LAWA-Ausschuss
„Grundwasser und Wasserversorgung“
(LAWA-AG)

Stand:
31.01.2008

FACHLICHE UMSETZUNG DER RICHTLINIE ZUM SCHUTZ DES GRUND-WASSERS VOR VERSCHMUTZUNG UND VERSCHLECHTERUNG (2006/118/EG)

INHALT

1 EINFÜHRUNG 3

2 VERFAHREN FÜR DIE BEURTEILUNG DES CHEMISCHEN ZUSTANDES NACH ARTIKEL 4 UND ANHANG III DER RICHTLINIE 2006/118/EG 3

2.1 Diffuse Belastungen 3
2.2 Punktuelle Belastungen 4

3 BUNDESWEIT EINHEITLICHE SCHWELLENWERTE NACH ANHANG II DER RICHTLINIE 2006/118/EG 4

4 BUNDESWEIT EINHEITLICHE METHODE ZUR ERMITTLUNG SIGNIFIKANTER UND ANHALTEND STEIGENDER SCHADSTOFFTRENDS NACH ARTIKEL 5 UND ANHANG IV DER RICHTLINIE 2006/118/EG 5

ANHANG
FACHLICHE UMSETZUNG DER GRUNDWASSER-TOCHTERRICHTLINIE (GWTR)

Teil 1: Bundesweit einheitliche Methode zur Beurteilung des chemischen Zustandes nach Artikel 4 und Anhang III der GWTR 7

Teil 2: Bundesweit einheitliche Schwellenwerte nach Anhang II GWTR 31

Teil 3: Ableitung von Schwellenwerten für das Grundwasser – Ammonium – 51

Teil 4: Bundesweit einheitliche Methode zur Ermittlung signifikanter und anhaltend steigender Schadstofftrends nach Artikel 5 und Anhang IV GWTR 63

Anlage 1 zu Teil 4: Länderbeispiel NRW

Anlage 2 zu Teil 4: Länderbeispiel Sachsen

1 EINFÜHRUNG

Zur Klärung bestimmter wissenschaftlich-technischer Fragestellungen, die durch die Richtlinie 2006/118/EG (Grundwasser-Tochterrichtlinie, GWTR) aufgeworfen werden, wurde mit Wirkung vom 20.03.2007 der ad-hoc-Unterausschuss „Fachliche Umsetzung der Grundwasser-Tochterrichtlinie“ (UA) eingerichtet. Der UA hatte die Aufgabe, bundesweit einheitliche und pragmatische Lösungsvorschläge zu erarbeiten. Die Empfehlungen aus den Guidance-Dokumenten der EU sowie weiteren EU-Aktivitäten (z. B. BRIDGE-Projekt) sollten dabei berücksichtigt werden.

Der UA sollte insbesondere zu folgenden Punkten Vorschläge vorlegen:

- Bundesweit einheitliche Methode zur Beurteilung des chemischen Zustandes nach Artikel 4 und Anhang III der GWTR
- Bundesweit einheitliche Schwellenwerte nach Anhang II GWTR
- Bundesweit einheitliche Methode zur Ermittlung signifikanter und anhaltend steigender Schadstofftrends nach Artikel 5 und Anhang IV GWTR

Der LAWA-AG wurde regelmäßig über den Fortschritt der Arbeiten informiert und fasste zu den Zwischenergebnissen jeweils Beschluss. Im Folgenden sind die Vorschläge für eine einheitliche fachliche Umsetzung der Richtlinie 2006/118/EG zusammengefasst.

Die Sachstandsberichte des UA sind als Anhang beigefügt.

2 VERFAHREN FÜR DIE BEURTEILUNG DES CHEMISCHEN ZUSTANDES NACH ARTIKEL 4 UND ANHANG III DER RICHTLINIE 2006/118/EG

2.1 Diffuse Belastungen

Die Beurteilung des chemischen Zustandes von Grundwasserkörpern (GWK) bei diffusen Belastungen erfolgt auf der Grundlage geostatistischer Methoden und/oder hydrogeologischer Modelle oder vergleichbarer Verfahren in folgenden Schritten:

Ermittlung der flächenhaften Ausdehnung der Qualitätsnormüberschreitung, ggf. auf eine Landnutzungskategorie bezogen (Summe der Flächen, für die eine Überschreitung der Grundwasserqualitätsnorm bzw. des Schwellenwertes identifiziert wird).

- Prüfung der flächenhaften Relevanz der Belastung (Einschätzung als relevante Belastung bzw. signifikante Gefährdung für den GWK) unter Einbeziehung weiterer Kriterien, z. B. auch der tolerierbaren prozentualen Ausdehnung der Belastung (eine Belastung gilt insbesondere dann als relevant, wenn die Ausdehnung der Belastung insgesamt mehr als 30 bis 40 % der Fläche je Landnutzungskategorie im GWK beträgt).
- Ein GWK ist unabhängig von seiner absoluten Größe dann in einem schlechten Zustand, wenn die Ausdehnung einer relevanten Belastung mehr als 25 km² im GWK beträgt. GWK, die kleiner als 75 km² sind, sind dann in einem schlechten Zustand, wenn die Ausdehnung einer relevanten Belastung mehr als 1/3 ihrer Fläche beträgt.

2.2 Punktuelle Belastungen

Die Beurteilung des chemischen Zustandes von Grundwasserkörpern (GWK) bei punktuellen Belastungen erfolgt in folgenden Schritten:

- Ermittlung der Fläche, für die eine Überschreitung der Grundwasserqualitätsnorm bzw. des Schwellenwertes auf Grund der Lage der Belastungsquellen und der Messstellen identifiziert wird.
- Ein GWK ist unabhängig von seiner absoluten Größe dann in einem schlechten Zustand, wenn aufgrund von punktuellen Belastungsquellen auf mehr als 25 km² im GWK die Grundwasserqualitätsnormen bzw. die Schwellenwerte überschritten werden. GWK, die kleiner als 250 km² sind, sind dann in einem schlechten Zustand, wenn aufgrund von punktuellen Belastungsquellen auf mehr als 10 % ihrer Fläche die Grundwasserqualitätsnormen bzw. die Schwellenwerte überschritten werden.

3 BUNDESWEIT EINHEITLICHE SCHWELLENWERTE NACH ANHANG II DER RICHTLINIE 2006/118/EG

Die Geringfügigkeitsschwellenwerte (GFS-Werte) nach LAWA-Bericht „Ableitung von Geringfügigkeitsschwellenwerten für das Grundwasser“ sollen für die Parameter nach GWTR als Schwellenwerte gelten. Da für Ammonium kein GFS-Wert festgelegt wurde, wird für Ammonium ein Schwellenwert von 0,5 mg/l vorgeschlagen. Damit ergibt sich folgender Vorschlag für Qualitätsnormen bzw. Schwellenwerte:

Parameter	Einheit	Qualitätsnorm/Schwellenwert
Nitrat*	mg/l	50
Wirkstoffe in Pestiziden, einschließlich relevanter Stoffwechselprodukte, Abbau und Reaktionsprodukte*	µg/l	0,1 0,5 (insgesamt)
Arsen	µg/l	10
Cadmium	µg/l	0,5
Blei	µg/l	7
Quecksilber	µg/l	0,2
Ammonium	mg/l	0,5
Chlorid	mg/l	250
Sulfat	mg/l	240
Summe Trichlorethylen und Tetrachlorethylen	µg/l	10
* Qualitätsnormen, die bereits durch die GWTR festgelegt sind		

Überschreiten die natürlichen Hintergrundwerte den GFS-Wert, wird der natürliche Hintergrundwert als Schwellenwert festgelegt.

4 BUNDESWEIT EINHEITLICHE METHODE ZUR ERMITTLUNG SIGNIFIKANTER UND ANHALTEND STEIGENDER SCHADSTOFFTRENDS NACH ARTIKEL 5 UND ANHANG IV DER RICHTLINIE 2006/118/EG

Zur Ermittlung signifikant ansteigender Schadstofftrends wird das folgende Verfahren angewandt:

1. Eine Trendbetrachtung wird in allen als „gefährdet“ eingestuften Grundwasserkörpern an jeder gemeldeten Messstelle und nur für die Parameter durchgeführt, die zur Einstufung des Grundwasserkörpers in „gefährdet“ geführt haben.

   Die Trendbetrachtung erfolgt jeweils über einen 6-Jahres-Zeitraum (= Zeitintervall eines Bewirtschaftungsplans). Entscheidend für die Bewertung ist das jeweils aktuelle 6-Jahres-Intervall. Bei Bedarf, zum Beispiel zur Plausibilisierung, können auch frühere Daten hinzugezogen werden.

   Die Trendanalyse erfolgt in der Regel mittels linearer Regressionsanalyse. Eine Trendanalyse kann nur durchgeführt werden, wenn in einem Überwachungszeitraum für mindestens 2/3 der Jahre Überwachungsergebnisse vorliegen.

   Bei 4 bis 10 Messwerten kann alternativ der Mann-Kendall-Test durchgeführt werden. Bei weniger als 4 Messwerten kann keine Trendanalyse durchgeführt werden.

   Vor dem Test auf signifikantes Trendverhalten erfolgt ein Ausreißertest.

2. Für die Ermittlung signifikanter und anhaltend steigender Trends die eine signifikante Gefahr für die Qualität der aquatischen oder terrestrischen Ökosysteme oder für - tatsächliche oder potenzielle - legitime Nutzungen der Gewässer darstellen, wird bei diffusen Belastungen das folgende Verfahren angewandt:

   a) Die Zuordnung der Flächen zu den Messstellen und die Abschätzung der Ausdehnung der Fläche
      - mit signifikant ansteigendem Trend und
      - mit einer Überschreitung von 75 % der Grundwasserqualitätsnorm bzw. des Schwellenwertes

      wird im Rahmen einer Relevanzprüfung analog zur Beurteilung des chemischen Zustands (siehe Kapitel 2) individuell in jedem Land geregelt. Wenn diese Relevanzkriterien erfüllt sind, erfolgt die Prüfung nach b).

   b) Unabhängig von der absoluten Größe des Grundwasserkörpers, sind in einem Grundwasserkörper nur dann Maßnahmen zur Trendumkehr zu bewirken, wenn die nach a) identifizierte Ausdehnung der Fläche 25 km² des Körpers überschreitet. Diese Mindestgröße ist auch für die Beurteilung der Belastung durch Sonderkulturen relevant.

   c) In Grundwasserkörpern, die kleiner als 75 km² sind, sind nur dann Maßnahmen zur Trendumkehr zu bewirken, wenn die nach a) identifizierte Ausdehnung der Fläche 1/3 ihrer Fläche überschreitet.

3. Die Ermittlung der Trendumkehr erfolgt über die Bildung von gleitenden 6-Jahres-Intervallen. Für jedes Intervall wird über eine lineare Regression die Steigung der Regressionsgeraden bestimmt und als Zeitreihe in einem Koordinaten-

system (x,y) aufgetragen. Ein Nulldurchgang, d.h. ein Übergang von einem steigenden in einen fallenden Trend (und umgekehrt) bedeutet eine Trendumkehr.

Sachstandsbericht

LAWA - Unterausschuss

ANHANG

FACHLICHE UMSETZUNG DER GRUNDWASSER-TOCHTERRICHTLINIE (GWTR)

TEIL 1: BUNDESWEIT EINHEITLICHE METHODE ZUR BEURTEILUNG DES CHEMISCHEN ZUSTANDES NACH ARTIKEL 4 UND ANHANG III DER GWTR

Haas, B (LfU, Bayern)
Kuhn, K. (LFUG, Sachsen)
Langner, M. (UM, Baden-Württemberg)
Lemke, G. (LUNG, Mecklenburg-Vorpommern)
Lerho, A. (MUNLV, Nordrhein-Westfalen)
Peters, A. (TLUG, Thüringen)
Schäfer, W. (LBEG, Niedersachsen, Obmann)
Wieger, C. (MLUR, Schleswig-Holstein)
Wolter, R. (UBA)

19. April 2007

INHALT

1 AUFTRAG 9

2 AUSGANGSSITUATION 9

3 EMPFEHLUNG/VORSCHLAG DES UA 11

4.1 Diffuse Quellen 11
3.1 Punktquellen 14
3.2 Grundlage der Bewertung (Mittelwertbildung) 14

1 AUFTRAG

Laut Mandat vom 03.11.06 hat der UA die Aufgabe, der LAWA-AG bis zum 15.02.07 einen Vorschlag für eine „bundesweit einheitliche Methode zur Beurteilung des chemischen Zustands nach Artikel 4 und Anhang III der GWTR“ vorzulegen.

2 AUSGANGSSITUATION

1. Die Ausgangssituation hinsichtlich Flächengröße der GWK, Homogenität der GWK, Messstellendichte und Messnetzkonzeption ist in den einzelnen Bundesländern sehr unterschiedlich (siehe Tab.1).
2. Entsprechend der unterschiedlichen Ausgangssituation haben die Bundesländer unterschiedliche Methoden bei
   - der Zuordnung von Flächen zu Messstellen,
   - der Abschätzung der Relevanz und Ausdehnung der Belastung und
   - der Beurteilung der Ausdehnung der Belastung

entwickelt (siehe Tab. 1).

Die jeweiligen Methoden sind an bestimmte Bedingungen hinsichtlich der Messnetzdichte, Größe und Homogenität der GWK, hydrochemische Eigenschaften usw. geknüpft und können nicht beliebig ausgetauscht werden.

Tabelle 1: Signifikanz der Belastungen (Ausgangssituation).

Bundesland	Beurteilte Fläche	Beurteilung der Ausdehnung
Berlin	Zuordnung Fläche und Nutzung zu Messstelle, Methodik der Zuordnung ist nicht definiert.	> 33 – 50 % Fläche (bezogen auf GWK) mit Überschreitung (= Nutzung von der Belastung ausgeht) Mindestflächengröße: > 25 km2, > 50 km2
BMU/UBA	Zuordnung Fläche und Nutzung zu Messstelle, Methodik der Zuordnung ist nicht definiert.	> 10 – 30 % Fläche (bezogen auf GWK) mit Überschreitung (= Nutzung von der Belastung ausgeht) Mindestflächengröße: > 25 km2, > 50 km2
NRW	GWK, eindeutige Zuordnung einer Landnutzung zur Messstelle; gleichmäßige Verteilung der Nutzungsfläche auf die zugeordneten MST (100%-GWK-Abdeckung)	Nutzungsgewichteter Mittelwert > QN, 33 % (oder 50 %) der Mst. > QN; Alternativ: > 33 % der Fläche (bezogen auf GWK) >QN Pkt.Q. in NRW: Belastungsgebiet > 10% der Fläche des GWK (Das Messnetz repräsentiert die prozentuale Flächennutzung)
TH, MV	GWK, Zuordnung der Messstelle zur Hydrogeologie und Landnutzung; Ermittlung der belasteten Fläche > QN über Kriging/SIMIK	> 33 % der Fläche (bezogen auf GWK) >QN TH: Mindestflächengröße: 25 km² MV: ohne Mindestflächengröße
SN	GWK, Fläche > QN über Kriging/SIMIK, Punktquellen: Belastungsgebiete bilden.	Diff.Q: > 33 % der Fläche (bezogen auf GWK) >QN, ohne Mindestflächengröße Pkt.Q: Belastungsgebiet > 10% der Fläche des GWK
Bayern,	Zustromgebiet zu Messstellen über hydrogeol. Abgrenzung	Einzelbetrachtung jeder im Einzugsgebiet vertretenen Nutzung; Quotient (belastete Flächenanteile/Summe aller Flächenanteile) > 0,3 bis 0,5
BW	Zustromgebiet zu Messstellen über hydrogeol. Abgrenzung	Nutzungsquotient > 0,3 bis 0,5 bei Messstellen > QN Emissionsbetrachtung Mindestgröße: 25 km2 (belastete Fläche Unter Berücksichtigung der O2-Gehalte des GW und der Verweilzeiten
NDS	Zuordnung der Messstellen zu Teilraum im GWK über hydrogeol. Abgrenzung	Flächenanteil des betroffenen Teilraums > 30 % (bezogen auf GWK), Emissionsbetrachtung, Mindestflächengröße: > 25 km2, > 50 km2
SH	Zuordnung Fläche und Nutzung zu Messstelle	Zuordnung der im Einzugsgebiet vertretenen Hauptnutzung; Quotient (belastete Flächenanteile /Summe aller Flächenanteile) >0,3 bis 0,5 (In SH repräsentiert das Messnetz die prozentuale Flächennutzung)

3 EMPFEHLUNG/VORSCHLAG DES UA

4.1 Diffuse Quellen

Die Beurteilung des chemischen Zustands erfolgt in drei Arbeitsschritten:

Zuordnung von Flächen zu Messstellen (länderspezifisch)

Die Zuordnung erfolgt individuell in jedem Land nach einer Methodik, die an die jeweiligen Voraussetzungen hinsichtlich Messdichte etc. angepasst ist.
Die im Folgenden genannten Methoden wurden von den UA-Mitgliedern angewandt und können empfohlen werden:

1a) Jeder Messstelle wird eine charakteristische Landnutzung zugeordnet.

Voraussetzung: Messnetz deckt GWK systematisch ab und repräsentiert die prozentuale Flächennutzung, hohe Messnetzdichte.

1b) Für jede Messstelle werden das Zustromgebiet (z. B. durch hydrogeologische Abgrenzung) und die Landnutzungsanteile (z. B. Acker, Wald, Grünland, Siedlung) im Zustromgebiet ermittelt.

Voraussetzung:

Die Methode ist weitgehend unabhängig von der Messstellendichte.

1c) Den Messstellen wird im Regionalisierungsverfahren (Kriging/SIMIK-Verfahren) eine Fläche zugeordnet.
Voraussetzung: Sehr hohe Messstellendichte (mind. 1 Mst./ 10 - 15 km²) (in homogenen GW-Leitern kann die Messstellendichte verringert werden)

1d) Die Messstellen werden hydrogeologisch homogenen Teilräumen der GWK zugeordnet.
Jede Messstelle ist maximal für den ihr zugeordneten Teilraum repräsentativ.

Voraussetzung: alle Teilräume sind durch Messstellen abgedeckt.

Abschätzung der Relevanz und Ausdehnung der Belastung (länderspezifisch)

Vor einer Beurteilung der Ausdehnung der Belastung sollte für die Messstellen mit Überschreitung der QN eine Relevanzprüfung erfolgen. Für diese Relevanzprüfung können (je nach länderspezifischer Ausgangssituation) verschiedene Methoden herangezogen werden:

2a) Relevanzprüfung auf Grundlage von Landnutzungsquotienten (ermittelt nach den in Anlage 2.1 bis 2.3 beschriebenen Methoden.
Als Kriterium für eine relevante Belastung durch eine Landnutzungsart im GWK gilt ein Landnutzungsquotient von 0,3 – 0,4.

Ausdehnung der Belastung = Fläche der relevant belasteten Landnutzung in einem GWK

Voraussetzung: Aussagekraft jeder Messstelle im Messnetz ist für den GWK gleichwertig.

2b) Relevanzprüfung erfolgt im Rahmen von Regionalisierungsverfahren (Kriging/SIMIK) über Einbeziehung z. B. benachbarter Messstellen, hydrogeologischer Situation und Landnutzung.

Ausdehnung der Belastung = im Regionalisierungsverfahren ermittelte Fläche >QN

2c) Relevanzprüfung erfolgt über Emissionsbetrachtung.
Die den Messstellen zugeordneten Teilräume des GWK werden als relevant belastete Flächen betrachtet, wenn ein kritischer Wert der Emission (z. B. pot. Nitratkonzentration >60 – 75 mg/l) überschritten wird.

Voraussetzung: Modell zur Abschätzung des diffusen Eintrags,

geeignet auch bei einem hohen Anteil von Messstellen mit hydrochemischer Beeinflussung (Nitratabbau).

Ausdehnung der Belastung = Fläche der relevant belasteten Teilräume in einem GWK

Anmerkungen

Bei der Relevanzprüfung erfolgt eine Abschätzung der Wahrscheinlichkeit, ob die Messstellen >QN (im GWK) eine signifikante Belastung einer bestimmten Landnutzung (Methode 2a) bzw. eines hydrogeologischen Teilraumes (Methode 2c) anzeigen.

So ist z. B. nach Methode 2a nur dann von einer „relevanten" Belastung einer Landnutzung auszugehen, wenn der Landnutzungsquotient einen Wert von 0,3 – 0,4 übersteigt. In diesem Fall wird unterstellt, dass die betroffene Landnutzung in diesem GWK signifikant belastend ist. Die Gesamtfläche dieser betroffenen Landnutzung oder die belastete Fläche der Landnutzung im GWK wird als relevant belastete Ausdehnung angenommen. Bei mehr als einer betroffenen Landnutzung im GWK werden die relevant belasteten Ausdehnungen aufsummiert. Ein GWK, bei dem ein Landnutzungsquotient von 0,3 bis 0,4 bei keiner Landnutzung überschritten wird, gilt als nicht signifikant belastet.
Ausdehnung der Belastung = Fläche der relevant belasteten Landnutzung in einem GWK

Nach Methode 2c wird die Emission zur Relevanzprüfung herangezogen. Es wird unterstellt, das eine einem Teilraum zugeordnete Messstelle >QN nur dann eine relevante Belastung für diesen Teilraum anzeigt, wenn die Emission (z. B. pot. Nitratkonzentration) einen bestimmten Wert (z. B. 60 mg/l) übersteigt. Ist die Emission im Teilraum geringer, deutet dies darauf hin, dass die Messstelle >QN in diesem Teilraum eine überwiegend punktuelle Belastung anzeigt. Dieser Teilraum gilt dann als nicht relevant belastet.

Ausdehnung der Belastung = Fläche der relevant belasteten Teilräume in einem GWK

Bei Anwendung des Kriging-Verfahrens (Methode 2b) beeinflussen die den Messstellen >QN benachbarten Messstellen und die zusätzliche Einbeziehung der Landnutzung das Ergebnis der Regionalisierung. Die Relevanzprüfung spiegelt sich damit in der mittels Regionalisierung ausgewiesenen Ausdehnung der Belastung wider.
Ausdehnung der Belastung = im Regionalisierungsverfahren ermittelte Fläche >QN

Beurteilung der Ausdehnung der Belastung (bundesweit einheitlich)

Nach Artikel 4, Abschnitt 2, Buchstabe c, Ziffer i kann die Ausdehnung einer Überschreitung der QN/SW zur Beurteilung einer signifikanten Gefährdung der Umwelt herangezogen werden.

Der UA empfiehlt, die folgenden Kriterien (bundesweit einheitlich) zur Feststellung einer „signifikanten Gefährdung der Umwelt“ heranzuziehen:

1. Zuordnung der Flächen zu Messstellen und die Abschätzung der Ausdehnung der relevanten Belastung (Fläche für die die Überschreitung der Qualitätsnorm (QN) bzw. des Schwellenwertes (SW) im Rahmen der Relevanzprüfung identifiziert wird) wird individuell in jedem Land geregelt.
2. Unabhängig von der absoluten Größe des Grundwasserkörpers, ist ein Grundwasserkörper nur dann in einem schlechten Zustand, wenn die identifizierte Ausdehnung der relevanten Belastung auf mehr als 25 km² des Körpers überschritten wird. Diese Mindestgröße ist auch für die Beurteilung der Belastung durch Sonderkulturen relevant.
3. Körper, die kleiner als 75 km² sind, sind nur dann in einem schlechten Zustand, wenn die identifizierte Ausdehnung der relevanten Belastung auf mehr als 1/3 bzw. 33% ihrer Fläche überschritten wird.

Erläuterung der Vorgehensweise

Die sehr heterogene Ausgangssituation (siehe Pkt. 2) erfordert zunächst eine auf die jeweilige Messnetzkonzeption abgestimmte länderspezifische Vorgehensweise bei der Zuordnung von Flächen zu den Messstellen und der erforderlichen Relevanzprüfung der Messstellen >QN/SW.

Die Zusammenführung dieser länderspezifischen Vorgehensweisen hin zu einer bundesweit einheitlichen Methode der Beurteilung der Ausdehnung der Belastung erfolgt entsprechend Abb. 1.

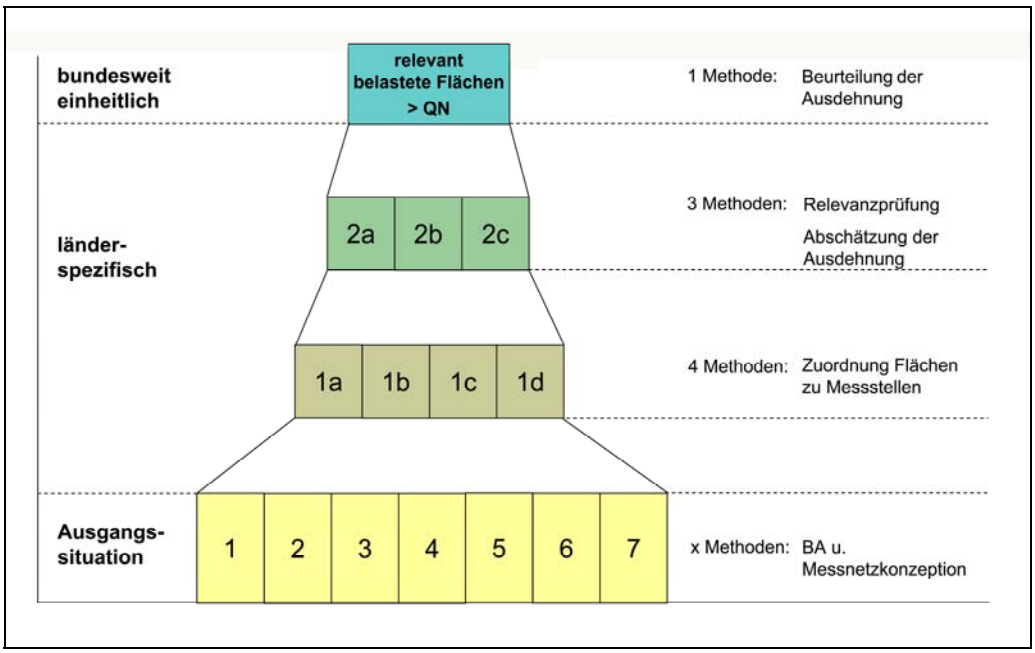


Abbildung 1: Schema der Zusammenführung der länderspezifischen Vorgehensweisen zu einer bundesweit einheitlichen Beurteilungsmethode.

Der UA empfiehlt – in Abhängigkeit von den Voraussetzungen, die sich aus den länderspezifischen Messnetzkonzeptionen ergeben – die in Anlage 1 aufgelisteten Methodenkombinationen.

Die in Pkt. 3.1.3 genannten bundesweit einheitlichen Flächenkriterien zur Beurteilung der Ausdehnung der Belastung sind auf diese empfohlenen Methodenkombinationen abgestimmt, d. h diese Flächenkriterien haben nur Gültigkeit für die empfohlenen länderspezifischen Methodenkombinationen.

3.1 Punktquellen

Der UA empfiehlt, die folgenden Kriterien (bundesweit einheitlich) zur Feststellung einer „signifikanten Gefährdung der Umwelt“ heranzuziehen:

1. Zuordnung der Flächen zu Messstellen und die Ermittlung der Ausdehnung der Belastung (>QN) wird individuell in jedem Land geregelt.
2. Unabhängig von der absoluten Größe des Grundwasserkörpers, ist ein Grundwasserkörper dann in einem schlechten Zustand, wenn aufgrund von Punktquellen auf mehr als 25 km² des Körpers die Qualitätsnorm (QN) bzw. die Schwellenwerte (SW) überschritten werden.
3. Körper, die kleiner als 250 km² sind, sind dann in einem schlechten Zustand, wenn aufgrund von Punktquellen auf 10 % ihrer Fläche die QN bzw. SW überschritten werden.

3.2 Grundlage der Bewertung (Mittelwertbildung)

Grundlage der Bewertung der Überschreitung der QN bzw. SW ist der jeweils aktuellste verfügbare Jahresmittelwert

Dieser wird mit Hilfe von Werten aus Vorjahren plausibilisiert.

Anlage 1: Beurteilung des chemischen Zustandes – diffuse Quellen, Empfohlene Methodenkombinationen.

	Angewandte Methodenkombination			
Bundesland	**NRW, SH**	**BY, BW**	**TH, SN, MV**	**NI**
Zuordnung von Flächen zu Messstellen	1a Charakteristische Landnutzung	1b Zustromgebiet und Landnutzungsanteile	1c Regionalisierungsverfahren (Kriging/SIMIK)	1d Hydrogeol. homogene GWK-Teilräume
Relevanzprüfung*), Abschätzung Ausdehnung der relevanten Belastung	2a Landnutzungsquotient	2a Landnutzungsquotient	2b Regionalisierungsverfahren (Kriging/SIMIK)	2c Emissionsbetrachtung
Bewertung der Ausdehnung der relevanten Belastung	**Bundeseinheitliche Bewertungskriterien** GWK ist im schlechten Zustand, wenn die in Schritt 1 und 2 ermittelte Fläche >25 km^2 oder > 33% der Fläche des GWK			
Voraussetzungen	Messnetz deckt GWK systematisch ab, repräsentiert die prozentuale Flächennutzung, hohe Messstellendichte	Aussagekraft jeder Messstelle im Messnetz ist für GWK gleichwertig, weitgehend unabhängig von Messstellendichte	Sehr hohe Messstellendichte (mind. 1 Mst. / 10-15 km^2) Validiertes Kriging-Verfahren In homogenen GW-leitern kann die Messstellendichte verringert werden	Modell zur Abschätzung des diffusen Eintrags, geeignet auch bei einem hohen Anteil von Messstellen mit hydrochemischer Beeinflussung (Nitratabbau)

*) Relevanzprüfung
Optional können zur Relevanzprüfung noch weitere Kriterien herangezogen werden, wie z. B. statistische Parameter (s. Methode 3), oder Emissionsbetrachtungen.

Anlage 2: Methodenbeschreibungen.

Anlage 2.1 Bayerisches Verfahren zur Beurteilung des chemischen Zustands von Grundwasserkörpern (Berücksichtigung diffuser Belastungen). Methodenkombination 1b/2a nach Anlage 1.

Bayerisches Landesamt für Umwelt
Ref. 91
Stand 20.02.2007

Voraussetzungen

Der Zustrombereich zu einer Grundwassermessstelle bzw. das hydrogeologische Einzugsgebiet einer Quelle oder eines als Messstelle genutzten Brunnens muss bekannt sein. Gleichzeitig müssen die Landnutzungen / Landnutzungsanteile im Zustrombereich / Einzugsgebiet ermittelt sein.

Grenzen

Die Betrachtung der hydrogeologischen Zustrombereiche / Einzugsgebiete stellvertretend für den gesamten GWK ist nur zulässig, wenn das Messnetz so gewählt ist, dass es die Situation im GWK ausreichend gut repräsentiert (Berücksichtigung aller Nutzungen und ggf. aller Hydrogeologischen Einheiten) und wenn die Aussagekraft jeder Messstelle im Messnetz für den GWK gleichwertig ist.

Vorteile des „bayerischen Verfahrens“

Die Vorgehensweise ist unabhängig von der Größe und Heterogenität des GWK anwendbar.

Nachteile des „bayerischen Verfahrens“

Die Visualisierung „belasteter Bereiche“ im GWK kann nur mittels einer Zuordnung von QN/SW-Überschreitungen zu der gesamten als belastet identifizierten Landnutzung erfolgen. Variationen unterliegender geologischer Einflussfaktoren (z. B. Schutzfunktion der Deckschichten) müssen getrennt berücksichtigt werden (sind nicht wie z. B. bei der Anwendung von SIMIK bereits „verrechnet“).

Für die Arbeiten im Zuge der Bewirtschaftungsplanung (Maßnahmenplanung) sind deshalb weitere Betrachtungen notwendig.

Detaillierte Beschreibung der Vorgehensweise

vgl. Papier vom 09.01.07

1) Das Jahr, für welches die Zustandsbewertung durchgeführt werden soll, wird festgelegt. Für alle untersuchten / auszuwertenden Parameter werden Jahresmittelwerte je Messstelle berechnet und plausibilisiert.
2) Die von den Messstellen repräsentierten Flächen werden ermittelt (hydrogeologische Abgrenzung von Zustrombereichen / Einzugsgebieten). Die in den repräsentierten Flächen vorliegenden Nutzungen und ihre prozentuale Aufteilung je Fläche

/ Messstelle werden bestimmt; Kategorien: Acker, Grünland, Siedlung, Sonderkulturen, Wald; z. B. aus ATKIS zu entnehmen.

3) Für jeden Parameter werden für jede Messstelle folgende Informationen aufgelistet: Überschreitung der Qualitätsnorm (QN), anteilige Flächennutzung jeder Kategorie in der durch die Messstelle repräsentierten Fläche. (Beispiel siehe unten)

4) Je Kategorie werden
   - die Angaben über die anteilige Flächennutzung über alle Messstellen aufsummiert;
   - die anteilige Flächennutzung der Messstellen > QN aufsummiert;
   - der Quotient aus [Summe anteilige Flächennutzung > QN] und [Summe aller anteiligen Flächennutzungen] gebildet.

5) Der gebildete Quotient drückt für jede Kategorie aus, zu welchem Anteil diese Flächennutzung auf den insgesamt betrachteten repräsentierten Flächen zu einer QN- Überschreitung beim betrachteten Parameter führt. Dieser Quotient eignet sich daher als Maßstab für die Bewertung, ob die Flächennutzung eine signifikanten Belastung des GWK bedingt.

   Als Kriterium für eine signifikante Belastung wird ein Quotient über 0,4 einheitlich für jede Nutzung herangezogen.
   Voraussetzung ist, dass die Aussagekraft jeder Messstelle im Messnetz für den GWK gleichwertig ist; dies ist für ein repräsentatives Messnetz anzunehmen.

   Beispiel (Parameter Nitrat):

Mess-stelle	**Jahres-mittelwert im Bezug zur QN**	**anteilige Flächennutzung**				
		Acker	**Grünland**	**Siedlung**	**Sonder-kulturen**	**Wald**
M1	*< QN*	*0,2*	*0,1*	*0,3*		*0,4*
M2	*> QN*	*0,7*			*0,3*	
M3	*> QN*	*0,5*	*0,3*			*0,2*
M4	*< QN*	*0,1*	*0,8*	*0,1*		
M5	*< QN*		*0,1*		*0,1*	*0,8*
Summe der jeweiligen Nutzungsanteile >QN (I)		1,2	0,3	0	0,3	0,2
Summe aller jeweiligen Nutzungsanteile (II)		**1,5**	**1,3**	**0,4**	**0,4**	**1,4**
Quotient I/II		0,8	**0,23**	**0,0**	0,75	**0,14**

Das Beispiel ergibt, dass die QN für Nitrat an Messstellen überschritten ist, die 80 % der Ackernutzung und 75 % der Sonderkulturen repräsentieren, jedoch nur 23 % des Grünlands, 14 % des Waldes und keine Siedlungsflächen (bezogen auf die Gesamtheit der repräsentierten Flächen).

6) Nimmt die „belastete Nutzung“ bzw. die Summe der „belasteten Nutzungen“ im GWK eine Fläche von mehr als 25 km² ein, wird der GWK als im schlechten Zustand betrachtet. Im Beispiel führen die beiden Nutzungs-Kategorien Acker und Sonderkulturen (Quotient größer 0,4) dazu, dass der GWK als belastet (im schlechten chemischen Zustand) bewertet wird.

Anlage 2.2 Methodenbeschreibung für Nordrhein-Westfalen. Methodenkombination 1a / 2a nach Anlage 1.

Auswahl der Messstellen und zugeordnete Flächen

Jeder Messstelle wird eindeutig eine charakteristische Landnutzung zugeordnet. Dabei entspricht die Anzahl der Messstellen innerhalb einer Flächennutzung dem Anteil dieser Flächennutzung an der gesamten Grundwasserkörperfläche, z. B. bei 75% Landwirtschaft und 25% Wald: 9 Landwirtschafts-MST und 3 Wald-MST.

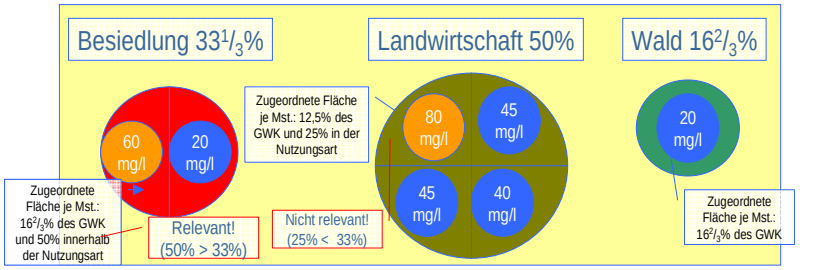
Um ausreichende Informationen in der Fläche zu erhalten wird eine relativ hohe Messstellendichte gewählt: 1 MST/50 km² im Überblicksmonitoring und 1 MST/ 10-20 km² im operativen Monitoring.

Die von einer Messstelle repräsentierte Fläche wird so ermittelt, dass die Größe der jeweiligen Flächennutzung in einem GWK gleichmäßig auf die der Flächennutzung zugeordneten Messstellen verteilt wird, z. B. bei 60 km² Landwirtschaft und 3 Messstellen darin, erhält jede Messstelle eine zugeordnete Fläche von 20 km². Damit ist der GWK zu 100% abgedeckt.

Bewertung bezogen auf einen Parameter neuer NRW-Ansatz nach LAWA

Bei Überschreitung der QN an einer oder mehr Messstellen im GWK werden die von den Messstellen repräsentierten Flächen innerhalb einer Nutzung aufsummiert. Nur wenn diese belastete Fläche größer als 33% der Nutzungsfläche ist, ist es eine relevante Belastung.

Bewertungsbeispiel NRW



Annahmen für das Beispiel: Qualitätsnorm=50mg/l, GWK-Fläche=250qkm	Beispiel
Schlechter Zustand, wenn	
▪ Wenigstens eine Messstelle die Qualitätsnorm verletzt und eine der folgenden Bedingungen erfüllt ist:	trifft zu
▪ Die *relevanten* zugeordneten Flächen dieser Messstellen innerhalb derselben Nutzungsart umfassen mehr als 33% (hier: 50% bzw. 25%) dieser Nutzungsart und diese Flächen zusammen sind größer als 25qkm (hier: 41,7qkm).	trifft zu
▪ eine der belasteten Messstellen liegt in einem Wasserschutzgebiet und das Rohwasser verletzt die Qualitätsnorm.	-

Nordrhein-Westfalen

Die relevanten Belastungen in einem GWK werden ggf. aufsummiert, bei unterschiedlichen Nutzungen. Diese Ausdehnung der relevanten Belastung führt nur dann zu einem schlechten chemischen Zustand, wenn die Fläche größer als 25 km² ist oder bei GWK<75 km² wenn die Ausdehnung der relevanten Belastung größer als 33% der GWK-Fläche ist.

Weiterhin wird in NRW zusätzlich noch ein nutzungsgewichteter Mittelwert für den GWK gebildet. Falls dieser die QN überschreitet, ist der GWK in schlechtem Zustand. (Nach den Auswertungen werden diese GWK aber auch schon durch den obigen Flächenansatz abgebildet.)

Anlage 2.3 Methodenbeschreibung für Schleswig-Holstein.
Methodenkombination 1a / 2a nach Anlage 1.

Auswahl von Messstellen und zugeordneten Flächen

Die Gesamtzahl der Messstellen eines Grundwasserkörpers ist abhängig von der jeweiligen Größe, den geologischen Gegebenheiten und der Nutzungsstruktur. Bei landesweit insgesamt rund 220 Messstellen liegt die Messstellendichte zwischen einer Messstelle auf 35 km² und einer Messstelle auf 135 km².

Bei Grundwasserkörpern mit ungünstigen bis mittleren Deckschichten (< 10m schwer durchlässige Sedimente) wird jeder Landnutzungsart (Acker, Grünland, Siedlung und Wald) eine dem Flächenanteil entsprechende Anzahl von Messstellen zugeordnet (Beispiel: Bei 40% Acker, 30% Grünland, 20% Siedung und 10% Wald mit insgesamt zehn Messstellen im Grundwasserkörper stehen vier Messstellen im ackerbaulich genutzten Bereich, drei Messstellen im Grünlandbereich, zwei in Siedlungsgebieten und eine Messstelle im Wald). Die Messstellen liefern dadurch einen repräsentativen, nutzungsgewichteten Überblick über den gesamten Grundwasserkörper.

Bei Grundwasserkörpern mit günstigen Deckschichten (> 10m schwer durchlässige Sedimente in flächenhafter Verbreitung) ist ein direkter Zusammenhang zwischen Nutzung im engeren Umfeld der Messstelle und dem entnommenen Grundwasser nicht mehr gegeben. Hier erfolgt deshalb keine spezifische Zuordnung von Flächennutzungen.

Bewertung bezogen auf einen Parameter

Bei Überschreitung der QN an einer oder mehren Messstellen in einem GWK wird innerhalb jeder Landnutzung der Quotient aus der Messstellenanzahl mit Überschreitung der QN und der Gesamtanzahl der Messstellen in dieser Landnutzung gebildet.

Beispiel:

Nutzung	Anteil am GWK		Anzahl Messst.
Acker	40%	=	4
Grünland	30%	=	3
Siedlung	20%	=	2
Wald	10%	=	1

Messstellen-Nr.	gemessener Nitratgehalt	Qualitätsnorm (50 mg/l) überschritten?
Acker-Mst. 1	86,3	Ja
Acker-Mst. 2	54,6	Ja
Acker-Mst. 3	12,4	Nein
Acker-Mst. 4	66,3	Ja

%-Anteil der Überschreitung bei Nutzungsart „Acker“ $= \frac{\text{Anzahl Mst.} > \text{QN}}{\text{Gesamtzahl der Mst.}} = \frac{3}{4} = 0{,}75 = 75\ \%$

d.h. 75% der Messstellen bei Ackernutzung zeigen eine Überschreitung der Qualitätsnorm.

Schleswig-Holstein

Die betrachtete Landnutzung stellt eine signifikante Belastung für den Grundwasserkörper dar, wenn der Flächennutzungsquotient größer als 0,33 (1/3 der Fläche, alternativ 30 - 40%) ist.

Ein schlechter chemischer Zustand des Grundwasserkörpers ist gegeben, wenn die so ermittelte belastende Landnutzung eine Flächengröße von mehr als 25 km² überschreitet bzw. bei GWK < 75 km², wenn die Fläche größer als 33% der GWK-Fläche ist.

Thüringen

Anlage 2.4 Methodik zu SIMIK+.
Methodenkombination 1c / 2b nach Anlage 1.

A. Peters
01.03.2007

Einen besonderen Einfluss auf die Beschaffenheit des Grundwassers haben die hydrogeochemischen Eigenschaften des **Grundwasserleiters** und die **Landnutzung**. Das Verfahren SIMIK+ (**Sim**ple Updating and **I**ndicator **K**riging based on **Additional Information**)[1] basiert auf einer geostatistischen Interpolationsmethode, die diese Zusatzinformationen als Klassifizierung der Grundwasserdaten nutzen kann und damit plausiblere Ergebnisse für die räumliche Verteilung von Messwerten erzielt als herkömmliche Methoden. Zur Regionalisierung der Messwerte wird zunächst ein Variogramm berechnet, bei dem aus den Messwerten - jeweils gruppiert nach Abstands- und Richtungsintervallen - eine halbierte quadratische Differenz ermittelt wird. Dieses Variogramm ermöglicht eine detaillierte Aussage der räumlichen Variabilität der Daten. Das SIMIK+ Verfahren ist eine Erweiterung des GIS-Werkzeugs ArcView GIS 3.2.

Als Datengrundlage für eine Interpolation mittels SIMIK+ werden folgende Informationen benötigt:

Punktinformationen:

Jeder Grundwasserbeschaffenheitsmessstelle muss neben den Koordinaten und der Information zum Messwert (inkl. Bestimmungsgrenze) der entsprechende Grundwasserleiter sowie die relevante Landnutzung zugewiesen werden. *(Hinweis: Die Attribute Landnutzung bzw. Grundwasserleiter können von der tatsächlichen Information am Standort der Messstelle abweichen, wenn erkennbar ist, dass die Grundwasserbeschaffenheit durch eine andere Landnutzungsart bzw. Hydrogeologie im Einzugsgebiet der Messstelle beeinflusst wird.)*

Zur Ermittlung der Grundwasserbeschaffenheit ist eine Messstellendichte von 10 bis 15 km² pro Messstelle erforderlich. Um diese Messstellen-Dichte zu erreichen, wurden in Thüringen neben dem Landesmessnetz weitere Messstellen (z. B. Rohwasserdaten der Wasserversorger) herangezogen.

Flächeninformationen:

Um die räumliche Variabilität der Messwerte hinsichtlich der Einflussgrößen Grundwasserleitereigenschaft und Landnutzung zu gruppieren, ist die Verbreitung der Hauptgrundwasserleiter sowie der Landnutzung als Raster-Datei zu hinterlegen. In Thüringen wurden als flächenhafte Zusatzinformationen die Hydrogeologische Übersichtskarte (HÜK200) und die Landnutzung der Datenbasis Corine Landcover (Stand 2000) verwendet.

---

[1] (USLÄNDER, TH. (2003): Benutzerhandbuch SIMIK+, ArcView-Erweiterung zur flächenhaften Darstellung der Grundwasserbeschaffenheit, Version 1.0, Fraunhofer IITB, Landesanstalt für Umweltschutz Baden-Württemberg, Universität Stuttgart – Institut für Wasserbau, Karlsruhe 13.02.2003

Grenzen der Anwendung:

Für eine statistisch abgesicherte Berechnung ist die oben genannte Messstellendichte von 10 bis 15 km² je Messstelle unbedingt einzuhalten. Dabei ist eine möglichst gleichmäßige Verteilung der Messstellen anzustreben. Weiterhin müssen die Messwerte für die Ermittlung der diffusen Belastungen das obere Grundwasserstockwerk repräsentieren. Die Messwerte sollten einen engen Zeitraum umfassen (nach den Erfahrungen in Thüringen max. Mittelwerte aus 3 Jahren), damit die zeitliche Varianz der Grundwasserbeschaffenheit während eines Rechenlaufs ausgeschlossen wird.

SIMIK+ führt eine Analyse der Messwerte auf Ausreißer durch. Dabei ist zu beachten, dass Ausreißer nicht zwangsläufig als Messfehler anzusehen sind, sondern auch lokale Spitzenwerte anzeigen können. Sollten diese Werte für eine flächenhafte Betrachtung von Bedeutung sein, dürfen sie nicht aus dem Datenkollektiv gestrichen werden.

Anlage 2.5 Bewertung des chemischen Zustands des Grundwassers in Niedersachsen. Methodenkombination 1d / 2c nach Anlage 1.

GRUNDLAGEN

Hydrogeologische Unterteilung der Grundwasserkörper

In Niedersachsen wurden im Rahmen der Bestandsaufnahme 121 Grundwasserkörper abgegrenzt. Diese Grundwasserkörper sind – insbesondere in den Lockergesteinbereichen der Norddeutschen Tiefebene – sehr groß und hydrogeologisch heterogen. Aus diesem Grunde wurde im Rahmen der Planung des Monitorings Grundwasser innerhalb der GWK Teilräume mit gleichen oder ähnlichen hydrogeologischen, hydrodynamischen, hydrochemischen und bodenkundlichen Eigenschaften abgegrenzt.

Abschätzung der Emission (Belastung an der Bodenoberfläche)

In Niedersachsen wird zusätzlich zum Monitoring des chemischen Zustands des Grundwassers die Emission, also die Belastung, die aus der ungesättigten Zone in das Grundwasser übertritt, beobachtet. Die sog. Basis-Emissionserkundung beruht auf der landesweit durchgeführten Abschätzung der Emission (= potenzielle Nitratkonzentration im Sickerwasser) aus diffusen Quellen.

Die potenzielle Nitratkonzentration im Sickerwasser dient der Abschätzung der Sickerwassergüte an der Untergrenze des Wurzelraumes. Zu deren Abschätzung werden die folgenden Eingangsgrößen herangezogen.

- N-Flächenbilanzsaldo (berechnet nach Daten der Agrarstatistik)
- Atmosphärische Deposition
- Denitrifikationspotenzial des Bodens
- Gesamtabfluss (nach Wasserhaushaltsmodell GROWA)

BESCHREIBUNG DER VORGEHENSWEISE

Zuordnung der Messstellen zu Teilräumen innerhalb der GWK

Die Messstellen mit Nitratwerten > QN werden den jeweils betroffenen Teilräumen zugeordnet. Eine Messstelle kann maximal für die Fläche des betroffenen Teilraumes repräsentativ sein.

Abschätzung der Relevanz und Ausdehnung der Belastung

Die Frage, ob eine Messstelle mit Nitratwert > QN eine relevante Belastung innerhalb eines Teilraums anzeigt, wird anhand der folgenden Kriterien bewertet:

Kriterium 1: mehrere Messstellen > QN je Teilraum. Unter „mehreren Messstellen“ sind mindestens 2 Messstellen > QN zu verstehen, bzw. >1,5 Messstellen > QN je 100 km².

oder

Kriterium 2: Mittelwert der Nitratkonzentration aller Messstellen in einem Teilraum ist > QN (Kriterium 2 nur anwendbar bei mindestens 5 Messstellen je Teilraum

oder

Kriterium 3: Mittelwert der potentiellen Nitratkonzentration im Sickerwasser des Teilraums > 60 mg/l.

Erläuterung zu Kriterium 3:

Während des Transports im Grundwasser kann Nitrat abgebaut werden. Ein solcher Abbau findet insbesondere in den tieferen Bereichen des niedersächsischen Lockergesteins statt und ist abhängig von der Aufenthaltszeit und der chemischen Beschaffenheit des Gesteins. In einem Teil der Messstellen des Überwachungsmessnetzes in Niedersachsen führen diese Prozesse zu sehr geringen Nitratkonzentrationen bei gleichzeitig hoher Belastung an der Bodenoberfläche. Eine Beurteilung der Relevanz der Belastungen allein aufgrund der Messwerte im Grundwasser und der Landnutzung ist daher nicht ausreichend.

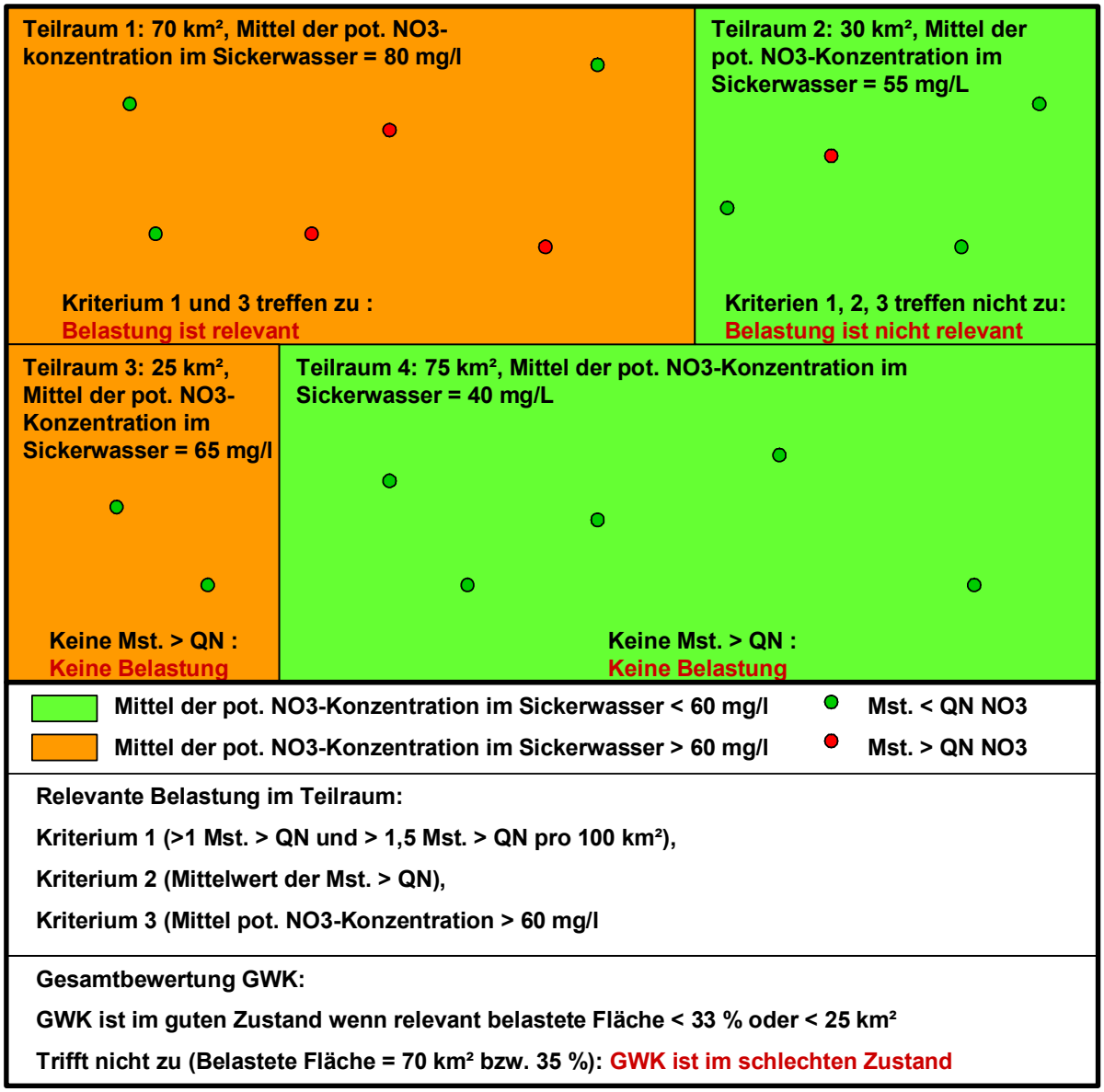
Die mittlere potenzielle Nitratkonzentration im Sickerwasser eines Teilraumes wird als Indikator herangezogen, um zu entscheiden, ob die Messstellen > QN in diesem Teilraum eine flächenhafte, relevante Belastung oder eine punktuelle Belastung anzeigen.

Bei Teilräumen mit nur einer Messstelle > QN und Erfüllung von Kriterium 3 kann die Bewertung durch das Hinzuziehen weiterer Messstellen im Rahmen des Operativen Monitorings abgesichert werden.

Beurteilung der Ausdehnung der Belastung:

Nachdem die Relevanz einer Belastung für einen Teilraum festgestellt wurde, wird die Ausdehnung der Belastung anhand der Flächengröße des Teilraums und dessen Anteil am GWK bewertet. Dabei gelten die von der LAWA vorgeschlagenen Mindestgrößen bzw. Mindestanteile (25 km², 33 %).

Die Methodik der Bewertung des chemischen Zustands eines GWK ist im folgenden Schema dargestellt:



VORAUSSETZUNGEN, GRENZEN, VORTEILE UND NACHTEILE DES VERFAHRENS

Voraussetzungen und Grenzen

Das in Niedersachsen angewandte Verfahren beruht auf der Ausweisung hydrogeologisch einheitlicher Teilräume innerhalb der GWK. Auf eine solche Unterteilung kann nur dann verzichtet werden, wenn der GWK hydrogeologisch einheitlich beschaffen ist.

Als wichtiges Kriterium für die Relevanz der Belastung wird eine Emissionsbetrachtung herangezogen. Für eine solche Emissionsbetrachtung muss ein geeignetes und anerkanntes Berechnungsverfahren oder Modell zur Verfügung stehen. Da eine Emissionsbetrachtung derzeit nur für Stickstoff möglich ist, kann die Bewertungsmethodik nur für den Parameter Nitrat herangezogen werden.

Die Methodik ist nicht an eine bestimmte Messstellendichte gebunden. Sie kann auch bei Nitratabbau im Grundwasser angewandt werden. Für eine endgültige Einstufung eines Teilraums als relevant belastete Fläche muss in Zweifelsfällen jedoch zusätzliche Information herangezogen werden (bspw. zusätzliche Messstellen, Stichtagsbeprobungen).

Entwurf

Sachstandsbericht

LAWA - Unterausschuss

ANHANG

FACHLICHE UMSETZUNG DER GRUNDWASSER-TOCHTERRICHTLINIE (GWTR)

TEIL 2: BUNDESWEIT EINHEITLICHE SCHWELLENWERTE NACH ANHANG II GWTR

Berthold, G. (HLUG, Hessen)
Dihlmann,P. (UM, Baden-Württemberg)
Haas, B (LfU, Bayern)
Kuhn, K. (LFUG, Sachsen)
Lemke, G. (LUNG, Mecklenburg-Vorpommern)
Lerho, A. (MUNLV, Nordrhein-Westfalen)
Peters, A. (TLUG, Thüringen)
Schäfer, W. (LBEG, Niedersachsen, Obmann)
Wieger, C. (MLUR, Schleswig-Holstein)
Wolter, R. (UBA)

06. Juni 2007

INHALT

1 AUFTRAG 33

2 PRÄMISSEN 33

3 EMPFEHLUNG DES UA 34

5 METHODIK ZUR ABLEITUNG VON SCHWELLENWERTEN 34

5.1 Ursprüngliches BRIDGE-Verfahren 34

5.1.1. Festlegung der hydrogeologischen Bezugseinheiten 35

5.1.2. Festlegung der natürlichen Hintergrundwerte (NHW) für die nach Punkt 1 festgelegten hydrogeologischen Bezugseinheiten 35

5.1.3. Referenzwert setzen 36

5.1.4. Ableitung des Schwellenwertes 36

3.3 Modifiziertes BRIDGE-Verfahren 36

3.3.1. Ableitung der Schwellenwerte nach modifiziertem BRIDGE-Verfahren 36

3.3.2. Schwellenwerte nach modifizierten BRIDGE-Verfahren 38

3.4 GFS-Werte als Schwellenwert 39

3.4.1. Anwendungsbereich der GFS-Werte 39

3.4.2. GFS-Werte als Schwellenwerte 40

6 AUSWIRKUNGEN DER UNTERSCHIEDLICHEN METHODEN 41

7 VOR- UND NACHTEILE DER METHODEN 42

7.1 Ursprüngliches BRIDGE-Verfahren 42

7.2 GFS – Werte als Schwellenwerte 42

7.3 Modifiziertes BRIDGE-Verfahren 42

8 HINWEISE ZUR BEWERTUNG 43

9 LITERATUR 43

10 ANLAGEN 43

1 AUFTRAG

Laut Mandat vom 03.11.06 hat der UA die Aufgabe, dem LAWA-AG bis zum 31.05.07 einen Vorschlag für „bundesweit einheitliche Schwellenwerte nach Anhang II GWTR“ vorzulegen.

2 PRÄMISSEN

UA einigt sich zur Ableitung der Schwellenwerte (SW) auf folgende Prämissen:

- Ableitung der Schwellenwerte (SW) erfolgt unter der Prämisse, dass das Grundwasser unabhängig von seiner Nutzung ein Schutzgut ist.
- Ableitung der Schwellenwerte orientiert sich an der natürlichen Beschaffenheit des Grundwassers. Ein „Auffüllen“ ist zu vermeiden.
- Die Ableitungsmethode soll einfach und nachvollziehbar sein
- Bestehende Konzepte, wie z. B. die Geringfügigkeitsschwellenwerte (GFS) bzw. TVO-Werte sollten bei Ableitung der Schwellenwerte berücksichtigt werden.
- Schwellenwerte müssen deutlich unterhalb toxikologisch begründeter Werte liegen. Ausnahme: natürliche Hintergrundwerte liegen oberhalb toxikologisch begründeter Werte.
- Zahl der Schwellenwerte sollte überschaubar (klein) und für möglichst viele Grundwasserkörper anwendbar sein
- Bei synthetischen Stoffen werden bundesweit einheitliche Schwellenwerte (1/2 Referenzwert) vorgeschlagen.
- SW gelten für gesamten GWK. Punktquellen werden gesondert betrachtet.
- Bei Anwendung des BRIDGE-Verfahrens sollen als Referenzwerte die TVO-Werte herangezogen werden.
- Schwellenwerte werden nur für die in der Mindestliste der GWTR genannten Parameter vorgeschlagen, auf die Festlegung eines Schwellenwertes für den Parameter Leitfähigkeit wird verzichtet.

3 EMPFEHLUNG DES UA

Der UA hat die folgenden Methoden zur Ableitung von Schwellenwerten diskutiert:

- BRIDGE-Verfahren
- Modifiziertes BRIDGE-Verfahren
- GFS als Schwellenwerte („GFS-Methode“)

Der UA hat sich nicht eindeutig für ein bestimmtes Verfahren entschieden. Aus fachlicher Sicht und unter Berücksichtigung der oben genannten Prämissen liegen die Präferenzen des UA mehrheitlich beim modifizierten BRIDGE-Verfahren.

Für die Verwendung der GFS-Werte als Schwellenwerte sprechen aus Sicht des UA vor allem verwaltungstechnische Gründe (vgl. Kap.6, Vor- und Nachteile der Methoden). Da die Verwendung der GFS-Werte als flächenhaftes Grundwasser-Qualitätsziel in den einschlägigen LAWA-Veröffentlichungen (vgl. Pkt.4.3.1) ausdrücklich abgelehnt wird, ist aus Sicht des UA vor einer Verwendung der GFS-Werte als Schwellenwerte eine Grundsatzentscheidung der LAWA-AG erforderlich.

Das modifizierte BRIDGE-Verfahren ist aus Sicht des UA ein vorteilhafter Kompromiss aus dem ursprünglichen BRIDGE-Verfahren (Berücksichtigung der natürlichen Hintergrundwerte) und der „GFS-Methode“ (bundesweit einheitliche Nivellierung, überschaubare Anzahl an Schwellenwerten)

5 METHODIK ZUR ABLEITUNG VON SCHWELLENWERTEN

5.1 Ursprüngliches BRIDGE-Verfahren

Die Ableitung der Schwellenwerte nach dem BRIDGE-Verfahren erfolgt entsprechend Abbildung 1 unter Berücksichtigung der natürlichen Hintergrundwerte und toxikologisch begründeter Referenzwerte. Im Fall 1 (siehe Abb.1) wurde der Algorithmus so gewählt, dass die Schwellenwerte in der Mitte zwischen Referenzwerten und natürlichen Hintergrundwerten liegen. Bei niedrigen natürlichen Hintergrundwerten ergeben sich auch niedrigere Schwellenwerte, so dass ein „Auffüllen“ vermindert wird.

Überschreiten die natürlichen Hintergrundwerte den Referenzwert, wird der natürliche Hintergrundwert als Schwellenwert festgelegt.

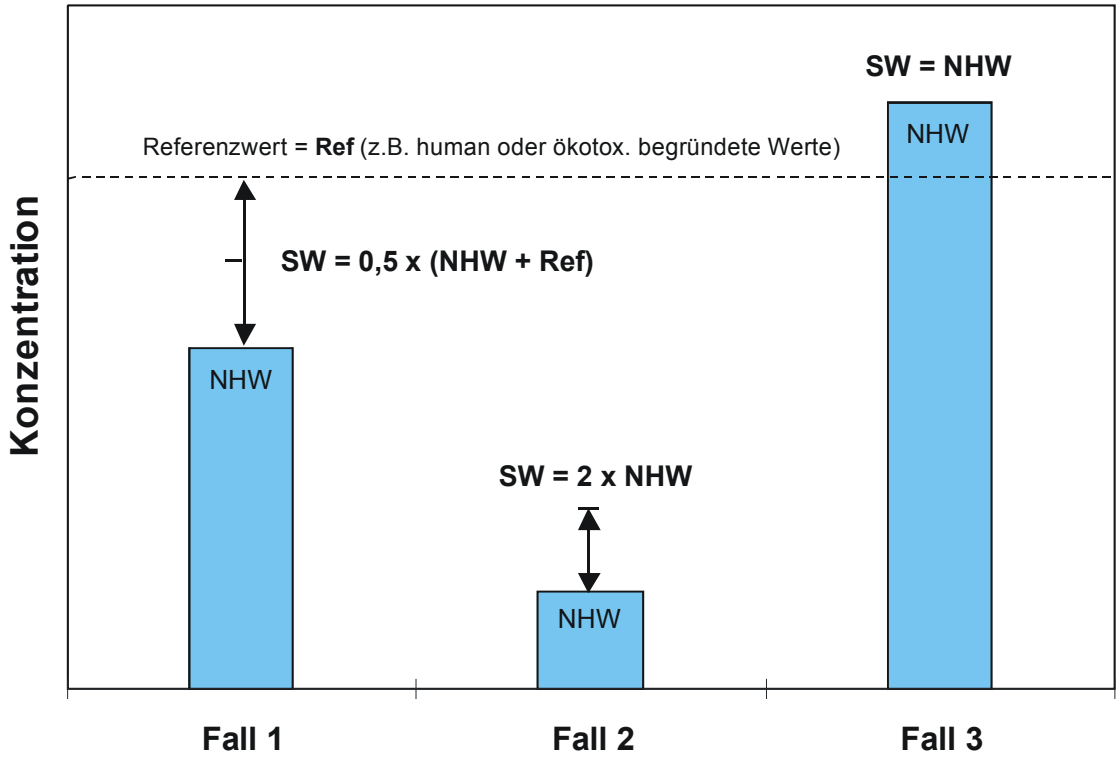


Abbildung 1: Ursprüngliche BRIDGE-Methode zur Ableitung von Grundwasser-Schwellenwerten.
NHW = natürlicher Hintergrundwert,
REF = Referenzwert,
SW = Schwellenwert.

Die Ableitung von Schwellenwerten für Parameter, die auch geogen bedingt im Grundwasser vorkommen, erfolgt nach BRIDGE-Methodik in folgenden Schritten:

5.1.1. Festlegung der hydrogeologischen Bezugseinheiten

a) bundesweit 17 hydrogeologische Bezugseinheiten nach LAWA 2004

b) bei Bedarf (z. B. Überschreitung von SW) werden regional-/länderspezifische hydrogeologische Bezugseinheiten, z. B. entsprechend der Vorschläge der SGD, ausgewiesen.

5.1.2. Festlegung der natürlichen Hintergrundwerte (NHW) für die nach Punkt 1 festgelegten hydrogeologischen Bezugseinheiten

a) Aufarbeitung der Datengrundlage: Aufteilung in natürliche und anthropogen beeinflusste Komponente

b) natürlicher Hintergrundwert = 90 Perzentil

5.1.3. Referenzwert setzen

Die Referenzwerte werden nach human-/ökotoxikologischen Kriterien abgeleitet. TVO-Werte bzw. GFS-Werte können als Referenzwerte herangezogen werden. Der UA spricht sich dafür aus, die TVO-Werte (= EU-Norm) als Referenzwerte heranzuziehen.

5.1.4. Ableitung des Schwellenwertes

Ableitung des Schwellenwertes für geogene Stoffe erfolgt nach den folgenden Regeln:

a) NHW < Referenzwert: Schwellenwert = 0,5*(NHW + Referenzwert)
b) NHW > Referenzwert: Schwellenwert = NHW

Für synthetische Stoffe (NHW = 0) ergeben sich bei Anwendung des BRIDGE-Verfahrens bundesweit einheitliche Schwellenwerte in Höhe des halben Referenzwertes (= ½ GFS-Wert).

c) SW = 0,5 * GFS

3.3 Modifiziertes BRIDGE-Verfahren

Die konsequente Anwendung des BRIDGE-Verfahrens führt zu einer großen, schwer überschaubaren Anzahl von Schwellenwerten.

Ziel des modifizierten BRIDGE-Verfahrens ist eine regelbasierte Aggregierung und damit deutliche Verringerung der Anzahl der Schwellenwerte auf lediglich 2 (3) Stufen je Parameter (vgl. Abb. 2).

Das modifizierte BRIDGE-Verfahren unterscheidet sich vom BRIDGE-Verfahren lediglich im geänderten Algorithmus zur Ableitung der Schwellenwerte.

3.3.1. Ableitung der Schwellenwerte nach modifiziertem BRIDGE-Verfahren

Ableitung des Schwellenwertes für geogene Stoffe erfolgt nach den folgenden Regeln:

a) Wenn NHW < 1/3RW, dann SW = 2/3 RW

b) Wenn NHW > 1/3 RW, dann SW = RW

c) Wenn NHW > RW, dann SW = NHW

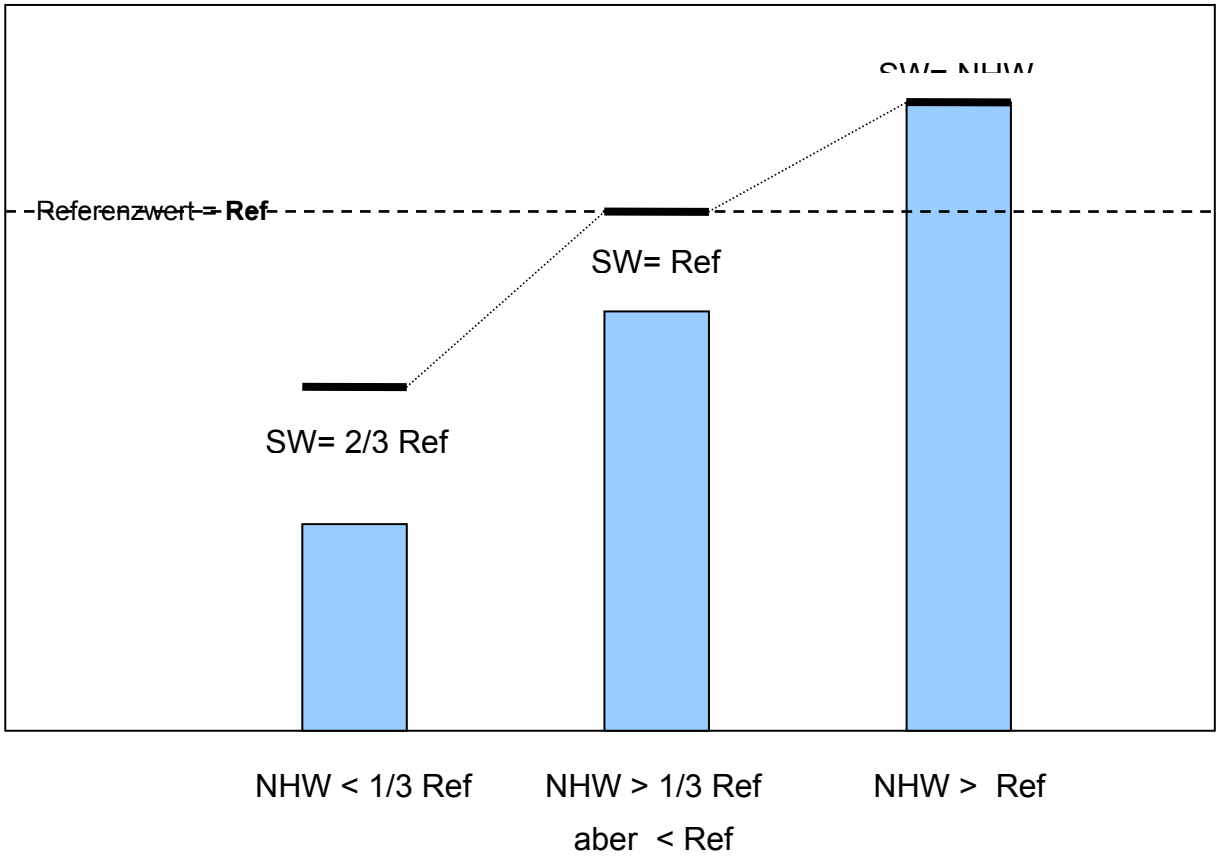


Abbildung 2: Modifizierte BRIDGE-Methode zur Ableitung von Grundwasser-Schwellenwerten.

Für synthetische Stoffe (NHW = 0) ergeben sich bei Anwendung des modifizierten BRIDGE-Verfahrens bundesweit einheitlich Schwellenwerte in Höhe von 2/3 des Referenzwertes (= 2/3 GFS-Wert).

d) SW = 2/3 * GFS

Zur Veranschaulichung wird auf Abbildung 3 verwiesen. Während sich bei der ursprünglichen BRIDGE-Methode für jeden geogenen Hintergrund ein anderer Schwellenwert ergibt (rote Linie), erhält man mit der modifizierten Methode lediglich zwei Schwellenwerte (dunkelblaue Linie). Bei der GFS-Methode ergibt sich unabhängig von der geologischen Formation ein und derselbe Referenzwert (hellblaue Linie).

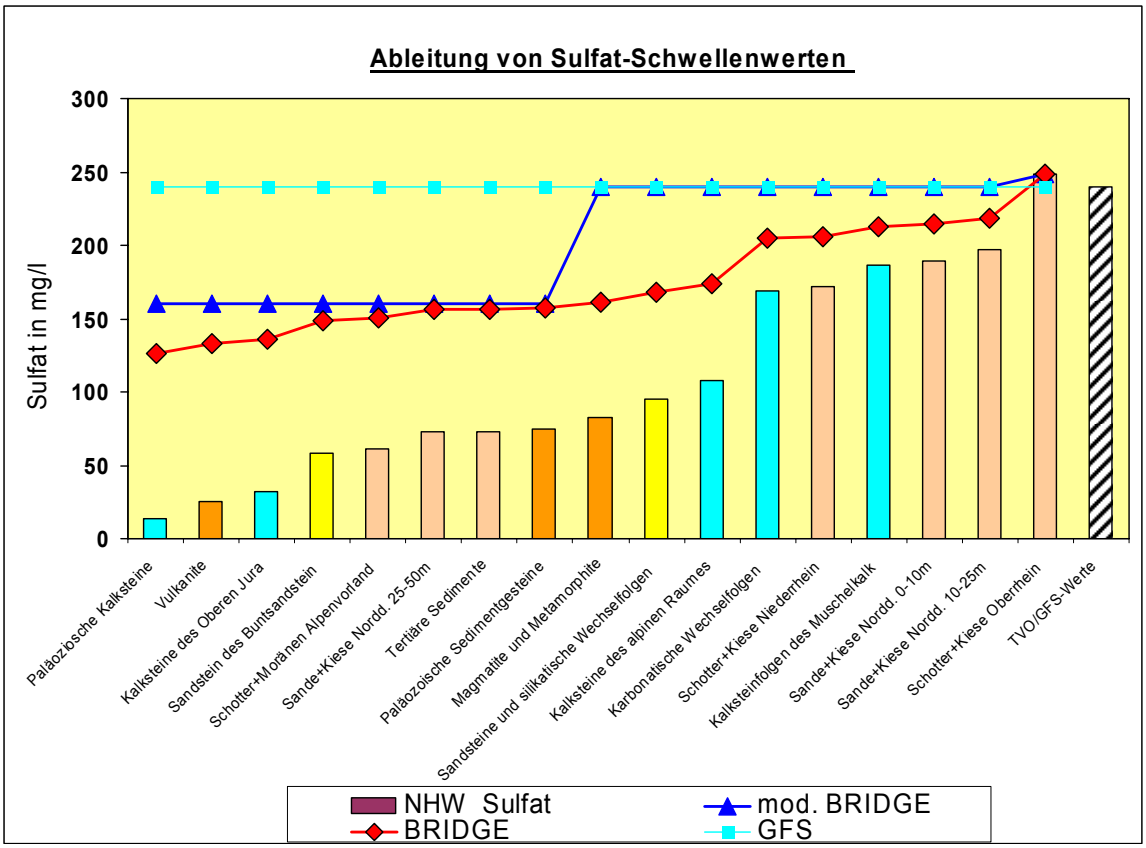


Abbildung 3: Gegenüberstellung der Rechenergebnisse nach den zwei unterschiedlichen Algorithmen der BRIDGE-Methode bzw. GFS-Deckelung am Beispiel Sulfat.

3.3.2. Schwellenwerte nach modifizierten BRIDGE-Verfahren

In Tabelle 1 sind die Schwellenwerte nach modifiziertem BRIDGE-Verfahren im Vergleich zu den TVO-Werten und GFS-Werten Werten unter Zugrundelegung der natürlichen Hintergrundgehalte (LAWA F&E-Vorhaben) dargestellt. Nach diesem Verfahren ergibt sich pro Parameter ein zweistufiges System: ein bundesweit einheitlicher Schwellenwert (SW1) und – als Ausnahme - in Abhängigkeit der hydrogeologischen Bezugseinheiten ein davon abweichender Schwellenwert (SW 2). Die Zahlenwerte sind erforderlichenfalls entsprechend allgemeiner Regeln gerundet. Sofern in den Ländern detailliertere Kenntnisse zu den Hintergrundgehalten vorliegen, können diese zu Grunde gelegt werden.

Tabelle 1: Schwellenwerte nach dem modifizierten BRIDGE-Verfahren.

Parameter	TVO	SW 1	SW 2	GFS	Gesteinstypen für SW 2							
Sulfat (mg/l)	240	240	160	240	Paläoziosche Kalksteine	Vulkanite	Kalksteine des Oberen Jura	Sandstein des Buntsand-stein	Schotter+ Moränen Alpenvorland	Sande+Kiese Nordd. 25-50m	Tertiäre Sedimente	Paläozoische Sediment-gesteine
Ammonium (mg/l)	0,5	0,3	0,5		Schotter+Kiese Niederrhein	Sande+Kiese Nordd. 10-25m	Sande+Kiese Nordd. 25-50m					
Arsen (µg/l)	10	7	10	10	Schotter+ Kiese Oberrhein	Sande+Kiese Nordd. 0-10m	Kalksteine des alpinen Raumes	Sandsteine und silikatische Wechsel-folgen				
Cadmium (µg/l)	5	3		0,5	SW 1 gilt für alle Gesteinstypen							
Blei (µg/l)	10	7	10	7	Sande + Kiese Nordd. 0-10m	Sande + Kiese Nordd. 25-50m	Kalksteine des alpinen Raumes	Sande+Kiese Nordd. 10-25m				
Quecksilber (µg/l)	1	0,7	1	0,2	Sande+Kiese Nordd. 25-50m							
Chlorid (mg/l)	250	167	250	250	Sande + Kiese Nordd. 0-10m	Schotter + Kiese Oberrhein	Schotter + Kiese Niederrhein					
Summe Tri- und Perchlorethylen (µg/l)	10	7		10								

SW 1 = bundesweiter Schwellenwert (nach modifizierter BRIDGE-Methode)
SW 2 = für die genannten Gesteinstypen gilt SW 2 als Schwellenwert (Ausnahme)
Es gilt für alle Schwellenwerte: Wenn NHW > Referenzwert (hier: TVO-Werte), dann ist NHW = SW
Die Länder können bei Bedarf regionalspezifische natürliche Hintergrundwerte ausweisen

3.4 GFS-Werte als Schwellenwert

3.4.1. Anwendungsbereich der GFS-Werte

Die Geringfügigkeitsschwellenwerte (GFS) bilden definitionsgemäß die Grenze zwischen einer nur geringfügigen Veränderung der chemischen Beschaffenheit des Grundwassers und einer nachteiligen oder schädlichen Verunreinigung im Sinne der materiellen Grundlagen des WHG . Sie haben damit eine grundlegende Bedeutung in **allen** Bereichen, in denen es lokal begrenzt um die Bewertung von bereits eingetretenen Grundwasserverunreinigungen (Grundwasserschäden aus wasserrechtlicher Sicht) oder von Gefahren oder Gefährdungen für das Grundwasser geht. Hierzu zählen:

- Bodenschutzrecht
  - schädliche Bodenveränderungen
  - Altlasten und Altlastverdachtsflächen
- Abfallrecht
  - Abfallverwertung und Produkteinsatz,
  - Abfallbeseitigung/Deponierecht.
- Wasserrecht/Gefahrgutrecht
  - Unfälle mit wassergefährdenden Stoffen,

Das LAWA-Papier (Ableitung von Geringfügigkeitsschellenwerten für das Grundwasser, LAWA 2004) erwähnt unter Pkt. 2.2.2/*Beurteilung im Hinblick auf ökotoxische Wirkungen* auch die EU-WRRL. Aufgrund ihrer Ableitungssystematik (wirkungsbezogen nach human- **und** ökotoxikologischen Kriterien, vorrangige Berücksichtigung rechtlich verbindlicher EU-Qualitätsziele bei der Beurteilung ökotoxikologischer Wirkungen) können die Geringfügigkeitsschwellenwerte im Grundsatz auch bei der Definition von Schwellenwerten zur Beurteilung des guten chemischen Zustandes (gem. GWTR) herangezogen werden.

Der Anwendungsbereich der GFS ist allerdings auf räumlich begrenzte Grundwasserverunreinigungen beschränkt (vgl. GAP-Papier, Pkt. 4.2.). Insofern wäre eine Verwendung bei der Definition von Schwellenwerten zunächst nur im Zusammenhang mit Punktquellen zulässig.

Bei einer generellen Verwendung der GFS-Werte als Schwellenwerte auch im Zusammenhang mit diffusen flächenhaften Belastungen ist allerdings darauf hinzuweisen, dass die Geringfügigkeitsschwellenwerte **kein Qualitätsziel** im Sinne einer Immissionsnorm darstellen (vgl.„Ableitung von Geringfügigkeitsschwellen für das Grundwasser“,Pkt.3, LAWA 2004) . Dies leitet sich aus dem **Ort der Beurteilung** her, wie er im Rahmen der bodenschutzrechtlichen Bewertung (Sickerwasserprognose) wie auch bei der Bewertung nach den Grundsätzen des GAP-Papiers vorgegeben ist. Im Rahmen der bodenschutzrechtlichen Gefahrenbeurteilung ist der Ort der Beurteilung durch die Grundwasseroberfläche definiert und die GFS bzw. Prüfwerte der BBodSchV gelten für das Sickerwasser, das am Ort der Beurteilung zu Grundwasser wird. Damit wird gewährleistet, dass sich lokal begrenzt im betroffenen Grundwasservolumen abhängig von der Sickerwasserfracht und dem Verdünnungs-/Abbaupotential im Grundwasserraum eine Situation zwischen dem natürlichen chemischen Zustand und der Geringfügigkeitsschwelle einstellt. Hierdurch wird eine „Auffüllung“ bis zum Niveau der GFS verhindert

Demgegenüber stellen die Schwellenwerte der Tochterrahmenrichtlinie ein Qualitätsziel (Immissionsnorm) für Grundwasser dar. Bei Verwendung der GFS-Werte als Schwellenwerte ist langfristig damit eine Auffüllung der Grundwasserressourcen bis mindestens 75% des Schwellenwertes (Ausgangspunkt für die Trendumkehr) zu besorgen.

3.4.2. GFS-Werte als Schwellenwerte

In Tabelle 2 sind die GFS-Werte für die Parameter der Mindestliste nach GWTR dargestellt. Für Ammonium wurde kein GFS-Wert abgeleitet.

Tabelle 2: Toxikologisch abgeleitete GFS im Vergleich mit natürlichen Hintergrundwerten.

Parameter	relev. Kriterium	GFS	Prüfwert	TVO	Ökotoxizität			Hintergrundwerte	
			BBodSchV		PNEC	LAWA-ZV	MPC	bundesweit Tab. 2.2-2 LAWA 2004	
		µg/l bzw. mg/l	µg/l	µg/l bzw. mg/l	µg/l	µg/l	µg/l	µg/l	
Arsen	TVO	10	10	10			31	**5**	
Blei	Ökotox/HGW	7	25	10		3,4	13	**5**	
Cadmium	Ökotox/HGW	0,5	5	5	0,31	0,072	0,4	**0,5**	
Quecksilber	Ökotox/HGW	0,2	1	1		0,04	0,2	**0,1**	
Chlorid	TVO	250		250					
Sulfat	TVO	240		240					

HGW: Hintergrundwert
PNEC:Predicted No Effect Concentration
MPC: Maximum Permissible Concentration
LAWA-ZV: LAWA Zielvorgaben

Hintergrundwert maßgeblich für GFS

6 AUSWIRKUNGEN DER UNTERSCHIEDLICHEN METHODEN

Beim Vollzug der Richtlinie bzw. einer auf die Richtlinie gestützten Bundesverordnung bergen niedrigere Schwellenwerte das Risiko häufigerer Überschreitungen der Schwellenwerte und damit Einstufungen von Grundwasserkörpern in einen schlechten Zustand. Je nach Methode, konnten folgende Parameter identifiziert werden:

Modifiziertes BRIDGE Verfahren:

Für die Parameter Ammonium, Sulfat, Chlorid wird die Anzahl der Überschreitungen bei Anwendung der BRIDGE-Methode voraussichtlich größer sein.

GFS-Verfahren:

Cadmium und Quecksilber:

Für die Parameter Blei und Arsen ist zu erwarten, dass beide Methoden zu ähnlichen Ergebnissen führen.

Diese Einschätzung wird allerdings in Abhängigkeit des jeweils angetroffenen geogenen Hintergrunds mehr oder weniger relativiert.

Die Hintergrundwerte für Ammonium sollten im Lockergesteinsbereich nochmals überprüft werden. In Niederungsbereichen des Lockergesteins treten teilweise hohe natürliche Ammoniumgehalte auf, die erheblich höher liegen als die im BRIGDE-Verfahren verwendeten Hintergrundwerte.

7 VOR- UND NACHTEILE DER METHODEN

7.1 Ursprüngliches BRIDGE-Verfahren

Pro

- Bezug zu geogenen Hintergrundwerten (konform zur GWTR)
- Stoffeinträge werden stärker begrenzt,
- Kombination der geogenen Hintergrundwerten mit toxikologisch begründeten Werten (TVO, GFS)
- Die Wahrscheinlichkeit, toxikologisch begründete Werte (z. B. TVO-Werte, GFS) zu überschreiten ist geringer
- Besserer Schutz der natürlichen Grundwasserbeschaffenheit, insbesondere bei niedrigen geogenen Hintergrundwerten
- Früheres Erkennen von Beeinträchtigungen

Contra

- Größere Zahl von Schwellenwerten für einen Parameter möglich
- Komplizierte verwaltungstechnische Umsetzung
- Höherer Prüfaufwand

7.2 GFS – Werte als Schwellenwerte

Pro

- Bundesweit einheitlich, akzeptiert
- Nach human- und ökotoxikologischen Kriterien abgeleitet
- Bundesweit jeweils nur ein Schwellenwert, Verwaltungstechnisch einfach handhabbar
- Grundlage für andere Regelungen (Bundesbodenschutz-/Altlastenverordnung, Abfallrecht)
- Konform mit TVO-Werten, ähnlich oder strenger, Cd, Pb, Hg

Contra

- Kein Bezug zur natürlichen Beschaffenheit (siehe Anhang III, Teil A der GWTR)
- GFS-Werte per Definition (siehe LAWA 2004) für Bewertung punktueller Belastungen
- Die Verwendung der GFS als Schwellenwerte, führt häufiger zur Überschreitung toxikologisch begründeter Werte
- Konterkariert die Philosophie des Auffüllungsverbotes , insbesondere bei niedrigen geogenen Hintergrundwerten (in deutlich stärkeren Umfang als nach BRIDGE-Methodik)

7.3 Modifiziertes BRIDGE-Verfahren

Da diese Methode zu lediglich maximal zwei verschiedenen Schwellenwerten SW1 und SW2 führt und, wie eingangs bemerkt, einen Kompromiss zwischen den beiden vorangestellten Methoden darstellt, werden die jeweiligen Vor- und Nachteile der anderen beiden Methoden graduell verringert bzw. erhöht.

8 HINWEISE ZUR BEWERTUNG

Bei Überschreitung auch der regionalspezifisch festgelegten SW erfolgt eine nochmalige messstellenspezifische Prüfung auf geogen bedingte Ursachen (unter Einbeziehung von Expertenwissen)

Können geogen bedingte Ursachen für die Schwellenwert-Überschreitung ausgeschlossen werden, erfolgt die Beurteilung des chemischen Zustands entsprechend Sachstandsbericht, Teil 1. In Anlehnung an § 9 Absatz 3 Bundesbodenschutz- und Altlastenverordnung werden großflächig siedlungsbedingt erhöhte Schadstoffgehalte den geogen bedingten gleichgestellt.

9 LITERATUR

KUNKEL R., VOIGT H.-J., WENDLAND F., HANNAPPEL S. (2004): Die natürliche, ubiquitär überprägte Grundwasserbeschaffenheit in Deutschland, Schriften des Forschungszentrums Jülich, Reihe Umwelt/Environment, Band/Volume 47

LAWA (2004): Ableitung von Geringfügigkeitsschwellen für das Grundwasser. Düsseldorf, Dez. 2004.

LAWA (2002): Grundsätze des vorsorgenden Grundwasserschutzes bei Abfallverwertung und Produkteinsatz (GAP-Papier), Hannover, Mai 2002.

10 ANLAGEN

1. Hydrogeologische Bezugseinheiten und natürliche Hintergrundwerte nach KUNKEL et al. (2004)
2. Liste der Stoffe nach Anhang II, Teil B, der GWTR mit GFS-Werten und TVO-Werten und Schwellenwerten nach modifizierter BRIDGE-Methode
3. Abbildungen 1 bis 7: Graphische Darstellung der natürlichen Hintergrundwerte und der Schwellenwerte für die betrachteten Parameter

Anlage 1: Natürliche Grundwasser-Beschaffenheit (90%-Perzentil) nach Kunkel et al. (2004).

	Gesteinstyp						
Parameter	**Ammonium (mg/l)**	**Arsen (µg/l)**	**Cadmium (mg/l)**	**Chlorid (mg/l)**	**Blei (µg/l)**	**Quecksilber (µg/l)**	**Sulfat (mg/l)**
Sande+Kiese Nordd. 0-10m	0,1	4,4	0,3	87	4,3	0,3	189
Sande+Kiese Nordd. 10-25m	0,35	2,7	0,54	76	8,5	0,29	197
Sande+Kiese Nordd. 25-50m	0,44	2,2	0,38	46	5,9	0,56	73
Schotter+Kiese Niederrhein	0,23	1,2	0,33	106	3,3	0,13	172
Schotter+Kiese Oberrhein	0,04	3,6	0,15	99	1,5	0,07	249
Schotter+Moränen Alpenvorland	0,01	1,4	0,15	56	0,47	0,01	61
Tertiäre Sedimente	0,04	2,9	0,09	25,8	2	0,1	73
Kalksteine des Oberen Jura	0,01	1,3	0,23	37	0,7	0,06	32
Kalksteinfolgen des Muschelkalk	0,01	1,8	0,18	49	2	0,08	186
Kalksteine des alpinen Raumes	0,02	4,5	0,23	39,3	6,8	0,33	108
Paläoziosche Kalksteine	0,01	0,55	0,02	1	0,31	0,29	13,3
Karbonatische Wechselfolgen	0,01	1,8	0,2	52	1,9	0,11	169
Sandsteine und silikatische Wechselfolgen	0,004	4,9	0,22	55	1,5	0,03	95
Sandstein des Buntsandstein	0,01	3,1	0,41	17,4	0,75	0,08	58
Paläozoische Sedimentgesteine	0,03	1,6	0,14	24	1,5	0,09	75
Vulkanite	0,02	1	0,04	21,9	0,07	0,03	25,7
Magmatite und Metamorphite	0,01	2,5	0,36	14,2	0,33	0,08	83

Anlage 2: **Liste der Stoffe nach Anhang II, Teil B, der GWTR mit GFS-Werten, TVO-Werten und Schwellenwerten nach modifizierter BRIDGE-Methode.**

Parameter	TVO	GFS	Schwellenwerte nach modifiziertem BRIDGE-Ansatz	
nach Mindestliste GWTR, Anhang II, Teil B			SW 1	SW 2
Sulfat (mg/l)	240	240	240	160
Ammonium (mg/l)	0,5		0,3	0,5
Arsen (µg/l)	10	10	7	10
Cadmium (µg/l)	5	0,5	3	
Blei (µg/l)	10	7	7	10
Quecksilber (µg/l)	1	0,2	0,7	1
Chlorid (mg/l)	250	250	167	250
Summe Tri- und Per-chlorethylen (µg/l)	10	10	7	
Leitfähigkeit				

SW 1 = bundesweiter Schwellenwert nach modifizierter BRIDGE-Methode

SW 2 = SW 2 als Schwellenwert (Ausnahme) für bestimmte Gesteinstypen

Für Leitfähigkeit werden keine Schwellenwerte festgelegt

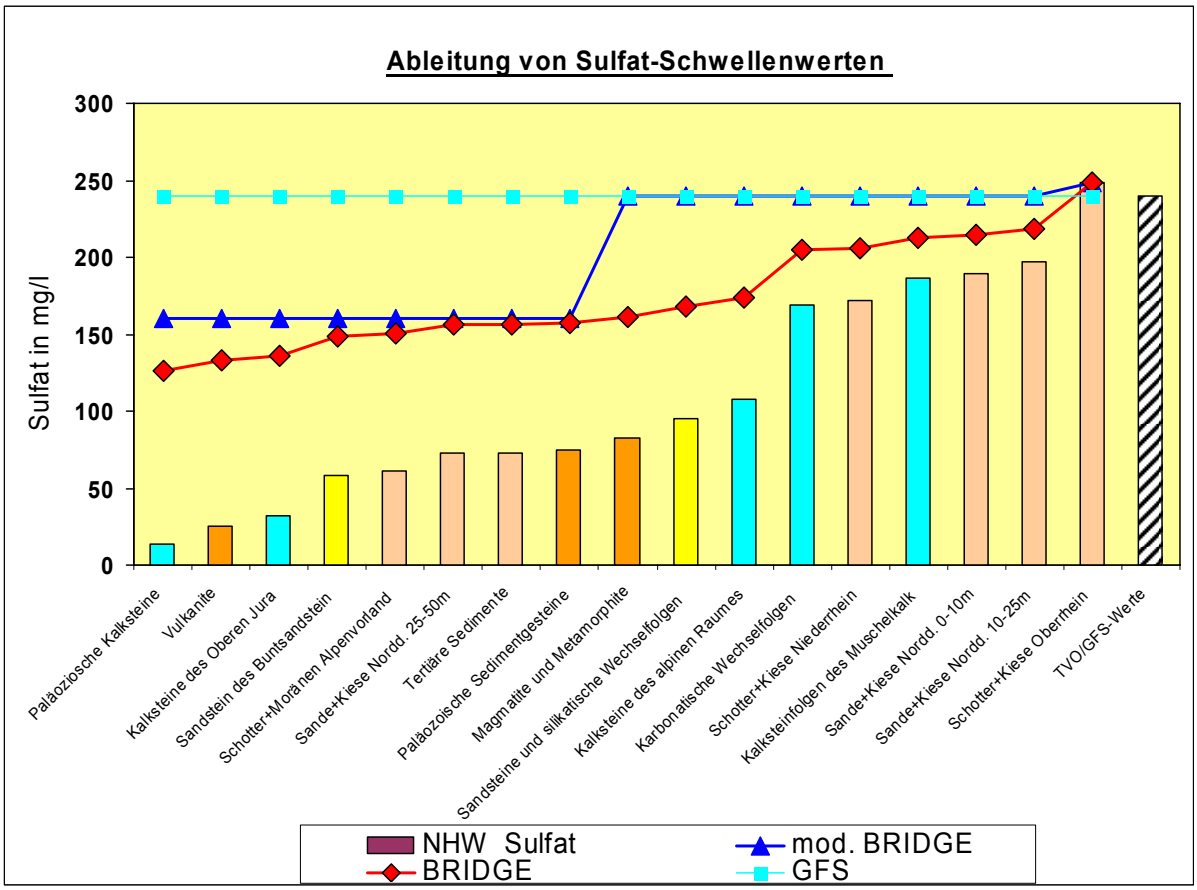


Abbildung 1: Natürliche Hintergrundwerte und Schwellenwerte für Sulfat.

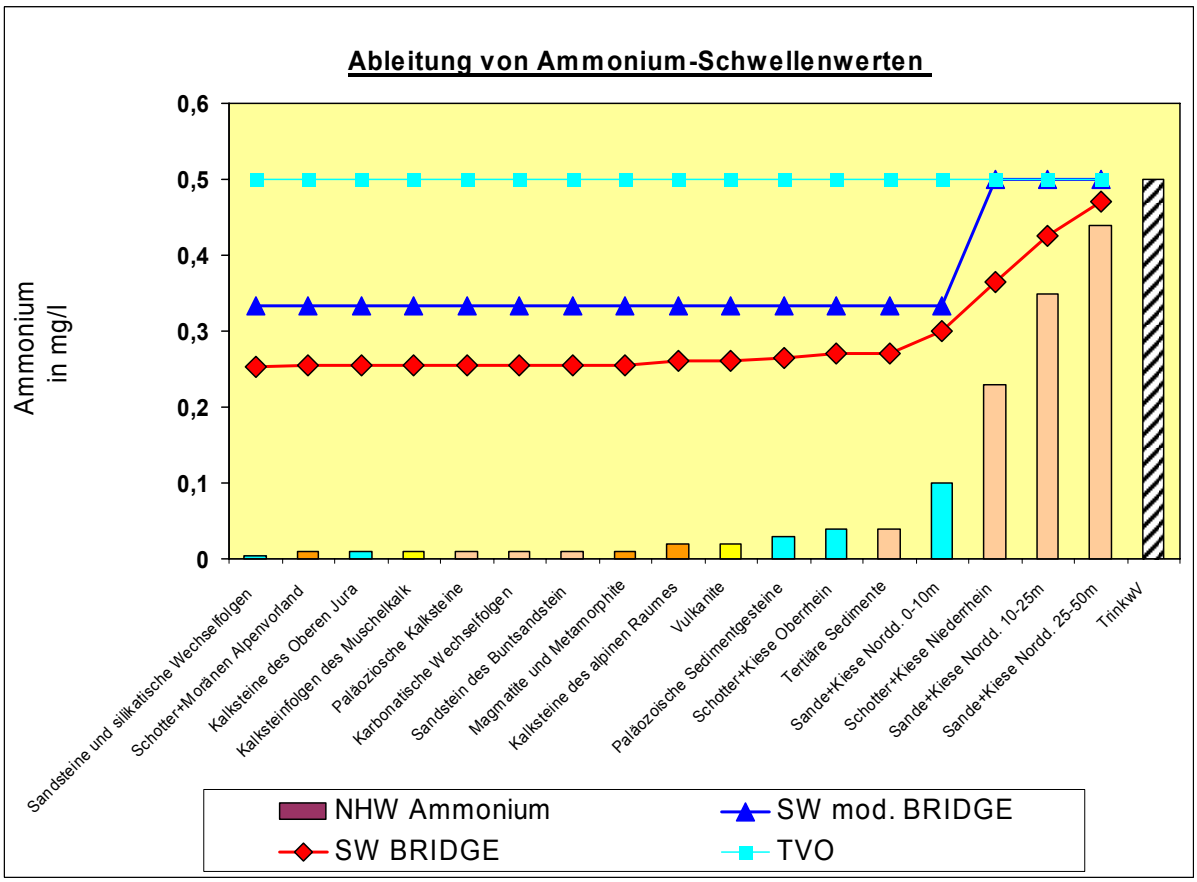


Abbildung 2: Natürliche Hintergrundwerte und Schwellenwerte für Ammonium.

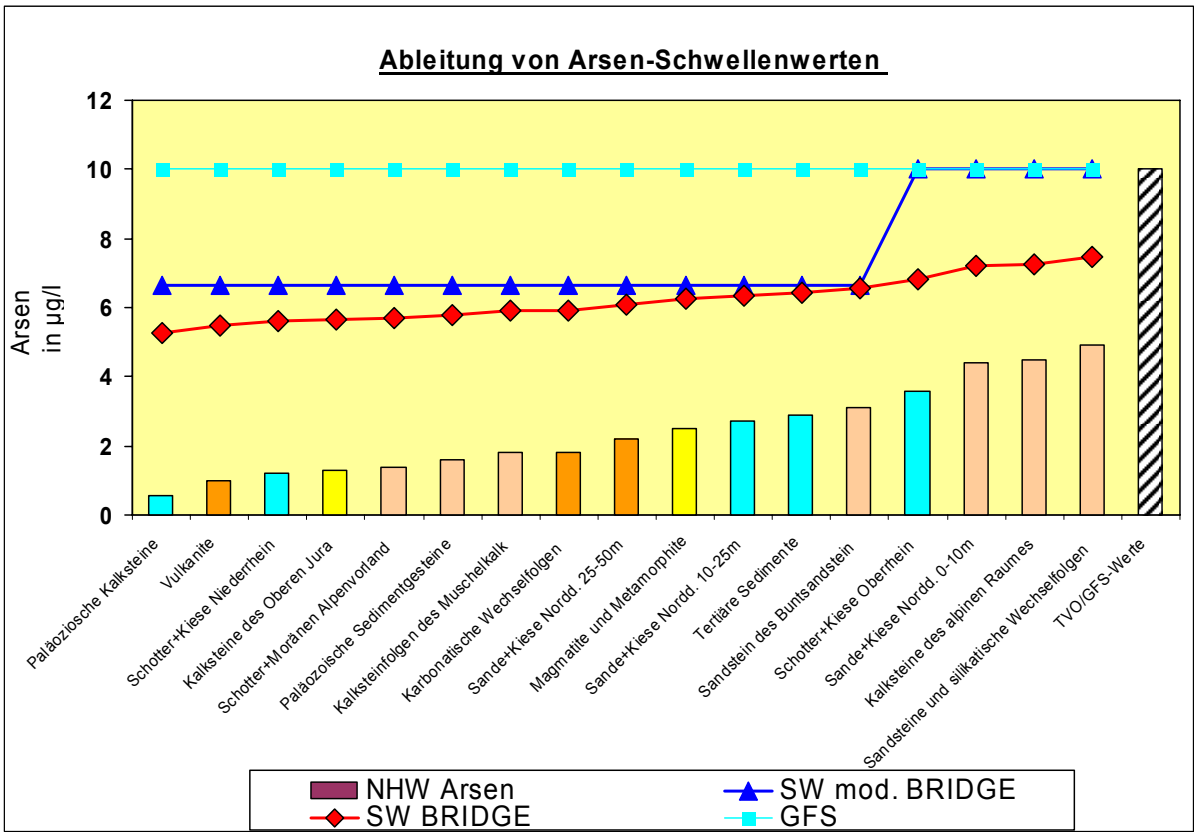


Abbildung 3: Natürliche Hintergrundwerte und Schwellenwerte für Arsen.

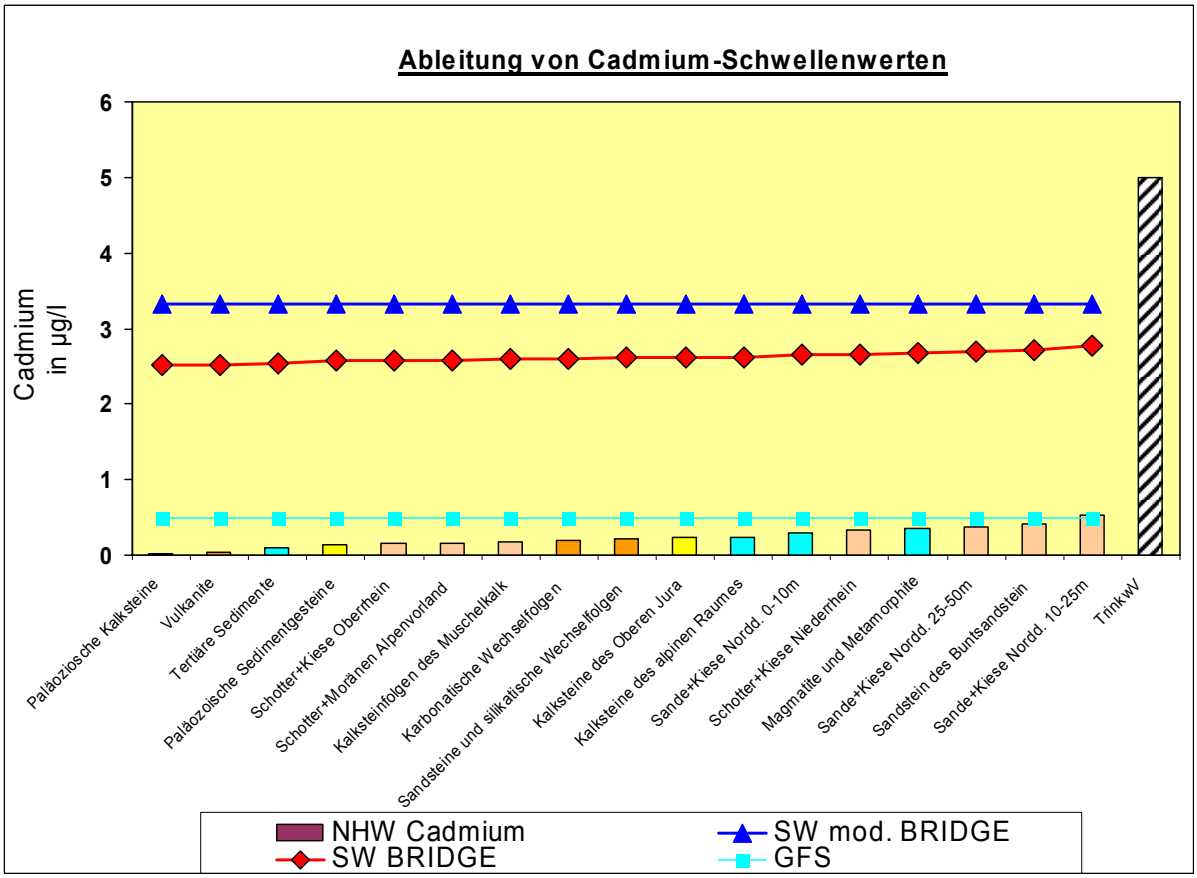


Abbildung 4: Natürliche Hintergrundwerte und Schwellenwerte für Cadmium.

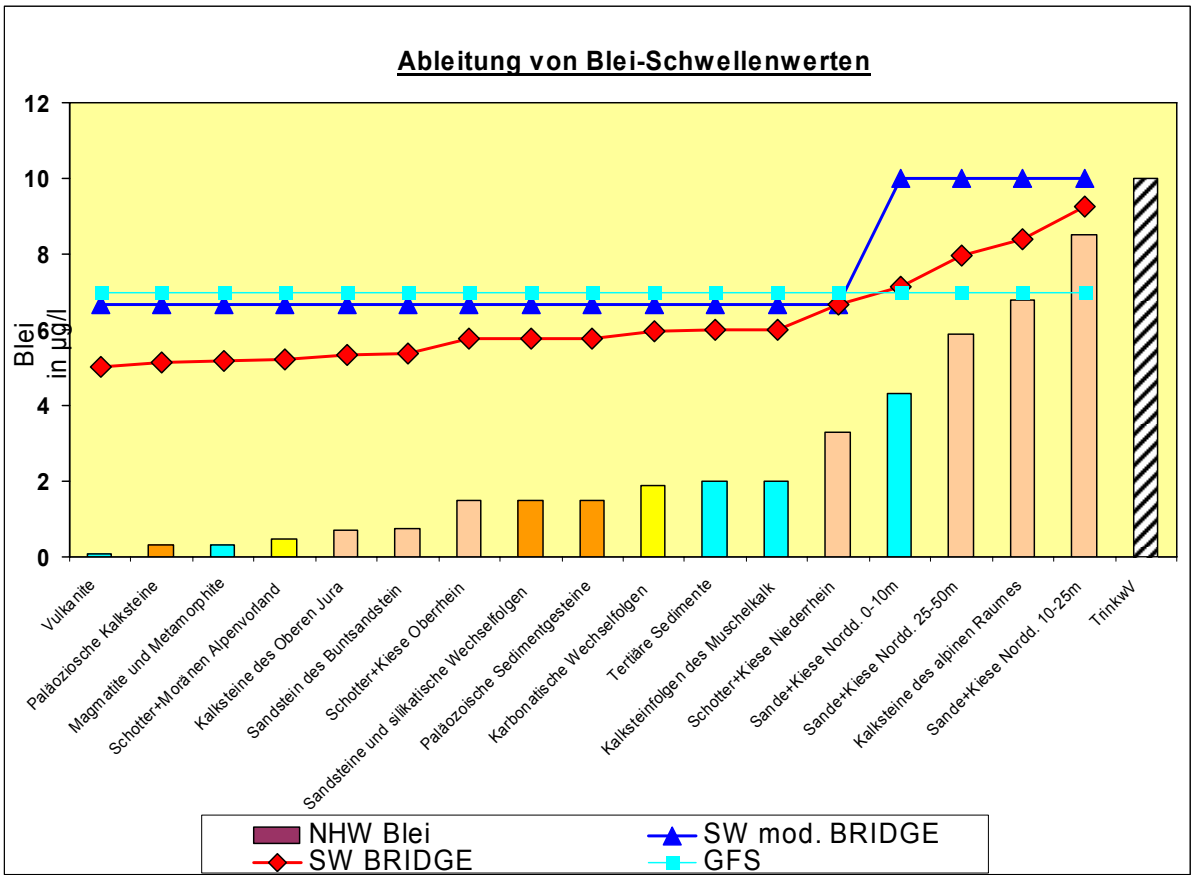


Abbildung 5: Natürliche Hintergrundwerte und Schwellenwerte für Blei.

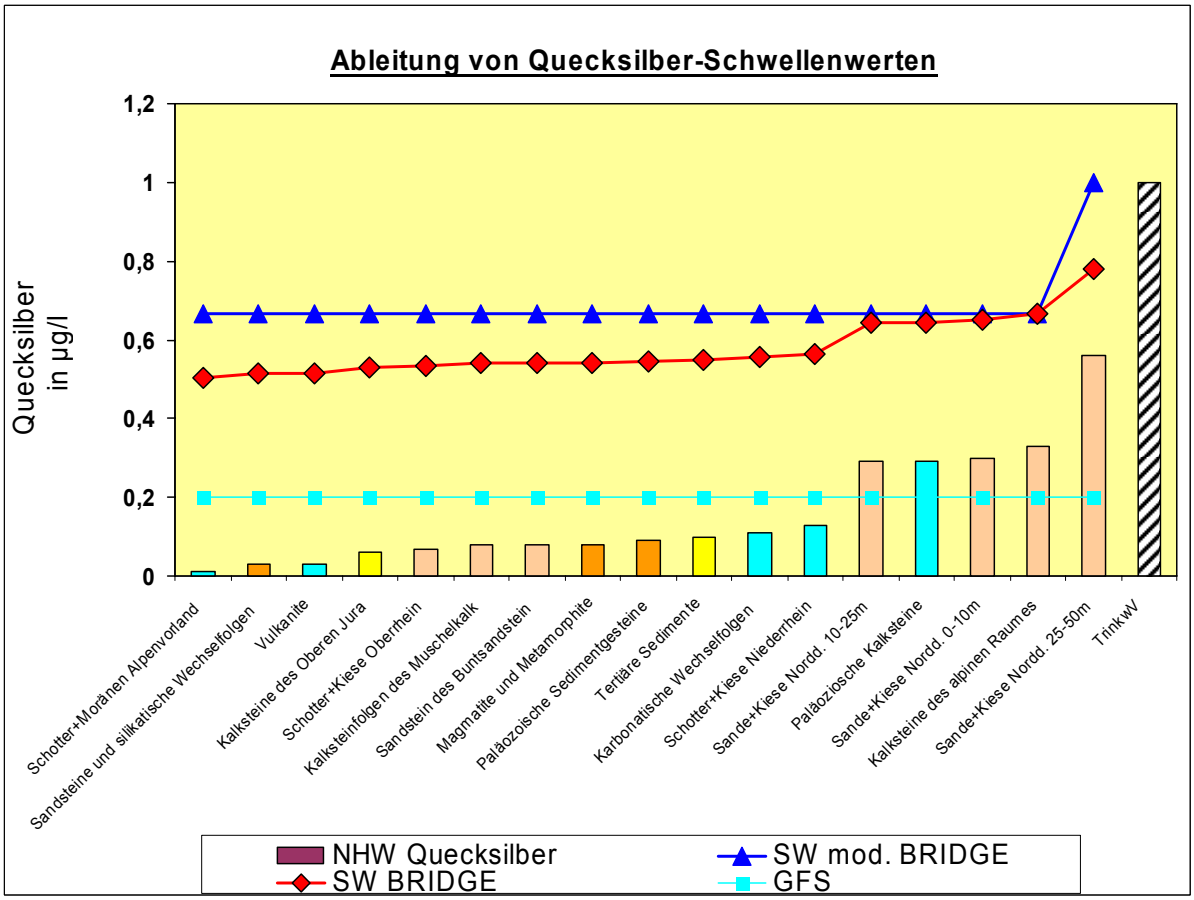


Abbildung 6: Natürliche Hintergrundwerte und Schwellenwerte für Quecksilber.

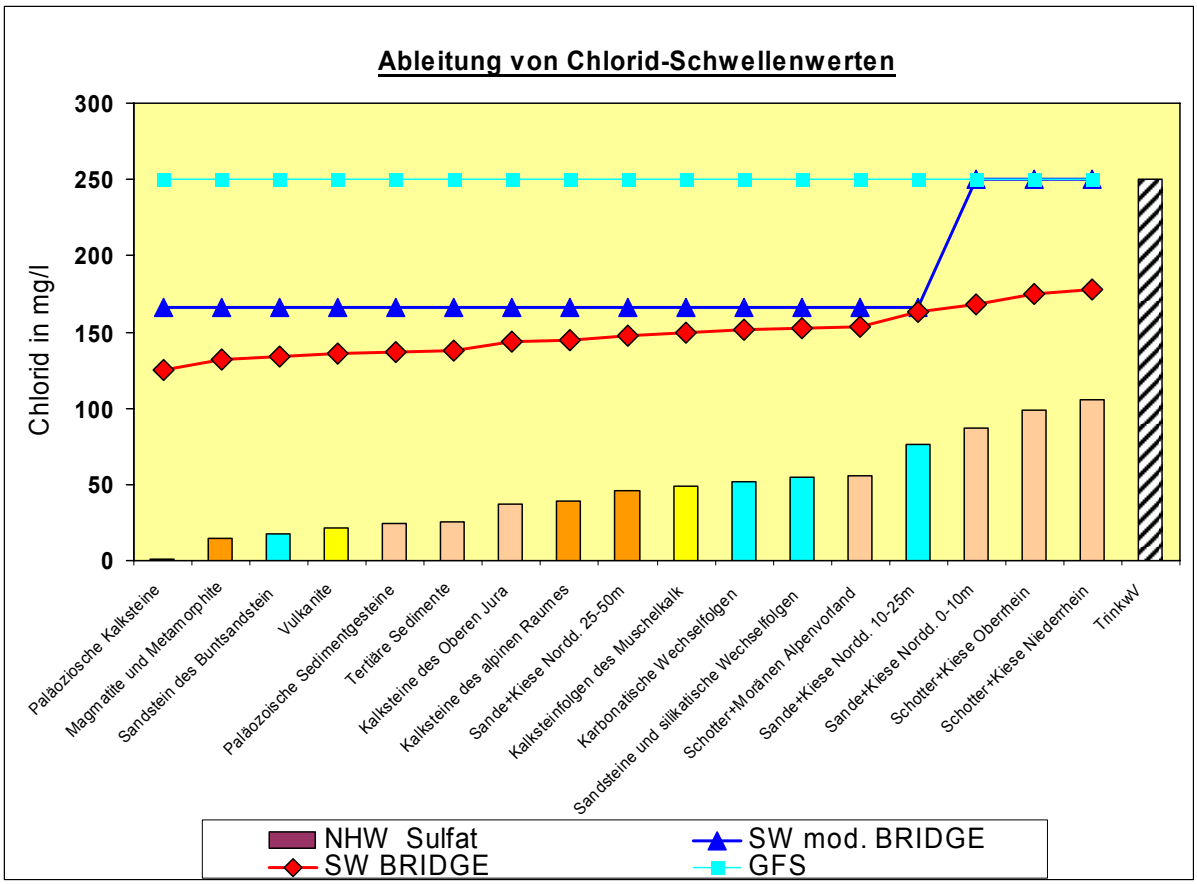


Abbildung 7: Natürliche Hintergrundwerte und Schwellenwerte für Chlorid.

Entwurf
Sachstandsbericht
LAWA - Unterausschuss

ANHANG

FACHLICHE UMSETZUNG DER GRUNDWASSER-TOCHTERRICHTLINIE (GWTR)

TEIL 3: ABLEITUNG VON SCHWELLENWERTEN FÜR DAS GRUNDWASSER

– AMMONIUM –

Berthold, G. (HLUG, Hessen)
Dihlmann,P. (UM, Baden-Württemberg)
Haas, B (LfU, Bayern)
Kuhn, K. (LFUG, Sachsen)
Lemke, G. (LUNG, Mecklenburg-Vorpommern)
Lerho, A. (MUNLV, Nordrhein-Westfalen)
Peters, A. (TLUG, Thüringen)
Schäfer, W. (LBEG, Niedersachsen, Obmann)
Wieger, C. (MLUR, Schleswig-Holstein)
Wolter, R. (UBA)

31. Oktober 2007

INHALT

1 AUFTRAG 53

2 ALLGEMEINES - AMMONIUM 53

3 NATÜRLICHE GRUNDWASSERBESCHAFFENHEIT 55

4 METHODIK 55

4.1 Beurteilung in Anlehnung an Trinkwasserverordnung 56
4.2 Beurteilung im Hinblick auf ökotoxikologische Wirkungen 56

4.2.1. Umweltqualitätsnorm 56

4.2.2. PNEC-Werte 57

4.2.3. LAWA-Zielvorgaben 57

4.2.4. Richt- und Grenzwerte für Ammonium 57

4.2.5. Weitere Recherchen zur Ökotoxikologie 58

5 VORSCHLAG SCHWELLENWERT FÜR AMMONIUM 59

6 LITERATUR 59

ANHANG 63

1 AUFTRAG

Laut Protokoll der Sitzung der LAWA AG vom 26.06.07 hat der UA die Aufgabe, dem LAWA-AG einen Vorschlag für einen „Schwellenwert Ammonium“ vorzulegen.

2 ALLGEMEINES - AMMONIUM

Ammonium wird in Böden unter aeroben Bedingungen nicht angereichert, da unter diesen Bedingungen die Nitrifikation schneller abläuft als die Ammonifikation.

Die Gefahr eines Eintrags in das Grundwasser ist gegeben, wenn das Ammoniumangebot (z. B. nach Düngung) die Nitrifikationskapazität überschreitet oder die nitrifizierenden Mikroorganismen durch äußere Bedingungen wie z. B. sauerstoffarmes Milieu, niedrige pH-Werte oder extreme Trockenheit gehemmt sind.

Ammonium wird von Pflanzen als Nährstoff aufgenommen. Als Kation kann Ammonium im Boden an die Austauscher im Boden, z. B. Tonminerale sorbiert und damit bis zu einem gewissen Grad vor Verlagerung geschützt werden.

Ammonium ist als einwertiges Kation hinsichtlich der Verlagerungsgefahr mit Kalium zu vergleichen.

Quellen für Verunreinigungen des Grundwassers durch Ammonium können z. B. sein:

- mineralische Düngemittel und Wirtschaftsdünger,
- häusliche und landwirtschaftliche Abwässer,
- Kläranlagenabläufe, Sickerwässer aus Deponien.

Ammonium kann im Grundwasser auch geogen vorkommen (vgl. Pkt. 3). Unter sauerstoffarmen Bedingungen entsteht bei der mikrobiellen Zersetzung stickstoffhaltiger organischer Substanzen Ammonium. Unter anaeroben Bedingungen kann Nitrat durch Bakterien zu Ammonium (Nitratammonifikation) bzw. zu N_2/N_2O (Denitrifikation) reduziert werden.

Ammonium und Ammoniak stehen im Wasser in einem Gleichgewicht zueinander.

Dieses Gleichgewicht ist vom pH-Wert und der Temperatur des Wassers abhängig. Bei einem Anstieg des pH-Wertes verschiebt sich der Schwerpunkt zum Ammoniak. Für die aquatische Umwelt kann Ammonium im Zusammenhang mit steigenden pH-Werten relevant sein, wenn sich das chemische Gleichgewicht in Richtung Ammoniak (NH_3) verschiebt.

$$NH_3 + H_2O \longleftrightarrow NH_4^+ + OH^-$$

Die Toxizität von Ammoniak ist wesentlich größer als die von Ammonium.

Aus toxikologischer Sicht ist Ammonium/Ammoniak im Trinkwasser im Vergleich zu den hygienisch-mikrobiologischen und technologischen Gesichtspunkten von untergeordneter Bedeutung (Dieter, 2003).

In der Liste der wassergefährdenden Stoffe (Anlage 2 der VwVwS) ist Ammonium nicht aufgeführt, wohl aber Ammoniak und verschiedene Ammoniumverbindungen (Tab. 1).

Tabelle 2: Wassergefährende Stoffe, Stoffgruppen und Gemische nach Anlage 2 der VwVwS.

Stoffbezeichnung	Kenn-Nr.	WGK	Cas-Nr.
Ammoniak	211	2	7664-41-7
Ammoniumarsenat	289	3	
Ammoniumchlorid	213	1	12125-02-9
Ammoniumdichromat	290	3	
Ammoniumeisen(II)-sulfat	513	1	
Ammoniumfluorid	291	1	
Ammoniumhexafluorsilikat	544	2	
Ammoniumhydrogenfluorid	292	1	
Ammoniumhydrogensulfat	293	1	
Ammoniummolybdat	637	1	
Ammoniummonochromat	1033	3	
Ammoniumnitrat	212	1	6484-52-2
Ammoniumperchlorat	294	1	
Ammoniumperoxdisulfat	836	1	
Ammoniumpikrat	295	2	
Ammoniumsulfat	296	1	7783-20-2
Ammoniumsulfid	297	2	
Ammoniumthiocyanat	1442	1	
Ammoniumthioglykolat	5245	1	
Ammoniumthiosulfat	193	1	

3 NATÜRLICHE GRUNDWASSERBESCHAFFENHEIT

Basiswerte der natürlichen Grundwasserbeschaffenheit in Deutschland für Ammonium wurden von KUNKEL et al. (2004) als 90. Perzentilwerte für 15 (17?) hydrogeologische Bezugsräume ausgewiesen (Tab. 2).

Tabelle 2: Basiswerte der natürlichen Grundwasserbeschaffenheit für Ammonium als 90. Perzentilwerte für 17 hydrogeologische Bezugsräume (nach Kunkel et al., 2004) und als flächengewichtetes Mittel für Deutschland.

Hydrogeologischer Bezugsraum	90. Perzentil mg/l	Hydrogeologischer Bezugsraum	90. Perzentil mg/l
Sande + Kiese Nordd., 0 – 10 m	0,1	Kalksteine des alpinen Raumes	0,007
Sande + Kiese Nordd., 10 – 25 m	0,4	Paläoziosche Kalksteine	0,02
Sande + Kiese Nordd., 25 – 50 m	0,44	Karbonatische Wechselfolgen	0,007
Schotter + Kiese Niederrhein	0,2	Sandsteine und silikatische Wechselfolgen	0,004
Schotter + Kiese Oberrhein	0,04	Sandstein des Buntsandstein	0,01
Schotter + Moränen Alpenvorland	0,006	Paläozoische Sedimentgesteine	0,03
Tertiäre Sedimente	0,04	Vulkanite	0,02
Kalksteine des Oberen Jura	0,01	Magmatite und Metamorphite	0,01
Kalksteinfolgen des Muschelkalk	0,01	**Flächengewichtetes Mittel für Deutschland**	**0,2 – 0,3**

4 METHODIK

Die Geringfügigkeitsschwelle (GFS) ist nach LAWA (2004) definiert als „…Konzentration, bei der trotz einer Erhöhung der Stoffgehalte gegenüber regionalen Hintergrundwerten keine relevanten ökotoxischen Wirkungen auftreten können und die Anforderungen der Trinkwasserverordnung oder entsprechend abgeleiteter Werte eingehalten werden.“

Die Methodik zur Ableitung eines Schwellenwertes für Ammonium folgt der im LAWA-Konzept „Ableitung von Geringfügigkeitsschwellen für das Grundwasser“ (2004) beschriebenen Vorgehensweise. Das Übersichtsschema aus LAWA (2004) ist im Anhang wiedergegeben.

Der Unterausschuss hat sich bei der Zusammenstellung der erforderlichen Daten zur Ableitung des Schwellenwertes auf gesetzlich geregelte Werte beschränkt.

4.1 Beurteilung in Anlehnung an Trinkwasserverordnung

Ammonium ist nach § 7 und Anlage 3 der Trinkwasserverordnung (TrinkwV 2001) ein Indikatorparameter. Im Wasser für den menschlichen Gebrauch müssen die in Anlage 3 der TrinkwV 2001 festgelegten Grenzwerte und Anforderungen für Indikatorparameter eingehalten sein.

Es sind zwei Schutzziele definiert:

1. Schutzziel „Chlorung des Trinkwassers (Minimierung der Entstehung von Chloraminen)“: **0,5 mg/l**
2. Schutzziel „Geschmack/Geruch“: je nach pH-Wert **1,5 mg/l Ammoniak** oder **35 mg/l Ammonium-Ion**

Spätestens ab 35 mg/l wäre ein Rohwasser ohne Aufbereitung nicht mehr als Rohstoff für Trinkwasser geeignet und schon bei weit niedrigeren Konzentrationen (ab 0,5 mg/l) könnte ein Rohwasser durch Chlorung nicht mehr sicher desinfiziert werden. Andernfalls wäre die notwendige Konzentration an freiem Chlor (bis 0,3 mg/l) nur unter Hinnahme erheblicher Geschmacksprobleme (verursacht durch Chloramine) aufrecht zu erhalten (Dieter, 2003).

4.2 Beurteilung im Hinblick auf ökotoxikologische Wirkungen

Es wird auf Richt-/Grenzwerte (und konsentierte ökotoxikologische Daten) für Oberflächengewässer zurückgegriffen. In Anlehnung an LAWA (2004) werden die ökotoxikologischen Daten in folgender Reihenfolge berücksichtigt:

- Rechtlich verbindliche, ökotoxikologisch begründete Umweltqualitätsnorm für aquatische Lebensgemeinschaften der Oberflächengewässer,
- PNEC-Werte,
- LAWA-Zielvorgaben,
- Weitere Richt- und Grenzwerte.

4.2.1. Umweltqualitätsnorm

Nach Anhang 5 (Umweltqualitätsnorm für die Einstufung des chemischen Zustandes) der LAWA-Musterverordnung zur Umsetzung der Anhänge II und V der WRRL (LAWA 2003) ist für Ammonium keine Umweltqualitätsnorm ausgewiesen.

Als Umweltqualitätsnorm für Ammonium kann auf die „Richtlinie 2006/44/EG des Europäischen Parlaments und des Rates vom 6. September 2006 über die Qualität von Süßwasser, das schutz- oder verbesserungsbedürftig ist, um das Leben von Fischen zu erhalten“ zurückgegriffen werden.

4.2.2. PNEC-Werte

PNEC-Werte sind nach EU-Prinzipien (Technical Guidance Document TGD 2003) abgeleitet und mit dem Bericht zum „risk assessment report“ auch akzeptiert worden. Für Ammonium, Ammoniak und häufig verwendete Ammoniumsalze, wie Ammoniumchlorid, Ammoniumsulfat, Ammoniumnitrat, wurden im European Chemical Substances Information System (ESIS, http://ecb.jrc.it/esis/) keine Einträge zum risk assessment/existing substances gefunden.

4.2.3. LAWA-Zielvorgaben

Auf Grundlage des Zielvorgabenkonzeptes wurde von der LAWA in Zusammenarbeit mit dem UBA eine chemische Gewässergüteklassifikation erarbeitet. Für gefährliche Stoffe wird als Zielvorgabe die Güteklasse II angegeben. Ammonium wird nicht als „gefährlicher Stoff“, sondern als „Nährstoff“ klassifiziert.

Tabelle 3: Chemische Gewässergüteklassifikation Ammonium.

Stoffbezogene chemische Gewässergüteklasse	Ammonium-Stickstoff mg/l	Ammonium mg/l
I	<0,04	<0,05
I – II	0,1	0,13
II	0,3	0,39 = ~0,4
II – III	0,6	0,77
III	1,2	1,54
II – IV	2,4	3,08
IV	>2,4	>3,08

4.2.4. Richt- und Grenzwerte für Ammonium

In Tabelle 4 sind Richt- und Grenzwerte aufgelistet die zur Ableitung eines Schwellenwertes für Ammonium herangezogen werden können. Dabei bezieht sich der Grenzwert der TrinkwV auf das Trinkwasser, alle anderen in Tabelle 4 genannten Werte beziehen sich auf Oberflächengewässer..

Tabelle 4: Richt- und Grenzwerte für Ammonium.

Quelle	Grenz- und Schwellenwerte		
	Originalangabe		NH_4^- (mg/l)
TrinkwV	0,5 mg/l NH_4		0,5
EU-Richtlinie 2006/44/EG Fischgewässerrichtlinie	Richtwert <0,2 mg/l NH_4	Imperativer Wert <1 mg/l NH_4	0,2
	Cyprinidengewässer		
LAWA-Zielvorgabe (1998)	0,31 mg/l NH_4-N		0,4
US-EPA (1993)	1,71 mg/l NH_4-N bei pH 8,0; 20 °C 0,342 mg/l NH_4-N bei pH 9,0; 20 °C		2,2 0,44
CAN-EPA	1,37 mg/l NH_4 bei pH 8,0; 10 °C 2,20 mg/l NH_4 bei pH 6,5; 10 °C		1,37 2,20

4.2.5. Weitere Recherchen zur Ökotoxikologie

Weitere toxikologische Daten sind zu finden in

UBA 2000: (siehe Literaturliste) und

Stoffdatenblätter Grundwasser der Landesanstalt für Umweltschutz Baden-Württemberg (siehe Literaturliste).

Darüber hinaus wurden Recherchen in verschiedenen Datenbanken mit dem folgenden Ergebnis durchgeführt:

European Chemical Substances Information System (ESIS)

http://ecb.jrc.it/esis/
keine Einträge zu risk assessment für Ammonium, Ammoniak, Ammoniumchlorid, Ammoniumnitrat, Ammoniumsulfat

Environmental Protection Agency

Substance Registry System:
http://iaspub.epa.gov/srs/search$.startup
keine Einträge für Ammonium, Ammoniak, Ammoniumnitrat ,Ammoniumchlorid, Ammoniumsulfat.

Integrated Risk Information System
http://www.epa.gov/iris/
keine Einträge für Ammonium, Ammniumchlorid, Ammoniumnitrat, Ammoniumsulfat

5 VORSCHLAG SCHWELLENWERT FÜR AMMONIUM

Die Ableitung des Schwellenwertes erfolgt nach dem „Ableitungsschema Geringfügigkeitsschwellenwerte“ (LAWA 2004), siehe Anhang 1. Die zur Ableitung herangezogenen Daten sind Tabelle 5 zu entnehmen.

Tabelle 5: Datenblatt Schwellenwert (nach LAWA 2004). Ammonium

Substanzname	**Ammonium**
CAS-Nr.	
Schwellenwert (mg/L)	**0,5**
Maßgebliche Basis für den Vorschlag	☒ TrinkwV ☐ Analog TrinkwV ☐ Ökotoxizität ☐ Hintergrundkonzentration/Untergrenze
Grenzwert der TrinkwV (mg/L)	**0,5**
Vorschlag analog TrinkwV (µg/L)	
Humantoxikologisch begründeter Wert	
Ästhetisch begründeter Wert	
Ökotoxikologische Kriterien (mg/L)	
EU-Fischgewässerrichtlinie	**0,20**
PNEC (aquat.)	
LAWA ZV	**0,40**
MPC	
Sonstige	
Basiskonzentration (mg/L)	**0,2 – 0,3** (s. Punkt 3 im Text)

Erläuterung
Entsprechend des „added risk approach“ wird zu den ökotoxikologisch abgeleiteten Werten ein Basiswert addiert. Der Richtwert der EU-Fischgewässerrichtlinie (2006744/EG) + Basiswert entspricht dem Grenzwert der TrinkwV.
Ausschlaggebend für die Festlegung der Geringfügigkeitsschwelle ist deshalb der Grenzwert der Trinkwasserverordnung (Indikativer Parameter).

6 LITERATUR

DIETER, H.-H., 2003: Vorkommen und Bedeutung von Ammonium/Ammoniak im Trinkwasser – Die Trinkwasserverordnung – Einführung und Erläuterungen für Wasserversorgungsunternehmen und Überwachungsbehörden (Grohmann, A., Hässelbarth, U., Schwerdtfeger, WK., Hrsgg.), 4. neu bearbeitetet Auflage. Erich Schmidt, Berlin, 2003. Seite 505 – 510.

EUROPEAN CHEMICALS BUREAU under http://ecb.jrc.it – last update 02.05.2000 (risk assessment reports / existing substances.

EU-Fischgewässerrichtlinie (2006): Richtlinie 2006/44/EG des Europäischen Parlaments und des Rates vom 6. September 2006 über die Qualität von Süßwasser, das schutz- oder verbesserungsbedürftig ist, um das Leben von Fischen zu erhalten

KUNKEL, R., VOIGT, H.-J., WENDLAND, F., HANNAPPEL, S., 2004: Die natürliche, ubiquitär überprägte Grundwasserbeschaffenheit in Deutschland. – Schriften des Forschungszentrums Jülich, Reihe Umwelt Band 47.

Landesanstalt für Umweltschutz Baden-Württemberg, Hrsg.(1994): Kompendium Stoffdatenblätter – Texte und berichte zur Altlastenbearbeitung 14/94.

LAWA 1997: Zielvorgaben um Schutz oberirdischer Binnengewässer; Band I: Teil I: Konzeption zur Ableitung von Zielvorgaben zum Schutz oberirdischer Binnengewässer von gefährlichen Stoffen; Teil II: Erprobung der Zielvorgaben von 28 gefährlichen Wasserinhaltsstoffen in Fließgewässern. – Länderarbeitsgemeinschaft Wasser, Berlin 1997.

LAWA 1998b: Zielvorgaben zum Schutz oberirdischer Binnengewässer; Band III: Teil I: Konzeption zur Ableitung von Zielvorgaben zum Schutz oberirdischer Binnengewässer vor gefährlichen Stoffen; Teil II: Erprobung der Zielvorgaben für Wirkstoffe in Bioziden und Pflanzenbehandlungsmitteln für trinkwasserrelevante oberirdische Binnengewässer. – Länderarbeitsgemeinschaft Wasser, Berlin 1998.

LAWA 2003: Musterverordnung zur Umsetzung der Anhänge II und V der Richtlinie 200/60/EG des Europäischen Parlaments und des Rates vom 23. Oktober 2000 zur Schaffung eines Ordnungsrahmens für Maßnahmen im Bereich der Wasserpolitik. – Länderarbeitsgemeinschaft Wasser, Entwurf Stand 2.7.2003.

LAWA 2004: Ableitung von Geringfügigkeitsschwellenwerten für das Grundwasser. – Länderarbeitsgemeinschaft Wasser, Düsseldorf, 2004

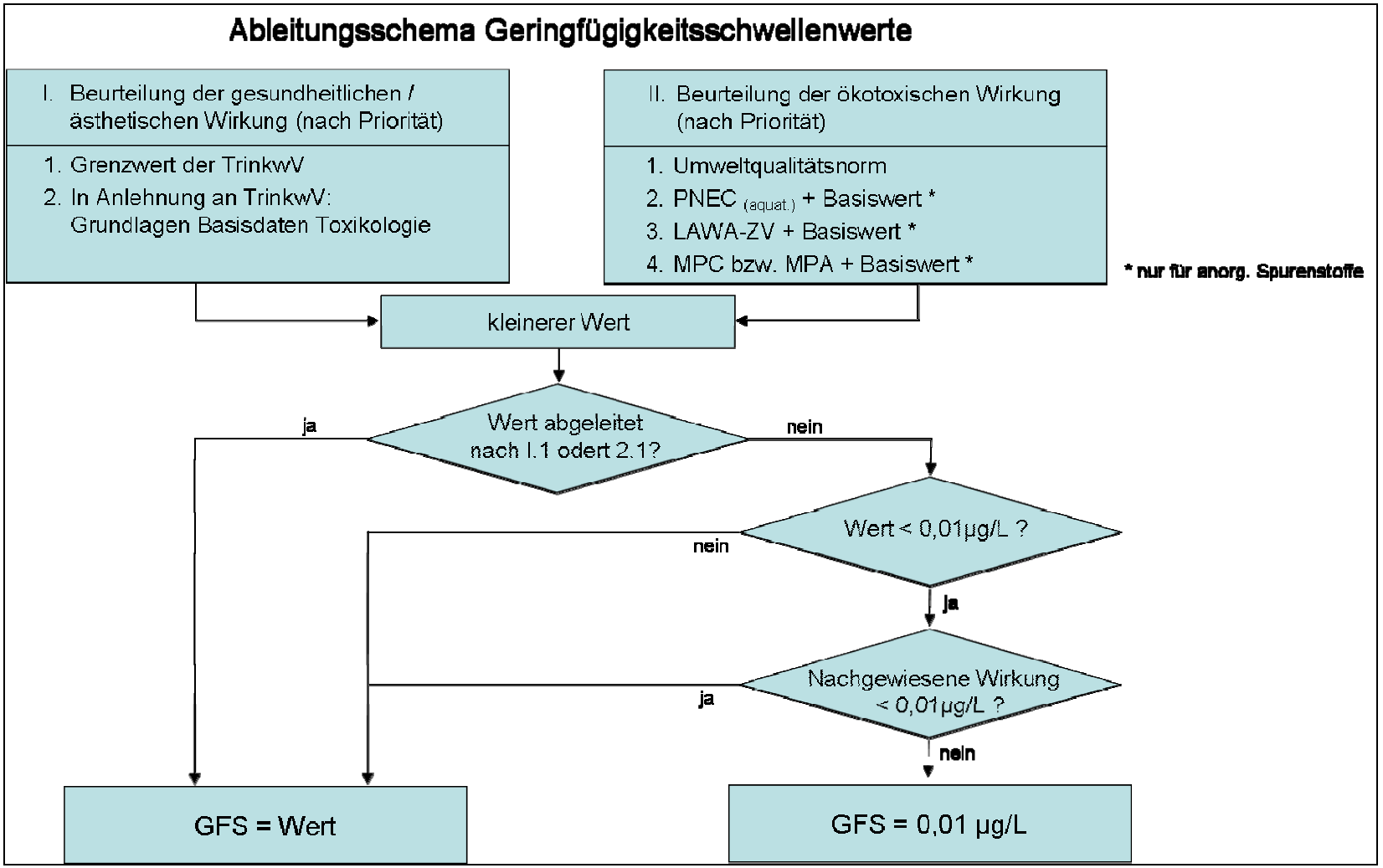
TGD 2003: Technical Guidance Document on Risk Assessment for New and Existing Substances. – siehe EC 1994 (http://ecb.jrc.it/)

TrinkwV 2001: Verordnung zur Novellierung der Trinkwasserverordnung vom 21. Mai 2001. – Bundesgesetzblatt, Teil I Nr. 24, 959 ff.

UBA 2000: Umweltqualitätsziele für gefährliche Stoffe in Gewässern. Internationaler Abgleich der Ableitungsmethoden. Bearbeitet von SCHUDOMA, D. – UBA-Texte 24/00, Umweltbundesamt Berlin.

WRRL 2000: Richtlinie 2000/60/EG vom 23. Oktober 2000 zur Schaffung eines Ordnungsrahmens für Maßnahmen der Gemeinschaft im Bereich der Wasserpolitik. – Amtsblatt der Europäischen Gemeinschaften Nr. L 327 vom 22.12.2000, S. 1.

US EPA (1999): 1999 update of ambient water quality criteria for Ammonia. EPA-822-R-99-014, 147 S.



Anlage 1: Ableitungsschema Geringfügigkeitsschwellenwerte.

Entwurf

Sachstandsbericht

LAWA - Unterausschuss

ANHANG

FACHLICHE UMSETZUNG DER GRUNDWASSER-TOCHTERRICHTLINIE (GWTR)

TEIL 4: BUNDESWEIT EINHEITLICHE METHODE ZUR ERMITTLUNG SIGNIFIKANTER UND ANHALTEND STEIGENDER SCHADSTOFFTRENDS NACH ARTIKEL 5 UND ANHANG IV GWTR

Berthold, G. (HLUG, Hessen)
Dihlmann,P. (UM, Baden-Württemberg)
Haas, B (LfU, Bayern)
Kuhn, K. (LFUG, Sachsen)
Lemke, G. (LUNG, Mecklenburg-Vorpommern)
Lerho, A. (MUNLV, Nordrhein-Westfalen)
Peters, A. (TLUG, Thüringen)
Schäfer, W. (LBEG, Niedersachsen, Obmann)
Wieger, C. (MLUR, Schleswig-Holstein)
Wolter, R. (UBA)
Neumann, (LANUV, Nordrhein-Westfalen, Gast)

07. November 2007

INHALT

1 AUFTRAG 65

2 EMPFEHLUNG/VORSCHLAG DES UA 65

2.1 Umfang der Trendbetrachtung 65
2.2 Zeiträume der Trendbetrachtung 65
2.3 Ermittlung eines statistisch signifikanten Trends 66
2.4 Trendermittlung für den gesamten Grundwasserkörper 68
2.5 Trendbewertung / Erfordernis einer Maßnahme zur Trendumkehr 68
2.6 Ermittlung der Trendumkehr 69
2.7 Ausgangspunkt der Trendumkehr 70

Anlage 1 zu Teil 4: Länderbeispiel NRW
Anlage 2 zu Teil 4: Länderbeispiel Sachsen

1 AUFTRAG

Laut Mandat vom 03.11.06 hat der UA die Aufgabe, dem LAWA-AG bis zum 31.05.07 einen Vorschlag für eine „bundesweit einheitliche Methode zur Ermittlung signifikanter und anhaltend steigender Schadstofftrends nach Artikel 5 und Anhang IV GWTR“ vorzulegen. Mit dem vorliegenden Bericht erfolgt eine Präzisierung des Sachstandsberichts vom 06.06.2007.

2 EMPFEHLUNG/VORSCHLAG DES UA

Der UA empfiehlt die nachfolgend beschriebene Vorgehensweise zur Ermittlung von Schadstofftrends und der Trendumkehr.

2.1 Umfang der Trendbetrachtung

Eine Trendbetrachtung wird in allen als „gefährdet“ eingestuften Grundwasserkörpern an jeder gemeldeten Messstelle und nur für die Parameter durchgeführt, die zur Einstufung des Grundwasserkörpers in „gefährdet“ geführt haben.

Darüber hinaus wird empfohlen, eine Trendbetrachtung bei allen Messstellen, bei denen der jeweils verfügbare aktuellste jährliche arithmetische Mittelwert 75 % der Qualitätsnorm bzw. eines Schwellenwertes überschreitet, auch in den als nicht gefährdet eingestuften Grundwasserkörpern vorzunehmen.

2.2 Zeiträume der Trendbetrachtung

Für den ersten Bewirtschaftungszeitraum erfolgt eine Trendbetrachtung bis 2007 bzw. 2008. Dafür werden die Messwerte (soweit vorhanden) ab dem Jahr 2000 (Inkraftreten der WRRL) herangezogen. Bei Bedarf, zum Beispiel zur Plausibilisierung, können auch frühere Daten hinzugezogen werden.

Die Trendbetrachtung erfolgt jeweils über einen 6-Jahres-Zeitraum, was nach WRRL dem Zeitintervall eines Bewirtschaftungsplans entspricht. Entscheidend für die Bewertung ist das jeweils aktuelle 6-Jahres-Intervall.

2.3 Ermittlung eines statistisch signifikanten Trends

Nach GWTR (Anhang IV, Teil A, 2 c) kann die Trendanalyse mit Hilfe einer Regressionsanalyse durchgeführt werden. Im Sinne der GWTR wird dabei der Zusammenhang zwischen einer abhängigen Variablen (Stoffkonzentration an einer GW-Messstelle zum Zeitpunkt t) und einer unabhängigen Variablen (Zeitindex, z. B. Jahr) untersucht.

Bei der Trendanalyse nach GWTR wird eine im Rahmen des Monitoring erfasste Stichprobe untersucht, die als Teil einer unbekannten Grundgesamtheit anzusehen ist.

Die lineare Regressionsanalyse unterstellt, dass zwischen Regressand und Regressor eine lineare Beziehung steht. Linearität bedeutet, dass sich Regressand und Regressor nur in konstanten Relationen verändern:

$$\frac{\Delta y}{\Delta x} = \text{const}$$

Die Schätzung der Regressionsfunktion erfolgt in mehreren Schritten:

1. Formulierung des Modells

Die Fragestellung im Sinne der GWTR lautet „Schätzung der Entwicklung (Änderung) der Stoffkonzentration (gemessen an einer GW-Mst.) in Abhängigkeit von der Zeit“. Dabei wird unterstellt, dass die Beziehung zwischen der Stoffkonzentration (abhängige Variable, y) und der Zeit (unabhängige Variable, x) linear ist.
Die Regressionsfunktion lautet damit

$$y = a_0 + a_1 * x$$

mit

y = Regressand (abhängige Variable, Stoffkonzentration)
a_0 = Konstante
a_1 = Regressionskoeffizient

x = Regressor (unabhängige Variable, Zeit)

2. Prüfung auf Linearität

Wenn der Punkteschwarm bei Eintrag in ein Koordinatensystem die Linearität oder Nichtlinearität deutlich zum Ausdruck bringt, kann auf einen Linearitätstest verzichtet werden. Bei Beschränkung auf ein Überwachungsintervall von 6 Jahren ist der Zusammenhang in der Regel mit einer linearen Regressionsfunktion zu beschreiben.

3. Schätzung der Regressionsfunktion

Gesucht ist die genaue Lage der linearen Funktion im Koordinatensystem (x, y), die als Regressionsgerade bezeichnet wird. Die Lage dieser Geraden wird durch 2 Parameter bestimmt:

- durch das konstante Glied a_0

- den Regressionskoeffizienten a_1

Rechnerisch geht es darum, durch Schätzung der Parameter a_0 und a_1 einen Verlauf der gesuchten Geraden zu finden, der sich der empirischen Punkteverteilung möglichst gut anpasst.

Die Schätzung der Parameter erfolgt nach der „Methode der kleinsten Quadrate“. Die statistischen Einzelheiten sind im Anlage 1 , Abschnitt 5 beschrieben.

4. Ausreißertest

Über einen Ausreißertest (Anlage 1, Abschnitt 4) wird sichergestellt, dass die Regressionsgerade nicht durch „Extremwerte“ verfälscht wird. Die mit einer statistischen Methode ermittelten Ausreißer sind einer fachlichen Prüfung zu unterziehen.

5. Prüfung der Regressionsfunktion

Nach Schätzung der Regressionsfunktion erfolgt im nächsten Schritt mit Hilfe statistischer Testverfahren die Prüfung der „Qualität“ der Regressionsgleichung. Dies erfolgt über die Prüfung des Regressionskoeffizienten:

Bei dieser Prüfung wird mit einem t-Test die Nullhypothese getestet, dass der Regressionskoeffizient der Grundgesamtheit Null ist (d. h. die Steigung der Regressionsgeraden Null ist). Trifft diese Nullhypothese zu, ist kein Trend festzustellen.

Die Trendanalyse entsprechend der Punkte 1 bis 5 erfolgt in der Regel unter Anwendung der im Länderbeispiel NRW (siehe Anlage 1) beschriebenen Methodik.

Eine Trendanalyse kann nur durchgeführt werden, wenn in einem Überwachungszeitraum (6 Jahre) für mindestens 2/3 der Jahre Überwachungsergebnisse vorliegen.

Bei mehr als 4 bis 10 Messwerten kann alternativ der Mann-Kendall-Test nach der im Länderbeispiel Sachsen (siehe Anlage 2) beschriebenen Methodik durchgeführt werden. Mit dem Mann-Kendall-Test kann lediglich der Trend (fallend, steigend) jedoch nicht die Steigung eines Trends bestimmt werden.

Bei weniger als 4 Messwerten kann keine Trendanalyse durchgeführt werden.

Bei saisonal beeinflussten Parametern (Nitrat) ist auf vergleichbare Probenahme-Zeitpunkte zu achten, um z. B. jahreszeitlich bedingte Schwankungen der Messwerte zu minimieren.

Bei der Trendbetrachtung ist an den Einzelmessstellen immer mit den Einzelwerten zu rechnen. So sollten z. B. bei mehr als einem Messwert pro Jahr vor der Trendbetrachtung keine Jahresmittelwerte gebildet werden.

Messwerte < Bestimmungsgrenze werden mit dem Wert der halben Bestimmungsgrenze (1/2 Bestimmungsgrenze) bei der Trendanalyse berücksichtigt.

Messwerte < Nachweisgrenze werden auf den Wert 0 (Null) gesetzt.

Vor dem Test auf signifikantes Trendverhalten erfolgt ein Ausreißertest nach der im Länderbeispiel NRW (siehe Anlage 1) beschriebenen Methodik.

2.4 Trendermittlung für den gesamten Grundwasserkörper

Laut GWTR (siehe auch Anhang 5 WRRL, Pkt. 2.4.4) muss aus den Trendbetrachtungen der einzelnen Messstellen eine Trendaussage für den gesamten Grundwasserkörper abgeleitet werden. Dafür werden die Trendbetrachtungen der einzelnen Messstellen zunächst für jede Nutzung (z. B. Acker, Wald, Grünland, Siedlung etc.) getrennt aggregiert.

Die Methodik ist im Länderbeispiel NRW in Abschnitt 10 (siehe Anlage 1) ausführlich beschrieben. Danach erfolgt die Aggregierung der Messwerte (der Einzelmessstellen) auf den Grundwasserkörper in mehreren Schritten:

1. Berechnung von arithmetischen Jahresmittelwerten für jede Messstelle des Grundwasserkörpers.
2. Zuordnung der Messstellen zur Nutzung.
3. Berechnung von nutzungsbezogenen Jahresmittelwerten für jede Nutzung.
4. Berechnung eines flächennutzungsgewichteten Jahresmittelwertes für den gesamten Grundwasserkörper.
5. Berechnung des Trends für den gesamten Grundwasserkörper anhand der Zeitreihe der flächennutzungsgewichteten Jahresmittelwerte des Grundwasserkörpers. Die Trendermittlung erfolgt entsprechend der in Pkt. 2.3 beschriebenen Methodik.

2.5 Trendbewertung / Erfordernis einer Maßnahme zur Trendumkehr

Gemäß § 5, Abs. 2 der GWTR ist bei Trends, „die eine signifikante Gefahr für die Qualität der aquatischen oder terrestrischen Ökosysteme, für die menschliche Gesundheit oder für – tatsächliche oder potenzielle – legitime Nutzungen der Gewässer darstellen“, eine Trendumkehr durch Maßnahmen zu bewirken.

Die Ermittlung der nicht nur statistischen, sondern auch ökologisch bedeutsamen Zunahme der Konzentration eines Schadstoffes (§ 2, Abs. 3 der GWTR) erfolgt in Anlehnung an die Vorgehensweise zur Beurteilung des chemischen Zustandes (gemäß Abstimmung im LAWA-Ausschuss Grundwasser).

Für die Ermittlung signifikanter und anhaltend steigender Trends die eine signifikante Gefahr für die Qualität der aquatischen oder terrestrischen Ökosysteme oder für - tatsächliche oder potenzielle - legitime Nutzungen der Gewässer darstellen, wird bei diffusen Belastungen das folgende Verfahren angewandt:

a) Die Zuordnung der Flächen zu den Messstellen und die Abschätzung der Ausdehnung der Fläche
   - mit signifikant ansteigendem Trend und
   - mit einer Überschreitung von 75 % der Grundwasserqualitätsnorm bzw. des Schwellenwertes wird im Rahmen einer Relevanzprüfung analog zur Beurteilung des chemischen Zustands (siehe Sachstandsbericht “Beurteilung des chemi-

schen Zustands“) individuell in jedem Land geregelt. Wenn diese Relevanzkriterien erfüllt sind, erfolgt die Prüfung nach b).

b) Unabhängig von der absoluten Größe des Grundwasserkörpers, sind in einem Grundwasserkörper nur dann Maßnahmen zur Trendumkehr zu bewirken, wenn die nach a) identifizierte Ausdehnung der Fläche mehr als 25 km² des Körpers überschreitet. Diese Mindestgröße ist auch für die Beurteilung der Belastung durch Sonderkulturen relevant.

c) In Grundwasserkörpern, die kleiner als 75 km² sind, sind nur dann Maßnahmen zur Trendumkehr zu bewirken, wenn die nach a) identifizierte Ausdehnung der Fläche mehr als 1/3 ihrer Fläche überschreitet.

2.6 Ermittlung der Trendumkehr

Die Ermittlung der Trendumkehr erfolgt über die Bildung von gleitenden 6-Jahres-Intervallen über mindestens drei 6-Jahres-Intervalle, d.h. vom 1. – 6. Jahr, dann vom 2. – 7. Jahr und vom 3. – 8. Jahr.

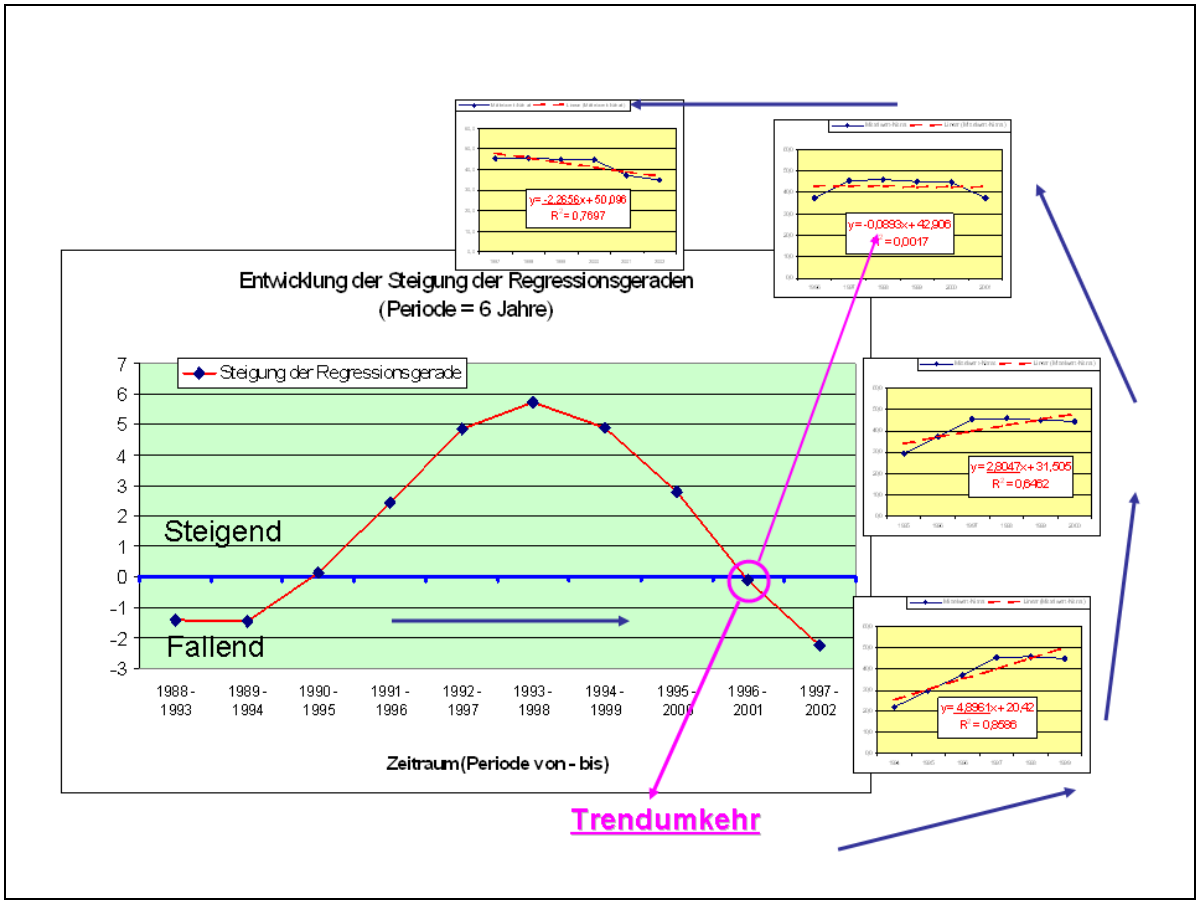


Abbildung 1: Ermittlung der Trendumkehr.

Für jedes Intervall wird über eine lineare Regression die Steigung entsprechend Pkt. 2.3 bestimmt und als Zeitreihe im Koordinatensystem aufgetragen. Verlaufen die Steigungen im negativen Bereich, liegt ein fallender Trend vor, im positiven Bereich liegt ein steigender Trend vor. Ein Nulldurchgang, d.h. ein Übergang von einem steigenden in einen fallenden Trend (und umgekehrt) bedeutet eine Trendumkehr (vgl. Abb. 1).

Alternativ ist die Ermittlung der Trendumkehr nach der im Länderbeispiel NRW beschriebenen Methodik möglich.

2.7 Ausgangspunkt der Trendumkehr

Der UA empfiehlt als Ausgangspunkt für die Berechnung einer Trendumkehr entsprechend Anhang IV, Teil B der GWTR eine Konzentration von > 75% der Qualitätsnorm bzw. Schwellenwert .

Teil 4 - Anlage 1

TRENDBERECHNUNG UND TRENDUMKEHR

Länderbeispiel NRW

Trends, deren Beschreibung und Berechnung
sowie eine mögliche Vorgehensweise zur Festlegung einer Trendumkehr
im Rahmen des Grundwassermonitorings
für die Europäische Wasserrahmenrichtlinie (WRRL)

INHALT

1 EINLEITUNG 3
2 AUSGANGSSITUATION 3
3 BERECHNUNG DER REGRESSIONSGERADEN 4
4 AUSREIßERTEST 5
5 TRENDBERECHNUNG 8
6 PRAKTISCHE BEISPIELE REALER DATENSÄTZE DER GRUNDWASSERDATENBANK NRW 12
7 TRENDBERECHNUNG MIT MESSWERTEN <BG UND >BG 14
8 PRAKTISCHE BEISPIELE REALER DATENSÄTZE DER GRUNDWASSERDATENBANK NRW (TEIL 2) 16
9 NACHWEIS EINER TRENDUMKEHR AN EINER GRUNDWASSERMESSSTELLE 18
10 TRENDBERECHNUNG FÜR EINEN GRUNDWASSERKÖRPER 23
11 ERFORDERNIS VON MAßNAHMEN (TRENDUMKEHR) 30
12 ZUSAMMENFASSUNG 30
13 ALTERNATIVE VERFAHREN: 31

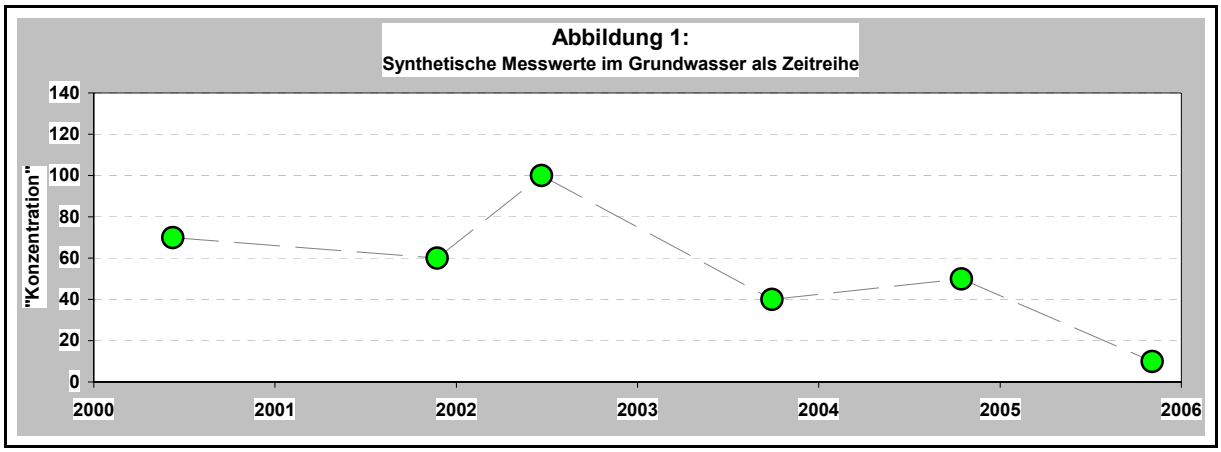
3 EINLEITUNG

Trends und Trendumkehr für chemische Parameter sind im Grundwassermonitoring nach WRRL nachzuweisen. Ein derart geforderter Nachweis kann nicht durch eine bloße verbale Beschreibung nach optischer Inaugenscheinnahme einer Zeitreihe erfolgen. Werkzeuge der beurteilenden Statistik bieten die Möglichkeit und die Gewähr, Trends nach „objektiven“ Kriterien zu beschreiben.

4 AUSGANGSSITUATION

Am Beispiel einer Grundwassermessstelle (GWM) werden die theoretischen Grundlagen und die Vorgehensweise der Berechnung und Verifizierung eines signifikanten Trends – einschließlich einer eingebundenen Ausreißeranalyse – anhand eines synthetischen Datensatzes beschrieben. Als Betrachtungszeitraum ist ein Zeitfenster von sechs Jahren gewählt, was nach der WRRL grundsätzlich einem Bewirtschaftungszeitraum entspricht. Darüber hinaus wird gemäß den Vorgaben davon ausgegangen, dass pro Jahr jeweils nur ein Untersuchungsergebnis für einen Parameter an der Grundwassermessstelle vorliegt. Grundsätzlich ist das Verfahren aber auch an längeren Zeitreihen mit einem ausgedehnteren Zeitfenster und/oder mit einer größeren Anzahl von Messwerten anwendbar.

Gegeben ist ein beliebiger Parameter der Grundwasserbeschaffenheit an einer GWM, für den in einem Zeitabschnitt von sechs Jahren jeweils ein Untersuchungsergebnis pro Jahr vorliegt. Eine solche Situation würde für NRW beispielsweise auf einen Basisparameter des Überblicksmonitorings wie Sulfat oder Nitrat zutreffen. Die graphische und tabellarische Datenpräsentation dieser aus „Probenahmedatum“ und „Untersuchungsergebnis“ bestehenden n-Wertepaare (x_1, y_1), (x_2, y_2).....(x_n, y_n) mit n = 6 ist der folgenden Abbildung 1 zu entnehmen.



Lfd.Nr.	Probennahmedatum	x	y (=Messwert)	y Ausgleichs-gerade	y Resi-duum	Ausrei-ßer
1	08.06.2000	2000.44	70.0	---	---	---
2	23.11.2001	2001.89	60.0	---	---	---
3	20.06.2002	2002.47	100.0	---	---	---
4	28.09.2003	2003.74	40.0	---	---	---
5	14.10.2004	2004.79	50.0	---	---	---
6	03.11.2005	2005.84	10.0	---	---	---

5 BERECHNUNG DER REGRESSIONSGERADEN

Als Grundlage für die Bewertung, ob für diesen Parameter an dieser GWM eine signifikante zeitliche Konzentrationsentwicklung, also ein möglicher Trend, überhaupt gegeben ist, wird für diese n-Wertepaare die Ausgleichsgerade $y = a_0 + a_1 * x$ beschrieben. Damit wird konstatiert, dass in erster Näherung für diese Stichprobe die zeitliche Entwicklung einer Konzentration als lineare Änderung für diesen Zeitabschnitt vereinfacht dargestellt werden kann. Die Wahl der linearen Regression ist lediglich eine Konvention, da statistische Voraussetzungen in diesem Stadium nicht vorliegen und daher nicht berücksichtigt werden müssen.

Der Verlauf der Ausgleichsgeraden ist definitionsgemäß eindeutig, da die Summe der Quadrate aller Abstände der Messwerte von der Geraden ein Minimum erreichen muss. Die Konstanten a_0 und a_1 der Geradengleichung für den konkreten Datensatz ergeben sich aus:

$$a_1 = s_{xy} / s_x^2 \quad \text{mit} \quad s_{xy} = [\sum x_i * y_i - (\sum x_i) * (\sum y_i) / n] / (n-1) \quad \text{und}$$

$$s_x^2 = [\sum x_i^2 - (\sum x_i)^2 / n] / (n-1)$$

sowie

$$a_0 = - (a_1 * x_{MW} - y_{MW}) = y_{MW} - a_1 * x_{MW}$$

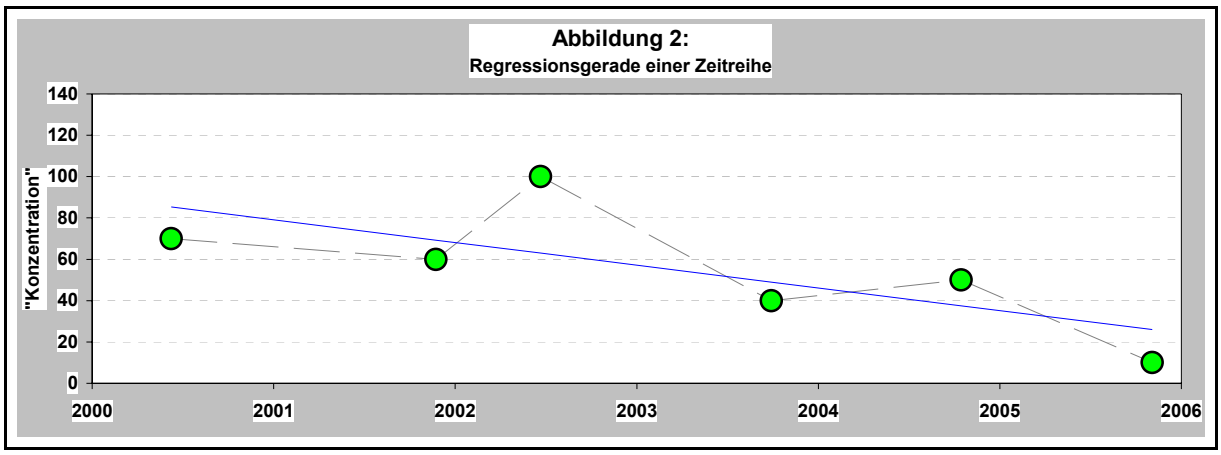
$$\text{mit} \quad x_{MW} = (x_1 + x_2 + \ldots\ldots\ldots + x_n) / n \quad \text{und}$$

$$y_{MW} = (y_1 + y_2 + \ldots\ldots\ldots + y_n) / n$$

Damit wird der Ausgangsdatensatz um den Verlauf der Ausgleichsgerade, dargestellt in Abbildung 2, erweitert. Zusätzlich zum eigentlichen „Messwert“ (y-Wert) ergibt sich aus der Regressionsgeraden noch das zu jedem konkreten „Messzeitpunkt“ dazugehörige y_A (= $y_{Ausgleichsgerade}$) und der Residualwert y_R ($y_{Residuum}$) als Differenz zwischen dem „Messwert“ und dem y-Wert der Ausgleichsgeraden ($y_R = y - y_A$).

Der Regressionskoeffizient a_1 – im Beispiel der Abbildung 2 mit dem Wert $a_1 = -10.975$ Messgrößeneinheiten pro Jahr – gibt zunächst nur die Steigung der Ausgleichsgeraden für diese Stichprobe an. Ob dieses Steigungsmaß gleichzeitig auch der Anzeiger für einen signifikanten Trend der Grundgesamtheit ist, muss durch einen gesonderten Test geprüft werden. Wird auf diesen Test verzichtet, so beschreibt einzig das Vorzeichen von a_1 einen ansteigenden ($a_1>0$) oder, wie im Beispiel der Abbildung 2, einen abnehmenden ($a_1< 0$) Trend, allerdings auch ohne einen Hinweis auf die zu erwartende statistische Sicherheit (Signifikanz).

Der Fall, dass aus der Berechnung der Ausgleichsgeraden bereits $a_1 = 0$ resultiert, bedarf keiner weiteren Betrachtung, weil er in der Praxis nur in extremen Ausnahmefällen vorkommen wird und sich darüber hinaus für einen solch speziellen Fall eine weitergehende Trendbetrachtung ohnehin erübrigt.



Lfd.Nr.	Probennahmedatum	x	y (=Messwert)	y Ausgleichs-gerade	y Resi-duum	Ausrei-ßer
1	08.06.2000	2000.44	70.0	85.3	-15.3	---
2	23.11.2001	2001.89	60.0	69.3	-9.3	---
3	20.06.2002	2002.47	100.0	63.0	37.0	---
4	28.09.2003	2003.74	40.0	49.0	-9.0	---
5	14.10.2004	2004.79	50.0	37.5	12.5	---
6	03.11.2005	2005.84	10.0	26.0	-16.0	---

6 AUSREIßERTEST

Vor der Anwendung des Tests auf signifikantes Trendverhalten ist noch sicherzustellen, dass ein „exotischer Messwert“ nicht die ermittelte Regressionsgerade verfälscht. Dazu wird das Verfahren in diesem Stadium um einen Ausreißertest ergänzt. Dabei definiert dieser Test eventuelle Extremwerte nur im statistischen Sinn als Ausreißer. Eine Aussage über die Ursache der Anomalie (z. B.: nicht optimale Probenahme, fehlerhafte Analytik, unkorrekte Dateneingabe durch Zahlendreher, falsche Dimensionsangabe, sehr kurzfristiger Konzentrationsanstieg mit anschließendem ebenso raschem Abklingen dieser Konzentration, oder andere erklärbare, bzw. nicht nachvollziehbare Gründe) kann nur über eine fachliche Beurteilung erfolgen. Der die Trendanalyse ergänzende Ausreißertest bietet somit auch die Möglichkeit, einen oder mehrere fehlerhafte Werte im Datenkollektiv zu korrigieren, sofern der Fehler nachvollziehbar und korrigierbar ist.

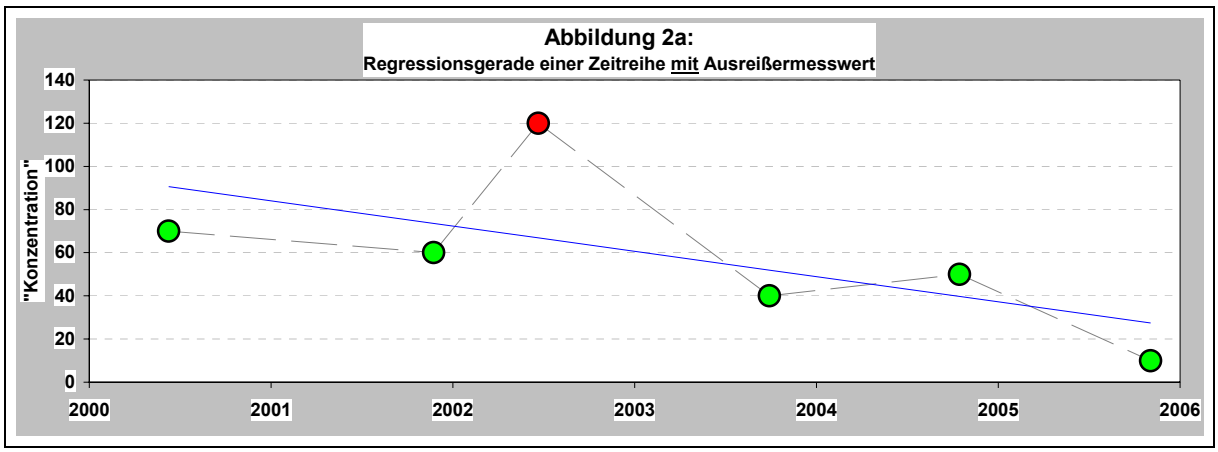
Das Verfahren der Ausreißerelimination ist beschrieben bei:

KAISER, R. & GOTTSCHALK, G. (1972): Elementare Tests zur Beurteilung von Messdaten. Soforthilfe für statistische Tests mit wenigen Messdaten. Kapitel 3: Ausreißertest nach NALIMOV, Seite 18 ff., Bibliographisches Institut, Wissenschaftsverlag, Bd 774.

Der Ausreißertest erfolgt an den trendunabhängigen Werten der $y_{Residuen}$, von denen der Mittelwert, der gegen Null tendiert, und die Standardabweichung berechnet werden. Der Residualwert mit dem höchsten Betrag, d.h. der „Messwert“ mit der größten Entfernung zur Ausgleichsgeraden, ist der vorläufig ausreißerverdächtige Wert. Bestätigt sich der Verdacht, so erfolgt eine Neuberechnung der Regressionsgeraden ohne Einbeziehung dieses Wertepaares, also mit n = n - 1. Ist auch im zweiten Durchlauf noch ein Ausreißer vorhanden, so wird die Schleife mit n = n - 2 erneut durchlaufen und so häufig wiederholt, bis sich kein weiterer Ausreißer im Datensatz befindet.

Diese sukzessive Ausreißerelimination macht ein Abschneidekriterium bezüglich einer Mindestanzahl von ausreißerfreien Wertepaaren, bzw. einer Mindestanzahl von beprobten Jahren unbedingt erforderlich. Wird dieses Abschneidekriterium erreicht, so sollte auf eine Trendberechnung für diesen Parameter an der GWM verzichtet werden. Nach den in NRW mit der Anwendung der Trendberechnung gemachten Erfahrungen, sollten für die Berechnung eines Trendverhaltens mindestens 2/3 der Jahre des gewählten Zeitabschnitts mit ausreißerfreien Messwerten dokumentiert sein. Für das gewählte Beispiel gilt dementsprechend, dass für einen Sechsjahreszeitraum eine Trendberechnung mit mindestens vier Jahren, für die auch Messwerte vorliegen, gerade noch vertretbar ist.

Zur Demonstration der praktischen Anwendung wird der Datensatz aus Abbildung 2 leicht verändert, weil die synthetischen Originaldaten ausreißerfrei sind. Verändert man den „dritten Messwert“ von 100 auf 120, so ergibt sich die in Abbildung 2a visualisierte Datensituation. Wegen der leicht veränderten Lage der Ausgleichsgeraden folgen daraus auch zwingend neue Werte für y_A und y_R.



Lfd.Nr.	Probennahmedatum	x	y (=Messwert)	y Ausgleichs-gerade	y Resi-duum	Ausrei-ßer
1	08.06.2000	2000.44	70.0	90.7	-20.7	---
2	23.11.2001	2001.89	60.0	73.6	-13.6	---
3	20.06.2002	2002.47	120.0	66.8	53.2	ja
4	28.09.2003	2003.74	40.0	51.9	-11.9	---
5	14.10.2004	2004.79	50.0	39.7	10.3	---
6	03.11.2005	2005.84	10.0	27.4	-17.4	---

In diesem leicht veränderten Datensatz liegt ein Ausreißer vor. Der Nachweis ergibt sich wie folgt:

Mit $\hat{y}_R$ = Mittelwert der Residualwerte = $1.82 * 10^{-12} \approx 0$
s_R = Standardabweichung der Residualwerte = 28.239
n = Anzahl der Wertepaare = 6
$\check{a}_R$ = ausreißerverdächtiger Residualwert = 53.2

r^* = $[\,|\ 53.2 - 1.82 * 10^{-12}\ |\ /\ 28.239\,] * \sqrt{(6 / 5)} = 2.063$

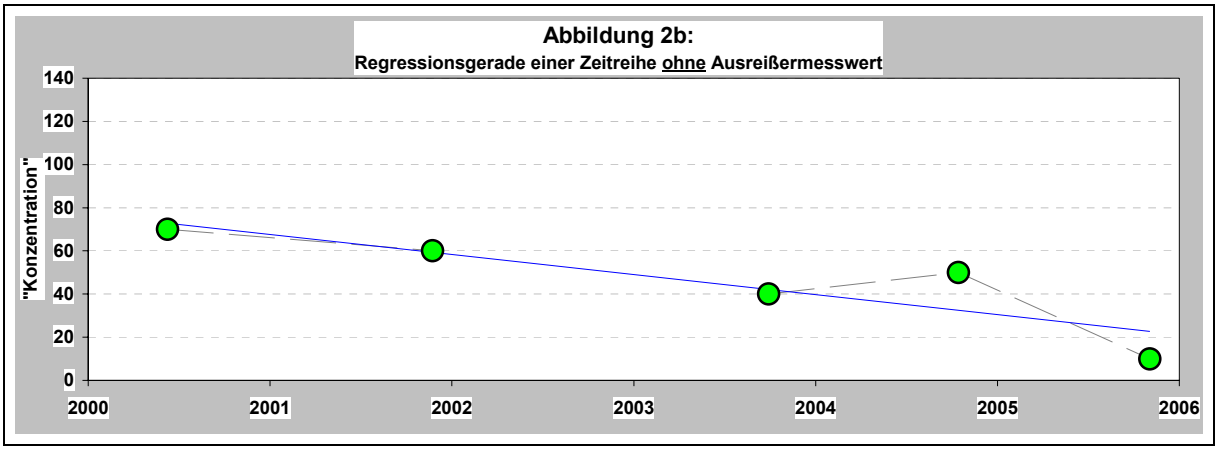
Man entscheidet, indem man r* mit einem theoretischen Wert r_i vergleicht. Der theoretische Wert r_i ist aus der Tabelle in Anhang 1 in Abhängigkeit von der Anzahl der Wertepaare n, der sich daraus ergebenden Freiheitsgrade f = n - 2 und der gewünschten statistischen Sicherheit P (Angaben für 95 %, 99 % und 99.9 %) zu ermitteln.

1. bei: r* < r(95) < r(99) < r(99.9) liegt definitionsgemäß kein Ausreißer vor
2. wenn r(95) < r* < r(99) < r(99.9), dann ist $ă_R$ <u>wahrscheinlich</u> ein Ausreißer
3. oder r(95) < r(99) < r* < r(99.9), dann ist $ă_R$ <u>signifikant</u> ein Ausreißer
4. oder r(95) < r(99) < r(99.9) < r*, dann ist $ă_R$ <u>hochsignifikant</u> ein Ausreißer

Es kann nur entweder ein ausreißerfreier Datensatz vorliegen oder einer der Fälle 2 bis 4 zutreffen. In der bisherigen Praxis in NRW („Grundwasserbericht 2000 Nordrhein-Westfalen“ und Bericht über „Die Nitratbelastung des Grundwassers in Nordrhein-Westfalen“) hat sich das Kriterium des signifikanten Ausreißers bewährt. Das Entscheidungsmerkmal des wahrscheinlichen Ausreißers führt zu einer vorschnellen Ausreißerelimination. Das Kriterium der Hochsignifikanz ist dagegen ein zu scharfes Ausschlussmerkmal.

Für das gewählte Beispiel ergeben sich für f = n - 2 = 4 Freiheitsgrade die Tabellenwerte r(95) = 1.814, r(99) = 2.051 und r(99.9) = 2.178. Daraus folgt, dass der dritte „Messwert“ in Abbildung 2a mit r* = 2.063, wenn auch verhältnismäßig knapp, als signifikanter Ausreißer anzusehen ist.

Die Nichtberücksichtigung dieses dritten Datensatzes bei der Neuberechnung der Regressionsgeraden mit n = n - 1 führt zu dem in Abbildung 2b dokumentierten Ergebnis:



Lfd.Nr.	Probennahmedatum	x	y (=Messwert)	y Ausgleichs-gerade	y Resi-duum	Ausrei-ßer
1	08.06.2000	2000.44	70.0	72.9	-2.9	---
2	23.11.2001	2001.89	60.0	59.3	0.7	---
3	20.06.2002	2002.47	120.0			ja
3	28.09.2003	2003.74	40.0	42.2	-2.2	---
4	14.10.2004	2004.79	50.0	32.5	17.5	---
5	03.11.2005	2005.84	10.0	22.7	-12.7	---

Die verbliebenen „Messwerte“ gruppieren sich im Vergleich zur Abbildung 2a enger an die neuberechnete Ausgleichsgerade. Das berechnete Steigungsmaß der Regressionsgeraden erreicht mit a_1 = - 9.281 gegenüber dem vorherigen a_1 = - 11.713 eine zwar geringere Abnahme, diese ist aber immer noch deutlich ausgeprägt.

Ausreißerverdächtig ist jetzt der „Messwert“ vom 14.10.2004. Aus der Berechnung geht hervor dass:

$$r^* = [(| \check{a}_R - \hat{y}_R |) / s_R] * \sqrt{(n / (n-1))}$$
$$= [| 17.4 - (-1.46 * 10^{-12}) | \ / 10.974] * \sqrt{(5 / 4)} = 1.775$$

mit $\hat{y}_R = -1.46 * 10^{-12} \approx 0$
$s_R = 10.974$
$n = 5$
$\check{a}_R = 17.5$

Für die jetzt vorliegenden f = n – 2 = 3 Freiheitsgrade ergeben sich als Vergleich die theoretischen Werte r(95) = 1.757, r(99) = 1.918 und r(99.9) = 1.982. Wegen r* = 1.775 < r(99) = 1.918 ist der Ausreißer nicht signifikant. Die vorliegende, auf fünf Wertepaaren bestehende Zeitreihe ist also ausreißerfrei und kann für die weitere Trendberechnung herangezogen werden.

Dagegen wäre der „Messwert“ vom 14.10.2004 als Ausreißer wahrscheinlich, weil r* = 1.775 > r(95) = 1.757 zutrifft. Eine derartige Entscheidung eines wahrscheinlichen aber nicht signifikanten Ausreißers ist eine zu differenzierte Unterscheidung, die im Rahmen des Grundwassermonitorings nach WRRL nicht notwendig erscheint. Es sollte ausreichen, eine einfache JA/NEIN-Entscheidung bezüglich der Signifikanz eines Ausreißers zu treffen und damit die Möglichkeit wahrnehmen zu können, etwaige Fehleintragungen noch rechtzeitig zu korrigieren.

7 TRENDBERECHNUNG

Nachdem die Datenvorbereitung, d.h. die Berechnung der Ausgleichsgeraden, die Verifizierung eines ausreißerfreien Datensatzes und die sich daraus eventuell ergebende Neuangleichung der Ausgleichsgeraden abgeschlossen ist, erfolgt die eigentliche Trendberechnung

Wie bereits in Abschnitt 4 dargelegt, erfüllt der Ausgangsdatensatz aus Abbildung 2 bereits mit seinen sechs „Wertepaaren“ diese Voraussetzungen. Im folgenden Schritt wird unter der gewählten Signifikanzzahl festgestellt, ob das errechnete Steigungsmaß (a_1) der Stichprobe als signifikanter Trend für die Grundgesamtheit angesehen werden kann. Dabei wird angenommen, dass eine Grundgesamtheit für diesen Parameter an dieser GWM existiert, deren Konzentrationsentwicklung sich für den gewählten Zeitraum in vereinfachter Form als lineare Veränderung beschreiben lässt. Diese lineare Konzentrationsveränderung der Grundgesamtheit wird durch $Y = \mu + \beta * X$, mit der Zeitachse X und dem Steigungsmaß β beschrieben.

Da diese Grundgesamtheit nicht bekannt ist, kann demzufolge auch keine Aussage über irgendeinen Wert $\beta \neq 0$ als „Sollwert“ für das Steigungsmaß erfolgen. Der praktisch bedeutsame Fall für die Trendberechnung ist das Aufstellen einer Hypothese $\beta = 0$.

Trifft diese Hypothese zu, so bedeutet dies, dass die Stichprobe mit dem Steigungsmaß a_1 die Annahme eines Trends für die Grundgesamtheit nicht rechtfertigt. Die Regressionsgerade der Grundgesamtheit verläuft wegen $\beta = 0$ waagerecht. Die Y-Werte hängen damit gar nicht von den X-Werten ab. Sie sind unter der gewählten statistischen Signifikanz zufallsbedingt, also über die Dauer dieser sechs Jahre (streng genommen nur vom Zeitpunkt der ersten bis zum Zeitpunkt der letzten „Messung“) zeitunabhängig. Als einzig verbleibender Anhaltspunkt verläuft die damit „waagerechte Ausgleichsgerade“ der Grundgesamtheit durch den Mittelwert der y-Werte der Stichprobe.

Trifft dagegen die Alternative zu, dann kann für die gewählte Signifikanzzahl (= Eintrittswahrscheinlichkeit) aus dem Steigungsmaß a_1 der Stichprobe auch ein vorliegender Trend für die Grundgesamtheit gefolgert werden.

In der Praxis ist die Vorgehensweise in den folgenden Arbeitsschritten skizziert:

Allgemein: Test der Hypothese $\beta = \beta_0$ gegen die Alternative $\beta > \beta_0$ (hier mit $\beta_0 = 0$)

Spezialfall: Hypothese $\beta = 0$ (y ist nicht abhängig von x)

Alternative $\beta \neq 0$ (abnehmender oder ansteigender Trend ist signifikant)

1. Schritt: Man wähle die Signifikanzzahl α^* (5 %, 1 % oder dgl.).

   Es wird $\alpha^* = 5$ % empfohlen (wie Berechnung der Nitrattrends im „Grundwasserbericht 2000 Nordrhein-Westfalen“ oder im Bericht über „Die Nitratbelastung des Grundwassers in Nordrhein-Westfalen“). Die Festlegung ist eine Grundsatzentscheidung, die zu Beginn einmal getroffen werden muss und danach immer beibehalten wird.

   Die Signifikanzzahl bezeichnet die Eintrittswahrscheinlichkeit für einen Fehler 1. Art, d.h. das Verwerfen der Hypothese zugunsten der Alternative, obwohl die Hypothese richtig ist.

2. Schritt: Man bestimme eine Zahl c aus der Students t-Verteilung in Anlage 2 mit n-2 Freiheitsgeraden. Für das Beispiel in Abbildung 2 mit n = 6 Wertepaaren ergibt sich für eine 95 %ige Wahrscheinlichkeit und für 4 Freiheitsgrade ein Wert von c = 2.13.

3. Schritt: Aus der Stichprobe $(x_1,y_1),.....,(x_n,y_n)$ berechne man
   s_x^2 (Formel siehe Abschnitt 3)
   s_y^2 (entsprechend wie s_x^2)
   a_1 (Formel siehe Abschnitt 3) und
   $A = (n-1) * (s_y^2 - a_1^2 * s_x^2)$

4. Schritt: Man berechne
   $t0 = sx * [\sqrt{(n-1)(n-2)}] *(|a1 – \beta0| / \sqrt{A}))$

Man vergleiche den sich aus den aktuellen Wertepaaren ergebenden Wert t_0 mit dem theoretisch-statistischen Wert c. Ist $t_0 \leq c$, so wird die Hypothese angenommen. Ist dagegen $t_0 > c$, so wird sie verworfen und die Alternative als zutreffend angesehen.

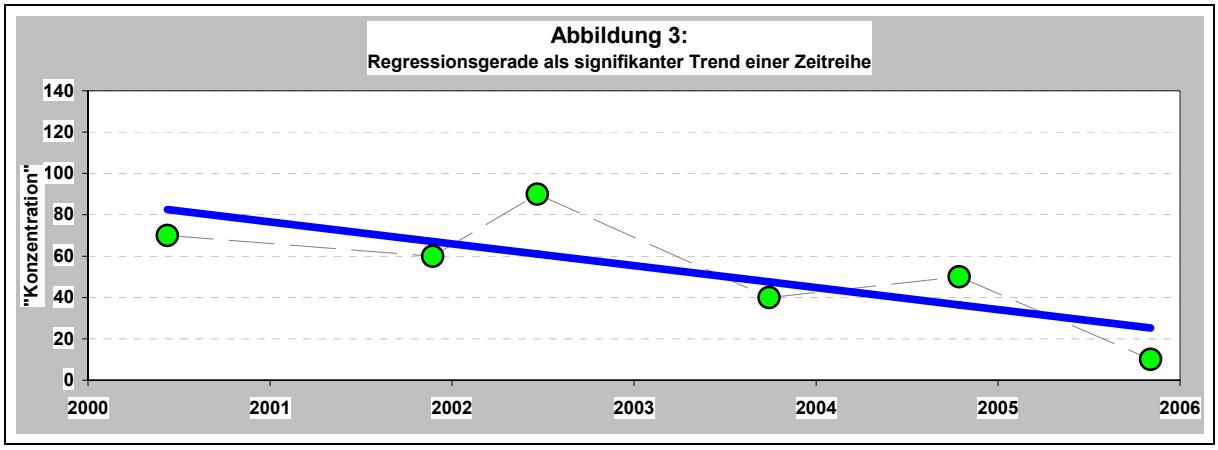
(Vorgehensweise wie in KREYSZIG (1991), Kap. 17, Seite 276 beschrieben).

Am konkreten Beispiel des synthetischen Datensatzes aus Abbildung 2 ergibt die Berechnung für $t_0 = 2.083$. Daraus folgt, dass $t_0 < c$ und damit die Hypothese $\beta = \beta_0 = 0$ angenommen wird. Dies Ergebnis ist insofern etwas überraschend, weil entweder das Steigungsmaß der Regressionsgeraden, in diesem Beispiel mit < -10 Messgrößeneinheiten pro Jahr, oder die gewählte Darstellung den Betrachter „gefühlsmäßig“ dazu verleiten könnte, ein abnehmendes Trendverhalten anzuerkennen. Der Test bietet damit ein „objektives“ Maß der Entscheidung, dass der hier angetroffene abnehmende Trend nicht signifikant ist.

Zwar ist der Wert t_0 direkt proportional sowohl dem absoluten Steigungsmaß, als auch der Anzahl der Stichprobenwerte, dagegen aber umgekehrt proportional der Summe der Abstandsquadrate (= Streuung der Einzelwerte um die Regressionsgerade). Letzeres wird durch den Term A in die Berechnung von t_0 mit berücksichtigt. Aus dem numerischen Wert von a_1 allein ist ein signifikantes Trendverhalten ebenso wenig abzuleiten wie die Erhöhung der Anzahl der Stichprobenwerte auch nicht unbedingt zwangläufig zu einem signifikant vorliegenden Trend führen muss.

Das in Abbildung 2 gezeigte synthetische Beispiel wurde bewusst gewählt, um die „Grenzwertproblematik“ besonders zu verdeutlichen.

Verändert man dagegen in dem Beispiel der Abbildung 2 den dritten „Messwert“ von 100 auf 90, so verringert sich das Steigungsmaß der Regressionsgeraden zwar nur unwesentlich von a_1= -10.98 auf a_1= -10.61 Messgrößeneinheiten pro Jahr. Wegen t_0 = 2.410 > c = 2.130 wäre aber unter den gegebenen Voraussetzungen und Vorgaben ein Trend für die Grundgesamtheit als signifikant anzuerkennen (s. Abb. 3), weil in diesem Fall die Summe der Abstandsquadrate geringer ausfällt und den Wert von t_0 deutlicher prägt als in dem vorherigen Beispiel.



Lfd.Nr.	Probennahmedatum	x	y (=Messwert)	y Ausgleichs-gerade	y Resi-duum	Ausrei-ßer
1	08.06.2000	2000.44	70.0	82.6	-12.6	---
2	23.11.2001	2001.89	60.0	67.1	-7.1	---
3	20.06.2002	2002.47	90.0	61.0	29.0	---
4	28.09.2003	2003.74	40.0	47.5	-7.5	---
5	14.10.2004	2004.79	50.0	36.5	13.5	---
6	03.11.2005	2005.84	10.0	25.3	-15.3	---

Es sei an dieser Stelle darauf hingewiesen, dass für den ausreißerbereinigten Datensatz des Beispiels in Abbildung 2b ebenso die Alternative zuträfe; das heißt, eine Konzentrationsabnahme von 9.3 Messgrößeneinheiten pro Jahr wäre im Datensatz der Abbildung 2b als signifikanter Trend anzusehen.

Eine Zusammenfassung der Vorgehensweise für die Trendberechnung einschließlich der Ausreißerbereinigung bietet das folgende Fließdiagramm:

FLIEßDIAGRAMM ZUR TRENDBERECHNUNG

Für die m-te Messstelle mit den Wertepaaren $(x_{m,1}, y_{m,1})$.....$(x_{m,n}, y_{m,n})$

Berechnung der Regressionsgeraden :

$$y = a_0 + a_1 * x$$

$s_x^2 = [\sum x_i^2 - (\sum x_i)^2 / n] / (n-1)$

$s_y^2 = [\sum y_i^2 - (\sum y_i)^2 / n] / (n-1)$

$s_{xy} = [\sum x_i * y_i - (\sum x_i) * (\sum y_i) / n] / (n-1)$

$x_{MW} = (x_1 + x_2 + ...+ x_n) / n$

$y_{MW} = (y_1 + y_2 + ...+ y_n) / n$

$a_1 = s_{xy} / s_x^2$

$a_0 = -(a_1 * x_{MW} - y_{MW}) = y_{MW} - a_1 * x_{MW}$

Berechnung der Residuen :

$$\hat{y}_R = y_i - y = y_i - (a_0 + a_1 * x_i)$$

$\hat{y}_R$: Mittelwert der Residuen

s_R : Standartabweichung

$y_{R,max}$: der y_R-Wert mit der größten Abweichung von der Regressionsgraden

Ausreißertest nach NALIMOV :

$$r* = [(|y_{R,max} - \hat{y}_R|) / s_R] * \sqrt{(n / (n-1))}$$

Vorgehensweise aus :
KAISER & GOTTSCHALK (1972): Kap.3, S. 18 / 19

$r* < r_{(99)}$

$r_{(99)}$ aus Anlage 1 (f = n - 2)

nein

Entfernen des Wertepaares x_i, y_i für das gilt:

$y_{R,i} = y_{R,max}$

$n = n - 1$

$n_{Probensoll}$ **und** $n_{Jahressoll}$ noch erfüllt ?

ja

nein

keine Trendberechnung wegen zu geringer Anzahl Wertepaare ($n_{Probensoll}$ oder $n_{Jahressoll}$)

ja

Test beim Regressionskoeffizenten:

Allgemein: Test der Hypothese $\beta = \beta_0$ gegen die Alternative $\beta > \beta_0$

Spezialfall : $\beta = 0$; d.h. y ist unabhängig von x

1. Schritt: Festlegen der Signifikanzzahl $\alpha^* = 5\%$
2. Schritt: Man bestimme den Wert **c** aus $P(T \leq c) = 1 - \alpha^*$ $[P = 95\%]$ aus der t-Verteilung der Anlage 2 mit n - 2 Freiheitsgraden
3. Schritt: Aus der (ausreißerbereinigten) Stichprobe $(x_{m,1}, y_{m,1})$.....$(x_{m,n}, y_{m,n})$ berechne man $A = (n-1) * (s_y^2 - a_1^2 * s_x^2)$
4. Schritt: Man berechne für $\beta_0 = 0$ $t_0 = s_x * [\sqrt{(n-1)(n-2)}] * |a1 - \beta_0| / \sqrt{A}$

Vorgehensweise aus:
KREYSZIG (1991): Kap. 17, Seite 276

$t_0 > c$

nein

kein Trend vorhanden y ist unabhängig von x

ja

$a_1 > 0$

ja

Trend ansteigend

nein

Trend abnehmend

8 PRAKTISCHE BEISPIELE REALER DATENSÄTZE DER GRUNDWASSERDATENBANK NRW

Nachfolgend dokumentieren ausgewählte Beispiele unterschiedlicher Parameter und für landeseigenen Grundwassermessstellen in NRW die beschriebene Vorgehensweise für ein gewählten Zeitraum von 2000 bis einschließlich 2006.

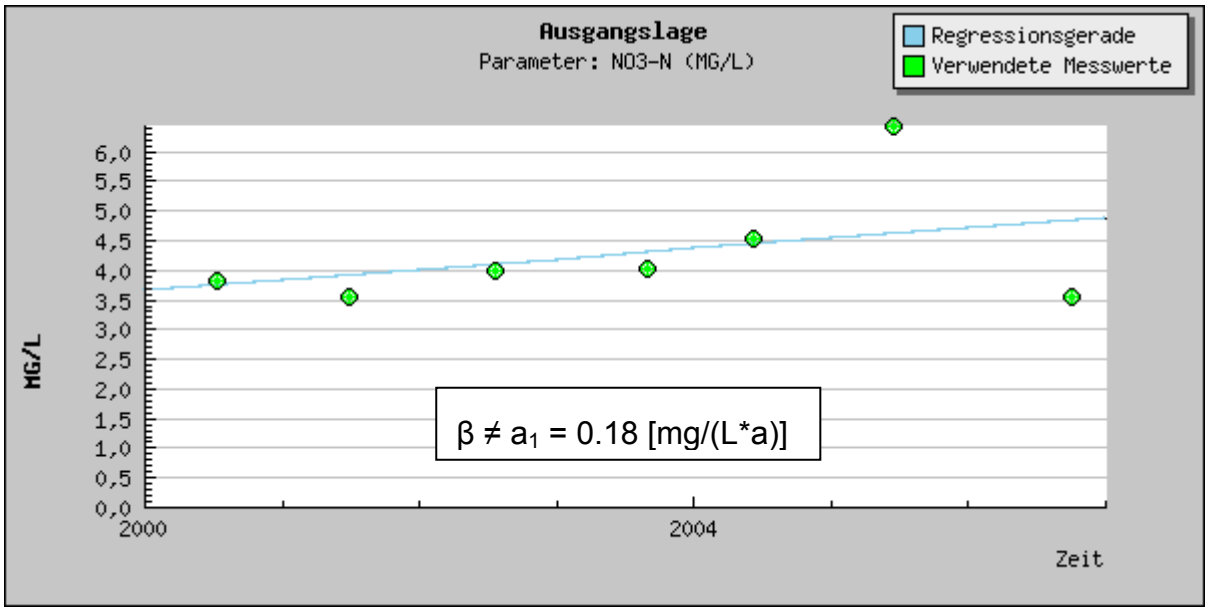


Abbildung 4a: Nitrat-Stickstoff in der NRW - Grundwassermessstelle 070198019

Nach einer angedeutet ansteigenden Konzentrationsentwicklung des Nitrat-Stickstoffs in den ersten fünf Jahren führen die stark streuenden Messergebnisse der beiden letzten Jahre zu der Bewertung, dass die Regressionsgerade der Stichprobe keinen signifikanten Trend für die Grundgesamtheit rechtfertigt.

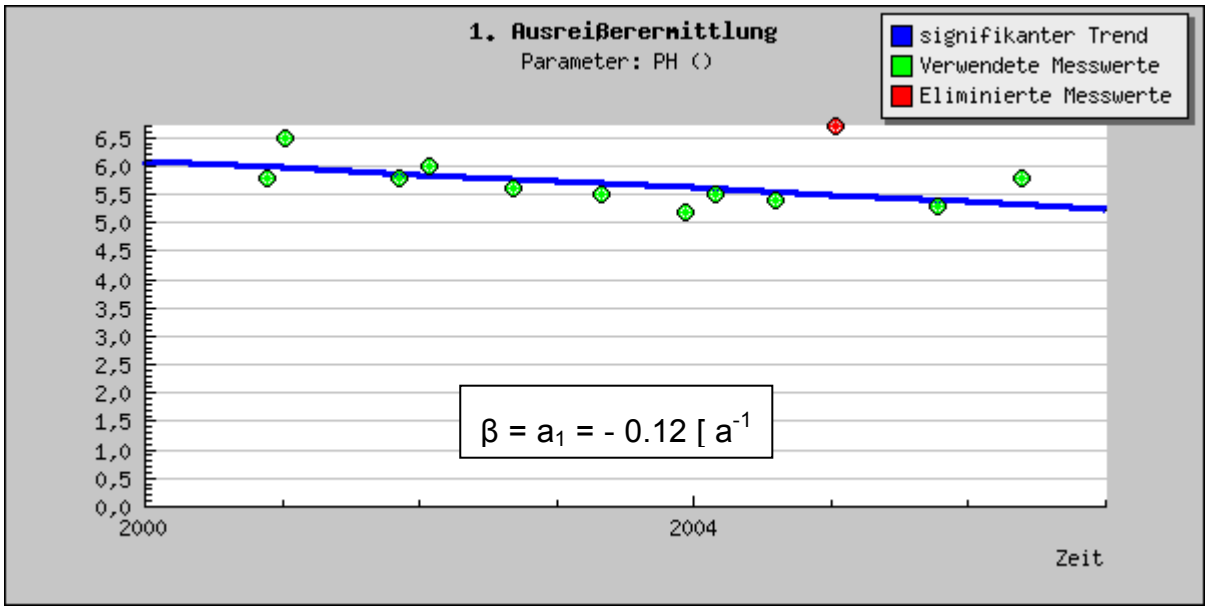


Abbildung 4b: pH-Wert in der NRW - Grundwassermessstelle 030302584.

Für diese Grundwassermessstelle ist für den Zeitraum von 2000 bis 2006 eine signifikante Verringerung des pH-Wertes, d.h. eine Versauerung mit der Größenordnung von 0.12 Einheiten pro Jahr festzustellen. Ein Messwert mit einer geringfügigen Abweichung vom restlichen Datenkollektiv wurde dabei als Ausreißer (rot gekennzeichnet) angesehen.

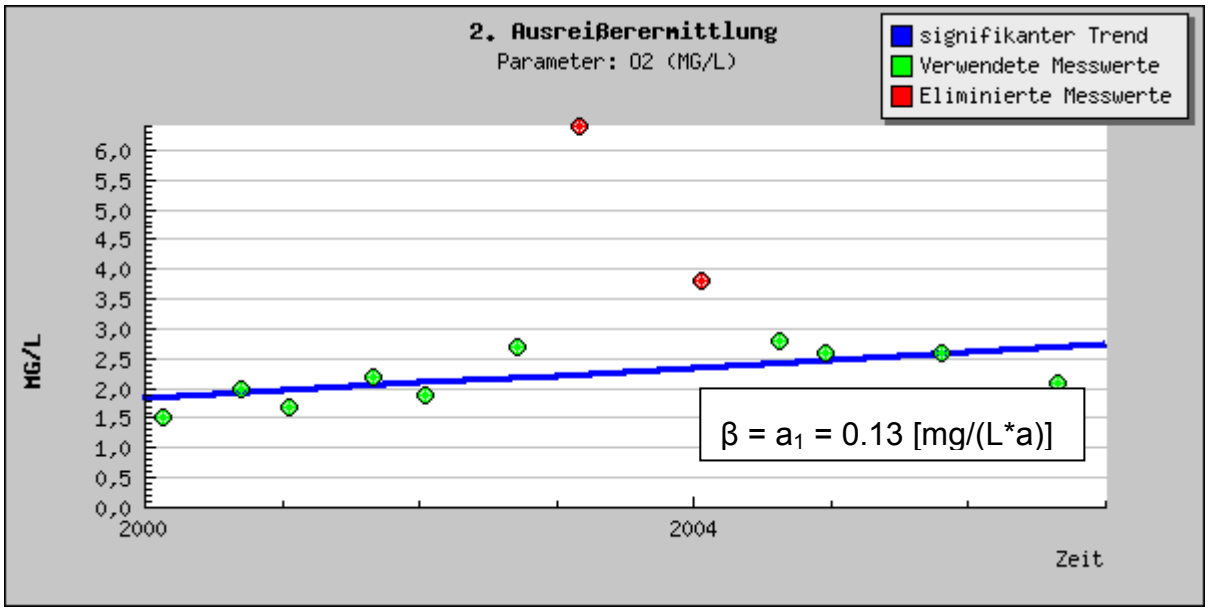


Abbildung 4c: Sauerstoff in der NRW - Grundwassermessstelle 080300285.

Der lineare Anstieg der O_2-Konzentration um jährlich 0.13 mg/L ist signifikant. Die beiden als Ausreißer markierten Messwerte dieses Datenkollektivs deuten auf eine mögliche kurzfristige Erhöhung der Sauerstoffkonzentration im Grundwasser zu Beginn des Jahres 2003 hin. Zukünftige Untersuchungen werden zeigen, ob das deutliche Abklingen der Konzentration auch wieder zu den ohnehin geringen Messwerten der Anfangsjahre führen wird.

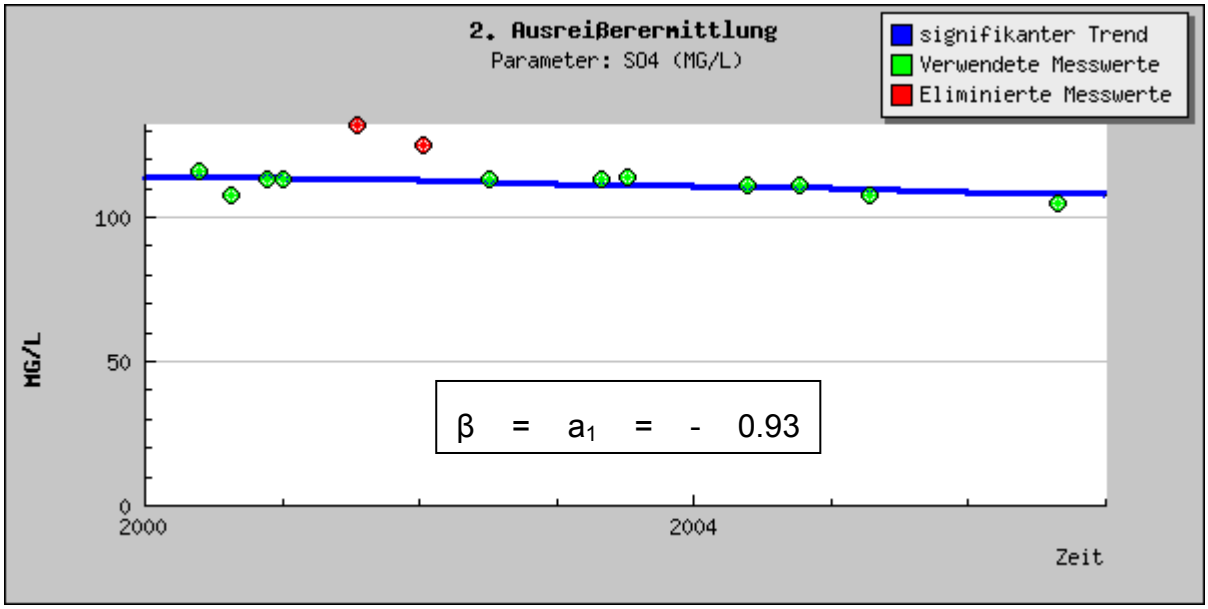


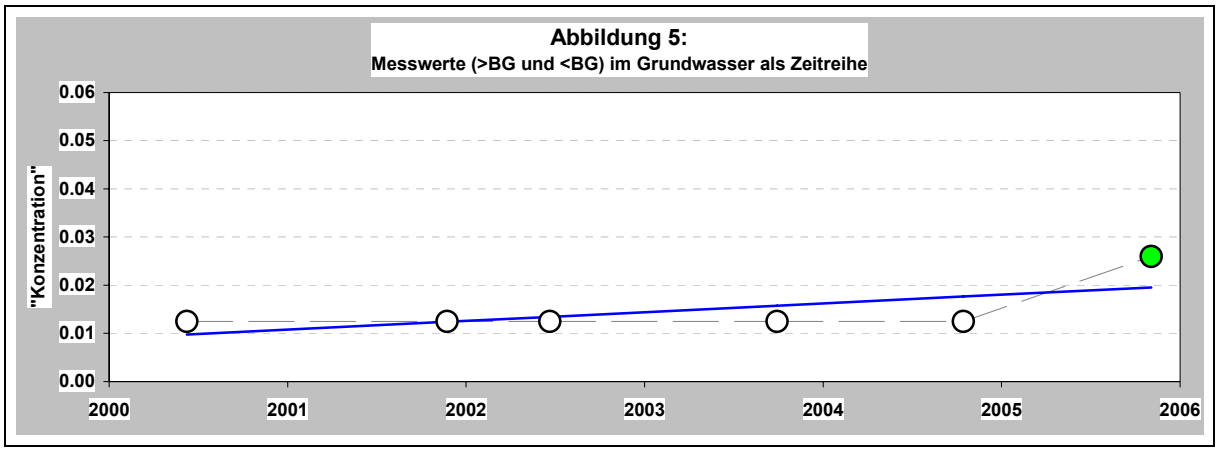
Abbildung 4d: Sulfat in der NRW - Grundwassermessstelle 080301332.

Trotz der beiden ausgewiesenen Ausreißer und der sich daraus ergebenden geringen Verringerung der Sulfatkonzentration von jährlich 0.93 mg/L an dieser Grundwassermessstelle liegt ein signifikanter Trend vor. Dieses Beispiel aus der Praxis demonstriert, dass die Datenlage zur Entscheidung eines vorliegenden Trends keineswegs immer ein optisch eindeutiges Erscheinungsbild bieten muss.

9 TRENDBERECHNUNG MIT MESSWERTEN <BG UND >BG

Die bisherigen Erläuterungen zur Trendberechnung und die ausgewählten Beispiele bezogen sich immer auf Parameter, deren Untersuchungsergebnisse einen diskreten Messwert präsentieren. Im Folgenden wird die Anwendbarkeit der Trendberechnung auch auf Parameter ausgeweitet, bei denen das Messergebnis auch < Bestimmungsgrenze (<BG) lauten kann. Zeitreihen, die ausschließlich aus Werten <BG bestehen, werden bei der Trendberechnung nicht mit berücksichtigt.

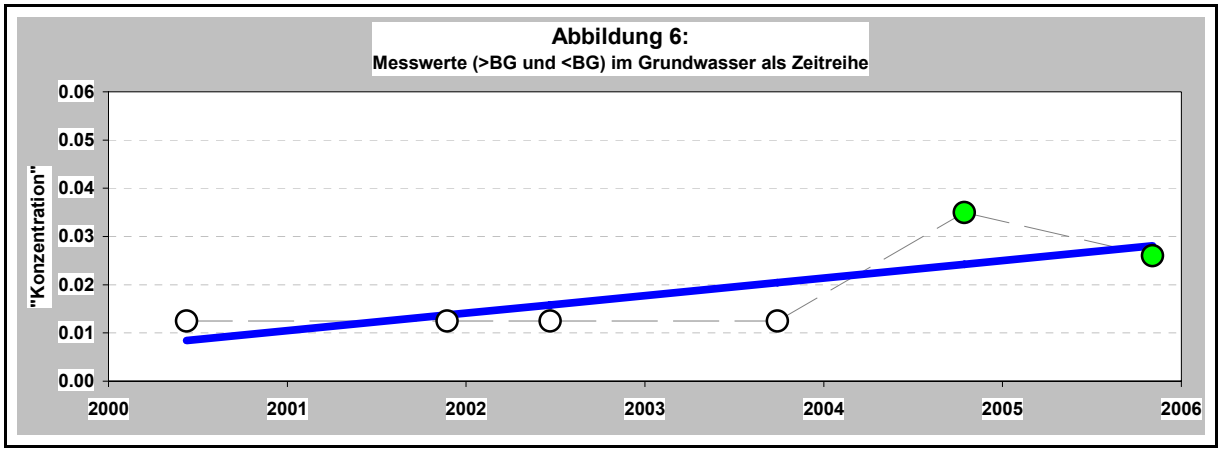
Pflanzenschutzmittel (PSM) sind deshalb von besonderer Bedeutung, weil für den überwiegenden Anteil der Untersuchungsergebnisse <BG gilt. Bei den PSM und prinzipiell für alle Grundwasseranalysen für chemische Verbindungen der organischen Chemie sowie für einige Schwermetalle kann für die Trendbetrachtung an einer Grundwassermessstelle eine Kombination aus Werten <BG und >BG auftreten. Nach WRRL sind die Untersuchungsergebnisse <BG für eine Trendbetrachtung mit dem Wert der halben Bestimmungsgrenze einzubeziehen. Anhand des Datensatzes in Abbildung 5 werden an einem synthetischen Datensatz für einen beliebigen Wirkstoff oder Metabolit und für ein beliebiges Zeitfenster die Auswirkungen und möglichen Konsequenzen für diese Sonderfälle diskutiert.



Lfd.Nr.	Probennahmedatum	x	y (=Messwert)	y Ausgleichs-gerade	y Resi-duum	Ausrei-ßer
1	08.06.2000	2000.44	0.0125	0.0097	0.0028	---
2	23.11.2001	2001.89	0.0125	0.0124	0.0001	---
3	20.06.2002	2002.47	0.0125	0.0134	-0.0009	---
4	28.09.2003	2003.74	0.0125	0.0158	-0.0033	---
5	14.10.2004	2004.79	0.0125	0.0176	-0.0051	---
6	03.11.2005	2005.84	0.0260	0.0196	0.0064	---

- Von sechs Untersuchungsergebnissen zeigen die ersten fünf alle <BG. Der konstante Zahlenwert von 0.0125 orientiert sich an der derzeitig erreichbaren Bestimmungsgrenze vom Labor des Landesamtes für Natur, Umwelt und Verbraucherschutz (LANUV-NRW) mit 0.025 µg/L für nahezu alle Wirkstoffe/Metabolite.
- Das Ergebnis des jüngsten Messwertes >BG beträgt 0.026 µg/L, d.h. der positive Nachweis erfolgte nur ganz knapp oberhalb der Bestimmungsgrenze.
- Aus der Datenkonstellation ergibt sich eine Ausgleichsgerade mit einem Steigungsmaß von ca. 2 ng/L pro Jahr.
- Der Datensatz ist ausreißerfrei.
- Der ansteigende Trend ist nicht signifikant, d.h. dass ein vereinzelter positiver Nachweis am Ende der Zeitreihe noch nicht zu einem signifikanten Trend führt.

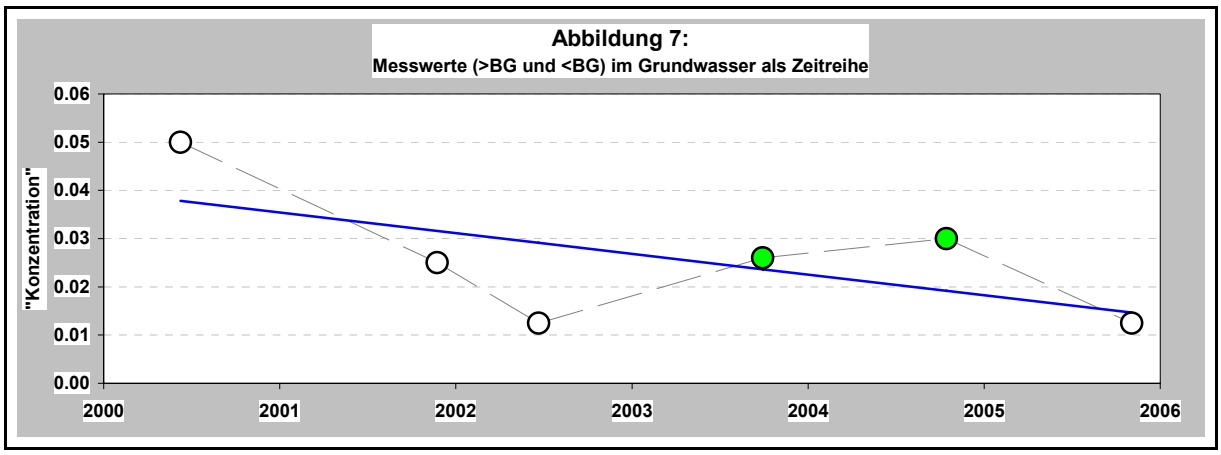
Dagegen führen zwei positive Untersuchungsergebnisse zu einem signifikanten, in diesem Beispiel ansteigenden Trend, auch wenn alle vier vorherigen Messergebnisse <BG aufweisen (Abb. 6).



Lfd.Nr.	Probennahmedatum	x	y (=Messwert)	y Ausgleichs-gerade	y Resi-duum	Ausrei-ßer
1	08.06.2000	2000.44	0.0125	0.0084	0.0041	---
2	23.11.2001	2001.89	0.0125	0.0137	-0.0012	---
3	20.06.2002	2002.47	0.0125	0.0156	-0.0033	---
4	28.09.2003	2003.74	0.0125	0.0205	-0.0080	---
5	14.10.2004	2004.79	0.0350	0.0243	0.0107	---
6	03.11.2005	2005.84	0.0260	0.0281	-0.0021	---

Ein analoges Ergebnis würde sich auch mit den beiden positiven Nachweisen zu Beginn der Zeitreihe mit einem daraus resultierenden abnehmenden Trend ergeben.

Befinden sich die wenigen Nachweise >BG nicht an einer der Enden der Zeitreihe, so wird daraus kein signifikantes Trendverhalten resultieren, insbesondere dann nicht, wenn, wie in Abbildung 7 gezeigt, von den sechs Untersuchungsergebnissen drei verschiedene Bestimmungsgrenzen, dargestellt durch die offenen Kreise auftreten.



Lfd.Nr.	Probennahmedatum	x	y (=Messwert)	y Ausgleichs-gerade	y Resi-duum	Ausrei-ßer
1	08.06.2000	2000.44	0.0500	0.0379	0.0121	---
2	23.11.2001	2001.89	0.0250	0.0316	-0.0066	---
3	20.06.2002	2002.47	0.0125	0.0291	-0.0166	---
4	28.09.2003	2003.74	0.0260	0.0237	0.0023	---
5	14.10.2004	2004.79	0.0300	0.0192	0.0108	---
6	03.11.2005	2005.84	0.0125	0.0146	-0.0021	---

10 PRAKTISCHE BEISPIELE REALER DATENSÄTZE DER GRUNDWASSERDATENBANK NRW (TEIL 2)

Entsprechend der in Kapitel 6 aufgeführten Beispiele werden an weiteren ausgewählten Parametern an landeseigenen Grundwassermessstellen in NRW die beschriebene Vorgehensweise für ein gewählten Zeitraum von 2000 bis einschließlich 2006 unter besonderer Berücksichtigung der Werte <BG aufgezeigt.

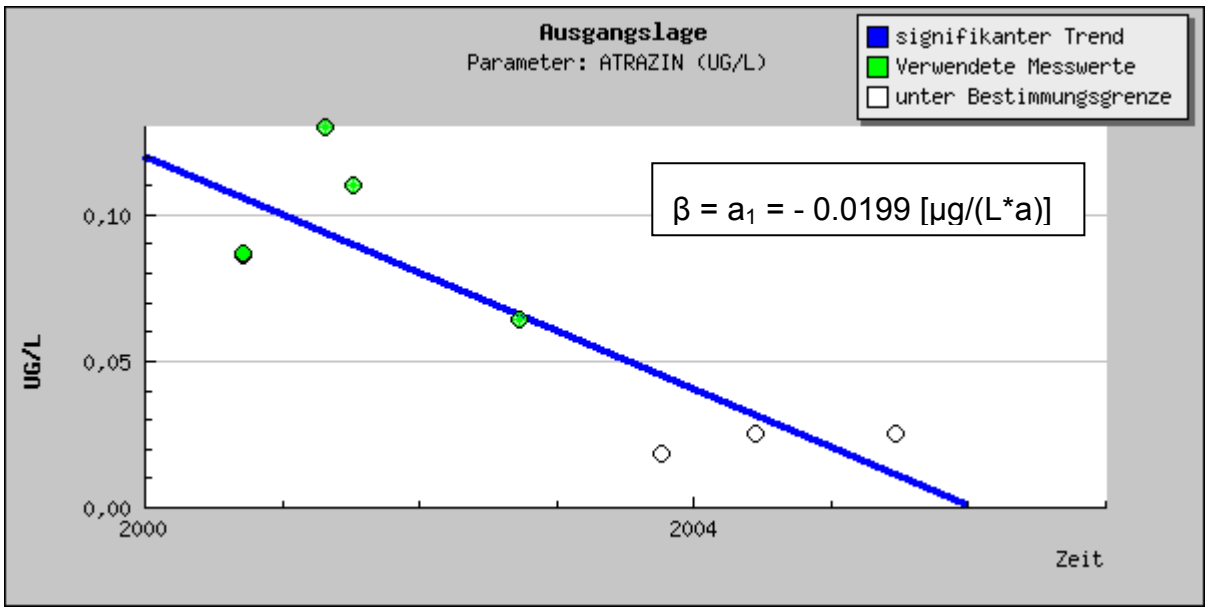


Abbildung 8a: Atrazin in der NRW - Grundwassermessstelle 070270016.

Die Abnahme der anfänglich z. T. auch über dem Grenzwert für PSM-Wirkstoffe gemessenen Konzentration des Atrazins ist an dieser Grundwassermessstelle für den Zeitraum 2000 bis 2006 mit jährlich ca. 0.02 µg/L als signifikant anzuerkennen. Selbstverständlich unterbleibt die Fortsetzung der Trendgeraden in den Bereich der negativen Konzentration.

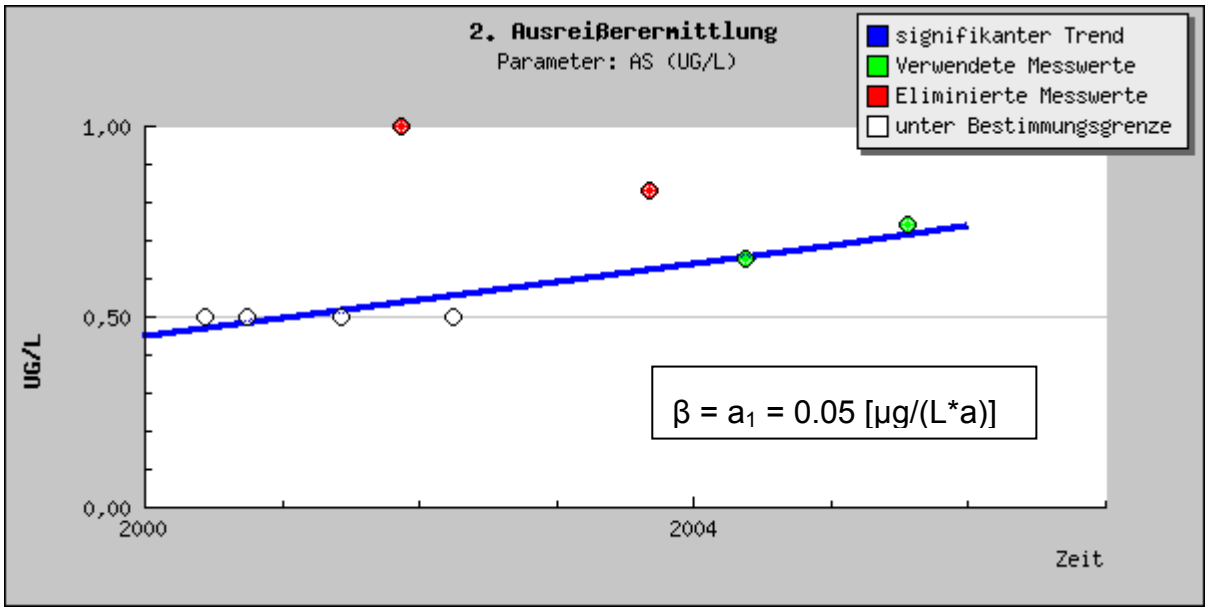


Abbildung 8b: Arsen in der NRW - Grundwassermessstelle 040061383.

Untersuchungsergebnisse <BG sind auch bei Schwermetallen, wie hier beim Metalloid Arsen keine Seltenheit. Das Steigungsmaß der Stichprobe von jährlich 0.05 µg/L wird bei zwei erkannten Ausreißern als signifikant ansteigender Trend für die Grundgesamtheit erkannt.

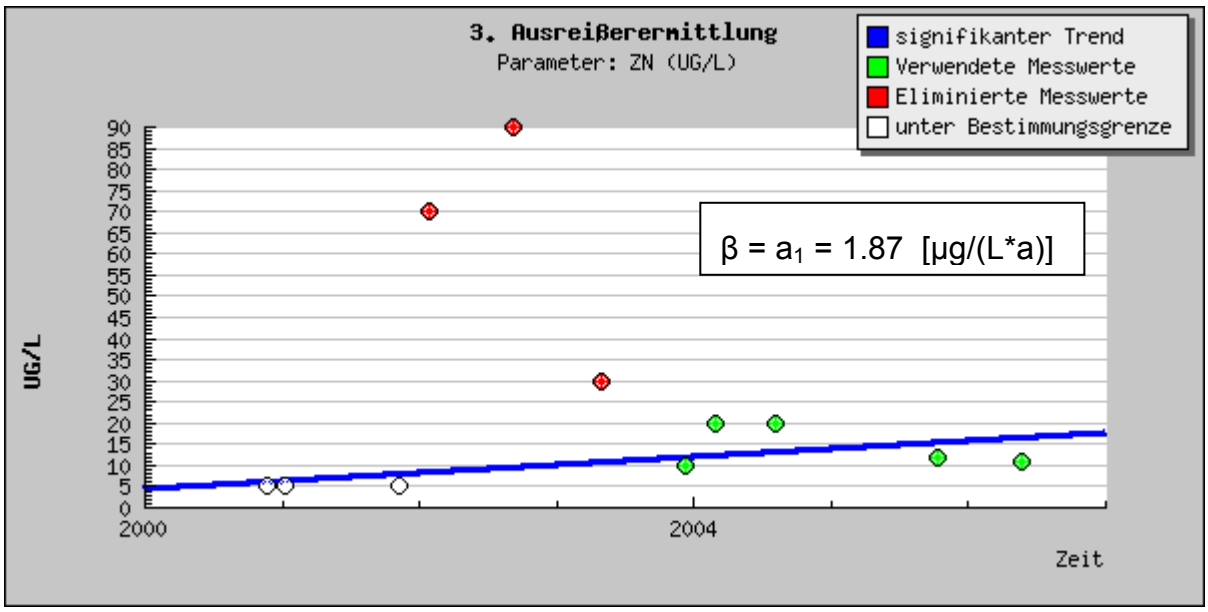


Abbildung 8c: Zink in der NRW - Grundwassermessstelle 030302584.

Für das Zink liegt an dieser Grundwassermessstelle ein signifikant ansteigender linearer Trend von 1.87 µg/L pro Jahr vor. Eine differenziertere Interpretation der Daten könnte, ähnlich dem in Abbildung 4c gezeigten Beispiel des Sauerstoffs, einen kurzfristig in 2002 erfolgten deutlichen Anstieg der Konzentration mit anschließender asymptotisch verlaufender Konzentrationsabnahme erkennen. Diese sicherlich gegenüber der Annahme einer linearen Konzentrationsänderung zutreffendere Deutung der lokalen Grundwassersituation ändert nichts an der Feststellung, dass die Zinkkonzentration am Ende des Betrachtungszeitraumes signifikant höher ist als dies in den Anfangsjahren der Fall war. Diese Aussage wird durch die Trendanalyse bestätigt.

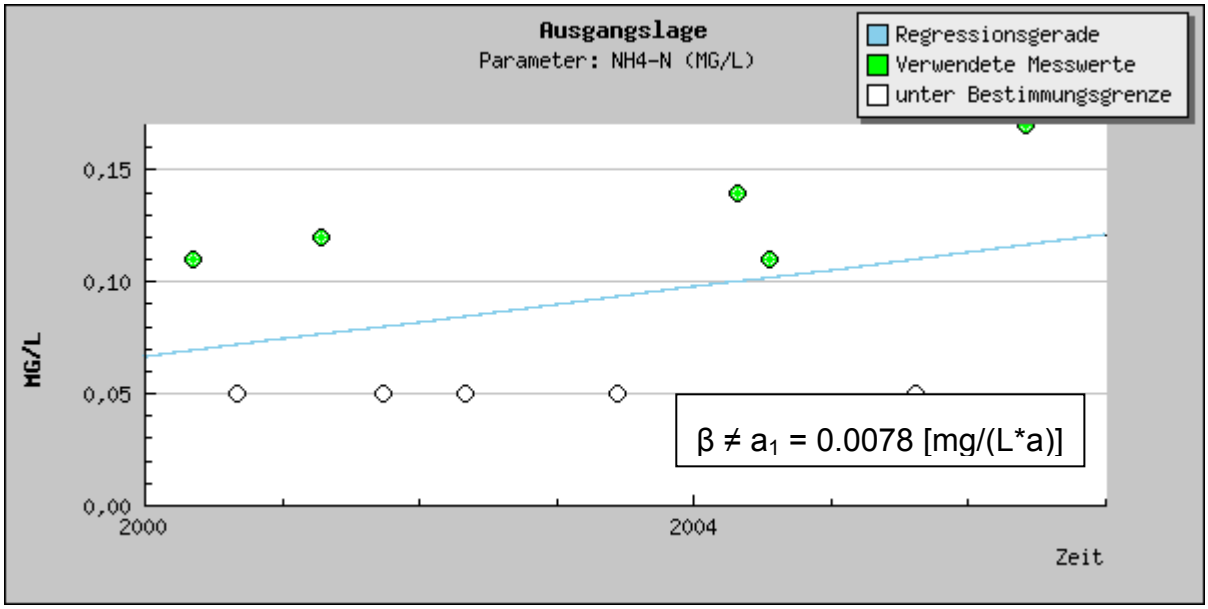


Abbildung 8d: Ammonium-Stickstoff in der NRW - Grundwassermessstelle 040100017.

Die stark zwischen realen Messwerten und Werten <BG wechselnden Untersuchungsergebnisse für Ammonium-Stickstoff an dieser Grundwassermessstelle weisen zwar ein Steigungsmaß für die Stichprobe von 0.0078 mg/L jährlich auf, dieses ist aber wegen der großen Streuung der Werte um die Regressionsgerade weit davon entfernt als signifikant ansteigender Trend für eine Grundgesamtheit bezogen auf den Zeitabschnitt 2000 bis 2006 anerkannt zu werden.

11 NACHWEIS EINER TRENDUMKEHR AN EINER GRUNDWASSERMESSSTELLE

Die EU-WRRL fordert nicht nur den Nachweis eines Trends für Stoffe im Grundwasser unter Angabe des zugrundeliegenden statistischen Verfahrens einschließlich der gewählten statistischen Sicherheit, sondern darüber hinaus auch in besonderen Fällen (siehe Kap. 11) den Nachweis einer Trendumkehr. Der Nachweis einer Trendumkehr ist für den ersten Bewirtschaftungsplan noch nicht relevant. Die zuvor beschriebene Vorgehensweise für die Trendberechnung ist auch für diese Fragestellung das geeignete Mittel der Wahl.

Grundsätzlich ist unter einer Trendumkehr eine deutlich ausgeprägte Konzentrationsänderung innerhalb eines vorgegebenen Zeitraumes zu verstehen. Für eine lineare Konzentrationsänderung bedeutet dies, dass eine Trendumkehr durch eine Änderung des Trendverhaltens zweier Regressionsgeraden dokumentiert werden kann. In der Abbildung 9 sind die sich daraus ergebenden Kombinationen dargestellt.

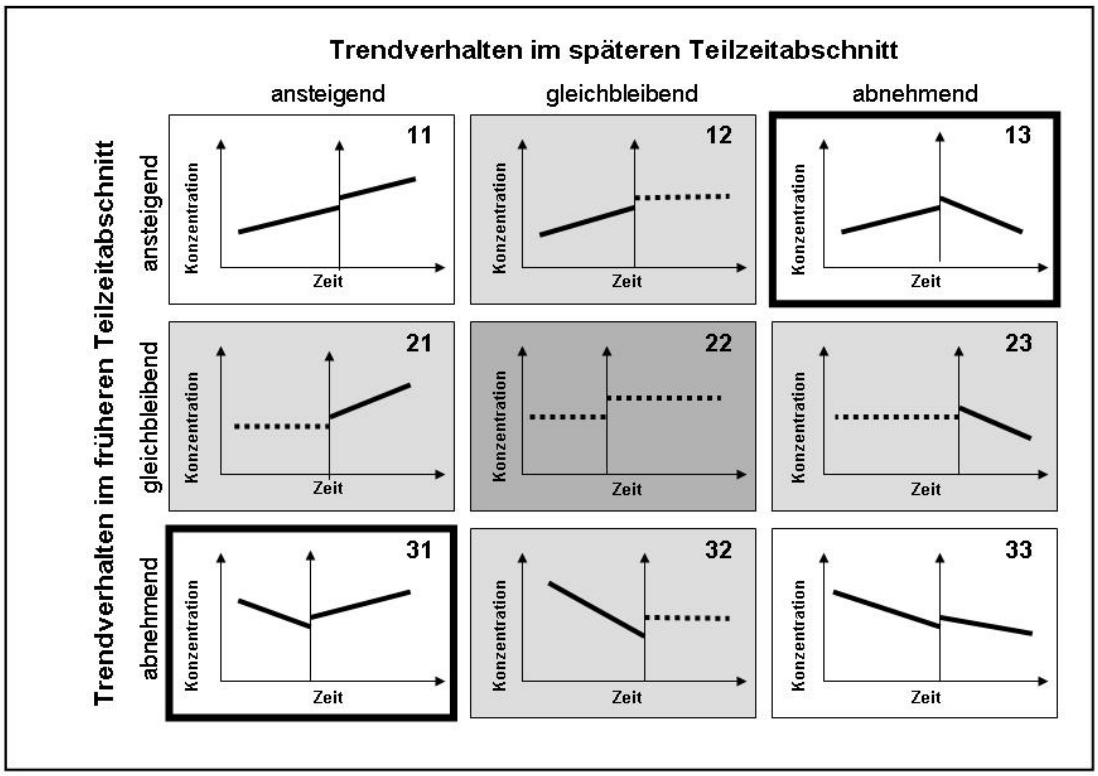


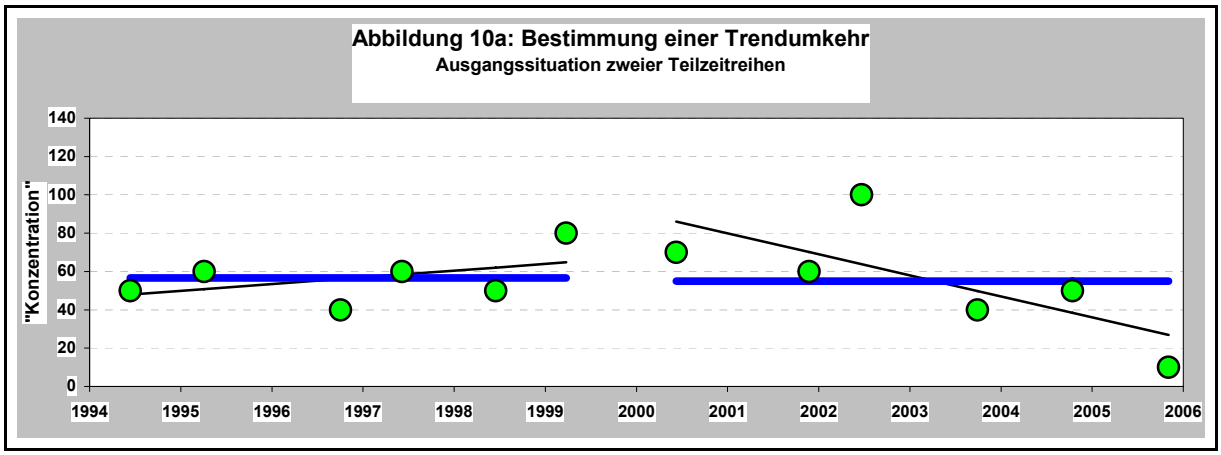
Abbildung 9: Kombination der Trendverhalten zweier Zeitabschnitte.

Eine Trendumkehr im strengen Sinne ist dabei nur in den beiden Fällen 13 und 31 gegeben. Eine Änderung des Trendverhaltens, aber eben keine strenge Trendumkehr, liegt in den Kombinationen 12, 21, 23 und 32 vor. Im weiteren Verfahren werden diese sechs aufgezeigten Möglichkeiten als „Trendumkehr im weiteren Sinne“ aufgefasst und entsprechend verwendet. Der Vollständigkeit halber sei auf die drei verbliebenen Fälle 11, 22 und 33 hingewiesen, für die der geforderte Nachweis nicht möglich ist.

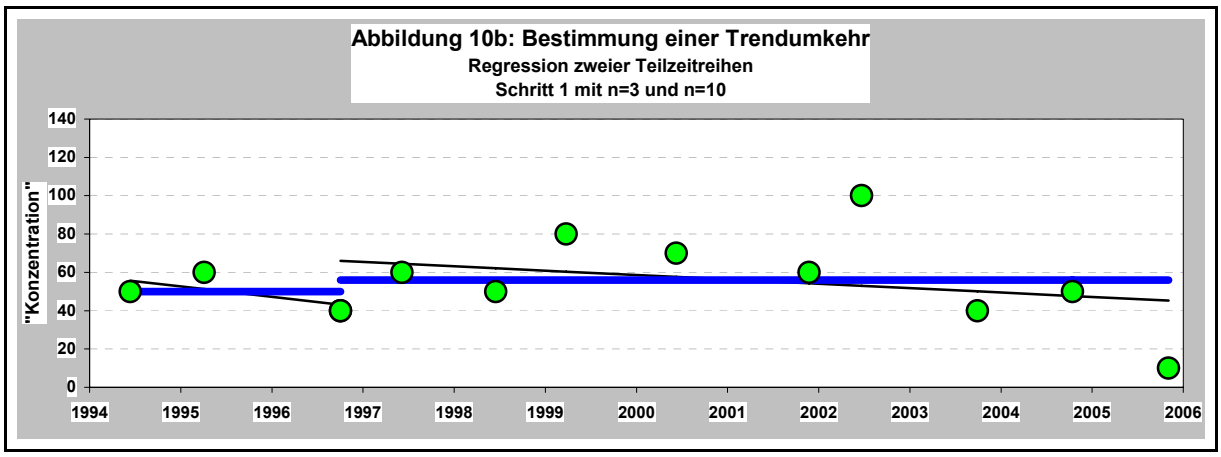
Für die Einschätzung einer Trendumkehr wird zunächst wieder der Datensatz aus der Abbildung 2 verwendet. Es muss festgestellt werden, dass für diesen Datensatz allein die Vorraussetzungen zum Nachweis einer Trendumkehr ungenügend sind, weil der Zeitabschnitt von sechs Jahren für Grundwasserdaten sicher für eine solche Fragestellung zu kurz ist und/oder die Anzahl von sechs vorliegenden „Messwerten“ bei weitem nicht ausreichend ist, um an zwei Regressionsgeraden eine Trendumkehr begründen zu können.

Als Konsequenz dieses noch unzulänglichen Datensatzes wird die vorliegende Zeitreihe in die Vergangenheit verlängert. Anzustreben ist eine Erweiterung um ebenso sechs Jahre (=Bewirtschaftungszeitraum im Sinne der EU-WRRL). Wenn die Datenlage dieses nicht hergibt, dann kann der Versuch auch mit einer kürzeren Erweiterung durchgeführt werden. Sollten sich die Daten nur auf den vorliegenden Sechsjahreszeitabschnitt beschränken, dann ist eine Bestimmung der Trendumkehr an dieser Grundwassermessstelle und für diesen Parameter nicht durchführbar.

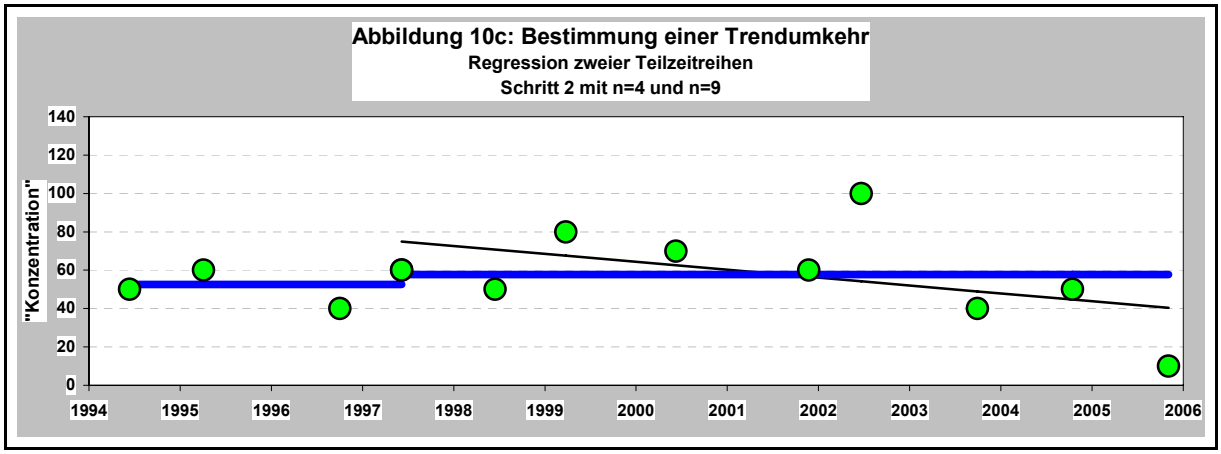
Die Ausgangsdatenlage für den Zeitabschnitt 2000 bis 2005 wird um den Zeitraum 1994 bis 1999 in die Vergangenheit verlängert. Die graphische Präsentation erfolgt in Abbildung 10a. Gemeinsames Merkmal beider Zeitreihen ist es, dass in keiner ein signifikant ansteigender oder abnehmender Trend vorliegt. Läge bereits in diesem Stadium ein signifikanter Trend in einer der beiden Zeitreihen vor, dann wäre wegen des Vorliegens einer der in Abbildung 9 beschriebenen Fälle der Nachweis einer „Trendumkehr im weiteren Sinne“ bereits erfolgt. Weil die Datenlage für den Gesamtzeitraum von 2 mal 6 Jahren dieses aber nicht hergibt, wird jetzt die Zeitreihe in Teilabschnitte unterschiedlicher Dauer zerlegt.



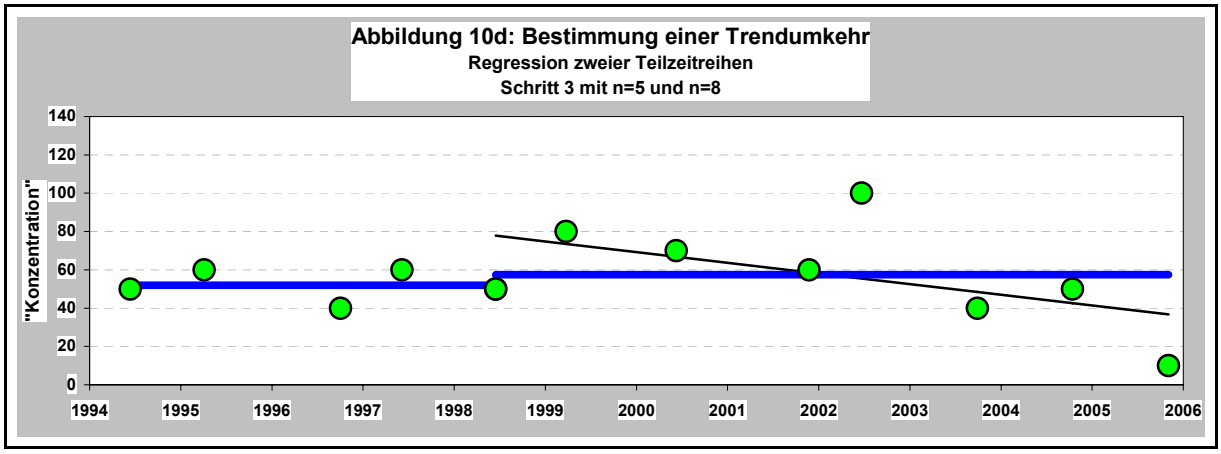
Die Zerlegung erfolgt in der Weise, dass immer der letzte Wert der zeitlich vorliegenden Teilzeitreihe auch der erste Wert der daran folgenden Teilzeitreihe ist. Die ersten beiden Teilzeitreihen werden aus den ersten drei und den letzten zehn „Messwerten“ gebildet, wie in Abbildung 10b dargestellt. Die an diesen ungleich langen Teilzeitreihen erfolgten Trendberechnungen zeigen das gleiche Ergebnis wie zuvor (Abb. 10a). Ein signifikant ansteigender oder abnehmender Trend liegt in keiner der beiden Teilzeitreihen vor. Damit kann der Nachweis einer Trendumkehr auch in diesem Schritt noch nicht gelingen.



Die weitere Aufteilung erfolgt in dem in Abbildung 10c dargestellten zweiten Schritt konsequenterweise in eine Teilzeitreihe der ersten vier „Messwerte“ gegen eine Teilzeitreihe der letzten 9 „Messwerte“. Auch in diesem Schritt gelingt der Nachweis einer Trendumkehr nicht.



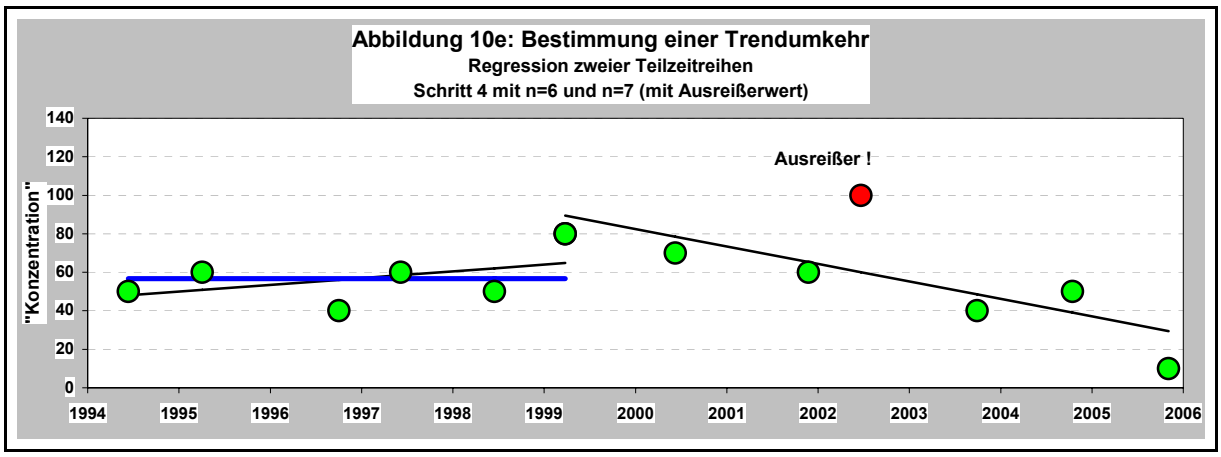
Auch die in dem darauf folgenden Schritt 3 erfolgte Trendberechnung an den Teilzeitreihen mit den ersten 5 gegen die letzten 8 „Messwerte“ ergibt weiterhin nur das Ergebnis, dass für beide Teilzeitreihen ein signifikanter ansteigender, bzw. abnehmender Trend nicht aufgezeigt werden kann (Abbildung 10d).



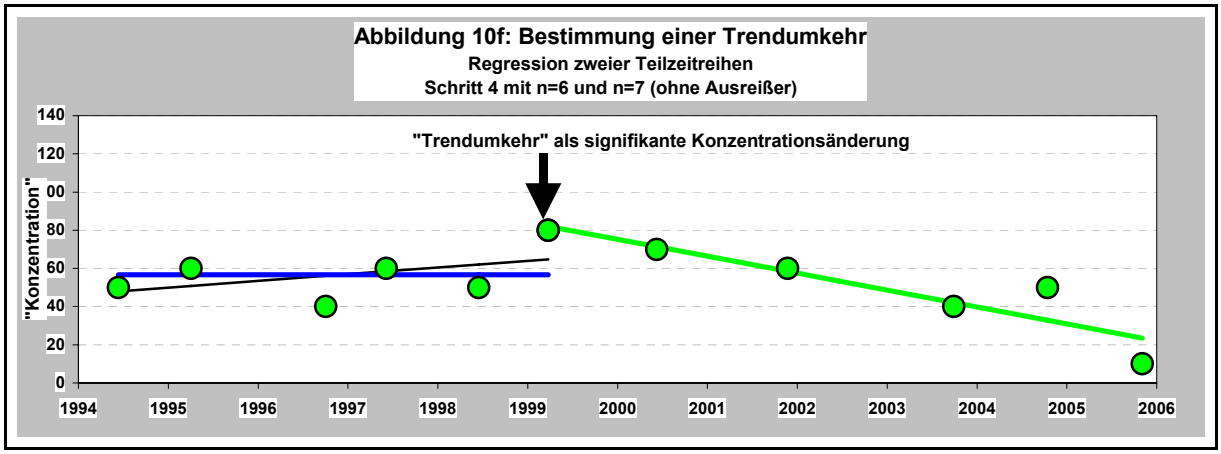
Erst die weitere Bearbeitung der Teilzeitreihen mit den ersten sechs „Messwerten“ gegen die letzten sieben „Messwerte“ gibt, wie in Abbildung 10e dargestellt, einen Hinweis, dass der Nachweis einer vorliegenden Trendumkehr an dieser Grundwassermessstelle und für diesen (fiktiven) Parameter möglicherweise doch erfolgen kann.

Zunächst ist festzustellen, dass die ältere Teilzeitreihe mit n = 6 „Messwerten“ exakt der Zeitreihe entspricht, die für die Verlängerung der Ausgangsdaten in die Vergangenheit herangezogen wurde (siehe Abb. 10a). Die Regressionsgerade mit einem positiven Steigungsmaß repräsentiert keinen ansteigenden Trend.

Dagegen besteht die zweite Teilzeitreihe mit den n = 7 „Messwerten“ aus den Wertepaaren der Zeitreihe von 2000 bis 2005, was genau unserem Ausgangsdatensatz entspricht, erweitert um den einen „Messwert“ aus dem Jahre 1999. Die sich daraus ergebenden Konsequenzen aus dieser einjährigen Zeitreihenverlängerung sind in diesem Beispiel weitreichend. Durch die Berechnung der Zeitreihe für n = 7 ergibt sich für den Wert des Jahres 2002, dass es sich hierbei, bezogen auf diese Zeitreihe, um einen Ausreißer handelt. Es wird nochmals darauf verwiesen, dass dieser „Messwert“ in der Originalzeitreihe für 2000 bis 2005 nicht als Ausreißer angesehen werden konnte (vgl. Abb. 2). Der Ausreißer wird jetzt nicht zuletzt auch deshalb als solcher angesehen, weil sich der ergänzende Wert aus dem Jahr 1999 gut in das Datenkollektiv der Teilzeitreihe von 1999 bis 2005 einfügt (s. Abb. 10e).



Das Auftreten eines Ausreißers macht eine Neuberechnung der Regressionsgeraden der Teilzeitreihe für 1999 bis 2005 unter Auslassung der Wertes aus 2002 erforderlich. Dieser neue Sachverhalt ist in Abbildung 10f dargestellt. Das Steigungsmaß der Regressionsgeraden für 1999 bis 2005 repräsentiert jetzt ein signifikant abnehmendes Trendverhalten. Damit ist an dieser Grundwassermessstelle und für diesen Parameter das Vorliegen einer „Trendumkehr im weiteren Sinne“ erbracht, weil ein anfänglich gleichbleibender Konzentrationsverlauf ab dem Jahr 1999 in eine signifikant abnehmende Konzentrationsentwicklung übergeht. Eine weitere Zerlegung in Teilzeitreihen ist damit nicht mehr erforderlich.



Abschließend sei noch darauf hingewiesen, dass eine Trendumkehr nicht zwangläufig auch in jeder längeren Zeitreihe auftreten muss, weil die Datensituation es nicht hergibt. Dann würde die in den Abbildungen 10b bis 10d dargestellte Situation bis zum letzten Schritt der drei jüngsten Werte gegen die ältere Teilzeitreihe der 10 älteren „Messwerte“ durchgängig auftreten.

12 TRENDBERECHNUNG FÜR EINEN GRUNDWASSERKÖRPER

Alle bisherigen Ausführungen zur Trendberechnung bezogen sich immer auf einen beliebigen Parameter der Grundwasserbeschaffenheit an einer fiktiven oder einer realen Grundwassermessstelle.

Nach WRRL ist die Trendberechnung auch für den Grundwasserkörper (Anhang V, Abschnitt 2.4.4) vorgesehen. Dies setzt für einen Parameter der Grundwasserbeschaffenheit eine Aggregation der Messwerte von den Einzelmessstellen des Monitorings auf den Grundwasserkörper als hierarchisch höhere Ebene voraus. Als ein mögliches Verfahren bietet sich für einen Beschaffenheitsparameter die jahresweise Gruppierung der Einzelmesswerte an den Messstellen zu einem nutzungsbezogenen Jahresmittelwert an. Danach folgt die, ebenso gesondert für jedes Jahr, flächennutzungsgewichtete Berechnung des Mittelwertes. Aus der Vorgehensweise resultieren ebenfalls Zeitreihen mit Jahresmittelwerten sowohl für die einzelnen Nutzungen, als auch für den Grundwasserkörper. Diese Zeitreihen unterscheiden sich nicht von den Zeitreihen der Einzelmessstellen und erfüllen ebenso alle Voraussetzungen für eine Trendberechnung.

Für die Berechnung des Trends eines gesamten Grundwasserkörpers wird somit in Nordrhein-Westfalen die Zeitreihe der flächennutzungsgewichteten Jahresmittelwerte des Grundwasserkörpers (diese werden ohnehin auch bei der Beurteilung des chemischen Zustands herangezogen) genommen.

Die nachfolgenden Beispiele belegen die Vorgehensweise:

Grundsätzlich kann davon ausgegangen werden, dass bei einem einheitlichen Trendverhalten aller Messstellen des Monitorings nach EU-WRRL in einem Grundwasserkörper, dieser in seiner Gesamtheit auch das einheitliche Trendverhalten widerspiegeln muss. Diese möglichen Fälle bedürfen keiner weiteren Erläuterung. Es ist aber zu erwarten, dass in einem Grundwasserkörper eher eine mehr oder weniger ausgeglichene Mischung der drei verschiedenen Trendergebnisse vorherrscht, was im Folgenden an drei Beispielen erläutert wird.

Alle Beispiele orientieren sich an realen Daten aus NRW, die für diesen Demonstrationszweck teilweise verändert werden mussten. Die Zeitreihen basieren jeweils auf einem Jahreswert von 2000 bis 2005. Auf Datenlücken wurde verzichtet. Das „Probennahmedatum“ wurde vereinfacht auf einen einheitlichen Tag festgesetzt, damit hierfür bei der Datenaggregierung die Berechnung eines Mittelwertes entfallen konnte. Die Datenpräsentation erfolgt in tabellarischer Form, weil Zeitreihendarstellungen den Umfang sprengen würden.

Tabelle 1.1: Trend Grundwassermessstelle – Flächennutzung – Grundwasserkörper.

Besiedlung: 70.7 %	Landwirtschaft (Acker + Grünland): 29.3 %	Wald: entfällt
GWK: Beispiel 01, fiktiv	Parameter: pH-Wert an Einzelmessstellen, Datensatz natürlich/synthetisch	

GW-Messstellen	2000	2001	2002	2003	2004	2005	Trend	Messstellen-mittelwert
Besiedlung_01	6.40	6.47	6.49	6.60	6.60	6.54	▲	*6.52*
Besiedlung_02	4.41	4.37	4.49	4.40	4.48	4.56	▲	*4.45*
Besiedlung_03	6.74	6.78	6.90	6.70	6.80	6.86	▶	*6.80*
Besiedlung_04	6.68	6.74	6.90	6.80	6.83	6.79	▶	*6.79*
Besiedlung_05	6.70	6.61	6.52	6.60	6.61	6.54	▶	*6.60*
Besiedlung_06	6.51	6.44	6.44	6.60	6.49	6.42	▶	*6.48*
Besiedlung_07	6.87	6.92	6.77	6.80	6.85	6.91	▶	*6.85*
Besiedlung_08	6.67	6.64	6.69	6.80	6.74	6.77	▲	*6.72*
Besiedlung_09	6.44	6.40	6.59	6.50	6.61	6.78	▲	*6.55*
Besiedlung_10	5.89	5.87	5.93	5.88	5.99	6.05	▲	*5.95*
Acker_01	7.07	6.97	7.17	7.20	7.10	7.06	▶	*7.10*
Acker_02	7.08	7.11	7.14	7.10	7.14	7.11	▶	*7.11*
Acker_03	6.57	6.64	6.70	6.60	6.52	6.59	▶	*6.60*
Acker_04	7.39	7.35	7.36	7.25	7.50	7.45	▶	*7.38*
Acker_05	7.34	7.27	7.30	7.20	7.28	7.30	▶	*7.28*

Das Monitoring des in Tabelle 1.1 gezeigten Grundwasserkörpers basiert auf 15 Grundwassermessstellen, die mit der fortlaufenden Nummerierung ihres Nutzungseinflusses gekennzeichnet sind. Als Parameter der Grundwasserbeschaffenheit wurde der pH-Wert gewählt.

Von den fünf Messstellen mit einem hauptsächlichen Nutzungseinfluss durch Acker zeigen vier durchweg pH-Werte > 7. Alle fünf Ackermessstellen sind durch ein einheitliches Verhalten eines gleichbleibenden Trends gekennzeichnet.

Dagegen zeigen die Messstellen mit einem Nutzungseinfluss durch Besiedlung ein davon abweichendes Verhalten. Es liegen durchgehend pH-Werte < 7, teilweise deutlich im sauren Bereich, vor. Der Messstellenmittelwert von drei Einzelmessstellen unterschreitet den Grenzwert von pH = 6.5. Das Trendverhalten verteilt sich zu gleichen Anteilen mit jeweils fünf Messstellen auf ansteigende und gleichbleibende pH-Werte. Grundwassermessstellen mit einem signifikant abnehmendem Trendverhalten kommen in diesem Grundwasserkörper nicht vor.

Tabelle 1.2: Trend Grundwassermessstelle – Flächennutzung – Grundwasserkörper.

Besiedlung: 70.7 %		Landwirtschaft (Acker + Grünland): 29.3 %				Wald: entfällt		
GWK: Beispiel 01, fiktiv		Parameter: pH-Wert,		Mittelwerte der Flächennutzung (jahresweise)				
Flächen-nutzung	**2000**	**2001**	**2002**	**2003**	**2004**	**2005**	**Trend**	**Mittelwert, Nutzungs-bezogen**
Besiedlung (MST 01 bis 10)	6.33	6.32	6.37	6.37	6.40	6.42	▲	*6.37*
Landwirtschaft (Acker_01 bis 05)	7.09	7.07	7.13	7.07	7.11	7.10	▶	*7.09*
Wald (entfällt)	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----

Aus den Messwerten der Grundwassermessstellen können Mittelwerte hochaggregiert werden, die jeweils für jede Flächennutzung einzeln und jahresweise berechnet werden. Die Ergebnisse sind in Tabelle 1.2 dargestellt. Messstellen mit Nutzungseinfluss Wald sind keine vorhanden, weil in diesem Grundwasserkörper entweder keine Waldflächen vorkommen, oder der Anteil der Waldflächen vernachlässigt werden kann. Für die Flächennutzung Landwirtschaft, die durch die fünf Ackermessstellen repräsentiert wird, ergibt sich der Wert für das Jahr 2000 mit 7.09 = (7.07 + 7.08 + 6.57 + 7.39 + 7.34) ÷ 5. Die somit für die Jahre 2000 bis 2005 neu entstandene Zeitreihe der Flächennutzung Landwirtschaft zeigt ein gleichbleibendes Trendverhalten. Das konnte auch erwartet werden, da für alle fünf Einzelmessstellen ausschließlich dieser Trend festzustellen ist.

Bei der Flächennutzung durch Besiedlung ergibt sich dagegen eine signifikante Zunahme des pH-Wertes. Demnach dominieren die fünf Einzelmessstellen mit ansteigendem Trend die verbleibend fünf, deren Trendverhalten als gleichbleibend bewertet wurde. Der Messstellenmittelwert der Nutzung Besiedlung unterscheidet sich klar von dem der Nutzung Landwirtschaft und liegt mit 6.37 auch deutlich unter dem Grenzwert von 6.5.

Tabelle 1.3: Trend Grundwassermessstelle – Flächennutzung – Grundwasserkörper.

Besiedlung: 70.7 %		Landwirtschaft (Acker + Grünland): 29.3 %				Wald: entfällt		
GWK: Beispiel 01, fiktiv		Parameter: pH-Wert,		nutzungsgewichtete Mittelwerte (jahresweise)				
Grundwasser-körper	**2000**	**2001**	**2002**	**2003**	**2004**	**2005**	**Trend**	**Mittelwert, Nutzungs-gewichtet**
Nutzungsgewichtet	**6.55**	**6.54**	**6.60**	**6.57**	**6.61**	**6.62**	▲	***6.58***

Die in Tabelle 1.3 dokumentierte Zeitreihe ist der letzte Schritt des Zusammenfassens auf die Ebene des Grundwasserkörpers. Aus den zuvor berechneten Jahresmittelwerten der drei Flächennutzungen wird ein dieser Nutzungsfläche entsprechend gewichteter Mittelwert gebildet. Für diesen Grundwasserkörper resultiert daraus für das Jahr 2000 der Wert von 6.55 = (0.707 * 6.33) + (0.293 * 7.09) + (0). [Nutzungsgewichteter Jahresmittelwert des GWK = (FlächeBesiedlung * KonzentrationBesiedlung) + (FlächeLandwirtschaft * KonzentrationLandwirtschaft)]

Für die aus den nutzungsgewichteten Jahresmittelwerten berechnete neue Zeitreihe des Grundwasserkörpers ist ein signifikant zunehmender Trend für die Jahre 2000 bis 2005 festzustellen. Das Trendverhalten des Grundwasserkörpers wird durch die berechneten Jahreswerte der Nutzungsart „Besiedlung“ wegen des hohen Wichtungsfaktors von 0.707 wesentlich dominanter geprägt als durch die Jahreseinzelwerte der Nutzungsart „Landwirtschaft“.

Ein etwas inhomogeneres Bild ergibt sich im gleichen Grundwasserkörper für den Parameter Chlorid. Die „Messwerte“ und die sich daraus ergebenden Trends der Einzelmessstellen zeigt Tabelle 2.1. Die Konzentrationen sind an diesen Grundwassermessstellen zwar durchweg gering bis sehr gering, dennoch lassen sich aber die Grundprinzipien des Zusammenfassens der Trends von Einzelmessstellen über die Flächennutzungen hin zum Grundwasserkörper auch an diesem Beispiel aufzeigen.

Bei den Grundwassermessstellen mit Nutzungseinfluss Acker ist für Chlorid kein einheitliches Verhalten des Trends zu erkennen. Es liegt ein leichtes Übergewicht durch drei Messstellen mit signifikant abnehmendem Trend gegenüber den beiden Messstellen mit gleichbleibendem Trend vor.

Dagegen zeigen sich bei den zehn Grundwassermessstellen mit Nutzungseinfluss Besiedlung alle drei Zustände des Trendverhaltens im Verhältnis eine ansteigende, vier gleichbleibende und fünf abnehmende Trendmessstellen. Es ergibt sich also ähnlich wie bei dem Parameter pH-Wert bei der Besiedlung ein Übergewicht, diesmal aber zugunsten des abnehmenden Trends, bei einer Messstelle mit gegensätzlichem Trendverhalten.

Tabelle 2.1: Trend Grundwassermessstelle – Flächennutzung – Grundwasserkörper.

Besiedlung: 70.7 %	Landwirtschaft (Acker + Grünland): 29.3 %	Wald: entfällt
GWK: Beispiel 02, fiktiv	Parameter: Chlorid an Einzelmessstellen, Datensatz natürlich/synthetisch	

GW-Messstellen	2000	2001	2002	2003	2004	2005	Trend	Messstellen-mittelwert
Besiedlung_01	153.0	107.0	132.0	114.0	120.0	115.0	▶	*123.50*
Besiedlung_02	46.5	39.2	47.3	44.3	46.7	42.1	▶	*44.35*
Besiedlung_03	39.8	39.1	31.6	31.3	31.1	28.0	▼	*33.48*
Besiedlung_04	30.9	32.4	29.6	23.5	24.7	17.9	▼	*26.50*
Besiedlung_05	79.8	88.5	97.1	85.5	68.8	76.4	▶	*82.68*
Besiedlung_06	70.6	75.7	51.9	46.2	52.0	46.5	▼	*57.15*
Besiedlung_07	33.6	32.9	27.6	27.7	28.6	28.8	▼	*29.87*
Besiedlung_08	70.0	65.9	58.7	49.5	51.6	50.8	▼	*57.75*
Besiedlung_09	48.3	45.1	42.4	50.5	34.4	54.1	▶	*45.80*
Besiedlung_10	26.2	27.6	29.3	33.3	38.4	52.6	▲	*34.57*
Acker_01	34.6	31.5	32.3	37.6	38.8	26.4	▶	*33.53*
Acker_02	55.5	54.9	48.2	47.6	41.2	42.7	▼	*48.35*
Acker_03	44.3	37.9	42.0	39.8	35.4	30.4	▼	*38.30*
Acker_04	25.2	22.3	22.6	22.6	23.9	23.5	▶	*23.35*
Acker_05	36.7	37.6	32.2	33.3	31.3	31.4	▼	*33.75*

Tabelle 2.2: Trend Grundwassermessstelle – Flächennutzung – Grundwasserkörper.

Besiedlung: 70.7 %	Landwirtschaft (Acker + Grünland): 29.3 %	Wald: entfällt
GWK: Beispiel 02, fiktiv	Parameter: Chlorid, Mittelwerte der Flächennutzung (jahresweise)	

Flächen-nutzung	2000	2001	2002	2003	2004	2005	Trend	Mittelwert, Nutzungs-bezogen
Besiedlung (MST 01 bis 10)	59.87	55.34	54.75	50.58	49.63	51.22	▼	*53.57*
Landwirtschaft (Acker_01 bis 05)	39.26	36.84	35.46	36.18	34.12	30.88	▼	*35.46*
Wald (entfällt)	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----

Für die beiden Nutzungen Besiedlung und Landwirtschaft liegt jeweils ein signifikant abnehmender Trend vor. Der nutzungsbezogene Mittelwert fällt bei der Landwirtschaft im Vergleich zur Besiedlung deutlich geringer aus (siehe Tabelle 2.2).

Tabelle 2.3: Trend Grundwassermessstelle – Flächennutzung – Grundwasserkörper.

Besiedlung: 70.7 %		Landwirtschaft (Acker + Grünland): 29.3 %				Wald: entfällt		
GWK: Beispiel 02, fiktiv		Parameter: Chlorid, nutzungsgewichtete Mittelwerte (jahresweise)						
Grundwasser-körper	**2000**	**2001**	**2002**	**2003**	**2004**	**2005**	**Trend**	**Mittelwert, Nutzungs-gewichtet**
Nutzungsgewichtet	**53.83**	**49.92**	**49.10**	**46.36**	**45.09**	**45.26**	▼	***48.26***

Das einheitliche Trendverhalten der beiden Flächennutzungen zeigt sich als Konsequenz auch auf der höheren Hierarchiestufe des Grundwasserkörpers mit sehr eindeutig signifikant abnehmender Konzentration (siehe Tabelle 2.3). Die eine Grundwassermessstelle „Besiedlung_10“ mit der „Fehlorientierung“ (= konträres Trendverhalten), hat das Ergebnis bereits bei der nutzungsbezogenen Teilbewertung nicht prägend beeinflussen können. Bezogen auf den Grundwasserkörper ist der Einfluss dieser Messstelle dementsprechend zu vernachlässigen.

Abschließend sei das Zusammenwirken von Trends an einzelnen Grundwassermessstellen an einem anderen Grundwasserkörper anhand des Parameters Nitrat-Stickstoff aufgezeigt (siehe Tabelle 3.1).

Tabelle 3.1: Trend Grundwassermessstelle – Flächennutzung – Grundwasserkörper.

Besiedlung: 7 %		Landwirtschaft (Acker + Grünland): 74 %				Wald: 19 %		
GWK: Fiktiv_02		Parameter: Nitrat-Stickstoff an Einzelmessstellen, Datensatz natürlich/synthetisch						
GW-Messstellen	**2000**	**2001**	**2002**	**2003**	**2004**	**2005**	**Trend**	**Messstellen-mittelwert**
Besiedlung_01	21.2	17.4	13.0	15.7	12.2	14.5	▼	*15.7*
Acker_01	30.0	31.2	31.1	28.8	28.2	28.1	▼	*29.6*
Acker_02	18.2	19.1	20.1	19.4	19.1	19.3	▶	*19.2*
Acker_03	22.6	21.4	20.1	20.6	18.7	19.5	▼	*20.5*
Acker_04	24.0	24.3	25.5	23.0	24.7	24.2	▶	*24.3*
Acker_05	34.5	35.4	40.7	36.6	38.8	41.5	▲	*37.9*
Grünland_01	18.5	17.5	20.0	18.0	18.9	18.6	▶	*18.6*
Grünland_02	1.8	1.6	2.1	2.4	1.7	2.5	▶	*2.0*
Wald_01	13.8	14.2	14.1	14.0	15.3	14.7	▲	*14.4*
Wald_02	10.4	7.0	6.9	5.5	5.7	5.3	▼	*6.8*

Der Grundwasserkörper wird durch Grundwassermessstellen zu allen vier in NRW ausgewiesenen Nutzungseinflüssen repräsentiert. Die Nutzung Landwirtschaft wird durch ackerbeeinflusste und durch grünlandbeeinflusste Messstellen zusammengefasst. Deren Anteil von sieben der insgesamt zehn Messstellen entspricht dem Anteil 74% der Flächennutzung in diesem Grundwasserkörper. Die drei verbleibenden Messstellen verteilen sich auf 1 mal Besiedlung und 2 mal Wald. Das Trendverhalten mit dem Verhältnis 2 / 4 / 4 (ansteigend / gleichbleibend / abnehmend) kann als eher recht ausgeglichen beschrieben werden.

Die eine Messstelle unter Siedlungseinfluss zeigt einen abnehmenden Trend. Durch den geringen Anteil der Besiedlung in diesem Grundwasserkörper wird diese Messstelle nur eine untergeordnete Rolle spielen. Die beiden waldbeeinflussten Grundwassermessstellen zeigen mit einem ansteigenden und einem abnehmenden Trend beide Extreme auf. In der Landwirtschaft herrscht bei den sieben Messstellen eine ausgegliche-ne Mischung der möglichen Trendverhalten vor.

Die Messstellen-Mittelwerte zeigen an, dass es sich hier um einen Grundwasserkörper handelt, der die Qualitätsnorm von 11.3 mg/L Nitrat-Stickstoff (entspricht dem Grenzwert von 50 mg/L Nitrat) an nahezu jeder Einzelmessstelle übertrifft.

Tabelle 3.2: Trend Grundwassermessstelle – Flächennutzung – Grundwasserkörper.

Besiedlung: 7 %		**Landwirtschaft (Acker + Grünland): 74 %**					**Wald: 19 %**	
GWK: Fiktiv_02	**Parameter: Nitrat-Stickstoff,**	**Mittelwerte der Flächennutzung (jahresweise)**						
Flächen-nutzung	**2000**	**2001**	**2002**	**2003**	**2004**	**2005**	**Trend**	**Mittelwert, Nutzungs-bezogen**
Besiedlung_01	21.20	17.40	13.00	15.70	12.20	14.50	▼	*15.70*
Landwirtschaft (Acker + Grünland)	21.38	21.51	(22.80)	21.26	21.44	21.95	▶	*21.72*
Wald (Wald_01 bis 02)	12.10	10.59	10.54	9.76	10.52	10.00	▼	*10.59*

Die Flächennutzung der Besiedlung ist die Wiederholung aus Tabelle 3.1, da nur eine Grundwassermessstelle diese Nutzung repräsentiert.

Die Zusammenfassung von den zwei Einzelmessstellen Wald auf die Flächennutzung Wald zeigt, dass die Grundwassermessstelle mit dem abnehmenden Trend ihr Pendant mit dem ansteigenden Trend deutlich dominiert, weil für die Flächennutzung Wald ein abnehmender Trend festzustellen ist (siehe Tabelle 3.2). Ein Ausnivellieren durch die beiden Extremverhalten erfolgt demnach nicht zwangläufig.

Dagegen ergibt die Zusammenfassung der sieben landwirtschaftsbeeinflussten Messstellen ein gleichbleibendes Trendverhalten. Dabei ist der Wert aus dem Jahr 2002 hinsichtlich der Trendberechnung als Ausreißer anzusehen. Anzumerken ist auch, dass dabei die Konzentration dieser Zeitreihe zu den jüngeren Jahren eher zunehmen, obwohl zwei der sieben Einzelmessstellen einen signifikant abnehmenden Trend gegenüber einem signifikant ansteigenden Trend aufweisen. Die Messstelle Acker_05 prägt mit ihrem deutlichen Steigungsmaß die Flächennutzung Landwirtschaft mehr, als die Messstellen Acker_01 und Acker_03. Unterstützung kommt dabei noch von den vier Einzelmessstellen mit gleichbleibenden Trend, von denen zwei ein Steigungsmaß nahe Null aufweisen, eine Messstelle sich mit leicht ansteigenden Werten auf vernachlässigbar geringem Konzentrationsniveau bewegt (Grünland_02), aber die Messstelle Acker_02 so gerade eben nicht als signifikant ansteigender Trend gewertet wurde.

Tabelle 3.3: Trend Grundwassermessstelle – Flächennutzung – Grundwasserkörper.

Besiedlung: 7 %			Landwirtschaft (Acker + Grünland): 74 %				Wald: 19 %	
GWK: Fiktiv_02	Parameter: Nitrat-Stickstoff, nutzungsgewichtete Mittelwerte (jahresweise)							
Grundwasser-körper	**2000**	**2001**	**2002**	**2003**	**2004**	**2005**	**Trend**	**Mittelwert, Nutzungs-gewichtet**
Nutzungsgewichtet	**19.60**	**19.15**	**19.79**	**18.69**	**18.72**	**19.16**	▶	***19.19***

Das Gesamtbild für diesen Grundwasserkörper ergibt ein gleichbleibendes Trendverhalten bei einem deutlich über der Qualitätsnorm (Nitrat-Stickstoff: 11.3 mg/L) vorliegenden Konzentrationsniveau von 19.19 mg/L. Das Trendverhalten des Grundwasserkörpers verfehlt knapp das Kriterium eines signifikant abnehmenden Trends. Die Gewichtung der Flächennutzung Landwirtschaft mit ihrem gleichbleibenden Trend (siehe auch vorheriger Absatz) wiegt dabei stärker als die Trendverhalten der Besiedlung und des Waldes, die zwar signifikant abnehmende Trends aufweisen, dagegen aber nur mit insgesamt 26% in die Berechnung für den Grundwasserkörper mit einbezogen werden.

13 ERFORDERNIS VON MAßNAHMEN (TRENDUMKEHR)

Gemäß Art. 5, Abs. 3 der Grundwasserrichtlinie (2006/118/EG, Tochterrichtlinie Grundwasser) ist bei Trends, die eine signifikante Gefahr für die Qualität der aquatischen oder terrestrischen Ökosysteme, für die menschliche Gesundheit oder für legitime Nutzungen der Gewässer darstellen, eine Trendumkehr durch Maßnahmen zu bewirken.

Die Ermittlung der nicht nur statistischen, sondern auch ökologisch bedeutsamen Zunahme der Konzentrationen eines Schadstoffs (Art. 2, Abs. 3 Grundwasserrichtlinie) erfolgt gemäß Abstimmung im LAWA-Ausschuss Grundwasser in Anlehnung an die Vorgehensweise zur Bewertung des chemischen Zustands. Das bedeutet, dass die Bewertung für jede Flächennutzung in einem Grundwasserkörper separat erfolgt. Ein signifikant ansteigender Trend ist erst dann maßnahmenrelevant, wenn die mittlere Schadstoffkonzentration einer Grundwassermessstelle über 75 % der geltenden Qualitätsnorm liegt <u>und</u> wenn die von dieser oder mehreren Messstellen repräsentierte Fläche größer als 33 % der Nutzungsfläche und größer als 25 km² ist (analog zur Signifikanzprüfung im Leitfaden Monitoring Grundwasser, Kap. 5.2.3.1).

14 ZUSAMMENFASSUNG

- Eine Trendaussage für Daten der Grundwasserbeschaffenheit im Rahmen der WRRL lässt sich hinreichend gut mit Hilfe der linearen Regression treffen.
- Der Bearbeitungsvorgang basiert auf der Anwendung grundlegender Funktionen der klassischen beschreibenden und vergleichenden Statistik. Nach erstmaliger Festlegung der Entscheidungssicherheit ist der Bearbeitungsvorgang unabhängig von der subjektiven Beurteilung einer sachbearbeitenden Person.
- Zu beachten ist, dass Trendaussagen immer instabil sind. Sie beziehen sich nur auf den ausgewählten Zeitabschnitt und für den vorliegenden Datensatz. Das Hinzufügen oder Weglassen eines oder mehrerer Messwerte kann zu einem an-

deren Trendverhalten führen. Ebenso gilt dies für das Verlängern und das Verkürzen des Betrachtungszeitraumes.

- Der Rechenvorgang ist vollständig automatisierbar.
- Der Rechenvorgang kann sowohl für jede einzelne Grundwassermessstelle, als auch für die Zeitreihen der jahresweise nutzungsgewichteten Beschaffenheitsdaten für einen Grundwasserkörper angewendet werden. Das Verfahren ist ebenso anwendbar für die Bewertung einer Trendumkehr an ausreichend langen Zeitreihen.

15 ALTERNATIVE VERFAHREN:

Als Alternative zum beschriebenen Verfahren wird verwiesen auf:

J. Grath, A. Scheidleder, S. Uhlig, K. Weber, M. Kralik, T. Keimel, D. Gruber (2001): The EU Water Framework Directive: Statistical aspects of the identification of groundwater pollution trends, and aggregation of monitoring results“. Final Report. Austrian Federal Ministry of Agriculture and Forestry, Environment and Water Management (Ref.: 41046/01-IV1/00 and GZ 16 2500/2-I/6/00), European Commission (Grant Agreement Ref.: Subv 99/130794), in kind contribution by project partners. Vienna.

In dem zitierten Final Report wird das lineare Regressionsmodell ebenfalls als die Methode der Wahl bevorzugt. Für die Berechnung des Trends (Kapitel 5.4.4 „Trend assessment“, S. 40 ff.) wird mindestens ein Zeitfenster von acht Jahren gefordert. Da der Beginn eines operativen Monitorings im Jahr 2007 angenommen wurde und im Jahr 2015 eine erste Bilanz des Bewirtschaftungsplanes vorgelegt werden muss, wurde davon ausgegangen, dass sich die Auswertung auf eine Datengrundlage von 2007 bis 2014 stützen wird. Bei einer jährlichen Beprobung resultiert daraus die Mindestanforderung von acht Messungen für die Trendanalyse. Das Vorhandensein von Ausreißern ist im Final Report nicht vorgesehen.

Grundsätzlich wird auch im Final Report davon ausgegangen, dass für eine Trendumkehr die Zeitreihe durch zwei lineare Trends mit einem Wechsel des Steigungsmaßes innerhalb des Gesamtzeitrahmens dargestellt werden kann. Für die Berechnung einer Trendumkehr erfolgt die Einschätzung einer Mindestlänge des Zeitfensters auf ähnliche Weise (Kap. 5.4.5 „Trend Reversal Assessment“, S. 42 ff.). Mit dem Beginn eines operativen Monitorings im Jahr 2007 und einer zweiten Bilanz des Bewirtschaftungsplans im Jahr 2021 wird davon ausgegangen, dass sich die Auswertung auf eine Datengrundlage von 2007 bis 2020 stützen wird. Bei einer jährlichen Beprobung stehen demnach mindestens 14 Messungen für einen Nachweis auf eine vorliegende Trendumkehr zur Verfügung.

Die Vorgehensweise zur Berechnung von Trend und Trendumkehr ist in Kapitel 6 „Algorithm and Computation“ (S. 49 ff.) ausführlich dargelegt.

Anlage 1: **r – Tabelle**
(Ausreißertest nach NALIMOV, Zahlen von G. GOTTSCHALK)
aus: KAISER & GOTTSCHALK (1972), Seite 49
Die grau unterlegte Spalte enthält die für die beschriebene Vorgehensweise Vergleichswerte.

Statistische Sicherheit P in %:

f	(95 %)	(99 %)	(99.9 %)
1	1,409	**1,414**	1,414
2	1,645	**1,715**	1,730
3	1,757	**1,918**	1,982
4	1,814	**2,051**	2,178
5	1,848	**2,142**	2,329
6	1,870	**2,208**	2,447
7	1,885	**2,256**	2,540
8	1,895	**2,294**	2,616
9	1,903	**2,324**	2,678
10	1,910	**2,348**	2,730
11	1,916	**2,368**	2,774
12	1,920	**2,385**	2,812
13	1,923	**2,399**	2,845
14	1,926	**2,412**	2,874
15	1,928	**2,423**	2,899
16	1,931	**2,432**	2,921
17	1,933	**2,440**	2,941
18	1,935	**2,447**	2,959
19	1,936	**2,454**	2,975
20	1,937	**2,460**	2,990
25	1,942	**2,483**	3,047
30	1,945	**2,498**	3,085
35	1,948	**2,509**	3,113
40	1,949	**2,518**	3,134
45	1,950	**2,524**	3,152
50	1,951	**2,529**	3,166
100	1,956	**2,553**	3,227
200	1,958	**2,564**	3,265
300	1,958	**2,566**	3,271
400	1,959	**2,568**	3,275
500	1,959	**2,570**	3,279
600	1,959	**2,571**	3,281
700	1,959	**2,572**	3,283
800	1,959	**2,573**	3,285
∞	1,960	**2,576**	3,291

Anlage 2: **Students t-Verteilung**
aus: KREYSZIG (1991), Seite 435
Die grau unterlegte Spalte enthält die für die beschriebene Vorgehensweise zu Grunde gelegten Vergleichswerte.

	F (z)		
Anzahl der Freiheitsgrade	**0.90**	**0.95**	**0.975**
1	3,08	**6,31**	12,70
2	1,89	**2,92**	4,30
3	1,64	**2,35**	3,18
4	1,53	**2,13**	2,78
5	1,48	**2,02**	2,57
6	1,44	**1,94**	2,45
7	1,42	**1,90**	2,37
8	1,40	**1,86**	2,31
9	1,38	**1,83**	2,26
10	1,37	**1,81**	2,23
11	1,36	**1,80**	2,20
12	1,36	**1,78**	2,18
13	1,35	**1,77**	2,16
14	1,35	**1,76**	2,15
15	1,34	**1,75**	2,13
16	1,34	**1,75**	2,12
17	1,33	**1,74**	2,11
18	1,33	**1,73**	2,10
19	1,33	**1,73**	2,09
20	1,33	**1,73**	2,09
22	1,32	**1,72**	2,07
24	1,32	**1,71**	2,06
26	1,32	**1,71**	2,06
28	1,31	**1,70**	2,05
30	1,31	**1,70**	2,04
40	1,30	**1,68**	2,02
50	1,30	**1,68**	2,01
100	1,29	**1,66**	1,98
200	1,29	**1,65**	**1,97**
∞	1,28	**1,65**	1,96

Teil 4 - Anlage 2

TRENDBERECHNUNG UND TRENDUMKEHR

Länderbeispiel Sachsen

Trends, deren Beschreibung und Berechnung
sowie eine mögliche Vorgehensweise zur Festlegung einer Trendumkehr
im Rahmen des Grundwassermonitorings
für die Europäische Wasserrahmenrichtlinie (WRRL)

PARAMETERUNABHÄNGIGE TESTS ZUR BEWERTUNG VON KONZENTRATIONSTRENDS

Zwei Parameterunabhängige statistische Tests dienen der Trendanalyse einzelner Messstellen. Dies sind zum einen der Mann-Kendall-Test (MANN 1945; KENDALL 1975; DIETZ, KILEEN 1981) der mit einer Saisonkomponente bei jahreszeitlichen Grundwasserflurabstandsschwankungen versehen werden kann (HIRSCH, SLACK 1984; http://www.mai.liu.se/~cllib/welcome/PMKtest.html) und der Saison-Komponentenfreie Mann-Whitney-Test oder Wilcoxon-Rangsummentest (http://faculty.vassar.edu/lowry/utest.html). Diese Tests können benutzt werden, um zu zeigen, ob Schadstoffkonzentrationen in einer Messstelle einen Trend hinsichtlich des Verlaufs von Schadstoffkonzentrationen in einem Vertrauensintervall aufweisen. Der Mann-Kendall-Test muss mindestens mit 4 und maximal 10 aufeinander folgenden Messwerten durchgeführt werden. Um zu zeigen, dass z. B. ein abnehmender Trend vorliegt muss, müssen die abnehmenden Schadstoffkonzentrationen in einem bestimmten Vertrauensbereich liegen.

Anwendung des Mann-Kendall-Tests (modifiziert nach WDNR 2003)

a) Mindestens vier Monitoring-Einzelereignisse werden pro Messstelle nacheinander nach der Reihenfolge des Messereignisses sortiert. Folgende Messstellen sollte dabei in die Betrachtung einbezogen werden:
   - eine Messstelle in der Nähe der Quelle
   - mehrere Messstellen abstromig in der Schadstofffahne, im günstigsten Fall zusätzlich eine Messstelle am Ende der Fahne die gerade noch messbare Schadstoffkonzentrationen aufweist. Damit kann zudem das Expandieren/Schrumpfen einer Schadstofffahne überwacht werden.

b) Messereignisse, deren Messwerte keine oder keine bestimmbare Konzentrationen aufweisen, wird jeweils ein Wert unterhalb der Bestimmungsgrenze zugeordnet, auch dann, wenn die Bestimmungsgrenze sich veränderte.

c) Für stark Saisonbeeinflusste Messwerte kann
   - eine Saisonbereinigung durch Nichtverwenden dieser Werte erfolgen. Die übrigen zu verwendenden Werte sollten aus Messereignissen stammen, die nicht in hydrologisch extremen Situationen durchgeführt wurden. Dafür ist es vorteilhaft, anhand einer überjährigen Grundwasserstandsganglinie, die z. B. in einer vor Ort vorhandenen Messstelle mit Hilfe eines Datenloggers gewonnen wird, einen Vertrauensbereich der historisch vorhandenen Messwerte für zukünftige Messkampagnen auszuwählen. Ebenso sollten die historischen Grundwasserfließrichtungen anhand der verfügbaren Hydroisohypsenpläne überprüft werden. Lässt die Grundwasserfließrichtung auf Abweichungen > 20 % der generellen Schadstofffließrichtung von der vorhandenen Fließweg-Orientierten Messstellenanordnung schließen, sollten die Messereignisse aus der Betrachtung ausgeschlossen werden.
   - der Saison-Komponentenfreie, allerdings weniger aussagekräftige Mann-Whitney-Test verwendet werden.

d) Für die ausgewählten Messstellen werden alle Messwerte in der Reihenfolge der Probennahme sortiert. Die Messwerte werden sequenziell nach folgendem Schema miteinander verglichen. Dabei wird nach folgendem Vergleichsmaßstab verfahren:

- $T_i > T_{i+1}$: +1
- $T_i = T_{i+1}$: 0
- $T_i < T_{i+1}$: -1

  mit n – Gesamtzahl verwendeter Probennahmezeitpunkte

  und T_i - Konzentration zum Zeitpunkt i mit i = 1…n

Tabelle 3: Vergleichsschema zur Berechnung des Mann-Kendall-Wertes S (Beispiel, WDNR 2003).

Probennahmezeitpunkt	**T_1**	**T_2**	**T_3**	**T_4**	**T_5**	
Konzentration	100	50	85	75	50	**Summe**
Vergleich mit T_1		-1	-1	-1	-1	**-4**
Vergleich mit T_2			+1	+1	0	**+2**
Vergleich mit T_3				-1	-1	**-2**
Vergleich mit T_4					-1	**-1**
Mann-Kendall-Wert (S)						**-5**

e) Trendermittlung: Zunächst ist die **Nullhypothese (kein Trend)** gegenüber der Hypothese eines ansteigenden Trends zu prüfen. Die Nullhypothese kann gegenüber einem ansteigenden Trend ausgeschlossen werden, wenn eine der beiden folgenden Bedingungen zutrifft:

- S ist ein großer negativer Wert (vgl.)
- Der Wahrscheinlichkeitswert (Gilbert, 1987), n und S, sind kleiner als α. α drückt dabei die Wahrscheinlichkeit von $S \leq S_{max}$ aus (Konfidenzintervall). (Tabelle 4)

In Tabelle 4 sind die maximalen Mann-Kendall-Werte (S_{max}) dargestellt, die einen abnehmenden Trend im Konfidenzintervall α akzeptieren lassen. Ist S größer als S_{max}, oder ist der Wert eine größere absolute Zahl, kann entweder kein oder ein **ansteigender Trend** vorliegen. Dann gilt

- S ist positiv
- $S \geq S_{max}$; das Konfidenzintervall α = o,2 ist i. d. R. ausreichend für diesen Test.

Für einen **abnehmenden Trend** muss also folgende Bedingung erfüllt sein:

- $S < S_{max}$

Tabelle 4: Mann-Kendall-Statistik mit Signifikanzschranken für α = 0,10 bzw. 0,20 in Abhängigkeit der Anzahl der Datensätze (Probennahmezeitpunkte) (nach WDNR 2003).

n Proben-nahmezeit-punkte	S-Bereich	S_{max} (α = 0,10)	S_{max} (α = 0,20)
4	- 6 bis + 6	- 6	- 4
5	- 10 bis + 10	- 7	- 5
6	- 15 bis + 15	- 8	- 6
7	- 21 bis + 21	- 10	- 7
8	- 28 bis + 28	- 11	- 8
9	- 36 bis + 36	- 14	- 10
10	- 45 bis +45	- 16	- 11

REFERENZEN

DIETZ, KILEEN: "A Nonparametric Multivariate Test for Monotone Trend with Pharmaceutical Applications." Journal of the American Statistical Association 76 (1981): 169-174.

GILBERT, R.O: “Statistical Methods for Environmental Pollution Monitoring”, Van Nostrand, Reinhold, 1987

HIRSCH, SLACK: "A nonparametric trend test for seasonal data with serial dependence." Water Resources Research 20 (1984): 727-732.

KENDALL: "Rank Correlation Methods." London: Charles Griffin, 1975.

MANN: "Nonparametric Tests against Trend." Econometrica 13 (1945): 245-259.

WDNR: "Guidance on Natural Attenuation for Petroleum Releases (Pub-RR-614)." Wisconsin Department of Natural Resources, Bureau for Remediation and Redevelopment, 2003.