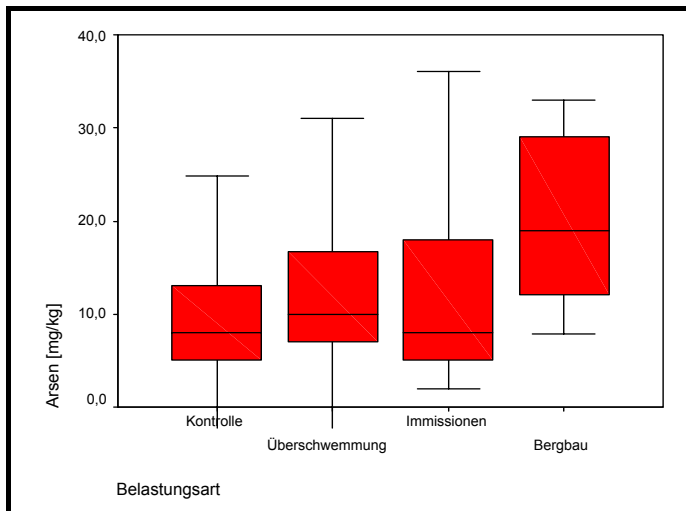


Abbildung 22: Box-and-Whisker-Plots der Arsengehalte von Böden der nach potenziellen Belastungsursachen differenzierten Teildatenbestände

1.3 Statistische Ausreißerdefinition

In einem weiteren Schritt wurde zur abschließenden Datenbereinigung auf weniger empfindliche, rein statistische Testverfahren (E DIN 38 402 TL. 42, 2004; GRUBBS AND BECK, 1972) zurückgegriffen. Diese Vorgehensweise erlaubt es, Extremwerte zu erkennen, führt jedoch nicht dazu, dass der Datenbestand unrealistisch stark geglättet wird und bekannte, vom Flächenumfang bedeutsame Belastungsschwerpunkte von den weiteren Berechnungen vollständig ausgeschlossen würden. Da dieses Verfahren eine annähernd normalverteilte Werteverteilung voraussetzt, wurde die Identifizierung anhand logarithmierter Werte vorgenommen. Da bereits im Zuge der Datenvorbereitung sehr strenge Ausschlussverfahren durchgeführt wurden, wurde hier für die Entscheidung zum Ausschluss das 1%-Niveau gewählt. Die damit herangezogenen oberen und unteren Schranken sind der Tabelle 7 zu entnehmen.

Tabelle 7: Obere und untere Grenzen der Ausreißerbehandlung

	Cd	Pb	Cu	Cr	Ni	Hg	Zn	As
Ausreißer: (untere Schranke; $\alpha=0,01$)	0,1	1	1	1	1	0,004	4	0,3
Ausreißer: (obere Schranke; $\alpha=0,01$)	52,5	1.140	244	252	361	2,07	1.454	228

Datensätze, bei denen ein Messwert als Ausreißer identifiziert wurde, wurden gelöscht.

2. Statistische und geostatistische Methoden zur Kartenerstellung

Variabilität an sich ist eine charakteristische Eigenschaft von Böden und lässt sich in allen Raumdimensionen und auf allen Maßstabsniveaus nachweisen. Ein wesentliches Ziel der Anwendung statistischer und geostatistischer Methoden bei der vorliegenden Auswertung ist es daher, systematische Komponenten der Variabilität festzustellen. Mit Hilfe überwiegend deskriptiv statistischer Methoden können dabei Zusammenhänge mit erwarteten Stoffgehalten einer Probe und bestimmten kategoriellen Eigenschaften wie Nutzungsart, Probenahmetiefe, Überschwemmungseinfluss, etc. nachgewiesen werden. Der Schwerpunkt der vorliegenden Auswertung geht allerdings über diese Zielrichtung hinaus. So sollen hier auch Aussagen zu Stoffgehalten und ihrer Variabilität in Abhängigkeit von deren räumlicher Lage getroffen werden.

2.1 Statistische Kennwerte

Im Rahmen der Exploration eines Datenbestandes werden verschiedene statistische Kennwerte zur Beurteilung der Aussagesicherheiten genutzt. Der hier zu Grunde liegende Datenbestand stimmt im Wesentlichen mit den Daten überein, die bereits für die Ableitung von Hintergrundwerten in NRW analysiert wurden. Im Rahmen der dort durchgeführten Berechnungen wurden die Daten bereits ausführlich statistisch beschrieben. In der hier vorliegenden Analyse sollen geostatistische Verfahren im Vordergrund stehen, so dass an dieser Stelle auf eine intensive statistische Auswertung verzichtet wird. Unter Berücksichtigung der Vorkenntnisse über die Verteilungscharakteristik der Daten werden lediglich die wichtigsten Lagemaße bestimmt und auf differenzierte Auswertungen bestimmter Raumeinheiten verzichtet. Die dazu notwendigen Berechnungen wurden mit Hilfe des Statistikprogrammes SPSS 10.0 durchgeführt. Die Ergebnisse der Auswertungen sind in Kapitel 5.1 dargestellt.

2.2 Räumliche Interpolation

Räumliche Interpolationsverfahren schätzen Messwerte für bestimmte Variablen nicht untersuchter Messstellen aus benachbarten Messungen. Dabei gilt die Grundannahme, dass Messwerte, die näher beieinander liegen, sich ähnlicher sind als Werte, die weiter voneinander entfernt liegen (TOBLER 1970 - First Law of geography).

Man unterscheidet deterministische und geostatistische Interpolationsverfahren. Erstere, wie das Inverse-Distance-Verfahren (IDW) nutzen mathematische Funktionen, um anhand der umliegenden Werte kontinuierliche Oberflächen einer Karte zu modellieren. Geostatistische Interpolationsmethoden, wie das Kriging, nutzen darüber hinaus statistische Beziehungen innerhalb des Kollektivs der Messpunkte (Autokorrelation) und können so zusätzlich Aussagen über Schätzgüte und Sicherheit treffen.

Eine Voraussetzung für eine bestmögliche Schätzung ist neben der räumlichen Abhängigkeit die Stetigkeit der Werteoberfläche. Für Daten des Mediums Boden ist diese Voraussetzung nicht immer gegeben, da natürliche Grenzen durch Nutzungswechsel oder Wechsel des Ausgangsgesteines die Stetigkeit unterbrechen. Um ein solches Verfahren trotzdem anwenden zu können, können so genannte Korrekturfaktoren (s.u.) eingeführt werden.

Das Kriging als geostatistisches Interpolationsverfahren basiert auf der Bestimmung der räumlichen Variation bekannter Messpunkte in Abhängigkeit von deren Entfernung zueinander (WEBSTER AND OLIVER 2001). Dabei werden Messwerte an nicht untersuchten Orten aus gewichteten Mittelwerten benachbarter Messpunkte prognostiziert. Zur Bestimmung der Wichtungsfaktoren ist grundsätzlich eine räumliche Analyse durch ein so genanntes Semivariogramm erforderlich. Dabei müssen die geeigneten Interpolations-Parameter im Einzelfall durch eine Modellanpassung an die empirisch ermittelten Werte abgeleitet werden. Das Semivariogramm ist durch zahlreiche Parameter optimierbar und stellt damit ein mächtiges Werkzeug zur Analyse dar. Die damit einhergehenden Entscheidungen sind weitgehend nicht automatisierbar. Aus diesem Grund erfordern die einzelnen Arbeiten eine genaue Kenntnis von Daten und Methoden. Eine pauschale Anwendung der Flächeninterpolation ohne vorbereitende Raumstrukturanalyse kann zu Fehlinterpretationen führen. Es bestehen mehrere Möglichkeiten, die Interpolation anzuwenden (UMWELTBUNDESAMT 2002):

- Interpolation über Raumeinheiten ohne Korrekturfaktoren

Bei der einfachen Interpolation über Raumeinheiten ohne Korrekturfaktoren sind großräumige Gebietsunterschiede dominant und die Raumeinheiten zeigen keine spezifischen Unterschiede. Aus diesem Grund können auch Korrekturfaktoren nicht mit der nötigen Sicherheit berechnet werden.

- Interpolation innerhalb von Raumeinheiten

Wenn die Angabe von Korrekturfaktoren nicht möglich ist und gleichzeitig Unterschiede zwischen den Einheiten bestehen, sollte die Interpolation innerhalb der einzelnen Raumeinheiten durchgeführt werden.

- Interpolation über Raumeinheiten mit Korrekturfaktoren

Bei dieser Art von Interpolation handelt es sich um ein aufwändiges Verfahren. Es ist ein Verfahren, welches auch bei der Erstellung von digitalen Bodenbelastungskarten der Kreise und kreisfreien Städte in NRW angewandt wird (LANDESUMWELTAMT 2000). Zur Berücksichtigung von Einflussgrößen können so genannte Korrekturfaktoren eingeführt werden. Diese werden statistisch für die vorhandenen Einflussfaktoren und jeden Stoff differenziert abgeleitet. Mit Hilfe der Faktoren können bekannte Einflussgrößen rechnerisch eliminiert und somit die Voraussetzungen für die Anwendung von Interpolationsmethoden geschaffen werden.

2.2.1 Methode

Als Methode für das räumliche Interpolationsverfahren wurde das Ordinary Kriging angewandt. Es ist zu beachten, dass in der Regel bei Wertekollektiven, die Bodenkonzentrationen beschreiben, trotz der vorangegangenen Selektionsschritte keine Normalverteilung der Werte vorliegt. Um eine notwendige annähernde Normalverteilung zu erreichen, wurde generell eine Log-Transformation der Daten durchgeführt.

Die Interpolation der Daten wurde mit Hilfe des „ArcGIS Geostatistical Analyst“ der Firma ESRI durchgeführt.

2.2.2 Korrekturfaktoren

Wie in den vorangegangenen Kapiteln bereits angeführt, stellen insbesondere die Nutzungsart, das oberflächennahe Ausgangsgestein sowie Überschwemmungsgebiete bedeutende, nicht stetige Einflussgrößen dar, so dass es an den Grenzen der jeweiligen Einheiten zu sprunghaften Konzentrationsänderungen kommen kann. Die für die Interpolation notwendigen Voraussetzungen von Stetigkeit und Persistenz liegen daher in der Regel nicht vor. Um dennoch eine geostatistische Interpolation durchführen zu können, sind Korrekturen erforderlich.

Die quantitative Ermittlung der Faktoren sowie die Durchführung der anschließenden Korrektur wurde in Anlehnung an die Methoden zur Erstellung digitaler Bodenbelastungskarten in NRW (LANDESUMWELTAMT 2000) vorgenommen. Der Korrekturfaktor „Nutzung“ (F_N) wurde stoffspezifisch als Quotient aus dem 50.-Perzentil der jeweiligen Einheit und dem 50.-Perzentil des Gesamtbestandes errechnet. Beim Korrekturfaktor „Ausgangsgestein“ für den geogen bedingten Stoffgehalt (S_G) wurde von der BBK-Methodik der stoff- und substratspezifischen Durchpausungsfaktoren abgewichen, weil hier bei der Bildung von Einheiten gleichen oberflächennahen Ausgangsgesteins durch umfangreiche Aggregation bereits eine weit reichende Generalisierung stattgefunden hatte. Stattdessen wurde für jede Aggregationseinheit das 1.-Perzentil jedes Stoffes bestimmt und als Korrekturglied in die weiteren Berechnungen einbezogen. Der Einfluss von Überschwemmungen wird für die vorliegende Auswertung nicht berücksichtigt, da die Überschwemmungsgebiete als Ausschlussflächen definiert wurden.

Die Berechnung der korrigierten Stoffgehalte erfolgte demnach nach der folgenden Formel:

$$S_B = (S - S_G) * F_N$$

wobei S_B = bereinigter Stoffgehalt, S = gemessener Stoffgehalt, S_G = geogen bedingter Stoffgehalt und F_N = Nutzungsfaktor.

Im Gegensatz zu den Faktoren Nutzung und Gestein wird im Rahmen der vorliegenden Auswertung angenommen, dass es bei der Einflussgröße „Immissionen“ um eine stetige Größe handelt, die sich nicht oder nur bedingt an starren Grenzen im Raum, allenfalls dem Relief, orientiert. Bei den Gemeindegrenzen handelt es sich zudem um administrative Grenzen, die nur selten an naturräumlichen Gegebenheiten ausgerichtet sind. Es wurde deshalb keine Korrektur für den Immissionseinfluss vorgenommen. Der Prägung der Stoffgehalte durch Einträge über den Luftpfad kommt bei der Interpretation der weiteren Arbeitsschritte daher besondere Bedeutung zu.

2.2.3 Modelloptimierung und Variogrammanalyse

Das Semivariogramm beschreibt die räumliche Variation der gemessenen Werte. Nach Klassenbildung über Entfernungs- und Richtungskomponenten (lag bins) wird die räumliche Abhängigkeit der Klassenmittelwerte in Abhängigkeit von deren Entfernung untereinander dargestellt. Der Zusammenhang wird anschließend durch Anpassung eines Modells abgebildet. Dieses Modell wird üblicherweise durch bestimmte Charakteristiken beschrieben. Diese Kennzeichen werden beispielhaft in Abbildung 23 dargestellt und im Folgenden erläutert.

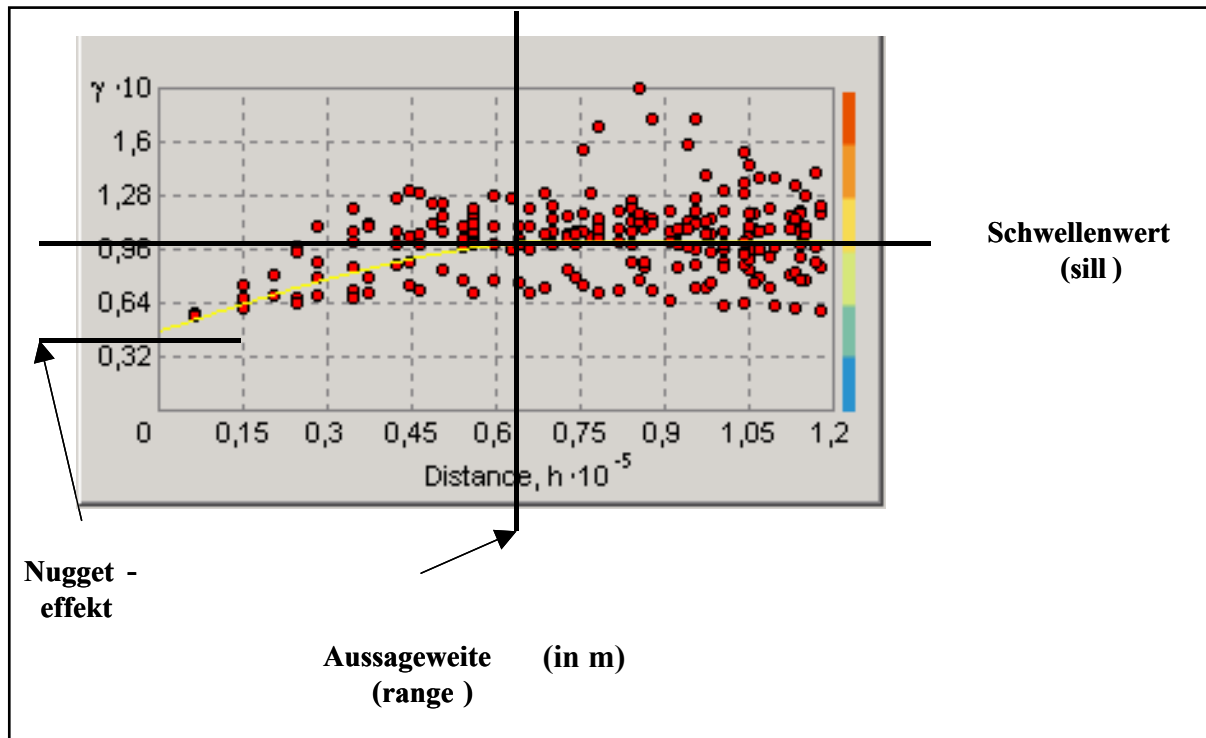


Abbildung 23: Beispiel eines Standardsemivariogramms mit nugget-Effekt, range und sill

- In einem Semivariogramm wird das Abweichungsquadrat zwischen den Messwerten je eines Paares von Probenstandorten (Semivarianz γ) auf der y-Achse gegen die Entfernung dieser beiden Punkte auf der x-Achse aufgetragen. Da diese Vorgehensweise auf Grund des vorliegenden Datenumfangs nicht für alle Einzelwerte handhabbar ist, werden die Einzelwerte in Zellen, die Entfernungs- und Richtungsklassen (lag bins) repräsentieren, eingeteilt und die durchschnittlichen Abweichungsquadrate der Messwerte in den Zellen abhängig von der Entfernung dargestellt.
- Ein roter Punkt in der Punktwolke im Semivariogramm verkörpert ein Zellenpaar. Da näher beieinander liegende Zellen sich ähnlicher sein sollten als weiter entfernte liegende, sollten die Zellen geringer Abstände auch geringere Semivarianzwerte aufweisen. Mit ansteigender Entfernung sollte sich auch die Semivarianz bis zu einem Punkt erhöhen, an dem keine Korrelation mehr zwischen den Werten beobachtet wird.
- Nachdem das Semivariogramm erstellt ist, wird den Punkten ein theoretisches Modell als kontinuierliche Funktionskurve angepasst. Ziel ist es dabei, die durchschnittliche Abweichung der Messwerte von der Kurve zu minimieren. Ein häufig verwendbarer Modelltyp besteht dabei aus sphärischen Funktionen, die dadurch gekennzeichnet

sind, dass sie eine mit der Entfernung abnehmende Tendenz der Autokorrelation aufweisen, bis sie einen Punkt erreichen, an dem die Autokorrelation gleich null ist.

- Es ist dann erkennbar, dass der durch die gelbe Linie in der Abbildung modellhaft beschriebene Zusammenhang mit zunehmender Entfernung abnimmt und ab einer bestimmten Distanz stagniert. Die Entfernung, ab der das Modell abflacht, definiert die Aussageweite (*range*) des Modells. Probenahmepunkte, die näher beieinander liegen als diese Aussageweite sind räumlich autokorreliert, während bei Punkten, die weiter auseinander liegen, ein solcher Zusammenhang nicht mehr nachweisbar ist.
- Der maximal auf der y-Achse erreichte Schwellenwert der Semivarianz wird als *sill* bezeichnet.
- Eine häufig auftretende Besonderheit räumlicher Zusammenhänge wird durch den *Nugget-Effekt* beschrieben. Es wäre zu erwarten, dass bei einer Entfernung zwischen Punkten, die gegen Null geht, die Semivarianz ebenfalls Null beträgt. Dies ist in der Realität jedoch zumeist nicht der Fall. Anschaulich lässt sich dieser Effekt aus den Erfahrungen in der Gewinnung von Gold erläutern. Die nuggets sind scheinbar völlig unabhängig voneinander, sehr zerstreut und diskontinuierlich im Raum zu finden. In der Realität ist dieser Effekt eher Messfehlern oder Variationsquellen in Abständen, die kleiner als die Entfernungsintervalle sind, zuzuschreiben.

Die Ermittlung des Semivariogrammes ist für die räumliche Interpolation von entscheidender Bedeutung, weil auf dieser Basis die Wichtungsfaktoren des Krige-Schätzers berechnet werden. Damit hängt die Güte der anschließenden Interpolation entscheidend vom ermittelten Semivariogramm ab.

Die Validierung und Optimierung der Modelle bzw. des Variogrammes wurde schrittweise anhand der Maßzahlen der Variogrammanalyse sowie mit Hilfe der Werkzeuge zur Datenexploration des Geostatistical Analyst (JOHNSTON ET AL. 2001) durchgeführt.

Es wurde für alle Stoffe eine Anpassung an eine sphärische Variogrammfunktion durchgeführt. Der Geostatistical Analyst berechnet aus den Eingangswerten optimierte Werte für die Parameter der theoretischen Variogrammfunktion (lagsize, number of lags, range). Um hier eine einheitliche Bezugsgröße für alle Stoffe zu erhalten, wurden die Parameter „lagsize“ auf einheitlich 10.000 m und „number of lags“ auf 12 gesetzt.

Die anschließend durchgeführte Datenexploration ergab in einigen Fällen, dass trotz des Ausschlusses spezifisch belasteter Proben weiterhin Extremwerte auftraten. Deren Lokalisierung zeigte, dass insbesondere Proben im Nahbereich gekennzeichnete Überschwemmungsgebiete gehäuft als Extremwerte identifiziert werden konnten. Es wurden in einem weiteren Schritt auch die Daten, die einen Abstand von weniger als 100 m zu einem gekennzeichneten Überschwemmungsgebiet aufwiesen, von der Interpolation ausgeschlossen (Anhang 1.2).

Auf diesem Wege konnte in allen Fällen eine deutliche Reduzierung des Restfehlers und damit eine Verbesserung des Modells erreicht werden.

Die räumliche Variation muss nicht notwendigerweise in allen Richtungen gleich verlaufen. So sind zwei Arten von Richtungskomponenten, die die Vorhersage beeinflussen können, denkbar. Offensichtliche großräumige Veränderungen der Werte in eine Richtung können durch globale Trends, die alle Messwerte des untersuchten Raumes in einer gesetzmäßig vorhersagbaren und beschreibbaren Weise beeinflussen, hervorgerufen werden. In Abbildung 24

werden als Beispiel dafür die Cadmiumkonzentrationen für die gesamte untersuchte Landesfläche abgebildet. Die Messwerte werden durch die Höhe auf der Z-Skala dargestellt (hellgrün) und in Nord-Süd- (X-Achse/Blau) und West-Ost-Richtung (Y-Achse/Dunkelgrün) auf die Diagrammflächen im Hintergrund projiziert. Die Projektion erfolgt maßstabsunabhängig, da die Höhe der Messwerte für die Ableitung von Tendenzen nicht relevant ist. Wie zu erwarten, ist über einen derart umfangreichen Raumbezug ein solcher Trend nicht zu erkennen. Dies gilt gleichermaßen auch für die anderen untersuchten Parameter.

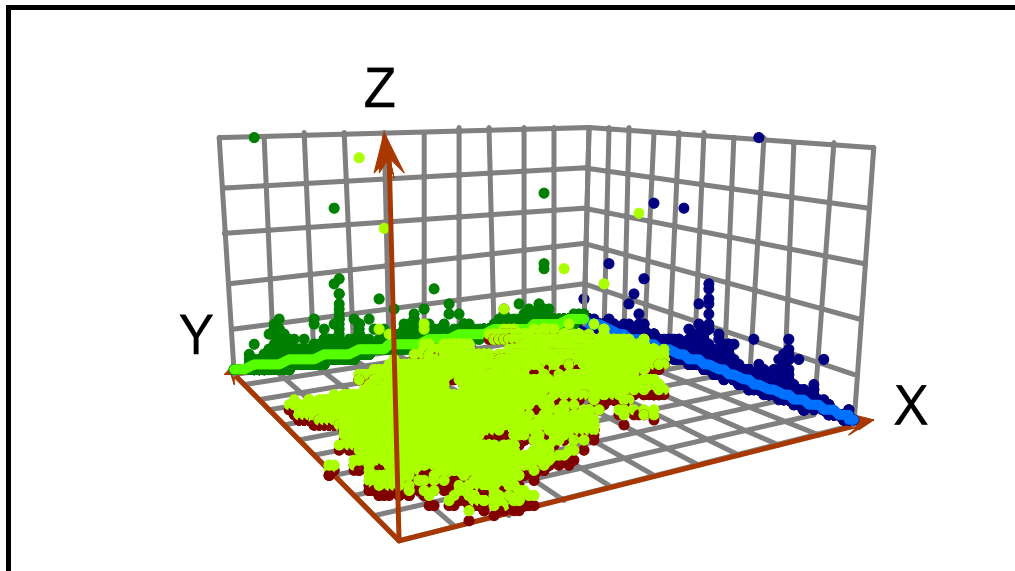


Abbildung 24: Trendanalyse der Cadmiumgehalte in Oberböden Nordrhein-Westfalens

Im Gegensatz zum Trend sind Anisotropie-Einflüsse nicht durch einen physikalischen Prozess erklärbar, ihre Auswirkungen sind häufig nicht eindeutig einer Ursache zuzuordnen. Sie können durch mehrere unbekannte oder nicht messbare Prozesse begründet sein, was zu richtungsabhängig unterschiedlichen Strukturen führen kann. Anisotropie macht sich bemerkbar, wenn das Semivariogramm der gemessenen Werte mit der Himmelsrichtung variiert. Für einige Stoffe ergaben sich bei der Modellierung Hinweise auf das Vorliegen solcher Einflüsse. Deren Berücksichtigung bei der Modelloptimierung führte jedoch nicht mehr zu einer signifikanten Verbesserung, so dass generell auf ihre Einbeziehung verzichtet wurde.

Die Semivariogramme für die untersuchten Stoffe sind in den Abbildungen 25 - 32 dargestellt, deren Kennzahlen sind in der Tabelle 8 aufgeführt.

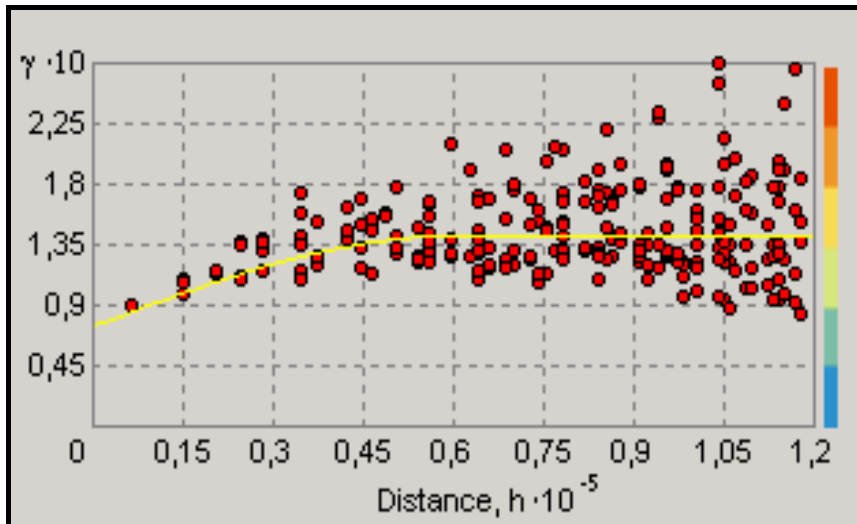


Abbildung 25: Semivariogramm der **Cadmium**gehalte im Boden

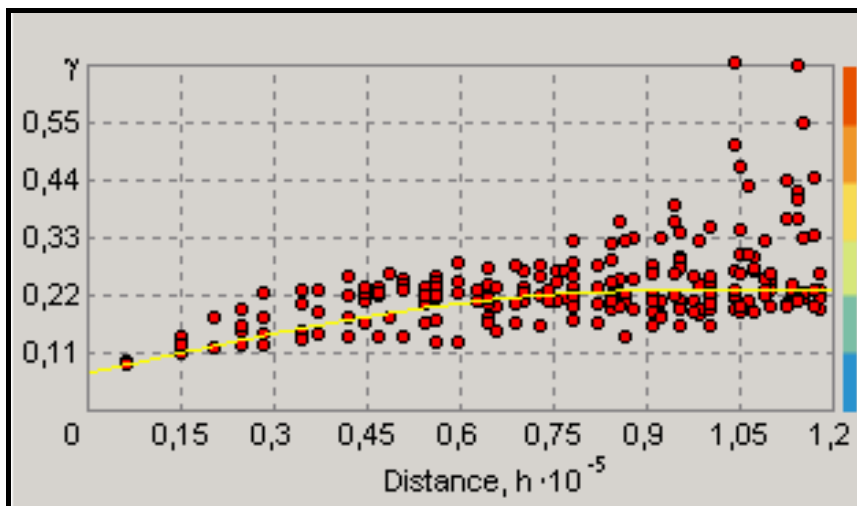


Abbildung 26: Semivariogramm der **Blei**gehalte im Boden

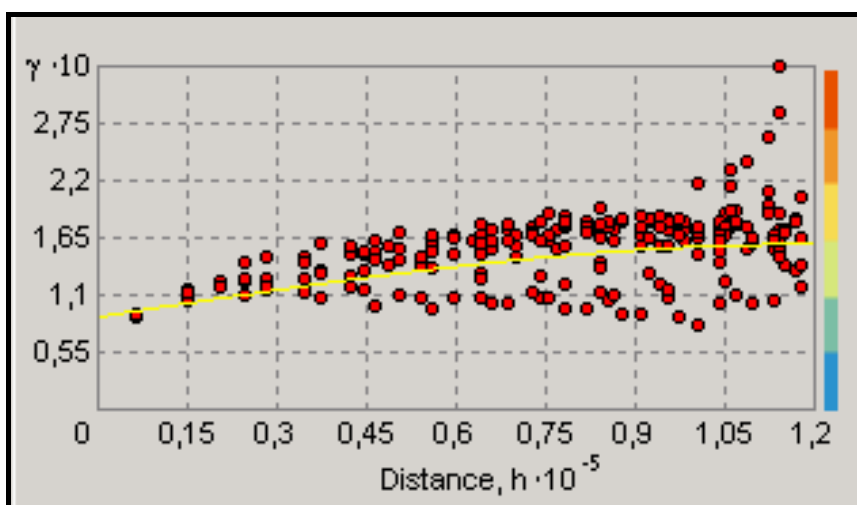


Abbildung 27: Semivariogramm der **Kupfer**gehalte im Boden

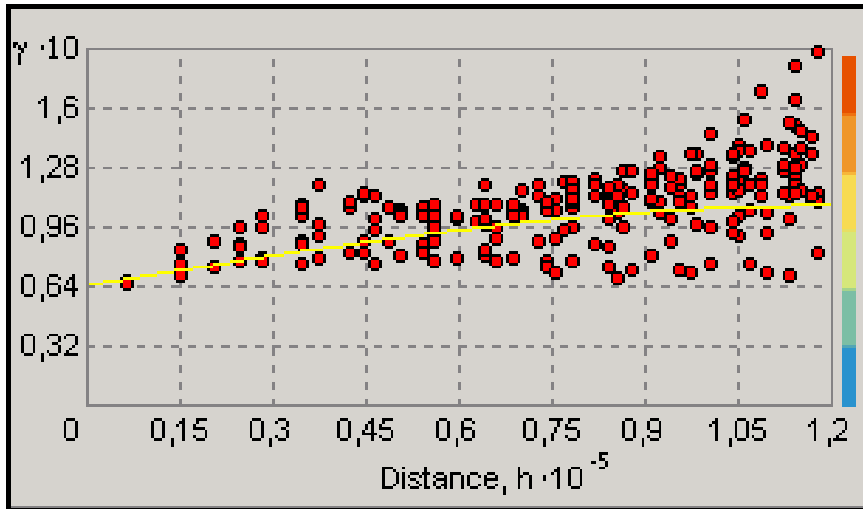


Abbildung 28: Semivariogramm der **Chrom**gehalte im Boden

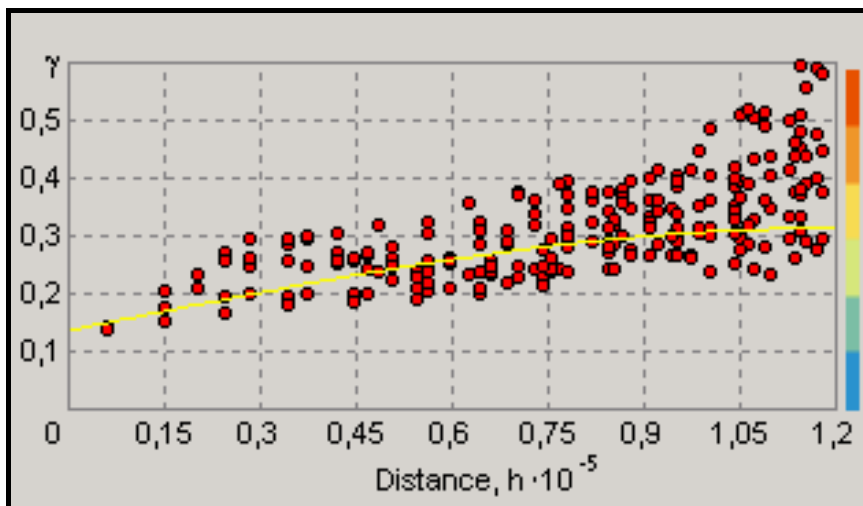


Abbildung 29: Semivariogramm der **Nickel**gehalte im Boden

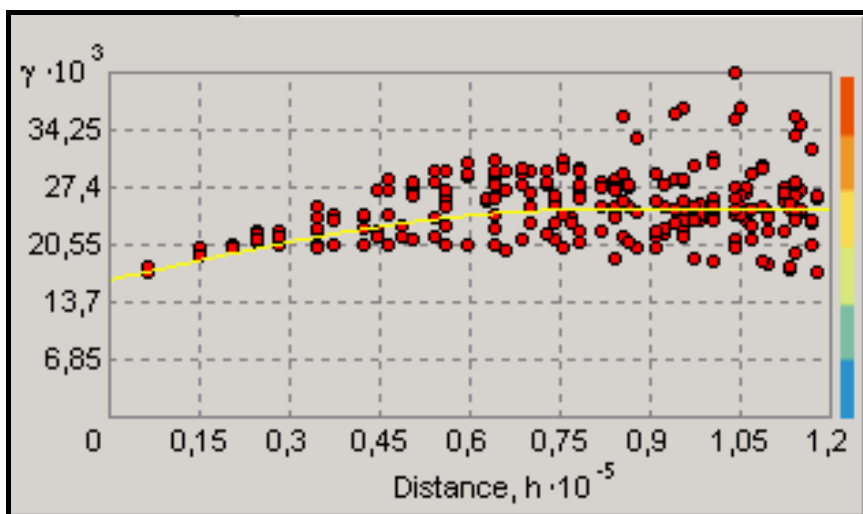


Abbildung 30: Semivariogramm der **Quecksilber**gehalte im Boden

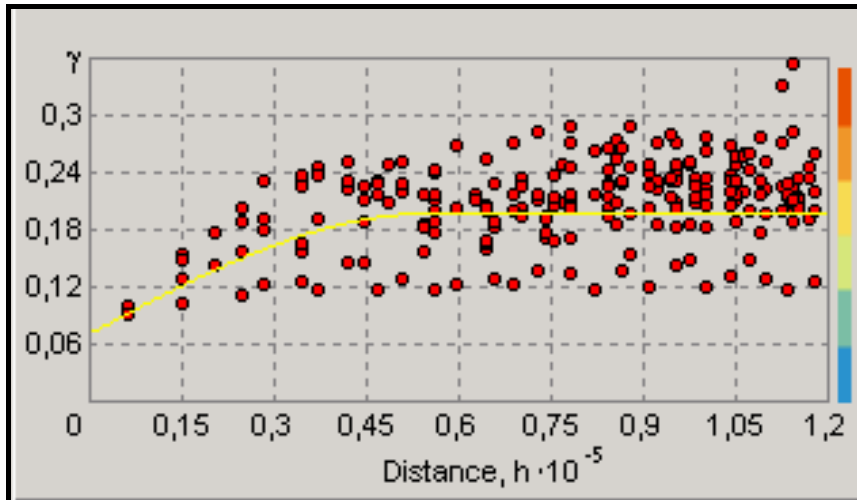


Abbildung 31: Semivariogramm der Zinkgehalte im Boden

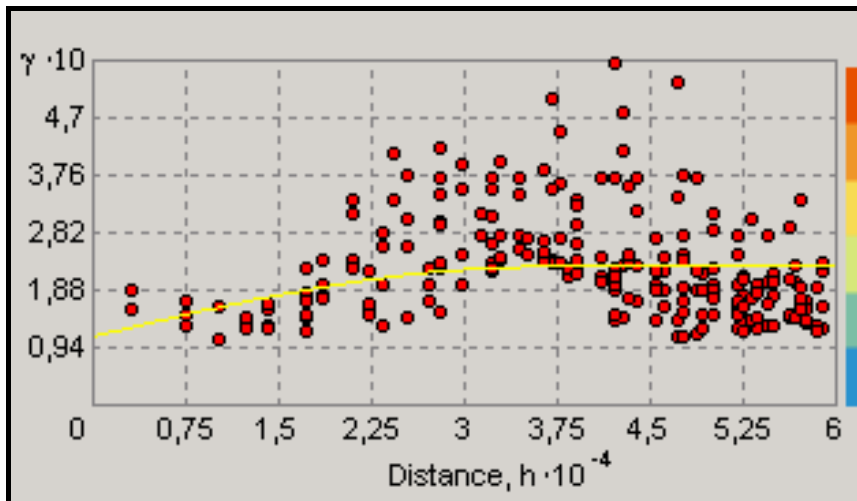


Abbildung 32: Semivariogramm der Arsengehalte im Boden

Vor der endgültigen Erstellung der Arbeitskarten wurde geprüft, wie gut das Modell in der Lage ist, Werte an unbekanntem Standorten vorherzusagen. Dieses wurde vorrangig mit Hilfe der vom Geostatistical Analyst angebotenen Kreuzvalidierung beurteilt. Dabei werden nacheinander gemessene Werte aus dem Kollektiv entfernt und unter Verwendung des gewählten Verfahrens neu geschätzt. Der Schätzfehler des Modells wird aus den Differenzen zwischen gemessenen und geschätzten Werten bestimmt (Standardfehler in Tab. 8).

Tabelle 8: Kenndaten der Semivariogramme und Schätzfehler des Modells

Stoff	Modelltyp	Nugget	Sill	Range	Standardfehler
Cadmium	spherical	0,074	0,141	59.976	0,39
Blei	spherical	0,071	0,228	90.204	17,29
Kupfer	spherical	0,089	0,159	118.530	7,00
Chrom	spherical	0,065	0,108	118.530	11,02
Nickel	spherical	0,136	0,313	118.530	10,41
Quecksilber	spherical	0,016	0,024	79.447	0,06
Zink	spherical	0,071	0,198	55.324	34,08
Arsen	spherical	0,112	0,226	35.808	6,46

Die Schätzfehler können mit Hilfe statistischer Kennwerte wie Standardabweichung oder mittlerem Abweichungsquadrat abschließend beurteilt werden. Die in der Kreuzvalidierung angebotenen Plots geschätzter gegen gemessene Werte ermöglichen die optische Identifizierung stark abweichender Bereiche sowie eine Einschätzung zur Normalverteilung der Schätzfehler (Abbildungen 33 – 40). Theoretisch wäre zu erwarten, dass die Werte um die schwarz gepunktete 1:1-Linie streuen. Da das Kriging jedoch generell dazu tendiert, hohe Werte zu unterschätzen und kleine zu überschätzen, ist die tatsächliche Steigung der errechneten Funktion üblicherweise kleiner als 1.

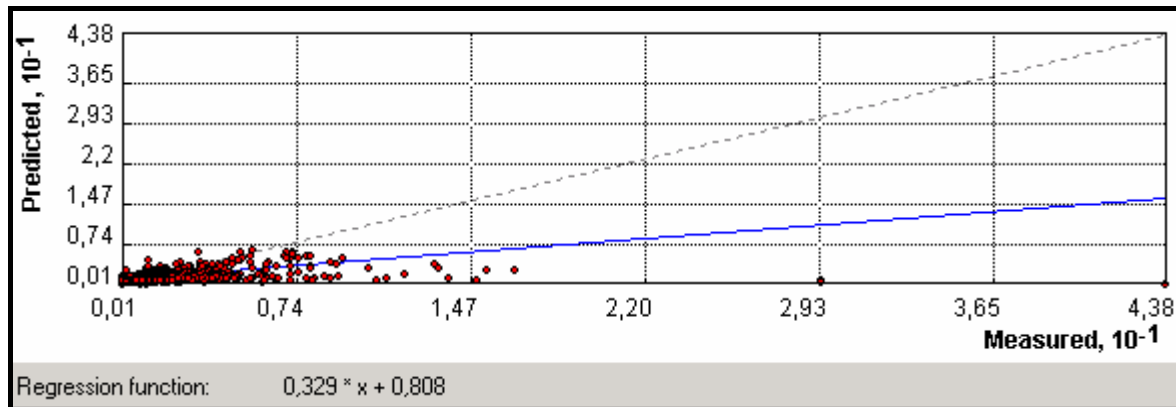


Abbildung 33: Kreuzvalidierung gemessener zu geschätzten **Cadmium**gehalten

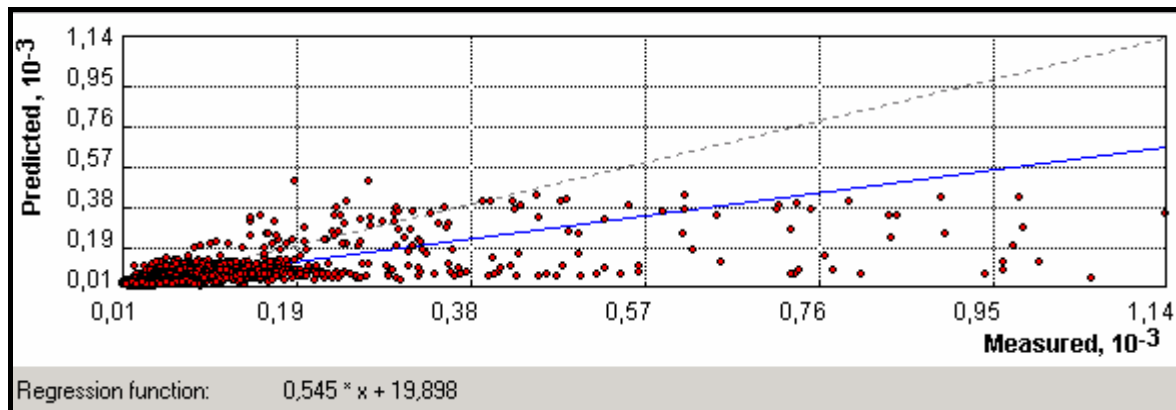


Abbildung 34: Kreuzvalidierung gemessener zu geschätzten **Blei**gehalten

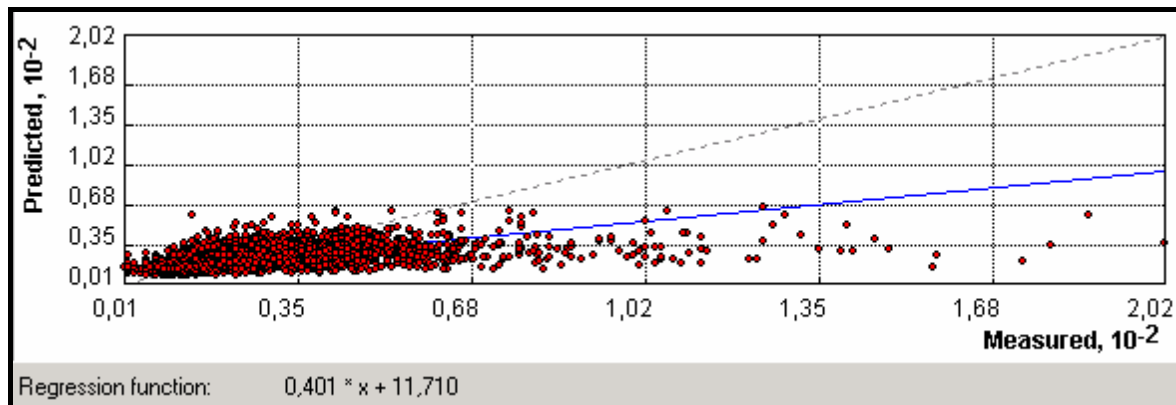


Abbildung 35: Kreuzvalidierung gemessener zu geschätzten **Kupfer**gehalten

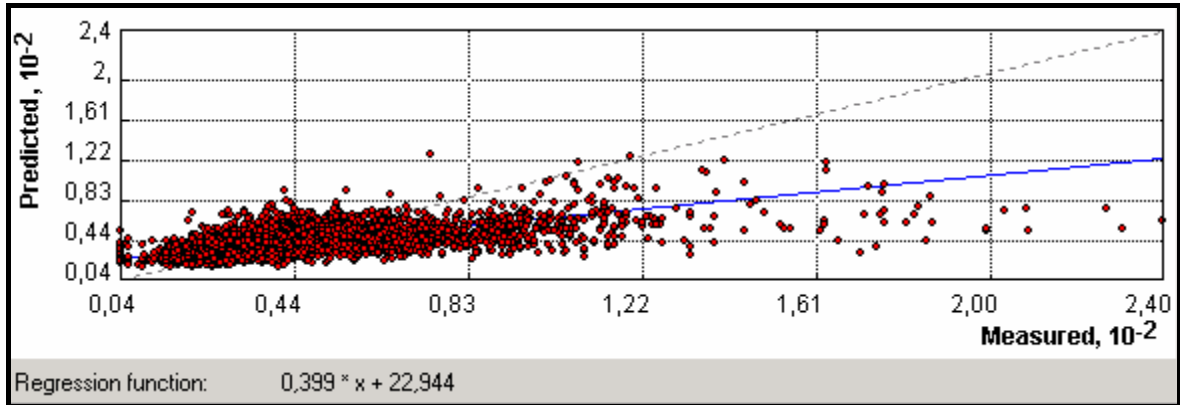


Abbildung 36: Kreuzvalidierung gemessener zu geschätzten **Chrom**gehalten

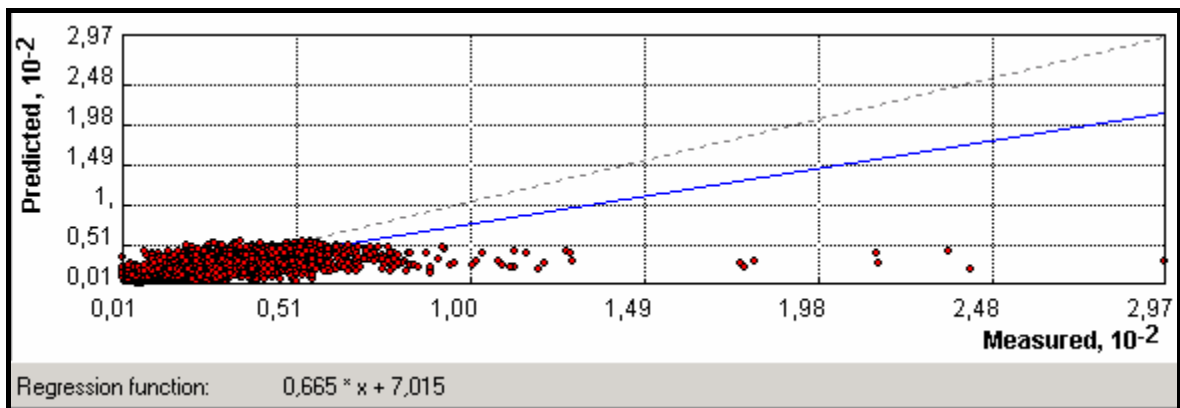


Abbildung 37: Kreuzvalidierung gemessener zu geschätzten **Nickel**gehalten

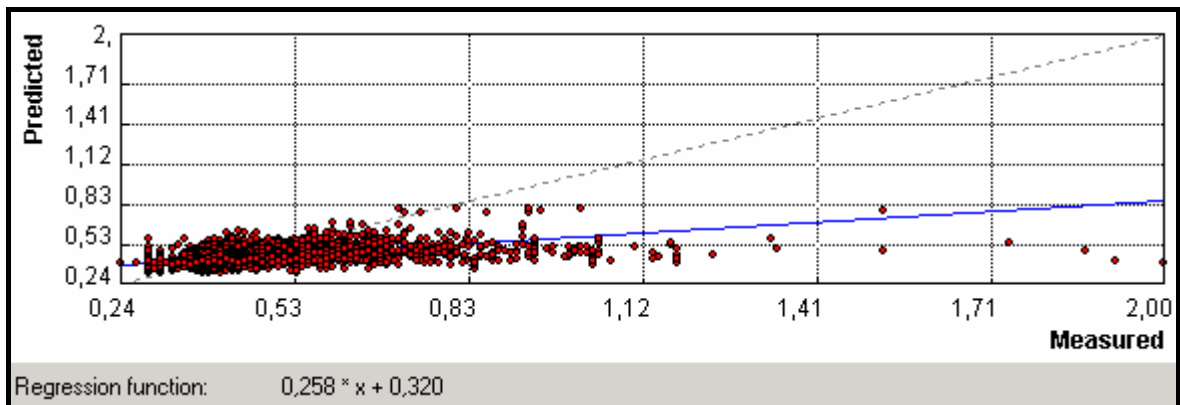


Abbildung 38: Kreuzvalidierung gemessener zu geschätzten **Quecksilber**gehalten

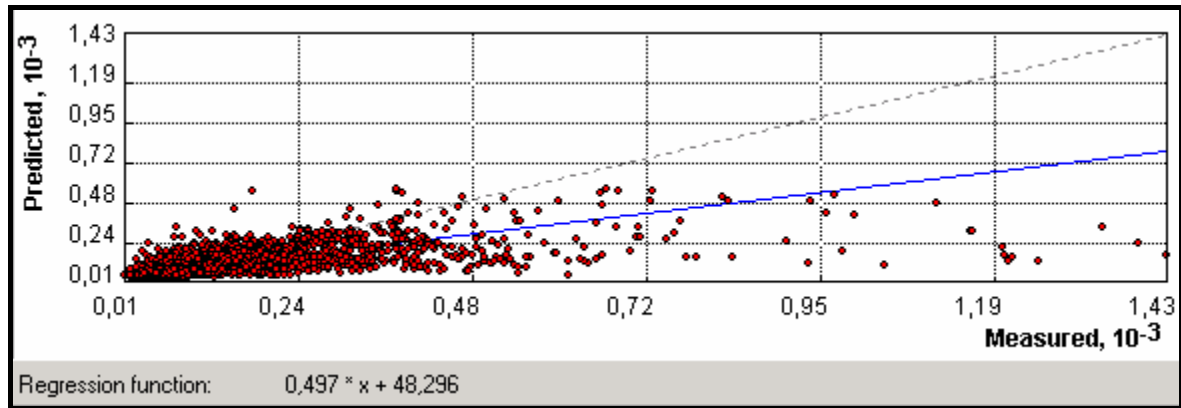


Abbildung 39: Kreuzvalidierung gemessener zu geschätzten **Zink**gehalten

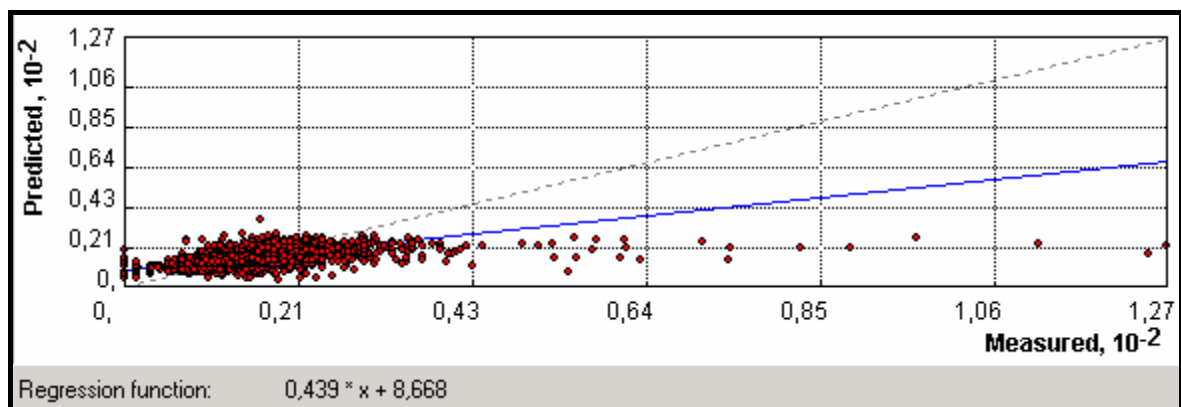


Abbildung 40: Kreuzvalidierung gemessener zu geschätzten **Arsen**gehalten

2.2.4 Erstellung der Karten der Schwermetallgehalte

Um die prognostizierten Werte als Kartenoberfläche darzustellen, wurden die Messwerte mit der Methode „Ordinary Kriging“ interpoliert. Es wurden die für das jeweilige Modell optimierten Standardeinstellungen des Geostatistical Analyst übernommen. Dabei begrenzt der *range* des theoretischen Semivariogramms, also die maximale Entfernung für räumliche Abhängigkeit, den Suchradius für die Messpunkte, die in die Schätzung einbezogen werden. In diesem Kreis mit vier Sektoren wurden normalerweise fünf, mindestens jedoch zwei benachbarte Datenpunkte pro Sektor für die Schätzung benutzt. Da deren Entfernung vom Schätzpunkt einen direkten Einfluss auf den jeweiligen Wichtungsfaktor hat, üben weiter entfernt liegende Messwerte einen weniger bedeutenden Einfluss auf das Schätzergebnis aus als solche in geringerer Entfernung.

Eine Ergebniskarte der interpolierten Bodengehalte ist beispielhaft für Cadmium, Blei und Kupfer in Abbildung 41-43 dargestellt. Da die hier dargestellten standardisierten Vorhersagewerte im weiteren Verfahren noch umfangreichen weiteren Berechnungen unterliegen, werden auch hier keine Angaben zum absoluten Niveau der Schätzwerte gemacht.

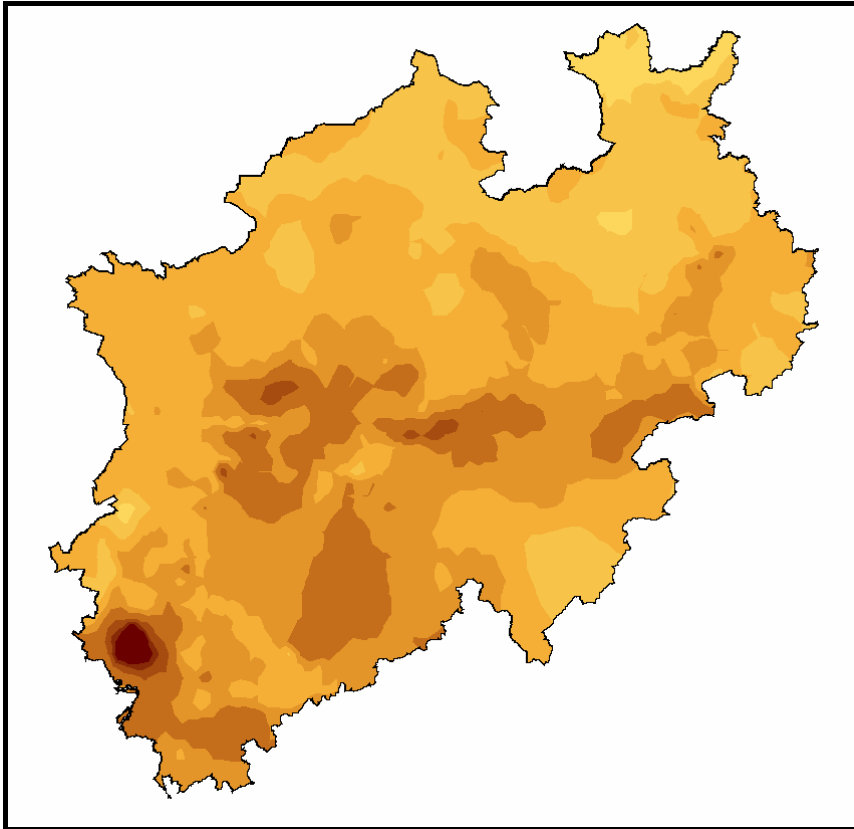


Abbildung 41: Kartendarstellung der standardisierten Vorhersagewerte am Beispiel **Cadmium**

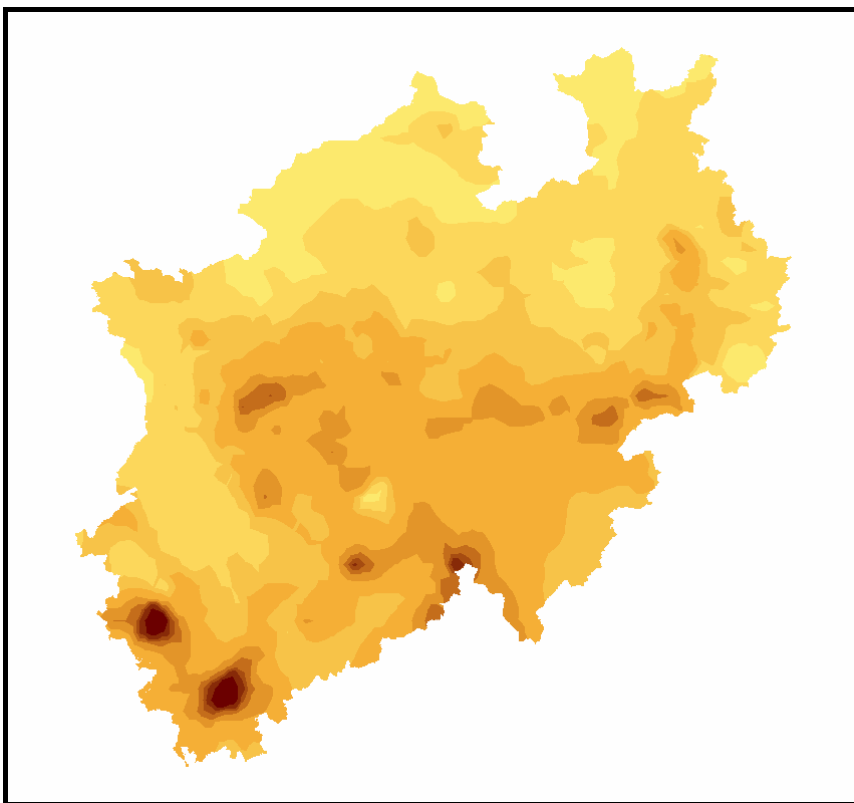


Abbildung 42: Kartendarstellung der standardisierten Vorhersagewerte am Beispiel **Blei**

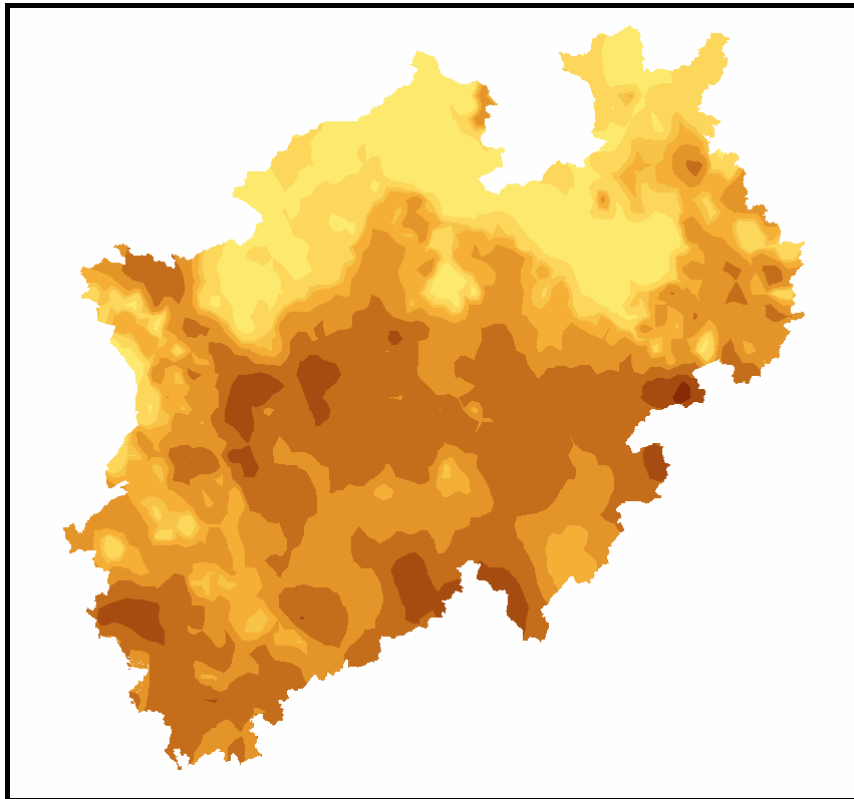


Abbildung 43: Kartendarstellung der standardisierten Vorhersagewerte am Beispiel **Kupfer**

2.2.5 Rückrechnung und Weiterverarbeitung der Ergebnisse

Die für die Interpolation notwendige Bereinigung der Eingangsdaten hat zu einer artefaktisch stetigen Wertoberfläche geführt und muss, um ein realistisches Abbild zu zeigen, unter Berücksichtigung der Korrekturfaktoren wieder zurückgerechnet werden. Die notwendigen Rückrechnungen der Einflussfaktoren wurden anschließend in umgekehrter Reihenfolge mit den Kehrwerten der jeweiligen Korrekturfaktoren durchgeführt.

Die Rückrechnung erfolgt für Rasterzellen von 500 x 500 m Seitenlänge. Dazu wird jeder der Zellen ein einheitlicher Wert für das bodenbildende Ausgangsgestein und die Nutzungsart über die innerhalb jeder Zelle vorrangig vorliegende Ausprägung zugewiesen. Die so ermittelten Karten der geschätzten Schwermetallgehalte beinhalten im Ergebnis wieder die bekannten Unstetigkeitsgrenzen.

Von besonderem Interesse für die Einschätzung der so ermittelten Flächendaten sind Aussagen zur Unsicherheit der Vorhersagen. Da beim Kriging neben der Werteinterpolation auch Angaben dazu bereitgestellt werden, mit welchem Fehler diese Werte behaftet sind, könnten für die einzelnen Rasterzellen Aussagen gemacht werden, mit welcher Wahrscheinlichkeit bestimmte Referenzwerte, z.B. Prüf-, Maßnahmen- oder Vorsorgewerte überschritten sind. Diese Möglichkeit besteht im Rahmen des Krigingverfahrens aus den aufgezeigten methodischen Gründen allerdings nur für die um Korrekturfaktoren bereinigten Daten, nicht für die tatsächlich vorliegenden Messwerte. Darüber hinaus kann die Einsetzung eines sinnvollen

Bewertungsmaßstabes, z.B. der Vorsorge- oder Prüfwerte, nur unter Berücksichtigung der zusätzlichen Flächeninformationen erfolgen. Dies ist auf dem notwendig niedrigen Maßstabniveau sinnvoll nicht möglich. Auf Wahrscheinlichkeitsaussagen im Hinblick auf die Überschreitung von Referenzwerten wurde daher verzichtet. Stattdessen wurde als unabhängiges Verfahren zur Prüfung räumlicher Hinweise bezüglich der Aussagesicherheit hier der Zellenvariationskoeffizient V ($\frac{s}{\bar{x}}$ in Prozent), der Quotient aus Standardabweichung und Mittelwert der Werte aus einer Rasterzelle, als Maß für die relative Streuung gewählt und in die kartographische Darstellung übertragen.

Die Zuweisungen sowie die Rechenschritte, die für die Rückrechnung und Ermittlung der Variationskoeffizienten erforderlich sind, erfolgten mit Hilfe des ArcGIS Spatial Analyst (8.3) der Firma ESRI.

Die abschließenden Karten werden differenziert für jedes Element im Kapitel 5.2 abgebildet und interpretiert.