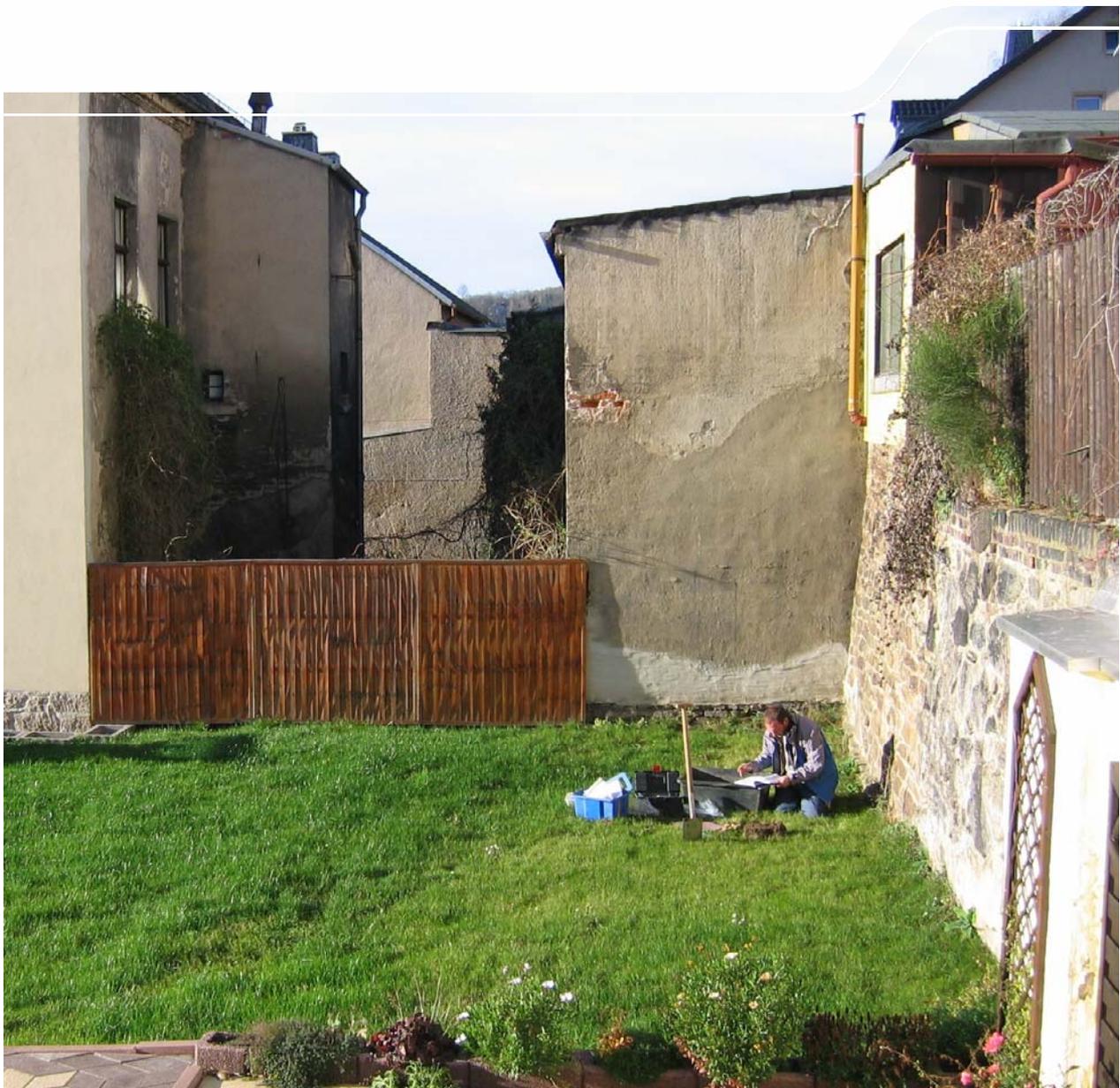


Schadstoffkarten für Siedlungsbereiche

Schriftenreihe, Heft 1/2012



Schadstoffe in Siedlungsbereichen – Untersuchungen zur Verbesserung der Validität flächenhafter Aussagen

Dr. Thomas Hertwig, Dr. Karl-Otto Zeißler

1	Grundlagen und Ziele	8
1.1	Grundlagen	8
1.2	Zielstellung	8
2	Datengrundlage und Auswerteverfahren	8
2.1	Untersuchungsgebiete und Probenahme	8
2.1.1	Auswahl der Testgebiete	8
2.1.1.1	Annaberg-Buchholz	9
2.1.1.2	Aue	10
2.1.2	Auswahl der Probenahmepunkte	11
2.1.3	Tatsächliche Probenahmepunkte	13
2.1.4	Probenahme	14
2.1.5	Analytik	15
2.1.6	Datenauswahl und Datenvorbehandlung	15
2.2	Methodische Grundlagen	17
2.2.1	Methodische Ansätze	17
2.2.2	Deterministische und geostatistische Interpolationsverfahren	19
2.2.2.1	Allgemeine Einführung	19
2.2.2.2	Voronoi-Mosaik	20
2.2.2.3	Invers Distance Weighting (IDW)	22
2.2.2.4	Kriging	23
2.2.2.5	Ordinary Kriging (OK)	24
2.2.2.6	Universal Kriging (UK)	30
2.2.2.7	Indikatorkriging (IK)	33
2.2.3	Flächenhafte Aussagen mit Hilfe von künstlichen neuronalen Netzen (KNN)	35
2.2.3.1	Grundidee der künstlichen neuronalen Netze	35
2.2.3.2	Das Programm advangeo®	37
2.2.4	Validität flächenhafter Aussagen	38
3	Ausgewählte Ergebnisse auf der Basis der modifizierten Methodik	40
3.1	Flächenmodellierungen und methodische Ansätze	40
3.1.1	Raumanalytischer Ansatz – Pb-Gehalte im Oberboden von Annaberg	40
3.1.2	Immissionsansatz – Cd-Gehalte im Oberboden von Aue	43
3.1.3	Substratansatz – Cd-Gehalte im Oberboden von Annaberg	46
3.1.4	Substratansatz – As-Gehalte in den A- und B-Proben von Annaberg mittels advangeo®	48
3.2	Probenverdichtung und Schätzungsverbesserung	51
3.3	Validierung der Schätzung anhand von 10 neuen Proben	53
3.3.1	Auswahl der Probenahmepunkte	53
3.3.2	Überprüfung der prognostizierten Gehalte	54
3.3.2.1	Allgemeines	54
3.3.2.2	Prüfung mit Hilfe der geostatistischen Modelle	55
3.3.2.3	Prüfung mit Hilfe von advangeo®	59
4	Empfehlungen zur Weiterentwicklung der Methodik	65
4.1	Rahmenbedingungen	65
4.2	Flächenabgrenzung	66
4.3	Methodische Ansätze zur Flächenabgrenzung	66
4.4	Probenahme, Elementauswahl und Datenvorbehandlung	68
4.5	Interpolationsverfahren	69
4.6	Eignungsprüfung der Probenwerte anhand der Interpolationsergebnisse	73
4.7	Zusammenfassung der Empfehlungen	73
5	Literaturverzeichnis	76

Abbildungsverzeichnis

Abbildung 1:	Flächennutzung Annaberg-Buchholz, nach historischen Gesichtspunkten aus dem DOP abgeleitet	10
Abbildung 2:	Flächennutzung Aue, nach historischen Gesichtspunkten aus dem DOP abgeleitet, mit Auenbereich.....	11
Abbildung 3:	Verteilung der Probenahmepunkte im Siedlungsgebiet Annaberg-Buchholz	13
Abbildung 4:	Verteilung der Probenahmepunkte im Siedlungsgebiet Aue	14
Abbildung 5:	Beispiel Voronoi-Mosaik; Annaberg - As-Gehalte im Oberboden - Urwerte (links) und Mittelwerte (rechts) aus den Delaunay-Nachbarn	21
Abbildung 6:	Beispiel Voronoi-Mosaik; Annaberg - As-Gehalte im Oberboden - Standardabweichungen	22
Abbildung 7:	Beispiel IDW; Annaberg - As-Gehalte im Oberboden - Interpolationsergebnis	23
Abbildung 8:	Beispiel OK1 und OK2; Annaberg - As-Gehalte im Oberboden - Variogramm	25
Abbildung 9:	Beispiel OK1; Annaberg - As-Gehalte im Oberboden - acht einbezogene Messwerte	25
Abbildung 10:	Beispiel OK2; Annaberg - As-Gehalte im Oberboden - 100 einbezogene Messwerte.....	26
Abbildung 11:	Beispiel OK; Annaberg - As-Gehalte im Oberboden - Vergleich der Schätzwerte; acht (links) und 100 (rechts) einbezogene Messwerte; schattierte Darstellungen	27
Abbildung 12:	Beispiel OK3; Annaberg - As-Gehalte im Oberboden - Variogramm	28
Abbildung 13:	Beispiel OK3; Annaberg - As-Gehalte im Oberboden - Inselbildungen durch fehlenden Nuggeteffekt	28
Abbildung 14:	Cross Validation-Ergebnis für Variante OK1	29
Abbildung 15:	Cross Validation-Ergebnis für Variante OK2	29
Abbildung 16:	Cross Validation-Ergebnis für Variante OK3	29
Abbildung 17:	Beispiel UK1; Annaberg - As-Gehalte im Oberboden - Variogramm mit Standardparametern.....	31
Abbildung 18:	Beispiel UK1; Annaberg - As-Gehalte im Oberboden - Schätzung mit den Standardwerten.....	31
Abbildung 19:	Beispiel UK2; Annaberg - As-Gehalte im Oberboden - Variogramm mit angepassten Parametern	32
Abbildung 20:	Beispiel UK2; Annaberg - As-Gehalte im Oberboden - Schätzung mit den angepassten Variogrammparametern.....	32
Abbildung 21:	Beispiel UK3; Annaberg - As-Gehalte im Oberboden - Schätzung mit Berücksichtigung der Anisotropie.....	33
Abbildung 22:	Beispiel IK1; Annaberg – $\log(\text{As}_B/\text{As}_A)$ - Variogramm des Indikatororkriging	34
Abbildung 23:	Beispiel IK1; Annaberg – $\log(\text{As}_B/\text{As}_A)$ – IDW-Modell (links) und IK (rechts)	34
Abbildung 24:	Schematische Darstellung eines neuronalen Netzes mit einer verdeckten Schicht	35
Abbildung 25:	Beispiel für die Beziehung Ausgangssignale der Sender – Gewichte – Eingangssignal des Empfänger-Neurons.....	36
Abbildung 26:	Voronoi-Mosaik; Annaberg - Pb-Gehalte im Oberboden - Urwerte (links) und Mittelwerte der Delaunay-Nachbarn (rechts).....	40
Abbildung 27:	Box-and-Whisker Plot der dekadischen Logarithmen der nutzungsbezogenen Pb-Gehalte im Oberboden.....	41
Abbildung 28:	Vergleiche der nutzungsbezogenen Gruppenmittelwerte und der 95 %-LSD-Intervalle der dekadischen Logarithmen der Pb-Gehalte im Oberboden.....	41
Abbildung 29:	Annaberg; Pb-Gehalte im Oberboden - Schätzung mit raumanalytischem Ansatz.....	42
Abbildung 30:	Schattierungsdarstellung der Schätzwertoberfläche der Pb-Gehalte im Oberboden mit den beiden sich durch Sprünge abhebenden Teilflächen.....	43
Abbildung 31:	Voronoi-Mosaik; Aue - Cd-Gehalte im Oberboden - Urwerte	43
Abbildung 32:	Untergliederung des Siedlungsgebietes Aue für Darstellung der Cd-Gehalte (gelb – Region 1; ocker – Region 2).....	44
Abbildung 33:	Aue - Cd-Gehalte im Oberboden - Schätzung mit raumanalytischem und Immissionsansatz.....	45
Abbildung 34:	Aue – Vergleich der Cd-Gehalte in den B- und den A-Proben – IDW-Modell (links) und IK (rechts).....	45
Abbildung 35:	Cross Validation für Cd, A-Horizont in Aue, Region 1	46
Abbildung 36:	Cd-Gehalte über der Lagerstättenkontur	46
Abbildung 37:	Zwei-Stichprobenvergleich für die Cd-Gehalte – Box-and-Whisker Plot.....	47
Abbildung 38:	Annaberg - Cd-Gehalte in den A-Proben - Schätzung mit Substratansatz	48
Abbildung 39:	Schätzung der As-Gehalte in Oberböden (links) und Unterböden (rechts) von Annaberg mit advangeo®	49
Abbildung 40:	Gegenüberstellung von Mess- und Vorhersagewerten Annaberg, As im Oberboden	50
Abbildung 41:	Ergebnisse der Kreuzvalidierung, 20 Proben, Annaberg, As im Oberboden	50

Abbildung 42: As- und Pb-Gehalte im Oberboden Annaberg in Abhängigkeit von den Mineralgängen (Schätzung mit advangeo®).....	51
Abbildung 43: Annaberg - As-Gehalte in den A-Proben - Schätzung mit 101 Proben.....	52
Abbildung 44: Annaberg - As-Gehalte in den A-Proben - Schätzung mit 133 Proben.....	52
Abbildung 45: Probenahmepunkte () für die Validierungsuntersuchungen.....	54
Abbildung 46: Annaberg - As-Gehalte im Oberboden - Schätzung mit raumanalytischem Ansatz.....	59
Abbildung 47: As-Gehalte im Ober- und Unterboden des Gebiets Annaberg-Buchholz ohne und mit Einbezug der 10 Zusatzproben	60
Abbildung 48: Gegenüberstellung von Mess- und modellierten As-Werten Annaberg-Buchholz.....	61
Abbildung 49: Gegenüberstellung von Mess- und modellierten Cd-Werten Annaberg-Buchholz.....	62
Abbildung 50: Pb-Gehalte im Ober- und Unterboden des Gebiets Annaberg-Buchholz ohne und mit Einbezug der 10 Zusatzproben	63
Abbildung 51: Gegenüberstellung von Mess- und modellierten Pb-Werten im Ober- und Unterboden des Untersuchungsgebiets Annaberg-Buchholz	64
Abbildung 52: As-Gehalte im Oberboden, Ausschnitt aus dem Untersuchungsgebiet Annaberg-Buchholz mit Zusatzproben 201 und 202 auf Gangstrukturen	65
Abbildung 53: Beispiel für zwei HRE und neun Messwerte.....	67
Abbildung 54: Die Messwerte wurden transformiert und danach interpoliert.....	67
Abbildung 55: Rücktransformation der Messwerte und Interpolation (durchgehende Linie); gestrichelt das erwartete Ergebnis	67

Tabellenverzeichnis

Tabelle 1:	Informationsquellen zur Flächennutzung Annaberg-Buchholz und ihr Nutzwert für die Flächenabgrenzung	9
Tabelle 2:	Flächennutzungsstatistik und Ableitung erforderlicher Probenahmepunkte für Annaberg	12
Tabelle 3:	Flächennutzungsstatistik und Ableitung erforderlicher Probenahmepunkte für Aue	12
Tabelle 4:	Probenahmetiefe Bodenproben	15
Tabelle 5:	Statistische Maßzahlen zum Zwei-Stichprobenvergleich (Gehaltsangaben in mg/kg)	47
Tabelle 6:	Bewertung der As-Gehalte in den Proben der 10 zusätzlichen Probenahmepunkte	55
Tabelle 7:	Bewertung der Cd-Gehalte in den Proben der 10 zusätzlichen Probenahmepunkte	56
Tabelle 8:	Bewertung der Pb-Gehalte in den Proben der 10 zusätzlichen Probenahmepunkte	56
Tabelle 9:	Bewertung der U-Gehalte in den Proben der 10 zusätzlichen Probenahmepunkte	56
Tabelle 10:	Bewertung der Cr-Gehalte im Oberboden der 10 zusätzlichen Probenahmepunkte	57
Tabelle 11:	Übersicht über die probenahmepunktbezogene und horizontbezogene Überschreitung der oberen Grenze des Konfidenzintervalls mit Hilfe der normierten Werte	57
Tabelle 12:	Bewertung der As-Gehalte im Oberboden der 10 zusätzlichen Probenahmepunkte; raumanalytischer Ansatz	59
Tabelle 13:	Arithmetische Mittelwerte aus (modellierter Wert – Messwert)/Messwert	62
Tabelle 14:	Übersicht über die empfohlenen Änderungen/Ergänzungen der Methodik bezüglich der methodischen Ansätze	74
Tabelle 15:	Anwendungsempfehlungen für die untersuchten Verfahren	75

Abkürzungsverzeichnis

AKBEZ	Aufschlusskurzbezeichnung (im FIS Boden)
ALK	Automatisierte Liegenschaftskarte
BBK	Bodenbelastungskarte
BBodSchV	Bundes- Bodenschutz- und Altlastenverordnung
BTLNK	Biotoptypen- und Landnutzungskartierung
DGM	digitales Geländemodell
DOP	digitales Orthophoto
ESRI	Environmental Systems Research Institute (Redlands, Kalifornien)
FIS Boden	Fachinformationssystem Boden des LfULG
GIS	geographisches Informationssystem
HRE	homogene Raumeinheit
IDW	Inversdistanzwägung
IK	Indikatorkriging
KA 5	Kartieranleitung Boden, 5. Auflage
KNN	künstliches neuronales Netz
KW	Königswasseraufschluss
LANUV	Landesamt für Natur, Umwelt und Verbraucherschutz Nordrhein-Westfalen
LfULG	Sächsisches Landesamt für Umwelt, Landwirtschaft und Geologie
LSD	Least Significant Difference (geringste signifikante Differenz)
LUA	Landesumweltamt Nordrhein-Westfalen
OK	Ordinary Kriging
SALKA	Sächsisches Altlastenkataster
TK 10	Topographische Karte 1:10.000
UBODEN	Erfassungsprogramm Boden für das FIS Boden
UK	Universal Kriging
	Probenahmekampagnen
EHF	Ehrenfriedersdorf
SM	Schwermetalluntersuchungen
BBS	Bodenbelastungskarte Siedlungsgebiete
ME	Probendaten Mittleres Erzgebirge

BiCoNi, bafI, hmba, flq, kb, kssf und z

sind Kürzel für Gangmineralisationen: Cobalt-Silbererz-, Baryt-Fluorit-, Hämatit-Baryt-, Quarz-Hornstein- und Fluorit-Quarz-, Kies-Blende-Bleierz-, Kassiterit-Sulfid- und Zinnerz-Formation

1 Grundlagen und Ziele

1.1 Grundlagen

Die Böden des Erzgebirges führen großflächig erhöhte Elementgehalte. Diese Situation ist geogen bedingt, wurde und wird aber auf vielen Flächen durch die menschliche Tätigkeit, insbesondere durch den Bergbau und die angeschlossenen Aufbereitungs- und Hüttenindustrien, erheblich verstärkt und ausgedehnt (insbesondere für die Elemente Arsen, Blei und Cadmium, teilweise auch für Uran). Das zeigen Bodenuntersuchungen an zahlreichen Standorten, so z. B. im Rahmen der Kampagnen zu den Bodenmessnetzen, für die Erarbeitung der fachlichen Grundlagen für eine Ausweisung von Bodenplanungsgebieten und bei Altlastuntersuchungen, sowohl für den sogenannten Außenbereich unter land- und forstwirtschaftlicher Nutzung als auch für die Siedlungsbereiche.

Neben den Punktinformationen aus den einzelnen Untersuchungen sind für zahlreiche Bodenschutzaufgaben ganz besonders Informationen zur flächenhaften Verbreitung von Schadstoffen notwendig, so z. B. für den umweltgerechten Umgang mit Bodenaushub, zur Gefahrenbeurteilung und Ableitung von Maßnahmen zur Gefahrenabwehr bzw. Auflagen bei Wechsel hin zu einer sensibleren Nutzung wie Kinderspielflächen. Weil gerade im Siedlungsbereich nicht alle Einzelgrundstücke intensiv beprobt werden können, verbleibt nur der Weg, aus den Punktinformationen flächenhafte Aussagen abzuleiten.

Für den Außenbereich unter land- und forstwirtschaftlicher Nutzung sind entsprechende Methoden zur flächenhaften Darstellung der Schadstoffgehalte im Rahmen von sogenannten Bodenbelastungskarten (BBK) in NRW erarbeitet und validiert worden (LUA 2000) /4/. Die Übertragung auf sächsische Verhältnisse ist in einem Leitfaden beschrieben (LfULG 2007) /9/. Das LANUV NRW hat zur Bearbeitung von Siedlungsbereichen mehrere methodische Ansätze (immissionsbezogener, substratbezogener und raumanalytischer Ansatz) entwickelt und dargestellt (LANUV 2007) /8/. Diese konnten mit Blick auf die für Sachsen typischen Belastungsbedingungen nur theoretisch modifiziert und in den o. g. Leitfaden des LfULG aufgenommen werden. Eine Überprüfung der Ansätze in den geogen vorbelasteten und bergbaulich geprägten Siedlungsbereichen des Erzgebirges ist bislang nicht erfolgt.

1.2 Zielstellung

Die im Leitfaden des LfULG /9/ beschriebene Methodik zur Erstellung von Bodenbelastungskarten (BBK) im Siedlungsbereich sollte beispielhaft in zwei erzgebirgischen Gebieten erprobt, dort validiert (im Hinblick auf die Aussagesicherheit und die Abschätzung des dafür erforderlichen Aufwands) und ggf. modifiziert werden. Im Ergebnis waren zudem Empfehlungen abzuleiten, welche Parameter und Informationen in welcher Dichte für die flächenhafte Darstellung der Schadstoffsituation zu erheben sind, um mit vertretbarem Aufwand eine für den Vollzug hinreichende Aussagesicherheit zu erreichen.

2 Datengrundlage und Auswerteverfahren

2.1 Untersuchungsgebiete und Probenahme

2.1.1 Auswahl der Testgebiete

Es wurden die Städte Annaberg-Buchholz und Aue als geogen vorbelastete und bergbaulich-industriell geprägte Untersuchungsgebiete für die methodischen Untersuchungen festgelegt. Annaberg-Buchholz ist vorrangig bergbaulich geprägt, Aue hingegen vorrangig industriell und hütten technisch. In Annaberg lagen bereits größere verwendbare Analysendatenmengen vor, in Aue war der Kenntnisstand bezüglich der Bodenbelastungen wesentlich geringer.

2.1.1.1 Annaberg-Buchholz

Allgemeine Charakteristik

Die Größe des Siedlungsgebietes beträgt 781 ha. Die Siedlungsfläche von Annaberg-Buchholz ist durch ein mittelgebirgisches Relief geprägt. Es besteht aus den beiden Städten Annaberg und Buchholz sowie den Dörfern Cunersdorf und Frohnau. Weitere zur Stadt gehörende Siedlungsbereiche wurden nicht mit in die Betrachtung einbezogen. Während Annaberg sich am Westhang des ca. 800 m hohen Pöhlberg ansiedelt, wird das weitere Siedlungsgebiet vom tief eingeschnittenen Sehmatal in zwei Teile geschnitten. Östlich der Sehma liegen Annaberg und Cunersdorf, während westlich Buchholz und Frohnau zu finden sind.

Annaberg-Buchholz ist historisch eine vorrangig bergbaulich geprägte Stadt, in der sich andere Industrien wie die Leichtindustrie erst gegen Ende des 19. Jahrhunderts angesiedelt haben. Entsprechend sind Schadstoffe in erster Linie geogen und vor allen Dingen bergbaulich und durch mittel- bzw. spätmittelalterliches Hüttenwesen bedingt zu erwarten.

Flächennutzungsdaten Annaberg-Buchholz

Für das Untersuchungsgebiet Annaberg-Buchholz liegen folgende Informationsquellen zur Flächennutzung vor (Tabelle 1):

Tabelle 1: Informationsquellen zur Flächennutzung Annaberg-Buchholz und ihr Nutzwert für die Flächenabgrenzung

Flächennutzungsinformationen hergeleitet aus	Nutzwert im Sinne der Aufgabenstellung	Bemerkungen
Biotoptypenkarte (BTLNK)	von geringer Bedeutung, weil bei ihnen der Schwerpunkt auf biotischen Aspekten sowie auf eine Flächendifferenzierung der Bereiche außerhalb der Siedlungsgebiete liegt	
ALK	teilweise zu detailliert, sodass es zu Zuordnungskonflikten der Proben zu bestimmten Nutzungsklassen kommt	
Unterscheidung der Siedlungsflächen nach historischen Gesichtspunkten	kann wesentlichen Hinweis auf den raumanalytischen Ansatz geben	abgeleitet aus den digitalen Orthofotos DOP
Berücksichtigung der Flußäue	hier nicht relevant wegen der überwiegend sehr geringen Breite der Sehmaue im Siedlungsgebiet	
am Probenahmepunkt beobachtet	lässt sich leider selten in die Fläche extrapolieren, was für eine Unterstützung der Interpolation der Messdaten in die Fläche notwendig wäre	

In Voruntersuchungen wurden alle genannten unterschiedlichen Flächennutzungsarten im GIS dargestellt und bewertet. Dabei erwies sich die Flächennutzungsgliederung mit der Unterteilung der Wohngebiete nach historischen Gesichtspunkten für Annaberg-Buchholz als die geeignetste, weil sie insbesondere die Wohngebiete im Sinne des raumanalytischen Ansatzes (s. Kap. 2.2.1 und 3.1.1) sinnvoll unterteilt.

Die aus den DOP optisch abgeleitete Flächennutzungsklassifizierung unterteilt das Siedlungsgebiet Annaberg-Buchholz in folgende historisch gewachsene Flächennutzungen (Abbildung 1):

- Wohngebiete
 - Altstadt
 - Reihenhaussiedlungen (Ende 19.-Anfang 20. Jh.)
 - Eigenheime (Eigenheimsiedlungen, Siedlungen mit dörflichem Charakter)
 - Neubaublocksiedlung aus der DDR
- Gärten
- Freizeit und Erholung
- Grünland
- Industrie/Gewerbe

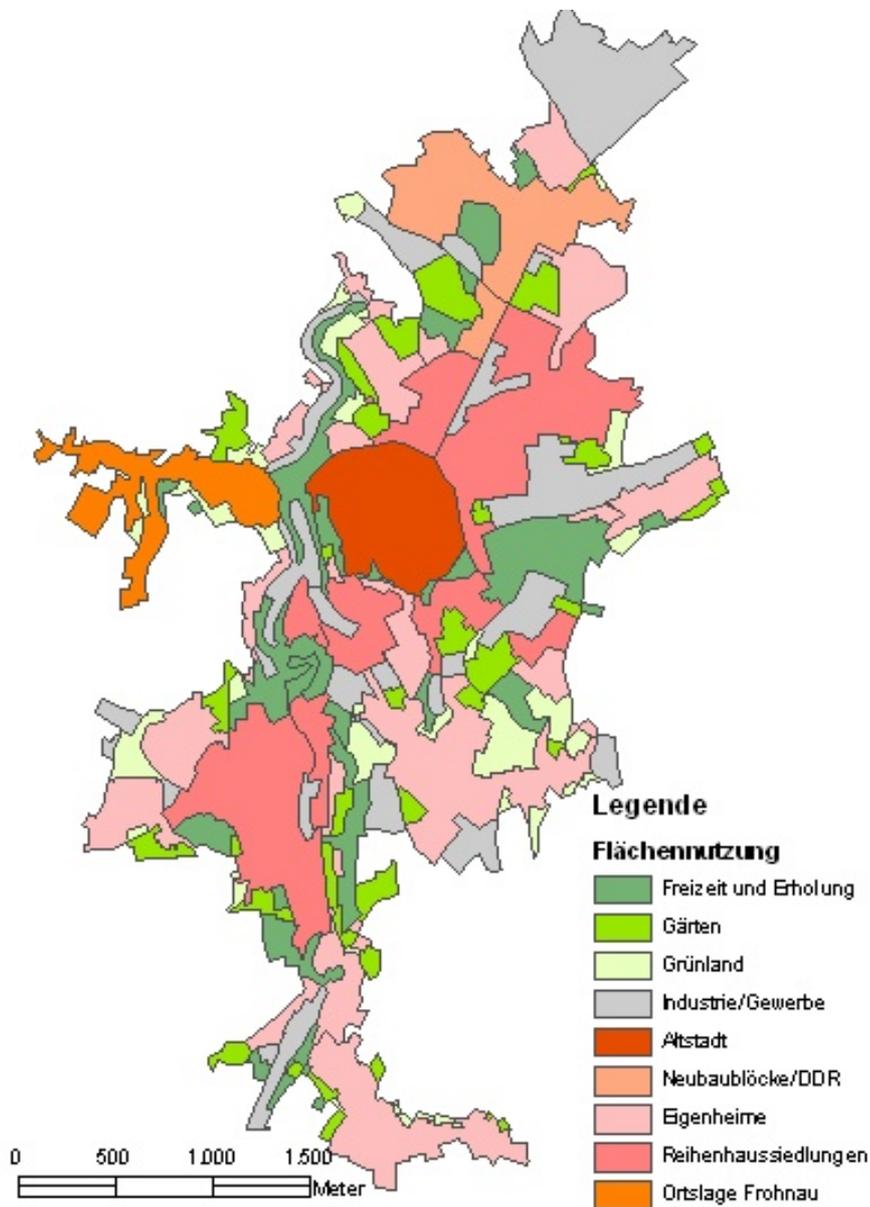


Abbildung 1: Flächennutzung Annaberg-Buchholz, nach historischen Gesichtspunkten aus dem DOP abgeleitet

2.1.1.2 Aue

Allgemeine Charakteristik

Die Größe des untersuchten Siedlungsgebietes Aue beträgt 502 ha. Aue ist ein jahrhundertealter Industriestandort im Erzgebirge am Zusammenfluss von Zwickauer Mulde und Schwarzwasser. Der Flächenanteil der Auen von Zwickauer Mulde und Schwarzwasser beträgt ca. 25 % der Gesamtfläche des Siedlungsgebietes, was deutlich mehr ist als der Anteil in Annaberg. Der größte Teil dieses Auengebietes ist seit langer Zeit von Industrieanlagen besetzt. Zu den bekanntesten Industrieanlagen gehören die Nickelhütte Aue, der Auerhammer, die ehemalige Auer Besteckfabrik und der Bahnhof Aue. Diese Industrieanlagen haben vorrangig die Schadstoffsituation im Siedlungsgebiet geprägt. Für Aue weniger prägend waren die Jahre des Wismut-Bergbaus im benachbarten Schlema-Alberoda. Altlastenbereiche (z. B. Bahnhofsgelände) waren nicht Gegenstand der Untersuchungen. In der heutigen Nickelhütte Aue GmbH wurden in den vergangenen Jahrzehnten hauptsächlich Nickelerze verhüttet, auf dieser Fläche befand sich aber in den vergangenen Jahrhunderten ein Blaufarbenwerk mit dem Schwerpunkt der Verarbeitung von Kobalterzen.

Flächennutzungsdaten Aue

Für das Untersuchungsgebiet Aue liegen die gleichen Flächennutzungsinformationen vor wie für Annaberg (Tabelle 1). Bezüglich der Relevanz dieser Informationen wird für das Gebiet Aue die Lageinformation im Hinblick auf die Flussaue wesentlich höher eingeschätzt, weil diese Nutzung in Aue einen höheren Flächenumfang einnimmt.

Wie für Annaberg-Buchholz erwies sich auch für Aue nach Voruntersuchungen die Flächennutzungsgliederung nach historischen Gesichtspunkten als die geeignetste, weil sie insbesondere die Wohngebiete im Sinne des raumanalytischen Ansatzes (s. Kap. 2.2.1 und 3.1.1) sinnvoll unterteilt (Abbildung 2). Eine Abgrenzung des durch Immissionsvorgänge charakterisierten Hütteneinflussbereiches kann nicht über die Flächennutzungsanalyse, sondern nur über die gemessenen Elementgehalte im Boden vorgenommen werden (s. Kapitel 3.1.2).

Die aus den DOP optisch abgeleitete Flächennutzungsklassifizierung unterteilt das Siedlungsgebiet Aue in folgende historisch gewachsene Flächennutzungen (Abbildung 2), die sich von denen in Annaberg-Buchholz nur durch das Fehlen des Altstadt-kerns unterscheiden:

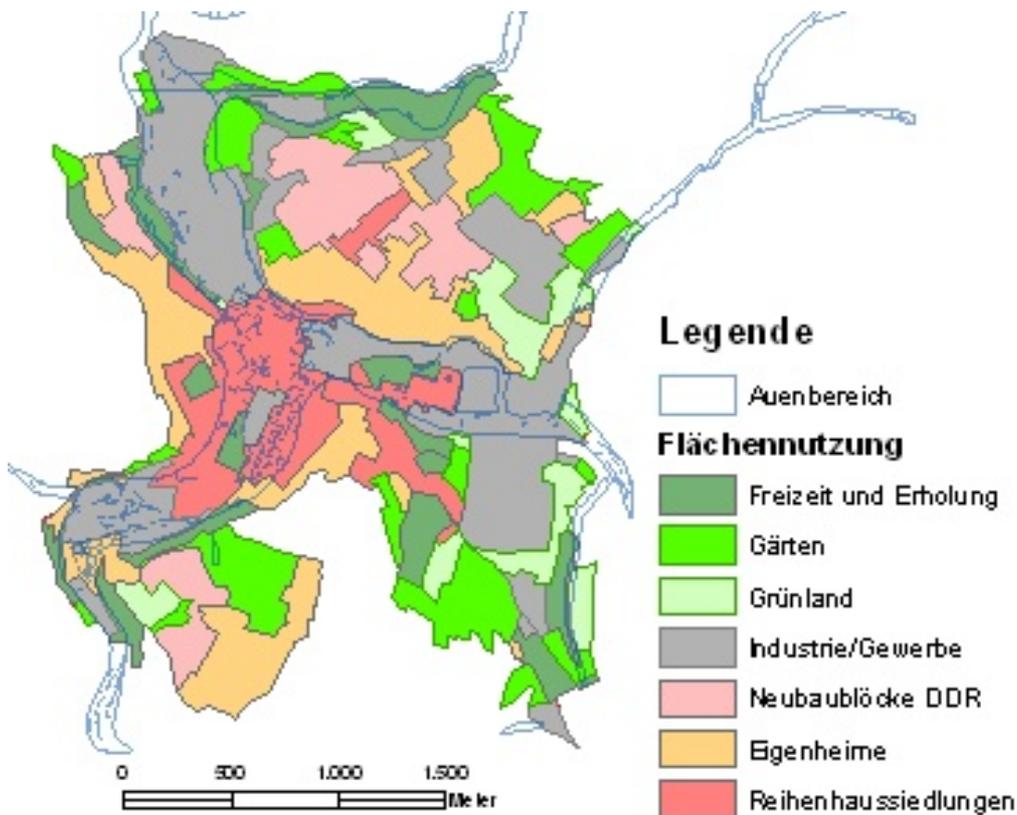


Abbildung 2: Flächennutzung Aue, nach historischen Gesichtspunkten aus dem DOP abgeleitet, mit Auenbereich

2.1.2 Auswahl der Probenahmepunkte

Die Auswahl bzw. Platzierung der Probenahmepunkte beschränkte sich auf die Siedlungsgebiete im engeren Sinn /1/.

Die Punkte wurden manuell so auf der Siedlungsfläche platziert, dass eine möglichst gleichmäßige Punktverteilung der schon vorhandenen und der neu zu nehmenden Proben über das gesamte Siedlungsgebiet entsteht. Für Annaberg wurden 32 neue Probenahmepunkte vorgesehen, für Aue aufgrund der geringeren vorliegenden Datendichte 68 neue Punkte.

Als Grundlage für die Unterteilung der Flächennutzung dienten in der frühen Bearbeitungsphase die ALK-Flächennutzungsinformationen (ALK-Layer 21). Bei der Auswahl der neuen Probenahmepunkte stand das Ziel, dass die Punktlagen der vorhandenen und der gewählten neuen Punkte in ihrer statistischen Gesamtheit gleichzeitig weitgehend den Anteil der

jeweiligen Flächennutzungsklasse widerspiegeln sollten. Alle Altlastenflächen, die im sächsischen Altlastenkataster SALKA figurieren, wurden aus den potenziellen Platzierungsflächen ausgeschlossen.

Tabelle 2 und Tabelle 3 belegen, dass die Punktlage in Aue sehr gut die Flächennutzungsstatistik repräsentiert (keine größeren Abweichungen von Null in der letzten Spalte für die einzelnen Flächennutzungsklassen). In Annaberg ist dagegen eine Überbelegung der Nutzungsart Garten zuungunsten der anderen Klassen zu beobachten. Diese Abweichung wurde jedoch in Kauf genommen, weil sie überwiegend von den schon vorhandenen Proben bestimmt wurde und andere Flächen entweder überwiegend nicht zugänglich waren bzw. dort keine Erlaubnis zur Probenahme vorlag (s. Kap. 2.1.3).

Tabelle 2: Flächennutzungsstatistik und Ableitung erforderlicher Probenahmepunkte für Annaberg

Flächennutzungsklassen	Anzahl Teilflächen	Summe Flächeninhalt	Anteil an Gesamtfläche [%]	Anzahl vorhandener Proben	Summe Probenanzahl (inkl. neuer Proben) [Proben _{plan}]	Nach Flächennutzung repräsentativ verteilte Probenanzahl [Proben _{Fläche}]	Differenz der Probenanzahl [(Proben _{plan} - Proben _{Fläche})]
Abgrabungen/Aufschüttungen	451	327.769	4,2	1	3 (2)	6	-3
Ackerland	93	197.633	2,5		2 (2)	3	-1
Freizeit und Erholung	80	180.286	2,3	1	3 (2)	3	0
Garten	2.835	1.781.155	22,8	38	44 (6)	30	14
Grünanlage	118	249.849	3,2	4	4 (0)	4	0
Grünland	314	501.689	6,4	8	9 (1)	9	0
Industriegebiet	381	870.872	11,2	2	14 (12)	15	-1
Verkehr	1.242	1.203.617	15,4	17	19 (2)	21	-2
Wald	102	256.657	3,3	1	1 (0)	4	-3
Wasser	72	42.144	0,5		0 (0)	1	-1
Wohngebiet	3.910	2.193.596	28,1	29	34 (5)	37	-3
unbestimmt	9	406	0,0		0 (0)	0	0
Summe	9.607	7.805.673	100	101	133 (32)	133	0

Tabelle 3: Flächennutzungsstatistik und Ableitung erforderlicher Probenahmepunkte für Aue

Flächennutzungsklassen	Anzahl Teilflächen	Summe Flächeninhalt	Anteil an Gesamtfläche [%]	Anzahl vorhandener Proben	Summe Probenanzahl (inkl. neuer Proben) [Proben _{plan}]	Nach Flächennutzung repräsentativ verteilte Probenanzahl [Proben _{Fläche}]	Differenz der Probenanzahl [(Proben _{plan} - Proben _{Fläche})]
Abgrabungen/Aufschüttungen	224	136.474	2,7		1 (1)	2	-1
Ackerland	2	8.373	0,2		1 (1)	0	1
Freizeit und Erholung	53	180.176	3,6		2 (2)	3	-1
Garten	1.588	1.105.124	22,0	1	16 (15)	16	0
Grünanlage	82	131.492	2,6		3 (3)	2	1
Grünland	109	291.320	5,8	1	5 (4)	4	1
Industriegebiet	269	657.076	13,1		10 (10)	10	0
Verkehr	1.095	887.731	17,7		11 (11)	13	-2
Wald	146	208.770	4,2	2	5 (3)	3	2
Wasser	69	104.664	2,1		0 (0)	2	-2
Wohngebiet	1.882	1.309.162	26,1	1	19 (18)	19	0
unbestimmt	5	164	0,0		0 (0)	0	0
Summe	5.524	5.020.526	100	5	73 (68)	73	0

2.1.3 Tatsächliche Probenahmepunkte

Im Zuge der unmittelbaren Vorbereitung der Probenahmekampagnen sowie der eigentlichen Probenahme war eine geringfügige Verschiebung von ursprünglich geplanten Punkten notwendig. Ursachen dafür waren:

- aktueller Eigentümer mit Wohnsitz nicht ermittelbar
- keine Erlaubnis durch den Eigentümer
- Verschiebung innerhalb des Flurstücks nach Abstimmung mit Eigentümer
- keine geeignete Probenahmemöglichkeit vor Ort

Der neue Beprobungspunkt wurde möglichst nahe an die ursprüngliche Probenahmestelle gelegt, um von der geplanten räumlichen und Flächennutzungsverteilung im Stadtgebiet nur im geringen Maße abzuweichen.

Die tatsächlichen Entnahmestellen der Bodenproben in den Stadtgebieten Annaberg-Buchholz und Aue zeigen die folgenden Abbildungen 3 und 4 im Überblick sowie der Anhang 3 im Detail.

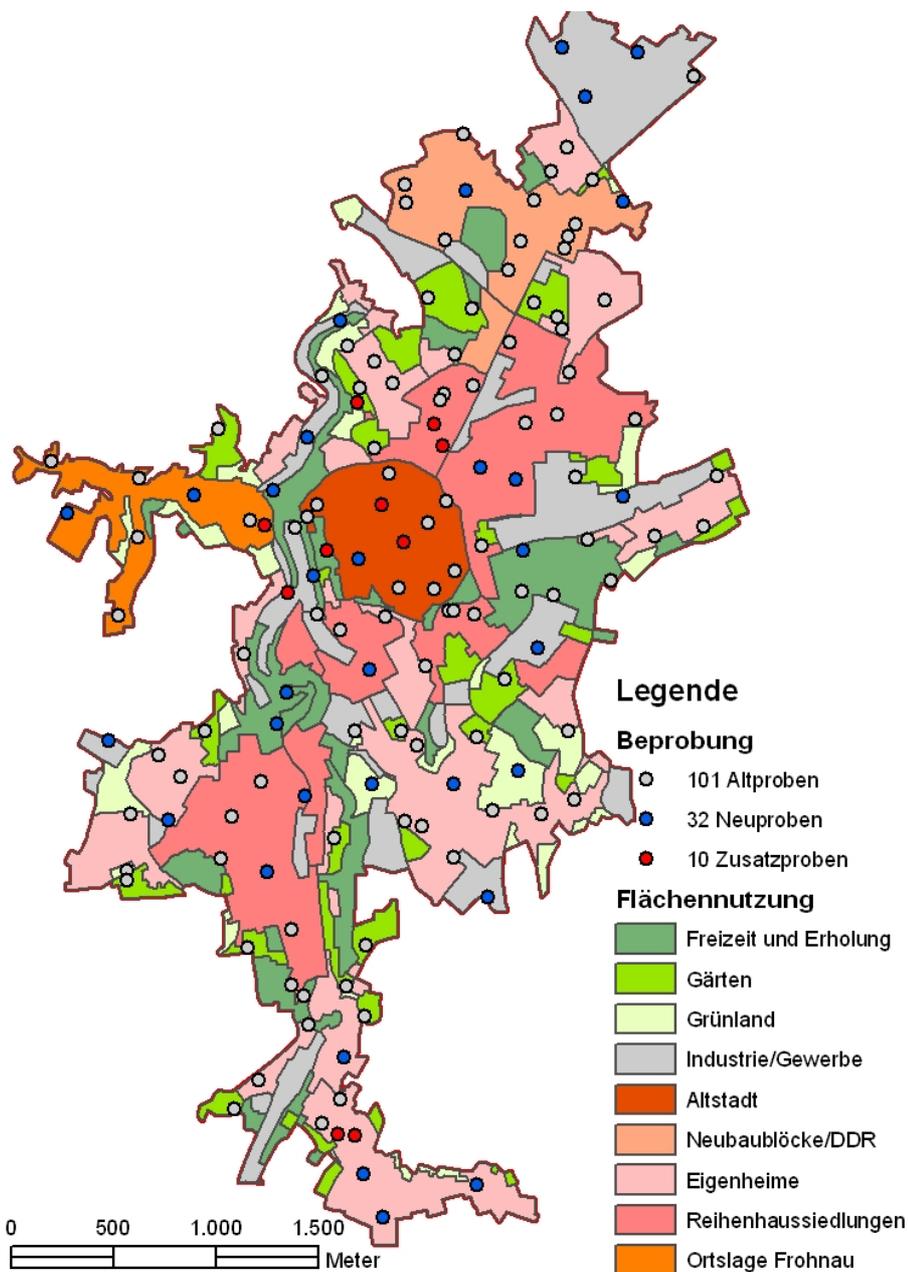


Abbildung 3: Verteilung der Probenahmepunkte im Siedlungsgebiet Annaberg-Buchholz

Wie in Kapitel 2.1.6 und Tabelle 2 aufgezeigt, sind die Probenpunkte für Annaberg-Buchholz in „Altprobenpunkte“ (101 Stück), für das Vorhaben festgelegte neue Probenpunkte (32 Stück) sowie die im Vorhaben vorgesehenen Validierungsproben (10 Probenpunkte einer nachfolgenden, überprüfenden Probennahmekampagne) unterteilt. Die Erhöhung der Altprobenzahl um eine Probe resultierte aus einer nachträglich erforderlichen geringen Anpassung der Siedlungsgebietsgrenze an die tatsächlich vorliegenden Nutzungen.

Unter Kenntnis der Auswertungsergebnisse der insgesamt zur Verfügung stehenden 133 Probenpunkte wurden im Nachhinein zielgerichtet 10 Zusatzprobenpunkte zur Verifizierung der verwandten Modelle festgelegt, beprobt, analysiert und ausgewertet (siehe dazu Kap. 3.3).

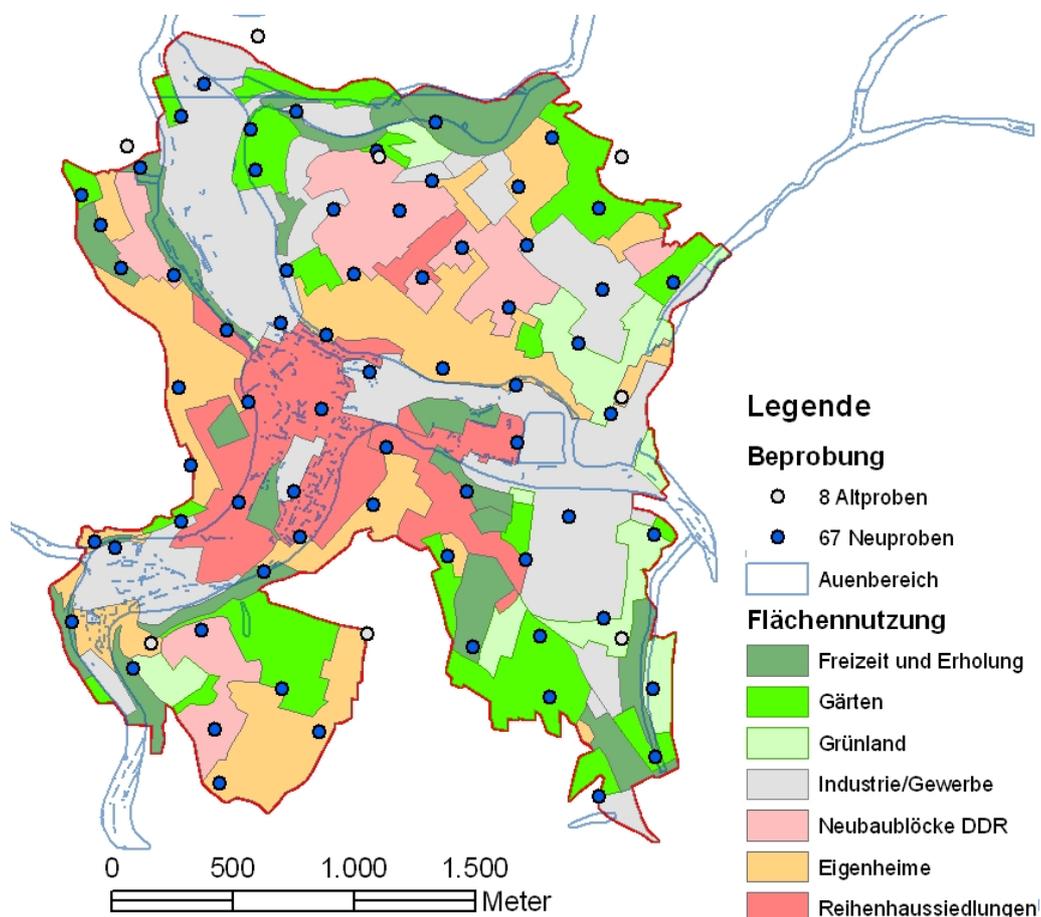


Abbildung 4: Verteilung der Probenahmepunkte im Siedlungsgebiet Aue

Die endgültig für die Auswertung zur Verfügung stehenden Probenpunkte für Aue unterteilen sich in fünf vorliegende „Altpunkte“, weitere drei knapp außerhalb liegende Punkte dicht an der Siedlungsgebietsgrenze, deren vorliegende Informationen mit einbezogen wurden und 68 Probenpunkte, die im Verlaufe des Vorhabens festgelegt und beprobt wurden. Im Zuge der Auswertungen musste ein Probenahmepunkt ausgeschlossen werden, weil dieser offensichtlich nicht die Flächennutzung repräsentiert, für die er entnommen wurde (s. Kap. 2.1.6).

2.1.4 Probenahme

Die Entnahme der Bodenproben erfolgte aus kleinen Gruben bis max. 60 cm Tiefe, die mit einem Spaten ausgehoben wurden; die Grube diente zugleich der bodenkundlichen Profilaufnahme. Die Probenmenge betrug ca. 500 bis 1.000 g pro Probe.

Die Probenahmetiefe richtete sich nach den Vorgaben der Bundes-Bodenschutz- und Altlastenverordnung, 1999, Anhang 1, Tab. 1 und ist somit abhängig von der am jeweiligen Punkt angetroffenen Flächennutzung (Tabelle 4):

Tabelle 4: Probenahmetiefe Bodenproben

Flächennutzung	obere Probe (A-Probe) (Oberboden)	untere Probe (B-Probe) (Unterboden)
Grünland, Park- und Freizeitanlagen, Industrie- und Gewerbegrundstücke	0-10 cm	10-30 cm
Kinderspielflächen, Wohngebiete	0-10 cm	10-35 cm
Acker und Nutzgarten	0-30 cm	30-60 cm

Im weiteren Text werden die Begriffe „obere Probe“, „A-Probe“ und "Oberboden" als Synonym verwendet, ebenso wie „untere Probe“, „B-Probe“ und „Unterboden“. Die Begriffe „Ober- und Unterboden“ werden der besseren Lesbarkeit halber benutzt, wohl wissend, dass in den „Unterbodenproben" nicht selten Bereiche des Oberbodens enthalten sein werden. Die Proben wurden in Kunststoffbeutel verpackt, eindeutig beschriftet und mit Plastikmarken versehen.

Profilaufnahme

In der Grube erfolgte eine Profilaufnahme entsprechend der aktuellen Kartier- und Erfassungsvorschrift für bodenkundliche Profilaufnahmen (KA 5) auf den Datenblättern des LfULG (Formblätter für bodenkundliche Profilaufnahmen nach KA 5).

Erfassung der bodenkundlichen Beschreibungen

Die aufgenommenen Profilbeschreibungen sowie die entnommenen Bodenproben werden digital mit dem Programm UBODEN.net für das FIS Boden des LfULG erfasst.

2.1.5 Analytik

Die Bodenproben wurden wie folgt untersucht:

- Probenvorbereitung
 - Rohproben trocknen bei max. 40 °C
 - Proben sieben, Siebschnitt 2 mm, Trennung in Feinboden (< 2 mm) und Grobboden (> 2 mm), Grobboden dokumentieren und zurückstellen
 - 100 ml Restmaterial des Feinbodens in Plastikflaschen für Bodenprobenbank LfULG
 - Zerkleinerung Feinboden für Untersuchung KW-Extraktion nach DIN ISO 11466 (< 150 µm)
- Bestimmung des pH-Wertes (CaCl₂) nach DIN ISO 10390 am Feinboden (< 2 mm)
- Bestimmung von Spurenelementgehalten nach DIN ISO 11466
 - aufgemahlener Feinboden < 150 µm, Aufschluss mit Königswasser (KW) und Bestimmung der Spurenelementgesamtgehalte As, Cd, Co, Cr, Cu, Hg, Ni, Pb, Sb, Ti, U und Zn
- Bestimmung der Resorptionsverfügbarkeit (RV) nach DIN 19738 am Feinboden an 100 Oberbodenproben
 - Bestimmung von As, Cd und Pb im Speichel-Magen-Darm-Modell, unter Zusatz von Vollmilchpulver; Angabe resorptionsverfügbaren Gehalt in mg/kg sowie RV in % vom KW-Gehalt

Die chemischen Analysen wurden am Probenmaterial < 2 mm im Labor AI Dr. Rietzler & Kunze in Freiberg durchgeführt.

2.1.6 Datenauswahl und Datenvorbehandlung

Annaberg-Buchholz

Das Datenkollektiv für die Auswertungsarbeiten setzt sich für Annaberg-Buchholz aus vier unterschiedlichen Probenahmekampagnen zusammen:

- EHF Ehrenfriedersdorf
- SM Schwermetalluntersuchungen
- ME Probendaten Mittleres Erzgebirge
- BBS neu entnommene Proben dieses Vorhabens

Insgesamt standen aus den vier Kampagnen für 133 Proben die Gehalte an As, Cd und Pb für Auswertungen zur Verfügung.

Zusätzlich wurden Uran und Chrom in die Auswertung einbezogen. Für die Auswahl des Urans sprach dessen Vorkommen in den Mineralisationen der bekannten Mineralgänge. Seine Verwendung könnte weitere Hinweise auf eine mögliche mineralisationsbedingte Elementverteilung geben. Das Element Chrom hingegen lässt grundsätzlich keine besonderen geogen oder anthropogen bedingten Belastungen erwarten.

In Annaberg-Buchholz sind im Bereich des Oberbodens 32 Analysen für Uran und 126 Analysen für Chrom vorhanden, für den Bereich des Unterbodens liegen 32 Analysen für Uran und 41 Analysen für Chrom vor.

Weitere wichtige Informationsebenen für die Auswertung waren

- Flächennutzung,
- Geologie,
- Erzgänge,
- Lagerstättenkontur,

die genauso wie die nachstehenden Hintergrundinformationen zum Datenkollektiv hinzugefügt wurden.

Als Hintergrundinformationen dienen:

- DOP Digitale Orthophotos
- TK10 TK10-Ebenen Bebauung, Gewässer, Relief und Wald

Aue

Im Unterschied zu Annaberg wurde der Probenbestand in Aue zum überwiegenden Teil in diesem Vorhaben genommen. Im eigentlichen Siedlungsgebiet befinden sich insgesamt 70 Proben. Davon wurden 65 im Rahmen des Projektes gewonnen, fünf Proben gehören zu einer älteren Probenahme. Aus dem unmittelbaren Umfeld des Siedlungsgebietes wurden weitere drei Altproben zur Auswertung hinzugezogen (Abstand zum Siedlungsgebiet < 100 m) und zudem lagen zwei Neuprobepunkte in einem Abstand zur Siedlungsgebietsgrenze von 5 bzw. 20 m; auch diese Proben wurden dem Siedlungsbereich zugeordnet. Somit sind insgesamt 75 Probenpunkte in die Auswertung einbezogen worden.

Näher betrachtet wurden die Elemente As, Pb, Cd, Ni und Co. Während die aktuelle Probenahme Analysendaten zu allen fünf Parametern lieferte, fehlt der Parameter Co durchgängig in den Analysendaten der älteren Probenahme.

In der statistischen Erstausswertung /2/ wurde der Probenpunkt mit AKBEZ=29 als singuläre Probe für Pb qualifiziert (29.000 mg/kg in der oberen Probe und 4.100 mg/kg in der unteren Probe). Hohe Pb-Gehalte sind zwar regelmäßig zu erwarten, aber diese extremen Konzentrationen spiegeln nicht das Gehaltsniveau der Region wider. Ein Ausschluss der Proben erschien nicht geboten, weil die Grundinformation „hohe Pb-Gehalte vorhanden“ nicht verloren gehen sollte. Um die Proben für die Berechnungen zu verwenden, wurde der Wert der oberen Probe formal auf 2.900 mg/kg und der Wert der unteren Probe formal auf 2.050 mg/kg gekappt. Die Höhe der gekappten Werte richtete sich nach den höchsten Pb-Gehalten des übrigen Kollektivs. Damit sind die Probenahmepunkte für die Flächenberechnung erhalten geblieben, wirken als Einzelwerte aber nicht mehr flächenhaft dominierend auf das Gesamtergebnis der Interpolation.

Bei der Erstbewertung der räumlichen Verteilung der Analysenwerte fiel weiterhin der Probenpunkt 19 dadurch auf, dass er für alle Analysen grundsätzlich Werte aus der niedrigsten Werteklasse enthielt. Die Nachbarproben wiesen häufig wesentlich höhere Gehalte auf. Der Probenahmepunkt liegt in einem neu geschaffenen Grünstreifen vor einer neuen Sporthalle. Diese Probe charakterisiert zwar den Probenahmepunkt selbst, ist aber für eine Erweiterung in die Fläche wegen der deutlichen Unterschiede zu den Nachbarproben nicht geeignet. Nach den Erkenntnissen der Autoren stammt das hier aufgetragene Bodenmaterial nicht aus der Region und wurde möglicherweise bewusst mit Blick auf die geringen Konzentrationen dort verwendet. Deshalb wurde dieser Punkt aus den nachfolgend beschriebenen Berechnungen ausgeschlossen. Alle anderen Analysendaten gingen ohne Einschränkungen in die weiteren Berechnungen ein.

Auswahl der Elemente für die flächenhafte Darstellung

Für die nähere Auswertung waren die drei Elemente As, Pb und Cd als erzgebirgstypisch vorbestimmt. Ursprünglich sollten noch je zwei Elemente ausgewertet werden, die von der Belastung vor Ort unabhängig sein sollten. Diese Bedingung erfüllt jedoch nur Cr für Annaberg-Buchholz. Das Interpolationsergebnis für Cr ist repräsentativ für mögliche weitere Elemente unter dem genannten Auswahlgesichtspunkt. Daher wurde für Annaberg-Buchholz zusätzlich U sowie für Aue Ni und Co ausgewählt. Die Auswahl von U erfolgte mit Blick auf die Wismut-Vergangenheit des Annaberger Bergbaus und die wesentlich geringere Anzahl an Messpunkten für U im Vergleich zu den anderen Messdaten. Ni und Co wurden für Aue unter dem Gesichtspunkt der Hüttenvergangenheit des jahrhundertealten Standorts Nickelhütte im Schwarzwassertal gewählt. Neben Nickel wurde hier vor 300 Jahren Kobalterz zu Blaufarben verarbeitet. Diese Produktion war mit großen Emissionen verbunden, die sich heute noch im Schwarzwassertal und an seinen Hängen nachweisen lassen.

2.2 Methodische Grundlagen

2.2.1 Methodische Ansätze

Die in /8/ vorgestellten Ansätze beruhen auf der Annahme, dass auch in Siedlungsgebieten

- die Einflussgrößen der Bodenbelastung bestimmten Gesetzmäßigkeiten unterliegen,
- diese beschreibbar sind und
- sie damit zur flächenhaften Darstellung der Bodenbelastung genutzt werden können.

Mit Zielsetzung Flächeninterpolation zeichnen sich die drei Ansätze wie folgt aus:

Substratansatz

„Die Erfassung der substratbedingten Bodenbelastung hat zum Ziel, im Siedlungsbereich Flächen mit vergleichbarer Bodenbelastung, die durch das Auftreten natürlicher und technogener Substrate bedingt sind, abzugrenzen. Im Unterschied zur immissionsbezogenen Bodenbelastung (s. u.) können sich die Aussagen auch auf tiefere Bodenhorizonte beziehen. Als Grundlage zur Abgrenzung der Flächen dient die aktuelle Flächennutzung. Ziel ist es, jeweils Regelmäßigkeiten und Gesetzmäßigkeiten herauszuarbeiten, die eine Übertragung von stichprobenhaft ermittelten Aussagen zur Bodenbelastung auf nicht untersuchte Flächen vergleichbarer Nutzung bzw. Nutzungsabfolge zulassen. Ohne den Beleg solcher Gesetzmäßigkeiten im Einzelfall ist die Übertragbarkeit nicht gegeben“ /8/.

Der Substratansatz ist in seiner in /8/ dokumentierten Originalform derjenige aus den drei Ansätzen, der sich am schwierigsten unter dem Gesichtspunkt einer flächendeckenden Aussage für einen bestimmten Schadstoff fassen lässt. Kernpunkt ist das Vorhandensein und die räumliche Verteilung technogener oder natürlicher Substrate, die als solche durch ihre Entstehung vor der Ablagerung Träger von Schadstoffen geworden sind (z. B. Bauschutt).

Wurde nun eine Teilfläche mit diesen Substraten auf Schadstoffe beprobt und eine weitere nicht beprobte Teilfläche weist dieselben Substrate auf, dann steht das Ziel, auf Grund der herausgearbeiteten Beziehungen statistische Kennwerte von bekannten auf nicht untersuchte Flächen zu übertragen. Eine Übertragung der räumlichen Veränderlichkeit des Parameters ist dagegen nicht möglich und auch nicht vorgesehen. Die statistischen Kennwerte (z. B. Mittelwert und Standardabweichung) gelten für jeden Punkt des nicht beprobten Teilbereichs als Vorhersagewerte.

Aus praktischen Erwägungen im Zusammenhang mit den Daten aus den Testgebieten Annaberg und Aue erschien eine Erweiterung des Ansatzes erforderlich, dessen Kern wie folgt beschrieben werden kann: Neben den anthropogenen Substraten wie Bauschutt spielen in den kleinen und mittleren Städten des Erzgebirges geogen beeinflusste Substrate eine wichtige Rolle als Träger von Schadstoffen in Siedlungsgebieten. Dazu zählen Substrate, die von verschiedenen Vererzungen beeinflusst wurden („Lagerstättenbereiche“), so z. B. in Annaberg spezielle, gangmaterialbeeinflusste Substrate. Unter diesen Prämissen eröffnet sich eine wesentliche Erweiterung des Spektrums an Verfahren zur Verbreitung von Punktdaten in die Fläche über die klassische Häufigkeitsanalyse hinaus. Neben den Interpolationsverfahren seien als markantestes Verfahren an dieser Stelle die künstlichen neuronalen Netze aufgeführt (siehe Kap. 2.2.3). Unter diesem erweiterten Verständnis ist der Substratansatz

verwandt mit dem weiter unten vorgestellten raumanalytischen Ansatz, kann er doch zur Untergliederung des Siedlungsgebietes in HRE dienen.

Immissionsansatz

„Die Erfassung der auf Immissionen zurückzuführenden Bodenbelastung erfolgt unabhängig vom Substrateinfluss. Der Ansatz geht von der Annahme aus, dass die depositionsbedingte Bodenbelastung wie die Deposition selbst interpolierbar sein sollten. Der Immissionsansatz bezieht sich naturgemäß auf die oberen Dezimeter des Bodens, da insbesondere dort der Einfluss der Deposition wirksam werden konnte. Voraussetzung für die Erfassung einer derartigen Bodenbelastung ist allerdings, dass dabei der Einfluss anderer Belastungsfaktoren minimiert wird (z. B. durch gezielte Auswahl von Probenahmeflächen). Die depositionsbedingte Bodenbelastung kann außerdem quantitativ nur auf diejenigen Flächen erfasst werden, die für lange Zeit ungestört der Immission ausgesetzt waren. Im Umkehrschluss lassen sich die so gewonnenen Aussagen deshalb uneingeschränkt nur auf diejenigen Flächen beziehen, die den erwähnten Voraussetzungen genügen.“ /8/

Der Immissionsansatz gilt nach /8/ für lange Zeit unbenutzte bzw. unveränderte Böden, in denen sich Stoffe lokaler Emittenten anreichern können. Die Deposition der Emittenten wird lediglich in den obersten Zentimetern (bei Bodenbearbeitung wie in Gärten durch die Durchmischung in den obersten Dezimetern wirksam. Die in diesen Bereichen aufgefundenen Gesetzmäßigkeiten der Schadstoffverbreitung sind dann auf ähnlich beeinflusste und ungestörte Flächen übertragbar. In den meisten Fällen nicht anwendbar ist dieser Ansatz für solche Flächen, in denen die Elementgehalte in den von der Erdoberfläche beginnenden Tiefenintervallen der Probenahme geringer sind als in den jeweils darunter liegenden. Durch die Verteilung der Emissionen durch das Windfeld ist zu erwarten, dass ihre Verteilung einer stetigen Oberfläche entspricht, wobei mit einer stetigen Abnahme der Gehalte bei wachsender Entfernung von der Immissionsquelle zu rechnen ist.

Raumanalytischer Ansatz

„Der raumanalytische Ansatz geht davon aus, dass das Zusammenwirken von Belastungsursachen und typischen Schadstoffverteilungsmustern in den Böden dem steuernden Einfluss von Nutzungsarten, teilweise in Kombination mit der Nutzungsdauer, unterliegt. Die Nutzungsdauer beschreibt dabei, wie lange der anstehende Oberboden Immissionseinflüssen und zugleich nutzungstypischen Einträgen und Durchmischungen ausgesetzt war. Ferner werden die natürlichen oder technogenen Substrate der Bodenbildung und mögliche Überschwemmungseinflüsse berücksichtigt. Starke Streuungen der Bodenbelastung innerhalb der zunächst als homogen angenommenen Raumeinheiten deuten auf nicht erkannte Einflussfaktoren und erschweren die Anwendbarkeit des Ansatzes.“ /8/

Der raumanalytische Ansatz unterteilt das Siedlungsgebiet in HRE. Nach den methodischen Richtlinien der vorgenannten Leitfäden sollen die Messwerte der unterschiedlichen HRE zunächst durch Datentransformation zu einer einheitlichen statistischen Verteilung gebracht werden, wobei jede HRE ihre spezifische Transformation aufweist. Danach erfolgt eine gemeinsame Interpolation über alle transformierten Werte. Abschließend werden die Interpolationsergebnisse HRE-spezifisch wieder rücktransformiert, um das Endergebnis zu erhalten. Der wesentliche Vorteil gegenüber einer separaten Interpolation in den HRE wird dabei im möglichen Einbezug außerhalb liegender Punkte gesehen, die einen Erklärungsbeitrag auch für die eigentlich betrachtete HRW liefern sollen. Durch die höhere Anzahl an einbezogenen Datenpunkten wäre dann insgesamt eine geringere Probenanzahl erforderlich. In diesem Vorhaben weichen die Autoren von dieser Vorgehensweise ab, d.h. es wird eine getrennte Berechnung für jede HRE durchgeführt. Am Ende werden die Teilergebnisse zu einem gemeinsamen Abschlussergebnis montiert. Der Grund für diese Abweichung ist in Kap. 4.3 zu finden.

Homogenansatz – Vorschlag für einen neuen Ansatz

Es kann durchaus vorkommen, dass in einem Untersuchungsgebiet bezüglich eines bestimmten Merkmals (Schadstoffs) sich keiner der bisher aufgeführten drei Ansätze als geeignet erweist. Das ist insbesondere dann der Fall, wenn z. B.

- in einem frühen Untersuchungsstadium sich noch keine Abhängigkeiten der Messwerte von den räumlichen Gegebenheiten abzeichnen,
- das Untersuchungsgebiet zu klein ist, um räumliche Differenzierungen bezüglich eines speziellen Schadstoffgehaltes aufzuweisen,
- die Verbreitung des untersuchten Schadstoffs von einem ganz anderen Ereignis als den bisher aufgeführten abhängt.

In diesem Fall schlagen die Autoren einen neuen Ansatz (Homogenansatz) vor. Dieser Ansatz lässt sich als ein Sonderfall des raumanalytischen Ansatzes mit nur einer homogenen Raumeinheit (HRE) beschreiben, für die weder der Immissionsansatz, noch der Substratansatz in seiner erweiterten Form gilt. Er kann gerade zu Beginn der Arbeiten zur flächenhaften Darstellung von Elementgehalten erste pragmatische Informationen liefern, die, sollten die anderen Ansätze keine Anwendung finden können, beibehalten bzw. verfeinert werden können.

2.2.2 Deterministische und geostatistische Interpolationsverfahren

2.2.2.1 Allgemeine Einführung

Flächenhafte Aussagen aus Punktinformationen werden entweder durch flächenbezogene Werteübertragung oder mittels Interpolationsverfahren erzielt. Bei den Interpolationsverfahren ist das Ergebnis eine Vorhersage auf der Basis der vorhandenen Messwerte, welcher Messwert an einer beliebigen Stelle des Untersuchungsgebietes aus einer hypothetischen neuen Probe vergleichbarer Geometrie, wie die Ausgangsproben zu erwarten wäre. Auf die Rolle der Geometrie der Probe soll an dieser Stelle nur hingewiesen werden, ohne das Problem weiter zu vertiefen. Betrachtet man beispielsweise nur die empirische Verteilung der Messwerte, so führt eine Vergrößerung des Probenkörpers an jedem Probenahmepunkt in der Tendenz zu einer Vereinheitlichung des Probenmaterials und damit zu einer Verringerung der Variabilität der Messwerte, was u. a. in einer Verringerung der Standardabweichung zum Ausdruck kommt.

Die Qualität der Vorhersage kann auf unterschiedliche Weise gemessen werden. Ideal wäre eine Überprüfung durch Vergleich der vorhergesagten Werte mit den tatsächlich vorhandenen. Ein vollständiger Vergleich ist nicht möglich, aber man kann einen stichpunktartigen Vergleich anstellen, z. B. mittels

- Vergleich Schätzwert – Messwert,
- Cross Validation,
- Nachbeprobung.

Beim Vergleich Schätzwert – Messwert erfolgt die Überprüfung der Qualität mit allen zur Verfügung stehenden Messwerten. Ist der Schätzwert in allen Punkten identisch mit dem Messwert, hat man es mit einem messpunkttreuen Verfahren zu tun. Beim Verfahren der Cross Validation erfolgt die Überprüfung, indem man einen Messwert nicht mit zur Vorhersage hinzuzieht, um im Anschluss den so ermittelten Schätzwert mit dem tatsächlich im Messpunkt angetroffenen zu vergleichen. Die Differenz zwischen Messwert und Vorhersagewert wird zum einen zum Messwert selbst in Beziehung gesetzt. Zum anderen kann man sie auch mit dem Abstand zwischen ausgelassenem Messpunkt und seinem nächsten Messpunktnachbarn in Beziehung setzen. Das Verfahren kann man nacheinander für alle Messwerte anwenden und die Differenzen danach statistisch auswerten. Das Verfahren hat den Vorteil, dass es grundsätzlich für alle Interpolationsverfahren angewendet werden kann. Andererseits hat es insbesondere für regelmäßige Messnetze den Nachteil, dass es eine Genauigkeitsaussage für einen Abstand zu den Messpunkten bringt, der uninteressant ist, weil sich in diesem Abstand bereits der nächste Messpunkt befindet.

Beim Verfahren der Nachbeprobung werden tatsächlich neue Proben genommen und deren Messwerte dann mit den vorhergesagten in den neuen Messpunkten verglichen. Dieses Verfahren hat den Vorteil, dass zusätzlich im Nachgang weitere reale Messwerte zur Verfügung stehen, die iterativ in die Interpolation und flächenhafte Darstellung einbezogen werden können.

In einer speziellen Gruppe von Interpolationsverfahren, den geostatistischen Verfahren, besteht die Vorhersage aus zwei Teilen, dem Schätzwert und dem Schätzfehler. Aus der Kombination beider Werte kann man in jedem Punkt des Untersuchungsgebietes ein Konfidenzintervall erzeugen, innerhalb dessen sich der unbekannte Messwert mit einer vorgegebenen Wahrscheinlichkeit befindet. Dieses Konfidenzintervall dient dann als Grundlage für die Beurteilung der Qualität der Interpolation. Es geschieht nicht selten, dass in Publikationen der Schätzwert als das alleinige Ergebnis der geostatistischen Verfahren angesehen wird. Das ist aber genau so, als würde man eine gewöhnliche statistische Stichprobe lediglich mit ihrem arithmetischen Mittelwert charakterisieren, ohne Hinzuziehung der Standardabweichung als Maß für die Streuung der Messwerte um diesen Mittelwert.

Folgende Interpolationsverfahren werden in den kommenden Kapiteln anhand von Anwendungsbeispielen in den Untersuchungsgebieten Annaberg und Aue vorgestellt:

- deterministische Verfahren
 - Voronoi-Mosaik
 - Invers-Distance-Weighting (IDW)
- geostatistische Verfahren
 - Ordinary Kriging
 - Universal Kriging
 - Indikatorkriging

Es existiert eine umfangreiche Literatur zu diesen Verfahren, sodass auf eine ausführliche theoretische Darstellung hier verzichtet wird (siehe z. B. /5/). Für die Ausführung der Berechnungen wurde der Geostatistical Analyst von ArcGIS verwendet. Die folgenden Kapitel sollen die Verfahren anhand anschaulicher Darstellungen beispielhafter Ergebnisse aus den beiden Untersuchungsgebieten erläutern. Die Detailergebnisse zu den einzelnen Verfahren und Elementen für die beiden Gebiete finden sich im Anhang 1.

Man kann postulieren, dass die Verdichtung des Probenahmernetzes in der Regel zu einer Verbesserung der Qualität der Vorhersage bei gleichem Interpolationsmodell in dem Sinn führt, dass sich die Standardabweichungen der Vorhersage verringern. Bemerkbar wird diese Verbesserung erst, wenn es zu einer deutlichen Verdichtung des Messnetzes kommt, wobei sich die Messpunktzahl wenigstens verdoppelt. Geringere Verdichtungen können durchaus lokal zu Erhöhungen der Standardabweichung führen, was der statistischen Natur der Methode geschuldet ist. Dieses Phänomen soll ebenfalls untersucht werden.

2.2.2.2 Voronoi-Mosaik

Das Voronoi-Mosaik (auch Thiessen-Polygone genannt) unterteilt die Untersuchungsfläche in Zellen (Polygone). Die Einteilung ist abhängig von der Verteilung der Messpunkte. Jeder Flächenpunkt wird dem nächstgelegenen Messpunkt zugeordnet. Somit ist jeder Messpunkt der Kern einer Zelle des Voronoi-Mosaiks. In jeder Zelle liegt genau ein Messpunkt. Jeder Punkt der Zelle erhält als Interpolationswert den Messwert des Messpunktes der Zelle. Jede Zelle hat mehrere Nachbarzellen, mit denen sie eine gemeinsame Kante hat (Delaunay-Nachbarn). Aus der Zelle und ihren Delaunay-Nachbarzellen lassen sich lokale Messwertstichproben bilden, auf deren Grundlage sich erste statistische Maßzahlen wie Mittelwert, Streuung, Minimum, Maximum berechnen und der Stammzelle zuordnen lassen. Die Urwerte gemeinsam mit den abgeleiteten Werten bilden eine gute Grundlage zur Ersteinschätzung der Messwertverteilung im Raum. Es folgen zur Illustration drei Beispiele aus Annaberg mit den Messwerten für As in den A-Proben, den Mittelwerten und den Standardabweichungen aus den lokalen Stichproben (Abbildung 5 und Abbildung 6).

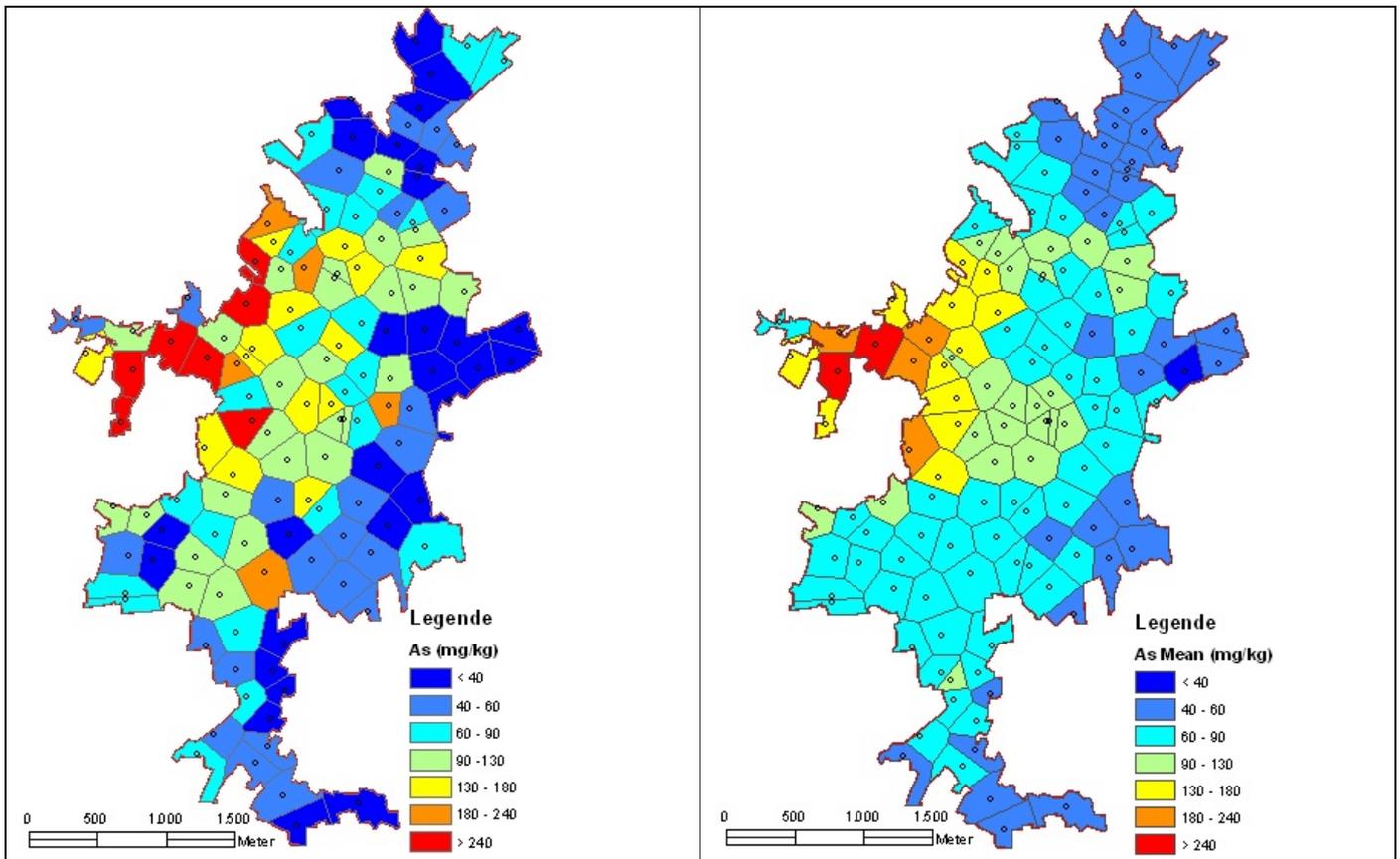


Abbildung 5: Beispiel Voronoi-Mosaik; Annaberg - As-Gehalte im Oberboden - Urwerte (links) und Mittelwerte (rechts) aus den Delaunay-Nachbarn

Man sieht hier im Beispiel wie auch in den nachfolgenden Abbildungen, dass die Mittelwertdarstellung im Verhältnis zu den Originalwerten ein deutlich ruhigeres Bild ergibt. Zufällige Messwertschwankungen treten in den Hintergrund zugunsten des großräumigen Trends, der die höchsten Werte im Bereich der Ortslage Frohnau, der Altstadt und des Gangzugs im Norden, der in E-W-Richtung das gesamte Siedlungsgebiet überstreicht, aufweist. Weiterhin ist eine mehr oder weniger kontinuierliche Werteabnahme in alle anderen gemessenen Richtungen zu erkennen. Die Darstellung der Standardabweichung zeigt an den Stellen die höchsten Werte, wo auch die höchsten Messwerte zu verzeichnen sind. Das ist problemlos nachvollziehbar in Anbetracht der Messwertverteilung der Originaldaten. Dort wo die höchsten Messwertdaten zu verzeichnen sind, gibt es auch die größten absoluten Gehaltsschwankungen zu den Delaunay-Nachbarn.

Bei den weiteren Ergebnissen in Form der Voronoi-Mosaike wird auf die Ausgabe der Standardabweichungen verzichtet. Zum einen handelt es sich hier um ein deterministisches Verfahren, was die Interpretation der Standardabweichungen erschwert. Zum anderen werden in den vorliegenden Auswertungen die geostatistischen Ergebnisse mit Schätzfehlern immer zusammen mit den Voronoi-Mosaiken angegeben. Letztere sind gemeinsam mit den Schätzwerten leichter interpretierbar.

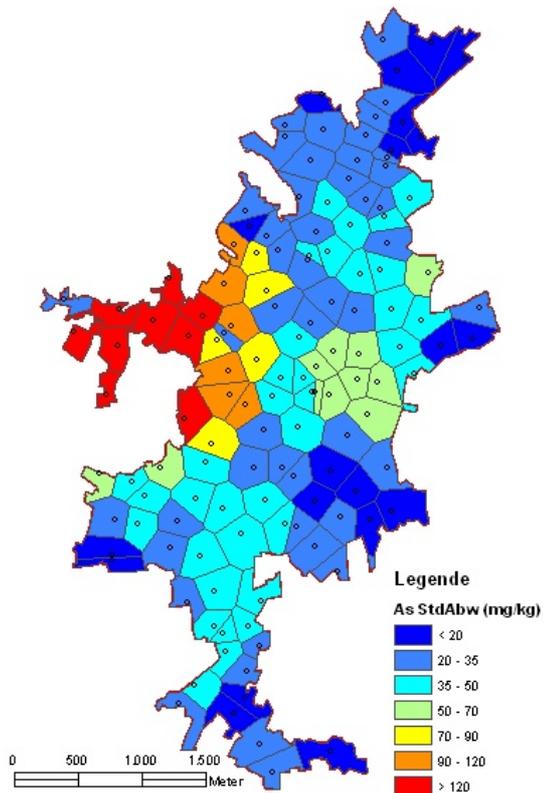


Abbildung 6: Beispiel Voronoi-Mosaik; Annaberg - As-Gehalte im Oberboden - Standardabweichungen

2.2.2.3 Invers Distance Weighting (IDW)

Die Invers-Distanz-Methode ist wie auch das Voronoi-Mosaik der Originalwerte ein sogenanntes messpunkttreues Interpolationsverfahren. Das heißt, dass der Vorhersagewert in jedem Messpunkt genau dem Messwert entspricht. Allerdings sind die Voronoi-Mosaike mit Sprüngen in den Vorhersagewerten an den Zellenrändern behaftet, die es bei IDW so nicht gibt. Man erhält im Gegenteil eine weitgehend glatte Oberfläche der Vorhersagewerte, was dem menschlichen ästhetischen Empfinden näher ist als eine Oberfläche mit Sprüngen, soweit diese nicht durch die Natur der Sache bedingt ist wie z. B. an HRE-Grenzen. Es gibt dafür für IDW keine guten Möglichkeiten, Aussagen über die Genauigkeit der Vorhersage zu treffen. Cross Validation bietet sich hier als geeignetes Verfahren an. Das Beispiel in Abbildung 7 ist typisch für das Verfahren IDW. Es bilden sich u. a. eine Vielzahl lokaler Extremwerte, die nur durch genau einen Messpunkt belegt sind. Diese Erscheinung ist eine Folge der Messpunkttreue in Kombination mit der vom Verfahren postulierten Stetigkeit der Werteoberfläche.

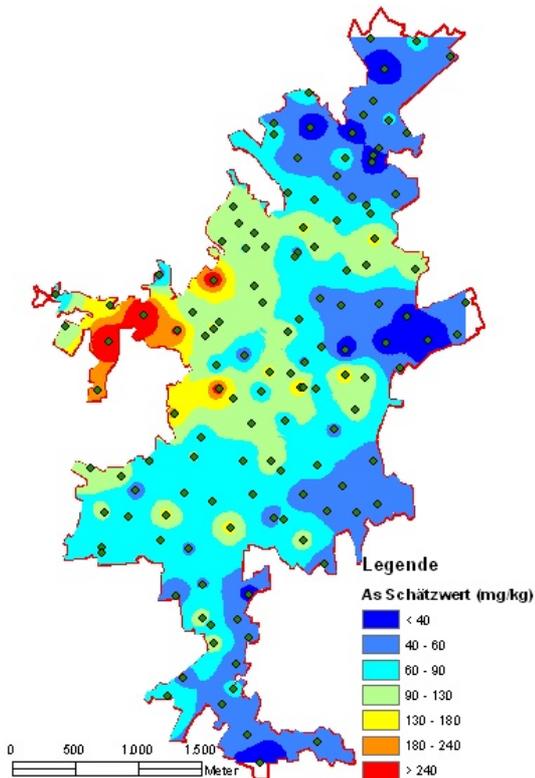


Abbildung 7: Beispiel IDW; Annaberg - As-Gehalte im Oberboden - Interpolationsergebnis

2.2.2.4 Kriging

Kriging ist eine Familie von Verfahren zur Verbreitung von Punktdaten in die Fläche, deren Besonderheit darin besteht, dass das nur in den Messpunkten bekannte Wertefeld als Realisierung einer Zufallsfunktion angesehen wird. Über diese Zufallsfunktion trifft man gewisse Annahmen. Auf Basis dieser Annahmen und der gewonnenen Messwerte werden die Kenngrößen der Zufallsfunktion geschätzt. Im nächsten Schritt ermittelt man unter Verwendung der Kenngrößen und wiederum der Messwerte eine Schätzung der gesuchten Realisierung der Zufallsgröße. Diese Schätzung besteht aus dem Schätzwert und dem Schätzfehler. Die wichtigste Annahme über das Zufallsfeld ist die Art der raumabhängigen Mittelwertfunktion, um die die hypothetischen Realisierungen der Zufallsfunktion schwanken. Die wichtigste Kenngröße des Zufallsfeldes ist das Variogramm. Es beschreibt die Merkmalerhaltenseigenschaft in Form autokorrelativer Parameter des Zufallsfeldes.

Die Theorie ist anschaulich in /5/ dargestellt. Man kann sich beispielhaft ein Zufallsfeld als eine Meeresoberfläche in Bewegung vorstellen. Die Realisierung des Zufallsfeldes ist eine Momentaufnahme der Oberfläche. Die Höhe der Oberfläche ist an einigen Messpunkten bekannt. Die Mittelwertfunktion ist ein konstanter Wert, nämlich die Meeresoberfläche, wenn kein Wellengang ist. Die Höhenlage jedes Punktes der Momentaufnahme ist die gesuchte Größe. Das Variogramm beschreibt die Wellenhöhe (Sill) und die Wellenlänge (Range). Wild durcheinander wirbelnde Wellen bilden sich im Variogramm im sogenannten Nugget-Effekt ab. In diesem Begriff spiegelt sich, dass das Kriging seinen Ursprung in der Modellierung geologischer (Gold-) Erkundungsergebnisse hat. Die Wasserhöhen zweier Punkte, die weiter als der Range voneinander entfernt sind, haben keinen Einfluss mehr aufeinander. Je geringer dieser Abstand wird, umso ähnlicher werden sich die beobachteten Wasserhöhen. Die gesuchten Zielwerte (Schätzwert und Schätzfehler der Wasserhöhe) in jedem Punkt werden als Linearkombination der bekannten Wasserhöhen ermittelt. Liegt ein Vorhersagepunkt dicht an einem Messpunkt (im Vergleich zum Range), erhält dieser Messpunkt ein höheres Gewicht als die anderen Messpunkte bei der Ermittlung des Schätzwertes. Liegt der Vorhersagepunkt weit weg von allen Messpunkten, erhalten alle Messwerte das gleiche Gewicht bei der Ermittlung des Schätzwertes. Die Ermittlung der Schätzfehler folgt etwas komplizierteren Gesetzmäßigkeiten. Im Endergebnis kann man in jedem Vorhersagepunkt aus Schätzwert und Schätzfehler ein Konfidenzintervall konstruieren, innerhalb dessen sich der gesuchte unbekannte Messwert mit vorgegebener Wahrscheinlichkeit befindet. In den nachfolgenden Kapiteln wird folgendes 90 %-Intervall verwendet:

$$(\text{Schätzwert} - 2 * \text{Schätzfehler} ; \text{Schätzwert} + 2 * \text{Schätzfehler})$$

(2.1)

Die Kriging-Verfahren stellen heutzutage den Kern der Geostatistik dar. Die sensibelste Stelle des Kriging ist unabhängig vom gewählten Modell die Ermittlung eines plausiblen Variogramms. Eine Reihe von Vorverarbeitungsschritten ist zur Ermittlung eines geeigneten Variogramms unbedingt zu beachten. Im Folgenden sollen drei Aspekte näher beleuchtet werden.

Normalverteilung: Es ist eine Normalverteilung der Messwerte anzustreben. Das kann z. B. durch Transformation der Ausgangswerte geschehen. Zumindest sollte man auf annähernde Symmetrie der Verteilungsdichte achten. Ein häufig angewandtes Verfahren ist z. B. die Logarithmierung der Ausgangsdaten, wenn es sich um Spurenelementgehalte handelt.

Trend: Langwellige Veränderlichkeiten mit einer Wellenlänge vergleichbar dem Durchmesser des Untersuchungsgebietes sind mit Hilfe einer Trendabspaltung zu entfernen. Das verbessert die Variogramm-Modellierung bedeutend.

Anisotropie: In nicht wenigen Merkmalsfeldern sind bevorzugte Richtungen der Merkmalsänderung zu erkennen. Der Berücksichtigung der bevorzugten Richtungen ist durch geeignete Verfahren Rechnung zu tragen, die man im Allgemeinen mit „Anisotropie“ in Verbindung bringt.

Abschließend sei noch auf ein Phänomen hingewiesen, das weniger mit dem Variogramm, dafür aber mit der übermäßigen **Beschränkung der Messstellenanzahl** zu tun hat, die man in die Ermittlung von Schätzwert und Schätzfehler einbezieht. Diese Beschränkung führt nämlich dazu, dass die vom Schätzwert beschriebene Oberfläche eine Vielzahl von fachlich nicht begründbaren Sprüngen aufweist, wie im folgenden Kapitel zu sehen sein wird.

2.2.2.5 Ordinary Kriging (OK)

Die Spezifik des OK besteht darin, dass die Mittelwertfunktion als unbekannte Konstante angenommen wird. Festzuhalten ist, dass man die Richtigkeit dieser Annahme weder beweisen noch widerlegen kann. In diesem einen Merkmal unterscheidet sich OK vom später noch zu betrachtenden Universal Kriging. Alle anderen variablen Modellgrößen sind in der Verantwortung des Bearbeiters so zu setzen, dass am Ende ein plausibles Ergebnis steht. Man kann nur beschränkt allgemeingültige Workflows empfehlen (siehe Kap. 4). Für OK wird nach Einschätzung der Autoren eine Mindestzahl an Messpunkten von ca. 30 empfohlen, für einige Teilberechnungen wird diese Anzahl in den folgenden Modellberechnungen allerdings auch unterschritten. Ein weiteres wichtiges Kriterium der Anwendbarkeit des OK ist die Messpunktanordnung. Sie sollen das Untersuchungsgebiet möglichst gleichmäßig bedecken. Besonders ungünstig ist eine linienartige Anordnung der Messpunkte.

Ordinary Kriging (OK) für As in den A-Proben von Annaberg soll als Beispiel für folgende der soeben gemachten Ausführungen zu Kriging allgemein dienen:

- Anisotropie
- Beschränkung der Messstellenanzahl
- Trendabspaltung

Bezüglich der Vorverarbeitung wurden die Urdaten grundsätzlich logarithmiert, um die Anpassung an die Normalverteilung zu verbessern. Das betrifft ebenfalls alle Daten, die mit Universal Kriging bearbeitet wurden.

Es erfolgt zuerst eine Modellierung mit den Standardwerten des OK. Das schließt ebenfalls die automatisch ermittelte Anisotropie ein. Das zugrunde liegende Variogramm für die ersten beiden Modelle OK1 (8 einbezogene Messwerte) und OK2 (100 einbezogene Messwerte) ist in Abbildung 8 dargestellt.

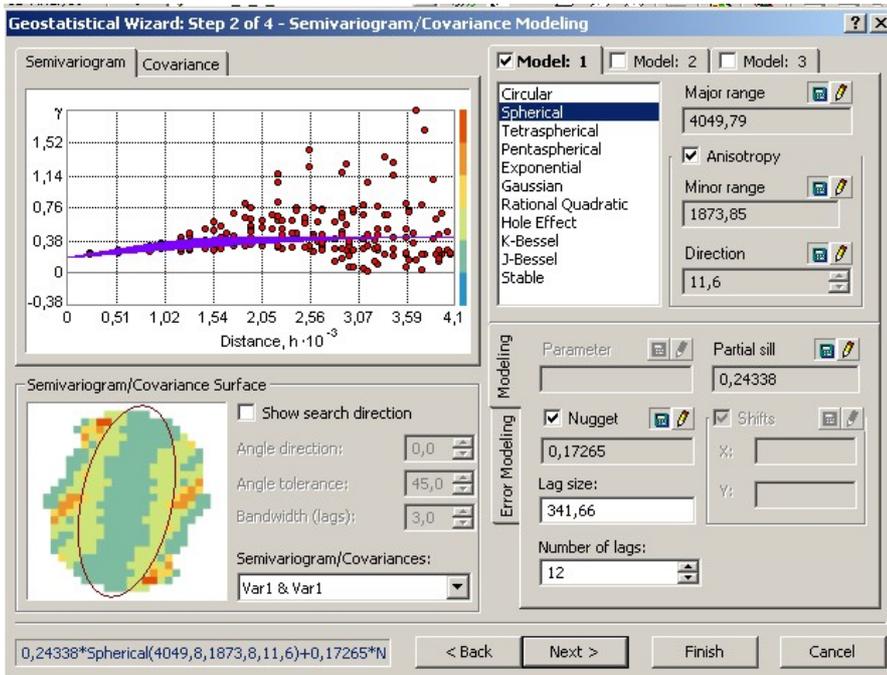


Abbildung 8: Beispiel OK1 und OK2; Annaberg - As-Gehalte im Oberboden - Variogramm

Das Variogramm weist eine ausgeprägte Anisotropie in NNE-Richtung auf. Anisotropie ist immer dann zu berücksichtigen, wenn man auf die Abspaltung des Trends verzichtet. Der hohe Nuggeteffekt im Variogramm hat einen verhältnismäßig starken Filtereffekt zur Folge, der sich in größeren Abweichungen der Schätzwerte von den Messwerten in den Messpunkten dokumentiert.

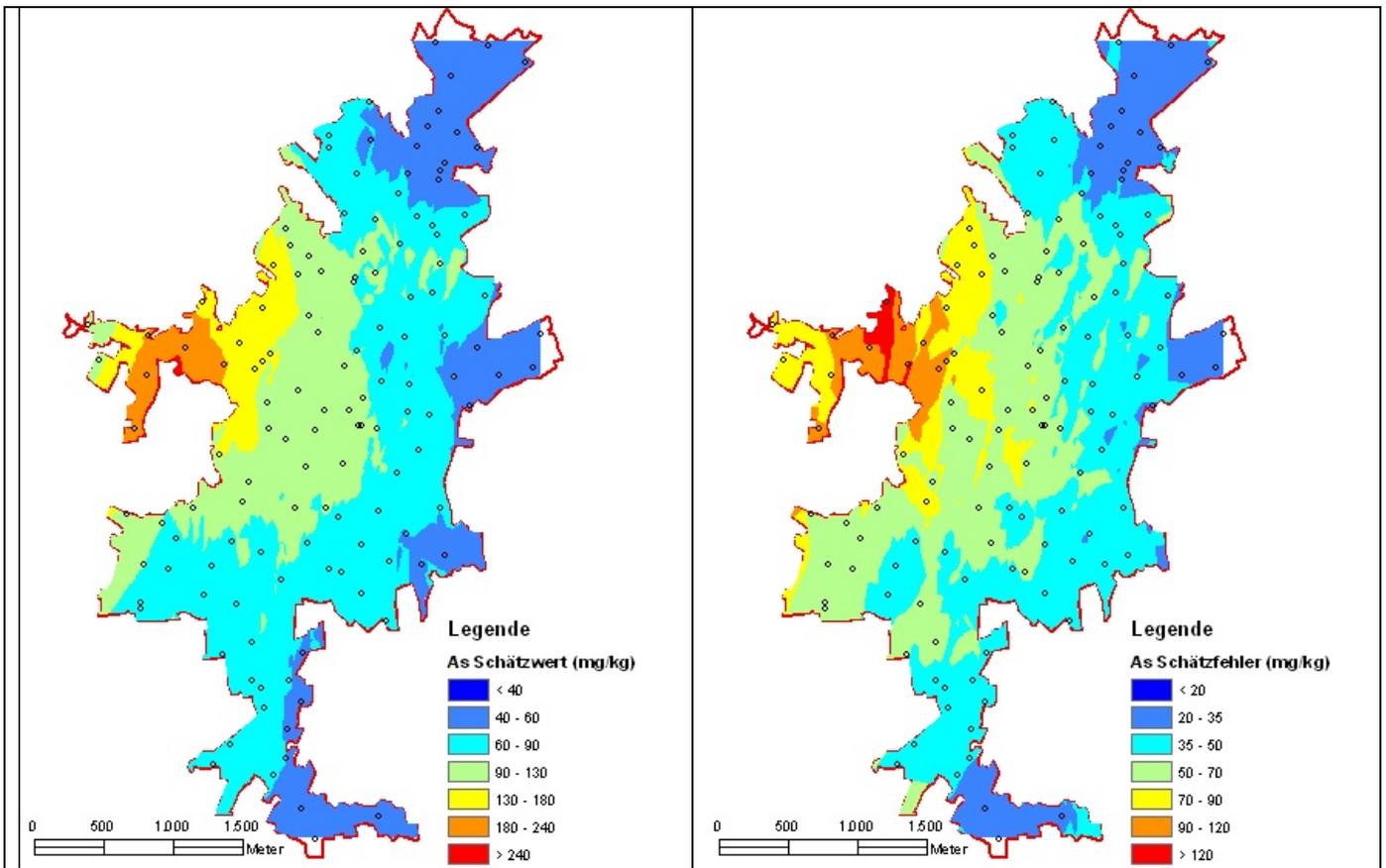


Abbildung 9: Beispiel OK1; Annaberg - As-Gehalte im Oberboden - acht einbezogene Messwerte

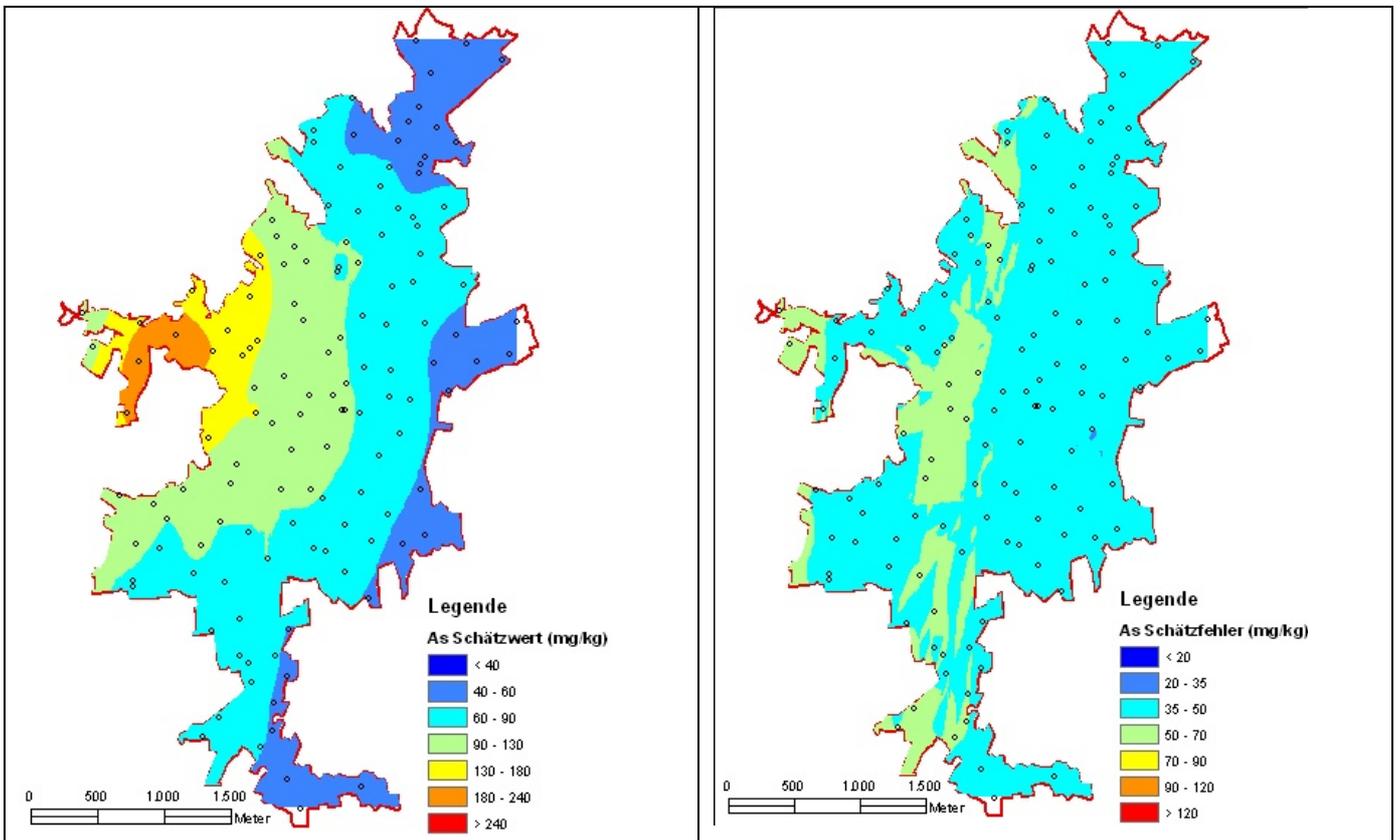


Abbildung 10: Beispiel OK2; Annaberg - As-Gehalte im Oberboden - 100 einbezogene Messwerte

In OK1 und OK2 (Abbildung 9 und Abbildung 10) wurde lediglich die Anzahl in die Interpolation einbezogener umliegender Messwerte variiert (acht vs. 100 Messwerte). Die Schätzwerte weisen dabei scheinbar nur unbedeutende Unterschiede auf. Diese werden erst deutlich, wenn man sich die schattierten Darstellungen in Abbildung 11 betrachtet. Intuitiv würde man die Darstellung mit den 100 einbezogenen Messwerten wegen der stetigen Oberfläche bevorzugen. Ein Vergleich der Schätzfehlerbilder lässt jedoch die Variante mit den acht einbezogenen Messwerten als die Plausiblere erscheinen. Die Schätzfehler sind dort am größten, wo auch die größten As-Messwerte sind. Somit haben beide Modelle ihre Berechtigung, wenn man sich auf diese beiden beschränken würde.

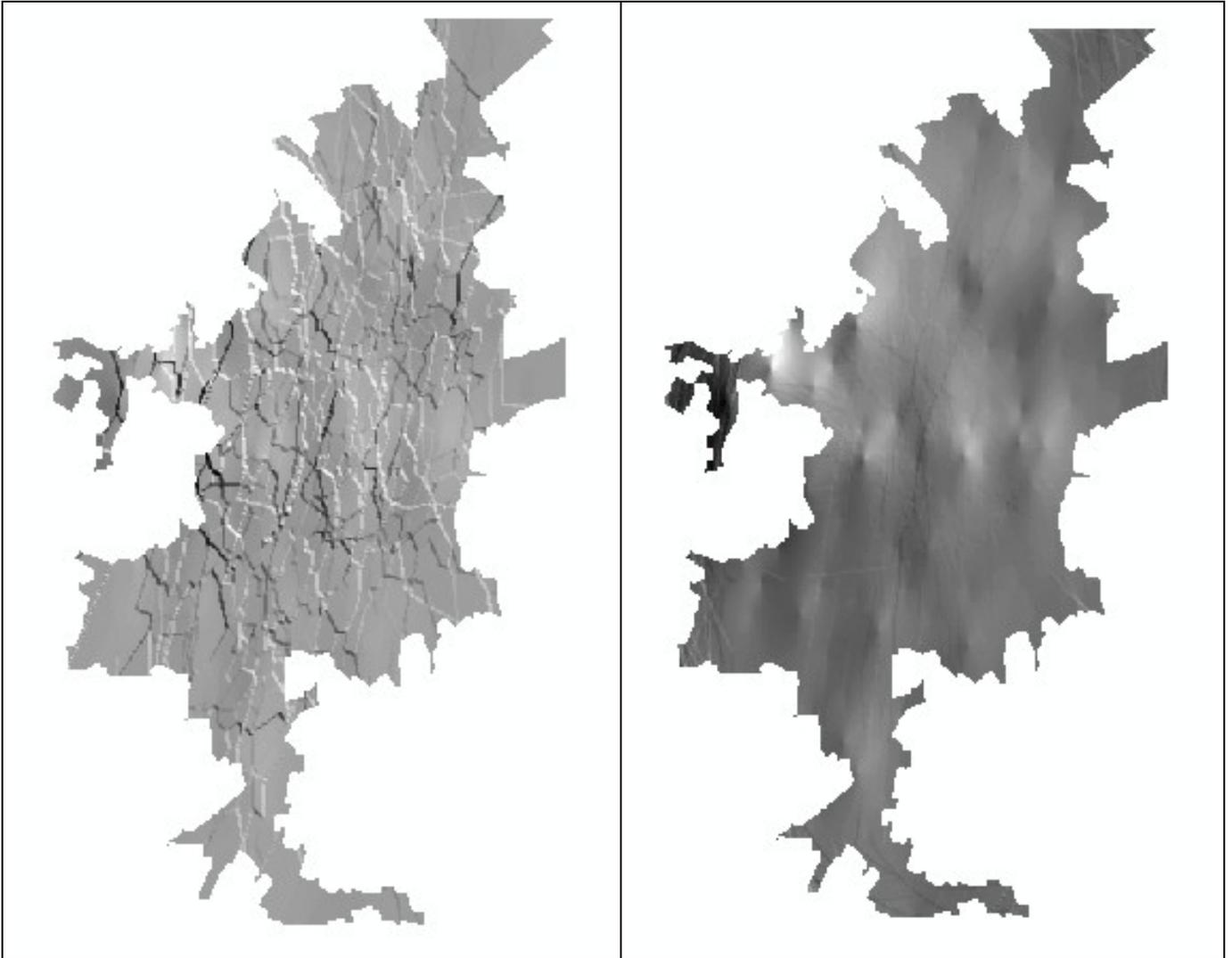


Abbildung 11: Beispiel OK; Annaberg - As-Gehalte im Oberboden - Vergleich der Schätzwerte; acht (links) und 100 (rechts) einbezogene Messwerte; schattierte Darstellungen

Das dritte Modell OK3 für OK berücksichtigt die Trendabspaltung vor dem eigentlichen Kriging. Es wird anhand der Ergebnisse für OK1 und OK2 das Vorhandensein eines Trend 2. Grades angenommen. Das Variogramm ist in Abbildung 12 dargestellt. Eine Anisotropie ist bei abgespaltetem Trend nicht mehr zu erkennen. Der Nuggeteffekt ist gleich Null. Das führt zu einer Verringerung des oben beschriebenen Filtereffektes in den Messpunkten. Daher wirkt das Ergebnisbild unruhiger, weil jeder Messpunkt ein ausgeprägtes lokales Minimum im Schätzfehlerbild darstellt (Abbildung 13).

Fazit: Eine Trendabspaltung ist auf jeden Fall zu empfehlen, allerdings ist ein nuggeteffektfreies Variogramm auf der Basis der vorhandenen Daten in Frage zu stellen. Auf eine expertenbasierte Verbesserung der Variogrammanpassung wird an dieser Stelle zugunsten der Betrachtung des komplexeren Modells des Universal Kriging (UK) im folgenden Kapitel verzichtet.

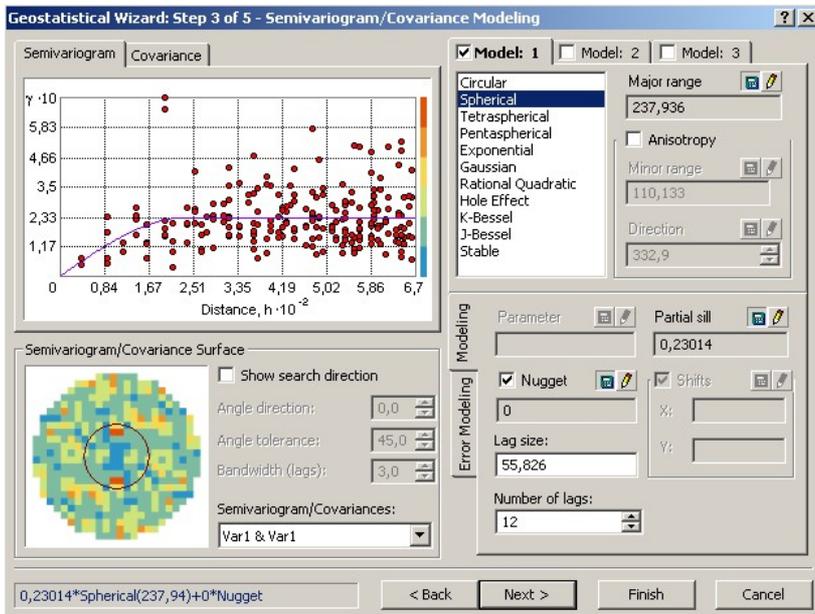


Abbildung 12: Beispiel OK3; Annaberg - As-Gehalte im Oberboden - Variogramm

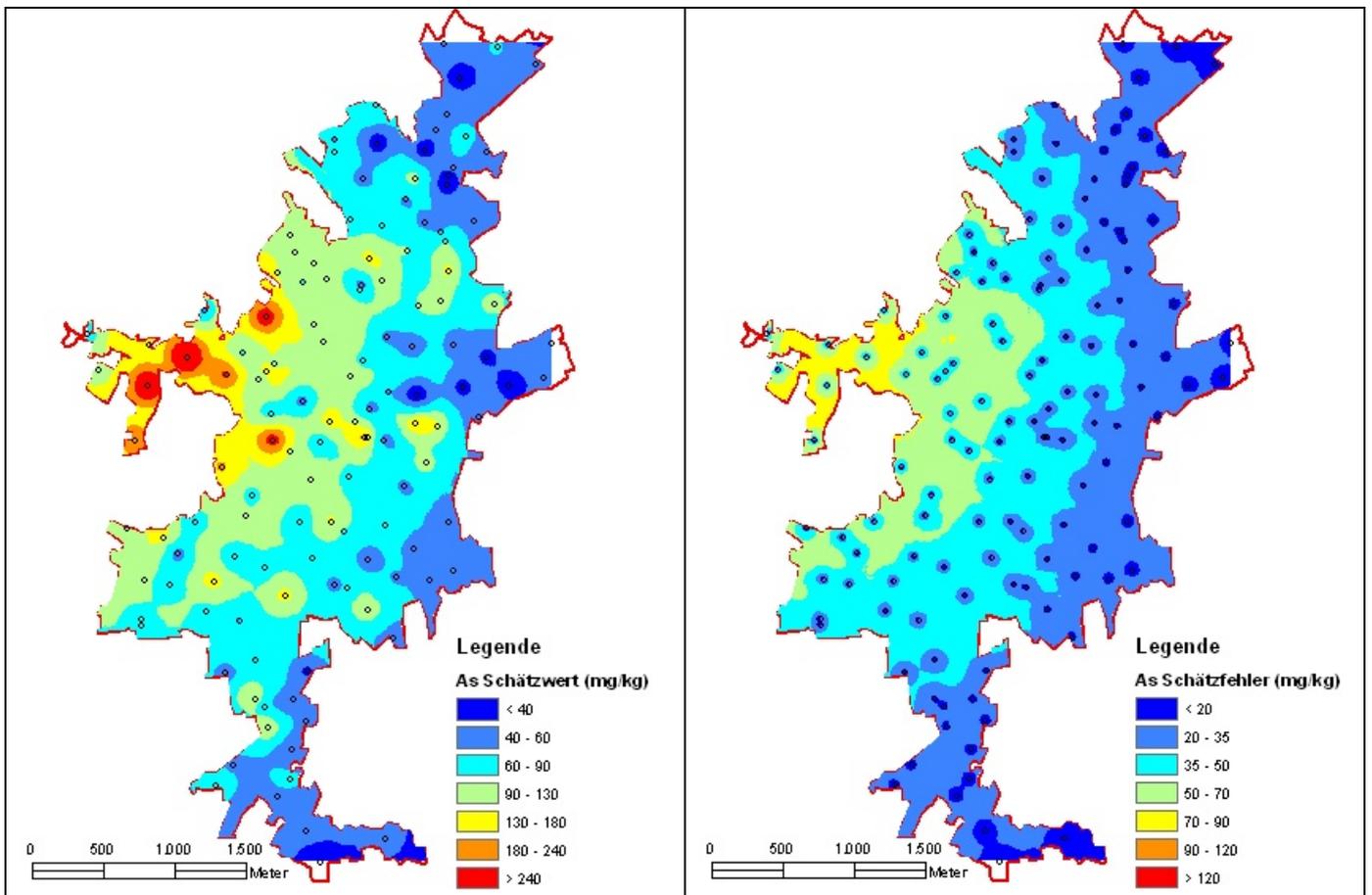


Abbildung 13: Beispiel OK3; Annaberg - As-Gehalte im Oberboden - Inselbildungen durch fehlenden Nuggeteffekt

Es folgt der Vergleich der Cross Validation-Ergebnisse für die drei Varianten (Abbildung 14, Abbildung 15 und Abbildung 16).

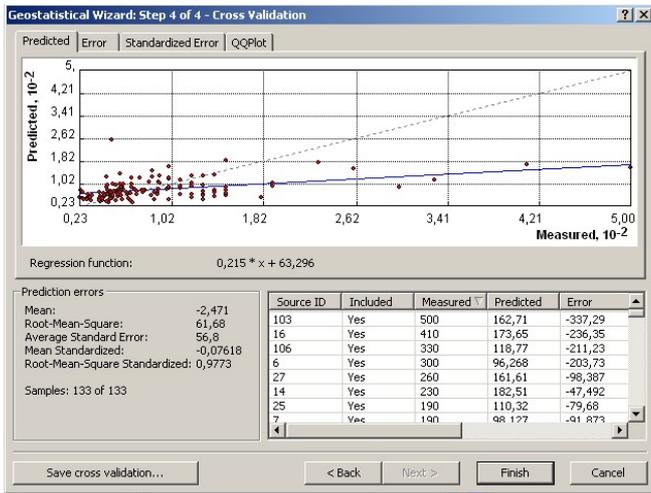


Abbildung 14: Cross Validation-Ergebnis für Variante OK1

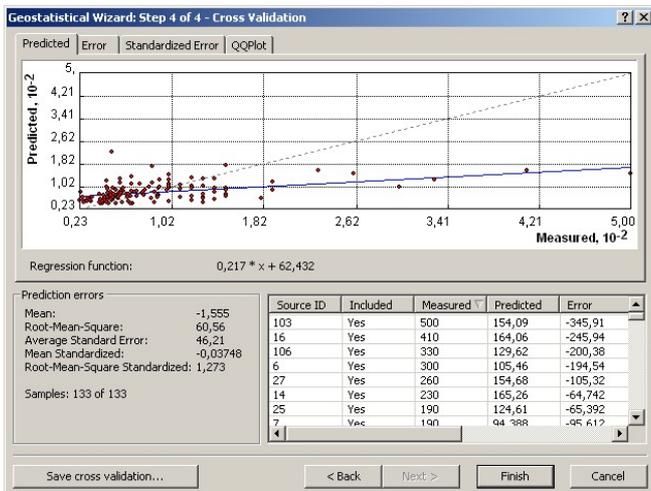


Abbildung 15: Cross Validation-Ergebnis für Variante OK2

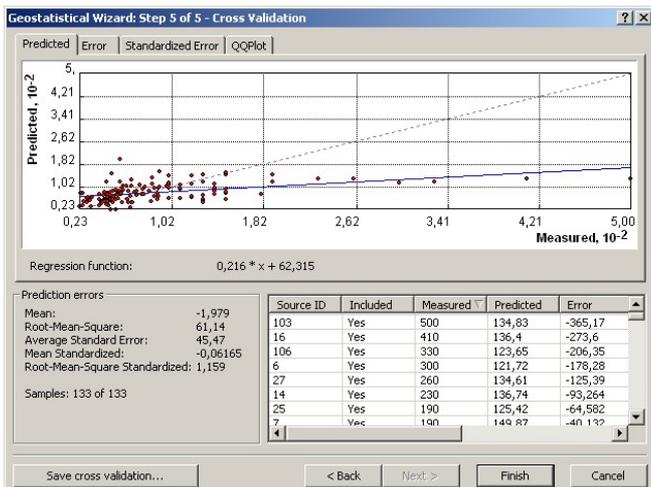


Abbildung 16: Cross Validation-Ergebnis für Variante OK3

Trotz der deutlichen Unterschiede in Schätzwert und Schätzfehler lassen die Cross Validation-Diagramme keinen deutlichen Unterschied erkennen. Bemerkenswert ist bei allen drei Abbildungen die flache Trendlinie. Sie bedeutet, dass speziell auf keinen der großen Messwerte verzichtet werden kann, um ein brauchbares Interpolationsergebnis in den Messpunkten mit hohen Messwerten zu erzielen. Keiner dieser Werte ist ausschließlich durch die umliegenden anderen Messwerte auch nur

annähernd im Schätzwert rekonstruierbar. Diese Feststellung ist mit einer Ausnahme (Cd in Aue, Kap. 3.1.2) für alle anderen Modellierungsergebnisse mehr oder weniger gültig. Sie festigt gleichzeitig den Zweifel an einem Variogramm durch den Koordinatenursprung wie es für OK3 voreingestellt verwendet wurde.

Einschränkend muss an dieser Stelle festgehalten werden, dass in dieses Cross Validation-Diagramm nur die Schätzwerte in den Messpunkten, nicht aber die Schätzfehler eingegangen sind. Wie diese Berücksichtigung finden können, wird in Kap. 3.3 behandelt.

Abschließend sei zu OK noch auf den Fakt verwiesen, dass ein Variogramm mit reinem Nuggeteffekt zu einem konstanten Schätzwert führt, der mit dem arithmetischen Mittel der statistischen Stichprobe übereinstimmt. Der Schätzfehler ist dann ebenfalls konstant und stimmt mit der Standardabweichung der Stichprobe überein.

2.2.2.6 Universal Kriging (UK)

Im Unterschied zu OK besteht die Spezifik des UK darin, dass als Mittelwertfunktion eine Funktion angenommen wird, die durch eine endliche Anzahl von Parametern vollständig beschrieben werden kann. Am häufigsten wird ein Polynom 2. Grades verwendet. Wie schon bei OK gilt es auch hier festzustellen, dass man die Richtigkeit dieser Annahme weder beweisen noch widerlegen kann. Es kommen ansonsten dieselben Modellgrößen vor und diese sind auch vom Bearbeiter zu setzen, wie bei OK. Zu den generellen Empfehlungen wird auf Kap. 4.5 verwiesen. Für UK wird nach Einschätzung der Autoren eine Mindestzahl an Messpunkten von ca. 70 empfohlen. Bezüglich der empfohlenen Messpunktanordnung gilt das im voran gegangenen Kapitel Gesagte.

Um Vergleiche mit OK zu ermöglichen, werden im Folgenden drei Modellvarianten mittels Universal Kriging (UK) für As in den A-Proben von Annaberg berechnet:

- Belassen der Standardeinstellungen (UK1)
- Anpassen des Variogramms (UK2)
- Berücksichtigung der Anisotropie (UK3)

Die Trendabspaltung mit Trend 2. Grades erfolgte in allen drei Modellen. Es wurden im Interesse einer stetigen Oberfläche der Schätzwerte immer 100 Messpunkte in die Berechnungen einbezogen.

Bemerkung zu Trend und Mittelwertfunktion:

Es scheint auf den ersten Blick die Trendabspaltung für UK eigentlich eine Doppelung der Eigenschaft der Mittelwertfunktion und damit überflüssig zu sein. Das ist aber nicht ganz so. Während zur Ermittlung des Trends die Parameter der Trendfunktion immer explizit ermittelt werden müssen, ist das für die Parameter des angenommenen Polynoms der Mittelwertfunktion keineswegs der Fall. Der Lösungsalgorithmus für UK kommt ohne deren Ermittlung aus. Denn es interessiert letztendlich nicht die zugrunde liegende Zufallsfunktion, sondern die Schätzung der einzigen Realisierung dieser Funktion.

Das Modell UK1 verwendet die von der Software angebotenen Standardwerte. Das dazu gehörige Variogramm ist der Abbildung 17 zu entnehmen. Die daraus resultierende Schätzung (Abbildung 18 links) liefert ein plausibles, wenn auch generalisierendes Ergebnis. Nach näherer Betrachtung des Variogramms (Abbildung 17) wurde seine Anpassung in der Nähe von Null kenntnisgestützt modifiziert (UK2). Das Ergebnis ist Abbildung 19 zu entnehmen. Diese Anpassung führt bei der Schätzung zu Schätzwerten, die wesentlich besser als UK1 die Messwerte lokal wiedergeben. Die Änderungen im Schätzfehler sind dagegen marginal (Abbildung 20).

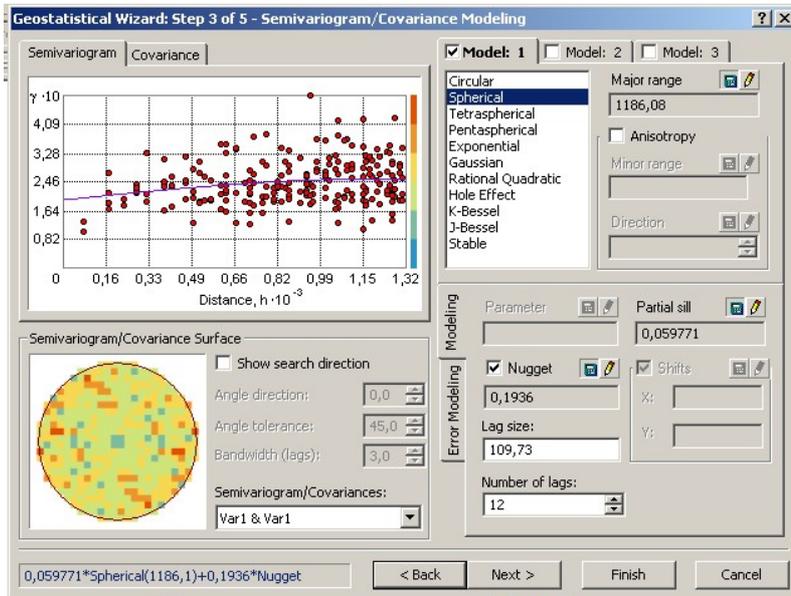


Abbildung 17: Beispiel UK1; Annaberg - As-Gehalte im Oberboden - Variogramm mit Standardparametern

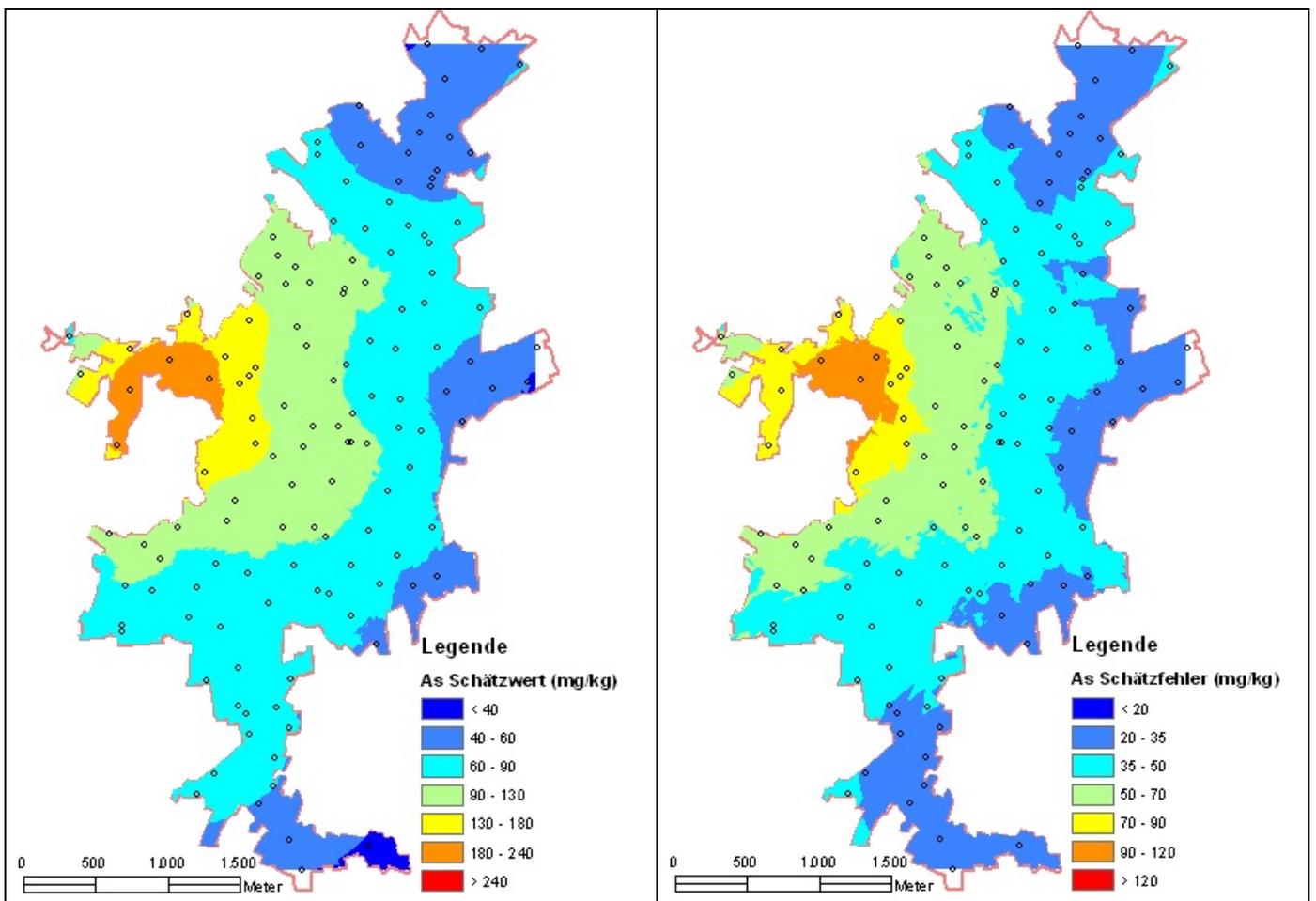


Abbildung 18: Beispiel UK1; Annaberg - As-Gehalte im Oberboden - Schätzung mit den Standardwerten

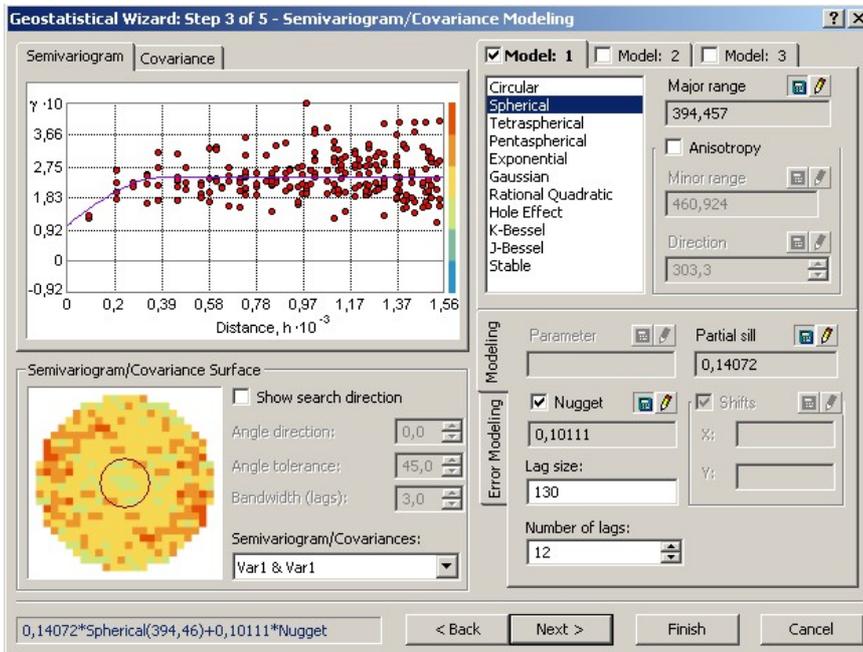


Abbildung 19: Beispiel UK2; Annaberg - As-Gehalte im Oberboden - Variogramm mit angepassten Parametern

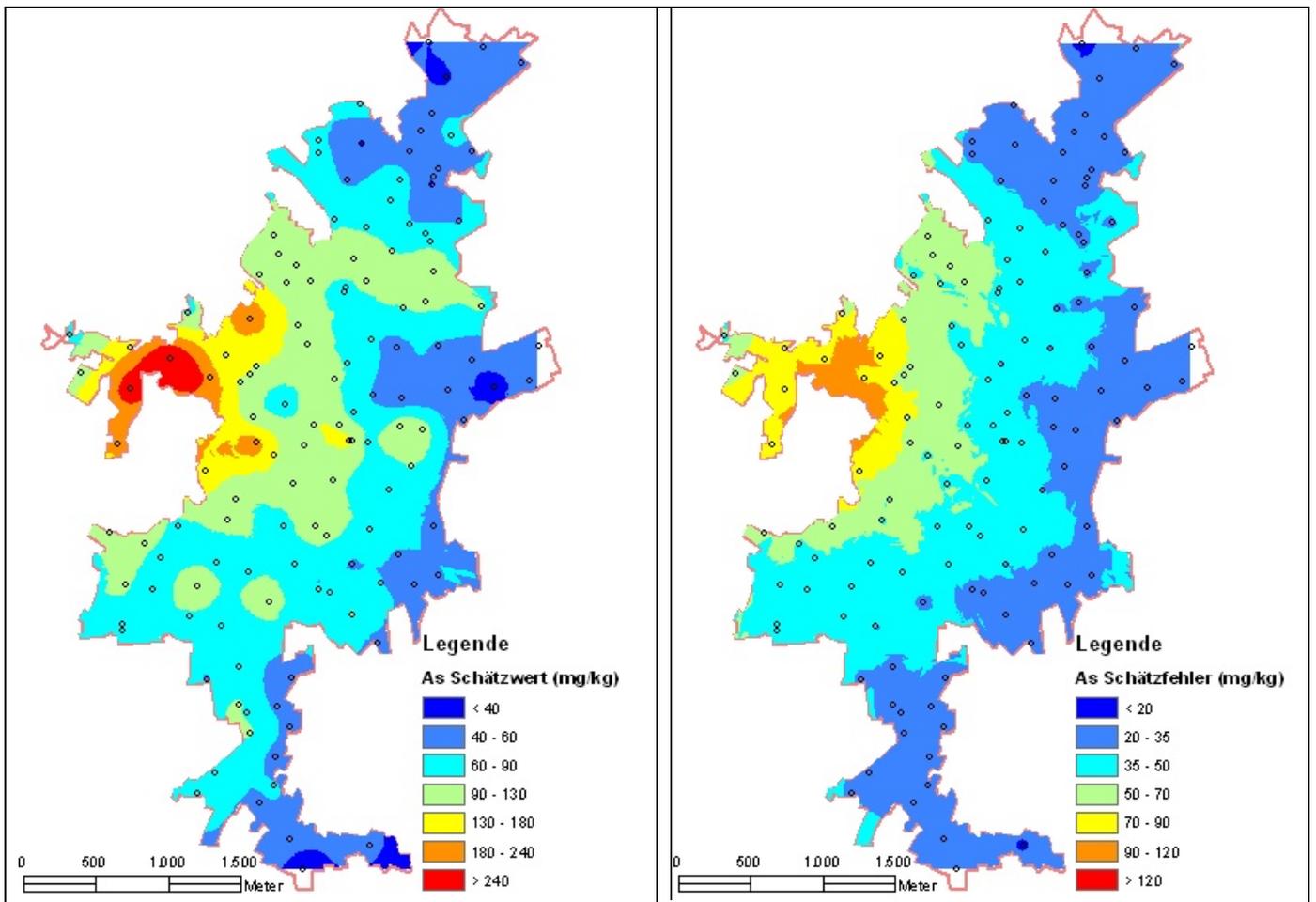


Abbildung 20: Beispiel UK2; Annaberg - As-Gehalte im Oberboden - Schätzung mit den angepassten Variogrammparametern

Mit dem Modell UK3 wird versucht, zusätzlich die Anisotropie zu berücksichtigen. Das Modellierungsergebnis ist Abbildung 21 zu entnehmen. Das Ergebnis überbewertet die Anisotropierichtung NW-SE. Es liefert zwar einen Schätzfehler, der etwas kleiner ist, als der von UK2, aber insgesamt betrachtet liefert UK2 das plausibelste Ergebnis der Interpolation der As-Messwerte der A-Proben. Das letzte Beispiel zeigt gleichzeitig, dass in der Geostatistik nicht unbedingt das Prinzip „viel hilft viel“ Erfolg verspricht. Die Hinzuziehung der Anisotropie hat im Beispiel das Endergebnis verschlechtert anstelle es zu verbessern.

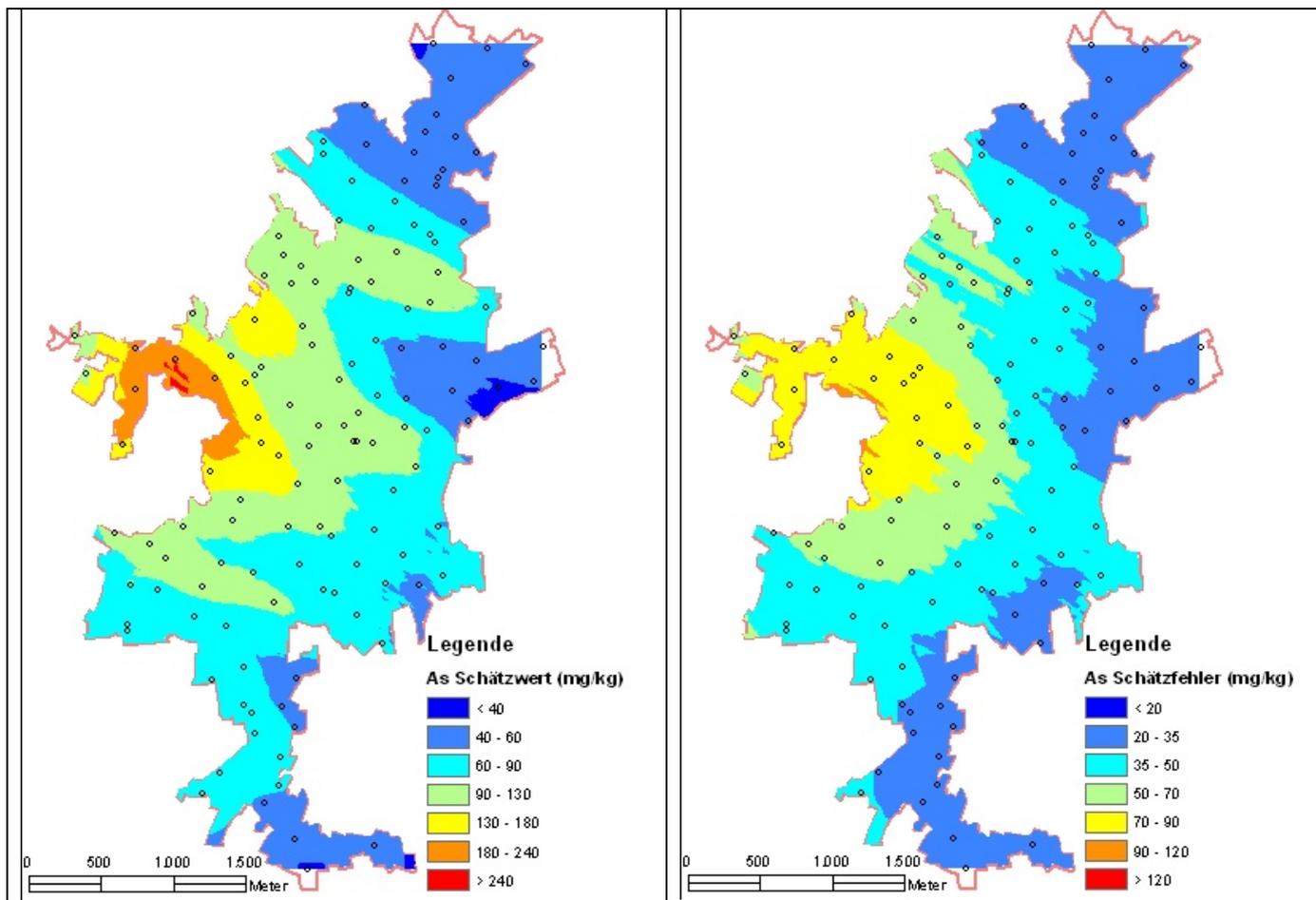


Abbildung 21: Beispiel UK3; Annaberg - As-Gehalte im Oberboden - Schätzung mit Berücksichtigung der Anisotropie

Für die Cross Validation-Diagramme treffen dieselben Bemerkungen zu wie für die des Ordinary Kriging. Weil sie sich nur unwesentlich von den OK-Darstellungen unterscheiden, wird auf die Wiedergabe an dieser Stelle verzichtet.

2.2.2.7 Indikatorkriging (IK)

Das Indikatorkriging (IK) ist ein Sonderfall des Ordinary Krigings. Es behandelt die Problemstellung, mit welcher Wahrscheinlichkeit ein Messwert einen vorgegebenen Schwellwert überschreitet. Das Ergebnis ist in jedem Fall ein Wert zwischen 0 und 1. In der vorliegenden Arbeit lautet beispielsweise eine Problemstellung, ob ein gemessener Wert in die Tiefe zu- oder abnimmt. Dazu werden die Werte von B-Probe (Unterboden) und A-Probe (Oberboden) miteinander verglichen. Es wird der Ausdruck

$$\log(\text{bWert}) - \log(\text{aWert}) \tag{2.2}$$

untersucht. Dieser ist gleichzusetzen mit

$$\log(\text{bWert}/\text{aWert}) \tag{2.3}$$

Die Logarithmierung erfolgt wegen der Schiefe der Verteilungen der untersuchten Elementgehalte.

Die As-Werte von Annaberg dienen als Illustration für IK1. Das Variogramm ist in Abbildung 22 und das Modellierungsergebnis in Abbildung 23. Bemerkenswert ist der große Bereich in der Nordhälfte mit signifikant höheren As-Gehalten im Unterboden. Die IDW-Darstellung in der linken Hälfte der Abbildung dient dem Vergleich mit dem Ergebnisbild des IK. Dabei erscheint das Ergebnis des IK wesentlich ruhiger und begründeter als die IDW-Darstellung aus den Originaldaten.

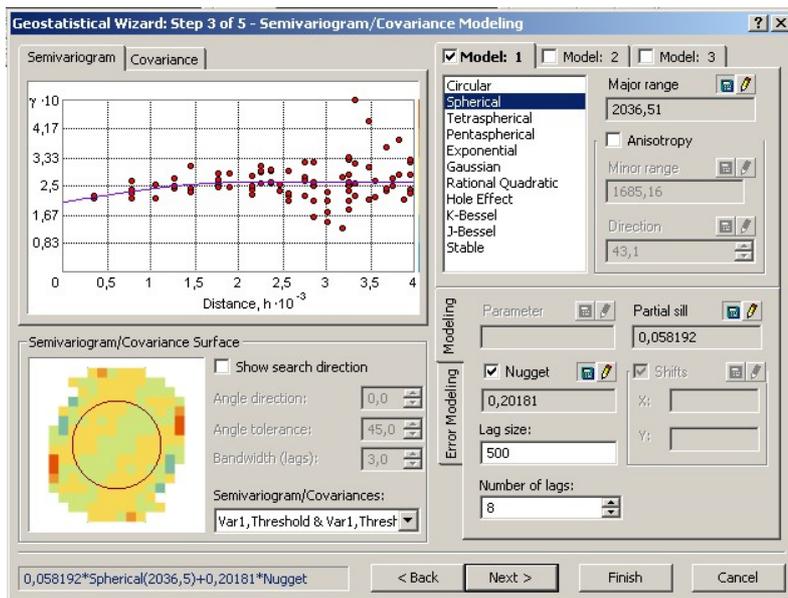


Abbildung 22: Beispiel IK1; Annaberg – $\log(A_{s_B}/A_{s_A})$ - Variogramm des Indikatorkriging

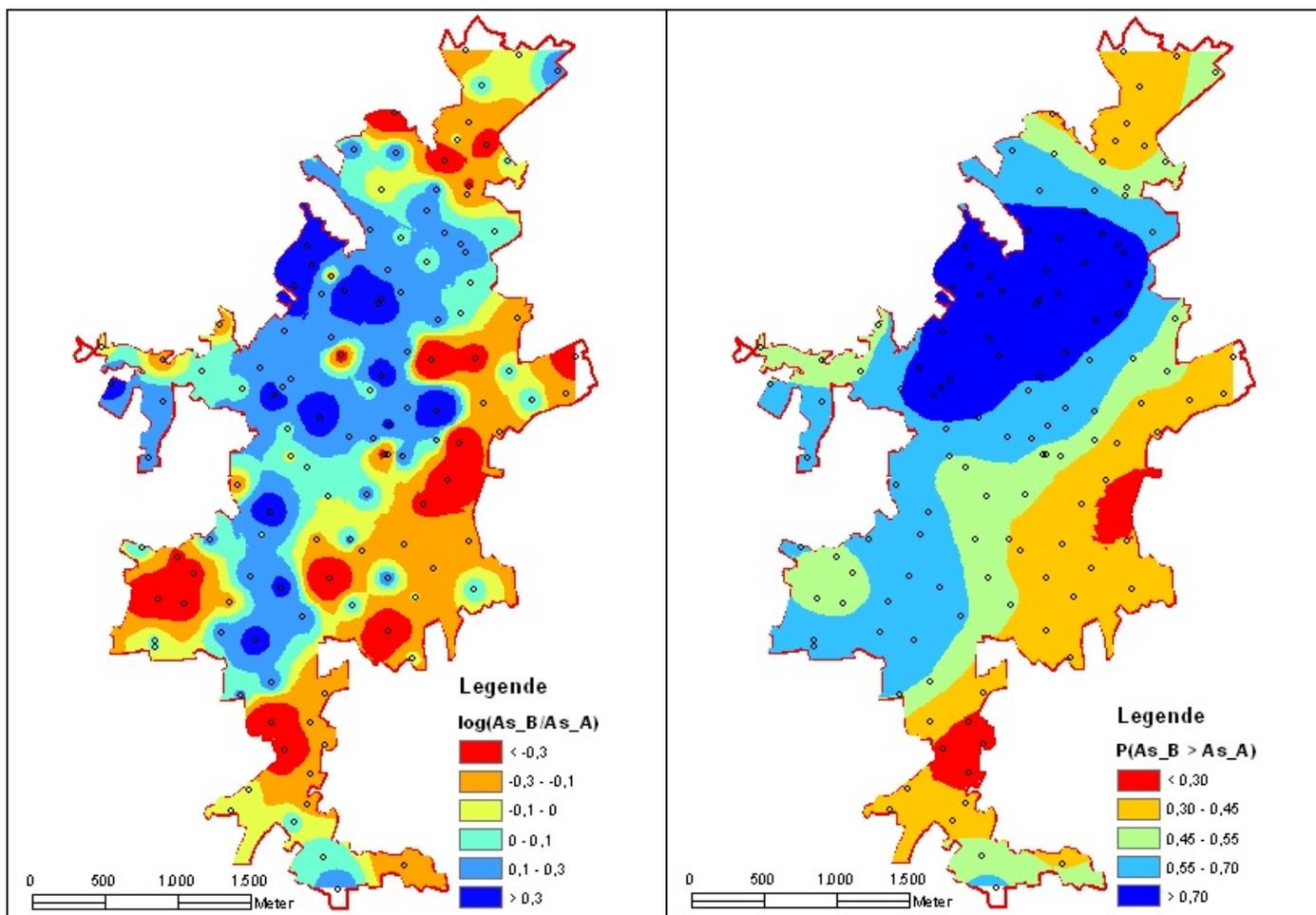


Abbildung 23: Beispiel IK1; Annaberg – $\log(A_{s_B}/A_{s_A})$ – IDW-Modell (links) und IK (rechts)

2.2.3 Flächenhafte Aussagen mit Hilfe von künstlichen neuronalen Netzen (KNN)

2.2.3.1 Grundidee der künstlichen neuronalen Netze

Die Grundideen werden unter Verwendung von <http://www.neuronalesnetz.de/index.html> dargestellt (Tutorial der Universität Würzburg, Autoren REY & BECK). Danach ist ein Neuron ein Objekt, das von unterschiedlichen Sendern (z. B. von anderen Neuronen oder von der Außenwelt) ein Eingangssignal empfängt und aus der Kombination der eingegangenen Signale ein Ausgangssignal erzeugt, das es an andere Neuronen weitergibt. Mehrere miteinander verbundene Neuronen bilden ein neuronales Netz. Dieses Netz ist strukturiert in Layer bzw. Schichten. Layer enthalten Neuronen gleicher Funktionalität. Man unterscheidet Input Layer (Eingabeschicht), Output Layer (Ausgabeschicht) und Hidden Layer (verdeckte Schicht).

- Input Layer: Neuronen erhalten Signale von der Außenwelt.
- Output Layer: Neuronen geben Signale an die Außenwelt weiter.
- Hidden Layer: Neuronen empfangen Signale von Input Layern und geben Signale an Output Layer ab. Sie haben keinen direkten Kontakt zur Außenwelt, bilden diese aber ab.

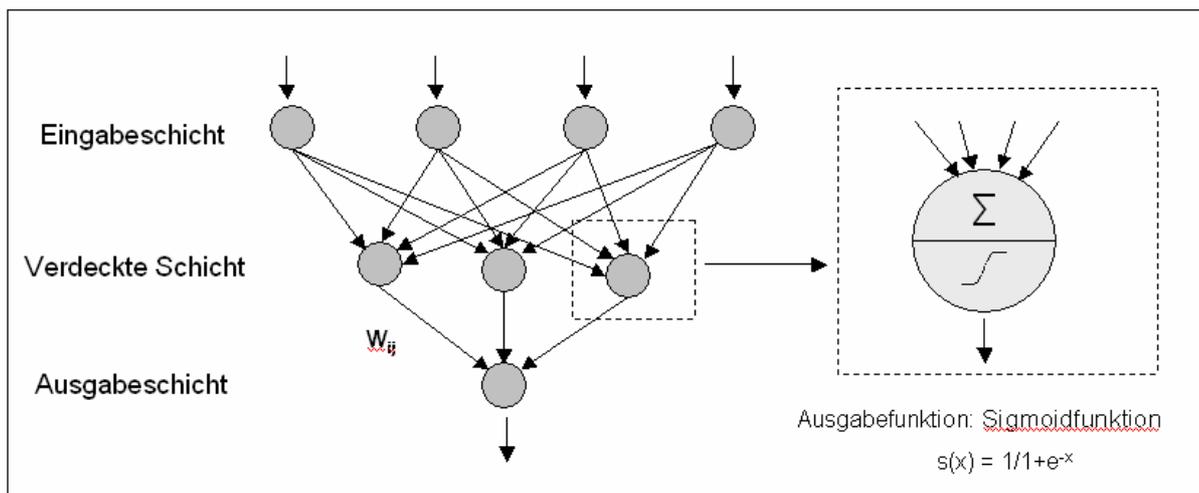


Abbildung 24: Schematische Darstellung eines neuronalen Netzes mit einer verdeckten Schicht

Jede Verbindung zwischen zwei Neuronen ist mit einem Gewichtungsfaktor belegt. Das Signal des Senders wird mit dem Gewichtungsfaktor multipliziert und erreicht in dieser Stärke das Empfänger-Neuron. Empfängt ein Neuron Signale von mehreren Sendern, so werden diese aufaddiert (Abbildung 24).

Das aufsummierte Eingangssignal wird im Neuron mittels spezieller Ausgabefunktion in ein Ausgangssignal gewandelt. Ein Beispiel für eine Ausgabefunktion ist die sogenannte Sigmoid-Funktion, die weite Verbreitung bei der Anwendung künstlicher neuronaler Netze gefunden hat. Bei ihr ist das Ausgangssignal ein Wert zwischen 0 und 1. Dabei wird für ein starkes positives Eingangssignal ein Wert nahe 1 ausgegeben. Für ein starkes negatives Eingangssignal wird dagegen ein Wert nahe 0 ausgegeben.

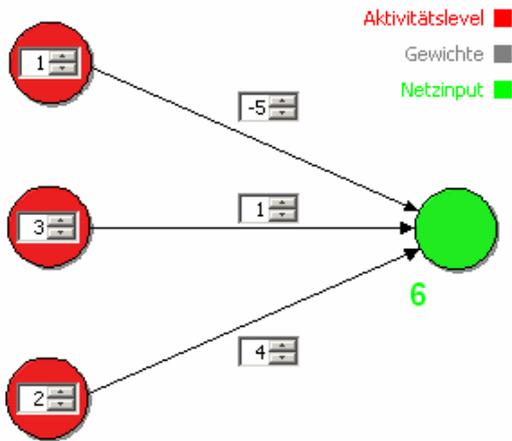


Abbildung 25: Beispiel für die Beziehung Ausgangssignale der Sender – Gewichte – Eingangssignal des Empfänger-Neurons

Das Beispiel in Abbildung 25 zeigt den Wirkmechanismus zwischen den drei Komponenten Ausgangssignale (A), Gewichte (W) und Eingangssignal (E):

$$E = A1 \cdot W1 + A2 \cdot W2 + A3 \cdot W3 \quad (2.4)$$

$$E = 1 \cdot -5 + 3 \cdot 1 + 2 \cdot 4 = 6 \quad (2.5)$$

Ein komplexes Eingangssignal aus der Außenwelt in einem neuronalen Netz mit einem Input Layer, einem Hidden Layer und einem Output Layer durchläuft fünf Verarbeitungsstufen bis zur Erzeugung eines Ausgangssignals an die Außenwelt:

- Wandlung in den Neuronen des Input Layers zu Ausgangssignalen des Input Layers
- gewichtete Aufsummierung der Ausgangssignale des Input Layers zu Eingangssignalen der Neuronen des Hidden Layers
- Wandlung in den Neuronen des Hidden Layers zu Ausgangssignalen des Hidden Layers
- gewichtete Aufsummierung der Ausgangssignale des Hidden Layers zum Eingangssignalen der Neuronen des Output Layers
- Wandlung in den Neuronen des Output Layers zu Ausgangssignalen des Output Layers

Das lässt sich funktional in zwei Matrizengleichungen und drei Signaltransformationen darstellen:

$$i_a = t(i_e) \quad (2.6)$$

$$h_e = i_a \bullet W_{IH} \quad (2.7)$$

$$h_a = t(h_e) \quad (2.8)$$

$$o_e = W_{HO} \bullet h_a \quad (2.9)$$

$$o_a = t(o_e) \quad (2.10)$$

Dabei sind:

i_e, h_e, o_e – Eingangssignale der Neuronen des Input-, Hidden- und des Output-Layers

i_a, h_a, o_a – Ausgangssignale der Neuronen des Input-, Hidden- und des Output-Layers

$t(\dots)$ – Transformation des jeweiligen Eingangssignals in ein Ausgangssignal der Neuronen

W_{IH}, W_{HO} – Matrizen der Gewichte der Verbindungen der Neuronenschichten

Der Nutzen eines künstlichen neuronalen Netzes ergibt sich daraus, dass es Eingangssignale aus der Außenwelt analysiert und sinnvoll in Ausgangssignale wandelt. Dazu ist es erst in der Lage, nachdem es anhand von Trainingsmaterial geschult wurde. Dieses Trainingsmaterial besteht aus bekannten Eingangssignalen (Ausprägung der auf die Höhe der Elementgehalte Einfluss

nehmenden Parameter wie z. B. Flächennutzung, Geologie, Boden) und dazugehörigen ebenso bekannten Ausgangssignalen (Elementgehalte an den Probenahmepunkten). Diese Form des Lernens nennt man überwachtes Lernen. Die Aufgabe besteht während des Lernens in der Vergabe von Gewichten auf jeder Verbindung zwischen zwei Neuronen und zwar so, dass die berechneten Ausgangssignale (Höhe der Elementgehalte) möglichst wenig von den Vorgaben des Lernmaterials (gemessene Elementgehalte am Probenahmepunkt) abweichen. Es müssen mit anderen Worten optimale Gewichte gefunden werden, die in den Matrizen W_{IH} und W_{HO} beschrieben sind. Diese erfüllen die Bedingung, dass sie eine minimale Abweichung der Modelldaten vom Lernmaterial gewährleisten. Einer der Lösungsansätze für diese Aufgabe heißt Backpropagation. Nach erfolgreichem Training ist dann das neuronale Netz in der Lage, aus weiteren Eingangssignalen, die zum Themenkreis der Aufgabenstellung gehören, sinnvolle Ausgangssignale zur Weiterverarbeitung zu erzeugen.

Das angewendete Analyseverfahren gehört zu den multivariaten statistischen Methoden. Der Ansatz künstlicher neuronaler Netze (KNN) hat gegenüber statistischen „Standard“-Verfahren (wie der Regression oder Diskriminanzanalyse) verschiedene Vorteile:

- Fähigkeit zur Abbildung komplexer und nichtlinearer Zusammenhänge
- Möglichkeit qualitativer (Aussage: ja/nein bzw. Wahrscheinlichkeit des Auftretens) und quantitativer Modellierung (Aussage: zahlenmäßig belegte Mengen für z. B. Höhe des Elementgehaltes)
- „Lernfähigkeit“
- Generalisierungsfähigkeit
- Rauschtoleranz

Das Verfahren der KNN hilft darüber hinaus bei der Ermittlung der Faktoren, die ein Zielereignis beeinflussen.

2.2.3.2 Das Programm advangeo®

Das beschriebene Verfahren ist grundsätzlich für jede Aufgabenstellung anwendbar, in der komplexe Zusammenhänge auf der Basis von Lern- und Analysealgorithmen gelöst werden. Ganz spezielle Anwendungsfälle liegen bei der Analyse raumbezogener Daten vor. Hierzu wurde das Programm advangeo® entwickelt. Es ist eine Erweiterung zur ESRI-Software ArcGIS und analysiert räumliche Zusammenhänge zwischen bekannten Ereignissen und potenziellen Einflussfaktoren. Dazu zählt u. a. auch die Modellierung des Stoffgehalts im Boden anhand einiger bekannter Probenwerte und flächenhaft verbreiteter Einflussdaten wie Flächennutzung, geologischen Gesteins- und Gangstrukturen im Untergrund, Werten des DGM und daraus abgeleiteter Daten usw.

Es handelt sich dabei um ein überwachtes Lernen. Das bedeutet, dass bekannte Ereignisse vorhanden sein müssen (z. B. Erosion vorhanden?, Lagerstätte vorhanden?, Elementgehalt am bekannten Probenahmepunkt), die als Lernmuster dienen.

Die Software advangeo® gestattet dem Nutzer,

- den gesamten Workflow der statistischen Analyse nachvollziehbar aufzubauen und zu dokumentieren,
- vorhandene Geodaten als Eingangsdaten einer statistischen Modellierung mittels KNN zuzuführen,
- die Ergebnisse nutzerfreundlich zu visualisieren (GIS-Extension).

Die Grundideen der KNN wurden in advangeo® folgendermaßen umgesetzt:

- Der Input Layer nimmt die Informationen zu den potenziellen Einflussfaktoren auf. Die Anzahl der Eingangsinformationen legt die Neuronenzahl in diesem Layer fest.
- Eine verdeckte Schicht dient zur Informationsverarbeitung. Die Zahl der Neuronen ist durch den Nutzer festzulegen.
- Die Ausgabeschicht repräsentiert das vorgegebene Muster. Weil es sich im Falle der Software advangeo® immer um eine konkrete Ausgabe, nämlich das Lernmuster, handelt, beträgt die Anzahl der Neuronen in dieser Schicht immer 1.

Eine umfangreiche Bedienungsanleitung /12/ unterstützt den Nutzer bei der Arbeit mit advangeo®.

2.2.4 Validität flächenhafter Aussagen

Das Ziel der vorliegenden Arbeit ist die „Verbesserung der Validität flächenhafter Aussagen“. Vereinfacht ausgedrückt bedeutet Validität „Gültigkeit“. Was aber bedeutet „Verbesserung der Gültigkeit flächenhafter Aussagen“? Der Untersuchungsgegenstand ist ein abgegrenztes Raumstück, im vorliegenden Fall ein Siedlungsgebiet. Einige Eigenschaften des Siedlungsgebietes wie z. B. die Flächennutzung oder das DGM sind flächendeckend bekannt. Andere Eigenschaften wie z. B. der Gehalt an Schadstoffen sind nur punktuell bekannt. Die Aufgabe besteht nicht nur in der Modellierung der flächendeckenden Verbreitung der nur punktuell bekannten Eigenschaften unter Zuhilfenahme der anderen, auch flächendeckend bekannten Einflussgrößen, sondern auch in der Bewertung ihrer Validität. Mit unterschiedlichen flächendeckenden und punktförmigen Einflussgrößen sowie Modellansätzen erzielt man unterschiedliche Vorhersagen über die flächenhafte Verbreitung punktförmig vorliegender Informationen. Wenn Schadstoffgehalte modelliert werden sollen, ist es naheliegend, die Messwerte mit Hilfe eines Interpolationsverfahrens wie IDW in die Fläche zu modellieren. IDW gibt die Messwerte in den Messpunkten sehr gut wieder, hat jedoch Probleme, Aussagen über die Genauigkeit der Vorhersage zwischen den Messpunkten zu machen. Wenn man auf eine solche Genauigkeitsaussage Wert legt, ist als Interpolationsverfahren Kriging vorzuziehen. Die beiden Ergebnisteile Schätzwert und Schätzfehler erhöhen die Gültigkeit der flächenhaften Aussage zwischen den Messpunkten.

Diese Betrachtungen waren u. a. Gegenstand des Kap. 2.2.2. Die dort vorgestellten Ergebnisse werden nun unter Verwendung der verschiedenen methodischen Ansätze (Homogenansatz, Immissionsansatz, raumanalytischer Ansatz, Substratansatz) interpretiert. Man kann unter Umständen die Gültigkeit der flächenhaften Aussage weiter verbessern, indem man durch Verwendung eines anderen geeigneten methodischen Ansatzes die Vorhersage über die flächenhafte Verbreitung der Schadstoffe noch mehr an die natürlichen Gegebenheiten anpasst. Das soll in den folgenden Kapiteln gezeigt werden. Dazu werden zuerst Kriging gemeinsam mit dem raumanalytischen Ansatz und dem Immissionsansatz zur Anwendung gebracht. In einem weiteren Schritt werden interessante Ergebnisse mit KNN und dem Substratansatz vorgestellt.

Bezüglich der Auswahl des geeigneten methodischen Ansatzes und des Kriging-Verfahrens gelten folgende Richtlinien:

- Der eigentlichen Auswahl gehen zumeist mehrere Berechnungsvarianten mit anschließendem Ergebnisvergleich voraus. Ein wichtiges Hilfsmittel sind vorausgehende statistische Auswertungen der Messdaten.
- Zuerst erfolgt die Auswahl eines geeigneten methodischen Ansatzes. Der methodische Ansatz muss der Genese des Schadstoffs Rechnung tragen.
- Die homogenen Raumeinheiten (HRE) müssen so definiert sein, dass sie die Anwendung eines möglichst einfachen Kriging-Modell zur Modellierung zulassen.
- Abschließend erfolgt die Auswahl des einfachsten Kriging-Modells je HRE, das die zur Verfügung stehenden Daten adäquat abbildet.

Ordinary Kriging (OK) ist anzuwenden, wenn weniger als 70 Messpunkte zur Verfügung stehen. Darüber hinaus ist OK zu empfehlen, wenn man den Immissionsansatz gewählt hat. In diesem Fall ist die Anisotropie zu berücksichtigen. OK kann auch bei anderen methodischen Ansätzen zum Einsatz kommen, wenn sich z. B. anhand des Voronoi-Mosaiks ein einfaches räumliches Verbreitungsmodell des untersuchten Schadstoffs abzeichnet. Von dieser Regel sollte man nur in begründeten Ausnahmen abweichen.

Unter diesen Gesichtspunkten fand für Annaberg der raumanalytische Ansatz und der Substratansatz erfolgreich Verwendung, während für Aue der Immissionsansatz eine große Rolle spielt. In jedem Fall erscheint der vorgeschlagene Homogenansatz dann sinnvoll, wenn keiner der drei anderen Ansätze zu einem akzeptablen Ergebnis führt und dennoch eine flächenhafte Darstellung der Elementgehalte sinnvoll möglich erscheint.

Neben der horizontalen Verbreitung der untersuchten Merkmale war in den Beispielgebieten dieser Untersuchung die Gehaltsunterschiede zwischen Ober- und Unterboden von Interesse. Das kann durch einen flächenhaften Vergleich der Differenz der Gehalte erfolgen, wie in Kap. 2.2.2.7 demonstriert. Mit dieser Untersuchung kann man z. B. auch die Gültigkeit des Immissionsansatzes bewerten. Für diesen Ansatz gilt, dass die Gehalte in die Tiefe schnell abnehmen; demnach sollten die Oberbodenproben regelmäßig höhere Konzentrationen aufweisen als die Proben der Unterböden am gleichen Messpunkt. Kap. 3.1.2 und Anhang 1 enthalten diesbezüglich interessante, beispielhafte Resultate.

Ein weiterer Gesichtspunkt im Hinblick auf die Gültigkeit einer Modellierung ist mit der Verdichtung des Probenahmernetzes verbunden. Einerseits erscheint es intuitiv einleuchtend, dass eine Probenverdichtung das Resultat verbessern muss. Ob und wie sich die Resultatsverbesserung in einer Verringerung des Schätzfehlers widerspiegelt, ist in Kap. 3.2 exemplarisch dargestellt. Auf der anderen Seite kann man die Gültigkeit des Modells daran prüfen, ob die Gehalte neuer Proben sich in dem definierten Konfidenzintervall (z.B. lt. Formel 2.1) befinden oder nicht. In Kap. 3.3.2.2 wird gezeigt, wie sich die Ergebnisse der 10 Zusatzproben in Annaberg interpretieren lassen und wie diese Proben bei nachfolgendem Einbezug das Modell der flächenhaften Aussagen beeinflussen können.

Cross Validation ist ein weiteres Verfahren zur Bewertung der Validität des verwendeten Modells. In Kap. 2.2.2.5 wurde jedoch bereits auf die Probleme hingewiesen, die speziell bei der Verwendung von Kriging mit dieser Bewertungsmethode auftreten. Deswegen wird die Genauigkeitsbetrachtung mit Schätzwert und Schätzfehler wie in Kap. 3.3.2.2 dem Cross Validation-Verfahren vorgezogen.

Das in advangeo[®] realisierte Verfahren der künstlichen neuronalen Netze erwies sich zur Merkmalsschätzung als gut geeignet. Besonders bei der Berücksichtigung des erweiterten Substratansatzes am Beispiel der geogen mit Gangmaterial beeinflussten Stadtböden in Annaberg erwies es sich als leistungsfähige Modellierungsmethode (siehe Kap. 3.1.4 und Anhang 2). Aussagen zur Genauigkeit der Schätzwerte kann man bei diesem Verfahren jedoch nur in den Messpunkten treffen. Dazu werden zunächst die gemessenen Werte den in den Messpunkten ermittelten Schätzwerten gegenübergestellt (Kap. 3.1.4, Abbildung 40). Eine Cross Validation ist im advangeo-Verfahren nicht automatisiert verfügbar und dadurch recht aufwändig. In diesem Vorhaben wurden die Cross Validation daher nur teilweise durchgeführt, d. h. es wurden für 20 ausgewählte Messpunkte die dort vorhandenen Informationen weggelassen und die flächenhafte Schätzung der Stoffgehalte im Oberboden mittels advangeo[®] neu erzeugt (Kap. 3.1.4, Abbildung 41).

3 Ausgewählte Ergebnisse auf der Basis der modifizierten Methodik

3.1 Flächenmodellierungen und methodische Ansätze

3.1.1 Raumanalytischer Ansatz – Pb-Gehalte im Oberboden von Annaberg

Das Voronoi-Mosaik der Pb-Gehalte in den A-Proben von Annaberg-Buchholz ist in Abbildung 26 dargestellt.

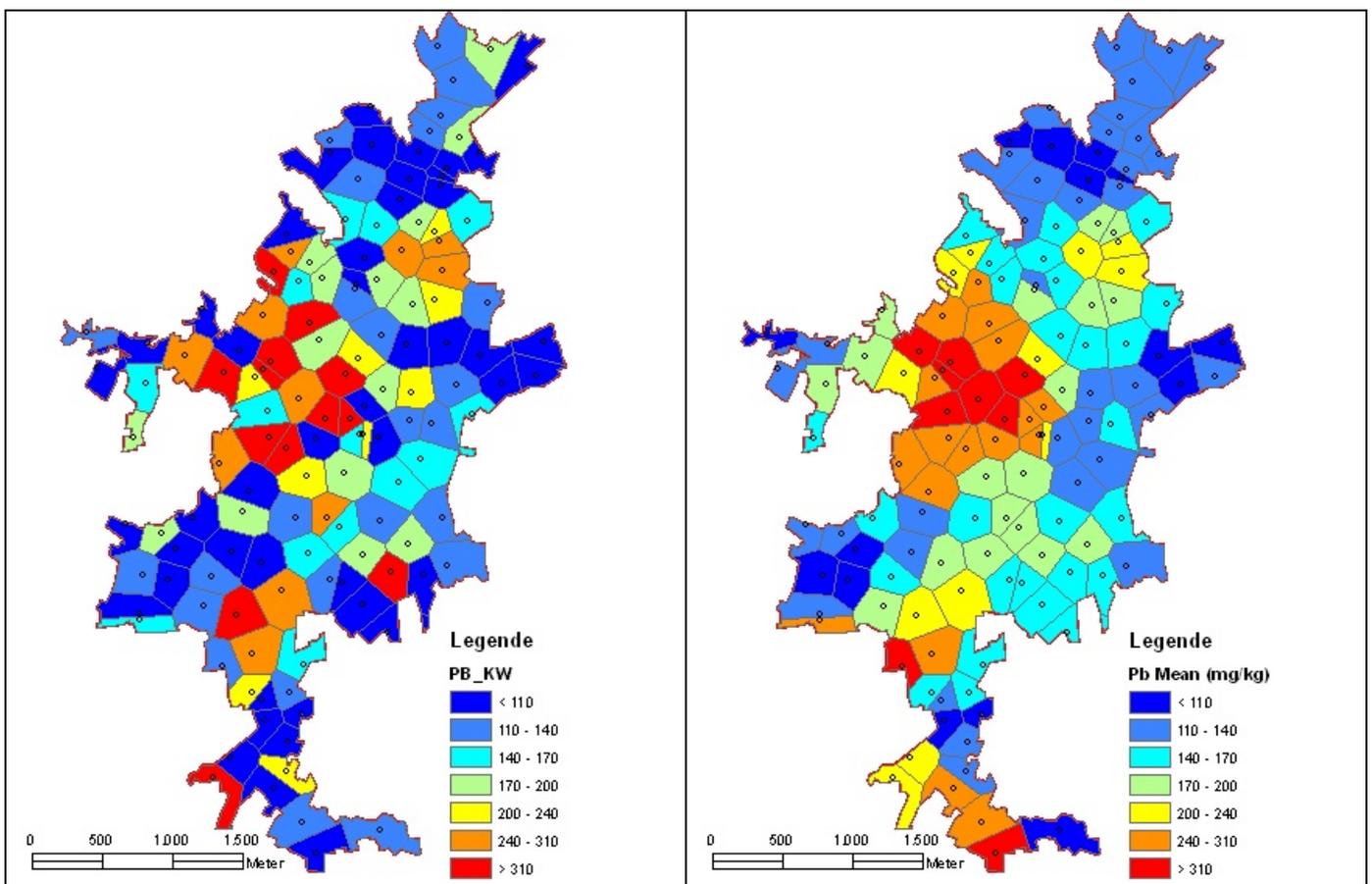


Abbildung 26: Voronoi-Mosaik; Annaberg - Pb-Gehalte im Oberboden - Urwerte (links) und Mittelwerte der Delaunay-Nachbarn (rechts)

Ordnet man die Proben den Flächennutzungen zu (Abbildung 1) und führt über die Flächennutzungsklassen eine Häufigkeitsstatistik der dekadischen Logarithmen der Pb-Gehalte aus, erhält man die Ergebnisse, die in Abbildung 27 (Box-and-Whisker Plot) und Abbildung 28 (Least Significant Difference (LSD) Intervalle der Mittelwerte) niedergelegt sind. Aus beiden Abbildungen ist ersichtlich, dass sich die beiden Nutzungsklassen WG_BL (Neubaublöcke/DDR) und WG_A (Altstadtbereich) aus den anderen Nutzungen hervorheben. Die Nutzungsklasse Neubaublöcke/DDR hat deutlich die geringsten Gehalte an Blei, während sie in der Nutzungsklasse Altstadt am höchsten sind. Als Begründung wird bei Neubaublöcke/DDR die Verwendung von nicht kontaminiertem Auffüllmaterial während der Bauphase gesehen. Im Altstadtbereich wird der jahrhundertlange Umgang speziell im ausgehenden Mittelalter mit Blei innerhalb der alten Stadtmauern Annabergs als Ursache vermutet (Wasserrohre, Fensterfassungen, Farben usw.).

Diese beiden Teilflächen und die Restfläche werden als drei homogene Raumeinheiten betrachtet und einer getrennten Berechnung unterzogen. Zum Schluss wird aus den drei Teilergebnissen mit Hilfe des Spatial Analyst ein Gesamtergebnis zusammengesetzt.

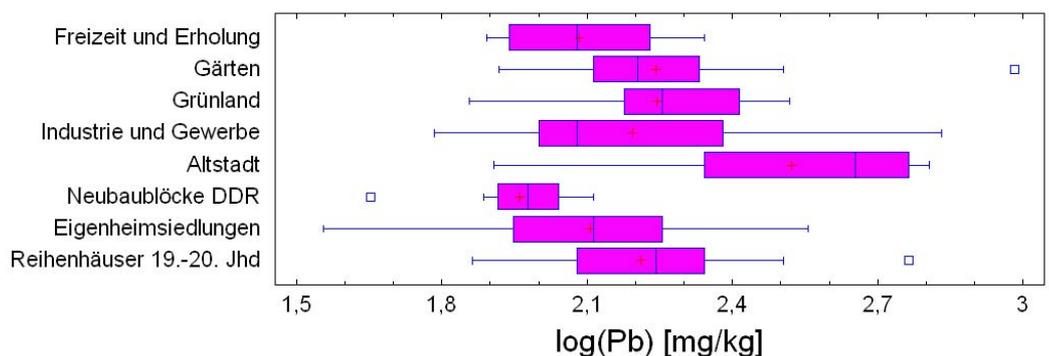


Abbildung 27: Box-and-Whisker Plot der dekadischen Logarithmen der nutzungsbezogenen Pb-Gehalte im Oberboden

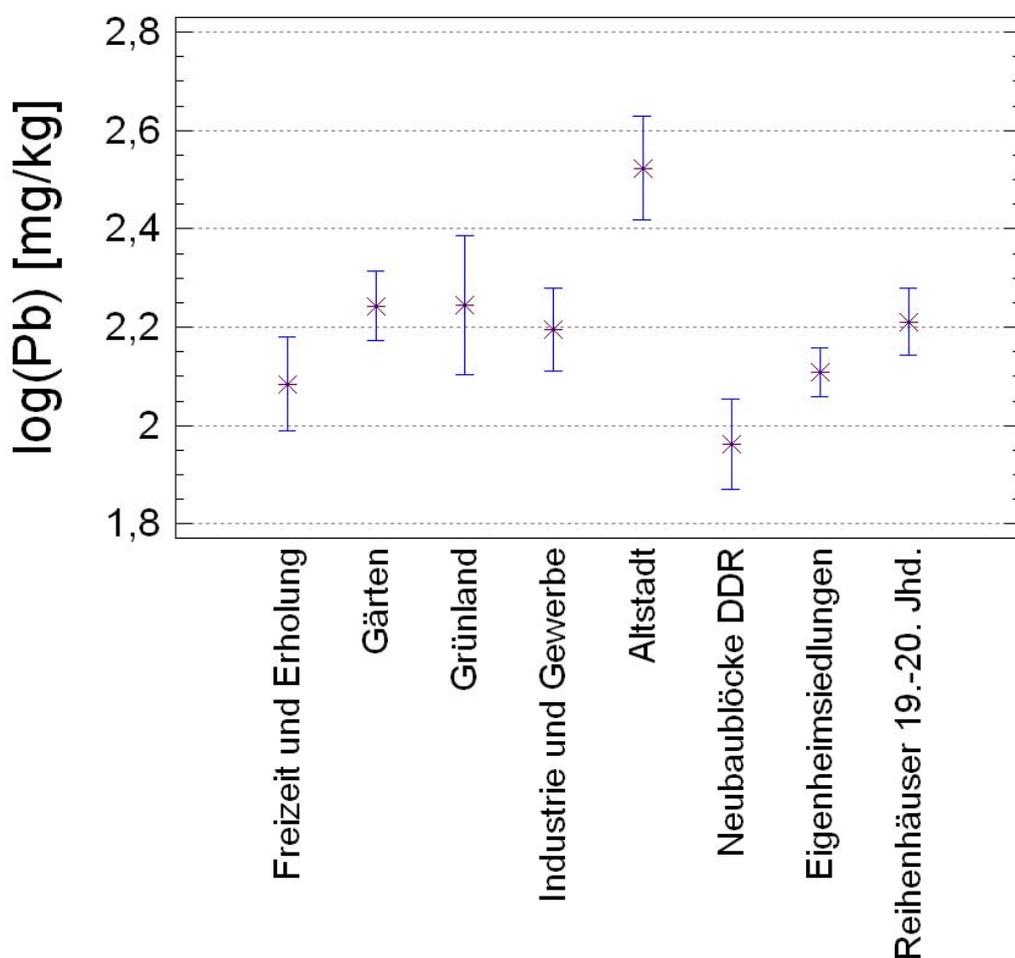


Abbildung 28: Vergleiche der nutzungsbezogenen Gruppenmittelwerte und der 95 %-LSD-Intervalle der dekadischen Logarithmen der Pb-Gehalte im Oberboden

Dieses Beispiel steht für einen klassischen raumanalytischen Ansatz: Die Schadstoffverteilung ist von der Flächennutzung abhängig und die drei Teilflächen werden wie von den Autoren favorisiert getrennt berechnet.

Für die Neubaublöcke/DDR und den Altstadtbereich kommt in Anbetracht der geringen Probenzahl Ordinary Kriging ohne Trendberücksichtigung zum Einsatz (s. Kap. 2.2.4), während für den Restbereich Universal Kriging mit Trend 2. Grades

angesetzt wird. Für das Restgebiet werden alle Messpunkte hinzugezogen, die nicht in einer der beiden Teilflächen liegen. Das montierte Ergebnis ist in Abbildung 29 dargestellt.

Während bei der Modellierung der As-Gehalte Wert auf möglichst stetige Schätzwerte und Schätzfehler gelegt wurde, wird in diesem Fall der Sprung zwischen den beiden Teilgebieten und dem Restgebiet ganz bewusst realisiert, um den nutzungsabhängigen Gehaltsunterschied hervorzuheben (s. Abbildung 30). Diese definierten Sprünge in den Werteoberflächen sind charakteristisch für den raumanalytischen Ansatz. Gäbe es lediglich einen stetigen Übergang an den Flächengrenzen, würde der raumanalytische Ansatz seinen Sinn verlieren.

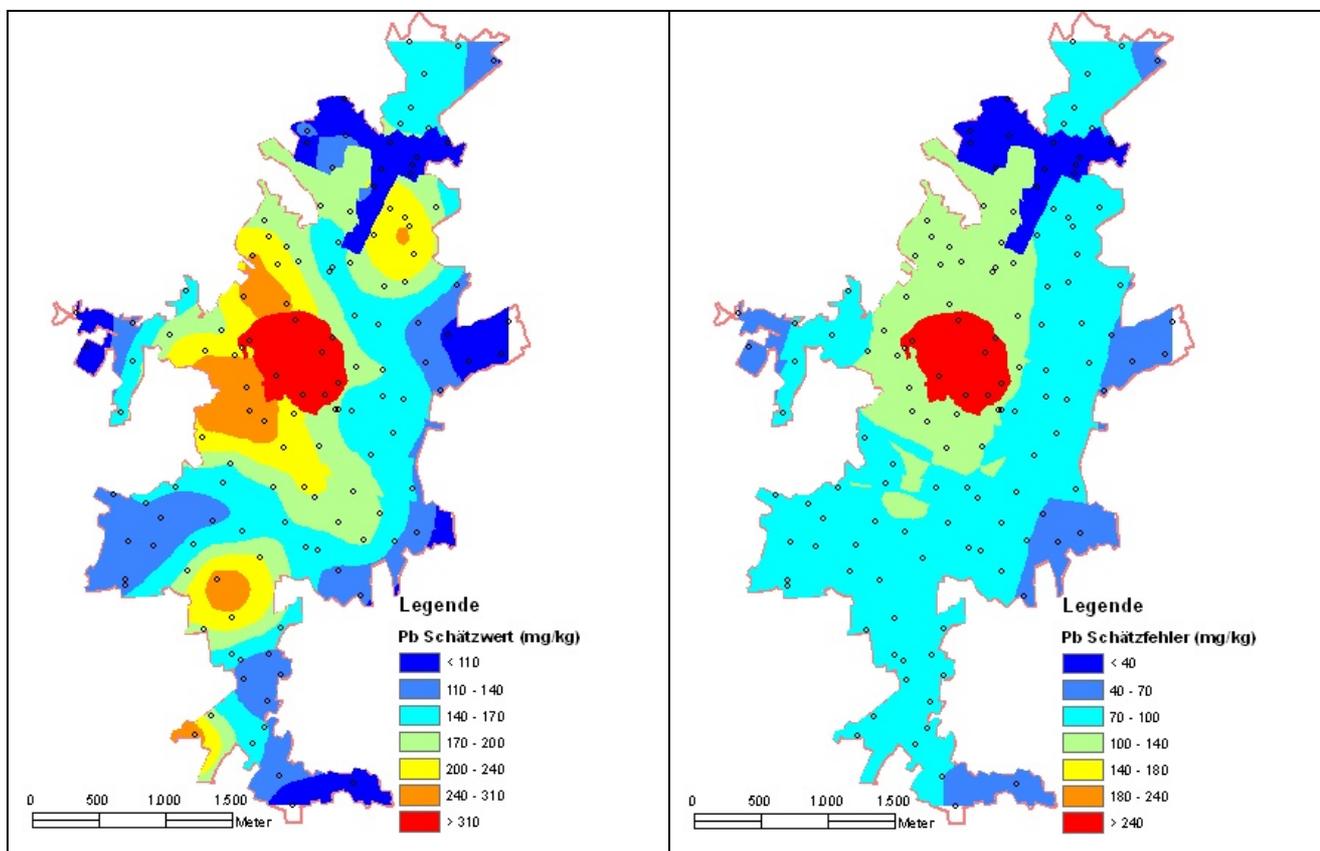


Abbildung 29: Annaberg; Pb-Gehalte im Oberboden - Schätzung mit raumanalytischem Ansatz



Abbildung 30: Schattierungsdarstellung der Schätzwertoberfläche der Pb-Gehalte im Oberboden mit den beiden sich durch Sprünge abhebenden Teilflächen

3.1.2 Immissionsansatz – Cd-Gehalte im Oberboden von Aue

Die Situation in Aue ist durch einen starken, über Jahrhunderte aktiven Hüttenstandort gekennzeichnet. Dies hat es mit sich gebracht, dass sich eine Reihe von Schadstoffen über Teile der Stadt Aue und insbesondere das Schwarzwassertal über den Luftpfad verbreiteten. Sehr deutlich ist das anhand des Voronoi-Mosaiks für die Cd-Gehalte im Oberboden zu beobachten (Abbildung 31).

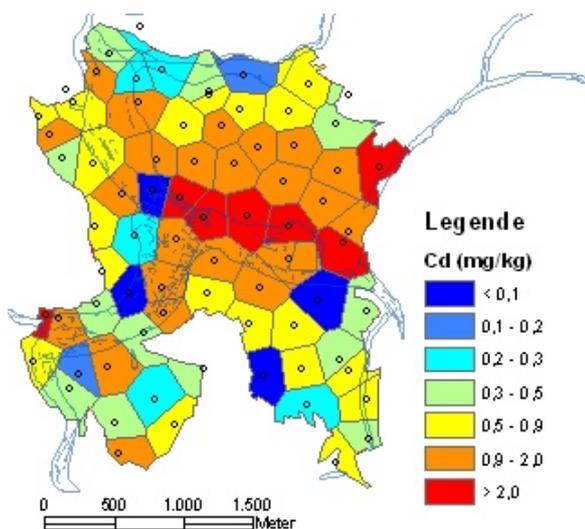


Abbildung 31: Voronoi-Mosaik; Aue - Cd-Gehalte im Oberboden - Urwerte

Der Hüttenstandort befindet sich am Ostrand des Siedlungsgebietes unmittelbar am Schwarzwasser. Der Bereich mit erhöhten Elementgehalten zieht sich entlang des Schwarzwassers. Die Belastung findet sich beidseitig des Gewässers an den Hängen und hat dabei mit dem Geländeanstieg an Intensität allmählich verloren. Ein ähnliches Bild ist ebenso für Ni und Co zu beobachten (siehe Anhang 1). Bemerkenswert ist, dass diese gesetzmäßige Ablagerung trotz der sehr geringen absoluten Gehalte selbst an den ungefilterten Urdaten im Voronoi-Mosaik zu erkennen ist. Andererseits ist auch zu erkennen, dass sich dieses Belastungsbild auf das Schwarzwassertal und seine Hänge beschränkt. Es wurde deshalb für die Modellierung das Stadtgebiet in zwei Teile geteilt. Die Maske dieser Teilung ist Abbildung 32 zu entnehmen.

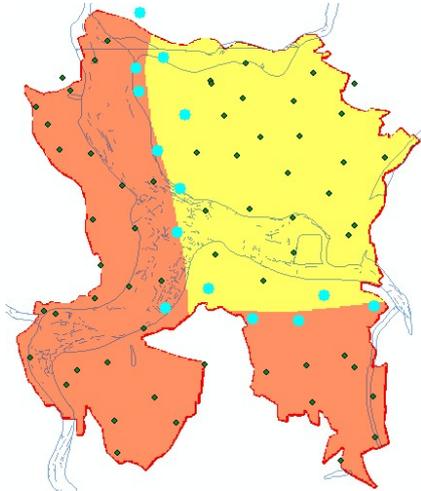


Abbildung 32: Untergliederung des Siedlungsgebietes Aue für Darstellung der Cd-Gehalte (gelb – Region 1; ocker – Region 2)

Die Teilung ist quasi ein raumanalytischer Ansatz, der im Unterschied zum Einflussfaktor Flächennutzung des vorangegangenen Kapitels als Abgrenzungskriterium den Einwirkungsbereich des Hüttenstandortes verwendet. Für die Region 1 im Bereich des Hüttenstandortes wurde der Immissionsansatz angenommen und für Region 2 der Homogenansatz. Die Cd-Gehalte der türkis markierten Punkte im Übergangsbereich gehen in die Berechnung für beide Regionen ein.

Für die beiden Regionen kommt Ordinary Kriging ohne Trend zur Anwendung. Für Region 1 wird eine deutliche Anisotropie angesetzt, die sich parallel zum Schwarzwasser erstreckt. Diese Anisotropie ist hauptsächlich im Immissionsansatz und der daraus resultierenden Form der Schadstoffausbreitung im Schwarzwassertal begründet. Region 2 kommt ohne diese Anisotropie-Annahme aus.

Das endgültige montierte Schätzwertergebnis und der Schätzfehler sehen für den ersten Moment etwas gewöhnungsbedürftig aus (Abbildung 33). Die beiden Regionen weisen an ihren Grenzen deutliche Sprünge in der Vorhersage, ganz besonders jedoch im Schätzfehler auf. Das ist der Preis für die angepasste Modellierung der Werteoberfläche. Die modellierten Gehalte sind in der Region 2 im Schnitt etwas niedriger als in der Region 1. Dafür sind sie mit dem deutlich höheren Schätzfehler behaftet. Das ist die direkte Folge der getrennt angepassten Modellierung in den beiden homogenen Raumeinheiten.

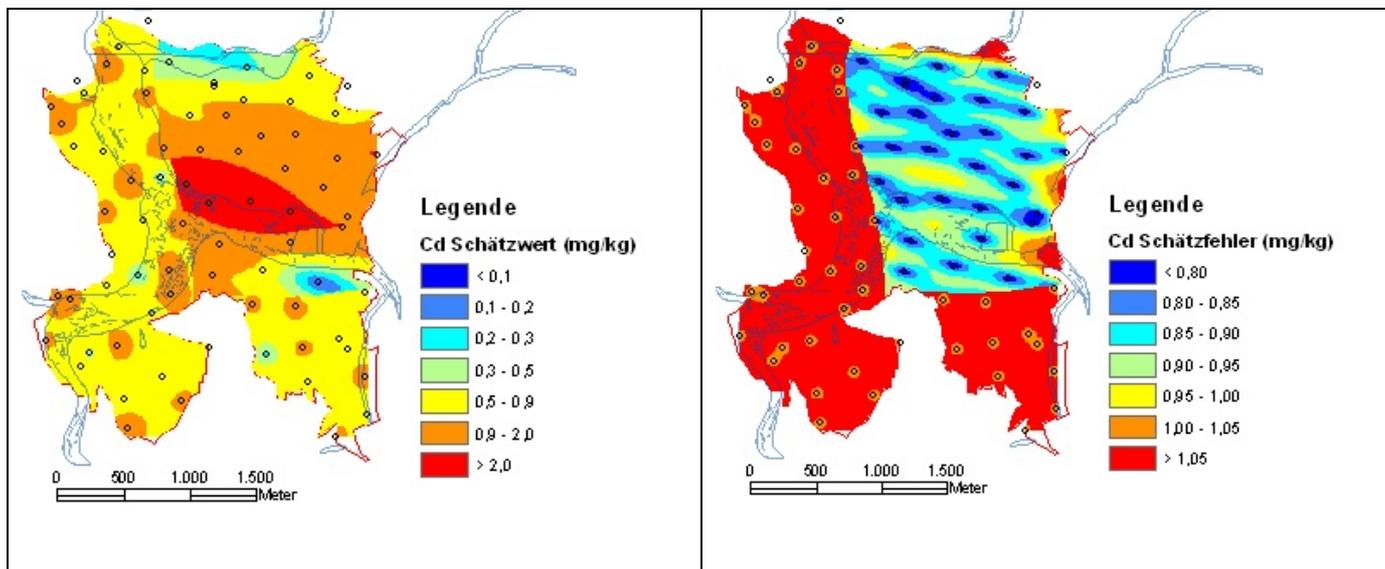


Abbildung 33: Aue - Cd-Gehalte im Oberboden - Schätzung mit raumanalytischem und Immissionsansatz

Es wurde nachfolgend ein wichtiges Kriterium für den Immissionsansatz geprüft. Dieses besteht darin, dass durch die Immission nur die obersten dm eine erhöhte Belastung aufweisen, d. h. dass die Gehalte im Unterboden regelmäßig unter denen im Oberboden liegen sollten. Das kann durch Vergleich der Gehalte in den B-Proben und den A-Proben erfolgen, wie in Kap. 2.2.2.7 zum Indikatorokriging beschrieben. Das Ergebnis des Vergleichs ist Abbildung 34 zu entnehmen. Man sieht - deutlicher noch in IDW als bei IK - dass in der Region 1 die A-Proben die größeren Gehalte aufweisen. Die wenigen Ausnahmen machen das IK-Bild etwas weniger eindeutig. Allerdings ist auch hier abzulesen, dass die Wahrscheinlichkeit, dass die B-Proben die größeren Gehalte aufweisen, kleiner ist, als die Wahrscheinlichkeit der umgekehrten Annahme, nämlich dass die A-Proben die größeren Gehalte haben. Das Ergebnis untermauert die Berechtigung des Immissionsansatzes für die Region 1.

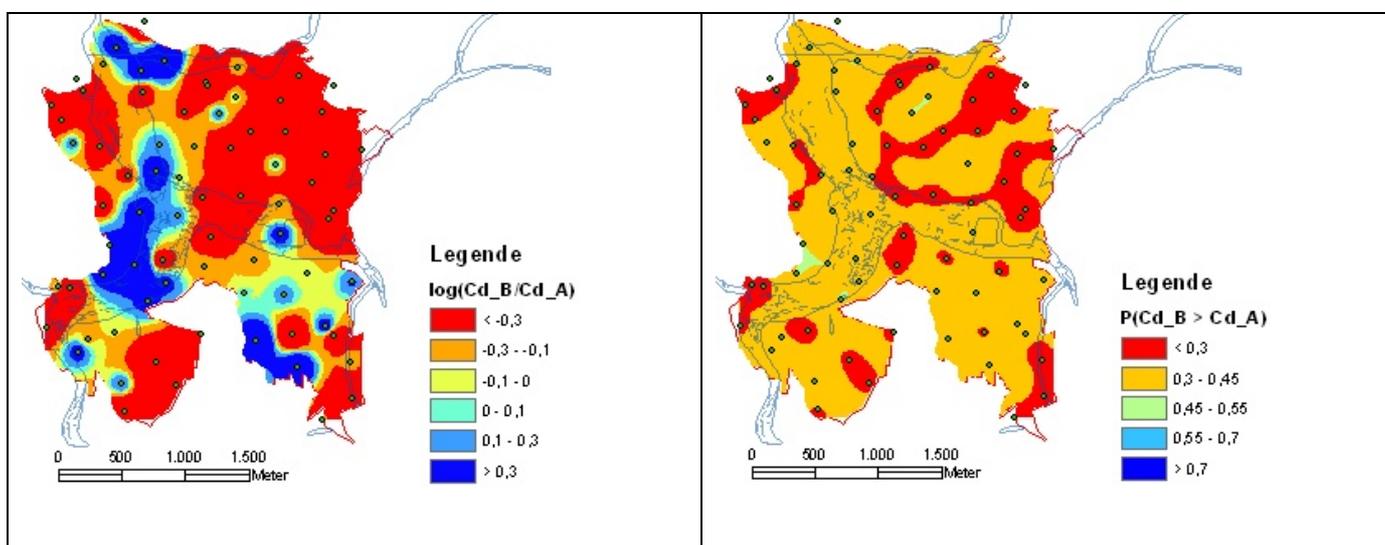


Abbildung 34: Aue - Vergleich der Cd-Gehalte in den B- und den A-Proben - IDW-Modell (links) und IK (rechts)

Weil sich das Cross Validation-Diagramm für die Region 1 von denen aus Kap. 2.2.2.5 deutlich unterscheidet, wird es hier aufgeführt (Abbildung 35). Man sieht, dass auch die größeren Cd-Werte weitgehend befriedigend von ihren Nachbarn wiedergegeben werden. Das erfordert allerdings ein hohes Maß an räumlicher Werteerhaltung, wie es in den beiden Untersuchungsgebieten nur für Cd im Oberboden in Aue zutrif.

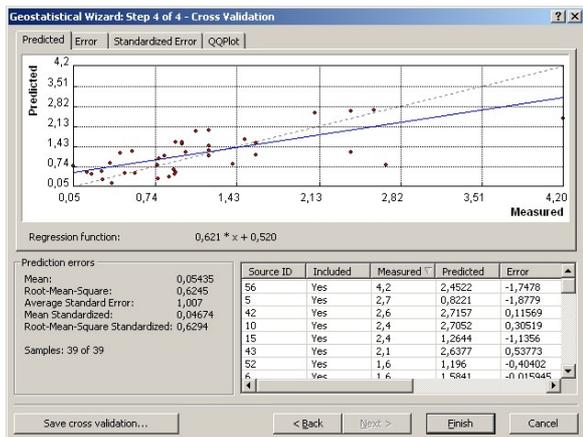


Abbildung 35: Cross Validation für Cd, A-Horizont in Aue, Region 1

3.1.3 Substratansatz – Cd-Gehalte im Oberboden von Annaberg

Der erweiterte Substratansatz soll am Beispiel der Cd-Gehalte im Oberboden von Annaberg gezeigt werden. Betrachtet man die insgesamt nicht sehr hohen Cd-Werte über der Lagerstättenkontur, ergibt sich folgendes Bild (Abbildung 36).

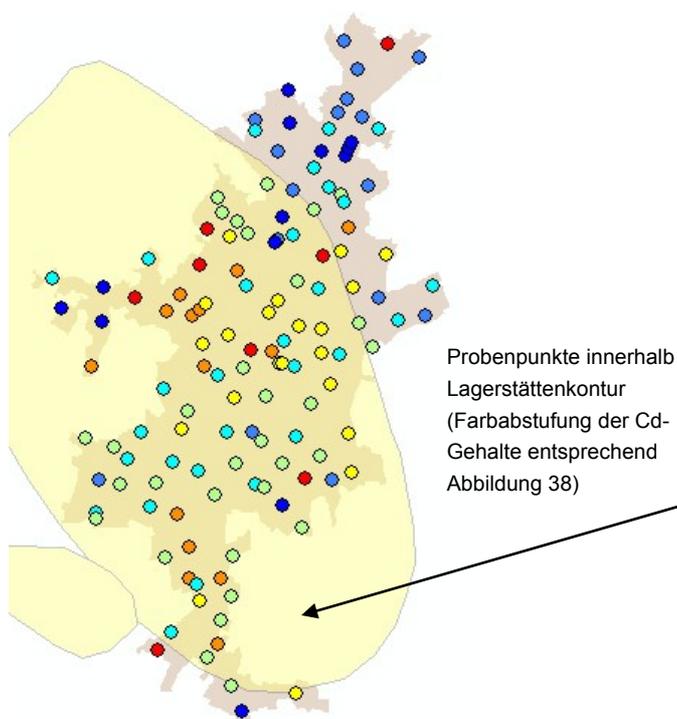


Abbildung 36: Cd-Gehalte über der Lagerstättenkontur

Um die Lagerstättenkontur wurde ein 100 m-Puffer gelegt und jedem Messpunkt wird das Merkmal „Lagerstätte – J/N“ in Abhängigkeit von seiner Lage zur erweiterten Lagerstättenkontur zugewiesen. Die erfolgte Pufferung lässt sich mit Kartierungsungenauigkeiten am Lagerstättenrand begründen. Der Vergleich der zwei entstehenden Teilstichproben ist aus Abbildung 37 und Tabelle 5 zu ersehen.

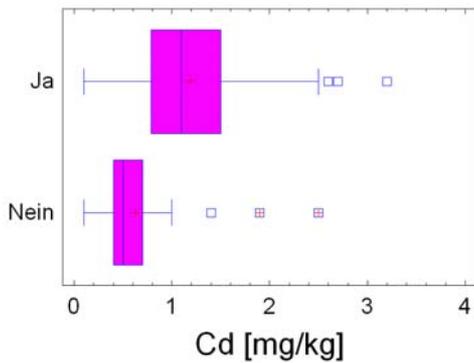


Abbildung 37: Zwei-Stichprobenvergleich für die Cd-Gehalte – Box-and-Whisker Plot

Tabelle 5: Statistische Maßzahlen zum Zwei-Stichprobenvergleich (Gehaltsangaben in mg/kg)

Maßzahl	in Lagerstätte	außerhalb Lagerstätte
Anzahl	103	30
Mittelwert	1,18	0,62
Standardabweichung	0,61	0,51

Die Unterschiede der Mittelwerte sind statistisch signifikant, sodass die gepufferte Lagerstättenkontur als Grundlage für die Teilung des Siedlungsgebiets in zwei homogene Raumeinheiten dient, um für Cd eine Berechnung analog Pb in Kap. 3.1 durchzuführen. Der wesentliche Unterschied zu Pb besteht darin, dass die Unterteilung des Siedlungsgebietes nicht nach flächennutzerischen Gesichtspunkten erfolgt, sondern nach den natürlichen geologischen Gegebenheiten, nämlich den lagerstättenbedingten Substratunterschieden.

Der Bereich innerhalb der Lagerstätte wurde mit Universal Kriging und Trend 2. Grades berechnet. Dabei soll der Trend die langwellige Veränderlichkeit über den gesamten Lagerstättenbereich aufnehmen. Der Bereich außerhalb der Lagerstätte wurde in Anbetracht der Messpunktzahl (< 70) mit Ordinary Kriging ohne Trend berechnet.

Das montierte Ergebnis aus den zwei Teilgebieten ist Abbildung 38 zu entnehmen. Aus dem Ergebnis ist folgendes zu erkennen:

- Die Einteilung in innerhalb/außerhalb der Lagerstätte widerspiegelt sich beim Schätzfehler deutlicher als bei der Vorhersage. Wahrscheinlich ist die Lagerstättenkontur in Wirklichkeit doch etwas komplizierter als sie in Abbildung 36 dargestellt wurde.
- Der maximale Schätzfehler befindet sich im Unterschied zu As (Kap. 2.2.2.6) und Pb (Kap. 3.1) nicht dort, wo die höchsten Vorhersagewerte sind.
- Beim Vergleich der Bereiche mit den maximalen Schätzwerten von As, Pb und Cd fällt auf, dass ihre Lage nicht deckungsgleich ist. As hat seine maximalen Werte in Frohnau, Cd im Sehmatal und Pb im Altstadtbereich. Einzelne lokale erhöhte Cd-Werte sind darüber hinaus über das gesamte Siedlungsgebiet verteilt, wobei ihre Absolutwerte gering ausfallen. Einzelne Klassenbreiten der Kartendarstellung in Abbildung 38 liegen daher durchaus im Bereich der analytischen Werteschwankungen (Analysefehler).

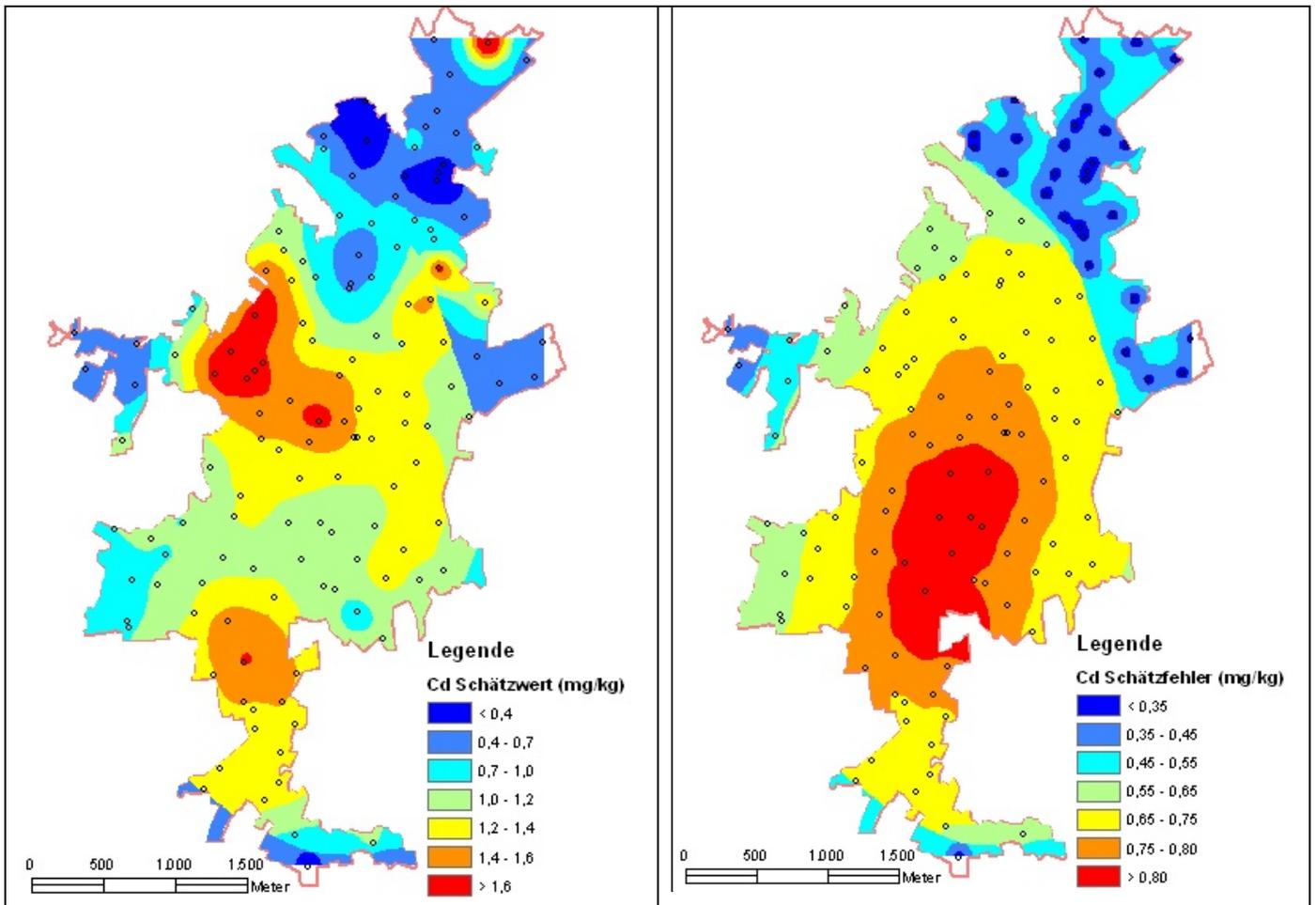


Abbildung 38: Annaberg - Cd-Gehalte in den A-Proben - Schätzung mit Substratansatz

3.1.4 Substratansatz – As-Gehalte in den A- und B-Proben von Annaberg mittels advangeo®

Entscheidet man sich für IDW oder Kriging als Interpolationsverfahren, so sind die Möglichkeiten beschränkt, Substratunterschiede zu berücksichtigen. Mittels der Software advangeo® können aber auch kompliziertere Substratunterschiede hinreichend gut in die Modellierung einbezogen werden. Das betrifft insbesondere linienförmige Strukturen wie z. B. an Mineralisationsgänge gebundene Eigenschaften.

Als Datengrundlage dienen diejenigen flächenhaft verbreiteten Daten, die die zu bewertende Fläche insgesamt charakterisieren und die die Höhe der Elementgehalte im Boden beeinflussen, wie

- Verbreitung und Formationen von Mineralgängen,
- Vorhandensein von anthropogenen Beimengungen in den Probensubstraten, z. B. von Hüttenschlacken,
- Flächennutzungen,
- DGM bzw. dessen Ableitungen zur Hangneigung und Exposition.

Die Kartendarstellungen der advangeo-Ergebnisse unter Einbeziehung der oben genannten Einflussfaktoren zeigen im Allgemeinen einen wesentlichen Einfluss der Mineralgänge auf die Verteilung der Elementgehalte (Abbildung 39). Auch dadurch kommt sehr häufig eine scharfe Flächentrennung zustande (Sprünge im Gehaltsniveau der Elemente im Boden), weil

- der gesamte Einflussbereich der Erzgänge (formal) auf insgesamt 300 m Breite festgelegt wurde; d. h., ab 150 m Abstand vom Gang verliert er seine Wirksamkeit auf die Höhe der Elementgehalte im Boden und
- die Flächennutzungen scharfe Grenzen aufweisen.

In diesen Fällen besitzen die kontinuierlich verteilten Daten wie Höhe oder Hangneigung einen geringeren Einfluss auf die Elementgehalte. Sind die Gehalte mehr kontinuierlich verteilt, dann sind die Einwirkungspotenziale entgegengesetzt.

Die höchsten Arsengehalte im Oberboden werden für Frohnau und das Sehmatal unterhalb Frohnau vorhergesagt, was den Interpolationsergebnissen entspricht. Für Arsen weisen die Proben der Unterböden großflächig höhere Gehalte auf als in den oberen Bereichen (A-Proben, meist 0-10 cm). Die Fläche mit den Gehalten der beiden untersten Gehaltsklassen (< 60 mg/kg As) ist in beiden Teufenbereichen ungefähr gleich.

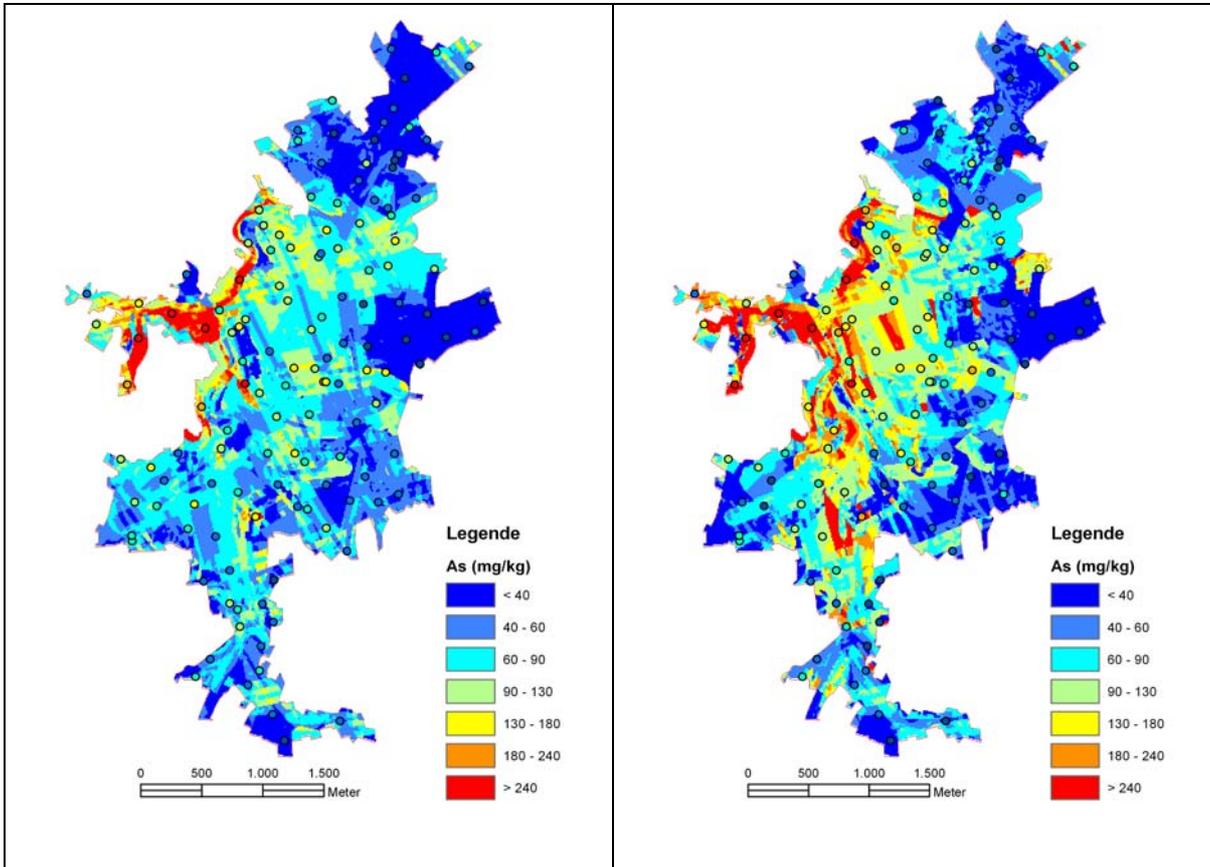


Abbildung 39: Schätzung der As-Gehalte in Oberböden (links) und Unterböden (rechts) von Annaberg mit advangeo®

Die Gegenüberstellung der modellierten (mit advangeo® vorhergesagten) und der gemessenen Gehalte von Arsen in den A-Proben (Abbildung 40) zeigt im Allgemeinen

- eine gute Wiederfindung der Messwerte; die As-Gehalte bis 100 mg/kg und größer 200 mg/kg werden sehr gut vorhergesagt, die zwischen 100 und 200 mg/kg zeigen zum Teil größere Abweichungen,
- keine deutliche Überschätzung der tiefen und Unterschätzung der hohen Gehalte, wie es bei Kriging und IDW fast immer in den Schätzwerten zu beobachten ist.

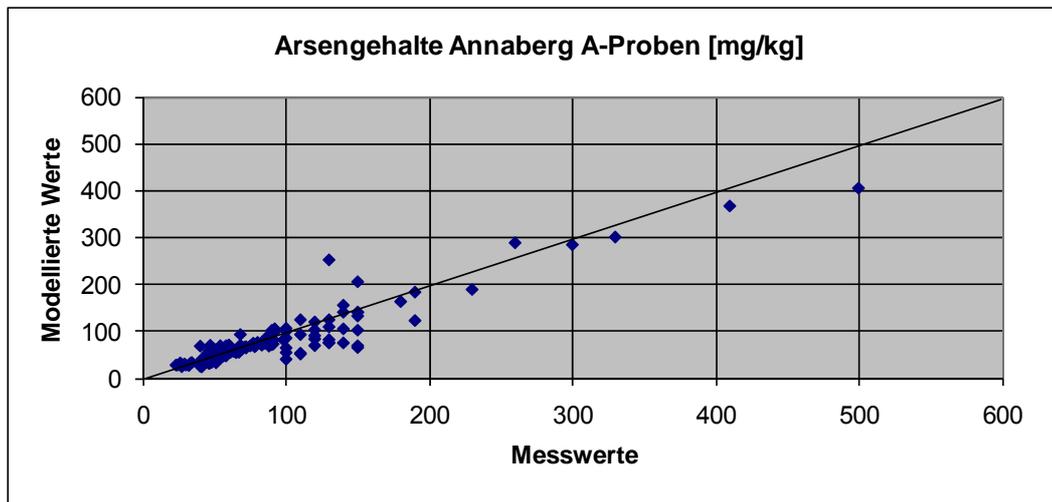


Abbildung 40: Gegenüberstellung von Mess- und Vorhersagewerten Annaberg, As im Oberboden

Ein messbarer Ausdruck der Vorhersagegüte wird durch die Ergebnisse der Kreuzvalidierung (Cross Validation) dargestellt. Weil diese Methode noch nicht in advangeo[®] implementiert ist, sind nur 20 von den insgesamt 133 Proben in die Berechnung einbezogen worden (bei der Auswahl der 20 Proben wurde darauf geachtet, dass alle Gehaltsbereiche vertreten sind) (Abbildung 41).

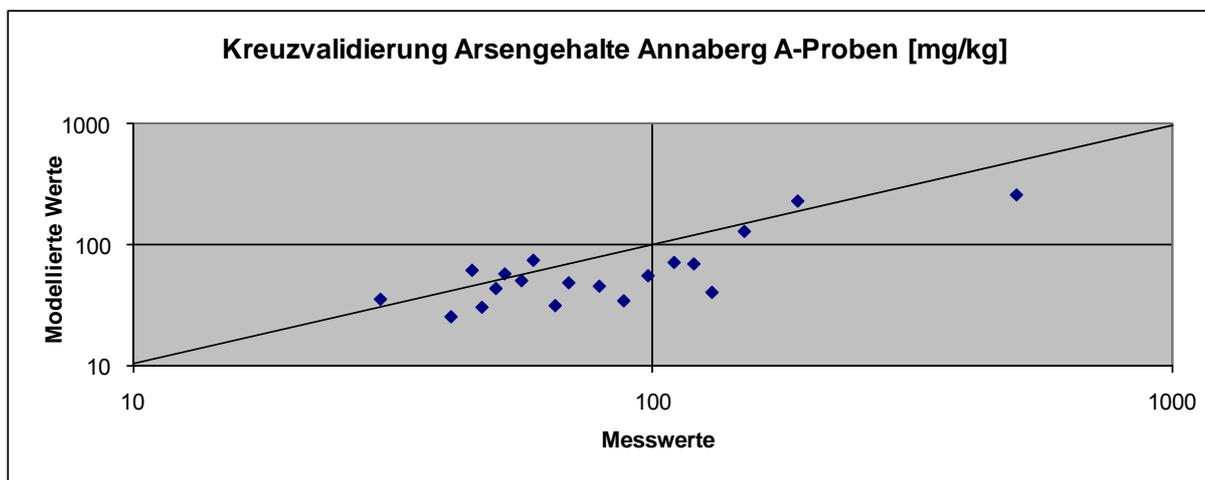


Abbildung 41: Ergebnisse der Kreuzvalidierung, 20 Proben, Annaberg, As im Oberboden

Es ist eine deutliche Abhängigkeit der Vorhersage- von den Messwerten zu erkennen. Allgemein werden die Messwerte etwas unterschätzt. Der Anstieg der Kurve ist eindeutig näher an 1 als bei den Kreuzvalidierungsergebnissen des Ordinary Krigings (OK) (Abbildung 14 bis Abbildung 16).

Die Probenpunkte, die auf den Mineralgängen bzw. in ihrer näheren Umgebung liegen, beeinflussen das Lernverhalten von advangeo[®] wesentlich (Abbildung 42). Dabei werden selbstverständlich auch die Unterschiede in der prinzipiellen Mineralführung der Gänge deutlich. So steigen die Arsengehalte an den Ausstrichbereichen der BiCoNi-, kb- und z-Gänge und erreichen ihr Maximum an deren Kreuzungsbereichen. Höhere Bleigehalte ergeben sich zwar auch an und in der Umgebung der BiCoNi-Gänge, der Verlauf der kb-Gänge hingegen bewirkt geringe Bleigehalte im Boden.

Für das „Durchläuferelement“ Arsen werden bei der Erweiterung der Punktdaten auf die Fläche immer genügend konkrete Probenahmeplätze für den Lernprozess vorhanden sein. Für Blei zeigt sich die Situation anders. Auch wenn das Blei (im Bleiglanz gebunden) generell im kb-Gang vorkommt, muss der Bleiglanz nicht unbedingt an allen Probenahmeplätzen vorhanden sein. Der Lernvorgang an Punkten in Gangnähe ergibt dann fehlende Bleigehalte, was sich beim Übertrag der

Ergebnisse auf die Fläche wiederum auf andere nicht beprobte gangnahe Bereiche auswirkt, sodass dort ebenfalls geringe Pb-Gehalte vorhersagt werden.

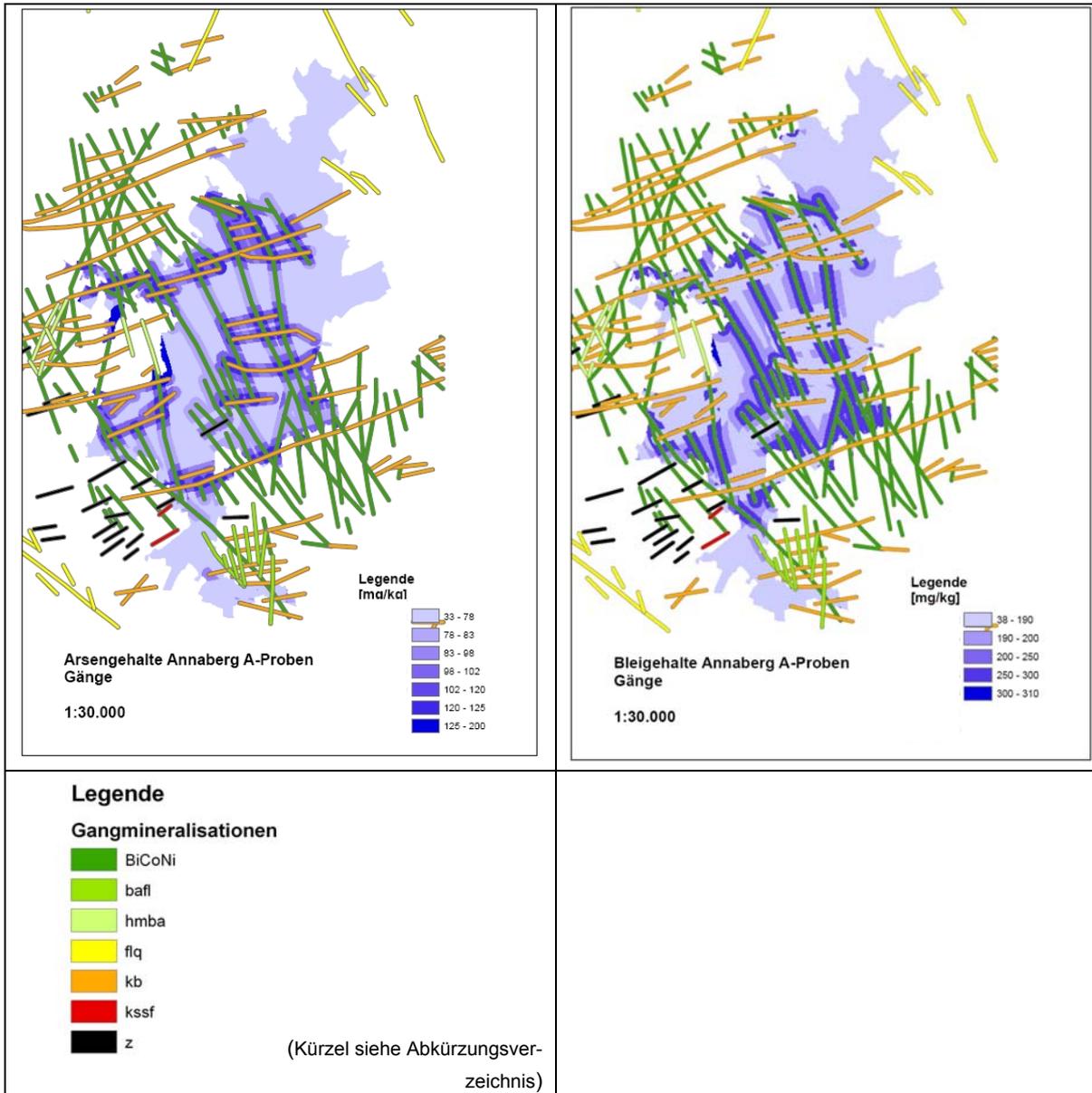


Abbildung 42: As- und Pb-Gehalte im Oberboden Annaberg in Abhängigkeit von den Mineralgängen (Schätzung mit advangeo®)

3.2 Probenverdichtung und Schätzungsverbesserung

Anhand eines Beispiels soll im Folgenden untersucht werden, wie sich eine Probenverdichtung in den beiden Ergebnisteilen Schätzwert und Schätzfehler ausdrückt. Die Arbeitshypothese lautet, dass insbesondere der Schätzfehler in der Tendenz kleiner wird. Zur Überprüfung, ob diese Hypothese in jedem Fall zutrifft, wurde das bereits bekannte Beispiel der As-Gehalte in im Oberboden von Annaberg hinzugezogen. In Kap. 2.1.2 wurde bereits ausgeführt, dass 101 Proben mit As-Daten vor Projektbeginn zur Verfügung standen. Im Projekt wurden 32 neue Proben genommen. Die Interpolationsergebnisse mit den 101 Proben und den 133 Proben zeigen Abbildung 43 und Abbildung 44.

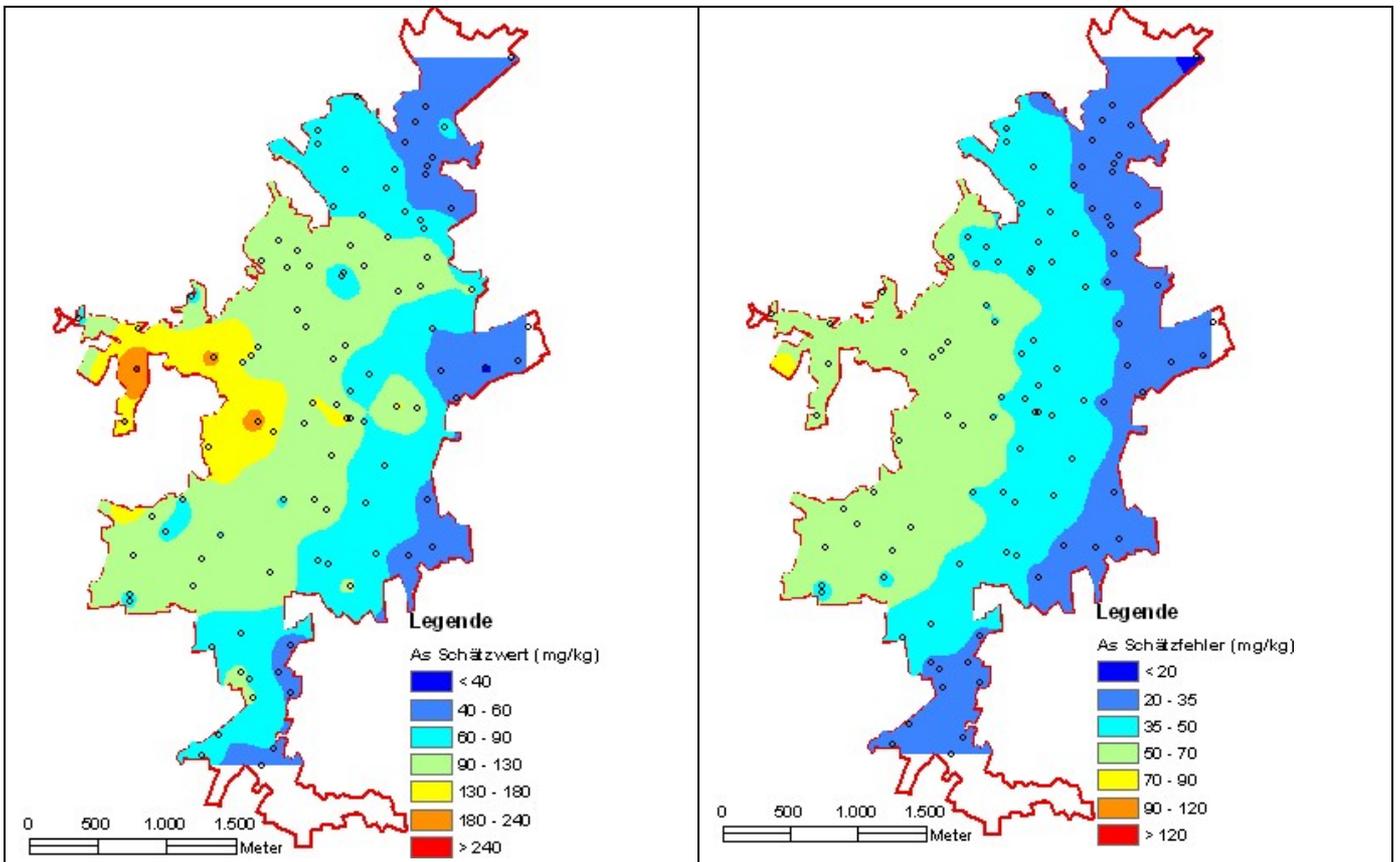


Abbildung 43: Annaberg - As-Gehalte in den A-Proben - Schätzung mit 101 Proben

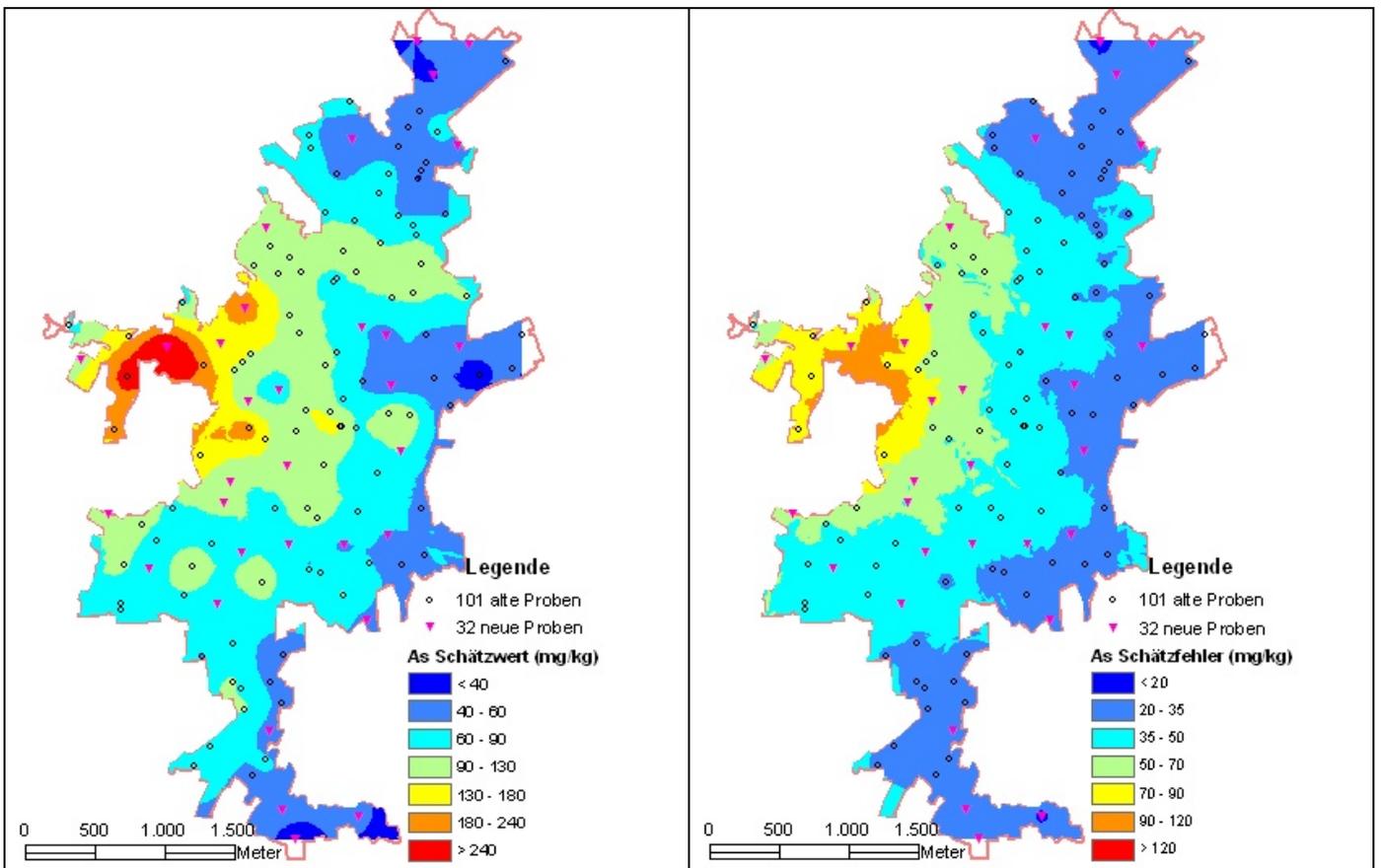


Abbildung 44: Annaberg - As-Gehalte in den A-Proben - Schätzung mit 133 Proben

Der Vergleich der beiden Schätzungen zeigt, dass sich auf dem größten Teil des Siedlungsgebietes das Schätzergebnis nicht wesentlich geändert hat, mit folgenden Ausnahmen:

- In der Ortslage Frohnau (Westteil des Siedlungsgebietes) haben sich sowohl der Schätzwert als auch der Schätzfehler signifikant vergrößert. Die hinzugewonnenen Informationen deuten darauf hin, dass die dort vorhandene As-Belastung mit den ursprünglichen 101 Proben unterschätzt wurde.
- In der südlich davon gelegenen Ortslage Buchholz haben sich Schätzwert und Schätzfehler verkleinert, wenn auch nur um geringe Beträge. Hier ist der gewünschte Effekt der Schätzfehlerverkleinerung eingetreten.

Fazit: Der Informationsgewinn von 32 neuen Proben gegenüber ursprünglich 101 Proben wirkt sich im Kriging-Modell noch nicht dahingehend aus, dass es zu einer flächendeckenden Verringerung des Schätzfehlers kommt. Dazu wären Probenverdichtungen in anderen Größenordnungen notwendig. Die Autoren schätzen ein, dass es für flächendeckend kleinere Schätzfehler zumindest zu einer Verdoppelung der Probenanzahl kommen muss, möglichst sogar zu einer Vervierfachung.

Die Probenverdichtung kann allerdings auch dazu führen, dass sich in Teilgebieten der Schätzfehler signifikant vergrößert. Dafür sind besonders Bereiche mit den höchsten Gehalten prädestiniert, wie im Beispiel As die Ortslage Frohnau. Die Natur des „Tiefpassfilters“ beim Kriging lässt einen Bereich erhöhter Messwerte erst dann im Schätzwert erscheinen, wenn er durch eine entsprechende Anzahl Proben belegt ist.

3.3 Validierung der Schätzung anhand von 10 neuen Proben

3.3.1 Auswahl der Probenahmepunkte

Die Zielstellung für die 10 zusätzlichen Proben bestand in der Überprüfung der in der ersten Auswertungsetappe für diese Probenpunkte prognostizierten/abgeschätzten Gehalte. Im Ergebnis der Zusatzbeprobung soll eine bessere Bewertung der methodenbedingten Unterschiede (methodische Ansätze und Bildung der HRE sowie Interpolationsverfahren) möglich sein. Außerdem wird hierin eine Alternative zu Cross Validation gesehen.

Für die Validierungsuntersuchungen wurde das Siedlungsgebiet Annaberg ausgewählt. Die für die Validierungsuntersuchungen vorgesehenen Flächen zur Probenahme zeigen im Schätzergebnis

- große Variabilität der Gehalte eines oder mehrerer Elemente ohne derzeit erkennbaren Grund bei UK,
- hohe Schätzvarianz bei UK,
- lokal abweichende Werte bei IDW,
- Indikationen hoher/niedriger Gehalte aus der Schätzung mit advangeo[®] (z. B. Gangverläufe) ohne Beleg durch Probenpunkte.

In Anbetracht der auf 10 begrenzten zusätzlichen Probenahmepunkte erfolgte eine Konzentration auf wenige Gebiete (Abbildung 45). Hier waren zum einen auf der Basis des Kriging flächenhaft erhöhte Gehalte an Pb nachgewiesen worden, die lokal sehr stark schwankten. Zum anderen wurden einige der auf Basis advangeo[®] ausgewiesenen Flächen mit extrem niedrigen Werten bzw. extrem hohen Werten an As mit Proben besetzt. Des Weiteren dienten die Probenahmen auch der Überprüfung, ob sich die Gangstrukturen in den modellierten Gehalten an As, Pb und Cd in den Proben widerspiegeln oder nicht.

Man kann davon ausgehen, dass die vorgeschlagenen neuen Punkte neben den erwarteten Aussagen für ihr eigentliches Ziel ebenso noch wertvolle Aussagen für die anderen chemischen Parameter liefern werden, so z. B. über die Pb-Verteilung im Umfeld der Altstadt. Drei der Proben aus der Validierungsuntersuchung lagen in Grünanlagen, drei auf Gartengrünflächen und vier auf Brachflächen.

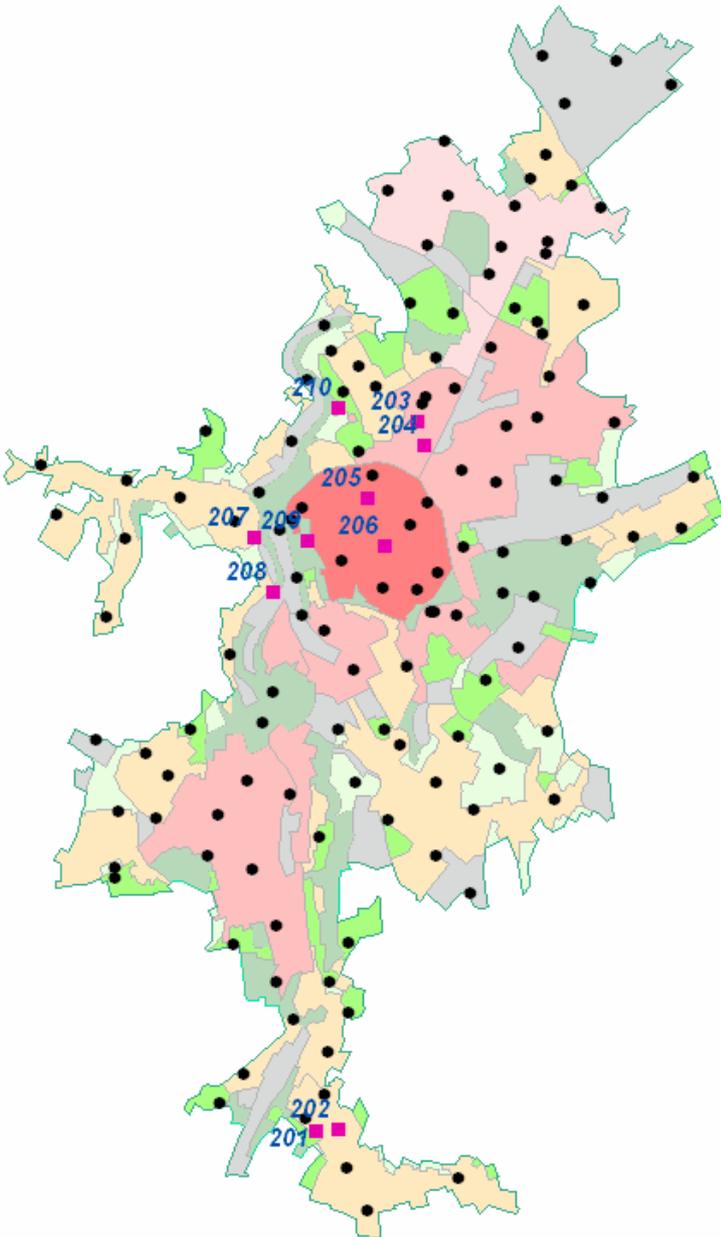


Abbildung 45: Probenahmepunkte (■) für die Validierungsuntersuchungen

3.3.2 Überprüfung der prognostizierten Gehalte

3.3.2.1 Allgemeines

Die folgenden Kapitel dienen der Bewertung der Analysendaten der Zusatzproben in Annaberg-Buchholz. Zuerst erfolgt eine Bewertung mit Hilfe der geostatistischen Modelle des Kapitels 2.2.2.4. Danach wird geprüft, wie die Zusatzdaten das advangeo-Modell verändern und insbesondere, an welchen Stellen eine Modellverbesserung zu verzeichnen ist.

Eine rein verbale Beurteilung der Zusatzprobenwerte anhand der in Kapitel 3.3.1 gestellten Ziele lässt folgende Aussagen zu:

- Es haben sich die von advangeo® auf Grund der Gangstrukturen prognostizierten erhöhten As-Gehalte im Verhältnis zur unmittelbaren Umgebung bestätigt.
- Es haben sich die erhöhten Pb-Gehalte im Altstadtbereich bestätigt.
- Die gemessenen Gehalte weisen erhöhte Schwankungen auf engem Raum für As und Pb auf, wie von den Modellen vorausgesagt.

- Die prognostizierten erhöhten Werte ließen sich nur in einem Punkt nachweisen.
- Der Bereich mit deutlich geringeren As-Gehalten gegenüber seiner Umgebung, wie von advangeo® prognostiziert, konnte durch die einzelne Überprüfungsprobe nicht belegt werden.

3.3.2.2 Prüfung mit Hilfe der geostatistischen Modelle

Die erhaltenen neuen Messwerte wurden darauf geprüft, ob sie innerhalb des Konfidenzintervalls (Formel 2.1, S. 23) liegen. Die erwähnte Besonderheit der Auswahl der Probenahmepunkte ließ erwarten, dass die obere Konfidenzintervallgrenze eher überschritten wird als die untere unterschritten.

Als erstes wurden in den 10 Probenahmepunkten die Schätzwerte und die Schätzfehler für die Merkmale As, Cd, Pb und U (Ober- und Unterboden) sowie Cr (nur Oberboden) aus den vorhandenen Modellen entnommen. Als Grundlage dienten die Modellierungsergebnisse der Kapitel 2.2.2.5, 2.2.2.6, 3.1.1, 3.1.3. Weitere Grundlagen sind Anhang 1 zu entnehmen. Es wurde für alle 10 Fälle der Ausdruck

$$\frac{(\text{Messwert} - \text{Schätzwert})/\text{Schätzfehler}}{\quad} \quad (3.2)$$

(„normierter Wert“) gebildet und bewertet. Hervorzuheben ist, dass jeder Probenahmepunkt seine eigenen Werte für Schätzwert und Schätzfehler aufweist, abhängig von Lage, Merkmal und Teufenlage. Ist der normierte Wert betragsmäßig nicht größer als 2, so kann man davon ausgehen, dass er in einem 90 %-Konfidenzintervall liegt. Liegen andererseits ca. 10 % der Messwerte außerhalb des Konfidenzintervalls, so geschieht dies noch im Rahmen der statistischen Unsicherheit, ohne dass man das geostatistische Modell verwerfen müsste. In Tabelle 6 bis Tabelle 10 sind die Ergebnisse der Auswertung aufgeführt. Die rot markierten Zeilen zeigen die Überschreitung der oberen Grenze des Konfidenzintervalls an. Eine Unterschreitung der unteren Konfidenzintervallgrenze war in keinem Fall zu verzeichnen.

Tabelle 6: Bewertung der As-Gehalte in den Proben der 10 zusätzlichen Probenahmepunkte

Punkt-Nr.	A-Proben (Oberboden)				B-Proben (Unterboden)			
	As in mg/kg			normierter Wert	As in mg/kg			normierter Wert
	Messwert	Vorhersagewert	Standardabweichung		Messwert	Vorhersagewert	Standardabweichung	
201	97	58,2	27,8	1,40	63	56,4	28,2	0,23
202	89	57,5	28,1	1,12	99	54,8	28,0	1,58
203	220	80,0	49,0	2,86	160	122,5	64,6	0,58
204	120	81,4	49,4	0,78	180	109,9	64,8	1,08
205	60	106,5	55,5	-0,84	120	118,2	74,1	0,02
206	480	101,2	49,4	7,66	2000	127,3	68,1	27,50
207	450	177,3	84,9	3,21	180	198,2	83,9	-0,22
208	87	157,9	80,8	-0,88	42	161,0	84,4	-1,41
209	120	92,3	68,2	0,41	140	128,8	77,3	0,14
210	110	115,2	53,2	-0,10	110	166,7	74,6	-0,76

Tabelle 7: Bewertung der Cd-Gehalte in den Proben der 10 zusätzlichen Probenahmepunkte

A-Proben (Oberboden)					B-Proben (Unterboden)			
Punkt-Nr.	Cd in mg/kg			normierter Wert	Cd in mg/kg			normierter Wert
	Messwert	Vorher-sagewert	Standard-abweichung		Messwert	Vorher-sagewert	Standard-abweichung	
201	0,93	1,206	0,688	-0,40	0,8	1,16	0,59	-0,65
202	2,10	1,171	0,687	1,35	1,8	1,17	0,60	1,06
203	1,70	0,839	0,712	1,21	1,2	1,13	0,54	0,12
204	1,30	0,980	0,732	0,44	1,7	1,18	0,59	0,88
205	1,60	1,380	0,759	0,29	2,5	1,44	0,68	1,56
206	2,40	1,514	0,779	1,14	2,0	1,44	0,70	0,80
207	1,70	1,739	0,673	-0,06	1,6	1,51	0,66	0,13
208	1,40	1,403	0,749	0,00	0,8	1,54	0,67	-1,10
209	1,70	1,591	0,745	0,15	1,3	1,60	0,70	-0,43
210	1,70	1,419	0,669	0,42	1,2	1,22	0,62	-0,04

Tabelle 8: Bewertung der Pb-Gehalte in den Proben der 10 zusätzlichen Probenahmepunkte

A-Proben (Oberboden)					B-Proben (Unterboden)			
Punkt-Nr.	Pb in mg/kg			normierter Wert	Pb in mg/kg			normierter Wert
	Messwert	Vorher-sagewert	Standard-abweichung		Messwert	Vorher-sagewert	Standard-abweichung	
201	120	140,6	77,6	-0,26	110	110,0	87,0	0,00
202	150	134,1	75,5	0,21	150	109,7	86,3	0,47
203	240	174,0	109,6	0,60	140	237,4	182,2	-0,53
204	280	176,6	110,8	0,93	290	228,1	175,3	0,35
205	720	392,4	284,0	1,15	1900	356,4	260,1	5,94
206	620	391,4	283,9	0,81	1100	345,7	259,2	2,91
207	240	235,8	103,4	0,04	290	243,8	173,5	0,27
208	100	282,0	112,2	-1,62	72	260,0	166,2	-1,13
209	1300	246,5	114,3	9,21	340	249,1	178,2	0,51
210	99	234,9	107,9	-1,26	87	303,6	205,9	-1,05

Tabelle 9: Bewertung der U-Gehalte in den Proben der 10 zusätzlichen Probenahmepunkte

A-Proben (Oberboden)					B-Proben (Unterboden)			
Punkt-Nr.	U in mg/kg			normierter Wert	U in mg/kg			normierter Wert
	Messwert	Vorher-sagewert	Standard-abweichung		Messwert	Vorher-sagewert	Standard-abweichung	
201	1,5	2,42	1,13	-0,81	1,5	2,54	3,40	-0,31
202	2,4	2,34	1,08	0,05	2,4	2,52	3,38	-0,04
203	5,7	3,13	1,43	1,79	5,3	5,13	3,37	0,05
204	4,0	2,88	1,36	0,82	5,6	4,76	3,34	0,25
205	1,9	3,62	1,52	-1,13	3,1	5,48	3,32	-0,72
206	11,0	3,05	1,41	5,66	55,0	4,76	3,32	15,15
207	3,7	4,57	1,88	-0,46	3,4	6,53	3,30	-0,95
208	3,1	3,67	1,73	-0,33	2,5	5,33	3,30	-0,86
209	3,0	3,58	1,58	-0,37	3,3	5,39	3,26	-0,64
210	2,6	5,06	1,71	-1,44	2,8	7,51	3,37	-1,40

Tabelle 10: Bewertung der Cr-Gehalte im Oberboden der 10 zusätzlichen Probenahmepunkte

Punkt-Nr.	Cr in mg/kg			normierter Wert
	Messwert	Vorhersagewert	Standardabweichung	
201	30	58,8	18,2	-1,58
202	33	57,0	18,4	-1,30
203	45	53,0	18,3	-0,44
204	58	54,9	18,5	0,17
205	37	54,8	18,4	-0,96
206	48	55,5	18,4	-0,41
207	44	56,0	18,0	-0,66
208	32	56,4	18,4	-1,33
209	36	51,2	18,3	-0,83
210	37	60,0	18,1	-1,27

Eine Zusammenstellung der wichtigsten Werte ist in Tabelle 11 aufgeführt.

In der Tabelle 11 sind alle die Fälle gelb markiert, bei denen eine Überschreitung der oberen Konfidenzintervallgrenze durch den angetroffenen Messwert zu verzeichnen ist.

Probenahmepunktbezogene Auswertung: In den Punkten 203, 205, 207 und 209 ist jeweils ein Merkmal im Ober- bzw. Unterboden von der Überschreitung betroffen. Dies ist im Sinne der statistischen Unsicherheit tolerierbar. Nicht tolerierbar ist die Überschreitung im Probenahmepunkt 206 in fünf verschiedenen Parametern. Dieser Punkt ist eher als singulär anzusehen. Seine Werte sind damit nicht repräsentativ für die beprobte Raumeinheit; ein Einbezug zur Berechnung von Merkmalsoberflächen im Sinn der Erstellung von Bodenbelastungskarten in Siedlungsgebieten sollte daher nicht erfolgen.

Merkmalsbezogene Auswertung: Zieht man den o. g. Fakt in Betracht, kann man feststellen, dass die Werte der stichprobenhaften Überprüfung für Cd, U und Cr (nur Oberboden) konform mit dem gewählten geostatistischen Modell sind. Für Pb und speziell für As ist das gewählte geostatistische Modell zu hinterfragen. Während die Überschreitung der Konfidenzgrenzen in einem Probenahmepunkt noch tolerierbar ist, muss man das bei jeweils zwei Überschreitungen bereits infrage stellen. Bezüglich der Pb-Überschreitung in Punkt 209 ist in dieser Hinsicht allerdings folgende Einschränkung zu machen: Der Punkt liegt nur ca. 30 m außerhalb der definierten Altstadtkontur. Rechnet man ihn zur Altstadt zugehörig, so passt er sehr gut in das Modell mit den erhöhten Pb-Gehalten im Altstadtbereich.

Tabelle 11: Übersicht über die probenahmepunktbezogene und horizontbezogene Überschreitung der oberen Grenze des Konfidenzintervalls mit Hilfe der normierten Werte

Probenpunkte	As	Cd	Pb	U	Cr
201					
202					
203	2,86				
204					
205			5,94		

Probenpunkte	As	Cd	Pb	U	Cr
206	7,66			5,66	
	27,5		2,91	15,15	
207	3,21				
208					
209			9,21		
210					

Modifizierung des As-Modells: Bezüglich der zwei As-Überschreitungen im Oberboden (Punkte 203 und 207) sind erklärende Feststellungen wie für Pb nicht machbar. Das Modell für die Schätzung der As-Gehalte im Oberboden wurde deshalb in Kenntnis der Ergebnisse der Validierungsuntersuchung folgendermaßen modifiziert: Die Ortslage Frohnau wurde als Zentrum des Lagerstättenbereichs und Hauptort der bergbaulichen Aktivitäten vom Rest des Siedlungsgebietes Annaberg abgetrennt. Die Trennung erfolgte entlang des Verlaufs der Sehma. Diese Vorgehensweise entspricht der gesonderten Behandlung der Altstadt bezüglich Pb (raumanalytischer Ansatz). Für den Frohnauer Teil wurde Ordinary Kriging ohne Trend angesetzt, während für den Rest Universal Kriging mit Trend 2. Grades zum Einsatz kam. Die Berechnung erfolgte unter Ausschluss der 10 neuen Proben. Das Ergebnis ist Abbildung 46 zu entnehmen.

Ein Vergleich mit Abbildung 20 lässt die wesentlichen Unterschiede im Bereich Frohnau erkennen. In den anderen Bereichen hat sich das Modell nur marginal verändert. In Frohnau hat sich insbesondere der Schätzfehler wesentlich erhöht. Mit dieser modifizierten Herangehensweise ist gleichzeitig der beobachteten bisherigen Unterschätzung der As-Gehalte in Frohnau aus Kap. 3.2 Rechnung getragen worden.

Mit dem so geänderten Modell wurde die beschriebene Bewertung der 10 Zusatzproben erneut durchgeführt (Tabelle 12).

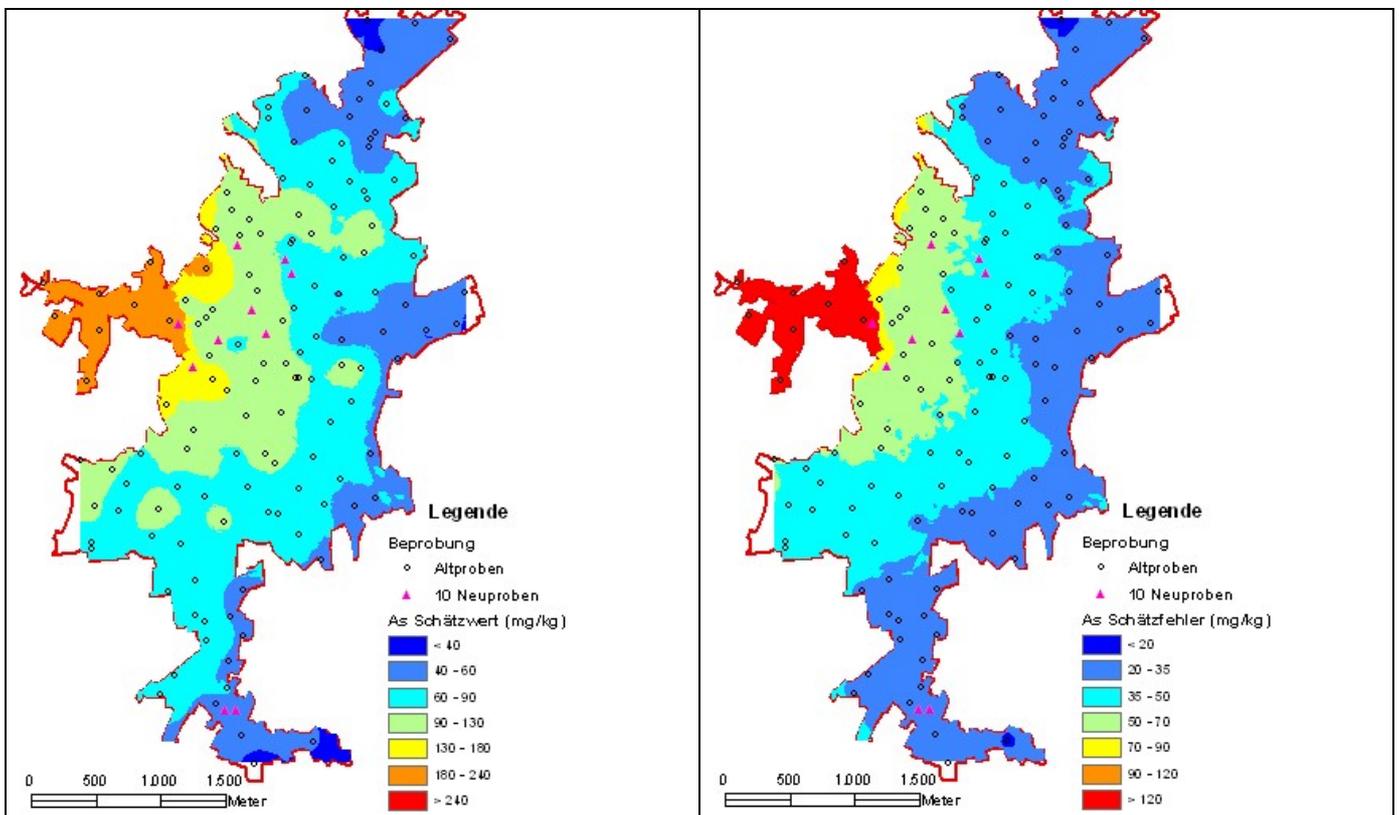


Tabelle 12: Bewertung der As-Gehalte im Oberboden der 10 zusätzlichen Probenahmepunkte; raumanalytischer Ansatz

Punkt-Nr.	As in mg/kg			normierter Wert
	Messwert	Vorhersagewert	Standardabweichung	
201	97	56,7	27,0	1,49
202	89	55,5	26,9	1,25
203	220	84,8	47,0	2,88
204	120	85,0	45,8	0,76
205	60	105,5	52,0	-0,88
206	480	102,6	49,2	7,67
207	450	224,1	209,2	1,08
208	87	138,4	66,5	-0,77
209	120	99,4	59,4	0,35
210	110	115,7	56,1	-0,10

Der Tabelle 12 ist zu entnehmen, dass das modifizierte Modell den As-Wert der oberen Probe aus Punkt 207 im Konfidenzintervall einschließt. Der Punkt 203 bleibt dagegen weiterhin auffällig. Diese Auffälligkeit wird der statistischen Unsicherheit zugeschrieben. Punkt 206 wurde bereits aus den oben beschriebenen Gründen als singulärer Punkt erkannt. Damit beschreibt das modifizierte Modell die As-Werte der oberen 10 Zusatzproben hinreichend.

3.3.2.3 Prüfung mit Hilfe von advangeo®

Werden bei sonst gleichen Bedingungen die 10 zusätzlichen Probenahmestellen ins advangeo® integriert, dann ergeben sich folgende Bilder der Elementverteilungen in den jeweils beiden Probenteufen; als Beispiel werden die advangeo-Vorhersageergebnisse für Arsen (Abbildung 47) und Blei (Abbildung 50) gezeigt.

Durch die neu hinzugekommenen Probenahmepunkte werden neue Flächen in den Lernvorgang einbezogen, die sich aber bei der Anwendung des Lernergebnisses nicht nur dort, sondern auch in Flächen ähnlicher Merkmalskombination außerhalb der Probenahmepunkte auswirken. So zum Beispiel bewirken die gemessenen erhöhten As-Gehalte am Probenahmepunkt 203, einem Bereich, wo advangeo® im Umfeld der BiCoNi-Gangzüge erhöhte As-Gehalte vorhergesagt hatte (Abbildung 47, oben links), dass dieser Gangzug im Vorhersagebild mit den neuen Punkten noch deutlicher hervortritt (Abbildung 47, oben rechts). Zusätzlich wird aber bewirkt, daß für die NE-SW-verlaufenden kb-Gangzüge in diesem nördlichen, aber auch im mittleren Siedlungsbereich bis hin zur östlichen Siedlungsgrenze ebenfalls deutlich höhere As-Gehalte prognostiziert werden.

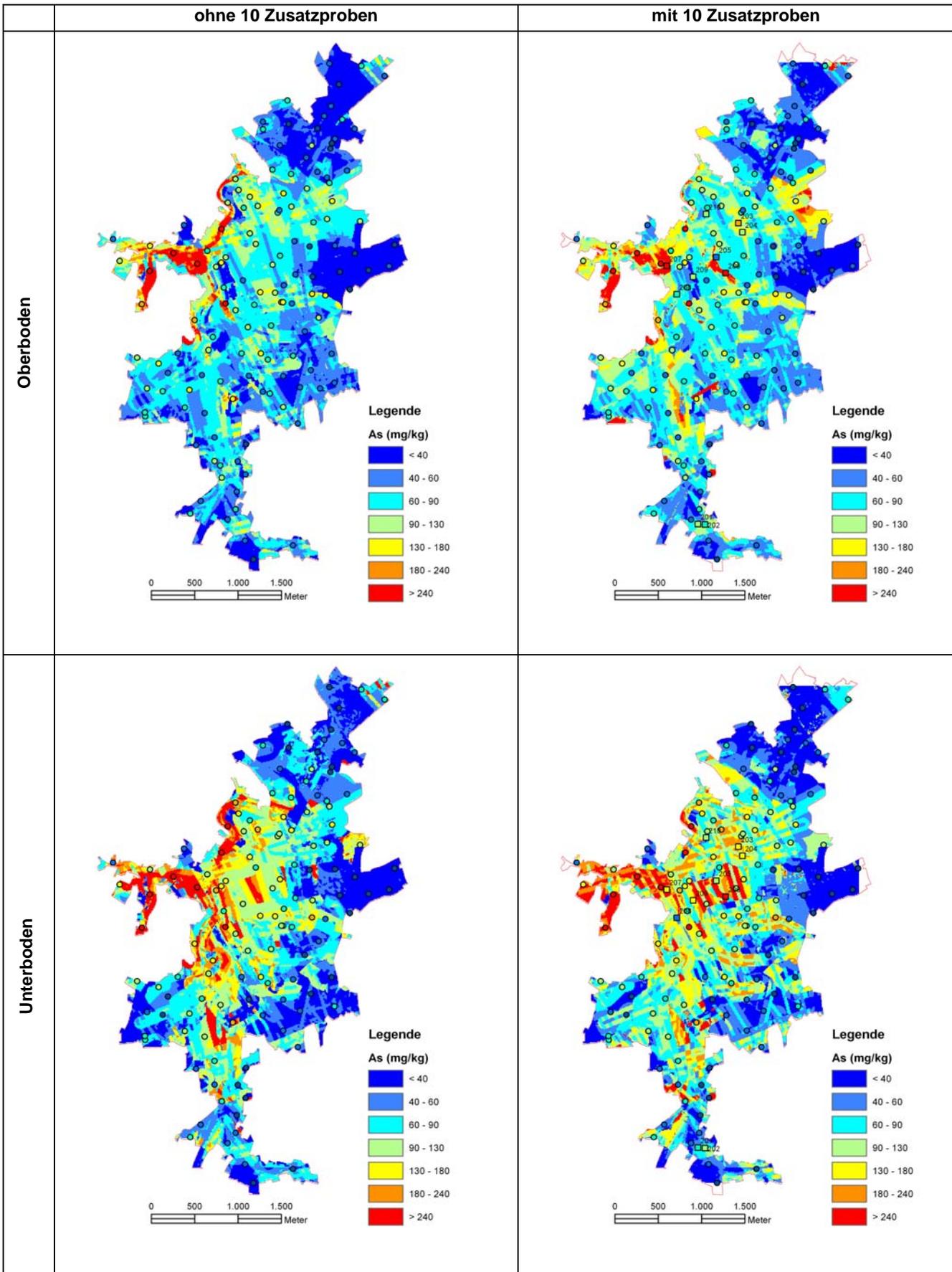


Abbildung 47: As-Gehalte im Ober- und Unterboden des Gebiets Annaberg-Buchholz ohne und mit Einbezug der 10 Zusatzproben

Die x-y-Diagramme mit den Mess- und Vorhersagewerten (am Probenahmepunkt) erlauben eine gewisse Genauigkeitsbeurteilung für die Vorhersageergebnisse (Abbildung 48).

Die an den Probenahmepunkten mit advangeo® modellierten Gehalte liegen bei der Berechnung mit den 10 zusätzlichen Proben (in Summe 143 Proben) deutlich näher an der 1:1-Gerade als bei der Berechnung der Grundkarte (133 Proben) (Abbildung 48 und Tabelle 15).

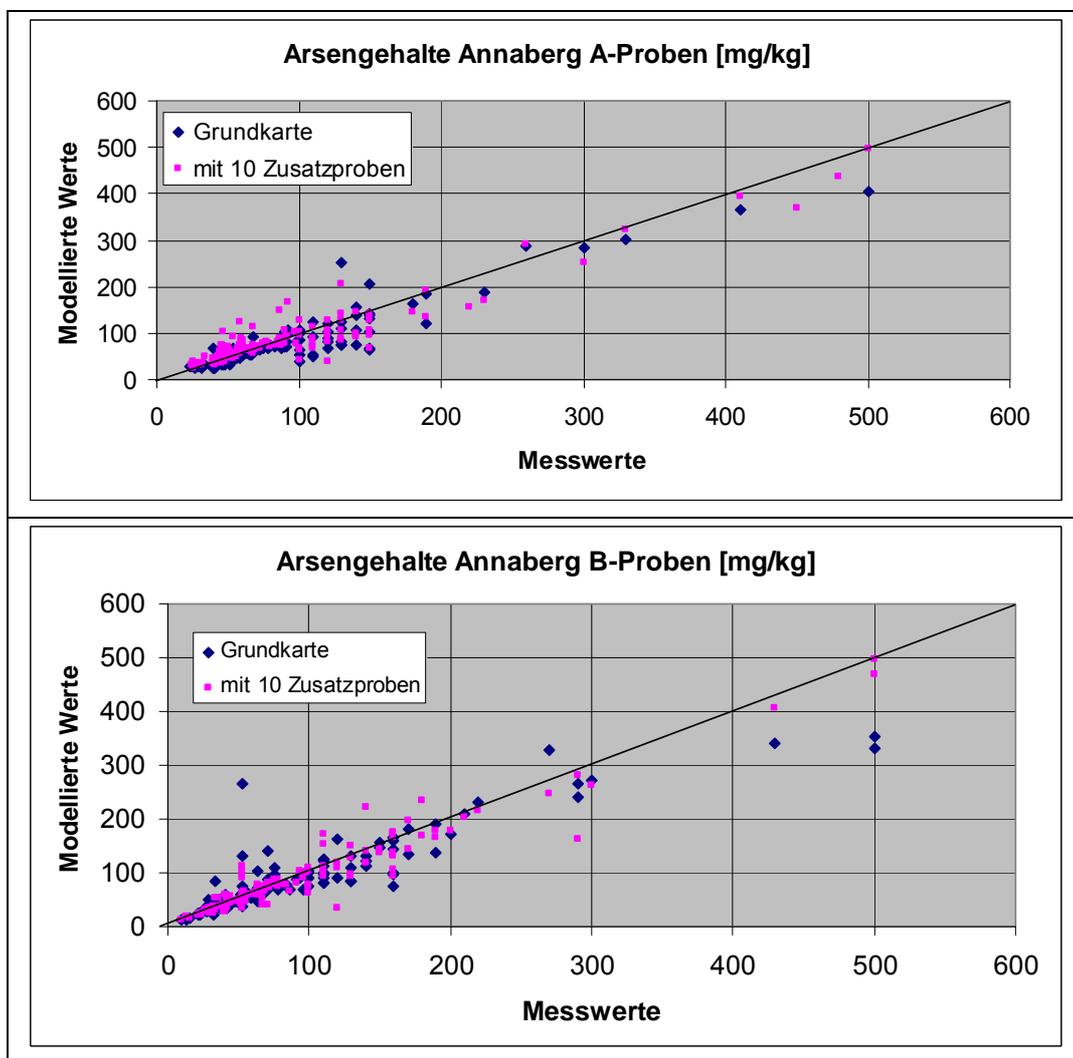


Abbildung 48: Gegenüberstellung von Mess- und modellierten As-Werten Annaberg-Buchholz

Der Ausdruck

$$\frac{(\text{modellierter Wert} - \text{Messwert})}{\text{Messwert}}$$

kann als auf den Messwert normierter Abstand des modellierten Wertes von der 1:1-Geraden bezeichnet werden. Die arithmetischen Mittelwerte dieser Ausdrücke für As, Cd und Pb sind in Tabelle 13 zusammengestellt.

Tabelle 13: Arithmetische Mittelwerte aus (modellierter Wert – Messwert)/Messwert

Element	Probe	Genauigkeitsmaß	
		Grundkarte Mittel über 133 Proben	mit 10 Zusatzproben Mittel über 143 Proben
As	A	-0,079	+0,028
	B	+0,046	+0,007
Cd	A	+0,091	+0,050
	B	-0,011	-0,005
Pb	A	+0,050	+0,030
	B	+0,034	+0,049

Offensichtlich liegen für den Fall des As im Stadtboden für advangeo® so viel Eingangsinformationen vor, dass mit der Hinzunahme der 10 zusätzlichen Proben advangeo® für die meisten der Probenahmepunkte ein verbessertes Lernergebnis erzielt, was in einer genaueren Prognose mündet. Dieses trifft auch für Cd zu (Abbildung 49), nicht aber in gleichem Maße für Pb (Abbildung 51).

Die Höhe und die Verteilung der Bleigehalte in den B-Proben im Stadtboden von Annaberg sind demnach „Gesetzmäßigkeiten“ bzw. Ursachen unterworfen, die so durch die vorhandenen Eingangsdaten (Gänge, Lagerstättenbereich, Proben mit Schlacke, Flächennutzung, DGM) nicht genügend beschrieben werden können.

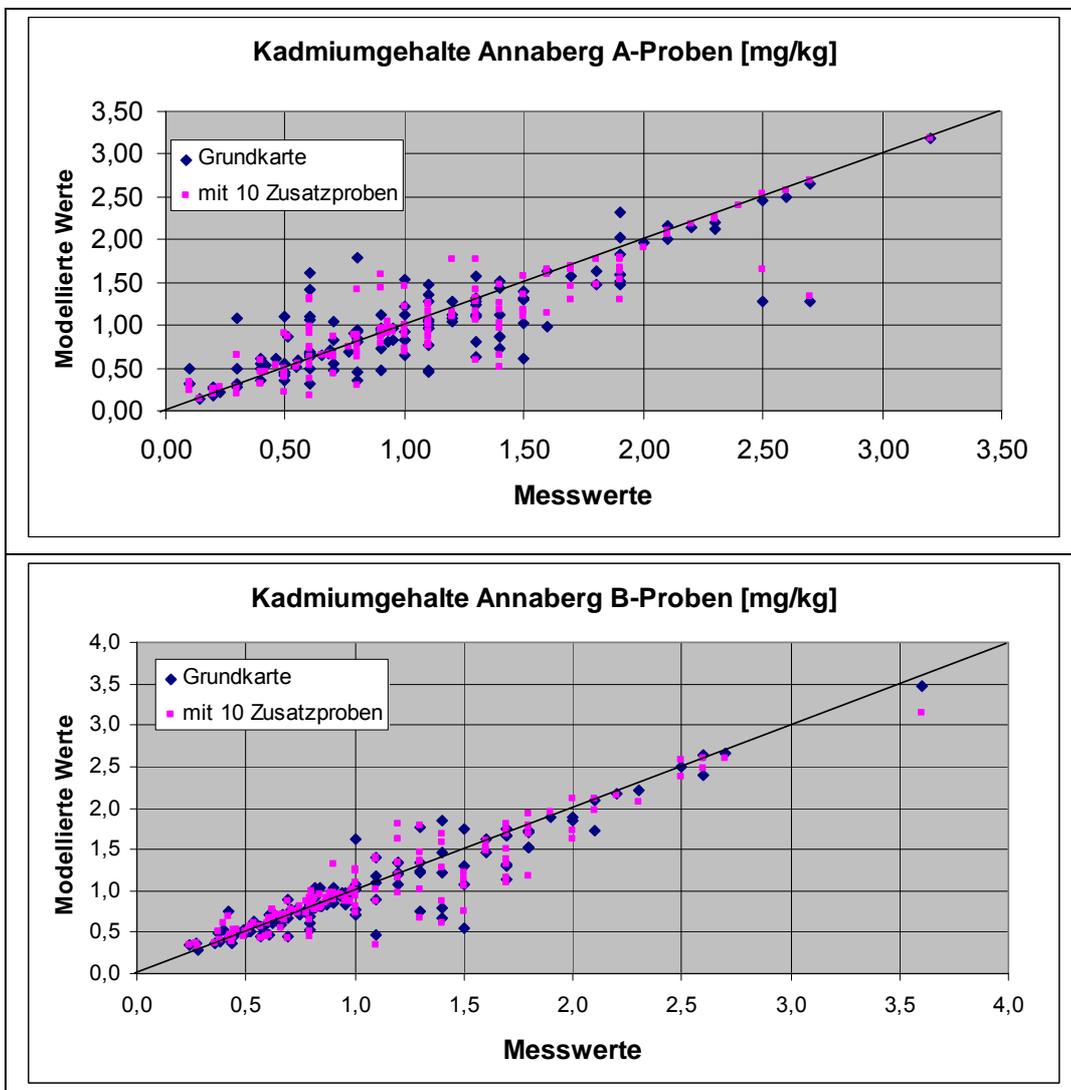


Abbildung 49: Gegenüberstellung von Mess- und modellierten Cd-Werten Annaberg-Buchholz

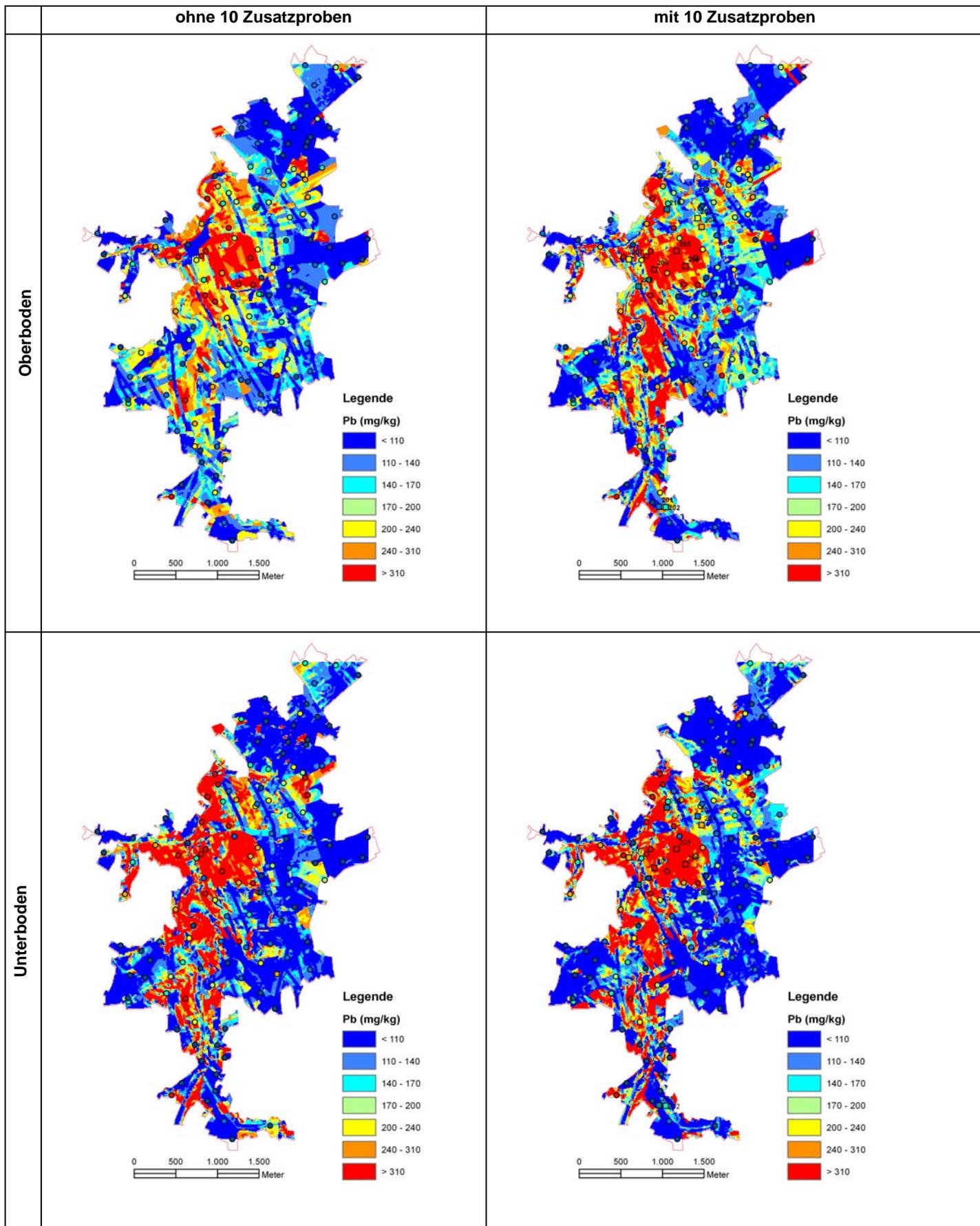


Abbildung 50: Pb-Gehalte im Ober- und Unterboden des Gebiets Annaberg-Buchholz ohne und mit Einbezug der 10 Zusatzproben

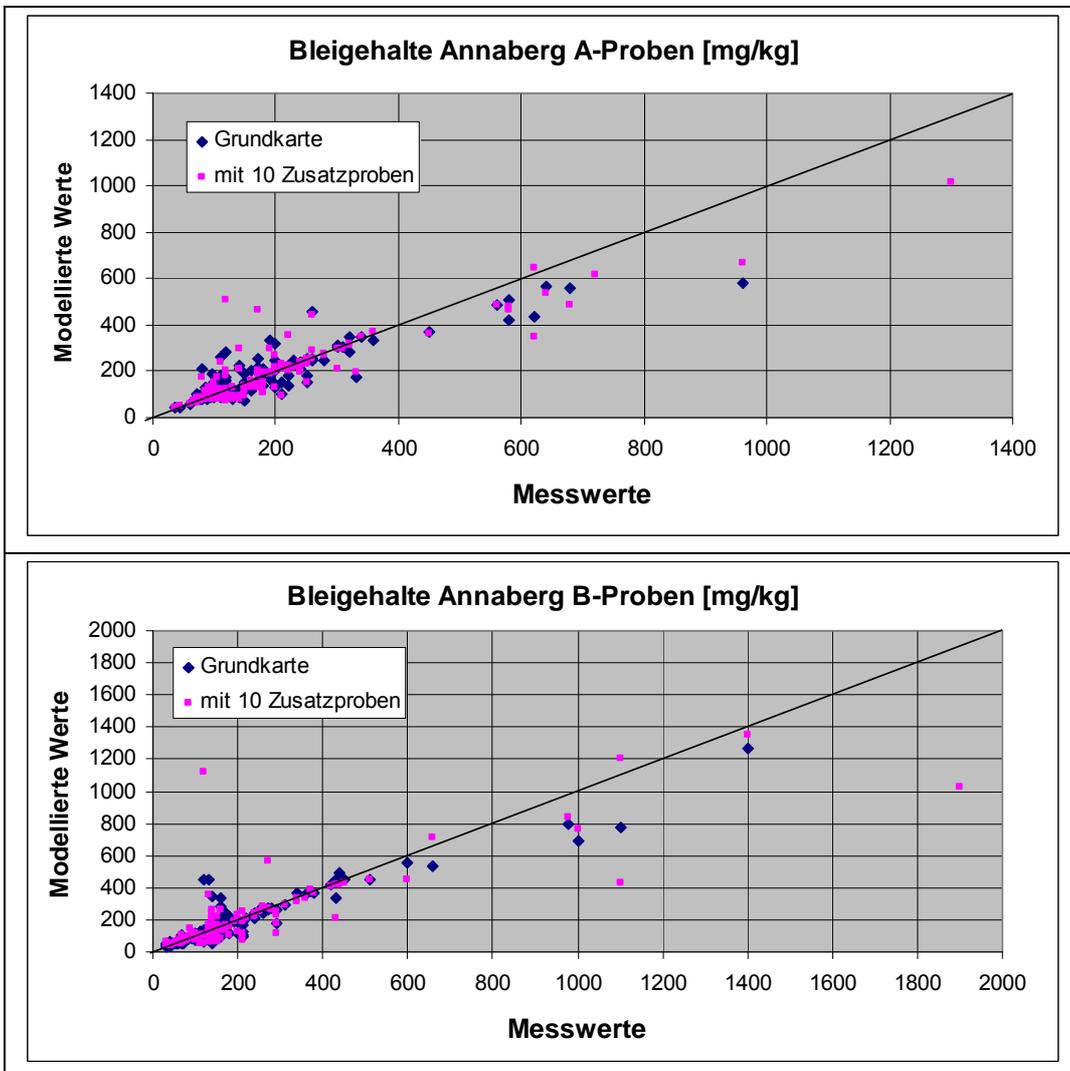


Abbildung 51: Gegenüberstellung von Mess- und modellierten Pb-Werten im Ober- und Unterboden des Untersuchungsgebiets Annaberg-Buchholz

Einige Zusatzproben wurden im Bereich der Gangstrukturen platziert, weil dort gemäß advangeo-Ergebnissen erhöhte Elementgehalte vorhanden sein sollten (Abbildung 47, oben). Die in den Zusatzproben mit den Nummern 201 und 202 gefundenen As-Gehalte erfüllen die Vermutung sehr gut (Abbildung 52).

Die guten Übereinstimmungen zwischen den mit advangeo® auf Flächen mit Mineralgängen vorhergesagten höheren Elementgehalte treffen für Arsen und Kadmium zu. Für Blei ist das weniger der Fall; hier spielt die unterschiedlich "durchgehende" Verteilung der Erzminerale im Streichen der Gänge eine Rolle: Arsenführende Minerale sind in den vorhandenen Formationen sehr viel weiter und nahezu durchgängig verbreitet als zum Beispiel Bleiglanz.

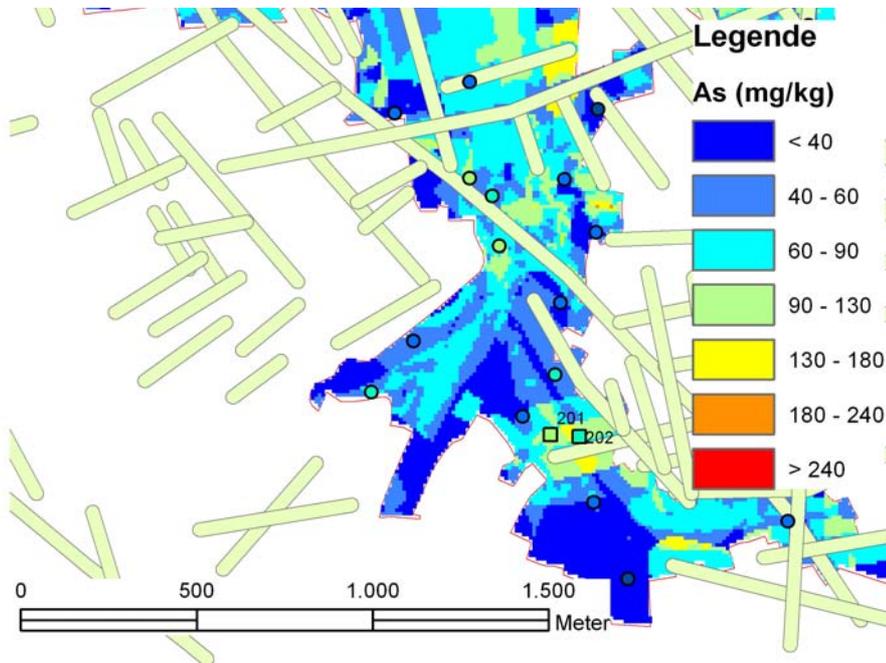


Abbildung 52: As-Gehalte im Oberboden, Ausschnitt aus dem Untersuchungsgebiet Annaberg-Buchholz mit Zusatzproben 201 und 202 auf Gangstrukturen

Zusammenfassend ist generell festzustellen, dass eine Erhöhung der Anzahl der Probenahmepunkte ein verbessertes Lernergebnis bei advangeo® hervorruft, welches sich in der Regel in einer verbesserten Vorhersagegenauigkeit widerspiegelt. Weitergehende Untersuchungen müssten die einzelnen Wirkfaktoren und ihren spezifischen Beitrag zur Elementkonzentration insbesondere für Blei klären und quantifizieren helfen.

4 Empfehlungen zur Weiterentwicklung der Methodik

4.1 Rahmenbedingungen

Die nachfolgenden Empfehlungen beleuchten nicht die gesamte Methodik zur Erstellung digitaler Bodenbelastungskarten /3/, sondern beschränken sich auf die Ergebnisse zu Arbeiten, die im Rahmen des vorliegenden Berichts durchgeführt wurden. Kernaufgabe waren dabei Anwendung und Bewertung von Verfahren für Siedlungsgebiete, die numerische Punktdaten in die Fläche bringen. Dazu sind folgende Komponenten erforderlich:

- eine auf Basis eines methodischen Ansatzes unterteilte Fläche
- eine Anzahl von Messpunkten in der Fläche mit konkreten Konzentrationsangaben
- ein Verfahren, das jedem Punkt der Fläche unter Verwendung der Messpunkte, Messwerte und ggf. weiterer flächenhafter Informationen einen Vorhersagewert und ggf. einen Schätzfehler zuweist

4.2 Flächenabgrenzung

Bezüglich der Flächenabgrenzung können aufgrund der Ergebnisse und Erfahrungen aus dem vorliegenden Vorhaben folgende Maßgaben bzw. Voraussetzungen abgeleitet werden:

- Das Untersuchungsgebiet ist auf Siedlungsgebiete zu begrenzen. Für diese Abgrenzung vom Außenbereich muss ein Siedlungsgebiet eine gewisse Mindestgröße aufweisen. In NRW hatten die kleinsten untersuchten Gemeinden ca. 70.000 Einwohner. Die Einwohnerzahl von Annaberg-Buchholz beträgt 23.000, die von Aue 18.000. Als Richtwert für eine eigenständige Bearbeitung eines Siedlungsgebietes wird die Einwohnerzahl von mindestens 10.000 empfohlen.
- Innerhalb des Siedlungsgebietes sollten homogene Raumeinheiten differenziert ausgehalten werden. Eine homogene Raumeinheit ist bestimmt durch die natürlichen und anthropogenen Verhältnisse und durch die Verteilung des zu modellierenden Schadstoffs.
- Innerhalb einer homogenen Raumeinheit (HRE) sollten einigermaßen gleichbleibende Verhältnisse der Anlagerungs- und Lagerungsbedingungen für den zu modellierenden Stoff angenommen werden (bodengeologische Verhältnisse, Immission, Flächennutzung ...). Insbesondere sollten innerhalb einer HRE keine sprunghaften Veränderungen des zu modellierenden Stoffs im Raum beobachtet werden.
- Sprunghafte Veränderungen des zu modellierenden Schadstoffs sollten nur an den HRE-Grenzen auftreten. Im Allgemeinen haben diese sprunghaften Veränderungen natürliche (z. B. Gesteinsgrenzen) oder anthropogene Ursachen (z. B. Flächennutzungen), die als Grundlage für die Abgrenzung der HRE herangezogen werden.
- Ein Siedlungsgebiet kann im Einzelfall und gerade bei kleinen Siedlungsbereichen auch aus nur einer homogenen Raumeinheit bestehen.

Während das Siedlungsgebiet aus reinen Gesichtspunkten der Bebauung abgegrenzt wird, gehen in eine homogene Raumeinheit natürliche geologische und künstliche anthropogene Gesichtspunkte sowie die Werteverteilung des jeweiligen zu modellierenden Elements mit ein. Innerhalb einer homogenen Raumeinheit nimmt man intuitiv eine allmähliche stetige Werteänderung von Punkt zu Punkt an („Werterhaltung“). Zwischen homogenen Raumeinheiten können sich nicht nur die Umgebungsbedingungen sprunghaft ändern, sondern auch die Messwertfelder.

4.3 Methodische Ansätze zur Flächenabgrenzung

Ein wichtiger Anhaltspunkt bei der Abgrenzung homogener Raumeinheiten sind die im Leitfaden /3/ ausgewiesenen drei methodischen Ansätze:

- raumanalytischer Ansatz
- Substratansatz
- Immissionsansatz

Vom Standpunkt der Flächeninterpolation unterscheiden sich diese drei Ansätze wie folgt:

Der **raumanalytische Ansatz** unterteilt das Siedlungsgebiet nach den o. g. Gesichtspunkten in HRE. Nach den bisherigen methodischen Richtlinien sollen die Messwerte der unterschiedlichen HRE durch Datentransformation zu einer einheitlichen statistischen Verteilung gebracht werden, wobei jede HRE ihre spezifische Transformation aufweist. Danach erfolgt eine gemeinsame Interpolation über alle transformierten Werte. Abschließend werden die Interpolationsergebnisse HRE-spezifisch wieder rücktransformiert, um das Endergebnis zu erhalten. Das möglicherweise dabei auftretende Problem soll an folgenden Abbildungen illustriert werden:

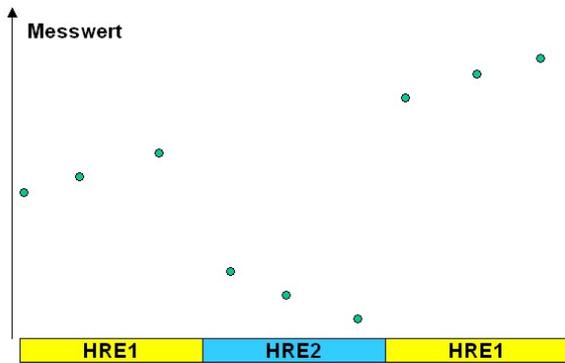


Abbildung 53: Beispiel für zwei HRE und neun Messwerte

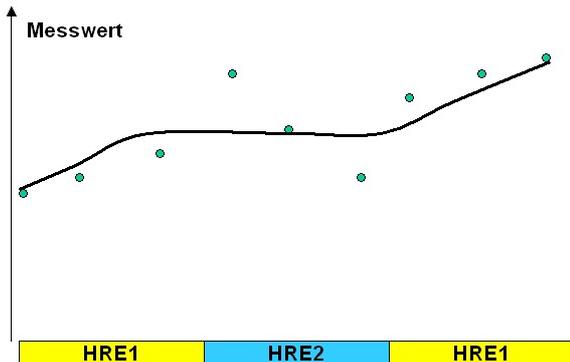


Abbildung 54: Die Messwerte wurden transformiert und danach interpoliert.

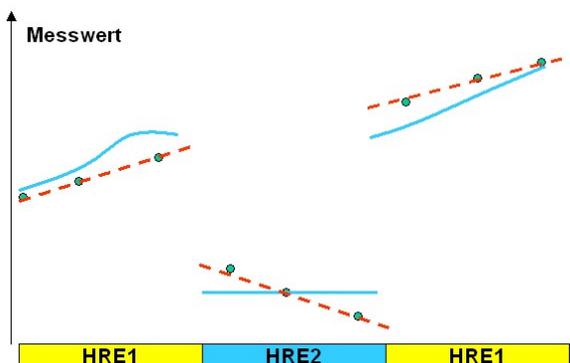


Abbildung 55: Rücktransformation der Messwerte und Interpolation (durchgehende Linie); gestrichelt das erwartete Ergebnis

Die Schadstoffverteilungen in HRE 1 und 2 sind unabhängig voneinander. Die ausgeführte Transformation verändert diese Unabhängigkeit nicht. Durch die ausgeführte Interpolation über alle transformierten Werte wird jedoch eine räumliche Quasiabhängigkeit hergestellt (Abbildung 54). Diese Abhängigkeit schlägt sich in der rücktransformierten Oberfläche negativ auf das Ergebnis aus (durchgehende Linie in Abbildung 55). Die gestrichelte Oberfläche ist den Messpunkten und Messwerten wesentlich besser angepasst. Sie entsteht durch getrennte Interpolation der Messwerte für jede HRE. Es wird deshalb empfohlen, nur in den Fällen eine gemeinsame Interpolation mittels Transformation vorzunehmen, wenn für unterschiedliche HRE auch ein diesbezüglicher räumlicher Zusammenhang fachlich begründet werden kann. Ansonsten wird empfohlen, die flächenhaften Messwerte für die HRE getrennt zu berechnen. Ein Beispiel dafür findet sich in der vorliegenden Arbeit z. B. in Annaberg für Pb (Kap. 3.1.1).

Der **Substratansatz** ist in seiner erweiterten Form (Kap. 2.2.1) ein Sonderfall des raumanalytischen Ansatzes. Er setzt die genaue Kenntnis der Bodenzusammensetzung auf dem Niveau der Stadtbodenkartierung voraus. Daraus lassen sich Flächen gleicher Substratzusammensetzung als HRE aushalten (z. B. Trümmerschuttflächen, aber auch natürliche Substrate wie z. B. diffus verwittertes Gangmaterial). Sollte davon nur ein Teil beprobt sein, so kann man in Form eines Analogieschlusses

statistische Kennwerte aus einer beprobten Fläche in eine nicht beprobte Fläche übertragen, wenn man sich über die Ähnlichkeit der Herkunft des Materials im Klaren ist. Es ist jedoch ebenfalls denkbar, dass in solchen Fällen über die HRE gleichen Substrats analog dem Beispiel zum raumanalytischen Ansatz interpoliert wird, wenn es die Probenverteilung zulässt. Es wird empfohlen, die Methodik in diesem Sinne zu erweitern. Im Testgebiet Annaberg fand die Modellierung der flächenhaften As-Verbreitung unter Kenntnis des Verlaufs der Gangmineralisation als angewandter Substratansatz mittels advangeo® statt.

Der **Immissionsansatz** ist vom Standpunkt der Interpolation der einfachste Ansatz. Er bezieht sich in Siedlungsbereichen auf genau eine HRE. Diese HRE kann Bestandteil eines raumanalytischen Ansatzes sein (siehe Beispiel Cd in Aue, Kap. 3.1.2). Infolge der mit wachsendem Abstand von der Schadstoffquelle kontinuierlich abnehmenden Schadstoffkonzentration kann von stetiger Veränderung des Messwertparameters über die gesamte immissionsbeeinflusste Fläche im oberen Horizont ausgegangen werden. Ein wichtiges zusätzliches Kriterium, ob der Immissionsansatz zulässig ist, besteht darin, dass die Proben des A-Horizonts großflächig die höheren Messwerte besitzen als die des B-Horizonts.

Zusammenfassend drei Beispiele für je eine Anwendung eines methodischen Ansatzes:

- raumanalytischer Ansatz: Interpolation der Pb-Gehalte in Annaberg-Buchholz mittels Geostatistik
- (erweiterter) Substratansatz: flächenhafte Darstellung der As-Gehalte in Annaberg-Buchholz mittels advangeo®
- Immissionsansatz: Interpolation der Cd-Gehalte in Aue (Schwarzwassertal) mittels Geostatistik

Neben den drei genannten Ansätzen wird die Einführung eines vierten Ansatzes (**Homogenansatz**) empfohlen, der den Fall beschreibt, dass die Schadstoffgehalte und -verteilung in einer ausgehaltenen HRE nicht auf die vorgenannten Ansätze zurückgeführt werden kann. Der Homogenansatz zeichnet sich dadurch aus, dass die Schadstoffe weder durch Immission, noch durch klassifizierbare anthropogene Nutzungen, noch ausschließlich durch natürliche Verwitterungsprozesse des Bodensubstrats der Flächen an den Ort ihrer Bestimmung gelangt sind. Dieser Zustand entspricht gleichzeitig einem frühen Kenntnisstand über ein Untersuchungsgebiet, wenn nur eine geringe Zahl an analysierten Proben vorliegt oder (noch) keine plausiblen Erklärungen für die räumlichen Elementverteilungen gegeben sind. Die Autoren empfehlen, auch für diesen Ansatz Interpolationen anzustellen. Bei sehr geringen Probenzahlen kann diese Bearbeitungsstufe allerdings nur als vorläufig bezeichnet werden, weil mit Blick auf die Validität des Ergebnisses noch zu große Unsicherheiten angenommen werden müssen.

4.4 Probenahme, Elementauswahl und Datenvorbehandlung

Das vorliegende Testgebiet Annaberg-Buchholz zeichnete sich durch eine bereits vorhandene bedeutende Zahl von Proben aus (ca. 100), die im Rahmen des vorliegenden Projektes durch 32 weitere Proben verdichtet wurden. Die Auswahl neuer Messpunkte zielte auf die **Optimierung der Messpunktlage**. Im Wesentlichen wird hierzu empfohlen,

- die Flächennutzung möglichst repräsentativ abzubilden,
- den weitesten Abstand jedes Siedlungspunktes zum nächstgelegenen Messpunkt zu minimieren.

Diese Aspekte wurden auch in Aue berücksichtigt. Allerdings bestand hier die Besonderheit, dass im Siedlungsgebiet bisher nur fünf Proben zur Verfügung standen.

In Abhängigkeit vom Kenntnisstand und von den Untersuchungszielen sind auch **alternative Strategien** der Probenpunktfestlegung denkbar, wie sie z. B. bei der Festlegung der 10 Zusatzproben in Annaberg anhand der bekannten Schadstoffverteilungsmodelle beispielhaft dargestellt wurden. Diese umfassen z. B. auch

- hohe, bislang unerklärte Variabilität der Elementgehalte,
- hohe Schätzvarianzen bei Krigingverfahren,

- lokale Auffälligkeiten beim Verfahren IDW,
- Übernahme hoher oder niedriger Gehalte durch Übertragung von Informationen in unbeprobte Bereiche.

Derart festgelegte Punkte dienen auch der

- Überprüfung der Validität der flächenhaften Darstellung, z. B. ergänzend zur Cross Validation,
- Überprüfung und Anpassung des gewählten Ansatzes und des Zuschnitts von HRE,
- Überprüfung und Anpassung der gewählten (Interpolations-) Modelle für die flächenhafte Darstellung.

Allgemein lassen sich bei der **Elementauswahl** für Untersuchungen von Siedlungsbereichen in der Erzgebirgsregion folgende Empfehlungen ableiten:

- As, Cd und Pb (erzgebirgstypisches Vorkommen in Mineralisationen und Erzgängen),
- Ni, Co als regional in Mineralisationen und Erzgängen vorkommende Elemente,
- Cr als weitgehend von den Vererzungen und anthropogenen Tätigkeiten unbeeinflusstes Element,
- U (sofern regional durch die Wismutvergangenheit bedeutsam).

Eine wichtige Erkenntnis bezüglich der Datenvorbehandlung ist die **Kappung einzelner Extremwerte**, die sich immer wieder in den Proben finden, auf einen Wert, der zur allgemeinen Stichprobe passt. Als Einzelwert bleibt er in den Dokumenten enthalten, aber für Interpolationszwecke sind solche Werte ungeeignet, weil sie das Interpolationsergebnis in ihrer Umgebung unzulässig stark beeinflussen. Als Beispiel sei auf die Kappung von zwei Pb-Werten für Aue verwiesen.

Neben den zu hohen Werten sind vor der eigentlichen Modellierung auch **zu kleine Werte zu entfernen**. Einen zu kleinen Wert kann man nicht an einem einzelnen Element festmachen. Wenn jedoch eine Probe in allen Elementen, auch in den nicht näher betrachteten, die kleinsten Messwerte bezüglich ihrer Nachbarn aufweist, muss man sich schon die Frage nach der flächenhaften Repräsentanz dieser Probe stellen. In Aue wurde aus diesen Erwägungen eine Probe aus den auszuwertenden Messdaten entfernt.

Unterschiedliche Strategien der **Verdichtung des Probenahmernetzes** wurden in Kap. 3.2 vorgestellt. Die wichtigsten Empfehlungen sind:

- flächenhafte Verbreitung des Probenahmernetzes, möglichst keine linearen Strukturen
- flächenanteilmäßig gleichmäßige Beprobung aller relevanten flächenhaften Objekte (z. B. Flächennutzungsklassen)
- flächenhafte Verdichtung nur um ein Vielfaches (mindestens das Doppelte) der vorhandenen Messpunktzahl; stehen weniger Punkte zur Verfügung, dann Konzentration auf wenige Schwerpunkte

4.5 Interpolationsverfahren

Die Verfahren, die Punktdaten in die Fläche bringen, werden im Allgemeinen Interpolationsverfahren genannt. Bezüglich der Genauigkeit in den Messpunkten unterscheidet man zwei Gruppen von Verfahren:

- messpunkttreue Verfahren
- nicht messpunkttreue Verfahren

Bezüglich der Stetigkeit der entstehenden Oberfläche kann man ebenfalls die beiden Gruppen

- stetige Verfahren,
- nicht stetige Verfahren

aushalten. Darüber hinaus ist für die Einschätzung von Interpolationsergebnissen noch Auskunft über die Genauigkeit

- in den Messpunkten und
- zwischen den Messpunkten

zu erhalten.

Die messpunkttreuen Verfahren ergeben in den Messpunkten stets genau den Messwert. Bei den nicht messpunkttreuen Verfahren ist das zumeist nicht der Fall. Die stetigen Verfahren werden den unstetigen in der Regel vorgezogen, obwohl das nicht zwangsläufig ein Ausschlusskriterium sein sollte. Während es relativ leicht ist, Genauigkeitsaussagen in den Messpunkten zu treffen, sind die Genauigkeitsaussagen zwischen den Messpunkten nicht ganz so trivial und erfordern zusätzliche Annahmen über das Verhalten der unbekanntenen wahren Werte sowie erhöhten Berechnungsaufwand. Das ideale Verfahren ist

- messpunkttreu,
- stetig,
- mit Genauigkeitsaussagen zwischen den Messpunkten.

Leider ist ein solches Verfahren nicht verfügbar. Im Zusammenhang mit der vorliegenden Aufgabenstellung kamen folgende Interpolationsverfahren zum Einsatz:

- statistische Kennwerte
- Voronoi-Mosaik
- IDW
- geostatistische Verfahren
 - Ordinary Kriging
 - Universal Kriging
 - Indikator Kriging
- Verfahren der künstlichen neuronalen Netze (Programm advangeo[®])

Die wichtigen Genauigkeitsaussagen zwischen den Messpunkten liefern nur die statistischen Kennwerte und die geostatistischen Verfahren in Form eines Schätzwertes und eines Schätzfehlers. Dafür sind diese Verfahren nicht messpunkttreu. Zur Gewährleistung der Stetigkeit muss man bei den geostatistischen Verfahren möglichst alle zur Verfügung stehenden Messwerte in die Schätzung einbeziehen. Die statistischen Kennwerte liefern in Form von Mittelwert und Standardabweichung bzw. Median und Quantilen geeignete Größen, um Oberflächen- und Genauigkeitsaussagen über die gesamte HRE abzuleiten. Diese würden jedoch immer konstant für die gesamte HRE sein und speziell im Fall von räumlichen Abhängigkeiten qualitativ und quantitativ wesentlich schlechtere Ergebnisse liefern als die geostatistischen Verfahren. Für geringe Datenmengen innerhalb einer HRE (10-20) sind sie jedoch ein hilfreiches Verfahren und für Analogieschlüsse nach Substratansatz ein unerlässliches Hilfsmittel.

Das Voronoi-Mosaik mit den originalen Messwerten und das IDW sind messpunkttreue Verfahren. IDW liefert sogar eine stetige Vorhersageoberfläche, während das Voronoi-Mosaik an den Zellrändern Sprünge aufweist und damit nicht stetig ist. Ein Beispiel für ein nicht messpunkttreues nichtstetiges Verfahren ist das Voronoi-Mosaik mit den Mittelwerten aus den DELAUNAY-Nachbarn der jeweiligen Zelle. Es zeigte sich jedoch, dass auch dieses Verfahren bei der Verbreitung von Messwerten und abgeleiteten Werten in die Fläche seine Berechtigung hat.

Stellt man sich die Frage, welches Interpolationsverfahren das Beste ist, so muss man konstatieren, dass es abhängig von der Aufgabenstellung immer wieder andere „Beste“ gibt. Einige Aufgabenbeispiele für jedes der aufgeführten Verfahren sollen das erläutern.

- Voronoi-Mosaik: Erstauswertung der Messwerte, ihrer Lage und Größe ohne großen Wert auf das, was zwischen den Messwerten passiert. Das schließt bereits das Erkennen und die kritische Bewertung lokaler Extremwerte mit ein.

- IDW: stetige Oberfläche durch die Messwerte aller Messpunkte ohne lokale Extremwerte außerhalb der Messpunkte, allerdings ohne eine Genauigkeitsaussage zwischen den Messpunkten.
- Statistische Kennwerte: Werteübertragung durch Analogieschluss (Substratansatz) bzw. bei sehr wenigen Messpunkten in der HRE (10-20).
- Ordinary Kriging: wenig Messpunkte (ca. ab 30), einfache räumliche Abhängigkeit in den Daten drückt sich im Variogramm aus. Schätzfehleraussage geht vor Messpunktstreue; „kurzwellige“ Variabilitäten werden zugunsten „längerwelliger“ Gesetzmäßigkeiten unterdrückt („Tiefpassfilter“).
- Universal Kriging: viele Messpunkte (ca. ab 70), komplexe räumliche Abhängigkeit in den Daten drückt sich im Variogramm aus. Schätzfehleraussage geht vor Messpunktstreue; „kurzwellige“ Variabilitäten werden zugunsten „längerwelliger“ Gesetzmäßigkeiten unterdrückt („Tiefpassfilter“).
- Indikator Kriging: In einem Wertefeld ist nicht die Vorhersage des Werts selbst von Interesse, sondern die Frage, wie sicher der Wert eine vorgegebene Schwelle unterschreitet oder überschreitet. Somit lässt sich z. B. untersuchen, ob der Oberboden großflächig die größeren Werte aufweist als der Unterboden. Auch das Überschreiten von Beurteilungswerten wird mittels IK für jeden Flächenpunkt mit einer Wahrscheinlichkeit angegeben.
- Das in advangeo[®] realisierte Verfahren künstlicher neuronaler Netze hat sich in den Fällen als besonders geeignet erwiesen, in denen eine Vielzahl sich überlagernder Einflussfaktoren die räumliche Schadstoffverteilung beeinflussen. Dabei muss die räumliche Verteilung der Einflussfaktoren selbst möglichst flächendeckend bekannt sein.

Die geostatistischen Verfahren liefern zum einen einen Schätzfehler, und zwar nicht nur in den Messpunkten, sondern auch zwischen den Messpunkten. In Verbindung mit dem Schätzwert kann man in jedem Vorhersagepunkt ein Konfidenzintervall konstruieren, innerhalb dessen sich der unbekannte Messwert mit vorgegebener Wahrscheinlichkeit befindet. Zum anderen liefern die geostatistischen Verfahren eine stabile Lösung für ähnliche Messnetze über ein und denselben zu untersuchenden HRE. Am deutlichsten wird der Unterschied, wenn man sich eine Fläche vorstellt, die ein sogenanntes „Weißes Rauschen“ beinhaltet. Ein messpunkttraues Verfahren würde sich viel Mühe geben, bezüglich der Werte jede „Spitze“ und jedes „Loch“ genau wiederzugeben. Verschiebt man das Messnetz etwas, würde ein ganz anderes Interpolationsmodell erscheinen. Die geostatistischen Verfahren würden dagegen in jedem Fall den Mittelwert des Rauschens und seine Streuung als Ergebnis wiedergeben, unabhängig von der Lage des Messnetzes.

Die geostatistischen Verfahren besitzen eine Reihe von Parametern, mit denen man das Ergebnis wesentlich beeinflussen kann. Dazu zählen als die wichtigsten:

Variogramm: Die Ermittlung des Variogramms ist der zentrale Punkt aller geostatistischen Berechnungen. Das Variogramm beschreibt, wie weit entfernt sich benachbarte Werte gegenseitig beeinflussen und in welcher Stärke. Die verwendete Software Geostatistical Analyst lässt zwar zu, einen so wichtigen Wert, wie den Nuggeteffekt und den Sill per Hand zu setzen. Die resultierende Kurve muss jedoch immer im Einklang mit der Punktwolke sein. Es sei nicht verschwiegen, dass die Variogrammfestlegung in der Nähe des Nullpunktes das Ergebnis ganz wesentlich beeinflusst und seine Vorhersage an dieser Stelle gleichzeitig das mit der größten Unsicherheit behaftete Problem der Geostatistik darstellt. Setzt man per Hand den Nuggeteffekt auf Null, kann man zwar sogar Messpunktstreue in der Vorhersage erreichen, weiß aber in Wirklichkeit nicht, ob sich das Wertefeld in der Messpunktnähe ähnlich gutmütig führt, wie mit dem „geschönten“ Variogramm vorgetäuscht. Ein weiteres Problem ist die Schätzung des Variogramms, wenn die Messpunkte ungünstig angeordnet sind, z. B. auf einer Linie. Das passiert u. a., wenn man schlauchförmige HRE ausgehalten hat. In diesen Fällen wird empfohlen, auf Geostatistik zu verzichten und auf die einfachen statistischen Kennwerte zurückzugreifen.

Trend: Sehr langwellige Informationen, die sich in den Messwerten befinden, werden zumeist nicht mit dem Variogramm gefasst, sondern besser mit einem Trendansatz. Das kann z.B. ein größerer Bereich erhöhter Gehalte an einem Schadstoff sein, der von kleineren Messwertschwankungen umgeben ist. Bei der Ausweisung des Trends sollte man stets darauf achten, dass der ausgewiesene Trend auch wirklich die erwartete Form angenommen hat. Im Unterschied zur Anisotropie beeinflusst der Trend den Schätzfehler dahingehend, dass er für lognormal verteilte Größen in den Bereichen der großen Vorhersagewerte auch erhöhte Schätzfehler erzeugt.

Anisotropie: Das ist ein weiterer Steuerwert, um speziell gerichtete Strukturen, die in den Messwerten enthalten sind, zu berücksichtigen. Ganz erfolgreich war der Anisotropie-Ansatz für die Cd-Gehalte im Oberboden von Aue im Schwarzwassertal. Im Unterschied zum Trend beeinflusst die Anisotropie den Schätzfehler in den Bereichen erhöhter Vorhersagewerte nicht.

Die **Genauigkeit der Modellierung** in den Messpunkten wird mit drei Verfahren gemessen:

- Vergleich von Messwert und Modellwert (ermittelt unter Einbeziehung des jeweiligen Messwerts am Messpunkt)
- Vergleich von Messwert und Modellwert (ermittelt unter Auslassung des Messwertes bei der Modellerstellung; Cross Validation)
- Vergleich von neuem Messwert und vorhandenen Modellparametern (real entnommene Kontrollproben)

Der Vergleich unter Einbeziehung des jeweiligen Messwerts führt für die messpunktstreuen Verfahren immer zu vollständiger Übereinstimmung und damit zur Abweichung = 0. Die Genauigkeitsergebnisse der nicht messpunktstreuen Verfahren wurde für Annaberg und Aue bei Verwendung von advangeo® in Kap. 3.3.2.3 diskutiert.

Zur Cross Validation bei Kriging: Mit einer Ausnahme (Cd im oberen Horizont von Aue, Region 1) waren die Cross Validation-Ergebnisse durchweg wenig befriedigend. Hohe Messwerte werden unterschätzt und niedrige Messwerte werden überschätzt, die hohen Werte teilweise sogar in beträchtlichem Maß. Das bedeutet, dass man diese Werte nicht auslassen darf, damit sie sich in der Schätzwertoberfläche widerspiegeln. Andererseits besteht das Schätzergebnis mit Kriging nicht nur aus dem Schätzwert, sondern zusätzlich noch aus dem Schätzfehler. Die richtige Interpretation der beiden Ergebnisteile im Sinne des Konfidenzintervalls hat wesentlich größere Bedeutung.

Der Genauigkeitsvergleich anhand neuer Proben wurde in Kap. 3.3.2.2 vorgeführt. Dieser ist ohne Einschränkung auch für Messwerte einsetzbar, die zur Modellierung selbst verwendet wurden.

Bemerkung: Bezüglich des Tiefpassfiltereffekts im Kriging gab es in den letzten Jahren wissenschaftliche Untersuchungen zur Beseitigung oder zumindest Milderung dieses Effekts (siehe z. B. /11/). Ziel ist es dabei, den Vorhersagewert nach dem Kriging so zu manipulieren, dass er

- eine ähnliche statistische Verteilung aufweist wie die Messdaten,
- ein ähnliches empirisches Variogramm erzeugt wie die Ausgangsdaten.

Unklar blieb jedoch, was dieses „korrigierte“ Ergebnis in Verbindung mit der Schätzvarianz noch für eine Aussagekraft bezüglich des Konfidenzintervalls besitzt. Ist man mit dem Filtereffekt unzufrieden, steht einem als Alternative IDW mit dem bekannten Verlust der Genauigkeitsaussage zwischen den Messpunkten zur Verfügung.

Abschließend sei noch auf das Problem eingegangen, welcher Kriging-Ansatz der bessere ist in Anbetracht einer Vielfalt von Steuerparametern. Ist es in jedem Fall der mit dem geringsten Schätzfehler und wenn ja, an welchen Stellen wird das gemessen? Die As-Vergleichsrechnungen für Annaberg haben gezeigt, wie unterschiedlich die Vorhersageergebnisse in Abhängigkeit vom gewählten Kriging-Modell aussehen können (Kap. 2.2.2.5 und 2.2.2.6). Zweifellos ist die Größe des Schätzfehlers ein Kriterium der Beurteilung. Ein weiteres ebenso wichtiges Kriterium ist aber auch die Übereinstimmung der eingesetzten Parameterwerte mit den vor Ort angetroffenen Gegebenheiten. So erwartet man z. B. bei der As-Schätzung wie in Annaberg, dass dort der größte Schätzfehler vorliegt, wo die größten Vorhersagewerte zu finden sind. Das liegt sowohl an der statistischen Verteilung der As-Werte als auch an der Wirkung eines Tiefpassfilters wie im Kriging-Verfahren auf diese Werte.

4.6 Eignungsprüfung der Probenwerte anhand der Interpolationsergebnisse

Neben der groben Datenvorbehandlung wie in Kap. 4.4 dargestellt, erlauben die Interpolationsergebnisse mit den geostatistischen Verfahren eine detaillierte Bewertung insbesondere neuer Probenwerte auf ihre Eignung als Datenquellen für weitere Interpolationsschritte. Proben, deren Messwerte zu mehreren Parametern gleichzeitig bestimmte Integritätsbedingungen verletzen, sind als singuläre Punkte zu kennzeichnen und aus weiteren Interpolationsschritten auszuschließen, weil sie vorrangig nur sich selbst repräsentieren und nichts zur flächenhaften Verbreitung der untersuchten Parameter im Sinn einer Bodenbelastungskarte beitragen. Die Bewertung der 10 zusätzlichen Proben in Annaberg hat gezeigt, dass eine Probe, nämlich Nr. 206 nach mehreren Kriterien auffällig war und als singulär angesehen wurde (Kap.3.3). Sie sollten aber als Punktinformationen trotzdem erhalten bleiben und als solche nachgewiesen werden.

4.7 Zusammenfassung der Empfehlungen

Die Erweiterung von Punktdaten in die Fläche erfordert neben der Kenntnis der Interpolationsverfahren für ein konkretes Siedlungsgebiet umfangreiche Kenntnisse über den geologischen Untergrund, die historische Entwicklung der Siedlung mit Schwerpunkt schadstoffrelevanter Flächennutzung. Die Auswertung von Erfahrungen aus anderen bereits bearbeiteten Siedlungsgebieten unterstützt diesen Prozess.

Auf den zwei Testgebieten Annaberg-Buchholz und Aue wurde die derzeit gültige Methodik zur Erstellung von Bodenbelastungskarten mit dem Schwerpunkt der Verbreitung von Punktdaten in die Fläche getestet. Im Ergebnis der Erfahrungen aus den beiden Testgebieten werden folgende Empfehlungen/Änderungen für die Methodik unter dem speziellen Blickwinkel der Interpolation gegeben. In Tabelle 14 sind die Empfehlungen zu den methodischen Ansätzen zusammengefasst.

Tabelle 15 enthält die Empfehlungen zur optimalen Anwendung der untersuchten Modellierungsverfahren.

Tabelle 14: Übersicht über die empfohlenen Änderungen/Ergänzungen der Methodik bezüglich der methodischen Ansätze

Methodischer Ansatz	Änderung/Erweiterung
raumanalytischer Ansatz	Verzicht auf Messwertanpassung durch Transformation, wenn keine fachliche Begründung; dafür separate Rechnungen für jede ausgehaltene HRE getrennt; zum Schluss Montage der HRE-bezogenen Teilergebnisse
Substratansatz	Erweiterung um Möglichkeit der Interpolation bei ausreichender Datenlage über die Übertragung statistischer Kennwerte hinaus; Substratansatz ist dann Sonderfall des raumanalytischen Ansatzes
Immissionsansatz	Prüfung auf die Eigenschaft, dass Probenmesswerte im Oberboden großflächig größer als die des Unterboden sind. Ansonsten würde der Immissionsansatz seine Berechtigung verlieren.
Homogenansatz	Ergänzung um diesen methodischen Ansatz für den Fall, dass weder Immissionsansatz, raumanalytischer, noch Substratansatz gilt bzw. Verwendung bei einem Bearbeitungsstand mit geringem Kenntnisstand

Tabelle 15: Anwendungsempfehlungen für die untersuchten Verfahren

Verfahren	Anwendungsbedingung	Ansatz	Geeignet für
Voronoi-Mosaik	Punktinfos sind in die Fläche ausdehnbar.	alle	Erstübersicht über den primären Datenbestand
IDW	Punktinfos sind in die Fläche ausdehnbar, Oberfläche wird stetig erwartet.	Immissionsansatz, Homogenansatz, Substratansatz	Messpunkttreue Darstellungen, bei denen die Abweichungen (Modell – wahrer Wert) zwischen den Messpunkten keine Rolle spielen.
Statistische Kennwerte	Punktinfos sind in die Fläche ausdehnbar; mindestens 10-20 Messwerte empfohlen.	Substratansatz, Homogenansatz	Kennwertübertragung auf nicht beprobte Substrat-HRE aus beprobten Substrat-HRE; Zuweisung der Kennwerte für wenig beprobte HRE
Ordinary Kriging	Punktinfos sind in die Fläche ausdehnbar; mindestens 30 Messwerte empfohlen; in begründeten Ausnahmen weniger.	Immissionsansatz, Substratansatz, Homogenansatz	Stetige Oberflächen, bei denen die Messpunkttreue nicht im Vordergrund steht, dafür aber eine Genauigkeitsaussage an jedem Punkt des Vorhersagefeldes; einfache Trendannahme (konstant bzw. linear).
Universal Kriging	Punktinfos sind in die Fläche ausdehnbar; mindestens 70 Messwerte.	Immissionsansatz, Substratansatz, Homogenansatz	Stetige Oberflächen, bei denen die Messpunkttreue nicht im Vordergrund steht, dafür aber eine Genauigkeitsaussage an jedem Punkt des Vorhersagefeldes; nichtlineare Annahme über das zu modellierende Zufallsfeld.
Indikatorkriging	Vorhandensein oberer und unterer Proben bzw. von Messwertschwellwerten.	alle	Prüfung auf flächenhafte Messwertentwicklung in die Teufe bzw. Überschreitungswahrscheinlichkeiten der Schwellwerte

5 Literaturverzeichnis

- /1/ Zwischenbericht 1 zum Forschungsvorhaben „Schadstoffe in Siedlungsbereichen - Untersuchungen zur Verbesserung der Validität flächenhafter Aussagen“, Beak Consultants GmbH, Freiberg, 12.10.2009
- /2/ Zwischenbericht 2, Etappen B und C, zum Forschungsvorhaben „Schadstoffe in Siedlungsbereichen - Untersuchungen zur Verbesserung der Validität flächenhafter Aussagen“, Beak Consultants GmbH, Freiberg, 30.11.2009
- /3/ Zwischenbericht 3, Etappe D, zum Forschungsvorhaben „Schadstoffe in Siedlungsbereichen - Untersuchungen zur Verbesserung der Validität flächenhafter Aussagen“, Beak Consultants GmbH, Freiberg, 19.03.2010
- /4/ Leitfaden zur Erstellung digitaler Bodenbelastungskarten – Teil I: Außenbereiche, Landesumweltamt NRW, Essen 2000, 116 S.
- /5/ LABO (2003): Geostatistische und statistische Methoden und Auswerteverfahren für Geodaten mit Punkt- bzw. Flächenbezug. Abschlussbericht Teil 1: Grundlagen. – LABO, November 2003
- /6/ LABO (2003): Geostatistische und statistische Methoden und Auswerteverfahren für Geodaten mit Punkt- bzw. Flächenbezug. Abschlussbericht Teil 2: Auswertebispiele. – LABO, November 2003
- /7/ LABO (2003): Geostatistische und statistische Methoden und Auswerteverfahren für Geodaten mit Punkt- bzw. Flächenbezug. Abschlussbericht Teil 3: Empfehlungen für die Anwendung geostatistischer und statistischer Methoden zur flächenhaften Auswertung von Daten über Stoffgehalte in Böden. – LABO, November 2003
- /8/ Leitfaden zur Erstellung digitaler Bodenbelastungskarten – Teil II: Siedlungsbereiche, Landesamt für Natur, Umwelt und Verbraucherschutz NRW, Recklinghausen 2007, 107 S.
- /9/ Erstellung digitaler Bodenbelastungskarten zur flächenhaften Darstellung und Beurteilung von Schadstoffen in sächsischen Böden – Leitfaden – Stand 05/2007, Materialien zum Bodenschutz, Sächsisches Landesamt für Umwelt und Geologie – 71 S.
- /10/ MÜLLER, H.: Die Erzgänge des Annaberger Bergrevieres, Leipzig, 1894
- /11/ YAMAMOTO, J. K.: Correcting the Smoothing Effects of Ordinary Kriging Estimates, Mathematical Geology, Vol, 37, No, 1, January 2005 – S. 69 – 94
- /12/ NOACK, S.: advangeo® - User Guide. Beak Consultants GmbH 2009 – 138 S.

Die in diesem Bericht erwähnten Anlagen

Anhang 1: Ergebnisse Geostatistik

Anhang 2: Ergebnisse mit advangeo®

können bei Bedarf angefordert werden bei:

Dr. Ingo Müller

Sächsisches Landesamt für Umwelt, Landwirtschaft und Geologie - Referat Boden, Altlasten

Telefon: 03731 294-226

E-Mail: ingo.mueller@smul.sachsen.de

Herausgeber:

Sächsisches Landesamt für Umwelt, Landwirtschaft und Geologie (LfULG)
Pillnitzer Platz 3, 01326 Dresden
Telefon: + 49 351 2612-0
Telefax: + 49 351 2612-1099
E-Mail: lfulg@smul.sachsen.de
www.smul.sachsen.de/lfulg

Autoren:

Dr. Thomas Hertwig, Dr. Karl-Otto Zeißler
Beak Consultants GmbH
Am St. Niclas Schacht 13
09599 Freiberg
Telefon: + 49 3731 781 371
Telefax: + 49 3731 781-352
E-Mail: thomas.hertwig@beak.de; karl-otto.zeissler@beak.de

Redaktion:

Dr. Ingo Müller
LfULG, Abteilung Wasser, Boden, Wertstoffe/Referat Boden, Altlasten
Telefon: + 49 3731 294-226
Telefax: + 49 3731 294-115
E-Mail: ingo.mueller@smul.sachsen.de

Fotos:

Beak Consultants GmbH

Redaktionsschluss:

30.11.2011

ISSN:

1867-2868

Hinweis:

Die Broschüre steht nicht als Printmedium zur Verfügung, kann aber als PDF-Datei unter <http://www.smul.sachsen.de/lfulg/6447.htm> heruntergeladen werden.

Verteilerhinweis

Diese Informationsschrift wird von der Sächsischen Staatsregierung im Rahmen ihrer verfassungsmäßigen Verpflichtung zur Information der Öffentlichkeit herausgegeben. Sie darf weder von Parteien noch von deren Kandidaten oder Helfern im Zeitraum von sechs Monaten vor einer Wahl zum Zwecke der Wahlwerbung verwendet werden. Dies gilt für alle Wahlen.

Missbräuchlich ist insbesondere die Verteilung auf Wahlveranstaltungen, an Informationsständen der Parteien sowie das Einlegen, Aufdrucken oder Aufkleben parteipolitischer Informationen oder Werbemittel. Untersagt ist auch die Weitergabe an Dritte zur Verwendung bei der Wahlwerbung. Auch ohne zeitlichen Bezug zu einer bevorstehenden Wahl darf die vorliegende Druckschrift nicht so verwendet werden, dass dies als Parteinahme des Herausgebers zugunsten einzelner politischer Gruppen verstanden werden könnte.

Diese Beschränkungen gelten unabhängig vom Vertriebsweg, also unabhängig davon, auf welchem Wege und in welcher Anzahl diese Informationsschrift dem Empfänger zugegangen ist. Erlaubt ist jedoch den Parteien, diese Informationsschrift zur Unterrichtung ihrer Mitglieder zu verwenden.