

EBERHARD-KARLS-UNIVERSITÄT TÜBINGEN

Geologisches Institut

Lehrstuhl für Angewandte Geologie

Statistische Absicherung der Probenahme bei der Gefahrenherderkundung

**Abschlußbericht
LAG 98-01/0460**

Projekt: LfU-Werkvertrag Nr. 126760/54

Projektleiter: Dr. R. Liedl
Prof. Dr. G. Teutsch

Datum: 30. 06. 1998

Inhalt

	Seite
Tabellenverzeichnis	4
Abbildungsverzeichnis	5
Vorwort	6
1 Aufgabenstellung und Vorgehensweise	7
2 Einführung in die Thematik	9
2.1 Erkundungsziele im Altlastbereich	9
2.2 Statistische Grundlagen und Begriffe	9
2.3 Geostatistische Grundlagen und Begriffe	10
2.4 Fallbeispiel	13
3 Möglichkeiten statistischer Methoden - Grenzen der Geostatistik	15
4 Einflußgrößen der statistischen Aussagesicherheit	18
5 Berechnung der Erkennungswahrscheinlichkeit in Abhängigkeit von der Probenanzahl	23
5.1 Einführung	23
5.2 Geometrischer Ansatz	24
5.3 Wahrscheinlichkeitstheoretischer Ansatz	30
5.4 Vergleich von geometrischem und wahrscheinlichkeitstheoretischem Ansatz.....	33
6 Schätzen von Mittelwert und Streuung der Grundgesamtheit	40
6.1 Voraussetzungen	40
6.2 Berechnung	41
6.2.1 Mittlere Belastung der Grundgesamtheit	41
6.2.2 Anteil der kontaminierten Fläche in der Grundgesamtheit	47
7 Umsetzung in kostenoptimierte Erkundungsstrategien	50
7.1 Statistisch optimierte Probenahmeverfahren.....	50
7.1.1 Effiziente Rasterformen	50
7.1.2 Einfluß der Stützung auf die Erkennungswahrscheinlichkeit	51
7.2 Group Testing	53
7.2.1 Grundlagen	53

7.2.2	Vorgehensweise.....	54
7.3	Sensitivität der Erkundungskosten in Abhängigkeit von der Aussage- sicherheit	57
7.3.1	Erkundungsziel „Erkennen der Kontamination“	57
7.3.2	Erkundungsziel „Ermittlung von Mittelwert und Streuung der Grundgesamtheit“	59
8	Anwendung auf drei Teilflächen am Standort Sinsheim.....	61
8.1	Einführung	61
8.2	Erkennungswahrscheinlichkeit	61
8.3	Mittelwert und Streuung der Grundgesamtheit.....	63
8.4	Anmerkungen zum Einsatz geostatistischer Verfahren am Standort Sinsheim	67
9	Praktische Umsetzung der statistischen Auswerteverfahren	68
9.1	Definition der statistisch zu behandelnden Erkundungsziele.....	68
9.2	Vorgehensweise zum Einsatz der Statistik	68
9.3	Dezimaldarstellung der verwendeten Konstanten.....	71
10	Literatur	72
Glossar	76
 Anlagen		
Anlage 1:	Lageplan Fallbeispiel	
Anlage 2:	Lageplan Modellvorhaben Sinsheim	
Anlage 3:	Datensätze Modellvorhaben Sinsheim	
Anlage 4:	Berechnung von Erkennungswahrscheinlichkeiten	

Tabellenverzeichnis

	Seite
Tab. 1: Daten des Fallbeispiels.....	14
Tab. 2: Zusammenstellung statistischer Verfahren	15
Tab. 3: Bestimmungsfaktoren für die Aussagesicherheit der Erkundung von Schadensherden.....	22
Tab. 4: Erkennungswahrscheinlichkeit bei einer oder zwei Kontaminationen	32
Tab. 5: Berechnung des Vertrauensbereiches für den Mittelwert \bar{x} am Fallbeispiel	42
Tab. 6: Stichprobenumfang als Funktion des tolerierbaren Absolutfehlers	43
Tab. 7: Transformation linksschiefer Verteilungen (x) auf Normalverteilung (x')	45
Tab. 8: Berechnung des Vertrauensbereichs für den Mittelwert \bar{x} am Fallbeispiel unter der Annahme lognormalverteilter Meßwerte	46
Tab. 9: Stichprobenumfang und Konfidenzintervall bei Anteilsschätzung.....	49
Tab. 10: Erkennungswahrscheinlichkeiten in Abhängigkeit der Stützung.....	52
Tab. 11: Erkennen der Kontaminationen, Modellvorhaben Sinsheim	62
Tab. 12: Zentralwerte und Streuung, Modellvorhaben Sinsheim.....	64

Abbildungsverzeichnis

	Seite
Abb. 1: Anwendbarkeit geostatistischer Methoden	17
Abb. 2: Einfluß der Größe von „Hot-spots“ auf die Erfassung der Kontamination an einem Altstandort.....	19
Abb. 3: Einfluß der Probenanzahl auf die Erfassung einer Kontamination	19
Abb. 4: Einfluß des Mittelungsvolumens auf die Erfassung einer Kontamination.....	21
Abb. 5: Unsicherheit bzgl. Lage und Größe einer Verdachtsfläche.....	23
Abb. 6: Anordnung von Probenahmestellen im Quadrat- bzw. Dreieckraster.....	25
Abb. 7: Geometrische Veranschaulichung zur Bestimmung der Erkennungswahrscheinlichkeit für Quadratraster	26
Abb. 8: Erkennungswahrscheinlichkeit für ein quadratisches Raster	27
Abb. 9: Geometrische Veranschaulichung zur Bestimmung der Erkennungswahrscheinlichkeit für Dreieckraster	28
Abb. 10: Erkennungswahrscheinlichkeit für ein Dreieckraster	29
Abb. 11: Einfluß der Probenahmereichweite (Mittelungsvolumen)	34
Abb. 12: Erkennen eines „Hot-spots“ bei zufälliger Anordnung der Probenahmepunkte.....	35
Abb. 13: Quadratraster vs. zufällige Anordnung der Probenahmepunkte (1 „Hot-spot“)	36
Abb. 14: Quadratraster vs. zufällige Anordnung der Probenahmepunkte (2 gleich große „Hot-spots“)	37
Abb. 15: Vergleich der Erkennungswahrscheinlichkeit für Quadrat- und Dreieckraster sowie einen und zwei „Hot-spots“	38
Abb. 16: Kostensensitivität für das Erkennen von „Hot-spots“.....	58
Abb. 17: Kostensensitivität für die Reduzierung des Standardfehlers des arithmetischen Mittels.....	60
Abb. 18: Ablaufdiagramm zum Einsatz der Statistik	70

Vorwort

Dieses Projekt entstand im Auftrag der Landesanstalt für Umweltschutz (LfU) Baden-Württemberg am Lehrstuhl für Angewandte Geologie (LAG) der Universität Tübingen mit dem Ziel, einen Beitrag zum besseren Verständnis der Aussagesicherheit in der Schadensherderkennung zu liefern.

Ähnliche Fragestellungen sind im Rahmen früherer Studien meist projekt- bzw. standortspezifisch behandelt worden (vgl. die umfassende Literaturliste). Demgegenüber wurde in diesem Projekt besonderer Wert auf die Erarbeitung eines flexiblen und allgemeingültigen Konzepts gelegt, das die zahlreichen Einflußvariablen auf die Aussagesicherheit (Größe des Schadensherds, Anzahl der „Hot-spots“, Mittelungsvolumen der Probenahme, Anzahl und Anordnung der Probenahmestellen, Größe des Untersuchungsgebiets) simultan berücksichtigt. Darauf aufbauend kann für jeden Einzelfall eine spezielle Bearbeitungsvorschrift entwickelt werden.

In diesem Zusammenhang ist die Zusammenarbeit mit Herrn Dipl.-Wirtsch.-Ing. Dipl.-Geol.-Ing. (FH) Andreas Weiske entstanden, der aufgrund seiner Vorerfahrung wertvolle Unterstützung bei der Erstellung des vorliegenden Berichts geleistet und das neu entwickelte Berechnungsverfahren in der Anwendung überprüft hat (z. B. Modellvorhaben Sinsheim). Ebenfalls kamen von ihm wertvolle Hinweise auf themenbezogene Veröffentlichungen.

1 Aufgabenstellung und Vorgehensweise

Der Lehrstuhl für Angewandte Geologie der Eberhard-Karls-Universität Tübingen wurde mit Abschluß des Werkvertrags Nr. 126760/54 vom 23. 06. 1997 von der Landesanstalt für Umweltschutz Baden-Württemberg beauftragt, eine Studie zur statistischen Absicherung der Probenahme bei der Schadensherderkundung zu erstellen.

Damit soll im Rahmen des geplanten Leitfadens „Erkundungsstrategie Gefahrenherd“ eine Quantifizierung der erforderlichen Probenanzahl zur Erzielung noch festzulegender Aussagesicherheiten und letztlich eine Optimierung des Erkundungsaufwands erreicht werden.

Die vorgelegte Studie beruht auf einem skalenorientierten Konzept, das sich auf klassische Ansätze aus der Wahrscheinlichkeitsrechnung und der Mathematischen Statistik stützt. Diese werden mit geometrischen Überlegungen verknüpft, die es erlauben, die Anordnung der Probenahmestellen, die Größe von Schadensherden und insbesondere die Probenahmereichweite (Mittelungsvolumen) bei der Datenauswertung zu berücksichtigen.

Die Studie beginnt mit einer kurzen Zusammenfassung der statistischen und geostatistischen Grundlagen und Begriffe, die zur Bearbeitung der Aufgabenstellung benötigt werden (Kapitel 2). Damit verbunden ist die Einführung eines einfachen, aber typischen Fallbeispiels, um die grundlegenden Probleme der statistischen Absicherung bei der Erkundung kontaminationsverdächtiger Flächen zu veranschaulichen. Daran anknüpfend werden in Kapitel 3 Möglichkeiten und Grenzen statistischer und geostatistischer Methoden vorgestellt, während sich Kapitel 4 mit den diversen Einflüssen befaßt, denen die statistische Aussagesicherheit bzw. -unsicherheit unterworfen ist.

In den Kapiteln 5 und 6 werden die quantitativen Ansätze aus der Wahrscheinlichkeitsrechnung und der Mathematischen Statistik erarbeitet, die bei der Auswertung der Probenahmedaten zum Einsatz kommen. Hierbei handelt es sich zum einen um die Berechnung von Erkennungswahrscheinlichkeiten von Schadensherden, zum anderen um die Schätzung von Zentralwert und Streuung der Grundgesamtheit. Insbesondere läßt sich mit den entwickelten Berechnungsverfahren die Zunahme der Erkennungswahrscheinlichkeit von „Hot-spots“ quantifizieren, die auf die erhöhte Probenahmereichweite bei Bodenluftproben zurückzuführen ist.

Die erarbeiteten statistischen Methoden werden in Kapitel 7 mit Kosten-Nutzen-Betrachtungen kombiniert, um daraus optimierte Erkundungsstrategien abzuleiten. Dabei wird u. a. auf die Eignung von Mischprobenkonzepten („group testing“) eingegangen.

Kapitel 8 beinhaltet die Anwendung der erarbeiteten Methoden auf drei Teilflächen des Modellvorhabens Sinsheim für die Schadstoffe Chrom, Pentachlorphenol und polyzyklische aromatische Kohlenwasserstoffe unter Berücksichtigung unterschiedlicher Probenahmestrategien. Abschließend werden die besprochenen Methoden in Kapitel 9 in Form von praktisch umsetzbaren Verfahrensanweisungen (inkl. Ablaufplan) dargestellt. Überdies liegen die Berechnungsvorschriften für die „Hot-spot“-Erkennungswahrscheinlichkeiten, die nicht zum Repertoire kommerziell erhältlicher Statistik-Software gehören, auf Diskette bei (Anlage 4).

2 Einführung in die Thematik

2.1 Erkundungsziele im Altlastbereich

Im Rahmen der technischen Erkundung von Umweltrisiken werden zur Verifizierung von Eintragungshypothesen Boden-, Bodenluft-, und Grundwasserproben entnommen und auf nutzungsspezifische Schadstoffe entsprechend den Ergebnissen der Vorerkundung analysiert. Durch Auswertung und Interpretation dieser Ergebnisse soll zum einen der durch die Historische Erhebung bestehende Kontaminationsverdacht bestätigt oder abgelehnt, zum anderen soll aus den Probeergebnissen die Schadstoffhöhe und -verteilung der gesamten Fläche abgeleitet werden.

Das Ziel der Erkundung von Umweltrisiken läßt sich also in Anlehnung zum allgemeinen Prozeß des Risikomanagements in zwei wesentliche Teilziele untergliedern, die sowohl bezüglich der Aussage als auch der Methodik streng zu unterscheiden sind:

- **Erkennen** einer möglicherweise vorhandenen Kontamination (Wahrscheinlichkeit des Risikos).
- **Schließen** von den Ergebnissen der Proben **auf Zentralwerte und Streuung der Grundgesamtheit** (Analyse und Bewertung der Höhe des Risikos).

Beide Teilziele sind stochastischer Natur, so daß zur Zielerreichung der Einsatz statistischer Verfahren, insbesondere von Methoden der induktiven Statistik, sinnvoll ist.

Im Hinblick auf die Vielzahl zu bearbeitender und oftmals großer Datensätze in Verbindung mit den bereits in Standardsoftware gebotenen Möglichkeiten ist es daher dringend geboten, statistische Verfahren standardisiert in der Erkundungspraxis einzusetzen.

2.2 Statistische Grundlagen und Begriffe

Zum besseren Verständnis der nachfolgenden Berechnungen werden an dieser Stelle wichtige Grundlagen kurz dargestellt.

Der aus Stichproben n berechnete Mittelwert \bar{x} ist eine Schätzung des unbekanntes Parameters μ der Grundgesamtheit. Die Richtung der Abweichung von \bar{x} zu μ ist abhängig davon, welche Zufallsvariablen x in der Stichprobe enthalten sind.

Die Quantifizierung der möglichen Abweichung von \bar{x} zum wahren Wert μ in Form eines Konfidenzintervalls erlaubt Aussagen zur Sicherheit des ermittelten Stichprobenwertes. Eine Angabe von μ ohne Konfidenzintervall ist damit von sehr beschränkter Aussagekraft.

Zur Berechnung des Konfidenzintervalls muß in Abhängigkeit der Fehlerkosten und des resultierenden Risikos ein bestimmtes Vertrauensniveau vorgegeben werden. Dieses Vertrauensniveau bestimmt, mit welcher Wahrscheinlichkeit der wahre Wert μ innerhalb des Konfidenzintervalls liegt. Häufig verwendete Werte sind 95 % und 99 %. Zur Berechnung des Konfidenzintervalls sind für wichtige Verteilungsformen (Standardnormalverteilung, Studentverteilung) die den Vertrauensniveaus zuzuordnenden Quantile in Tabellenwerken aufgeführt. Neben dem Mittelwert als Beispiel eines Zentralwertes können natürlich auch andere Parameter der Grundgesamtheit, wie der Anteilswert oder die Varianz, mittels Stichproben abgeschätzt werden.

Für Zufallsexperimente sind, basierend auf dem Urnenmodell, zwei Arten der Durchführung zu unterscheiden. Im Fall des Ziehens mit Zurücklegen wird die Probe nach Ziehen in die Grundgesamtheit zurückgegeben, so daß diese von Zug zu Zug nicht verändert wird, und ein Element mehrmals in der Stichprobe enthalten sein kann. Im Fall des Ziehens ohne Zurücklegen wird die Probe nicht in die Grundgesamtheit zurückgeführt, so daß die Wahrscheinlichkeit für das Ziehen einer bestimmten Probe von den vorher gezogenen Proben abhängt. Für den Fall des Ziehens ohne Zurücklegen ist zur Berechnung des Konfidenzintervalles eine Endlichkeitskorrektur erforderlich. Bei kleinem Stichprobenumfang n bzw. großer Grundgesamtheit N nähert sich der Korrekturfaktor $\frac{N-n}{N-1}$ dem Grenzwert 1, so daß als Approximation bei einem Verhältnis $n/N < 0,05$ (Auswahlsatz) die Korrektur entfallen kann. Dies kann in der Altlastenerkundung mittels Rammkernsondierungen vorausgesetzt werden. Dagegen kann bei Erkundung mittels Schürfen diese Voraussetzung durchaus verletzt sein.

2.3 Geostatistische Grundlagen und Begriffe

Als Pendant zum vorhergehenden Abschnitt sollen hier die wichtigsten Grundlagen und Ansätze der Geostatistik in geraffter Form vorgestellt werden. Bzgl. ausführlicherer Darstellungen wird auf Mathéron (1963), Clark (1979), Journel und Huijbregts (1981), Davis (1986), Akin und Siemes (1988) sowie Isaacs und Srivastava (1989) verwiesen.

Geostatistische Verfahren wurden zur Analyse und Prognose räumlich variabler Parameter (z. B. hydraulische Durchlässigkeit, Porosität) entwickelt, deren Schwankungen als Überlagerung deterministischer und zufallsabhängiger Einflüsse interpretiert werden können. Derartige Parametervariationen werden mit Hilfe sog. regionalisierter Variablen beschrieben. Darunter

sind ortsabhängige Funktionen zu verstehen, denen in jedem Raumpunkt eine stochastische Fluktuation zugeordnet ist, so daß jeder Funktionswert als Summe einer deterministischen und einer zufallsabhängigen Komponente gebildet wird. Die deterministische Komponente wird als Trend, die zufallsabhängige Komponente als Residuum bezeichnet. Hierbei repräsentiert der Trend großräumige, d. h. sich über das gesamte Untersuchungsgebiet erstreckende Parameteränderungen. Demgegenüber beschreiben die Residuen kleinräumige Abweichungen von diesem Trend, die regellos („zufällig“) über das Untersuchungsgebiet verteilt sind. Dies setzt voraus, daß sich weder positive noch negative Residuen in irgendeinem Teilbereich des Untersuchungsgebiets signifikant häufen (sog. statistische Homogenität bzw. statistische Stationarität der Residuen).

Der Einsatz geostatistischer Verfahren zielt darauf ab, sowohl den Trend als auch die Residuen auf der Basis der vorhandenen Meßinformation zu quantifizieren. Klarerweise ist bei der praktischen Durchführung dieser Verfahren zu beachten, daß die räumliche Parameterverteilung keineswegs im gesamten Untersuchungsgebiet bekannt ist. Vielmehr stehen lediglich an einzelnen (Meß-)Punkten zuverlässige Informationen zur Verfügung. Zwischen diesen Meßpunkten besteht Unsicherheit über die korrekten Parameterwerte, die mit zunehmender Entfernung von den Meßpunkten anwächst.

Zur Bestimmung des Trends werden Verfahren aus der Regressionsanalyse (z. B. Nollau, 1979) herangezogen. Diese Verfahren bilden Verallgemeinerungen der bekannten Methode, eine Ausgleichsgerade für Parameterwerte festzulegen, die von nur einer einzigen Einflußvariable abhängen. Die angesprochenen Erweiterungen dieses einfachen Regressionsansatzes berücksichtigen, daß die Trendfunktion

- von zwei oder drei Raumkoordinaten abhängt und
- diese Abhängigkeit auch in Form eines nichtlinearen Zusammenhangs auftreten kann.

Das zugrundeliegende allgemeine Regressionsmodell läßt sich dann in Matrixschreibweise wie folgt formulieren:

$$x=Y\beta+\varepsilon \tag{1}$$

mit x = Vektor der Meßwerte
 ε = Vektor der Residuen
 β = Vektor der zu bestimmenden Trendparameter
 Y = Designmatrix (s. u.)

Die Komponenten der Designmatrix Y beinhalten dabei die (u. U. nichtlinearen) deterministischen Komponenten des Zusammenhangs zwischen den Meßwerten (Vektor x) und den festzulegenden Trendparametern (Vektor β). Demgegenüber repräsentiert der Residuenvektor ε die stochastischen Komponenten der regionalisierten Variable. Es wird üblicherweise angenommen, daß die Residuen normalverteilt sind. Unter diesen Voraussetzungen lassen sich die Trendparameter β als Lösungen der sog. Normalgleichungen (Nollau, 1979) bestimmen. Die Lösung dieses Gleichungssystems erfordert den Einsatz spezieller numerischer Verfahren, auf deren Darstellung im Rahmen dieses Berichts verzichtet wird.

Die Eigenschaften der statistisch homogenen bzw. stationären Residuen werden in der Geostatistik mit Hilfe sog. (Semi-)Variogramme charakterisiert. Diese beschreiben die wechselseitige Abhängigkeit zweier Residuenwerte an verschiedenen Punkten des Untersuchungsgebiets. Dabei wird der Tatsache Rechnung getragen, daß die Wahrscheinlichkeit, an zwei Meßpunkten „ähnliche“ Meßergebnisse zu erhalten, umso höher ist, je weniger diese beiden Meßpunkte voneinander entfernt liegen. Diesen räumlichen Zusammenhang quantifiziert das Variogramm

$$\gamma(h) = \frac{1}{2n(h)} \sum_{i=1}^{n(h)} [\varepsilon(\xi_i) - \varepsilon(\xi_i+h)]^2 \quad (2)$$

mit h = Abstand zwischen zwei Meßpunkten
 $n(h)$ = Anzahl der Paare von Meßpunkten mit Abstand h
 ξ_i = Lage des Meßpunkts Nr. i
 ε = Residuum am jeweiligen Meßpunkt

Aus der vorhandenen Meßinformation, den Trendparametern und dem Variogramm kann der räumliche Verlauf einer regionalisierten Variable im Untersuchungsgebiet ermittelt werden. Zunächst ergibt sich für den Wert des Residuums an einem Punkt ξ mit dem als Kriging bezeichneten geostatistischen Schätzverfahren

$$\varepsilon(\xi) = \sum_{i=1}^n w_i \varepsilon(\xi_i) \quad (3)$$

mit ξ = Punkt im Untersuchungsgebiet
 n = Anzahl der Meßpunkte
 ξ_i = Lage des Meßpunkts Nr. i ($i=1,2,\dots,n$)
 $\varepsilon(\xi_i)$ = Residuum am Meßpunkt Nr. i
 w_i = Kriging-Wichtungsfaktor ($i=1,2,\dots,n$)

Das Residuum am Punkt ξ wird somit als gewichtetes Mittel der Residuen an den Meßpunkten dargestellt. Dabei werden die Kriging-Wichtungsfaktoren w_i so festgelegt, daß die Summe $x(\xi)+\varepsilon(\xi)$ aus Trend und Residuum eine bestmögliche Schätzung des korrekten Wertes der regionalisierten Variable am Punkt ξ ergibt. Diese Bedingung, die eine Minimierung des Prognosefehlers unter vollständiger Ausschöpfung der vorhandenen Meßinformation beinhaltet, führt auf ein System von Bestimmungsgleichungen für die Wichtungskoeffizienten w_i , auf dessen Lösung in diesem Bericht nicht eingegangen wird (vgl. die zu Beginn dieses Abschnitts zitierte Literatur).

Zusammenfassend ist festzuhalten, daß die geostatistische Prognose von Werten eines räumlich variablen Parameters unter folgenden Voraussetzungen möglich ist:

- Der Parameter kann als regionalisierte Variable dargestellt werden, d. h. als additive Überlagerung eines großräumigen, deterministischen Trends und stochastischer Residuen, die lokale Parameterschwankungen repräsentieren.
- Die Residuen sind statistisch homogen (stationär), d. h. in allen Teilbereichen des Untersuchungsgebiets treten positive und negative Residuenwerte mit gleicher Wahrscheinlichkeit auf.
- Die Residuen sind normalverteilt.

2.4 Fallbeispiel

Nachfolgend wird ein konkretes, aus didaktischen Gründen zunächst bewußt einfach gehaltenes Fallbeispiel eingeführt, um grundlegende Zusammenhänge und statistische Vorgehensweisen zu demonstrieren.

Unterstellt wird die Erkundung einer Liegenschaft von 5.000 m² in einem ca. 1955, also vor Einführung des Wasserhaushaltgesetzes (WHG), erschlossenen Gewerbegebiet. Das Gelände wurde von Beginn an als Spedition genutzt. Die Akteneinsicht und Kennnisträgerbefragung ergab, außer einer Eigenbedarfstankstelle, keinen weiteren konkreten Altlastverdacht. Eine zweite Verdachtsfläche im Bereich des früheren Umschlags von leichtflüchtigen chlorierten Kohlenwasserstoffen (LCKW) wurde nicht erkannt. Zur Erkundung wurden 10 Rammkernsondierungen (RKS) bis max. 4 m Tiefe niedergebracht (vgl. Anlage 1). Dabei erfassen die Sondierungen 1 bis 4 konkrete Verdachtsflächen. Die Sondierungen 5 bis 10 sind auf der Fläche ohne konkreten Altlastverdacht rasterförmig angeordnet. Auch bei der Anlage des Rasters wurde jedoch versucht, die Knotenpunkte entsprechend der Nutzung zu legen (Lagerhalle, Anlieferung, LKW-Abstellfläche). Die Analytik auf infrarotspektrometrisch nachweisbare

Kohlenwasserstoffe (KW-IR) im Feststoff sowie aromatische Kohlenwasserstoffe (AKW) und LCKW in der Bodenluft ergab die in Tabelle 1 aufgelisteten Konzentrationen.

Tab. 1: Daten des Fallbeispiels

Lage	RKS	Tiefe [m]	KW-IR [mg/kg]	AKW [µg/m ³]	LCKW [µg/m ³]
Dieseltank	1	3	200	n.n.	n.n.
VK-Tank	2	3	1.000	600.000	n.n.
Ölabscheider	3	3	800	20.000	2.000
Zapfsäule	4	2	100	10.000	n.n.
Fläche	5	2	50	n.n.	n.n.
Fläche	6	2	10	n.n.	500
Fläche	7	2	90	n.n.	n.n.
Fläche	8	2	20	n.n.	100
Fläche	9	2	40	n.n.	n.n.
Fläche	10	2	10	n.n.	n.n.

Bereits in diesem einfachen Einführungsbeispiel werden **wichtige Zusammenhänge** für die statistische Bearbeitung von Altlastflächen deutlich:

- Fehlende Vorkenntnisse, hier über die Lage des LCKW-Umschlags, verringern die Wahrscheinlichkeit des Erkennens der Altlast erheblich.
- Ebenso beeinflusst die Größe des „Hot-spots“ und der Probenahmeabstand die Wahrscheinlichkeit des Erkennens deutlich.
- Die Berechnung von Zentralwert und Streuwerten führt bei Einbeziehung der gesamten Fläche zu unplausiblen Werten. Daraus folgt, daß als Voraussetzung für die Berechnung von statistischen Parametern zwingend die Flächen verschiedener Schadstoffeinträge abgegrenzt werden müssen.

3 Möglichkeiten statistischer Methoden - Grenzen der Geostatistik

Grundsätzlich ist die Eignung einer Vielzahl statistischer Verfahren zur Lösung jeweils bestimmter Fragestellungen in der Erkundung zu prüfen. In Tabelle 2 sind wichtige Fragestellungen der Erkundung und mögliche statistische Verfahren im Erkundungsablauf gegenübergestellt.

Tab. 2: Zusammenstellung statistischer Verfahren

Problem	Statistisches Verfahren	Aussage
Wahrscheinlichkeit, eine Altlast zu erkennen	Kombinatorik – Binomialverteilung	Wahrscheinlichkeit bzw. erforderliche Probenanzahl
Schätzen von der Stichprobe auf Mittelwert und Streuung der Grundgesamtheit	Bestimmen des Konfidenzintervalls	Mittelwert, Streumaße und Konfidenzintervall bei bestimmtem Vertrauensbereich bzw. erforderliche Probenanzahl
Prüfen einer Eintragshypothese	Parametrische Tests Nichtparametrische Tests	Entscheidung, ob ein Eintrag vorliegt oder ein Schwellenwert überschritten ist
	Korrelationsanalyse	Entscheidung, ob ein gemeinsamer Eintrag vorliegt
Größe der Altlast Abgrenzung der Altlast	Binomialverteilung	Anteil an der Gesamtfläche bei diffusem Eintrag
	Geostatistik	Größe und Form der Altlast
Senkung des Analysenaufwandes bei ähnlicher Aussagesicherheit	Korrelationsanalyse	Identifikation von Parametern hoher Korrelation
	Group testing	Mischprobenkonzepte

Im Rahmen der vorliegenden Studie mit der Zielstellung,

- die Aussageunsicherheiten in Abhängigkeit von der Probenanzahl bzw.
- die Probenanzahl in Abhängigkeit von der Aussagesicherheit sowie
- die Sensitivität der Erkundungskosten in Abhängigkeit von der Aussagesicherheit

zu quantifizieren, sind im Hinblick auf die praktische Umsetzung, insbesondere die Möglichkeiten der Binomialverteilung (Erkennen der Kontamination), der Bestimmung von Konfidenzintervallen (Schätzen von der Stichprobe auf die Grundgesamtheit) sowie der Bildung von Mischproben zu prüfen.

Die im vorliegenden Bericht nicht betrachteten Testverfahren können im Rahmen der Störerauswahl und Störerefestsetzung sinnvoll eingesetzt werden. Das ursprünglich aus der Exploration stammende und auch in der Grundwassermodellierung eingesetzte geostatistische Kriging-Verfahren (vgl. Abschnitt 2.3) ist für die Schadensherderkundung im allgemeinen nicht anwendbar, da wesentliche Voraussetzungen für die Anwendung geostatistischer Verfahren nicht erfüllt sind. So ist die Darstellung der Schadstoffkonzentration als regionalisierte Variable fragwürdig, da Schadensherde weder als großräumige Trends noch als gleichförmig im Untersuchungsgebiet verteilte Residuen aufgefaßt werden können. Daher ist auch die statistische Homogenität (Stationarität) der Konzentrationswerte nicht gegeben (Abbildung 1). Ferner muß davon ausgegangen werden, daß im Falle eines zu untersuchenden Schadensherdes zwischen der räumlichen Position von Probenahmepunkten und der vorzufindenden Schadstoffbelastung kein allgemein gültiger Zusammenhang herstellbar, d. h. ein Variogramm nicht sinnvoll abzuleiten ist (Abbildung 1).

Zieht man das in Abschnitt 2.4 vorgestellte Fallbeispiel heran, so läßt sich anhand der KW-IR-Messungen in sehr einfacher Weise aufzeigen, daß die Daten aus Tabelle 1 die Voraussetzung der statistischen Homogenität verletzen. Nach Abschnitt 2.3 besagt diese Voraussetzung, daß Abweichungen vom Mittelwert nicht an bestimmte räumlich abgegrenzte Flächen gebunden sind, sondern „mit gleicher Häufigkeit“ in allen Bereichen des Speditionsgeländes auftreten. Eine Analyse der Einzelmessungen in Tabelle 1 ergibt jedoch unmittelbar, daß deren Abweichungen vom Durchschnittswert der KW-IR-Messungen (232 mg/kg) keinesfalls gleichförmig über das gesamte Speditionsgelände verteilt sind, sondern bestimmten Teilflächen zugeordnet werden können. So liegen im Bereich der Tankstelle stark überdurchschnittliche Werte vor (insbesondere RKS 2 und 3 mit 1.000 mg/kg bzw. 800 mg/kg), während die RKS 5-10 weit unter dem Durchschnitt liegende Belastungen liefern (10 mg/kg bis 90 mg/kg). Damit ist die statistische Homogenität der Meßwerte nicht gegeben, so daß geostatistische Methoden nicht zum Einsatz kommen können. Ähnliche Überlegungen werden in Abschnitt 8.4 auf das Modellvorhaben Sinsheim angewendet.

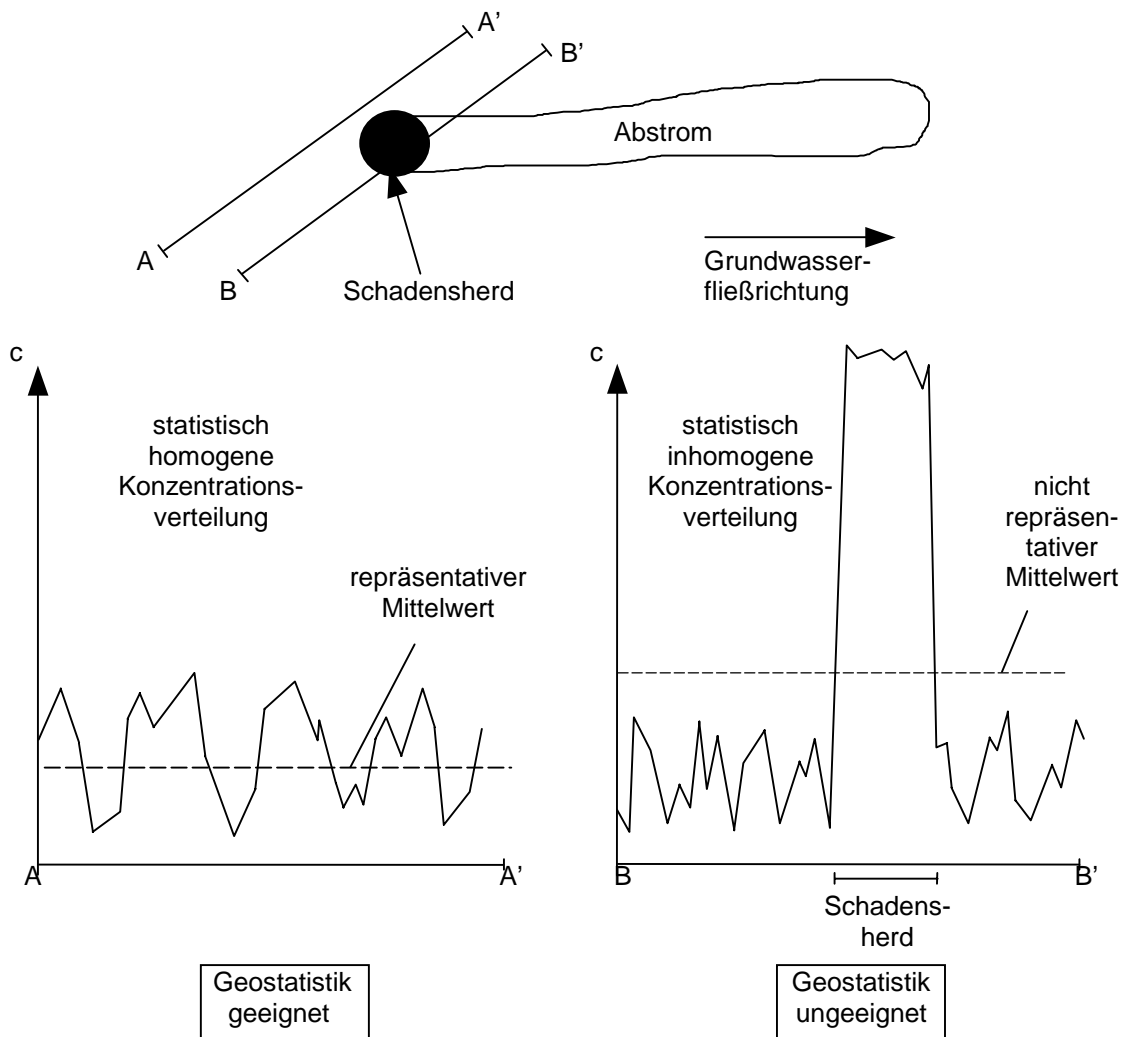


Abb. 1: Anwendbarkeit geostatistischer Methoden

4 Einflußgrößen der statistischen Aussagesicherheit

Die Erfassung einer Kontamination und damit die statistische Aussagesicherheit wird von zahlreichen Faktoren beeinflusst. Diese lassen sich unter drei Hauptgruppen subsumieren:

- Vorkenntnisse,
- Schadstoffverteilung im Untergrund,
- Mittelungsvolumen der Probe.

Nachfolgend werden die einzelnen Hauptgruppen näher erläutert und die Beeinflussungen anhand des in Kapitel 2 eingeführten Fallbeispiels demonstriert.

Die **Vorkenntnisse** erlauben Aussagen zur

- Wahrscheinlichkeit, möglicherweise auch zur
- Lage und
- Größe der Kontamination (Abbildung 3),

aus denen eine Eintragshypothese abzuleiten ist. Die Wahrscheinlichkeit des Vorliegens einer Kontamination bestimmt zunächst die Entscheidung, ob eine technische Erkundung erforderlich und verhältnismäßig ist. Diese Entscheidung wird trotz vorliegender Entscheidungshilfen (z. B. Branchenkatalog) von den Bedingungen des Einzelfalls abhängen und damit zwangsläufig subjektiv sein.

Im Fallbeispiel (Abschnitt 2.4) wird aufgrund des Vorliegens der Tankstelle **und** der langjährigen Nutzung eine technische Erkundung erforderlich.

Aus der Lage und Größe der Kontamination ist im zweiten Schritt eine Probenahmestrategie mit den auch die statistische Aussagefähigkeit maßgeblich beeinflussenden Kriterien

- Anzahl der Probenahmepunkte (Abbildung 3) und
- Lage der Probenahmepunkte

aufzustellen. Aus den Abbildungen 2 und 3 ist ersichtlich, daß die Anzahl der Probenahmepunkte pro Flächeneinheit unter der Bedingung gleichbleibender statistischer Aussagesicherheit entscheidend von der Größe der Kontamination abhängt. Da diese Variable vorgegeben ist, kann im Hinblick auf die Erkundungseffizienz eine Kostensenkung über Reduzierung der Probenahmepunkte nur durch Senkung des Anspruchsniveaus der statistischen Aussagesicherheit

cherheit erreicht werden. Dieser Zusammenhang ist in Kapitel 5 näher ausgeführt und mit konkreten Zahlen belegt. Im Fallbeispiel wurden vier Sondierungen in konkreten Verdachtsflächen und sechs Sondierungen als Raster ohne konkrete Hinweise durchgeführt.

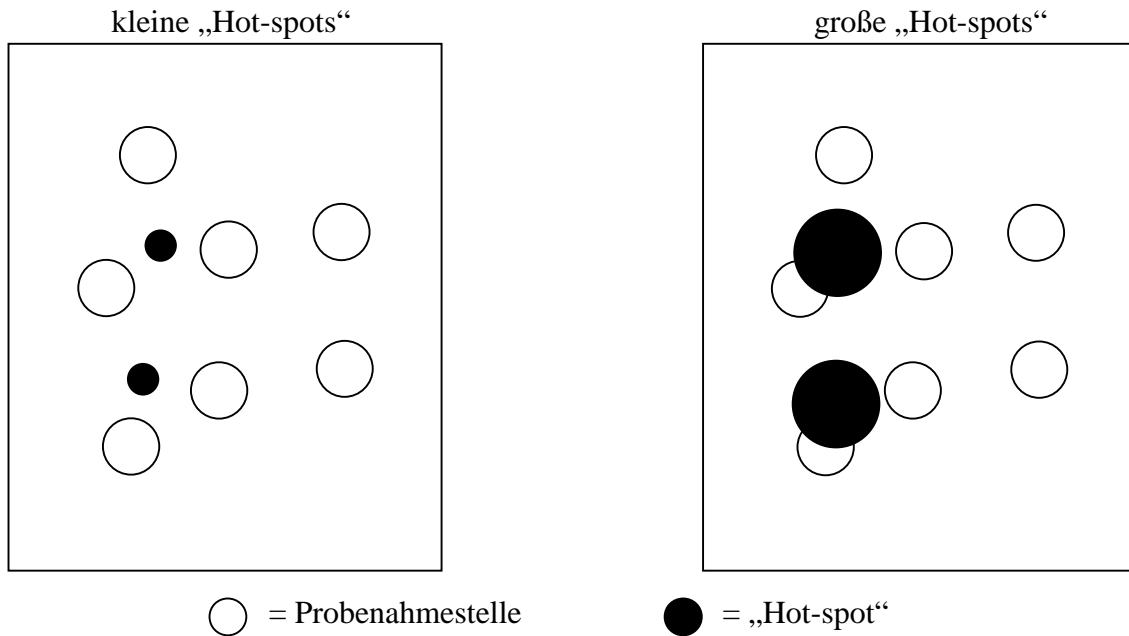


Abb. 2: Einfluß der Größe von „Hot-spots“ auf die Erfassung der Kontamination an einem Altstandort

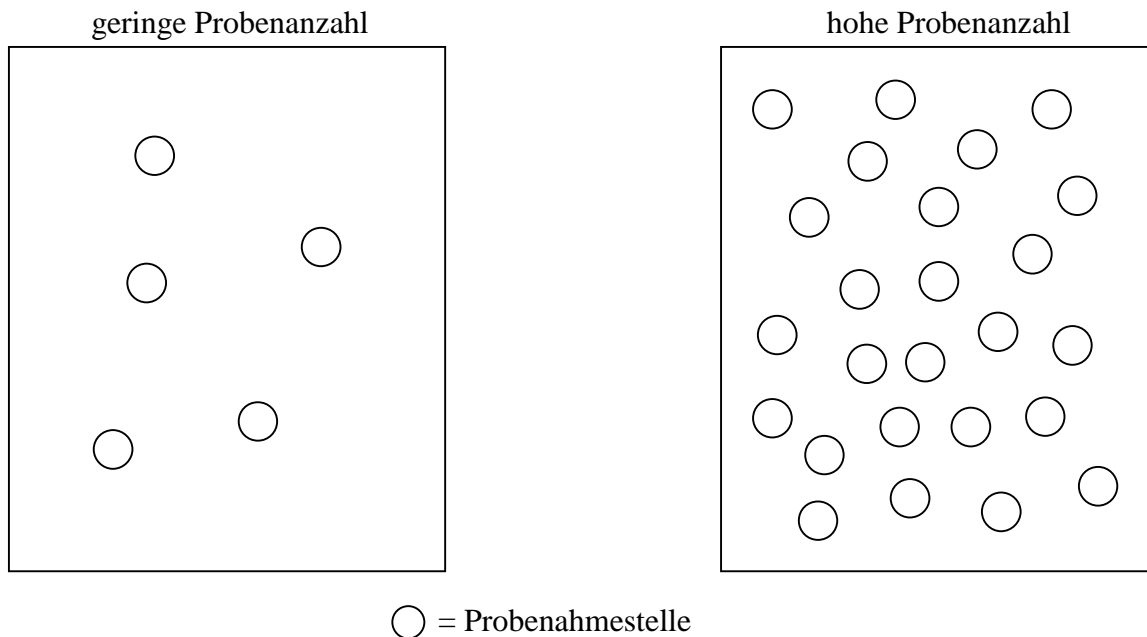


Abb. 3: Einfluß der Probenanzahl auf die Erfassung einer Kontamination

Als zweite Hauptgruppe ist die **Schadstoffverteilung** im Untergrund zu berücksichtigen. Durch diese wird die Kontaminationsgröße unabhängig von der eingebrachten Schadstoffmenge durch folgende Faktoren geprägt:

- Schadstofftyp (phys. und chem. Eigenschaften),
- Standorttyp (Stratigraphie, Lithologie),
- Eintragungstyp (diffus, flächig, lokal begrenzt).

Im Schadstofftyp ist in einer Bandbreite zwischen mobilen Parametern mit hoher Ausbreitungspräferenz und immobilen Parametern mit geringer Ausbreitungspräferenz zu unterscheiden. Mobile Parameter führen bei gleicher Menge an zugeführtem Schadstoff zu größeren Kontaminationsflächen und damit höherer statistischer Aussagesicherheit bei gleichem Erkundungsaufwand. Dies gilt nicht nur für verschiedene Stoffgruppen, z. B. LHKW als typischer Vertreter mobiler Stoffe und Schwermetalle als Vertreter immobilier Stoffe, sondern auch innerhalb der Stoffgruppen. So ist die Wahrscheinlichkeit, einen Eintrag von leichtem Heizöl zu erkennen, gegenüber einem Eintrag mit Schweröl deutlich höher.

Ähnliche Auswirkungen hat der Eintragungstyp. Damit soll zwischen den Ausprägungen flächiger Eintrag, z. B. durch atmosphärische Deposition, und lokal begrenzter Eintrag, z. B. aus einer definierten Leckstelle unterhalb der Erdoberfläche sowie entsprechenden Zwischenstufen unterschieden werden. Eine Sonderform stellen diffuse Einträge, oft bei Altablagerungen, dar. Diese sind letztlich entsprechend des gewählten Betrachtungsmaßstabs als flächig oder begrenzt einzuordnen.

Der Standorttyp bestimmt im wesentlichen über zwei Parameter die statistische Aussagesicherheit. Zum einen sind im Kluftgestein gegenüber Lockergesteinen die Inhomogenitäten naturgemäß deutlich größer. Das führt neben einer erhöhten Varianz der Meßwerte auch zu einer reduzierten Erkennungswahrscheinlichkeit. Zum anderen beeinflussen Nutzporosität und Permeabilität des Gesteins maßgeblich die Größe der Kontaminationsfläche und damit die statistische Aussagesicherheit.

Das **Mittelungsvolumen der Probe** bestimmt die statistische Aussagesicherheit unabhängig von der Größe der kontaminierten Fläche und der Schadstoffverteilung (Abbildung 4). Das Mittelungsvolumen wird durch den

- Probenotyp (Boden, Bodenluft, Wasser) und
- die Probenahme (Stützung der Probe)

bestimmt und ist somit, im Gegensatz zu den feststehenden Parametern (Größe des „Hotspots“, Schadstoffverteilung) durch den Probenehmer in Grenzen steuerbar. Die Höhe des Mittelungsvolumens erhöht die Erkennungswahrscheinlichkeit additiv zur Kontaminationsgröße. Der Vorteil des höheren Mittelungsvolumens des Probentyps Bodenluftproben gegenüber Feststoffproben wird in der Erkundungspraxis seit langem umgesetzt, ist jedoch nur für leichtflüchtige Schadstoffe einzusetzen.

Dagegen sind die Vorteile einer großen Stützung der Proben durch ein hohes Probevolumen sowohl bei Bodenluft- als auch Bodenproben durchweg anwendbar. Die große Stützung kompensiert in noch darzustellendem Umfang (vgl. Kapitel 5) eine geringe Größe der kontaminierten Fläche, wirkt also flächenerhöhend. Dies führt entsprechend zu einer erhöhten Wahrscheinlichkeit, die Altlast zu treffen, und verbessert damit die statistische Aussagesicherheit.

Eine große Stützung nivelliert darüber hinaus in gewissen Umfang die im Altlastbereich typische Schadstoffvariabilität auf engstem Raum. Bodenwerte streuen generell nach den Erfahrungen auf Dauerbeobachtungsflächen erheblich (vgl. Bayerisches Staatsministerium für Landesentwicklung und Umweltfragen, 1990), die Varianz wird im Altlastbereich noch verstärkt. Dieser in der geostatistischen Literatur als Nuggetvarianz bezeichnete Effekt wird durch eine große Stützung der Proben reduziert.

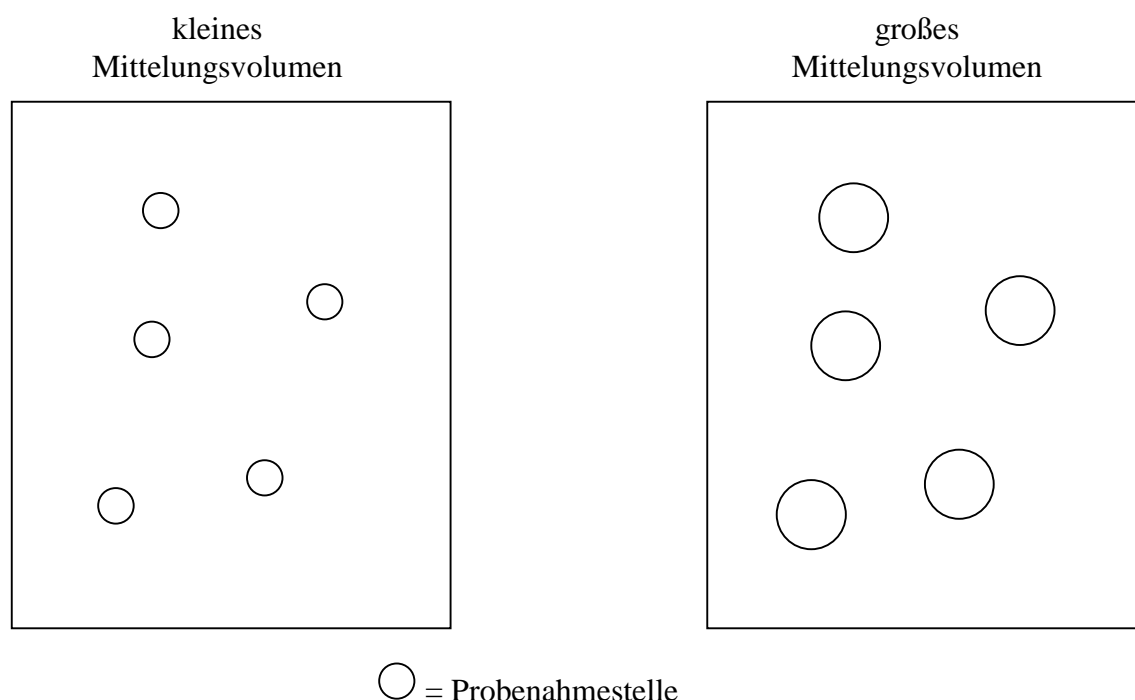


Abb. 4: Einfluß des Mittelungsvolumens auf die Erfassung einer Kontamination

Die Art der Verknüpfung dieser drei Faktoren und deren nachgeordneter Kriterien bestimmt maßgeblich die Aussagesicherheit der Erkundung. Daraus ist sofort erkennbar, daß eine Vielzahl von Fallklassen in der vorgesehenen Testphase zu unterscheiden sind. Zur besseren Übersicht sind die bestimmenden Faktoren und nachgeordneten Kriterien in Tabelle 3 zusammengefaßt, wobei die wichtigsten hervorgehoben sind.

Tab. 3: Bestimmungsfaktoren für die Aussagesicherheit der Erkundung von Schadensherden

Vorkenntnisse	Wahrscheinlichkeit einer Kontamination Lage der Kontamination Größe der Kontamination Anzahl Probenahmepunkte Verteilung Probenahmepunkte
Schadstoffverteilung	Schadstofftyp Standorttyp Eintragungstyp
Mittelungsvolumen der Probe	Probentyp Probenahmetyp

5 Berechnung der Erkennungswahrscheinlichkeit in Abhängigkeit von der Probenanzahl

5.1 Einführung

Abhängig von den Vorkenntnissen können die Lage und die Größe einer Verdachtsfläche unsicher bzw. nicht exakt bekannt sein (Abbildung 5). In diesen Fällen ist im ersten Erkundungsschritt nachzuweisen, ob sich der Altlastenverdacht bestätigt oder ob die Fläche kontaminationsfrei ist. Dazu ist eine rasterförmige Erkundung erforderlich. Da die gesamte kontaminationsverdächtige Fläche abgedeckt werden muß, entstehen in Abhängigkeit von der Grundstücksgröße entsprechende Kosten. Die statistische Aussagesicherheit zur Erkennung von Altlasten wird grundsätzlich vom Verhältnis folgender vier Kriterien definiert:

- - Größe der kontaminationsverdächtigen Fläche,
- - Größe der Kontamination,
- - Anzahl der Probenahmepunkte,
- - Mittelungsvolumen der Probe.

Daneben beeinflussen die Form der Kontamination (Kreis, Ellipse und deren Achsenverhältnisse), die Orientierung der Kontamination in Bezug zum Raster und die Form des Rasters (vgl. Abschnitt 7.1.1) die Erkennungswahrscheinlichkeit.

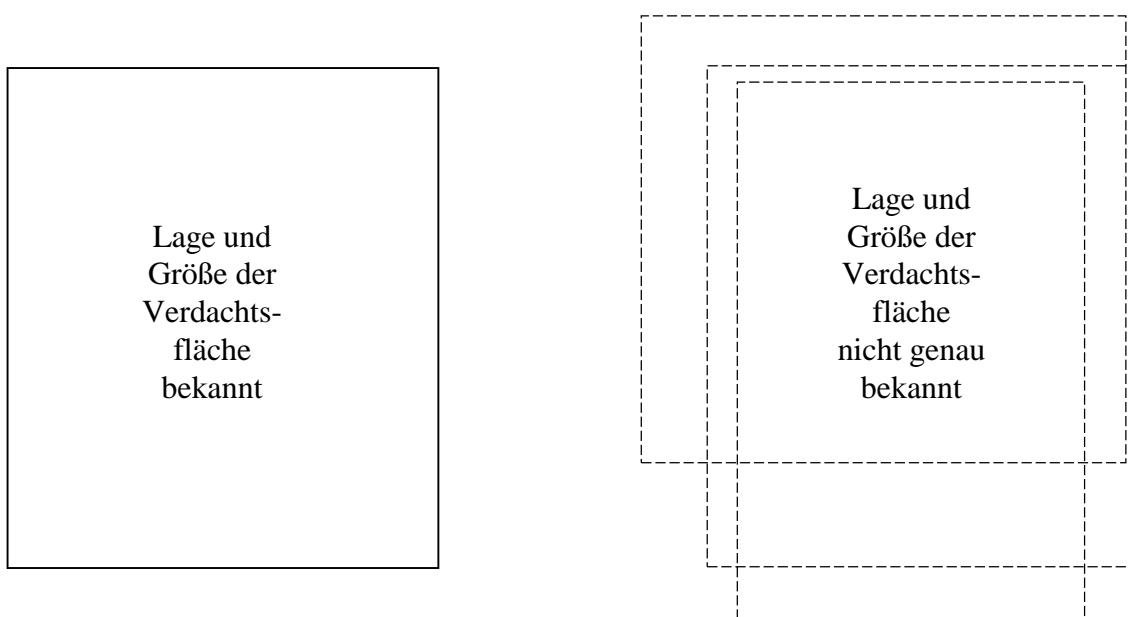


Abb. 5: Unsicherheit bzgl. Lage und Größe einer Verdachtsfläche

Bereits ohne weiterführende statistische Überlegungen ist sofort erkennbar, daß sich bei gleicher Aussagesicherheit die erforderliche Anzahl der Probenahmepunkte proportional zur Größe der kontaminationsverdächtigen Fläche und der Grundstücksgröße entwickelt. In der Praxis ist oft zu beobachten, daß in Zeiten begrenzter Budgets gegen diesen Grundsatz verstoßen wird. Zur Verknüpfung der beiden Parameter Grundstücksgröße und Kontaminationsgröße wird in Abschnitt 5.3 die Kontaminationsgröße relativ zur Grundstücksgröße angegeben und fließt so als ein Wert in die Berechnungen ein.

Im Fallbeispiel (Abschnitt 2.4) wurde die nicht durch konkrete Eintragsstellen belegte Fläche von 4.000 m² mit lediglich sechs Sondierungen erfaßt.

Zu den Rasterformen, insbesondere aber zum Rasterabstand, existieren eine Vielzahl methodischer Empfehlungen. Für Rasterabstände werden Empfehlungen in einer Bandbreite von ca. 5 m bis 50 m, also Faktor 10, gegeben, wobei statistisch abgesicherte Begründungen nicht vorliegen (Ferguson, 1993). Nachfolgend werden ein einfacher Ansatz auf geometrischer Basis, dem ein systematisches Raster zugrunde liegt und ein allgemeingültiger Ansatz auf wahrscheinlichkeitstheoretischer Basis, dem ein Zufallsraster zugrunde liegt, dargestellt.

5.2 Geometrischer Ansatz

Im idealisierten Fall einer kreisförmigen Kontamination kann für geometrische Rasterformen die Wahrscheinlichkeit des Erkennens einer Altlast in erster Näherung aus dem Verhältnis von Altlastfläche zur Fläche der Elementarzelle des Rasters ermittelt werden (Drew, 1979; Bunge, 1996b). Abbildung 6 zeigt schematisch die beiden am häufigsten verwendeten Rasterformen, das Quadrat- und das Dreieckraster mit der zugehörigen quadratischen bzw. sechseckigen Rasterzelle. Diese repräsentiert den Bereich, der von der jeweiligen Probenahmestelle „erfaßt“ werden soll.

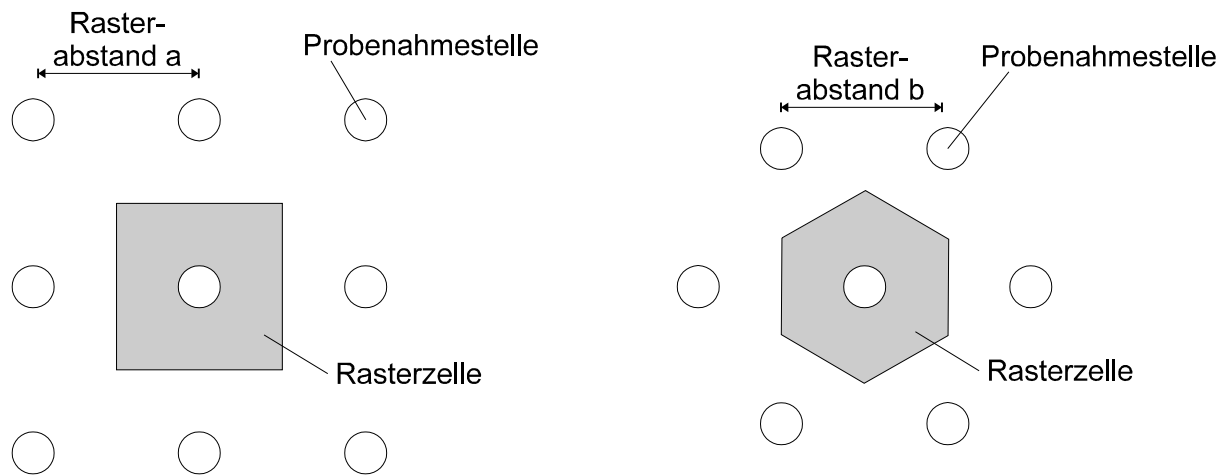


Abb. 6: Anordnung von Probenahmestellen im Quadrat- bzw. Dreiecksraster

Am Beispiel eines quadratischen Rasters errechnet sich die Wahrscheinlichkeit des Erkennens der Kontamination zu

$$p = \begin{cases} \frac{\pi}{4} \cdot \left(\frac{d_{HS}}{a}\right)^2 & \text{falls } 0 \leq \frac{d_{HS}}{a} < 1 \\ \left(\frac{d_{HS}}{a}\right)^2 \cdot \left(\frac{\pi}{4} - \arccos \frac{a}{d_{HS}}\right) + \sqrt{\left(\frac{d_{HS}}{a}\right)^2 - 1} & \text{falls } 1 \leq \frac{d_{HS}}{a} < \sqrt{2} \\ 1 & \text{falls } \frac{d_{HS}}{a} \geq \sqrt{2} \end{cases} \quad (4)$$

mit p = Erkennungswahrscheinlichkeit
 d_{HS} = Durchmesser der Kontamination („Hot-spot“)
 a = Rasterabstand (quadratisches Raster)

In Kapitel 4 wurde dargestellt, daß das **Mittelungsvolumen** der Probe die Erkennungswahrscheinlichkeit beeinflusst. In der vorliegenden Literatur hat bisher nur McCammon (1974) in einem Kurzaufsatz zur Ölexploration auf diesen Effekt hingewiesen. Insbesondere bei Bodenluftproben würde die Vernachlässigung dieses Kriteriums zur Unterschätzung der Erkennungswahrscheinlichkeit führen. Zur Einbeziehung dieses Kriteriums erweitert sich Gleichung (4) zu

$$p = \begin{cases} \frac{\pi}{4} \cdot \left(\frac{d_{HS} + d_{MV}}{a} \right)^2 & \text{falls } 0 \leq \frac{d_{HS} + d_{MV}}{a} < 1 \\ \left(\frac{d_{HS} + d_{MV}}{a} \right)^2 \cdot \left(\frac{\pi}{4} - \arccos \frac{a}{d_{HS} + d_{MV}} \right) + \sqrt{\left(\frac{d_{HS} + d_{MV}}{a} \right)^2 - 1} & \text{falls } 1 \leq \frac{d_{HS} + d_{MV}}{a} < \sqrt{2} \\ 1 & \text{falls } \frac{d_{HS} + d_{MV}}{a} \geq \sqrt{2} \end{cases} \quad (5)$$

mit d_{MV} = Durchmesser der kreisförmig angenommenen Probenreichweite (charakterisiert die Ausdehnung des Mittelungsvolumens)

Die drei in Gleichung (5) auftretenden Fälle sind in Abbildung 7 veranschaulicht. Schadensherde werden erkannt, wenn ihr Zentrum innerhalb der dargestellten Kreisfläche liegt. Dabei ist zu unterscheiden, ob der Kreisdurchmesser kleiner als der Rasterabstand a , kleiner als die Diagonale der Rasterzelle bzw. größer als die Diagonale der Rasterzelle ist. Der dunkel schattierte Bereich gibt jeweils den Flächenanteil innerhalb einer Rasterzelle an, der durch die Be-
probung im Zentrum der Zelle erfaßt wird.

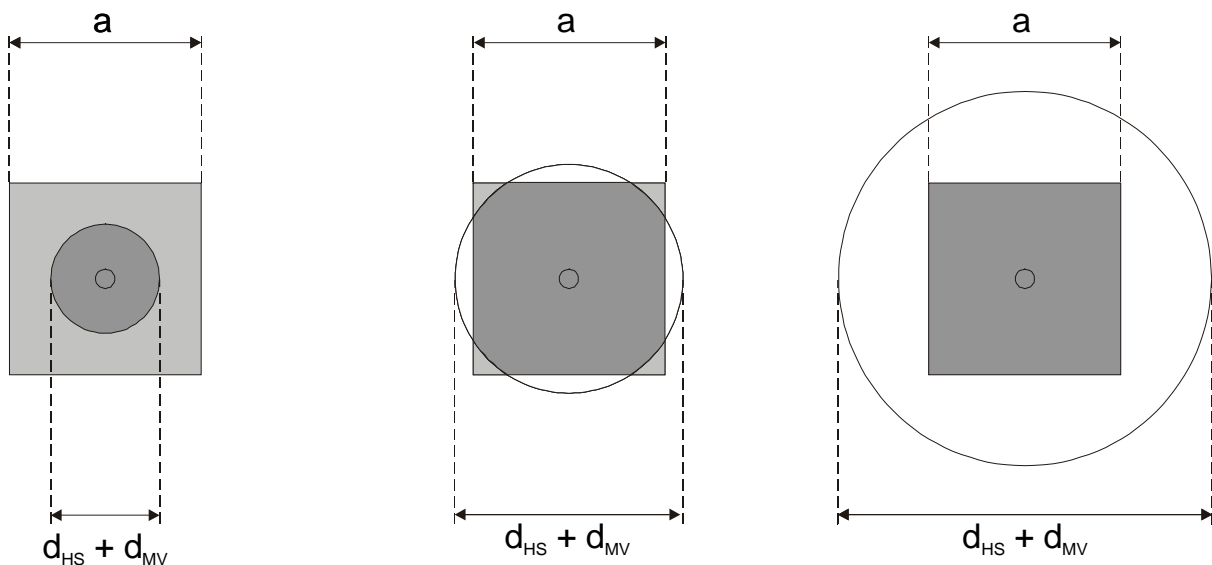


Abb. 7: Geometrische Veranschaulichung zur Bestimmung der Erkennungswahrscheinlichkeit für Quadratraster

Im für die Erkundungspraxis relevanten Bereich $0 < \frac{d_{HS} + d_{MV}}{a} < 1$ wächst gemäß Gleichung (5) die Erkennungswahrscheinlichkeit proportional zum Flächenverhältnis (Kontamination + Probenreichweite)/Rasterzelle. Wird der Rasterabstand zum Erreichen hoher Aussagesicherheit kleiner als die Summe der Durchmesser d_{HS} und d_{MV} gewählt, kann die Kontaminations-

fläche mehr als einmal getroffen werden. Entsprechend ergibt sich ab einem Verhältnis $\frac{d_{HS}+d_{MV}}{a} > 1$ eine deutliche Kurvenverflachung.

In Abbildung 8 sind die Wahrscheinlichkeiten für Treffer in Abhängigkeit des Verhältnisses $\frac{d_{HS}+d_{MV}}{a}$ graphisch dargestellt. Daraus läßt sich ablesen, daß bereits unter idealtypischen Bedingungen (Altlastfläche und Raster besitzen eine hohe Symmetrie) für eine Erkennungswahrscheinlichkeit von ca. 80 % der Rasterabstand der Summe der Durchmesser von kontaminierter Fläche und Probenreichweite entsprechen muß.

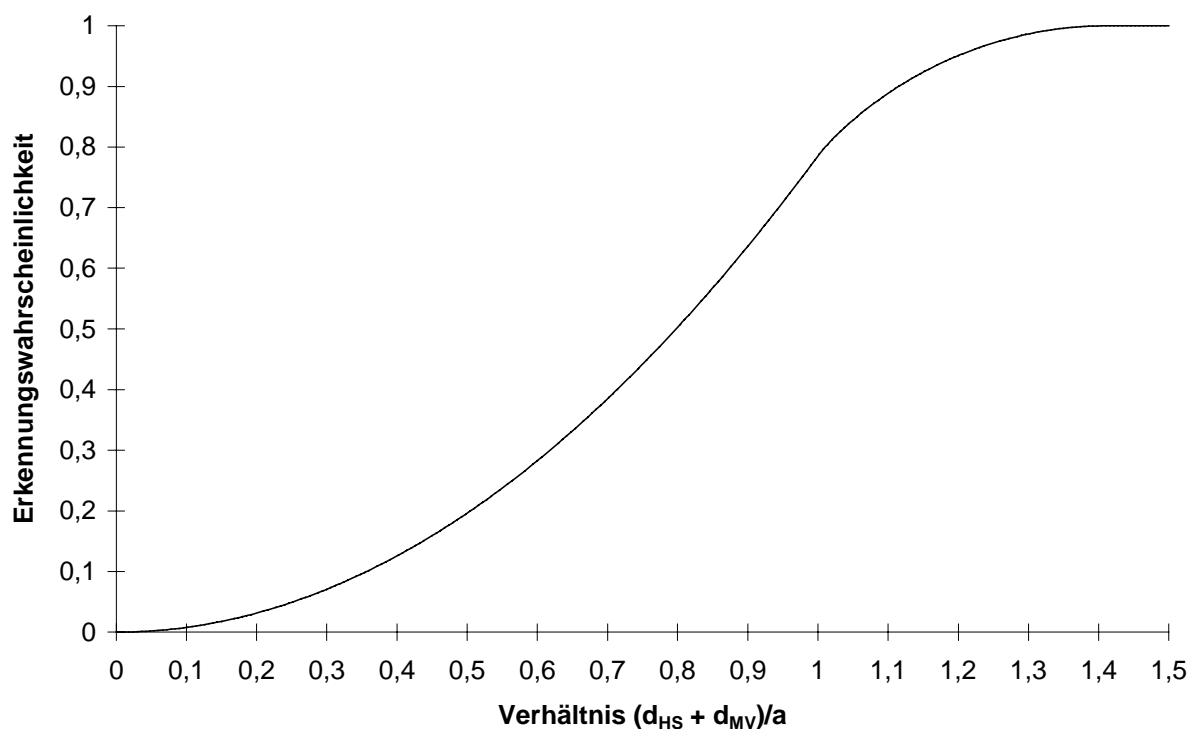


Abb. 8: Erkennungswahrscheinlichkeit für ein quadratisches Raster

Werden die Probenahmepunkte in einem aus gleichseitigen Dreiecken bestehenden Raster angeordnet, dann ergibt sich anstelle von Gleichung (5) nunmehr für die Erkennungswahrscheinlichkeit

$$p = \begin{cases} \frac{\sqrt{3} \cdot \pi}{6} \cdot \left(\frac{d_{HS} + d_{MV}}{b} \right)^2 & \text{falls } 0 \leq \frac{d_{HS} + d_{MV}}{b} < 1 \\ \left(\frac{d_{HS} + d_{MV}}{b} \right)^2 \cdot \left(\frac{\sqrt{3} \cdot \pi}{6} - \arccos \frac{b}{d_{HS} + d_{MV}} \right) + \sqrt{3} \cdot \sqrt{\left(\frac{d_{HS} + d_{MV}}{a} \right)^2 - 1} & \text{falls } 1 \leq \frac{d_{HS} + d_{MV}}{b} < \frac{2}{3} \sqrt{3} \\ 1 & \text{falls } \frac{d_{HS} + d_{MV}}{b} \geq \frac{2}{3} \sqrt{3} \end{cases} \quad (6)$$

wobei b = Abstand benachbarter Probenahmepunkte (Dreieckraster)

Die in Gleichung (6) zu unterscheidenden Fälle verdeutlicht Abbildung 9. Die Kreisfläche repräsentiert wiederum den Bereich, in dem Schadensherde erkannt werden. Der Kreisdurchmesser ist dabei kleiner als der Rasterabstand b , kleiner als die Diagonale der Rasterzelle bzw. größer als die Diagonale der Rasterzelle.

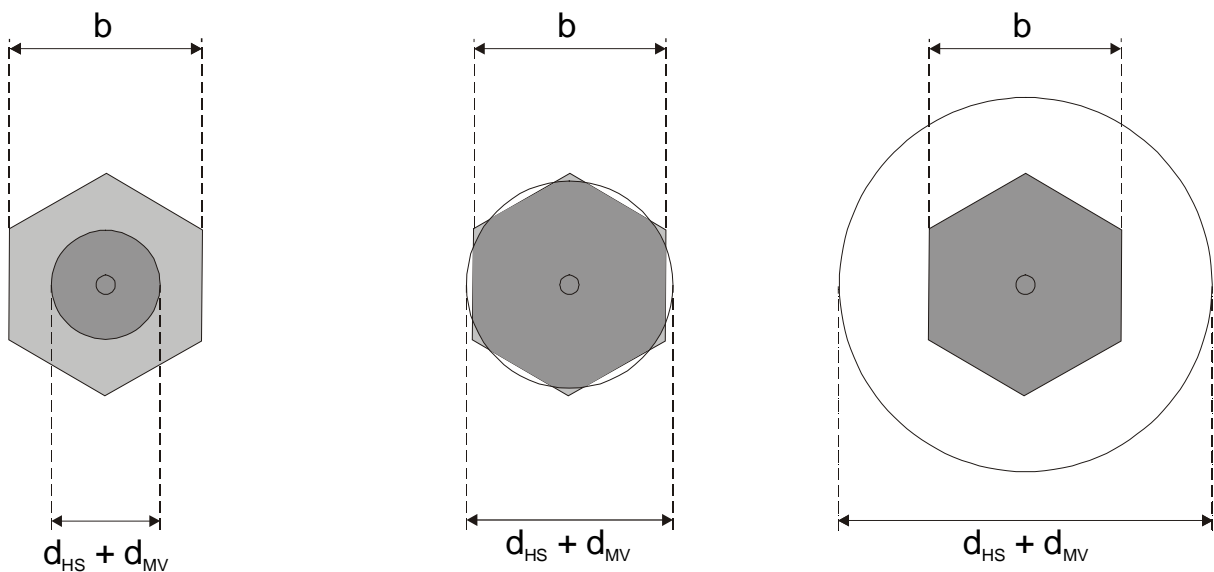


Abb. 9: Geometrische Veranschaulichung zur Bestimmung der Erkennungswahrscheinlichkeit für Dreieckraster

Abbildung 10 zeigt die Erkennungswahrscheinlichkeiten in Abhängigkeit des Verhältnisses $\frac{d_{HS} + d_{MV}}{b}$ für ein Dreieckraster gemäß Gleichung (6).

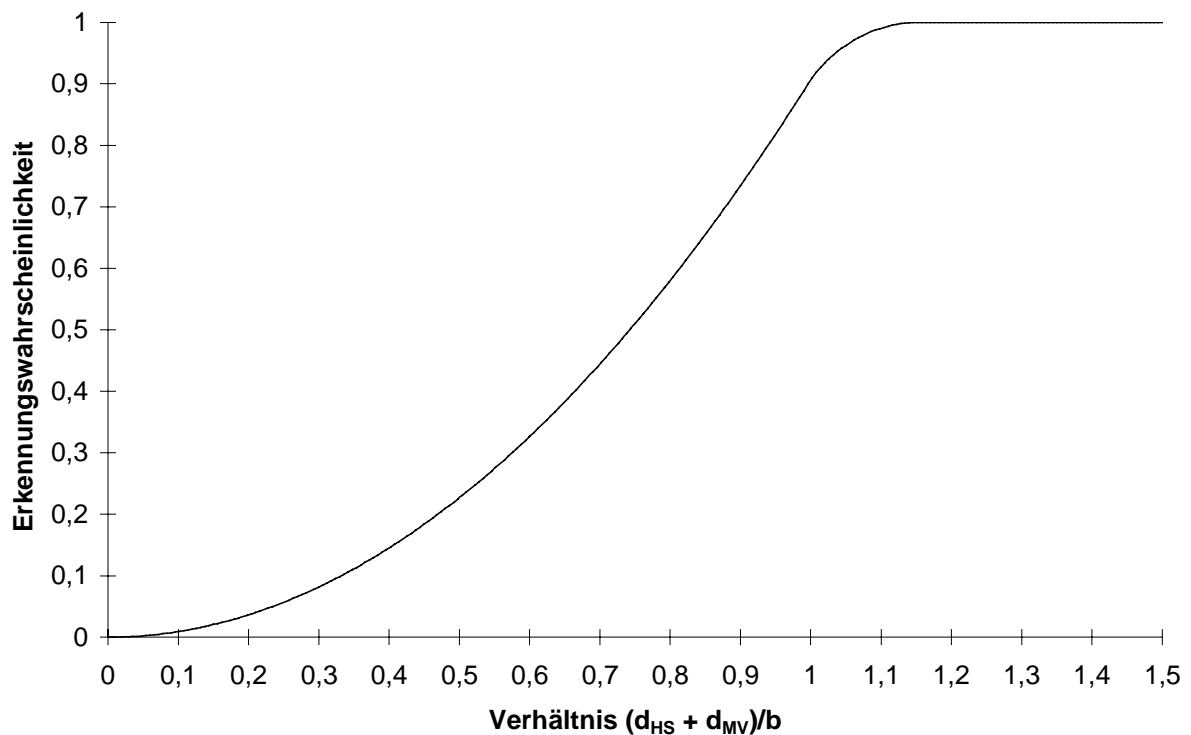


Abb. 10: Erkennungswahrscheinlichkeit für ein Dreieckraster

Aus einem Vergleich mit Abbildung 8 (Quadratraster) ist abzulesen, daß die Erkennungswahrscheinlichkeiten für das Dreieckraster etwas größer sind. Diese Feststellung bleibt auch dann noch gültig, wenn man bedenkt, daß für einen „fairen“ Vergleich der beiden Rastertypen unterschiedliche Kantenlängen a und b zugrunde gelegt werden müssen (Bunge, 1996b). Denn nur im Fall

$$\frac{b}{a} = \sqrt{\frac{2}{\sqrt{3}}} \approx 1,0746 \quad (7)$$

sind nämlich die Flächen der Rasterzellen gleich groß, d. h. nur in diesem Fall decken ein Quadrat- und ein Dreieckraster eine vorgegebene Grundstücksfläche mit derselben Anzahl von Rasterzellen ab, so daß dieselbe Anzahl von Probenahmestellen vorliegt und somit dieselben Erkundungskosten anfallen. Einen entsprechenden Vergleich unter Beachtung von Gleichung (7) beinhaltet Abschnitt 5.4.

Als **Faustregel** für eine überschlägige Abschätzung des Rasterabstandes in der Praxis bleibt festzuhalten, daß für eine akzeptable Erkennungswahrscheinlichkeit von ca. 80 % ein Rasterabstand erforderlich ist, der etwa dem erwarteten Durchmesser der Kontaminationsfläche entspricht.

Für gestreckte Kontaminationsflächen (Ellipsen) kann die Erkennungswahrscheinlichkeit nicht mehr durch einen einfachen analytischen Ausdruck berechnet werden (Drew, 1967; McCammon, 1977). Durch Simulationsläufe wurde gezeigt, daß sich bei unsymmetrischen Altlastflächen (z. B. Ellipsen) die Erkennungswahrscheinlichkeiten mit zunehmender Streckung signifikant verschlechtern (Ferguson, 1992; Aschenbrenner und Knoblich, 1995; DIN ISO 10381, Teil 5, Entwurf, 1996). In der Erkundungspraxis kann zur Berechnung, zumal vorab die Form der Kontamination nicht bekannt ist, vereinfachend eine kreisrunde Fläche angenommen werden (Aschenbrenner und Knoblich, 1995).

Die alleinige Berechnung der Erkennungswahrscheinlichkeit mit dem in diesem Abschnitt vorgestellten geometrischen Ansatz ist unzureichend, da dieser

- die Möglichkeit mehrerer Altlasten pro Untersuchungsfläche außer acht läßt,
- sich auf eine konkrete Konfiguration (idealisierte kreisförmige Altlast) beschränkt,
- sich auf symmetrische Raster bezieht.

Nachfolgend wird als zweite Möglichkeit ein wahrscheinlichkeitstheoretischer Ansatz vorgestellt. Diesem Ansatz liegt ein Zufallsraster zugrunde.

5.3 Wahrscheinlichkeitstheoretischer Ansatz

In diesem Ansatz wird zur Entwicklung eines analytischen Ausdrucks die kontaminationsverdächtige Fläche als eine Ansammlung von N Probenkörpern verstanden, aus der n einzelne Proben entnommen werden. Die Objektmerkmale sind diskret verteilt und schließen einander aus. Es kann nur das Merkmal „Kontamination ja“ oder das Merkmal „Kontamination nein“ auftreten, differenziert durch einen vorzugebenden Schwellenwert. Dies entspricht dem klassischen Urnenmodell der Stochastik (Abschnitt 2.2), so daß die Regeln der Kombinatorik angewendet werden können.

Aufgrund der getroffenen Annahmen liegt eine Binomialverteilung (Bernoulli-Verteilung) vor. Die Anwendung der Binomialverteilung setzt voraus, daß - bezogen auf das Urnenmodell - der Fall des „Ziehens mit Zurücklegen“ vorliegt. Durch die geringe Anzahl der Proben n im Verhältnis zur Anzahl der Probenkörper N in der Grundgesamtheit $n/N < 0,05$, die im Regelfall vorliegt, ist diese Voraussetzung erfüllt.

Nach der Verteilungsfunktion der Binomialverteilung berechnet sich die Wahrscheinlichkeit, bei Vorhandensein einer einzigen Kontaminationsfläche zumindest auch in einer Probe den Merkmalsträger „Kontamination Ja“ anzutreffen, mit

$$p = \sum_{k=1}^n \binom{n}{k} \cdot q^k \cdot (1-q)^{n-k} \quad (8)$$

wobei n = Anzahl der Proben
k = Anzahl kontaminierter Proben
q = Anteil der Kontamination am Gesamtgrundstück

Die Größe des Eingangsparameters q ist zu Beginn der Erkundung nicht bekannt. Dieser muß aus den Vorkenntnissen abgeschätzt werden. Mit der Binominalverteilung ist es möglich, unabhängig von der Anzahl der Altlastflächen pro Untersuchungsgebiet und der Konfiguration der Altlast die Wahrscheinlichkeit für das Erkennen der Altlast zu berechnen.

In Tabelle 4 sind einige mittels Binomialverteilung berechnete Wahrscheinlichkeiten für das Erkennen einer Kontamination in Abhängigkeit der Anzahl der Sondierungen und des Anteils der Kontaminationsgröße am Gesamtgrundstück dargestellt.

Verschärft man die Voraussetzungen durch Erhöhung der Anzahl der Kontaminationsflächen bei insgesamt gleichem Flächenanteil, wird die Berechnung komplizierter. Die Berechnung mittels Binomialverteilung gemäß Gleichung (8) setzt voraus, daß jede Kontamination zumindest einmal getroffen wird. Diese Bedingung wäre eine praxisferne Modellbeschränkung, da insbesondere bei der praxisrelevanten kleinen Anzahl von Treffern diese sich auf eine Kontaminationsfläche konzentrieren können. Daher muß bei zwei und mehr Kontaminationsflächen pro Untersuchungsfläche zunächst die Erkennungswahrscheinlichkeit mittels Gleichung (8) für jede einzelne Kontaminationsfläche ermittelt und dann mittels Multiplikationssatz die Wahrscheinlichkeit für das gleichzeitige Eintreffen der stochastisch unabhängigen Erkennung aller Kontaminationsflächen berechnet werden.

Auch hier sind einige Zahlen in Tabelle 4 zusammengestellt. Angegeben sind die Wahrscheinlichkeiten bei zwei Kontaminationsflächen mit je gleicher Größe der Einzelfläche (d. h., die Größe der Einzelfläche bleibt gleich, entsprechend verdoppelt sich die Gesamtgröße), und bei zwei Kontaminationsflächen mit je halber Größe der Einzelflächen (d. h. die Gesamtfläche bleibt gleich). Es wird deutlich, daß sich die Wahrscheinlichkeit p beide Flächen zu erkennen, insbesondere bei bereits geringen Wahrscheinlichkeiten des Erkennens einer Fläche (ca. < 70 %) und bei Halbierung der Einzelgrößen, d. h. gleichbleibender Gesamtgröße, drastisch reduziert.

Tab. 4: Erkennungswahrscheinlichkeit bei einer oder zwei Kontaminationen

Anteil der kontaminierten Einzelfläche [%]	Anzahl Sondierungen	Wahrscheinlichkeit der Erkennung bei		
		einer Fläche	zwei Flächen, je in Größe der Einzelfläche nach Spalte 1	zwei Flächen, je halb so groß wie die Einzelfläche nach Spalte 1
20	10	0,89	0,79	0,42
20	20	0,99	0,98	0,77
20	30	1,00	1,00	0,92
10	10	0,65	0,42	0,16
10	20	0,88	0,77	0,41
10	30	0,96	0,92	0,62
5	10	0,40	0,16	0,05
5	20	0,64	0,41	0,16
5	30	0,79	0,62	0,28
1	10	0,10	0,01	0,00
1	20	0,18	0,03	0,01
1	30	0,26	0,07	0,02

Es wird deutlich, daß der Erkundungsaufwand zur Erreichung einer akzeptablen Wahrscheinlichkeit bei kleinen Kontaminationsflächen im Verhältnis zum Untersuchungsgebiet sehr hoch ist. Daraus folgt, daß der Nachweis der Kontaminationsfreiheit mit verhältnismäßigem Aufwand nicht zu führen ist.

Auch dieser Ansatz ist noch unbefriedigend, da die spezifische Effizienz verschiedener Rasterformen (vgl. Abschnitt 7.1.1) nicht berücksichtigt wird. Der Binomialverteilung liegt ein Zufallsraster zugrunde, so daß für systematische Raster die erforderliche Probenanzahl überschätzt wird.

5.4 Vergleich von geometrischem und wahrscheinlichkeitstheoretischem Ansatz

Um einen praktikablen Berechnungsansatz zu erreichen, müssen die Zwischenergebnisse der Abschnitte 5.1 bis 5.3 verglichen und zu einem analytischen Ausdruck zusammengefaßt werden. Die Verdichtung wird nachfolgend dargestellt.

Den Ausgangspunkt dieser Überlegungen bildet eine rechteckige Grundstücksfläche (Kantenlängen L_x und L_y), auf der sich eine als kreisförmig angenommene Kontamination

(Durchmesser d_{HS}) befindet. Mit d_{MV} als Durchmesser der Probenreichweite erhält man, in Analogie zum ersten Fall in Gleichung (5)

$$q = \frac{\pi}{4} \cdot \frac{(d_{HS} + d_{MV})^2}{L_x \cdot L_y} \quad (9)$$

für die Wahrscheinlichkeit q , mittels einer einzigen Probe den „Hot-spot“ zu erkennen. Diese Erkennungswahrscheinlichkeit läßt sich auch in Abhängigkeit von der Fläche des „Hot-spots“

$F_{HS} = \frac{\pi}{4} d_{HS}^2$, der Grundstücksfläche $F_{GS} = L_x \cdot L_y$ und der Mittelungsfläche $F_{MV} = \frac{\pi}{4} d_{MV}^2$ ausdrücken. Dabei ergibt sich

$$q = \frac{F_{HS}}{F_{GS}} \cdot \left(1 + \sqrt{\frac{F_{MV}}{F_{HS}}} \right)^2 \quad (10)$$

Aus Gleichung (10) ist ersichtlich, daß sich die Erkennungswahrscheinlichkeit aus zwei Faktoren zusammensetzt, die sich aus Flächenverhältnissen, also aus geometrischen Zusammenhängen, ergeben. So ist der erste Faktor F_{HS}/F_{GS} gerade der Flächenanteil der Kontamination am Grundstück. Der zweite Faktor beschreibt den Einfluß der Probenahmereichweite. Er nimmt für Proben mit punktförmiger Stützung (z. B. Bodenproben, $F_{MV} = 0$) den Wert 1 an, erhöht sich jedoch bei zunehmendem Mittelungsvolumen (z. B. Bodenluftproben, $F_{MV} > 0$). Dieser zweite Faktor quantifiziert somit, wie die Erkennungswahrscheinlichkeit q bei Zunahme des Mittelungsvolumens anwächst. q wird im folgenden als **„wirksames Flächenverhältnis“** bezeichnet.

Abbildung 11 verdeutlicht das Anwachsen des zweiten Faktors in Gleichung (10) als Funktion des Flächenverhältnisses F_{MV}/F_{HS} . In dieser Graphik quantifizieren die Ordinatenwerte, um welchen Faktor sich die Erkennungswahrscheinlichkeit q bei zunehmender Probenahmereichweite (Mittelungsvolumen) erhöht.

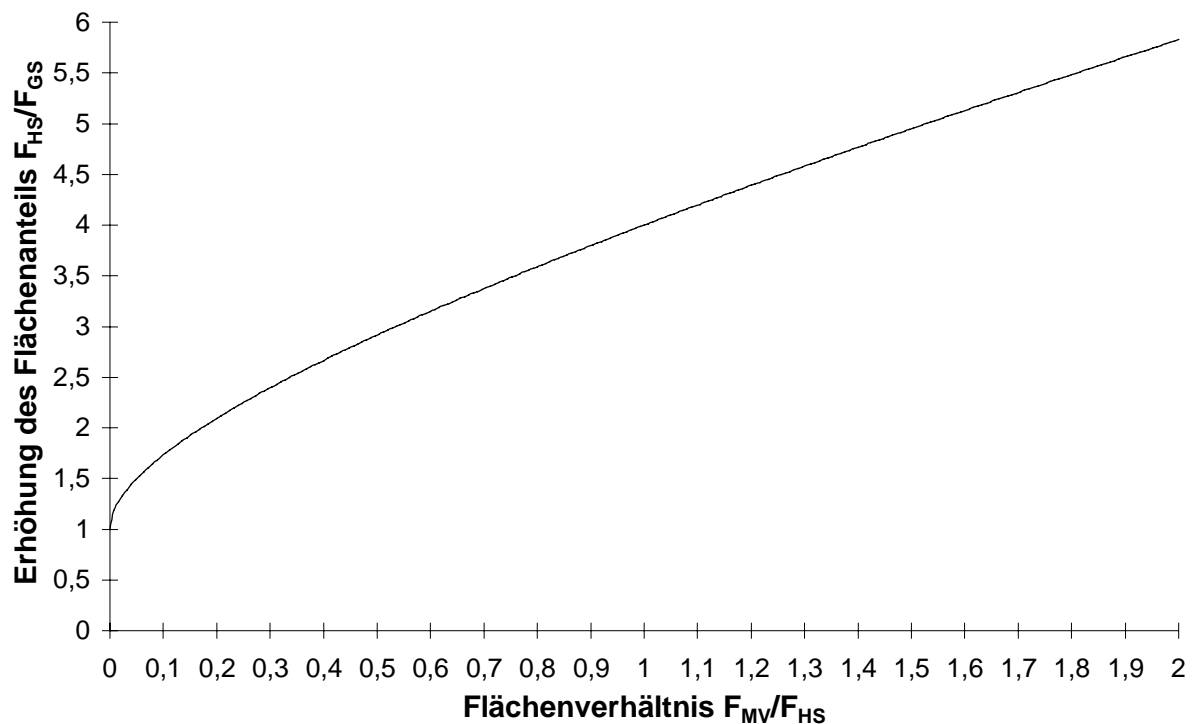


Abb. 11: Einfluß der Probenahmereichweite (Mittelungsvolumen)

Werden mehrere Probenahmestellen zufällig auf dem Grundstück verteilt, so errechnet sich die Erkennungswahrscheinlichkeit für einen „Hot-spot“ mit Hilfe der Binomialverteilung (Abschnitt 5.3). Hierbei ergibt sich

$$\begin{aligned}
 p &= \sum_{k=1}^n \binom{n}{k} \cdot q^k \cdot (1-q)^{n-k} \\
 &= 1 - (1-q)^n \\
 &= 1 - \left[1 - \frac{F_{HS}}{F_{GS}} \cdot \left(1 + \sqrt{\frac{F_{MV}}{F_{HS}}} \right)^2 \right]^n
 \end{aligned} \tag{11}$$

- wobei
- n = Anzahl der Proben
 - k = Anzahl Proben mit Merkmal „Kontamination ja“
 - q = wirksames Flächenverhältnis gemäß Gleichung (10)

Gleichung (11) stellt somit einen Zusammenhang zwischen dem wahrscheinlichkeitstheoretischen Ansatz (Binomialverteilung) und dem geometrischen Ansatz (Flächenverhältnisse) her. Eine graphische Darstellung dieser Beziehung ist in Abbildung 12 wiedergegeben. Demnach wächst die Erkennungswahrscheinlichkeit p sowohl mit dem wirksamen Flächenverhältnis q als auch mit der Probenanzahl n.

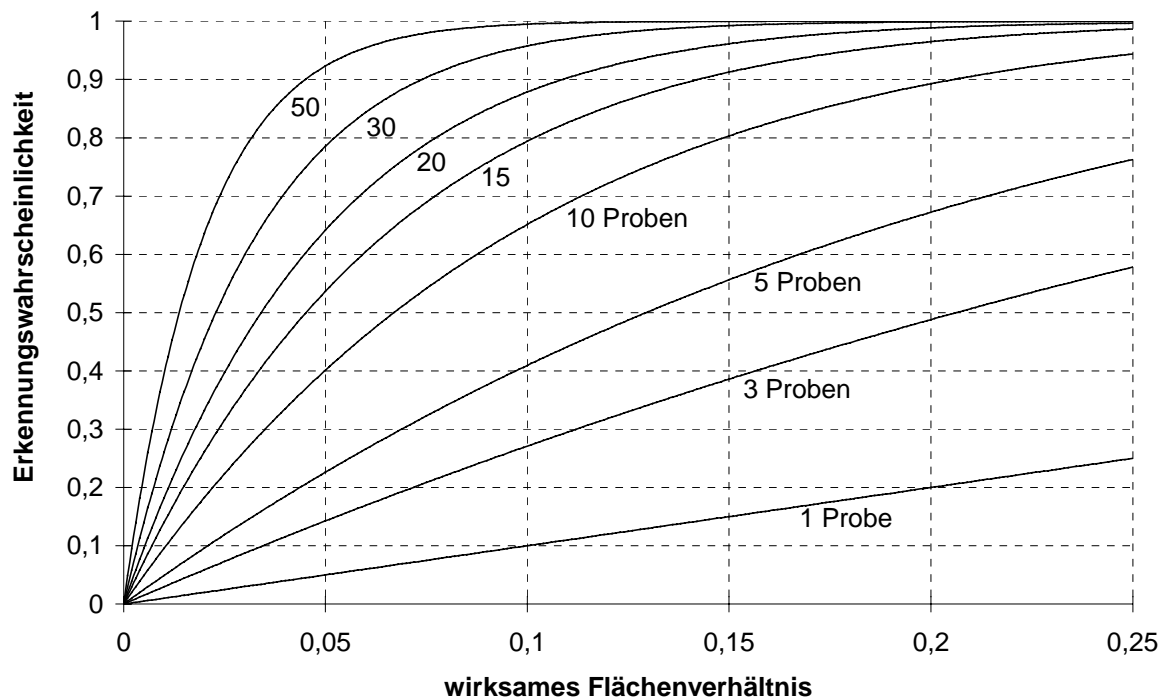


Abb. 12: Erkennen eines „Hot-spots“ bei zufälliger Anordnung der Probenahmepunkte

Sind im Grundstück mehrere „Hot-spots“ (Nr. 1, 2, ..., m) mit ggf. unterschiedlicher Größe vorhanden, dann ergeben sich zunächst aus Gleichung (10) die jeweiligen wirksamen Flächenverhältnisse q_1, q_2, \dots, q_m . Die zugehörigen Erkennungswahrscheinlichkeiten p_1, p_2, \dots, p_m errechnen sich dann unmittelbar aus Gleichung (11). Die Wahrscheinlichkeit, alle m „Hot-spots“ zu erkennen, erhält man mit Hilfe des Multiplikationssatzes für Wahrscheinlichkeiten:

$$p_{\text{alle}} = p_1 \cdot p_2 \cdot \dots \cdot p_m \quad (12)$$

Die Erkennungswahrscheinlichkeit p für einen „Hot-spot“ aus Gleichung (11) läßt sich erhöhen, wenn die Probenahmestellen nicht zufällig, sondern in einem **Raster**, also „systematisch“, angeordnet werden. Dies ist unmittelbar einzusehen, wenn man bedenkt, daß eine Erhöhung der Anzahl systematisch angeordneter Probenahmepunkte dazu führt, daß alle nicht beprobten Teilflächen gleichmäßig abnehmen. Diese Abnahme erfolgt bei einem Zufallsraster hingegen unsystematisch, d. h. es besteht stets ein „Restrisiko“ einer großen, nicht beprobten Teilfläche.

Im folgenden wird die Erkennungswahrscheinlichkeit für eine Kontaminationsfläche bei Verwendung eines Quadrat- bzw. Dreieckrasters miteinander verglichen. Dabei wird vorausgesetzt, daß für beide Rastertypen jeweils dieselbe Anzahl von Probenahmepunkten vorliegt, d. h. der in Gleichung (7) angegebene Zusammenhang wird beachtet. Zum Vergleich wird daher

nachfolgend der bisher verwendete Parameter Rastergröße durch den Parameter Zellenanzahl ersetzt.

Unter dieser Voraussetzung erhält man für ein Quadratraster aus Gleichung (5) die Erkennungswahrscheinlichkeit für einen kreisförmigen „Hot-spot“ in der Form

$$p = \begin{cases} N_{RZ} \cdot q & \text{falls } 0 \leq N_{RZ} \cdot q < \frac{\pi}{4} \\ N_{RZ} \cdot q \cdot \left(1 - \frac{4}{\pi} \arccos \sqrt{\frac{\pi}{4 \cdot N_{RZ} \cdot q}} \right) + \sqrt{\frac{4 \cdot N_{RZ} \cdot q}{\pi} - 1} & \text{falls } \frac{\pi}{4} \leq N_{RZ} \cdot q < \frac{\pi}{2} \\ 1 & \text{falls } N_{RZ} \cdot q \geq \frac{\pi}{2} \end{cases} \quad (13)$$

mit N_{RZ} = Anzahl der Zellen des quadratischen Rasters
 q = wirksames Flächenverhältnis gemäß Gleichung (10)

Abbildung 13 gibt diesen Sachverhalt graphisch wieder, wobei zum Vergleich die Erkennungswahrscheinlichkeiten für zufällig angeordnete Probenahmestellen mit dargestellt sind. Die Überlegenheit des Quadratrasters ist eindeutig zu erkennen.

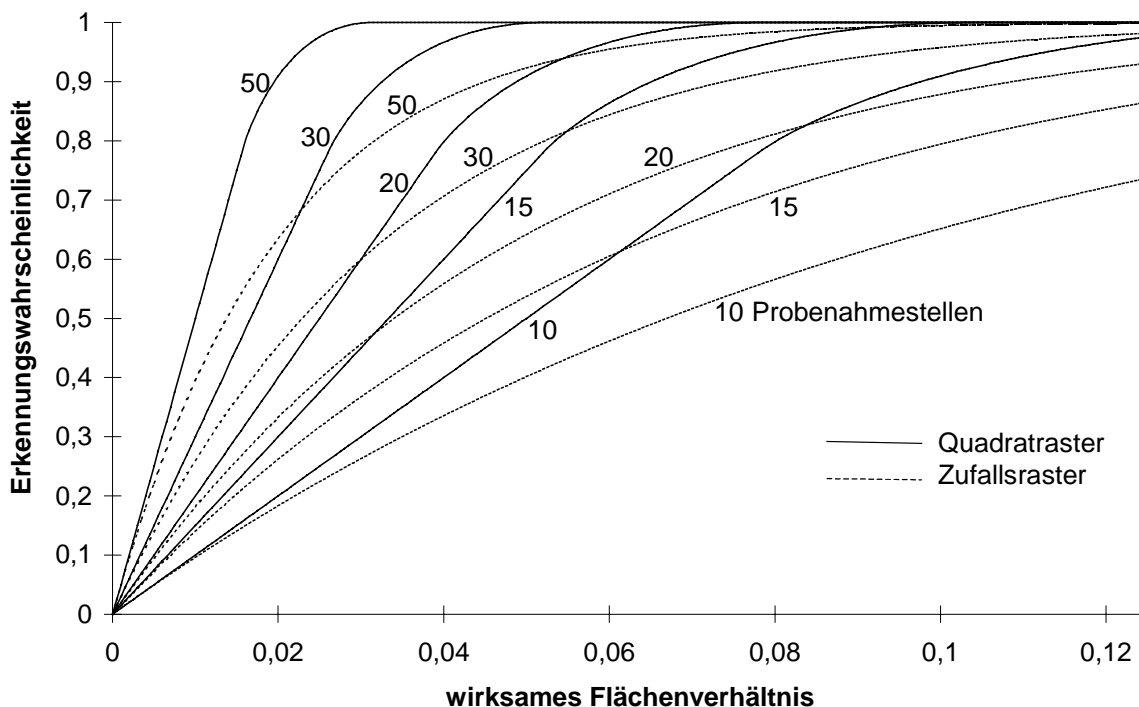


Abb. 13: **Quadratraster vs. zufällige Anordnung der Probenahmepunkte (1 „Hot-spot“)**

Analog erhält man aus Gleichung (6) die Erkennungswahrscheinlichkeit für ein Dreieckraster

$$p = \begin{cases} N_{RZ} \cdot q & \text{falls } 0 \leq N_{RZ} \cdot q < \frac{\sqrt{3} \cdot \pi}{6} \\ N_{RZ} \cdot q \cdot \left(1 - \frac{6}{\pi} \cdot \arccos \sqrt{\frac{\sqrt{3} \cdot \pi}{6 \cdot N_{RZ} \cdot q}} \right) + \sqrt{3} \cdot \sqrt{\frac{2 \cdot \sqrt{3}}{\pi} \cdot N_{RZ} \cdot q - 1} & \text{falls } \frac{\sqrt{3} \cdot \pi}{6} \leq N_{RZ} \cdot q < \frac{2 \cdot \sqrt{3} \cdot \pi}{9} \\ 1 & \text{falls } N_{RZ} \cdot q \geq \frac{2 \cdot \sqrt{3} \cdot \pi}{9} \end{cases} \quad (14)$$

wobei N_{RZ} = Anzahl der Zellen des Dreieckrasters
 q = wirksames Flächenverhältnis gemäß Gleichung (10)

Bei mehreren „Hot-spots“ (Anzahl m) im Grundstück ergeben sich die jeweiligen Erkennungswahrscheinlichkeiten p_1, p_2, \dots, p_m ebenfalls aus Gleichung (13) für das Quadrat- bzw. aus Gleichung (14) für das Dreieckraster, wobei nunmehr die zugehörigen wirksamen Flächenverhältnisse q_1, q_2, \dots, q_m einzusetzen sind. Die Wahrscheinlichkeit, alle m „Hot-spots“ im Grundstück zu erkennen, erhält man dann wiederum mit dem Multiplikationssatz.

Den Fall zweier gleich großer „Hot-spots“ ($m=2$) veranschaulicht Abbildung 14. Auf der Ordinate ist dabei die Wahrscheinlichkeit aufgetragen, beide „Hot-spots“ zu erkennen. Wiederum ist das Quadrat- dem Zufallsraster klar überlegen, allerdings reduzieren sich sämtliche Trefferwahrscheinlichkeiten gegenüber dem Fall $m=1$ (Abbildung 13).

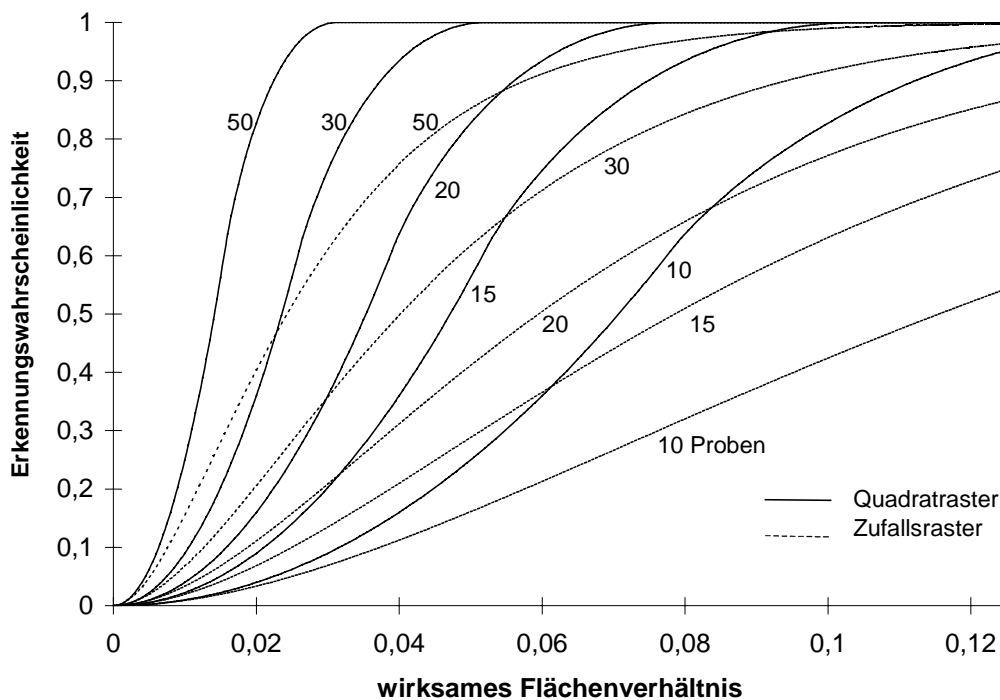


Abb. 14: **Quadratraster vs. zufällige Anordnung der Probenahmepunkte (2 gleich große „Hot-spots“)**

Abschließend vergleicht Abbildung 15 Quadrat- und Dreieckraster für einen bzw. zwei gleich große „Hot-spots“. Die etwas höhere Erkennungswahrscheinlichkeit des Dreieckrasters wird mit einem erhöhten Aufwand bei der Einmessung erkauft. Zudem liegt das Produkt $N_{RZ} \cdot q$ aus Zellenzahl und wirksamem Flächenverhältnis in praktisch relevanten Fällen ohnehin meist im Bereich zwischen 0 und 0,8, in dem beide Rastertypen zu identischen Erkennungswahrscheinlichkeiten führen.

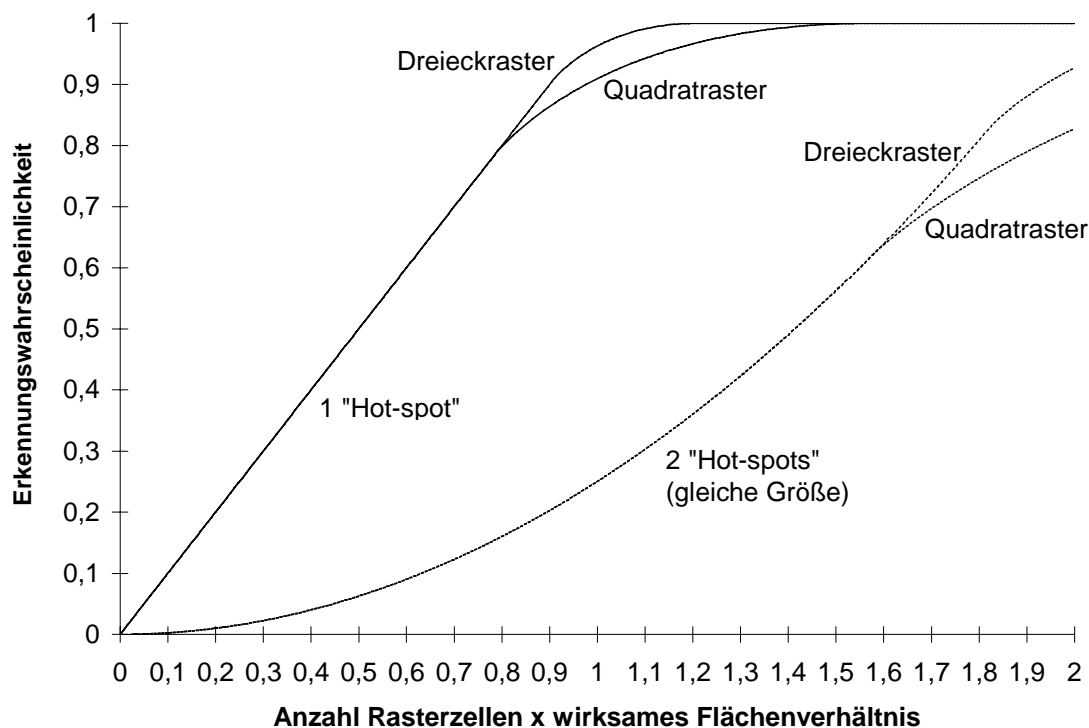


Abb. 15: Vergleich der Erkennungswahrscheinlichkeit für Quadrat- und Dreieckraster sowie einen und zwei „Hot-spots“

Als Zwischenergebnis bleibt festzuhalten, daß

- mit Gleichung (5) auch das Mittelungsvolumen der Probe in die Berechnung einbezogen wird,
- mit Gleichung (11) für Zufallsraster eine Verknüpfung des wahrscheinlichkeitstheoretischen mit dem geometrischen Ansatz erreicht wurde,
- mit Gleichung (13) und Gleichung (14) für geometrische Raster eine Verknüpfung des wahrscheinlichkeitstheoretischen mit dem geometrischen Ansatz erreicht wurde,

- die Erkennungswahrscheinlichkeit für mehrere „Hot-spots“, auch bei unterschiedlichen Größen, über einen einfachen analytischen Ausdruck mittels des Multiplikationssatzes berechnet werden kann,
- die Erkennungswahrscheinlichkeit für mehrere „Hot-spots“ signifikant abnimmt,
- das Zufallsraster gegenüber systematischen Rastern deutlich ineffizienter ist,
- die Effizienz des quadratischen Rasters gegenüber dem Dreieckraster annähernd gleich ist.

Als Anlage 4 ist diesem Bericht eine Diskette beigelegt, auf der sich ein Worksheet (Excel, Version 7.0 für Windows 95) zu Berechnung von Erkennungswahrscheinlichkeiten für Zufalls-, Quadrat- und Dreieckraster befindet.

6 Schätzen von Mittelwert und Streuung der Grundgesamtheit

6.1 Voraussetzungen

Um aus den Analysenwerten auf die Grundgesamtheit zu schließen, müssen drei wichtige Voraussetzungen erfüllt sein:

- keine systematischen Fehler in der Beprobung,
- Normalverteilung der gemessenen Werte bzw. transformierter Werte (z. B. Logarithmen von Konzentrationen),
- abgrenzbare Kontaminationsverdachtsflächen.

Ein Repräsentationsschluß auf die Grundgesamtheit ist nicht möglich, wenn die Meßwerte systematische Fehler enthalten. Dies ist immer bei bevorzugter Festsetzung von Probenahmepunkten in potentiellen Eintragstellen oder bevorzugter Beprobung sensorisch belasteter Bodenprofile der Fall. Da dies gängige Erkundungspraxis ist, ist bei der Datenanalyse große Vorsicht geboten.

Als weitere wichtige Voraussetzung müssen die zu untersuchenden Grundgesamtheiten abgrenzbare Kontaminationsverdachtsflächen sein. Dies bedeutet, daß Flächen mit verschiedenen Schadstofftypen oder räumlich weit getrennte Kontaminationsflächen nicht zu einer Grundgesamtheit zusammengefaßt werden dürfen. Damit wird vermieden, daß ggf. durch die Mittelung eine hohe Schadstoffbelastung in der Fläche unter den Toleranzwert gesenkt wird. Die Forderung nach Abgrenzung der einzelnen Kontaminationsverdachtsflächen führt bei kleinflächigen Altstandorten aufgrund des erforderlichen Stichprobenumfangs zu hohen Erkundungskosten. Nur so ist jedoch eine repräsentative und reproduzierbare Schätzung von der Stichprobe auf die Grundgesamtheit möglich.

Meßdaten aus dem Umweltbereich sind aufgrund der häufigen Werte im unteren Konzentrationsbereich meist linksschief verteilt. Da jedoch viele statistische Verfahren das arithmetische Mittel als Zentralwert und damit eine Normalverteilung voraussetzen, müssen die Daten durch geeignete Transformation, z. B. durch Logarithmieren, einer Normalverteilung angenähert werden. Unter statistisch-theoretischen Gesichtspunkten ist im Umweltbereich aufgrund der Robustheit gegen Abweichungen von der Normalverteilung und der Unempfindlichkeit gegen Ausreißer der Median als Zentralwert dem arithmetischem Mittel vorzuziehen.

Insbesondere bei linksschiefer Verteilung zeigt das arithmetische Mittel gegenüber dem Median zu hohe Werte an. In der weiteren statistischen Bearbeitung zur Berechnung von Streuungswerten führt jedoch der Median, gerade bei kleinen Stichprobenumfängen, zu Problemen.

So umfaßt das Konfidenzintervall des Medians bei einem Stichprobenumfang bis $n = 8$ die Proben 1 bis 7, d. h. nahezu die gesamte Range der Proben. Auch die Berechnung von Stichprobenumfängen und parametrischen Tests beruhen auf dem arithmetischen Mittel. Daher wird in der nachfolgenden Berechnung der Streuungswerte das arithmetische Mittel zugrunde gelegt. Die Werte sind ggf. vorab durch einen vorgeschalteten Ausreißertest, z. B. nach Dixon, und durch einen Kolmogoroff-Smirnov-Test auf Normalverteilung zu überprüfen. Ggf. empfiehlt es sich, die Datei zu logarithmieren, zu stutzen oder zu winsorieren. Beim Stutzen werden Ausreißer ober- bzw. unterhalb eines sinnvollen Schwellenwertes nicht in die Datenauswertung mit einbezogen. Beim Winsorieren werden Ausreißer nach oben bzw. unten nicht vollständig vernachlässigt, sondern durch den größten bzw. kleinsten Meßwert ersetzt, der nicht als Ausreißer eingestuft wird. Die extremen Meßergebnisse werden somit als unzuverlässig betrachtet, der Richtung der Abweichung wird jedoch Bedeutung beigemessen.

6.2 Berechnung

6.2.1 Mittlere Belastung der Grundgesamtheit

Ein Konfidenzintervall für das arithmetische Mittel der Grundgesamtheit läßt sich bei vorgegebenem Vertrauensniveau $1 - \alpha$ wie folgt abschätzen

$$\left[\bar{x} - t \sqrt{\frac{s^2}{n}}; \bar{x} + t \sqrt{\frac{s^2}{n}} \right] \quad (15)$$

mit \bar{x} = arithmetisches Mittel der Stichprobe
 t = $(1-\alpha/2)$ -Quantil der Student'schen t-Verteilung mit $n-1$ Freiheitsgraden
 n = Stichprobenumfang
 s^2 = Schätzung der Varianz der Grundgesamtheit

Vorausgesetzt wird auch hier der Fall des „Ziehens mit Zurücklegen“. Ebenso kann ein Konfidenzintervall für die Standardabweichung berechnet werden.

Die Berechnung soll am *Fallbeispiel* verdeutlicht werden: Für das Areal außerhalb der Verdachtsflächen soll für KW-IR der Mittelwert und das Konfidenzintervall bei einem Vertrauensniveau von 95 % errechnet werden. Für die sechs Werte 50, 10, 90, 20, 40, 10 ergibt sich ein arithmetisches Mittel \bar{x} von 35 mg/kg und eine Varianz s^2 von 950. Aus Tabellenwerken ergibt sich bei $n = 6$ und $1 - \alpha = 95 \%$ ein Quantil t von 2,57. Setzt man diese Werte in Gleichung (15) ein, berechnet sich ein Vertrauensbereich von 35 ± 12 mg/kg. Für die ersten vier Werte errechnet sich ein arithmetisches Mittel \bar{x} von 42 mg/kg und ein Vertrauensbereich

von 42 ± 18 mg/kg, der Vertrauensbereich ist aufgrund des reduzierten Stichprobenumfangs also deutlich größer.

Tab. 5: Berechnung des Vertrauensbereiches für den Mittelwert \bar{x} am Fallbeispiel (FG = Freiheitsgrade)

Meßwerte	Stichproben- umfang	Quantile der t- Verteilung bei n-1 FG und $\alpha = 5 \%$	Mittelwert	Varianz	95%- Vertrauens- bereich
x_i	n	t	\bar{x}	s^2	VB
50, 10, 90, 20, 40, 10	6	2,57	35	950	35 ± 12
50, 10, 90, 20	4	3,18	42	1.292	42 ± 18

Der Vertrauensbereich des Medians würde im Fallbeispiel auf dem 95%-Vertrauensniveau für $n = 4$ Proben nicht berechenbar sein, für $n = 6$ Proben die gesamte Range von 10 bis 90 umfassen.

Durch Umstellung von Gleichung (15) läßt sich nun eine Fallzahlberechnung des für ein vorgegebendes Vertrauensniveau erforderlichen Stichprobenumfangs in Abhängigkeit von der Standardabweichung und des zulässigen Absolutfehlers $\Delta\mu$ durchführen:

$$n \geq \left(\frac{s \cdot z}{\Delta\mu} \right)^2 \quad (16)$$

Statt des Quantils der t-Verteilung muß jetzt der entsprechende z-Wert der Normalverteilung verwendet werden, da t von der Anzahl der Proben bzw. des Freiheitsgrades abhängt und diese vorab nicht bekannt sind. Dies führt bei einem geringen Stichprobenumfang bis ca. $n < 30$ zu einer Unterschätzung der Probenanzahl. Bei Verwendung von t kann die Probenanzahl nur iterativ mit entsprechend höherem Rechenaufwand bestimmt werden.

Die Höhe des tolerierbaren Fehlers und das Konfidenzniveau muß der Bearbeiter vor Beginn der Untersuchung in Abhängigkeit von den Untersuchungszielen und den spezifischen Standortverhältnissen festlegen. Diese Festlegung ist zwangsläufig subjektiv.

Läßt man einen Absolutfehler in Höhe der Standardabweichung zu ($\Delta\mu = s$), so sind bei einem Vertrauensniveau von 95 % mindestens vier Proben erforderlich. Untersuchungen auf Dauerbeobachtungsflächen zeigen, daß Böden bereits für geogene Stoffe eine hohe räumliche

Schadstoffvariabilität erreichen (Schilling, 1994). Für anthropogene Stoffe wie im Altlastbereich werden oft Standardabweichungen von der Größenordnung des Mittelwertes und darüber erreicht (Joneck und Prinz, 1993, 1994). Daher ist ein als tolerabel eingestuftes Absolutfehler in Höhe der Standardabweichung inakzeptabel, insbesondere bei erhöhten Konzentrationen. Bei Absolutfehlern, die kleiner sind als die Standardabweichung, werden jedoch schnell große Stichprobenumfänge erreicht. Hier muß also eine sorgfältige Abwägung zwischen angestrebter Aussagesicherheit und ökonomischem Aufwand erfolgen.

Die Berechnung wird an den o. g. Werten des *Fallbeispiels* (Abschnitt 2.4) verdeutlicht:

Zunächst wird der Absolutfehler $\Delta\mu$ gleich der Standardabweichung $s = 36 \text{ mg/kg}$ gesetzt. Das zum 95%-Vertrauensbereich gehörende Quantil der Standardnormalverteilung beträgt $z = 1,96$. Damit ergibt sich aus Gleichung (16) für den Stichprobenumfang

$$n \geq \left(\frac{36 \times 1,96}{36} \right)^2$$

$$n \geq 1,96^2$$

$$n \geq 4$$

Reduziert man den zulässigen Absolutfehler auf 50 % der Standardabweichung, werden in obigem Beispiel ($\Delta\mu$ jetzt 18 mg/kg) bereits $n = 15$ Proben erforderlich.

Zur Übersicht sind in folgender Tabelle für ein Vertrauensniveau von 95 % einige erforderliche Stichprobenumfänge in Abhängigkeit des tolerierbaren Absolutfehlers dargestellt. Der tolerierbare Absolutfehler wird dazu als Anteil an der Standardabweichung s angegeben. Aus Tabelle 6 läßt sich ablesen, daß für eine Halbierung des tolerierbaren Fehlers etwa eine Vervierfachung der Stichprobenauswahl erforderlich ist.

Tab. 6: Stichprobenumfang als Funktion des tolerierbaren Absolutfehlers

tolerierbarer Fehler	erforderliche Anzahl Stichproben
1,0 s	4
0,8 s	6
0,6 s	11
0,5 s	15
0,25 s	61

Es wird nochmals betont, daß eine Mittelwertbildung und Berechnung des zugehörigen Konfidenzintervalls nur für Flächen sinnvoll ist, die nach Schadstoffart und Eintrag räumlich abgegrenzt sind. Statistisch gesehen entspricht dies der Forderung, daß die Stichproben der gleichen Grundgesamtheit entstammen. Die Überprüfung ist statistisch durch einen vorgeschalteten Test möglich. In Konsequenz führt diese Forderung dazu, daß große Budgets bereitgestellt werden müssen, um Mittelwerte mit für den Nutzer akzeptablen und verwertbaren Konfidenzintervallen zu erhalten.

Für eine Verallgemeinerung von Gleichung (16) in der Praxis ist es sinnvoll, nicht absolute, sondern relative Zahlen zu verwenden, da sowohl die Standardabweichung als auch der Mittelwert in absoluten Zahlen vorab nicht bekannt sind (vgl. Keith et al., 1996). Bei dieser Vorgehensweise werden in Gleichung (16) die Standardabweichung s durch den Variationskoeffizienten $V = s/\mu$ und der tolerierbare Absolutfehler $\Delta\mu$ durch den relativen tolerierbaren Fehler $\Delta\mu_r = \Delta\mu/\mu$ ersetzt. Gleichung (16) verändert sich damit zu

$$n \geq \left(\frac{z \cdot V}{\Delta\mu_r} \right)^2 \quad (17)$$

Der Variationskoeffizient ist abhängig vom jeweiligen Schadstoffparameter, der Art der Probe und der Probenahme sowie der Konzentration. Statistisch ist der Variationskoeffizient als die auf den Mittelwert normierte Standardabweichung definiert.

Mit Gleichung (17) vereinfacht sich zum einen die Abschätzung, da nicht mehr Absolutzahlen, sondern nur noch die Verhältnisse s/μ und $\Delta\mu/\mu$ abgeschätzt werden müssen. Somit kann die Abschätzung auch konsistent und mit geringem Aufwand auf mehrere Analysenparameter erweitert werden. Zum anderen werden damit die Standortverhältnisse besser berücksichtigt, da eine Anpassung des tolerierbaren Fehlers an die Höhe der Konzentration erfolgen kann. So kann der Forderung nach einer auf die Gegebenheiten des Einzelfalls abgestimmte Schadensfallbearbeitung entsprochen werden.

Falls die Annahme einer normalverteilten Grundgesamtheit nicht zutrifft, so sind die Berechnungsvorschriften für das Vertrauensintervall des Mittelwerts und für den Mindestumfang der Stichprobe zu modifizieren. Wie oben erwähnt, führen Konzentrationsmessungen im Umweltbereich häufig zu linksschiefen Verteilungen, die auch näherungsweise nicht mittels einer Normalverteilung dargestellt werden können. In diesem Fall empfiehlt sich eine Transformation der Meßdaten, um mit den transformierten Werten eine Normalverteilung anzunähern, so daß dann die hierfür verfügbaren Berechnungsmethoden angewendet werden können (DIN 53804, 1989; DIN 55303, 1984).

Für linksschiefe Verteilungen gibt Sachs (1993) eine Reihe von Transformationen an, die in Tabelle 7 zusammengestellt sind. Für den Parameter w werden dabei Werte im Bereich $0,4 \leq w \leq 1$ vorgeschlagen.

Tab. 7: Transformation linksschiefer Verteilungen (x) auf Normalverteilung (x')

Transformation	Rücktransformation	häufig verwendete Werte des Parameters w
$x' = \sqrt{x + w}$	$x = (x')^2 - w$	0,375 bzw. 0,4
$x' = \ln(x + w)$	$x = e^{x'} - w$	1
$x' = \frac{1}{\sqrt{x + w}}$	$x = \frac{1}{(x')^2} - w$	0,5
$x' = \frac{1}{x + w}$	$x = \frac{1}{x'} - w$	0,5 bzw. 1
$x' = \frac{1}{(x + w)^2}$	$x = \frac{1}{\sqrt{x'}} - w$	0,5
$x' = \frac{1}{(x + w)^3}$	$x = \frac{1}{\sqrt[3]{x'}} - w$	0,5

Da die Lognormalverteilung (2. Zeile in Tabelle 7) die am häufigsten auftretende linksschiefe Verteilung darstellt, sollen dafür im folgenden das Vertrauensintervall für die Schätzung des Mittelwerts sowie der Mindestumfang der Stichprobe zu einer vorgegebenen Genauigkeit angegeben werden. In Analogie zu Gleichung (15) ergibt sich das Vertrauensintervall für die Schätzung des Mittelwerts der Grundgesamtheit zum Vertrauensniveau $1-\alpha$ nach Sachs (1993) in der Form

$$\left[e^{\bar{x}' - t \sqrt{(s')^2/n}} - w; e^{\bar{x}' + t \sqrt{(s')^2/n}} - w \right] \quad (18)$$

mit \bar{x}' = arithmetisches Mittel der logarithmierten Meßwerte
 $(s')^2$ = Schätzung der Varianz der logarithmierten Meßwerte
 n = Stichprobenumfang
 t = $(1-\alpha/2)$ -Quantil der t-Verteilung mit $n-1$ Freiheitsgraden
 w = Parameterwert aus Tabelle 7 (meist: $w = 1$)

Im Unterschied zu Gleichung (15) ist das Vertrauensintervall in Gleichung (18) asymmetrisch zum Mittelwert \bar{x} der Grundgesamtheit, entsprechend der Linksschiefe der Lognormalverteilung.

Diese Asymmetrie zeigt sich auch bei der Anwendung von Gleichung (18) auf die Daten des *Fallbeispiels*. In Analogie zu Tabelle 7 werden wiederum die KW-IR-Messungen außerhalb der Verdachtsflächen ausgewertet, diesmal jedoch unter der Annahme, daß den Meßwerten eine Lognormalverteilung zugrundeliegt. Die Ergebnisse dieser Berechnungen sind in Tabelle 8 zusammengestellt. Zusätzlich zur Asymmetrie der Vertrauensbereiche um die Mittelwerte 35 mg/kg (bei 6 Meßwerten) bzw. 42 mg/kg (bei 4 Meßwerten) ist für dieses Beispiel zudem festzuhalten, daß die Vertrauensintervalle einen wesentlich größeren Bereich umfassen als dies unter der Annahme der Normalverteilung der Fall ist (Tabelle 7). Nach Sachs (1993) ist diese Zunahme der Intervalllänge für asymmetrische Vertrauensbereiche - wie sie bei einer linksschiefen Verteilung zwangsläufig auftreten - typisch. Im Beispiel wird für 4 Meßstellen die gesamte Range der (Original-)Meßwerte durch das Vertrauensintervall abgedeckt, so daß man für diesen Fall keine praktisch verwertbaren Aussagen über den Vertrauensbereich der Schätzung des Mittelwerts erhält. Eine Verkleinerung des 95%-Vertrauensintervalls - und damit eine Erhöhung der Aussagesicherheit - läßt sich natürlich mit einem erhöhten Stichprobenumfang erreichen, wobei allerdings eine entsprechende Zunahme der Erkundungskosten mit in Betracht zu ziehen ist.

Tab. 8: Berechnung des Vertrauensbereichs für den Mittelwert \bar{x} am Fallbeispiel unter der Annahme lognormalverteilter Meßwerte (FG = Freiheitsgrade, Parameter $w=1$)

logarithmierte Meßwerte	Stichprobenumfang	Quantil der t-Verteilung bei n-1 FG und $\alpha=5\%$	Mittelwert der logarithmierten Meßwerte	Varianz der logarithmierten Meßwerte	95%-Vertrauensbereich
$x'_i = \ln(x_i + 1)$	n	t	\bar{x}'	$(s')^2$	VB
3,93; 2,40; 4,51; 3,04; 3,71; 2,40	6	2,57	3,33	0,74	[13;72]
3,93; 2,40; 4,51; 3,04	4	3,18	3,47	0,87	[6;122]

Gleichung (18) läßt sich verwenden, um den Mindestumfang der Stichprobe n zu errechnen. Dazu ist ein Intervall der Länge $2\Delta\mu$ vorzugeben, in dem der Mittelwert mit einer Sicherheitswahrscheinlichkeit $1-\alpha$ enthalten sein soll. Auch dieses Intervall liegt nicht symmetrisch zum Mittelwert, so daß $\Delta\mu$ hier strenggenommen nicht als Absolutfehler bezeichnet werden kann. Aus Gleichung (18) erhält man die Bedingung

$$n \geq \left[\frac{s \cdot z}{\ln\left(\Delta\mu \cdot e^{-\bar{x}'} + \sqrt{\Delta\mu^2 \cdot e^{-2\bar{x}'} + 1}\right)} \right]^2 \quad (19)$$

Statt des Quantils der t-Verteilung wird hier wiederum das entsprechende Quantil z der Normalverteilung verwendet, um iterative Berechnungsverfahren für n zu vermeiden (vgl. entsprechende Bemerkung nach Gleichung (16)). Weiterhin ist unmittelbar zu erkennen, daß Gleichung (19) eine wesentlich kompliziertere Struktur als die für normalverteilte Meßwerte zu verwendende Gleichung (16) aufweist. Dies führt dazu, daß es für lognormalverteilte Meßdaten keine Möglichkeit aufgefunden werden konnte, um den minimalen Stichprobenumfang auf der Basis relativer, d. h. auf den Mittelwert bezogener Größen (Variationskoeffizient, relativer tolerierbarer Fehler) zu errechnen. Ein Analogon zu Gleichung (17) kann hier also nicht angegeben werden.

6.2.2 Anteil der kontaminierten Fläche in der Grundgesamtheit

Neben dem Schluß auf die mittlere Belastung von Teilflächen kann über eine statistische Auswertung auch der kontaminierte Anteil der Gesamtfläche im Untersuchungsareal ermittelt werden. Im Gegensatz zur Schätzung der mittleren Belastung werden also jetzt nicht einzelne abgrenzbare Teilflächen, sondern die Gesamtfläche betrachtet.

Der Anteil kontaminierter Proben in der Stichprobe dient dabei als Schätzer des kontaminierten Anteils in der Grundgesamtheit. In der Anwendung kann so beispielsweise die Größe der kontaminierten Fläche auch ohne genaue Kenntnis der Konfiguration der Kontamination abgeschätzt und so das Problem der Nichtanwendbarkeit des Kriging relativiert werden. Ebenso können Massenermittlungen zum kontaminierten Aushub durchgeführt werden. Dies klingt bestechend, in der praktischen Anwendung werden jedoch schnell wichtige Voraussetzungen (z. B. zufällige Stichprobe) verletzt oder die weiten Vertrauensgrenzen nicht angegeben und beachtet.

Das Konfidenzintervall für den Flächenanteil der Kontamination in der Grundgesamtheit soll aus Vereinfachungsgründen zunächst mit der **Normalverteilung** berechnet werden. Dabei ergibt sich

$$\left[p - z \cdot \sqrt{\frac{p(1-p)}{n}} ; p + z \cdot \sqrt{\frac{p(1-p)}{n}} \right] \quad (20)$$

mit p = Anteil der Kontamination in der Stichprobe
 n = Anzahl der Proben
 z = $(1-\alpha/2)$ -Quantil der Standardnormalverteilung

Analog zu Gleichung (17) kann auch hier durch Umstellung der Gleichung (20) der erforderliche Stichprobenumfang berechnet werden:

$$n \geq \frac{z^2 p(1-p)}{\Delta p^2} \quad (21)$$

mit Δp = tolerierbarer Absolutfehler für den Flächenanteil der Kontamination

Die für binäre Merkmale zugrundeliegende Wahrscheinlichkeitsverteilung ist jedoch die **Binomialverteilung** bzw. bei großer Anzahl von Versuchen und kleinen Wahrscheinlichkeiten die Poisson-Verteilung als Grenzfall der Binomialverteilung. Die Binomialverteilung kann durch die Normalverteilung nur unter der Voraussetzung approximiert werden, daß

$$n p(1-p) \geq 9 \quad (22)$$

gilt. Dies erfordert bei einem Anteil kontaminierter Fläche von 10 % ca. 100 Proben, bei einem kontaminierten Flächenanteil von 20 % immer noch 57 Proben. Daher wird als Regelfall die Binomialverteilung zugrunde gelegt werden müssen.

Das Konfidenzintervall berechnet sich dann gemäß

$$\left[\frac{k}{k + (n-k+1) F_{2(n-k+1);2k}} ; \frac{(k+1) F_{2(k+1);2(n-k)}}{n-k + (k-1) F_{2(k+1);2(n-k)}} \right] \quad (23)$$

mit k = Anzahl der kontaminierten Proben in der Stichprobe
 F = $(1-\alpha/2)$ -Quantil der F-Verteilung mit den in der Formel jeweils angegebenen Freiheitsgraden

Clopper und Pearson haben ein Nomogramm zur Schnellschätzung entwickelt, das statistischer Literatur, z. B. Sachs (1997) oder DIN 53804, Teil 1 bis Teil 4 (1989) entnommen werden kann. Hier wird auch die geringe praktische Relevanz des Schätzens des kontaminierten Anteils in der Grundgesamtheit aus der Stichprobe deutlich. Für realistische Anteile kontaminierter Flächen von 10 % bis 20 % und einem tolerierbaren relativen Fehler von 100 %, d. h.

einem tolerierbaren Absolutfehler von 10 % bzw. 20 %, ist eine hohe Anzahl von Stichproben erforderlich. Die Schätzung des Anteils bleibt bei sachgemäßer Anwendung deshalb auf große kontaminierte Flächen beschränkt. In folgender Tabelle sind ausgewählte Stichprobenumfänge für eine Sicherheitswahrscheinlichkeit $1 - \alpha$ von 95 % und ein Zufallsraster dargestellt.

Tab. 9: Stichprobenumfang und Konfidenzintervall bei Anteilsschätzung

Stichprobe		Grundgesamtheit	
kont. Anteil [%]	Anzahl der Stichproben	kont. Anteil [%]	Konfidenzintervall [%]
5	10	5	0 bis 59
5	20	5	0 bis 25
5	30	5	1 bis 15
10	10	10	0 bis 45
10	20	10	1 bis 32
10	30	10	4 bis 22
20	10	20	0,5 bis 44
20	20	20	6 bis 39
20	30	20	10 bis 34

Aus Tabelle 7 wird neben dem unakzeptabel hohen Vertrauensbereich für kleine Anteile kontaminierter Flächen auch deutlich, daß die Konfidenzintervalle stark unsymmetrisch sind. Erst ab einem kontaminierten Flächenanteil von ca. 50 % werden die Vertrauensgrenzen symmetrisch.

7 Umsetzung in kostenoptimierte Erkundungsstrategien

7.1 Statistisch optimierte Probenahmeverfahren

7.1.1 Effiziente Rasterformen

Bei unbekanntem Eintragstellen muß eine rasterförmige Erkundung erfolgen (vgl. Abschnitte 5.2 und 5.4). Dazu gibt es in der Literatur eine Vielzahl von Vorschlägen und Empfehlungen zur Rasterform:

- Zufall (frei, eingeschränkt),
- symmetrisch (zentriert, Rechteck, Quadrat, diverse Dreieckraster),
- linear (Zick-Zack, X, W, diagonal).

Der Einsatz statistischer Verfahren setzt grundsätzlich eine zufällige Entnahme von Stichproben aus der Grundgesamtheit voraus. Unter streng theoretischen Gesichtspunkten ist daher sowohl für das Erkundungsziel „Erkennen der Kontamination“ als auch für das Erkundungsziel „Ermittlung der mittleren Belastung“ zunächst ein streng **zufälliges Raster** zu fordern. Die Umsetzung ist jedoch bereits durch örtliche Gegebenheiten beschränkt (unterirdische Leitungen, tiefe Fundamente u. ä.). Im Extremfall können zwei Aufschlüsse direkt nebeneinander liegen. Die massive Ungleichverteilung kann durch eine Begrenzung der Zufallsauswahl innerhalb vorgegebener Parzellen reduziert werden (sog. eingeschränkte Auswahl bzw. stratified random sampling).

Die Auswahl der Rasterform ist entscheidend durch eine hohe Trefferwahrscheinlichkeit bei einer gegebenen Anzahl von Punkten (Maximumprinzip) bzw. durch eine bestimmte Trefferwahrscheinlichkeit bei einer geringstmöglichen Anzahl von Punkten (Minimumprinzip) geprägt. Daneben sind weitere Kriterien, wie Einmeßaufwand, Einfluß von Abweichungen und vor allem auch Möglichkeit der Nachverdichtung, zu beachten.

Die Effizienz der Rasterform bestimmt sich durch die Minimierung der größten, nicht beprobten Teilfläche (Nothbaum et al., 1994). Dieses Ziel erreichen nur Raster hoher Symmetrie. Im **Quadratraster** (Seitenlänge a) bestimmt sich der Radius des Inkreises, d. h. der nicht beprobten Fläche zu

$$r = \frac{a}{2} \cdot \sqrt{2} \quad (24)$$

Im **gleichseitigen Dreieck** (Seitenlänge b) bestimmt sich der Radius des Inkreises bzw. der nicht beprobten Teilfläche zu

$$r = \frac{b}{3} \cdot \sqrt{3} \quad (25)$$

Er ist also geringfügig (Faktor ca. 0,82) kleiner als im Quadratraster, jedoch ist das Dreieckraster im Gelände schwieriger festzulegen.

Im Entwurf der ISO 10381 –5, Stand 10/96 ist, zurückgehend auf frühere Veröffentlichungen von Ferguson (1992), das „**Herringbone**“-**Raster** (basierend auf rechtwinkligen Dreiecken) in Computersimulationen unter bestimmten Annahmen als effizientestes Raster herausgestellt. Die Effizienz ist durch die Versetzung der linearen Ausrichtung bedingt, so daß gestreckte Körper besser erkannt werden. Dieses Raster ist jedoch zum einen schwierig einzumessen, zum anderen schwierig zu verdichten, so daß auch im u. a. auf Ferguson aufbauenden ISO-Normentwurf lediglich „regular pattern“ empfohlen werden.

Alle anderen Rasterformen sind suboptimal. Das gilt insbesondere für das unter theoretisch-statistischen Erwägungen zu bevorzugende Zufallsraster, selbst bei eingeschränkter Auswahl.

Nähere Ausführungen und Berechnungen zur Effizienz der Rasterformen wurden bereits in Abschnitt 5.4 behandelt.

Als **Ergebnis** ist das Quadratraster als effiziente Rasterform bei gleichzeitig einfachem Handling für Einmessung und Nachverdichtung im Regelfall zu bevorzugen.

Neben zweidimensionalen Rastern sind auch **dreidimensionale Raster** im Einzelfall zu berücksichtigen, wobei die gleichen Überlegungen gelten. Im Regelfall wird sich die Beprobung in vertikaler Richtung jedoch am Bohrprofil, d. h. an Bodenhorizonten und sensorischen Auffälligkeiten, orientieren.

7.1.2 Einfluß der Stützung auf die Erkennungswahrscheinlichkeit

Die Wahrscheinlichkeit für das Erkennen von Kontaminationen verbessert sich bei einem hohen Mittelungsvolumen (Stützung) der Probe. Gleichzeitig reduziert eine große Stützung auch maßgeblich die Standardabweichung des arithmetischen Mittels, da die räumliche Variabilität reduziert wird. Das Erreichen der Erkundungsziele wird also unter statistischen Gesichtspunkten durch eine große Stützung der Proben verbessert.

Der Einfluß der Stützung auf die Erkennungswahrscheinlichkeit wurde bereits in Abschnitt 5.2 hergeleitet. Der Quotient d_{HS}/a wird zur Berücksichtigung des Mittelungsvolumens der Probe im Zähler zum Term $\frac{d_{HS} + d_{MV}}{a}$ erweitert. Wegen

$$\frac{d_{HS} + d_{MV}}{a} = \frac{d_{HS}}{a} \left(1 + \frac{d_{MV}}{d_{HS}} \right) \quad (26)$$

ist der Einfluß der Stützung - bei konstantem Quotienten d_{HS}/a - damit vom Größenverhältnis aus Probenreichweite (Mittelungsvolumen) und Durchmesser der kontaminierten Fläche abhängig.

Unter Zugrundelegung realistischer „Hot-spot“-Größen > 5 m Durchmesser wird deutlich, daß größere Stütungen der **Bodenproben** durch Vergrößerungen der Bohrdurchmesser trotz der damit verbundenen höheren Bohrkosten nur marginale Verbesserungen der Erkennungswahrscheinlichkeiten bringen. Diese sind vernachlässigbar.

Ein signifikanter Einfluß ist nur bei **Bodenluftproben** erreichbar. Das Mittelungsvolumen der Bodenluftproben bei aktiver Probenahme ist abhängig vom abgesaugten Luftvolumen, das neben den beeinflussbaren Parametern Zeitdauer der Probenahme und Durchfluß pro Zeiteinheit entscheidend von der Bodenart (Permeabilität, Tortuosität, Nutzporosität) abhängt.

In folgender Tabelle sind einige Werte zur Verbesserung der Erkennungswahrscheinlichkeit bei erhöhtem Mittelungsvolumen der Proben dargestellt.

Tab. 10: Erkennungswahrscheinlichkeiten in Abhängigkeit der Stützung

Durchmesser „Hot-spot“ [m]	Durchmesser Probenreichweite [m]	Rasterabstand [m]	Erkennungswahrscheinlichkeit [%]
5	0,01	10	20
	0,5		24
	1		28
	2		38
10	0,01	15	35
	0,5		38
	1		42
	2		50
20	0,01	30	35
	0,5		37
	1		38
	2		42

Zu berücksichtigen ist der Verdünnungseffekt bei zu großer Stützung der Proben. Dies begrenzt eine zu große Ausdehnung des Mittelungsvolumens. Hier muß einzelfallbezogen eine Abwägung getroffen werden. Ggf. müssen im ersten Erkundungsschritt die Schwellenwerte, ab der ein Bereich als verunreinigt zugeordnet wird, abgesenkt werden.

Neben der aktiven Probenahme sind auch passive Verfahren durch im Boden temporär installierte Sammler möglich. Das Mittelungsvolumen ist hier im wesentlichen nur von Bodenparametern (Permeabilität) abhängig. Bzgl. der quantitativen Bestimmung des Mittelungsvolumens bei der angesprochenen Probenahmetechnik besteht allerdings noch Forschungsbedarf. Insbesondere ist die Frage zu untersuchen, wie die zeitliche Mittelung über Stoffkonzentrationen, die durch die Passiv-Sammler vorgenommen wird, in ein Mittelungsvolumen umgerechnet werden kann. Von Interesse sind hierbei vor allem Untersuchungen bzgl. instationärem Schadstofftransport mit u. U. unregelmäßig schwankenden Konzentrationswerten.

Als Ergebnis bleibt festzuhalten:

- Eine Verbesserung der Erkennungswahrscheinlichkeit bei Bodenproben durch größere Bohrdurchmesser ist nicht signifikant und im Verhältnis zu den höheren Bohrkosten unverhältnismäßig. Damit bleibt das Verfahren auf leichtflüchtige Schadstoffe und die dadurch mögliche Bodenluftprobenahme beschränkt.
- Bodenluftproben können in Abhängigkeit des gewählten Probenahmeverfahrens und der Bodenart signifikant bessere Erkennungswahrscheinlichkeiten bringen. Der Aufwand zur Erreichung höherer Mittelungsvolumen der Bodenluftproben ist gering, die Effizienz damit insgesamt groß. Einer kritischen Überprüfung bedürfen in diesem Zusammenhang Probenahmeverfahren ohne Absaugung der Bodenluft (z. B. Verfahren nach Neumayr, vgl. VDI 3865, 1992).

7.2 Group Testing

7.2.1 Grundlagen

Im Rahmen der Optimierung von Probeplänen ist mit der Zielsetzung der Senkung von Analysekosten und Varianz der Meßwerte die Bildung von Mischproben zu prüfen. Bei der Bildung von Mischproben ist zunächst streng zu prüfen, ob die Voraussetzungen dafür vorliegen.

Die Mischprobenbildung ist ausgeschlossen bei

- leichtflüchtigen Schadstoffen, wobei die Grenzen fließend sind (Naphthalin, Alkane_{<C10}),
- ungleichartigen oder inhomogenen Probenmaterial (Korngröße, C_{org}, Schadstoffphase),
- Schadstoffen, deren „Grenzwert“ bei oder gering über der Nachweisgrenze liegt. Die durch die Mischprobenbildung zwangsläufige Verdünnung kann dann zu Werten unterhalb der Nachweisgrenze führen, obwohl in einer Einzelprobe der Grenzwert überschritten ist (falsch negatives Ergebnis).

Zur Entscheidung über eine Mischprobenbildung müssen den Einsparungen von Analysekosten die Mehrkosten für die sachgemäße Herstellung der Mischproben und den Aufwand für deren Auswertung, der zeitliche Mehrbedarf sowie der Informationsverlust (Varianz der Mischprobe und Konzentration der Einzelproben bleiben unbekannt) gegenübergestellt werden.

Grundsätzlich sind bei Mischprobenkonzepten wiederum die zwei Zielstellungen

- Erkennen einer Kontamination,
- Schätzung eines Zentralwertes (Höhe der Konzentration) und der Streuung der Grundgesamtheit

zu unterscheiden. Einschlägige Richtlinien in der Bundesrepublik (z. B. LAGA, 1991; Bayerisches Geologisches Landesamt, 1992; Umweltministerium Baden-Württemberg, 1993) beziehen sich auf die Zielstellung „Schätzen der Konzentration der Grundgesamtheit“. Das Vorgehen orientiert sich an der in Abschnitt 6.2.1 dargestellten Standardabweichung der Proben.

Nachfolgend wird daher das Mischprobenkonzept im Rahmen der Zielstellung „Erkennen der Kontamination“ dargestellt. Die Mischprobe bezeichnet dabei eine horizontale Probe aus dem gleichen Horizont mehrerer Einzelaufschlüsse.

7.2.2 Vorgehensweise

Durch die Prüfung in Gruppen (Group Testing) soll die Anzahl der Analysen von nicht belasteten Bodenproben reduziert, die Kontamination jedoch trotzdem sicher erkannt werden. Das Verfahren wurde von den USA bereits im 2. Weltkrieg zur Senkung der Analysekosten von Blutproben, die an jedem Eingezogenen untersucht wurden, erfolgreich eingesetzt (Gar-

ner et al., 1996; Sachs, 1997). Im Gegensatz zu Blutproben werden bei Bodenproben jedoch nicht binäre, sondern stetige Merkmale (Konzentrationen) untersucht.

Das Group Testing untersucht zunächst nur eine bestimmte Anzahl von Einzelproben, die zu einer Mischprobe zusammengefaßt sind. Nur wenn die Konzentration einen festzulegenden kritischen Wert übersteigt, werden die Einzelproben nachanalysiert. Als Nebeneffekt dieses Prinzips wird auch die Anzahl falsch positiver Analysen reduziert. Die Nachanalyse kann zur Maximierung der Kosteneinsparung sequentiell erfolgen, dies ist jedoch wenig praktikabel.

Wesentlich zur Anwendung des Group Testing ist also, daß vorher

- die Anzahl der eine Mischprobe bildenden Einzelproben und
- die Höhe des Schwellenwertes

festgelegt werden.

Die Herleitung der optimalen Anzahl der zur Mischprobe zusammengefaßten Einzelproben haben Bunge und Bunge (1997) dargestellt. Die **optimale Probenzahl** wird demnach vom prozentualen Variationskoeffizient V , definiert als

$$V = \frac{s}{\mu} \times 100 \quad (27)$$

und vom Verhältnis Grenzwert C_G zu Konzentration der Mischprobe C_M bestimmt. Wesentlich ist das letztgenannte Verhältnis. Je geringer die Konzentration der Mischprobe, desto mehr Einzelproben wurden zu einer Mischprobe zusammengefaßt. Praktisch relevant ist der Bereich $C_G/C_M = 2$ bis 8 , indem entsprechend zwei bis vier Einzelproben zusammengefaßt werden. Die Kostenersparnis erreicht dann ca. 25% bis 70% . Eine größere Anzahl Einzelproben führt zumindest bei den im Altlastbereich als Quasistandard durchgesetzten Rammkernsondierungen zu signifikant höheren Kosten der Probenahme, denen jedoch nur noch eine moderate Senkung der Analysekosten gegenübersteht. Im Rahmen einer vom BMBF geförder-ten Studie in Osnabrück hat sich eine Bildung von sechs oder vier Einzelproben zu einer Mischprobe als vorteilhaft erwiesen (IfUA, 1997).

Die Anzahl n der Einzelproben wird unabhängig von den Kosten begrenzt durch das Verhältnis

$$n \leq \frac{C_G}{C_{NWG}} \quad (28)$$

mit C_G = Konzentration des Grenzwertes
 C_{NWG} = Nachweisgrenze

um eine Grenzwertüberschreitung in Einzelproben sicher zu erkennen.

Zur Festlegung der **Höhe des Schwellenwertes**, unterhalb dessen eine Kontamination der Einzelproben unwahrscheinlich ist, muß die Hintergrundbelastung und der maßgebende „Grenzwert“ einfließen. Die Berechnung erfolgt dann in Anlehnung an Gerdts (1996) gemäß folgender Gleichung

$$C_S = \frac{(n-1) \times C_{HG} + C_G}{n} \quad (29)$$

mit C_S = Konzentration des Schwellenwertes
 C_{HG} = Konzentration des Hintergrundwertes
 n = Anzahl der Einzelproben

Liegen Schadstoffe mit Hintergrundwerten im Bereich der Nachweisgrenze vor, vereinfacht sich Gleichung (29) zu

$$C_S = \frac{C_G}{n} \quad (30)$$

Diese Gleichung ist auch anzuwenden, wenn sicher ausgeschlossen werden soll, daß die Überschreitung eines Grenzwertes in der Einzelprobe nicht erkannt wird (vgl. Garner et al., 1996).

Die praktische Anwendung von Mischproben in der Erkundung von Kontaminationen ist trotz der bestehenden Kostenvorteile sehr begrenzt.

Dies hat im wesentlichen folgende Ursachen:

- Die Voraussetzung der Anwendung ist in vielen Fällen eben nicht gegeben. Dies betrifft insbesondere die Ausgasung von leichtflüchtigen Schadstoffgruppen (z. B. LCKW) oder bestimmter Einzelsubstanzen von Schadstoffgruppen (z. B. Naphthalin), was zu Minderbefunden bzw. Chromatographieeffekten führt. Auch heterogenes Probenmaterial ist im Altlastbereich oft anzutreffen (Auffüllung).
- Mischproben erfordern eine bestimmte Probenmenge, um einerseits eine repräsentative Mischprobe zu bilden, andererseits jedoch auch genügend Probenmaterial für Analysen der Einzelprobe zurückhalten zu können. Das Problem verschärft sich bei mehreren Parametern oder der Erfordernis von Feststoff- und Eluatproben. Diese Probenmenge steht aus Rammkernsondierungen mit Durchmesser 36 mm bis 50 mm, wie in der Altlasterkundung eingesetzt, nicht zur Verfügung.
- Mischproben erfordern eine sehr sorgfältige Homogenisierung und Teilung der Proben.

- Mischproben führen zu Informationsverlusten, da Streuungsparameter und die räumliche Verteilung der Einzelwerte zumindest im ersten Analyseschritt unbekannt bleiben.

Mischproben werden in der Altlasterkundung als Regelfall nicht empfohlen bzw. bleiben auf spezielle Anwendungen (z. B. oberflächennahe Untersuchung von Schwermetallen, d. h. also ein Schadstoff, große Probenmenge, schwerflüchtig) begrenzt. In der umfangreichen o. g. BMBF-Studie (IfUA, 1997) wurden unter dem Erkundungsziel „Erkennen der Kontamination“ als Beispiel die untersuchten Schwermetalle als grundsätzlich geeignet, PAK dagegen als ungeeignet für eine Mischprobenbildung eingestuft.

Sinnvoll erscheint eine Mischprobenbildung für die Zuordnung von Aushub- und Haufwerksbeprobungen.

7.3 Sensitivität der Erkundungskosten in Abhängigkeit von der Aussagesicherheit

7.3.1 Erkundungsziel „Erkennen der Kontamination“

Wie in anderen wirtschaftlichen Bereichen wirkt auch im Bereich der Erkundung das Gesetz des abnehmenden Grenznutzens. Je höher das Informationsniveau bereits ist, desto geringer wird trotz weiter steigender Kosten der Informationszuwachs (Grenznutzen der letzten Kosteneinheit) sein.

Unter Beachtung dieser Gesetzmäßigkeit muß die geforderte Aussagesicherheit sorgfältig gegen die entstehenden Erkundungskosten abgewogen werden. Als Kriterien zur Festlegung der Aussagesicherheit sind unter öffentlich-rechtlichen Aspekten

- das Gefährdungspotential der nicht erkannten Kontamination für Schutzgüter,
- die Sensibilität der Schutzgüter

maßgeblich. Bei Erkundung unter privatwirtschaftlichen Gesichtspunkten, die im wesentlichen bei geplanter Bebauung oder Transfers erfolgt, ist zur Festlegung der Aussagesicherheit das Kostenrisiko bei Nichterkennung der Kontamination wesentlich.

In Abbildung 16 ist auf der Grundlage von Gleichung (13) die Kostensensitivität in Abhängigkeit der geforderten Aussagesicherheit jeweils für verschiedene Kontaminationsgrößen von 1 % bis 10 % des Untersuchungsgebietes dargestellt. Die Kosten sind dabei über die Anzahl

der Rasterzellen bestimmt, wobei in erster Näherung ein linearer Zusammenhang unterstellt wird (variable Kosten der Beprobung und Analytik).

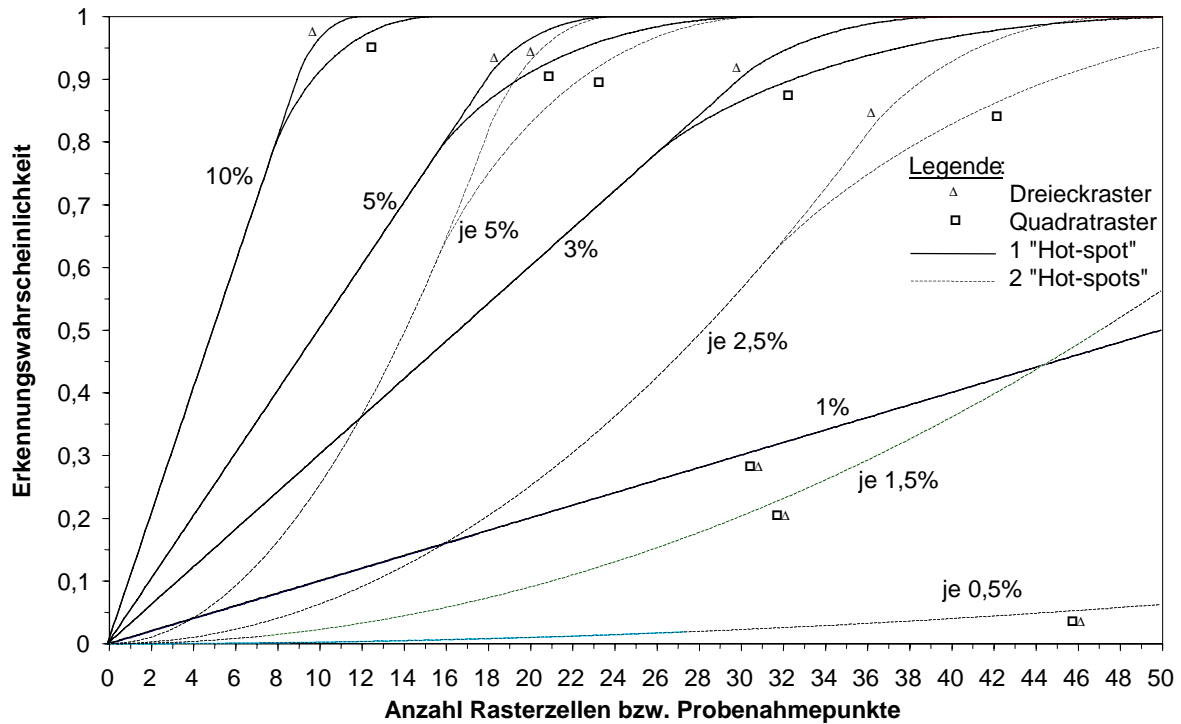


Abb. 16: Kostensensitivität für das Erkennen von „Hot-spots“

Die Kurven zeigen folgende grundsätzliche Tendenzen:

- Bei kleiner Probenanzahl bzw. Wahrscheinlichkeit ergibt sich zunächst ein deutlicher linearer Anstieg, der mit steigender Probenzahl zunehmend abflacht.
- Der Anstieg im linearen Bereich ist abhängig von der Größe des „Hot-spots“. Je größer die kontaminierte Fläche, desto steiler der Anstieg.
- Der Beginn der signifikanten Kurvenverflachung ist abhängig von der Größe der „Hot-spots“ (hier normiert auf die Grundstücksgröße). Je größer die kontaminierte Fläche, desto eher beginnt die Verflachung der Kurve.

Deutlich wird, daß sich der Kurvenverlauf für Flächenanteile der Kontamination der Grundstücksfläche von über 5 % bereits ab einer Probenanzahl von n ca. 15 deutlich abflacht. Bei einer Probenanzahl von n ca. 20 wird bereits eine Erkennungswahrscheinlichkeit von 90 % erreicht.

Bei sehr kleinen Kontaminationsanteilen, dargestellt sind 1 %, ergibt sich bis $n = 50$ ein linearer Anstieg, wobei die Erkennungswahrscheinlichkeit mit 50 % auch bei $n = 50$ nur gering ist.

Aus den Kurvenverläufen der Kostensensitivität lassen sich folgende Empfehlungen zur kostenoptimalen Erkundungsstrategie ableiten:

- Im Bereich des linearen Kurvenanstiegs besteht eine akzeptable Kostensensitivität. Der Zunahme der Erkundungskosten stehen deutliche Verbesserungen der Erkennungswahrscheinlichkeit und damit Reduzierungen der Fehlerkosten gegenüber.
- Im Bereich der Kurvenverflachung wird die Zunahme der Erkennungswahrscheinlichkeit mit überproportional steigenden Grenzkosten erkaufte. Hier muß der Entscheidungsträger eine sehr sorgfältige Abwägung treffen. Dies gilt insbesondere bei sehr kleinen Altlastflächen ($< 5\%$) und bei Vorliegen mehrerer Altlasten.

Zusammenfassend ist festzustellen, daß

- für den Erkundungsaufwand die Größe der Altlast eine entscheidende Rolle spielt und im Vorfeld möglichst genau abgeschätzt werden sollte oder tolerierbare, nicht erkannte Kontaminationsgrößen zu definieren sind,
- bei Übergang vom linearen in den degressiven Kurvenanstieg marginal höhere Aussagesicherheiten mit hohen Grenzkosten erkaufte werden,
- bis zu zwei Altlastflächen mit je $> 5\%$ Anteil an der Grundstücksfläche bereits mit ca. 30 Proben ausgeschlossen werden können,
- die Feststellung der „Kontaminationsfreiheit“ mit verhältnismäßigem Aufwand nicht zu erreichen ist.

7.3.2 Erkundungsziel „Ermittlung von Mittelwert und Streuung der Grundgesamtheit“

Wird eine Stichprobe zur Schätzung von Mittelwert und Streuung der Grundgesamtheit herangezogen, dann soll eine möglichst geringe Abweichung von den wahren Parameterwerten erreicht werden. Bezogen auf das arithmetische Mittel wird der Standardfehler s_μ des Mittelwertes gemäß Gleichung (15) bei vorgegebenem Vertrauensniveau mit

$$s_\mu = \frac{s}{\sqrt{n}} \quad (31)$$

bestimmt. Der Standardfehler reduziert sich also mit abnehmender Standardabweichung s und steigendem Stichprobenumfang n . Da der Stichprobenumfang jedoch nur mit seiner Wurzel

eingeht, nimmt auch schon bei geringer Probenanzahl die Aussagefähigkeit nicht mehr signifikant zu.

Diese Abhängigkeit wird in Abbildung 17 graphisch verdeutlicht. Dargestellt ist die Reduzierung des Standardfehlers in Abhängigkeit des Beprobungsumfangs.

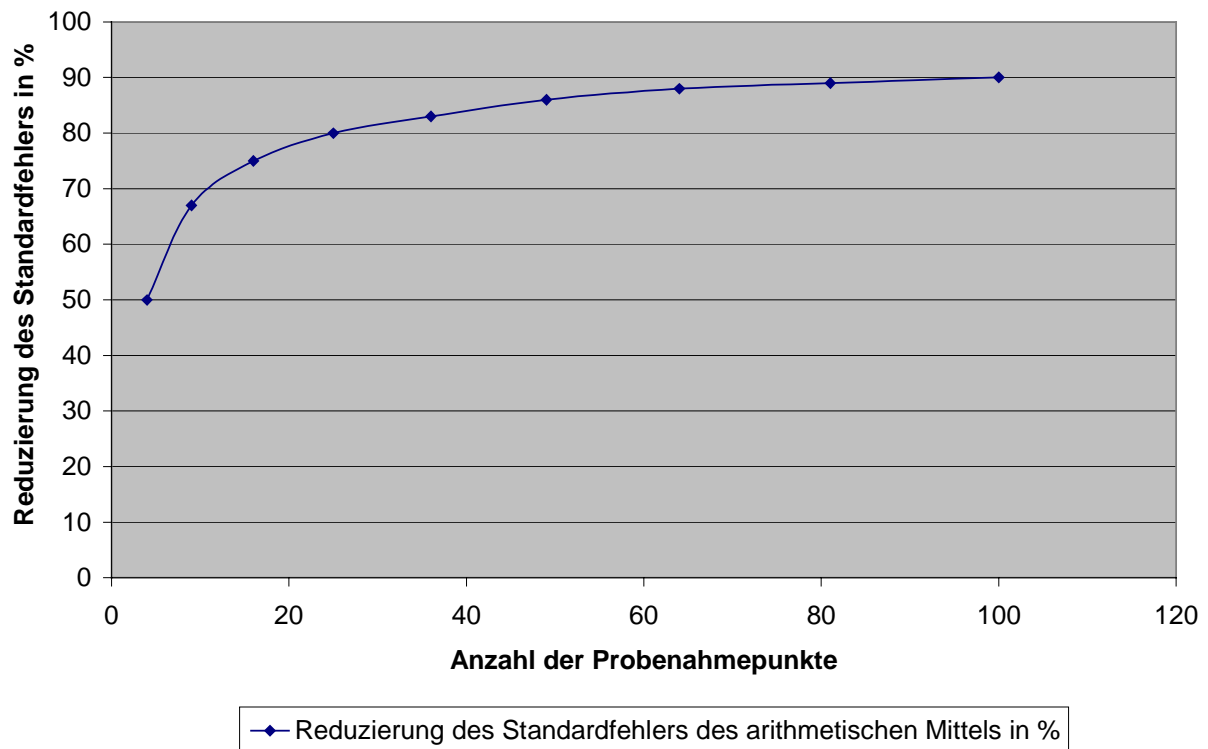


Abb. 17: Kostensensitivität für die Reduzierung des Standardfehlers des arithmetischen Mittels

Nach einem steilen Anstieg beginnt die Kurvenverflachung bereits bei einem Umfang von ca. 10 Proben. Eine Verdopplung der Proben von 20 auf 40 ergibt nur noch eine Erhöhung der Aussagesicherheit um 10 %, d. h. die Sensitivität beträgt in diesem Bereich nur noch ca. 0,1.

Aus dem Kurvenverlauf läßt sich ableiten, daß

- analog zur Erkennungswahrscheinlichkeit mit einsetzender Kurvenverflachung marginal höhere Aussagesicherheiten mit hohen Grenzkosten erkaufte werden,
- eine Fallzahlberechnung gemäß Gleichung (17) mit schematischer Vorgabe des zulässigen Absolutfehlers aufgrund der dargestellten Kostensensitivität zu unverhältnismäßigem Aufwand führen kann.

8 Anwendung auf drei Teilflächen am Standort Sinsheim

8.1 Einführung

Im Modellvorhaben Reinig Sinsheim handelt es sich um die Untersuchung der Schadstoffbelastung auf dem Gelände einer ehemaligen Holzverarbeitung. Der Standorttyp ist ein Lockergesteinsaquifer in einer Talau. Unter Auffüllung und bindigen Deckschichten steht das quartäre Grundwasser in ca. 6 m Tiefe an.

Auf dem Standort der ehem. Firma Reinig wurden Bodenverunreinigungen durch Fluorid, Chrom, Pentachlorphenol (PCP), PAK und MKW festgestellt. Für eine statistische Auswertung wurden die Parameter Chrom, PAK und PCP ausgewählt. Die Schadensflächen sind jeweils lokal getrennt und durch das enge Sondierungsrastrer von 5 m horizontal gut abgegrenzt (vgl. Anlage 2). Als Erkundungsrastrer wurde ein Quadratraster gewählt.

Somit stehen mit dem Modellvorhaben Sinsheim drei verschiedene Flächen mit unterschiedlichen Schadstoffen zur Verfügung.

8.2 Erkennungswahrscheinlichkeit

In Anlage 2 ist die Verteilung der jeweiligen Schadensflächen dargestellt, wobei als Verunreinigung in Anlehnung an das Gutachten des Standortgutachters 100 mg/kg Chrom, 1mg/kg PCP und 10 mg/kg PAK angenommen wurden.

Aufgrund des Rasters von 5 m wurde für eine verunreinigte Fläche pro „Treffer“ (Sondierung mit Konzentration über den o. g. Werten) eine Größe von 25 m² angesetzt.

In folgender Tabelle sind die berechneten Erkennungswahrscheinlichkeiten den realen Erkennungswahrscheinlichkeiten, aufgeschlüsselt nach Rastergrößen von 5 m, 10 m, 15 m und 20 m, gegenübergestellt. Dabei wurden die Rasterabstände 10 m, 15 m und 20 m durch Ignorieren der Meßergebnisse an den jeweiligen dazwischenliegenden Rasterpunkten „simuliert“. Die Berechnung erfolgte gemäß der in Abschnitt 5.4 entwickelten Gleichung (13). In der Berechnung sind die z. T. verschiedenen möglichen Rasteransätze mit A und B unterschieden (vgl. Anlage 2). Für PAK liegen zwei Schadensbereiche vor, die ebenfalls berücksichtigt werden.

Tab. 11: Erkennen der Kontaminationen, Modellvorhaben Sinsheim

			Raster		Kont. Fläche		Anzahl Treffer	Erkennungs- wahr- scheinlichkeit [%]	Kontami- nation fest- gestellt	
			beprobte Fläche [m ²]	Anzahl Zellen	absolut [m ²]	relativ [%]				
Rasterabstand = 5 x 5 m										
Chrom			750	30	175	23	6	100	ja	
PCP			625	25	200	32	8	100	ja	
PAK			735	28	350	48	15	100	ja	
Rasterabstand = 10 x 10 m										
Chrom	A		900	9	150	17	1	100	ja	
	B		900	9	175	19	1	100	ja	
PCP			1 200	12	200	17	2	100	ja	
PAK	A		800	8	300	37	5	100	ja	
	B				250	31	3	100	ja	
PAK 2 Flächen	A	oben	800	8	200	25	3	100	ja	
		unten			100	13	2	92	ja	
	B	oben	800	8	125	16	2	98	ja	
		unten			125	16	1	98	ja	
	Wahrscheinlichkeit, beide Flächen zu: erkennen		A						92	ja
			B						96	ja
Rasterabstand = 15 x 15 m										
Chrom	A		900	4	75	8	1	32	ja	
	B				100	11	2	44	ja	
PCP			1 350	4	200	15	1	60	ja	
PAK	A	oben	1 350	6	225	17	2	90	ja	
		unten			150	11	2	66	ja	
	Wahrscheinlichkeit, beide Flächen zu er- kennen:								59	ja
Rasterabstand = 20 x 20 m										
Chrom			1 600	4	125	8	0	32	nein	
PCP			1 600	4	200	13	0	52	nein	

A = Rasteransatz Variante A

B = Rasteransatz Variante B

Die Ergebnisse zeigen, daß im Raster 5 m und 10 m den berechneten Wahrscheinlichkeiten von 92 % bis 100 % auch real jeweils „Treffer“ gegenüberstehen, d. h. die Kontaminationsbereiche wurden sicher erkannt.

Für Raster 15 m und 20 m liegen die berechneten Wahrscheinlichkeiten zwischen 32 % und 90 %. Real wurde in zwei von neun Fällen die Kontamination verfehlt, d. h. zumindest in der Tendenz stimmt die Berechnung mit den real ermittelten Ergebnissen überein. Für eine generelle Bewertung ist die Zahl der zur Verfügung stehenden Standorte viel zu gering. Stochastische Aussagen hoher Sicherheit werden erst mit Standortzahlen erreicht, wie sie nur Computersimulationen mit einer hohen Anzahl Läufen, d. h. wiederum mit nicht in der Realität verifizierten Daten, erbringen können.

8.3 Mittelwert und Streuung der Grundgesamtheit

Im Abschnitt 6.2.1 wurde dargelegt, daß die Berechnung von Zentralwert und Streuung der Grundgesamtheit nur auf der Basis einer vorherigen Abgrenzung sinnvolle und verwertbare Ergebnisse liefert. Dies soll nachfolgend an den konkreten Ergebnissen des Modellvorhabens Sinsheim verdeutlicht werden.

Grundlage der Auswertung sind die in Anlage 3 tabellarisch zusammengefaßten Datensätze der 5 m-Rastererkundung für Chrom, Pentachlorphenol (PCP) und polyzyklische aromatische Kohlenwasserstoffe (PAK). Daraus wurden die folgenden verdichteten Datensätze mit Angabe der Zentralwerte Arithmetisches Mittel und Median sowie der Streuungswerte Varianz, Standardabweichung, Variationskoeffizient sowie Standardfehler (absolut und prozentual) und schließlich des 95%-Vertrauensbereichs für den Mittelwert berechnet. Die Zentral- und Streuungswerte sind jeweils für

- alle Werte in der Rasterfläche ohne Berücksichtigung der Abgrenzung (1. Zeile),
- den kontaminierten Bereich ohne Berücksichtigung der vertikalen Abgrenzung (2. Zeile),
- den kontaminierten Bereich nach horizontaler und vertikaler Abgrenzung (3. Zeile),
- den kontaminierten Bereich gemäß Zeile 3 nach Stützung der äußersten Werte (4. Zeile)

dargestellt.

Tab. 12: Zentralwerte und Streuung, Modellvorhaben Sinsheim

a) Chrom:

						Standardfehler		Vertrauensbereich		Anzahl
	Mittelwert	Median	Varianz	Standardabweichung	Variationskoeffizient	absolut [mg/kg]	proz. [%]	einseitig	zweiseitig	
alle Werte	54	36	3 208	57	1,0	7	13	54+11	54±14	66
Kontamination; > 100 mg/kg 0 m - 2 m	85	45	6 833	81	1,0	17	20	85+28	85±34	24
Kontamination >100 mg/kg; 0 m - 0,3 m	195	175	7 672	88	0,4	36	18	195+72	195±92	6
gestutzt	183	175	2 625	51	0,3	26	14	183+60	183±81	4

b) PCP:

						Standardfehler		Vertrauensbereich		Anzahl
	Mittelwert	Median	Varianz	Standardabweichung	Variationskoeffizient	absolut [mg/kg]	proz. [%]	einseitig	zweiseitig	
alle Werte	26	0,2	7 855	89	3,4	15	56	26+25	26±30	36
Kontamination; > 1 mg/kg 0 m - 2 m	53	2	14 718	121	2,3	29	54	53+50	53±60	18
Kontamination >1 mg/kg; 0 m - 0,3 m	133	54	29 267	171	1,3	65	49	133+125	133±158	7
gestutzt	110	54	23 447	153	1,4	68	62	110+146	110±190	5

c) PAK:

	Mittelwert	Median	Varianz	Standardabweichung	Variationskoeffizient	Standardfehler		Vertrauensbereich		Anzahl
						absolut [mg/kg]	proz. [%]	einseitig	zweiseitig	
alle Werte	22	6	6 063	78	3,6	10	44	22+16	22±19	67
Kontamination; > 10 mg/kg 0 m - 2 m	33	14	9 568	98	3,0	15	46	33+25	33±30	42
Kontamination > 10 mg/kg gestutzt	54	21	15 193	123	2,3	25	46	54+42	54±51	25
	38	21	813	29	0,7	6	15	38+10	38±12	23

Deutlich wird sofort, daß nur eine Mittelwertbildung nach vollständiger Abgrenzung (Zeile 3) sinnvolle Ergebnisse liefert.

Bei Nichtberücksichtigung der Trennung in kontaminierte und nichtkontaminierte Flächen kommt es zu einer unzulässigen Vermischung der Werte und damit zum einen zur Senkung des Zentralwertes der kontaminierten Fläche, zum anderen zur Erhöhung des Zentralwertes der nichtkontaminierten Fläche. In der Konsequenz führt dies zur Unterschätzung der Belastung bei gleichzeitiger Überschätzung der verunreinigten Kubatur.

So liegt für Chrom die mittlere Belastung der kontaminierten Fläche bei 195 mg/kg statt 54 mg/kg in der Gesamtfläche, für PAK bei 54 mg/kg statt 22 mg/kg.

Bezüglich der Zentralwerte ist festzustellen, daß der arithmetische Mittelwert erwartungsgemäß deutlich über dem Median liegt. Die Abweichung ist umso ausgeprägter, je linksschiefer die Verteilung ist. Dies führt bei PCP zu massiven Abweichungen von 133 mg/kg zu 54 mg/kg. Hier muß zwingend eine Transformation der Werte vor Berechnung des Mittelwertes erfolgen.

Nimmt man eine Lognormalverteilung der PCP-Werte an und transformiert diese gemäß Tabelle 7 (Zeile 2) auf eine Normalverteilung, dann reduziert sich der Variationskoeffizient von 1,3 (Tabelle 10b)) auf 0,45. Die transformierten Werte streuen also weniger stark um den Mittelwert als die Originaldaten. Deren Verteilung wird somit - wie erwartet - durch eine Lognormalverteilung besser angenähert als durch eine Normalverteilung. Als 95%-Vertrauensintervall für den Mittelwert ergibt sich aus Gleichung (15) nunmehr $8 \leq \mu \leq 250$. Wenngleich auch damit noch kein allzu enger Vertrauensbereich für die Schätzung des Konzentrationsmittels angegeben werden kann, so ist der aus den logarithmierten Werten ermittelte Bereich doch erkennbar kleiner als das Intervall $-25 \leq \mu \leq 291$, das sich aus Tabelle 10b) (zweiseitiger Vertrauensbereich) ergibt.

Das Modellvorhaben verdeutlicht das Dilemma, daß einerseits zwingend in abgegrenzten Schadensbereichen gerechnet werden muß, andererseits dann jedoch nur sehr wenige Werte zur Verfügung stehen. Das Ausweichen auf den theoretisch zu bevorzugenden Median (vgl. Abschnitt 6.2.1) als Zentralwert macht wenig Sinn, da kein Vertrauensbereich berechnet werden kann. Dies gilt bereits in einem Modellvorhaben, obwohl hier eine in die Erkundungspraxis kaum übertragbare Rasterdichte von 5 m vollzogen wurde. So liegt für Chrom und PCP mit sechs bzw. sieben Proben der Vertrauensbereich des Medians im Bereich der Range.

Eine Verbesserung bringt neben dem Transformieren bei Ausreißern das Stutzen oder Winsorieren der Werte (vgl. Abschnitt 6.1). In Zeile 4 wurden dazu die Datensätze der kontaminierten Bereiche jeweils um den höchsten Wert und entsprechend auch des kleinsten Wertes gestutzt. Im Ergebnis ergibt sich eine Annäherung in Richtung des Medianwertes, allerdings erkauft mit einer Reduzierung der Probenanzahl. Die Reduzierung der Probenanzahl erhöht jedoch nicht zwingend den Standardfehler, da durch die gleichzeitige Senkung der Varianz eine teilweise Überkompensation erfolgt (vgl. Chrom und PAK).

Die berechneten Streuungsparameter am konkreten Fall verdeutlichen weiterhin die schlechte Reproduzierbarkeit der Werte im Altlastbereich, insbesondere im Boden. Die Variationskoeffizienten schwanken zwischen ca. 1 bis 3, d. h. die Standardabweichung liegt beim bzw. deutlich höher als der Mittelwert.

8.4 Anmerkungen zum Einsatz geostatistischer Verfahren am Standort Sinsheim

Bei der Anwendung geostatistischer Verfahren (z. B. Kriging) am Standort Sinsheim ergibt sich dasselbe grundlegende Problem, das bereits für das eingangs vorgestellte Fallbeispiel in Kapitel 3 aufgezeigt werden konnte: Die Meßdaten sind im Untersuchungsgebiet nicht statistisch homogen bzw. stationär, so daß eine zentrale Voraussetzung für die Anwendbarkeit geostatistischer Verfahren verletzt ist (vgl. Abschnitt 2.3).

Dies verdeutlichen die im „Schadensbereich PCP“ (Anlage 2) ermittelten Konzentrationswerte für Pentachlorphenol. Hier liegen die Meßergebnisse im Zentrum der Verdachtsfläche (Probenahmestellen S2126 und S2131 im Bereich von 0 bis 0,3 m) mit ca. 380 mg/kg weit über dem Durchschnittswert (26 mg/kg). Damit ist in diesem Teilbereich eine signifikante Häufung hoher Konzentrationen zu beobachten, so daß die Voraussetzung der statistischen Homogenität der Meßwerte nicht erfüllt ist.

Unter diesen Bedingungen führt die Anwendung des Kriging-Verfahrens zwangsläufig auf Standardabweichungen, die zumindest in der Größenordnung der Mittelwerte liegen. Dies bedeutet aus praxisrelevanter Sicht, daß eine Prognose der Schadstoffbelastung auf der Basis von Mittelwerten mit unverträglich hohen Unsicherheiten behaftet ist. Demzufolge sind auch daraus abgeleitete Abgrenzungen kontaminierter Flächen nicht gesichert.

9 Praktische Umsetzung der statistischen Auswerteverfahren

9.1 Definition der statistisch zu behandelnden Erkundungsziele

Zielstellung der vorliegenden Studie war es, die Möglichkeiten der Statistik in der Altlasterkundung zur Optimierung des Erkundungsaufwandes zu prüfen. Es wurde dargestellt, daß die wesentlichen Teilziele der Erkundung

- Erkennen der Kontamination
- Schätzen von den entnommenen (Stich-)Proben auf Zentralwerte und Streuung der Grundgesamtheit

durch den Einsatz der Statistik wirkungsvoll unterstützt werden können. Die Statistik ermöglicht die

- Quantifizierung der Probenanzahl bei gegebener Aussagesicherheit (Minimumprinzip)
- Quantifizierung der Aussagesicherheit bei gegebener Probenanzahl (Maximumprinzip)

Es wurde weiter ausgeführt, daß das Teilziel der Erkundung

- räumliche Abgrenzung der Kontamination

durch den Einsatz der Geostatistik bei Bodenproben nicht zum Erfolg führt. Ebenso ist die Bildung von Mischproben in der Erkundung von Kontaminationsflächen in Standardfällen nicht zu empfehlen.

9.2 Vorgehensweise zum Einsatz der Statistik

Die Vorgehensweise ist in Abbildung 18 in Form eines Ablaufdiagramms dargestellt. Zunächst ist anhand von Prüffragen zu erheben, ob der Einsatz der Statistik sinnvoll ist (vgl. das entsprechende Vorgehen am Beispiel des Modellvorhabens Sinsheim in Kapitel 8).

- Wird eine Mindestzahl von Proben entnommen (mind. 5)?
- Ist das Teilziel der Erkundung für den Einsatz der Statistik geeignet?
- Nur bei Teilziel „Schätzen auf Zentralwerte und Streuung Grundgesamtheit“:
Ist die Kontaminationsfläche abgegrenzt?

Daran anschließend ist die Rasterform, in der Regel ein Quadratraster, festzulegen.

Innerhalb der Teilziele „Erkennen der Kontamination“ und „Schätzen auf Zentralwerte und Streuung der Grundgesamtheit“ ist jeweils die Berechnung der erforderlichen Probenanzahl (Erkundungsplanung) oder die Berechnung des Zielwertes (bei dem Schätzen auf die Zentralwerte und Streuung Grundgesamtheit erst nach abgeschlossener Erkundung) möglich. Dafür wurden in der Studie Formeln entwickelt, die im Ablaufplan jeweils benannt sind. Vorab müssen bestimmte Eingangsparameter festgelegt werden, die ebenfalls benannt sind.

Im abschließenden Modul „Kostensensitivität“ kann dann bei Überschreiten des Kostenbudgets oder der Zielstellung eine Variierung unter Berücksichtigung der fachlichen und wirtschaftlichen Kriterien vorgenommen werden.

In Anlage 4 werden die Formeln zur Berechnung von Erkennungswahrscheinlichkeiten für Zufalls-, Quadrat- und Dreieckraster in Form eines Worksheets (Excel, Version 7.0 für Windows 95) auf Diskette bereitgestellt.

Abschließend ist zu betonen, daß die bereitgestellten Formeln nicht ohne vorherige Prüfung der Eignung am konkreten Standort und Datensatz eingesetzt werden können. Ebenso sind die Ergebnisse auf Plausibilität zu prüfen.

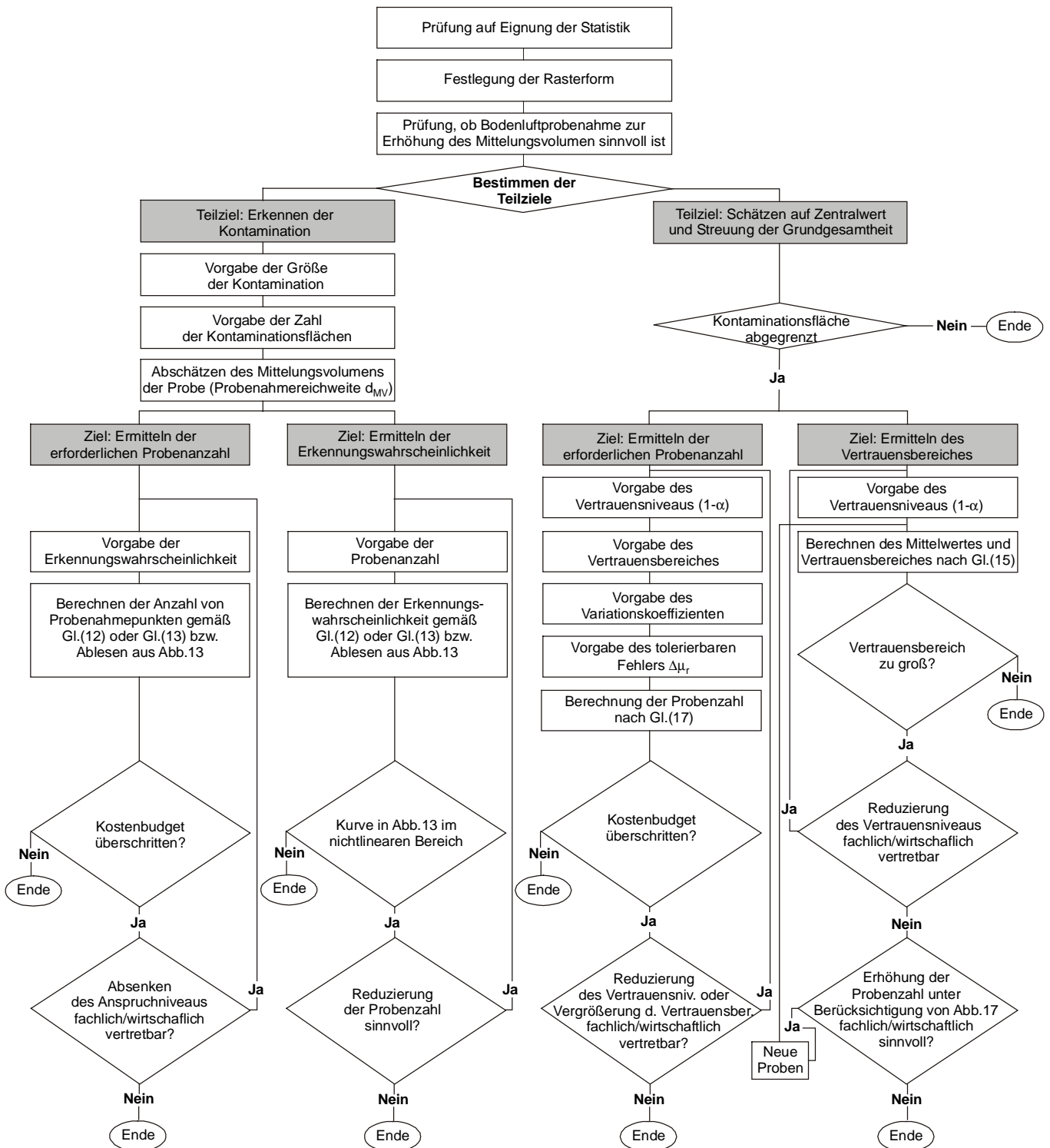


Abb.18: Ablaufdiagramm zum Einsatz der Statistik (Die angegebenen Gleichungs- und Abbinungsnummern beziehen sich auf quadratische Probenahmeraster sowie normalverteilte Meßdaten.)

9.3 Dezimaldarstellung der verwendeten Konstanten

Die im Bericht verwendeten Konstanten werden im folgenden auf vier Nachkommastellen genau angegeben. Damit ist eine ausreichende Genauigkeit für praktische Berechnungen mit Taschenrechner gewährleistet:

$$\sqrt{2} \approx 1.4142$$

$$\pi \approx 3.1416$$

$$\frac{\sqrt{3} \cdot \pi}{6} \approx 0.9069$$

$$\sqrt{3} \approx 1.7321$$

$$\frac{\pi}{2} \approx 1.5708$$

$$\frac{2 \cdot \sqrt{3} \cdot \pi}{9} \approx 1.2092$$

$$\frac{2}{3} \cdot \sqrt{3} \approx 1.1547$$

$$\frac{\pi}{4} \approx 0.7854$$

$$\frac{2 \cdot \sqrt{3}}{\pi} \approx 1.1027$$

$$\sqrt{\frac{2}{\sqrt{3}}} \approx 1.0746$$

$$\frac{4}{\pi} \approx 1.2732$$

$$\frac{6}{\pi} \approx 0.5236$$

10 Literatur

- Akin H., Siemes H. (1988): Praktische Geostatistik, Springer-Verlag, Berlin.
- Aschenbrenner F., Knoblich K. (1995): Das Auffinden von Kontaminationsflächen innerhalb von Altstandorten, Wasser und Boden 2/95, 16 - 19.
- Bayerisches Geologisches Landesamt (1992): Merkblatt für die Anlage von Bodenmeßnetzen zur Bodenbeobachtung und Beweissicherung bei Problemstoffemittenten, München.
- Bayerische Landesanstalt für Umweltschutz (1996): Anleitung zur Probenahme im Zusammenhang mit umweltgefährdenden Ereignissen, München.
- Bayerisches Staatsministerium für Landesentwicklung und Umweltfragen (1990): Boden-Dauerbeobachtungsflächen in Bayern: Standortauswahl, Einrichtung, Probenahme, Analytik, München.
- Botbol J. M., Sinding-Larsen R., McCammon R. B., Gott G. B. (1977): Characteristic analysis of geochemical exploration data, U. S. Geological Survey, Reston, VA, United States, 55p.
- Botbol J. M., Sinding-Larsen R., McCammon R. B., Gott G. B. (1978): A regionalized multivariate approach to target selection in geochemical exploration, Economic Geology and the Bulletin of the Society of Economic Geologists 73(4), 534 - 546.
- Bradford H. R. (1988): Integration of GIS technology, field sampling and laboratory analyses for characterizing hazardous waste sites, in: GIS: Integrating technology and geoscience applications, 138 - 139.
- Bundesgesetzblatt Nr. 21 (1992): Klärschlammverordnung.
- Bundesministerium für Raumordnung, Bauwesen und Städtebau, Bundesministerium für Verteidigung (1996): Arbeitshilfen Altlasten zur Anwendung der baufachlichen „Richtlinien für die Planung und Ausführung der Sicherung und Sanierung belasteter Böden“ des BM Bau für Liegenschaften des Bundes.
- Bund/Länder AD-HOC-Arbeitsgruppe Boden (1996): Anleitung zur Entnahme von Bodenproben, Schweizerbart'sche Verlagsbuchhandlung, Stuttgart.
- Bund/Länder-Arbeitsgruppe (SAG) (1993): Konzeption zur Einrichtung von Boden-Dauerbeobachtungsflächen, München.
- Bunge R. (1996a): Auswertung und Darstellung der chemischen Daten von Bodenproben, altlasten spektrum 3/96, 125-134.
- Bunge R. (1996b): Probenahme auf Altlasten: Bei welcher Rasterweite wird ein 25 m² großer Schadstoffherd mit 85 % Wahrscheinlichkeit entdeckt? Altlasten spectrum 1/96, 14 - 18.
- Bunge R., Bunge K. (1997): Mischprobenkonzept zur Verringerung der Kosten bei der Analytik von Bodenproben.
- Clark I. (1979): Practical geostatistics, Applied Science Publishers.

- Chung C. F. (1981): Application of the Buffon needle problem and its extensions to parallel-line search sampling scheme, in: Jones T. A. (ed.), Special issue on statistics and the Earth sciences, J. Int. Association for Mathematical Geology 13(5), 371 - 390.
- Davis J. C. (1986): Statistics and data analysis in geology, 2nd ed., John Wiley & Sons.
- DIN 4021 (1990): Aufschluß durch Schürfe und Bohrungen sowie Entnahme von Proben.
- DIN 53804, Teil 1 bis Teil 4 (1989): Statistische Auswertungen, kontinuierliche und diskrete Merkmale, Ordinalmerkmale, Attributmerkmale, Beuth-Verlag.
- DIN 55303, Teil 1 und Teil 2 (1984): Statistische Auswertung von Daten, Testverfahren und Vertrauensbereiche für Erwartungswerte und Varianzen.
- DIN ISO 10381, Teil 1, Entwurf (1996): Probenahme, Anleitung zur Aufstellung von Probenahmeprogrammen.
- DIN ISO 10381, Teil 2, Entwurf (1996): Probenahme, Anleitung für Probenahmeverfahren.
- DIN ISO 10381, Teil 4, Entwurf (1996): Probenahme, Anleitung für das Vorgehen bei der Untersuchung von natürlichen, naturnahen und Kulturstandorten.
- DIN ISO 10381, Teil 5, Entwurf (1996): Soil quality-Sampling-Part 5: Guidance on the procedure for the investigation of urban and industrial sites with regard to soil contamination.
- Drew L. J. (1967): Grid-drilling exploration and its application to the search for petroleum, Economic Geology 62, 698-710.
- Drew L. J. (1979): Pattern drilling exploration, optimum pattern types and hole spacings when searching for elliptical shaped targets. J. Int. Association for Mathematical Geology 11(2), 223 - 254.
- Ertel T., Kern F. (1997a): Optimization of exploration strategies using on-site analysis, in: Gottlieb J., Hötzl H., Huck K., Niessner R. (Hrsg.), Field Screening Europe, Kluwer Academic Publishers.
- Ertel T., Kern F. (1997b): Vor-Ort-Analytik in der Altlastenbearbeitung, Terra Tech 2, 24-26.
- Ferguson C. C. (1992): The statistical basis for spatial sampling of contaminated land, Ground Engineering 25 (5), 34 - 38.
- Ferguson C. C. (1993): Sampling strategy guidelines for contaminated land, in: Arendt F., Annokke G. J., Bosman R., van den Brink W. J. (eds.), Contaminated Soil '93. International TNO/BMFT Conference on Contaminated Soil 4, Vol. 1, 599 - 608.
- Flatman G. T., Yfantis A. A. (1996): Geostatistical sampling designs for hazardous waste sites 2, in: Keith L. H. (ed.), Principles of environmental sampling, 779 - 801.
- Garner F. C., Stapanian M. A., Williams L. R. (1996): Composite sampling for environmental monitoring, in: Keith L. H. (ed.): Principles of environmental sampling, 2nd ed., ACS.
- Gerds D. (1996): Umgang mit bewohnten Altlasten. Das Beispiel Osnabrück-Wüste, Tagungsband ITVA-Symposium Altlasten, 02.11.1996.
- Gilbert R. O. (1987): Statistical methods for environmental pollution monitoring, Van Nostrand Reinhold.

- Goodspeed M. J. (1968): Sampling considerations in land evaluation, in: Stewart G. A. (ed.), Land evaluation, 40 - 52.
- Gundu R. C. (1962): A review of some recent developments in the study of heavy mineral assemblages, *Indian Minerals* 16 (3), 247 - 255.
- Gupta V. K., Nigam A. K., Kumar P. (1982): On a family of sampling schemes with inclusion probability proportional to size, *Biometrika* 69 (1), 191 - 196.
- Hartung J., Elpelt B., Klösener K.-H. (1995): Statistik - Lehr- und Handbuch der angewandten Statistik, 10. Auflage, Oldenbourg.
- Holgate P. (1990): Lattice points in a random parallelogram, *Adv. in Appl. Probab.* 22 (2), 484 - 485.
- IfUA, Institut für Umwelt-Analyse GmbH (1997): Gefährdungsabschätzung Osnabrück Wüste, 7. Sachstandsbericht / W-222-94.
- Isaacs E. H., Srivastava R. M. (1989): Applied geostatistics, Oxford University Press.
- Joneck M., Prinz R. (1993): Inventur organischer Schadstoffe in Böden Bayerns, Bayerisches Geologisches Landesamt, Fachberichte, Heft 9.
- Joneck M., Prinz R. (1994): Hintergrundbelastung bayrischer Böden mit organischen Schadstoffen, Bayerisches Geologisches Landesamt, Fachberichte, Heft 12.
- Joneck M., Prinz R. (1995): Nutzungs- und raumspezifische Hintergrundgehalte organischer Schadstoffe im Boden, Wasser und Boden 11/95, 28 - 42.
- Journel A. G., Huijbregts C. J. (1981): Mining geostatistics, Academic Press.
- Keith L. H., Patton G. L., Lewis D. L., Edwards P. G. (1996): Determining what kinds of samples and how many samples to analyze, in: Keith L. H. (ed.): Principles of environmental sampling, 2nd ed., ACS.
- Kotlyar B. D. (1982): The number of lattice points in a random set. *Teor. Veroyatnost. i Mat. Statist.* 26, 85 - 90.
- LAGA (1991): LAGA-Informationsschrift Altablagerungen und Altlasten, LAGA-Mitteilungen 15, Erich Schmidt Verlag.
- Landesamt für Umweltschutz und Gewerbeaufsicht Rheinland-Pfalz (1997): Altablagerungen und Altstandorte, Merkblätter 01 bis 06, Informationsblätter 01 bis 12, Mainz.
- Landesanstalt für Umweltschutz Baden-Württemberg (1995): Verfahrensempfehlungen für die Probenahme bei Altlasten (Boden, Abfall, Grund-Sickerwasser, Bodenluft), Karlsruhe.
- Mallarino A. P. (1996): Spatial variability patterns of phosphorus and potassium in no tilled soils for two sampling scales, *Soil Sci. Soc. Am. J.* 60 (5), 1473 - 1481.
- Martin W., Ruppert H., Fried G. (1991): Veränderungen von Elementgehalten, pH-Wert und potentieller Kationenaustauschkapazität in ausgewählten Böden Bayerns, Bayerisches Geologisches Landesamt, Fachberichte, Heft 6.
- Mathéron G. (1963): Principles of geostatistics, *Economic Geology* 58, 1246-1266.

- McCammon R. B. (1963): Stochastic variables of geologic search and decision: Discussion, Geological Society of America Bulletin 74 (2), 239 - 240.
- McCammon R. B. (1970): An information theoretic approach to stratigraphic systems analysis: Abstracts with programs, Geological Society of America 2(1), 28.
- McCammon R. B. (1974): A proposed measure of the effectiveness of geological effort related to discovery rates in partially explored areas, Bulletin of Canadian Petroleum Geology 22 (1), 59 - 62.
- McCammon, R. B., (1977): Target intersection probabilities for parallel-line and continuous-grid types of search, in: Davis J. C. (ed.), Quantitative strategy for exploration, Journal of the International Association for Mathematical Geology 9 (4), 369 - 382.
- Nollau V. (1979): Statistische Analysen, 2. Aufl., Birkhäuser.
- Nothbaum N., Scholz R., May T. (1994): Probenplanung und Datenanalyse bei kontaminierten Böden, Erich Schmidt Verlag.
- Piotrowski J., Bartels F., Salski A., Schmidt G. (1997): Regionalisierung der Durchlässigkeitsbeiwerte mit unscharfen (fuzzy) Zahlen: Der Natur näher? Grundwasser 1/97, 3 - 7.
- Raghunath A., Debesh R. (1990): On use of symmetrical balanced incomplete block design in construction of sampling design realising pre-assigned sets of inclusion probabilities of first two orders. Comm. Statist. Theory Methods 19 (9), 3223 - 3232.
- Sachs L. (1993): Statistische Methoden, Planung und Auswertung, 7. Auflage, Springer.
- Sachs L. (1997): Angewandte Statistik, 8. Auflage, Springer.
- Schilling B. (1994): Dauer-Beobachtungsflächen, Bayrisches Geologisches Landesamt, Fachberichte, Heft 11.
- Singer D. A. (1975): Relative efficiencies of square and triangular grids in the search for elliptically shaped resource targets, Journal of Research of the U. S. Geological Survey 3 (2), 163 - 167.
- Soloyanis S. C. (1996): A common sense sampling strategy to expedite hazardous waste site cleanup, ASTM Special Technical Publication 1282, 21 - 32.
- Umweltbundesamt (1994): Handbuch Kommunales Altlastenmanagement, Erich Schmidt Verlag.
- Umweltbundesamt (1995): Methodenhandbuch Bodenschutz 1, Berlin.
- Umweltministerium Baden-Württemberg (1993): Zweite Verwaltungsvorschrift des Umweltministeriums zum Bodenschutzgesetz über die Probenahme und -aufbereitung (VwV Bodenproben).
- VDI 3865, Blatt 1 (1992): Messen organischer Bodenverunreinigungen, Meßplanung für Bodenluft-Untersuchungsverfahren, Düsseldorf.
- Verwaltungsvereinbarung OFD Hannover - Bundesanstalt für Materialforschung und -prüfung Berlin (1997): Anforderungen an Untersuchungsmethoden zur Erkundung und Bewertung kontaminationsverdächtiger/kontaminierter Flächen und Standorte auf Bundesliegenschaften.

Glossar

Ausreißertest	Statistischer Test zur Überprüfung, ob einzelne Werte signifikant von den restlichen Daten einer Stichprobe abweichen.
Auswahlsatz	Verhältnis von Stichprobenumfang zum Umfang der Grundgesamtheit.
Bernoulli-Verteilung	Wahrscheinlichkeitsverteilung für die Anzahl von „Treffern“ bei mehrfacher Durchführung eines Zufallsexperiments („Ziehen mit Zurücklegen“) mit zwei möglichen Ergebnissen.
Binominalverteilung	siehe Bernoulli-Verteilung.
Designmatrix	Matrix, deren Komponenten den Zusammenhang zwischen Meßwerten und Trendparametern eines Regressionsmodells beschreiben.
Endlichkeitskorrektur	Korrekturfaktor für die Varianz der Binominalverteilung bei „Ziehen ohne Zurücklegen“.
Fehlerkosten	Kosten, die als Folge der Abweichung eines statistisch geschätzten Parameterwertes vom wahren Wert entstehen.
Flächenverh., wirksames	Das wirksame Flächenverhältnis ist mit der Wahrscheinlichkeit identisch, einen „Hot-spot“ mittels einer einzigen Probe zu erkennen. Dabei wird die Reichweite der Probenahme berücksichtigt, so daß das wirksame Flächenverhältnis größer ist als das Verhältnis aus Kontaminations- zu Grundstücksfläche.
Freiheitsgrad	Ganzzahliger Parameter der F- und der Student-Verteilung.
Geostatistik	Oberbegriff für alle statistischen Verfahren zur Schätzung der räumlich korrelierten Verteilung von Parametern, für die lediglich unvollständige Meßinformationen (z.B. zu einzelnen Meßpunkten) zur Verfügung stehen.
Group testing	Prüfung in Gruppen, d.h. unter Verwendung von Mischproben.
Grundgesamtheit	Oberbegriff für alle Objekte einer statistischen Erhebung.
Homogenität, statistische	siehe Stationarität.
Kolmogoroff-Smirnov-Test	(nichtparametrischer) Test zur Überprüfung der Hypothese, daß die unbekannte Verteilungsfunktion der Grundgesamtheit mit einer vorgegebenen Verteilungsfunktion übereinstimmt.
Kombinatorik	Oberbegriff für alle Verfahren zur Berechnung der Wahrscheinlichkeiten bestimmter Anordnungs- bzw. Auswahlmöglichkeiten von Objekten.

Konfidenzintervall	Bereich, in dem ein zu schätzender, unbekannter Parameterwert mit einer vorgegebenen Wahrscheinlichkeit liegt.
Korrelationsanalyse	Statistisches Verfahren zur Quantifizierung der wechselseitigen Abhängigkeit verschiedener Merkmale der Grundgesamtheit.
Kriging	Geostatistisches Interpolationsverfahren.
Lognormalverteilung	Statistische Verteilung, deren logarithmierte Werte normalverteilt sind.
Multiplikationssatz	Formel zur Berechnung der Wahrscheinlichkeit des simultanen Eintretens mehrerer, voneinander unabhängiger Ereignisse.
Normalgleichungen	Gleichungssystem für die Trendparameter bei der Regressionsanalyse.
Nuggetvarianz	Parameterstreuung, die von der Meßmethode nicht aufgelöst werden kann (beinhaltet auch Meßfehler).
Prognosefehler	Abweichung der mittels Kriging vorhergesagten von den entsprechenden exakten (aber unbekannt)en Parameterwerten.
Quantil	Wert einer Zufallsverteilung, der dadurch festgelegt ist, daß niedrigere Werte mit einer vorgegebenen Wahrscheinlichkeit auftreten (z.B. 95 % - Quantil).
Range	Wertebereich einer Zufallsverteilung.
Regressionanalyse	Statistisches Verfahren zur bestmöglichen Anpassung (kleinste Quadrate) einer oder mehrerer vorgegebener Funktionen an Meßdaten (Spezialfall: Bestimmung einer Regressionsgeraden).
Residuum	Differenz aus Meßwert und Regressionsmodell.
Schätzung	Mit Unsicherheit behaftete Angabe eines Parameterwertes als Ergebnis einer statistischen Auswertung von Beobachtungen.
Semivariogramm	Funktion zur Quantifizierung des räumlichen Zusammenhangs von Parameterwerten.
Standardnormalverteilung	Normalverteilung mit Mittelwert 0 und Varianz 1
Stationarität, statistische	Voraussetzung in der Geostatistik, die besagt, daß in keinem Teil des Untersuchungsgebietes eine signifikante Häufung hoher bzw. niedriger Meßwerte auftritt.
Statistik, induktive	Bereich der Statistik, in dem Aussagen über die Grundgesamtheit aus begrenzten Informationen (Stichprobe) abgeleitet werden.
Stichprobe	Teil der Grundgesamtheit, für den Informationen vorliegen bzw. erhoben werden.
Stichprobenumfang	Anzahl der Objekte in der Stichprobe.

Student-Verteilung	Verteilung des arithmetischen Mittels einer Stichprobe bei normalverteilter Grundgesamtheit mit unbekannter Varianz.
Stutzen	Weglassen von Ausreißern in einer Stichprobe
Test	Statistisches Verfahren zur Überprüfung von Hypothesen. Bei parametrischen Tests beinhaltet die Hypothese Aussagen zu einzelnen Parametern (z.B. Mittelwert, Streuung) einer Verteilung. Bei nichtparametrischen Tests wird überprüft, ob die Verteilung der Stichprobenwerte einer vorgegebenen Verteilung entspricht.
Trend	Deterministische Komponente von Regressionsmodellen.
t-Verteilung	siehe Student-Verteilung.
Urnenmodell	Modell der Statistik, das die Auswahl von Objekten aus einer Grundgesamtheit anhand des Ziehens von Kugeln aus einer Urne (mit bzw. ohne Zurücklegen) veranschaulicht.
Variable, regionalisierte	Ortsabhängige Funktion, bestehend aus einer deterministischen und einer stochastischen Komponente.
Variationskoeffizient	Verhältnis aus Standardabweichung und Mittelwert einer Verteilung.
Variogramm	siehe Semivariogramm
Vertrauensbereich	siehe Konfidenzintervall.
Vertrauensintervall	siehe Konfidenzintervall.
Winsorieren	Ersetzen von Ausreißern nach oben bzw. unten durch den jeweils nächstkleineren bzw. nächstgrößeren Wert in der Stichprobe.
Ziehen mit/ohne Zurückl.	siehe Urnenmodell