

**Probleme und Lösungsansätze des Grundwassermonitorings
nach EU-Wasserrahmenrichtlinie**

Dissertation
zur Erlangung des Doktorgrades
der Mathematisch-Naturwissenschaftlichen Fakultäten
der Georg-August-Universität zu Göttingen

vorgelegt von
Daniel Stietenroth
aus Northeim

Göttingen 2005

D 7

Referent: Prof. Dr. G. Gerold
Korreferent: Prof. Dr. K.-H. Pörtge

Tag der mündlichen Prüfung: 19.04.2005

Danksagung

Mein herzlicher Dank gilt Herrn Prof. Dr. Gerhard Gerold für die weit über die formale fachliche Betreuung und Diskussion hinausgehende Unterstützung und Förderung. Die stetige Bereitschaft, mir für Fragen zur Verfügung zu stehen, wissenschaftliche Lösungswege aufzuzeigen und die Integration in die Arbeitsgruppe ermöglichten mir erst, die vorliegende Arbeit fertig zu stellen.

Zahlreiche Hinweise auf aktuelle Entwicklungen und neueste Erkenntnisse in der Hydrologie erreichten mich auch in den letzten eindreiviertel Jahren im Tropenzentrum auf dem Postweg von Herrn Prof. Dr. Karl-Heinz Pörtge. Für die stetige Unterstützung und anregende Diskussion danke ich ihm ebenso herzlich, wie für die Übernahme des Korreferats.

Herrn Prof. Dr. Otto Fränzle danke ich für die Aufnahme in das Graduiertenkolleg „Integrative Umweltbewertung“, die damit verbundene wissenschaftliche Weiterbildung durch alle Beteiligten und die finanzielle Förderung durch die DFG. Durch wertvolle Anregungen und Gespräche auch nach meinem berufsbedingten Wechsel nach Göttingen durfte ich von seinem einzigartigen Wissen profitieren und seiner Persönlichkeit lernen.

Mein besonderer Dank gilt Herrn Dr. habil. Norbert Lanfer, der mir neben fachlichen Ratschlägen auch immer wenn es notwendig war seine persönliche Hilfestellung geboten hat.

Meinen Vorgesetzten Herrn Prof. Dr. Teja Tschardt und Herrn Prof. Dr. Manfred Zeller danke ich dafür, dass Sie mich trotz vielfältiger wichtiger und dringender Aufgaben motivierten, die Dissertation zügig zum Abschluss zu bringen und im Rahmen der Möglichkeiten dafür Zeitfenster zugestanden.

Allen Kollegen und ehemaligen Kollegiaten die mit mir diskutierten, stritten, lernten und mit Rat und Tat zur Seite standen, sei an dieser Stelle gedankt ohne dass ich alle Namen nennen kann.

Mein größter Dank gilt meinen Freunden, die Leid und Freude mit mir teilen, zur Seite stehen, wenn niemand anderes es kann oder merkt, dass es notwendig ist!

Meiner Familie danke ich für die Unterstützung in vielerlei Hinsicht. Meinen Eltern danke ich dafür, dass Sie mir meine Hochschulausbildung ermöglicht haben, nicht ohne selbst Einschränkungen dafür hinnehmen zu müssen.

Meiner Mutter danke ich für all das, was sie mir gibt und das nur eine Mutter zu geben im Stand ist.

Danke!

Inhaltsverzeichnis

Teil 1 – Text	I
Abkürzungsverzeichnis	IV
Abbildungs- und Tabellenverzeichnis (Teil 1)	V
1. Einleitung	1
1.1. Umweltpolitische Einordnung.....	1
1.1.1. Ausgangssituation	1
1.1.2. Umweltrechtliche Aspekte	1
1.1.3. Aspekte zur Umsetzung der WRRL.....	3
1.2. Ziele und Hypothesen	6
2. Schadstoffe im Boden-Wasser-System	10
2.1. Verständnisansatz	10
2.2. Regel- und Transportprozesse.....	12
2.3. Aspekte der Variabilität	15
3. Analyse und Modellierung der Grundwasserbeschaffenheit	17
3.1. Stoffstrommodelle	17
3.2. Flächenschätzung	18
3.2.1. Geostatistik.....	18
3.2.1.1. Strukturanalyse	19
3.2.1.2. Räumliche Schätzung	21
3.2.2. Inverse-Distance-Weighting.....	24
3.3. Räumliche Bezugssysteme.....	25
3.3.1. Naturräumliche Bezugssysteme	26
3.3.2. Anthropogene Bezugssysteme.....	27
3.4. Messstellengruppierung	29
3.4.1. Hierarchische Verfahren	30
3.4.2. Partitionierende Verfahren.....	32

3.4.3. Qualitätssicherung	33
4. Eingangsdaten und Datenaufbereitung	35
4.1. Messpunktinformationen	36
4.1.1. Eignung	36
4.1.2. Relevanz.....	39
4.1.3. Problem kleiner Messwerte	41
4.2. Flächeninformationen	43
4.2.1. Schutzfunktion der Grundwasserüberdeckung	43
4.2.2. Geogene Grundwasserbeschaffenheit	44
4.2.3. Landnutzung.....	45
4.2.4. Flusseinzugsgebiete.....	45
4.2.5. Regierungsbezirke.....	46
5. Exemplarische Problemlösung.....	47
5.1. Grundwasserbeschaffenheit in Baden-Württemberg	47
5.1.1. Zeitliche Aspekte der Grundwasserbeschaffenheit.....	47
5.1.2. Räumliche Aspekte der Grundwasserbeschaffenheit	52
5.1.2.1. Schutzfunktion der Grundwasserüberdeckung.....	52
5.1.2.2. Geogene Grundwasserbeschaffenheit	52
5.1.2.3. Landnutzung	53
5.1.2.4. Flusseinzugsgebiete.....	54
5.1.2.5. Regierungsbezirke	55
5.2. Flächenschätzungen der Grundwasserbeschaffenheit	56
5.2.1. Geostatistische Strukturanalyse	56
5.2.1.1. Ableitung geeigneter Kriterien	56
<i>Exkurs 1: Einfluss der Schrittweite auf die Variogrammanalyse und Kriging.</i>	58
<i>Exkurs 2: Bessere Schätzergebnisse durch Transformation?</i>	59
5.2.1.2. Gesamtgebiet.....	61
5.2.1.3. Einzugsgebiet Enz	63
5.2.2. Kriging	67
5.2.2.1. Gesamtgebiet.....	68
5.2.2.2. Einzugsgebiet Enz	70

<i>Exkurs 3: Skalenwechsel</i>	71
5.2.3. Inverse-Distance-Weighting.....	73
5.2.3.1. Gesamtgebiet.....	73
5.2.3.2. Einzugsgebiet Enz	74
5.3. Anthropogene Beeinflussung der Grundwasserbeschaffenheit	75
5.3.1. Ableitung geeigneter Methodenkombination.....	75
5.3.2. Untersuchung aller Messstellen.....	77
5.3.2.1. Direkte Ward-Clusterung.....	77
5.3.2.2. Dreistufige Clusterung.....	79
5.3.3. Untersuchung der anthropogen beeinflussten Messstellen	85
6. Ergebnisdiskussion und Zusammenführung	91
6.1. Fazit der exemplarischen Problemlösung	91
6.1.1. Fazit Flächenschätzungen.....	91
6.1.2. Fazit Messstellengruppierungen.....	93
6.2. Kritische Betrachtung der WRRL-Vorgaben.....	95
6.2.1. Räumliche Bezugssysteme	95
6.2.2. Datengrundlage	97
6.2.3. Kartographische Berichterstattung	98
6.2.4. Zielerreichbarkeit	99
6.3. Ausblick und Internationale Einordnung.....	100
7. Zusammenfassung	104
8. Literatur	106
Teil 2 – Anhang	117

Abkürzungsverzeichnis

BMU	Bundesministerium für Umwelt, Naturschutz und Reaktorsicherheit
LAWA	Länderarbeitsgemeinschaft Wasser
EUV	Konsolidierte Fassung des Vertrages zur Gründung der Europäischen Gemeinschaft (AMT FÜR AMTLICHE VERÖFFENTLICHUNGEN DER EUROPÄSCHEN GEMEINSCHAFTEN 1997)
GG	Grundgesetz für die Bundesrepublik Deutschland vom 23. Mai 1949, zuletzt geändert durch Gesetz vom 19. Dezember 2000 (PARLAMENTARISCHER RAT DER BUNDESREPUBLIK DEUTSCHLAND 2000)
JDK	Jahresdatenkatalog Beschaffenheit des Grundwassers in Baden-Württemberg 1994 - 1998
LGRB	Landesamt für Geologie, Rohstoffe und Bergbau Baden-Württemberg
PEC	Predicted Evironmental Concentration
PNEC	Predicted No Effect Concentration
PSM	Pflanzenschutzmittel
TrinkwV	Verordnung zur Novellierung der Trinkwasserverordnung (PARLAMENTARISCHER RAT DER BUNDESREPUBLIK DEUTSCHLAND 2001); „Trinkwasserverordnung“
TWRL	Richtlinie 98/83/EG (EUROPÄISCHES PARLAMENT UND RAT 1998); „Trinkwasserrichtlinie“
UQZ	Umweltqualitätsziel
WHG	Gesetz zur Ordnung des Wasserhaushalts (PARLAMENTARISCHER RAT DER BUNDESREPUBLIK DEUTSCHLAND 1996); „Wasserhaushaltsgesetz“
WRRL	Richtlinie 2000/60/EG (EUROPÄISCHES PARLAMENT UND RAT (2000); Richtlinie des Europäischen Parlaments und des Rates zur Schaffung eines Ordnungsrahmens für Maßnahmen der Gemeinschaft im Bereich der Wasserpolitik; „Wasserrahmenrichtlinie“

Darüber hinaus werden allgemein gebräuchliche Abkürzungen und die üblichen Kurzformen für Maßeinheiten sowie chemische Elemente und Verbindungen verwendet.

Abbildungs- und Tabellenverzeichnis (Teil 1 – Text)

Abbildung 1: Experimentelles Semivariogramm und Variogrammodell	20
Abbildung 2: Dimensionen und Zusammenhänge der Disziplinarität (nach DASCHKEIT 2000).....	100
Tabelle 1: Aufbau der Untersuchung	9
Tabelle 2: Erwartete Konzentrationsspektren im GW (KÖLLE 2001).....	11
Tabelle 3: Verwendete Datenbasis.....	35
Tabelle 4: Messnetze des Grundwasserüberwachungsprogramms Baden- Württemberg.	37
Tabelle 5: Eingesetzte Normen und Verfahren zur Datenerfassung	38
Tabelle 6: Reduzierung der Messstellenanzahl.....	39
Tabelle 7: Relevanz von Grundwasserbeschaffenheitsparametern in Regelwerken.	40
Tabelle 8: Problematik von Messwerten unterhalb der quantitativen Erfassbarkeit...	42
Tabelle 9: Klassen der Grundwasserschutzfunktion, Flächenanteile und Messstellendichten	44
Tabelle 10: Klassen der geogenen Grundwasserbeschaffenheit, Flächenanteile und Messstellendichten	45
Tabelle 11: Landnutzungsklassen, Flächenanteile und Messstellendichten	45
Tabelle 12: Ausgewählte Flusseinzugsgebiete, Flächenanteile und Messstellendichten	46
Tabelle 13: Regierungsbezirke, Flächenanteile und Messstellendichten	46
Tabelle 14: Kombination verschiedener Clusterverfahren.....	76

**Weitere Abbildungen und Tabellen – sowie alle Karten – befinden
sich in Teil 2 – Anhang**

1. Einleitung

1.1. Umweltpolitische Einordnung

1.1.1. Ausgangssituation

Seit den 1970er Jahren verstärkte sich weltweit das Umweltbewusstsein in fast allen Bereichen der Gesellschaft, Politik und Verwaltung. Die in Europa zusammenwachsenden Staaten verständigten sich erstmals 1976 mit der Gewässerschutzrichtlinie (EUROPÄISCHES PARLAMENT UND RAT 1976; 76/464/EWG) auf eine grundlegende Handhabung im Gewässerschutz. Auf nationaler Ebene wurden weitergehende, jedoch europaweit nicht aufeinander abgestimmte Regelungen geschaffen, so dass sich in den 1990er Jahren ein „Flickenteppich der geltenden Richtlinien und der aktuellen Entwürfe auf dem Gebiet des Gewässerschutzes“ (BREUER 1995) darstellt. Der Bedarf einer umfassenden Rahmenregelung veranlasst das Parlament der EU und den Rat Expertenteams mit der Ausarbeitung der Entwürfe einer einheitlichen Regelung für alle Mitgliedsstaaten der EU zu beauftragen. Ende 2000 wird die „Richtlinie des Europäischen Parlaments und des Rates zur Schaffung eines Ordnungsrahmens für Maßnahmen der Gemeinschaft im Bereich der Wasserpolitik“ (kurz: WRRL) (EUROPÄISCHES PARLAMENT UND RAT 2000; 2000/60/EG) als europaweit einheitliches Rahmenregelwerk verabschiedet und zahlreiche Verpflichtungen der Mitgliedsstaaten gegenüber der EU rechtsverbindlich. Den Mitgliedsstaaten werden mit der WRRL Zielvorgaben gesetzt, einheitliche Verfahren und Methoden zur Umsetzung der Forderungen werden nicht vorgegeben. In Deutschland erarbeitet ein Expertenteam unter Führung des LAWA-EU-Kontaktausschusses die „Arbeitshilfe zur Umsetzung der WRRL“ (LAWA 2004 fortlaufend), um den Vollzugsbehörden Handlungsabläufe, Basisdaten und Methoden aufzuzeigen und damit die Vorgaben der WRRL fristgerecht umzusetzen.

1.1.2. Umweltrechtliche Aspekte

Die Europäische Gemeinschaft legt die gesellschaftlichen Fundamente mittels Schaffung rechtlicher Regelwerke durch die Legislative des Europäischen Parlaments. Der Prozess der Gesetzgebung durch Organe der EU ist mitunter nicht unproblematisch, da häufig Konflikte mit nationalen und regional teilweise sehr unterschiedlichen Regelungen bewältigt werden müssen. Einen Überblick für die Entwicklung der WRRL

gibt Tabelle A im Anhang I. Häufig erfolgt eine dreistufige Gesetzgebung: In einem ersten Schritt – der EU-Rechtslegung – werden zunächst die Ziele, Hinweise zur Zielerreichung und Fristen genannt. Die Umsetzungspflicht der Mitgliedsstaaten dieser EU-Regelungen in nationales Recht stellt den zweiten Schritt dar, der wiederum durch die EU überprüft wird. Sofern weitere landeseigene Regelungen existieren, müssen die nationalen Regelungen daraufhin in einem dritten Schritt in Landesrecht umgesetzt werden. Die Umsetzung in nationale Regelungen wird seitens der EU überprüft. Sofern eine unzureichende Umsetzung festgestellt wird, werden Nachbesserungen eingefordert. Sind diese noch immer nicht hinreichend, können gegebenenfalls Sanktionen gegen die Mitgliedsstaaten verhängt werden.

Mit der Schaffung der WRRL wurde diesem Rechtslegungsprozess gefolgt. Der aus der WRRL resultierende nationalstaatliche Rechtssetzungsbedarf erfolgt in Deutschland durch Novellierungen des deutschen Wasserrechts. Aufgrund der föderativen deutschen Staatsform muss aber auch innerhalb Deutschlands eine mehrstufige legislative Umsetzung erfolgen: einerseits auf Ebene des Bundes (WHG, TrinkwV), andererseits – bedingt durch die Rahmengesetzgebungskompetenz des Bundes (Art. 75 GG) – auch auf Landesebene (Landeswassergesetze) (vgl. FARBENDER 2001; KNOPP 2001). Der stets aktuelle Status ist über die Internetplattform WasserBLICK (<http://wasserblick.net>) für die Fachöffentlichkeit zugänglich. Klar differenziert werden muss allerdings – auch hinsichtlich der Einhaltung vorgegebener Fristen und fachlicher Anforderungen – zwischen der normativen (durch den nationalen Gesetzgeber) und der administrativen Umsetzung (durch die nationalen Vollzugsbehörden).

Sofern das Nichteinhalten von Fristen klar auf unzureichende normative und/oder administrative Umsetzung der WRRL-Inhalte in Landesrecht nachzuweisen ist (Art. 75 GG), wäre es grundsätzlich denkbar, dass gemäß Art. 37 GG Maßnahmen ergriffen würden, um die Erfüllung der so genannten Bündnispflicht der Länder herbeizuführen (STETTNER 1998). Der sog. „Bundeszwang“ geht in seiner Tradition bis in die Zeiten des Heiligen Römischen Reiches Deutscher Nation zurück, ist aber nach BAUER (1998) seit Bestehen der Bundesrepublik nicht ausgeführt worden. Bevor die Bundesregierung Maßnahmen, die bis hin zur Einstellung von Finanzausweisungen, Ersatzvornahmen der unterlassenen Handlung durch Bundesorgane oder der treuhänderischen Ausübung administrativer und legislativer Landesfunktionen durch den

Bund gehen können, ergreift, muss von dieser jedoch geprüft werden, ob die Tatbestandsvoraussetzungen vorliegen. Die Durchführung derartiger Maßnahmen erfordert in jedem Fall die Zustimmung des Bundesrates. Eine vergleichbare rechtliche Situation existiert zwischen der Bundesrepublik und der EU: Sofern Verpflichtungen – denen auch die weitere Umsetzung der WRRL zuzurechnen ist – gemäß EUV nicht erfüllt werden, können zurückgehend auf Art. 291 EUV Sanktionen finanzieller Art beschlossen werden.

1.1.3. Aspekte zur Umsetzung der WRRL

Mit dem Inkrafttreten ist formell das Hauptziel der WRRL – „die Schaffung eines Ordnungsrahmens für den Schutz (...) des Grundwassers“ – erreicht. Die inhaltlichen Ziele (Art. 1) sind mittel- und langfristig orientiert und bedürfen umfangreicher Umsetzungsprozesse, einen Überblick gibt Tabelle B im Anhang I. Im Folgenden sind einige wesentliche Aspekte zusammengestellt, die für die Umsetzung der WRRL relevant sind.

Die WRRL fordert eine ganzheitliche Betrachtungs- und Bewirtschaftungsweise und verwendet einen kombinierten Ansatz zur Qualitätszielerreichung: einerseits die Festsetzung von Emissionsgrenzwerten (Anh. IX), die Vorgabe von Qualitätszielen (Art. 4) und ein Verschlechterungsverbot der Wasserqualität (Art. 4 Abs.1) a) i) und b) i)) andererseits. Die Anpassung an die Entwicklung der Gewässerqualitäten ist in der WRRL durch die in vorgegebenen Abständen wiederholte Überprüfung der Erreichung von UQZ und der Effektivität der eingeleiteten Maßnahmen vorgegeben. Eine explizite Berücksichtigung der international zur Einschätzung der Grundwasserqualität verwendeten PEC oder PNEC erfolgt in der Richtlinie nicht, gleichfalls wird die Exposure-Analysis nicht direkt berücksichtigt.

In besonderem Maße werden mit der WRRL hinsichtlich der chemischen Wasserqualität einige Stoffe, Stoffgruppen und Verbindungen berücksichtigt (Art. 12 Abs. 2)). Die Auswahl dieser "prioritären" und "prioritär gefährlichen Stoffe" erfolgt für die WRRL mittels des COMMPS-Verfahrens (HERRCHEN 1999). Darüber hinaus sind grundsätzlich auch diejenigen Stoffe von Interesse, die in der TWRL und – aus deutscher Sicht – im WHG und in der TrinkwV genannt werden. Es ist davon auszuge-

hen, dass diese Stoffe auf nationaler Ebene ebenfalls in die Novellierungen der gesetzlichen Regelwerke Eingang finden.

Die WRRL orientiert sich räumlich nicht an administrativen Grenzen, sondern an Flussgebietseinheiten, also naturgegebenen Raumeinheiten. Anders als in Frankreich und Großbritannien stellt die Verwendung von Flussgebieten als räumliche Bezugssysteme in Deutschland ein Novum dar und muss nicht nur aus juristisch-administrativer Sicht kritisch hinterfragt werden (vgl. CASPAR 2001). Die 10 für Deutschland relevanten Flussgebietseinheiten sind vom BMU definiert und stehen im Internet über WasserBLiCK (<http://wasserblick.net>) zur Verfügung. Für die Umsetzung der WRRL sind diese Flussgebietseinheiten hierarchisch in Flussgebiete zu unterteilen, diese wiederum können aus mehreren Teileinzugsgebieten und Nebenflüssen gebildet werden.

Die Hauptinstrumente, die zur Erreichung der Qualitätsziele eingesetzt werden, sind die Maßnahmenprogramme (Art. 11) und der Bewirtschaftungsplan (Art. 13). Die Maßnahmenprogramme basieren auf einer Analyse ausgewählter Merkmale von Flussgebietseinheiten, der Prüfung von Auswirkungen einer möglichen anthropogenen Beeinflussung der Gewässer und einer wirtschaftlichen Analyse der Wassernutzung (Art. 5; Anh. II und III). In den Maßnahmenprogrammen werden zentrale Vorgaben zum Umgang mit den Wasserressourcen eines Flusseinzugsgebietes festgesetzt, die mit einem hohen Grad an Verbindlichkeit versehen werden sollen. Die Maßnahmenprogramme müssen verbindlich folgende wesentliche Inhalte umfassen:

- Umsetzung vorhandener Richtlinien (in Deutschland z.B. Nitrat-Richtlinie, Kommunalabwasserrichtlinie);
- Umsetzung des kombinierten Ansatzes von Emissionsgrenzwerten sowie von Qualitätsstandards für die Gewässer zur Festlegung der Anforderungen an Einleitungen;
- Verfolgung des Ziels zur Einführung von kostendeckenden Wasserpreisen;
- Einführung einer Genehmigungspflicht für
 - Entnahmen und Aufstauungen einschließlich der Aufstellung eines Registers,
 - Einleitungen einschließlich der Aufstellung eines Registers;

- Grundsätzliches Verbot der Einleitung von Schadstoffen in das Grundwasser und die Umkehrung einer Erhöhung von Schadstoffen;
- Maßnahmen zur Vorbeugung von unfallbedingten Verschmutzungen;
- Zusätzliche Schutz- und Sanierungsmaßnahmen zur Zielerreichung wie z.B. Einrichtung von Schutz- und Schongebieten, Bau von Fischtrepfen, Renaturierungen usw.

Die Maßnahmenprogramme müssen spätestens zwölf Jahre nach Inkrafttreten der Richtlinie in die Praxis umgesetzt sein und werden langfristig alle sechs Jahre überprüft und aktualisiert.

Die Bewirtschaftungspläne enthalten Karten, Zusammenfassungen und Auswertungen in Textform, die Vorgaben der WRRL für das jeweilige Flusseinzugsgebiet aufgreifen (Anh. VII; Art. 8; Anh. V); sie sind damit als Gesamtheit flächendeckend, stellen das zentrale Instrument wasserwirtschaftlichen Handelns dar und dienen als Berichtsmedium gegenüber der Öffentlichkeit und den Organen. Die Bewirtschaftungspläne müssen unter anderem folgendes leisten:

- hydrografische Abgrenzung der Einzugsgebiete und Bildung von Flussgebietseinheiten,
- Benennung der zuständigen Behörden zur Durchführung der Flussgebietsplanung in den Flussgebietseinheiten,
- Aufstellung von Flussgebietsplänen für die Flussgebietseinheiten sowie
- nationale und internationale Koordination der Flussgebietsplanung in den Flussgebieten.

Die Aufstellung der Bewirtschaftungspläne richtet sich im Wesentlichen nach den folgenden inhaltlichen Vorgaben:

- Beschreibung des Einzugsgebietes nach hydrologischen und naturräumlichen Gegebenheiten,
- Erfassung der Einflüsse menschlicher Aktivitäten auf den Gewässerzustand getrennt nach Punktquellen, diffusen Quellen, Wasserentnahmen und anderen negativen Einflüssen,
- Darstellung des ökologischen und chemischen Gewässerzustandes beziehungsweise des quantitativen Grundwasserzustandes sowie des Zustandes vorhandener Schutzgebiete,

- ökonomische Analyse als Grundlage
 - zur Festlegung der Kosten für die Wasserver- und -entsorgung einschließlich Prognose,
 - zur Abschätzung der Kosteneffektivität von Maßnahmen,
- Erarbeitung von Maßnahmenprogrammen zur Zielerreichung und Darstellung der Umsetzung.

Die Bewirtschaftungspläne werden spätestens neun Jahre nach Inkrafttreten der Richtlinie veröffentlicht und langfristig alle sechs Jahre überprüft und aktualisiert.

1.2. Ziele und Hypothesen

Ausgehend von der in der WRRL geforderten flussgebietsbezogenen Planung zur Gewässerbewirtschaftung ergeben sich besondere Aufgaben für die Ermittlung des qualitativen Ist-Zustandes von Flussgebietseinheiten sowie der Bestimmung des Sollzustandes und der Defizite. Gemäß des Art. 5 Abs. 1 WRRL erfordert dies für jede Flussgebietseinheit zum einen die „Analyse ihrer Merkmale“ zum anderen die „Überprüfung der Auswirkungen menschlicher Tätigkeiten auf den Zustand (...) des Grundwassers“. Das Aufzeigen von Lösungsmöglichkeiten des so umschriebenen Untersuchungs- und Bewertungsbedarfs ist Hauptziel dieser Arbeit. Exemplarisch wird dies am Beispiel des Bundeslandes Baden-Württemberg, ausgewählter Schadstoffe für den Bereich des Grundwassers genauer und praxisrelevant untersucht. Dazu sind insbesondere die folgenden Fragestellungen zu beantworten:

(F1) Können flächendeckend Aussagen zur oberflächennahen Grundwasserbeschaffenheit gemacht werden?

(a) Sind Daten aus existierenden Messprogrammen dafür ausreichend?

(b) Lassen sich flächenhafte Aussagen auf andere Maßstabsskalen übertragen?

(F2) Sind Flussgebiete die geeigneten räumlichen Bezugssysteme für ein Grundwasserqualitätsmonitoring?

(F3) Wie kann der menschliche Einfluss auf die Grundwasserbeschaffenheit flächendeckend erfasst werden?

- (a) Ist der menschliche Einfluss in verschiedenen räumlichen Bezugssystemen besonders gut oder schlecht abzubilden?
- (b) Ist ein bestimmter Belastungstypus an mehreren Messstellen nachweisbar?

Den Fragestellungen liegen neben den Vorgaben der WRRL die folgenden hypothetischen Annahmen zu Grunde:

(H1) Physikalische und chemische Stoffeigenschaften, naturräumliche Gegebenheiten sowie Applikationsmenge und -modus bestimmen die Verteilung in Flusseinzugsgebieten.

- (b) Je leichter flüchtig oder löslich und chemisch oder mikrobiell abbaubar Verbindungen sind und je höher Speichervermögen und Transformationspotenzial des Bodens sowie dessen Grundwasserabstand sind, desto geringer ist die Wahrscheinlichkeit einer Grundwasserbelastung durch diffuse Stoffeinträge.
- (c) Regionalisierungen auf der Grundlage der verteilungsrelevanten Bodeneigenschaften Humus- und Tongehalt, pH-Wert, Tonmineralgarnitur, Transformationspotenzial, Bodentemperatur und -feuchte liefern potenzielle Verbreitungsmuster von Schadstoffen in den Böden eines Flusseinzugsgebietes und damit – komplementär – der Grundwassergefährdung.
- (d) Die Infiltrationskapazität der Böden, die Grundwasserspeisung und hydraulische Leitfähigkeit der Boden- und Lockergesteinsschichten beziehungsweise die Klüftigkeit von Festgesteinen bestimmen unter sonst gleichen Rahmenbedingungen den Stofftransport in der Lösungsphase durch Oberflächenabfluss, Interflow und Grundwasser in die Vorfluter eines Flussgebietes.

(e) Auf verschiedenen Maßstabsskalenebenen weisen die einzelnen Steuergrößen der Schadstoffbelastung der Böden beziehungsweise der Grundwässer unterschiedliche Bedeutung auf.

(H2) Höherdimensionale GIS-gestützte Modelle der Schadstoffverteilung im Grundwasser spiegelt umso besser definierte Raumstrukturen, je mehr deren (multivariate) Kennzeichnung auch für die Stoffverteilung relevante Größen berücksichtigt.

(a) Naturräumlich definierte Raumgliederungen kovariieren besser mit Konzentrationsmustern einzelner Schadstoffe in der Umwelt als anthropogen beeinflusste Raumgliederungen.

(b) Die Geometrie der amtlichen Grundwassermessstellen gestattet nur für kleine Maßstäbe angenähert flächentreue Schätzungen der Verteilung von Umweltchemikalien.

Das formulierte Hypothesensystem gibt die Struktur des Untersuchungsaufbaus vor. Nach einer Einordnung der vorliegenden Arbeit in **Kapitel 1** folgen fünf weitere Abschnitte, sowie eine Zusammenfassung (**Kapitel 7**), ein Literaturverzeichnis (**Kapitel 8**) und der **Anhang (Teil 2)** in dem sich die meisten Abbildungen, Tabellen und Karten befinden. **Kapitel 2** erfasst und ordnet die relevanten naturwissenschaftlichen Zusammenhänge des Verhaltens von Schadstoffen im Boden-Wasser-System als Grundlage für die weiteren analytischen und modellierenden Arbeitsschritte ein. Die Vorstellung und Auswahl geeigneter Verfahren zur Problemlösung erfolgt in **Kapitel 3**. In **Kapitel 4** werden die verwendeten Datengrundlagen vorgestellt und diskutiert. Die statistischen Analysen, Modellierungen und Ergebnisse der GIS-Auswertungen werden in den Unterabschnitten des **Kapitel 5** vorgestellt. Eine kritische Diskussion der Auswertungen, des Arbeitsablaufes und der Ergebnisse und ein Ausblick erfolgt in **Kapitel 6**.

Kapitel	Arbeitschritt	Ziel
1	→ Vorstellung des Problems, Formulierung der Zielsetzungen, Einordnung der Arbeit	→ Gegenstand, Ziel und Aufbau der Untersuchung sind dargestellt und in Forschungszusammenhang gesetzt
2	→ Vorstellung relevanter Einflussfaktoren, Stoffverteilungsmuster und -konzentrationen	→ Erklärungsbasis für Stoffverteilungen und -konzentrationen ist abgeleitet
3	→ Vorstellung und Diskussion geeigneter Modelle und Verfahren	→ Im Lösungsweg eingesetzte Modelle und Verfahren sind vorgestellt und der Einsatz begründet
4	→ Vorstellung und Interpretation der verwendeten Daten	→ Messwerte aus Überwachungsprogrammen sind vorgestellt, die Datenaufbereitung begründet und Probleme der Datenbasis diskutiert → Auswahl relevanter räumlicher Bezugssysteme ist begründet
5	→ Einsatz verschiedener statistischer Verfahren und Analysen → Einsatz von GIS	Ergebnisse zu Untersuchungen → der räumlichen Stoffverteilung, → der Stoffkonzentrationen, → deren räumlicher Zusammenhänge und → deren Abhängigkeiten vom Betrachtungsmaßstab, sowie → Möglichkeiten der räumlichen Schätzung von Stoffkonzentrationen, → Ähnlichkeiten von Messstellengruppen und → deren Abhängigkeiten von der Art der Raumgliederung sind durchgeführt, vorgestellt und begründet
6	→ Abschließende Ergebnisdiskussion	→ Ergebnisse sind abschließend diskutiert und in Bezug zur Umsetzung der WRRL gesetzt

Tabelle 1: Aufbau der Untersuchung

2. Schadstoffe im Boden-Wasser-System

2.1. Verständnisansatz

Schadstoffe sind nach Art. 2 Pkt. 31 WRRL alle „Stoffe die zu einer Verschmutzung führen können“; Anh. VIII Pkt. 7; 9 und 11 nennt explizit Metalle und Metallverbindungen, Biozide und Pflanzenschutzmittel (PSM) – bzw. deren Wirkstoffe –, Nitrate und Phosphate sowie weitere Stoffgruppen. Grundsätzlich kann die Verschmutzung des Grundwassers mit Schadstoffen, die im Sinne der WRRL als Kontamination – als Nachweis unnatürlich hoher Konzentrationen oder bereits der einfache Nachweis eines Schadstoffes – verstanden wird, zur Gefahr werden, wenn Beeinträchtigungen der belebten oder unbelebten Umwelt durch den Kontakt oder die Nutzung des mit Schadstoffen verunreinigten Grundwassers entstehen. Von einer Gefährdung wird im Allgemeinen dann ausgegangen, wenn ein anerkannter Schwellenwert der Schadstoffkonzentration überschritten wird (DVWK 1985), der nachweisbar Schädigungen des aufnehmenden Organismus hervorruft. Auf dieser Grundlage werden rechtsverbindliche Grenzwerte definiert. Die Definition von Grenzwerten ist durch Art. 17 der WRRL vorgesehen und wird in einer weiteren Richtlinie geregelt werden.

Analytische Ansätze der Erfassung von Stoffflüssen in ganzen Landschafts-ökosystemen (LESER 1991) oder schadstoffbeeinflussten Teilsystemen (FRÄNZLE 1993) kompartimentieren das zu untersuchende System in die funktionalen Hauptbestandteile Input, Prozesse, Regler, Speicher und Output.

Der Input von Schadstoffen in das Grundwasser erfolgt nach FRÄNZLE's Modellansatz primär über die Grundwasserneubildung. Damit befindet sich die Grundwasserqualität in Abhängigkeit der Funktionalität und des Outputs des Boden-Wasser-Systems. Das Boden-Wasser-System erhält durch anthropogene und natürliche Quellen einen Schadstoff-Input, im System ist der Schadstoff vielfältigen Prozessen ausgesetzt. Grundsätzlich wird im Sinn der WRRL zwischen rein anthropogenen Schadstoffen und natürlichen Schadstoffen unterschieden. Als natürlich vorkommende Schadstoffe werden im Grundwasser geogene Metalle, sowie Phosphat-, Stickstoff- und Schwefelverbindungen verstanden, Quellen sind der aquiferbildende Gesteinstyp und die Produkte natürlich im und auf dem Boden erfolgender Prozesse. Die rein natürlich vorkommenden Konzentrationen werden anthropogen – teils stark, beispielsweise durch Stickstoffdüngung – überlagert, die natürliche Hintergrundkon-

zentration ist im beeinflussten System in der Regel nicht bekannt (LfU 2000a). Ausschließlich anthropogenen Ursprungs sind die Wirkstoffe der PSM und in Industrie und Gewerbe eingesetzte Hilfsstoffe. Aussagekräftige Erkenntnisse zu PSM-Input-Mengen liegen nicht vor; das UBA (1997) weist zudem auf die Schwierigkeit hin, aus auf dem Markt abgesetzten Pflanzenschutzmittelmengen auf den Eintrag pro Flächeneinheit zu schließen, da betriebsbedingt von erheblichen Unterschieden auszugehen ist.

Kenntnisse der Schadstoffquantität im Grundwasserspeicher liegen als Ergebnisse aus Messprogrammen vor, in denen die Beprobungen des Grundwassers aus in verschiedenen Messnetzen organisierten Grundwassermessstellen zusammengeführt werden. KÖLLE (2001) gibt auf Grundlage von Untersuchungen für Mitteleuropa erwartete Schadstoffkonzentrationen im Grundwasser an, die sich wie folgt zusammenstellen lassen:

	Einheit	Erwartung
Pb	mg/l	< 0,040
As	mg/l	< 0,040
Cd	mg/l	< 0,005
NO ₃	mg/l	< 90,000
Trichlorethen	mg/l	< 0,010
Tetrachlorethen	mg/l	< 0,010
Atrazin	µg/l	< 0,100
Simazin	µg/l	< 0,100
LHKW	mg/l	< 0,010
Diuron	µg/l	< 0,100
Desethylatrazin	µg/l	< 0,100
Isoproturon	µg/l	< 0,100
Bromacil	µg/l	< 0,100
Hexazinon	µg/l	< 0,100
Bentazon	µg/l	< 0,100

Tabelle 2: Erwartete Konzentrationsspektren im GW (KÖLLE 2001)

Die Art und der Umfang des Schadstoff-Outputs aus den Boden-Wasser-System in das Grundwasser ist gesteuert durch chemisch-physikalische Eigenschaften des Schadstoffs und chemisch-physikalische Eigenschaften des Bodens und seiner funktionalen Teilsysteme, den Regeln für den Schadstoffeintrag in das Grundwasser.

2.2. Regel- und Transportprozesse

Der Eintritt eines anthropogenen Schadstoffes in das Boden-Wasser-System kann an der Bodenoberfläche durch Aufnahme in die Pflanze oder Verflüchtigung reduziert werden. Eine Verflüchtigung ausgebrachter Schadstoffe von Boden- und Pflanzenoberfläche ist sowohl von seinen Eigenschaften, den Eigenschaften des Bodens, als auch von atmosphärischen Einflüssen wie Niederschlag, Luftfeuchtigkeit, Wind, Temperatur und Strahlung abhängig. Durch Aufnahme in die Pflanze erfolgt entweder eine Transformation im pflanzenphysiologischen System, ein späteres Ausscheiden oder eine Akkumulation im Pflanzenkörper. Sofern eine Akkumulation erfolgt, kann ein Abtransport mit der Ernte oder ein zeitlich verzögerter Eintritt in das Bodensystem über den Abbau auf der Bodenoberfläche befindlichen pflanzlichen Materials erfolgen.

Das Verhalten von anthropogenen Schadstoffen im Bodensystem und damit der Eintrag in das Grundwasser wird durch drei Prozesse charakterisiert (BLUME 1992a):

- (A) Umwandlung
- (B) Bindung
- (C) Transport

Jeder der Prozesse wird durch beeinflussenden Verhaltenseigenschaften der Schadstoffe

- (S1) Flüchtigkeit
- (S2) Wasserlöslichkeit
- (S3) Bindungsfähigkeit (an Humus/Ton)
- (S4) Abbaubarkeit (chemisch, mikrobiell, aerob, anaerob)

und die beeinflussenden Bodeneigenschaften

- (B1) Infiltrationskapazität
- (B2) Humusgehalt
- (B3) Temperatur
- (B4) Tonart
- (B5) Tongehalt

- (B6) Transformationspotenzial
- (B7) Bodenfeuchte und Bodenluft
- (B8) hydraulische Leitfähigkeit
- (B9) pH-Wert
- (B10) Speichervermögen
- (B11) Grundwasserabstand

bestimmt, wobei zwischen allen Faktoren und zwischen Schadstoffen Wechselwirkungen existieren. Die genannten Eigenschaften (Sx) sind Gegenstand umfangreicher Untersuchungen, sowohl mit dem Ziel der herstellerunabhängigen Information über Wirkstoffe in Pflanzenschutzmitteln (Industrieverband Pflanzenschutz = IPS, 1982) als auch über „potenziell als gefährlich einzustufende und in die Umwelt freigesetzte Altstoffe“ (Beratergremium für umweltrelevante Altstoffe = BUA 1993/1994/1999). Die genannten Eigenschaften (Bx) sind insbesondere von BLUME (1992), SCHEFFER (1992) FRÄNZLE (1993) auf Grundlage zahlreicher Einzeluntersuchungen ausführlich erläutert.

Unter Bezugnahme auf die genannten Quellen sind die Prozesse (1) bis (3) und Wechselwirkungen der Schadstoff- und Bodeneigenschaften als Grundlage einer Modellierung näher zu erläutern.

Als Umwandlung ist die Veränderung der ursprünglich schädlichen Substanz zu verstehen. Die durch Umwandlung entstehenden Metabolite können die schädliche Wirkung der Ausgangssubstanz haben oder toxikologisch unbedeutend sein. Der Umwandlungsprozess kann fotochemisch, chemisch und biotisch (mikrobiell), sowohl parallel als auch zeitlich versetzt, erfolgen. Fotochemische Umwandlung erfolgt durch Isomerisierung, Dechlorierung oder Oxidation ausschließlich an der Bodenoberfläche unter Beeinflussung der dort vorherrschenden Bedingungen, insbesondere der UV-Einstrahlung.

Die chemische Umwandlung erfolgt durch Hydrolyse, Oxidation und Isomerisation. Die Hydrolyse erfolgt insbesondere unter alkalischen Bedingungen sehr stark, wobei die Umwandlungsgeschwindigkeit nicht nur pH- sondern auch temperaturabhängig ist und damit unter sauren Bedingungen gleichfalls beträchtliche Hydrolyse-raten erreicht werden können. Die katalytischen Eigenschaften der Tonminerale vermögen den Umwandlungsprozess insbesondere unter sauren Bedingungen

durch Protonenabgabe aus den in Wassermolekülen hydratisierten Austauschkationen zu beschleunigen.

Die weitaus größte Bedeutung wird der mikrobiellen Umwandlung beigemessen. Insbesondere Pilze und Bakterien vermögen Schadstoffe mittels Hydrolyse, Oxidation, Abspaltung und Ersatz von Substituten und Ringspaltung zunächst in weniger schädlich wirksame Metaboliten zu transformieren und diese als Kohlenstoffquelle zu verwenden und letztlich zu Kohlendioxid zu oxidieren. Die mikrobielle Abbaubarkeit variiert erheblich in Abhängigkeit des chemischen Aufbaus des Schadstoffs (Abbaufähigkeit), Umfang der Verfügbarkeit mikrobiellen Lebens (Lebensbedingungen im Boden über lange Zeiträume) und den die mikrobielle Aktivität steuernden Größen (insbesondere Temperatur, pH, Bodenluft- und Bodenwasserhaushalt, alternative Nahrungsquellen). Ein vollständiger Abbau eingetragener Schadstoffe erfolgt oft nur über längere Zeiträume, wenngleich die Umwandlung in unschädliche Metabolite oft rasch abläuft.

Die Schadstoffbindung ist die vorübergehende oder dauerhafte Adsorption im Boden bzw. seinen Bestandteilen. Bei dauerhafter Akkumulation des nicht umgewandelten Schadstoffs erfolgt eine Anreicherung, die bei anhaltendem Schadstoffeintrag zur Kontamination des Bodens führt. Schadstoffbindungen erfolgen über Ligandenaustausch, Ionenbindung, Dipolreaktion, Wasserstoffbrückenbindung und van der Waals'schen Bindungen. Hauptsteuergrößen für die Adsorption sind Art und Menge des Adsorbens, Art und Menge des Adsorbenten, Wasserverfügbarkeit (Bodenfeuchte), pH-Wert und Temperatur. Als Adsorbenten stehen im Boden bedingt durch ihre große Oberfläche und verschiedenen Bindungstypen hauptsächlich Huminstoffe und Tonminerale zur Verfügung. Der Umfang der Schadstoffbindung ist damit in enger Abhängigkeit der Bodenbeschaffenheit räumlich variabel.

In den oberen Bodenschichten kann der Schadstofftransport gasförmig nach Verdampfung in der Bodenluft, als Feststoff bzw. gebunden an Feststoffe oder in wassergelöster Form erfolgen. Mit zunehmender Bodentiefe nimmt die Bedeutung des gasförmigen Transports mit Verringerung des Porenvolumens und damit des Bodenluftgehaltes bei gleichzeitiger Zunahme der wassergefüllten Poren ab. In Abhängigkeit der Porengröße befindet sich der Transport von in Festform vorliegenden oder an Feststoffe gebundenen Schadstoffe; ist die Korngröße des transportierenden oder transportierten Feststoffes gleich der Porengröße ist ein Transport physikalisch

nicht mehr möglich. Der Transport in den tieferen Bodenschichten und der Übergang in das Grundwasser erfolgt in wassergelöster Form und ist abhängig vom Ausmaß der Schadstoffadsorption, der Wasserlöslichkeit und der Wasserbewegung. Grundsätzlich kann Transport auf den genannten Pfaden in vertikale und horizontale Richtungen erfolgen.

Die Wasserlöslichkeit von Schadstoffen ist in der Regel bekannt (IPS 1982; BUA 1993/1994/1999) und bedingt durch die räumlich variierende Temperatur selbst räumlich variabel. Die Schadstoffadsorption – gesteuert durch die angesprochenen Bodeneigenschaften – und die Bewegung des Wassers im Boden – gesteuert durch klimatische und bodenphysikalische Faktoren – ist im Gegensatz dazu von zahlreichen räumlich variablen Faktoren abhängig. Insbesondere für kleinräumige Modelle weist PESCHKE (1999) die Abhängigkeit der Wasserbewegung von räumlichen Strukturen nach. HÖLTING (1996) geht aber trotz der regionalen Variabilität des Wasserhaushalts in Mitteleuropa von einer über einen längeren Zeitraum als im Mittel abwärts gerichteten Wasserbewegung aus.

Die mittels der WRRL-Instrumente Bewirtschaftungsplan und Maßnahmenprogramm durchzuführende „Analyse der Merkmale“ und „Überprüfung der Auswirkungen menschlicher Aktivitäten auf den Zustand des Grundwassers“ impliziert eine raumbezogene Bewertung des Grundwasserzustandes die ausgehend vom grundlegenden Verständnis der Regel- und Transportprozesse und der Variabilität eine Betrachtung existierender Modellansätze erfordert.

2.3. Aspekte der Variabilität

Daten zur Umweltbeschaffenheit werden über Messprogramme erfasst. Durch zusätzliche Informationen über die Messprogramme sind den erhobenen Datenwerten in der Regel methodische, räumliche und zeitliche Attribute zugeordnet. Die gemessenen Daten sind im statistischen Sinn als Stichproben der Grundgesamtheit zu verstehen, deren Beschaffenheit als solche nicht vollständig erfasst werden kann (SCHRÖDER 1994). Die Beprobungen werden an definierten Zeitpunkten an definierten räumlichen Punkten des Gesamtökosystems vorgenommen. Das Boden-Wasser-System ist durch zahlreiche raum- und zeitversetzt ablaufende und teils interagierende Prozesse in Abhängigkeit von der Betrachtungsskala nicht als homogen anzusehen (DIEKKRÜGER 1999).

Der festgestellte Umweltzustand ist damit nur an einem räumlichen Punkt zu einem bestimmten Zeitpunkt im Umweltsystem, sofern zwischen Probennahme und Probenanalyse keine relevante Beeinflussung des Probenmaterials stattfindet, als sicher anzusehen. Um Aussagen zur zeitlichen und räumlichen Variabilität zu ermöglichen werden wiederholte, zeitversetzte Beprobungen an verschiedenen Messstellen durchgeführt. Die gewonnenen Datensätze werden, um eine bessere Handhabung zu ermöglichen, oft aggregiert und mittels einfacher statistischer Verfahren – beispielsweise Spannweite, arithmetischer Mittelwert, Median, Standardabweichung, Art der Verteilung – beurteilt. Durch die Datenaggregation wird der Informationsgehalt des Primärdatensatzes auf die wesentlichen Informationen reduziert. Ausprägungen der räumlichen und zeitlichen Variabilität sind durch deskriptive oder einfach statistische Parameter räumlich oder zeitlich distanzierter Punktinformationen und deren Vergleich erfassbar. Für die aufgeworfenen Fragestellungen der WRRL zu definierten Zeitpunkten (Bewirtschaftungspläne in sechsjährigen Abständen) räumlich flächendeckende Aussagen (Flussgebiete) zur Grundwasserbeschaffenheit zu treffen, ist dies nicht ausreichend. Die zu treffenden Aussagen müssen entsprechend zeitlich aggregiert – im Fall mehrerer Messergebnisse derselben Messstelle innerhalb eines sechsjährigen Zeitraums – und räumlich extrapoliert – im Fall lediglich an Messstellen vorliegender Messergebnisse – sein.

Um die Lücken zwischen räumlichen und zeitlichen Messpunkten zu schließen bedarf es der Translokation – der Übertragung von festgestellten Merkmalen eines Objekts auf ein anders Objekt mit unbekanntem Merkmalen (BACH & FREDE 1999). Dieser Übertragungsprozess erfolgt beispielsweise vom Bearbeiter unter zu Hilfe-nahme seines Expertenwissens und kann ein zwei- oder dreidimensionales Ergebnis zum Ziel haben. Derartige Aussagen sind weder objektiv noch reliabel und eindeutig qualitativ zu beurteilen. Die Eignung für langfristige großräumige Untersuchungen ist daher fraglich. Es gilt daher geeignete Verfahren zu finden, die ausgehend von den Ergebnissen der Grundwasserüberwachungsprogramme qualitativ messbare Ergebnisse zur Schätzung der Grundwasserbeschaffenheit zwischen Messpunkten in räumlichen Bezugssystemen liefern.

3. Analyse und Modellierung der Grundwasserbeschaffenheit

3.1. Stoffstrommodelle

Verschiedene Modellierungsansätze gehen auf den abstrakten von LESER (1991) und FRÄNZLE (1993) geprägten Verständnisansatz (Kapitel 2.1) zurück. Transportmodellansätze bilden das Verhalten gelöster oder mit Wasser gemischter Chemikalien im Boden-Wasser-System oder im Grundwasser ab, meist beschränken sie sich auf vertikale oder horizontale Transporte. Da hierfür vorwiegend boden- und wasserphysikalische Parameter Berücksichtigung finden, sind die Ergebnisse von Gleichgewichtsmodellen hinsichtlich der Abbildung des Schadstoffverhaltens oft aussagekräftiger, oft fehlt die mehrdimensionale Berücksichtigung des Raumbezugs bei diesen völlig (JØRGENSEN 2002). Beide Modellansätze versuchen grundsätzlich eine möglichst exakte Abbildung der realen Prozesse zu erreichen, die bedingt durch die zahlreichen Einflussfaktoren (Kapitel 2.2) oft eine umfangreiche Datengrundlage notwendig macht.

Ein Entwicklungsziel von Stoffstrommodellen wie WASMOD/STOMOD (REICHE 1991) war es daher, den Datenbedarf auf möglichst allgemeine, durch umfangreiche Begleitversuche kalibrierte und flächendeckend verfügbare Parameter einzuschränken und damit Modellierungen für größere Flächen zu ermöglichen. GEROLD (1999, 2003) koppelt Stoffstrommodelle mit dem reliefanalytischen Verfahren SARA und kann damit „Hydrological Response Units“ auf der Mesoskala ausgrenzen und Stoffströme generieren.

Skalenspezifische und auf eine Fragestellung abgestimmte Modellansätze liefern nach DIEKKRÜGER (1999) gute Modellierungsergebnisse; die Übertragbarkeit auf andere Skalen, modifizierte Fragestellungen und insbesondere in die Fläche bleibt jedoch weitgehend unbeachtet. Die Fragestellung der flächenhaften Beschaffenheitsanalyse erfordert nicht – wie von Stoffstrommodellen geliefert – die möglichst vollständige und exakte Abbildung der Grundwasserbeschaffenheit zu definierten Zeitpunkten an bestimmten Messpunkten, sondern vielmehr ausgehend von Informationen an Messstellen den Übertrag von Informationen in die Fläche.

3.2. Flächenschätzung

Die Verifizierung der raumbezogenen Aspekte der Hypothesen (Kapitel 1.2) bedarf als Grundlageninformation flächendeckend vorliegender Informationen zur Grundwasserbeschaffenheit. Der Untersuchung der räumlichen Variabilität von Messpunktinformationen und deren Übertragung in die Fläche kommt für das Hauptziel dieser Arbeit eine zentrale Bedeutung zu.

Zahlreiche Verfahren werden eingesetzt, um aus Punktinformationen flächenhafte Aussagen zu generieren. Die einfachste Möglichkeit ist es, Mittelwert für definierte Raumeinheiten zu schätzen. Den Verfahren der Voronoi-/Thiessen-Polygone, Splines und Inverse-Distance-Weighting liegen spezifische mathematisch-kartografische Grundannahmen zugrunde, eine zusammenfassende Darstellung findet sich beispielsweise in BURROUGH & McDONELL (2000). Ein wesentlicher Nachteil ist allen genannten Verfahren gemeinsam: Die flächenhafte Darstellung erfolgt ohne Berücksichtigung der tatsächlichen räumlichen Variabilitätseigenschaften der untersuchten Merkmale und der zugrunde liegenden Prozesse. Das Verfahren der geostatistischen Analyse zielt im Gegensatz dazu auf die Beurteilung der räumlichen Variabilität ab.

3.2.1. Geostatistik

Als ortsabhängige Variablen sind Parameter zu verstehen, die Eigenschaften eines Punktes wiedergeben und einen räumlichen Bezug aufweisen. Viele umwelt(geo)-wissenschaftliche Kenngrößen, beispielsweise hydro(geo)logische und bodenkundliche Daten, sind so als ortsabhängige Variablen zu interpretieren. Die Geostatistik beschäftigt sich mit der Veränderung von Eigenschaftsausprägungen ortsabhängiger Variablen im Raum. Als "Theorie der ortsabhängigen Variablen und ihrer Schätzung" wurde die Geostatistik als eine geowissenschaftliche Spezialdisziplin in den wesentlichen Grundzügen durch MATHERON (1963) eingeführt.

Drei wesentliche Schritte werden im Allgemeinen als geostatistischer Arbeitsgang bezeichnet: Die Strukturanalyse – sie wird auch als Variogrammanalyse bezeichnet – erfasst und beschreibt die räumliche Variabilität mittels Berechnung eines empirischen Variogramms und ermöglicht als zweiten Schritt die Anpassung eines theoretischen Variogrammmodells. Der dritte Schritt ist die räumliche Schätzung mittels des Kriging-Verfahrens, bei dem eine Gewichtung der Eigenschaften eines Messpunktes auf Grundlage der umgebenden Messpunkte in Abhängigkeit der Ent-

fernung und Richtung erfolgt. Auf Grundlage der räumlichen Schätzung kann eine flächenhafte Darstellung der Ergebnisse und eine kartografische Aufarbeitung erfolgen.

Ein wichtiger Vorteil geostatistischer Verfahren für räumliche Interpolationen ist die Tatsache, dass neben den Schätzwerten auch die Schätzvarianzen berechnet werden, die als Indikatoren für die Zuverlässigkeit der Schätzung interpretiert werden können. Im Anhang sind die im Folgenden auf grundlegende Sachverhalte reduzierte Aspekte der Strukturanalyse (Anlage A in Anhang II), die grundlegenden theoretischen Variogrammodelle (Anlage B in Anhang II), der Krigingschätzung und spezieller Krigingverfahren (Anlage C in Anhang II) unter Bezugnahme auf AKIN & SIEMES (1988), SCHAFMEISTER (1999), STEIN (1999), HEINRICH (1994A, 1994B) und JOURNEL & HUIJBREGTS (1978) in erweiterter Form zusammengestellt.

3.2.1.1. Strukturanalyse

Mittels des Semivariogramms – meist nur als Variogramm bezeichnet – lassen sich die als Inkremente γ bezeichneten halbierten Varianzen der Differenzen $Z(x) - Z(x+h)$ der raumabhängigen Variablen unter Berücksichtigung des Abstands h darstellen (siehe Abbildung 1):

$$\gamma(h) = \frac{1}{2} \text{Var}[Z(x) - Z(x+h)] \quad (1)$$

Es wird aus dem experimentellen Variogramm abgeleitet, das auf die auch heute noch gebräuchliche Formulierung von MATHERON (1963) zurückgeht:

$$\gamma(h) = \left[\frac{1}{2} N(h) \right] \sum_{i=1}^N (Z(x_i) - Z(x_i+h))^2 \quad (2)$$

mit $N(h)$ = Anzahl der Probenpaare im Abstand h

Das Variogramm wird durch Auftrag der errechneten Semivarianzen $\gamma(h)$ für die Intervalle h der Entfernung visualisiert. Der Errechnung des Semivariogramms liegen einige Annahmen zu Grunde, die in Anlage A in Anhang II dargestellt sind.

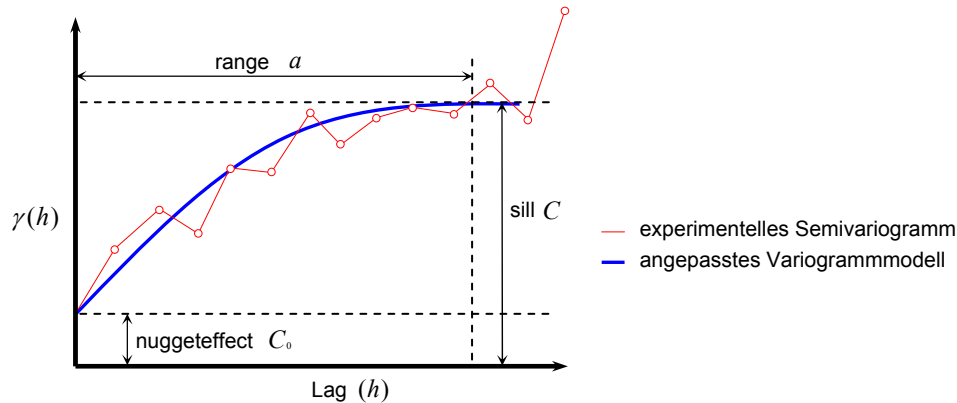


Abbildung 1: Experimentelles Semivariogramm und Variogrammodell

Variogrammodelle werden durch drei wesentliche, in Abbildung 1 veranschaulichte, Parameter charakterisiert: Dem Schwellenwert oder sill C , der den Wert angibt, dem sich die üblicherweise mit wachsenden Distanzen der beprobten Punkte ansteigenden Semivarianzen annähern. Damit entspricht er der Probenvarianz (AKIN & SIEMES 1988). Die Reichweite oder range a bezeichnet die Entfernung h der Punktepaare beim Erreichen des sill. Oft ist die Semivarianz bereits unterhalb des ersten Probenabstandintervalls größer Null; dies hat seine Ursache in der bereits relativ großen Variabilität der Merkmalausprägungen in sehr geringen Entfernungen. In solchen Fällen spricht man von einem nugget-effect C_0 .

Um das Variogramm sinnvoll für eine Flächenschätzung mittels Kriging einsetzen zu können, muss es an eine Modellfunktion angepasst werden. Üblicherweise reicht die kleine Anzahl gängiger Modellfunktionen – manchmal eine Kombination (Addition) dieser, dann als nested structures bezeichnet – aus, um eine geeignete Anpassung eines Variogrammodells an ein experimentelles Variogramm zu erzielen. Die angesprochenen Modellfunktionen sind durch umfangreiche, in der Literatur belegte theoretische und praktische Nachweise autorisiert (siehe Anlage B in Anhang II).

Auch die Variografie ist, wie andere Verfahren, der Flächenschätzung auf ein gewisses Maß an Subjektivität bei der Variogramminterpretation und Variogrammodellanpassung angewiesen. Heute eingesetzte Softwarepakete vermitteln oftmals durch voreingestellte Parameter den Eindruck, dass die Entscheidung für oder gegen ein Variogrammodell lediglich auf Grundlage "harter Fakten" getroffen würde. Es

sollte stets berücksichtigt werden, dass mittels der Variografie einer Stichprobe auf den zugrunde liegenden Prozess (Kapitel 2.2) geschlossen wird (HEINRICH 1994A). JOURNEL & HUIJBREGTS (1978) halten daher Variogramme nur bis zu einer Distanz gleich der halben Distanz eines Untersuchungsgebietes für interpretierbar und 30-50 Punktepaare für die Berechnung eines Variogrammwertes für notwendig.

Für angepasste Variogrammmodelle ist mittels der Kreuzvalidierung ein Gütekriterium zu errechnen. Dabei wird das angepasste Modell genutzt, um sukzessiv jeden bekannten Datenwert eines Punktes Z_i (der in der Modellanpassung berücksichtigt wurde) durch die umgebenden Messpunkte zu schätzen. Aus der Differenz zwischen Z_i und dem geschätzten Wert Z_i^* am Punkt x_i ist dann die Modellgüte an jedem der Datenpunkte als Schätzfehler interpretierbar – wobei Werte gegen Null angestrebt werden. Der mittlere Schätzfehler des Variogrammmodells

$$\frac{1}{N} \sum_N (Z - Z^*) \quad (3)$$

kann als Indikator für die Güte des angepassten Variogrammmodells verwendet werden. Für Vergleiche der Ergebnisse von Strukturanalysen verschiedener Maßstabskalenbereiche ist es sinnvoller, das Verhältnis zwischen den experimentellen und theoretischen Varianzen durch die Varianz des standardisierten Schätzfehlers anzugeben:

$$\frac{1}{N} \sum_N \left(\frac{Z - Z^*}{\sigma} \right)^2 \quad (4)$$

Im Optimalfall beträgt das Verhältnis 1. Mit zunehmender Abweichung der Werte muss von einer unzureichenden Abbildung des Ausgangsdatensatzes durch das Modell ausgegangen werden, die beispielsweise durch Ausreißer auftreten können.

3.2.1.2. Räumliche Schätzung

Das theoretische Variogrammmodell ermöglicht es mit dem – auf den südafrikanischen Bergbauingenieur D.G. Krige zurückgehenden – als Kriging bezeichneten räumlichen Schätzverfahren Punkt-, Flächen- oder Blockwertigkeiten aus den be-

nachbarten, gewichteten Variablenwerten zu ermitteln. Die Wertigkeiten werden unter der Bedingung der Minimierung der Schätzvarianz einem definierten Interpolationsraster zugewiesen.

Durch direkte Berücksichtigung der Ergebnisse der Variogrammanalyse muss der Bereich definiert werden, aus dem die für die Schätzung verwendeten Datenwerte stammen. Die so genannte Neighborhood ist maximal begrenzt durch die Reichweite des verwendeten, angepassten Variogrammodells. Da die Punkte in geringer Distanz des zu schätzenden Ortes stets die größten Gewichtungen erhalten, sind Punkte am Rand der zulässigen Neighborhood vergleichsweise unbedeutend und werden bei großer Datenpunktzahl häufig zur Reduzierung des Rechenaufwands nicht für die Schätzung herangezogen. Durch Definition einer Mindestprobenanzahl der für die Schätzung zu verwendenden Datenpunkte in der Neighborhood kann vermieden werden, dass Unsicherheiten im Schätzergebnis auftreten. Zellen des Interpolationsrasters für die dieses zutrifft werden als nicht berechenbar gekennzeichnet.

Die Errechnung des Krigingschätzers (Schätzwertes) Z_0^* ergibt sich für das univariate, lineare Ordinary Kriging aus einer Linearkombination der Probenwerte der umgebenden Messpunkte (SCHAFMEISTER 1999):

$$Z_0^* = \sum_{i=1}^n \lambda_i Z(x_i) \quad (5)$$

wobei die Gewichte λ_i so zu bestimmen sind, dass Z_0^* erwartungstreu ist und die sich unter Berücksichtigung des Variogramms ergebende (Kreuzvalidation) Krigingschätzvarianz

$$\sigma_K^2 = \text{Var}(Z_0^* - Z_0) = \mu + \sum_{i=1}^n \lambda_i \gamma(x_i - x_0) \quad (6)$$

ein Minimum sei. Die Berechnung der Gewichtung geht durch den Lagrangefaktor μ (Anlage C in Anhang II) ein, indem die Schätzvarianzen für die Schätzwerte minimiert werden und in der Summe 1 ergeben. Die Krigingschätzvarianz ist damit ein statistisches Maß für die Güte des Interpolationsergebnisses.

Einige hervorzuhebende Eigenschaften des Krigingschätzers gegenüber anderen Interpolationsverfahren sind nach vgl. SCHAFMEISTER (1999) und HEINRICH (1994B):

- (A) Einbeziehung des angepassten Variogramms, also der Ergebnisse der räumlichen Strukturanalyse, in die Schätzung.
- (B) Das Gleichungssystem ist nur vom Variogramm und der relativen Lage der Messpunkte, nicht aber von den Werten der Variablen in den Probenpunkten abhängig.
- (C) Es handelt sich um einen exakten Interpolator (bedingt durch die Minimierung der Schätzvarianz).
- (D) Es können mit Hilfe des Schätzfehlers für jeden Schätzpunkt Vertrauensgrenzen der Schätzung angegeben werden.
- (E) Der Krigingschätzer ist durch die Bedingungen der Erwartungstreue und Schätzvarianzminimierung ein so genannter BLUE (Best Linear Unbiased Estimator).
- (F) Das Gleichungssystem ist nur lösbar, wenn keine Probe mehrfach mit gleichen Koordinaten auftritt.

Die dargestellte Methode zur räumlichen Schätzung setzt ein positives Ergebnis der räumlichen Strukturanalyse, die Existenz einer räumlichen Autokorrelation voraus. Für die Ausprägungen zahlreicher Kompartimente verschiedener Sphären kann diese räumliche Autokorrelation vermutet und entsprechend der dargestellten Verfahren untersucht werden. Sofern die Strukturanalyse allerdings zu einem negativen Ergebnis führt, ist die Aussagefähigkeit einer Krigingschätzung eingeschränkt. Ein Vergleich mit den Ergebnissen aus anderen Verfahren scheint in derartigen Fällen sinnvoll.

3.2.2. Inverse-Distance-Weighting

In der vorliegenden Untersuchung wird Inverse-Distance-Weighting (IDW) eingesetzt, um einen Vergleich zu Krigingschätzungen zu ermöglichen. Gegenwärtig ist IDW eines der am häufigsten eingesetzten Verfahren, es ist in fast allen gängigen Programmen für raumbezogene Datenverarbeitung (beispielsweise ArcGIS, Surfer) verfügbar.

Dem IDW liegt – wie der eigentlichen Geostatistik – die Annahme zugrunde, dass sich die Ausprägungen von Messpunkten mit zunehmender Distanz zueinander vergrößern, sich „nahe“ Messstellen also „ähnlicher“ sind als solche, die weit voneinander entfernt liegen. Den Merkmalsausprägungen Z umliegender Messpunkte am Ort i wird daher bei der Schätzung eines Messpunktes Z^* am Ort 0 eine invers zur Distanz ansteigende Gewichtung λ zugeordnet. Allgemein formuliert:

$$Z_0^* = \sum_{i=1}^n \lambda_i Z(x_i) \quad (7)$$

Die Errechnung der Gewichte erfolgt – im Gegensatz zum Kriging – nicht unter Berücksichtigung der räumlichen Variabilität der Merkmalsausprägungen sondern durch

$$\lambda_i = \frac{d_{i0}^{-p}}{\sum_{i=1}^n d_{i0}^{-p}} \quad (8)$$

wobei d_{i0} die Distanz zwischen Vorhersage- und Messpunkt ist. Der Exponent p beeinflusst damit direkt das abnehmende Gewicht eines Punktes mit zunehmender Distanz; je größer sein Betrag wird, desto schneller nimmt die Gewichtung ab.

IDW lässt weder Rückschlüsse auf die Güte der Abbildung des räumlichen Variabilitätsverhaltens des untersuchten Datensatzes noch auf die darauf aufbauende Interpolation zu. Schätzfehler können nicht errechnet werden, damit fehlt für flächenhafte Aussagen ein Indikator zur Qualitätsbeurteilung. Der IDW-Schätzwert ist – wie auch der Krigingschätzer – ein exakter Interpolator. Durch die Exponenzierung ist IDW sehr anfällig für Extremwerte im Datensatz und räumliche Häufungen der Messpunkte.

3.3. Räumliche Bezugssysteme

Übliche Verfahren der Flächenschätzung (Kapitel 3.2) berücksichtigen – bedingt durch den rein statistisch abgeleiteten Ansatz der Schätzung unbekannter Punkte auf Grundlage von Messpunktinformation – nicht das Schadstoffverhalten im Boden-Wasser-System. Die großräumige Modellierung der Grundwasserbeschaffenheit mittels Stoffstrommodellen ist aus den in Kapitel 3.1 angesprochenen Gründen nicht geeignet, großflächige Aussagen zu treffen, da eine Verknüpfung zur Flächenschätzung fehlt. Es stellt sich daher die Frage, inwieweit sich die in Kapitel 2.2 dargestellten Regel- und Transportprozesse in verschiedenen Raumklassen zusammenfassen lassen. Für diese räumlichen Bezugssysteme gilt es Zusammenhänge zwischen der in einer definierten Raumklasse erwarteten Grundwasserbeschaffenheit zu prüfen und die räumlichen Schätzungen auf Grundlage der Messdaten zu erfassen. Gleichfalls wäre zu prüfen, ob sich scharfe Raumklassengrenzen mittels Raumschätzung abbilden lassen.

Die räumlichen Bezugssysteme sollten auf Grundlage der wesentlichen Einflussfaktoren Begrenzungen der räumlichen Messdatenvariabilität darstellen, die sich folgendermaßen summieren lassen:

- (A) Regionen ähnlicher Bodenschutzfunktion gegenüber Schadstoffeinträgen in das Grundwasser
- (B) Regionen ähnlicher natürlicher Grundwasserbeschaffenheit

Da die WRRL als rechtliches Regelwerk erstmalig naturräumliche Grenzen als Bezugssystem für rechtsverbindliche Beurteilungen festlegt, muss zudem die Raumklasse

- (C) Flusseinzugsgebiet

berücksichtigt werden. Die Eignung dieser naturräumlich definierten Klassen zur Abbildung der tatsächlichen Grundwasserbeschaffenheit kann mit Raumgliederungen anthropogenen Ursprungs wie

- (D) Regionen ähnlicher potenzieller anthropogener Schadstoffbelastung
- (E) Regierungsbezirken

vergleichend betrachtet werden.

3.3.1. Naturräumliche Bezugssysteme

Die klassische großflächige Naturraumgliederung für Deutschland von MEYNEN et al. (1953 - 1962) grenzt Großlandschaften aus, die einige der relevanten Faktoren integrieren. Für die Fragestellungen relevant wären insbesondere die Raumgliederungen der Bodeneigenschaften, die aber lediglich bodenphysikalische Parameter berücksichtigt und deren Ableitungskriterien und Datengrundlagen nicht eindeutig nachvollziehbar sind. Gleiches trifft für die Entwürfe von HOLLSTEIN (1963) zu. RENNERS (1992) überarbeitete und ergänzte die Entwürfe von MEYNEN auf den aktuellen Wissensstand. Ein grundsätzlich überarbeitetes Konzept, das die Fortschritte der Datenverarbeitung einbezieht und die wichtigen Kriterien der Bearbeiterunabhängigkeit, der Wiederholbarkeit und Gültigkeit der Ergebnisse – insbesondere für die räumliche Verortung – enthält ist jedoch nicht erkennbar. Die bodenkundlichen Karten von RÖSCHMANN (1986) berücksichtigen zwar das „mechanische Filtervermögen“ der Böden, sind aber als großmaßstäbige Bodengesellschaftskarten und den damit verbundenen Generalisierungen mit erheblichen Informationsverluste verbunden. FRÄNZLE (1988) kommt zu dem Ergebnis, dass bodentypologische Karten diesen Typs für pedofunktionale Aussagen weitgehend ungeeignet sind.

Die genannten Kritikpunkte treffen in ähnlicher Weise auf die von SCHMIDT (2002) entworfene „ökologische Raumgliederung für Deutschland“ zu. Der Ansatz unterscheidet sich grundsätzlich von früheren Raumgliederungen, da eine Vielzahl für „Ökologische Klassen“ relevante Parameter mit klar definierten multivariat-statistischen Verfahren verarbeitet werden und damit insbesondere der Objektivität und Reliabilität eine große Bedeutung beigemessen wird. Die exemplarisch durchgeführten Raumgliederungen integrieren die genannten Einflussfaktoren der Schadstoffverteilung in Böden nicht ausreichend.

Das Landesamt für Geologie, Rohstoffe und Bergbau Baden-Württemberg (LGRB 1998) erarbeitete eine sechsstufige Klassifikation der „Schutzfunktion der

Grundwasserüberdeckung“. Die Raumgliederung stützt sich im Wesentlichen auf das Konzept HÖLTING's (1995) als Summe der Schutzfunktionen des Bodens, bindiger quartärer und tertiärer Deckschichten und der restlichen ungesättigten Zone. Das Konzept beinhaltet wie alle großmaßstäbigen Raumgliederungen die Generalisierungsproblematik. Die wichtigsten Eingangsgrößen für die Bewertung sind die Verweildauer des Sickerwassers in der ungesättigten Zone, die Sickerwasserrate, die nFK, sowie Mächtigkeit, Petrographie und Klüftigkeit der Grundwasserüberdeckung unterhalb des Bodens. Der Flurabstand geht für die einzelnen hydrogeologischen Einheiten jeweils als konstant ein.

Die geogene Grundwasserbeschaffenheit Baden-Württembergs wird vom LGRB (1998) in fünf Klassen unterteilt. Die gebildeten Grundwassertypenklassen gehen auf die Eigenschaften der hydrogeologischen Einheiten zurück – bei sekundärer Berücksichtigung anthropogener Belastung und der Grundwasserneubildung aus dem Niederschlag. Damit werden die Grundwassertypen überwiegend durch die mineralogische Zusammensetzung des Kontaktgesteins bestimmt.

Die WRRL schreibt als zu verwendende Raumgliederung Flusseinzugsgebiete vor, die entsprechend des Bearbeitungsmaßstabs weiter zu unterteilen sind. Hauptkriterium für die großmaßstäbige Flussgebietsabgrenzung ist die Morphologie. Für die Umsetzung der WRRL in Deutschland werden existierende Abgrenzungen für diese weitere Unterteilung verwendet, die in der Regel bereits von den geologischen Landesdiensten erarbeitet und validiert wurden (LAWA 2004).

3.3.2. Anthropogene Bezugssysteme

Regierungsbezirke stellen rein administrative Raumgrenzen dar. Bedingt durch das deutsche Verwaltungssystem sind diesen Raumsystemen bisher auch die Überwachung, Analyse und Beurteilung der Naturräume zugewiesen. Durch die Festsetzung von Flussgebieten als Raumbezugssysteme für die Umsetzung der WRRL wird diese Zuordnung ersetzt. Eine Prüfung, inwieweit diese Bezugssysteme geeignet für die Überwachung von Naturräumen sind, ist nie erfolgt. Durch die diskutierten Einflussfaktoren auf die Grundwasserbeschaffenheit ist eine Korrelation der Grundwassereigenschaften mit administrativen Bezugsflächen nicht zu erwarten.

Großräumige Flächennutzungen sind auf Grundlage von Satellitenbilddaufnahmen erfassbar. Insbesondere für Pflanzenschutzmittel ist eine Korrelation der im Grundwasser nachweisbaren Konzentrationen mit intensiver landwirtschaftlicher Nutzung zu erwarten. Im Jahr 1993 wurde von der LFU eine Landnutzungsklassifikation auf Grundlage von Landsat-Aufnahmen erarbeitet (CORINE-Landcover), die selbst bei Verwendung der Hauptnutzungsklassen detaillierte räumliche Zuordnungen der Landoberfläche zulässt.

Die aus der WRRL abgeleitete Fragestellung der anthropogenen Beeinflussung des Grundwasserzustandes wäre durch Vergleich der Landnutzungsform und tatsächlich vorliegenden Schadstoffkonzentrationen prüfbar. Es ist hinsichtlich der Ausweisung von räumlichen Belastungsschwerpunkten und der Optimierung von Monitoringnetzen sinnvoll, Messstellen entsprechend ihrer multiplen Merkmalsausprägungen zu gruppieren. Für Regionen, in denen gehäuft Messstellen definierter – auf anthropogene Aktivitäten zurückzuführende – Belastungscharakteristika liegen, sind spezifisch abgestimmte Maßnahmenprogramme und Bewirtschaftungspläne zu erstellen. Für Messstellengruppen, die starke Grundwasserbelastungen zeigen, ist zu überprüfen, ob eine Intensivierung der Messintervalle und der erhobenen Parameter adäquat ist. Es wäre zu prüfen, ob eine Ergänzung des Messstellennetzes sinnvoll ist, um Belastungsgebiete exakter erfassen zu können. Dies kann von Nutzen sein, um die Effektivität eingeleiteter Maßnahmen zur Erreichung von UQZ vor dem Hintergrund der WRRL zu überprüfen.

Geeignete Verfahren müssen Strukturen in großen Datensätzen erkennen und Messstellen zu Gruppen zusammenfassen, in denen die Fälle sich möglichst ähnlich sind. Die Gruppen sollten untereinander möglichst klar getrennt sein. Mit geeigneten Verfahren sollten metrisch skalierte Variablenausprägungen verarbeitet werden können, wobei jeder Messstelle mehrere Variablen zugeordnet sind. Die Verfahren sollten möglichst objektiv und reliabel zu Gruppierungen gelangen. Gegenwärtig erscheint die im Folgenden kurz vorgestellte Clusteranalyse am ehesten geeignet, die genannten Kriterien zu erfüllen.

3.4. Messstellengruppierung

Als ein strukturentdeckendes statistisches Verfahren dient die Clusteranalyse der Unterteilung einer heterogenen statistischen Stichprobe in möglichst homogene Teilmengen (Cluster) anhand der Fälle. Als Fall werden im Zusammenhang mit der Clusteranalyse die einem Parameter zuzuordnenden Merkmale und ihre Ausprägungen bezeichnet. Die Mitglieder einer Teilmenge oder Gruppe sollen sich dabei möglichst ähnlich, die Gruppen untereinander möglichst verschieden sein. Als Resultat einer Clusteranalyse ergeben sich nach einem mathematisch definierten Verfahren abgeleitete Gruppen, die hinsichtlich ihrer Eigenschaftsausprägungen Ähnlichkeiten aufweisen. Die Clusteranalyse ist ein Verfahren, das in verschiedensten Kontexten der Sozial- und Naturwissenschaften angewandt wird. An die Clusteranalyse lassen sich zudem andere Verfahren anpassen beziehungsweise jeweils für die sich aus der Clusteranalyse ergebenden Teilgruppen anwenden.

Die Clusteranalyse lässt sich in zwei wesentliche Schritte unterteilen: Zunächst wird die statistische Ähnlichkeit zwischen den einzelnen Fällen bezüglich ihrer Merkmalsausprägungen ermittelt. Diese statistische Ähnlichkeit wird auch als Distanz bezeichnet; damit ist hier die statistische Verschiedenheit der Fälle gemeint, nicht etwa die räumliche Distanz. Im Anschluss erfolgt im zweiten Schritt die Zusammenfassung der Fälle mit größter Ähnlichkeit zu Untergruppen. Die folgenden überblicksweisen Ausführungen greifen im Wesentlichen auf die Darstellungen von BACKHAUS et al. (2000), JANSSEN & LAATZ (1999) und MUCHA (1994) zurück.

Zur Berechnung einer Distanzmatrix können verschiedene Methoden eingesetzt werden. Für praktische Anwendungen haben sich die Minkowski-Metriken oder L-Normen häufig als geeignete Distanzmaße erwiesen, sofern die zu untersuchenden Merkmale sich auf einem metrischen Skalenniveau befinden. Die Berechnung der so genannten L_2 -Norm (Euklidische Distanz) folgt dabei folgender allgemeiner Form nach:

$$d_{k,l}^2 = \sum_{j=1}^J |x_{kj} - x_{lj}|^2 \quad (9)$$

mit $d_{k,l}$ = Euklidische Distanz der Objekte k und l
 x_{kj}, x_{lj} = Wert der Variablen j bei Objekt k, l (j = 1, 2, ... J)

Die Quadrierung führt zu einer stärkeren Berücksichtigung großer Differenzwerte und einer kleineren Gewichtung geringerer Differenzen, was für einige naturwissenschaftliche Fragestellungen, insbesondere zur Gruppenbildung von Messstandorten, die Euklidische Distanz als geeignetes Distanzmaß bestätigt. Dies ist darauf zurückzuführen, dass in derartigen, wie auch der vorliegenden, Untersuchungen meist primär der absolute Abstand zwischen zwei Objekten von Interesse ist. Aus den Berechnungen lässt sich eine Distanzmatrix zur übersichtlichen Darstellung der Ergebnisse anfertigen. Bevor die Berechnung der Distanzmatrix erfolgen kann, muss – um Einflüsse unterschiedlicher Verteilungen und Skalenbereiche auszuschließen – eine Standardisierung erfolgen (vgl. hierzu Kap. 4).

Im zweiten Schritt der Clusteranalyse erfolgt eine Zusammenfassung zu Gruppen, also die eigentliche Clusterung. Grundsätzlich werden mono- und polythetische Verfahren unterschieden. Da die monothetischen Verfahren lediglich eine Variable zur Gruppenbildung heranziehen und damit den bereits formulierten Fragestellungen dieser Untersuchung nicht gerecht werden können, bleiben sie in den weiteren Ausführungen unberücksichtigt. Polythetische Verfahren lassen sich weiter differenzieren in partitionierende und hierarchische Verfahren. Dabei erfordern die partitionierenden Verfahren eine Startpartition erfordern, deren Gruppen durch Austauschalgorithmen solange einzelne Fälle zugeordnet werden, bis eine gegebene Zielfunktion ihr Optimum erreicht. Dieses Verfahren ist jedoch nur dann anwendbar, wenn eine geeignete Startpartition zuverlässig festgestellt werden kann. In den folgenden Abschnitten werden exemplarisch einige hierarchische und partitionierende Verfahren vorgestellt.

3.4.1. Hierarchische Verfahren

Hierarchische Verfahren kommen der Anforderung, eine Gruppierung der Gesamtheit des vorliegenden Datensatzes vorzunehmen, recht nahe, da hier die größte Partition der Ausgangspunkt des Algorithmus bildet, das heißt, alle Untersuchungsobjekte befinden sich zunächst in einer Gruppe.

Das Single-Linkage-Verfahren vereinigt zunächst die Objekte, die gemäß der Distanzmatrix (vgl. oben) die kleinste Distanz aufweisen. Für den folgenden Fusionschritt ist es danach notwendig, eine reduzierte Distanzmatrix zu errechnen,

die die Distanz der neu gebildeten Gruppe zu den anderen Fällen berechnet. Dies geschieht durch

$$D(R, P + Q) = \frac{1}{2} [D(R, P) + D(R, Q) - |D(R, P) - D(R, Q)|] \quad (10)$$

mit $D(R, P)$ = Distanz zwischen den Gruppen R und P
 $D(R, Q)$ = Distanz zwischen den Gruppen R und Q
 $D(P, Q)$ = Distanz zwischen den Gruppen P und Q

Das Single-Linkage-Verfahren weist somit der neu gebildeten Gruppe die kleinste Distanz zu, die sich aus den alten Distanzen der in der Gruppe vereinigten Objekte zu einem bestimmten anderen Objekt ergibt, was auch zur Bezeichnung als Nearest-Neighbour-Verfahren geführt hat. Als Ergebnis wird meist eine Clusterung in wenige große und viele kleine Gruppen, die als Ausreißer zu interpretieren sind, erreicht.

Das Ward-Verfahren erscheint durch die Distanzbildungs- und Fusionierungsalgorithmen am ehesten geeignet, um eine Unterteilung in Cluster ähnlicher Gruppengröße zu erzeugen. Ausgehend von der zuvor berechneten Distanzmatrix (vgl. oben) werden die Cluster (bzw. im ersten und ggf. auch in weiteren Fusionierungsschritten einzelne Fälle) mit der geringsten Distanz zueinander gesucht und zusammengefasst. Die Anzahl der Gruppen nimmt somit um eins ab. Durch Neuberechnung gelangt man zu einer reduzierten Distanzmatrix, die dann wiederum Basis für den nächsten Fusionierungsschritt ist. Die Distanzberechnung erfolgt dabei nach

$$D(R, P + Q) = \frac{1}{NR + NP + NQ} [(NR + NP) \times D(R, P) + (NR + NQ) \times D(R, Q) - NR \times D(P, Q)] \quad (11)$$

mit $D(R, P)$ = Distanz zwischen den Gruppen R und P
 $D(R, Q)$ = Distanz zwischen den Gruppen R und Q
 $D(P, Q)$ = Distanz zwischen den Gruppen P und Q
NR = Zahl der Objekte in Gruppe R
NP = Zahl der Objekte in Gruppe P
NQ = Zahl der Objekte in Gruppe Q

Im Gegensatz zu Single- und Complete-Linkage-Verfahren werden beim Ward-Verfahren nicht die Gruppen zusammengefasst, die die geringste Distanz aufweisen, sondern diejenigen, die ein vorgegebenes Heterogenitätsmaß am Wenigsten vergrößern.

ßern. Dieses Verfahren ist damit eine exakte Umsetzung der eigentlichen Intention, der mit der Clusteranalyse nachgegangen werden soll: die Unterteilung der vorliegenden Gesamtheit von Objekten in möglichst homogene Cluster. Als Heterogenitätsmaß wird üblicherweise die Fehlerquadratsumme (Varianzkriterium) verwendet, die sich für eine Gruppe g wie folgt errechnet:

$$V_g = \sum_{k=1}^{K_g} \sum_{j=1}^J (x_{kjg} - \bar{x}_{jg})^2 \quad (12)$$

mit x_{kjg} = Beobachtungswert der Variablen j ($j = 1, \dots, J$) bei Objekt k (für alle Objekte $k = 1, \dots, K_g$ in Gruppe g)
 \bar{x}_{jg} = Mittelwert über die Beobachtungswerte der Variablen j in Gruppe g

Das Verfahren fusioniert auf diese Weise in jedem weiteren Schritt zwei Gruppen, die ihr Heterogenitätsmaß am Wenigsten verändern, bis alle Objekte einem Cluster zugeordnet sind.

3.4.2. Partitionierende Verfahren

Anders als die zuvor besprochenen hierarchisch-agglomerativen Verfahren, bei denen eine Zuordnung der Objekte zu einem Cluster „fest“ ist, ist in dem partitionierenden Austauschverfahren K-means eine Umordnung der Objekte möglich beziehungsweise beabsichtigt. Dieses ebenfalls die Euklidische Distanz verwendende Verfahren erfordert die Vorgabe der angestrebten Clusterzahl. Ausgehend von dieser Startpartitionierung werden für die Gruppen in iterativen Schritten das Clusterzentrum berechnet und die Objekte zwischen den Gruppen ausgetauscht. Dabei wird überprüft, ob bei einer "Probeverlagerung" eines Objektes in eine andere Gruppe deren Fehlerquadratsumme minimiert werden kann. Sofern das der Fall ist, verbleibt das Objekt in der Gruppe. Wird keine Minimierung der Fehlerquadratsumme erreicht, wird es nicht in diese Gruppe verlagert. Nach jeder dauerhaften Verlagerung eines Objektes erfolgt eine erneute Berechnung der Clusterzentren und die probeweise Zuordnung des nächsten Objektes. Die Fehlerquadratsumme innerhalb der Cluster wird damit – ähnlich dem Ward-Verfahren – minimiert, hier allerdings durch eine Objektumordnung. Das k-means-Verfahren arbeitet, bis eine optimale Clusterung gefunden ist.

3.4.3. Qualitätssicherung

Das Ergebnis der Clusteranalyse ist eine vollständige Zuordnung aller Fälle in Cluster. Eine Aussage, welche Anzahl von Clustern die geeignetste zur Beantwortung der die Clusteranalyse initiierenden Fragestellung oder für weitere Untersuchungen ist, wird damit nicht getroffen. Diese Entscheidung muss vom Bearbeiter unter Zuhilfenahme von Hilfskriterien getroffen werden, um subjektive Einflüsse weitestgehend auszuschließen.

Als eine Interpretationshilfe findet häufig die Fehlerquadratsumme Verwendung, die die Zunahme des Distanzmaßes – also die "Trennschärfe" – charakterisiert. Trägt man die Fehlerquadratsumme gegen die Clusteranzahl in einem Koordinatensystem ab, wird visuell deutlich, nach welchem Fusionierungsschritt ein vergleichsweise deutlicher Heterogenitätssprung zu verzeichnen ist; vor diesem Schritt ist also möglicherweise eine als "geeignet" zu interpretierende Clusteranzahl erreicht. Man spricht in diesem Zusammenhang auch vom Elbow-Kriterium.

Eine weitere Möglichkeit zur Ermittlung einer geeigneten Clusterzahl ist die Darstellung der Fusionierung mittels eines Dendrogramms, wobei die Fehlerquadratsummen üblicherweise auf einer normierten Skala dargestellt werden. Die Fehlerquadratsumme der letzten Fusionierungsstufe entspricht dem Maximalwert. Häufig wird eine als geeignet angesehene Clusterzahl in der Mitte der normierten Skala angenommen, also nach dem letzten Fusionierungsschritt, mit dem 50 % der maximalen Fehlerquadratsumme erreicht werden.

Als Kriterium zur Beurteilung der Homogenität der ermittelten Cluster eignet sich der F-Wert, der sich aus

$$F = \frac{V(J, G)}{V(J)} \quad (13)$$

mit $V(J, G)$ = Varianz der Variable J in der Gruppe G
 $V(J)$ = Varianz der Variable J in der Erhebungsgesamtheit

errechnet. Sofern alle Variablen in einer Gruppe F-Werte von < 1 aufweisen, ist von einer vollkommenen Homogenität auszugehen. Übersteigt der F-Wert 1, weist die entsprechende Variable innerhalb des ermittelten Clusters eine größere Streuung auf

als in der Erhebungsgesamtheit. Durch F-Werte > 1 kann damit die Sinnhaftigkeit des Ergebnisses der Clusterung in Frage gestellt werden.

Zur Interpretation der Repräsentativität einzelner Variablen in den erzeugten Clustern kann der sich aus

$$t = \frac{\bar{X}(J, G) - \bar{X}(J)}{S(J)} \quad (14)$$

mit $\bar{X}(J, G)$ = Mittelwert der Variable J über die Objekte in Gruppe G

$\bar{X}(J)$ = Gesamtheit der Variable J in der Erhebungsgesamtheit

$S(J)$ = Standardabweichung der Variable J in der Erhebungsgesamtheit

errechnete t-Wert herangezogen werden. Negative t-Werte deuten auf eine Überrepräsentation der Variablen in dem betrachteten Cluster hin, positive t-Werte entsprechend auf eine Unterrepräsentation.

4. Eingangsdaten und Datenaufbereitung

Die exemplarische Problemlösung der aufgeworfenen Fragestellungen (Kapitel 1.2) mit den diskutierten Verfahren (Kapitel 3) erfordert eine umfangreiche Datengrundlage. Die in dieser Untersuchung verwendeten Daten sind dem von der Landesanstalt für Umweltschutz Baden-Württemberg (LFU 2000c) veröffentlichten „Jahresdaten-katalog Beschaffenheit des Grundwassers 1994 - 1998“, den vom Landesamt für Geologie, Rohstoffe und Bergbau Baden-Württemberg (LGRB 1998) veröffentlichten „Geowissenschaftlichen Übersichtskarten“ und dem Internetportal „WasserBLICK“ (<http://wasserblick.net>) entnommen. Zusätzlich wurden von der LFU Metainformationen zur Verortung der Grundwassermessstellen, ein aufbereitetes CORINE-Landcover und die Grenzen der Regierungsbezirke zur Verfügung gestellt.

	Inhalt	Datentyp/-format/-quelle	Verwendung
(1)	Grundwasserbeschaffenheitsmessnetze	Punkt/ASCII/LfU	<ul style="list-style-type: none"> • Selektion geeigneter Messstellen • Geostatistische Analyse
(2)	Metadaten zu Grundwasserbeschaffenheitsmessnetzen	Meta/ASCII/LfU	<ul style="list-style-type: none"> • Selektion geeigneter Messstellen • Räumliche Verortung GW-Messstellen
(3)	Messdaten der Grundwasserbeschaffenheitsmessnetze	Punkt/ASCII/LfU	<ul style="list-style-type: none"> • Clusteranalysen • Geostatistische Analyse
(4)	Abgrenzungen der Oberirdischen Flusseinzugsgebiete	Vektor/Coverage/WasserBLICK	<ul style="list-style-type: none"> • Räumliches Bezugssystem
(5)	Abgrenzungen der Regierungsbezirke	Vektor/Coverage/LfU	<ul style="list-style-type: none"> • Räumliches Bezugssystem
(6)	Raumklassen der Hydrogeologischen Einheiten	Fläche/Coverage/LGRB	<ul style="list-style-type: none"> • Räumliches Bezugssystem
(7)	Raumklassen der Grundwasserschutzfunktion	Fläche/Coverage/LGRB	<ul style="list-style-type: none"> • Räumliches Bezugssystem
(8)	Raumklassen der Landnutzung	Fläche/Grid/LfU	<ul style="list-style-type: none"> • Räumliches Bezugssystem

Tabelle 3: Verwendete Datenbasis

4.1. Messpunktinformationen

4.1.1. Eignung

Die Datenanalyse und -verarbeitung stellt grundsätzliche Anforderungen an die Datenbasis. Zu verwendende Daten müssen

- (a) räumlich verortbar und zeitlich definiert sein.
- (b) oberflächennah sein.
- (c) Ergebnisse geeigneter Probenahmeverfahren und chemischer Analyseverfahren sein.

Der LFU „Jahresdatenkatalog Beschaffenheit des Grundwassers 1994 - 1998“ (JDK) enthält insgesamt 226.172 Datensätze bezogen auf 2.201 Messstellen im Zeitraum 1994 - 1998. Ein Datensatz beinhaltet Informationen von bis zu 23 chemischen Beschaffenheitsparametern. Bedingt durch die Kriterien (a) bis (c) mussten Datensätze ausgeschlossen werden, so dass der in die Untersuchung eingehende Datenbestand aus 161.408 Datensätzen bezogen auf 1.599 Messstellen des genannten Zeitraums bestand. Die Eignungsbeurteilung erfolgte auf Grundlage von Zusatzinformationen (Metadaten) zum JDK.

Zu allen Messstellen des JDK lagen ergänzende Informationen zur räumlichen Verortung (Gauss-Krüger-Koordinaten) vor. Gleichfalls waren alle Messwerte zeitlich definiert.

Insgesamt werden in Baden-Württemberg elf Hauptmessnetze unterschiedlicher Zielsetzungen unterhalten; einen Überblick gibt Tabelle 4. Entsprechend den Fragestellungen der Untersuchung wurden lediglich die Daten des „Basismessnetzes“ (Ziel des Messnetzes: Überwachung der Grundwasserbeschaffenheit in anthropogen wenig beeinflussten Räumen; LFU 2000c) und der „Verdichtungsmessnetze“ (Ziel der Messnetze: Erfassung der Grundwasserbeschaffenheit nahe potenzieller Emittenten; LFU 2000c) verwendet. Die Daten anderer Messnetze wurden aufgrund der abweichenden Zielsetzungen als nicht relevant ausgeschlossen.

Messnetzbezeichnung	Datenbank Schlüsselnummer	Kürzel	verwendet
Basismessnetz	1	BMN	ja
Grundwasserstands-messnetz	2	ST	nein
Quellschüttungsmessnetz	3	QS	nein
Lysimetermessnetz	4	LYS	nein
Grobrastermessnetz	5	GR	nein
VMI Weicher Rand	6	I-WR	nein
Verdichtungsmessnetz Industrie	7	VMI	ja
Verdichtungsmessnetz Wasserversorgung	8	VMW	ja
Quellmessnetz	9	QMN	nein
Verdichtungsmessnetz Landwirtschaft	10	VML	ja
Verdichtungsmessnetz Siedlungen	17	VMS	ja

Tabelle 4: Messnetze des Grundwasserüberwachungsprogramms Baden-Württemberg.

Neben der Eignungsprüfung der Messstellen über Messnetzzugehörigkeit ist eine individuelle Überprüfung nötig, um diejenigen Messstellen zu selektieren, die die „oberflächennahe“ Grundwasserbeschaffenheit charakterisieren. Als Auswahlkriterium wurde die Tiefe des im Beprobungsbrunnen eingebauten Filters angesehen: Messstellen mit Filter tiefer als 30 m unter der Geländeoberkante wurden ausgeschlossen. Zusätzlich wurde überprüft, ob die verbliebenen Messstellen im obersten Grundwasserleiter liegen oder einem tieferen Aquifer zugeordnet werden müssen; sofern dies der Fall war, führte der Umstand ebenfalls zum Ausschluss.

Die Auswahl der Messstellenstandorte, die Planung, der Bau und die Unterhaltung der Messstellen, sowie der so genannte Datendienst, wurde für die verwendeten Daten durch die Gewässerdirektionen und die LfU durchgeführt (LFU 2000b). Die Probennahme und -analyse fand allerdings durch – meist private – chemische Untersuchungslabors, deren Mitarbeiter von der LfU geschult werden, auf Basis des LFU-internen Grundsatzpapiers „Grundwasserüberwachungsprogramm“ statt. Die quantitative Analyse chemisch-physikalischer Grundwassereigenschaften erfolgte nach gängigen Normen, die in Tabelle 5 zusammengestellt sind.

Parameter	Norm	Analyseverfahren
LF	DIN EN 27888, ISO 7888 (DEV C8)	Konduktometrisch
pH	DIN 38404-C5	Elektrometrisch
Na	DIN 38406-E14 DIN EN ISO 11885 (DEV E22) DIN ISO 9964-3 (DEV E27)	Flammenfotometrisch, ICP-AES, ICP-OES, ICP-MS
K	DIN 38406-E14 DIN EN ISO 11885 (DEV E22) DIN ISO 9964-3 (DEV E27)	Flammenfotometrisch, ICP-AES, ICP-OES, ICP-MS
Ca	DIN 38406-E3 DIN EN ISO 11885 (DEV E22)	Chelatometrisch, AAS, ICP-OES, ICP-MS
Mg	DIN 38406-E3 DIN EN ISO 11885 (DEV E22)	Chelatometrisch, AAS, ICP-OES, ICP-MS
Pb	DIN 38406-E6 DIN EN ISO 11885 (DEV E22)	Inversvoltammometrisch, AAS, ICP-OES, ICP-MS
As	DIN EN ISO 11885 (DEV E22) DIN EN 26595 (DEV D12) DIN EN ISO 11969 (DEV D18)	AAS (Graphitrohr), ICP-OES, Spektralfotometrie, AAS-Hybridssystem, ICP-MS
Cd	DIN 38406-E16 DIN EN ISO 11885 (DEV E22) DIN EN ISO 5961	Inversvoltammometrisch, AAS, ICP-OES, ICP-MS
NO ₃	DIN 38405-D9/-D29 DIN EN ISO 10304 (DEV 19)	Kolorimetrisch/fotometrisch, ionenchromatografisch
SO ₄	DIN 38405-D5 DIN EN ISO 10304-1 (DEV D19)	Titration, gravimetrisch, ionenchromatografisch
Cl	DIN 38405-D1 DIN EN ISO 10304-1 (DEV D19)	Potentiometrisch
Trichlorethen	DIN 38409-H18	Aufbereitung: flüssig-flüssig, Headspace Bestimmung: IR-spektralfotometrisch
Tetrachlorethen	DIN 38409-H18	Aufbereitung: flüssig-flüssig, Headspace Bestimmung: IR-spektralfotometrisch
Atrazin	DIN 38407-F6 DIN EN ISO 11369 (DEV E12)	GC, HPLC
Simazin	DIN 38407-F6 DIN EN ISO 11369 (DEV E12)	GC, HPLC
LHKW	DIN 38409-H18	Aufbereitung: flüssig-flüssig, Headspace Bestimmung: IR-spektralfotometrisch
Diuron	k.A.	k.A.
Desethylatrazin	DIN 38407-F6 DIN EN ISO 11369 (DEV E12)	GC, HPLC
Isoproturon	k.A.	k.A.
Bromacil	DIN 38407-F6 DIN EN ISO 11369 (DEV E12)	GC, HPLC
Hexazinon	DIN 38407-F6 DIN EN ISO 11369 (DEV E12)	GC, HPLC
Bentazon	DIN 38407-F6 DIN EN ISO 11369 (DEV E12)	GC, HPLC

Tabelle 5: Eingesetzte Normen und Verfahren zur Datenerfassung

¹ *Summenparameter der leichtflüchtigen Halogen-Kohlenwasserstoffe (Dichlormethan, Trichlorethan, 1,1,1-Trichlormethan, Trichlorethen, Tetrachlorethen, Tetrachlorkohlenstoff und 1,2-Dichlorethan)*

Es ist davon auszugehen, dass die genannten Datenerhebungsverfahren von der Probennahme über Transport, Laboranalyse bis zum Datenwert in der Datenbank für alle genutzten Daten korrekt durchgeführt wurden. Diese Prämisse muss gestellt werden, da eine weitergehende Überprüfung der Datenbasis im Rahmen der vorliegenden Untersuchung nicht möglich war. Ebenso war nicht überprüfbar, ob und inwieweit bei mehreren angegebenen Untersuchungsverfahren eine direkte Vergleichbarkeit der Datenwerte zulässig ist. Insoweit muss auch hier die Prämisse gelten, dass die direkte Vergleichbarkeit gegeben ist. Es ist anzunehmen, dass Qualitätskontrollen nach DIN 45001 (Qualitätssicherungshandbuch des Prüflaboratoriums) oder DIN 38402-A41/A42 (Ringversuche) durchgeführt werden.

Die geschilderten Sachverhalte stellen potenzielle Fehlerquellen dar. Da die Qualitätssicherung der Grundwasserüberwachung bzw. anderer Datenerhebungen nicht Thema dieser Arbeit ist, ist eine exemplarische Nutzung der beschriebenen Datenbestände zulässig.

Die aus der Eignungsprüfung der Datenbasis resultierende Reduzierung der Messstellen- und Datensatzzahl ist in Tabelle 6 zusammengefasst.

	Messstellen	Datensätze
Anzahl vor Eignungsprüfung	2.201	226.172
Ausschluss Kriterium (a)	0	0
Ausschluss Kriterium (b)		
• tiefer 30m unter Geländeoberkante	147	20.739
• nicht oberster Aquifer	88	10.613
Ausschluss Kriterium (c)	347	33.412
Anzahl nach Eignungsprüfung	1.599	161.408

Tabelle 6: Reduzierung der Messstellenanzahl

4.1.2. Relevanz

Im JDK sind Messwerte zu 23 untersuchten chemisch-physikalischen Merkmalen (Parameter) enthalten. Der Orientierung an der WRRL Rechnung tragend, sollen nur relevante Parameter in die weiteren Untersuchungen eingehen.

Ein Schritt der WRRL-Umsetzung ist die Abstimmung und Integration des bisherigen deutschen Wasserrechts. Bisherige Nennungen von Grundwasserbeschaffensparametern werden daher ebenso wie auf diese bezogene Regelungen in Novellierungen übernommen werden. In der nachfolgenden Tabelle 7 sind die Parameter der GW-Beschaffenheit aufgeführt, für die in der vorliegenden Untersuchung em-

pirisches Datenmaterial zur Verfügung stand und die gemäß verschiedener europäischer und deutscher rechtlicher Regelwerke von Bedeutung sind.

Parameter	TrinkwV	TWRL	WRRL
LF	X ⁶	X ¹⁰	X ³
pH	X ⁶	X ¹⁰	X ³
Na	X ⁸	X ¹⁰	--
K	X ⁸	--	--
Ca	X ⁸	--	--
Mg	X ⁸	--	--
Pb	X ⁷	--	X ¹
As	X ⁷	X ⁹	X ²
Cd	X ⁷	X ⁹	X ⁴
NO ₃	X ⁷	X ⁹	X ^{1,3}
SO ₄	X ⁸	X ¹⁰	--
Cl	X ⁸	--	--
Trichlorethen	X ⁵	X ⁹	X ²
Tetrachlorethen	X ⁵	X ⁹	X ²
Atrazin	X ⁵	--	X ²
Simazin	X ⁵	--	X ¹
LHKW	X ⁷	--	X ²
Diuron	X ⁵	--	X ¹
Desethylatrazin	X ⁵	--	X ²
Isoproturon	X ⁵	--	X ¹
Bromacil	X ⁵	--	X ²
Hexazinon	X ⁵	--	X ²
Bentazon	X ⁵	--	X ²

Tabelle 7: Relevanz von Grundwasserbeschaffenheitsparametern in Regelwerken

¹ In der Liste der prioritären Stoffe im Bereich der Wasserpolitik vom 16.02.2001 als prioritäre oder prioritär gefährliche Stoffe bezeichnet.

² Im Verzeichnis der wichtigsten Schadstoffe der WRRL (Anh. VIII) genannt.

³ Als zu überwachende Leitparameter (Anh. V 2.4.2) genannt.

⁴ Nur indirekt mit Verweis auf die Richtlinie über Cadmiumableitungen (83/513/EWG) erwähnt.

⁵ Anl. 3 (II), 13

⁶ Anl. 4 (II), 5 und 6

⁷ Anl. 2 (I)

⁸ Anl. 4 (III)

⁹ Anh. I Teil B

¹⁰ Anh. I Teil C

Alle zur Verfügung stehenden Parameter sind in wenigstens einem der im Kontext der WRRL bedeutenden Regelwerke berücksichtigt. Im weiteren Vorgehen wurden daher für viele Untersuchungen alle Parameter integriert. Gelegentlich mussten Einschränkungen des Untersuchungsumfanges insoweit vorgenommen werden, als aufgrund des Arbeitsaufwandes nicht für alle Parameter und Gebiete Untersuchungen durchgeführt werden konnten.

4.1.3. Problem kleiner Messwerte

Grundsätzlich ist davon auszugehen, dass alle in Rede stehenden Parameter quantitativ bis zu Konzentrationen analytisch erfasst werden können, die deutlich unterhalb des im Kontext des Grundwassermonitorings relevanten Konzentrationsbereiches liegen. Für Parameter die überwiegend in sehr geringen Konzentrationen vorliegen, ist im Datenbestand die Angabe „kleiner als“ Bestimmungsgrenze zu finden. Aus verschiedenen Ursachen (Messnetzziel, unterschiedliche Analyseverfahren, verschiedene Untersuchungslabors) kommt es dazu, dass sich für einige der untersuchten Datensätze als Metainformationen vorliegenden Bestimmungsgrenzen von denen anderer Datensätze desselben Parameters unterscheiden. Die tatsächliche Konzentration bleibt unbekannt und der nicht überschrittene Wert der Bestimmungsgrenze variiert innerhalb des Datensatzes.

Für statistische Analysen und räumliche Schätzungen von Konzentrationen chemischer Parameter liegt hier ein nicht zu unterschätzendes Fehlerpotenzial. Verschiedene Handhabungen sind denkbar: Die betroffenen Datensätze könnten

- (a) ausgeschlossen werden
- (b) gleich Null gesetzt werden
- (c) gleich der Bestimmungsgrenze gesetzt werden

Die Möglichkeit (a) würde bei vielen Parametern zu äußerst lückenhaften Datensätzen führen, (b) hätte zur Folge, dass die tatsächlichen Konzentrationen grundsätzlich unterschätzt würden, was gerade im Kontext mit einigen toxisch wirkenden Substanzen nicht vertretbar ist. Möglichkeit (c) birgt ebenfalls Fehler, kann aber als pragmatische Näherung betrachtet werden. Dies gilt insbesondere dann, wenn Fragestellungen nicht rein naturwissenschaftlich betrachtet werden: Liegt die tatsächliche Konzentration eines Stoffes unterhalb eines existierenden Grenz- oder Schwellenwertes, ist sie aus juristischer beziehungsweise verwaltungstechnischer Sicht irrelevant. Dies ist für die meisten betroffenen Parameter zu erwarten.

In der vorliegenden Untersuchung wurde so verfahren, dass zunächst für alle Parameter Erwartungswerte aus der Literatur und die jeweils höchste Bestimmungsgrenze der verarbeiteten Datenbasis ermittelt wurden.

	Einheit	Erwartung ¹	Bestimmungsgrenze ²	Problematik kleiner MW
LF	mS/m	0,5 - 250	--	nein
pH	--	4,5 - 9,5	--	nein
Na	mg/l	< 200,000	2,0000	nein
K	mg/l	< 50,000	0,5000	nein
Ca	mg/l	< 400,000	1,0000	nein
Mg	mg/l	< 120,000	0,5000	nein
Pb	mg/l	< 0,040	0,0050	ja
As	mg/l	< 0,040	0,0050	ja
Cd	mg/l	< 0,0050	0,0002	ja
NO ₃	mg/l	< 90,000	2,0000	nein
SO ₄	mg/l	< 500,000	2,0000	nein
Cl	mg/l	< 250,000	5,0000	nein
Trichlorethen	mg/l	< 0,010	0,0010	ja
Tetrachlorethen	mg/l	< 0,010	0,0010	ja
Atrazin	µg/l	< 0,100	0,0500	ja
Simazin	µg/l	< 0,100	0,0500	ja
LHKW	mg/l	< 0,010	0,0010	ja
Diuron	µg/l	< 0,100	k.A.	ja
Desethylatrazin	µg/l	< 0,100	0,0500	ja
Isoproturon	µg/l	< 0,100	k.A.	ja
Bromacil	µg/l	< 0,100	0,0500	ja
Hexazinon	µg/l	< 0,100	0,1000	ja
Bentazon	µg/l	< 0,100	k.A.	ja

Tabelle 8: Problematik von Messwerten unterhalb der quantitativen Erfassbarkeit

¹ erwartetes Konzentrationsspektrum im GW nach KÖLLE (2001) (dort zusammengestellt aus unterschiedlichen Untersuchungen und Grenzwerten rechtsverbindlicher Regelwerke)

² für die verwendeten Daten nach Metadaten der LFU; es ist die höchste von mehreren Bestimmungsgrenzen angegeben

Für einige Parameter ist die Bestimmungsgrenzenproblematik in dieser Untersuchung gegeben (Tabelle 8). Zu Vergleichszwecken wurden statistische Basis-kennwerte für die Datenkollektive mit und ohne Ausschluss der Datensätze kleiner des höchsten Bestimmungsgrenzenwertes ermittelt (siehe Kapitel 5). Es zeigte sich, dass für einige Parameter aufgrund einer stark reduzierten Datenbasis geostatistische Auswertungen nicht sinnvoll wären. Daher wurde der pragmatische – wenn auch nicht fehlerfreie – Weg gewählt, alle Datensätze mit Messwerten kleiner der von der LFU genannten höchsten Bestimmungsgrenze – der pragmatischen Bestimmungsgrenze – eines Parameters dieser Grenze anzugleichen. Für die weitere Analyse solcherart modifizierter Datensätze schließt sich eine Beurteilung von statistisch ermittelten Konzentrationen unterhalb der Bestimmungsgrenze aus.

4.2. Flächeninformationen

Die Anforderungen an räumliche Bezugssysteme zur Beurteilung der besten Eignung zur Umsetzung der WRRL-Vorgaben (Fragestellung (F2) in Kapitel 1.2) ergeben sich unter Berücksichtigung der Regel- und Transportprozesse im Boden-Wasser-System (Kapitel 2.2). In Kapitel 3.3 wurden verschiedene räumliche Bezugssysteme und ihre Ableitung vorgestellt, damit ist die Eignung und Relevanz gegeben. Die verwendeten Flächeninformationen (Kapitel 4) sind durch Fachbehörden aufgearbeitet, daher wird die Validität vorausgesetzt.

Die Aufbereitung der digitalen Eingangskarten beschränkt Transformation in die flächentreuen Albers-Projektion – so können für Grid-Informationen Flächenschätzungen einheitliche Rasterzellengrößen verwendet werden – und die Generalisierung einiger Unterklassen zu Hauptklassen. Karten- und Lagebestimmungen erfolgen in Eingangs- wie Ergebniskarten in der Transverse-Projektion (Gauss-Krüger-Koordinaten).

4.2.1. Schutzfunktion der Grundwasserüberdeckung

Die vier Raumklassen der Schutzfunktion der Grundwasserüberdeckung „sehr gering“, „gering“, „mittel“ und „hoch“ werden jeweils mit Informationen zur hydrologischen Beschaffenheit des Aquifers ergänzt und auf dieser Grundlage in „Locker-stein“, „Locker- über Festgestein“ und „Festgestein“ unterteilt. Da die diese Ausprägungen für die Grundwasserbeschaffenheit lediglich über mögliche Grundwasserbewegungen von sekundärer Bedeutung sind, wurden lediglich die Hauptklassen berücksichtigt. Grundwassergeringleiter wurden in einer weiteren Klasse zusammengefasst. Nicht klassifiziert wurden Siedlungsflächen und Wasseroberflächen.

In den fünf Klassen der Schutzfunktion nach Definition des LGRB findet sich die geringste Messstellendichte auf den Flächen der Grundwassergeringleiter. Große Teile des Schwarzwaldes, das südliche Alpenvorland und der nordwestliche Transformationsbereich der Schwäbischen Alb wurden dieser Klasse zugeordnet. Eine Messstelle repräsentiert in diesen Bereichen eine Fläche von über 46km².

Die Bereiche von sehr geringer Grundwasserschutzfunktion haben die größte räumliche Ausdehnung mit über 14.000 km², aber mit 18,5 km² Flächenabdeckung pro Messstelle auch das dichteste Monitoring-Netz. Weite Bereiche des Rheintalgrabens, die Schwäbische Alb, Übergangsbereiche zum Schwarzwald und die nordöstlichen Hügelländer Baden-Württembergs wurden so klassifiziert. Die übrige Landes-

fläche wird den Klassen mit geringer, mittlerer und hoher Grundwasserschutzfunktion zugeordnet, diese Klassen zeigen vergleichsweise mittlere Messstellendichten und Gesamtflächenanteile. 260 Messstellen liegen in nicht klassifizierten Bereichen.

Schutzfunktion der Grundwasserüberdeckung	Messstellenanzahl	Fläche [km ²]	km ² /Messstelle
sehr gering	794	14.714	18,5
gering	168	3.696	22,0
mittel	46	1.679	36,5
hoch	36	938	26,1
Grundwassergeringleiter	295	13.618	46,2

Tabelle 9: Klassen der Grundwasserschutzfunktion, Flächenanteile und Messstellendichten

4.2.2. Geogene Grundwasserbeschaffenheit

Die 54 hydrogeologischen Einheiten wurden für die Klassifikation der geogenen Grundwasserbeschaffenheit auf 17 hydrogeochemische Einheiten reduziert. Zusammengefasst wurden solche Einheiten, die eine vergleichbare petrographische Zusammensetzung aufweisen und deshalb einen einheitlichen geogenen Grundwassertyp erwarten lassen. Für die großräumige Charakterisierung der geogenen Grundwasserbeschaffenheit wurden diese nochmals zu fünf Hauptklassen generalisiert: Wässer mit „geringem“, „mittlerem“, „mittlerem bis vereinzelt höherem“ und „stark wechselndem Lösungsinhalt“. Die Klasse „mittlerem Lösungsinhalt“ ist zu unterteilen in „Ca-HCO₃-“ und „Ca-Mg-HCO₃-Wässer“. Die Klasse des „stark wechselnden Lösungsinhalts“ wird vorwiegend durch holozäne Ablagerungen geprägt.

Die räumlichen Klassen der geogenen Grundwasserbeschaffenheit haben mittlere Flächenabdeckungen von 5,5 km² pro Messstelle (Klasse „Holozän“) und 73,4 km² pro Messstelle (Klasse „Geringer Lösungsinhalt“). Die größte Flächenausdehnung zeigt die Klasse „Mittlerer Lösungsinhalt Ca-HCO₃-Wässer“ mit 16.858 km², die kleinste räumliche Klasse „Holozän“ umfasst lediglich 1.836 km². Die unterschiedlich starke Besetzung und Messstellendichte in den Klassen sollte bei einer detaillierteren Interpretation der Messwerte berücksichtigt werden. 8 Messstellen liegen in nicht klassifizierten Bereichen.

Geogene Grundwasserbeschaffenheit	Messstellenanzahl	Fläche [km ²]	km ² /Messstelle
Holozän	333	1.836	5,5
geringer Lösungsinhalt	97	7.119	73,4
mittlerer Lösungsinhalt	909	16.858	18,5
mittlerer Lösungsinhalt	162	7.637	47,1
mittlerer bis hoher Lösungsinhalt	90	2.287	25,4

Tabelle 10: Klassen der geogenen Grundwasserbeschaffenheit, Flächenanteile und Messstellendichten

4.2.3. Landnutzung

Die Landnutzungsklassifikation auf Grundlage eines CORINE-Landcovers führte die LFU zu 17 Nutzungsklassen, die zu den vier Hauptklassen „Ackerbau“, „Grünland“, „Wald“ und „Siedlungsflächen“ generalisiert wurden. Die größte Messstellendichte zeigt die Klasse „Siedlung“ mit 4,8 km² pro Messstelle, in den Klassen „Acker“ und „Wald“ sind im Mittel 24,0 km² beziehungsweise 25,7 km² pro Messstelle abgedeckt. Durch die kleinräumige Struktur der Flächen sind diese Werte lediglich theoretische Anhaltspunkte, zusammenhängende Flächen in diese Größen stellen häufig Ausnahmen dar. Mit 2.630 km² sind die Siedlungsflächen die Klasse mit der kleinsten und die Waldflächen (14.124 km²) die mit der größten räumlichen Ausdehnung; 10.689 km² sind als Wald und 8.275 km² als Grünland klassifiziert. 10 Messstellen liegen in nicht klassifizierten Bereichen.

Landnutzung	Messstellenanzahl	Fläche [km ²]	km ² /Messstelle
Acker	446	10.689	24,0
Grünland	322	8.275	25,7
Wald	174	14.124	81,2
Siedlung	547	2.630	4,8

Tabelle 11: Landnutzungsklassen, Flächenanteile und Messstellendichten

4.2.4. Flusseinzugsgebiete

Für die Landesfläche Baden-Württembergs sind 2.158 Flusseinzugsgebiete bis zur siebten Hierarchiestufe im Arbeitsmaßstab 1:50.000 ausgegrenzt. Da eine umfassende einzugsgebietsbezogene Auswertung für die gesamte Landesfläche im Rahmen dieser Untersuchung nicht möglich ist, werden vier Einzugsgebiete des Flussgebietes „Rhein“ zufällig ausgewählt, um einen Überblick über die Grundwasserbe-

schaffenheit in diesen Gebieten zu geben und ein Einzugsgebiet für weitergehende Untersuchungen auszuwählen.

Jedes der vier ausgewählten Einzugsgebiete umfasst unterschiedlich geprägte Naturräume, mit verschiedenen Landnutzungen, die auch innerhalb des Gebietes variieren, und Flächen in verschiedenen hydrogeologischen Einheiten. Es kann – auch auf Grundlage der vorhergehenden Darstellungen – angenommen werden, dass diese Faktoren einen beträchtlichen Einfluss auf die Grundwasserbeschaffenheit in den Einzugsgebieten haben, die nur in Einzelfällen über die innerhalb des gesamten Einzugsgebietes gemittelten Erhebungsparameter abgebildet werden.

Flusseinzugsgebiete (Auswahl)	Messstellenanzahl	Fläche [km ²]	km ² /Messstelle
EZG2384	96	2.228	23,2
EZG2381	126	3.286	26,1
EZG233	165	2.426	14,7
EZG2388	59	1.835	31,1

Tabelle 12: Ausgewählte Flusseinzugsgebiete, Flächenanteile und Messstellendichten

4.2.5. Regierungsbezirke

Die Flächengrößen der vier Regierungsbezirke Baden-Württembergs liegen zwischen 6.919 km² (Karlsruhe) und 10.558 km² (Stuttgart). Eine Messstelle repräsentiert in den Regierungsbezirken eine Fläche zwischen 18,3 km² und 25,1 km². Die Grundwasserbeschaffenheit wird durch natürliche und anthropogene Einflussfaktoren gesteuert; in verschiedenen Administrationsgebieten könnten möglicherweise existierende rechtsverbindliche Regelwerke (beispielsweise Verordnungen zur Regelung von Pflanzenschutzmittelmengen) Einfluss auf anthropogen verursachte Einträge nehmen. Im vorliegenden Fall des Landes Baden-Württembergs ist davon auszugehen, dass diesbezüglich keine nennenswerten Unterschiede existieren, da das Schutzgut Wasser betreffende Regelungen in Deutschland über die Landeswassergesetze – in besonders wichtigen Bereichen und für bundesweite Aspekte über das WHG – festgelegt sind.

Regierungsbezirke	Messstellenanzahl	Fläche [km ²]	km ² /Messstelle
Freiburg	420	9.357	22,3
Karlsruhe	378	6.919	18,3
Stuttgart	421	10.558	25,1
Tübingen	377	8.918	23,7

Tabelle 13: Regierungsbezirke, Flächenanteile und Messstellendichten

5. Exemplarische Problemlösung

5.1. Grundwasserbeschaffenheit in Baden-Württemberg

5.1.1. Zeitliche Aspekte der Grundwasserbeschaffenheit

(Anhang Tabellen A in Anhang III)

Im Betrachtungszeitraum 1994 – 1998 wurden für die Leitfähigkeit Werte von 1,1 bis 632,0 mS/m festgestellt, die damit die Erwartungswerte über- und unterschreiten (vgl. Kapitel 4.1.3). Der Wert des 99. Perzentils von 188,9 mS/m zeigt allerdings, dass es sich im Maximalbereich um Ausreißer handelt. Im Mittel beträgt die Leitfähigkeit 74,4 mS/m, die mittleren Werte steigen von 1994 73,1 mS/m auf 1998 75,8 mS/m an. Eine Bestimmungsgrenzenproblematik ist nicht gegeben.

Die pH-Werte der Grundwässer zeigen Werte zwischen 3,9 und 9,8. Der Wert des 99. Perzentils von 7,9 weist einzelne Messstellen als Ausreißer aus. Die Messwerte liegen fast ausschließlich im Erwartungsbereich. Die pH-Werte zeigen sich über den Betrachtungszeitraum sehr stabil.

Das Natrium-Monitoring wurde von 1.710 Messwerten im Jahr 1994 auf Probenumfänge zwischen 116 und 346 in den übrigen Jahren stark reduziert. Damit sind generelle statistische Aussagen im zeitlichen Vergleich nur eingeschränkt gültig, 99 % aller Beprobungen finden sich allerdings im Erwartungsbereich von unter 200 mg/l. Der stark schwankende Mittelwert ist darauf zurückzuführen, dass unterschiedliche Probenahmestellen die Datenbasis bilden; dies ist auf veränderte Monitoringstrategien zurückführbar (vgl. LFU 2000b). Die extreme Standardabweichung stützt diesen Eindruck. Die statistischen Basiskennwerte, die aus der um alle Messwerte unterhalb der festgelegten pragmatischen Bestimmungsgrenze (vgl. Kapitel 4.1.3) reduzierten Datenbasis ermittelt wurden, skizzieren ein sehr ähnliches Bild.

Für die Parameter Kalium, Calcium, Magnesium und Chlor ist in ähnlichem Umfang eine Reduktion des Beprobungsumfanges in den Jahren bis 1998 festzustellen. Aussagen zur zeitlichen Variabilität der Parameter sind daher kaum möglich. Das 99. Perzentil der Kalium-Konzentration liegt mit 22,9 mg/l im Erwartungsbereich, maximal wurden 166,0 mg/l gemessen, lediglich geringfügige Änderungen ergeben sich durch

Ausschluss der Messungen unterhalb der definierten Bestimmungsgrenze. Lediglich ein Calcium-Messwert wurde unterhalb der pragmatischen Bestimmungsgrenze ausgeschlossen. Als Maximalwert wurden 738,0 mg/l festgestellt, der durch das 99. Perzentil von 312,6 mg/l als Ausreißer bezeichnet werden muss. Der Calcium-Mittelwert liegt bei 111,4 mg/l. Die Magnesium-Konzentrationen liegen zu 99 % unter 65,0 mg/l innerhalb des Erwartungsspektrums, maximal wurden 148,0 mg/l gemessen. Nur wenige Messwerte liegen unter der definierten Bestimmungsgrenze von 0,5 mg/l. Der mittlere Chlorgehalt von 27,8 mg/l liegt ebenso wie der Wert des 99. Perzentils von 162,2 mg/l innerhalb der Erwartungen, einzelne Werte erreichen allerdings bis zu 1.620,0 mg/l. Durch den Ausschluss von Werten unterhalb der pragmatischen Bestimmungsgrenze steigt der Mittelwert recht deutlich auf 35,7 mg/l an.

Für die in den Grundwasserüberwachungsprogrammen beprobten Schwermetalle Blei und Arsen steigt die Beprobungsintensität im zeitlichen Verlauf deutlich an, der Cadmium-Beprobungsumfang blieb etwa auf gleichem Niveau. Die Beprobungsintensität ist im Vergleich zu den oben beschriebenen Elementen und Parametern gering und die Grenzwertproblematik deutlich stärker ausgeprägt, umfangreiche Informationen – beispielsweise für Blei 97 % der Beprobungsdaten – entfallen durch Ausschluss derjenigen Messungen, die unterhalb der pragmatischen Bestimmungsgrenze liegen. Die Definitionskriterien der Bestimmungsgrenze wären daher für Untersuchungen und Analysen, die juristische Relevanz besitzen, zu überprüfen. Für die hier betrachteten Fragestellungen ist dies nur in sofern von Bedeutung, als dass möglicherweise eine zu geringe Datengrundlage für einige einzusetzende Verfahren zur Verfügung steht. Eine sinnvolle Auswertung statistischer Parameter derjenigen Datensätze, deren Messwerte oberhalb der definierten Grenzwerte liegen, ist schwer möglich, da sich Beprobungsumfänge von maximal wenigen Dutzend Einzelwerten auf die gesamte Landesfläche beziehen. Es ist aufgrund der großen räumlichen Distanz davon auszugehen, dass kaum eine begründbare Vergleichbarkeit besteht, vielmehr wäre zu prüfen, inwieweit die Beprobungslokalitäten der gleichen Grundgesamtheit zuzuordnen wären. Diese Fragestellung wird unten (Kapitel 5.1.2.2) mit der Betrachtung verschiedener räumlicher Bezugssysteme aufgegriffen.

Die Messwertstreuung der nicht um die unterhalb der pragmatischen Bestimmungsgrenze liegenden bereinigten Datensätze aller betrachteten Schwermetalle bewegt sich im Betrachtungszeitraum überwiegend innerhalb des Erwartungsbe-

reichs. Lediglich einige Ausreißer oberhalb des 99. Perzentils der Bleikonzentrationen erreichen Maximalwerte von bis zu 0,0174 mg/l, für Arsen wurden entsprechend maximal 0,0183 mg/l und für Cadmium 0,0007 mg/l festgestellt.

Die umfangreich erfassten Nitrat-Konzentrationen (17.804 Einzelmesswerte im Betrachtungszeitraum) steigen im Mittel von 1994 bis 1996 leicht an und fallen in den darauf folgenden Jahren wieder leicht ab. Das Gesamtmittel liegt mit 32,2 mg/l im Erwartungsbereich. Die auf 2,0 mg/l festgesetzte pragmatische Bestimmungsgrenze führt zu einem Ausschluss von 1.394 Messstellen, die zeitlichen Trends bleiben jedoch erhalten, Minimal- und Perzentilwerte erhöhen sich erwartungsgemäß leicht. Fünf Prozent aller Messwerte des Gesamtdatenbestands zeigen Konzentrationen über 86,1 mg/l (95. Perzentil); werden die Messwerte unterhalb der Bestimmungsgrenze ausgeschlossen, liegt dieser Wert bei 89,0 mg/l. Der Maximalwert von 249,0 mg/l ist als Ausreißer anzusehen, da das 99. Perzentil bereits bei Werten von 134,09 bzw. 137,8 mg/l (Gesamtdatenbestand bzw. ausgeschlossene Werte unterhalb der pragmatischen Bestimmungsgrenze) liegt.

Die Sulfat-Beprobungsintensität geht im Betrachtungszeitraum deutlich zurück; ähnlich einigen anderen erfassten Parametern ist dies auf eine Umstrukturierung im Grundwasserüberwachungsprogramm zurückzuführen (LFU 2000b). Der Gesamtmittelwert von 63,0 mg/l ist kaum für den gesamten Betrachtungszeitraum interpretierbar. So wurde 1994 – auf Basis von 1.729 Einzelmessungen – ein Mittel von 80,9 mg/l festgestellt, im Jahr 1996 mit lediglich 117 Messungen beträgt der arithmetische Mittelwert 22,6 mg/l. Dieser sehr deutliche Unterschied zeigt, welchen Einfluss die Abgrenzung von Zeiträumen und Probenahmestrategien auf statistische Kennwerte haben kann. Generell kann jedoch festgestellt werden, dass über 95 % der Messungen Konzentrationen von weniger als 197,1 mg/l zeigen und damit innerhalb der Erwartungen liegen. Ausreißer zeigen Konzentrationen von bis zu 1490,0 mg/l. Nur wenige Messungen (19 von insgesamt 2.694) werden durch Festlegung einer pragmatischen Bestimmungsgrenze ausgeschlossen, entsprechend gering ist der Einfluss auf statistische Basisparameter.

Für die untersuchten Wirkstoffe in Pflanzenschutzmitteln muss grundsätzlich festgestellt werden, dass das gewählte Verfahren zur Festlegung einer pragmatischen Bestimmungsgrenze in fast allen Fällen zu einer starken Reduzierung der Datenbasis führt, wenn alle Datenwerte unterhalb dieses Grenzwertes ausgeschlossen

werden. Teils sehr stark variierende Beprobungsintensitäten sind – wie bereits oben angesprochen – auf Veränderungen oder Vorgaben in den Grundwasserüberwachungsprogrammen zurückzuführen, erschweren aber eine vergleichende Interpretation über längere Zeiträume. Auf eine Interpretation der statistischen Basiskennwerte der durch Ausschluss der Messwerte unterhalb der pragmatischen Bestimmungsgrenze reduzierten Datensätze wird daher verzichtet, sie sind in Tabellen A -2 in Anhang III einzusehen.

Ein wesentlicher Teil aller Trichlorethen-Messwerte liegt im Erwartungsbereich von unter 0,010 mg/l, allerdings bewegen sich die Mittelwerte mit Ausnahme des Jahres 1997 stets knapp oberhalb dieses Grenzwertes, im Jahr 1996 mit 0,341 mg/l deutlich oberhalb, im Mittel wurden 0,018 mg/l festgestellt. Auffällig ist allerdings, dass zum einen der Median mit 0,0001 mg/l sehr viel niedriger liegt und das 95. Perzentil bei 0,005 mg/l festzustellen ist. Die hohen Mittelwerte sind auf Ausreißer mit Extremwerten von bis zu 18,000 mg/l zurückzuführen.

Ein ähnlicher Zustand zeigt sich für Tetrachlorethen; die Maximalwerte von bis zu 14,500 mg/l lassen den Mittelwert auf 0,026 mg/l ansteigen, der Median liegt mit 0,0001 mg/l auch hier deutlich niedriger. Es zeigen allerdings mehr Messungen hohe Werte als bei Trichlorethen, da bereits das 95. Perzentil 0,020 mg/l aufweist.

Im Vergleich zu den vorhergehenden Ausführungen muss der festgestellte Atrazin-Mittelwert von 0,048 µg/l positiv interpretiert werden, da er deutlich unterhalb der Erwartungsgrenze von 0,100 µg/l liegt. Auch für Atrazin sind Ausreißer festzustellen: das 95. Perzentil liegt bei 0,120 µg/l, der Median allerdings mit 0,030 µg/l nahe am arithmetischen Mittel. Maximalwerte werden mit einer Konzentration von bis zu 3,400 µg/l erreicht.

Die Simazin-Konzentrationen von 0,028 µg/l im arithmetischen Mittel liegen innerhalb des Erwartungsbereiches von weniger als 0,100 µg/l. Die höchsten festgestellten Konzentrationen von 0,880 µg/l stellen Ausreißer dar, die auf wenige Einzelfälle begrenzt sind, das 99. Perzentil liegt bei 0,100 µg/l.

Die Messungen der LHKW finden sich im Mittel deutlich oberhalb der grundsätzlich unterhalb von 0,010 mg/l zu erwartenden Konzentrationen. Zwar ist die Ver-

teilung derjenigen von Tri- und Tetrachlorethen vergleichbar, so dass einige extreme Ausreißer den arithmetischen Mittelwert deutlich auf 0,150 mg/l erhöhen (der Median beträgt nur 0,005 mg/l), aber bereits beim 75. Perzentil wird der Erwartungswert überschritten. Eine so deutliche Überschreitung der Erwartungen sollte zum einen eine kritische Betrachtung der Festlegungskriterien der Erwartungswerte zur Folge haben, aber andererseits auch zu einer näheren Betrachtung der Ursachen für derartig hohe Werte bei vergleichsweise vielen Messungen führen. Maximal werden Werte von bis zu 158,005 mg/l erreicht.

Die Diuron-Konzentrationen überschreiten den Erwartungsbereich nicht, sie liegen im Mittel bei 0,048 µg/l. Lediglich wenige Ausreißer mit Werten von bis zu 1,800 µg/l wurden festgestellt, das 99. Perzentil liegt bei 0,100 µg/l. Teilweise ist die Datenverfügbarkeit für Diuron sehr spärlich, so liegen für das Jahr 1998 lediglich 9 geeignete Messwerte vor.

Zusammenfassend lässt sich für die Stoffe Desethylatrazin, Isoproturon, Bromacil, Hexazinon und Bentazon feststellen, dass die mittleren Konzentrationen innerhalb des Erwartungsbereiches von weniger als 0,100 µg/l liegen. Für alle angesprochenen Stoffe finden sich aber Maxima deutlich oberhalb dieser Erwartungsgrenzen. Für Isoproturon und Hexazinon wird die Erwartungsgrenze lediglich von weniger als 1 % der Messungen überschritten, 5 % der Messungen der Bromacil- und fast 5 % der Messungen der Bentazon-Konzentrationen überschreiten den Erwartungswert. Die Desethylatrazin-Konzentrationen liegen häufiger oberhalb von 0,100 µg/l, das 95. Perzentil liegt hier bereits bei 0,210 µg/l.

5.1.2. Räumliche Aspekte der Grundwasserbeschaffenheit

(Anhang Tabellen B in Anhang III)

5.1.2.1. Schutzfunktion der Grundwasserüberdeckung

Die Messwerte in Bereichen mit hoher GW-Schutzfunktion zeigen überraschend hohe Konzentrationen der Parameter Ca, Cl und NO₃ (Statistiken in Anhang Tabellen B 2 in Anhang III). Da das Verfahren zur Ermittlung der Schutzfunktion nicht primär die chemische Sorptionsfähigkeit der Böden erfasst, sondern versucht, einen kumulativen Wert zu ermitteln, der die tatsächlichen regionalen Bedingungen abbildet, könnten die hohen Ca- und Cl-Konzentrationen auf die vom Verfahren weitgehend unabhängige Größe der physiko-chemischen Charakteristik der Ausgangssubstrate zurückgeführt werden. Die Nitrat-Konzentrationen sind so allerdings nicht erklärbar.

Die Gebiete mit sehr geringer Schutzfunktion der Grundwasserüberdeckung zeigen im Vergleich mit den GW-Geringleitern für zwei der erhobenen Parameter auffällige Ausprägungen: Die Nitratkonzentrationen sind ähnlich niedrig (< 30 mg/l) und Desethylatrazin-Konzentrationen ähnlich hoch ($\geq 0,070 \mu\text{g/l}$). Das verwendete Klassifikationsverfahren der LGRB führt zu einer grundsätzlich niedrigen Ausstattung der Grundwassergeringleiter mit den erfassten Makronährstoffen, für die nachgewiesenen Wirkstoffe der Pflanzenschutzmittel sind in diesen Gebieten aber oft die höchsten Konzentrationen festzustellen.

Die Merkmalsausprägungen in den jeweiligen Klassen entsprechen nicht immer direkt den aufgrund der Klassenbezeichnung zu erwartenden Charakteristika. Da die Klassifizierung einige für die Grundwasserbeschaffenheit bedeutende, aber variable Faktoren – beispielsweise die Landnutzung – unberücksichtigt lässt, wäre für eine weitergehende Interpretation die Berücksichtigung zusätzlicher Informationen der Regionen sinnvoll.

5.1.2.2. Geogene Grundwasserbeschaffenheit

Die mittleren Anionen- und Kationen-Konzentrationen der Messstellen in den so definierten räumlichen Klassen bilden das Klassifizierungsverfahren entsprechend gut ab (Tabellen B 4 in Anhang III): Mit Ausnahme der Na- und K-Werte finden sich die höchsten Konzentrationen in der Klasse der Grundwässer mittleren bis hohen Lösungsinhalts. Die höchsten Mittelwerte der Na- und K-Konzentrationen sind in den

Gebieten holozäner Ablagerungen – nach LGRB (1998) Gebiete stark wechselnden Lösungsinhalts – festzustellen. In diesen Gebieten wurden auch die mit 125,3 mg/l deutlich höchsten SO_4 -Konzentrationen erfasst. Die Gebiete geringen Lösungsinhalts zeigen stets die niedrigsten Konzentrationen.

Ein differenzierteres Verhalten ist für die übrigen erhobenen Parameter festzustellen. Die höchsten Trichlorethen- und Simazin-Konzentrationen wurden – ebenso wie die niedrigsten Bromacil- und Isoproturon-Werte – in den Gebieten mittleren bis hohen Lösungsrückstands gemessen. Die Mittelwerte zeigen allerdings für diese Stoffe insgesamt nur geringfügige Unterschiede. Im Mittel sehr hohe Konzentrationen von 0,089 $\mu\text{g/l}$ und 0,421 $\mu\text{g/l}$ wurden für die Tetrachlorethen- und LHKW-Konzentrationen in den Gebieten holozäner Ablagerungen festgestellt, in den übrigen Raumklassen wurden maximal 0,022 $\mu\text{g/l}$ beziehungsweise 0,243 $\mu\text{g/l}$ festgestellt.

Für die Merkmale, die auch im Klassifizierungsverfahren der geogenen Grundwasserbeschaffenheit indirekt berücksichtigt wurden, zeigen sich meist klare Ausprägungen in den jeweiligen Klassen. Die Pflanzenschutzwirkstoffe zeigen keine einheitlichen Konzentrationsverteilungen in diesen räumlichen Einheiten. Damit ist die Eignung dieses räumlichen Bezugssystems nur für einige Merkmalsausprägungen des GW gegeben. Die Nutzbarkeit dieser räumlichen Klassifikation als Bezugssystem für weitergehende Aussagen hinsichtlich der Fragestellungen der WRRL ist fraglich.

5.1.2.3. Landnutzung

Die deutlich höchsten Nitrat-Konzentrationen von 43,8 mg/l wurden im Mittel für die Ackerflächen festgestellt (Tabellen B 5 in Anhang III), an Waldstandorten sind die niedrigsten Werte mit lediglich 20,0 mg/l zu finden. In der Klasse „Wald“ liegen neben den Messstellen mit den niedrigsten SO_4 -Konzentrationen (19,5 mg/l) auch diejenigen, die die im Mittel geringsten Werte der Leitfähigkeit, pH-Werte, Na, K, Ca, Mg, Tri- und Tetrachlorethen zeigen. Die Messstellen mit den entsprechend höchsten festgestellten Werten – mit Ausnahme des Nitrates, aber zusätzlich Cl, Simazin, LHKW, Bromacil und Bentazon – liegen in der Klasse „Siedlung“, wo aber auch die niedrigsten Desethylatrazin-Konzentrationen ermittelt wurden. Die Grünlandflächen zeigen für Desethylatrazin- und Isoproturon- die vergleichsweise höchsten, aber auch niedrigsten Hexazinon- und Bentazon-Mittelwerte. Atrazin ist in den Grundwässern unter Ackerflächen mit 0,052 $\mu\text{g/l}$ am stärksten konzentriert, für die meisten

Pflanzenschutzstoffe finden sich in dieser Klasse die zweithöchsten Konzentrationen nach denen in der Klasse „Siedlung“.

Die auf Grundlage der Landnutzung gebildeten Raumklassen spiegeln durch die Ausprägungen der erhobenen Grundwassereigenschaften, neben den erwartungsgemäß auf Einsatz von Pflanzenschutzmitteln zurückzuführenden erhöhten Konzentrationen dieser Stoffe in Siedlungsgebieten und auf Ackerflächen, wider, dass ein Zusammenhang zwischen Landnutzung und naturräumlicher Ausstattung besteht. Beispielsweise liegt ein großer Teil der Waldflächen im Naturraum Schwarzwald. Aufgrund der geologischen/pedologischen Ausstattung dieses Naturraums dürfte dies zu einer Reduktion der mittleren Konzentrationen einiger Parameter führen. Eine Überlagerung der Ausprägungen der Grundwasserbeschaffenheit mit Faktoren, die nicht ausschließlich auf die Landnutzung zurückzuführen sind, liegt nahe. Für detaillierte Auswertungen der Grundwasserbeschaffenheit ist eine Raumgliederung auf Grundlage der Landnutzung sicherlich hilfreich, sollte aber unbedingt durch weitere Informationsschichten ergänzt werden.

5.1.2.4. Flusseinzugsgebiete

Jedes der vier exemplarisch ausgewählten Einzugsgebiete umfasst unterschiedlich geprägte Naturräume, mit verschiedenen Landnutzungen, die auch innerhalb des Gebietes variieren, und Flächen in verschiedenen hydrogeologischen Einheiten. Es kann – auch auf Grundlage der vorhergehenden Darstellungen – unterstellt werden, dass diese Faktoren einen beträchtlichen Einfluss auf die Grundwasserbeschaffenheit in den Einzugsgebieten haben, die nur in Einzelfällen über die innerhalb des gesamten Einzugsgebietes gemittelten Erhebungsparameter abgebildet werden. Die hohen Ca-, Na- und K-Konzentrationen im Einzugsgebiet 2381 könnten beispielsweise auf die Lage am Naturraum Schwäbische Alb zurückgehen (Tabellen B 1 in Anhang III). Die im Mittel geringsten Messwerte für Tri- und Tetrachlorethen, LHKW, Diuron, Desethylatrazin, Isoproturon, Bromacil und Bentazon im Einzugsgebiet 233 lassen auf eine großflächig gute Schutzfunktion der Grundwasserüberdeckung oder aufgrund der Landnutzung generell niedrigere anthropogene Eintragsraten dieser Stoffe vermuten. Eine Prüfung derartiger Vermutungen beispielsweise mit Kovarianzanalysen wäre für eine detailliertere Interpretation der statistischen Messwertverteilungen notwendig, eindeutige Interpretationen sind aufgrund von deskriptiv statistischen Kennwerten nicht möglich.

Aufgrund der Lage am östlichen Rand des Naturraumes Schwarzwald mit großflächigen Waldgebieten, des Übergangs zu stark landwirtschaftlich genutzten Flächen und zahlreicher kleinerer und zwei größerer Siedlungsflächen ist das Einzugsgebiet 2384 „Enz“ nach unterschiedlichen Raumgliederungskriterien als sehr divers anzusehen. Es wurde daher als Testgebiet für die in Kapitel 4.3 durchgeführten geostatistischen Untersuchungen ausgewählt. Das Gebiet 2384 hat eine Gesamtfläche von 2.228 km², die von insgesamt 96 geeigneten Messstellen überwacht werden; damit ergibt sich im Mittel eine überwachte Fläche von 23,2 km² pro Messstelle. Die Konzentrationsspektren des Großteiles der erhobenen Parameter sind denen der gesamten Landesfläche Baden-Württembergs grundsätzlich sehr ähnlich; anthropogene Parameter sind meist leicht erhöht, viele Kationen- und Anionen-Konzentrationen liegen etwas unter den Mittelwerten der gesamten Landesfläche.

5.1.2.5. Regierungsbezirke

Der Regierungsbezirk Freiburg zeigt (Tabellen B 2 in Anhang III) bedingt durch die naturräumliche Ausstattung, die den südlichen Schwarzwald, den südlichen Teil des Rheintalgrabens bis zur Landesgrenze am Bodensee umfasst, für viele der erfassten Parameter die im Vergleich niedrigsten mittleren Konzentrationen. Dies gilt für die LF, die pH-, Na-, K-, Ca-, Mg-, SO₄-, Tri- und Tetrachlorethen-, LHKW- und Bromacil-Werte. Lediglich die Simazin-Werte liegen höher als in den übrigen Regierungsbezirken. Für die genannten Stoffe zeigt entsprechend der Regierungsbezirk Stuttgart die höchsten mittleren Konzentrationen, lediglich die Bromazil und LHKW-Werte sind im Regierungsbezirk Karlsruhe höher. Ein großer Teil der aus basischen Gesteinen aufgebauten Schwäbischen Alb liegt im Regierungsbezirk Tübingen, der entsprechend im Mittel die höchsten pH-Werte zeigt. Gleichfalls sind hier die niedrigsten NO₃-, Simazin-, Arsen- und Bentazon-Konzentrationen anzutreffen, was zum einen auf die besonderen Sorptionseigenschaften und zum anderen auf die Landnutzungscharakteristik zurückzuführen sein dürfte. Um diesbezüglich konkrete Aussagen machen zu können, müssten die Regierungsbezirke hinsichtlich ihrer naturräumlichen Ausstattung und der Lage der Messstellen in den Raumklassen detaillierter untersucht werden.

5.2. Flächenschätzungen der Grundwasserbeschaffenheit

5.2.1. Geostatistische Strukturanalyse

5.2.1.1. Ableitung geeigneter Kriterien

In Kapitel 3.2.1 werden die wichtigsten Grundannahmen und mathematischen Formulierungen einer geostatistischen Untersuchung erläutert. Da nicht speziell für diese Untersuchung Daten erhoben wurden, müssen einheitliche Kriterien aufgestellt werden, die den Analysen zu Grunde liegen.

Für die Strukturanalyse soll gelten:

- (1) Für jeden Grundwasserbeschaffenheitsparameter soll ein omnidirektionales Variogramm und zur Überprüfung möglicher Drifts für jede Hauptrichtung ein Variogramm erstellt werden.
- (2) Die Variogramme sollen auf der Abszisse bis zur addierten Distanz aller Schritte mit $|0,5 \times h_{\max}|$ und h_{\max} = maximale Distanz zwischen den Messpunkten dargestellt werden.
- (3) Die Schrittweite (*Lag-value*, Distanzklassengröße) soll $0,2 \times h_x$ betragen, mit h_x = mittlere Distanz aller Messpunkte.
- (4) Um die experimentellen Variogramme nicht zu überinterpretieren, soll die Anpassung des Variogrammmodells auf nicht mehr als 3 Strukturen basieren.
- (5) Zur Beurteilung der Güte eines angepassten Variogrammmodells werden Kreuzvalidationen durchgeführt.

Für die vier Hauptrichtungen wurden in Anhang V Variogramme A 2 einsehbare experimentelle Variogramme erstellt. Eine vollständige Interpretation der gerichteten Variogramme erfolgt nicht. Im Folgenden werden die gerichteten Variogramme zu Vergleichszwecken bei der Variogrammmodell Anpassung an die omnidirektionalen Variogrammmodelle verwendet.

Für die Grundwasserbeschaffenheitsdaten des Landes Baden-Württemberg ergeben sich nach (2) bei einer maximalen Messpunktdistanz von 250 km die variografische Darstellung bis zu 125 km. Für das Teileinzugsgebiet der Enz ergibt sich bei einer maximalen Messpunktdistanz 70 km eine variografische Darstellung bis zu 35 km. Nach (3) ergeben sich Schrittweiten für die Gesamtfläche Baden Württembergs von 1.000 m und 250 m für das Einzugsgebiet der Enz.

Das Testgebiet Baden-Württemberg hat eine maximale Flächenausdehnung von etwa 290 x 200 km – die Ausdehnung in die dritte Dimension beträgt – definiert durch die Betrachtung der oberflächennahen Grundwasserbeschaffenheit (Kapitel 4.1) nur 30 m. Die oberen 30 m der Erdkruste werden in der Untersuchung als homogen angenommen. Da dies nicht den tatsächlichen Bedingungen entspricht, dürfte hier eine nicht zu unterschätzende Fehlerquelle liegen. Für alle durchgeführten geostatistischen Untersuchungen wurde die dritte Dimension vernachlässigt. Zwar sind dreidimensionale Analysen technisch möglich, hinreichend aufgelöste, flächendeckende und verlässliche Daten zu den relevanten Eigenschaften der oberen 30 m der Erdkruste zu beschaffen, ist kaum möglich. Eine Auswertung der Bohrprofile zu den Brunnen wäre obligatorisch, ist im Rahmen dieser Arbeit aber nicht möglich. Letztlich ist es das Ziel der Untersuchung, nachvollziehbare und in der Praxis umsetzbare Verfahren zu testen, was ohne die entsprechende Datengrundlage nicht möglich ist.

Für viele der zu betrachtenden Stoffe ist die Bestimmungsgrenzenproblematik von Bedeutung (Kapitel 4.1.3). Geostatistische Verfahren analysieren die räumliche Variabilität und ermöglichen darauf aufbauend Flächenschätzungen, deren visualisierte Ergebnisse Karten sind. Die Aussagefähigkeit von Flächenschätzungen auf Grundlage von Datensätzen, die zum überwiegenden Teil an einen pragmatisch festgesetzten Bestimmungsgrenzwert angepasst sind, ist eingeschränkt.

Für einige der untersuchten Parameter, deren Beprobungswerte häufig unterhalb der Bestimmungsgrenze liegen, würden so deutlich veränderte Daten untersucht, die die niedrigeren Konzentrationen nicht mehr wiedergeben. Eine mögliche, auf Grundlage der Strukturanalyse noch sinnvoll erscheinende, räumliche Schätzung könnte zu Karten als Ergebnis führen, die flächenhaft deutlich zu hohe Konzentrationen – nämlich minimal die der definierten Bestimmungsgrenze – ausweisen. Für diejenigen Parameter, die die Problematik der Bestimmungsgrenze zeigen und durch

die Anhebung dieser Messwerte auf den Bestimmungsgrenzwert eine deutliche Beeinflussung der Datenbasis erfahren würden, wurden die nicht auf die Bestimmungsgrenze angehobenen Datensätze für die geostatistische Analyse verwendet.

Exkurs 1: Einfluss der Schrittweite auf die Variogrammanalyse und Kriging

Nach (2) und (3) erstellte Variogramme wirken zwar unruhig, bilden aber das tatsächliche räumliche Verhalten aller Punktpaare einer Distanzklasse besser ab als so genannte „geglättete“ Variogramme, die in vergleichsweise großen Distanzklassen mehr Punktpaare gemittelt darstellen, aber naturgemäß Informationen verloren gehen. Um den Einfluss unterschiedlicher Schrittweiten darzustellen und für diese Untersuchung eine geeignete Schrittweite und Gesamtbetrachtungsdistanz zu ermitteln, wurden exemplarisch verschiedene Schrittweiten (500 m, 1.000 m, 5.000 m und 10.000 m) bei gleich bleibender betrachteter Gesamtdistanz (125 km) für die Strukturanalyse und räumliche Schätzung der Grundwasserleitfähigkeit der Gesamtfläche Baden-Württembergs verglichen. Die Variogramme sind im Anhang V unter Variogramme C, die Krigingschätzungen in Anhang VI unter Karten E 4 bis 6 und B 1 (für Schrittweite 1000 m) einsehbar.

Erwartungsgemäß erscheint das Variogramm mit einer Schrittweite von nur 500 m äußerst unruhig. Insbesondere in den kleinen Distanzklassen sind große Unterschiede zwischen benachbarten Klassen feststellbar. Dieser Eindruck bestätigt sich auch noch bei einer Schrittweite von 1.000 m. Die Verwendung einer Schrittweite von 5.000 m glättet das Variogramm bereits soweit, dass die Varianzen zwischen den nun deutlich größeren Distanzklassen im Bereich bis 20.000 m nahezu gleich sind. Die Strukturanalyse mit nur 13 Schritten von 10.000 m Weite lassen zwar noch immer die deutliche Zunahme der Varianzen bis 70.000 m erkennen, weitere Charakteristika der räumlichen Variabilität sind allerdings kaum noch erkennbar.

An alle errechneten Variogramme wurde ein Variogrammmodell angepasst, das subjektiv nach Einschätzung des Bearbeiters die Variogrammfunktion am besten beschreibt. Für alle Variogramme wurde neben dem Nuggeteffekt lediglich ein Gauss'sches Modell angepasst. Die Reichweiten bleiben auf gleichem Niveau zwischen 39.000 m (Schrittweite 500 m) und 63.500 m (Schrittweite 10.000 m); auch die Sills liegen auf sehr ähnlichem Niveau zwischen 1.700 (Schrittweite 500 m) und 1.825. Der standardisierte Schätzfehler liegt für die Schrittweite 500 m mit 0,84 dem

Optimum von 1,0 am nächsten; das auf Grundlage der Schrittweite 5.000 m angepasste Variogrammodell zeigt mit 0,78 die größte Abweichung.

Durch die ähnlichen angepassten Variogrammodelle resultieren aus der Krigingschätzung (einheitliche, es wurden wie unten erläuterte Kriterien verwendet) Schätzwerte für die gesamte Landesfläche, die sich sehr ähnlich sind: Der Naturraum Schwarzwald hebt sich deutlich von der übrigen Landesfläche mit den niedrigsten Grundwasserleitfähigkeiten ab. In dem Gebiet nördlich an Stuttgart angrenzend und einer weiteren Region noch weiter nördlich gelegen werden die höchsten Werte erreicht. Die größten Schätzfehler treten für alle Variogrammodelle in den Bereichen der geringsten geschätzten Konzentrationen auf und erreichen bis über 100%.

Die sehr ähnlichen Schätzergebnisse, auf Grundlage recht ähnlicher Variogrammodelle, die an sehr unterschiedlich wirkende Variogramme angepasst wurden, erhoben, zeigen die relativ geringe Empfindlichkeit der Geostatistik gegenüber subjektiven Einflüssen durch den Bearbeiter. Sicherlich ist es sinnvoll, die Variogrammdarstellung – die in der verwendeten Form dazu dient, die Varianzen aller existierenden Punktpaare einer Distanzklasse vereinfacht zu visualisieren – durch festzulegende Schrittweite so zu wählen, dass der Bearbeiter einen möglichst umfangreichen Eindruck der im Datensatz vorhandenen Varianzen erhält. Im vorliegenden Fall scheint die Schrittweite von 1.000 m einen diesbezüglich sinnvollen Kompromiss darzustellen.

Exkurs 2: Bessere Schätzergebnisse durch Transformation?

Die in der Geostatistik oft wenig beachtete Verteilung der zu analysierenden Messwerte kann durch eine Transformation in eine Normalverteilung vor der Strukturanalyse umgangen werden. In übliche Software integrierte Hilfsprogramme vereinfachen den Einsatz von Transformationen deutlich und machen sie praktisch ständig und ohne großen Aufwand verfügbar. Entsprechend des geostatistischen Arbeitsganges wird bei der Verwendung von Transformationen nach der Variogrammanalyse, -anpassung und Krigingschätzung eine Rücktransformation nach dem Kriging notwendig. Da bereits eine Mittelwertbildung über mehrere Jahre mit dem Ziel der Datenreduktion – wie für die verwendeten Datensätze durchgeführt – bei strenger Betrachtung bereits eine Transformation darstellt, sind weitere Transformationen fragwürdige Alternativen, da geschätzte Ergebnisse, die auf

transformierten Daten basieren, schwer interpretierbar werden. Für diese Untersuchung wurden für drei Parameter (Leitfähigkeit, Magnesium- und Simazin-Konzentrationen) die Basisdatensätze transformiert und anschließend der geostatistischen Untersuchung zugeführt.

Für alle drei Parameter (Anhang VI, Karten E 1 bis 3) zeigen die Variogramme (Anhang V Variogramme D) eine gleichmäßige Zunahme der Varianzen mit größer werdenden Distanzen. Der Nuggeteffekt erreicht jeweils deutlich geringere Werte (pH: 20 %; Mg: 10 %; Simazin: 34 %) der Gesamtvarianzen, als sie für die nicht transformierten Daten errechnet wurden (Kapitel 5.2.1.2). Für Simazin ist eine Variogrammodellanpassung sogar ausschließlich nach Transformation sinnvoll. Das angepasste Variogrammodell hat in diesem Fall eine Reichweite von 57.000 m; mittels Kreuzvalidation wurde ein standardisierter Schätzfehler von 1,25 errechnet. Die rücktransformierten Werte der Flächenschätzungen sind – nicht zuletzt aufgrund fehlender vergleichbarer Schätzungen nicht transformierter Daten – schwer interpretierbar. Schätzfehler von flächenhaft selten unter 120% scheinen zunächst sehr hoch.

Ähnlich hohe Schätzfehler wurden für die Krigingschätzungen der Magnesium-Konzentrationen (selten unter 100%) und der Leitfähigkeit (ebenfalls selten unter 100%) festgestellt. Im Gegensatz zu den Konzentrationen des Simazins zeichnen sich für diese beiden Stoffe aber große Naturräume durch ihre physisch-chemischen Eigenschaften ab: Das Gebiet des Schwarzwaldes zeigt die geringsten Leitfähigkeiten und zusätzlich geringe Magnesium-Konzentrationen. Letzteres ist auch deutlich für die Schwäbische Alb erkennbar. Diese Schätzergebnisse decken sich weitgehend mit den Schätzungen und IDW-Interpolationen der nicht transformierten Daten, wie sich in Kapitel 5.2.2 zeigt.

Die nicht eindeutige Interpretierbarkeit der Schätzergebnisse und die flächenhaft hohen Schätzfehler, gerade in Gebieten niedriger Konzentrationen/Werte, lassen den Einsatz von Transformationen vor der geostatistischen Analyse fragwürdig erscheinen. Klare Vorteile sind nicht erkennbar, die scheinbar gut anzupassenden Variogrammodelle enttäuschen durch hohe Schätzfehler auf fast der gesamten Untersuchungsfläche.

5.2.1.2. Gesamtgebiet

Die entsprechend den oben ausgeführten Kriterien durchgeführte Strukturanalyse führt zu den im Anhang V unter Variogramme A dargestellten Ergebnissen. Nur für fünf der 23 auf räumliche Autokorrelation geprüften Parameter der Grundwasserbeschaffenheit konnte eine deutliche räumlich autokorrelative Struktur festgestellt werden.

Die Werte der Grundwasserleitfähigkeit erreichen bereits in Distanzklasse 20 ein Niveau kontinuierlich oberhalb des Varianzwertes des Gesamtdatensatzes von 1.239. Schon für geringe Distanzen sind hohe Varianzen feststellbar, die in einigen Distanzklassen bereits die Varianz des Gesamtdatenbestandes übertreffen. Mit zunehmender Distanz nimmt die Varianz bis auf einen Maximalwert von 2.042 in Distanzklasse 63 zu. Das Variogramm zeigt mit einem Nuggeteffekt von 980 – entsprechend über 75% der Gesamtvarianz des Datensatzes – eine sehr stark ausgeprägte Zufallskomponente. Eine Modellanpassung scheint aufgrund der mit zunehmender Distanz ebenfalls zunehmenden Variabilität zunächst sinnvoll. Es wurde eine Variogrammodell bestehend aus zwei Strukturen (Nugget und Gauss) angepasst. Der Sill des angepassten Modells beträgt 1.740, die Reichweite liegt bei 50.000 m. Die Varianz des standardisierten Schätzfehlers, ermittelt durch Kreuzvalidation, liegt bei 0,81.

Die pH-Werte der untersuchten Grundwasserbeschaffenheitsdaten zeigen in den Klassen geringer Distanzen eine starke Zunahme der Varianzen. Der Nuggeteffekt von 0,02 bei einer durchschnittlichen Gesamtvariabilität von 0,16 ist als niedrig einzuschätzen. Der starken Varianzzunahme in geringen Distanzen folgen ein Distanzbereich auf relativ ähnlichem Niveau um 0,10, ab Distanzklasse 60 eine leichte Abnahme der Variabilität und eine erneute Zunahme der Variabilität ab Distanzklasse 90. Die Gesamtvariabilität des Datensatzes wird erst in großen Distanzen von über 150.000 m erreicht und überschritten. Für die pH-Werte wurden zwei Variogrammodelle angepasst: Eines berücksichtigt vorwiegend die starke Varianzzunahme in kleinen Distanzen und setzt sich lediglich aus Nugget- und Sphärischem Modell zusammen, das andere bildet aus drei Strukturen (Nugget, Sphärisch, Gauss) ein Modell mit einer Reichweite von 70.000 m und berücksichtigt damit den Distanzbereich relativ ähnlich bleibender Varianzen. Der standardisierte mittlere Schätzfehler liegt

für das einfachere Modell mit kurzer Reichweite bei 1,27 und bei dem aus drei Strukturen zusammengesetzten Modell bei 1,30.

Der Nuggeteffekt mit einer Varianz von 2.738 erreicht bereits fast zwei Drittel der Gesamtvarianz der Datenbasis der Calcium-Messungen, die bei 4.189 liegt, es ist daher von einer ausgeprägten Zufallskomponente auszugehen. Da die Variabilität allerdings mit zunehmenden Distanzen bis etwa 75.000 m weiter zunimmt, ist eine Variogrammodellanpassung sinnvoll. Die Gesamtvarianz wird erstmalig in der Distanzklasse 17 überschritten, sinkt in größeren Distanzen aber noch mehrmals unter diesen Wert ab. Die maximale Varianz wird im betrachteten Bereich bis 125.000 m in Klasse 74 mit einem Wert von 5.535 erreicht. Die Anpassung eines aus drei Strukturen (Nugget, Sphärisch, Gauss) zusammengesetzten Modells führt nach Kreuzvalidierung zu einem standardisierten Schätzfehler von 0,97. Das angepasste Variogrammodell hat eine Reichweite von 68250 m und erreicht seinen Sill bei 4.750.

Der Trend der Varianzen der Magnesium-Konzentrationen ist bis zu Distanzklasse 30 zunehmend, um schon in etwas größeren Entfernungen leicht zurückzugehen und erneut anzusteigen. Die Gesamtvarianz von 213 wird in der Distanzklasse 27 überschritten, die maximale Varianz wird in Klasse 69 mit dem Wert von 353 erreicht. Der Nuggeteffekt ist mit 72 – entsprechend 33% der Gesamtvarianz – im Vergleich zu den anderen betrachteten Parametern niedrig. Den mit zunehmenden Distanzen stark ansteigenden Varianzen wurde mit der Anpassung eines lediglich aus zwei Strukturen (Nugget und Gauss) zusammengesetzten Modells Rechnung getragen. Die Reichweite des Modells ist auf 37.500 m begrenzt, es erreicht einen Sill von 260. Der standardisierte Schätzfehler liegt bei 0,85 – bei der Verwendung des Modells für Krigingschätzungen ist also von tendenziellen Unterschätzungen der tatsächlichen Konzentrationen auszugehen.

Abweichend von denen des Magnesiums zeigen die Varianzen des Sulfats bereits in den Klassen geringer Distanzen starke Unterschiede zwischen den Klassen, die Varianzen in diesen Klassen liegen teilweise bereits über der Gesamtvarianz von 15.122. Insgesamt entsteht bei der bewusst verwendeten hohen Auflösung durch kleine Distanzklassen ein sehr inhomogener Eindruck der räumlichen Sulfat-Variabilität. Dieser Eindruck lässt sich durch Verwendung größerer Distanzklassen für die Darstellung des Variogramms relativieren (so genannte Glättung). Der Trend

der räumlichen Variabilität ist jedoch eindeutig: eine Zunahme der Variabilität über größere Distanzen bis zu einer maximalen Variabilität von 32.404 in der Distanzklasse 74. Die Anpassung eines Variogrammmodells ist daher sinnvoll. Das aus zwei Strukturen (Nugget und Exponentiell) bestehende Modell hat eine Gesamtreichweite von 75.000 m und erreicht einen Sill von 29500. Der errechnete standardisierte Schätzfehler liegt mit 1,04 dem Optimum von 1,0 sehr nahe und lässt für räumliche Schätzungen mittels Kriging nur geringfügig zu hohe Schätzungen erwarten.

Alle übrigen betrachteten Parameter zeigen als Ergebnis der durchgeführten Variogrammanalysen keine deutliche räumliche Autokorrelation. Die Varianzen in den Distanzklassen schwanken bereits bei geringen Entfernungen stark. Besonders auffällig ist die Varianzabnahme mit zunehmender Distanz der Messpunkte zueinander bei den Stoffen Natrium, Chlor und Simazin. Die räumliche Variabilität der Nitratkonzentrationen ist kleinräumig besonders hoch, erreicht die maximale Varianz von 827 bereits in Distanzklasse 6 – die Gesamtvarianz liegt bei 807. Für diese drei, aber auch alle übrigen Stoffe, für die kein Variogrammmodell angepasst werden konnte, ist von einer Überlagerung der räumlichen Variabilität mit hier unberücksichtigten Faktoren auszugehen. Ein wichtiger Faktor kann das Umweltverhalten der untersuchten Parameter sein, aber auch andere Einflüsse sind denkbar. Die extreme Variabilität der Bleikonzentrationen in unterschiedlichen Messpunktdistanzen könnte beispielsweise durch die starke Abhängigkeit des Lösungsverhaltens vom pH-Wert so stark überlagert werden, dass möglicherweise vorhandene räumliche Strukturen nicht mehr ohne weiteres identifizierbar sind. Dies würde eine hohe räumliche Variabilität des pH-Wertes unterstellen, die erfahrungsgemäß durchaus – beispielsweise in Abhängigkeit von Bodenbehandlungen oder kleinräumigen Koniferenbeständen – gegeben ist.

5.2.1.3. Einzugsgebiet Enz

Im Einzugsgebiet Enz konnte mittels Variografie für fünf der untersuchten 23 Parameter der Grundwasserbeschaffenheit eine – in einigen Fällen nur schwach ausgeprägte – räumliche Autokorrelation festgestellt werden. Im Anhang V sind alle berechneten Variogramme unter Variogramme B abgebildet.

Die Grundwasserleitfähigkeit zeigt im Einzugsgebiet Enz eine deutliche Zunahme der Varianzen in den Klassen größerer räumlicher Distanz. Allerdings war eine

Maskierung (Ausschluss) von zehn Probenahmestellen notwendig, um ein Variogramm zu berechnen, das eine entsprechende Struktur ausweist. Die Berechnungen von Variogrammen ohne Maskierung dieser Messstellen ließen keine eindeutige räumliche Struktur der Variabilität erkennen. In Distanzklasse 3 wird bereits ein Varianzwert von 336 erreicht, doch wurden in den angrenzenden Klassen weitaus geringere Varianzen festgestellt. Die maximale Varianz wird im betrachteten Distanzraum in Klasse 34 mit 1.054 erreicht, die Gesamtvarianz liegt bei einem Wert von 1.105. Der Nuggeteffekt liegt mit einem Wert von 136 auf einem vergleichsweise niedrigen Niveau. Das angepasste, aus zwei Strukturen (Nugget und Gauss) zusammengesetzte Variogrammmodell hat einen *Sill* von 645 und eine Reichweite von 20.500 m. Der standardisierte Schätzfehler ist mit einem Wert von 1,39 im Vergleich zu den Schätzfehlern der angepassten Variogrammmodelle der Gesamtfläche Baden-Württembergs hoch.

Die pH-Werte des Grundwassers zeigen für das Einzugsgebiet Enz im empirischen Variogramm eine räumliche Erhaltungsneigung bis etwa 20.000 m Distanz zwischen den Messpunkten. In den größeren Distanzklassen schwankt die Variabilität zwischen den benachbarten Klassen sehr stark. Der Nuggeteffekt liegt mit 0,01 – entsprechend 5,5 % der Gesamtvarianz von 0,18 in der Datenbasis – recht niedrig. Dies lässt auf eine vergleichsweise schwach ausgeprägte Zufallskomponente schließen. Die Gesamtvarianz des Datensatzes wird in den betrachteten Distanzklassen nicht erreicht. Ein Variogrammmodell, bestehend aus zwei Strukturen (Nugget und Gauss), wurde mit einer Reichweite von 20.250 m und einem *Sill* von 0,086 angepasst. Die Kreuzvalidierung führt zu einem standardisierten Schätzfehler von 2,1 – ein sehr hoher Wert, der auf ein nicht optimal angepasstes Variogrammmodell hinweist. Auch Änderungen in der Variogrammmodelladaptation führten zu ähnlich hohen Schätzfehlern.

Dieser Fall verdeutlicht einen Schwachpunkt der Variogrammmodelladaptation: den nicht zu unterschätzenden Einfluss der Subjektivität des Bearbeiters. Üblicherweise werden empirische Variogramme verwendet, um Variogrammmodelle anzupassen, da sie Distanzklassen wiedergeben. Da die Besetzungstärke (Messstellen pro Distanzklasse) in der Regel aber unbeachtet bleibt, können gering besetzte – und daher weniger bedeutende – Klassen überbewertet und entsprechend wichtige – da stark besetzte – Klassen unterbewertet werden. Distanzklassen, die stark besetzt sind, aber durch die beschriebene Vorgehensweise ebenso wie weniger stark be-

setzte Klassen behandelt werden, führen dann zu schlecht angepassten Variogrammodellen, wie die Kreuzvalidierung deutlich macht. Diese Problematik wäre durch ein zu entwickelndes Regelsystem, das die Verteilungsstruktur der Probenahmestellen in den Distanzklassen berücksichtigt, vermeidbar, ist aber bisher in der Literatur und Software nicht berücksichtigt worden. Im vorliegenden Fall wurde das angepasste Variogrammodell trotz des wesentlich hohen Schätzfehlers für Krigingschätzungen zu Vergleichszwecken mit anderen Interpolationsverfahren genutzt.

Die Varianzen der Magnesium-Konzentrationen steigen distanzabhängig bis 17.000 m im Trend an. Dieser Anstieg ist allerdings nicht kontinuierlich, in Klassen größerer Distanzen sinken die Varianzwerte teilweise unter die der nächsten Klasse geringerer Distanz ab. Bei Distanzen um 20.000 m gehen die Varianzen zurück und steigen oberhalb von 25.000 m wieder an. Der Nuggeteffekt liegt mit einem Wert von 33 bei einer Gesamtvarianz von 286 auf einem vergleichsweise niedrigen Niveau. Im betrachteten Distanzraum wird ein maximaler Varianzwert von 552 in Distanzklasse 32 erreicht. Das angepasste Variogrammodell setzt sich aus zwei Strukturen (Nugget und Linear) zusammen, hat eine Reichweite von 18.000 m und erreicht den Sill bei 205. Die Kreuzvalidierung ergab einen mittleren standardisierten Schätzfehler von 1,54 – bei Verwendung des Variogrammodells für räumliche Krigingschätzungen ist also von flächenhaft zu hohen Schätzungen auszugehen.

Ähnlich der Strukturanalyse der Grundwasserleitfähigkeit konnte für Atrazin nach Maskierung eine räumliche Autokorrelation festgestellt werden. In diesem Fall wurde lediglich eine Messstelle aus dem Datensatz entfernt. Die Varianzen steigen mit zunehmenden Distanzen von einem Nuggeteffekt-Wert von 0,000019 bis in eine Entfernung von 9.000 m nahezu kontinuierlich an. In größeren Distanzen sind die Varianzen uneinheitlich und erreichen Werte von bis zu 0,00028 in Distanzklasse 28. Das angepasste Variogrammodell setzt sich aus zwei Strukturen zusammen (Nugget und Gauss) und hat bei einem Sill von 0,0000275 eine Reichweite von 13.500 m. Die Kreuzvalidierung führt zu einem hohen standardisierten Schätzfehler von 2,1. Die bereits angesprochene Problematik der subjektiven Variogrammodellanpassung trifft auch im Fall des Atrazins zu.

Die räumliche Struktur der Simazin-Konzentrationen ist denen der Atrazin-Konzentrationen im Einzugsgebiet Enz recht ähnlich. Von einem relativ zur Gesamt-

varianz – aber auch im Vergleich mit anderen untersuchten Parametern – schwach ausgeprägten Nuggeteffekt von 0,000006 steigen die Varianzen in kurzen Distanzen kontinuierlich an, erreichen aber noch unterhalb von 10.000 m ein lokales Maximum. In größeren Distanzen schwanken die Varianzen der Distanzklassen uneinheitlich, steigen zwischen 23.000 m und 28.000 m (Gesamtvarianz 0,00021) stark an und sinken bei 30.000 m noch stärker ab. Eine Variogrammodellanpassung ist damit nur im Nahbereich möglich. Das angepasste Variogrammodell setzt sich aus zwei Strukturen zusammen (Nugget und Gauss) und hat eine Reichweite von lediglich 6.500 m bei einem Sill von 0,000064. Die Kreuzvalidierung führt zu einem standardisierten Schätzfehler von 4,9 – ein sehr hoher Wert, der eine ernsthafte Verwendung des Variogrammodells für räumliche Interpretationen ausschließt. Um einen qualitativen Vergleich der Krigingschätzung – auch unter Verwendung eines offensichtlich unzureichend exakt angepassten Variogrammodells – mit anderen Interpolationsverfahren durchführen zu können, wurde das Modell dennoch für die Krigingschätzung verwendet.

Für die übrigen untersuchten Parameter der Grundwasserbeschaffenheit des Einzugsgebietes Enz konnte keine eindeutige räumliche Autokorrelation festgestellt werden. Besonders fällt das räumliche Verhalten der Varianzen der Calcium- und Sulfatkonzentrationen auf: In Distanzen bis 30.000 m ist in beiden Fällen ein recht einheitliches, gering ansteigendes Niveau feststellbar. In Distanzklasse 32 wird jeweils die maximale Varianz des betrachteten Distanzraumes erreicht, die sehr deutlich über den übrigen Varianzen liegt. Ein fast inverses räumliches Verhalten zeigen die Parameter Bromacil und Hexazinon. Die maximalen Varianzen wurden in diesen Fällen bei geringen Distanzen festgestellt, sie nehmen dann stark ab und sind im übrigen Betrachtungsraum sehr variabel. Es ist zu vermuten, dass ebenso wie für die gesamte Landesfläche auch im Einzugsgebiet Enz Überlagerungen mit Faktoren, die nicht durch die räumliche Distanz der Messstellen zueinander abgebildet werden, existieren und so eine Beeinflussung der Merkmalsausprägungen besteht. Die Diskussion des Skalenwechsels bei gleich bleibender Datenbasis sollte bei der Interpretation von Daten, die in Landesmessnetzen erhoben, aber für eine Teilfläche interpretiert werden, stets beachtet werden (Kapitel 5.2.4). Entsprechend kann das Einzugsgebiet Enz als eine räumliche Stichprobe der gesamten Landesfläche betrachtet werden. Für die geostatistische Untersuchung gewinnen Aspekte wie der Stichprobenumfang und der Einfluss anderer Faktoren – beispielsweise die Landnutzung

oder naturräumliche Ausstattung, wie oben angedeutet – an Bedeutung. Das empirische Variogramm ist bei geringerem Stichprobenumfang zunehmend empfindlicher gegenüber derartigen Einflüssen, bildet diese aber nur eingeschränkt ab.

5.2.2. Kriging

Für die Krigingschätzungen werden folgende Kriterien definiert:

- (1) Die Neighborhood (Suchradius) ist durch die Reichweite des angepassten Variogrammmodells definiert.
- (2) Die optimale zur Schätzung verwendete Anzahl der Messpunkte soll 20 sein.

Damit soll einer zu starken Glättung in Gebieten mit einer hohen Messstellenanzahl vorgebeugt werden. Eine größere zugelassene Anzahl würde keine deutliche Verbesserung der Schätzung bringen, da zu erwarten ist, dass mit zunehmender Messpunktanzahl ein so genannter „Abschirmungseffekt“ weiter entfernter Messpunkte durch näher liegende Messpunkte eintritt – da diese im KGS höhere Gewichte erhalten.

- (3) Die minimale zur Schätzung verwendete Anzahl der Messpunkte soll 5 sein.

Sollte dieser Wert nicht erreicht werden, wird der Schätzvorgang abgebrochen, die entsprechende Rasterzelle gilt als nicht schätzbar.

- (4) Zur Schätzung werden die dem zu schätzenden Punkt am nächsten liegenden Punkte verwendet.
- (5) Für die Untersuchungen für die gesamte Landesfläche Baden-Württemberg beträgt die Kantenlänge der Grid-Rasterzellen 1.000 m.
- (6) Für die Untersuchungen des Einzugsgebiets Enz beträgt die Kantenlänge der Grid-Rasterzellen 250 m.

Für alle kartographischen Darstellungen der Ergebnisse aus Krigingschätzung oder IDW-Interpolation der Gesamtfläche Baden-Württembergs und des Einzugsgebietes

Enz wurden der besseren Vergleichbarkeit wegen einheitliche Legenden und Farb-abstufungen für jeweils einen untersuchten Parameter verwendet.

5.2.2.1. Gesamtgebiet

Die Ergebnisse der räumlichen Schätzungen auf Grundlage der angepassten Variogrammodelle und der oben definierten Schätzkriterien für diejenigen Parameter, deren Test auf räumliche Autokorrelation positiv ausfiel, sind in Anhang VI unter Karten B als kartographische Darstellungen einzusehen.

Die Karte B 1 der geschätzten elektrischen Leitfähigkeit führt zu zwei deutlich abgesetzten Gebieten, in denen die höchsten Werte geschätzt wurden. Es handelt sich um die Räume um die Ballungsgebiete Stuttgarts und Heilbronn. Die niedrigsten Schätzwerte wurden für den Naturraum Schwarzwald ermittelt. Die Flächen der Schwäbischen Alb heben sich nicht vom südlich angrenzenden Alpenvorland ab. Die zu erwartenden Schätzfehler sind im Naturraum Schwarzwald mit über 100 % am höchsten. Da sich in diesem Gebiet die wenigsten Messstellen befinden, ist davon auszugehen, dass nicht das Variogrammodell *per se* zu schlechten Schätzergebnissen führt, sondern vielmehr die geringe Messstellendichte die Schätzqualität beeinträchtigt.

Die Flächenschätzungen der pH-Werte (Karten B 3-1 und B 3-2) lassen den Naturraum Schwarzwald deutlich hervortreten. Im Gegensatz zu den LF-Schätzungen zeigt sich aber kein deutlicher Anstieg der Schätzwerte am Übergang zum Rheintalgraben. Die nördlichen Landesteile östlich von Heidelberg zeigen ebenfalls sehr niedrige Schätzwerte. Die Schwäbische Alb, das Alpenvorland und die übrige Landesfläche weisen nur schwach ausgeprägte Unterschiede in den pH-Wertschätzungen auf. Die Schätzungen beider angepasster Variogrammodelle führen zu sehr ähnlichen Ergebnissen, die bei Betrachtung der Ergebnisse auf großer Maßstabsebene zu vernachlässigen sind. Die prozentualen Schätzfehler sind im Vergleich zu denen anderer Parameter sehr gering. Da eine ähnliche Messstellenanzahl für die Strukturanalyse und Variogrammodellanpassung verwendet wurde, ist die große Differenz des prozentualen Schätzfehlers so nicht erklärbar. Die Variogramme der pH-Schätzungen haben – in dieser Hinsicht offensichtlich wesentliche – Unterschiede zu den meisten übrigen Variogrammen: einen relativ zur Gesamtvarianz (0,16) kleinen Sill von 0,02 und besonders im Nahbereich stark ansteigende Varian-

zen. Gerade dieser Bereich wird durch die oben definierten Kriterien der räumlichen Schätzung für die Flächenschätzung prioritär berücksichtigt. Insbesondere für den Nahbereich konnte in diesem Fall ein sehr gutes Variogrammmodell angepasst werden, obwohl die durch Kreuzvalidation ermittelte Varianz des standardisierten Schätzfehlers für die Variogrammmodelle insgesamt keine deutlich bessere Qualität der Variogrammmodelle im Vergleich zu den Modellen der anderen Parameter zeigen.

Die höchsten Calcium-Konzentrationen (Karte B 5) wurden für mehrere Regionen in nördlichen Landesteilen geschätzt, die Schätzfehler liegen in diesen Bereichen deutlich unter 100 %. Wiederum erreichen die Schätzfehler aufgrund der geringen Messstellendichte ihre Maximalwerte im Schwarzwald, der gleichfalls die niedrigsten Schätzwerte aufweist.

Die Schätzungen der Magnesium-Konzentrationen (Karte B 7) lassen zwei Naturräume und deren Übergangsbereiche deutlich hervortreten: Der Schwarzwald und die Schwäbische Alb zeigen die niedrigsten Werte. Gleichfalls müssen wiederum die höchsten Schätzfehler in diesen Regionen festgestellt werden. Die höchsten Magnesium-Konzentrationen finden sich mit Werten bis über 50 mg/l in den nördlichen Landesteilen, im Voralpenland werden Werte bis zu 30 mg/l erreicht. In diesen Gebieten liegen die Schätzfehler meist unter 50 %, teilweise sogar unter 20 %.

Die Sulfat-Schätzungen (Karte B 9) zeigen über die gesamte Landesfläche Baden-Württembergs großflächig ausgeprägt eine Variabilität von über 1.000 %. So sind die niedrigsten Werte im Schwarzwald und im östlichen Alpenvorland anzutreffen. Hohe Konzentrationen finden sich in mehreren Gebieten am Nordwestrand der Schwäbischen Alb und in den nördlichen Landesteilen. Wenigstens teilweise spiegelt sich darin eine geogene Beeinflussung durch oberflächennahe Muschelkalk- und Keupervorkommen wider. Die extrem hohen prozentualen Schätzfehler von bis über 1.500 % stellen allerdings die Aussagefähigkeit der räumlichen Interpolation für Sulfat auch für Überblicksdarstellungen in Frage. Das besonders in den kleinen Distanzklassen heterogene Variogramm und die dadurch für diesen Bereich erschwerte Variogrammanpassung verursachen diese Ungenauigkeit, trotz des für das Gesamtmodell sehr guten standardisierten Schätzfehlers von 1,04.

5.2.2.2. Einzugsgebiet Enz

Die Schätzwerte der Grundwasserleitfähigkeit (Karte C 1) nehmen im Einzugsgebiet Enz von West nach Ost zu, gleichfalls nehmen die prozentualen Schätzfehler ab. Im Westen werden die niedrigsten Leitfähigkeiten von unter 20 mS/m geschätzt, in den östlichen Teilen des Einzugsgebietes Werte von bis zu 140 mS/m. Die Abnahme der Schätzfehler von über 100 % bis unter 20 % lässt sich nicht auf die geringe Messstellendichte zurückführen. Zwar liegen wie im gesamten Schwarzwald, auch in dem zum Einzugsgebiet der Enz gehörigen Teil, die Messstellen vergleichsweise weit auseinander, im nordöstlichen Teil des Einzugsgebietes sind die Messstellendichten aber kaum größer. Die Ursache der hohen prozentualen Schätzfehler ist vielmehr in den unterschiedlichen Schätzwertniveaus zu sehen. Die absoluten Schätzfehler (nicht dargestellt) finden sich im westlichen Teil des Einzugsgebietes auf einem dem Ostteil sehr ähnlichen Niveau. Durch die niedrigen Schätzwerte im Westteil verursacht, liegt der relative Schätzfehler hier aber deutlich höher. Für kleine Bereiche im Westen des Einzugsgebietes konnten keine Schätzwerte ermittelt werden, da auf diesen Flächen die oben aufgeführten Mindestanforderungen nicht erfüllt wurden.

Die in Karte C 3 dargestellten geschätzten pH-Werte des Einzugsgebietes Enz sind erwartungsgemäß an den Ausläufern des Schwarzwaldes am niedrigsten. Minima von unter pH 5,5 wurden geschätzt, die Maximalwerte liegen im Gebiet des Einzugsgebietes unter pH 7,5. Auch die pH-Werte zeigen eine Zunahme des prozentualen Schätzfehlers in Bereichen niedriger Schätzwerte, allerdings ist dieses Phänomen nicht so stark ausgeprägt wie bei den Schätzungen der Leitfähigkeit. Hierfür könnte eine Überlagerung mit dem bereits im Zusammenhang mit den Schätzungen für die gesamte Landesfläche aufgefallenen Phänomen der schlechten Anpassung des Variogrammmodells im für die Schätzung verwendeten Variogrammmodellabschnitts die Ursache sein. Für kleine Bereiche im Westen des Einzugsgebietes konnten keine Schätzwerte ermittelt werden, da auf diesen Flächen die oben aufgeführten Mindestanforderungen nicht erfüllt wurden.

Für die Schätzungen der Magnesium-Konzentrationen (Karte C 5) können Teilen des Einzugsgebietes, die großflächiger als bei der Leitfähigkeit und der pH-Werte sind, keine Werte zugewiesen werden, da die für die Krigingschätzung definierten Mindestanforderungen nicht erfüllt wurden. Im Übrigen zeigt sich eine erwartungsgemäße Konzentrationsverteilung mit geringeren Werten im Westen (unter 15 mg/l)

und den Maximalwerten (über 45 mg/l) in zwei voneinander getrennten östlichen Bereichen im Norden und im Süden. Die prozentualen Schätzfehler steigen in engem Zusammenhang umgekehrt proportional mit den Magnesium-Konzentrationen.

Die Atrazin-Schätzungen (Karte C 7) erreichen Maximalwerte von bis zu 0,065 µg/l etwas nördlich des zentralen Bereiches des Einzugsgebietes, die niedrigsten Werte von unter 0,02 µg/l werden im östlichen Teil erreicht. Durch die definierten Qualitätskriterien konnten keine Schätzungen für das ganze Einzugsgebiet durchgeführt werden: Bedingt durch die vergleichsweise geringe Reichweite des Variogrammodells von 13.500 m lagen einige Bereiche des Einzugsgebietes peripher, es waren nicht ausreichend viele Messstellen in Reichweite, um Schätzungen durchzuführen. Die prozentualen Schätzfehler liegen mit maximal unter 40 % vergleichsweise niedrig. Ein Zusammenhang kann mit einer guten Variogrammanpassung im Nahbereich vermutet werden – obwohl der standardisierte Schätzfehler für das gesamte Variogrammodell vergleichsweise hoch liegt (2,1).

Die bereits angesprochene Problematik eines Variogrammodells mit geringer Reichweite für die Atrazin-Schätzungen wiederholt sich für die Simazin-Schätzungen (Karte C 9) in verstärktem Maße. Die sehr kleine Reichweite des Variogrammodells von nur 6.500 m führt dazu, dass für große Bereiche des Einzugsgebietes keine Schätzungen durchgeführt werden können, da die definierten Kriterien (hier: Schätzung auf Grundlage der Werte von mindestens fünf Messstellen und begrenzte Variogrammodellreichweite) nicht eingehalten werden konnten. Die höchsten Schätzwerte (über 0.05 µg/l) werden im mittleren Teil des Einzugsgebietes erreicht, unweit von Bereichen mit den niedrigsten Konzentrationen (unter 0,01 µg/l). Die prozentualen Schätzfehler bleiben durchgängig unter 30 %, der im Vergleich zur Gesamtvarianz sehr niedrige Sill dürfte in Kombination mit einem im Nahbereich sehr gut angepassten Variogrammodell zu diesem Ergebnis führen.

Exkurs 3: Skalenwechsel

Die Ergebnisse der Strukturanalysen lassen in einigen Fällen räumliche Schätzungen mittels Krigingschätzung zu. Dies gilt sowohl für die Maßstabsebene der gesamten Landesfläche, als auch für die Prüfung der räumlichen Autokorrelation für das exemplarisch betrachtete Einzugsgebiet der Enz. Offen bleibt bisher die Frage, inwieweit sich die Schätzungen der bisher stets getrennt betrachteten Bezugsräume unter-

schiedlicher Größe (35.790 km² bzw. 2.229 km²) und Messstellenanzahlen (1599 bzw. 96) decken, oder ob Unterschiede feststellbar sind. Anhand dreier Parameter, für die auf Einzugsgebietsebene und für die Gesamtfläche Schätzungen zulässig sind, wurde der im Folgenden dargestellte Vergleich durchgeführt.

Die Karten D 1 bis D 3 in Anhang VI zeigen das Einzugsgebiet Enz als einen vergrößerten Ausschnitt der geschätzten Parameterwerte der Gesamtfläche Baden Württembergs für die elektrische Leitfähigkeit, den pH-Wert und die Magnesiumkonzentration. Die Zellengröße von 1.000 m x 1.000 m wurde beibehalten, als Isolinien sind die im GIS ermittelten prozentualen Differenzen der Schätzwerte zwischen Einzugsgebiet und gesamter Landesfläche aufgetragen.

Die Leitfähigkeitswerte der Schätzungen für die gesamte Landesfläche liegen im deutlich überwiegenden Flächenanteil oberhalb derer des Einzugsgebietes, lediglich im äußersten Südosten und Nordwesten wurden in der Gesamtflächenschätzung niedrigere Werte ermittelt. Insgesamt werden Schätzwertabweichungen von bis über 110 % erreicht. Diese Spitzenwerte sind in den Regionen zu finden, die geringe Schätzwerte und hohe Schätzfehler aufweisen. Eine tatsächlich detailliertere Aussage – die durch die verwendeten kleineren Rasterzellen der Schätzung für das Einzugsgebiet unterstellt wird – kann nicht bestätigt werden. Die insgesamt höheren Schätzwerte aus der Schätzung für die gesamte Landesfläche könnten durch die Beeinflussung durch Messstellen, die außerhalb des Einzugsgebietes Enz liegen, verursacht werden.

Der Vergleich der geschätzten pH-Werte (Karte D 2) zeigt ein ähnliches Ergebnis, allerdings liegen die Abweichungen der Schätzwerte auf einem deutlich niedrigeren Niveau zwischen 3,5 % (positive Abweichungen) und 4,0 % (negative Abweichungen). Diese maximalen Abweichungen konnten im äußersten Osten und im äußersten Süden des Einzugsgebietes festgestellt werden. Durch die Randlagen kann in diesem Fall eine Beeinflussung durch Messstellen, die außerhalb des Einzugsgebietes liegen, angenommen werden. Dies liegt nahe, da das für die Schätzung der gesamten Landesfläche verwendete Variogrammmodell eine Reichweite von 70.000 m hat und damit auch die Merkmalsausprägungen weiter entfernter Messstellen in die Schätzung eingehen können. Das zur Schätzung des Einzugsgebietes verwendete

te Modell hat eine Reichweite von „nur“ 20.500 m, berücksichtigt in der verwendeten Form aber ausschließlich Messstellen, die innerhalb des Einzugsgebietes liegen.

Die prozentualen Abweichungen zwischen beiden Schätzungen der Magnesium-Konzentrationen (Karte D 3) liegen zwischen 15 % (positive Abweichungen) und 85 % (negative Abweichungen). Die größten Unterschiede finden sich wiederum in Gebieten mit den niedrigsten Konzentrationen und in den Randbereichen des Einzugsgebietes. Insgesamt liegen die Klassengrenzen beider Schätzungen sehr ähnlich.

5.2.3. Inverse-Distance-Weighting

Für alle Parameter, für die mittels Strukturanalyse eine räumliche Autokorrelation festgestellt wurde, wurden neben den Krigingschätzungen auch Interpolationen mittels IDW durchgeführt. Da die IDW-Interpolation weniger zu definierende Eingangskriterien als die Krigingschätzung fordert, um die Vergleichbarkeit zu gewährleisten, wurden der Suchradius und die für die Interpolation zu verwendende Messstellenanzahl aus der Krigingschätzung des jeweiligen Parameters übernommen. Als Exponent wurde stets 2 verwendet.

5.2.3.1. Gesamtgebiet

Die IDW-Interpolation der Grundwasserleitfähigkeit (Karte B 2 in Anhang VI) führt zu einem der Krigingschätzung sehr ähnlichen Ergebnis. Die Differenzen beider Interpolationsverfahren sind moderat und erreichen maximale Abweichungen zwischen 110% (unterhalb der Vergleichswerte) und 60% (oberhalb der Vergleichswerte), die aber nur sehr kleinräumig erreicht werden. Auf über 90 % der Landesfläche betragen die Abweichungen der Interpolationsergebnisse weniger als 20 %.

Die Differenzen zwischen der IDW-Interpolation und der Krigingschätzung der pH-Werte (Karte B 4) liegen im Bereich zwischen 27 % unterhalb der Vergleichswerte) und 7,5 % (oberhalb der Vergleichswerte), beide Extrema werden in den Randbereichen des zu schätzenden Untersuchungsgebietes erreicht. In über 90 % liegen die Ergebnisse beider Verfahren weniger als 10 % auseinander.

Sehr ähnlich sind sich auch die Schätz- und Interpolationsergebnisse der Calcium-Konzentrationen (Karte B 6). Die Differenzen zwischen beiden Verfahren steigen

jedoch im Naturraum Schwarzwald sehr stark an. Bleiben sie auf der übrigen Landesfläche – mit Ausnahme des nördlichen Randes – flächenhaft innerhalb +/-25 %, so schnellen sie hier auf kurzen Distanzen bis über 150 % hoch. In diesem Bereich zeigt die Krigingschätzung extrem hohe Schätzfehler bei sehr niedrigen geschätzten Konzentrationen. Für diese Bereiche wäre detaillierter zu untersuchen, wie sich die Aussagefähigkeit beider eingesetzter Verfahren in problematischen Bereichen ergänzen oder kombinieren lässt.

Den Interpolationen der Calcium-Konzentrationen ein sehr ähnliches Bild zeichnet ein Vergleich beider Interpolationsergebnisse für die Magnesium-Konzentrationen (Karte B 8): Die Bereiche, für die die Krigingschätzungen hohe Schätzfehler aufweisen, sind auch die Bereiche, in denen die größten Differenzen zwischen Kriging- und IDW-Interpolation auftreten. In diesem Fall liegen die Abweichungen in Bereichen bis über 150 %. Für weite Landesteile (70 %) weichen die Ergebnisse beider Verfahren lediglich um weniger als 20 % voneinander ab.

Die durch IDW-Interpolation ermittelten Sulfat-Konzentrationen liegen – die vorhergehenden Aussagen bestätigend – insgesamt unterhalb derer, die mittels Kriging geschätzt wurden. Insbesondere werden wiederum in Regionen mit hohen Kriging-Schätzfehlern kleinräumig eng begrenzt enorme Unterschiede von bis über 1.500 % festgestellt. Grundsätzlich lässt sich bestätigen, dass für den überwiegenden Flächenanteil mittels IDW geringere Sulfat-Konzentrationen geschätzt wurden.

5.2.3.2. Einzugsgebiet Enz

Die IDW-Interpolationsergebnisse (Karte C 2) führen zu – im Gegensatz zu denen für die gesamte Landesfläche – höheren Grundwasserleitfähigkeitswerten als die Krigingschätzungen. Die prozentualen Abweichungen zwischen den Ergebnissen der beiden eingesetzten Schätzverfahren sind wie beim Vergleich der Verfahren für die Gesamtfläche mit maximal 25 % gering. Auffällig sind die geringen Abweichungen auch in Gebieten mit geringen Leitfähigkeiten.

Die auf Karte C 4 dargestellten interpolierten pH-Werte zeigen wiederum um bis zu 15 % geringere Werte als für das Einzugsgebiet per Krigingschätzung ermittelt wurden. Die größten Abweichungen zeigen sich erneut in den Gebieten mit den niedrigsten Werten.

Die IDW-Interpolationen der Magnesium-Konzentrationen (Karte C 6) führen zu meist höheren Werten als die Krigingschätzungen, besonders deutlich wird dies in Gebieten mit geringen Konzentrationen. Die Abweichungen erreichen bis zu 110 %. In der kartographischen Darstellung der prozentualen Differenzen zeigen sich die Auswirkungen der Schätzwert-Interferenzen, dies ist vermutlich auf das der Krigingschätzung zugrunde liegende lineare Variogrammodell zurückzuführen.

Die Atrazin-Interpolationen (Karte C 7) zeigen überraschend geringe Differenzen zu den Krigingschätzungen, maximale Abweichungen von 50 % werden erreicht. Schon die geringen relativen Schätzfehler deuten die gute Qualität des angepassten Variogrammodells an. Aufgrund der geringen Reichweite des Variogrammodells sind allerdings Flächenschätzungen nicht für das gesamte Einzugsgebiet möglich. Differenzen können lediglich für die Bereiche errechnet werden, für die Werte aus beiden eingesetzten Verfahren vorliegen. Weiten Teilen der Einzugsgebietsfläche werden mittels Krigingschätzung höhere Werte zugewiesen als durch IDW-Interpolation.

Die geringe Reichweite des für Simazin erstellten Variogrammodells erschwert den Vergleich zwischen beiden Interpolationsverfahren, da nur für rund 65 % der Einzugsgebietsfläche Schätzwerte vorliegen. Die den Flächen mittels IDW zugewiesenen Werte liegen flächenhaft leicht über denen der Krigingschätzungen. Die prozentualen Abweichungen zwischen den Werten beider Verfahren erreichen bis zu 110 %. Die höchsten Differenzen werden in den Bereichen der geringsten Konzentrationen erreicht, sind aber räumlich begrenzt: 75 % der Fläche, für die aus beiden Verfahren Schätzwerte vorliegen, zeigen Differenzen von weniger als 20 %.

5.3. Anthropogene Beeinflussung der Grundwasserbeschaffenheit

5.3.1. Ableitung geeigneter Methodenkombination

Das Single-Linkage-Verfahren tendiert aufgrund der verwendeten Algorithmen dazu, Ausreißer erst in den letzten Fusionierungsschritten zusammenzufassen (Kapitel 3.4.1); daher wurde zunächst dieses Verfahren eingesetzt, um Messstellen zu erkennen, die aufgrund ihrer multidimensionalen Merkmalsausprägungen Clusterbe-

rechnungen mit dem Ward- und K-means-Verfahren als Ausreißer negativ beeinflussen würden. Nach der Eliminierung wurden dann erneute Clusterungen durchgeführt, die für das Einsatzziel der Clusteranalyse – die Erkennung von möglichst homogenen Gruppen der Untersuchungsobjekte – am ehesten geeignet erscheinen. Nach den oben gemachten Ausführungen ist dies zunächst eine Clusterung mittels Ward-Verfahren (Quadrierter Euklidischer Abstand als Distanzmaß). Da das Ward-Verfahren es nicht zulässt, die Objekte zwecks einer Homogenitätsverbesserung (zunächst testweise) einem anderen Cluster zuzuordnen, wird zu diesem Zweck, in einem weiteren Schritt, das K-means-Verfahren eingesetzt. Die Ergebnisse der Ward-Clusterung können so genutzt werden, um eine als geeignet anzusehende Gruppenanzahl zu ermitteln, die als Eingangsgröße für das K-means-Verfahren verwendet wird. Es resultiert die Annahme, dass durch eine dreistufige Clusterung die „besten“ Gruppierungsergebnisse erreicht werden können:

Schritt	Verfahren	Ziel
(1)	Single-Linkage-Clusterung	Erkennung von Ausreißern unter Berücksichtigung der multivariaten Merkmalsausprägungen.
(2)	Ward-Clusterung	Ermittlung einer als geeignet anzusehenden Gruppenanzahl und Messstellengruppierung
(3)	K-means-Clusterung	Optimierung der Gruppenhomogenitäten aus Schritt (2)

Tabelle 14: Kombination verschiedener Clusterverfahren

Im Folgenden werden für das gesamte Untersuchungsgebiet die Ergebnisse einer direkten Ward-Clusterung denen einer Gruppierung nach dem dreistufigen Verfahren gegenübergestellt.

Da schon der erste Schritt der Clusteranalyse – die Berechnung der Distanzmatrix – aufgrund der verschiedenen Maßeinheiten eine unterschiedliche Gewichtung der Eigenschaftsmerkmale hervorrufen würde, wurde zuvor eine Standardisierung der Messwerte durchgeführt. In die Clusteranalysen gehen die über den gesamten Untersuchungszeitraum gemittelten Messwerte aller Messstellen ein.

Für alle durchgeführten Clusterungen mussten die Parameter Cadmium und Bentazon ausgeschlossen werden, da sie nur an einem kleinen Teil der Messstellen erhoben wurden. Eine korrekte Clusterzuordnung kann nur erfolgen, sofern für alle Fälle (= Messstellen) Merkmalsausprägungen bekannt sind. In den statistischen Ü-

bersichten in den Tabellen C 1 in Anhang III sind die genannten Variablen dennoch berücksichtigt, um eine Interpretation ihrer Eigenschaften zu ermöglichen, die Zuordnung der Messstellen in die Cluster aber erfolgte ausschließlich mittels der 21 Parameter für die eine ausreichende Datengrundlage bestand. Messstellen, für die über den gesamten betrachteten Zeitraum nicht für alle Parameter Messwerte vorlagen, mussten ausgeschlossen werden. Dies ist die Ursache dafür, dass lediglich für 1.321 der insgesamt 1.599 Messstellen Clusterzugehörigkeiten ermittelbar sind. Die nicht zuzuordnenden 278 Messstellen gehen nicht in die Clusteranalyse ein.

5.3.2. Untersuchung aller Messstellen

5.3.2.1. Direkte Ward-Clusterung

(Karten A 1 und A 2 in Anhang VI; Diagramme A 1 in Anhang IV)

Die direkte Ward-Clusterung führt bei Berücksichtigung der Fehlerquadratsumme als Entscheidungskriterium zu einer Bildung von sechs beziehungsweise acht Gruppen. Um die Beurteilung mittels der Fehlerquadratsumme zu vereinfachen, können diese von der verwendeten Software (SPSS) auf einen Skalenbereich von 0 bis 25 normiert und die Fusionierungsschritte in Form eines Dendrogramms dargestellt werden. Nimmt man eine sinnvolle Clusteranzahl bei Erreichen von etwa 50 % der maximalen Fehlerquadratsumme an, so resultiert eine Clusterzahl von 6.

Für diese 6-Clusterlösung sind den Clustern 1 und 2 zusammen 1.284 Messstellen zugeordnet, wobei die Messstellen des Clusters 2 im Mittel stets die geringeren Makroelementkonzentrationen zeigen. Die Cluster 3 und 4 beinhalten insgesamt 35 Messstellen, und lediglich 2 bzw. 1 Messstelle bilden die Cluster 5 und 6. Wie die Diagramme A 1 in Anhang IV visuell veranschaulichen, sind die hohen SO_4^- , Cl- und Na-Konzentrationen Ursache für die Bildung von Cluster 6; Cluster 5 resultiert aus den extrem hohen LHKW- und Tetrachlorethen-Konzentrationen. Die hohen Atrazin- und Desethylatrazin-Werte führen zur Bildung des Clusters 4, gleichfalls sind Bromacil und Hexazinon sehr hoch konzentriert. Cluster 3 wird aufgrund der im Mittel gegenüber den anderen Clustern erhöhten SO_4^- -Werte gebildet, wobei ebenfalls die Konzentrationen von Na, K, Ca, und Mg höher liegen als in allen Clustern, die stärker mit Messstellen besetzt sind (lediglich die Messstelle, die Cluster 6 bildet, zeigt höhere Werte). Im Mittel sind die Konzentrationen der Makroelemente Na, K, Ca, Mg, NO_3 , SO_4 , und Cl in Cluster 1 deutlich höher als in Cluster 2. Die F-Werte in Cluster 1

weisen mit 15,9 und 23,5 für Trichlorethen bzw. die LHKW auf ausgeprägte Heterogenitäten dieser Verbindungen in den gebildeten Messstellengruppen hin. Für Cluster 2 gilt dies mit einem Wert von 11,0 für Diuron, die teilweise extrem hohen Heterogenitäten in den übrigen Clustern sind aufgrund der Besetzung mit nur wenigen Messstellen nicht zuverlässig interpretierbar.

Karte A 1 in Anhang VI gibt die räumliche Verteilung der Clusterbelegungen der direkten Ward-Clusterung wieder. Klare Interpretationen der Clusterzugehörigkeiten der Messstellen sind kaum möglich, da ein Großteil der Messstellen den Clustern 1 oder 2 zugeordnet wurde. Die Messstellen, die entlang der holozänen Sedimente nördlich der Schwäbischen Alb liegen, wurden größtenteils Cluster 1 zugeordnet. Zahlreiche Messstellen der Gebiete mit sehr geringer Grundwasserschutzfunktion – so beispielsweise die Lockergesteine des Rheintals und die Schwäbische Alb – aber auch die meisten Messstellen der Grundwassergeringleiter des Schwarzwaldes und das Alpenvorland südlich der Schwäbischen Alb wurden Cluster 2 zugeordnet. Für die 21 weiträumig auseinander liegenden Messstellen des Clusters 3 mit sehr hohen Sulfatkonzentrationen wäre die Ursache dieser hohen Konzentrationen zu prüfen. Nahe liegend wären geogene oder durch die Landnutzung bedingte Beeinflussungen. Die Messstellen des Clusters 4 mit sehr hohen Atrazin- und Desethylatrazin-Konzentrationen liegen ebenfalls über die gesamte Landesfläche verteilt, eine starke anthropogene Beeinflussung – möglicherweise in Kombination mit geringer Schutzfunktion des Grundwassers gegenüber derartigen Beeinflussungen – kann vermutet werden.

Dem Dendrogramm ist zu entnehmen, dass für die 8-Clusterlösung zwei weitere sehr kleine Cluster aus den Clustern 2 und 4 der 6-Clusterlösung ausgelöst werden. Die Bildung dieser Gruppen geht auf die sehr hohe Diuron-Konzentration (Cluster 6 der 8er-Lösung, entstanden aus Cluster 2 der 6er-Lösung) bzw. die sehr hohen Bromacil- und Hexazinon-Konzentrationen zurück (Cluster 8 der 8er-Lösung, gebildet aus Cluster 4 der 6er-Lösung). Durch Bildung des Clusters 6 in der 8er-Lösung sinkt der F-Wert in Cluster 2 erwartungsgemäß stark ab. Die F-Werte in Cluster 1 entsprechen durch die gleiche Besetzung denen des Clusters 1 der 6er-Lösung, alle übrigen F-Werte sollten aufgrund der Belegung der Cluster mit zu wenigen Messstellen nicht interpretiert werden.

Die Fehlerquadratsumme sinkt im Fall der 8-Clusterlösung gegenüber der 6-Clusterlösung aufgrund der letzten durchgeführten Fusionierungsschritte von 12,5 auf den Wert 11,5 der normierten Skala.

Die kartographisch dargestellte 8-Clusterlösung (Karte A 2 in Anhang VI) ist derjenigen der 6-Clusterlösung sehr ähnlich. Die neu gebildeten Cluster beinhalten aufgrund ihrer geringen Besetzung lediglich Messstellen mit besonders auffälligen und in der Erhebungsgesamtheit selten vorkommenden Eigenschaften.

5.3.2.2. Dreistufige Clusterung

Schritt 1

Der erste Schritt der dreistufigen Clusterung – die Single-Linkage-Clusterung – führt bei Anwendung des gleichen Kriteriums zur Festlegung einer geeigneten Clusterzahl (Erreichen von 50% der Fehlerquadratsumme, entsprechend 12,5 auf der auf 25 normierten Skala) wie bei der direkten Ward-Clusterung zu einer 6-Clusterlösung.

Da das Single-Linkage-Verfahren aber nicht zur Feststellung einer geeigneten Gruppenanzahl oder Bildung von homogenen Clustern verwendet werden soll, sondern zur Erkennung von Ausreißern, ist eine genauere Betrachtung der in den letzten Schritten fusionierten Messstellen sinnvoll. Es zeigt sich, dass diese Messstellen auch in der direkten Ward-Clusterung meist als kleine Gruppen – oft nur mit einer einzelnen Messstelle besetzt – erkennbar sind. In der direkten Ward-Clusterung werden diese Messstellen allerdings mit anderen Gruppen fusioniert, so dass sie im Endergebnis nicht identifizierbar sind. Es ist daher sinnvoll, die mittels Single-Linkage-Clusterung erkannten Ausreißer aus dem Datensatz zu entfernen und im Anschluss eine erneute Ward-Clusterung vorzunehmen (2. Schritt). Im vorliegenden Fall wurden 31 Messstellen isoliert, die aus dem Datensatz entfernt wurden; im Dendrogramm der Single-Linkage-Clusterung sind dies die zuletzt fusionierten Messstellen. Die aus dem Datensatz entfernten Messstellen wurden durch das eingesetzte Verfahren aufgrund ihrer besonderen Merkmalsausprägungen ausgeschlossen. Für Fragen des Grundwasserschutzes sollte diesen Messstellen im Grundwassermonitoring eine besondere Aufmerksamkeit zukommen und eine besondere Betrachtung und Interpretation der Ursachen für die besonderen Eigenschaften erfolgen.

Schritt 2

(Karten A 3 und A 4 in Anhang VI; Diagramme A 2 in Anhang IV)

Das Dendrogramm einer Ward-Clusterung nach der Ausreißereliminierung zeigt sinnvolle Clusterungen bei normierten Fehlerquadratsummenwerten von 12,5 beziehungsweise 10, die zu einer 4- beziehungsweise 8-Clusterlösung führen. Die Gruppengrößen variieren zwischen beiden Lösungen deutlich. Es werden bei der 4er-Lösung wie bei der direkten Ward-Clusterung zwei sehr große Cluster gebildet, von denen lediglich der Cluster 3 aufgrund der sehr hohen Ca-, Mg- und SO₄-Werte und der Cluster 4 aufgrund der erhöhten Atrazin-, Desethylatrazin- und LHKW-Konzentrationen getrennt werden.

Von den 15 Messstellen des Clusters 3 finden sich entgegen nahe liegender Vermutungen lediglich drei in Regionen, in denen die geogene Grundwasserbeschaffenheit vom LGRB mit mittlerem bis hohem Lösungsanteil charakterisiert sind. Die in Cluster 4 zusammengefassten Messstellen finden sich allerdings – wie die überdurchschnittlich hohen Konzentrationen vermuten lassen – ausnahmslos in Flächen mit landwirtschaftlicher Nutzung und in Siedlungsbereichen. Die Messstellen des Clusters 2 sind zum überwiegenden Teil nicht in Gebieten mit geringem geogenen Lösungsanteil wie beispielsweise dem Schwarzwald lokalisiert, finden sich wohl aber auf der Schwäbischen Alb und im Alpenvorland. Geringere LHKW- und Tetrachlorethen-Konzentrationen im Grundwasser heben die Cluster 2-Messstellen von denen des Clusters 1 ab und lassen eine andere Landnutzung oder aber ein besseres Sorptions- und Transformationsvermögen der deckenden Böden vermuten. Diese Vermutungen lassen sich teilweise durch die Informationen zur Grundwasserschutzfunktion und Landnutzung bestätigen.

In der 8er-Lösung werden die Cluster 3 und 4 der 4er-Lösung unverändert als Cluster 6 und 8 beibehalten. Hingegen werden die großen Cluster 1 und 2 der 4er-Lösung mit zusammen 1267 Messstellen weiter unterteilt: aus Cluster 1 entstehen die Cluster 1, 3 und 4 und aus Cluster 2 die Cluster 2, 5 und 6. Cluster 4 lässt sich durch erhöhte SO₄⁻, Cl⁻, Na⁻, Tri- und Tetrachlorethen- und LHKW-Konzentrationen charakterisieren, wohingegen Cluster 1 sich durch erhöhte NO₃-Werte abhebt.

Die aus Cluster 2 der 4er-Lösung hervorgehenden Cluster zeigen in vielen Fällen ähnliche Verhältnisse der Konzentrationen zueinander. Die Werte des Clusters 5 bewegen sich dabei allerdings für die Elemente K, Ca, Na, SO₄ und Cl in einem deut-

lich niedrigeren Skalenbereich. Cluster 7 zeigt für Simazin vergleichsweise hohe Konzentrationen, die Messwerte für Tetra- und Trichlorethen sind hingegen geringer als in den Clustern 5 und 2.

Die weitere Unterteilung des Clusters 2 lässt auch eine weitergehende Interpretation der resultierenden Cluster zu: Die 99 Messstellen des Clusters 5 haben im Mittel stets die geringsten Makroelementkonzentrationen (sehr deutlich für Ca und Mg) und liegen zum größten Teil am oder im Schwarzwald. Die Messstellen des Clusters 7 finden sich vorwiegend in Bereichen, die mit einer geringen Grundwasserschutzfunktion ausgestattet sind. Sie zeichnen sich insbesondere durch die Kombination hoher Simazin- mit niedrigen LHKW-, Tri- und Tetrachlorethenkonzentrationen aus, was eine anthropogene Beeinflussung in Kombination mit hoher LHKW-, Tri- und Tetrachlorethensorption bzw. Abbauaktivität in den Bodenschichten nahe legt. Messstellen des Clusters 2 finden sich überwiegend im Rheintal, an der Schwäbischen Alb und im Alpenvorland. Sie zeigen zumeist recht niedrige Makroelementkonzentrationen, aber recht hohe Trichlorethenwerte.

Die 174 Messstellen des Clusters 4 – charakterisiert durch hohe Lösungskonzentrationen, insbesondere für SO_4 , Cl , Na , aber auch As , Cd sowie Tri- und Tetrachlorethen – finden sich häufig in den holozänen Talniederungen, in denen sich auch die Hauptsiedlungsbereiche erstrecken, aber auch in Bereichen, die eine geringe Schutzfunktion der Grundwasserüberdeckung aufweisen. Hauptunterschied zu den recht ähnlichen Clustern 1 und 3 sind die höheren LHKW-Konzentrationen. An den 64 Cluster 1 zugeordneten Lokalitäten sind Auswirkungen von Denitrifizierung zu unterstellen, da hier mit 97 mg/l die im Mittel höchsten NO_3 -Werte gemessen wurden. Lediglich eine Messstelle findet sich in einer Entfernung größer als 200 m vom nächsten Acker oder Grünlandstandort entfernt.

Die Erhöhung der Gruppenhomogenitäten der Ergebnisse der Ward-Clusterung nach Single-Linkage-Ausreißereliminierung gegenüber einer direkten Ward-Clusterung ohne Ausreißereliminierung kann durch einen Vergleich der F-Werte grundsätzlich bestätigt werden. Insbesondere für die 8er-Lösung zeigen sich lediglich für sehr wenige Parameter größere Heterogenitäten innerhalb des Clusters als in der Erhebungsgesamtheit. In Cluster 4 der 8er-Lösung fällt die Heterogenität für Cd auf, was darauf zurückzuführen ist, dass es für die Clusterung nicht berücksichtigt wurde, da es nur an sehr wenigen Messstellen erhoben wurde.

Die vergleichsweise hohen Heterogenitäten anthropogener Stoffe in Cluster 4 und 8 lassen eine Clusterung, in der nur diese Variablen berücksichtigt werden, sinnvoll erscheinen. In Cluster 4 zeigen allerdings auch nicht eindeutig anthropogen beeinflusste Stoffe (Ca, K, Mg) eine besonders hohe Heterogenität, die zunächst nicht begründet werden kann. In Kapitel 5.3.3 werden die Ergebnisse einer Clusterung auf Grundlage der überwiegend anthropogen beeinflussten Parameter diskutiert.

Schritt 3

(Karten A 5 und A 6 in Anhang VI; Diagramme A 3 in Anhang IV)

Für den vorgeschlagenen dritten Schritt eines Clusteranalyseverfahrens – den Einsatz des Austauschverfahrens, mit dem Ziel einer verbesserten Zuordnung der einzelnen Fälle zu den Clustern einer bereits ermittelten Anzahl von Gruppen – wurde eine K-means-Clusterung durchgeführt. Als Startpartitionen wurden entsprechend der Ergebnisse der vorhergehenden Ward-Clusterung eine 4-Clusterlösung und eine 8-Clusterlösung vorgegeben.

Die deutlichsten Unterschiede der mittleren Merkmalsausprägungen der 4er-Clusterung zeigt Cluster 3 bei den – gegenüber den anderen Gruppen – deutlich erhöhten Parametern Atrazin und Desethylatrazin sowie den erhöhten Bromacil- und Hexazinon-Werten. Cluster 3 ist ebenso wie Cluster 4 – das insbesondere durch stark erhöhte SO_4^- , Mg-, Ca- und Trichlorethen-Werte und hohe Cl- und Na-Werte auffällt – lediglich mit einigen Dutzend Messstellen belegt. Eine einheitliche räumliche Zuordnung ist nicht feststellbar, viele Messstellen liegen jedoch in Siedlungsgebieten oder auf Flächen landwirtschaftlicher Nutzung. Die 137 Messstellen aus Cluster 2 zeichnen sich im Mittel durch die im Vergleich niedrigsten Na-, K-, Ca-, Mg- NO_3^- , SO_4^- und Cl-Konzentrationen aus. Bereits auf einer groben Übersichtskarte lassen sich die Messstellen aus Cluster 2 Naturräumen mit geogen bedingt geringer Nährstoffausstattung zuordnen. Das am stärksten besetzte Cluster 1 (1.346 Messstellen) zeigt für diese Elemente und Verbindungen meist dem Cluster 3 ähnliche Konzentrationsniveaus, weist aber demgegenüber für den Herbizid-Wirkstoff Trichlorethen höhere Werte auf. Cluster 1 lässt sich als breite Basis der „normalen“ Grundwassereigenschaften bezeichnen, die Messstellen sind entsprechend über nahezu die ganze Landesfläche verteilt und nicht einer einheitlichen Struktur folgend den verwendeten räumlichen Bezugssystemen zuzuordnen.

Die 8er-Clusterung bildet zwei mit einer großen Messstellenanzahl besetzte Gruppen: Cluster 2 mit 340 und Cluster 6 mit 984 Messstellen. Cluster 2 ist durch im Mittel vergleichsweise hohe SO_4^- , Ca-, Na-, Mg- und Trichlorethen-Werte sowie die höchsten Cl- und NO_3^- -Konzentrationen charakterisiert. 102 der in diesem Cluster zusammengefassten Messstellen liegen auf ackerbaulich genutzten Flächen und 166 in Siedlungen; bemerkenswert ist jedoch, dass 337 der Messstellen sich in weniger als 1000 m Entfernung zu diesen Siedlungen befinden. Insbesondere die hohen NO_3^- - und Trichlorethen-Konzentrationen lassen dieses Ergebnis plausibel erscheinen. 173 Messstellen des Clusters sind zudem den Bereichen der geogen mittleren Lösungsrückstände und 84 den holozänen Bereichen zugeordnet.

Die Messstellen des Clusters 6 weisen im Vergleich der Cluster untereinander für die zuvor genannten Parameter Konzentrationen im mittleren Wertebereich auf, bei allerdings vergleichsweise niedrigen LHKW-Werten, die lediglich von den Messstellen der Cluster 3 und 4 unterschritten werden. Lediglich 304 Messstellen des Clusters 6 liegen auf Ackerflächen, was in der vergleichsweise geringen Belastung durch Pflanzenschutzsubstanzen durchaus erkennbar ist. Der große Anteil von 553 Messstellen in Gebieten, die als Bereiche mit sehr geringer Grundwasserschutzfunktion klassifiziert sind, ließe allerdings eine höhere Belastung mit einigen Substanzen erwarten.

Die übrigen Cluster lassen sich klar durch auffällig hohe bzw. niedrige Konzentrationen einzelner oder mehrerer Parameter identifizieren: Cluster 7 (6 Messstellen, alle in Siedlungs- bzw. Ackerflächen) zeigt die mit Abstand höchsten Na-, Tri- und Tetrachlorethen- und LHKW-Werte, Cluster 8 die im Vergleich höchsten Ca-, Mg- und SO_4^- -Werte. 25 der Cluster 8 zugeordneten Messstellen befinden sich direkt in oder weniger als 1000 m entfernt von Bereichen, die als Gebiete mit mittlerem bis hohem mineralischen Lösungsanteil (Ca-Mg- HCO_3^- -Wässer) klassifiziert sind. Das nur mit 10 Messstellen besetzte Cluster 1 hat die im Mittel höchsten Konzentrationen der Stoffe Atrazin, Desethylatrazin, Bromacil und Bentazon. Sieben der Messstellen dieses Clusters sind für Gebiete mit sehr geringer Grundwasserschutzfunktion klassifiziert, alle übrigen finden sich in Distanzen von weniger als 1.000 m zu diesen Flächen.

Die 65 Messstellen des Clusters 4 haben die höchsten Diuron-, aber auch die niedrigsten Tri- und Tetrachlorethen- (sehr deutlich), Atrazin-, Simazin- und Desethyl-

latrazin-Werte. 25 Messstellen des Clusters liegen in Gebieten mit sehr geringer Grundwasserschutzfunktion, 27 in Grundwassergeringleitern. Die zunächst überraschend deutlichen Unterschiede der Konzentrationen verschiedener Pflanzenschutzmittelsubstanzen lassen sich möglicherweise durch die geringe Distanz (<1.000 m) von 60 Messstellen zu Siedlungsbereichen erklären: Diuron ist ein Wirkstoff, der häufig in Präparaten zu finden ist, die speziell für Gärten – die in der Landnutzungsklassifikation als Siedlungsbereiche erfasst sind – entwickelt wurden.

Cluster 5 zeigt im Vergleich mit die niedrigsten Konzentrationen der Stoffe Na, K, Ca, Mg, NO₃, SO₄ und Cl und ist mit 127 Messstellen besetzt, die vorwiegend dem Naturraum Schwarzwald – und damit den Bereichen eines geringen geogenen Lösungsrückstandes – zuzuordnen sind. Cluster 3 zeigt die niedrigsten LHKW-Konzentrationen und recht niedrige Konzentrationen für Tri- und Tetrachlorethen, allerdings die höchsten Simazin-Konzentrationen. Fünf der acht Messstellen des Clusters 3 liegen weniger als 1.000 m von Ackerflächen entfernt, vier direkt in Siedlungsbereichen und fünf in Gebieten mit geringer oder sehr geringer Grundwasserschutzfunktion. Starker Einsatz bestimmter Pflanzenschutzpräparate für möglicherweise spezielle, an diesen Standorten vorherrschende Umweltbedingungen oder besondere Sorptionseigenschaften der Böden, die nicht durch die stark generalisierten und groben Klassen der Grundwasserschutzfunktion abgebildet werden, dürften Ursache für diese Gruppierung der untereinander ähnlichen Messstellen sein.

Die Ergebnisse des K-means-Verfahrens zeigen recht eindeutige Charakteristika der gebildeten Cluster, die wiederum grobe Rückschlüsse auf spezielle Verhältnisse – deutliche anthropogene Beeinflussung durch mehrere Substanzen insbesondere für Cluster 1, 2 und 6; starke anthropogene Beeinflussung durch Simazin, Diuron oder LHKW (Cluster 3, 4 bzw. 7); geringe oder hohe geogene Grundwasserlösungskonzentration in Cluster 5 bzw. 8 – an den Standorten zulassen. Da Messstellengruppierungen in besonderem Maße auf Grundlage der anthropogen beeinflussten Merkmale der Grundwässer von Interesse sind, wurden gleichfalls Clusterungen durchgeführt, in denen in den Rechenprozess ausschließlich diese Parameter eingingen.

5.3.3. Untersuchung der anthropogen beeinflussten Messstellen

Da nicht immer eine Messstellengruppierung aufgrund aller zur Verfügung stehenden Variablen sinnvoll oder notwendig ist, wurde exemplarisch eine Clusterung durchgeführt, für die lediglich Variablen eindeutig anthropogenen Ursprungs verrechnet wurden. In diesem Fall wurden als solche alle auf Pflanzenbehandlungsmittel zurückgehenden Variablen (Trichlorethen, Tetrachlorethen, Atrazin, Simazin, LHKW, Diuron, Desethylatrazin, Isoproturon, Bromacil, Hexazinon) und für die Daten vorliegen, in die Berechnung einbezogen. Zwar sind auch einige Schwermetalle sowie NO_3 und SO_4 meist stark anthropogen beeinflusst, jedoch kann für diese Variablen eine natürliche Konzentration und damit auch der anthropogen verursachte Anteil im Arbeitsmaßstab nicht eindeutig festgelegt werden.

Die Verbesserung der Gruppenhomogenitäten durch Vorschalten einer Single-Linkage-Clusterung konnte bereits im Zuge der Clusterung anhand aller Variablen nachgewiesen werden. Daher wurde hier auf eine direkte Ward-Clusterung verzichtet und lediglich ein dreistufiges Clusterverfahren, wie oben beschrieben, angewendet. Wiederum wurde die Variable Bentazon ausgeschlossen, da anderenfalls eine sehr große Anzahl von Messstellen nicht hätte verarbeitet werden können. Da im Folgenden nur die Variablen anthropogenen Ursprungs integriert wurden, mussten lediglich 120 Messstellen aus dem Verfahren ausgeschlossen werden, für die Datenlücken bestanden. In den im Anhang III befindlichen Tabellen der statistischen Basisparameter wurden diese dennoch aufgeführt, um auch für sie – anhand der auf Grundlage der anthropogenen Parameter gebildeten Cluster – Vergleiche zu ermöglichen.

Schritt 1

Durch eine Single-Linkage-Clusterung wurden sechs Cluster ermittelt, wobei in den letzten Schritten die Fusion von 15 Messstellen erfolgte, die als Ausreißer identifiziert und anschließend eliminiert wurden. Im folgenden 2. Schritt wurden damit lediglich 1.479 Messstellen verarbeitet.

Schritt 2

(Karten A 7 und A 8 in Anhang VI; Diagramme B 1 in Anhang IV)

Die Ward-Clusterung führte zu zwei geeigneten Gruppierungen: einer 5- und einer 7-Clusterlösung. Diese wurden wiederum anhand des Kriteriums der – auf einer Skala von 0 bis 25 normierten – Fehlerquadratsumme ermittelt.

Die Cluster 3 und 4 der 5-Clusterlösung, denen zusammen 728 Messstellen zugeordnet wurden, zeichnen sich durch eine sehr hohe Heterogenität bei fast allen in die Berechnung eingehenden Parametern aus. Eine Ausnahme bildet lediglich Trichlorethen, das in Cluster 4 eine deutlich höhere Varianz aufweist als in der Erhebungsgesamtheit. Cluster 3 ist hingegen als vollkommen homogen zu bezeichnen, da für alle Variablen geringere Varianzen berechnet wurden als in der Erhebungsgesamtheit. Cluster 2 ist sehr heterogen, lediglich für Atrazin und Simazin konnte die Varianz gegenüber der Erhebungsgesamtheit gesenkt werden. Die Cluster 1 und 5 zeigen lediglich für einige Variablen eine höhere Homogenität als die Gesamtheit der Messstellen. Insbesondere ist allerdings für Atrazin und Desethylatrazin in Cluster 5 eine Überrepräsentation dieser Variablen anhand der t-Werte feststellbar, die auch eine ausgesprochen heterogene Werteverteilung aufweisen; dies gilt auch für Bromacil und Hexazinon, die in Cluster 2 die größten Inhomogenitäten aufweisen.

Die 710 Messstellen des Clusters 1 zeigen im Mittel für alle anthropogenen Stoffe Konzentrationen, die im Vergleich zu den anderen Clustern in mittleren Bereichen liegen. Besonders häufiges Auftreten in einzelnen Klassen der verwendeten räumlichen Bezugssysteme sind nicht festzustellen. Cluster 2 zeichnet sich durch die im Mittel höchsten Trichlorethen-, LHKW-, Hexazinon- und Bromacil-Konzentrationen und im Vergleich zu den anderen Clustern sehr hohen Tetrachlorethen-, Atrazin- und Desethylatrazin-Konzentrationen aus. Von den nur 18 Messstellen dieses Clusters liegen neun in Siedlungsbereichen und vier weitere auf Ackerflächen. Allerdings befinden sich elf der Messstellen weniger als 1.000 m von Ackerstandorten und alle 18 weniger als 1.000 m von Siedlungsflächen entfernt. Dieser Aspekt lässt die Zuordnung von Messstellen dieses Clusters in Bereiche mit sehr geringer (drei Messstellen) und geringer (zwei Messstellen) Grundwasserschutzfunktion der Bodendeckschichten vergleichsweise unbedeutend erscheinen.

Die im Mittel geringsten Konzentrationen für LHKW, Tri- und Tetrachlorethen charakterisieren die 438 Messstellen von Cluster 3. Gleichfalls sind fast alle anderen anthropogenen Parameter an diesen Messstellen geringer konzentriert als in den übrigen Clustern. Der größte Teil der Cluster 3-Messstellen (411) liegt weniger als 1.000 m von Waldflächen entfernt, die geringere Belastung mit Pflanzenschutzmitteln zeigt sich hier offensichtlich deutlich. Die ebenfalls gering mit anthropogenen Stoffen belasteten Grundwässer an den 290 Messstellen des Clusters 4 heben sich von de-

nen des Clusters 3 durch höhere LHKW- und Trichlorethen-Konzentrationen ab. Der größte Teil dieser Messstellen befindet sich wiederum näher als 1.000 m an Waldflächen. Wie die recht einseitige – aber beachtliche Belastung – verursacht wird, wäre zu prüfen. Denkbar sind einerseits im Vergleich zu Cluster 3 andere Sorptions-eigenschaften der Böden (eine gehäufte Zugehörigkeit zu Gebieten der Grundwasserschutzfunktionsklassen konnte nicht festgestellt werden), andere Grundwasserströmungsverhältnisse (nicht berücksichtigt) oder der forstwirtschaftliche Einsatz von Pflanzenschutzmitteln.

Cluster 5 zeichnet sich durch vergleichsweise hohe Pflanzenschutzmittel-Konzentrationen aus, die acht Messstellen haben die im Mittel höchsten Atrazin-, Desethylatrazin- und Bentazon-Konzentrationen. Keine dieser Messstellen liegt direkt in einer Siedlungsfläche, alle jedoch weniger als 1.000 m entfernt.

In der 7-Clusterlösung wurde lediglich Cluster 1 der 5-Clusterlösung unterteilt, die übrigen Cluster blieben in ihrer Zusammensetzung und damit auch in ihrer Homo-/Heterogenität erhalten. Cluster 1 wurde in die Cluster 1, 2 und 6 unterteilt. Die Cluster 2 und 6 zeichnen sich durch eine relativ große Homogenität aus, lediglich die Variablen Diuron (Cluster 2) und Simazin (Cluster 6) sind innerhalb der Cluster deutlich heterogener als in der Erhebungsgesamtheit, wobei Simazin in Cluster 6 deutlich überrepräsentiert ist. Cluster 1 zeigt für Atrazin, Simazin, Desethylatrazin, Tetrachlorethen und die LHKW eine größere Inhomogenität als in der Erhebungsgesamtheit, insbesondere gilt dies für die beiden letztgenannten Variablen. Lediglich Atrazin und Desethylatrazin sind nennenswert überrepräsentiert.

Das Cluster 6 (sieben Messstellen) ist insbesondere durch sehr niedrige LHKW-Tri- und Tetrachlorethen-Konzentrationen sowie die im Vergleich höchsten Simazin-Werte charakterisiert. Lediglich zwei dieser Messstellen liegen direkt in Siedlungsgebieten, sechs allerdings in Entfernungen von weniger als 1.000 m. Die verschiedenen Konzentrationen der Cluster 1 und 2 – vorwiegend durch die höheren mittleren Tetrachlorethen-, Atrazin- und Diuron-Werte des Clusters 1 gekennzeichnet – sind mit den verwendeten Daten nicht durch die Lage im Bezug auf die unterschiedliche Landnutzung oder Naturraumeigenschaften nachzuvollziehen.

Schritt 3

(Karten A 9 und A 10 in Anhang VI; Diagramme B 2 in Anhang IV)

Der Einsatz des K-means-Verfahrens mit dem von der Ward-Clusterung abweichenden Ziel, homogenere Gruppierungen zu erhalten, erfolgte für die 5- und die 7-Clusterlösung. Als Ergebnis beider Clusterungen wurden jeweils eine sehr große Gruppe und eine der Startpartition entsprechende Anzahl kleiner Gruppen errechnet. Für die jeweils große Gruppe ist eine vollkommene Homogenität festzustellen, d.h., für keine der verrechneten Variablen liegt innerhalb der Gruppe eine größere Varianz vor als in der Erhebungsgesamtheit. Für die kleineren Gruppen sind für einzelne Variablen im Vergleich mit der Erhebungsgesamtheit sehr große Heterogenitäten feststellbar, diese sind auch aufgrund ihrer Überrepräsentanz (t-Werte) als Ursachen für die jeweilige Gruppenbildung anzusehen.

Das Cluster 5 ist mit 1.552 Messstellen die mit großem Abstand am stärksten besetzte Gruppe. Die Messstellen dieses Clusters sind über alle räumlichen Bezugssysteme ohne auffällige Häufungen verteilt; sie weisen die im Mittel höchsten Trichloethen-Konzentrationen auf. Die übrigen Cluster sind deutlich schwächer besetzt, zeigen aber immer für einen oder zwei Stoffe besonders hohe mittlere Konzentrationen: Die neun Messstellen des Clusters 1 haben die höchsten Simazin- und sehr hohe Atrazin- und Tetrachlorethen-Werte. Cluster 2 (12 Messstellen) zeigt die höchsten Tetrachlorethen-, Atrazin- und Desethylatrazin-Konzentrationen. Cluster 3 (4 Messstellen) hat die mit Abstand höchsten Hexazinon-Werte und die im Vergleich mit den anderen Clustern geringsten LHKW-, Tetrachlorethen-, Atrazin- und Simazin-Konzentrationen. Die fünf Messstellen von Cluster 4 sind durch die besonders hohen Isoproturon-Werte und ebenfalls recht geringe LHKW-, Simazin-, Atrazin- und Tetrachlorethen-Werte charakterisiert.

29 der 30 Messstellen der gering besetzten Cluster 1 bis 5 lassen sich räumlich vorwiegend als nahe (< 1.000 m) an Siedlungsflächen bezeichnen, eine Messstelle befindet sich innerhalb einer Siedlungsfläche. Nur zwölf der Messstellen hingegen befinden sich in gleicher Distanz oder direkt auf ackerbaulich genutzten Flächen. Es kann der Rückschluss gezogen werden, dass auf den entsprechenden Siedlungsflächen eine erhöhte Freisetzung der jeweiligen Substanzen erfolgt, deren Ursache mit den vorliegenden Daten nicht geklärt werden kann. Eine besonders geringe, relativ kleinräumige Sorptionsfähigkeit der Böden kann als Ursache zwar nicht ausge-

geschlossen werden, erscheint aber aufgrund der besonders deutlichen Erhöhungen der Konzentrationen meist nur einzelner Parameter unwahrscheinlich.

Für die 7er- zeigt sich ein der 5er-Lösung sehr ähnliches Resultat: Ein sehr stark besetztes Cluster beinhaltet einen sehr großen Teil aller gruppierten Messstellen, die übrigen Messstellen sind in kleine Cluster mit besonders markanten Eigenschaften zusammengefasst. Die Clusterung auf Grundlage der anthropogenen Merkmale hat für diese Anzahl der Cluster auch Auswirkungen auf die mittleren Konzentrationen einiger natürlich vorkommender Elemente: Cluster 6 zeigt sehr hohe Ca-, Mg- und SO₄-Werte; Cluster 1 die niedrigsten Mg- und NO₃-Konzentrationen. Wechselwirkungen mit hohen LHKW- und Trichlorethen-Werte in Cluster 6 und den hohen Isoproturon-Konzentrationen von Cluster 1 wären für weiterführende Untersuchungen zu prüfen. Von den insgesamt 50 Messstellen der Cluster 1, 2, 3, 4, 6 und 7 liegen 48 weniger als 1.000 m von Siedlungsflächen entfernt – ähnlich der Messstellen der gering besetzten Cluster einer 5er-Lösung. Die Messstellen des Clusters 5 häufen sich nicht hinsichtlich der einzelnen Klassen der verwendeten räumlichen Bezugssysteme, sie sind nahezu gleichmäßig in allen Flächen der Grundwasser-schutzfunktion, der Grundwasserüberdeckung, den Einheiten der geogenen Grundwasserbeschaffenheit und der Landnutzungsklassen vertreten.

Die Gruppenzuordnung nach dem dritten Schritt des gesamten Clusterverfahrens auf Grundlage der anthropogenen Stoffe unterscheidet sich deutlich von derjenigen nach dem zweiten Bearbeitungsschritt. Für einen Großteil der Messstellen wurde eine sehr homogene Gruppenzuordnung gefunden, die gebildeten Kleingruppen wurden aufgrund einiger Variablen gebildet, die anhand der t-Werte deutlich hervortreten. Es zeigt sich, dass ein dritter Schritt – die Neuordnung der Fälle mittels Austauschverfahren zu einer im Vorfeld ermittelten Clusteranzahl – ein äußerst sinnvoller Prozess ist, um vermutete ähnliche Merkmalsausprägungen mehrerer Messstellen, hier der anthropogenen Beeinflussung, zu ermitteln. Das Resultat könnte als Basis für weitergehende Untersuchungen mit einer detaillierteren Informationsgrundlage dienen, um die besonderen Belastungscharakteristika einiger Messstellen detaillierter zu erfassen und zu begründen. Die Resultate zeigen ebenfalls, dass mittels eines dreistufigen Clusterverfahrens vermutete Gruppen ähnlicher Messstellen anhand ihrer Merkmalsausprägungen gefunden und – sofern diese Informationen vorlie-

gen – räumlich zugeordnet werden können, was entsprechend der Detailinformationen und Qualität weiterer Informationen eine Interpretation der Ergebnisse zulässt.

6. Ergebnisdiskussion und Zusammenführung

6.1. Fazit der exemplarischen Problemlösung

6.1.1. Fazit Flächenschätzungen

Aus aufbereiteten Daten der Grundwasserbeschaffenheit mehrerer Landesmessnetze wurden für die gesamte Landesfläche und die Fläche eines ausgewählten Einzugsgebiets (Enz) der qualitative Zustand für verschiedene physikalische und chemische Parameter mittels geostatistischer Verfahren und der IDW-Interpolation geschätzt. Die eingesetzten Verfahren führen in weiten Teilen zu ähnlichen Ergebnissen. Verfahrensbedingt ermöglicht die Geostatistik eine qualitative Beurteilung der Schätzergebnisse über Testparameter. Aufgrund der Charakteristik der räumlichen Autokorrelation ist eine Kriging-Schätzung nach der Strukturanalyse nur für einige Parameter zulässig. Die Aussagefähigkeit wird kaum erhöht, wenn lediglich die Daten der näher zu untersuchenden Teilfläche – beispielsweise eines Einzugsgebiets – für Schätzungen verwendet werden. Die Ergänzung der Datengrundlage aus Landesmessnetzen mit weiteren Daten regionaler Messnetze wäre wünschenswert.

Die errechneten prozentualen Schätzfehler der Krigingschätzungen erreichen meist Maxima in Bereichen mit geringen Konzentrationen der untersuchten Parameter. Eine der Ursachen ist in den geringen Konzentrationswerten zu sehen – unterstellt man eine flächenhaft gleich bleibende Qualität des Variogrammmodells, wirken sich absolute Schätzfehler in Gebieten relativ niedriger Konzentrationen besonders stark aus. Eine weitere Ursache ist darin zu sehen, dass Flächen geringer Konzentrationen meist mit Gebieten einer geringen Messstellendichte zusammenfallen. Als Beispiel dafür kann der Schwarzwald dienen: Als nähr- und schadstoffarmer Naturraum mit nur vergleichsweise geringer anthropogener Beeinflussung durch größere Siedlungen oder intensive landwirtschaftliche Nutzung (geringe anthropogene Beeinflussung) stellt er ein Gebiet dar, in dem die Überwachung der Grundwasserbeschaffenheit als weniger prioritär angesehen wird (wenige Messstellen).

Die niedrigen Schätzfehler der Krigingschätzungen der pH-Werte für die gesamte Landesfläche und der Atrazin- und Simazin-Konzentrationen für das Einzugsgebiet Enz zeigen deutlich, wie bedeutend die Berücksichtigung der Kriterien für die

räumliche Schätzung schon bei der Anpassung des Variogrammodells ist. In der vorliegenden Untersuchung wurden für die Kriging-Schätzung eines Punktes die Merkmalsausprägungen von maximal 20 und minimal fünf Messpunkten verwendet. In Abhängigkeit von der Messstellendichte findet sich diese als optimal definierte Messstellenzahl bereits innerhalb einer geringen Entfernung vom zu schätzenden Punkt, Messstellen größerer Distanz bleiben unberücksichtigt. Damit wird lediglich die Distanz des angepassten Variogrammodells für die Schätzung verwendet, die dem vom Schätzpunkt weitestentfernten Messpunkt entspricht. Die tatsächliche Qualität der Schätzung ist damit abhängig vom verwendeten Bereich des angepassten Variogrammodells. Die üblicherweise verwendete Kreuzvalidierung gibt im Gegensatz dazu den standardisierten Schätzfehler für die gesamte Reichweite des Variogrammodells an – also auch für die Bereiche, die häufig nicht für die Schätzung verwendet werden. Die Weiterentwicklung von Kriging-Algorithmen, die beispielsweise die mittlere für eine Schätzung verwendete Reichweite des Variogrammodells ausgeben, würde nachträglich eine Optimierung der Variogrammodellanpassung an relevante Distanzbereiche ermöglichen.

Die teils großen Flächen, für die bei Verwendung der angepassten Variogrammodelle keine Schätzungen möglich sind (Atrazin- und Simazin-Schätzungen für das Einzugsgebiet Enz; Kapitel 5.2.1.3), ließen sich vermeiden, indem im GIS für eine Untersuchung definierte Kriterien umgesetzt würden, die eine Mindestreichweite eines Variogrammodells ermitteln. Dabei musste für die in dieser Untersuchung definierten Kriterien lediglich der maximal notwendige Suchradius ermittelt werden, mit dem es möglich ist, an allen zu schätzenden Punkten wenigstens fünf Messstellen für die Schätzung zur Verfügung zu haben.

In vielen Fällen steigen die Schätzfehler an den Grenzen der Untersuchungsflächen an. In der vorliegenden Untersuchung wurden Messstellen, die außerhalb des betrachteten Raumes lagen, nicht berücksichtigt, um eine Beeinflussung der Schätzwerte durch Nachbarräume auszuschließen. Gerade für Gebiete mit vergleichsweise geringer Informationsdichte wäre dies zu überdenken. Zwar würden die Schätzwerte bei Zuhilfenahme externer Daten durch diese beeinflusst, jedoch dürfte diese Beeinflussung in der Praxis unter Umständen völlig fehlenden Schätzwerten vorzuziehen sein. Der Einbezug externer Daten dürfte insbesondere beim Überschreiten verwaltungstechnischer Grenzen einen juristischen Regelungsbedarf her-

vorrufen. In diesem Fall wäre für die Umsetzung der WRRL eine Adaption an europarechtliche Regelungen vorzusehen.

6.1.2. Fazit Messstellengruppierungen

Drei verschiedene Clusterverfahren wurden für unterschiedliche Teilziele eingesetzt: Das Single-Linkage-Verfahren wurde verwendet, um Ausreißer aufzuspüren, die in multiplen Clusterverfahren die Ergebnisse negativ beeinflussen würden. Das Ward-Verfahren ist zum Einsatz gekommen, um eine optimale Clusteranzahl für die Grundgesamtheit zu ermitteln (als Trennschärfe-Kriterium dient die Fehlerquadratsumme). Um die Gruppenhomogenitäten zu erhöhen, wurde das Austauschverfahren K-means verwendet, zur Optimierung der Ergebnisse wurden die drei Verfahren „in Reihe geschaltet“. Zur Überprüfung, ob es auf diesem Weg möglich ist, besondere Charakteristika der Grundgesamtheit zu ermitteln, wurde der gesamte Clustervorgang jeweils einmal auf Grundlage aller zur Verfügung stehenden Parameter und einmal auf Grundlage der Parameter, die eindeutig anthropogenen Ursprungs sind, durchgeführt.

Das Single-Linkage-Verfahren erkennt sowohl auf Grundlage aller Parameter, als auch auf Grundlage der anthropogenen chemischen Verbindungen sehr gut Messstellen, an denen über den Untersuchungszeitraum mehrere extreme Grundwassereigenschaften auftreten. Der Vergleich der kaum sinnvoll interpretierbaren direkten Ward-Clusterung mit derjenigen nach Ausschluss der durch Single-Linkage-Verfahren ermittelten Ausreißer für die Clusterungen auf Grundlage aller Parameter macht dies deutlich. Zwar sind grundlegende Eigenschaften der gebildeten Cluster charakterisierbar, aber bereits bei einer 8-Clusterlösung werden vier Cluster gebildet, die lediglich mit einer oder zwei Messstellen belegt sind – die Messstellen, die durch eine vorgeschaltete Single-Linkage-Clusterung erkannt und entfernt werden können.

Die Ward-Clusterungen liefern entsprechend den Single-Linkage-Clusterungen zunächst mögliche Clusteranzahlen, von denen die geeignetsten anhand der Fehlerquadratsumme, aber auch aufgrund ihrer Lage in den verschiedenen räumlichen Bezugssystemen für die sich anschließende K-means-Clusterung ausgewählt werden. Die Ergebnisse der Ward-Clusterungen – sowohl für die Clusterrungen auf Grundlage aller Parameter, als auch auf Grundlage nur der anthropogenen Parame-

ter – zeigen aber auch bereits gut interpretierbare Charakteristika der gebildeten Gruppen, die sich durch die ihre Lage in klassifizierten Gebieten unterschiedlicher räumlicher Bezugssysteme bestätigen lassen. Für exakte Interpretationen reicht allerdings die Qualität (räumliche Auflösung, grobe Klassifikation) der verwendeten Informationen über die räumlichen Bezugssysteme nicht aus. Insbesondere die 8-Clusterlösungen – sowohl der Clusterung auf Grundlage aller Parameter, als auch nur der anthropogenen Parameter – geben gute Anhaltspunkte für besondere Eigenschaften der gebildeten Gruppen, die sich durch ihre besonderen Lage-Charakteristika unterstreichen lassen. Durch den Einsatz multipler Korrelationen wären die Ähnlichkeiten der Messstellengruppierung anhand der Merkmalsausprägungen (Clusterverfahren) zum einen und der Messstellengruppierung durch die Lage in Klassen der räumlichen Bezugssysteme andererseits qualitativ exakt charakterisierbar. Zu diesem Zweck müssten GIS-gekoppelte Datenbanken angelegt werden, die neben den Lageparametern der Messstellen die Ausprägungen aller erfassten Merkmale in höchstmöglicher Auflösung beinhalten, die über GIS-integrierte statistische Abfragen ermöglichen – die Kombination mit gängigen GIS-Funktionen, beispielsweise Pufferfunktionen, wäre in diesem Fall wünschenswert.

Die im Allgemeinen höheren Gruppen-Homogenitäten der K-means-Clusterung führen zu einem wesentlichen Unterschied in den Ergebnissen: Werden für die Clusterung auf Grundlage aller Parameter mehrere stark besetzte Gruppen bei der 7-Clusterlösung gebildet, so ist für die Clusterung auf Grundlage der anthropogenen Parameter ein Cluster mit 1.533 Messstellen sehr dominant. Die kleineren Cluster dieser Gruppierung sind allerdings sehr gut aufgrund ihrer Eigenschaften charakterisierbar und räumlich recht exakt in bestimmte Bezugsklassen einzuordnen. Klar erkennbar ist die Bedeutung meist eines Parameters, auf dessen Grundlage diese Gruppe gebildet wurde (hohe t-Werte).

Nach dem letzten Schritt eines dreistufigen Clusterverfahrens sind die gebildeten Gruppen aufgrund der Merkmalsausprägungen der in ihnen zusammengefassten Messstellen am besten interpretierbar und räumlichen Klassen zuzuordnen, für die Charakteristika entsprechend der Gruppierungen erwartet werden können. Ähnlichkeiten aufgrund vermuteter gemeinsamer Eigenschaften, etwa besonderer Belastungen durch Verbindungen anthropogenen Ursprungs, können – sofern vorhanden – erkannt und interpretiert werden. Die Zuordnung und Interpretation dieser Gruppierung

rung in räumliche Klassen ist stark abhängig von den Kriterien der Bildung räumlicher Bezugssysteme und der räumlichen Auflösung.

6.2. Kritische Betrachtung der WRRL-Vorgaben

Die WRRL regelt, seitdem sie rechtskräftig gültig wurde, als Quelle europäischen Rechts den menschlichen Umgang mit der Ressource Wasser im Gebiet der Mitgliedsstaaten der Europäischen Union. Die WRRL ist – bedingt durch den Status eines gesetzlichen Regelwerkes – trotz des weitreichenden Einflusses auf viele Dimensionen der Gesellschaft, Wirtschaft und Wissenschaft sehr kompakt und teilweise abstrakt formuliert. Die Umsetzung der Vorgaben bedarf in vielen Bereichen weiterer Ausführungen und Konkretisierungen, um zu den angestrebten Ergebnissen zu führen – dieser Prozess ist in Deutschland begonnen, die Dokumentation und der Vergleich verschiedener Ansätze ist bisher jedoch wenig umfangreich (BMU 2004).

Die von der LAWA (2004) erarbeitete und in stetiger Aktualisierung herausgegebene „Arbeitshilfe zur Umsetzung der EU-Wasserrahmenrichtlinie“ („LAWA-Arbeitshilfe“; verwendeter Stand Ende 2004), als Beitrag von deutscher Seite zum Umgang mit der WRRL zu betrachten, interpretiert die juristischen Vorgaben der WRRL und überträgt sie in praxisnahe Formulierungen und Empfehlungen für die Vollzugsbehörden. Die LAWA-Arbeitshilfe wird in Deutschland als informelles Regelwerk die Umsetzung der WRRL maßgeblich beeinflussen. Unter Berücksichtigung der LAWA-Arbeitshilfe, der WRRL und der durchgeführten Untersuchungen sind folgende Anmerkungen für eine sinnvolle und dauerhafte Umsetzung der WRRL – die in engem Zusammenhang der formulierten Fragestellungen dieser Untersuchung stehen – von Bedeutung und kritisch anzumerken.

6.2.1. Räumliche Bezugssysteme

Die WRRL gibt als räumliche Bezugssysteme Flussgebiete vor, die weiter in Flusseinzugsgebiete zu unterteilen sind. Die bisherigen rechtlichen und verwaltungstechnischen Vorgaben in Deutschland basieren auf politisch-administrativen räumlichen Bezugssystemen. Länderübergreifende Arbeitsgruppen, die formell keine Entscheidungsbefugnisse haben – diese liegen bei den Bundes- und Landesbehörden – er-

möglichten den fachlichen Diskurs unabhängig von Verwaltungsgrenzen, näher an den in Rede stehenden Sachverhalten.

Die im deutschen Rechtssystem vorgegebenen administrativen Zuständigkeiten auf Grundlage von Verwaltungsgrenzen für das Medium Wasser werden durch die WRRL, als dem nationalen deutschen Recht übergeordnetes und bindendes Regelwerk, ersetzt. Die Neugliederung der Zuständigkeiten in den Flusseinzugsgebieten dürfte die Entscheidungs- und Regelungskompetenz der jeweiligen Behörden erhöhen und die Handlungsfähigkeit verbessern.

Die Verwendung von Flusseinzugsgebieten als räumliche Bezugssysteme – nach Empfehlung der LAWA (2004) sollten die Grundwasser- und Oberflächengewässerkörper möglichst identisch sein, um die Berichterstattung zu optimieren – ist damit positiv gegenüber der bisherigen Unterteilung nach politisch-administrativen Grenzen zu sehen. Die exemplarischen Untersuchungen dieser Arbeit bestätigen dies; es zeigt sich gleichfalls, dass bereits einfache statistische Untersuchungen der verfügbaren Daten zur Grundwasserqualität in anderen relevanten räumlichen Bezugssystemen teils besser geeignet wären, der Zielsetzung eines qualitativen Grundwassermonitorings zu entsprechen. Die exakte Definition der anzustrebenden Aussage über die Grundwasserqualität wäre in diesem Zusammenhang von maßgeblicher Bedeutung zur Auswahl des am ehesten geeigneten räumlichen Bezugssystems.

Die Ergebnisse der Bildung von Messstellengruppen auf Grundlage der zugehörigen Merkmalsausprägungen und unter besonderer Berücksichtigung der anthropogenen Beeinflussung (Kapitel 5.3) führt zu einem ähnlichen Ergebnis: Die gebildeten Cluster zeigen nicht nur qualitative Gemeinsamkeiten, sondern finden sich in vielen Fällen gleichfalls in derselben räumlichen Klasse. Die räumliche Klasse ist nur in wenigen Fällen dasselbe Flusseinzugsgebiet, größere Bedeutung kommt den Klassen der Bezugssysteme Landnutzung, Grundwasserschutzfunktion und geogene Grundwasserbeschaffenheit zu.

Die durch die WRRL vorgegebene Nutzung von Flusseinzugsgebieten als räumliche Bezugssysteme und entsprechender administrativer Zuständigkeit kann damit als Legitimierung und Optimierung von bereits existierenden, über administra-

tive Grenzen hinausgehende Aktivitäten der zuständigen Behörden betrachtet werden. Das Ziel eines optimierten Grundwasserqualitätsmonitorings kann damit allein jedoch nicht erreicht werden – ein Ergebnis, das HANSJÜRGENS (2004) stützt. Die Nutzung von speziellen Raumgliederungen oder optimierten Verfahren für ein Grundwasserqualitätsmonitoring wäre sinnvoll und wird durch die WRRL-Vorgaben nicht explizit ausgeschlossen.

6.2.2. Datengrundlage

Es existieren keine einheitlichen europaweiten, aus der WRRL resultierenden Vorgaben, eine bestimmte Datengrundlage und -qualität für die Aktivitäten zur Umsetzung der Forderungen der WRRL zu verwenden. Derartige Vorgaben wären zudem nicht praktikabel, da in den europäischen Staaten meist verschiedene Daten unterschiedlicher Qualität existieren. Die LAWA-Arbeitshilfe gibt Empfehlungen für zu verwendende Datensätze zur Umsetzung der WRRL in Deutschland. Die Empfehlung der Nutzung existierender Daten ist einerseits auf fehlende Kapazitäten für umfangreiche Datenneuerhebungen zurückzuführen, ist aber gleichfalls sinnvoll, da eine Nutzung und Fortschreibung existierender Daten Aussagen zu zeitabhängigen Prozessen erst ermöglicht. In Deutschland stehen umfangreiche Materialien in Landes- und Bundesbehörden für die Umsetzung der WRRL zur Verfügung; diese Materialien wurden in der Regel für die bisherigen Anforderungen an die Charakterisierung und Überwachung von Umweltmedien erarbeitet.

Die Anforderungen der EU an die Berichterstattung sind teilweise sehr hoch. In rechtsverbindlichen Berichten sollten nur Aussagen getroffen werden, die nach dem Stand des Wissens valide und reliabel sind. Damit ist die maximal erreichbare Qualität hinsichtlich der Aussagefähigkeit eines Berichts durch die Qualität und maximale Aussagefähigkeit der für die Berichterstattung zur Verfügung stehenden Materialien definiert. Speziellen aus der WRRL resultierenden Forderungen ist mit existierenden Datenmaterialien und Verfahren bisher nicht optimal nachzukommen, wengleich der Einsatz geeigneter Verfahren in den Vollzugsbehörden erst anläuft (HENNEBERG 2005). Eine Prüfung von Methoden, aus existierenden punktuellen Messwerten überprüfbare qualitative Aussagen über Flächen abzuleiten, führte zu dem Ergebnis, dass existierende, ohne größere Schwierigkeiten verfügbare und einsetzbare Verfahren in vielen Fällen eine Näherung an die gewünschten Ergebnissen ermöglichen. Oft

sind aber anhand der verfügbaren Daten und der Charakteristika der untersuchten Stoffe keine validen flächenhaften Aussagen gemacht werden können, die in Planungsmaßstabsgröße zuverlässig verwendet könnten, oder dass diese nur durch aufwändigere Spezialverfahren getroffen werden könnten.

6.2.3. Kartographische Berichterstattung

Die WRRL schreibt zur Überwachung der Grundwasserbeschaffenheit als Medium zur Berichterstattung unter anderem Karten vor. Konkrete Vorgaben zur Kartenqualität und Methodik der Kartenerstellung werden nicht gemacht. Die LAWA-Arbeitshilfe nähert sich dieser Problematik durch eine differenzierte Betrachtung des so genannten Bearbeitungs-, Erfassungs- und Berichtsmaßstabs. Konkrete Maßstäbe sind auch in der Arbeitshilfe bisher nicht definiert. Zunächst soll die Berichterstattung in einem Maßstab zwischen 1:250.000 und 1:1.000.000 erfolgen, langfristig aber auf 1:250.000 reduziert und vereinheitlicht werden.

Die Darstellung von punktuellen Informationen, wie sie in der WRRL ebenfalls gefordert werden (z.B. Lage von Kläranlagen), ist in diesem Zusammenhang – insbesondere beim Einsatz moderner elektronischer Kartenwerke – unproblematisch. Flächenhafte Aussagen zur Grundwasserbeschaffenheit unterliegen zwei wichtigen Kriterien: Zum einen ist es notwendig, die Flächeninformationen auf Grundlage punktueller Informationen zu generieren beziehungsweise zu schätzen, was verfahrensbedingt nur bis zu einem von der Informationsdichte abhängenden Maßstab möglich ist, und zum anderen die Zuverlässigkeit der Schätzwerte. Der exemplarische Einsatz geostatistischer Verfahren in dieser Untersuchung zeigt, dass aus existierenden Datensätzen eines Landesmessnetzes grundsätzlich Karten mit Auflösungen von 1.000 x 1.000 m Zellengröße generiert werden können, die eine akzeptable Zuverlässigkeit aufweisen. Die Schätzfehler erscheinen zwar insbesondere für Schadstoffe sehr hoch, unter Berücksichtigung existierender Grenzwerte bleiben sie akzeptabel. Die Zuverlässigkeit könnte durch den Einsatz neuerer und für diesen Zweck optimierter Verfahren deutlich erhöht werden. Problematisch ist die verfahrensbedingte Abhängigkeit der tatsächlichen Qualität, des Schätzfehlers, der Karten von den physikochemischen Eigenschaften der darzustellenden Grundwasserbeschaffenheitsparameter, die sich durch statistische Charakteristika abbilden lassen. Bei „ungünstigen“ Eigenschaften kann so allein auf Grundlage der Ausprägungen eines Grundwasser-

merkmals eine Karte mit geringen Schätzfehlern nicht erstellt werden. Andere Grundwassermerkmale lassen hingegen selbst mit den exemplarisch eingesetzten Verfahren die Erstellung von Karten mit geringen Schätzfehlern bei einer Auflösung von Rasterzellen mit einer Kantenlänge von 250 m zu.

Sehr positive Erfahrungen werden von der Weiterentwicklung existierender geostatistischer Verfahren berichtet (pers. Mittlg. GRIMM-STRELE), die für die Flächenschätzung sekundäre Informationen berücksichtigen. Unter Leitung der LfU wurde zu diesem Zweck das Tool „SIMIK+“ als Erweiterung für das weit verbreitete GIS-System „ArcView“ entwickelt. Da die Grundwasserkontamination mit Schadstoffen von zahlreichen Faktoren beeinflusst wird, wäre es wünschenswert, wenn zukünftige Verfahren die Integration multipler Informationen ermöglichen. Die Berücksichtigung generalisierter Informationsschichten – beispielsweise von Bodeneinheiten oder der Landnutzung – enthalten stets Unsicherheiten, die in der Regel nicht quantifiziert werden (können) und stellen damit potenzielle Fehlerquellen resultierender Auswertungen dar.

6.2.4. Zielerreichbarkeit

Mit der WRRL wird das Ziel vorgegeben, einen guten chemischen Zustand für Grundwässer zu erreichen und gegebenenfalls existierende negative Trends umzukehren (Art. 4 Abs. 1 b). Gemäß Artikel 17 der WRRL wird eine „Tochterraichtlinie“ erarbeitet, die genaue Vorgaben darüber macht, mithilfe welcher Verfahren und Qualitätskriterien der gute chemische Zustand und eine Trendumkehr definiert werden. Diesem Sachverhalt kommt eine große Bedeutung für den gesamten europaweiten Implementierungsprozess der WRRL zu, da ohne definierte Beurteilungskriterien jedes eingesetzte Verfahren zur Umsetzung der WRRL ohne anerkanntes Bezugssystem zur Feststellung des Zielerreichungsgrades – also der möglichst optimalen Beurteilung der flächenhaften Grundwasserqualität – lediglich nach allgemein gültigen wissenschaftlichen Kriterien evaluiert werden kann.

Zwar sollte jedem Verfahren, das großflächig und langfristig zur Beurteilung und Bewahrung der menschlichen Umwelt eingesetzt wird, eine wissenschaftliche Richtigkeit unterstellt werden, nicht zwingend kommt jedes wissenschaftlich korrekte Verfahren aber zu Ergebnissen, die juristischen Überprüfungen eindeutig standhalten und für die Verwaltungspraxis tauglich sind. Für die Ausführung der „Tochterraichtli-

nie“ müssen daher die Forderungen nach einer wissenschaftlichen Richtigkeit, einer juristischen Eindeutigkeit und einer praktischen Anwendbarkeit gestellt werden. Verfahren, die diese Forderungen erfüllen, wären geeignete Instrumente mit kontrollierten Qualitätsschwankungen, die eine Beurteilung der tatsächlichen Zielerreichung zuließen.

6.3. Ausblick und Internationale Einordnung

Die WRRL weist im Sinne DASCHKEIT's (2000) verschiedene Dimensionen der Disziplinarität auf: Insgesamt stellt sie ein transdisziplinäres Wirkungsgefüge dar, dessen Kompartimente aus interdisziplinären Teilsystemen zusammengesetzt sind. Dies können beispielsweise wissenschaftliche oder wirtschaftliche Projektverbünde sein. Die interdisziplinären Projektverbünde sind wiederum aus monodisziplinären Teilvorhaben zusammengesetzt, die mit den ihnen eigenen Methoden agieren.

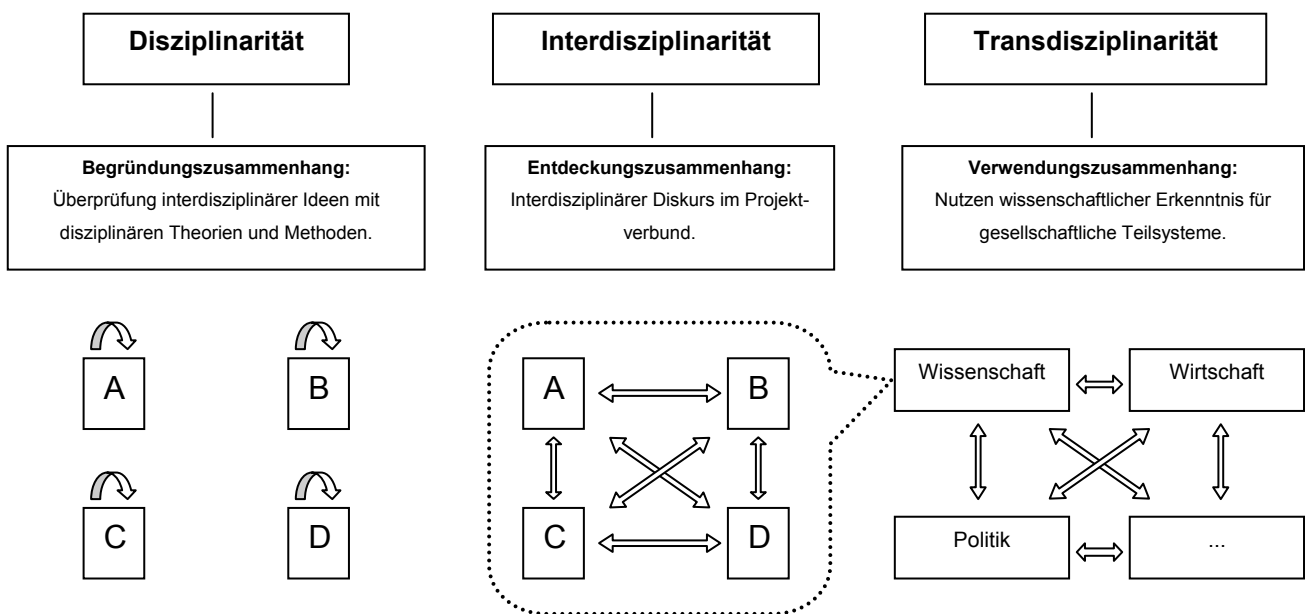


Abbildung 2: Dimensionen und Zusammenhänge der Disziplinarität (nach DASCHKEIT 2000)

Diese Untersuchung ist als Beitrag zu dem inter- und transdisziplinären Prozess zu den aus der WRRL abgeleiteten Fragestellungen (Kapitel 1.2) zu verstehen. Damit wird – übertragen auf das von DASCHKEIT (2000) vorgestellte Schema – neben dem monodisziplinären Ansatz des Systemverständnisses, der Entdeckungszusammenhang als interdisziplinärer Diskurs in einem Projektverbund als auch der Verwen-

dungszusammenhang als Nutzen wissenschaftlicher Erkenntnis für gesellschaftliche Teilsysteme (Transdisziplinarität) erreicht. Sie leistet damit einen Beitrag, abstrakt formulierte, monodisziplinäre – hier juristische – und naturwissenschaftliche – hier hydro-geochemische – Wissensbereiche gerichtete Vorgaben mit geeigneten Methoden zu bearbeiten.

Für die erfolgreiche Umsetzung der WRRL ist die Optimierung und Anpassung der existierenden Verfahren und Messnetze an die Vorgaben der WRRL notwendig. Keines der verwendeten räumlichen Bezugssysteme eignet sich optimal, um die Messungen Grundwasserbeschaffenheit zu optimieren. Raumgliederungen auf Grundlage multivariat-statistischer Verfahren, wie von SCHMIDT (2002) vorgestellt, könnten unter vorheriger Ableitung an die Fragestellungen angepassten Kriterien diesbezüglich einen sehr hilfreichen Beitrag leisten.

Das grundsätzliche Problem der sehr geringen Messstellenanzahl und entsprechend hohem Anspruch an die Repräsentativität jeder einzelnen Messstelle scheint zunächst nur durch eine deutliche Erhöhung der Messstellenanzahl lösbar zu sein. Die Weiterentwicklung existierender geostatistischer Verfahren, die für die Flächenschätzung sekundäre Informationen berücksichtigen, scheint diesbezüglich viel versprechend. Zu diesem Zweck wird unter Leitung der LfU das Tool „SIMIK+“ als Erweiterung für das weit verbreitete GIS-System ArcGIS entwickelt.

Der Gültigkeitsbereich der WRRL erstreckt sich über viele nationalstaatliche Rechtssysteme, in die die Vorgaben und Ziele zu integrieren sind. In vielen Ländern haben dieser Integrationsprozess und die Umsetzung der WRRL begonnen. Ein Austausch in verschiedenen Dimensionen der Implementierung der eingesetzten Strategien, der rechtlichen Umsetzung der eingesetzten Verfahren, der Verwaltungsvorgaben, findet in EU-weiten Arbeitskreisen und -gruppen statt. Deutschland ist durch Arbeitskreise auf verschiedenen Ebenen und den bisher erreichten Ergebnissen gut positioniert, wenngleich vielfach Empfehlungen weiter auszugestalten und zu konkretisieren sind. Langfristig können die Ziele der WRRL als europäisches Regelwerk nur auf europäischer Ebene erreicht werden.

Derzeit lassen sich die europaweiten Aktivitäten zur Umsetzung der WRRL als ein Wettbewerb mehrerer „Teams“, die mit derselben Zielvorgabe arbeiten und sich

im gelegentlichen Austausch befinden, skizzieren. Eine so angelegte europäische Gemeinschaftsarbeit hat große Potenziale – nicht zuletzt durch eigene Interessen der einzelnen „Teams“ und die Konkurrenzsituation bedingt – sehr produktiv zu arbeiten. Es ist allerdings zu befürchten, dass auf politischer Ebene die wissenschaftlichen, technischen und auch juristischen Errungenschaften nur eines der Teams durchzusetzen und zur Vorgabe für alle Mitgliedsstaaten zu machen versuchen. Die Entwicklungsarbeiten der anderen Teams blieben damit in einem experimentellen Stadium.

Vor dem Hintergrund des Globalisierungsprozesses kann die Frage gestellt werden, ob veränderte Rahmenbedingungen nicht langfristig eine effizientere Problemlösung und Zielerreichung fördern würden. Letztlich bindet die Umsetzung der WRRL – wie andere Prozesse – Ressourcen, um eine politische Entscheidung, die durch gesellschaftliche Bedürfnisse getragen wird, umzusetzen. Es handelt sich bei diesem Vorgang zwar um produktive Aktivitäten für die Gesellschaften der EU, die Produktivität dürfte sich primär auf die Schnittflächen zwischen staatswissenschaftlich-juristischen, ökonomischen und naturwissenschaftlichen Bereichen konzentrieren. Aus naturwissenschaftlicher Sicht existieren verschiedene Verfahren, mit deren Hilfe nach einer Optimierung in den jeweiligen Fachdisziplinen definierte Fragestellungen beantwortet werden können.

Der gesamte Implementierungs- und Umsetzungsprozess der WRRL ist damit nicht nur als gesellschaftlicher und politischer Fortschritt zu verstehen, sondern kann gleichfalls als volkswirtschaftlicher Prozess verstanden werden. Auf Grundlage gesellschaftlicher Bedürfnisse wurden Ziele gesetzt, die zunächst in mehreren Fachgebieten humane, finanzielle und materielle Ressourcen binden und – eine im Ergebnis erfolgreiche Umsetzung der WRRL vorausgesetzt – zu einer Optimierung der Lebensbedingungen (im Sinne einer Risikoverminderung) derjenigen Gesellschaften nach sich zieht, die diesen Prozess angestoßen haben. Im internationalen Vergleich sind viele Gesellschaften mit Thematiken befasst, die einen sehr viel direkteren Einfluss auf das menschliche Dasein haben oder Fortschrittsprozesse auf Grund ihrer Situation und Realitätswahrnehmung in andere Richtungen lenken – teils sehr effektiv, jedoch immer nur durch die jeweiligen Möglichkeiten auf verschiedenen Ebenen und Dimensionen bestimmt. Vor diesem Hintergrund kann die WRRL mit ihren Zielsetzungen und Umsetzungsbestrebungen als ein Ergebnis intakter und intelligenter Gesellschaften betrachtet werden.

Die EU ist durch ihr politisch-administratives Zusammenwachsen selbständiger Nationalstaaten mit jeweils eigenen Ansichten im Vergleich zu ähnlichen Volkswirtschaften – beispielsweise den Vereinigten Staaten von Amerika – bedingt durch Meinungsbildungsprozesse und lange Kommunikationswege der europäischen Verwaltung und Politik in vielen Bereichen zu optimieren. Gemeinsame und von der gesamten EU getragene Steuergremien könnten in der Lage sein, bisher parallel und daher mehrfach ablaufende Prozesse so zu koordinieren, dass einerseits „Fortschritt“ effizienter erreicht werden könnte und andererseits existierende Konkurrenzsituationen mehrerer Gruppen statt zu Konflikten zu „win-win-Situationen“ führen. JONES (2002) gibt einen Überblick über unterschiedliche Herangehensweisen zum Thema „Watershed Health“, wobei das Streben nach Effizienz und ökonomische Aspekte insbesondere auf dem nordamerikanischen Kontinent, aber auch Managementstrategien kritische Beachtung finden.

Die LAWA entwickelt mit modernsten Mitteln und abgesicherten Verfahren Empfehlungen zur Umsetzung der WRRL in Deutschland. Es kann angenommen werden, dass die so erarbeiteten Empfehlungen von den zuständigen Behörden direkt übernommen werden. Da die LAWA aus Mitgliedern der Bundes- und Landesbehörden besteht, sind die Empfehlungen optimal auf die deutsche Ausgangssituation in der Vollzugspraxis abgestimmt. In anderen Mitgliedstaaten der EU übernehmen ähnliche Akteure vergleichbare Funktionen. Die WRRL ist durch ihre zeitliche Staffelung so strukturiert, dass eine automatische Aktualisierung und Konkretisierung – insbesondere durch eine Fortschreibung des Berichtswesens – vorgesehen ist. Im Gegensatz zu vielen anderen, meist älteren Regelwerken existierender Gesellschaften ist damit die Möglichkeit vorgesehen, sich verändernde Rahmenbedingungen zu berücksichtigen, ohne das Regelwerk grundsätzlich in Frage zu stellen. Die WRRL wird von BROCKMANN (2004) als Exempel für die Handlungsfähigkeit der EU untersucht. Die Konzeption der WRRL scheint insbesondere für in Natursysteme eingebundene Sachverhalte, die sich nur über lange Zeiträume (im politischen Verständnis) ändern, eine herausragende Bedeutung zu haben und ist möglicherweise auch als ein gesellschafts- und politikwissenschaftlicher Erkenntnisgewinn zu deuten. Im Gegensatz dazu sind in vielen Demokratien gelegentlich erhebliche politische Anstrengungen notwendig, um vergleichsweise starre existierende Regelungen an sich verändernde Bedingungen anzupassen.

7. Zusammenfassung

Mit dem Ziel, langfristig einen „guten Zustand des Wassers“ zu erreichen, regelt die Europäische Wasserrahmenrichtlinie (WRRL) den menschlichen Umgang mit der Ressource Wasser neu. Mit dem juristischen Regelwerk werden allen Mitgliedsstaaten die Hauptinstrumente Maßnahmenprogramm und Bewirtschaftungsplan für die Umsetzung vorgegeben. Detailliertere Vorgaben zu Methoden und Verfahren zur Überwachung des Gewässerzustands werden nicht gemacht.

Ziel der Untersuchung ist es, ausgehend von den WRRL-Vorgaben für die Merkmalsanalyse von Flussgebieten und die Prüfung der Auswirkungen menschlicher Tätigkeiten geeignete Methoden und Verfahren auszuwählen, einzusetzen und auf ihre Eignung für das Grundwasserbeschaffenheitsmonitoring zu prüfen. Exemplarisch wird dies anhand des Bundeslandes Baden-Württemberg durchgeführt. Da sich die Grundwasserqualität in enger Abhängigkeit von Faktoren und Prozessen im Boden-Wasser-System befindet, werden flächendeckend vorliegende naturräumliche Klassifikationen als unterschiedliche räumliche Bezugssysteme in die Untersuchung einbezogen und mit Raumgliederungen anthropogenen Ursprungs verglichen.

Flächendeckende Aussagen zur Grundwasserbeschaffenheit werden durch die Interpolation von Messpunktinformationen ermöglicht. Die geostatistische Untersuchung der räumlichen Variabilität zeigt, dass nur für einige Grundwasserbeschaffenheitsparameter eine Flächenschätzung zulässig ist. Durch die Möglichkeit der qualitativen Beurteilung von Krigingschätzungen auf Grundlage eines angepassten Variogrammodells ist dieses Verfahren der Interpolation mittels Inverse-Distance-Weighting vorzuziehen. Vermeintlich hohe Schätzfehler relativieren sich aufgrund der großen Messpunktdistanzen und der Heterogenität des Untersuchungsgebietes. Sowohl naturräumliche als auch anthropogene Bezugssysteme zeigen nur in Ansätzen einen engen und erklärbaren Bezug zur Grundwasserbeschaffenheit. Flächenschätzungen unter Einbezug sekundärer Informationen – beispielsweise Raumgliederung auf Grundlage der Boden-Wasser-System-Eigenschaften – dürften zu Ergebnissen mit geringeren Schätzfehlern führen.

Die Messstellen der Grundwasserbeschaffenheit lassen sich auf Grundlage der Merkmalsausprägungen mittels einer dreistufigen Clusteranalyse in Gruppen ähnlicher Eigenschaften zusammenfassen. Die gebildeten Messstellengruppen ähnlicher

Grundwasserbeschaffenheitsmerkmale lassen sich überwiegend einzelnen Klassen der räumlichen Bezugssysteme zuordnen.

Es existieren grundsätzlich geeignete Verfahren zur Umsetzung der WRRL. Um zu Aussagen zu gelangen, die aber flächendeckend valide Aussagen zur Grundwasserqualität und dem anthropogenen Einfluss zulassen, müssen diese Verfahren exakter an die WRRL-Vorgaben angepasst werden.

8. Literatur

- AKIN, H. & SIEMES, H. (1988): Praktische Geostatistik. Berlin, 304 S.
- ARMSTRONG, M. (1998): Basic Linear Geostatistics. Berlin, 153 S.
- BACH, M. & FREDE, H.G. (1998): Regionalisierung als methodische Aufgabe. *In*: Steinhardt, U. & Volk, M. (Hrsg.): Regionalisierung in der Landschaftsökologie – Forschung, Planung, Praxis. S. 55-64
- BACKHAUS, K. (2000): Multivariate Analysemethoden. Berlin, 591 S.
- BARTELME, N. (1995): Geoinformatik. Modelle, Strukturen, Funktionen. Berlin, 414 S.
- BARDOSSY, A. (1993): Stochastische Modelle zur Beschreibung der raum-zeitlichen Variabilität des Niederschlages. = Mitteilungen des Instituts für Hydrologie und Wasserwirtschaft der Universität Karlsruhe 44, 153 S.
- BARDOSSY, A. HABERLANDT, U. & GRIMM-STRELE, J. (1996): Regional scales of groundwater-quality parameters and their dependence on geology and land use. *In*: Kobus, H. et al. (Hrsg.): Groundwater and Subsurface Remediation. S. 195-204
- BARTELME, N. (2000): Geoinformatik: Modelle, Strukturen, Funktionen. Berlin, 419 S.
- BARSCH, H. & RICHTER, H. (1975): Grundzüge der naturräumlichen Gliederung der DDR auf der Basis typisierter Naturräume in der chorischen Dimension. *In*: Petermanns Geographische Mitteilungen 119, S. 173-179
- BAUER, H. (1998): Artikel 37 [Bundeszwang]. *In*: Dreier, H. (Hrsg.): Grundgesetz Kommentar, Bd. II: Artikel 20-82. Tübingen, S. 774-782
- BENS, O. (1999): Grundwasser-Belastungspotenziale forstlich genutzter Sandböden in einem Wasserschutzgebiet bei Münster/Westfalen. *In*: Felix-Henningsen, P., Frede, H.-G., Gäth, S., Harrach, T. & Otte, A. (Hrsg.): Boden und Landschaft. Schriftenreihe zur Bodenkunde, Landeskultur und Landschaftsökologie der Justus-Liebig-Universität Gießen.
- BERATERGREGIUM FÜR UMWELTRELEVANTE ALTSTOFFE DER GESELLSCHAFT DEUTSCHER CHEMIKER (BUA) (HRSG.) (1994): Tetrachlorethen (PER). = BUA-Stoffbericht 139. Stuttgart, 366 S.
- BERATERGREGIUM FÜR UMWELTRELEVANTE ALTSTOFFE DER GESELLSCHAFT DEUTSCHER CHEMIKER (BUA) (HRSG.) (1993): Trichlorethen (PER). = BUA-Stoffbericht 95. Stuttgart, 398 S.
- BERATERGREGIUM FÜR UMWELTRELEVANTE ALTSTOFFE DER GESELLSCHAFT DEUTSCHER CHEMIKER (BUA) (HRSG.) (1999): Tetrachlorethen (PER). = BUA-Stoffbericht 215. Stuttgart, 366 S.
- BERTHOLD, G. & QUADFLIEG, A. (2000): Bewertung des chemischen Grundwasserzustandes anhand geeigneter statistischer Auswerteverfahren. *In*: Wasser und Abfall 1-2 2000, S. 32-36
- BLUME, H.-P., LOOP, E.A. & REXILIUS, L. (1992a): Pflanzenschutzmittel. *In*: Blume, H.-P. (Hrsg.): Handbuch des Bodenschutzes. S. 325-353
- BLUME, H.-P. (1992b) (Hrsg.): Handbuch des Bodenschutzes. Landsberg, 794 S.
- BÖHME, M. (2003): Wann ist ein Wasserkörper gefährdet? *In*: KA – Abwasser, Abfall 2003 (50) Nr. 8, S. 1005-1007

- BOSENIUS, U. (1998): Wasserwirtschaft in Deutschland. Hrsg. v. Bundesministerium für Umwelt, Naturschutz und Reaktorsicherheit. Bonn, 190 S.
- BREUER, R. (1995): Gewässerschutz in Europa – Eine kritische Zwischenbilanz. *In: Wasser und Boden* 11/1995, S. 10-14
- BROCKMANN, C. (2004): Die Handlungsfähigkeit der Europäischen Union – untersucht am Beispiel der EU-Wasserrahmenrichtlinie. Heidelberg, 295 S.
- BRONSTERT, A. (Hrsg.) (1998): RIBAMOD – River basin modelling, management, and flood mitigation, concerted action. Proceedings of the European expert meeting on the Oder-Flood 1997. European Commission, Brussels
- BRUCKNER, G. & SCHIFFER, L. (1999): Nachhaltigkeit und Gewässerbewirtschaftung im Kontext der EU-Wasserrahmenrichtlinie. *In: UFZ-Bericht* 30/1999, Hrsg. v. Horsch, H. et al., S. 31-40
- BUNDESANSTALT FÜR GEWÄSSERKUNDE (Hrsg.)(1996): Katalog über ökologische Daten DV-Strukturen und Modelle. Berlin, 394 S.
- BUNDESMINISTERIUM FÜR UMWELT, NATURSCHUTZ UND REAKTORSICHERHEIT (Hrsg.) (1998): Umweltpolitik – Wasserwirtschaft in Deutschland. Bonn, 190 S. BONGAERT, P. et al. (1995): The spatial interpolation of agro-climatic data. = Agrometeorology Series Working Paper 12, FAO, Rom
- BUNDESMINISTERIUM FÜR UMWELT, NATURSCHUTZ UND REAKTORSICHERHEIT (Hrsg.) (2004): Die Wasserrahmenrichtlinie – Neues Fundament für den Gewässerschutz in Europa. Berlin, 121 S.
- BURGER, H., PAWLOWSKY-GLAHN, V. & SCHAFMEISTER, M.-TH. (1999): Grundbegriffe der Geostatistik. Eine Einführung in die geostatistische Modellierung und räumliche Interpolation im Rahmen des Weiterbildenden Studiums Mathematische Methoden und Modelle in den Geowissenschaften. FU Berlin, FR Geoinformatik, 61 S.
- BURROUGH, P.A. & MCDONNELL, R.A. (2000): Principles of Geographical Information Systems. Oxford, 306 S.
- BURROUGH, P.A. (1986): Principles of Geographical Information Systems for Land Resources Assessment. Oxford 193 S.
- CASPAR, J (2001): Die EU-Wasserrahmenrichtlinie: Neue Herausforderungen an einen europäischen Gewässerschutz. *In: Die Öffentliche Verwaltung*, 54. Jg., 13, S. 529-538
- CHIANG, W.-H. & KINZELBACH, W. (2000): 3D-Groundwater Modelling with PMWIN - A Simulation System for Modelling Groundwater Flow and Pollution. Berlin/Heidelberg, 335 S.
- CLARK, W.A.V. & HOSKING, P.L. (1986): Statistical Methods for Geographers. John Wiley & Sons, 24, 46
- DASCHKEIT, A. (Hrsg.) (1998): Umweltforschung quergedacht: Perspektiven integrativer Umweltforschung und -lehre. Berlin, 414 S.
- DASCHKEIT, A. (2000): Umweltforschung in der Geographie – Beiträge zur „innerdisziplinären Interdisziplinarität“. Dissertation an der Mathematisch-Naturwissenschaftlichen Fakultät der Universität Kiel, 152 S.
- DEUTSCH, C. V. & JOURNEL, A. G. (1998): Geostatistical Software Library and User's Guide. New York, Oxford, 369 S.
- DEUTSCHER VERBAND FÜR WASSERWIRTSCHAFT UND KULTURBAU E.V. (DVWK) (Hrsg.) (1985): Datensammlung zur Abschätzung des Gefährdungspotenzials von Pflanzenschutzmittel-Wirkstoffen für Gewässer. = DVWK-Schriften 74, Hamburg

- DEUTSCHER VERBAND FÜR WASSERWIRTSCHAFT UND KULTURBAU E.V. (DVWK) (Hrsg.) (1996): Ermittlung der Verdunstung von Land- und Wasserflächen. = DVWK-Merkblätter zur Wasserwirtschaft 238, Bonn
- DIEKKRÜGER, B. (Hrsg.) (1997): Proceedings of the Conference on Regionalisation in Hydrology at Braunschweig, March 1997 = IAHS Publications 254 bzw. Landschaftsökologie und Umweltforschung 25, Braunschweig
- DIEKKRÜGER, B. (1999): Regionalisierung von Wasserquantität und -qualität – Konzepte und Methoden. *In*: Steinhardt, U. & Volk, M. (Hrsg.): Regionalisierung in der Landschaftsökologie. S. 67-78
- DOMBROWSKY, W.R. & BRAUNER, C. (1996): Defizite der Katastrophenvorsorge in Industriegesellschaften am Beispiel Deutschlands. = IDNDR-Reihe, Bd. 3b, Bonn, 157 S.
- DUTTER, R. (1985): Geostatistik: eine Einführung mit Anwendungen. = Mathematische Methoden in der Technik 2, Stuttgart, 159 S.
- ERDMANN, K.-H. & BORK, H.-R. (1998): Geographie und Naturschutz. Beiträge zu einer naturverträglichen Entwicklung. = MAB-Mitteilungen 45, Bonn, 318 S.
- EUROPÄISCHES PARLAMENT UND RAT (2000): Richtlinie 2000/60/EG, *In*: Amtsblatt der Europäischen Gemeinschaften L327/1, 72 S.
- EUROPÄISCHES PARLAMENT UND RAT (1976): Richtlinie 76/464/EWG, *In*: Amtsblatt der Europäischen Gemeinschaften L129/23, 44 S.
- FAßBENDER, K. (2001): Gemeinschaftliche Anforderungen an die Normative Umsetzung der neuen EG-Wasserrahmenrichtlinie. *In*: Neue Zeitschrift für Verwaltungsrecht 3, 2001, S. 241-260
- FEHR, G. (Hrsg.) (2000): Nährstoffbilanzen für Flusseinzugsgebiete – Ein Beitrag zur Umsetzung der EU-Wasserrahmenrichtlinie. Berlin, 145 S.
- FRÄNZLE, O. (1991): Erarbeitung und Erprobung einer Konzeption für die ökologisch orientierte Planung auf der Grundlage der regionalisierenden Umweltbeobachtung am Beispiel Schleswig-Holsteins. = Umweltforschungsplan des Bundesministers für Umwelt, Naturschutz und Reaktorsicherheit, Forschungsbericht 109 02 033, Berlin, 194 S.
- FRÄNZLE, O. (1988): Naturraumgliederung mit Hilfe der Schwermetallbelastbarkeit von Böden. *In*: Ber. Z. dt. Landeskunde, 62,2, S. 287 - 303
- FRÄNZLE, O. (1992a): Modellierung des Chemikalienverhaltens in Boden und Grundwasser. *In*: Blume, H.-P. (Hrsg.): Handbuch des Bodenschutzes, S. 108-120
- FRÄNZLE, O. et al. (1992b): Erarbeitung und Erprobung einer Konzeption für die ökologisch orientierte Planung auf der Grundlage der regionalisierenden Umweltbeobachtung am Beispiel Schleswig-Holsteins. = UBA-Texte 20/92, Berlin
- FRÄNZLE, O. (1993): Contaminants in Terrestrial Environments. Berlin, 439 S.
- FRÄNZLE, O. (1994a): Representative Soil Sampling. *In*: Markert, B. (Hrsg.): Environmental Sampling for Trace Analysis. Weinheim, S. 305-320
- FRÄNZLE, O. & KILLISCH, W.F. (1994b): Die Biplottechnik als Analyseinstrument komplexer Datenmatrizen. *In*: SCHRÖDER, W. et al. (Hrsg.)(1994): Neuere statistische Verfahren und Modellbildung in der Geoökologie. Braunschweig, S. 129-144
- FRÄNZLE, O. et. al. (1995): Harmonisierung der Untersuchungsverfahren und Bewertungsmaßstäbe für den Bodenschutz mit der Russischen Föderation. = UBA Texte 60/95, Berlin, 133 S.

- FREDE, H.-G. & DABBERT, S. (1999): Handbuch zum Gewässerschutz in der Landwirtschaft. Landberg, 451 S.
- GEROLD, G., CYFFKA, B., SUTMÖLLER, J., KRÜGER, J.-P. & BUSCH, G. (1999): Regionalisierung der Abflussbildung über die Aggregation homogener Flächen unter Verwendung des Geographischen Informationssystems ARC/INFO und der Digitalen Reliefanalyse (Programm SARA). *In: Kleeberg, H.-B. et al. (Hrsg.): Regionalisierung in der Hydrologie.* S. 191-204
- GEROLD, G., PESCHKE, G. ETZENBERG, C., SUTMÖLLER, J., ZIMMERMANN, S. & KRÜGER, J.-P. (2003): Reliefgestützte und wissensbasierte Regionalisierung in der Hydrologie. Aachen, 126 S.
- GLOY, K. (1995): Das Verständnis der Natur. Bd. 1: Die Geschichte des wissenschaftlichen Denkens, München
- GOOVAERTS, P. (1997): Geostatistics for Natural Resources Evaluation. New York, 483 S.
- GRABAUM, R. (Hrsg.) (1998): Landschaftsbewertung unter Verwendung analytischer Verfahren und Fuzzy-Logic. Leipzig, 184 S.
- GREBNER, D. (1995): Klimatologie und Regionalisierung starker Gebietsniederschläge in der nordalpinen Schweiz. = Zürcher Geographische Schriften 59, Zürich, 149 S.
- GREIVING, S. (1999): Hochwasserschutz in der räumlichen Planung, dargestellt am Beispiel der Lenne. *In: Raumforschung und -ordnung* 57, 1, S. 25-34.
- GRIMM-STRELE, J. & ROMETSCH, C. (2001): Überblick über das Verfahren des Simple Updating Kriging. Unveröffentlichtes Skriptum zur Vorstellung des Verfahrens in der LAWA. Karlsruhe, 7 S.
- GRINGARTEN, E. & DEUTSCH, C.V. (2001): Teacher's Aide – Variogramm Interpretation and Modelling. *In: Mathematical Geology* 33, 4, S. 507-534
- GRÖNGRÖFT, A., HOCHFELD, B. & MIEHLICH, G. (1999): Funktionale Bewertung von Böden bei großmaßstäbigen Planungsprozessen. Gutachten des Instituts für Bodenkunde der Universität Hamburg im Auftrag der Umweltbehörde Hamburg, Abteilung Gewässer- und Bodenschutz.
- GROSSMANN, W. D. (1999): Nachhaltige Entwicklung in der Informationsgesellschaft – Von der „bürokratischen“ zur vergnügten „Nachhaltigkeit“. *In: Grossmann, W. D. et al. (1999): Nachhaltigkeit.* S. 129-146
- GRÜNEWALD, U. (1998): Ursachen, Verlauf und Folgen des Sommer-Hochwassers 1997 an der Oder sowie Aussagen zu bestehenden Risikopotenzialen - Eine interdisziplinäre Studie. = IDNDR-Reihe, Bd. 10b, Bonn
- GEYLER, S. (1999): Ökologisch-ökonomische Bewertung von Optionen des regionalen Trinkwasserschutzes im Kontext von Nachhaltigkeit. *In: UFZ-Bericht* 16/1999, Hrsg. v. Horsch, H. & Ring, I., S. 129-156
- HAASE, G. (1964): Landschaftsökologische Detailuntersuchungen und naturräumliche Gliederung. *In: Petermanns Geographische Mitteilungen* 108, S. 8-30
- HAASE, G. (1991): Naturraumerkundung und Landnutzung. Geochorologische Verfahren zur Analyse, Kartierung und Bewertung von Naturräumen. = Beiträge zur Geographie 34, Berlin
- HAASE, J. (1991): Methoden und Instrumentarien der geographischen Strukturanalyse. = Beiträge zur Geographie 35, Berlin, 261 S.
- HAASE, M. (2000): GIS-GwD: Ein GIS-basiertes Baukastensystem für den Einsatz bei den Gewässerdirektionen Baden-Württembergs. *In: Umweltinformatik '00 / Computer*

- Science for Environmental Protection '00 = "Umweltinformatik aktuell", Bd. 26, Hrsg. v. Cremers, A.B. & Greve, K.
- HAGENGUTH, R. (2001): Organisatorische Umsetzung der EU-Wasserrahmenrichtlinie in Deutschland. *In: Wasser und Abfall* 6, S.18-21
- HANSJÜRGENS, B. (2004): Die EU-Wasserrahmenrichtlinie in ihrer Bedeutung für die Forschung zu mesoskaligen Einzugsgebieten. *In: Lorz, C. & Haase, D. (Hrsg.): Stoff- und Wasserhaushalt in Einzugsgebieten.* S. 129-133
- HARTMUTH, G. (1998): Ansätze und Konzepte eines umweltbezogenen gesellschaftlichen Monitoring. *In: Kruse-Graumann et al. (Hrsg.): Ziele, Möglichkeiten und Probleme eines gesellschaftlichen Monitoring.* MAB-Mitteilungen 42, S. 9-33
- HEINRICH, U. (1992): Zur Methodik der räumlichen Interpolation mit geostatistischen Verfahren. Wiesbaden, 124 S.
- HEINRICH, U. (1994A): Flächenschätzung mit geostatistischen Verfahren – Variogrammanalyse und Kriging. *In: Schröder, W. et al. (Hrsg.): Neuere statistische Verfahren in der Geoökologie.* Braunschweig, S. 145-164
- HEINRICH, U. (1994B): Variogrammanalytische Überprüfung flächenbezogener Messnetze und Kriging-Interpolation. *In: Schröder, W. et al. (Hrsg.): Neuere statistische Verfahren in der Geoökologie.* Braunschweig, S. 283-296
- HENNEBERG, S. C. (2005): Ergebnisse der Bestandsaufnahme der EG-Wasserrahmenrichtlinie in der Flussgebietseinheit Weser. *In: KA – Abwasser, Abfall*, 52, 3, S. 249-252
- HENNRICH, K. (1999): Regionalisation of geomorphometric parameters in hydrologic modelling using GIS. *In: Diekkrüger, B. (Hrsg.): Proceedings of the Conference on Regionalisation in Hydrology at Braunschweig, March 1997.* = IAHS Publications 254 bzw. Landschaftsökologie und Umweltforschung 25, Braunschweig
- HERRCHEN, M. (1999): Vorschläge für eine Liste von prioritären Stoffen im Rahmen der zukünftigen Wasserrahmenrichtlinie der EU. = UBA Texte 1999/64, Berlin, 94 S.
- HERRMANN, S. (2000): Anforderungen an die GIS-gestützte Modellierung als Werkzeug für die Entscheidungsunterstützung in der Landnutzungsplanung. = Umweltinformatik aktuell, Bd. 26, hrsg. v. Cremers, A. B. & Greve, K.
- HERTLING, T., KUHN, G. & SCHMOTZ, W. (1995): Verfahren zur regional repräsentativen Untersuchung von Bodenbelastungen. *In: UVP-Report* 3/1995, S. 117-123.
- HOFFMANN-KROLL, R. (1997): Naturvermögen in den Umweltökonomischen Gesamtrechnungen. *In: Wirtschaft und Statistik* 10/97, S. 696-706
- HOLLSTEIN, W. (1963): Bodenkarte der Bundesrepublik Deutschland 1:1.000.000. Hrsg. v. Bundesanstalt für Bodenforschung, Hannover
- HÖLTING, B. (1995): Konzept zur Ermittlung der Schutzfunktion der Grundwasserüberdeckung. *In: Geologisches Jahrbuch C* 63, Hannover, S. 5-24
- HÖLTING, B. (1996): Hydrogeologie. Stuttgart, 441 S.
- HOLZMANN, H. (1996): Modellierung und Regionalisierung der Grundwasserneubildung und des Bodenwasserhaushaltes. Wiener Mittlg., Bd. 123, Wien
- HÖTZL, H. (1999): Methoden für die Beschreibung der Grundwasserbeschaffenheit. = DVWK-Schriften 125, Bonn, 200 S.
- HORNUNG, U. (1995): Regionalisierung als mathematisches Problem. *In: Totsche, K. et al. (Hrsg.): Ökobilanzen, Produktlinienanalysen, Öko-Audit, UVP, Integrierter Umwelt-*

- schutz, Modellierung und Risikoabschätzung, Ökometrie. = Tagungsband zur Ecoinforma 1994, Umweltbundesamt, Wien
- HORSCH, H. (1999): Ökonomische Instrumente zur Förderung eines nachhaltigen Grundwasserschutzes. *In: UFZ-Bericht 16/1999*, Hrsg. v. Horsch, H. & Ring, I., S. 217-244
- HORSCH, H. (1999): Schwerpunkte sozioökonomischer Forschung im Rahmen der Umsetzung der EU-Wasserrahmenrichtlinie. *In: UFZ-Bericht 30/1999*, Hrsg. v. Horsch, H. et al., S. 11-20
- INDUSTRIEVERBAND PFLANZENSCHUTZ (IPS) (HRSG.) (1982): Wirkstoffe in Pflanzenschutz- und Schädlingsbekämpfungsmitteln – Physikalisch-chemische und toxikologische Daten. Offenbach, 375 S.
- JANSSEN, J. & LAATZ, W. (1999): Statistische Datenanalyse mit SPSS. Berlin, 692 S.
- JELINEK, S. (1999): Wasser- und Stoffhaushalt im Einzugsgebiet der oberen Stör. = Schriftenreihe Institut für Wasserwirtschaft und Landschaftsökologie der Christian-Albrechts-Universität Kiel, Heft 29, 172 S.
- JONES, C., PALMER, R.M., MOTKALUK, S. & WALTERS, M. (2002): Watershed Health Monitoring: Emerging Technologies. Boca Raton, 227 S.
- JØRGENSEN, S.E. (2002): Ökotoxikologische Modelle. *In: Handbuch der Umweltwissenschaften – 8. Erg. Lfg.*, S. 3 - 13
- JOURNAL, A. G. & HUIJBREGTS, C. J. (1978): Mining Geostatistics. London, 600 S.
- KITANIDIS, P. K. (1997): Introduction to Geostatistics. Cambridge, 249 S.
- KLAR, R. & OPITZ, O. (Hrsg.): Classification and Knowledge Organisation. Heidelberg, 684 S.
- KLEEBOURG, H.-B., MAUSER, W., PESCHKE, G. & STREIT, U. (Hrsg.)(1999): Regionalisierung in der Hydrologie. Weinheim, 444 S.
- KNOPP, G.-M. (2001): Die Umsetzung der Wasserrahmenrichtlinie im deutschen Wasserrecht. *In: ZUR 6*, S. 368-380
- KÖLLE, W. (2001): Wasseranalysen – richtig beurteilt. Weinheim. 357 S.
- KRESS, W. (1996): ZEUS „Methodenbank Grundwassergütemessnetzplanung“ – Dokumentation – hrsg. v. Forschungsinstitut für anwendungsorientierte Wissensverarbeitung (FAW), Ulm, 139 S.
- KUGLER, H. (1984): Themakartographische Aspekte der landschaftlichen Regionalisierung. *In: Richter, H. (Hrsg.): Umweltforschung*. Gotha, S. 108-116
- LANDESAMT FÜR GEOLOGIE, ROHSTOFFE UND BERGBAU BADEN-WÜRTTEMBERG (Hrsg.) (1998): Geowissenschaftliche Übersichtskarten von Baden-Württemberg 1:350.000. Freiburg. (CD-ROM)
- LÄNDERARBEITSGEMEINSCHAFT WASSER (LAWA) (1993): Richtlinie für die Gebietskennzeichnung und Verschlüsselung von Fließgewässern. LAWA-ad-hoc-Arbeitskreis. Bonn
- LÄNDERARBEITSGEMEINSCHAFT WASSER (LAWA) (1993): Grundwasserrichtlinien für Beobachtung und Auswertung, Teil 3 – Grundwasserbeschaffenheit. Bonn
- LÄNDERARBEITSGEMEINSCHAFT WASSER (LAWA) (2000): Empfehlungen zu Konfiguration von Messnetzen sowie zu Bau und Betrieb von Grundwassermessstellen (qualitativ). Schwerin
- LÄNDERARBEITSGEMEINSCHAFT WASSER (LAWA) (2004, fortlaufend): Arbeitshilfe zur Umsetzung der EU-Wasserrahmenrichtlinie. = in Fortschreibung begriffenes Kompendium der Ergebnisse aus den LAWA-Ausschüssen, Internetdokument

- LANDESANSTALT FÜR UMWELTSCHUTZ BADEN-WÜRTTEMBERG (1999): Grundwasserüberwachungsprogramm, Ergebnisse der Beprobung 1998. Grundwasserschutz 6, Karlsruhe, 76 S.
- LANDESANSTALT FÜR UMWELTSCHUTZ BADEN-WÜRTTEMBERG (2000a): Grundwasserüberwachungsprogramm, Ergebnisse der Beprobung 1999. Grundwasserschutz 14, Karlsruhe, 69 S.
- LANDESANSTALT FÜR UMWELTSCHUTZ BADEN-WÜRTTEMBERG (2000b): Grundwasserüberwachungsprogramm, Rahmenkonzept Grundwassermessnetz. Grundwasserschutz 10, Karlsruhe, 40 S.
- LANDESANSTALT FÜR UMWELTSCHUTZ BADEN-WÜRTTEMBERG (2000c): Beschaffenheit des Grundwassers – Jahresdatenkatalog 1994-1998. Karlsruhe. (CD-ROM)
- LANDESANSTALT FÜR UMWELTSCHUTZ BADEN-WÜRTTEMBERG (2000c): Grundwasserüberwachungsprogramm. Das Zentrale Umweltkompetenz-System ZEUS. Grundwasserschutz 11, Karlsruhe, 41 S.
- LESER, H. (1981): Methodische Probleme beim räumlichen Ansatz der Ökosystemforschung. *In: Angewandte Botanik* 55, S. 309-320
- LESER, H. (1997): Landschaftsökologie. Stuttgart, 647 S.
- LOGAN, W.S. & NARDINI, R. (1999): Geospatial and Statistical Relationships between Geology, Land Use and Water Quality in Loudoun CO., a fast developing County in Northern Virginia. *In: Geological Society of America (Hrsg.): Abstracts with Programs – Geological Society of America.* 31, 7, S. 157
- LÜHR, H.-P. (1990): Überlegungen für ein Stoffspezifisches Bewertungsschema für das Verhalten von wassergefährdenden Stoffen im Untergrund. = Ausschuss „Verhalten von wassergefährdenden Stoffen“ des Beirats „Lagerung und Transport wassergefährdender Stoffe“ (LTwS) beim Bundesminister für Umwelt und Reaktorsicherheit. Berlin, 27 S.
- LÜHR, H.-P. (1990): Überlegungen zur Ermittlung der Standortcharakteristik und Ermittlung der Nutzungscharakteristik. = Ausschuss „Verhalten von wassergefährdenden Stoffen“ des Beirats „Lagerung und Transport wassergefährdender Stoffe“ (LTwS) beim Bundesminister für Umwelt und Reaktorsicherheit. Berlin, 31 S.
- MARTÍN-FERNÁNDEZ, J.A.; OLEA-MENESES, R.A. & PAWLOWSKY-GLAHN, V. (2001): Criteria to Compare Estimation Methods of Regionalized Compositions. *In: Mathematical Geology* 33, 8, S. 889-909
- MARTINI, M. (2000): Einfluss von Talniederungen auf den Stoffaustrag im Einzugsgebiet der Buckener Au/obere Stör (Schleswig-Holstein). Dissertation an der Math.-Nat. Fakultät der Universität Kiel, 181 S.
- MATHERON, G. (1963): Principles of Geostatistic. *In: Economic Geology* 58, S. 1246-1266
- MERZ, R. & BUCK, W. (1999): Integrierte Bewertung wasserwirtschaftlicher Maßnahmen. = DVWK Materialien 1/1999, 145 S.
- MESSNER, F. (1999): Anwendungsperspektiven eines integrierten Bewertungsverfahrens im Kontext der EU-Wasserrahmenrichtlinie. *In: UFZ-Bericht* 30/1999, Hrsg. v. Horsch, H. et al., S. 65-74
- MEULI, R. (1994): Geostatistical Interpolation in regional mapping of soil contamination by heavy metals. *In: Federal Office of Environment, Forests and Landscape (FOEFL) (Hrsg.): Regional soil contamination surveying, Part B*

- MEULI, R. (1995): Sind regionale Bodenuntersuchungen reproduzierbar? Ein Fallbeispiel. *In: Mittlg. D. dt. Bodenk. Ges.*, 76/1, S. 373-376
- MEYERHOFF, J. (1999): Die ökonomische Bewertung ökologischer Leistungen und ihre mögliche Rolle im Rahmen der EU-Wasserrahmenrichtlinie. *In: UFZ-Bericht 30/1999*, Hrsg. v. Horsch, H. et al., S. 87-98
- MEYNEN, E., SCHMITHÜSEN, J., GELLERT, J., NEEF, E. MÜLLER-MINY, H. & SCHULTZE, J.H. (1958 -1962): Handbuch der naturräumlichen Gliederung Deutschlands. Bad Godesberg, Bd. 1-9
- MILITINO, A.F. & UGARTE, M.D. (1999): Analyzing Censored Data. *In: Mathematical Geology*. 31, 5, S. 551-561
- MINISTERIUM FÜR UMWELT, NATUR UND FORSTEN DES LANDES SCHLESWIG-HOLSTEIN (Hrsg.) (1988): Gesamtplan Grundwasserschutz in Schleswig-Holstein. Kiel, 34 S.
- MITÁS, L. & MITÁSÓVA, H. (1999): Spatial interpolation. *In: Longley, P. et al.: Geographical Information Systems*. Bd. 1, 34, S. 33-55
- MITÁSÓVA, H. & HOFIERKA, J. (1993): Interpolation by Regular Spline with Tension: II. Application to terrain Modelling and Surface Geometry Analysis. *Mathematical Geology*, Bd. 25, 6, S. 657-669
- MONSEES, J. (1999): Wasser- und Bodenverbände und die EU-Wasserrahmenrichtlinie. *In: UFZ-Bericht 30/1999*, Hrsg. v. Horsch, H. et al., S. 147-156
- MUCHA, H.-J. (1994): Cluster-Analyse Automatische Klassifikation. *In: Schröder, W. et al. (Hrsg.): Neuere statistische Verfahren in der Geoökologie*. Braunschweig, S. 109-128
- MYERS, J.C. (1997): Geostatistical Error Management – Quantifying Uncertainty for Environmental Sampling and Mapping. Nostrand, 26 S.
- NATHANAIL, C. P. (1997): Expert knowledge to select model variogram parameters for geostatistical interpolation of sparse data sets. *In: Yong, R. N. & Thomas, H. R. (Hrsg.): Geoenvironmental engineering – contaminated ground: fate of pollutants and remediation*. London, S. 240-247
- NEEF, E. (1967): Die theoretischen Grundlagen der Landschaftslehre, Gotha, 152 S.
- NIXON, S. C. (1998): Europäisches Gewässerüberwachungsnetzwerk. = UBA-Texte 1998/17, hrsg. v. Umweltbundesamt, Berlin, 48 S.
- OLIVER, M.A. (1990): Kriging: A Method of Interpolation for Geographical Information Systems. *In: Int. J. of Geographic Information Systems Vol 4*, 4, S. 313-332
- PESCHKE (1999): Skalenwechsel über Modelle. *In: Kleeberg, H.-B. et al. (Hrsg): Regionalisierung in der Hydrologie*. S. 12-24
- PETERSEN, M. (1998): Regionalstatistische Untersuchungen der Grundwasserbeschaffenheit auf der westlichen Halbinsel Snaefellsnes (W-Island). = Diplomarbeit (Teil 2) Inst. f. Geowissenschaften Kiel, Kiel, 71 S.
- PIOTROWSKI, J. A. (1994): Fuzzy Kriging of imprecise hydrological data. *In: Int. Assoc. Mathematical Geology; Proceedings of the annual Meeting Mount Tremblant, Quebec, Canada*. Quebec, S. 282-288
- PIOTROWSKI, J. A. (1996): Geostatistical regionalization of glacial aquitard thickness in north-western Germany, based on fuzzy kriging. *In: Mathematical Geology*, 28, 4, S. 437-452
- REICHE, W. (1991): Entwicklung, Validierung und Anwendung eines Modellsystems zur Beschreibung und flächenhaften Bilanzierung der Wasser- und Stickstoffdynamik in Böden. = Kieler Geographische Schriften 79

- REINECKE, H. (1999): Umsetzung der EU-Wasserrahmenrichtlinie im Einzugsgebiet der Elbe. *In: UFZ-Bericht 30/1999*, Hrsg. v. Horsch, H. et al., S. 123-126
- RENNERS, M. (1992): Geoökologische Raumgliederung der Bundesrepublik Deutschland. Trier, 121 S.
- RICHTER, H & BARSCH, H. (1978): Eine naturräumliche Gliederung der DDR auf der Grundlage von Naturraumtypen. = *Beiträge zur Geographie* 29, S. 323-340
- RIEDEL, W. (1999): Komplexe Landschaftsanalyse als Grundlage ökologisch orientierter Raumplanung. = *Rostocker Materialien für Landschaftsplanung und Raumentwicklung* 2, 191 S.
- ROHMANN, U. & RÖDELSPERGER, M. (1997): Komplexe Grundwasserbelastungsverhältnisse mit Nitrat und Pflanzenschutzmittelwirkstoffen, dargestellt am Fallbeispiel des WSG Rheinau. Beitrag zum 5. Jahresbericht der vedewa (Hrsg.) "Grundwasserdatenbank Wasserversorgung" - VGW, DVGW, VKU, Städtetag, Gemeindetag Baden-Württemberg, S. 81-97
- RÖSCHMANN, G. (1986): Karte der Bundesrepublik Deutschland 1:1.000.000. Bodenkarte. Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe. Hannover
- RUDOLPH, M. (1989): Ökonomische Analyse von Nutzungskonflikten zwischen Wassergewinnung und landwirtschaftlicher Produktion. = *Landwirtschaft und Umwelt* Bd. 3, Hrsg. v. Haen, H. den, Kiel, 151 S.
- SCHÄFER, W. (1999): Raumbezug und Repräsentativität in der Ökologischen Flächenstichprobe. *In: Umweltwissenschaften und Schadstoff-Forschung*, S. 34-47
- SCHAFMEISTER, M. T. (1999): Geostatistik für die hydrogeologische Praxis. Heidelberg, 172 S.
- SCHAEFFER, P.; BLUME, H.-P.; BRÜMMER, G.; HARTGE, K.-H. & SCHWERTMANN, U. (1992): Lehrbuch der Bodenkunde. Stuttgart, 491 S.
- SCHENK, R.; AST, M.; DEIGLMAYR, W.; HOHBERGER, K.-H.; KOLBE, R.; LANGNER, M.; ROSENBAUM, S.; TOUSSAINT, B.; WOLTER, R. & ZIEGLER, G. (2002): Die Vorschriften der Wasserrahmenrichtlinie für das Grundwasser und ihre Umsetzung in die wasserwirtschaftliche Praxis. *In: Hydrologie und Wasserbewirtschaftung* 1, S. 25-30
- SCHEYTT, T. (1994): Örtliche und zeitliche Veränderungen der Grundwasserbeschaffenheit im Bereich der Bornhoeveder Seenkette. = *EcoSys, Suppl.* 7, Kiel, 149 S.
- SCHLEYER, R. (1993): Kartierung der Verschmutzungsempfindlichkeit von Grundwasser (durch multivariate statistische Auswertung geologischer, geographischer und hydrochemischer Daten). = *WaBoLu-Hefte* 93/04
- SCHNEIDER-SLIWA, R. , SCHAUB, D. & GEROLD, G. (Hrsg.) (1999): *Angewandte Landschaftsökologie*. Berlin, 560 S.
- SCHMIDT, G. (2002): Eine multivariat-statistisch abgeleitete ökologische Raumgliederung für Deutschland. Berlin, 142 S.
- SCHMIDT, J. (1999): Scales and similarities in runoff processes with respect to geomorphology. *In: Hydrological Processes*, S. 237-248
- SCHMOLL, G.A. (1991): *Risiko-Management*, Bd. 2 (hrsg. v. d. Schweizerischen Stiftung für Risikoberatung), Genf, 123 S.
- SCHRÖDER, W. (1991): Die Validität von Umweltdaten - Kriterien für ihre Zuverlässigkeit: Repräsentativität, Qualitätssicherung und -kontrolle. *In: Umweltwissenschaften und Schadstoff-Forschung* 3, S. 237-241

- SCHRÖDER, W. (1994): Erkenntnisgewinn, Hypothesenbildung und Statistik. *In: Schröder, W., Vetter, L. & Fränze, O. (Hrsg.): Neuere statistische Verfahren und Modellbildung in der Geoökologie.* S. 1-15
- SCHRÖDER, W., VETTER, L. & FRÄNZLE, O. (1994): Neuere statistische Verfahren und Modellbildung in der Geoökologie. Braunschweig, 346 S.
- SCHRÖDER, W. (1997): Harmonisierung der Ökologischen Umweltbeobachtung. Internationales Engagement und nationaler Nutzen. *In: Zeitschrift für Angewandte Umweltforschung*, 10, 1, S. 33-44
- SCHRÖDER, W. (1997): Methodik und Organisation eines Bodenmonitorings. = UBA Texte 21/98, Berlin, 35 S.
- SCHRÖDER, W. & SCHMIDT, G. (2000): Raumgliederung für die ökologische Umweltbeobachtung des Bundes und der Länder. *In: Z. Umweltchem. Ökotox.* 12, 4, S. 236-243
- SCHUHMAN, D. (1996): Die Methodenbank ZEUS – ein Werkzeug zur Planung von Grundwassermessnetzen und für die Auswertung der Messergebnisse. = *Wasserspiegel* 1
- STECH, C. (1996): Ein statistisches Verfahren zur Klassifikation und Auswahl von Standorten für die ökologische Umweltbeobachtung - dargestellt am Beispiel Europas. Diplomarbeit am Geographischen Institut der Universität Kiel. Kiel, Bd. I 77 S.; Bd. II 54 S.
- STEIN, M. L. (1999): *Interpolation of Spatial Data.* New York, 247 S.
- STEINHARDT, U. & VOLK, M. (Hrsg.) (1999): *Regionalisierung in der Landschaftsökologie - Forschung, Planung, Praxis.* Stuttgart, 400 S.
- STEINHARDT, U. (1999): Die Theorie der geographischen Dimensionen in der angewandten Landschaftsökologie. *In: Schneider-Sliwa, R. et al. (1999): Angewandte Landschaftsökologie.* S. 47-64
- STETTNER, R. (1998): Artikel 75 [Rahmenvorschriften]. *In: Dreier, H. (Hrsg.): Grundgesetz Kommentar, Bd. II: Artikel 20-82.* Tübingen, S.1435-1442
- STREIT, B. (1994): *Lexikon Ökotoxikologie.* Weinheim, 731 S.
- SZIBALSKI, M. (2000): Großmaßstäbige Regionalisierung labiler Bodenkennwerte in standörtlich hochdiversen Kulturlandschaften. Dissertation Universität Giessen, 160 S.
- THEOBALD, W. (1998)(Hrsg.): *Integrative Umweltbewertung : Theorie und Beispiele aus der Praxis,* Berlin, 293 S.
- THIEKEN, A. (1999): Scaling input data by GIS for hydrological modelling of Hydrological Processes. *In: Hydrological processes* 13, 4, S. 611-623
- TIETJE, O. & TAPKENHINRICHS, M. (1993): Evaluation of Pedo-Transfer-Functions. *In: Soil Sci. Soc. Am. J.* 57, S. 1088-1095
- UMWELTBUNDESAMT (1994) (Hrsg.): *Stoffliche Belastung der Gewässer durch die Landwirtschaft und Maßnahmen zu ihrer Verringerung.* = UBA Berichte 1994/02, Berlin
- UMWELTBUNDESAMT (1997) (Hrsg.): *Daten zur Umwelt – Der Zustand der Umwelt in Deutschland.* Berlin
- UMWELTBUNDESAMT (1998) (Hrsg.): *Europäisches Gewässerüberwachungsnetzwerk.* = UBA Texte 1998/17, Berlin
- UMWELTBUNDESAMT (1999) (Hrsg.): *Maßnahmenplan nachhaltige Wasserwirtschaft: Handlungsschwerpunkte für einen zukunftsorientierten Umgang mit Wasser in Deutschland.* = UBA Texte 1999/25, Berlin

- UMWELTBUNDESAMT (1999) (Hrsg.): Nachhaltige Wasserwirtschaft in Deutschland – Zusammenfassung und Diskussion. = UBA Texte 1999/14, Berlin
- WACKERNAGEL, H. (1995): Multivariable Geostatistics. Berlin, Heidelberg, 256 S.
- WEBSTER, R. & OLIVER, M.A. (1990): Statistical methods in soil and land resource survey. Oxford University Press, New York
- WENKEL, K.-O. & SCHULTZ, A. (1999): Vom Punkt zur Fläche – das Skalierungs- bzw. Regionalisierungsproblem aus Sicht der Landschaftsmodellierung. *In: Steinhardt, U. (Hrsg.): Regionalisierung in der Landschaftsökologie. Stuttgart, S. 19-42*
- WILHELM, F. (1997): Hydrogeographie. Braunschweig, 225 S.
- WOOD, E.F. (1995): Heterogeneity and scaling land-atmospheric water and energy fluxes in climate systems. In Space and time scale variability and Interdependencies in hydrogeological processes. International hydrological series, Cambridge
- VETTER, L. (1989): Evaluierung und Entwicklung statistischer Verfahren zur Auswahl von Repräsentativen Untersuchungsobjekten für toxikologische Problemstellungen. Dissertation am Geographischen Institut der Universität Kiel. Kiel, 162 S.
- VOGELANG, D. (1998): Grundwasser. Berlin, 264 S.
- ZÖLITZ-MÖLLER, R. & KLEIN, A. (1994): Cluster-Analyse an Daten aus der europaweiten Luftqualitätsüberwachung. *In: Schröder, W. et al. (Hrsg.): Neuere statistische Verfahren in der Geoökologie. Braunschweig, S. 239-254*
- ZIMMERMANN, D.; PAVLIK, C.; RUGGLES, A. & ARMSTRONG, M.P. (1999): An Experimental Comparison of Ordinary and Universal Kriging and Inverse Distance Weighting. *In: Mathematical Geology, 31, 4, S. 375-390*

Rechtsquellen

- AMT FÜR AMTLICHE VERÖFFENTLICHUNGEN DER EUROPÄSCHEN GEMEINSCHAFTEN (1997): Konsolidierte Fassung des Vertrages zur Gründung der Europäischen Gemeinschaft (EUV). Luxemburg, 168 S.
- EUROPÄISCHES PARLAMENT UND RAT (1976): Richtlinie 76/464/EWG. *In: Amtsblatt der Europäischen Gemeinschaften L129/23, 44 S.*
- EUROPÄISCHES PARLAMENT UND RAT (1998): Richtlinie 98/83/EG. *In: Amtsblatt der Europäischen Gemeinschaften L330/32, 23 S.*
- EUROPÄISCHES PARLAMENT UND RAT (2000): Richtlinie 2000/60/EG. *In: Amtsblatt der Europäischen Gemeinschaften L327/1, 72 S.*
- PARLAMENTARISCHER RAT DER BUNDESREPUBLIK DEUTSCHLAND (1996): Gesetz zur Ordnung des Wasserhaushalts. *In: Bundesgesetzblatt (BGBl. I), S. 1696-1733*
- PARLAMENTARISCHER RAT DER BUNDESREPUBLIK DEUTSCHLAND (2000): Grundgesetz für die Bundesrepublik Deutschland vom 23. Mai 1949 (BGBl. I), zuletzt geändert durch Gesetz vom 19. Dezember 2000. *In: Bundesgesetzblatt (BGBl. I), S. 1755-1789*
- PARLAMENTARISCHER RAT DER BUNDESREPUBLIK DEUTSCHLAND (2001): Verordnung zur Novellierung der Trinkwasserverordnung. *In: Bundesgesetzblatt (BGBl. I), S. 959-980*

Inhaltsverzeichnis

Teil 2 – Anhang

	Seite
Anhang I	
Tabelle A: Chronologische Entwicklung der EU-WRRL	1
Tabelle B: Wichtige Fristen zur Umsetzung von Teilaspekten der EU-WRRL	2
Anhang II	
Anlage A: Strukturanalyse	3-5
Anlage B: Variogrammmodellfunktionen	6-7
Anlage C: Räumliche Schätzung	8-10
Anhang III	
Tabellen A: Zeitvergleich statistischer Basisparameter	
1 – ohne Ausschluss der Messwerte mit Bestimmungsgrenzenproblemproblematik	11-18
2 – mit Ausschluss der Messwerte mit Bestimmungsgrenzenproblemproblematik	19-26
Tabellen B: Vergleich statistischer Basisparameter verschiedener räumlicher Bezugssysteme	
1 – Einzugsgebiete	27-28
2 – Grundwasserschutzfunktion	29-31
3 – Regierungsbezirke	32-33
4 – Geogene Grundwasserbeschaffenheit	33-35
5 – Landnutzung	36-37
Tabellen C: Vergleich statistischer Basisparameter zu verschiedenen Clusterlösungen Berücksichtigung aller Parameter	
1 – 1 direkte Ward-Clusterung	37-42
1 – 2 Ward-Clusterung nach Eliminierung	43-48
1 – 3 K-means	49-54
F- und T-Werte der gebildeten Cluster	
2 – 1 direkte Ward-Clusterung	54-55
2 – 2 Ward-Clusterung nach Eliminierung	56-57
2 – 3 K-means	57-58
Tabellen D: Vergleich statistischer Basisparameter zu verschiedenen Clusterlösungen Berücksichtigung anthropogener Parameter	
1 – 1 Ward-Clusterung nach Eliminierung	59-65
1 – 2 K-means	66-72

F- und T-Werte der gebildeten Cluster	
2 – 1 Ward-Clusterung nach Eliminierung	73-74
2 – 2 K-means	75-76

Anhang IV

Diagramme A: Clusterungen auf Grundlage aller Parameter

1 – direkte Ward-Clusterung	76-77
2 – Ward-Clusterung nach Eliminierung	78-79
3 – K-means	80-81

Diagramme B: Clusterungen auf Grundlage der anthropogenen Parameter

1 – Ward-Clusterung nach Eliminierung	82-83
2 – K-means	84-85

Anhang V

Variogramme A: Gesamtfläche

1 – omnidirektional	86-91
2 – gerichtet	92-97

Variogramme B: Einzugsgebiet Enz 98-103

Variogramme C: Vergleich Schrittweite 104

Variogramme D: Vergleich Transformationen 105

Anhang VI

Karten A: Clusterergebnisse 106-115

Karten B: Kriging und IDW Gesamtfläche 116-126

Karten C: Kriging und IDW Einzugsgebiet Enz 127-136

Karten D: Vergleich Einzugsgebiet Enz – Gesamtfläche 137-139

Karten E: Einfluss von Transformation und Schrittweite 140-145

Karten F: Räumliche Bezugssysteme 146-150

Anhang I

Tabelle A: Chronologische Entwicklung der EU-WRRL

Datum	Vorgang	Inhalte
15.6.1994	Vorschlag der Kommission für eine Richtlinie des Rates über die ökologische Qualität von Gewässern	<ul style="list-style-type: none"> • Qualitätsziele für Gewässer • Ablösung der qualitätsbezogenen geltenden EU-Richtlinien
21.02.1996	Mitteilung der Kommission der Europäischen Gemeinschaft an den Rat und das Europäische Parlament über die Wasserpolitik der Europäischen Union	<ul style="list-style-type: none"> • Darlegung der (zukünftigen) Grundsätze der Wasserpolitik • Vorstellung der Grundzüge einer zukünftigen Rahmenrichtlinie über die Wasserressourcen
26.02.1997	Vorschlag der Kommission für eine Richtlinie des Rates zur Schaffung eines Ordnungsrahmens für Maßnahmen der Gemeinschaft im Bereich der Wasserpolitik	<ul style="list-style-type: none"> • Festlegung abstrakter Gewässerschutzziele • Bewirtschaftung nach Flusseinzugsgebieten • Maßnahmenprogramme • Öffentlichkeitsbeteiligung • Ablösung der geltenden qualitätsbezogenen EU-Richtlinien
16.06.1998	"Political Agreement" des Rates	<ul style="list-style-type: none"> • Kompromiss der Mitgliedstaaten Weiterentwicklung des Kommissionsvorschlags
22.10.1999	Gemeinsamer Standpunkt des Rates	<ul style="list-style-type: none"> • Kompromiss der Mitgliedstaaten, der dem Europäischen Parlament lediglich in drei Fragen entgegenkommt
09.02.2000	Vorschlag der Kommission für eine Liste prioritärer Stoffe	<ul style="list-style-type: none"> • Liste von 32 prioritären Stoffen nach Art. 16 des WRRL-Entwurfs (Gemeinsamer Standpunkt)
23.05.2000	Einleitung des Vermittlungsverfahrens	<ul style="list-style-type: none"> • Suche nach Kompromissen zwischen Rat und EP
29.06.2000	Ergebnis des Vermittlungsverfahrens	<ul style="list-style-type: none"> • Aufnahme von besonders gefährlichen Stoffen i.S.v. OSPAR mit dem Ziel, Werte nahe Null zu erreichen. • Verbesserung der Grundwasserregelungen • Konkretisierung der Verpflichtung, kostendeckende Wasserpreise einzuführen • Verkürzung der Fristen
23.10.2000	Verabschiedung der WRRL vom Rat und Parlament der EU	<ul style="list-style-type: none"> • Keine Änderungen
22.12.2000	Inkrafttreten der WRRL	<ul style="list-style-type: none"> • Keine Änderungen

Anhang I

Tabelle B: Wichtige Fristen zur Umsetzung von Teilaspekten der EU-WRRL
(LAWA 2004)

Frist	Prozess	Art. (Abs.) der WRRL
	Rechtliche Umsetzung	
12/2003	Erlass der Rechtsvorschriften	24
12/2003	Bestimmung der zuständigen Behörden	3 (7)
06/2004	Benennung der zuständigen Behörden gegenüber der EG	3 (8)
	Bestandsaufnahme	
12/2004	Analyse der Merkmale eines Flusseinzugsgebietes	5 (1)
"	Verzeichnis der Schutzgebiete	6 (1)
"	Signifikante Belastungen erfassen und beurteilen	5 (1)
"	Wirtschaftliche Analyse der Wassernutzungen	"
12/2013 bzw. 2019	Fortschreibung der Bestandsaufnahme	5 (2)
	EU-Regelungen Grundwasser	
12/2002	Benennung von Maßnahmen zum GW-Schutz durch EG	17 (1)
"	Kriterien für den chemischen Zustand und Trendumkehr durch EG	17 (2)
12/2005	Kriterien auf nationaler Basis (falls erforderlich)	17 (4)
	Monitoringprogramme	
12/2006	Aufstellen und in Betrieb nehmen	8
	Öffentlichkeitsbeteiligung	
12/2006	Veröffentlichung des Zeitplans und des Arbeitsprogramms	14 (1a)
12/2007	Veröffentlichung der wichtigsten Wasserbewirtschaftungsfragen	14 (1b)
12/2008	Veröffentlichung der Entwürfe des Bewirtschaftungsplans	14 (1c)
	Bewirtschaftungsplan und Maßnahmenprogramme	
12/2009	Ausstellung und Veröffentlichung des Bewirtschaftungsplans	13 (6)
"	Aufstellung eines Maßnahmenprogramms	11 (7)
12/2012	Umsetzung der Maßnahmen	"
12/2015	Fortschreibung des Bewirtschaftungsplans	13 (7)
"	Fortschreibung der Maßnahmenprogramme	11 (8)
	Zielerreichung	
12/2015	Guter Zustand in den Oberflächengewässern	4 (1a)
"	Guter Zustand im Grundwasser	4 (1b)
"	Erfüllung der Ziele in Schutzgebieten	4 (1c)
12/2021 bzw. 2027	Fristverlängerungen für Zielerreichung	4 (4)
	Prioritätenliste "Gefährliche Stoffe"	
12/2002	Vorschlag von Grenzwerten für Emissionen und Immissionen	16 (8)
12/2004	Fortschreibung der Prioritätenliste	16 (4)
20 Jahre	Auslaufen des Einbringens prioritär gefährlicher Stoffe	16 (6)
	Kostendeckende Wasserpreise	
12/2010	Einführung abgeschlossen	9 (1)

Anhang II

Anlage A: Strukturanalyse

Die Strukturanalyse mittels Variogramm setzt zunächst mehrere Grundannahmen voraus. Die **Homogenitätsannahme** basiert auf der Vorstellung, dass mit einer an einem definierten Ort x_i entnommenen Probe noch keinerlei statistische Aussagen gemacht werden kann. Man nimmt daher an, dass sich alle Zufallsfunktionen Z_i an einem Punkt x_i in einem Raum D gleich verhalten. Es wird davon ausgegangen, dass in jedem Punkt x_i eine Verteilungsfunktion $p(Z)$ existiert, aus der die Probe z_i zufällig entnommen wurde. Eine Untersuchung von $p(Z)$ ist nicht möglich, daher wird angenommen, dass sich die durch k Proben empirisch ermittelte (geschätzte) Verteilungsfunktion $p(z)$ und die tatsächliche Verteilungsfunktion $p(Z)$ gleichen. Damit lassen sich die statistischen Eigenschaften der Zufallsfunktion beschreiben. Die Kovarianz ($Cov(X, Y)$) zweier Zufallsvariablen X und Y ist durch

$$\sigma_{XY}^2 = E[(X - E[X])(X - E[Y])] \quad (1)$$

mit σ = Kovarianz
 X und Y = Zufallsvariablen
 E = Erwartungswert

und der Korrelationskoeffizient durch

$$\rho_{XY} = Cov(X, Y) / \sigma_X \sigma_Y \quad (2)$$

definiert (SCHAFMEISTER 1999). Werden nun die räumlich voneinander getrennten Variablen X und Y an den Orten x_i und x_j durch die Variable Z ersetzt und die Strecke zwischen den Orten durch den Vektor h beschrieben, so lässt sich die Kovarianz σ^2 als

$$\sigma^2(h) = E[(Z(x) - E[Z(x)])(Z(x+h) - E[Z(x+h)])] \quad (3)$$

schreiben. Mit den Varianzen

$$\sigma_1^2 = E[(Z(x) - E[Z(x)])^2] \quad \text{und} \quad \sigma_2^2 = E[(Z(x+h) - E[Z(x+h)])^2] \quad (4)(5)$$

wird dann die Autokorrelation ρ zwischen $Z(x)$ und $Z(x+h)$ zu

$$\rho(h) = \sigma^2(h) / \sigma_1 \sigma_2 \quad (6)$$

Stationaritätsannahme – Sofern die Zufallsfunktion im Untersuchungsraum D unveränderlich ist, wird die Zufallsvariable Z als stationär bezeichnet. Schränkt man die Stationarität der Zufallsfunktion ein, so kann man mittels des Variogramms das autokorrelative Verhalten der Variablen in Abhängigkeit vom räumlichen Abstand der Beobachtungspunkte beschreiben. Man geht hierzu von der so genannten Stationarität zweiter Ordnung einer Zufallsfunktion aus, die gegeben ist, wenn der Mittelwert m und die Standardabweichung der Verteilung für alle x im Raum gleich bleiben:

$$m = E[Z(x)] \quad \forall x \quad (7)$$

$$\sigma^2(h) = E[(Z(x) - m)(Z(x+h) - m)] \quad (8)$$

Die so genannte **Intrinsische Hypothese** gilt, wenn zusätzlich der Erwartungswert der Differenzen zwischen $Z(x+h)$ und $Z(x)$ gleich Null ist und wenn für alle Abstandsvektoren h das Inkrement $Z(x+h) - Z(x)$ eine endliche Varianz unabhängig von x aufweist (AKIN & SIEMES 1988). Letztere Bedingung führt nach SCHAFMEISTER (1999) häufig zu einer nur eingeschränkten Gültigkeit der Intrinsischen Hypothese, da oft eine Drift vorliegt, eine lokale Abhängigkeit des Mittelwertes von x .

Sofern ein experimentelles Variogramm scheinbar einen Schwellenwert erreicht, aber mit zunehmendem h nochmals einen starken Anstieg zeigt, ist davon auszugehen, dass eine so genannte **Drift** vorliegt. Die Forderung nach Stationarität der ortsabhängigen Variablen ist dann nicht mehr gegeben, der erwartete Wert der Differenzen der Variablenpaare in h ist nicht mehr Null, sondern vom Abstand abhängig. Eine – auch als lokaler Trend bezeichnete – Drift lässt sich nach AKIN & SIEMES (1989) durch die Berechnung der mittleren Differenz $D(h)$ der Probenwerte an den Stellen x_i und $x_i + h$ in Abhängigkeit von h als Vektor einer stets gleichen Richtung für die Differenzenbildung zwischen den Probenpaaren berechnen:

$$D(h) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{n(h)} \frac{[Z(x_i + h) - Z(x_i)]}{n(h)} \quad (9)$$

Werden die Ergebnisse grafisch dargestellt, so zeigt sich bei einer Drift eine systematische Zu- oder Abnahme von $D(h)$ mit zunehmender Messpunktdistanz h . Im anderen Falle streuen die $D(h)$ -Werte um Null. Sofern eine Drift festgestellt wird, schließen sich für den nächsten Schritt der geostatistischen Analyse – dem Kriging – bestimmte Verfahren aus. Um dies zu umgehen, kann bei entsprechend guter Datenlage das Untersuchungsgebiet in mehrere quasistationäre Bereiche oder Domains unterteilt werden, für die "relative" Variogramme erstellt werden.

Zeigt ein Variogramm in alle Raumrichtungen gleiche oder sehr ähnliche Ausprägungen, so wird es als isotrop bezeichnet. Allerdings unterscheidet man mehrere Arten der Anisotropie, die durch Errechnung von Variogrammen in mehrere Richtungen erkannt werden kann: Die sogenannte geometrische **Anisotropie** liegt vor, sofern die Variogramme unterschiedlicher Richtungen zwar den gleichen sill, aber verschiedene Reichweiten aufweisen. Durch Koordinatentransformation können derartige Anisotropien technisch berücksichtigt werden. Kommen zu den unterschiedlichen ranges zusätzlich verschiedene Schwellenwerte, so spricht man von zonalen Anisotropien. Diese werden durch Anpassung additiv geschachtelter Variogrammmodelle berücksichtigt. Üblicherweise wird der nugget-effect als isotrope Komponente betrachtet; sollte dies nicht der Fall sein, so ist er ebenfalls als richtungsabhängige Komponente zu behandeln.

Zeigt ein experimentelles Variogramm eine gewisse Periodizität in der Form, dass zunächst ein Maximum erreicht wird und mit zunehmender Probedistanz h ein Abfall erfolgt, bevor sich wiederum ein Anstieg anschließt, so liegt ein so genannter **hole-effect** vor. Die Merkmalsausprägungen an den Messpunkten unterscheiden sich dann in begrenzten Teilgebieten deutlich von denen in der Gesamtfläche. Der Maximalwert für $\gamma(h)$ liegt dann über dem zu erwartenden Schwellenwert. In derartigen Fällen kann entweder eine Anpassung an Variogrammmodelle, die Sinus- oder Kosinusfunktionsglieder enthalten erfolgen oder die ausschließliche Verwendung des Variogramms für kurze Distanzen.

Anhang II

Anlage B: Variogrammodellfunktionen

Die gängigen Variogrammodellfunktionen lassen sich grob in solche mit und ohne sill unterteilen. Zu den erstgenannten gehört das **sphärische Modell**, das im Ursprung linear ansteigt und allmählich auf den sill einschwenkt. Nach AKIN & SIEMES (1988) erreicht die gedachte Verlängerung des linearen Anstiegs den sill bei etwa 2/3 der Reichweite. Das sphärische Modell ist definiert durch

$$\gamma(h) = C \left[\frac{3}{2} \times \frac{|h|}{a} - \frac{1}{2} \times \left(\frac{|h|}{a} \right)^3 \right] \quad \text{für } |h| \leq a \quad (10)$$

$$\gamma(h) = C \quad \text{für } |h| > a \quad (11)$$

Ebenfalls zu den transitiven, einen Schwellenwert erreichenden Modellen gehört das **exponentielle Modell**. Es folgt – wie der Name erwarten lässt – einer Exponentialfunktion, zeigt einen flacheren Verlauf als das sphärische Modell und nähert sich dem sill nur asymptotisch. Üblicherweise wird daher mit a lediglich ein Drittel der effektiven Reichweite erfasst, bei der 95% des Schwellenwertes erreicht sind. Die mathematische Formulierung dieses Modells lautet:

$$\gamma(h) = C \left[1 - \exp\left(-\frac{h}{a}\right) \right] \quad (12)$$

Ein weiteres Modell dieses Typs ist das **Gauß'sche Modell**. Definiert durch

$$\gamma(h) = C \left[1 - \exp\left(-\frac{|h|^2}{a^2}\right) \right] \quad (13)$$

verläuft das Variogramm nahe dem Ursprung parabolisch und nähert sich dem sill schneller als das exponentielle Modell. Der zunächst flache Anstieg zeigt eine sehr große Ähnlichkeit der Merkmalsausprägungen von in geringer Distanz liegender Messstellen.

Die folgenden Modelle erreichen im Gegensatz zu den zuvor beschriebenen keinen sill. Das **lineare Modell** steigt ohne jegliche Abflachung an, die Konstante ϖ bestimmt die Neigung der Geraden:

$$\gamma(h) = \varpi \times |h|^p \quad (14)$$

Dies ist jedoch ein Sonderfall des **Power-** oder **Potenz-Modells**, bei dem h mit p exponenziert wird. Ist $p > 1$, steigt das Variogramm zunächst flacher an, bei $p < 1$ steigt es nahe dem Ursprung steil an und flacht zunehmend ab.

Letztlich ist das **logarithmische Modell** zu nennen, bei dem die so genannte absolute Dispersionskonstante 3α die Neigung darstellt. Die mathematische Formulierung lautet:

$$\gamma(h) = 3\alpha \times \log|h| \quad (15)$$

In jüngerer Vergangenheit wurden weitere Modelle entwickelt und sowohl theoretisch als auch empirisch belegt. Da diese Modelle jedoch meist nur für seltene Spezialzwecke eingesetzt werden, wird hier auf eine Darstellung verzichtet.

Anhang II

Anlage C: Räumliche Schätzung

Zu Minimierung der Schätzvarianz unter der Bedingung $\lambda_i = 1$ wird der Lagrangemultiplikator μ eingeführt. Die angestrebte Minimierung erfolgt nach dem **Lagrange-Prinzip** unter Bildung partieller Ableitungen, die gleich Null gesetzt werden. Man erhält das (lineare) Kriging-Gleichungssystem mit $n + 1$ Gleichungen:

$$\sum_{j=1}^N \lambda_j \gamma(x_i - x_j) + \mu = \gamma(x_i - x_0) \quad (16)$$

$$\sum_{j=1}^N \lambda_j = 1$$

mit $i, j = 1, \dots, n$

Neben dem vorgestellten Ordinary Kriging existiert eine Reihe verschiedener **Kriging-Verfahren**, die aus unterschiedlichen Fragestellungen und Adaptierungen der Grundidee des Kriging hervorgegangen sind. Die wichtigsten Verfahren sollen hier lediglich mit Verweis auf einige Autoren genannt werden:

(A) **Lineare Verfahren:**

- Ordinary Kriging, „normales“ Kriging, wie oben hergeleitet, Mittelwert der Variablen der Grundgesamtheit unbekannt, AKIN & SIEMES (1988)
- Simple Kriging, „einfaches Kriging“, Mittelwert der Variablen der Grundgesamtheit bekannt – im naturwissenschaftlichen Zusammenhang kaum möglich, daher meist nicht geeignet, AKIN & SIEMES (1988), BURROUGH & McDONELL (2000)
- Random Kriging, „Zufallskriging“, AKIN & SIEMES (1988)

(B) **Nichtlineare Verfahren:**

- Universal Kriging, Einsatz bei feststellbarer Drift (instationären Variablen), AKIN & SIEMES (1988), SCHAFMEISTER (1999)
- Kriging mit externer Drift, SCHAFMEISTER (1999) Bayes-Markow Updating (BMU), BARDOSSY et al. (1996)

(C) **Weitere Verfahren:**

- Indikator Kriging (IK), BARDOSSY et al. (1996) Stratified Kriging, BURROUGH & McDONELL (2000)

- Raum Zeit Kriging, SCHAFMEISTER (1999)
- Simple Updating Kriging, GRIMM-STRELE & ROMETSCH (2001) Co-Kriging, SCHAFMEISTER (1999) AKIN & SIEMES (1988) Fuzzy-Kriging, PIOTROWSKI et al. (1996)

Dem **Co-Kriging** kann für einige Fragestellungen eine besondere Eignung unterstellt werden. Die Grundannahme des Verfahrens ist, dass regionalisierte Variablen nicht nur räumlich autokorrelieren, sondern auch untereinander korreliert sein können. So kann ein Variablenwert U^* an einem beliebigen Punkt x nicht nur aus Probenwerten des gleichen Parameters U geschätzt werden, sondern auch unter Zuhilfenahme von Probenwerten anderer, korrelierter Variablen V errechnet werden. Der Vorteil dieses Verfahrens ist darin zu sehen, dass die Interpolationsergebnisse einer unterbeprobten Variable – d.h. einer Variable, für die Merkmalsausprägungen an weniger Messpunkten bekannt sind als für andere Variablen – deutlich verbessert werden können.

Die Lösung des Co-Kriging-Gleichungssystems basiert auf der allgemeinen Definition der Kreuz-Semivarianz $\gamma_{UV}(h)$ für jedes Variablenpaar U und V (Kreuzvariogramm)

$$\gamma_{UV}(h) = \frac{1}{2} E\{[U(x+h) - U(x)][V(x+h) - V(x)]\} \quad (17)$$

sofern die Intrinsische Hypothese gilt (vgl. SCHAFMEISTER (1999)). Das experimentelle Kreuzvariogramm errechnet sich nach

$$\gamma_{UV}(h) = \frac{1}{2} N(h) \sum_{i=1}^{N(h)} [U(x_i) - U(x_i+h)][V(x_i) - V(x_i+h)] \quad (18)$$

aus den Messwerten. Die Minimierung der Schätzvarianz ist wiederum Ziel des Co-Kriging-Gleichungssystem, ähnlich der Formulierung des einfachen KGS lässt es sich wie folgt formulieren:

$$\sum_i^n a_i Cov\{U_i U_j\} + \sum_i^m b_i Cov\{V_i U_j\} + \mu_1 = Cov\{U_0 U_j\} \text{ für } j = 1, n \quad (19)$$

$$\sum_i^n a_i Cov\{U_i V_j\} + \sum_i^m b_i Cov\{V_i V_j\} + \mu_2 = Cov\{U_0 V_j\} \text{ für } j = 1, m$$

$$\sum_i^n a_i = 1$$

$$\sum_j^m b_j = 0$$

Daraus resultiert ein gegenüber dem Ordinary Kriging deutlich höherer Rechenaufwand, der aber durch die fortschreitende Entwicklung der Computertechnologie zunehmend leichter realisierbar ist. Gleichfalls ist es notwendig, zur Durchführung eines multivariaten Co-Krigings von n Variablen auch n Variogramme anzupassen und zusätzlich $\frac{n(n-1)}{2}$ Kreuzvariogramme zu erstellen, was einen deutlichen Mehraufwand gegenüber dem Ordinary Kriging bedeutet.

Anhang III: Tabellen A 1

Zeitvergleich statistischer Basisparameter aller zur Verfügung stehenden chemischen Parameter aller Messtellen
ohne Ausschluss der hinsichtlich der Bestimmungsgrenze problematischen Werte

LF	1994	1995	1996	1997	1998	Gesamt
N	3316	3519	3447	3858	3850	17990
Mittelwert	73,1	73,3	75,7	75,8	75,8	74,8
Median	71,6	72,3	74,0	73,9	74,1	73,2
Standardabweichung	35,4	34,4	34,6	35,9	35,8	35,2
Schiefe	2,2	2,3	2,5	2,2	2,3	2,3
Standardfehler der Schiefe	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Kurtosis	20,8	26,4	25,8	19,5	21,9	22,6
Standardfehler der Kurtosis	0,1	0,1	0,1	0,1	0,1	0,0
Spannweite	600,5	619,6	629,1	614,9	622,9	630,9
Minimum	2,5	2,4	2,9	1,1	3,1	1,1
Maximum	603,0	622,0	632,0	616,0	626,0	632,0
Perzentile						
1	4,5	4,5	4,9	4,6	4,6	4,6
5	11,4	11,4	18,2	16,1	15,4	13,5
25	56,8	57,7	60,0	59,4	59,0	58,7
50	71,6	72,3	74,0	73,9	74,1	73,2
75	87,6	87,2	89,5	90,2	90,1	88,9
95	126,8	124,2	126,0	128,4	128,9	127,0
99	188,6	179,0	186,1	195,0	193,3	188,9

pH	1994	1995	1996	1997	1998	Gesamt
N	3319	3524	3454	3860	3857	18014
Mittelwert	7,1	7,1	7,1	7,1	7,1	7,1
Median	7,2	7,2	7,2	7,2	7,2	7,2
Standardabweichung	0,5	0,4	0,4	0,4	0,4	0,4
Schiefe	-2,2	-2,1	-2,0	-2,0	-1,7	-2,0
Standardfehler der Schiefe	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Kurtosis	9,8	9,3	8,9	8,3	7,1	9,0
Standardfehler der Kurtosis	0,1	0,1	0,1	0,1	0,1	0,0
Spannweite	5,2	5,3	4,9	4,8	5,0	5,9
Minimum	3,9	4,0	4,3	4,3	4,8	3,9
Maximum	9,1	9,3	9,1	9,1	9,8	9,8
Perzentile						
1	5,2	5,2	5,5	5,5	5,6	5,4
5	6,2	6,2	6,4	6,4	6,3	6,3
25	7,0	7,0	7,1	7,0	7,0	7,0
50	7,2	7,2	7,2	7,2	7,2	7,2
75	7,3	7,3	7,3	7,3	7,3	7,3
95	7,6	7,6	7,6	7,6	7,6	7,6
99	8,0	7,9	7,9	7,8	7,9	7,9

Na	1994	1995	1996	1997	1998	Gesamt
N	1710	314	116	346	187	2673
Mittelwert	16,56	9,04	4,59	11,35	5,78	13,73
Median	9,70	3,30	3,00	9,30	3,40	7,90
Standardabweichung	25,96	19,89	4,11	13,03	7,28	22,81
Schiefe	8,95	5,52	1,76	6,51	4,68	9,26
Standardfehler der Schiefe	0,06	0,14	0,22	0,13	0,18	0,05
Kurtosis	152,48	37,63	2,83	71,43	31,79	171,32
Standardfehler der Kurtosis	0,12	0,27	0,45	0,26	0,35	0,09
Spannweite	589,40	188,40	19,70	173,40	67,30	589,40
Minimum	0,60	0,60	0,60	0,60	0,70	0,60
Maximum	590,00	189,00	20,30	174,00	68,00	590,00
Perzentile						
1	0,90	0,60	0,60	0,70	0,70	0,70
5	1,90	0,80	0,80	1,00	0,80	1,20
25	5,18	2,00	2,20	3,40	2,10	3,50
50	9,70	3,30	3,00	9,30	3,40	7,90
75	17,90	6,83	5,50	14,45	7,00	14,90
95	53,95	28,85	13,60	31,79	15,80	44,00
99	110,00	101,18	20,03	51,39	43,36	101,03

Anhang III: Tabellen A 1

Zeitvergleich statistischer Basisparameter aller zur Verfügung stehenden chemischen Parameter aller Messtellen ohne Ausschluss der hinsichtlich der Bestimmungsgrenze problematischen Werte

K	1994	1995	1996	1997	1998	Gesamt
N	1651	314	116	346	187	2614
Mittelwert	3,38	1,51	1,49	3,01	1,65	2,90
Median	1,80	1,10	1,10	1,80	1,30	1,70
Standardabweichung	6,50	1,50	1,24	4,08	1,63	5,48
Schiefe	12,46	3,59	3,38	6,10	4,74	13,73
Standardfehler der Schiefe	0,06	0,14	0,22	0,13	0,18	0,05
Kurtosis	256,66	18,78	16,14	55,70	29,37	329,12
Standardfehler der Kurtosis	0,12	0,27	0,45	0,26	0,35	0,10
Spannweite	165,90	12,20	8,70	49,40	14,30	165,90
Minimum	0,10	0,10	0,30	0,30	0,30	0,10
Maximum	166,00	12,30	9,00	49,70	14,60	166,00
Perzentile						
1	0,20	0,20	0,32	0,50	0,30	0,20
5	0,40	0,38	0,50	0,60	0,50	0,46
25	1,10	0,60	0,70	1,20	0,80	0,90
50	1,80	1,10	1,10	1,80	1,30	1,70
75	3,57	1,73	1,80	3,21	2,00	3,00
95	10,14	4,43	3,24	9,17	3,66	8,97
99	28,10	10,09	8,80	20,75	10,90	22,89

Ca	1994	1995	1996	1997	1998	Gesamt
N	2386	1666	636	349	475	5512
Mittelwert	117,17	112,54	110,36	76,98	104,65	111,36
Median	115,00	112,00	116,00	87,00	110,00	113,00
Standardabweichung	65,57	62,85	55,88	58,34	73,64	64,72
Schiefe	2,35	1,87	-0,07	0,01	1,13	1,72
Standardfehler der Schiefe	0,05	0,06	0,10	0,13	0,11	0,03
Kurtosis	14,93	11,95	0,64	-1,48	4,69	11,04
Standardfehler der Kurtosis	0,10	0,12	0,19	0,26	0,22	0,07
Spannweite	736,70	634,00	308,10	191,20	547,40	737,00
Minimum	1,30	1,00	2,10	1,80	1,60	1,00
Maximum	738,00	635,00	310,20	193,00	549,00	738,00
Perzentile						
1	3,39	2,50	2,34	2,10	2,38	2,60
5	10,40	5,34	4,70	2,75	3,48	5,00
25	89,00	83,95	86,93	10,00	60,00	81,25
50	115,00	112,00	116,00	87,00	110,00	113,00
75	140,38	139,38	139,75	127,50	140,00	139,00
95	206,13	199,79	194,80	162,50	212,40	200,00
99	360,13	309,84	264,26	185,00	356,72	312,64

Mg	1994	1995	1996	1997	1998	Gesamt
N	2320	1666	636	349	475	5446
Mittelwert	20,55	18,41	17,47	10,57	19,32	18,79
Median	17,70	16,20	16,60	8,60	17,20	16,30
Standardabweichung	15,43	13,73	12,53	9,22	16,54	14,58
Schiefe	1,69	1,02	0,73	1,25	1,04	1,41
Standardfehler der Schiefe	0,05	0,06	0,10	0,13	0,11	0,03
Kurtosis	6,41	1,70	0,29	1,83	1,36	4,47
Standardfehler der Kurtosis	0,10	0,12	0,19	0,26	0,22	0,07
Spannweite	147,80	101,50	62,60	53,70	93,70	147,90
Minimum	0,20	0,10	0,40	0,30	0,30	0,10
Maximum	148,00	101,60	63,00	54,00	94,00	148,00
Perzentile						
1	1,20	0,87	0,90	0,50	0,40	0,80
5	2,60	1,20	1,20	0,95	1,00	1,40
25	8,90	7,38	7,13	2,80	3,90	7,30
50	17,70	16,20	16,60	8,60	17,20	16,30
75	29,00	27,20	25,75	15,75	29,60	27,60
95	47,98	42,00	40,24	28,30	49,90	44,00
99	69,60	60,30	55,38	40,05	69,48	65,00

Anhang III: Tabellen A 1

Zeitvergleich statistischer Basisparameter aller zur Verfügung stehenden chemischen Parameter aller Messtellen
ohne Ausschluss der hinsichtlich der Bestimmungsgrenze problematischen Werte

Pb	1994	1995	1996	1997	1998	Gesamt
N	277	307	199	341	1622	2746
Mittelwert	0,0012	0,0010	0,0012	0,0015	0,0011	0,0012
Median	0,0001	0,0001	0,0001	0,0005	0,0005	0,0005
Standardabweichung	0,0054	0,0042	0,0048	0,0047	0,0035	0,0040
Schiefe	6,9137	8,7847	7,1432	6,8377	13,5429	9,9056
Standardfehler der Schiefe	0,1464	0,1391	0,1723	0,1321	0,0608	0,0467
Kurtosis	47,6578	81,4637	52,6166	47,2246	248,9939	121,7753
Standardfehler der Kurtosis	0,2917	0,2774	0,3430	0,2634	0,1215	0,0934
Spannweite	0,0412	0,0411	0,0389	0,0375	0,0835	0,0839
Minimum	0,0001	0,0001	0,0001	0,0005	0,0005	0,0001
Maximum	0,0413	0,0412	0,0390	0,0380	0,0840	0,0840
Perzentile						
1	0,0001	0,0001	0,0001	0,0005	0,0005	0,0001
5	0,0001	0,0001	0,0001	0,0005	0,0005	0,0001
25	0,0001	0,0001	0,0001	0,0005	0,0005	0,0005
50	0,0001	0,0001	0,0001	0,0005	0,0005	0,0005
75	0,0005	0,0005	0,0010	0,0006	0,0006	0,0006
95	0,0030	0,0030	0,0030	0,0049	0,0030	0,0030
99	0,0408	0,0379	0,0380	0,0356	0,0135	0,0174

As	1994	1995	1996	1997	1998	Gesamt
N	273	307	198	341	1620	2739
Mittelwert	0,0017	0,0018	0,0015	0,0017	0,0021	0,0019
Median	0,0005	0,0005	0,0005	0,0008	0,0010	0,0009
Standardabweichung	0,0053	0,0062	0,0053	0,0047	0,0051	0,0052
Schiefe	8,4068	9,4077	10,4350	12,1150	16,0762	13,3604
Standardfehler der Schiefe	0,1474	0,1391	0,1728	0,1321	0,0608	0,0468
Kurtosis	83,8281	101,2172	127,2573	180,6384	378,0467	259,9547
Standardfehler der Kurtosis	0,2938	0,2774	0,3439	0,2634	0,1215	0,0935
Spannweite	0,0617	0,0729	0,0679	0,0748	0,1418	0,1419
Minimum	0,0001	0,0001	0,0001	0,0002	0,0002	0,0001
Maximum	0,0618	0,0730	0,0680	0,0750	0,1420	0,1420
Perzentile						
1	0,0001	0,0001	0,0001	0,0002	0,0002	0,0001
5	0,0001	0,0001	0,0001	0,0002	0,0003	0,0001
25	0,0001	0,0002	0,0001	0,0003	0,0007	0,0005
50	0,0005	0,0005	0,0005	0,0008	0,0010	0,0009
75	0,0010	0,0010	0,0010	0,0015	0,0019	0,0017
95	0,0081	0,0090	0,0070	0,0061	0,0064	0,0066
99	0,0268	0,0187	0,0168	0,0167	0,0194	0,0183

Cd	1994	1995	1996	1997	1998	Gesamt
N	277	307	199	341	138	1262
Mittelwert	0,0001	0,0001	0,0001	0,0003	0,0002	0,0002
Median	0,0001	0,0001	0,0001	0,0002	0,0002	0,0001
Standardabweichung	0,0001	0,0001	0,0001	0,0005	0,0001	0,0003
Schiefe	3,5085	3,7407	3,2336	15,2102	2,1409	21,3847
Standardfehler der Schiefe	0,1464	0,1391	0,1723	0,1321	0,2063	0,0689
Kurtosis	13,0319	15,3382	11,2244	254,2117	4,4917	610,4421
Standardfehler der Kurtosis	0,2917	0,2774	0,3430	0,2634	0,4098	0,1376
Spannweite	0,0008	0,0008	0,0007	0,0083	0,0006	0,0083
Minimum	0,0001	0,0000	0,0001	0,0001	0,0001	0,0000
Maximum	0,0009	0,0009	0,0007	0,0083	0,0007	0,0083
Perzentile						
1	0,0001	0,0001	0,0001	0,0001	0,0001	0,0001
5	0,0001	0,0001	0,0001	0,0001	0,0001	0,0001
25	0,0001	0,0001	0,0001	0,0002	0,0002	0,0001
50	0,0001	0,0001	0,0001	0,0002	0,0002	0,0001
75	0,0001	0,0001	0,0001	0,0002	0,0002	0,0002
95	0,0005	0,0004	0,0005	0,0005	0,0005	0,0005
99	0,0008	0,0007	0,0007	0,0011	0,0006	0,0007

Anhang III: Tabellen A 1

Zeitvergleich statistischer Basisparameter aller zur Verfügung stehenden chemischen Parameter aller Messtellen
ohne Ausschluss der hinsichtlich der Bestimmungsgrenze problematischen Werte

NO3	1994	1995	1996	1997	1998	Gesamt
N	3261	3530	3462	3781	3770	17804
Mittelwert	31,23	31,41	33,35	32,75	32,01	32,17
Median	25,80	26,00	26,30	26,00	25,65	26,00
Standardabweichung	27,60	27,99	29,05	29,08	28,17	28,41
Schiefe	1,82	1,83	1,69	1,71	1,60	1,73
Standardfehler der Schiefe	0,04	0,04	0,04	0,04	0,04	0,02
Kurtosis	5,42	5,67	4,43	4,36	3,60	4,64
Standardfehler der Kurtosis	0,09	0,08	0,08	0,08	0,08	0,04
Spannweite	210,30	248,90	229,90	214,90	189,90	248,90
Minimum	0,10	0,10	0,10	0,10	0,10	0,10
Maximum	210,40	249,00	230,00	215,00	190,00	249,00
Perzentile						
1	0,10	0,10	0,20	0,40	0,40	0,30
5	0,60	0,50	0,50	0,50	0,50	0,50
25	11,00	10,90	12,00	11,30	11,00	11,20
50	25,80	26,00	26,30	26,00	25,65	26,00
75	43,00	43,00	45,63	44,85	44,00	44,00
95	83,98	85,00	88,00	89,36	86,13	86,10
99	132,30	133,00	136,11	137,34	137,00	133,99

SO4	1994	1995	1996	1997	1998	Gesamt
N	1729	315	117	346	187	2694
Mittelwert	80,92	26,89	22,63	35,45	34,39	63,00
Median	39,30	15,60	8,70	31,00	13,90	31,55
Standardabweichung	147,16	32,22	32,58	30,79	71,57	122,97
Schiefe	5,52	2,57	3,11	1,93	6,46	6,53
Standardfehler der Schiefe	0,06	0,14	0,22	0,13	0,18	0,05
Kurtosis	37,58	8,29	12,44	6,27	52,83	54,36
Standardfehler der Kurtosis	0,12	0,27	0,44	0,26	0,35	0,09
Spannweite	1489,30	213,30	213,40	222,10	716,00	1489,40
Minimum	0,70	0,70	0,60	1,90	2,00	0,60
Maximum	1490,00	214,00	214,00	224,00	718,00	1490,00
Perzentile						
1	3,00	0,72	0,62	2,20	2,09	2,20
5	5,50	2,68	2,19	3,00	2,92	3,70
25	20,00	6,40	4,20	11,23	5,10	13,80
50	39,30	15,60	8,70	31,00	13,90	31,55
75	83,45	35,00	28,65	48,63	37,80	63,05
95	264,00	86,12	77,35	91,61	121,20	197,10
99	868,80	170,94	202,59	159,65	512,08	719,10

Cl	1994	1995	1996	1997	1998	Gesamt
N	1717	315	117	346	187	2682
Mittelwert	34,24	9,79	11,16	25,68	13,94	27,84
Median	24,70	3,90	3,60	19,20	4,40	18,90
Standardabweichung	54,45	13,21	14,02	28,66	19,03	46,35
Schiefe	16,15	2,52	1,52	4,17	2,48	17,22
Standardfehler der Schiefe	0,06	0,14	0,22	0,13	0,18	0,05
Kurtosis	429,79	9,27	1,47	34,31	8,54	534,06
Standardfehler der Kurtosis	0,12	0,27	0,44	0,26	0,35	0,09
Spannweite	1619,90	103,70	59,50	319,30	122,30	1619,90
Minimum	0,10	0,30	0,90	0,70	0,70	0,10
Maximum	1620,00	104,00	60,40	320,00	123,00	1620,00
Perzentile						
1	0,72	0,40	0,92	0,80	0,79	0,70
5	2,30	0,70	1,10	1,24	1,00	1,20
25	11,15	1,80	1,65	4,05	1,60	5,60
50	24,70	3,90	3,60	19,20	4,40	18,90
75	42,00	11,00	17,70	38,08	21,40	37,00
95	96,00	38,42	41,96	69,72	45,50	82,91
99	190,82	55,30	59,61	122,12	105,40	162,19

Anhang III: Tabellen A 1

Zeitvergleich statistischer Basisparameter aller zur Verfügung stehenden chemischen Parameter aller Messtellen
ohne Ausschluss der hinsichtlich der Bestimmungsgrenze problematischen Werte

Trichlorethen	1994	1995	1996	1997	1998	Gesamt
N	1611	1623	53	249	1600	5136
Mittelwert	0,0155	0,0164	0,3412	0,0013	0,0152	0,0184
Median	0,0001	0,0001	0,0001	0,0001	0,0001	0,0001
Standardabweichung	0,2217	0,3061	2,4723	0,0105	0,3079	0,3708
Schiefe	20,2330	30,8874	7,2801	14,3337	28,6556	34,1398
Standardfehler der Schiefe	0,0610	0,0607	0,3274	0,1543	0,0612	0,0342
Kurtosis	446,6848	1055,2020	52,9997	216,4220	882,4258	1378,0591
Standardfehler der Kurtosis	0,1219	0,1214	0,6444	0,3074	0,1223	0,0683
Spannweite	5,8499	10,9999	17,9999	0,1599	10,2999	17,9999
Minimum	0,0001	0,0001	0,0001	0,0001	0,0001	0,0001
Maximum	5,8500	11,0000	18,0000	0,1600	10,3000	18,0000
Perzentile						
1	0,0001	0,0001	0,0001	0,0001	0,0001	0,0001
5	0,0001	0,0001	0,0001	0,0001	0,0001	0,0001
25	0,0001	0,0001	0,0001	0,0001	0,0001	0,0001
50	0,0001	0,0001	0,0001	0,0001	0,0001	0,0001
75	0,0003	0,0002	0,0010	0,0002	0,0002	0,0002
95	0,0060	0,0064	0,0135	0,0025	0,0036	0,0050
99	0,1688	0,1076	18,0000	0,0245	0,0777	0,0989

Tetrachlorethen	1994	1995	1996	1997	1998	Gesamt
N	1609	1623	53	249	1600	5134
Mittelwert	0,0236	0,0252	0,1221	0,0020	0,0293	0,0258
Median	0,0001	0,0001	0,0001	0,0001	0,0001	0,0001
Standardabweichung	0,4568	0,4393	0,7865	0,0097	0,4487	0,4421
Schiefe	27,8994	28,3551	7,1330	9,1778	25,5742	27,1489
Standardfehler der Schiefe	0,0610	0,0607	0,3274	0,1543	0,0612	0,0342
Kurtosis	788,9228	858,2846	51,4349	97,9029	719,3508	787,0466
Standardfehler der Kurtosis	0,1219	0,1214	0,6444	0,3074	0,1223	0,0683
Spannweite	13,5299	14,4999	5,6999	0,1199	13,9999	14,4999
Minimum	0,0001	0,0001	0,0001	0,0001	0,0001	0,0001
Maximum	13,5300	14,5000	5,7000	0,1200	14,0000	14,5000
Perzentile						
1	0,0001	0,0001	0,0001	0,0001	0,0001	0,0001
5	0,0001	0,0001	0,0001	0,0001	0,0001	0,0001
25	0,0001	0,0001	0,0001	0,0001	0,0001	0,0001
50	0,0001	0,0001	0,0001	0,0001	0,0001	0,0001
75	0,0004	0,0004	0,0010	0,0004	0,0003	0,0004
95	0,0207	0,0248	0,2320	0,0081	0,0208	0,0201
99	0,2234	0,2428	5,7000	0,0553	0,3120	0,2519

Atrazin	1994	1995	1996	1997	1998	Gesamt
N	2226	2272	1772	190	694	7154
Mittelwert	0,0488	0,0531	0,0492	0,0259	0,0375	0,0486
Median	0,0300	0,0300	0,0300	0,0200	0,0300	0,0300
Standardabweichung	0,1195	0,1156	0,1195	0,0287	0,0603	0,1123
Schiefe	14,6721	10,0404	12,8113	4,0753	8,5084	12,9328
Standardfehler der Schiefe	0,0519	0,0514	0,0581	0,1763	0,0928	0,0290
Kurtosis	322,8858	132,5947	217,3974	21,5659	91,8411	245,5567
Standardfehler der Kurtosis	0,1037	0,1027	0,1162	0,3509	0,1853	0,0579
Spannweite	3,3900	2,1900	2,6900	0,2200	0,8400	3,3900
Minimum	0,0100	0,0100	0,0100	0,0100	0,0100	0,0100
Maximum	3,4000	2,2000	2,7000	0,2300	0,8500	3,4000
Perzentile						
1	0,0100	0,0100	0,0100	0,0100	0,0100	0,0100
5	0,0100	0,0100	0,0100	0,0100	0,0100	0,0100
25	0,0100	0,0100	0,0100	0,0100	0,0100	0,0100
50	0,0300	0,0300	0,0300	0,0200	0,0300	0,0300
75	0,0500	0,0500	0,0500	0,0200	0,0500	0,0500
95	0,1200	0,1400	0,1200	0,0690	0,0900	0,1200
99	0,4473	0,5627	0,5181	0,1845	0,2510	0,4445

Anhang III: Tabellen A 1

Zeitvergleich statistischer Basisparameter aller zur Verfügung stehenden chemischen Parameter aller Messtellen
ohne Ausschluss der hinsichtlich der Bestimmungsgrenze problematischen Werte

Simazin	1994	1995	1996	1997	1998	Gesamt
N	2227	2271	1771	137	680	7086
Mittelwert	0,0295	0,0300	0,0285	0,0194	0,0257	0,0288
Median	0,0200	0,0200	0,0200	0,0200	0,0200	0,0200
Standardabweichung	0,0303	0,0334	0,0288	0,0116	0,0193	0,0299
Schiefe	8,2733	12,2784	7,9001	1,8862	3,3997	10,0770
Standardfehler der Schiefe	0,0519	0,0514	0,0582	0,2070	0,0937	0,0291
Kurtosis	118,8474	249,0906	105,0564	3,8394	33,0251	187,7113
Standardfehler der Kurtosis	0,1037	0,1027	0,1162	0,4112	0,1872	0,0582
Spannweite	0,5700	0,8700	0,5300	0,0600	0,2500	0,8700
Minimum	0,0100	0,0100	0,0100	0,0100	0,0100	0,0100
Maximum	0,5800	0,8800	0,5400	0,0700	0,2600	0,8800
Perzentile						
1	0,0100	0,0100	0,0100	0,0100	0,0100	0,0100
5	0,0100	0,0100	0,0100	0,0100	0,0100	0,0100
25	0,0100	0,0100	0,0100	0,0100	0,0100	0,0100
50	0,0200	0,0200	0,0200	0,0200	0,0200	0,0200
75	0,0500	0,0500	0,0500	0,0200	0,0500	0,0500
95	0,0500	0,0500	0,0500	0,0500	0,0500	0,0500
99	0,1100	0,0900	0,1000	0,0624	0,0500	0,1000

LHKW	1994	1995	1996	1997	1998	Gesamt
N	1608	1623	53	249	1600	5133
Mittelwert	0,1654	0,2478	0,4680	0,0098	0,0475	0,1503
Median	0,0050	0,0050	0,0095	0,0080	0,0050	0,0050
Standardabweichung	3,9765	5,1037	3,2555	0,0168	0,6820	3,6667
Schiefe	35,4048	27,2548	7,2704	7,8327	24,1351	37,4910
Standardfehler der Schiefe	0,0610	0,0607	0,3274	0,1543	0,0612	0,0342
Kurtosis	1329,8077	777,3795	52,9026	81,4633	630,4626	1499,5445
Standardfehler der Kurtosis	0,1220	0,1214	0,6444	0,3074	0,1223	0,0683
Spannweite	151,9540	158,0049	23,7109	0,2050	20,2179	158,0050
Minimum	0,0000	0,0001	0,0001	0,0001	0,0001	0,0000
Maximum	151,9540	158,0050	23,7110	0,2051	20,2180	158,0050
Perzentile						
1	0,0001	0,0001	0,0001	0,0002	0,0001	0,0001
5	0,0002	0,0002	0,0002	0,0002	0,0002	0,0002
25	0,0015	0,0017	0,0050	0,0010	0,0012	0,0014
50	0,0050	0,0050	0,0095	0,0080	0,0050	0,0050
75	0,0100	0,0100	0,0100	0,0100	0,0050	0,0100
95	0,0329	0,0380	0,2409	0,0200	0,0266	0,0326
99	0,5579	0,4452	23,7110	0,0955	0,6084	0,4508

Diuron	1994	1995	1996	1997	1998	Gesamt
N	731	1519	38	408	9	2705
Mittelwert	0,0469	0,0508	0,0550	0,0401	0,0511	0,0482
Median	0,0500	0,0500	0,0500	0,0500	0,0500	0,0500
Standardabweichung	0,0149	0,0546	0,0198	0,0161	0,0033	0,0423
Schiefe	3,8678	24,2072	4,6095	0,2327	3,0000	29,3356
Standardfehler der Schiefe	0,0904	0,0628	0,3828	0,1208	0,7171	0,0471
Kurtosis	55,5353	723,1552	22,6550	6,4724	9,0000	1129,8133
Standardfehler der Kurtosis	0,1806	0,1255	0,7497	0,2411	1,3997	0,0941
Spannweite	0,2300	1,7900	0,1100	0,1500	0,0100	1,7900
Minimum	0,0100	0,0100	0,0500	0,0100	0,0500	0,0100
Maximum	0,2400	1,8000	0,1600	0,1600	0,0600	1,8000
Perzentile						
1	0,0100	0,0100	0,0500	0,0100	0,0500	0,0100
5	0,0100	0,0100	0,0500	0,0100	0,0500	0,0100
25	0,0500	0,0500	0,0500	0,0200	0,0500	0,0500
50	0,0500	0,0500	0,0500	0,0500	0,0500	0,0500
75	0,0500	0,0500	0,0500	0,0500	0,0500	0,0500
95	0,0500	0,0500	0,1030	0,0500	0,0600	0,0500
99	0,0700	0,1200	0,1600	0,0500	0,0600	0,1000

Anhang III: Tabellen A 1

Zeitvergleich statistischer Basisparameter aller zur Verfügung stehenden chemischen Parameter aller Messstellen
ohne Ausschluss der hinsichtlich der Bestimmungsgrenze problematischen Werte

Desethylatrazin	1994	1995	1996	1997	1998	Gesamt
N	2224	2272	1772	198	694	7160
Mittelwert	0,0652	0,0719	0,0637	0,0357	0,0616	0,0658
Median	0,0300	0,0500	0,0300	0,0200	0,0300	0,0400
Standardabweichung	0,1451	0,1595	0,1302	0,0413	0,1671	0,1470
Schiefe	9,3412	9,9450	9,0742	2,6910	12,8762	10,2371
Standardfehler der Schiefe	0,0519	0,0514	0,0581	0,1728	0,0928	0,0289
Kurtosis	114,5338	131,9417	111,7048	8,3401	191,4871	140,0067
Standardfehler der Kurtosis	0,1038	0,1027	0,1162	0,3439	0,1853	0,0579
Spannweite	2,4400	2,8900	2,2300	0,2600	2,7900	2,8900
Minimum	0,0100	0,0100	0,0100	0,0100	0,0100	0,0100
Maximum	2,4500	2,9000	2,2400	0,2700	2,8000	2,9000
Perzentile						
1	0,0100	0,0100	0,0100	0,0100	0,0100	0,0100
5	0,0100	0,0100	0,0100	0,0100	0,0100	0,0100
25	0,0200	0,0200	0,0200	0,0100	0,0200	0,0200
50	0,0300	0,0500	0,0300	0,0200	0,0300	0,0400
75	0,0500	0,0500	0,0500	0,0500	0,0500	0,0500
95	0,2100	0,2300	0,2035	0,1305	0,1900	0,2100
99	0,6475	0,6300	0,5527	0,2007	0,3540	0,5600

Isoproturon	1994	1995	1996	1997	1998	Gesamt
N	674	1493	37	1677	92	3973
Mittelwert	0,0536	0,0476	0,0868	0,0434	0,0435	0,0471
Median	0,0500	0,0500	0,0500	0,0500	0,0500	0,0500
Standardabweichung	0,0277	0,0214	0,1013	0,0150	0,0178	0,0229
Schiefe	7,1789	10,6410	2,6728	0,7293	1,8881	8,5797
Standardfehler der Schiefe	0,0941	0,0633	0,3876	0,0598	0,2513	0,0388
Kurtosis	103,9694	195,0251	5,6891	17,4744	13,3445	139,3950
Standardfehler der Kurtosis	0,1880	0,1266	0,7587	0,1195	0,4977	0,0777
Spannweite	0,4900	0,4800	0,3700	0,2000	0,1400	0,4900
Minimum	0,0100	0,0100	0,0500	0,0100	0,0100	0,0100
Maximum	0,5000	0,4900	0,4200	0,2100	0,1500	0,5000
Perzentile						
1	0,0100	0,0100	0,0500	0,0100	0,0100	0,0100
5	0,0100	0,0100	0,0500	0,0100	0,0200	0,0100
25	0,0500	0,0500	0,0500	0,0500	0,0400	0,0500
50	0,0500	0,0500	0,0500	0,0500	0,0500	0,0500
75	0,0500	0,0500	0,0500	0,0500	0,0500	0,0500
95	0,1000	0,0500	0,3840	0,0500	0,0500	0,0500
99	0,1000	0,1000	0,4200	0,0500	0,1500	0,1000

Bromacil	1994	1995	1996	1997	1998	Gesamt
N	2206	2252	1744	50	655	6907
Mittelwert	0,0590	0,0567	0,0539	0,0238	0,0387	0,0548
Median	0,0500	0,0500	0,0500	0,0100	0,0500	0,0500
Standardabweichung	0,1583	0,1317	0,1283	0,0262	0,0170	0,1337
Schiefe	19,7907	17,3691	14,0188	3,1991	-0,7970	19,0589
Standardfehler der Schiefe	0,0521	0,0516	0,0586	0,3366	0,0955	0,0295
Kurtosis	500,8709	416,3281	240,0445	14,1457	-0,8867	494,3514
Standardfehler der Kurtosis	0,1042	0,1031	0,1171	0,6619	0,1907	0,0589
Spannweite	4,8900	3,9900	2,8900	0,1500	0,0900	4,8900
Minimum	0,0100	0,0100	0,0100	0,0100	0,0100	0,0100
Maximum	4,9000	4,0000	2,9000	0,1600	0,1000	4,9000
Perzentile						
1	0,0100	0,0100	0,0100	0,0100	0,0100	0,0100
5	0,0100	0,0100	0,0100	0,0100	0,0100	0,0100
25	0,0200	0,0500	0,0200	0,0100	0,0200	0,0200
50	0,0500	0,0500	0,0500	0,0100	0,0500	0,0500
75	0,0500	0,0500	0,0500	0,0350	0,0500	0,0500
95	0,1000	0,1000	0,0500	0,0600	0,0500	0,1000
99	0,4093	0,4741	0,45	0,16	0,05	0,3776

Anhang III: Tabellen A 1

Zeitvergleich statistischer Basisparameter aller zur Verfügung stehenden chemischen Parameter aller Messtellen
ohne Ausschluss der hinsichtlich der Bestimmungsgrenze problematischen Werte

Hexazinon	1994	1995	1996	1997	1998	Gesamt
N	2194	2253	1746	54	657	6904
Mittelwert	0,0502	0,0475	0,0462	0,0241	0,0348	0,0466
Median	0,0500	0,0500	0,0500	0,0100	0,0500	0,0500
Standardabweichung	0,1440	0,1115	0,1305	0,0260	0,0212	0,1225
Schiefe	24,4009	17,1501	20,7700	2,0260	0,5571	23,1592
Standardfehler der Schiefe	0,0523	0,0516	0,0586	0,3246	0,0953	0,0295
Kurtosis	716,8397	381,3429	545,3343	3,2827	0,3418	697,4565
Standardfehler der Kurtosis	0,1045	0,1031	0,1171	0,6389	0,1904	0,0589
Spannweite	4,8900	3,1900	4,0000	0,0900	0,0900	4,8900
Minimum	0,0100	0,0100	0,0100	0,0100	0,0100	0,0100
Maximum	4,9000	3,2000	4,0100	0,1000	0,1000	4,9000
Perzentile						
1	0,0100	0,0100	0,0100	0,0100	0,0100	0,0100
5	0,0100	0,0100	0,0100	0,0100	0,0100	0,0100
25	0,0100	0,0100	0,0200	0,0100	0,0100	0,0100
50	0,0500	0,0500	0,0500	0,0100	0,0500	0,0500
75	0,0500	0,0500	0,0500	0,0225	0,0500	0,0500
95	0,1000	0,1000	0,1000	0,1000	0,0500	0,1000
99	0,2205	0,2476	0,3000	0,1000	0,1000	0,2100

Bentazon	1994	1995	1996	1997	1998	Gesamt
N	3	3	474	16	0	496
Mittelwert	0,0100	0,0100	0,0458	0,2128	n.m.	0,0507
Median	0,0100	0,0100	0,0500	0,0775	n.m.	0,0500
Standardabweichung	0,0000	0,0000	0,0604	0,3871	n.m.	0,0944
Schiefe	1,2247	1,2247	15,2361	3,4581	n.m.	12,8814
Standardfehler der Schiefe	n.m.	n.m.	0,1122	0,5643	n.m.	0,1097
Kurtosis	n.m.	n.m.	284,5284	12,7696	n.m.	190,8871
Standardfehler der Kurtosis	0,0000	0,0000	0,2238	1,0908	n.m.	0,2189
Spannweite	0,0100	0,0100	1,1900	1,5800	n.m.	1,5900
Minimum	0,0100	0,0100	0,0100	0,0200	n.m.	0,0100
Maximum	0,0100	0,0100	1,2000	1,6000	n.m.	1,6000
Perzentile						
1	0,0100	0,0100	0,0100	0,0200	n.m.	0,0100
5	0,0100	0,0100	0,0100	0,0200	n.m.	0,0100
25	0,0100	0,0100	0,0300	0,0350	n.m.	0,0300
50	0,0100	0,0100	0,0500	0,0775	n.m.	0,0500
75	0,0100	0,0100	0,0500	0,2050	n.m.	0,0500
95	0,0100	0,0100	0,0500	1,6000	n.m.	0,0700
99	0,0100	0,0100	0,2175	1,6000	n.m.	0,2812

Anhang III: Tabellen A 2

Zeitvergleich statistischer Basisparameter aller zur Verfügung stehenden chemischen Parameter aller Messtellen
 Ausschluss der hinsichtlich der Bestimmungsgrenze problematischen Werte

Bestimmungsgrenzenproblematik nicht gegeben für: LF

Bestimmungsgrenzenproblematik nicht gegeben für: pH

Zeitvergleich statistischer Basisparameter aller zur Verfügung stehenden chemischen Parameter aller Messtellen
 Ausschluss der hinsichtlich der Bestimmungsgrenze problematischen Werte

Na	1994	1995	1996	1997	1998	Gesamt
N	1622	233	93	311	141	2400
Mittelwert	17,39	11,73	5,46	12,48	7,24	15,14
Median	10,30	4,50	3,40	10,50	5,10	9,10
Standardabweichung	26,41	22,47	4,16	13,28	7,86	23,66
Schiefe	8,89	4,82	1,65	6,64	4,46	9,08
Standardfehler der Schiefe	0,06	0,16	0,25	0,14	0,20	0,05
Kurtosis	149,04	28,35	2,21	71,56	27,78	162,50
Standardfehler der Kurtosis	0,12	0,32	0,50	0,28	0,41	0,10
Spannweite	587,90	186,90	18,20	171,90	65,90	587,90
Minimum	2,10	2,10	2,10	2,10	2,10	2,10
Maximum	590,00	189,00	20,30	174,00	68,00	590,00
Perzentile 1	2,20	2,13	2,10	2,10	2,10	2,20
5	2,90	2,27	2,20	2,40	2,20	2,50
25	5,80	3,05	2,65	6,10	2,90	4,70
50	10,30	4,50	3,40	10,50	5,10	9,10
75	18,63	9,90	7,40	15,00	8,95	16,00
95	56,93	66,50	15,51	33,38	19,73	47,95
99	113,08	144,66	20,30	51,84	56,24	102,98

Anhang III: Tabellen A 2

Zeitvergleich statistischer Basisparameter aller zur Verfügung stehenden chemischen Parameter aller Messtellen

Ausschluss der hinsichtlich der Bestimmungsgrenze problematischen Werte

K	1994	1995	1996	1997	1998	Gesamt
N	1511	252	107	331	173	2374
Mittelwert	3,66	1,79	1,58	3,13	1,74	3,15
Median	2,10	1,40	1,30	1,89	1,30	1,80
Standardabweichung	6,73	1,56	1,25	4,14	1,66	5,69
Schiefe	12,17	3,56	3,40	6,06	4,74	13,39
Standardfehler der Schiefe	0,06	0,15	0,23	0,13	0,18	0,05
Kurtosis	242,40	17,66	15,94	54,51	28,64	309,46
Standardfehler der Kurtosis	0,13	0,31	0,46	0,27	0,37	0,10
Spannweite	165,48	11,70	8,40	49,10	14,00	165,48
Minimum	0,52	0,60	0,60	0,60	0,60	0,52
Maximum	166,00	12,30	9,00	49,70	14,60	166,00
Perzentile						
1	0,60	0,60	0,60	0,60	0,60	0,60
5	0,70	0,60	0,60	0,70	0,60	0,62
25	1,21	0,90	0,80	1,30	0,90	1,18
50	2,10	1,40	1,30	1,89	1,30	1,80
75	3,80	2,00	1,80	3,50	2,00	3,30
95	10,74	4,57	3,64	9,18	3,73	9,33
99	28,46	11,12	8,90	20,77	11,49	24,33

Ca	1994	1995	1996	1997	1998	Gesamt
N	2386	1665	636	349	475	5511
Mittelwert	117,17	112,61	110,36	76,98	104,65	111,38
Median	115,00	112,00	116,00	87,00	110,00	113,00
Standardabweichung	65,57	62,81	55,88	58,34	73,64	64,71
Schiefe	2,35	1,87	-0,07	0,01	1,13	1,72
Standardfehler der Schiefe	0,05	0,06	0,10	0,13	0,11	0,03
Kurtosis	14,93	11,98	0,64	-1,48	4,69	11,05
Standardfehler der Kurtosis	0,10	0,12	0,19	0,26	0,22	0,07
Spannweite	736,70	633,80	308,10	191,20	547,40	736,80
Minimum	1,30	1,20	2,10	1,80	1,60	1,20
Maximum	738,00	635,00	310,20	193,00	549,00	738,00
Perzentile						
1	3,39	2,50	2,34	2,10	2,38	2,60
5	10,40	5,40	4,70	2,75	3,48	5,06
25	89,00	84,00	86,93	10,00	60,00	81,40
50	115,00	112,00	116,00	87,00	110,00	113,00
75	140,38	139,45	139,75	127,50	140,00	139,00
95	206,13	199,82	194,80	162,50	212,40	200,00
99	360,13	309,93	264,26	185,00	356,72	312,66

Mg	1994	1995	1996	1997	1998	Gesamt
N	2315	1658	635	346	469	5423
Mittelwert	20,59	18,50	17,49	10,66	19,56	18,87
Median	17,80	16,30	16,60	8,65	17,60	16,40
Standardabweichung	15,41	13,71	12,52	9,21	16,51	14,56
Schiefe	1,69	1,03	0,73	1,25	1,04	1,41
Standardfehler der Schiefe	0,05	0,06	0,10	0,13	0,11	0,03
Kurtosis	6,43	1,71	0,29	1,83	1,37	4,50
Standardfehler der Kurtosis	0,10	0,12	0,19	0,26	0,23	0,07
Spannweite	147,30	101,00	62,40	53,40	93,40	147,40
Minimum	0,70	0,60	0,60	0,60	0,60	0,60
Maximum	148,00	101,60	63,00	54,00	94,00	148,00
Perzentile						
1	1,30	1,00	0,90	0,60	0,70	1,00
5	2,60	1,30	1,20	1,00	1,10	1,50
25	8,90	7,40	7,20	2,90	4,45	7,40
50	17,80	16,30	16,60	8,65	17,60	16,40
75	29,00	27,40	26,00	15,83	30,00	27,60
95	48,00	42,00	40,28	28,36	49,90	44,00
99	69,70	60,37	55,38	40,23	69,60	65,00

Anhang III: Tabellen A 2

Zeitvergleich statistischer Basisparameter aller zur Verfügung stehenden chemischen Parameter aller Messtellen

Ausschluss der hinsichtlich der Bestimmungsgrenze problematischen Werte

Pb	1994	1995	1996	1997	1998	Gesamt
N	7	9	6	12	43	77
Mittelwert	0,0312	0,0189	0,0236	0,0212	0,0153	0,0188
Median	0,0398	0,0090	0,0257	0,0221	0,0088	0,0095
Standardabweichung	0,0157	0,0165	0,0161	0,0153	0,0152	0,0158
Schiefe	-1,2228	0,8454	-0,1161	-0,0089	2,6231	1,2874
Standardfehler der Schiefe	0,7937	0,7171	0,8452	0,6373	0,3614	0,2739
Kurtosis	-0,8255	-1,7117	-3,0078	-2,3626	8,9904	1,9801
Standardfehler der Kurtosis	1,5875	1,3997	1,7408	1,2322	0,7090	0,5415
Spannweite	0,0338	0,0348	0,0332	0,0325	0,0788	0,0788
Minimum	0,0075	0,0064	0,0058	0,0055	0,0052	0,0052
Maximum	0,0413	0,0412	0,0390	0,0380	0,0840	0,0840
Perzentile						
1	0,0075	0,0064	0,0058	0,0055	0,0052	0,0052
5	0,0075	0,0064	0,0058	0,0055	0,0052	0,0053
25	0,0091	0,0074	0,0069	0,0059	0,0059	0,0065
50	0,0398	0,0090	0,0257	0,0221	0,0088	0,0095
75	0,0410	0,0407	0,0383	0,0358	0,0155	0,0350
95	0,0413	0,0412	0,0390	0,0380	0,0400	0,0410
99	0,0413	0,0412	0,0390	0,0380	0,0840	0,0840

As	1994	1995	1996	1997	1998	Gesamt
N	20	21	11	19	114	185
Mittelwert	0,0143	0,0161	0,0155	0,0131	0,0126	0,0134
Median	0,0088	0,0099	0,0099	0,0072	0,0079	0,0088
Standardabweichung	0,0146	0,0184	0,0177	0,0159	0,0156	0,0159
Schiefe	2,7273	2,7918	3,1502	3,6660	5,8959	4,6035
Standardfehler der Schiefe	0,5121	0,5012	0,6607	0,5238	0,2265	0,1787
Kurtosis	6,9112	6,8927	10,1757	14,4909	43,7769	27,3273
Standardfehler der Kurtosis	0,9924	0,9719	1,2794	1,0143	0,4493	0,3555
Spannweite	0,0558	0,0676	0,0613	0,0697	0,1369	0,1369
Minimum	0,0060	0,0054	0,0067	0,0053	0,0051	0,0051
Maximum	0,0618	0,0730	0,0680	0,0750	0,1420	0,1420
Perzentile						
1	0,0060	0,0054	0,0067	0,0053	0,0051	0,0051
5	0,0060	0,0055	0,0067	0,0053	0,0052	0,0052
25	0,0072	0,0084	0,0076	0,0064	0,0061	0,0066
50	0,0088	0,0099	0,0099	0,0072	0,0079	0,0088
75	0,0140	0,0151	0,0147	0,0152	0,0128	0,0138
95	0,0612	0,0725	0,0680	0,0750	0,0328	0,0424
99	0,0618	0,0730	0,0680	0,0750	0,1321	0,0852

Cd	1994	1995	1996	1997	1998	Gesamt
N	25	23	18	38	17	121
Mittelwert	0,0005	0,0005	0,0004	0,0008	0,0005	0,0006
Median	0,0005	0,0005	0,0005	0,0005	0,0005	0,0005
Standardabweichung	0,0002	0,0002	0,0002	0,0013	0,0001	0,0008
Schiefe	0,4458	0,5152	0,2961	5,3874	-0,9122	9,1354
Standardfehler der Schiefe	0,4637	0,4813	0,5363	0,3828	0,5497	0,2200
Kurtosis	-0,7960	-0,3000	-1,0745	30,7105	0,7433	91,8219
Standardfehler der Kurtosis	0,9017	0,9348	1,0378	0,7497	1,0632	0,4366
Spannweite	0,0007	0,0007	0,0005	0,0081	0,0004	0,0081
Minimum	0,0002	0,0002	0,0002	0,0002	0,0002	0,0002
Maximum	0,0009	0,0009	0,0007	0,0083	0,0007	0,0083
Perzentile						
1	0,0002	0,0002	0,0002	0,0002	0,0002	0,0002
5	0,0002	0,0002	0,0002	0,0002	0,0002	0,0002
25	0,0003	0,0003	0,0002	0,0003	0,0004	0,0003
50	0,0005	0,0005	0,0005	0,0005	0,0005	0,0005
75	0,0006	0,0006	0,0005	0,0006	0,0006	0,0006
95	0,0009	0,0008	0,0007	0,0030	0,0007	0,0009
99	0,0009	0,0009	0,0007	0,0083	0,0007	0,0071

Anhang III: Tabellen A 2

Zeitvergleich statistischer Basisparameter aller zur Verfügung stehenden chemischen Parameter aller Messtellen

Ausschluss der hinsichtlich der Bestimmungsgrenze problematischen Werte

NO3	1994	1995	1996	1997	1998	Gesamt
N	3018	3243	3214	3477	3458	16410
Mittelwert	33,69	34,13	35,88	35,55	34,84	34,84
Median	28,00	28,20	29,00	28,30	28,20	28,20
Standardabweichung	27,24	27,59	28,64	28,67	27,72	28,00
Schiefe	1,89	1,91	1,76	1,77	1,66	1,79
Standardfehler der Schiefe	0,04	0,04	0,04	0,04	0,04	0,02
Kurtosis	5,73	6,04	4,68	4,59	3,78	4,91
Standardfehler der Kurtosis	0,09	0,09	0,09	0,08	0,08	0,04
Spannweite	208,30	246,90	227,90	212,90	187,90	246,90
Minimum	2,10	2,10	2,10	2,10	2,10	2,10
Maximum	210,40	249,00	230,00	215,00	190,00	249,00
Perzentile						
1	2,70	2,80	2,90	2,70	2,76	2,80
5	4,60	4,70	5,20	4,90	4,90	4,90
25	13,90	14,00	15,00	14,95	14,10	14,20
50	28,00	28,20	29,00	28,30	28,20	28,20
75	44,70	44,70	48,00	47,00	46,50	46,00
95	85,51	87,00	90,00	91,00	88,80	89,00
99	134,62	133,61	138,00	139,04	139,76	137,77

SO4	1994	1995	1996	1997	1998	Gesamt
N	1724	307	113	345	186	2675
Mittelwert	81,16	27,56	23,39	35,55	34,56	63,44
Median	39,30	16,00	9,20	31,00	13,95	31,90
Standardabweichung	147,31	32,36	32,90	30,79	71,73	123,30
Schiefe	5,51	2,56	3,07	1,93	6,45	6,51
Standardfehler der Schiefe	0,06	0,14	0,23	0,13	0,18	0,05
Kurtosis	37,49	8,16	12,10	6,28	52,60	54,07
Standardfehler der Kurtosis	0,12	0,28	0,45	0,26	0,35	0,09
Spannweite	1487,90	211,90	211,90	221,90	715,90	1487,90
Minimum	2,10	2,10	2,10	2,10	2,10	2,10
Maximum	1490,00	214,00	214,00	224,00	718,00	1490,00
Perzentile						
1	3,23	2,30	2,11	2,25	2,19	2,60
5	5,80	3,20	2,67	3,00	3,10	3,90
25	20,00	6,90	4,35	11,45	5,10	14,00
50	39,30	16,00	9,20	31,00	13,95	31,90
75	83,73	36,00	29,10	48,65	38,20	64,00
95	264,50	86,56	80,05	91,88	121,30	197,52
99	869,00	171,97	205,12	159,70	514,42	723,28

Cl	1994	1995	1996	1997	1998	Gesamt
N	1514	144	50	257	88	2053
Mittelwert	38,48	18,89	23,39	33,92	27,42	35,69
Median	28,00	12,50	9,20	28,40	22,40	27,00
Standardabweichung	56,65	15,11	32,90	29,02	20,64	50,43
Schiefe	16,06	1,85	3,07	4,73	2,14	17,04
Standardfehler der Schiefe	0,06	0,20	0,23	0,15	0,26	0,05
Kurtosis	411,04	6,02	12,10	39,02	6,53	487,15
Standardfehler der Kurtosis	0,13	0,40	0,45	0,30	0,51	0,11
Spannweite	1614,90	98,90	211,90	314,90	117,80	1614,90
Minimum	5,10	5,10	2,10	5,10	5,20	5,10
Maximum	1620,00	104,00	214,00	320,00	123,00	1620,00
Perzentile						
1	5,42	5,15	2,11	5,42	5,20	5,30
5	6,88	5,43	2,67	7,68	6,47	6,37
25	16,00	7,08	4,35	16,25	12,23	15,00
50	28,00	12,50	9,20	28,40	22,40	27,00
75	44,00	29,35	29,10	44,05	38,25	42,00
95	98,68	46,05	80,05	73,26	68,24	91,93
99	199,10	82,99	205,12	149,20	123,00	182,92

Anhang III: Tabellen A 2

Zeitvergleich statistischer Basisparameter aller zur Verfügung stehenden chemischen Parameter aller Messtellen

Ausschluss der hinsichtlich der Bestimmungsgrenze problematischen Werte

Trichlorethen	1994	1995	1996	1997	1998	Gesamt
N	221	221	10	28	172	652
Mittelwert	0,1118	0,1192	1,8070	0,0104	0,1404	0,1435
Median	0,0038	0,0040	0,0073	0,0022	0,0030	0,0035
Standardabweichung	0,5906	0,8236	5,6896	0,0301	0,9320	1,0328
Schiefe	7,3930	11,3984	3,1623	4,8789	9,3495	12,1313
Standardfehler der Schiefe	0,1637	0,1637	0,6870	0,4405	0,1852	0,0957
Kurtosis	58,7517	143,3952	10,0000	24,8082	93,4096	173,4783
Standardfehler der Kurtosis	0,3259	0,3259	1,3342	0,8583	0,3683	0,1911
Spannweite	5,8489	10,9989	17,9982	0,1588	10,2989	17,9989
Minimum	0,0011	0,0011	0,0018	0,0012	0,0011	0,0011
Maximum	5,8500	11,0000	18,0000	0,1600	10,3000	18,0000
Perzentile						
1	0,0011	0,0011	0,0018	0,0012	0,0011	0,0011
5	0,0013	0,0013	0,0018	0,0012	0,0011	0,0012
25	0,0020	0,0019	0,0041	0,0015	0,0016	0,0019
50	0,0038	0,0040	0,0073	0,0022	0,0030	0,0035
75	0,0142	0,0115	0,0128	0,0045	0,0099	0,0108
95	0,2098	0,2428	18,0000	0,0997	0,2713	0,2087
99	4,0648	4,0330	18,0000	0,1600	7,3070	4,3115

Tetrachlorethen	1994	1995	1996	1997	1998	Gesamt
N	298	305	11	29	274	907
Mittelwert	0,1266	0,1336	0,5869	0,0151	0,1765	0,1455
Median	0,0055	0,0066	0,0053	0,0062	0,0077	0,0065
Standardabweichung	1,0568	1,0076	1,7078	0,0251	1,0945	1,0441
Schiefe	11,9733	12,2810	3,2374	3,1496	10,3715	11,3555
Standardfehler der Schiefe	0,1412	0,1396	0,6607	0,4335	0,1499	0,0812
Kurtosis	144,3798	160,3041	10,5866	10,9906	117,6137	136,4070
Standardfehler der Kurtosis	0,2815	0,2783	1,2794	0,8452	0,2987	0,1622
Spannweite	13,5289	14,4989	5,6985	0,1189	13,9989	14,4989
Minimum	0,0011	0,0011	0,0015	0,0011	0,0011	0,0011
Maximum	13,5300	14,5000	5,7000	0,1200	14,0000	14,5000
Perzentile						
1	0,0011	0,0011	0,0015	0,0011	0,0011	0,0011
5	0,0012	0,0012	0,0015	0,0012	0,0012	0,0012
25	0,0025	0,0027	0,0034	0,0026	0,0028	0,0027
50	0,0055	0,0066	0,0053	0,0062	0,0077	0,0065
75	0,0233	0,0275	0,0400	0,0121	0,0282	0,0250
95	0,2603	0,2780	5,7000	0,0930	0,3750	0,3002
99	1,2942	2,5246	5,7000	0,1200	6,0054	2,5828

Atrazin	1994	1995	1996	1997	1998	Gesamt
N	277	338	233	13	65	926
Mittelwert	0,1947	0,1888	0,1884	0,1054	0,1445	0,1862
Median	0,1000	0,1050	0,1000	0,0800	0,0900	0,1000
Standardabweichung	0,2979	0,2583	0,2912	0,0565	0,1554	0,2720
Schiefe	6,0901	4,3768	5,2514	1,2758	3,0815	5,4162
Standardfehler der Schiefe	0,1464	0,1326	0,1595	0,6163	0,2971	0,0804
Kurtosis	52,6474	23,1320	34,0104	0,4285	9,7722	40,6131
Standardfehler der Kurtosis	0,2917	0,2645	0,3176	1,1909	0,5862	0,1606
Spannweite	3,3400	2,1400	2,6400	0,1700	0,7900	3,3400
Minimum	0,0600	0,0600	0,0600	0,0600	0,0600	0,0600
Maximum	3,4000	2,2000	2,7000	0,2300	0,8500	3,4000
Perzentile						
1	0,0600	0,0600	0,0600	0,0600	0,0600	0,0600
5	0,0600	0,0600	0,0600	0,0600	0,0600	0,0600
25	0,0700	0,0800	0,0750	0,0600	0,0700	0,0800
50	0,1000	0,1050	0,1000	0,0800	0,0900	0,1000
75	0,2000	0,1700	0,1700	0,1550	0,1500	0,1700
95	0,7600	0,7100	0,6400	0,2300	0,5780	0,6530
99	1,5330	1,6415	1,8990	0,2300	0,8500	1,5365

Anhang III: Tabellen A 2

Zeitvergleich statistischer Basisparameter aller zur Verfügung stehenden chemischen Parameter aller Messtellen

Ausschluss der hinsichtlich der Bestimmungsgrenze problematischen Werte

Simazin	1994	1995	1996	1997	1998	Gesamt
N	48	35	40	1	4	128
Mittelwert	0,1500	0,1809	0,1393	n.m.	0,1400	0,1541
Median	0,1000	0,1100	0,0900	n.m.	0,1200	0,1000
Standardabweichung	0,1217	0,1762	0,1146	n.m.	0,0883	0,1354
Schiefe	2,1641	2,5358	1,9422	n.m.	1,0568	2,5169
Standardfehler der Schiefe	0,3431	0,3977	0,3738	n.m.	1,0142	0,2140
Kurtosis	4,6917	7,0177	3,5427	n.m.	0,4481	7,6590
Standardfehler der Kurtosis	0,6744	0,7778	0,7326	n.m.	2,6186	0,4249
Spannweite	0,5200	0,8200	0,4800	n.m.	0,2000	0,8200
Minimum	0,0600	0,0600	0,0600	0,07	0,0600	0,0600
Maximum	0,5800	0,8800	0,5400	0,07	0,2600	0,8800
Perzentile						
1	0,0600	0,0600	0,0600	n.m.	0,0600	0,0600
5	0,0600	0,0600	0,0600	n.m.	0,0600	0,0600
25	0,0700	0,0800	0,0625	n.m.	0,0675	0,0700
50	0,1000	0,1100	0,0900	n.m.	0,1200	0,1000
75	0,1700	0,2000	0,1875	n.m.	0,2325	0,1800
95	0,5050	0,6320	0,4355	n.m.	0,2600	0,4920
99	0,5800	0,8800	0,5400	n.m.	0,2600	0,7930

LHKW	1994	1995	1996	1997	1998	Gesamt
N	1246	1266	46	176	675	3955
Mittelwert	0,2133	0,3175	0,5392	0,0135	0,0045	0,1949
Median	0,0081	0,0088	0,0100	0,0100	0,0050	0,0050
Standardabweichung	4,5167	5,7772	3,4939	0,0187	0,0044	4,1763
Schiefe	31,1658	24,0654	6,7733	7,4588	9,0204	32,9043
Standardfehler der Schiefe	0,0693	0,0688	0,3501	0,1831	0,0941	0,0389
Kurtosis	1030,3991	605,8935	45,9150	68,7228	118,0602	1154,7965
Standardfehler der Kurtosis	0,1385	0,1374	0,6876	0,3642	0,1879	0,0778
Spannweite	151,9529	158,0039	23,7095	0,2040	0,0743	158,0039
Minimum	0,0011	0,0011	0,0015	0,0011	0,0001	0,0011
Maximum	151,9540	158,0050	23,7110	0,2051	0,0744	158,0050
Perzentile						
1	0,0012	0,0012	0,0015	0,0011	0,0001	0,0012
5	0,0019	0,0018	0,0018	0,0014	0,0002	0,0018
25	0,0050	0,0050	0,0050	0,0076	0,0025	0,0050
50	0,0081	0,0088	0,0100	0,0100	0,0050	0,0050
75	0,0100	0,0100	0,0100	0,0200	0,0050	0,0100
95	0,0571	0,0567	0,4726	0,0210	0,0050	0,0535
99	0,6593	0,7278	23,7110	0,1413	0,0244	0,7019

Keine Bestimmungsgrenze für vorliegende Daten bekannt für:

Diuron

Anhang III: Tabellen A 2

Zeitvergleich statistischer Basisparameter aller zur Verfügung stehenden chemischen Parameter aller Messtellen

Ausschluss der hinsichtlich der Bestimmungsgrenze problematischen Werte

Desethyltrazin	1994	1995	1996	1997	1998	Gesamt
N	436	517	357	29	139	1478
Mittelwert	0,2063	0,2074	0,1950	0,1183	0,1876	0,2005
Median	0,1200	0,1200	0,1200	0,1100	0,1000	0,1200
Standardabweichung	0,2859	0,2956	0,2486	0,0513	0,3455	0,2844
Schiefe	4,6627	5,4385	4,7949	1,0221	6,2497	5,3364
Standardfehler der Schiefe	0,1169	0,1074	0,1291	0,4335	0,2056	0,0636
Kurtosis	26,4059	36,4754	28,5247	1,2716	42,0678	35,0369
Standardfehler der Kurtosis	0,2333	0,2144	0,2575	0,8452	0,4084	0,1272
Spannweite	2,3900	2,8400	2,1800	0,2100	2,7400	2,8400
Minimum	0,0600	0,0600	0,0600	0,0600	0,0600	0,0600
Maximum	2,4500	2,9000	2,2400	0,2700	2,8000	2,9000
Perzentile						
1	0,0600	0,0600	0,0600	0,0600	0,0600	0,0600
5	0,0600	0,0600	0,0600	0,0600	0,0600	0,0600
25	0,0800	0,0800	0,0800	0,0750	0,0800	0,0800
50	0,1200	0,1200	0,1200	0,1100	0,1000	0,1200
75	0,2100	0,2100	0,2000	0,1500	0,1900	0,2000
95	0,6575	0,5620	0,5510	0,2350	0,3500	0,5500
99	1,7726	1,9640	1,6840	0,2700	2,7200	1,7842

Keine Bestimmungsgrenze für vorliegende Daten bekannt für: Isoproturon

Bromacil	1994	1995	1996	1997	1998	Gesamt
N	298	183	53	3	3	540
Mittelwert	0,1898	0,2397	0,4804	0,0933	0,0733	0,2340
Median	0,1000	0,1000	0,2300	0,0600	0,0600	0,1000
Standardabweichung	0,4054	0,4182	0,5934	0,0577	0,0231	0,4369
Schiefe	7,7951	5,3638	2,2944	1,7321	1,7321	5,7184
Standardfehler der Schiefe	0,1412	0,1796	0,3274	1,2247	1,2247	0,1051
Kurtosis	74,6466	38,6584	5,8001	n.m.	n.m.	42,9211
Standardfehler der Kurtosis	0,2815	0,3573	0,6444	n.m.	n.m.	0,2099
Spannweite	4,8400	3,9400	2,8400	0,1000	0,0400	4,8400
Minimum	0,0600	0,0600	0,0600	0,0600	0,0600	0,0600
Maximum	4,9000	4,0000	2,9000	0,1600	0,1000	4,9000
Perzentile						
1	0,0699	0,0600	0,0600	0,0600	0,0600	0,0600
5	0,1000	0,0800	0,0600	0,0600	0,0600	0,0800
25	0,1000	0,1000	0,1000	0,0600	0,0600	0,1000
50	0,1000	0,1000	0,2300	0,0600	0,0600	0,1000
75	0,1000	0,1600	0,6050	0,1600	0,1000	0,1200
95	0,6035	0,9880	2,0200	0,1600	0,1000	0,9395
99	2,408	2,32	2,9	0,1600	0,1000	2,3590

Anhang III: Tabellen A 2

Zeitvergleich statistischer Basisparameter aller zur Verfügung stehenden chemischen Parameter aller Messtellen

Ausschluss der hinsichtlich der Bestimmungsgrenze problematischen Werte

Hexazinon	1994	1995	1996	1997	1998	Gesamt
N	39	48	38	0	0	125
Mittelwert	0,5579	0,4813	0,5250	n.m.	n.m.	0,5185
Median	0,2500	0,2150	0,2300	n.m.	n.m.	0,2200
Standardabweichung	0,9342	0,6049	0,7354	n.m.	n.m.	0,7540
Schiefef	3,5399	2,7221	3,4068	n.m.	n.m.	3,4617
Standardfehler der Schiefe	0,3782	0,3431	0,3828	n.m.	n.m.	0,2165
Kurtosis	13,4134	8,5352	13,6715	n.m.	n.m.	13,8603
Standardfehler der Kurtosis	0,7410	0,6744	0,7497	n.m.	n.m.	0,4298
Spannweite	4,7900	3,0900	3,8900	n.m.	n.m.	4,7900
Minimum	0,1100	0,1100	0,1200	n.m.	n.m.	0,1100
Maximum	4,9000	3,2000	4,0100	n.m.	n.m.	4,9000
Perzentile						
1	0,1100	0,1100	0,1200	n.m.	n.m.	0,1100
5	0,1300	0,1100	0,1200	n.m.	n.m.	0,1130
25	0,1700	0,1425	0,1575	n.m.	n.m.	0,1600
50	0,2500	0,2150	0,2300	n.m.	n.m.	0,2200
75	0,3700	0,5475	0,5375	n.m.	n.m.	0,4750
95	3,2000	1,8785	2,0720	n.m.	n.m.	1,9910
99	4,9000	3,2000	4,0100	n.m.	n.m.	4,6686

Keine Bestimmungsgrenze für vorliegende Daten bekannt für: Bentazon

Anhang III: Tabellen B 1

Statistische Basisparameter für alle Messstellen in einigen Einzugsgebieten

Alle Werte als reale Variablenwerte in [mg/l], lediglich LF in [µmS/m] und Atrazin; Simazin; Diuron; Desethylatrazin; Isoproturon, Bromacil, Hexazinon und Bentazon in [µg/l]

	Minimum	Maximum	Spannweite	Median	Mittelwert	Stichw.	Perzentile				N gültig	Fehlend	Schiefe	Stdfehler Schiefe	Kurtosis	Stdfehler Kurtosis	
							1	5	25	75							
eg2384																	
LF	4.400	289.000	284.600	76.200	74.362	33.251	4.900	65.600	93.550	122.150	169.050	99	1	0.363	0.079	3.860	0.159
pH	4.700	9.800	5.100	7.150	7.070	0.430	5.486	6.100	7.000	7.280	7.495	949	0	-1.636	0.079	7.435	0.159
Na	0.600	109.000	108.400	7.000	10.396	12.537	0.642	0.900	3.550	12.850	31.740	141	809	4.218	0.204	27.513	0.406
K	0.450	42.000	41.550	1.750	2.713	4.750	0.470	0.600	1.300	2.800	7.615	138	812	7.103	0.206	61.492	0.391
Ca	2.500	602.000	599.500	114.000	108.177	79.784	2.712	3.200	70.250	138.750	201.050	152	798	2.431	0.197	13.986	0.396
Mg	0.000	101.600	100.600	25.600	25.922	16.999	1.049	1.200	16.000	36.875	50.775	148	806	0.758	0.199	2.346	0.401
Pb	0.000	0.142	0.142	0.001	0.001	0.001	0.000	0.000	0.000	0.002	0.006	144	806	5.215	0.202	30.591	0.401
As	0.000	0.142	0.142	0.001	0.003	0.012	0.000	0.000	0.000	0.002	0.006	144	806	11.357	0.202	133.353	0.401
Cd	0.000	0.001	0.001	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.001	55	895	1.740	0.322	3.627	0.634
NO3	0.100	145.000	144.900	24.500	28.559	18.051	1.544	4.880	16.100	39.000	57.800	935	15	1.626	0.080	5.932	0.160
SO4	3.600	1220.000	1216.400	47.600	76.599	122.142	3.735	4.300	20.975	89.475	892.850	144	806	6.305	0.202	54.366	0.401
Cl	1.100	258.000	256.900	27.100	35.648	39.456	1.141	1.705	8.900	43.900	134.300	140	810	2.514	0.205	8.594	0.407
Trichloethen	0.000	0.690	0.690	0.000	0.111	0.060	0.000	0.000	0.000	0.001	0.026	291	659	8.869	0.143	88.623	0.285
Tetrachloethen	0.000	2.200	2.200	0.000	0.032	0.168	0.000	0.000	0.000	0.006	0.135	290	660	10.271	0.143	118.173	0.285
Atrazin	0.010	0.460	0.450	0.050	0.054	0.033	0.010	0.020	0.050	0.050	0.080	399	551	7.267	0.122	71.349	0.244
Simazin	0.000	0.080	0.070	0.050	0.048	0.009	0.010	0.000	0.000	0.020	0.050	397	553	-3.174	0.122	9.947	0.244
LHKW	0.000	21.503	21.503	0.005	0.171	1.595	0.000	0.000	0.005	0.020	0.180	291	659	12.120	0.143	149.430	0.285
Desethylatrazin	0.020	1.000	0.990	0.050	0.070	0.090	0.000	0.050	0.050	0.170	0.730	399	551	7.024	0.122	56.839	0.244
Isoproturon	0.010	2.900	2.890	0.030	0.048	0.007	0.020	0.020	0.050	0.164	-3.950	220	730	-0.960	0.164	13.728	0.327
Bromacil	0.010	2.900	2.890	0.050	0.082	0.203	0.010	0.050	0.050	0.213	0.612	394	556	11.031	0.123	138.481	0.245
Hexazinon	0.010	0.720	0.710	0.050	0.071	0.045	0.010	0.050	0.050	0.100	0.191	393	557	8.211	0.123	112.095	0.246
Bentazon	0.050	0.320	0.270	0.050	0.069	0.063	0.050	0.050	0.050	0.320	0.320	19	931	-3.939	0.524	16.162	1.014

	Minimum	Maximum	Spannweite	Median	Mittelwert	Stichw.	Perzentile				N gültig	Fehlend	Schiefe	Stdfehler Schiefe	Kurtosis	Stdfehler Kurtosis	
							1	5	25	75							
eg2381																	
LF	13.100	276.000	262.900	74.000	77.468	30.063	17.142	43.410	61.075	88.325	130.085	1570	0	2.161	0.062	9.821	0.123
pH	5.700	8.300	2.600	7.220	7.223	0.278	6.101	6.820	7.100	7.390	7.625	1569	1	-0.877	0.062	4.451	0.123
Na	1.100	258.000	256.900	10.500	19.734	29.671	1.240	2.500	5.175	20.550	80.025	134	1436	4.791	0.209	32.003	0.416
K	0.100	166.000	165.900	2.300	5.059	14.999	0.100	0.265	1.200	4.600	19.275	132	1438	9.669	0.211	103.011	0.419
Ca	14.500	635.000	620.500	116.000	132.171	65.538	24.400	68.020	103.000	146.000	252.500	493	1077	3.857	0.110	23.799	0.220
Mg	1.000	76.200	75.200	23.900	22.855	17.261	1.000	2.030	6.250	36.400	52.680	485	1085	4.443	0.111	-0.780	0.221
Pb	0.000	0.007	0.007	0.001	0.001	0.001	0.000	0.000	0.001	0.001	0.003	126	1444	4.299	0.216	21.872	0.428
As	0.000	0.007	0.007	0.001	0.001	0.001	0.000	0.000	0.001	0.001	0.003	126	1444	3.749	0.216	17.824	0.428
Cd	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	13	1557	1.101	0.616	-0.785	1.191
NO3	0.500	80.300	79.800	26.300	27.242	15.345	0.652	5.300	15.200	37.800	53.480	1551	19	0.384	0.062	-0.400	0.124
SO4	4.900	1420.000	1415.100	50.300	103.171	180.395	4.937	11.625	27.250	113.750	377.050	136	1434	5.363	0.208	34.176	0.413
Cl	0.100	194.000	193.900	25.300	31.150	28.422	1.080	6.200	15.900	35.700	90.375	134	1436	3.121	0.209	12.160	0.416
Trichloethen	0.000	1.665	1.665	0.000	0.023	0.150	0.000	0.000	0.000	0.000	0.018	373	1917	7.916	0.126	67.847	0.252
Tetrachloethen	0.000	14.500	14.500	0.000	0.115	1.139	0.000	0.000	0.000	0.001	0.071	325	192	11.406	0.126	132.046	0.252
Atrazin	0.010	0.970	0.960	0.030	0.052	0.038	0.010	0.010	0.030	0.050	0.070	608	962	7.117	0.099	52.992	0.198
Simazin	0.010	0.320	0.310	0.030	0.038	0.025	0.010	0.010	0.030	0.050	0.050	179	963	5.408	0.099	45.008	0.198
LHKW	0.000	158.005	158.005	0.005	0.934	11.378	0.000	0.000	0.001	0.010	0.130	373	1197	13.441	0.126	181.018	0.252
Diuron	0.050	0.120	0.070	0.050	0.053	0.012	0.050	0.050	0.050	0.050	0.120	199	1371	3.814	0.172	13.663	0.343
Desethylatrazin	0.010	1.780	1.770	0.050	0.068	0.166	0.010	0.014	0.030	0.050	0.120	607	963	7.493	0.099	59.998	0.198
Isoproturon	0.050	0.150	0.100	0.050	0.051	0.011	0.050	0.050	0.050	0.050	0.120	315	1285	10.989	0.137	63.948	0.274
Bromacil	0.010	0.880	0.870	0.050	0.060	0.051	0.010	0.010	0.050	0.050	0.100	604	966	10.999	0.099	164.193	0.199
Hexazinon	0.010	0.420	0.410	0.050	0.064	0.035	0.010	0.010	0.050	0.100	0.100	604	966	8.226	0.099	24.065	0.199
Bentazon	0.020	0.050	0.030	0.050	0.048	0.008	0.020	0.020	0.050	0.050	0.050	39	1531	-3.304	0.378	9.395	0.741

Anhang III: Tabellen B 1

Statistische Basisparameter für alle Messstellen in einigen Einzugsgebieten

Alle Werte als reale Variablenwerte in [mg/l], lediglich LF in [mS/m] und Atrazin; Simazin; Diuron; Desethylatrazin; Isoproturon, Bromacil, Hexazinon und Bentazon in [µg/l]

	egz233												Stofffehler Kurtosis					
	Minimum	Maximum	Spannweite	Median	Mittelwert	Stabsw.	Perzentile 1	5	25	75	95	99		N Gültig	Fehlend	Schiefe	Stofffehler Schiefe	Kurtosis
LF	1.100	158.400	157.300	75.400	66,985	31,679	3,900	5.300	42.800	89.700	110.500	129.000	2011	33	-0,451	0,055	-0,628	0,109
pH	5,280	8,600	3,340	7,100	7,004	6,442	5,761	6,080	6,810	7,280	7,575	7,910	2010	32	-0,809	0,055	0,947	0,109
Na	1,600	69.300	67.700	10,900	12,222	9,815	1.300	2.200	6.100	15.200	29.860	53.012	407	1636	2,379	0,121	8,187	0,241
K	0,300	49.700	49.400	1,810	3,197	4,751	3,800	0,500	1,000	3,800	5,960	28.685	404	1639	5,792	0,121	45,960	0,242
Ca	1,600	229.900	228.300	114,000	94,845	57,859	2,500	4.000	39.100	138.300	177.480	199.840	807	1238	-0,272	0,086	-1,157	0,172
Mg	0,700	55,600	54,900	13,050	13,702	8,941	0,800	1.100	7.100	19.025	29.800	33.510	798	1645	6,715	0,087	0,945	0,173
Pb	0,000	0,014	0,014	0,001	0,001	0,001	0,000	0,000	0,001	0,001	0,001	0,009	400	4243	5,677	0,122	39,942	0,243
As	0,000	0,007	0,007	0,001	0,001	0,001	0,000	0,000	0,000	0,002	0,003	0,006	399	1644	2,240	0,122	7,086	0,244
Cd	0,000	0,001	0,001	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,001	247	1796	3,832	0,155	25,632	0,309
NO3	0,200	181.000	180.800	50,600	51,436	35,309	0,500	3.200	19.200	78.700	109.800	143.360	1963	80	0,391	0,055	-0,379	0,110
SO4	1.300	185.000	183.700	34,000	38,214	33,001	1,900	2.400	10.200	55.000	104.840	158.760	407	1636	1,367	0,121	2,473	0,241
Cl	0,400	320.000	319.600	24,150	28,116	31,976	0,607	1.100	5.925	40.550	70.390	183.160	406	1637	4,023	0,121	27,532	0,242
Trichlorethen	0,000	0,027	0,027	0,000	0,000	0,001	0,000	0,000	0,000	0,000	0,002	0,005	639	1404	11,572	0,097	186,700	0,193
Tetrachlorethen	0,000	0,057	0,057	0,000	0,001	0,004	0,000	0,000	0,000	0,000	0,005	0,019	639	1404	9,017	0,097	98,484	0,193
Atrazin	0,010	0,670	0,660	0,020	0,042	0,049	0,010	0,010	0,020	0,050	0,127	0,263	765	1278	4,988	0,088	43,101	0,177
Simazin	0,010	0,880	0,870	0,020	0,033	0,052	0,010	0,010	0,010	0,050	0,127	0,260	763	1280	9,642	0,089	121,738	0,177
LHKW	0,000	0,057	0,057	0,002	0,005	0,007	0,000	0,000	0,000	0,010	0,020	0,023	639	1404	2,702	0,097	12,866	0,193
Diuron	0,010	0,570	0,560	0,050	0,043	0,030	0,010	0,010	0,050	0,050	0,160	0,282	436	1607	12,505	0,117	224,397	0,233
Desethylatrazin	0,010	0,470	0,460	0,040	0,051	0,053	0,010	0,010	0,020	0,050	0,160	0,282	775	1288	3,105	0,088	13,945	0,175
Isoproturon	0,010	0,050	0,050	0,040	0,043	0,043	0,010	0,010	0,050	0,050	0,160	0,282	508	1535	-1,717	0,108	1,030	0,216
Bromacil	0,010	0,690	0,680	0,050	0,043	0,043	0,010	0,010	0,050	0,050	0,160	0,282	762	1281	15,184	0,089	346,451	0,177
Hexazinon	0,010	0,140	0,130	0,050	0,036	0,019	0,010	0,010	0,020	0,050	0,160	0,282	762	1281	15,184	0,089	346,451	0,177
Bentazon	0,030	0,210	0,180	0,050	0,043	0,022	0,030	0,030	0,030	0,050	0,160	0,282	86	1957	5,608	0,260	41,626	0,514

	egz238												Stofffehler Kurtosis					
	Minimum	Maximum	Spannweite	Median	Mittelwert	Stabsw.	Perzentile 1	5	25	75	95	99		N Gültig	Fehlend	Schiefe	Stofffehler Schiefe	Kurtosis
LF	23.000	470.000	447.000	72.000	77,014	37,421	27.000	45.000	60.000	82.000	128.820	246,050	738	3	4,299	0,090	28,200	0,180
pH	5,150	8,870	3,720	7,280	7,236	6,453	5,220	6,842	7,180	7,440	7,610	7,866	741	0	-2,907	0,090	11,681	0,179
Na	1.300	230.000	228.700	6.500	13,759	30,037	1.300	2.700	4.150	12.500	45.890	230.000	81	660	5,773	0,267	37,069	0,529
K	0,600	36.600	36.000	1.600	2,910	4,662	0,600	0,700	0,900	2.600	9.400	36.600	79	662	5,411	0,271	35,821	0,535
Ca	10.000	603.000	593.000	93.000	112,231	80,445	25,040	28.000	66.000	133.000	198.800	506.000	303	438	3,222	0,140	12,884	0,279
Mg	3.000	93.000	90.000	31.000	31,322	18,529	3.200	7.205	16.000	43.000	65.950	87.830	300	441	0,513	0,141	-0,163	0,281
Pb	0,000	0,004	0,004	0,001	0,001	0,001	0,000	0,000	0,001	0,001	0,002	0,004	84	657	2,567	0,263	8,114	0,520
As	0,000	0,017	0,017	0,001	0,001	0,002	0,000	0,000	0,001	0,001	0,005	0,017	84	657	5,283	0,263	32,414	0,520
Cd	0,000	0,001	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,001	0,001	27	714	1,621	0,448	1,287	0,872
NO3	0,100	120.000	119.900	24.000	28,568	24,025	0,500	0,500	11.000	37.000	80.000	104.000	735	6	1,238	0,090	1,410	0,180
SO4	4.400	1317.000	1312.600	54.100	133,074	254,442	4.400	14.750	33.000	103.250	949.800	1317.000	78	663	3,736	0,272	13,648	0,538
Cl	1.100	277.000	275.900	24.000	27,624	31,896	1.100	3.505	13.250	35.500	52.500	277.000	80	661	6,235	0,269	48,152	0,532
Trichlorethen	0,000	0,028	0,028	0,000	0,001	0,001	0,000	0,000	0,000	0,000	0,001	0,027	189	552	6,984	0,177	49,997	0,352
Tetrachlorethen	0,000	0,750	0,750	0,010	0,012	0,012	0,000	0,000	0,000	0,000	0,004	0,067	189	552	7,749	0,177	60,602	0,352
Atrazin	0,010	0,420	0,410	0,010	0,039	0,058	0,010	0,010	0,010	0,050	0,160	0,338	302	439	3,177	0,140	12,451	0,280
Simazin	0,010	0,270	0,260	0,010	0,017	0,025	0,010	0,010	0,010	0,010	0,050	0,162	294	447	6,016	0,142	43,316	0,283
LHKW	0,000	0,778	0,778	0,005	0,018	0,087	0,000	0,000	0,005	0,005	0,022	0,122	189	552	7,620	0,177	58,973	0,352
Diuron	0,010	0,190	0,180	0,050	0,049	0,019	0,010	0,010	0,050	0,050	0,160	0,338	302	439	3,177	0,140	12,451	0,280
Desethylatrazin	0,010	0,780	0,770	0,020	0,075	0,124	0,010	0,010	0,010	0,080	0,367	0,500	302	439	2,725	0,140	8,288	0,280
Isoproturon	0,010	0,090	0,080	0,050	0,048	0,012	0,010	0,010	0,050	0,050	0,160	0,338	146	595	-1,891	0,201	4,812	0,399
Bromacil	0,010	1.900	1.890	0,050	0,053	0,111	0,010	0,010	0,050	0,050	0,160	0,338	287	484	16,206	0,144	289,871	0,287
Hexazinon	0,010	0,130	0,120	0,010	0,020	0,021	0,010	0,010	0,010	0,010	0,050	0,160	286	485	6,607	0,144	6,607	0,287
Bentazon	0,020	0,110	0,090	0,050	0,050	0,017	0,020	0,020	0,020	0,050	0,160	0,338	20	721	1,977	0,512	9,500	0,992

Anhang III: Tabellen B 2

Statische Basisparameter für alle Messstellen in den Klassen der Schutzfunktion der GW-Überdeckung (nach Lfu)

Alle Werte als reale Variablenwerte in [mg/l], lediglich LF in [µS/cm] und Atrazin, Simazin, Desethylatrazin, Isoproturon, Bromacil, Hexazinon und Bentazon in [µg/l]

	sehr gering	Minimum	Maximum	Spannweite	Median	Mittelwert	Stabw.	Perzentile	1	5	25	75	95	99	N	N	Gültig	Fehlend	Schiefte	Stdfehler Schiefe	Kurtosis	Stdfehler Kurtosis
LF	1.100	470.000	468.900	70.000	72.344	30.897	7.916	22.200	83.700	57.900	7.050	7.340	7.580	180.944	9207	142	1.711	0.026	9.936	0.051	0.051	
pH	3.950	9.800	7.151	5.850	7.200	7.151	5.825	6.900	7.340	7.340	7.340	7.340	7.580	7.580	9225	124	0.025	12.550	0.137	0.051		
Na	0.600	230.000	12.556	8.050	12.556	16.896	0.700	1.735	4.500	14.125	8.012	8.795	8.795	80.122	1266	8083	5.672	0.069	49.059	0.137	0.137	
K	0.100	49.700	49.600	1.700	2.877	3.942	0.141	1.000	133.000	205.960	347.417	2906	6443	6443	2865	6848	1.400	0.046	13.243	0.091	0.091	
Ca	2.900	635.000	103.200	14.000	17.231	13.526	1.000	2.200	7.000	23.200	44.000	60.934	60.934	60.934	2865	6848	1.400	0.046	2.623	0.091	0.091	
Mg	0.800	104.000	103.200	14.000	17.231	13.526	1.000	2.200	7.000	23.200	44.000	60.934	60.934	60.934	2865	6848	1.400	0.046	2.623	0.091	0.091	
Pb	0.000	0.084	0.084	0.001	0.002	0.006	0.000	0.000	0.001	0.001	0.001	0.001	0.001	0.001	1300	8049	7.446	0.068	66.135	0.136	0.136	
As	0.000	0.142	0.142	0.001	0.002	0.007	0.000	0.000	0.001	0.001	0.001	0.001	0.001	0.001	1296	8053	12.443	0.068	195.809	0.136	0.136	
Cd	0.000	0.003	0.003	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.001	563	8786	4.723	0.103	46.190	0.206	0.206	
NO3	0.100	202.100	202.000	24.000	29.317	25.568	0.400	0.500	10.700	39.400	60.000	82.780	82.780	117.680	9131	218	1.550	0.026	3.063	0.051	0.051	
SO4	1.300	1440.000	1438.700	32.000	64.043	128.818	3.877	6.885	17.000	60.000	204.300	801.840	801.840	801.840	1276	8073	6.444	0.068	51.715	0.137	0.137	
Cl	0.100	328.000	327.900	19.000	25.407	28.335	1.900	2.455	7.900	33.300	88.780	132.686	132.686	132.686	1270	8079	4.332	0.068	31.981	0.137	0.137	
Trichloethen	0.000	4.100	4.100	0.000	0.005	0.096	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.035	2583	6766	35.786	0.048	1409.950	0.096	0.096	
Tetrachloethen	0.000	1.680	1.680	0.000	0.005	0.061	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.098	2582	6767	19.395	0.048	442.081	0.096	0.096	
Atrazin	0.010	2.700	2.690	0.030	0.049	0.111	0.010	0.010	0.010	0.010	0.010	0.010	0.010	0.050	3646	5703	10.788	0.041	165.820	0.081	0.081	
Simazin	0.010	0.580	0.570	0.020	0.027	0.025	0.010	0.010	0.010	0.010	0.010	0.010	0.010	0.070	3603	5746	9.502	0.041	180.780	0.081	0.081	
LHKW	0.000	21.503	21.503	0.005	0.029	0.546	0.000	0.000	0.001	0.001	0.001	0.001	0.001	0.220	2583	6766	34.723	0.048	1281.108	0.096	0.096	
Diuron	0.010	0.790	0.780	0.050	0.046	0.076	0.010	0.010	0.010	0.010	0.010	0.010	0.010	0.100	1488	7891	16.693	0.064	488.235	0.128	0.128	
Desethylatrazin	0.010	2.900	2.890	0.030	0.070	0.173	0.010	0.010	0.010	0.010	0.010	0.010	0.010	0.640	3651	5898	10.023	0.041	124.507	0.081	0.081	
Isoproturon	0.010	0.500	0.490	0.050	0.049	0.028	0.010	0.010	0.010	0.010	0.010	0.010	0.010	0.110	3515	5834	8.848	0.055	114.939	0.109	0.109	
Bromacil	0.010	4.900	4.890	0.050	0.042	0.118	0.010	0.010	0.010	0.010	0.010	0.010	0.010	0.100	3519	5830	32.267	0.041	1198.716	0.083	0.083	
Hexazinon	0.010	4.900	4.890	0.050	0.042	0.118	0.010	0.010	0.010	0.010	0.010	0.010	0.010	0.100	3519	5830	32.267	0.041	1198.716	0.083	0.083	
Bentazon	0.010	0.210	0.200	0.050	0.038	0.022	0.010	0.010	0.010	0.010	0.010	0.010	0.010	0.126	270	9079	2.614	0.148	20.284	0.295	0.295	

	gering	Minimum	Maximum	Spannweite	Median	Mittelwert	Stabw.	Perzentile	1	5	25	75	95	99	N	N	Gültig	Fehlend	Schiefte	Stdfehler Schiefe	Kurtosis	Stdfehler Kurtosis
LF	1.100	404.000	402.900	92.200	93.620	29.635	44.834	56.000	108.550	76.700	7.050	7.280	7.510	230.000	2133	42	2.627	0.053	16.100	0.106	0.106	
pH	6.160	8.480	7.156	7.156	7.156	7.156	6.570	6.900	7.340	7.340	7.340	7.340	7.580	7.580	2139	36	0.061	0.053	2.175	0.106	0.106	
Na	1.300	86.000	84.700	12.000	15.157	11.943	1.642	3.310	19.400	14.000	3.000	3.000	3.000	78.160	241	1934	2.512	0.157	10.178	0.312	0.312	
K	0.100	59.000	52.900	2.200	3.632	5.371	0.467	0.800	4.050	1.400	1.400	1.400	1.400	36.840	233	1942	5.974	0.159	45.960	0.318	0.318	
Ca	30.200	650.000	619.800	138.600	139.200	50.718	45.140	61.000	107.000	107.000	164.800	203.240	288.638	288.638	613	1564	2.398	0.099	19.727	0.197	0.197	
Mg	3.900	66.000	64.100	30.000	30.185	11.230	7.836	11.600	23.000	23.000	34.000	53.400	53.400	65.880	611	1564	0.777	0.099	1.347	0.197	0.197	
Pb	0.000	0.014	0.014	0.001	0.001	0.001	0.000	0.000	0.001	0.001	0.001	0.001	0.001	0.006	250	1925	6.511	0.154	62.375	0.307	0.307	
As	0.000	0.019	0.019	0.001	0.001	0.002	0.000	0.000	0.001	0.001	0.001	0.001	0.001	0.016	290	1925	5.734	0.154	39.485	0.307	0.307	
Cd	0.000	0.001	0.001	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.001	86	2089	4.151	0.260	24.396	0.514	0.514	
NO3	0.500	230.000	229.500	41.000	48.400	37.896	0.500	0.500	63.900	24.500	63.900	129.100	185.600	185.600	2139	36	1.559	0.053	3.158	0.106	0.106	
SO4	11.000	1490.000	1479.000	68.900	96.168	133.715	12.410	17.150	114.750	43.000	114.750	212.050	212.050	945.770	240	1935	7.443	0.157	68.191	0.313	0.313	
Cl	2.400	128.000	125.600	39.750	39.837	23.272	2.935	5.500	53.000	25.800	53.000	83.550	83.550	112.650	246	1929	0.641	0.155	0.848	0.309	0.309	
Trichloethen	0.000	0.690	0.690	0.000	0.004	0.039	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.006	0.029	558	1617	16.331	0.103	271.273	0.206	0.206	
Tetrachloethen	0.000	0.067	0.067	0.000	0.002	0.006	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.003	557	1618	6.133	0.104	46.827	0.207	0.207	
Atrazin	0.010	0.480	0.470	0.030	0.040	0.047	0.010	0.010	0.050	0.010	0.010	0.010	0.010	0.090	824	1351	4.830	0.085	32.346	0.170	0.170	
Simazin	0.010	0.880	0.870	0.020	0.036	0.055	0.010	0.010	0.050	0.010	0.010	0.010	0.010	0.268	817	1358	8.044	0.086	91.551	0.170	0.170	
LHKW	0.000	1.261	1.261	0.005	0.013	0.078	0.000	0.000	0.001	0.001	0.001	0.001	0.001	0.143	555	1620	12.643	0.104	171.976	0.207	0.207	
Diuron	0.010	1.800	1.790	0.056	0.056	0.102	0.010	0.022	0.050	0.010	0.010	0.010	0.010	0.159	301	1874	16.571	0.140	282.492	0.280	0.280	
Desethylatrazin	0.010	0.780	0.770	0.050	0.049	0.061	0.010	0.010	0.010	0.010	0.010	0.010	0.010	0.342	825	1350	5.942	0.085	51.917	0.170	0.170	
Isoproturon	0.010	0.150	0.150	0.010	0.010	0.010	0.010	0.010	0.010	0.010	0.010	0.010	0.010	0.050	445	1730	-0.060	0.116	7.431	0.231	0.231	
Bromacil	0.010	1.900	1.890	0.052	0.052	0.093	0.010	0.010	0.050	0.010	0.010	0.010	0.010	0.300	797	1378	14.258	0.087	243.422	0.173	0.173	
Hexazinon	0.010	0.300	0.290	0.050	0.040	0.031	0.010	0.010	0.010	0.010	0.010	0.010	0.010	0.100	794	1381	1.801	0.087	8.562	0.173	0.173	
Bentazon	0.010	0.210	0.200	0.050	0.051	0.038	0.010	0.010	0.010	0.010	0.010	0.010	0.010	0.155	69	2106	2.701	0.289	8.292	0.570	0.570	

Anhang III: Tabellen B 2

Statische Basisparameter für alle Messstellen in den Klassen der Schutzfunktion der GW-Überdeckung (nach LfU)

Alle Werte als reale Variablenwerte in [mg/l], lediglich LF in [µS/m] und Atrazin, Simazin, Desethylatrazin, Isoproturon, Bromacil, Hexazinon und Bentazon in [µg/l]

mittel	Minimum	Maximum	Spannweite	Median	Mittelwert	Stabh.	Perzentile 1	5	25	75	95	99	N Gültig	Fehlend	Schiefe	Stdfehler Schiefe	Kurtosis	Stdfehler Kurtosis
LF	20,000	260,000	240,000	79,100	80,584	25,062	23,200	47,000	67,825	91,575	110,825	173,705	584	3	2,470	0,101	16,801	0,202
pH	6,100	8,180	2,080	7,200	7,209	6,231	6,257	6,823	7,100	7,100	7,330	7,651	585	2	-1,204	0,101	4,801	0,204
Na	1,800	86,000	86,200	7,450	10,224	11,993	1,800	3,525	5,100	11,125	27,000	88,000	54	533	5,426	0,330	34,398	0,639
K	0,300	42,000	41,700	1,200	2,614	6,051	0,300	0,465	0,663	2,275	11,555	42,000	52	535	5,814	0,330	36,840	0,650
Ca	34,000	600,000	566,000	119,000	120,278	59,815	42,140	67,400	88,500	139,100	161,410	580,760	173	414	5,598	0,185	42,123	0,367
Mg	2,500	67,000	64,500	24,500	23,957	16,288	2,642	2,800	11,000	35,000	50,000	67,000	170	417	1,582	0,186	10,281	0,370
Pb	0,000	0,004	0,004	0,001	0,001	0,001	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	55	532	2,049	0,322	3,324	0,634
As	0,000	0,017	0,017	0,001	0,002	0,003	0,000	0,000	0,000	0,001	0,011	0,011	55	532	3,654	0,322	13,465	0,634
Cd	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	10	577	1,214	0,667	0,226	1,334
NO3	0,500	89,100	88,600	32,050	20,108	20,108	0,500	1,300	16,000	45,575	70,000	76,000	574	13	0,230	0,102	-0,744	0,204
SD4	4,300	1350,000	1345,700	34,000	73,304	184,419	4,300	6,250	27,000	62,200	207,000	1350,000	53	534	6,645	0,327	46,427	0,644
Cl	4,400	150,000	145,600	28,000	33,415	25,736	4,400	7,630	20,500	37,150	92,200	150,000	53	534	2,934	0,327	10,591	0,644
Trichlorethen	0,000	0,021	0,021	0,000	0,001	0,002	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	138	449	7,917	0,206	75,232	0,410
Tetrachlorethen	0,000	1,000	1,000	0,000	0,118	0,118	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,914	138	449	7,089	0,206	50,901	0,410
Atrazin	0,010	1,550	1,540	0,020	0,046	0,122	0,010	0,010	0,010	0,050	0,100	0,690	223	364	9,728	0,163	109,216	0,324
Simazin	0,010	0,260	0,260	0,010	0,027	0,031	0,010	0,010	0,010	0,050	0,100	0,238	218	369	4,736	0,165	30,691	0,328
LHKW	0,000	1,004	1,003	0,005	0,024	0,118	0,000	0,000	0,002	0,010	0,022	0,919	138	449	6,999	0,206	49,999	0,410
Diuron	0,010	0,050	0,040	0,050	0,046	0,010	0,010	0,010	0,050	0,050	0,147	0,050	78	509	-3,147	0,272	13,008	0,538
Desethylatrazin	0,010	1,160	1,150	0,030	0,044	0,086	0,010	0,010	0,010	0,050	0,100	0,344	223	364	10,346	0,163	130,008	0,324
Isoproturon	0,010	0,130	0,120	0,050	0,047	0,017	0,010	0,020	0,050	0,050	0,126	0,056	135	452	1,166	0,209	7,694	0,414
Bromacil	0,010	1,100	1,090	0,050	0,053	0,107	0,010	0,010	0,020	0,050	0,100	0,836	214	373	7,886	0,166	66,275	0,331
Hexazinon	0,010	0,320	0,310	0,010	0,028	0,036	0,010	0,010	0,010	0,050	0,100	0,251	214	373	4,735	0,166	30,893	0,331
Bentazon	0,010	1,800	1,590	0,050	0,182	0,386	0,010	0,013	0,023	0,135	1,500	1,600	24	563	3,179	0,472	9,604	0,916

hoch	Minimum	Maximum	Spannweite	Median	Mittelwert	Stabh.	Perzentile 1	5	25	75	95	99	N Gültig	Fehlend	Schiefe	Stdfehler Schiefe	Kurtosis	Stdfehler Kurtosis
LF	21,200	161,700	140,500	88,500	90,425	16,645	43,304	67,340	82,700	99,000	118,320	138,624	475	1	0,299	0,112	2,573	0,224
pH	6,000	8,500	2,500	7,140	7,120	6,196	6,163	6,828	7,040	7,220	7,340	7,510	474	2	-1,122	0,112	12,792	0,224
Na	1,200	37,200	36,000	7,200	9,449	6,865	1,200	2,980	4,700	12,700	24,240	37,200	51	425	2,003	0,333	5,077	0,656
K	0,400	13,700	13,300	1,000	1,789	2,097	0,400	0,445	0,823	2,350	5,100	13,700	48	428	4,227	0,343	22,362	0,674
Ca	53,700	208,000	154,300	145,000	140,416	28,477	54,180	89,320	124,000	157,000	184,600	206,400	131	345	-0,533	0,212	0,854	0,420
Mg	9,500	70,500	61,000	26,000	27,136	8,716	9,660	14,280	21,500	32,000	38,940	66,164	131	345	1,546	0,212	6,258	0,420
Pb	0,000	0,003	0,003	0,001	0,001	0,001	0,000	0,000	0,001	0,001	0,003	0,003	42	434	2,648	0,365	6,997	0,717
As	0,000	0,005	0,004	0,001	0,001	0,001	0,000	0,000	0,000	0,002	0,003	0,005	42	434	2,296	0,365	6,704	0,717
Cd	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	9	487	0,700	0,717	-1,818	1,400
NO3	0,100	145,000	144,900	57,500	59,888	29,870	0,266	7,630	42,000	79,550	116,020	132,868	465	11	0,280	0,113	-0,052	0,226
SD4	11,000	265,000	254,000	52,600	66,085	47,972	11,000	16,705	36,500	83,775	181,100	285,000	52	424	2,104	0,330	5,485	0,650
Cl	13,900	172,000	158,100	41,700	46,188	27,683	13,900	14,695	31,025	52,750	95,180	172,000	52	424	2,200	0,330	7,377	0,650
Trichlorethen	0,000	0,258	0,258	0,000	0,004	0,030	0,000	0,000	0,000	0,000	0,002	0,252	107	369	7,546	0,234	57,605	0,463
Tetrachlorethen	0,000	0,050	0,050	0,000	0,003	0,029	0,010	0,010	0,010	0,050	0,093	0,148	107	369	4,180	0,234	18,849	0,463
Atrazin	0,010	1,770	1,600	0,020	0,035	0,097	0,010	0,010	0,010	0,050	0,100	0,650	174	302	1,347	0,184	2,818	0,366
Simazin	0,010	0,050	0,040	0,010	0,028	0,028	0,010	0,010	0,010	0,050	0,100	0,200	173	303	0,194	0,185	-1,945	0,367
LHKW	0,000	0,297	0,297	0,005	0,011	0,034	0,000	0,000	0,001	0,010	0,026	0,288	107	369	7,226	0,234	55,676	0,463
Diuron	0,010	0,100	0,090	0,050	0,047	0,020	0,010	0,010	0,040	0,050	0,100	0,100	67	409	0,637	0,293	15,102	0,463
Desethylatrazin	0,010	0,470	0,460	0,050	0,056	0,074	0,010	0,010	0,010	0,050	0,100	0,439	176	300	3,061	0,183	10,986	0,364
Isoproturon	0,010	0,050	0,050	0,050	0,040	0,013	0,010	0,020	0,040	0,050	0,100	0,050	108	368	-1,044	0,233	-0,498	0,461
Bromacil	0,010	0,600	0,590	0,041	0,069	0,144	0,010	0,010	0,010	0,050	0,100	0,556	173	303	6,657	0,185	48,015	0,367
Hexazinon	0,010	0,120	0,110	0,050	0,036	0,027	0,010	0,010	0,010	0,050	0,100	0,100	173	303	0,027	0,185	0,285	0,367
Bentazon	0,010	0,410	0,400	0,050	0,089	0,110	0,010	0,010	0,010	0,050	0,100	0,410	15	461	2,232	0,560	4,767	1,121

Anhang III: Tabellen B 2

Statistische Basisparameter für alle Messstellen in den Klassen der Schutzfunktion der GW-Überdeckung (nach LfU)

Alle Werte als reale Variablenwerte in [mg/l], lediglich LF in [µmS/m] und Atrazin, Simazin, Diuron, Desethylatrazin, Isoproturon, Bromacil, Hexazinon und Bentazon in [µg/l]

GW-Geringleiter	Minimum	Maximum	Spannweite	Median	Mittelwert	Stabh.	Perzentile 1	5					N Gültig	Fehlend	Schiefe	Stdfehler Schiefe	Kurtosis	Stdfehler Kurtosis
								25	76	95	99	99						
LF	2.400	355.000	352.600	67.500	61.208	31,228	3.400	4.800	43.900	78.900	108.000	129.556	4060	25	-0.049	0.038	1.789	0.077
pH	3.870	9.160	5.290	7.180	7.034	0.580	5.136	5.770	6.970	7.340	7.650	8.128	4059	26	-1.452	0.038	2.974	0.077
Na	0.600	101.300	100.700	3.100	7.120	12.951	0.700	0.800	2.000	7.000	22.130	81.108	736	3349	4.759	0.090	25.546	0.180
K	0.100	40.000	39.900	1.100	1.546	2.302	0.300	0.400	0.600	1.700	3.650	10.575	724	3361	8.849	0.091	119.149	0.181
Ca	1.000	360.000	359.000	86.000	76.448	60.408	2.100	2.700	5.900	121.000	164.000	224.840	1207	2878	0.264	0.070	-0.557	0.141
Mg	0.100	77.000	76.900	10.900	13.630	12.093	0.400	0.900	2.200	22.000	37.900	43.020	1189	2896	0.656	0.071	0.333	0.142
Pb	0.000	0.015	0.015	0.001	0.001	0.001	0.000	0.000	0.000	0.001	0.001	0.008	763	3322	5.858	0.089	43.106	0.177
As	0.000	0.021	0.021	0.001	0.002	0.003	0.000	0.000	0.000	0.002	0.007	0.015	761	3324	3.549	0.089	14.628	0.177
Cd	0.000	0.001	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	507	3578	1.226	0.108	2.514	0.217
NO3	0.100	204.400	204.300	24.000	29.594	25.823	0.100	1.200	9.300	43.300	75.000	120.000	4025	60	1.721	0.039	5.521	0.077
SO4	0.600	900.000	899.400	10.000	27.048	54.963	0.800	2.445	4.500	31.375	87.650	237.169	748	3337	8.372	0.089	104.209	0.179
Cl	0.300	202.000	201.700	3.060	12.577	18.433	0.437	0.800	1.500	19.750	44.075	85.000	736	3349	3.516	0.090	22.911	0.180
Trichloethen	0.000	18.000	18.000	0.000	0.051	0.779	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.331	923	3162	18.822	0.080	379.603	0.161
Tetrachloethen	0.000	5.700	5.700	0.000	0.118	0.240	0.000	0.000	0.000	0.000	0.006	0.312	923	3162	20.084	0.080	432.131	0.161
Atrazin	0.010	1.400	1.390	0.030	0.048	0.086	0.010	0.010	0.020	0.050	0.130	0.444	1463	2622	8.246	0.064	90.966	0.128
Simazin	0.010	0.200	0.190	0.020	0.028	0.018	0.010	0.010	0.010	0.050	0.050	0.050	1451	2634	1.104	0.064	5.080	0.128
LHRW	0.000	124.075	124.075	0.065	0.233	4.381	0.000	0.000	0.005	0.010	0.020	0.636	923	3162	25.550	0.080	702.218	0.161
Diuron	0.010	0.150	0.140	0.060	0.049	0.015	0.010	0.020	0.050	0.050	0.050	0.100	474	3611	0.924	0.112	9.645	0.224
Desethylatrazin	0.010	1.780	1.770	0.050	0.072	0.130	0.010	0.010	0.020	0.050	0.260	0.630	1461	2624	6.988	0.064	66.404	0.128
Isoproturon	0.010	0.150	0.140	0.050	0.050	0.114	0.010	0.020	0.050	0.050	0.060	0.100	719	3366	1.471	0.091	9.165	0.182
Bromacil	0.010	0.340	0.330	0.050	0.047	0.021	0.010	0.010	0.010	0.050	0.053	0.100	1396	2689	3.848	0.065	43.465	0.131
Hexazinon	0.010	0.180	0.170	0.060	0.042	0.030	0.010	0.010	0.020	0.050	0.100	0.100	1395	2690	0.999	0.066	0.303	0.131
Bentazon	0.010	0.320	0.310	0.060	0.045	0.032	0.010	0.010	0.030	0.050	0.061	0.301	108	3977	5.845	0.233	49.276	0.461

Anhang III: Tabellen B 3

Statistische Basisparameter für alle Messstellen in den Regierungsbezirken

Alle Werte als reale Variablenwerte in [mg/l], lediglich LF in [µS/m] und Atrazin, Simazin, Desethylatrazin, Isoproturon, Bromacil, Hexazinon und Bentazon in [µg/l]

Freilassung	Perzentile										N Gültig	Fehlend	Schiefe	Stdfehler Schiefe	Kurtosis	Stdfehler Kurtosis	
	Minimum	Maximum	Spannweite	Median	Mittelwert	Stabw.	1	5	25	75							95
LF	1.100	205.000	203.900	68.800	62.775	33.147	3.400	5.100	40.400	84.300	108.000	157.600	4679	0.084	0.036	0.484	0.072
pH	3.870	9.140	5.270	7.100	6.983	0.496	5.368	6.010	6.810	7.280	7.570	7.910	4677	-1.210	0.036	3.392	0.072
Na	0.600	190.000	189.400	6.900	11.543	19.764	0.900	2.500	13.400	36.500	125.000	899	4132	0.082	0.062	41.922	0.163
K	0.100	49.700	49.600	1.600	2.449	3.750	0.300	0.400	2.700	7.000	16.888	883	4148	7.053	0.082	69.882	0.164
Ca	1.000	435.000	434.000	89.400	83.584	64.528	2.100	2.800	16.300	130.000	170.000	303.480	1427	0.800	0.065	2.319	0.129
Mg	0.100	70.700	70.600	10.900	13.337	11.969	0.400	0.900	3.175	20.200	33.600	52.544	1406	3625	0.065	1.590	0.130
Pb	0.000	0.084	0.084	0.001	0.001	0.003	0.000	0.000	0.001	0.001	0.003	0.010	900	4131	0.062	494.531	0.163
As	0.000	0.075	0.075	0.001	0.002	0.004	0.000	0.000	0.000	0.000	0.008	0.014	896	4135	0.082	146.793	0.163
Cd	0.000	0.001	0.001	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.001	540	4491	0.105	20.843	0.210
NO3	0.100	18.100	180.900	25.000	32.519	30.041	0.400	0.600	8.600	47.600	93.535	125.140	4592	1.302	0.036	1.696	0.072
SO4	0.600	860.000	859.400	22.100	36.595	58.532	0.830	2.700	5.300	48.000	110.000	223.400	905	4126	0.081	82.505	0.163
Cl	0.300	328.000	327.700	11.500	20.752	30.366	0.600	1.000	1.800	30.000	62.800	146.000	899	4132	0.082	31.180	0.163
Trichloethen	0.000	0.620	0.620	0.000	0.003	0.027	0.000	0.000	0.000	0.000	0.005	0.053	1358	3673	0.066	363.298	0.133
Tetrachloethen	0.000	1.000	1.000	0.000	0.006	0.050	0.000	0.000	0.000	0.000	0.008	0.111	1358	3673	0.066	283.287	0.133
Atrazin	0.010	1.800	1.790	0.030	0.049	0.101	0.010	0.010	0.020	0.050	0.120	0.330	1747	3288	0.059	158.962	0.117
Simazin	0.010	0.880	0.870	0.020	0.033	0.037	0.010	0.010	0.020	0.050	0.106	0.291	1743	3288	0.059	214.576	0.117
LHKW	0.000	17.804	17.804	0.005	0.025	0.486	0.000	0.000	0.001	0.010	0.020	0.181	1358	3673	0.066	1318.978	0.133
Diuron	0.010	0.570	0.560	0.050	0.044	0.025	0.010	0.010	0.050	0.050	0.050	0.061	763	4268	0.089	252.477	0.177
Desethylatrazin	0.010	1.160	1.150	0.040	0.057	0.084	0.010	0.010	0.020	0.050	0.100	0.434	1755	3276	0.058	49.476	0.117
Isoproturon	0.010	0.040	0.040	0.000	0.000	0.013	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.050	1035	3996	-2.356	6.336	0.152
Bromacil	0.010	1.600	1.590	0.050	0.097	0.107	0.010	0.010	0.020	0.050	0.100	0.261	1737	3294	0.059	124.156	0.117
Hexazinon	0.010	0.980	0.980	0.060	0.041	0.049	0.010	0.010	0.020	0.050	0.082	0.200	1737	3294	0.059	140.651	0.117
Bentazon	0.030	0.210	0.180	0.050	0.047	0.017	0.030	0.030	0.045	0.050	0.050	0.167	138	4683	0.206	61.354	0.410

Keiferstufe	Perzentile										N Gültig	Fehlend	Schiefe	Stdfehler Schiefe	Kurtosis	Stdfehler Kurtosis		
	Minimum	Maximum	Spannweite	Median	Mittelwert	Stabw.	1	5	25	75							95	99
LF	3.200	245.000	241.800	77.200	78.336	35.427	5.400	11.300	59.925	99.000	132.795	170.416	4220	0.129	0.038	0.517	0.075	
pH	3.960	9.800	5.850	7.140	7.039	0.486	5.030	5.960	7.000	7.270	7.510	7.740	4223	-2.470	0.038	8.422	0.075	
Na	0.600	110.000	109.400	7.800	12.237	13.728	0.677	1.285	3.125	16.775	37.000	77.610	676	3568	0.094	11.211	0.188	
K	0.400	53.000	52.600	1.800	3.121	4.311	0.500	0.700	1.200	3.100	10.100	21.000	663	3581	0.095	47.223	0.190	
Ca	2.500	347.900	345.400	125.000	121.837	66.873	3.500	4.615	94.050	161.475	228.115	296.549	1302	2943	0.068	0.121	0.136	
Mg	1.000	55.000	54.000	17.300	18.046	11.242	1.292	2.200	8.700	27.600	36.000	44.896	1291	2853	0.029	-0.763	0.136	
Pb	0.000	0.036	0.036	0.001	0.001	0.002	0.000	0.000	0.001	0.001	0.003	0.007	708	3536	0.092	248.410	0.183	
As	0.000	0.078	0.078	0.001	0.002	0.007	0.000	0.000	0.000	0.000	0.006	0.041	707	3537	0.092	79.570	0.184	
Cd	0.000	0.008	0.008	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.001	0.001	350	3894	0.130	250.335	0.260	
NO3	1.300	618.000	616.700	42.400	70.366	33.350	0.500	0.500	11.000	43.000	97.000	170.120	4187	57	2.126	0.093	11.703	0.076
SO4	0.900	258.000	257.100	20.800	28.221	29.530	1.100	1.800	5.500	39.625	88.000	138.604	686	3558	0.093	8.345	0.186	
Cl	0.000	1.200	1.200	0.000	0.006	0.057	0.000	0.000	0.000	0.001	0.006	0.098	1223	3021	0.070	265.456	0.140	
Trichloethen	0.000	2.200	2.200	0.000	0.011	0.095	0.000	0.000	0.000	0.001	0.027	0.207	1605	3023	0.070	307.894	0.142	
Tetrachloethen	0.010	1.000	0.990	0.050	0.045	0.078	0.010	0.010	0.010	0.050	0.090	0.240	1604	3581	0.061	70.315	0.122	
Atrazin	0.010	0.350	0.340	0.030	0.032	0.024	0.010	0.010	0.010	0.050	0.050	0.090	1604	3581	0.061	41.228	0.122	
Simazin	0.000	21.503	21.503	0.005	0.053	0.085	0.000	0.000	0.001	0.010	0.048	0.133	1220	3024	0.070	619.888	0.184	
LHKW	0.010	1.800	1.790	0.050	0.053	0.074	0.010	0.010	0.040	0.050	0.100	0.159	703	3541	0.092	445.542	0.184	
Diuron	0.010	1.760	1.770	0.050	0.056	0.114	0.010	0.010	0.030	0.050	0.128	0.459	1603	2641	0.061	113.295	0.122	
Desethylatrazin	0.010	0.500	0.490	0.050	0.049	0.038	0.010	0.010	0.040	0.050	0.050	0.241	922	3322	0.081	76.194	0.161	
Isoproturon	0.010	4.000	3.990	0.050	0.067	0.201	0.010	0.010	0.020	0.050	0.100	0.812	1583	2661	0.062	182.161	0.123	
Bromacil	0.010	2.090	2.080	0.060	0.064	0.127	0.010	0.010	0.030	0.050	0.100	0.412	1577	2667	0.062	134.489	0.123	
Hexazinon	0.010	0.320	0.310	0.050	0.042	0.036	0.010	0.010	0.010	0.050	0.093	0.293	114	4130	0.226	31.392	0.449	

Anhang III: Tabellen B 3

Statische Basisparameter für alle Messstellen in den Regierungsbezirken

Alle Werte als reale Variablenwerte in [mg/l], lediglich LF in [µS/m] und Atrazin; Simazin; Desethylatrazin; Isoproturon, Bromacil, Hexazinon und Bentazon in [µg/l]

Stützgatt	Minimum	Maximum	Spannweite	Median	Mittelwert	Stabw.	Perzentile 1	5	25	75	95	99	N Gültig	Fehlend	Schief	Stdfehler Schief	Kurtosis	Stdfehler Kurtosis
LF	9.500	632.000	622.500	79.100	87.912	42,635	28,000	49,000	65,000	98,000	151,675	268,400	4564	86	4.211	0.036	34.370	0.072
pH	5.150	8.870	3.720	7.230	7.222	0.293	5.918	6.860	7.110	7.360	7.588	8.040	4583	67	-1.905	0.036	14.714	0.072
Na	0.600	590.000	589.400	8.900	17.223	34.100	1.353	3.000	4.800	18.000	58.440	157.350	552	4098	4.088	0.104	148.560	0.208
K	0.200	66.000	65.800	1.800	3.374	5.402	0.400	0.600	0.900	3.500	10.730	30.404	541	4109	5.912	0.105	48.706	0.210
Ca	8.100	738.000	729.900	115.000	122.815	71.976	10.000	49.000	86.400	141.750	220.000	481.830	1416	3234	3.670	0.065	20.492	0.130
Mg	1.000	148.000	147.000	26.000	26.849	18.480	2.600	3.400	11.000	38.000	60.000	83.846	1410	3240	1.192	0.065	3.402	0.130
Pb	0.000	0.041	0.041	0.001	0.002	0.007	0.000	0.001	0.001	0.001	0.001	0.001	573	4077	4.501	0.102	18.897	0.204
As	0.000	0.142	0.142	0.001	0.002	0.007	0.000	0.000	0.001	0.001	0.001	0.001	571	4079	16.410	0.102	326.129	0.204
Cd	0.000	0.001	0.001	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.001	175	4475	1.777	0.184	16.23	0.365
NO3	0.100	230.000	229.900	29.000	33.233	26.345	0.100	0.500	13.000	47.000	79.740	118.000	4552	98	1.437	0.036	4.322	0.073
SO4	4.300	1490.000	1485.700	48.800	119.422	221.168	6.854	10.000	24.500	112.000	494.200	1278.120	553	4097	3.952	0.104	16.668	0.207
Cl	1.100	1620.000	1618.900	29.800	43.018	84.153	1.551	2.500	13.000	47.050	115.090	300.490	550	4100	13.085	0.104	229.503	0.208
Trichloethen	0.000	18.000	18.000	0.000	0.061	0.731	0.000	0.000	0.000	0.000	0.012	1.202	1298	3352	17.466	0.068	356.124	0.136
Tetrachloethen	0.000	14.000	14.000	0.000	0.055	0.623	0.000	0.000	0.000	0.001	0.069	0.681	1298	3352	17.931	0.068	350.048	0.136
Atrazin	0.010	1.950	1.940	0.030	0.046	0.086	0.010	0.010	0.010	0.010	0.010	0.010	1948	2702	11.083	0.055	185.658	0.111
Simazin	0.010	0.540	0.530	0.010	0.027	0.025	0.010	0.010	0.010	0.050	0.050	0.071	1885	2765	5.945	0.056	98.818	0.113
LHKW	0.000	124.075	124.075	0.005	0.265	3.906	0.000	0.000	0.003	0.010	0.104	2.228	1298	3352	26.201	0.068	792.034	0.136
Diuron	0.010	0.250	0.240	0.050	0.049	0.018	0.010	0.010	0.050	0.050	0.050	0.108	588	4064	5.810	0.101	61.588	0.202
Desethylatrazin	0.010	1.690	1.680	0.050	0.066	0.114	0.010	0.010	0.010	0.050	0.240	0.590	1948	2702	6.244	0.055	60.432	0.111
Isoproturon	0.010	0.150	0.140	0.050	0.043	0.015	0.010	0.010	0.020	0.050	0.050	0.051	993	3657	0.092	0.078	6.390	0.155
Bromacil	0.010	4.900	4.890	0.050	0.051	0.142	0.010	0.010	0.010	0.050	0.050	0.187	1825	2825	25.649	0.057	793.510	0.115
Hexazinon	0.010	4.900	4.890	0.010	0.036	0.164	0.010	0.010	0.010	0.050	0.050	0.148	1820	2830	23.934	0.057	630.716	0.115
Bentazon	0.010	1.800	1.590	0.050	0.075	0.175	0.010	0.010	0.020	0.050	0.218	1.460	134	4516	7.150	0.209	557.69	0.416
Tübingen	Minimum	Maximum	Spannweite	Median	Mittelwert	Stabw.	Perzentile 1	5	25	75	95	99	N Gültig	Fehlend	Schief	Stdfehler Schief	Kurtosis	Stdfehler Kurtosis
LF	20.000	259.000	239.000	68.600	70.630	20.433	37.700	43.700	58.900	77.800	101.000	155.161	4176	7	2.583	0.038	15.175	0.076
pH	6.100	9.320	3.220	7.230	7.252	0.236	6.790	6.950	7.110	7.360	7.640	7.914	4179	4	1.473	0.038	9.671	0.076
Na	0.600	268.000	267.400	8.100	15.295	22.257	0.997	1.700	4.500	15.100	66.590	101.003	496	3687	4.445	0.110	32.134	0.219
K	0.100	166.000	165.900	1.300	2.943	8.666	0.100	0.300	0.700	2.800	8.900	25.867	478	3705	14.338	0.112	248.255	0.223
Ca	2.400	604.000	601.600	113.000	118.137	43.094	15.808	62.980	101.000	129.000	181.600	284.160	1283	2900	3.516	0.068	31.619	0.137
Mg	0.900	76.200	75.300	15.850	16.825	11.997	1.000	1.385	7.200	22.400	39.200	55.817	1256	2927	1.127	0.069	1.874	0.138
Pb	0.000	0.019	0.019	0.001	0.001	0.001	0.000	0.000	0.001	0.001	0.003	0.005	511	3672	8.656	0.108	95.184	0.216
As	0.000	0.023	0.023	0.001	0.001	0.002	0.000	0.000	0.000	0.001	0.003	0.015	511	3672	5.476	0.108	33.946	0.216
Cd	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	172	4011	0.869	0.185	-1.100	0.368
NO3	0.100	185.300	185.200	24.300	27.517	20.656	0.100	1.135	12.475	36.900	64.500	102.814	4126	57	1.615	0.038	4.634	0.076
SO4	0.800	1290.000	1289.200	23.950	38.874	77.583	2.897	6.585	14.500	35.450	132.750	373.810	496	3687	10.222	0.110	144.358	0.219
Cl	0.100	194.000	193.900	18.900	22.676	21.852	0.400	2.300	8.500	29.675	55.830	130.150	496	3687	3.607	0.110	21.784	0.219
Trichloethen	0.000	1.665	1.665	0.000	0.004	0.064	0.000	0.000	0.000	0.000	0.001	0.008	1154	3029	22.562	0.072	532.863	0.144
Tetrachloethen	0.000	14.500	14.500	0.000	0.035	0.647	0.000	0.000	0.000	0.030	0.100	0.640	1154	3029	20.311	0.072	419.400	0.144
Atrazin	0.010	2.700	2.690	0.030	0.049	0.123	0.010	0.010	0.010	0.030	0.100	0.640	1714	2489	10.913	0.059	172.137	0.118
Simazin	0.010	0.580	0.570	0.020	0.024	0.024	0.010	0.010	0.010	0.030	0.100	0.640	1714	2489	10.913	0.059	172.137	0.118
LHKW	0.000	158.005	158.005	0.005	0.285	6.456	0.000	0.000	0.005	0.008	0.012	0.079	1154	3029	23.930	0.072	572.940	0.144
Diuron	0.020	0.420	0.400	0.050	0.047	0.081	0.020	0.020	0.050	0.050	0.11782	0.090	592	3591	10.222	0.100	224.146	0.201
Desethylatrazin	0.010	2.900	2.890	0.030	0.081	0.228	0.010	0.020	0.020	0.060	0.250	1.296	1714	2489	8.656	0.059	83.102	0.118
Isoproturon	0.020	0.150	0.130	0.050	0.052	0.018	0.020	0.020	0.050	0.050	0.100	0.100	947	3236	1.655	0.079	4.967	0.159
Bromacil	0.010	0.230	0.220	0.050	0.062	0.027	0.010	0.010	0.050	0.050	0.100	0.100	1622	2561	1.128	0.061	3.307	0.121
Hexazinon	0.010	0.850	0.840	0.020	0.044	0.046	0.010	0.010	0.020	0.050	0.100	0.100	1631	2552	8.934	0.061	131.030	0.121
Bentazon	0.010	0.050	0.040	0.050	0.034	0.019	0.010	0.010	0.020	0.050	0.050	0.050	95	4088	-0.398	0.247	-1.800	0.490

Anhang III: Tabellen B 4

Statistische Basisparameter für alle Messstellen in den Klassen der Geogenen Grundwasserbeschaffenheit

Alle Werte als reale Variablenwerte in [mg/l], lediglich LF in [mS/m] und Atrazin, Simazin, Diuron, Bromacil, Hexazinon und Bentazon in [µg/l]

Holozän	Perzentile										Stabw.	Mittelwert	Median	Spannweite	Maximum	Minimum	N	Gültig	Fehlend	Schiefe	Stdfehler Schiefe	Kurtosis	Stdfehler Kurtosis
	1	5	25	75	95	99																	
LF	4.900	632.000	627.100	76.200	84.459	50.883	8.500	19.000	59.000	98.000	167.000	273.200	2879	47	3.409	0.046	24.748	0.091					
pH	5.530	9.800	4.270	7.170	7.133	7.030	7.030	6.600	7.030	7.280	7.500	7.950	2983	33	-0.258	0.046	7.166	0.091					
Na	0.600	590.000	589.400	10.750	20.689	38.419	1.011	1.855	5.800	21.975	74.820	159.450	410	2516	9.108	0.121	120.987	0.240					
K	0.100	166.000	165.900	2.350	4.343	9.994	0.200	0.400	1.200	4.250	13.900	31.924	401	2625	11.057	0.122	175.402	0.243					
Ca	9.000	736.000	729.000	128.000	141.382	80.725	14.530	44.220	109.000	152.450	263.700	589.160	805	2121	3.340	0.086	16.351	0.172					
Mg	1.000	148.000	147.000	20.000	22.247	18.636	1.399	3.000	6.500	31.925	56.915	77.822	798	2128	1.417	0.087	4.922	0.173					
Pb	0.000	0.014	0.001	0.001	0.001	0.001	0.000	0.000	0.000	0.001	0.001	0.001	418	2508	5.818	0.119	45.099	0.238					
As	0.000	0.142	0.001	0.001	0.002	0.008	0.000	0.000	0.001	0.002	0.007	0.028	417	2509	14.782	0.120	256.691	0.238					
Cd	0.000	0.001	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.001	0.001	0.001	104	2822	2.383	0.237	4.981	0.469					
NO3	0.100	143.000	142.900	20.400	23.882	18.180	5.017	8.600	11.000	33.125	57.000	85.200	2870	56	1.425	0.046	3.528	0.091					
SO4	4.200	1490.000	1485.800	51.950	123.266	228.633	5.017	8.600	18.000	122.750	591.500	1312.410	416	2510	3.798	0.120	15.543	0.239					
Cl	1.100	1620.000	1618.900	29.000	40.858	89.487	2.013	4.000	13.150	43.750	93.090	300.870	412	2514	13.941	0.120	238.080	0.240					
Trichloethen	0.000	6.200	6.200	0.000	0.022	0.279	0.000	0.000	0.000	0.001	0.011	0.011	1034	1892	17.768	0.076	340.300	0.152					
Tetrachloethen	0.000	14.500	14.500	0.000	0.089	0.945	0.000	0.000	0.000	0.002	0.017	0.017	1033	1893	13.311	0.076	180.965	0.152					
Atrazin	0.010	2.700	2.690	0.030	0.042	0.099	0.010	0.010	0.020	0.050	0.090	0.170	1298	1628	21.176	0.068	516.929	0.136					
Simazin	0.010	0.540	0.530	0.030	0.030	0.024	0.010	0.010	0.010	0.050	0.050	0.060	1264	1662	8.336	0.068	160.396	0.138					
LHKW	0.000	156.005	156.005	0.005	0.421	6.929	0.000	0.000	0.002	0.010	0.113	1.173	1034	1892	21.640	0.076	480.500	0.152					
Diuron	0.010	0.250	0.240	0.050	0.049	0.018	0.010	0.010	0.050	0.050	0.050	0.050	431	2495	6.762	0.118	74.815	0.235					
Desethylatrazin	0.010	1.520	1.510	0.050	0.053	0.071	0.010	0.010	0.020	0.050	0.160	0.290	1298	1628	9.200	0.068	153.260	0.136					
Isoproturon	0.010	0.300	0.320	0.050	0.046	0.017	0.010	0.010	0.020	0.050	0.073	0.135	1233	1693	6.611	0.090	112.285	0.180					
Bromacil	0.010	4.900	4.890	0.050	0.055	0.167	0.010	0.010	0.020	0.050	0.100	0.230	1233	1693	6.611	0.070	608.253	0.139					
Hexazinon	0.010	4.900	4.890	0.050	0.051	0.189	0.010	0.010	0.010	0.050	0.100	0.217	1230	1696	19.759	0.070	428.698	0.139					
Bentazon	0.010	0.050	0.040	0.050	0.039	0.016	0.010	0.010	0.020	0.050	0.050	0.050	64	2862	-0.926	0.299	-1.039	0.590					

Gefängnis	Perzentile										Stabw.	Mittelwert	Median	Spannweite	Maximum	Minimum	N	Gültig	Fehlend	Schiefe	Stdfehler Schiefe	Kurtosis	Stdfehler Kurtosis
	1	5	25	75	95	99																	
LF	2.400	206.000	203.600	14.100	28.906	29.885	3.200	3.700	5.900	45.000	84.380	119.880	1511	14	1.359	0.063	1.426	0.126					
pH	3.870	8.600	6.419	6.440	7.228	7.080	4.438	5.080	5.960	7.080	7.350	7.620	1513	12	-0.555	0.063	-0.094	0.126					
Na	0.600	92.000	91.400	2.400	3.506	6.016	0.600	0.750	1.600	3.100	10.000	23.670	529	996	9.387	0.106	116.870	0.212					
K	0.300	40.000	39.700	1.200	1.557	2.200	0.300	0.500	0.700	1.800	3.000	4.464	518	1007	12.145	0.107	191.929	0.214					
Ca	1.000	266.000	265.000	6.000	27.121	44.437	1.900	2.400	4.125	15.775	135.450	154.450	684	841	2.024	0.093	3.207	0.187					
Mg	0.200	48.000	48.800	2.300	6.067	8.677	0.364	0.700	1.300	4.800	27.940	39.360	663	862	2.302	0.095	4.764	0.190					
Pb	0.000	0.015	0.015	0.001	0.001	0.001	0.000	0.000	0.000	0.001	0.001	0.008	548	977	6.048	0.104	42.736	0.208					
As	0.000	0.021	0.021	0.001	0.001	0.002	0.000	0.000	0.000	0.002	0.007	0.010	547	978	3.106	0.104	12.445	0.209					
Cd	0.000	0.001	0.001	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.001	488	1057	1.463	0.113	2.566	0.225					
NO3	0.500	140.000	139.500	10.700	18.104	19.610	0.700	2.700	5.000	22.000	56.000	83.000	1499	26	2.050	0.063	5.278	0.126					
SO4	0.600	200.000	199.400	5.300	11.097	18.156	0.700	2.300	3.900	10.075	35.380	82.098	540	985	6.215	0.105	52.818	0.210					
Cl	0.300	110.000	109.700	1.900	5.673	11.062	0.600	0.800	1.300	3.900	29.935	56.670	532	993	4.386	0.106	24.457	0.211					
Trichloethen	0.000	1.200	1.200	0.000	0.011	0.098	0.000	0.000	0.000	0.000	0.002	0.731	314	1211	10.337	0.138	109.540	0.274					
Tetrachloethen	0.000	0.064	0.064	0.000	0.001	0.005	0.000	0.000	0.000	0.000	0.004	0.022	314	1211	9.311	0.138	97.007	0.274					
Atrazin	0.010	1.400	1.390	0.030	0.029	0.103	0.010	0.010	0.020	0.050	0.122	0.470	436	1089	9.290	0.117	105.975	0.233					
Simazin	0.010	0.100	0.090	0.020	0.049	0.091	0.010	0.010	0.020	0.050	0.090	0.166	434	1091	10.610	0.117	-0.477	0.234					
LHKW	0.000	1.252	1.252	0.005	0.018	0.101	0.000	0.000	0.005	0.010	0.020	0.0759	314	1211	10.324	0.138	109.764	0.274					
Diuron	0.010	0.120	0.110	0.050	0.049	0.119	0.010	0.010	0.050	0.050	0.113	0.113	136	1389	0.427	0.208	3.135	0.413					
Desethylatrazin	0.010	0.690	0.680	0.030	0.062	0.098	0.010	0.010	0.020	0.050	0.282	0.630	436	1089	4.041	0.117	18.351	0.233					
Isoproturon	0.010	0.150	0.140	0.050	0.049	0.174	0.010	0.010	0.050	0.050	0.100	0.100	219	1306	1.353	0.164	16.040	0.479					
Bromacil	0.010	1.400	1.390	0.050	0.060	0.126	0.010	0.010	0.020	0.050	0.100	0.2776	426	1099	8.021	0.118	71.279	0.236					
Hexazinon	0.010	0.420	0.410	0.050	0.047	0.041	0.010	0.010	0.020	0.050	0.100	0.200	420	1045	3.047	0.119	19.235	0.238					
Bentazon	0.030	0.050	0.020	0.050	0.049	0.005	0.030	0.030	0.050	0.050	0.050	0.050	30	1495	-3.660	0.427	12.207	0.833					

Anhang III: Tabellen B 4

Statistische Basisparameter für alle Messstellen in den Klassen der Geogenen Grundwasserbeschaffenheit

Alle Werte als reale Variablenwerte in [mg/l], lediglich LF in [µS/m] und Atrazin, Simazin, Diuron, Desethylatrazin, Isoproturon, Bromacil, Hexazinon und Bentazon in [µg/l]

Mittel_a	Perzentile										N Gültig	Fehlend	Schiefe	Stdfehler Schiefe	Kurtosis	Stdfehler Kurtosis	
	1	5	25	76	95	99											
LF	1.100	376.000	73.200	76.234	26.343	20.261	61.100	88.000	123.000	158.817	10060	71	1.353	0.024	8.065	0.049	
pH	4.960	9.320	7.180	7.177	7.032	6.180	7.050	7.320	7.918	7.918	10058	73	-0.860	0.024	8.473	0.049	
Na	0.600	258.000	11.000	15.914	18.857	1.955	2.800	6.400	17.600	95.970	1354	8771	4.759	0.067	36.513	0.133	
K	0.100	72.000	1.800	3.131	4.553	0.159	0.400	1.100	3.600	20.769	1330	8801	6.744	0.066	70.935	0.134	
Ca	1.200	481.000	120.000	122.575	45.751	17.168	43.555	100.000	143.425	197.530	3066	7065	0.696	0.044	3.222	0.088	
Mg	0.100	140.000	14.000	15.948	9.431	1.000	2.765	8.800	21.600	31.635	39667	7099	1.344	0.044	10.108	0.089	
Pb	0.000	0.084	0.001	0.001	0.003	0.000	0.000	0.001	0.001	0.001	1396	8735	20.669	0.065	565.747	0.131	
As	0.000	0.076	0.001	0.002	0.006	0.000	0.000	0.001	0.002	0.007	1393	8738	8.929	0.066	96.932	0.131	
Cd	0.000	0.008	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.001	544	9687	18.497	0.105	384.803	0.209	
NO3	0.100	249.000	27.950	35.779	32.373	0.100	0.500	12.000	49.900	97.000	153.474	9920	211	1.619	0.025	3.629	0.049
SO4	0.800	824.000	823.200	57.598	67.149	3.872	8.910	21.150	66.000	171.900	353.884	1361	8770	4.124	0.068	27.213	0.133
Cl	0.100	608.000	607.900	31.867	35.290	0.982	3.010	12.400	40.350	84.800	177.140	1361	8770	5.691	0.086	64.162	0.133
Trichloethen	0.000	18.000	0.000	0.016	0.432	0.000	0.000	0.000	0.000	0.003	2991	7140	34.154	0.045	1247.005	0.090	
Tetrachloethen	0.000	5.700	0.000	0.010	0.144	0.000	0.000	0.000	0.000	0.012	1300	2990	7141	30.357	1057.235	0.090	
Atrazin	0.010	3.400	3.390	0.052	0.129	0.010	0.010	0.010	0.050	0.150	0.640	4071	6060	11.134	0.038	183.696	0.077
Simazin	0.010	0.880	0.870	0.028	0.033	0.010	0.010	0.010	0.050	0.100	0.068	6063	11.070	0.038	193.352	0.077	
LHKW	0.000	124.075	124.075	0.065	0.079	0.000	0.000	0.001	0.010	0.020	0.178	2988	7143	45.961	0.045	2273.288	0.090
Diuron	0.010	1.800	1.790	0.060	0.047	0.010	0.010	0.050	0.050	0.050	0.100	1702	8429	25.685	0.059	814.058	0.119
Desethylatrazin	0.010	2.900	2.890	0.030	0.071	0.177	0.010	0.010	0.020	0.230	4076	6055	9.400	0.038	109.921	0.077	
Isoproturon	0.010	5.000	4.900	0.048	0.027	0.010	0.010	0.050	0.050	0.050	0.100	2352	7779	8.469	0.050	118.920	0.101
Bromacil	0.010	4.000	3.990	0.055	0.137	0.010	0.010	0.020	0.050	0.100	0.395	3946	6185	16.760	0.039	355.509	0.078
Hexazinon	0.010	3.200	3.190	0.060	0.047	0.115	0.010	0.020	0.050	0.100	0.290	3953	6178	16.957	0.039	370.031	0.078
Bentazon	0.010	0.210	0.200	0.060	0.040	0.027	0.010	0.010	0.020	0.050	0.203	297	9834	2.932	0.141	15.482	0.282

Mittel_b	Perzentile										N Gültig	Fehlend	Schiefe	Stdfehler Schiefe	Kurtosis	Stdfehler Kurtosis	
	1	5	25	76	95	99											
LF	9.500	404.000	75.100	78.243	27.660	11.900	47.000	63.000	87.000	119.300	199.300	2299	19	2.695	0.051	16.493	0.102
pH	5.790	8.500	7.300	7.271	7.239	5.980	6.900	7.150	7.420	7.600	7.710	2305	13	-1.919	0.051	8.818	0.102
Na	1.300	98.200	5.900	9.784	12.824	1.400	2.645	3.800	10.075	30.830	87.020	248	2070	4.359	0.155	22.620	0.308
K	0.100	45.000	1.500	2.723	5.096	0.340	0.520	0.800	2.300	9.400	39.840	239	2079	6.032	0.157	42.240	0.314
Ca	8.100	602.000	90.000	99.083	60.496	10.000	45.950	69.000	110.000	164.150	419.810	718	1600	3.813	0.091	20.659	0.183
Mg	2.600	101.600	34.000	34.095	13.646	2.832	8.700	28.000	41.000	57.200	70.668	715	1603	0.395	0.091	2.311	0.183
Pb	0.000	0.041	0.001	0.004	0.011	0.000	0.000	0.001	0.001	0.037	0.041	256	2062	2.820	0.152	6.142	0.303
As	0.000	0.019	0.001	0.001	0.002	0.000	0.000	0.001	0.001	0.004	0.016	294	2084	5.745	0.153	38.896	0.304
Cd	0.000	0.001	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.001	0.001	111	2207	1.401	0.229	1.282	0.455
NO3	0.500	145.000	30.000	32.075	20.995	0.500	1.845	16.000	44.400	71.000	98.644	2288	30	0.847	0.051	1.308	0.102
SO4	6.400	1220.000	1213.600	75.139	142.316	11.450	15.275	24.000	62.750	286.500	920.350	244	2074	5.310	0.156	31.768	0.310
Cl	1.300	154.000	17.900	24.934	26.843	1.500	1.830	6.450	32.700	80.200	144.480	245	2073	2.345	0.156	6.768	0.310
Trichloethen	0.000	0.620	0.000	0.004	0.043	0.000	0.000	0.000	0.000	0.004	0.062	496	1822	13.600	0.110	192.645	0.219
Tetrachloethen	0.000	1.000	0.000	0.010	0.063	0.000	0.000	0.000	0.000	0.023	0.315	496	1822	10.471	0.110	137.401	0.219
Atrazin	0.010	0.800	0.790	0.045	0.068	0.010	0.010	0.050	0.050	0.110	0.439	888	1450	6.480	0.083	51.793	0.166
Simazin	0.010	0.320	0.310	0.031	0.029	0.010	0.010	0.010	0.050	0.050	0.175	848	1470	3.776	0.084	24.351	0.166
LHKW	0.000	17.804	17.804	0.052	0.052	0.000	0.000	0.005	0.010	0.051	0.334	496	1822	21.975	0.110	486.928	0.219
Diuron	0.010	0.190	0.180	0.050	0.052	0.010	0.010	0.040	0.050	0.091	0.129	277	2041	3.364	0.146	22.690	0.292
Desethylatrazin	0.010	1.690	1.680	0.066	0.126	0.010	0.010	0.010	0.050	0.226	0.726	868	1450	6.826	0.083	65.935	0.166
Isoproturon	0.010	0.150	0.140	0.050	0.047	0.010	0.010	0.020	0.050	0.100	0.420	420	1898	1.054	0.119	12.486	0.238
Bromacil	0.010	1.200	1.190	0.058	0.090	0.010	0.010	0.050	0.050	0.100	0.558	841	1477	9.325	0.084	96.350	0.168
Hexazinon	0.010	0.420	0.410	0.038	0.041	0.010	0.010	0.010	0.050	0.100	0.142	841	1477	2.551	0.084	16.563	0.168
Bentazon	0.010	1.600	1.590	0.091	0.241	0.010	0.010	0.020	0.050	0.160	1.600	64	2254	5.645	0.299	31.785	0.590

Anhang III: Tabellen B 4

Statistische Basisparameter für alle Messstellen in den Klassen der Geogenen Grundwasserbeschaffenheit

Alle Werte als reale Variablenwerte in [mg/l], lediglich LF in [µS/m] und Atrazin, Simazin, Diuron, Desethylatrazin, Isoproturon, Bromacil, Hexazinon und Bentazon in [µg/l]

MittelHoch	Minimum	Maximum	Spannweite	Median	Mittelwert	Stabw.	Perzentile 1	5	25	75	95	99	N Gültig	Fehlend	Schiefte	Stdfehler Schiefe	Kurtosis	Stdfehler Kurtosis
LF	21.200	355.000	333.800	85.000	90.618	28.891	21.200	355.000	21.200	355.000	21.200	355.000	1172	6	2.499	0.071	12.940	0.143
pH	6.540	8.020	1.480	7.210	7.223	0.195	6.540	8.020	6.540	8.020	6.540	8.020	1176	2	0.459	0.071	1.542	0.143
Na	1.100	109.000	107.900	5.800	11.382	15.216	1.100	109.000	1.100	109.000	1.100	109.000	121	1057	3.689	0.220	17.236	0.437
K	0.300	7.900	7.600	1.200	1.704	1.427	0.300	7.900	0.300	7.900	0.300	7.900	116	1062	2.060	0.225	5.079	0.446
Ca	67.500	600.000	532.500	132.000	147.809	68.850	67.500	600.000	67.500	600.000	67.500	600.000	225	953	3.655	0.162	18.662	0.323
Mg	12.300	94.000	81.700	32.800	35.264	15.309	12.300	94.000	12.300	94.000	12.300	94.000	225	953	1.072	0.162	1.212	0.323
Pb	0.000	0.007	0.006	0.001	0.001	0.001	0.000	0.007	0.000	0.007	0.000	0.007	116	1062	3.054	0.225	11.221	0.446
As	0.000	0.008	0.008	0.001	0.001	0.001	0.000	0.008	0.000	0.008	0.000	0.008	116	1062	2.738	0.225	11.039	0.446
Cd	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	30	1148	1.017	0.427	-0.315	0.833
NO3	0.500	138.000	137.500	39.000	41.024	24.483	0.500	138.000	0.500	138.000	0.500	138.000	1159	19	1.012	0.072	1.657	0.144
SO4	8.000	1350.000	1342.000	55.500	115.335	186.412	8.000	1350.000	8.000	1350.000	8.000	1350.000	122	1056	4.717	0.219	25.882	0.435
Cl	1.300	161.000	159.700	31.600	41.874	34.868	1.300	161.000	1.300	161.000	1.300	161.000	121	1057	1.537	0.220	2.080	0.437
Trichloethen	0.000	5.850	5.850	0.000	0.066	0.475	0.000	5.850	0.000	5.850	0.000	5.850	277	901	9.515	0.146	100.429	0.292
Tetrachloethen	0.000	2.590	2.590	0.000	0.022	0.217	0.000	2.590	0.000	2.590	0.000	2.590	277	901	11.530	0.146	133.153	0.292
Atrazin	0.010	0.630	0.620	0.050	0.042	0.043	0.010	0.630	0.010	0.630	0.010	0.630	451	727	6.779	0.115	82.731	0.229
Simazin	0.010	0.080	0.070	0.030	0.031	0.019	0.010	0.080	0.010	0.080	0.010	0.080	442	736	-0.044	0.116	-1.835	0.232
LHRW	0.000	31.044	31.044	0.005	0.243	2.124	0.000	31.044	0.000	31.044	0.000	31.044	277	901	12.458	0.146	169.478	0.292
Diuron	0.010	0.100	0.090	0.050	0.050	0.015	0.010	0.100	0.010	0.100	0.010	0.100	149	1029	0.933	0.199	6.334	0.395
Desethylatrazin	0.010	0.700	0.690	0.050	0.057	0.067	0.010	0.700	0.010	0.700	0.010	0.700	452	726	4.306	0.115	27.879	0.229
Isoproturon	0.010	0.600	0.600	0.040	0.041	0.014	0.010	0.600	0.010	0.600	0.010	0.600	230	948	-1.043	0.160	-0.752	0.320
Bromacil	0.010	0.600	0.590	0.050	0.046	0.049	0.010	0.600	0.010	0.600	0.010	0.600	432	746	7.499	0.117	71.671	0.234
Hexazinon	0.010	0.360	0.360	0.050	0.044	0.037	0.010	0.360	0.010	0.360	0.010	0.360	431	747	1.867	0.118	10.980	0.235
Bentazon	0.020	0.410	0.390	0.060	0.067	0.092	0.020	0.410	0.020	0.410	0.020	0.410	40	1138	2.065	0.374	3.743	0.733

Anhang III: Tabellen B 5

Statistische Basisparameter für alle Messtellen in den Landnutzungsklassen

Alle Werte als reale Variablenwerte in [mg/l], lediglich LF in [µg/l], lediglich LF in [µg/l] und Atrazin, Simazin, Desethylatrazin, Isoproturon, Bromacil, Hexazinon und Bentazon in [µg/l]

Ackter	Perzentile										N Gültig	Fehlend	Schiefe	Stdfehler Schiefe	Kurtosis	Stdfehler Kurtosis	
	Minimum	Maximum	Spannweite	Median	Mittelwert	Stchw.	1	5	25	75							95
LF	1.100	225.000	223.900	78.000	81,573	25,292	26,340	47,400	66.000	92.800	126.000	163.800	6139	0.931	0.031	2.493	0.063
pH	5.530	9.320	3.790	7.180	7.170	0.000	6.235	6.750	7.050	7.300	7.530	7.990	6147	41	0.141	8.927	0.062
Na	0.900	258.000	257.100	10.500	16.234	24.974	1.116	3.200	6.400	16.000	48.240	165.880	619	5573	5.333	35.312	0.197
K	0.100	49.700	49.600	1.700	2.938	4.377	0.950	0.450	1.100	3.200	8.680	26.000	599	5689	0.089	47.633	0.199
Ca	1.300	392.000	390.700	124.400	128,735	46,791	22,886	64,540	101.000	150.000	206.820	283.140	1855	4333	1.017	3.209	0.114
Mg	0.900	75.100	74.200	19.500	20,778	12,255	1,100	3.600	11.500	29.000	42.000	57.664	1841	4347	0.057	0.673	0.114
Pb	0.000	0.019	0.019	0.001	0.001	0.001	0.001	0.001	0.001	0.001	0.003	0.005	600	5588	7.745	82.301	0.199
As	0.000	0.075	0.075	0.001	0.002	0.004	0.000	0.000	0.001	0.001	0.004	0.017	601	5587	11.642	183.884	0.199
Cd	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	180	6008	0.122	0.360	0.360
NO3	0.100	230.000	229.900	37.300	43,810	33,565	6,032	10,000	21.000	61.000	103.000	161.000	6086	102	1.308	0.031	0.063
SO4	1.900	835.000	834.100	42.200	64,822	82,048	6,032	10,000	27.000	68.600	187.400	480.320	615	5573	4.823	32.063	0.197
Cl	0.400	208.000	207.600	29.850	33,780	26,245	0,719	5,295	16.450	43.600	73.340	147.588	618	5570	2.516	10.461	0.196
Trichloethen	0.000	0.062	0.062	0.000	0.001	0.004	0.000	0.000	0.000	0.000	0.002	0.015	1441	4747	11.249	142.439	0.129
Tetrachloethen	0.000	2.200	2.200	0.000	0.004	0.069	0.000	0.000	0.000	0.000	0.004	0.049	1441	4747	25.955	758.559	0.129
Atrazin	0.010	3.400	3.390	0.030	0.052	0.136	0.010	0.010	0.010	0.050	0.150	0.360	2305	3883	13.183	0.051	0.102
Simazin	0.010	0.880	0.870	0.020	0.026	0.027	0.010	0.010	0.010	0.050	0.150	0.360	2305	3883	15.655	0.051	0.102
LHKW	0.000	2.224	2.224	0.005	0.011	0.081	0.000	0.000	0.001	0.010	0.020	0.068	1439	4749	20.032	464.410	0.129
Diuron	0.010	0.790	0.780	0.050	0.048	0.032	0.010	0.010	0.050	0.150	0.360	0.858	938	5250	15.491	329.705	0.160
Desethylatrazin	0.010	2.000	1.990	0.040	0.065	0.103	0.010	0.010	0.020	0.040	0.090	0.240	499	3881	6.279	72.931	0.102
Isoproturon	0.010	0.390	0.370	0.050	0.048	0.021	0.010	0.010	0.050	0.150	0.360	0.858	1277	4911	6.301	80.373	0.137
Bromacil	0.010	4.900	4.890	0.050	0.053	0.148	0.010	0.010	0.020	0.040	0.100	0.240	2254	3934	20.191	0.052	0.103
Hexazinon	0.010	4.900	4.890	0.030	0.045	0.172	0.010	0.010	0.010	0.050	0.100	0.189	2256	3932	21.692	511.606	0.103
Bentazon	0.010	1.800	1.590	0.050	0.058	0.137	0.010	0.010	0.030	0.050	0.131	1.050	218	5970	9.362	95.116	0.328

Grünland	Perzentile										N Gültig	Fehlend	Schiefe	Stdfehler Schiefe	Kurtosis	Stdfehler Kurtosis	
	Minimum	Maximum	Spannweite	Median	Mittelwert	Stchw.	1	5	25	75							95
LF	5.200	275.000	269.800	69.700	70,896	29,292	9,300	22.300	56.400	82.100	114.080	175.000	4823	54	1.613	9.524	0.071
pH	4.780	8.600	3.820	7.190	7.194	0.366	5.380	6.470	7.040	7.320	7.550	7.770	4834	43	-2.299	8.921	0.070
Na	0.600	147.000	146.400	7.300	10,559	12,428	1,500	2.495	4.500	11.625	28.335	79.321	518	4359	5.105	38.305	0.214
K	0.100	40.000	39.900	1.400	2.201	2.877	0.100	0.400	0.900	2.500	6.450	13.696	501	4376	6.790	68.763	0.218
Ca	3.800	650.000	646.200	113.000	116,472	58,772	8,916	27.000	95.800	136.800	201.720	348.640	1223	3654	2.689	17.550	0.140
Mg	0.700	76.200	75.500	16.100	19,384	14,190	1,112	2.900	8.000	27.000	49.000	60.072	1211	3666	1.034	0.070	0.140
Pb	0.000	0.016	0.015	0.001	0.001	0.001	0.000	0.000	0.001	0.001	0.003	0.005	657	4340	5.140	43.465	0.210
As	0.000	0.043	0.043	0.001	0.002	0.003	0.000	0.000	0.001	0.001	0.005	0.015	534	4343	7.614	87.794	0.211
Cd	0.000	0.001	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.001	0.001	234	4643	2.181	4.080	0.317
NO3	0.100	142.000	141.900	23.800	27,912	21,559	2,744	6.500	11.325	40.000	69.000	96.000	4800	77	1.240	0.035	0.071
SO4	1.300	1490.000	1488.700	30.000	57,058	109,586	2,744	6.500	15.000	61.050	172.800	395.380	521	4356	5.444	93.990	0.214
Cl	0.500	328.000	327.500	19.550	24,831	23,638	0,933	3,795	10.550	32.600	58.470	113.072	518	4359	8.544	55.444	0.214
Trichloethen	0.000	0.206	0.206	0.000	0.001	0.006	0.000	0.000	0.000	0.000	0.001	0.006	1089	3788	29.563	930.423	0.148
Tetrachloethen	0.000	0.750	0.750	0.000	0.003	0.035	0.010	0.010	0.000	0.000	0.003	0.020	1089	3788	18.743	361.919	0.148
Atrazin	0.010	1.200	1.190	0.030	0.047	0.087	0.010	0.010	0.010	0.050	0.110	0.570	1836	3041	7.086	0.057	0.114
Simazin	0.010	0.570	0.560	0.020	0.028	0.030	0.010	0.010	0.010	0.050	0.110	0.084	1827	3041	9.147	128.953	0.114
LHKW	0.000	0.778	0.778	0.005	0.008	0.037	0.000	0.000	0.002	0.010	0.014	0.030	1089	3788	17.729	331.326	0.148
Diuron	0.010	0.190	0.180	0.050	0.049	0.115	0.010	0.010	0.050	0.150	0.360	0.858	656	4221	2.642	24.636	0.191
Desethylatrazin	0.010	2.600	2.590	0.040	0.076	0.177	0.010	0.010	0.020	0.050	0.100	0.260	772	3037	8.445	60.082	0.114
Isoproturon	0.010	0.350	0.320	0.050	0.050	0.119	0.010	0.010	0.050	0.150	0.360	0.858	882	3995	4.521	55.160	0.164
Bromacil	0.010	1.100	1.090	0.050	0.047	0.041	0.010	0.010	0.010	0.050	0.100	0.189	1728	3149	17.426	394.580	0.118
Hexazinon	0.010	0.160	0.150	0.050	0.041	0.028	0.010	0.010	0.020	0.050	0.100	0.189	1730	3147	10.020	0.085	0.161
Bentazon	0.010	0.280	0.270	0.050	0.041	0.033	0.010	0.010	0.020	0.050	0.100	0.255	161	4716	4.268	26.554	0.380

Anhang III: Tabellen B 5

Statische Basisparameter für alle Messstellen in den Landnutzungsklassen

Alle Werte als reale Variablenwerte in [mg/l], lediglich LF in [µS/m] und Atrazin, Simazin, Desethylatrazin, Isoproturon, Bromacil, Hexazinon und Bentazon in [µg/l]

Wald	Perzentile										N Gültig	Fehlend	Schiefe	Stdfehler Schiefe	Kurtosis	Stdfehler Kurtosis	
	Minimum	Maximum	Spannweite	Median	Mittelwert	Stdabw.	1	5	25	76							95
LF	2.400	199.300	196.900	56.100	47.749	29.892	3.740	4.500	12.400	70.900	88.300	105.900	2639	-0.138	0.048	-0.984	0.095
pH	3.870	8.330	4.460	7.200	6.928	0.727	4.743	5.430	6.510	7.410	7.880	7.977	2843	0.048	0.048	1.227	0.095
Na	0.600	70.100	69.500	2.700	4.689	6.943	0.800	0.800	1.800	4.225	16.565	40.650	786	0.067	0.088	58.026	0.174
K	0.100	20.800	20.800	1.100	1.429	1.442	0.200	0.400	0.600	1.800	3.300	7.939	775	0.088	0.067	59.500	0.175
Ca	1.000	192.400	191.400	56.000	56.286	51.777	2.100	2.700	5.300	107.000	136.000	157.967	1110	0.073	0.073	-1.434	0.147
Mg	0.100	54.000	53.900	3.700	10.329	11.980	0.400	0.800	1.700	16.600	35.720	42.228	1083	0.074	0.074	0.528	0.149
Pb	0.000	0.041	0.041	0.001	0.002	0.006	0.000	0.000	0.000	0.001	0.004	0.039	851	0.084	0.084	30.176	0.167
As	0.000	0.076	0.076	0.001	0.002	0.006	0.000	0.000	0.000	0.001	0.007	0.161	847	0.084	0.084	107.926	0.168
AcD	0.000	0.001	0.001	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.001	0.001	719	0.091	0.091	6.468	0.182
NO3	0.100	125.900	125.800	13.000	20.033	20.414	0.400	0.500	5.400	29.925	55.000	103.000	2626	0.048	0.048	5.143	0.096
SO4	0.600	334.000	333.400	9.800	19.506	26.147	0.800	2.880	4.600	24.000	70.000	122.080	795	0.087	0.087	36.037	0.173
Cl	0.100	103.000	102.900	2.600	7.374	12.245	0.500	0.900	1.500	6.600	30.700	62.449	1885	0.087	0.087	16.490	0.173
Trichlorethen	0.000	0.018	0.018	0.000	0.000	0.002	0.000	0.000	0.000	0.000	0.001	0.011	582	0.101	0.101	74.523	0.202
Tetrachlorethen	0.000	0.066	0.066	0.000	0.001	0.005	0.000	0.000	0.000	0.000	0.003	0.032	582	0.101	0.101	72.092	0.202
Atrazin	0.010	0.960	0.950	0.030	0.044	0.087	0.010	0.010	0.010	0.050	0.100	0.720	1876	0.066	0.066	64.875	0.173
Simazin	0.010	0.100	0.090	0.020	0.026	0.016	0.010	0.010	0.010	0.050	0.100	0.650	1890	0.087	0.087	8.670	0.174
LHKW	0.000	0.069	0.069	0.005	0.007	0.007	0.000	0.000	0.000	0.000	0.020	0.035	582	0.101	0.101	26.086	0.202
Diuron	0.010	0.100	0.090	0.050	0.046	0.017	0.010	0.010	0.050	0.050	0.050	0.100	244	-0.176	0.156	3.277	0.310
Desethylatrazin	0.010	2.900	2.890	0.030	0.076	0.251	0.010	0.010	0.020	0.050	0.180	1.800	799	0.086	0.086	78.504	0.173
Isoproturon	0.010	0.100	0.090	0.050	0.046	0.014	0.010	0.010	0.050	0.050	0.100	0.294	381	0.125	0.125	5.144	0.249
Bromacil	0.010	0.460	0.450	0.050	0.045	0.045	0.010	0.010	0.020	0.050	0.100	0.100	764	0.068	0.068	45.469	0.177
Hexazinon	0.010	0.960	0.950	0.030	0.045	0.052	0.010	0.010	0.020	0.050	0.100	0.100	762	0.089	0.089	148.089	0.177
Bentazon	0.010	0.070	0.060	0.060	0.044	0.014	0.010	0.010	0.050	0.050	0.050	0.070	58	-1.539	0.314	1.089	0.616

Siedlung	Perzentile										N Gültig	Fehlend	Schiefe	Stdfehler Schiefe	Kurtosis	Stdfehler Kurtosis	
	Minimum	Maximum	Spannweite	Median	Mittelwert	Stdabw.	1	5	25	76							95
LF	4.900	632.000	627.100	83.000	91.168	49.709	14.651	27.100	65.300	105.300	171.000	262.490	3250	3.195	0.043	23.371	0.086
pH	5.740	9.120	3.380	7.170	7.157	0.298	6.285	6.670	7.020	7.300	7.580	8.009	3252	0.077	0.043	4.599	0.086
Na	0.800	590.000	589.200	16.000	26.002	35.884	2.778	4.900	9.800	28.700	79.000	160.000	625	7.858	0.098	103.156	0.195
K	0.300	165.000	165.700	3.050	5.199	9.270	0.584	0.900	1.800	5.410	14.450	38.936	621	2639	0.098	154.847	0.196
Ca	8.600	738.000	729.400	128.000	139.244	82.912	15.000	31.560	100.000	160.000	259.650	552.196	968	2.757	0.079	12.353	0.157
Mg	0.800	148.000	147.200	20.350	23.689	18.477	2.600	4.000	10.700	31.000	62.000	91.700	964	2.003	0.079	6.704	0.157
Pb	0.000	0.084	0.084	0.001	0.001	0.004	0.000	0.001	0.001	0.001	0.004	0.012	623	14.591	0.098	257.474	0.195
As	0.000	0.142	0.142	0.001	0.003	0.007	0.000	0.000	0.001	0.003	0.009	0.026	623	2637	0.098	277.885	0.195
Cd	0.000	0.008	0.008	0.000	0.000	0.001	0.000	0.000	0.000	0.000	0.001	0.008	104	8.812	0.237	82.592	0.469
NO3	0.100	249.000	248.900	21.800	27.598	25.717	1.729	0.100	0.500	10.600	37.000	130.352	3155	2.270	0.044	8.801	0.087
SO4	0.800	1440.000	1439.200	55.000	120.845	199.407	6.500	12.000	29.850	129.500	415.800	1216.600	633	2627	0.097	18.739	0.194
Cl	0.500	1620.000	1619.500	32.950	49.447	81.903	1.729	8.300	17.825	53.375	136.100	300.710	628	12.381	0.098	220.102	0.195
Trichlorethen	0.000	0.048	0.048	0.000	0.005	0.048	0.000	0.000	0.000	0.001	0.025	0.962	1684	19.533	0.060	450.683	0.119
Tetrachlorethen	0.000	14.500	14.500	0.000	0.072	0.767	0.000	0.000	0.000	0.000	0.089	0.874	1683	15.683	0.060	259.964	0.119
Atrazin	0.010	0.780	0.770	0.030	0.042	0.032	0.010	0.010	0.020	0.050	0.100	0.294	1740	6.066	0.059	54.903	0.118
Simazin	0.010	0.580	0.570	0.030	0.033	0.034	0.010	0.010	0.010	0.050	0.100	0.130	1722	8.057	0.059	103.457	0.118
LHKW	0.000	158.005	158.005	0.005	0.439	6.393	0.000	0.000	0.001	0.010	0.012	4.439	1884	1576	0.060	490.193	0.119
Diuron	0.010	1.800	1.790	0.050	0.049	0.073	0.010	0.010	0.050	0.050	0.162	0.161	686	21.487	0.093	501.434	0.186
Desethylatrazin	0.010	1.000	0.990	0.040	0.048	0.059	0.010	0.010	0.020	0.050	0.130	0.286	1740	7.014	0.059	79.000	0.117
Isoproturon	0.010	0.500	0.490	0.050	0.045	0.030	0.010	0.010	0.050	0.050	0.100	0.100	161	2099	0.072	132.813	0.143
Bromacil	0.010	3.990	3.990	0.050	0.067	0.195	0.010	0.010	0.020	0.050	0.100	0.700	1702	12.621	0.059	193.948	0.119
Hexazinon	0.010	2.090	2.080	0.050	0.054	0.135	0.010	0.010	0.020	0.050	0.100	0.540	1699	10.422	0.059	124.847	0.119
Bentazon	0.010	0.320	0.310	0.050	0.061	0.055	0.010	0.010	0.050	0.050	0.226	0.320	28	-4.018	0.441	18.768	0.858

Anhang III: Tabellen C 1 - 1

Statistische Basisparameter für alle Messstellen des jeweiligen Clusters einer 6-Clusterlösung.

Direkte Ward-Clustering (gemittelte Werte über den Gesamtzeitraum für jede Messstelle)

Alle Werte als reale Variablenwerte in [mg/l], lediglich LF in [mS/m] und Bentazon in [µg/l]

Cluster 1	Perzentile											Stabw.	Mittelwert	Median	Spannweite	Maximum	Minimum	N Gesamt	Fehlend	Schiefe	Stofffehler Schiefe	Kurtosis	Stofffehler Kurtosis
	1	5	25	75	95	99																	
LF	38,171	228,600	190,429	93,967	99,181	26,614	53,763	113,460	82,430	64,216	13,100	150,300	534	0	1,112	0,106	2,110	0,211					
pH	6,900	8,117	1,817	7,168	7,173	0,183	6,693	7,272	7,078	6,903	7,388	7,457	534	0	0,194	0,106	4,135	0,211					
Na	1,900	176,000	174,100	15,000	24,198	25,301	3,235	30,125	8,900	4,400	51,100	78,775	534	0	2,810	0,106	10,258	0,211					
K	0,300	53,000	52,700	2,610	4,863	6,537	0,500	4,863	1,500	0,700	9,650	16,863	534	0	3,824	0,106	17,748	0,211					
Ca	46,300	307,217	260,917	143,417	146,817	48,913	53,292	170,050	117,000	75,813	204,500	235,250	534	0	0,672	0,106	0,962	0,211					
Mg	1,933	90,667	88,733	29,000	30,201	13,820	5,258	37,000	21,321	10,300	47,222	55,975	534	0	0,961	0,106	1,826	0,211					
Pb	0,001	0,007	0,007	0,001	0,001	0,001	0,001	0,001	0,001	0,001	0,002	0,003	534	0	3,636	0,106	16,917	0,211					
As	0,000	0,054	0,053	0,001	0,003	0,005	0,000	0,002	0,001	0,001	0,005	0,010	534	0	5,440	0,106	40,655	0,211					
Cd	0,000	0,008	0,008	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	104	430	9,925	0,237	100,074	0,469					
NO3	0,120	194,200	194,080	34,210	39,765	31,997	0,431	16,685	16,685	0,610	84,462	94,126	534	0	1,286	0,106	2,514	0,211					
SO4	4,300	680,000	675,700	88,700	118,751	103,940	12,105	48,825	48,825	24,825	150,000	335,500	534	0	2,135	0,106	5,762	0,211					
Cl	3,100	400,000	396,900	43,458	55,902	44,709	8,670	30,000	30,000	15,075	108,500	139,750	534	0	2,905	0,106	13,116	0,211					
Trichlorethen	0,000	3,067	3,067	0,000	0,010	0,135	0,000	0,000	0,000	0,000	0,003	0,010	534	0	22,014	0,106	498,095	0,211					
Tetrachlorethen	0,000	0,853	0,853	0,000	0,013	0,068	0,000	0,000	0,000	0,000	0,010	0,048	534	0	9,066	0,106	94,578	0,211					
Atrazin	0,010	0,518	0,508	0,030	0,041	0,052	0,010	0,013	0,010	0,010	0,068	0,105	534	0	5,220	0,106	36,212	0,211					
Simazin	0,010	0,485	0,475	0,023	0,031	0,035	0,010	0,010	0,010	0,010	0,050	0,050	534	0	6,773	0,106	67,943	0,211					
LHW	0,000	7,743	7,743	0,005	0,034	0,343	0,000	0,008	0,003	0,001	0,020	0,075	534	0	21,502	0,106	482,571	0,211					
Diuron	0,010	0,220	0,210	0,050	0,047	0,077	0,010	0,050	0,050	0,010	0,050	0,050	534	0	3,135	0,106	32,236	0,211					
Desethylatrazin	0,010	0,747	0,737	0,037	0,051	0,064	0,010	0,020	0,010	0,010	0,103	0,163	534	0	5,280	0,106	42,885	0,211					
Isoproturon	0,010	0,100	0,090	0,050	0,042	0,041	0,010	0,035	0,010	0,010	0,050	0,050	534	0	9,991	0,106	1,879	0,211					
Bromacil	0,010	3,167	3,157	0,050	0,075	0,209	0,010	0,027	0,010	0,010	0,067	0,149	534	0	9,391	0,106	111,445	0,211					
Hexazinon	0,010	1,743	1,733	0,037	0,052	0,120	0,010	0,011	0,010	0,010	0,079	0,114	534	0	10,079	0,106	120,465	0,211					
Bentazon	0,010	0,283	0,273	0,050	0,048	0,031	0,010	0,039	0,020	0,010	0,050	0,081	158	376	4,213	0,193	25,270	0,384					

Cluster 2	Perzentile											Stabw.	Mittelwert	Median	Spannweite	Maximum	Minimum	N Gesamt	Fehlend	Schiefe	Stofffehler Schiefe	Kurtosis	Stofffehler Kurtosis
	1	5	25	75	95	99																	
LF	3,767	135,813	132,046	66,445	63,220	20,915	8,576	76,983	53,643	19,500	84,925	91,005	750	0	-0,573	0,089	0,709	0,178					
pH	5,284	8,676	3,392	7,166	7,132	0,336	5,965	7,297	7,066	6,416	7,422	7,546	750	0	-1,348	0,089	5,715	0,178					
Na	0,700	136,000	135,300	9,125	11,536	10,153	1,700	14,613	5,600	2,700	22,890	27,535	750	0	5,311	0,089	53,087	0,178					
K	0,100	18,650	18,550	1,700	2,517	2,382	0,100	3,203	1,074	0,433	5,200	7,505	750	0	2,428	0,089	7,825	0,178					
Ca	2,786	236,800	234,014	111,725	103,325	38,941	8,902	126,825	88,888	19,633	142,193	153,000	750	0	-0,710	0,089	0,508	0,178					
Mg	0,514	49,000	48,486	12,200	13,482	7,889	1,247	19,013	6,945	2,844	24,280	27,000	750	0	6,004	0,089	0,035	0,178					
Pb	0,000	0,036	0,036	0,001	0,001	0,002	0,001	0,001	0,001	0,001	0,002	0,003	750	0	9,555	0,089	120,435	0,178					
As	0,000	0,014	0,014	0,001	0,001	0,001	0,000	0,002	0,001	0,000	0,003	0,004	750	0	3,444	0,089	16,945	0,178					
Cd	0,000	0,003	0,003	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	175	575	9,448	0,184	106,050	0,365					
NO3	0,238	108,182	107,944	20,288	23,188	16,745	4,435	31,853	11,166	1,176	45,160	56,397	750	0	1,197	0,089	2,077	0,178					
SO4	1,300	317,000	315,700	29,975	39,896	36,199	4,351	48,000	17,350	7,000	79,650	108,900	750	0	2,731	0,089	10,860	0,178					
Cl	0,100	122,100	122,000	20,075	23,474	15,608	1,702	31,213	12,000	4,755	43,580	51,068	750	0	1,378	0,089	3,481	0,178					
Trichlorethen	0,000	0,983	0,983	0,000	0,003	0,039	0,000	0,000	0,000	0,000	0,001	0,003	750	0	22,289	0,089	539,128	0,178					
Tetrachlorethen	0,000	0,684	0,684	0,000	0,004	0,030	0,000	0,000	0,000	0,000	0,004	0,011	750	0	17,658	0,089	371,807	0,178					
Atrazin	0,010	0,450	0,440	0,030	0,040	0,040	0,010	0,050	0,020	0,010	0,067	0,105	750	0	4,290	0,089	26,734	0,178					
Simazin	0,010	1,127	1,117	0,023	0,029	0,016	0,010	0,045	0,010	0,010	0,050	0,050	750	0	9,953	0,089	17,005	0,178					
LHW	0,000	1,020	1,020	0,005	0,012	0,061	0,000	0,008	0,003	0,000	0,011	0,019	750	0	12,776	0,089	171,212	0,178					
Diuron	0,010	1,800	1,790	0,050	0,051	0,068	0,010	0,050	0,050	0,020	0,050	0,050	750	0	22,798	0,089	574,406	0,178					
Desethylatrazin	0,010	0,601	0,591	0,037	0,053	0,064	0,010	0,022	0,010	0,015	0,098	0,195	750	0	4,683	0,089	26,140	0,178					
Isoproturon	0,015	0,370	0,355	0,050	0,049	0,049	0,015	0,050	0,050	0,023	0,056	0,067	750	0	10,292	0,089	180,767	0,178					
Bromacil	0,010	0,310	0,300	0,050	0,046	0,022	0,010	0,034	0,030	0,010	0,067	0,075	750	0	9,382	0,089	37,333	0,178					
Hexazinon	0,010	0,475	0,465	0,037	0,040	0,028	0,010	0,050	0,020	0,010	0,067	0,061	750	0	5,629	0,089	76,019	0,178					
Bentazon	0,010	1,400	1,390	0,050	0,045	0,096	0,010	0,020	0,010	0,010	0,050	0,050	209	541	13,754	0,188	195,599	0,333					

Anhang III: Tabellen C 1 - 1

Statistische Basisparameter für alle Messstellen des jeweiligen Clusters einer 6-Clusterlösung.

Direkte Ward-Clustering (gemittelte Werte über den Gesamtzeitraum für jede Messtelle)

Alle Werte als reale Variablenwerte in [mg/l], lediglich LF in [mS/m] und Atrazin; Simazin; Bromacil; Hexazinon und Bentazon in [µg/l]

Cluster	Cluster 3										Cluster 4									
	Minimum	Maximum	Spannweite	Median	Mittelwert	Stabw.	Perzentile	1	5	25	75	95	99	N Gesamt	Fehlend	Schiefe	Stdfehler Schiefe	Kurtosis	Stdfehler Kurtosis	
LF	117.900	34.1600	223.700	215.450	219.069	52.387	117.900	120.972	184.414	248.590	308.410	339.160	21	0	0.535	0.501	0.726	0.972		
pH	6.754	7.438	0.684	7.054	7.061	0.140	6.754	6.772	6.960	7.131	7.218	7.416	21	0	0.497	0.501	1.984	0.972		
Na	4.600	230.000	225.400	17.000	43.205	54.584	4.600	5.080	11.000	65.500	105.800	217.700	21	0	2.338	0.501	6.164	0.972		
K	2.900	166.000	163.100	7.400	18.974	36.468	2.900	2.920	4.055	14.500	58.000	156.000	21	0	3.698	0.501	14.544	0.972		
Ca	195.000	650.000	455.000	412.000	424.286	134.747	195.000	198.800	329.500	571.000	613.800	646.650	21	0	1.749	0.501	-1.006	0.972		
Mg	30.900	148.000	117.100	65.300	71.212	28.681	30.900	30.950	57.667	110.400	144.400	178.500	21	0	2.221	0.501	2.456	0.972		
Pb	0.001	0.001	0.000	0.001	0.001	0.001	0.001	0.001	0.001	0.001	0.001	0.001	21	0	1.583	0.501	21.000	0.972		
As	0.001	0.142	0.141	0.002	0.011	0.031	0.001	0.001	0.001	0.005	0.029	0.131	21	0	4.216	0.501	18.346	0.972		
Cd	0.100	84.200	84.100	7.920	15.627	20.343	0.100	0.100	0.500	28.160	37.077	79.554	21	0	2.096	0.501	5.564	0.972		
NO3	324.000	1490.000	1166.000	900.000	980.476	324.603	324.000	340.000	794.500	1281.000	1436.000	1485.000	21	0	-0.992	0.501	-0.694	0.972		
SO4	5.000	300.000	295.000	29.200	71.140	82.956	5.000	6.400	28.500	86.500	255.200	297.700	21	0	1.984	0.501	3.214	0.972		
Trichlorethen	0.000	0.004	0.004	0.000	0.001	0.001	0.000	0.000	0.000	0.001	0.003	0.004	21	0	2.561	0.501	6.488	0.972		
Tetrachlorethen	0.000	0.185	0.185	0.000	0.011	0.041	0.000	0.000	0.000	0.000	0.003	0.037	21	0	4.210	0.501	18.264	0.972		
Atrazin	0.010	0.070	0.060	0.013	0.026	0.020	0.010	0.010	0.010	0.050	0.050	0.088	21	0	0.796	0.501	-0.944	0.972		
Simazin	0.010	0.050	0.040	0.013	0.026	0.019	0.010	0.010	0.010	0.050	0.050	0.050	21	0	0.523	0.501	-1.753	0.972		
LHKW	0.001	0.189	0.187	0.005	0.041	0.041	0.001	0.001	0.003	0.008	0.042	0.175	21	0	4.177	0.501	18.047	0.972		
Duron	0.030	0.050	0.020	0.050	0.047	0.007	0.030	0.030	0.050	0.050	0.050	0.050	21	0	-2.202	0.501	3.138	0.972		
Desethylatrazin	0.010	0.105	0.095	0.023	0.029	0.025	0.010	0.010	0.010	0.050	0.050	0.099	21	0	1.564	0.501	3.066	0.972		
Isoptroturon	0.030	0.050	0.020	0.035	0.038	0.008	0.030	0.030	0.035	0.050	0.050	0.050	21	0	0.793	0.501	-1.103	0.972		
Bromacil	0.010	0.130	0.130	0.045	0.030	0.045	0.010	0.010	0.017	0.078	0.134	0.134	21	0	1.434	0.501	4.103	0.972		
Hexazinon	0.010	0.095	0.085	0.023	0.033	0.027	0.010	0.010	0.010	0.050	0.078	0.094	21	0	0.820	0.501	-0.419	0.972		
Bentazon	0.020	0.030	0.030	0.035	0.035	0.021	0.020	0.020	0.020	0.050	0.050	0.050	2	19						
LF	61.380	96.733	35.353	77.250	76.319	12.164	61.380	61.380	64.305	88.420	94.085	96.733	13	0	0.247	0.616	-1.460	1.191		
pH	6.866	7.546	0.680	7.200	7.235	0.219	6.866	6.866	7.031	7.435	7.524	7.546	13	0	-0.101	0.616	-1.382	1.191		
Na	2.500	36.000	33.500	14.600	15.915	9.682	2.500	2.500	7.350	22.600	32.440	36.000	13	0	0.902	0.616	-0.510	1.191		
K	0.100	6.500	6.400	1.200	2.215	2.215	0.100	0.100	0.400	4.325	6.010	6.750	13	0	0.902	0.616	-0.510	1.191		
Ca	66.333	361.000	294.667	126.000	133.983	72.534	66.333	66.333	102.750	140.600	276.680	361.000	13	0	2.867	0.616	9.476	1.191		
Mg	1.440	82.600	81.160	21.750	24.107	21.283	1.440	1.440	9.150	30.917	66.493	82.600	13	0	1.815	0.616	4.427	1.191		
Pb	0.001	0.005	0.004	0.001	0.001	0.001	0.001	0.001	0.001	0.001	0.001	0.001	13	0	3.554	0.616	12.719	1.191		
As	0.001	0.095	0.095	0.001	0.002	0.002	0.001	0.001	0.001	0.001	0.005	0.005	13	0	2.041	0.616	2.885	1.191		
Cd	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	1	12						
NO3	15.325	127.460	112.135	33.267	47.153	34.816	15.325	15.325	20.523	73.190	111.519	127.460	13	0	1.176	0.616	0.689	1.191		
SO4	16.000	880.000	864.000	34.000	110.819	233.091	16.000	16.000	24.000	90.000	570.000	880.000	13	0	3.501	0.616	12.442	1.191		
Cl	13.850	95.300	81.450	25.000	35.598	25.057	13.850	13.850	17.450	50.600	84.860	95.300	13	0	1.492	0.616	1.409	1.191		
Trichlorethen	0.000	0.004	0.004	0.001	0.001	0.001	0.000	0.000	0.000	0.002	0.004	0.004	13	0	3.605	0.616	0.177	1.191		
Tetrachlorethen	0.097	2.487	2.370	0.764	0.910	0.577	0.097	0.097	0.598	1.195	2.014	2.467	13	0	1.611	0.616	4.080	1.191		
Atrazin	0.010	0.213	0.203	0.053	0.064	0.053	0.010	0.010	0.033	0.085	0.168	0.213	13	0	2.005	0.616	5.236	1.191		
LHKW	0.001	0.792	0.792	0.004	0.065	0.219	0.001	0.001	0.002	0.007	0.481	0.792	13	0	3.604	0.616	12.992	1.191		
Duron	0.023	0.250	0.227	0.050	0.065	0.219	0.023	0.023	0.050	0.050	0.177	0.250	13	0	0.750	0.616	12.179	1.191		
Desethylatrazin	0.237	2.180	1.943	0.697	0.932	0.654	0.237	0.237	0.461	1.308	2.180	2.180	13	0	1.065	0.616	0.203	1.191		
Isoptroturon	0.023	0.053	0.029	0.050	0.045	0.009	0.023	0.023	0.043	0.050	0.052	0.053	13	0	-1.840	0.616	2.533	1.191		
Bromacil	0.010	0.353	0.353	0.060	0.361	0.690	0.010	0.010	0.048	1.931	3.263	3.263	13	0	2.962	0.616	6.332	1.191		
Hexazinon	0.010	3.637	3.627	0.091	0.594	1.177	0.010	0.010	0.015	0.514	3.135	3.637	13	0	2.300	0.616	4.632	1.191		
Bentazon	0.050	0.120	0.070	0.050	0.068	0.035	0.050	0.050	0.050	0.103	0.120	0.120	4	9	2.000	1.014	4.000	2.619		

Anhang III: Tabellen C 1 - 1

Statistische Basisparameter für alle Messstellen des jeweiligen Clusters einer 6-Clusterlösung.
Direkte Ward-Clustering (gemittelte Werte über den Gesamtzeitraum für jede Messstelle)

Alle Werte als reale Variablenwerte in [mg/l], lediglich LF in [mS/m] und Atrazin, Simazin, Diuron; Desethylatrazin; Isoproturon, Bromacil, Hexazinon und Bentazon in [µg/l]

Cluster 5	Minimum	Maximum	Spannweite	Mittelwert	N Gesamt	Fehlend
LF	100,960	206,780	105,820	153,870	2	0
pH	6,964	7,240	0,276	7,102	2	0
Na	9,250	66,000	56,750	37,625	2	0
K	3,680	4,320	0,630	4,005	2	0
Ca	134,400	232,000	97,600	183,200	2	0
Mg	55,650	63,200	7,550	59,425	2	0
Pb	0,001	0,001	0,000	0,001	2	0
As	0,002	0,012	0,010	0,007	2	0
Cd					0	2
NO3	10,980	22,760	11,780	16,870	2	0
SO4	27,500	93,600	66,100	60,550	2	0
Cl	131,600	372,000	240,400	251,800	2	0
Trichlorethen	4,897	10,522	5,625	7,709	2	0
Tetrachlorethen	3,096	11,883	8,787	7,490	2	0
Atrazin	0,050	0,050	0,000	0,050	2	0
Simazin	0,050	0,050	0,000	0,050	2	0
LHKW	16,796	50,478	33,682	33,637	2	0
Diuron	0,050	0,050	0,000	0,050	2	0
Desethylatrazin	0,050	0,063	0,013	0,057	2	0
Isoproturon	0,035	0,050	0,015	0,043	2	0
Bromacil	0,050	0,050	0,000	0,050	2	0
Hexazinon	0,050	0,077	0,027	0,063	2	0
Bentazon					0	2

Cluster 6	
LF	619,800
pH	6,706
Na	590,000
K	25,000
Ca	738,000
Mg	132,000
Pb	0,001
As	0,041
Cd	
NO3	0,960
SO4	992,000
Cl	1620,000
Trichlorethen	0,000
Tetrachlorethen	0,000
Atrazin	0,010
Simazin	0,010
LHKW	0,007
Diuron	0,050
Desethylatrazin	0,010
Isoproturon	0,035
Bromacil	0,010
Hexazinon	0,010
Bentazon	

Anhang III: Tabellen C 1 - 1

Statistische Basisparameter für alle Messstellen des jeweiligen Clusters einer β -Clusterlösung.

Direkte Ward-Clustering (gemittelte Werte über den Gesamtzeitraum für jede Messstelle)

Alle Werte als reale Variablenwerte in [mg/l], lediglich LF in [mS/m] und Atrazin; Simazin; Diuron; Desethylatrazin; Isoproturon, Bromacil, Hexazinon und Bentazon in [μ g/l]

Cluster 1	Minimum	Maximum	Spannweite	Median	Mittelwert	Stabw.	Perzentile										N Gesamt	Fehlend	Schiefe	Stdfehler Schiefe	Kurtosis	Stdfehler Kurtosis
							1	5	25	75	95	99										
LF	38,171	228,600	190,429	93,987	99,181	26,614	53,763	64,216	82,430	113,460	150,300	189,213	534	0	1,112	0,106	2,110	0,211				
pH	6,300	8,117	1,817	7,166	7,173	0,183	6,983	6,993	7,076	7,272	7,457	7,676	534	0	0,194	0,106	4,136	0,211				
Na	1,900	176,000	174,100	15,000	24,198	25,301	4,637	4,400	8,900	30,128	78,775	146,300	534	0	2,910	0,106	10,298	0,211				
K	0,300	53,000	52,700	2,610	4,663	6,537	0,900	0,700	1,500	4,000	16,863	38,780	534	0	3,624	0,106	17,748	0,211				
Ca	46,300	307,617	260,917	143,417	146,813	45,932	53,292	75,913	117,000	170,950	235,250	286,717	534	0	0,672	0,106	0,962	0,211				
Mg	1,933	90,867	88,733	29,000	30,201	13,820	5,266	10,300	21,321	37,000	56,975	76,820	534	0	0,961	0,106	1,826	0,211				
Pb	0,001	0,007	0,007	0,001	0,001	0,001	0,001	0,001	0,001	0,001	0,003	0,004	534	0	3,638	0,106	16,917	0,211				
As	0,000	0,054	0,053	0,001	0,003	0,005	0,001	0,001	0,001	0,002	0,010	0,023	534	0	5,440	0,106	40,956	0,211				
Cd	0,000	0,008	0,008	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	104	430	9,926	0,237	100,074	0,469				
NO3	0,120	194,200	194,080	34,210	39,765	31,997	0,431	0,610	16,685	55,056	94,128	157,269	534	0	1,286	0,106	2,514	0,211				
SO4	4,300	680,000	675,700	88,700	118,751	103,940	12,106	24,825	48,825	160,000	335,500	569,750	534	0	2,136	0,106	5,762	0,211				
Cl	3,100	400,000	396,900	43,458	55,902	44,709	8,670	15,575	30,000	64,863	139,750	247,150	534	0	2,985	0,106	13,116	0,211				
Trichlorethen	0,000	3,067	3,067	0,000	0,010	0,136	0,000	0,000	0,000	0,001	0,001	0,109	534	0	22,014	0,106	48,995	0,211				
Tetrachlorethen	0,000	0,853	0,853	0,000	0,013	0,068	0,000	0,000	0,000	0,001	0,048	0,328	534	0	9,066	0,106	94,578	0,211				
Atrazin	0,010	0,618	0,608	0,030	0,041	0,052	0,010	0,010	0,013	0,050	0,105	0,305	534	0	5,220	0,106	36,212	0,211				
Simazin	0,010	0,466	0,476	0,023	0,031	0,036	0,010	0,010	0,010	0,050	0,106	0,207	534	0	6,773	0,106	67,943	0,211				
LHKW	0,000	7,743	7,743	0,005	0,034	0,047	0,017	0,010	0,050	0,098	0,175	0,531	534	0	21,932	0,106	48,571	0,211				
Diuron	0,010	0,220	0,210	0,050	0,047	0,017	0,010	0,010	0,050	0,051	0,051	0,120	534	0	3,135	0,106	32,236	0,211				
Isoproturon	0,010	0,100	0,090	0,037	0,051	0,064	0,010	0,010	0,020	0,050	0,163	0,296	534	0	5,280	0,106	42,985	0,211				
Bromacil	0,010	3,167	3,157	0,050	0,075	0,209	0,010	0,010	0,027	0,050	0,148	1,198	534	0	9,391	0,106	111,445	0,211				
Hexazinon	0,010	1,743	1,733	0,037	0,052	0,114	0,010	0,010	0,050	0,114	0,605	1,079	534	0	10,079	0,106	120,465	0,211				
Bentazon	0,010	0,263	0,273	0,050	0,046	0,031	0,010	0,010	0,039	0,050	0,081	0,231	158	376	4,213	0,168	25,270	0,384				

Cluster 2	Minimum	Maximum	Spannweite	Median	Mittelwert	Stabw.	Perzentile										N Gültig	Fehlend	Schiefe	Stdfehler Schiefe	Kurtosis	Stdfehler Kurtosis
							1	5	25	75	95	99										
LF	3,767	135,613	132,046	66,440	63,161	20,902	8,571	19,498	53,624	76,865	90,777	111,590	749	0	-0,673	0,089	0,714	0,178				
pH	5,284	8,676	3,392	7,166	7,132	0,336	5,965	6,416	7,066	7,297	7,546	8,002	749	0	-1,348	0,089	5,708	0,178				
Na	0,700	136,000	135,300	9,100	11,526	10,156	1,700	2,700	5,600	14,600	27,560	39,160	749	0	5,315	0,089	53,114	0,178				
K	0,100	18,650	18,550	1,700	2,512	2,279	0,100	0,430	1,073	3,200	7,365	12,125	749	0	2,441	0,089	7,907	0,178				
Ca	2,786	296,800	294,014	111,700	103,210	38,437	8,500	19,625	88,776	126,650	162,750	188,200	749	0	-0,724	0,089	0,507	0,178				
Mg	0,514	49,000	48,486	12,200	13,473	7,891	3,446	2,642	6,939	19,000	27,000	34,425	749	0	0,607	0,089	0,039	0,178				
Pb	0,000	0,036	0,036	0,001	0,001	0,002	0,001	0,001	0,001	0,001	0,003	0,011	749	0	9,577	0,089	120,767	0,178				
As	0,000	0,014	0,014	0,001	0,001	0,001	0,001	0,001	0,002	0,002	0,004	0,007	749	0	3,482	0,089	17,426	0,178				
Cd	0,000	0,003	0,003	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,001	175	574	9,448	0,184	106,560	0,365				
NO3	0,238	108,182	107,944	20,275	23,218	16,736	0,438	1,348	11,200	31,885	56,433	75,110	749	0	1,198	0,089	2,082	0,178				
SO4	1,300	317,000	315,700	29,950	39,735	35,956	4,350	7,000	17,800	47,800	107,525	193,600	749	0	2,754	0,089	11,243	0,178				
Cl	0,100	122,100	122,000	20,950	23,459	15,612	1,700	4,750	12,000	31,100	51,075	75,500	749	0	1,381	0,089	3,487	0,178				
Trichlorethen	0,000	0,893	0,893	0,000	0,003	0,039	0,000	0,000	0,000	0,000	0,003	0,030	749	0	22,274	0,089	538,409	0,178				
Tetrachlorethen	0,000	0,684	0,684	0,000	0,004	0,030	0,000	0,000	0,000	0,000	0,011	0,098	749	0	17,946	0,089	371,315	0,178				
Atrazin	0,010	0,450	0,440	0,030	0,029	0,040	0,010	0,010	0,020	0,050	0,105	0,233	749	0	4,289	0,089	26,705	0,178				
Simazin	0,010	0,127	0,117	0,023	0,029	0,016	0,010	0,010	0,017	0,046	0,090	0,067	749	0	0,958	0,089	1,724	0,178				
LHKW	0,000	1,020	1,020	0,005	0,012	0,061	0,000	0,000	0,003	0,008	0,019	0,106	749	0	12,767	0,089	176,975	0,178				
Diuron	0,010	0,420	0,410	0,050	0,048	0,024	0,010	0,020	0,050	0,090	0,150	0,382	749	0	9,576	0,089	122,946	0,178				
Desethylatrazin	0,010	0,601	0,591	0,037	0,053	0,064	0,010	0,015	0,022	0,050	0,155	0,403	749	0	4,864	0,089	28,128	0,178				
Isoproturon	0,015	0,370	0,355	0,050	0,049	0,017	0,015	0,023	0,050	0,090	0,167	0,389	749	0	10,386	0,089	180,529	0,178				
Bromacil	0,010	0,310	0,300	0,034	0,022	0,030	0,010	0,014	0,034	0,050	0,075	0,087	749	0	3,989	0,089	37,396	0,178				
Hexazinon	0,010	0,475	0,465	0,037	0,040	0,028	0,010	0,010	0,020	0,050	0,081	0,103	749	0	5,628	0,089	75,951	0,178				
Bentazon	0,010	1,400	1,390	0,050	0,045	0,031	0,010	0,010	0,020	0,050	0,090	0,065	209	540	13,754	0,168	185,969	0,335				

Anhang III: Tabellen C 1 - 1

Statistische Basisparameter für alle Messtellen des jeweiligen Clusters einer 8-C-Clusterlösung.
Direkte Ward-Clustering (gemittelte Werte über den Gesamtzeitraum für jede Messtelle)

Alle Werte als reale Variablenwerte in [mg/l], lediglich LF in [mS/m] und Atrazin, Simazin, Bromacil, Hexazinon und Bentazon in [µg/l]

Cluster 3	Perzentile 1							Median	Mittelwert	Stabw.	N Gültig	Fehlend	Schiefe	Stdfehler Schiefe	Kurtosis	Stdfehler Kurtosis
	Minimum	Maximum	Spannweite	5	25	75	95									
LF	117,900	341,600	223,700	120,972	184,414	248,690	339,160	341,600	52,387	219,069	0	0,535	0,501	0,726	0,972	
pH	6,754	7,438	0,684	6,754	7,131	7,438	7,438	7,438	0,140	7,438	21	0,497	0,501	1,984	0,972	
Na	4,800	230,000	225,400	5,080	11,000	65,600	217,700	230,000	4,800	230,000	21	0	0,501	0,501	6,164	0,972
K	2,900	166,000	163,100	2,920	4,055	14,600	156,000	166,000	36,468	163,100	21	0	3,998	0,501	14,544	0,972
Ca	195,000	660,000	465,000	198,600	329,500	571,000	646,650	660,000	134,747	646,650	21	0	0,149	0,501	1,006	0,972
Mg	30,900	148,000	117,100	30,900	30,950	79,667	144,400	148,000	26,681	144,400	21	0	1,221	0,501	2,456	0,972
Pb	0,001	0,001	0,000	0,001	0,001	0,001	0,001	0,001	0,001	0,001	21	0	4,583	0,501	21,000	0,972
As	0,001	0,142	0,141	0,001	0,001	0,001	0,131	0,142	0,031	0,131	21	0	4,216	0,501	18,946	0,972
Cd	0,100	84,200	84,100	0,100	0,500	28,160	79,554	84,200	20,343	79,554	21	0	2,096	0,501	5,664	0,972
NO3	324,000	1490,000	1166,000	324,000	980,476	1281,500	1485,000	1490,000	324,000	1485,000	21	0	-0,092	0,501	-0,694	0,972
SO4	5,000	300,000	295,000	6,400	26,500	86,500	287,700	300,000	5,000	287,700	21	0	1,984	0,501	3,214	0,972
Trichloethen	0,000	0,004	0,004	0,000	0,000	0,000	0,000	0,004	0,001	0,000	21	0	2,861	0,501	6,488	0,972
Tetrachloethen	0,000	0,165	0,165	0,000	0,000	0,000	0,171	0,165	0,041	0,165	21	0	4,210	0,501	18,294	0,972
Atrazin	0,010	0,060	0,060	0,010	0,010	0,050	0,068	0,070	0,026	0,068	21	0	0,756	0,501	-0,944	0,972
Simazin	0,010	0,050	0,050	0,010	0,010	0,050	0,050	0,050	0,019	0,050	21	0	0,523	0,501	-1,753	0,972
LHKW	0,001	0,189	0,187	0,001	0,003	0,008	0,175	0,189	0,041	0,008	21	0	4,177	0,501	18,047	0,972
Diuron	0,060	0,060	0,020	0,030	0,060	0,060	0,060	0,060	0,007	0,060	21	0	-2,202	0,501	3,138	0,972
Desethylatrazin	0,010	0,105	0,105	0,010	0,010	0,050	0,050	0,105	0,028	0,050	21	0	1,954	0,501	3,066	0,972
Isoproturon	0,030	0,090	0,090	0,030	0,030	0,030	0,090	0,090	0,030	0,090	21	0	0,793	0,501	-1,103	0,972
Bromacil	0,010	0,130	0,130	0,010	0,010	0,050	0,134	0,130	0,045	0,130	21	0	1,434	0,501	4,103	0,972
Hexazinon	0,010	0,095	0,095	0,010	0,010	0,050	0,094	0,095	0,027	0,094	21	0	0,820	0,501	-0,419	0,972
Bentazon	0,020	0,060	0,060	0,020	0,020	0,060	0,060	0,060	0,021	0,060	19	0	1,989	0,501	3,784	0,972

Cluster 4	Perzentile 1							Median	Mittelwert	Stabw.	N Gültig	Fehlend	Schiefe	Stdfehler Schiefe	Kurtosis	Stdfehler Kurtosis
	Minimum	Maximum	Spannweite	5	25	75	95									
LF	61,380	96,733	35,353	61,380	63,922	89,160	96,733	96,733	13,124	75,927	11	0	0,450	0,661	-1,633	1,279
pH	6,866	7,546	0,680	6,866	7,032	7,469	7,546	7,546	0,229	7,257	11	0	-0,371	0,661	-1,366	1,279
Na	2,900	36,000	33,500	2,900	6,400	22,200	36,000	36,000	10,231	36,000	11	0	0,893	0,661	0,244	1,279
K	0,100	6,750	6,650	0,100	0,300	4,850	6,750	6,750	2,370	2,409	11	0	0,638	0,661	-1,103	1,279
Ca	66,333	361,000	294,667	66,333	102,500	145,200	361,000	361,000	78,800	336,616	11	0	2,860	0,661	8,078	1,279
Mg	1,440	82,600	81,160	1,440	7,900	34,833	82,600	82,600	23,285	23,972	11	0	1,789	0,661	3,784	1,279
Pb	0,001	0,005	0,004	0,001	0,001	0,001	0,005	0,005	0,001	0,001	11	0	3,269	0,661	10,755	1,279
As	0,001	0,005	0,005	0,001	0,001	0,001	0,005	0,005	0,002	0,002	11	0	1,800	0,661	1,788	1,279
Cd	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	10	0	0,971	0,661	0,282	1,279
NO3	15,325	127,460	112,135	15,325	22,440	80,500	127,460	127,460	35,415	82,443	11	0	3,252	0,661	10,878	1,279
SO4	16,000	880,000	864,000	16,000	23,000	75,000	880,000	880,000	284,677	864,000	11	0	3,252	0,661	10,878	1,279
Cl	13,850	95,300	81,450	13,850	16,000	62,200	95,300	95,300	26,873	37,459	11	0	1,765	0,661	0,546	1,279
Trichloethen	0,000	0,004	0,004	0,000	0,000	0,000	0,004	0,004	0,002	0,001	11	0	0,004	0,661	1,650	1,279
Tetrachloethen	0,000	0,788	0,788	0,000	0,000	0,001	0,788	0,788	0,237	0,788	11	0	3,316	0,661	10,897	1,279
Atrazin	0,400	1,335	0,835	0,400	0,627	1,133	1,335	1,335	0,284	0,943	11	0	0,445	0,661	-0,872	1,279
Simazin	0,010	0,213	0,203	0,010	0,032	0,098	0,213	0,213	0,057	0,098	11	0	2,048	0,661	5,019	1,279
LHKW	0,001	0,792	0,792	0,001	0,001	0,007	0,792	0,792	0,238	0,792	11	0	3,315	0,661	10,993	1,279
Diuron	0,023	0,067	0,043	0,023	0,050	0,050	0,067	0,067	0,010	0,050	11	0	-1,469	0,661	6,662	1,279
Desethylatrazin	0,237	2,180	1,943	0,237	0,300	1,248	2,180	2,180	0,671	1,953	11	0	1,198	0,661	0,357	1,279
Isoproturon	0,023	0,065	0,029	0,023	0,060	0,060	0,065	0,065	0,009	0,060	11	0	-2,251	0,661	4,501	1,279
Bromacil	0,010	0,280	0,270	0,010	0,048	0,177	0,280	0,280	0,086	0,177	11	0	1,298	0,661	0,511	1,279
Hexazinon	0,010	0,638	0,628	0,010	0,010	0,203	0,638	0,638	0,154	0,203	11	0	1,771	0,661	2,876	1,279
Bentazon	0,050	0,120	0,070	0,050	0,050	0,103	0,120	0,120	0,035	0,103	4	7	2,000	1,014	4,000	2,619

Anhang III: Tabellen C 1 - 1

Statistische Basisparameter für alle Messstellen des jeweiligen Clusters einer 8-C-Clusterlösung.
Direkte Ward-Clustering (gemittelte Werte über den Gesamtzeitraum für jede Messstelle)

Alle Werte als reale Variablenwerte in [mg/l], lediglich LF in [mS/m] und Atrazin; Simazin; Diuron; Desethylatrazin; Isoproturon, Bromacil, Hexazinon und Bentazon in [µg/l]

Cluster 5	Minimum	Maximum	Spannweite	Mittelwert	N Gültig	Fehlend
LF	100,960	206,780	105,820	153,870	2	0
pH	6,964	7,240	0,276	7,102	2	0
Na	9,250	66,000	56,750	37,625	2	0
K	3,660	4,320	0,660	4,005	2	0
Ca	134,400	232,000	97,600	183,200	2	0
Mg	55,650	63,200	7,550	59,425	2	0
Pb	0,001	0,001	0,000	0,001	2	0
As	0,002	0,012	0,010	0,007	2	0
Cd					2	2
NO3	10,960	22,760	11,780	16,870	2	0
SO4	27,500	93,600	66,100	60,550	2	0
Cl	131,600	372,000	240,400	251,800	2	0
Trichloethen	4,897	10,522	5,625	7,709	2	0
Tetrachloethen	3,096	11,983	8,787	7,490	2	0
Atrazin	0,050	0,050	0,000	0,050	2	0
Simazin	0,050	50,478	33,682	33,637	2	0
LHKW	16,796	50,478	33,682	33,637	2	0
Diuron	0,050	0,050	0,000	0,050	2	0
Desethylatrazin	0,050	0,063	0,013	0,057	2	0
Isoproturon	0,035	0,050	0,015	0,043	2	0
Bromacil	0,050	0,050	0,000	0,050	2	0
Hexazinon	0,050	0,077	0,027	0,063	2	0
Bentazon					2	2

Cluster 8	Minimum	Maximum	Spannweite	Mittelwert	N Gültig	Fehlend
LF	4,077	78,640	2,863	80,678	2	0
pH	0,170	7,030	0,120	7,115	2	0
Na	3,000	20,000	2,121	21,500	2	0
K	0,100	1,100	0,071	1,150	2	0
Ca	33,000	103,000	23,335	119,500	2	0
Mg	1,000	26,000	0,707	26,500	2	0
Pb	0,000	0,001	0,000	0,001	2	0
As	0,000	0,001	0,000	0,001	2	0
Cd					2	2
NO3	2,227	16,940	1,574	18,053	2	0
SO4	49,000	56,000	34,648	80,500	2	0
Cl	0,200	25,000	0,141	25,100	2	0
Trichloethen	0,002	0,001	0,001	0,002	2	0
Tetrachloethen	0,003	0,000	0,002	0,002	2	0
Atrazin	2,370	0,097	1,676	1,282	2	0
Simazin	0,037	0,053	0,028	0,072	2	0
LHKW	0,006	0,001	0,004	0,004	2	0
Diuron	0,200	0,050	0,141	0,150	2	0
Desethylatrazin	1,100	0,267	0,778	0,877	2	0
Isoproturon	0,015	0,035	0,011	0,043	2	0
Bromacil	1,080	1,823	0,764	1,823	2	0
Hexazinon	1,253	2,383	0,866	3,010	2	0
Bentazon					2	2

Cluster 6	Cluster 7	
LF	92,480	619,800
pH	7,024	6,706
Na	19,000	590,000
K	6,600	25,000
Ca	190,000	738,000
Mg	20,000	132,000
Pb	0,004	0,001
As	0,008	0,041
Cd		
NO3	0,620	0,960
SO4	160,000	992,000
Cl	35,000	1620,000
Trichloethen	0,000	0,000
Tetrachloethen	0,000	0,000
Atrazin	0,050	0,010
Simazin	0,050	0,010
LHKW	0,002	0,007
Diuron	1,800	0,050
Desethylatrazin	0,083	0,010
Isoproturon	0,050	0,035
Bromacil	0,067	0,010
Hexazinon	0,050	0,010
Bentazon		

Anhang III: Tabellen C 1 - 2

Statistische Basisparameter für alle Messstellen des jeweiligen Clusters einer 4-Clusterlösung
Ward-Clustering nach Eliminierung der mittels Single-Linkage-Clustering ermittelten Ausreißer (gemittelte Werte über den Gesamtzeitraum für jede Messstelle)
 Alle Werte als reale Variablenwerte in $\mu\text{g/l}$, lediglich LF in ms/m und Atrazin; Simazin; Diuron; Desethylatrazin; Isoproturon, Bromacil, Hexazinon und Bentazon in $[\mu\text{g}/\text{l}]$

Cluster 1	Minimum	Maximum	Spannweite	Median	Mittelwert	Stdabw.	Perzentile				N Gültig	Fehlend	Schiefe	Stoßfehler Schiefe	Kurtosis	Stoßfehler Kurtosis	
							1	5	25	75							
LF	25,200	211,600	186,400	93,987	99,222	25,703	50,201	65,415	82,735	113,579	148,996	181,871	0	0,937	0,108	1,492	0,215
pH	6,300	8,117	1,817	7,167	7,173	0,173	6,741	6,925	7,079	7,272	7,443	7,612	0	0,082	0,108	0,3912	0,215
Na	1,900	176,000	174,100	14,800	23,471	24,702	3,326	4,400	8,825	29,000	66,740	146,740	0	2,932	0,108	11,320	0,215
K	0,300	53,000	52,700	2,800	4,551	6,520	0,500	0,700	1,500	4,588	16,900	39,044	0	3,942	0,108	18,678	0,215
Ca	35,000	307,217	272,217	142,844	147,661	45,679	58,011	78,000	118,050	171,141	236,233	287,523	0	0,727	0,108	1,877	0,215
Mg	1,933	90,667	88,733	29,200	30,634	13,371	5,530	11,936	21,938	37,000	55,315	70,653	0	0,919	0,108	1,782	0,215
Pb	0,001	0,016	0,015	0,001	0,001	0,002	0,001	0,001	0,001	0,001	0,004	0,012	0	4,932	0,108	28,795	0,215
As	0,000	0,016	0,015	0,001	0,002	0,002	0,000	0,001	0,001	0,001	0,006	0,012	0	3,455	0,108	14,718	0,215
Cd	0,000	0,008	0,008	0,000	0,000	0,001	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,008	93	9,384	0,250	89,470	0,495
NO3	0,120	194,200	194,080	35,420	41,268	32,084	0,500	1,051	18,218	56,987	98,467	157,479	0	1,275	0,108	2,435	0,215
SO4	9,333	680,000	670,667	90,850	120,531	104,846	15,130	25,965	49,325	155,500	336,100	563,050	0	2,111	0,108	5,619	0,215
Cl	2,400	400,000	397,600	43,825	55,732	44,482	9,008	16,000	30,000	64,000	135,700	253,970	0	3,034	0,108	14,053	0,215
Trichloethen	0,000	0,461	0,461	0,000	0,004	0,026	0,000	0,000	0,000	0,001	0,010	0,095	0	13,383	0,108	215,019	0,215
Tetrachloethen	0,000	0,853	0,853	0,000	0,012	0,069	0,000	0,000	0,000	0,001	0,042	0,347	0	9,179	0,108	95,528	0,215
Atrazin	0,010	0,518	0,508	0,030	0,039	0,047	0,010	0,010	0,012	0,050	0,094	0,271	0	5,310	0,108	40,028	0,215
Simazin	0,010	0,093	0,083	0,020	0,027	0,017	0,010	0,010	0,010	0,050	0,050	0,053	0	0,489	0,108	-1,000	0,215
LHW	0,000	0,866	0,866	0,005	0,020	0,077	0,000	0,001	0,003	0,008	0,072	0,473	0	7,795	0,108	68,983	0,215
Diuron	0,010	0,130	0,120	0,050	0,046	0,014	0,010	0,010	0,050	0,050	0,050	0,090	0	0,075	0,108	7,984	0,215
Desethylatrazin	0,010	0,657	0,647	0,037	0,049	0,057	0,010	0,010	0,020	0,050	0,159	0,289	0	4,281	0,108	30,257	0,215
Isoproturon	0,010	0,100	0,090	0,050	0,042	0,013	0,010	0,010	0,035	0,050	0,050	0,066	0	-0,953	0,108	1,862	0,215
Bromacil	0,010	1,247	1,237	0,050	0,060	0,115	0,010	0,010	0,023	0,050	0,107	0,734	0	6,954	0,108	55,835	0,215
Hexazinon	0,010	0,510	0,500	0,037	0,041	0,045	0,010	0,010	0,010	0,050	0,100	0,232	0	5,352	0,108	44,406	0,215
Bentazon	0,010	0,283	0,273	0,050	0,048	0,032	0,010	0,010	0,050	0,050	0,082	0,194	356	4,199	0,168	25,059	0,386

Cluster 2	Minimum	Maximum	Spannweite	Median	Mittelwert	Stdabw.	Perzentile				N Gültig	Fehlend	Schiefe	Stoßfehler Schiefe	Kurtosis	Stoßfehler Kurtosis	
							1	5	25	75							
LF	3,767	134,619	130,852	66,400	63,037	20,404	8,602	19,509	53,950	76,782	90,462	105,806	0	-0,710	0,089	0,605	0,178
pH	5,284	8,676	3,392	7,170	7,133	0,338	5,967	6,418	7,067	7,300	7,550	8,000	0	-1,337	0,089	5,557	0,178
Na	0,700	136,000	135,300	9,200	11,829	10,823	1,700	2,700	5,600	14,700	28,800	45,088	0	4,906	0,089	43,231	0,178
K	0,100	18,650	18,550	1,700	2,554	2,433	0,100	0,400	1,075	3,210	7,878	12,110	0	2,371	0,089	7,250	0,178
Ca	2,788	236,800	234,014	111,600	102,844	38,073	8,512	19,670	86,300	126,900	151,520	173,616	0	-0,777	0,089	-0,317	0,178
Mg	0,514	40,071	39,557	12,200	13,327	7,686	1,252	2,855	6,950	18,833	27,000	33,393	0	4,252	0,089	22,245	0,178
Pb	0,000	0,007	0,007	0,001	0,001	0,001	0,001	0,001	0,001	0,002	0,002	0,005	0	5,212	0,089	31,790	0,178
As	0,000	0,030	0,030	0,001	0,002	0,003	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,001	181	9,685	0,181	111,065	0,359
Cd	0,000	0,003	0,003	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,001	574	1,012	0,089	1,062	0,178
NO3	0,238	91,933	91,695	20,041	22,653	16,259	4,419	8,800	10,760	31,588	55,328	72,068	0	1,062	0,089	1,062	0,178
SO4	1,300	250,200	248,900	30,000	38,917	33,057	4,300	6,990	17,400	48,000	102,932	162,932	0	2,361	0,089	8,141	0,178
Cl	0,100	104,350	104,250	20,000	23,367	15,649	1,712	4,780	11,964	31,000	51,030	83,704	0	1,403	0,089	3,230	0,178
Trichloethen	0,000	0,983	0,983	0,000	0,003	0,039	0,000	0,000	0,000	0,000	0,003	0,029	0	22,410	0,089	544,289	0,178
Tetrachloethen	0,000	0,684	0,684	0,000	0,004	0,030	0,000	0,000	0,000	0,000	0,010	0,083	0	17,985	0,089	382,566	0,178
Atrazin	0,010	0,450	0,440	0,030	0,040	0,040	0,010	0,010	0,020	0,050	0,104	0,232	0	4,286	0,089	4,286	0,178
Simazin	0,010	0,319	0,309	0,023	0,031	0,025	0,010	0,010	0,017	0,046	0,050	0,138	0	5,464	0,089	48,278	0,178
LHW	0,000	1,020	1,020	0,005	0,012	0,060	0,000	0,000	0,002	0,008	0,016	0,104	0	12,896	0,089	179,948	0,178
Diuron	0,010	0,420	0,410	0,050	0,049	0,024	0,010	0,020	0,050	0,050	0,050	0,104	0	9,612	0,089	123,874	0,178
Desethylatrazin	0,010	0,601	0,591	0,037	0,053	0,064	0,010	0,015	0,023	0,050	0,164	0,403	0	4,701	0,089	28,339	0,178
Isoproturon	0,015	0,143	0,128	0,050	0,048	0,011	0,015	0,023	0,050	0,050	0,067	0,075	0	0,582	0,089	12,080	0,178
Bromacil	0,010	0,310	0,300	0,050	0,046	0,022	0,010	0,017	0,034	0,050	0,075	0,086	0	3,550	0,089	37,058	0,178
Hexazinon	0,010	0,475	0,465	0,037	0,040	0,028	0,010	0,010	0,020	0,050	0,081	0,103	0	5,635	0,089	76,416	0,178
Bentazon	0,010	1,400	1,390	0,050	0,045	0,036	0,010	0,010	0,020	0,050	0,050	0,065	545	13,784	0,168	196,480	0,334

Anhang III: Tabellen C 1 - 2

Statistische Basisparameter für alle Messtellen des jeweiligen Clusters einer 4-Clusterlösung
Ward-Clustering nach Eliminierung der mittels Single-Linkage-Clustering ermittelten Ausreißer (gemittelte Werte über den Gesamtzeitraum für jede Messtelle)
 Alle Werte als reale Variablenwerte in [µg/l], lediglich LF in [mS/m] und Atrazin; Simazin; Duroton; Bromacil; Hexazinon und Bentazon in [µg/l]

Cluster 3	Minimum		Spannweite	Median	Mittelwert	Stdbw.	Perzentile					N Gültig	Fehlend	Schiefe	Stofffehler Schiefe	Kurtosis	Stofffehler Kurtosis
	1	5					25	50	75	95	99						
LF	148,620	273,250	124,630	209,851	36,421	148,620	148,620	183,620	247,780	273,250	273,250	15	0	0,283	0,580	-0,907	1,121
pH	6,754	7,438	7,090	7,068	0,159	6,754	6,754	6,935	7,136	7,438	7,438	15	0	0,364	0,580	1,480	1,121
Na	9,400	37,000	27,600	18,327	9,120	9,400	9,400	10,800	27,000	37,000	37,000	15	0	0,907	0,580	-0,605	1,121
K	2,900	23,000	20,100	5,400	2,700	2,900	2,900	3,340	10,000	23,000	23,000	15	0	1,968	0,580	4,088	1,121
Ca	288,000	650,000	362,000	428,667	117,986	288,000	288,000	349,000	587,000	650,000	650,000	15	0	0,582	0,580	-1,023	1,121
Mg	48,500	112,000	63,500	70,376	17,608	48,500	48,500	59,333	77,000	112,000	112,000	15	0	1,363	0,580	1,564	1,121
Pb	0,001	0,001	0,000	0,001	0,001	0,001	0,001	0,001	0,001	0,001	0,001	15	0	3,873	0,580	15,000	1,121
As	0,001	0,004	0,004	0,001	0,001	0,001	0,001	0,001	0,002	0,004	0,004	15	0	2,346	0,580	6,138	1,121
Cd												0	15				
NO3	0,100	34,425	34,325	9,740	13,614	12,276	0,100	3,000	28,000	34,425	34,425	15	0	0,571	0,580	-1,360	1,121
SO4	740,000	1490,000	750,000	937,000	1050,733	269,191	740,000	808,000	1350,000	1490,000	1490,000	15	0	0,538	0,580	-1,403	1,121
Cl	19,000	84,000	65,000	29,000	34,663	18,455	19,000	25,000	34,000	84,000	84,000	15	0	1,949	0,580	3,351	1,121
Trichlorethen	0,000	0,004	0,004	0,000	0,001	0,001	0,000	0,000	0,001	0,004	0,004	15	0	2,213	0,580	4,401	1,121
Tetrachlorethen	0,000	0,185	0,185	0,000	0,016	0,048	0,000	0,000	0,000	0,185	0,185	15	0	3,541	0,580	12,887	1,121
Atrazin	0,010	0,070	0,060	0,013	0,029	0,022	0,010	0,010	0,050	0,070	0,070	15	0	0,521	0,580	-1,438	1,121
Simazin	0,010	0,050	0,040	0,013	0,028	0,020	0,010	0,010	0,050	0,050	0,050	15	0	0,296	0,580	-2,116	1,121
LHW	0,001	0,189	0,187	0,003	0,020	0,048	0,001	0,003	0,008	0,189	0,189	15	0	3,518	0,580	12,761	1,121
Duroton	0,030	0,050	0,020	0,050	0,047	0,007	0,030	0,050	0,050	0,050	0,050	15	0	-2,405	0,580	4,349	1,121
Desethylatrazin	0,010	0,105	0,095	0,023	0,032	0,027	0,010	0,010	0,050	0,105	0,105	15	0	1,407	0,580	2,330	1,121
Isoproturon	0,030	0,050	0,020	0,035	0,038	0,007	0,030	0,035	0,050	0,050	0,050	15	0	0,957	0,580	-0,791	1,121
Bromacil	0,010	0,140	0,130	0,050	0,048	0,032	0,010	0,023	0,050	0,140	0,140	15	0	1,532	0,580	4,245	1,121
Hexazinon	0,010	0,095	0,085	0,023	0,035	0,029	0,010	0,010	0,050	0,095	0,095	15	0	0,783	0,580	-0,448	1,121
Bentazon	0,020	0,050	0,030	0,035	0,035	0,021	0,020	0,020	0,050	0,050	0,050	2	13				

Cluster 4	Minimum		Spannweite	Median	Mittelwert	Stdbw.	Perzentile					N Gültig	Fehlend	Schiefe	Stofffehler Schiefe	Kurtosis	Stofffehler Kurtosis
	1	5					25	50	75	95	99						
LF	61,380	90,113	28,733	67,887	11,726	61,380	61,380	63,156	86,183	90,113	90,113	8	0	0,788	0,752	-1,179	1,481
pH	6,866	7,492	7,125	7,153	0,223	6,866	6,866	7,024	7,406	7,492	7,492	8	0	0,183	0,752	-1,416	1,481
Na	2,500	36,000	33,500	11,650	11,315	2,500	2,500	6,875	24,925	36,000	36,000	8	0	0,977	0,752	0,129	1,481
K	0,300	6,750	6,450	2,200	2,656	2,389	0,300	0,300	4,825	6,750	6,750	8	0	0,652	0,752	-0,870	1,481
Ca	66,333	145,200	78,867	109,600	108,019	26,551	66,333	82,750	128,063	145,200	145,200	8	0	-0,394	0,752	-0,588	1,481
Mg	7,900	42,333	34,433	19,975	21,765	11,749	7,900	11,725	31,875	42,333	42,333	8	0	2,828	0,752	-0,162	1,481
Pb	0,001	0,001	0,000	0,001	0,001	0,000	0,001	0,001	0,001	0,001	0,001	8	0	2,828	0,752	8,000	1,481
As	0,001	0,005	0,005	0,001	0,002	0,002	0,001	0,001	0,004	0,005	0,005	8	0	1,408	0,752	-0,002	1,481
Cd	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	1	7				
NO3	15,325	80,500	65,175	33,733	42,019	24,176	15,325	22,095	65,000	80,500	80,500	8	0	0,586	0,752	-1,379	1,481
SO4	16,000	105,000	89,000	32,850	44,206	30,158	16,000	24,950	65,768	105,000	105,000	8	0	1,502	0,752	1,509	1,481
Cl	13,850	69,200	55,350	23,500	29,456	18,751	13,850	14,425	38,425	69,200	69,200	8	0	1,548	0,752	2,476	1,481
Trichlorethen	0,000	0,004	0,004	0,001	0,001	0,001	0,000	0,000	0,001	0,004	0,004	8	0	2,479	0,752	6,404	1,481
Tetrachlorethen	0,000	0,788	0,788	0,000	0,099	0,279	0,000	0,000	0,001	0,788	0,788	8	0	2,828	0,752	8,000	1,481
Atrazin	0,400	1,335	0,935	0,880	0,893	0,333	0,400	0,600	1,226	1,335	1,335	8	0	-0,076	0,752	-1,271	1,481
Simazin	0,010	0,100	0,090	0,050	0,051	0,032	0,010	0,010	0,078	0,100	0,100	8	0	2,828	0,752	-0,912	1,481
LHW	0,001	0,792	0,792	0,003	0,102	0,279	0,001	0,002	0,050	0,792	0,792	8	0	2,828	0,752	8,000	1,481
Duroton	0,023	0,067	0,043	0,050	0,049	0,012	0,023	0,050	0,067	0,067	0,067	8	0	1,232	0,752	4,370	1,481
Desethylatrazin	0,237	1,249	1,012	0,623	0,697	0,337	0,237	0,431	0,964	1,249	1,249	8	0	0,362	0,752	-0,754	1,481
Isoproturon	0,023	0,053	0,029	0,050	0,047	0,010	0,023	0,050	0,050	0,053	0,053	8	0	-2,779	0,752	7,807	1,481
Bromacil	0,010	0,280	0,270	0,050	0,106	0,103	0,010	0,027	0,200	0,280	0,280	8	0	0,854	0,752	-1,009	1,481
Hexazinon	0,010	0,638	0,628	0,056	0,171	0,231	0,010	0,010	0,343	0,638	0,638	8	0	1,468	0,752	1,366	1,481
Bentazon	0,050	0,120	0,070	0,085	0,085	0,049	0,050	0,050	0,120	0,120	0,120	2	6				

Anhang III: Tabellen C 1 - 2

Statistische Basisparameter für alle Messstellen des jeweiligen Clusters einer 8-Clusterlösung
Ward-Clustering nach Eliminierung der mittels Single-Linkage-Clustering ermittelten Ausreisser (gemittelte Werte über den Gesamtzeitraum für jede Messstelle)
Alle Werte als reale Variablenwerte in [mg/l] lediglich LF in [µS/cm] und Atrazin; Simazin; Diuron; Desethylatrazin; Isoproturon, Bromacil, Hexazinon und Bentazon in [µg/l]

Cluster 1	Perzentile									N	Fehlend	Schiefe	Stdfehler Schiefe	Kurtosis	Stdfehler Kurtosis		
	Minimum	Maximum	Spannweite	Median	Mittelwert	Stdabw.	1	5	25							75	95
LF	68,375	149,620	81,245	88,936	94,246	19,124	88,375	71,158	80,046	99,723	140,629	149,620	64	1,200	0,299	0,880	0,590
pH	6,931	7,448	0,516	7,181	7,184	0,127	6,931	6,947	7,117	7,672	7,386	7,448	64	-0,131	0,299	-0,483	0,590
Na	4,200	55,000	50,800	12,968	15,013	9,248	4,200	7,950	16,925	16,825	39,750	55,000	64	2,448	0,299	6,714	0,590
K	0,500	16,750	16,250	1,750	2,677	2,633	0,500	0,663	1,328	3,060	7,208	16,750	64	3,228	0,298	14,567	0,590
Ca	110,907	243,543	132,636	151,377	153,920	28,620	110,907	114,424	133,862	163,865	206,900	243,543	64	1,001	0,299	1,271	0,590
Mg	9,310	59,000	49,690	17,958	19,858	8,967	9,310	11,363	13,642	23,700	35,113	59,000	64	2,136	0,299	6,343	0,590
As	0,000	0,011	0,011	0,001	0,001	0,001	0,001	0,001	0,001	0,001	0,001	0,003	64	0,001	0,299	7,050	0,590
Pb	0,000	0,000	0,000	0,000	0,001	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	64	0,000	0,298	41,797	0,590
Cd	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	39	5,524	0,378	34,026	0,741
NO3	55,435	194,200	138,765	89,700	97,077	28,865	55,435	64,849	80,148	107,744	170,287	194,200	64	1,559	0,299	2,385	0,590
SO4	18,300	227,700	209,400	54,650	74,106	46,246	18,300	31,225	44,788	82,713	202,750	227,700	64	1,786	0,299	2,851	0,590
Cl	15,767	187,500	171,733	46,800	51,843	28,508	15,767	24,200	36,563	56,088	113,563	187,500	64	2,725	0,298	9,451	0,590
Trichlorethen	0,000	0,028	0,028	0,000	0,001	0,004	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,028	64	7,303	0,299	95,961	0,590
Tetrachlorethen	0,000	0,025	0,025	0,000	0,001	0,004	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,025	64	5,363	0,299	33,024	0,590
Atrazin	0,010	0,243	0,233	0,034	0,034	0,044	0,010	0,010	0,014	0,051	0,149	0,243	64	2,202	0,299	10,034	0,590
Simazin	0,010	0,085	0,075	0,024	0,025	0,015	0,010	0,010	0,033	0,060	0,050	0,085	64	1,153	0,298	2,046	0,590
LHKW	0,001	0,027	0,026	0,007	0,007	0,005	0,001	0,001	0,003	0,009	0,015	0,027	64	1,885	0,299	6,430	0,590
Diuron	0,010	0,068	0,058	0,013	0,013	0,013	0,010	0,010	0,040	0,060	0,050	0,068	64	-0,994	0,299	0,089	0,590
Desethylatrazin	0,010	0,301	0,291	0,043	0,043	0,060	0,010	0,012	0,024	0,061	0,218	0,301	64	2,202	0,299	4,865	0,590
Isoproturon	0,010	0,057	0,047	0,012	0,012	0,012	0,010	0,010	0,031	0,050	0,050	0,057	64	-1,047	0,298	-0,353	0,590
Bromacil	0,010	0,157	0,147	0,048	0,038	0,023	0,010	0,010	0,011	0,050	0,099	0,157	64	1,849	0,299	9,706	0,590
Hexazinon	0,010	0,100	0,090	0,039	0,036	0,010	0,010	0,010	0,011	0,050	0,063	0,100	64	0,294	0,299	0,416	0,590
Bentazon	0,010	0,950	0,940	0,050	0,043	0,012	0,010	0,010	0,032	0,050	0,050	0,950	36	-1,597	0,393	1,845	0,768

Cluster 2	Perzentile									N	Fehlend	Schiefe	Stdfehler Schiefe	Kurtosis	Stdfehler Kurtosis		
	Minimum	Maximum	Spannweite	Median	Mittelwert	Stdabw.	1	5	25							75	95
LF	21,969	134,619	112,650	68,607	68,634	14,394	27,610	44,253	59,810	77,677	91,465	106,439	649	0,007	0,096	1,135	0,192
pH	6,522	8,676	2,154	7,194	7,227	0,201	6,790	6,922	7,112	7,316	7,564	8,021	649	1,634	0,096	7,841	0,192
Na	0,700	136,000	135,300	9,100	12,150	11,428	1,700	2,700	5,500	15,750	29,450	47,600	649	4,761	0,096	39,730	0,192
K	0,100	18,650	18,550	1,600	2,535	2,483	0,100	0,950	1,305	3,205	8,095	12,125	649	2,360	0,096	7,158	0,192
Ca	10,000	236,800	226,800	115,940	113,522	26,677	34,000	62,933	100,629	129,000	153,183	173,700	649	-0,357	0,096	1,671	0,192
Mg	1,100	40,071	38,971	13,800	14,376	7,497	1,575	3,822	8,600	20,000	27,000	34,325	649	0,418	0,096	-0,325	0,192
Pb	0,000	0,006	0,006	0,001	0,001	0,001	0,001	0,001	0,001	0,001	0,001	0,005	649	3,889	0,096	17,581	0,192
As	0,000	0,030	0,030	0,001	0,002	0,003	0,000	0,000	0,001	0,002	0,006	0,020	649	5,037	0,096	28,921	0,192
Cd	0,000	0,003	0,003	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,002	134	9,376	0,209	97,225	0,416
NO3	0,238	77,200	76,962	21,133	22,895	15,742	0,419	0,623	10,854	32,150	52,855	69,125	649	0,784	0,096	7,663	0,192
SO4	3,500	250,200	246,700	32,000	41,664	34,003	4,825	8,500	20,000	51,100	107,525	166,250	649	2,307	0,096	4,435	0,192
Cl	0,100	104,983	104,250	22,300	24,876	15,848	2,800	5,300	13,475	32,775	53,250	84,800	649	1,371	0,096	3,144	0,192
Trichlorethen	0,000	0,983	0,983	0,000	0,003	0,042	0,000	0,000	0,000	0,000	0,003	0,030	649	20,808	0,096	468,733	0,192
Tetrachlorethen	0,000	0,288	0,288	0,000	0,003	0,017	0,000	0,000	0,000	0,000	0,011	0,066	649	11,706	0,096	162,671	0,192
Atrazin	0,010	0,450	0,440	0,023	0,042	0,042	0,010	0,010	0,020	0,050	0,109	0,244	649	4,172	0,096	25,100	0,192
Simazin	0,010	0,127	0,117	0,033	0,029	0,016	0,010	0,010	0,016	0,048	0,050	0,096	649	0,961	0,096	1,705	0,192
LHKW	0,000	1,020	1,020	0,005	0,012	0,009	0,000	0,000	0,003	0,008	0,017	0,180	649	13,624	0,096	202,153	0,192
Diuron	0,010	0,620	0,610	0,050	0,049	0,025	0,020	0,023	0,050	0,050	0,050	0,130	649	10,021	0,096	124,069	0,192
Desethylatrazin	0,010	0,801	0,591	0,039	0,056	0,067	0,010	0,017	0,023	0,050	0,164	0,413	649	4,499	0,096	25,448	0,192
Isoproturon	0,015	0,143	0,128	0,050	0,049	0,011	0,020	0,023	0,050	0,050	0,078	0,096	649	0,940	0,096	14,358	0,192
Bromacil	0,010	0,310	0,300	0,060	0,046	0,021	0,010	0,018	0,034	0,050	0,075	0,087	649	3,267	0,096	36,925	0,192
Hexazinon	0,010	0,475	0,465	0,040	0,041	0,029	0,010	0,010	0,020	0,050	0,081	0,116	649	5,864	0,096	77,722	0,192
Bentazon	0,010	1,400	1,380	0,050	0,045	0,033	0,010	0,010	0,020	0,050	0,050	0,308	181	12,845	0,181	170,162	0,359

Anhang III: Tabellen C 1 - 2

Statistische Basisparameter für alle Messstellen des jeweiligen Clusters einer 8-Clusterlösung
Ward-Clustering nach Eliminierung der mittels Single-Linkage-Clustering ermittelten Ausreißer (gemittelte Werte über den Gesamtzeitraum für jede Messstelle
Alle Werte als reale Variablenwerte in [mg/l], lediglich LF in [mS/m] und Atrazin; Simazin; Diuron; Desethylatrazin; Isoproturon; Bromacil, Hexazinon und Bentazon in [μ g/l])

Cluster 3		Perzentile												N	Fehlend	Schiefe	Stdfehler Schiefe	Kurtosis	Stdfehler Kurtosis
		1		5		25		75		95		99							
		Minimum	Maximum	Spannweite	Median	Mittelwert	Stdabw.	Spannweite	Median	Mittelwert	Stdabw.	Spannweite	Median						
LF	25.200	145.457	120.257	89.661	88.727	17.506	62,363	78,028	99.900	119,280	133,970	274	0	0,045	0,147	0,647	0,293		
pH	6.741	7.765	1.025	7.190	7.168	6.780	6.954	7.088	7.900	7.478	7.833	274	0	0,184	0,147	1,209	0,293		
Na	1.900	42.500	40.600	13.015	10.500	8.889	4.000	6.400	17.028	32,925	40,400	274	0	1,328	0,147	2,226	0,293		
K	0.300	8.680	8.380	1.900	2.364	1.592	1.200	1.200	3.625	5,825	7,225	274	0	1,227	0,147	1,226	0,293		
Ca	35.000	245.667	210.667	131.500	133.365	37.037	57.900	108.000	155.867	197,138	242,413	274	0	0,296	0,147	0,034	0,293		
Mg	1.933	68.333	66.400	31.860	32.673	10.837	6.375	17.811	38.273	51,333	66,900	274	0	0,503	0,147	1,019	0,293		
Pb	0.001	0.016	0.015	0.001	0.002	0.001	0.001	0.001	0.001	0.007	0,014	274	0	4,115	0,147	18,288	0,293		
As	0.000	0.014	0.013	0.001	0.002	0.000	0.000	0.001	0.001	0.004	0,011	274	0	4,548	0,147	24,164	0,293		
Cd	0.000	0.001	0.001	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0,000	40	234	3,898	0,147	18,556	0,293		
NO3	0.200	108.182	107.982	34.861	35.272	21.554	1.223	19.440	48.397	73,902	101,467	274	0	0,479	0,147	0,240	0,293		
SO4	9.333	334.000	324.667	71.050	92.200	66.977	11.750	20.950	128.125	236,750	324,750	274	0	1,383	0,147	1,988	0,293		
Cl	2.400	110.100	107.700	35.750	37.709	18.675	7.600	13.500	48.350	89,200	101,300	274	0	0,998	0,147	1,613	0,293		
Trichlorethen	0.000	0.092	0.091	0.000	0.001	0.007	0.000	0.000	0.000	0.004	0,044	274	0	10,024	0,147	112,910	0,293		
Tetrachlorethen	0.000	0.184	0.184	0.000	0.002	0.013	0.000	0.000	0.000	0.008	0,080	274	0	10,639	0,147	129,719	0,293		
Atrazin	0.010	0.108	0.098	0.025	0.028	0.019	0.010	0.010	0.050	0,060	0,083	274	0	0,703	0,147	0,032	0,293		
Simazin	0.010	0.050	0.040	0.020	0.026	0.016	0.010	0.010	0.048	0,050	0,147	274	0	0,502	0,147	-1,476	0,293		
LHKW	0.023	0.990	0.967	0.050	0.048	0.027	0.030	0.050	0.087	0,090	0,147	274	0	7,451	0,147	69,181	0,293		
Diuron	0.010	0.253	0.243	0.034	0.041	0.034	0.010	0.010	0.050	0,107	0,220	274	0	-0,020	0,147	7,228	0,293		
Desethylatrazin	0.023	0.063	0.040	0.050	0.045	0.028	0.028	0.030	0.037	0,050	0,064	274	0	-0,881	0,147	-0,417	0,293		
Isoproturon	0.010	0.197	0.187	0.050	0.043	0.019	0.010	0.010	0.050	0,064	0,100	274	0	1,683	0,147	15,604	0,293		
Bromacil	0.010	0.187	0.177	0.034	0.035	0.026	0.010	0.010	0.050	0,088	0,108	274	0	1,455	0,147	4,311	0,293		
Hexazinon	0.010	0.283	0.273	0.050	0.051	0.037	0.010	0.010	0.050	0,123	0,282	100	174	3,769	0,241	18,113	0,478		

Cluster 4		Perzentile												N	Fehlend	Schiefe	Stdfehler Schiefe	Kurtosis	Stdfehler Kurtosis
		1		5		25		75		95		99							
		Minimum	Maximum	Spannweite	Median	Mittelwert	Stdabw.	Spannweite	Median	Mittelwert	Stdabw.	Spannweite	Median						
LF	47.500	211.600	164.100	113.760	116.107	29.898	53.605	70.870	135.855	166,115	203,856	174	0	0,403	0,184	0,159	0,366		
pH	6.300	8.117	1.817	7.152	7.142	6.922	6.365	6.888	7.039	7,425	7,911	174	0	0,211	0,184	5,815	0,366		
Na	6.400	176.000	169.600	34.700	43.047	32.571	6.850	9.575	54.825	109,250	171,500	174	0	1,896	0,184	4,149	0,366		
K	0.760	53.000	52.240	4.900	8.651	9.877	0.790	1.475	10.100	30,350	49,738	174	0	2,260	0,184	5,360	0,366		
Ca	46.300	307.217	260.917	158.833	168.014	54.288	53.500	94.000	200.250	281,000	304,804	174	0	0,478	0,184	0,019	0,366		
Mg	3.550	90.667	87.117	29.000	31.388	16.438	4.225	7.508	37.763	64,400	89,167	174	0	1,062	0,184	1,462	0,366		
Pb	0.001	0.008	0.005	0.001	0.001	0.001	0.001	0.001	0.001	0.003	0,006	174	0	2,894	0,184	8,498	0,366		
As	0.001	0.016	0.015	0.002	0.002	0.001	0.001	0.001	0.003	0,007	0,015	174	0	2,741	0,184	9,385	0,366		
Cd	0.000	0.008	0.008	0.000	0.001	0.002	0.000	0.000	0.000	0.008	0,057	14	160	3,742	0,184	14,000	0,366		
NO3	0.120	163.000	162.880	26.600	30.153	25.907	0.150	9.565	43.860	86,620	116,895	174	0	1,468	0,184	3,661	0,366		
SO4	18.000	680.000	662.000	150.000	182.220	136.804	23.250	35.088	227.000	473,750	633,900	174	0	1,394	0,184	1,707	0,366		
Cl	13.000	400.000	387.000	71.000	85.603	59.638	14.575	23.650	107.000	202,000	346,000	174	0	2,117	0,184	6,460	0,366		
Trichlorethen	0.000	0.461	0.461	0.000	0.009	0.042	0.000	0.000	0.002	0,035	0,280	174	0	8,238	0,184	76,974	0,366		
Tetrachlorethen	0.000	0.853	0.853	0.000	0.032	0.114	0.000	0.000	0.007	0,191	0,823	174	0	5,391	0,184	31,873	0,366		
Atrazin	0.010	0.518	0.508	0.037	0.032	0.069	0.010	0.010	0.050	0,166	0,470	174	0	3,953	0,184	19,445	0,366		
Simazin	0.010	0.093	0.083	0.030	0.031	0.018	0.010	0.010	0.050	0,050	0,184	174	0	0,240	0,184	-1,043	0,366		
LHKW	0.000	0.866	0.866	0.005	0.044	0.128	0.000	0.001	0.014	0,249	0,837	174	0	4,531	0,184	22,255	0,366		
Diuron	0.010	0.130	0.120	0.050	0.043	0.021	0.010	0.010	0.043	0,060	0,123	174	0	0,565	0,184	3,439	0,366		
Desethylatrazin	0.010	0.857	0.847	0.037	0.038	0.078	0.010	0.010	0.050	0,233	0,403	174	0	3,841	0,184	21,443	0,366		
Isoproturon	0.010	0.100	0.090	0.050	0.036	0.017	0.010	0.010	0.050	0,050	0,088	174	0	-0,266	0,184	0,120	0,366		
Bromacil	0.010	1.247	1.237	0.050	0.036	0.191	0.010	0.010	0.063	0,543	1,229	174	0	3,971	0,184	17,226	0,366		
Hexazinon	0.010	0.510	0.500	0.048	0.053	0.068	0.010	0.010	0.054	0,158	0,485	174	0	4,077	0,184	21,533	0,366		
Bentazon	0.010	0.093	0.083	0.050	0.043	0.021	0.010	0.010	0.050	0,090	0,093	20	154	-0,140	0,512	0,932	0,992		

Anhang III: Tabellen C 1 - 2

Statistische Basisparameter für alle Messstellen des jeweiligen Clusters einer 8-Clusterlösung
Ward-Clustering nach Eliminierung der mittels Single-Linkage-Clustering ermittelten Ausreißer (gemittelte Werte über den Gesamtzeitraum für jede Messstelle
 Alle Werte als reale Variablenwerte in [mg/l], lediglich LF in [mS/m] und Atrazin; Simazin; Diuron; Desethylatrazin; Isoproturon; Bromacil; Hexazinon und Bentazon in [µg/l]

Cluster 5	Perzentile											N Gültig	Fehlend	Schiefe	Stofffehler Schiefe	Kurtosis	Stofffehler Kurtosis	
	Minimum	Maximum	Spannweite	Median	Mittelwert	Stdabw.	1											99
							5	25	75	95	99							
LF	3.767	58.885	55.118	23.720	25.578	13.229	3.767	7.296	15.960	33.980	50.520	58.885	0	0.663	0.243	-0.238	0.481	
pH	5.284	7.270	2.086	6.538	6.511	0.391	5.284	5.908	6.271	6.784	7.138	7.270	0	-0.610	0.243	3.320	0.481	
Na	1.600	31.300	29.700	9.435	4.828	1.600	2.500	6.100	12.300	16.700	31.300	31.300	0	1.022	0.243	4.787	0.481	
K	0.400	9.700	9.300	2.020	2.450	1.643	0.400	6.833	9.700	12.100	15.900	15.900	0	1.929	0.243	4.787	0.481	
Ca	2.786	98.160	95.374	27.300	32.002	21.971	2.786	6.833	15.900	40.200	78.550	98.160	0	1.192	0.243	0.944	0.481	
Mg	0.514	15.600	14.986	5.200	5.972	3.415	0.514	1.298	3.200	8.800	12.100	15.600	0	0.624	0.243	-0.563	0.481	
Pb	0.001	0.007	0.007	0.001	0.001	0.001	0.001	0.001	0.001	0.001	0.003	0.007	0	4.405	0.243	22.735	0.481	
As	0.000	0.011	0.010	0.001	0.001	0.002	0.000	0.000	0.000	0.000	0.005	0.011	0	2.781	0.243	11.286	0.481	
Cd	0.000	0.001	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.001	0.001	44	1.893	0.357	4.155	0.702	
NO3	0.300	79.410	79.110	15.020	20.283	17.879	0.300	3.400	8.540	22.317	68.190	79.410	0	0	0.243	3.200	0.481	
SO4	1.300	63.700	62.400	16.600	19.823	14.097	1.300	4.400	8.733	27.950	47.800	63.700	0	1.086	0.243	0.772	0.481	
Cl	1.400	47.000	45.600	12.000	13.316	9.153	1.400	1.900	6.900	17.200	32.000	47.000	0	1.220	0.243	1.634	0.481	
Trichlorethen	0.000	0.029	0.029	0.000	0.001	0.004	0.000	0.000	0.000	0.000	0.003	0.029	0	6.786	0.243	48.682	0.481	
Tetrachlorethen	0.000	0.684	0.684	0.000	0.009	0.069	0.000	0.000	0.000	0.001	0.008	0.684	0	9.594	0.243	93.804	0.481	
Atrazin	0.010	0.223	0.213	0.023	0.031	0.025	0.010	0.010	0.019	0.039	0.067	0.223	0	4.756	0.243	33.231	0.481	
Simazin	0.010	0.087	0.075	0.027	0.028	0.013	0.010	0.010	0.020	0.037	0.050	0.087	0	5.36	0.243	-0.320	0.481	
LHKW	0.000	0.703	0.703	0.004	0.014	0.071	0.000	0.000	0.001	0.008	0.015	0.703	0	9.959	0.243	93.371	0.481	
Diuron	0.010	0.100	0.090	0.050	0.043	0.017	0.010	0.010	0.030	0.060	0.087	0.100	0	0.140	0.243	1.713	0.481	
Desethylatrazin	0.010	0.206	0.196	0.030	0.037	0.030	0.010	0.010	0.020	0.045	0.096	0.206	0	3.080	0.243	12.912	0.481	
Isoproturon	0.015	0.75	0.690	0.050	0.044	0.011	0.015	0.015	0.035	0.050	0.090	0.75	0	-1.070	0.243	0.947	0.481	
Bromacil	0.010	0.247	0.237	0.050	0.045	0.028	0.010	0.010	0.034	0.050	0.079	0.247	0	4.612	0.243	36.094	0.481	
Hexazinon	0.010	0.095	0.085	0.034	0.037	0.022	0.010	0.010	0.020	0.050	0.088	0.095	0	1.051	0.243	0.485	0.481	
Bentazon	0.010	0.050	0.040	0.050	0.047	0.039	0.010	0.018	0.050	0.050	0.050	0.050	72	-3.289	0.448	10.969	0.872	

Cluster 6	Perzentile											N Gültig	Fehlend	Schiefe	Stofffehler Schiefe	Kurtosis	Stofffehler Kurtosis	
	Minimum	Maximum	Spannweite	Median	Mittelwert	Stdabw.	1											99
							5	25	75	95	99							
LF	148.620	273.250	124.630	205.620	209.851	36.421	148.620	148.620	183.620	247.780	273.250	273.250	15	0.283	0.580	-0.907	1.121	
pH	6.754	7.438	0.684	7.090	7.068	0.159	6.754	6.754	6.754	7.136	7.438	7.438	15	0.384	0.580	1.480	1.121	
Na	9.400	37.000	27.600	14.000	18.327	9.120	9.400	9.400	10.800	27.000	37.000	37.000	15	0.907	0.580	-0.605	1.121	
K	2.900	23.000	20.100	5.400	7.270	5.521	2.900	2.900	3.340	10.000	23.000	23.000	15	1.968	0.580	4.088	1.121	
Ca	288.000	650.000	362.000	428.667	444.578	117.986	288.000	288.000	349.000	587.000	650.000	650.000	15	0.582	0.580	-1.023	1.121	
Mg	48.500	112.000	63.500	65.300	70.376	17.608	48.500	48.500	59.333	77.000	112.000	112.000	15	1.363	0.580	1.564	1.121	
Pb	0.001	0.001	0.000	0.001	0.001	0.001	0.001	0.001	0.001	0.001	0.001	0.001	15	3.873	0.580	15.000	1.121	
As	0.001	0.004	0.004	0.001	0.002	0.001	0.001	0.001	0.002	0.002	0.004	0.004	15	2.346	0.580	6.138	1.121	
Cd													0					
NO3	0.100	34.425	34.325	9.740	13.614	12.276	0.100	0.100	3.000	28.000	34.425	34.425	15	0.571	0.580	-1.360	1.121	
SO4	740.000	1480.000	750.000	897.000	1050.733	269.191	740.000	740.000	808.000	1350.000	1480.000	1480.000	15	0.538	0.580	-1.403	1.121	
Cl	19.000	84.000	65.000	29.000	34.663	18.455	19.000	19.000	25.000	34.000	84.000	84.000	15	1.949	0.580	3.351	1.121	
Trichlorethen	0.000	0.004	0.004	0.000	0.001	0.001	0.000	0.000	0.000	0.001	0.004	0.004	15	2.213	0.580	4.401	1.121	
Tetrachlorethen	0.000	0.165	0.165	0.000	0.016	0.048	0.000	0.000	0.000	0.015	0.165	0.165	15	3.541	0.580	12.887	1.121	
Atrazin	0.010	0.070	0.060	0.013	0.028	0.029	0.010	0.010	0.010	0.050	0.070	0.070	15	0.621	0.580	-1.438	1.121	
Simazin	0.010	0.050	0.040	0.013	0.028	0.029	0.010	0.010	0.010	0.050	0.050	0.050	15	0.286	0.580	-2.116	1.121	
LHKW	0.000	0.189	0.187	0.005	0.020	0.048	0.001	0.001	0.001	0.008	0.189	0.189	15	3.518	0.580	12.761	1.121	
Diuron	0.030	0.050	0.020	0.047	0.007	0.007	0.030	0.030	0.050	0.050	0.050	0.050	15	-2.405	0.580	4.349	1.121	
Desethylatrazin	0.010	0.105	0.095	0.023	0.032	0.027	0.010	0.010	0.010	0.050	0.105	0.105	15	1.407	0.580	2.330	1.121	
Isoproturon	0.030	0.050	0.020	0.038	0.007	0.007	0.030	0.030	0.035	0.050	0.050	0.050	15	0.957	0.580	-0.791	1.121	
Bromacil	0.010	0.140	0.130	0.060	0.048	0.032	0.010	0.010	0.023	0.050	0.140	0.140	15	1.532	0.580	4.245	1.121	
Hexazinon	0.010	0.095	0.085	0.023	0.035	0.029	0.010	0.010	0.010	0.050	0.095	0.095	15	0.783	0.580	-0.448	1.121	
Bentazon	0.020	0.050	0.030	0.035	0.035	0.021	0.020	0.020	0.020	0.050	0.050	0.050	2					

Anhang III: Tabellen C 1 - 2

Statistische Basisparameter für alle Messstellen des jeweiligen Clusters einer 8-Clusterlösung
Ward-Clustering nach Eliminierung der mittels Single-Linkage-Clustering ermittelten Ausreißer (gemittelte Werte über den Gesamtzeitraum für jede Messstelle
 Alle Werte als reale Variablenwerte in [mg/l], lediglich LF in [mS/m] und Atrazin; Simazin; Diuron; Desethylatrazin; Isoproturon; Bromacil; Hexazinon und Bentazon in [µg/l]

Cluster 7	Perzentile 1										N Gültig	Fehlend	Schiefe	Stdfehler Schiefe	Kurtosis	Stdfehler Kurtosis
	Minimum	Maximum	Spannweite	Median	Mittelwert	Stdabw.	5	25	75	95						
LF	38,171	101,441	63,270	76,333	73,896	20,028	38,171	64,400	86,867	101,441	101,441	0	-0,668	0,794	1,112	1,587
pH	6,689	7,658	0,969	7,414	7,243	0,377	6,689	6,755	7,516	7,658	7,658	0	-0,803	0,794	-1,044	1,587
Na	3,200	34,900	31,300	13,950	15,943	10,447	3,200	7,000	21,700	34,900	34,900	0	0,772	0,794	0,580	1,587
K	0,400	12,750	12,350	3,965	5,080	0,400	0,400	0,600	11,600	12,750	12,750	0	0,777	0,794	-1,228	1,587
Ca	46,900	188,000	141,100	120,200	114,734	46,782	46,900	73,333	148,000	188,000	188,000	0	0,105	0,794	-0,119	1,587
Mg	5,800	30,527	24,727	18,144	20,083	9,837	5,800	12,233	29,525	30,527	30,527	0	-0,192	0,794	-1,743	1,587
Pb	0,000	0,007	0,007	0,001	0,002	0,002	0,001	0,001	0,003	0,007	0,007	0	2,110	0,794	4,736	1,587
As	0,000	0,003	0,003	0,001	0,001	0,001	0,000	0,000	0,002	0,003	0,003	0	0,881	0,794	-0,395	1,587
Cd	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	4	-1,732	0,794	0,807	1,587
NO3	6,800	91,933	85,133	30,533	33,718	31,537	6,800	7,840	56,547	91,933	91,933	0	0,653	0,794	-1,318	1,587
SO4	4,300	123,050	118,750	36,000	54,236	45,823	4,300	20,000	106,500	123,050	123,050	0	0,767	0,794	-0,340	1,587
Cl	7,900	58,150	50,250	25,000	25,607	19,047	7,900	8,800	40,350	58,150	58,150	0	1,300	0,794	-0,363	1,587
Trichlorethen	0,000	0,001	0,001	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,001	0,001	0	1,497	0,794	0,978	1,587
Tetrachlorethen	0,000	0,001	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0	1,652	0,794	3,482	1,587
Atrazin	0,010	0,103	0,093	0,039	0,042	0,030	0,010	0,023	0,050	0,103	0,103	0	1,075	0,794	-0,891	1,587
Simazin	0,153	0,319	0,166	0,214	0,223	0,061	0,153	0,160	0,278	0,319	0,319	0	-0,457	0,794	-0,906	1,587
LHKW	0,000	0,009	0,004	0,002	0,004	0,003	0,000	0,002	0,009	0,009	0,009	0	-0,179	0,794	3,016	1,587
Diuron	0,020	0,078	0,058	0,050	0,050	0,017	0,020	0,020	0,050	0,078	0,078	0	-0,141	0,794	-0,084	1,587
Desethylatrazin	0,010	0,060	0,050	0,037	0,037	0,017	0,010	0,030	0,057	0,060	0,060	0	-2,646	0,794	7,000	1,587
Isoproturon	0,035	0,050	0,015	0,050	0,048	0,006	0,035	0,050	0,050	0,050	0,050	0	-0,469	0,794	3,112	1,587
Bromacil	0,020	0,075	0,055	0,050	0,049	0,016	0,020	0,050	0,050	0,075	0,075	0	0,153	0,794	0,192	1,587
Hexazinon	0,010	0,075	0,065	0,040	0,040	0,021	0,010	0,020	0,050	0,075	0,075	0	0,153	0,794	0,192	1,587
Bentazon	0,037	0,050	0,013	0,043	0,043	0,009	0,037	0,037	0,050	0,050	0,050	2				

Cluster 8	Perzentile 1										N Gültig	Fehlend	Schiefe	Stdfehler Schiefe	Kurtosis	Stdfehler Kurtosis
	Minimum	Maximum	Spannweite	Median	Mittelwert	Stdabw.	5	25	75	95						
LF	61,380	90,113	28,733	67,887	72,554	11,726	61,380	63,156	86,183	90,113	90,113	0	0,788	0,752	-1,179	1,481
pH	6,866	7,492	0,625	7,125	7,153	0,223	6,866	6,866	7,406	7,492	7,492	0	0,183	0,752	-1,416	1,481
Na	2,500	36,000	33,500	11,650	15,250	11,315	2,500	6,875	24,925	36,000	36,000	0	0,977	0,752	0,129	1,481
K	0,300	6,750	6,450	2,200	2,696	2,389	0,300	0,525	4,825	6,750	6,750	0	0,652	0,752	-0,870	1,481
Ca	66,333	145,200	78,867	109,600	108,019	26,551	66,333	82,750	128,063	145,200	145,200	0	-0,394	0,752	-0,588	1,481
Mg	7,900	42,333	34,433	19,975	21,765	11,749	7,900	11,725	31,975	42,333	42,333	0	0,767	0,752	-0,162	1,481
Pb	0,001	0,001	0,000	0,001	0,001	0,000	0,001	0,001	0,001	0,001	0,001	0	2,828	0,752	8,000	1,481
As	0,000	0,005	0,005	0,001	0,002	0,002	0,001	0,004	0,004	0,005	0,005	0	1,408	0,752	-0,002	1,481
Cd	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	7				
NO3	15,325	80,500	65,175	33,733	42,019	24,176	15,325	22,095	65,000	80,500	80,500	0	0,586	0,752	-1,379	1,481
SO4	16,000	105,000	89,000	32,850	44,206	30,158	16,000	24,950	65,788	105,000	105,000	0	1,502	0,752	1,509	1,481
Cl	13,850	69,200	55,350	23,900	29,436	18,751	13,850	14,425	38,425	69,200	69,200	0	1,548	0,752	2,476	1,481
Trichlorethen	0,000	0,004	0,004	0,000	0,000	0,001	0,000	0,000	0,001	0,004	0,004	0	2,479	0,752	6,404	1,481
Tetrachlorethen	0,000	0,788	0,788	0,000	0,059	0,279	0,000	0,000	0,001	0,788	0,788	0	2,828	0,752	8,000	1,481
Atrazin	0,400	1,335	0,935	0,880	0,893	0,333	0,400	0,600	1,226	1,335	1,335	0	-0,076	0,752	-1,211	1,481
Simazin	0,010	0,100	0,090	0,050	0,051	0,032	0,010	0,071	0,078	0,100	0,100	0	0,077	0,752	-0,912	1,481
LHKW	0,001	0,792	0,792	0,003	0,102	0,279	0,001	0,002	0,005	0,792	0,792	0	2,828	0,752	8,000	1,481
Diuron	0,023	0,067	0,043	0,050	0,049	0,012	0,023	0,050	0,050	0,067	0,067	0	-1,232	0,752	4,270	1,481
Desethylatrazin	0,237	1,249	1,012	0,623	0,697	0,337	0,237	0,431	0,964	1,249	1,249	0	0,362	0,752	-0,754	1,481
Isoproturon	0,023	0,053	0,029	0,050	0,047	0,010	0,023	0,027	0,050	0,053	0,053	0	-2,779	0,752	7,807	1,481
Bromacil	0,010	0,280	0,270	0,050	0,106	0,103	0,010	0,027	0,205	0,280	0,280	0	0,854	0,752	-1,009	1,481
Hexazinon	0,010	0,638	0,628	0,056	0,171	0,231	0,010	0,010	0,343	0,638	0,638	0	1,468	0,752	1,366	1,481
Bentazon	0,050	0,120	0,070	0,085	0,085	0,049	0,050	0,050	0,120	0,120	0,120	6				

Anhang III: Tabellen C 1 - 3

Statistische Basisparameter für alle Messtellen des jeweiligen Clusters einer 4-Clusterlösung
K-means-Clustering nach Eliminierung der mittels Single-Linkage-Clustering ermittelten Ausreisser und Festlegung der Clusteranzahl mittels Ward-Clustering
 (gemittelte Werte über den Gesamtzeitraum für jede Messtelle)

Alle Werte als reale Variablenwerte in [mg/l], lediglich LF in [mS/m] und Atrazin; Simazin; Diuron; Desethylatrazin; Isoproturon, Bromacil, Hexazinon und Bentazon in [µg/l]

Cluster 1	Perzentile										N Gültig	N Fehlend		
	Minimum	Maximum	Spannweite	Median	Mittelwert	Stdabw.	1	5	25	75			95	99
LF	21,969	201,275	179,306	76,413	79,415	23,840	31,583	46,507	63,784	91,193	112,212	124,778	1346	1
pH	6,613	9,090	2,477	7,194	7,222	0,207	6,778	6,961	7,104	7,316	7,439	7,551	1347	0
Na	0,700	258,000	257,300	10,720	16,872	21,148	1,506	2,911	6,038	19,000	35,000	51,285	1322	25
K	0,100	72,000	71,900	1,900	3,300	4,925	0,200	6,500	1,128	3,700	6,500	9,850	1289	58
Ca	1,450	284,333	282,883	120,200	123,069	38,345	30,970	62,190	101,783	142,750	170,013	193,350	1337	10
Mg	1,075	90,667	89,592	19,790	21,277	12,730	2,191	4,292	11,814	28,646	37,672	44,516	1326	21
Pb	0,000	0,041	0,041	0,001	0,001	0,002	0,000	0,000	0,001	0,001	0,002	0,003	1299	48
As	0,000	0,066	0,066	0,001	0,002	0,003	0,000	0,000	0,001	0,002	0,003	0,005	1300	47
Cd	0,000	0,008	0,008	0,000	0,000	0,001	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	297	1050
NO3	0,133	194,200	194,067	24,180	29,301	25,096	0,233	0,625	11,525	39,700	59,820	81,343	1347	0
SO4	1,700	550,000	548,300	44,000	68,317	67,325	5,395	10,000	25,500	87,650	154,000	202,280	1327	20
Cl	0,100	400,000	399,900	28,500	35,684	32,932	2,383	5,000	16,050	44,000	68,940	95,200	1315	32
Trichloethen	0,000	1,164	1,164	0,000	0,005	0,049	0,000	0,000	0,000	0,000	0,002	0,005	1346	1
Tetrachloethen	0,000	12,525	12,525	0,000	0,018	0,351	0,000	0,000	0,000	0,000	0,005	0,020	1346	1
Atrazin	0,010	0,290	0,280	0,030	0,028	0,028	0,010	0,010	0,016	0,050	0,057	0,080	1345	2
Simazin	0,010	0,319	0,309	0,020	0,028	0,021	0,010	0,010	0,011	0,046	0,050	0,050	1345	2
LHKW	0,000	106,677	106,677	0,005	0,120	2,970	0,000	0,001	0,003	0,008	0,015	0,033	1346	1
Diuron	0,010	0,420	0,410	0,050	0,048	0,021	0,010	0,020	0,050	0,050	0,050	0,050	1267	80
Desethylatrazin	0,010	0,288	0,278	0,034	0,040	0,040	0,010	0,010	0,020	0,050	0,050	0,050	1345	2
Isoproturon	0,010	0,143	0,133	0,050	0,046	0,012	0,010	0,020	0,047	0,050	0,050	0,057	1341	6
Bromacil	0,010	1,223	1,213	0,050	0,049	0,065	0,010	0,010	0,023	0,050	0,067	0,081	1343	4
Hexazinon	0,010	0,790	0,780	0,035	0,040	0,038	0,010	0,010	0,020	0,050	0,067	0,083	1343	4
Bentazon	0,010	1,400	1,390	0,050	0,045	0,075	0,010	0,010	0,020	0,050	0,050	0,050	370	977

Cluster 2	Perzentile										N Gültig	N Fehlend		
	Minimum	Maximum	Spannweite	Median	Mittelwert	Stdabw.	1	5	25	75			95	99
LF	2,764	69,280	66,516	18,900	21,096	14,073	3,024	4,482	9,976	29,240	39,429	50,070	137	0
pH	4,788	7,210	2,422	6,432	6,357	0,459	4,794	5,526	6,123	6,660	6,859	6,969	137	0
Na	0,763	34,200	33,438	7,550	8,020	5,529	0,778	1,520	3,208	11,738	14,780	17,553	132	5
K	0,400	13,550	13,150	1,823	2,322	1,864	0,400	0,500	1,286	2,700	4,446	5,916	126	11
Ca	2,216	101,050	98,834	19,625	25,917	21,869	2,296	3,460	9,319	35,825	53,700	76,847	132	5
Mg	0,514	24,667	24,152	4,100	4,971	3,588	0,544	1,100	2,486	6,700	9,860	11,780	131	6
Pb	0,000	0,037	0,037	0,001	0,001	0,004	0,000	0,000	0,001	0,001	0,002	0,004	137	0
As	0,000	0,017	0,016	0,001	0,002	0,002	0,000	0,000	0,000	0,000	0,004	0,007	137	0
Cd	0,000	0,001	0,001	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,001	71	66
NO3	0,300	113,638	113,338	11,914	15,660	16,715	0,361	2,139	6,049	18,690	30,024	51,088	130	0
SO4	0,722	87,100	86,378	12,825	16,935	14,962	0,901	3,305	5,774	22,888	35,450	43,663	130	7
Cl	0,825	47,000	46,175	8,350	10,538	9,146	0,918	1,288	3,100	14,500	24,080	31,880	131	6
Trichloethen	0,000	0,029	0,029	0,000	0,001	0,003	0,000	0,000	0,000	0,000	0,001	0,003	137	0
Tetrachloethen	0,000	0,684	0,684	0,000	0,008	0,061	0,000	0,000	0,000	0,001	0,003	0,009	137	0
Atrazin	0,010	0,223	0,213	0,023	0,031	0,024	0,010	0,010	0,020	0,037	0,050	0,067	136	1
Simazin	0,010	0,223	0,213	0,023	0,030	0,024	0,010	0,010	0,020	0,037	0,050	0,067	136	1
LHKW	0,000	0,703	0,703	0,007	0,014	0,063	0,000	0,000	0,002	0,008	0,013	0,017	137	0
Diuron	0,010	0,100	0,090	0,050	0,043	0,017	0,010	0,010	0,030	0,050	0,050	0,067	107	30
Desethylatrazin	0,010	0,217	0,207	0,035	0,035	0,030	0,010	0,010	0,020	0,040	0,051	0,076	136	1
Isoproturon	0,010	0,080	0,065	0,045	0,045	0,011	0,015	0,023	0,041	0,050	0,050	0,050	136	1
Bromacil	0,010	0,247	0,237	0,050	0,041	0,025	0,010	0,010	0,020	0,050	0,050	0,068	136	1
Hexazinon	0,010	0,095	0,085	0,027	0,034	0,020	0,010	0,010	0,020	0,044	0,062	0,082	136	1
Bentazon	0,010	0,050	0,040	0,050	0,048	0,009	0,010	0,017	0,050	0,050	0,050	0,050	26	111

Anhang III: Tabellen C 1 - 3

Statistische Basisparameter für alle Messtellen des jeweiligen Clusters einer 4-Clusterlösung
K-means-Clustering nach Eliminierung der mittels Single-Linkage-Clustering ermittelten Ausreißer und Festlegung der Clusteranzahl mittels Ward-Clustering
 (gemittelte Werte über den Gesamtzeitraum für jede Messtelle)

Alle Werte als reale Variablenwerte in [mg/l], lediglich LF in [mS/m] und Atrazin; Simazin; Diuron; Desethylatrazin; Isoproturon, Bromacil, Hexazinon und Bentazon in [µg/l]

Cluster 3	Perzentile										N Gültig	Fehlend		
	Minimum	Maximum	Spannweite	Median	Mittelwert	Stabw.	1	5	25	75			95	99
LF	52,034	144,000	91,966	76,382	82,510	24,916	52,034	55,327	64,547	90,657	126,810	138,870	38	0
pH	6,300	7,587	1,287	7,152	7,184	0,238	6,300	6,838	7,046	7,389	7,498	7,561	38	0
Na	1,900	41,000	39,100	11,650	14,910	11,800	1,900	2,410	4,750	24,263	36,000	38,450	36	2
K	0,200	40,000	39,800	1,700	5,010	9,172	0,200	0,285	0,700	4,100	17,425	37,110	36	2
Ca	46,300	209,000	162,700	128,750	126,244	37,016	46,300	56,680	103,643	151,500	169,280	201,800	37	1
Mg	1,000	53,500	52,500	16,833	19,034	13,799	1,000	1,270	5,950	29,043	38,867	46,750	37	1
Pb	0,001	0,019	0,016	0,001	0,001	0,001	0,001	0,001	0,001	0,001	0,002	0,005	36	2
As	0,000	0,007	0,006	0,001	0,002	0,001	0,000	0,000	0,001	0,002	0,005	0,005	36	2
Cd	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	3	35
NO3	4,400	157,603	153,203	44,281	54,456	33,506	4,400	10,442	33,967	69,975	103,155	150,577	38	0
SO4	9,800	198,000	188,200	34,000	58,826	56,226	9,800	9,960	18,000	75,000	172,800	190,800	35	3
Cl	11,200	176,000	164,800	38,000	42,711	31,863	11,200	12,800	21,000	57,000	75,400	114,800	35	3
Trichlorethen	0,000	0,025	0,025	0,000	0,002	0,006	0,000	0,000	0,000	0,001	0,007	0,024	37	1
Tetrachlorethen	0,000	0,813	0,813	0,000	0,055	0,190	0,000	0,000	0,000	0,000	0,103	0,791	37	1
Atrazin	0,070	1,335	1,265	0,252	0,390	0,329	0,070	0,101	0,167	0,502	0,989	1,268	36	2
Simazin	0,010	0,103	0,093	0,039	0,041	0,027	0,010	0,010	0,018	0,050	0,087	0,100	36	2
LHKW	0,001	0,827	0,826	0,005	0,061	0,192	0,001	0,002	0,004	0,009	0,111	0,796	37	1
Diuron	0,023	0,120	0,097	0,050	0,052	0,013	0,023	0,045	0,050	0,050	0,063	0,077	35	3
Desethylatrazin	0,050	1,249	1,199	0,375	0,423	0,250	0,050	0,083	0,257	0,540	0,774	1,010	36	2
Isoproturon	0,023	0,083	0,060	0,050	0,049	0,008	0,023	0,034	0,050	0,050	0,050	0,056	37	1
Bromacil	0,010	1,247	1,237	0,050	0,145	0,247	0,010	0,017	0,050	0,073	0,412	0,853	36	2
Hexazinon	0,010	0,638	0,628	0,050	0,107	0,158	0,010	0,010	0,010	0,098	0,416	0,529	36	2
Bentazon	0,050	0,120	0,070	0,050	0,055	0,018	0,050	0,050	0,050	0,050	0,078	0,120	15	23

Cluster 4	Perzentile										N Gültig	Fehlend		
	Minimum	Maximum	Spannweite	Median	Mittelwert	Stabw.	1	5	25	75			95	99
LF	128,340	375,000	246,660	187,000	197,852	49,661	128,340	133,689	158,235	236,569	254,260	283,488	46	0
pH	6,693	7,438	0,745	7,029	7,037	0,150	6,693	6,759	6,835	7,122	7,234	7,325	46	0
Na	9,400	160,000	150,600	23,000	31,699	29,327	9,400	9,940	13,400	37,000	63,280	95,200	37	9
K	1,300	28,000	26,700	4,300	6,963	6,117	1,300	1,794	2,975	10,075	15,090	23,250	38	8
Ca	190,000	650,000	460,000	318,000	364,061	126,364	190,000	220,000	270,000	438,000	587,000	616,500	39	7
Mg	27,850	140,000	112,150	61,333	62,678	22,203	27,850	32,892	51,000	70,000	93,400	112,000	39	7
Pb	0,001	0,003	0,002	0,001	0,001	0,000	0,001	0,001	0,001	0,001	0,001	0,002	43	3
As	0,001	0,026	0,025	0,002	0,004	0,005	0,001	0,001	0,001	0,004	0,011	0,014	43	3
Cd													0	46
NO3	0,100	120,300	120,200	11,090	23,066	27,831	0,100	0,148	2,798	33,951	64,743	92,927	46	0
SO4	226,000	1490,000	1264,000	789,000	785,963	348,307	226,000	340,000	466,000	1006,000	1350,000	1440,000	39	7
Cl	3,700	608,000	604,300	40,300	75,388	107,336	3,700	13,000	28,000	75,000	161,000	301,000	39	7
Trichlorethen	0,000	2,500	2,500	0,000	0,059	0,368	0,000	0,000	0,000	0,003	0,010	0,087	46	0
Tetrachlorethen	0,000	0,853	0,853	0,000	0,037	0,132	0,000	0,000	0,000	0,005	0,110	0,207	46	0
Atrazin	0,010	0,126	0,116	0,050	0,037	0,026	0,010	0,010	0,010	0,050	0,050	0,093	44	2
Simazin	0,010	0,067	0,057	0,048	0,034	0,019	0,010	0,010	0,010	0,010	0,050	0,050	44	2
LHKW	0,000	2,524	2,524	0,005	0,099	0,390	0,000	0,001	0,003	0,012	0,204	0,651	46	0
Diuron	0,030	0,050	0,020	0,049	0,004	0,004	0,030	0,030	0,050	0,050	0,050	0,050	39	7
Desethylatrazin	0,010	0,130	0,120	0,050	0,039	0,027	0,010	0,010	0,010	0,050	0,058	0,102	44	2
Isoproturon	0,020	0,050	0,039	0,039	0,039	0,010	0,020	0,035	0,035	0,050	0,050	0,050	45	1
Bromacil	0,010	0,185	0,175	0,050	0,052	0,032	0,010	0,010	0,043	0,060	0,082	0,126	44	2
Hexazinon	0,010	0,185	0,175	0,050	0,044	0,032	0,010	0,010	0,011	0,050	0,074	0,092	44	2
Bentazon	0,010	0,050	0,040	0,035	0,033	0,019	0,010	0,010	0,013	0,050	0,050	0,050	8	38

Anhang III: Tabellen C 1 - 3

Statistische Basisparameter für alle Messstellen des jeweiligen Clusters einer 8-Clusterlösung
K-means-Clustering nach Eliminierung der mittels Single-Linkage-Clustering ermittelten Ausreißer und Festlegung der Clusteranzahl mittels Ward-Clustering
 (gemittelte Werte über den Gesamtzeitraum für jede Messstelle)
 Alle Werte als reale Variablenwerte in [mg/l], lediglich LF in [µS/cm] und Atrazin; Simazin; Diuron; Desethylatrazin; Isoproturon, Bromacil, Hexazinon und Bentazon in [µg/l]

Cluster 1	Perzentile										N Gültig	N Fehlend		
	Minimum	Maximum	Spannweite	Median	Mittelwert	Stdabw.	1	5	25	50			75	95
LF	61.380	90.113	28.733	73.400	73.631	10.635	61.380	61.380	63.600	82.335	90.113	90.113	90.113	0
pH	6.866	7.492	0.625	7.083	7.154	0.205	6.866	6.866	7.029	7.397	7.492	7.492	7.492	0
Na	2.500	36.000	33.500	9.800	13.310	10.832	2.500	2.500	2.500	20.575	36.000	36.000	36.000	0
K	0.300	6.750	6.450	1.900	2.505	2.156	0.300	0.300	0.575	4.075	6.750	6.750	6.750	0
Ca	66.333	156.000	89.667	119.000	115.862	28.979	66.333	66.333	95.917	140.300	156.000	156.000	156.000	0
Mg	2.100	42.333	40.233	17.517	19.305	12.096	2.100	2.100	9.775	25.958	42.333	42.333	42.333	0
Pb	0.001	0.001	0.000	0.001	0.001	0.000	0.001	0.001	0.001	0.001	0.001	0.001	0.001	0
As	0.000	0.005	0.005	0.001	0.002	0.002	0.000	0.000	0.001	0.002	0.005	0.005	0.005	0
Cd	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	9
NO3	10.760	80.500	69.740	33.733	41.894	25.753	10.760	10.760	20.241	67.418	80.500	80.500	80.500	0
SO4	15.400	105.000	89.600	32.850	41.535	28.145	15.400	15.400	15.400	53.475	105.000	105.000	105.000	0
Cl	13.850	69.200	55.350	23.500	27.915	17.034	13.850	13.850	15.475	37.275	69.200	69.200	69.200	0
Trichlorethen	0.000	0.004	0.004	0.000	0.001	0.001	0.000	0.000	0.000	0.001	0.004	0.004	0.004	0
Tetrachlorethen	0.000	0.788	0.788	0.000	0.079	0.249	0.000	0.000	0.000	0.000	0.788	0.788	0.788	0
Atrazin	0.323	1.335	1.012	0.764	0.792	0.365	0.323	0.323	0.438	1.164	1.335	1.335	1.335	0
Simazin	0.010	0.100	0.090	0.047	0.048	0.029	0.010	0.010	0.025	0.073	0.100	0.100	0.100	0
LHKW	0.001	0.792	0.792	0.003	0.062	0.250	0.001	0.001	0.002	0.006	0.792	0.792	0.792	0
Diuron	0.023	0.067	0.043	0.050	0.049	0.010	0.023	0.023	0.023	0.050	0.067	0.067	0.067	0
Desethylatrazin	0.237	1.249	1.012	0.576	0.656	0.312	0.237	0.237	0.237	0.405	0.958	1.249	1.249	0
Isoproturon	0.023	0.053	0.029	0.050	0.048	0.009	0.023	0.023	0.023	0.050	0.053	0.053	0.053	0
Bromacil	0.010	0.280	0.270	0.050	0.056	0.093	0.010	0.010	0.040	0.186	0.280	0.280	0.280	0
Hexazinon	0.010	0.638	0.628	0.058	0.149	0.209	0.010	0.010	0.010	0.010	0.638	0.638	0.638	0
Bentazon	0.050	0.120	0.070	0.050	0.073	0.040	0.050	0.050	0.050	0.120	0.120	0.120	0.120	7

Cluster 2	Perzentile										N Gültig	N Fehlend		
	Minimum	Maximum	Spannweite	Median	Mittelwert	Stdabw.	1	5	25	50			75	95
LF	76.425	211.600	135.175	108.457	113.395	23.028	80.073	85.318	95.747	125.060	155.323	189.450	189.450	0
pH	6.640	7.842	1.202	7.132	7.131	0.143	6.757	6.916	7.044	7.207	7.361	7.553	7.553	0
Na	4.200	176.000	171.800	23.850	31.440	28.278	5.199	7.395	12.925	37.000	92.350	158.350	158.350	8
K	0.500	72.000	71.500	3.400	6.295	8.673	0.543	0.900	1.900	6.523	22.960	47.591	47.591	8
Ca	47.700	307.217	259.517	160.000	169.189	40.752	86.407	115.400	142.000	192.000	246.000	298.101	298.101	5
Mg	5.800	90.667	84.867	30.600	32.850	14.082	6.770	13.687	23.500	38.900	63.200	76.792	76.792	5
Pb	0.001	0.009	0.008	0.001	0.001	0.001	0.001	0.001	0.001	0.001	0.004	0.007	0.007	16
As	0.000	0.024	0.024	0.002	0.002	0.003	0.000	0.001	0.001	0.003	0.007	0.018	0.018	15
Cd	0.000	0.008	0.008	0.000	0.001	0.001	0.000	0.000	0.000	0.000	0.001	0.008	0.008	50
NO3	0.120	194.200	194.080	37.040	45.984	36.512	0.323	0.703	16.721	64.010	115.529	169.794	169.794	340
SO4	24.600	618.000	593.400	134.000	160.707	113.016	30.462	42.900	76.000	200.000	399.200	585.680	585.680	335
Cl	9.400	400.000	390.600	56.000	70.643	50.034	13.868	22.850	40.000	88.200	164.600	298.790	298.790	333
Trichlorethen	0.000	0.503	0.503	0.000	0.006	0.039	0.000	0.000	0.000	0.001	0.018	0.136	0.136	339
Tetrachlorethen	0.000	0.853	0.853	0.000	0.019	0.068	0.000	0.000	0.000	0.002	0.066	0.553	0.553	339
Atrazin	0.010	0.518	0.508	0.028	0.040	0.053	0.010	0.010	0.011	0.050	0.120	0.278	0.278	2
Simazin	0.010	0.093	0.083	0.020	0.027	0.018	0.010	0.010	0.010	0.050	0.050	0.078	0.078	338
LHKW	0.000	6.571	6.571	0.005	0.045	0.367	0.000	0.001	0.003	0.009	0.092	0.761	0.761	339
Diuron	0.010	0.190	0.180	0.050	0.044	0.018	0.010	0.010	0.047	0.050	0.050	0.120	0.120	333
Desethylatrazin	0.010	0.657	0.647	0.033	0.047	0.060	0.010	0.010	0.017	0.050	0.174	0.305	0.305	338
Isoproturon	0.010	0.100	0.090	0.043	0.039	0.014	0.010	0.010	0.030	0.050	0.050	0.075	0.075	339
Bromacil	0.010	1.247	1.237	0.050	0.066	0.135	0.010	0.010	0.020	0.050	0.168	0.841	0.841	338
Hexazinon	0.010	0.510	0.500	0.037	0.045	0.056	0.010	0.010	0.010	0.050	0.127	0.353	0.353	338
Bentazon	0.010	0.283	0.273	0.050	0.048	0.034	0.010	0.010	0.050	0.050	0.078	0.283	0.283	86

Anhang III: Tabellen C 1 - 3

Statistische Basisparameter für alle Messstellen des jeweiligen Clusters einer 8-Clusterlösung
K-means-Clustering nach Eliminierung der mittels Single-Linkage-Clustering ermittelten Ausreisser und Festlegung der Clusteranzahl mittels Ward-Clustering
 (gemittelte Werte über den Gesamtzeitraum für jede Messstelle)
 Alle Werte als reale Variablenwerte in [mg/l], lediglich LF in [µS/cm] und Atrazin; Simazin; Diuron; Desethylatrazin; Isoproturon, Bromacil, Hexazinon und Bentazon in [µg/l]

Cluster 3	Perzentile										N Gültig	Fehlend		
	Minimum	Maximum	Spannweite	Median	Mittelwert	Stdabw.	1	5	25	75			95	99
LF	38,171	101,441	63,270	72,011	72,825	18,784	38,171	38,171	64,650	85,625	101,441	101,441	8	0
pH	6,689	7,658	0,969	7,415	7,272	0,359	6,689	6,689	6,878	7,507	7,658	7,658	8	0
Na	3,200	34,500	31,300	13,550	15,940	10,447	3,200	3,200	7,000	21,700	34,500	34,500	7	1
K	0,400	12,750	12,350	3,505	5,229	5,080	0,400	0,400	0,600	11,800	12,750	12,750	7	1
Ca	46,900	188,000	141,100	110,573	112,892	43,624	46,900	46,900	80,000	142,439	188,000	188,000	8	0
Mg	5,900	30,527	24,727	17,007	19,523	9,244	5,900	5,900	12,863	29,477	30,527	30,527	8	0
Pb	0,001	0,007	0,007	0,002	0,002	0,002	0,001	0,001	0,001	0,001	0,001	0,001	8	0
As	0,000	0,003	0,003	0,001	0,001	0,001	0,000	0,000	0,001	0,002	0,003	0,003	8	0
Cd	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	3	5
NO3	6,800	91,933	85,133	32,367	34,878	29,382	6,800	6,800	7,922	53,161	91,933	91,933	8	0
SO4	4,300	123,050	118,750	36,000	54,236	45,823	4,300	4,300	20,000	106,500	123,050	123,050	7	1
Cl	7,900	58,150	50,250	25,000	25,607	19,047	7,900	7,900	8,800	40,350	58,150	58,150	7	1
Trichloethen	0,000	0,001	0,001	0,000	0,000	0,001	0,000	0,000	0,000	0,001	0,001	0,001	8	0
Tetrachloethen	0,000	0,009	0,009	0,001	0,001	0,003	0,000	0,000	0,000	0,000	0,009	0,009	8	0
Atrazin	0,010	0,103	0,093	0,035	0,042	0,030	0,010	0,010	0,023	0,050	0,103	0,103	7	1
Simazin	0,153	0,319	0,166	0,214	0,223	0,061	0,153	0,153	0,160	0,278	0,319	0,319	7	1
LHKW	0,000	0,010	0,009	0,002	0,004	0,004	0,000	0,000	0,002	0,009	0,010	0,010	8	0
Diuron	0,020	0,078	0,058	0,050	0,050	0,017	0,020	0,020	0,050	0,050	0,078	0,078	7	1
Desethylatrazin	0,010	0,060	0,050	0,037	0,037	0,017	0,010	0,010	0,030	0,057	0,060	0,060	7	1
Isoproturon	0,035	0,050	0,045	0,050	0,048	0,006	0,035	0,035	0,050	0,050	0,050	0,050	7	1
Bromacil	0,020	0,075	0,055	0,050	0,049	0,016	0,020	0,020	0,050	0,050	0,075	0,075	7	1
Hexazinon	0,010	0,075	0,065	0,040	0,040	0,021	0,010	0,010	0,020	0,050	0,075	0,075	7	1
Bentazon	0,037	0,050	0,013	0,043	0,043	0,009	0,037	0,037	0,037	0,050	0,050	0,050	2	6

Cluster 4	Perzentile										N Gültig	Fehlend		
	Minimum	Maximum	Spannweite	Median	Mittelwert	Stdabw.	1	5	25	75			95	99
LF	27,157	134,619	107,462	61,350	55,306	17,681	27,157	32,627	44,816	61,129	91,172	134,619	65	1
pH	6,613	9,090	2,477	7,414	7,460	0,345	6,613	7,079	7,279	7,576	8,199	9,090	66	0
Na	0,888	100,625	99,738	4,053	12,193	21,012	0,888	1,154	2,500	10,238	69,100	100,625	64	2
K	0,100	8,500	8,400	1,067	1,449	1,438	0,100	0,255	0,588	1,719	4,800	8,500	64	2
Ca	3,175	236,800	233,625	74,000	77,345	37,353	3,175	12,953	55,545	95,835	146,050	236,800	65	1
Mg	1,125	46,850	45,725	18,060	19,388	10,942	1,125	2,259	10,938	26,563	39,250	46,850	65	1
Pb	0,000	0,003	0,003	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,001	0,001	0,003	66	0
As	0,000	0,015	0,015	0,000	0,001	0,003	0,000	0,000	0,000	0,001	0,004	0,015	66	0
Cd	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	61	5
NO3	0,133	37,275	37,142	9,277	9,416	8,466	0,133	0,157	0,697	12,886	26,301	37,275	66	0
SO4	1,700	250,200	248,500	19,140	29,988	35,676	1,700	2,844	12,695	31,513	99,750	250,200	64	2
Cl	0,900	64,000	63,500	5,575	9,236	11,507	0,900	0,606	3,031	9,504	37,500	64,000	64	2
Trichloethen	0,000	0,001	0,001	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,001	66	0
Tetrachloethen	0,000	0,001	0,001	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,001	66	0
Atrazin	0,010	0,060	0,050	0,010	0,016	0,010	0,010	0,010	0,010	0,020	0,036	0,060	65	1
Simazin	0,010	0,040	0,030	0,010	0,016	0,009	0,010	0,010	0,010	0,020	0,035	0,040	65	1
LHKW	0,001	0,011	0,010	0,006	0,007	0,002	0,001	0,004	0,005	0,008	0,008	0,011	66	0
Diuron	0,240	0,420	0,180	0,324	0,327	0,074	0,240	0,240	0,258	0,399	0,420	0,420	4	62
Desethylatrazin	0,010	0,133	0,123	0,020	0,023	0,016	0,010	0,010	0,020	0,040	0,040	0,133	65	1
Isoproturon	0,020	0,050	0,030	0,042	0,042	0,013	0,020	0,020	0,020	0,050	0,050	0,050	63	3
Bromacil	0,010	0,050	0,040	0,045	0,033	0,018	0,010	0,010	0,013	0,050	0,050	0,050	64	2
Hexazinon	0,010	0,475	0,465	0,020	0,027	0,058	0,010	0,010	0,013	0,020	0,040	0,475	64	2
Bentazon	0,010	0,051	0,041	0,050	0,035	0,018	0,010	0,010	0,018	0,050	0,051	0,051	14	52

Anhang III: Tabellen C 1 - 3

Statistische Basisparameter für alle Messstellen des jeweiligen Clusters einer 8-Clusterlösung
K-means-Clustering nach Eliminierung der mittels Single-Linkage-Clustering ermittelten Ausreißer und Festlegung der Clusteranzahl mittels Ward-Clustering
 (Gemittelte Werte über den Gesamtzeitraum für jede Messstelle)
 Alle Werte als reale Variablenwerte in [mg/l], lediglich LF in [µS/cm], Atrazin, Simazin, Diuron, Desethylatrazin, Isoproturon, Bromacil, Hexazinon und Bentazon in [µg/l]

Cluster 5	Perzentile										N Gültig	N Fehlend		
	Minimum	Maximum	Spannweite	Median	Mittelwert	Stdabw.	1	5	25	75			95	99
LF	2,764	69,280	66,516	17,797	20,577	14,450	2,966	4,313	9,658	27,890	52,248	69,039	127	0
pH	4,788	6,976	2,188	6,384	6,306	4,938	4,792	5,471	6,091	6,614	6,854	6,873	127	0
Na	0,763	39,900	39,138	6,950	8,451	6,954	0,773	1,407	3,057	11,888	18,975	38,589	122	5
K	0,400	36,600	36,200	1,848	2,675	3,713	0,409	0,500	1,300	2,970	6,150	32,682	116	11
Ca	2,216	101,050	98,834	17,513	24,583	21,276	2,272	3,340	8,750	34,388	69,673	100,385	122	5
Mg	0,514	24,667	24,152	3,950	4,648	3,333	0,535	1,058	2,354	6,475	10,415	21,924	121	6
Pb	0,000	0,037	0,037	0,001	0,001	0,004	0,000	0,000	0,001	0,001	0,003	0,001	127	0
As	0,000	0,017	0,016	0,001	0,002	0,000	0,000	0,000	0,000	0,002	0,006	0,015	127	0
Cd	0,000	0,001	0,001	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,001	0,001	67	60
NO3	0,300	113,638	113,338	11,914	16,212	17,688	0,345	2,094	5,609	18,825	63,975	104,026	127	0
SO4	0,722	87,100	86,378	12,825	17,177	15,375	0,844	3,300	5,825	23,063	43,788	83,971	120	7
Cl	0,825	71,050	70,225	8,300	11,285	11,778	0,892	1,286	2,928	14,588	33,155	69,613	122	5
Trichloethen	0,000	0,029	0,029	0,000	0,001	0,003	0,000	0,000	0,000	0,000	0,003	0,008	127	0
Tetrachloethen	0,000	0,684	0,684	0,000	0,009	0,064	0,000	0,000	0,000	0,001	0,008	0,048	127	0
Atrazin	0,010	0,317	0,307	0,022	0,032	0,035	0,010	0,010	0,020	0,037	0,068	0,291	126	1
Simazin	0,010	0,125	0,115	0,022	0,028	0,015	0,010	0,010	0,020	0,037	0,050	0,106	126	1
LHKW	0,000	0,703	0,703	0,008	0,014	0,065	0,000	0,000	0,003	0,006	0,016	0,563	127	0
Diuron	0,010	0,100	0,090	0,050	0,043	0,018	0,010	0,010	0,030	0,050	0,067	0,100	97	30
Desethylatrazin	0,010	0,233	0,223	0,030	0,036	0,035	0,010	0,010	0,020	0,040	0,080	0,229	126	1
Isoproturon	0,015	0,075	0,060	0,050	0,045	0,011	0,015	0,021	0,040	0,050	0,050	0,075	126	1
Bromacil	0,010	0,247	0,237	0,050	0,041	0,026	0,010	0,010	0,020	0,050	0,074	0,203	126	1
Hexazinon	0,010	0,095	0,085	0,027	0,034	0,020	0,010	0,010	0,020	0,044	0,083	0,095	126	1
Bentazon	0,010	0,050	0,040	0,050	0,048	0,009	0,010	0,016	0,050	0,050	0,050	0,050	25	102

Cluster 6	Perzentile										N Gültig	N Fehlend		
	Minimum	Maximum	Spannweite	Median	Mittelwert	Stdabw.	1	5	25	75			95	99
LF	13,760	118,460	104,700	71,126	70,407	14,980	25,439	44,443	61,361	80,628	93,504	102,867	984	0
pH	6,628	8,380	1,752	7,207	7,227	0,185	6,813	6,978	7,113	7,326	7,539	7,631	984	0
Na	0,700	125,000	124,300	8,520	11,704	10,744	1,769	3,000	5,400	14,100	28,685	58,930	968	16
K	0,100	24,100	24,000	1,620	2,424	2,359	0,200	0,400	1,015	3,100	6,448	11,442	938	46
Ca	14,100	245,667	231,567	114,193	112,456	27,944	30,232	61,599	98,038	129,350	153,398	183,708	978	6
Mg	1,000	67,000	66,000	16,200	17,769	10,609	1,636	3,700	9,900	24,000	37,800	48,530	967	17
Pb	0,000	0,041	0,041	0,001	0,001	0,002	0,000	0,001	0,001	0,001	0,002	0,008	951	33
As	0,000	0,066	0,066	0,001	0,002	0,003	0,000	0,000	0,001	0,002	0,005	0,018	951	33
Cd	0,000	0,003	0,003	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,001	188	796
NO3	0,180	103,650	103,470	23,070	25,813	18,462	0,446	0,874	12,285	36,405	61,028	89,246	984	0
SO4	3,500	245,000	241,500	35,050	45,363	35,055	5,238	9,090	21,925	56,763	118,875	171,388	968	16
Cl	0,100	103,200	103,100	24,000	26,414	15,832	3,016	5,690	15,000	35,100	55,122	80,100	957	27
Trichloethen	0,000	0,983	0,983	0,000	0,036	0,036	0,000	0,000	0,000	0,000	0,003	0,041	983	1
Tetrachloethen	0,000	0,469	0,469	0,000	0,004	0,023	0,000	0,000	0,000	0,000	0,014	0,088	983	1
Atrazin	0,010	0,525	0,515	0,030	0,040	0,037	0,010	0,010	0,020	0,050	0,095	0,212	983	1
Simazin	0,010	0,127	0,117	0,023	0,029	0,016	0,010	0,010	0,015	0,048	0,050	0,063	983	1
LHKW	0,000	1,020	1,020	0,005	0,012	0,053	0,000	0,000	0,003	0,008	0,021	0,190	983	1
Diuron	0,010	0,170	0,160	0,050	0,048	0,010	0,020	0,030	0,050	0,050	0,050	0,073	970	14
Desethylatrazin	0,010	0,577	0,567	0,040	0,040	0,060	0,010	0,012	0,022	0,050	0,156	0,321	981	1
Isoproturon	0,010	0,143	0,133	0,050	0,049	0,009	0,020	0,050	0,050	0,050	0,067	0,071	981	3
Bromacil	0,010	0,784	0,774	0,050	0,048	0,042	0,010	0,015	0,037	0,050	0,075	0,165	982	2
Hexazinon	0,010	0,790	0,780	0,039	0,041	0,035	0,010	0,010	0,020	0,050	0,081	0,131	982	2
Bentazon	0,010	1,400	1,390	0,050	0,045	0,083	0,010	0,010	0,020	0,050	0,050	0,176	286	698

Anhang III: Tabellen C 1 - 3

Statistische Basisparameter für alle Messstellen des jeweiligen Clusters einer 8-Clusterlösung
K-means-Clustering nach Eliminierung der mittels Single-Linkage-Clustering ermittelten Ausreißer und Festlegung der Clusteranzahl mittels Ward-Clustering
 (gemittelte Werte über den Gesamtzeitraum für jede Messstelle)
 Alle Werte als reale Variablenwerte in [mg/l], lediglich LF in [mS/cm] und Atrazin; Simazin; Diuron; Desethylatrazin; Isoproturon, Bromacil, Hexazinon und Bentazon in [µg/l]

Cluster 7	Perzentile										N Gültig	Fehlend		
	Minimum	Maximum	Spannweite	Median	Mittelwert	Stdabw.	1	5	25	75			95	99
LF	56.000	166.000	110.000	92.335	99.205	41.945	56.000	56.000	61.835	135.083	166.000	166.000	6	0
pH	7.045	8.910	1.865	7.343	7.740	0.628	7.045	7.045	7.103	8.735	8.910	8.910	6	0
Na	95.900	258.000	162.100	159.375	163.163	69.618	95.900	95.900	105.925	239.188	258.000	258.000	4	2
K	1.333	10.600	9.267	5.100	5.687	3.675	1.333	1.333	2.367	9.900	10.600	10.600	5	1
Ca	1.450	126.667	125.217	68.500	59.323	53.251	1.450	1.450	5.725	108.333	126.667	126.667	5	1
Mg	2.167	33.100	30.933	5.533	12.840	12.843	2.167	2.167	1.450	25.550	33.100	33.100	5	1
Pb	0.000	0.001	0.000	0.001	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.001	0.001	0.001	4	2
As	0.002	0.005	0.003	0.002	0.003	0.002	0.002	0.002	0.002	0.004	0.005	0.005	4	2
Cd	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	1	5
NO3	0.500	35.200	34.700	3.628	14.025	14.025	0.500	0.500	0.500	22.810	35.200	35.200	6	0
SO4	51.300	190.000	138.700	65.000	81.210	60.841	51.300	51.300	52.525	123.000	190.000	190.000	5	1
Cl	1.100	34.000	32.900	16.300	18.440	13.561	1.100	1.100	6.000	31.950	34.000	34.000	5	1
Trichloethen	0.000	1.164	1.164	0.085	0.279	0.454	0.000	0.000	0.000	0.545	1.164	1.164	6	0
Tetrachloethen	0.000	12.525	12.525	0.573	2.703	4.916	0.000	0.000	0.000	5.040	12.525	12.525	6	0
Atrazin	0.020	0.193	0.173	0.035	0.063	0.066	0.020	0.020	0.028	0.097	0.193	0.193	6	0
Simazin	0.020	0.055	0.035	0.045	0.041	0.014	0.020	0.020	0.028	0.051	0.055	0.055	6	0
LHKW	0.005	106.677	106.672	6.524	22.767	41.772	0.005	0.005	0.006	39.516	106.677	106.677	6	0
Diuron	0.050	0.070	0.020	0.050	0.054	0.009	0.050	0.050	0.050	0.060	0.070	0.070	5	1
Desethylatrazin	0.020	0.153	0.133	0.035	0.054	0.050	0.020	0.020	0.028	0.076	0.153	0.153	6	0
Isoproturon	0.028	0.050	0.023	0.050	0.046	0.009	0.028	0.028	0.044	0.050	0.050	0.050	6	0
Bromacil	0.020	0.100	0.080	0.067	0.067	0.031	0.020	0.020	0.043	0.100	0.100	0.100	6	0
Hexazinon	0.020	0.100	0.080	0.058	0.059	0.026	0.020	0.020	0.043	0.075	0.100	0.100	6	0
Bentazon	0.020	0.050	0.030	0.050	0.040	0.017	0.020	0.020	0.020	0.050	0.050	0.050	3	24

Cluster 8	Perzentile										N Gültig	Fehlend		
	Minimum	Maximum	Spannweite	Median	Mittelwert	Stdabw.	1	5	25	75			95	99
LF	148.620	375.000	226.380	215.450	224.520	46.626	148.620	155.292	186.840	249.400	340.600	375.000	27	0
pH	6.693	7.438	0.745	7.060	7.042	0.169	6.693	6.718	6.934	7.136	7.389	7.438	27	0
Na	9.400	160.000	150.600	16.300	28.850	34.544	9.400	9.430	11.650	31.250	155.850	160.000	20	7
K	2.900	23.000	20.100	5.400	7.574	5.453	2.900	2.920	3.605	10.150	22.290	23.000	21	6
Ca	288.000	650.000	362.000	420.833	444.948	110.760	288.000	290.200	357.230	573.233	644.975	650.000	22	5
Mg	34.900	140.000	105.100	65.150	71.391	23.216	34.900	36.940	55.500	77.750	135.800	140.000	22	5
Pb	0.001	0.003	0.002	0.001	0.001	0.000	0.001	0.001	0.001	0.001	0.002	0.003	25	2
As	0.001	0.026	0.025	0.002	0.004	0.006	0.001	0.001	0.001	0.004	0.022	0.026	25	2
Cd	0.100	120.300	120.200	10.380	21.303	27.145	0.100	0.140	3.000	28.519	103.160	120.300	27	0
NO3	680.000	1490.000	810.000	918.500	1032.000	255.283	680.000	689.000	820.000	1237.500	1482.500	1490.000	22	5
SO4	3.700	608.000	604.300	29.100	64.511	124.448	3.700	5.995	26.350	46.275	537.050	608.000	22	5
Cl	0.000	2.500	2.500	0.000	0.000	0.481	0.000	0.000	0.000	0.001	1.513	2.500	27	0
Trichloethen	0.000	0.218	0.218	0.000	0.020	0.054	0.000	0.000	0.000	0.004	0.205	0.218	27	0
Tetrachloethen	0.010	0.070	0.060	0.030	0.031	0.020	0.010	0.010	0.010	0.050	0.063	0.070	26	1
Atrazin	0.010	0.050	0.040	0.035	0.035	0.018	0.010	0.010	0.010	0.050	0.050	0.050	26	1
Simazin	0.000	2.524	2.524	0.005	0.118	0.485	0.000	0.001	0.003	0.009	1.615	2.524	27	0
LHKW	0.030	0.050	0.020	0.050	0.046	0.006	0.030	0.030	0.050	0.050	0.050	0.050	22	5
Diuron	0.010	0.105	0.095	0.030	0.034	0.023	0.010	0.010	0.010	0.050	0.098	0.105	26	1
Desethylatrazin	0.020	0.050	0.030	0.050	0.037	0.010	0.020	0.020	0.043	0.050	0.050	0.050	27	0
Isoproturon	0.010	0.185	0.175	0.050	0.062	0.038	0.010	0.010	0.043	0.050	0.169	0.185	26	1
Bromacil	0.010	0.185	0.175	0.050	0.062	0.038	0.010	0.010	0.043	0.050	0.169	0.185	26	1
Hexazinon	0.020	0.050	0.030	0.050	0.040	0.017	0.020	0.020	0.020	0.050	0.050	0.050	3	24

Anhang III: Tabellen C 2 - 1

F- und T-Werte der gebildeten Cluster bei direkter Ward-Clustering

8er Lösung

F-Werte	Cluster 1	Cluster 2	Cluster 3	Cluster 4	Cluster 5	Cluster 6	Cluster 7	Cluster 8
LF	0,69	0,42	2,66	0,17	k.B.	k.B.	k.B.	k.B.
pH	0,42	1,42	0,25	0,66	k.B.	k.B.	k.B.	k.B.
Na	1,86	0,30	8,66	0,30	k.B.	k.B.	k.B.	k.B.
K	1,96	0,26	61,00	0,26	k.B.	k.B.	k.B.	k.B.
Ca	0,60	0,42	5,17	1,77	k.B.	k.B.	k.B.	k.B.
Mg	0,91	0,30	3,40	2,59	k.B.	k.B.	k.B.	k.B.
Pb	0,39	3,21	0,00	1,07	k.B.	k.B.	k.B.	k.B.
As	3,11	0,30	135,16	0,42	k.B.	k.B.	k.B.	k.B.
Cd	2,37	0,17	0,00	0,00	k.B.	k.B.	k.B.	k.B.
NO3	1,57	0,43	0,63	1,92	k.B.	k.B.	k.B.	k.B.
SO4	0,59	0,07	5,73	3,53	k.B.	k.B.	k.B.	k.B.
Cl	1,69	0,21	5,82	0,62	k.B.	k.B.	k.B.	k.B.
Trichlorethen	15,88	1,34	0,00	0,00	k.B.	k.B.	k.B.	k.B.
Tetrachlorethen	1,60	0,31	0,58	19,48	k.B.	k.B.	k.B.	k.B.
Atrazin	0,40	0,23	0,06	12,51	k.B.	k.B.	k.B.	k.B.
Simazin	2,48	0,51	0,69	6,56	k.B.	k.B.	k.B.	k.B.
LHKW	23,53	0,73	0,33	11,30	k.B.	k.B.	k.B.	k.B.
Diuron	0,71	1,39	0,12	0,23	k.B.	k.B.	k.B.	k.B.
Desethylatrazin	0,60	0,60	0,09	65,71	k.B.	k.B.	k.B.	k.B.
Isoproturon	1,13	2,07	0,43	0,57	k.B.	k.B.	k.B.	k.B.
Bromacil	7,65	0,09	0,16	1,36	k.B.	k.B.	k.B.	k.B.
Hexazinon	8,67	0,48	0,44	23,55	k.B.	k.B.	k.B.	k.B.
Bentazon	0,18	1,64	0,08	0,22	k.B.	k.B.	k.B.	k.B.

Grundgesamtheit: 1290 Mst.
k.B. keine Berechnung möglich

t-Werte	Cluster 1	Cluster 2	Cluster 3	Cluster 4	Cluster 5	Cluster 6	Cluster 7	Cluster 8
LF	0,62	-0,50	4,36	-0,11	2,33	k.B.	k.B.	0,05
pH	0,09	-0,06	-0,31	0,39	-0,16	k.B.	k.B.	-0,12
Na	0,41	-0,27	1,44	-0,09	1,14	k.B.	k.B.	0,27
K	0,27	-0,19	3,33	-0,21	0,13	k.B.	k.B.	-0,48
Ca	0,37	-0,36	5,06	0,20	0,99	k.B.	k.B.	-0,09
Mg	0,64	-0,51	3,48	0,19	2,66	k.B.	k.B.	0,39
Pb	-0,06	0,11	-0,31	0,02	-0,33	k.B.	k.B.	-0,29
As	0,34	-0,17	3,28	-0,05	1,77	k.B.	k.B.	-0,31
Cd	0,07	-0,04	-0,45	-0,07	-0,45	k.B.	k.B.	-0,45
NO3	0,38	-0,27	-0,56	0,88	-0,52	k.B.	k.B.	-0,47
SO4	0,26	-0,32	6,62	0,24	-0,17	k.B.	k.B.	-0,02
Cl	0,57	-0,38	1,01	0,03	6,27	k.B.	k.B.	-0,33
Trichlorethen	0,18	-0,01	-0,08	-0,07	227,65	k.B.	k.B.	-0,03
Tetrachlorethen	0,09	-0,07	0,06	1,20	139,09	k.B.	k.B.	-0,12
Atrazin	-0,04	-0,06	-0,23	9,60	0,06	k.B.	k.B.	14,88
Simazin	0,08	-0,03	-0,18	1,46	0,92	k.B.	k.B.	1,89
LHKW	0,26	-0,05	0,00	0,86	475,76	k.B.	k.B.	-0,16
Diuron	-0,04	0,05	-0,02	0,08	0,12	k.B.	k.B.	4,97
Desethylatrazin	-0,05	-0,03	-0,32	10,85	0,02	k.B.	k.B.	9,20
Isoproturon	-0,29	0,27	-0,62	0,06	-0,27	k.B.	k.B.	-0,27
Bromacil	0,30	-0,08	-0,10	0,57	-0,03	k.B.	k.B.	23,46
Hexazinon	0,27	-0,03	-0,20	2,76	0,53	k.B.	k.B.	72,68
Bentazon	0,02	-0,02	-0,16	0,28	-0,62	k.B.	k.B.	-0,62

Grundgesamtheit: 1290 Mst.
k.B. keine Berechnung möglich

Anhang III: Tabellen C 2 - 1

F- und T-Werte der gebildeten Cluster bei direkter Ward-Clusterung

6er Lösung

F-Werte	Cluster 1	Cluster 2	Cluster 3	Cluster 4	Cluster 5	Cluster 6
LF	0,69	0,42	2,66	0,14	k.B.	k.B.
pH	0,42	1,42	0,25	0,60	k.B.	k.B.
Na	1,86	0,30	8,66	0,27	k.B.	k.B.
K	1,96	0,26	61,00	0,22	k.B.	k.B.
Ca	0,60	0,42	5,17	1,50	k.B.	k.B.
Mg	0,91	0,30	3,40	2,16	k.B.	k.B.
Pb	0,39	3,21	0,00	0,90	k.B.	k.B.
As	3,11	0,30	135,16	0,36	k.B.	k.B.
Cd	2,37	0,17	0,00	0,00	k.B.	k.B.
NO3	1,57	0,43	0,63	1,85	k.B.	k.B.
SO4	0,59	0,07	5,73	2,95	k.B.	k.B.
Cl	1,69	0,21	5,82	0,53	k.B.	k.B.
Trichlorethen	15,88	1,33	0,00	0,00	k.B.	k.B.
Tetrachlorethen	1,60	0,31	0,58	16,48	k.B.	k.B.
Atrazin	0,40	0,23	0,06	48,26	k.B.	k.B.
Simazin	2,48	0,51	0,69	5,60	k.B.	k.B.
LHKW	23,53	0,73	0,33	9,56	k.B.	k.B.
Diuron	0,71	11,01	0,12	7,49	k.B.	k.B.
Desethylatrazin	0,60	0,59	0,09	62,51	k.B.	k.B.
Isoproturon	1,13	2,07	0,43	0,56	k.B.	k.B.
Bromacil	7,65	0,09	0,16	83,57	k.B.	k.B.
Hexazinon	8,67	0,48	0,44	748,14	k.B.	k.B.
Bentazon	0,18	1,64	0,08	0,22	k.B.	k.B.

Grundgesamtheit: 1280 Mst.
k.B. keine Berechnung möglich

t-Werte	Cluster 1	Cluster 2	Cluster 3	Cluster 4	Cluster 5	Cluster 6
LF	0,62	-0,50	4,36	-0,09	2,33	k.B.
pH	0,09	-0,06	-0,31	0,31	-0,16	k.B.
Na	0,41	-0,27	1,44	-0,03	1,14	k.B.
K	0,27	-0,19	3,33	-0,25	0,13	k.B.
Ca	0,37	-0,36	5,06	0,16	0,99	k.B.
Mg	0,64	-0,51	3,48	0,22	2,66	k.B.
Pb	-0,06	0,12	-0,31	-0,03	-0,33	k.B.
As	0,34	-0,17	3,28	-0,09	1,77	k.B.
Cd	0,07	-0,04	-0,45	-0,07	-0,45	k.B.
NO3	0,38	-0,27	-0,56	0,67	-0,52	k.B.
SO4	0,26	-0,32	6,62	0,20	-0,17	k.B.
Cl	0,57	-0,38	1,01	-0,02	6,27	k.B.
Trichlorethen	0,18	-0,01	-0,08	-0,06	227,65	k.B.
Tetrachlorethen	0,09	-0,07	0,06	1,00	139,09	k.B.
Atrazin	-0,04	-0,06	-0,23	10,41	0,06	k.B.
Simazin	0,08	-0,03	-0,18	1,53	0,92	k.B.
LHKW	0,26	-0,05	0,00	0,70	475,76	k.B.
Diuron	-0,04	0,17	-0,02	0,83	0,12	k.B.
Desethylatrazin	-0,05	-0,03	-0,32	10,60	0,02	k.B.
Isoproturon	-0,29	0,27	-0,62	0,01	-0,27	k.B.
Bromacil	0,30	-0,08	-0,10	4,09	-0,03	k.B.
Hexazinon	0,27	-0,03	-0,20	13,52	0,53	k.B.
Bentazon	0,02	-0,02	-0,16	0,28	-0,62	k.B.

Grundgesamtheit: 1280 Mst.
k.B. keine Berechnung möglich

Anhang III: Tabellen C 2 -2

F- und T-Werte der gebildeten Cluster bei Ward-Clustering nach Eliminierung

8er Lösung

F-Werte	Cluster 1	Cluster 2	Cluster 3	Cluster 4	Cluster 5	Cluster 6	Cluster 7	Cluster 8
LF	0,35	0,20	0,30	0,87	0,17	1,29	0,39	0,13
pH	0,20	0,51	0,32	0,51	1,92	0,32	1,78	0,62
Na	0,26	0,38	0,23	3,08	0,07	0,24	0,32	0,37
K	0,29	0,28	0,11	4,30	0,12	1,40	1,18	0,26
Ca	0,23	0,20	0,39	0,84	0,14	3,96	0,62	0,20
Mg	0,38	0,27	0,54	1,29	0,06	1,48	0,46	0,66
Pb	0,21	0,31	3,09	0,61	0,59	0,01	3,52	0,01
As	0,28	1,46	0,37	0,83	0,36	0,12	0,11	0,57
Cd	0,00	0,21	0,11	17,24	0,04	0,00	0,01	0,00
NO3	1,27	0,38	0,71	1,03	0,49	0,23	1,52	0,89
SO4	0,12	0,06	0,24	1,02	0,01	3,94	0,11	0,05
Cl	0,69	0,21	0,30	3,03	0,07	0,29	0,31	0,30
Trichlorethen	0,01	1,54	0,04	1,57	0,01	0,00	0,00	0,00
Tetrachlorethen	0,00	0,10	0,06	4,49	1,66	0,81	0,00	26,83
Atrazin	0,29	0,25	0,05	0,70	0,09	0,07	0,13	16,10
Simazin	0,47	0,54	0,54	0,68	0,34	0,77	7,46	2,05
LHKW	0,00	0,69	0,05	3,27	1,01	0,46	0,00	15,61
Diuron	0,37	1,48	0,11	1,04	0,71	0,12	0,66	0,33
Desethylatrazin	0,53	0,66	0,17	0,88	0,13	0,11	0,04	16,63
Isoproturon	0,99	0,79	0,40	2,14	0,88	0,40	0,23	0,65
Bromacil	0,09	0,08	0,06	6,42	0,12	0,18	0,04	1,84
Hexazinon	0,22	0,51	0,39	2,74	0,28	0,49	0,27	31,99
Bentazon	0,02	1,89	0,25	0,08	0,01	0,08	0,02	0,44

Grundgesamtheit 1290 Mst.

t-Werte	Cluster 1	Cluster 2	Cluster 3	Cluster 4	Cluster 5	Cluster 6	Cluster 7	Cluster 8
LF	0,47	-0,33	0,33	1,15	-1,67	4,07	-0,16	-0,21
pH	0,13	0,28	0,15	-0,02	-2,26	-0,29	0,33	0,12
Na	-0,08	-0,24	-0,19	1,43	-0,38	0,10	-0,03	-0,07
K	-0,16	-0,19	-0,22	1,12	-0,20	0,83	0,39	-0,16
Ca	0,49	-0,19	0,15	0,73	-1,56	5,40	-0,17	-0,28
Mg	-0,07	-0,45	0,81	0,72	-1,03	3,42	-0,06	0,06
Pb	-0,14	-0,11	0,31	0,02	-0,07	-0,30	0,94	-0,29
As	-0,15	-0,01	-0,14	0,41	-0,14	-0,12	-0,18	0,03
Cd	-0,06	-0,07	-0,07	1,04	0,02	-0,45	-0,13	-0,07
NO3	2,62	-0,28	0,20	0,00	-0,38	-0,64	0,14	0,47
SO4	-0,07	-0,31	0,07	0,73	-0,47	7,13	-0,21	-0,29
Cl	0,45	-0,33	0,04	1,43	-0,67	-0,05	-0,31	-0,20
Trichlorethen	-0,07	0,00	-0,06	0,17	-0,07	-0,07	-0,08	-0,07
Tetrachlorethen	-0,13	-0,09	-0,10	0,45	0,02	0,14	-0,14	1,69
Atrazin	-0,02	-0,04	-0,18	0,09	-0,17	-0,20	-0,04	10,21
Simazin	-0,22	-0,01	-0,17	0,05	-0,06	-0,09	8,64	0,95
LHKW	-0,13	-0,06	-0,11	0,41	-0,03	0,07	-0,17	1,21
Diuron	-0,21	0,09	0,05	-0,22	-0,20	-0,01	0,11	0,06
Desethylatrazin	0,08	0,00	-0,18	0,04	-0,22	-0,28	-0,22	7,76
Isoproturon	-0,34	0,28	-0,07	-0,64	-0,18	-0,62	0,18	0,11
Bromacil	-0,19	-0,08	-0,12	0,59	-0,10	-0,05	-0,03	0,72
Hexazinon	-0,14	-0,02	-0,16	0,29	-0,10	-0,15	-0,03	3,18
Bentazon	-0,05	-0,03	0,07	-0,05	0,01	-0,16	-0,04	0,51

Grundgesamtheit 1290 Mst.

Anhang III: Tabellen C 2 -2

F- und T-Werte der gebildeten Cluster bei Ward-Clusterung nach Eliminierung

4er Lösung

F-Werte	Cluster 1	Cluster 2	Cluster 3	Cluster 4
LF	0,64	0,40	1,29	0,13
pH	0,38	1,43	0,32	0,62
Na	1,77	0,34	0,24	0,37
K	1,95	0,27	1,40	0,26
Ca	0,59	0,41	3,96	0,20
Mg	0,85	0,28	1,48	0,66
Pb	1,92	0,38	0,01	0,01
As	0,58	1,30	0,12	0,57
Cd	2,64	0,16	0,00	0,00
NO3	1,57	0,40	0,23	0,89
SO4	0,60	0,06	3,94	0,05
Cl	1,67	0,21	0,29	0,30
Trichlorethen	0,57	1,32	0,00	0,00
Tetrachlorethen	1,62	0,30	0,81	26,83
Atrazin	0,32	0,23	0,07	16,10
Simazin	0,59	1,26	0,77	2,05
LHKW	1,19	0,73	0,46	15,61
Diuron	0,48	1,38	0,12	0,33
Desethylatrazin	0,47	0,59	0,11	16,63
Isoproturon	1,13	0,82	0,40	0,65
Bromacil	2,34	0,09	0,18	1,84
Hexazinon	1,21	0,48	0,49	31,99
Bentazon	0,18	1,63	0,08	0,44

Grundgesamtheit 1290 Mst.

t-Werte	Cluster 1	Cluster 2	Cluster 3	Cluster 4
LF	0,62	-0,50	4,07	-0,21
pH	0,09	-0,05	-0,29	0,12
Na	0,37	-0,25	0,10	-0,07
K	0,25	-0,18	0,83	-0,16
Ca	0,39	-0,37	5,40	-0,28
Mg	0,67	-0,52	3,42	0,06
Pb	0,16	-0,10	-0,30	-0,29
As	0,04	-0,03	-0,12	0,03
Cd	0,10	-0,05	-0,45	-0,07
NO3	0,44	-0,29	-0,64	0,47
SO4	0,28	-0,33	7,13	-0,29
Cl	0,56	-0,38	-0,05	-0,20
Trichlorethen	0,02	-0,01	-0,07	-0,07
Tetrachlorethen	0,08	-0,08	0,14	1,69
Atrazin	-0,07	-0,06	-0,20	10,21
Simazin	-0,10	0,06	-0,09	0,95
LHKW	0,06	-0,06	0,07	1,21
Diuron	-0,08	0,05	-0,01	0,06
Desethylatrazin	-0,07	-0,03	-0,28	7,76
Isoproturon	-0,30	0,21	-0,62	0,11
Bromacil	0,11	-0,08	-0,05	0,72
Hexazinon	0,00	-0,03	-0,15	3,18
Bentazon	0,02	-0,02	-0,16	0,51

Grundgesamtheit 1290 Mst.

Anhang III: Tabelle C 2 - 3

F- und T-Werte der gebildeten Cluster nach K-means

8er Lösung

F-Werte	Cluster 1	Cluster 2	Cluster 3	Cluster 4	Cluster 5	Cluster 6	Cluster 7	Cluster 8
LF	0,11	0,51	0,34	0,30	0,20	0,22	1,71	2,11
pH	0,53	0,26	1,62	1,49	2,41	0,43	8,62	0,36
Na	0,34	2,32	0,32	1,28	0,13	0,34	14,08	3,47
K	0,21	3,45	1,18	0,09	0,63	0,26	0,62	1,36
Ca	0,24	0,47	0,54	0,40	0,13	0,22	0,81	3,49
Mg	0,70	0,95	0,41	0,57	0,05	0,54	0,79	2,58
Pb	0,01	0,90	3,12	0,15	7,93	2,17	0,01	0,15
As	0,49	1,11	0,10	0,90	0,73	1,57	0,35	4,67
Cd	0,00	4,89	0,01	0,00	0,06	0,16	0,00	0,00
NO3	1,01	2,04	1,32	0,11	0,48	0,52	0,30	1,13
SO4	0,04	0,69	0,11	0,07	0,01	0,07	0,20	3,54
Cl	0,25	2,12	0,31	0,11	0,12	0,21	0,16	13,10
Trichlorethen	0,00	1,34	0,00	0,00	0,01	1,13	180,08	201,74
Tetrachlorethen	21,47	2,66	0,00	0,00	1,40	0,18	8351,83	1,02
Atrazin	19,27	0,41	0,13	0,01	0,18	0,20	0,62	0,06
Simazin	1,68	0,67	7,46	0,15	0,48	0,52	0,37	0,68
LHKW	12,47	27,00	0,00	0,00	0,57	0,84	349393,71	47,01
Diuron	0,26	0,77	0,66	13,03	0,75	0,24	0,19	0,08
Desethylatrazin	14,21	0,53	0,04	0,04	0,18	0,52	0,36	0,08
Isoproturon	0,52	1,48	0,23	1,22	0,83	0,63	0,60	0,77
Bromacil	1,51	3,19	0,04	0,06	0,12	0,31	0,16	0,26
Hexazinon	26,25	1,86	0,27	1,98	0,25	0,74	0,42	0,89
Bentazon	0,29	0,21	0,02	0,06	0,01	1,23	1,23	0,05

Grundgesamtheit 1280 Mst.

t-Werte	Cluster 1	Cluster 2	Cluster 3	Cluster 4	Cluster 5	Cluster 6	Cluster 7	Cluster 8
LF	-0,17	1,07	-0,20	-0,74	-1,82	-0,27	0,62	4,53
pH	0,02	-0,06	0,44	1,10	-2,99	0,28	2,10	-0,38
Na	-0,17	0,80	-0,03	-0,23	-0,44	-0,26	8,17	0,66
K	-0,19	0,62	0,39	-0,42	-0,16	-0,21	0,49	0,89
Ca	-0,15	0,75	-0,20	-0,80	-1,69	-0,21	-1,10	5,41
Mg	-0,11	0,83	-0,10	-0,11	-1,12	-0,22	-0,56	3,49
Pb	-0,29	0,08	1,05	-0,41	0,24	0,01	-0,38	-0,21
As	-0,07	0,24	-0,18	-0,30	-0,08	-0,05	0,38	0,82
Cd	-0,07	0,26	-0,13	-0,33	-0,03	-0,08	-0,34	-0,45
NO3	0,46	0,59	0,19	-0,81	-0,54	-0,17	-0,77	-0,34
SO4	-0,31	0,57	-0,21	-0,40	-0,49	-0,28	-0,01	7,00
Cl	-0,25	1,00	-0,31	-0,79	-0,73	-0,29	-0,52	0,82
Trichlorethen	-0,08	0,09	-0,08	-0,09	-0,08	-0,01	8,14	2,69
Tetrachlorethen	1,32	0,20	-0,12	-0,14	0,02	-0,08	50,10	0,22
Atrazin	8,99	-0,06	-0,04	-0,35	-0,16	-0,06	0,22	-0,17
Simazin	0,85	-0,10	8,64	-0,63	-0,06	-0,03	0,51	0,11
LHKW	0,94	0,41	-0,16	-0,13	-0,02	-0,05	321,94	1,44
Diuron	0,07	-0,16	0,11	13,55	-0,23	0,04	0,31	0,03
Desethylatrazin	7,29	-0,10	-0,22	-0,39	-0,23	-0,02	-0,02	-0,26
Isoproturon	0,16	-0,58	0,18	-0,30	-0,07	0,26	0,04	-0,70
Bromacil	0,59	0,18	-0,03	-0,25	-0,15	-0,05	0,20	0,01
Hexazinon	2,63	0,09	-0,03	-0,35	-0,17	-0,02	0,43	0,05
Bentazon	0,36	0,02	-0,04	-0,15	0,01	-0,02	-0,62	-0,09

Grundgesamtheit 1280 Mst.

k.B. = keine Berechnung möglich

Anhang III: Tabelle C 2 - 3

F- und T-Werte der gebildeten Cluster nach K-means

4er Lösung

F-Werte	Cluster 1	Cluster 2	Cluster 3	Cluster 4
LF	0,55	0,19	0,60	2,39
pH	0,54	2,65	0,71	0,28
Na	1,30	0,09	0,41	2,50
K	1,11	0,16	3,86	1,72
Ca	0,42	0,14	0,39	4,55
Mg	0,77	0,06	0,91	2,36
Pb	1,66	7,55	6,01	0,13
As	1,46	0,76	0,30	3,21
Cd	0,94	0,06	0,01	0,00
NO3	0,96	0,43	1,72	1,19
SO4	0,25	0,01	0,17	6,60
Cl	0,92	0,07	0,86	9,75
Trichlorethen	2,12	0,01	0,03	118,40
Tetrachlorethen	42,64	1,30	12,51	6,01
Atrazin	0,11	0,08	15,64	0,09
Simazin	0,89	1,14	1,45	0,73
LHKW	1766,06	0,78	7,42	30,48
Diuron	0,99	0,68	0,42	0,05
Desethylatrazin	0,24	0,13	9,14	0,10
Isoproturon	1,00	0,84	0,45	0,69
Bromacil	0,74	0,11	10,73	0,17
Hexazinon	0,88	0,24	15,04	0,60
Bentazon	1,00	0,01	0,06	0,07

Grundgesamtheit 1280 Mst.

t-Werte	Cluster 1	Cluster 2	Cluster 3	Cluster 4
LF	0,01	-1,81	0,10	3,70
pH	0,26	-2,80	0,13	-0,39
Na	0,02	-0,46	-0,09	0,82
K	-0,02	-0,23	0,34	0,76
Ca	-0,03	-1,67	0,03	4,04
Mg	0,03	-1,10	-0,13	2,89
Pb	0,00	0,25	0,22	-0,21
As	0,00	-0,07	-0,11	0,72
Cd	-0,08	-0,04	-0,13	-0,45
NO3	-0,03	-0,56	0,95	-0,27
SO4	-0,11	-0,49	-0,18	5,18
Cl	-0,02	-0,75	0,18	1,13
Trichlorethen	0,05	-0,07	-0,03	1,65
Tetrachlorethen	0,18	0,01	0,87	0,54
Atrazin	-0,12	-0,18	4,15	-0,10
Simazin	-0,05	0,01	0,50	0,19
LHKW	1,47	-0,03	0,64	1,18
Diuron	0,03	-0,20	0,24	0,07
Desethylatrazin	-0,12	-0,25	4,45	-0,20
Isoproturon	0,03	-0,03	0,31	-0,58
Bromacil	-0,03	-0,15	1,23	0,01
Hexazinon	-0,03	-0,17	1,60	0,06
Bentazon	-0,02	0,01	0,11	-0,19

Grundgesamtheit 1280 Mst.

k.B. = keine Berechnung möglich

Anhang III: Tabellen D 1 - 1

Statistische Basisparameter für alle Messtellen des jeweiligen Clusters einer 5-Clusterlösung
Ward-Clustering nach Eliminierung der mittels Single-Linkage-Clustering ermittelten Ausreisser (gemittelte Werte über den Gesamtzeitraum für jede Messtelle)
 Alle Werte als reale Variablenwerte in [mg/l], lediglich LF in [µS/m] und Atrazin, Simazin, Diuron, Desethylatrazin, Isoproturon, Bromacil, Hexazinon und Bentazon in [µg/l]

Cluster 1	Minimum	Maximum	Spannweite	Median	Mittelwert	Stabw.	Perzentile	1	5	25	75	95	99	N Gültig	Fehlend	Schiefe	Stofffehler Schiefe	Kurtosis	Stofffehler Kurtosis
LF	0,092	6,063	1,672	75,772	79,746	32,738	0,183	35,780	63,369	90,223	90,223	136,404	215,027	710	0	1,672	0,092	6,063	0,183
pH	0,092	7,924	-1,153	7,169	7,152	0,285	0,183	6,662	7,064	7,298	7,298	7,502	8,000	710	0	-1,153	0,092	7,924	0,183
Na	0,093	37,303	4,852	11,200	16,825	20,488	0,185	2,990	6,200	37,303	37,303	50,280	110,300	697	13	4,852	0,093	37,303	0,185
K	0,094	233,943	12,792	2,128	3,811	8,155	0,187	0,400	1,195	3,806	3,806	11,940	30,956	682	28	12,792	0,094	233,943	0,187
Ca	0,092	17,636	2,867	119,025	124,457	60,055	0,184	44,452	100,973	140,000	140,000	212,100	373,283	705	5	2,867	0,092	17,636	0,184
Mg	0,093	2,935	1,348	18,414	21,156	15,473	0,185	3,100	9,465	29,133	29,133	50,000	71,020	697	13	1,348	0,093	2,935	0,185
Pb	0,094	148,654	11,399	0,001	0,003	0,003	0,187	0,001	0,001	0,001	0,001	0,000	0,000	31	0	11,399	0,094	148,654	0,187
As	0,094	78,891	7,515	0,001	0,002	0,004	0,187	0,000	0,000	0,001	0,002	0,006	0,020	30	0	7,515	0,094	78,891	0,187
Cd	0,214	108,515	10,043	0,000	0,000	0,000	0,187	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	582	0	10,043	0,214	108,515	0,187
NO3	0,092	4,613	1,613	25,490	30,597	24,719	0,183	0,775	13,180	41,740	41,740	81,270	106,691	710	0	1,613	0,092	4,613	0,183
SO4	0,093	33,677	5,210	42,500	84,710	145,794	0,185	9,990	25,000	81,425	81,425	287,800	660,120	697	13	5,210	0,093	33,677	0,185
Cl	0,093	19,372	3,497	29,900	36,938	33,554	0,186	7,120	18,000	43,100	43,100	96,000	163,120	691	19	3,497	0,093	19,372	0,186
Trichloethen	0,092	274,309	15,925	0,000	0,006	0,047	0,183	0,000	0,000	0,000	0,000	0,009	0,166	710	0	15,925	0,092	274,309	0,183
Tetrachloethen	0,092	306,950	15,925	0,000	0,015	0,119	0,183	0,000	0,000	0,000	0,001	0,039	0,351	710	0	15,925	0,092	306,950	0,183
Atrazin	0,092	31,207	4,887	0,048	0,057	0,073	0,183	0,030	0,030	0,037	0,050	0,133	0,285	710	0	4,887	0,092	31,207	0,183
Simazin	0,092	62,697	6,432	0,048	0,043	0,023	0,183	0,020	0,030	0,030	0,050	0,150	0,351	710	0	6,432	0,092	62,697	0,183
LHKW	0,092	367,104	18,951	0,005	0,063	0,803	0,183	0,001	0,003	0,007	0,008	0,070	0,285	710	0	18,951	0,092	367,104	0,183
Diuron	0,092	139,262	10,997	0,050	0,053	0,024	0,183	0,050	0,050	0,050	0,050	0,148	0,166	710	0	10,997	0,092	139,262	0,183
Desethylatrazin	0,092	16,633	3,666	0,050	0,072	0,073	0,183	0,030	0,030	0,040	0,060	0,222	0,417	710	0	3,666	0,092	16,633	0,183
Isoproturon	0,092	7,842	-0,924	0,050	0,049	0,006	0,183	0,030	0,030	0,050	0,050	0,050	0,064	710	0	-0,924	0,092	7,842	0,183
Bromacil	0,092	47,649	6,106	0,050	0,058	0,034	0,183	0,037	0,037	0,050	0,063	0,083	0,250	710	0	6,106	0,092	47,649	0,183
Hexazinon	0,092	62,057	5,525	0,050	0,057	0,030	0,183	0,020	0,050	0,050	0,063	0,097	0,173	710	0	5,525	0,092	62,057	0,183
Bentazon	0,175	38,463	4,847	0,050	0,048	0,017	0,347	0,020	0,050	0,050	0,050	0,050	0,174	194	516	4,847	0,175	38,463	0,347

Cluster 2	Minimum	Maximum	Spannweite	Median	Mittelwert	Stabw.	Perzentile	1	5	25	75	95	99	N Gültig	Fehlend	Schiefe	Stofffehler Schiefe	Kurtosis	Stofffehler Kurtosis
LF	32,760	228,600	195,820	104,686	113,422	45,976	0,347	32,760	32,760	66,835	132,330	228,600	228,600	18	0	0,925	0,536	1,427	1,038
pH	6,828	7,214	0,386	7,111	7,083	0,115	0,347	6,828	6,828	6,966	7,190	7,214	7,214	18	0	-0,615	0,536	-0,566	1,038
Na	9,000	98,200	89,200	24,000	37,656	31,229	0,347	9,000	9,000	14,000	62,000	98,200	98,200	17	0	1,118	0,550	-0,352	1,063
K	0,990	15,000	14,010	3,300	4,802	3,881	0,347	0,990	0,990	2,200	7,000	15,000	15,000	17	0	1,549	0,550	2,075	1,063
Ca	44,000	234,000	190,000	150,000	154,228	40,220	0,347	44,000	44,000	130,750	181,750	234,000	234,000	18	0	-0,661	0,536	2,857	1,038
Mg	13,000	77,800	64,800	29,167	32,056	17,410	0,347	13,000	13,000	18,000	39,250	77,800	77,800	18	0	1,266	0,536	1,498	1,038
Pb	0,001	0,004	0,004	0,001	0,001	0,001	0,347	0,001	0,001	0,001	0,001	0,004	0,004	16	0	2,803	0,584	7,682	1,091
As	0,001	0,019	0,019	0,002	0,004	0,005	0,347	0,001	0,001	0,001	0,007	0,019	0,019	2	0	2,094	0,564	4,818	1,091
Cd	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,347	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	17	0	0,097	0,536	-1,219	1,038
NO3	8,000	373,000	365,000	123,650	149,685	101,858	0,347	8,000	8,000	8,135	40,195	373,000	373,000	17	0	0,526	0,550	-0,234	1,063
SO4	21,000	176,000	155,000	71,000	78,259	47,072	0,347	21,000	21,000	41,000	112,500	176,000	176,000	18	0	0,822	0,560	-0,265	1,063
Cl	0,000	0,503	0,503	0,001	0,032	0,118	0,347	0,000	0,000	0,000	0,008	0,503	0,503	18	0	4,210	0,536	17,802	1,038
Trichloethen	0,000	0,813	0,813	0,005	0,088	0,222	0,347	0,000	0,000	0,000	0,033	0,813	0,813	18	0	2,853	0,536	7,551	1,038
Tetrachloethen	0,010	0,273	0,263	0,063	0,079	0,075	0,347	0,010	0,010	0,028	0,090	0,273	0,273	18	0	1,705	0,536	2,553	1,038
Atrazin	0,010	0,057	0,047	0,018	0,018	0,018	0,347	0,010	0,010	0,025	0,050	0,067	0,067	18	0	-0,850	0,536	-0,695	1,038
Simazin	0,010	0,057	0,047	0,018	0,018	0,018	0,347	0,010	0,010	0,025	0,050	0,067	0,067	18	0	-0,850	0,536	-0,695	1,038
LHKW	0,002	6,571	6,569	0,011	0,429	1,545	0,347	0,002	0,002	0,004	0,038	6,571	6,571	18	0	4,140	0,536	17,338	1,038
Diuron	0,010	0,120	0,110	0,050	0,063	0,030	0,347	0,010	0,010	0,010	0,038	0,120	0,120	18	0	0,927	0,536	0,368	1,038
Desethylatrazin	0,010	0,657	0,647	0,067	0,122	0,157	0,347	0,010	0,010	0,043	0,141	0,657	0,657	18	0	2,673	0,536	8,039	1,038
Isoproturon	0,050	0,050	0,040	0,050	0,044	0,013	0,347	0,050	0,050	0,046	0,050	0,050	0,050	18	0	-2,171	0,536	3,682	1,038
Bromacil	0,197	1,197	0,632	0,632	0,632	0,359	0,347	0,197	0,197	0,450	0,814	1,247	1,247	18	0	0,026	0,536	-0,251	1,038
Hexazinon	0,010	1,743	1,733	0,186	0,380	0,427	0,347	0,010	0,010	0,093	0,547	1,743	1,743	18	0	2,157	0,536	5,489	1,038
Bentazon	0,010	1,743	1,733	0,186	0,380	0,427	0,347	0,010	0,010	0,093	0,547	1,743	1,743	0	18	2,157	0,536	5,489	1,038

Anhang III: Tabellen D 1 - 1

Statistische Basisparameter für alle Messtellen des jeweiligen Clusters einer 5-Clusterlösung
Ward-Clustering nach Eliminierung der mittels Single-Linkage-Clustering ermittelten Ausreißer (gemittelte Werte über den Gesamtzeitraum für jede Messtelle)
 Alle Werte als rechte Variablenwerte in [µg/l], lediglich LF in [µgS/m] und Atrazin; Diuron; Desethylatrazin; Isoproturon, Bromacil, Hexazinon und Bentazon in [µg/l]

Cluster 3	Minimum	Maximum	Spannweite	Median	Mittelwert	Stabw.	Perzentile	1	5	25	75	95	99	N Gültig	Fehlend	Schiefe	Stabweichung	Kurtosis	Stabweichung
LF	7,296	281,400	254,104	75,051	76,542	30,821	10,176	24,279	61,525	89,869	121,448	195,121	438	0	1,297	6,444	0,233		
pH	5,284	8,134	2,850	7,176	7,174	0,289	6,150	6,801	7,082	7,301	7,507	7,815	438	0	-2,035	0,117	12,693	0,233	
Na	1,500	176,000	174,500	9,200	14,966	18,386	2,200	3,200	5,700	16,000	41,150	102,360	431	7	4,185	24,203	0,235		
K	0,300	72,000	71,700	1,900	3,175	5,105	0,400	0,600	1,100	3,600	6,600	22,960	411	27	8,392	96,555	0,240		
Ca	9,000	616,500	607,500	119,000	120,756	55,989	10,738	28,450	98,330	141,000	193,306	369,222	433	5	2,788	20,506	0,234		
Mg	1,300	90,667	89,367	19,050	20,551	13,331	1,560	3,825	11,100	26,200	45,425	66,800	429	9	1,528	4,038	0,235		
Pb	0,000	0,016	0,015	0,001	0,001	0,002	0,002	0,000	0,001	0,001	0,001	0,003	422	16	6,061	41,940	0,237		
As	0,000	0,000	0,000	0,001	0,002	0,007	0,000	0,000	0,000	0,001	0,002	0,000	422	16	16,280	302,854	0,237		
Cd	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	391	47	1,066	0,347	1,066	0,661	
NO3	0,263	166,647	166,385	23,385	27,629	23,736	4,470	0,685	10,918	36,655	73,834	116,843	438	0	1,797	4,632	0,233		
NO4	3,500	1420,000	1416,500	40,000	72,945	129,317	4,432	7,080	21,000	81,700	197,160	822,120	431	7	6,849	56,099	0,235		
Cl	0,500	184,000	183,500	24,000	30,856	27,351	2,429	4,845	12,850	40,075	80,000	177,260	428	10	2,736	11,231	0,238		
Trichloethen	0,000	0,153	0,153	0,000	0,000	0,009	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,038	438	0	13,239	205,769	0,233		
Tetraethen	0,000	0,153	0,153	0,000	0,000	0,016	0,000	0,000	0,000	0,001	0,001	0,016	438	0	8,158	71,740	0,233		
Atrazin	0,010	0,192	0,182	0,020	0,023	0,024	0,010	0,010	0,010	0,012	0,023	0,067	438	0	4,133	22,730	0,233		
Simazin	0,010	0,087	0,057	0,016	0,016	0,006	0,010	0,010	0,010	0,020	0,023	0,028	438	0	2,196	16,328	0,233		
LHKW	0,000	0,323	0,323	0,005	0,008	0,022	0,000	0,000	0,003	0,003	0,007	0,028	438	0	9,428	108,162	0,233		
Diuron	0,035	0,100	0,065	0,050	0,049	0,004	0,040	0,050	0,050	0,050	0,050	0,052	438	0	4,691	75,717	0,233		
Desethylatrazin	0,010	0,130	0,120	0,023	0,033	0,024	0,010	0,010	0,010	0,020	0,034	0,090	438	0	1,925	3,116	0,233		
Isoproturon	0,035	0,216	0,181	0,045	0,053	0,012	0,044	0,047	0,050	0,050	0,050	0,075	438	0	8,027	93,900	0,233		
Bromacil	0,010	0,167	0,157	0,020	0,020	0,016	0,010	0,020	0,020	0,020	0,020	0,020	438	0	1,360	8,829	0,233		
Hexazinon	0,010	0,133	0,123	0,020	0,024	0,013	0,010	0,010	0,020	0,028	0,050	0,060	438	0	2,476	13,149	0,233		
Bentazon	0,010	1,400	1,390	0,050	0,051	0,118	0,010	0,010	0,020	0,020	0,050	0,060	438	302	11,208	128,939	0,233		

Cluster 4	Minimum	Maximum	Spannweite	Median	Mittelwert	Stabw.	Perzentile	1	5	25	75	95	99	N Gültig	Fehlend	Schiefe	Stabweichung	Kurtosis	Stabweichung
LF	8,312	619,800	611,488	83,052	87,893	55,470	12,130	20,799	59,341	103,345	160,246	319,396	290	0	3,931	30,930	0,285		
pH	5,908	8,022	2,114	7,159	7,104	0,296	5,967	6,427	7,063	7,273	7,439	7,593	290	0	-1,580	3,715	0,285		
Na	1,700	590,000	588,300	11,750	22,118	42,466	2,795	4,625	7,900	24,000	66,750	179,000	284	6	9,424	115,968	0,288		
K	0,400	66,000	65,600	2,623	4,212	6,453	0,449	0,800	1,400	4,838	13,185	39,330	280	10	5,463	39,516	0,290		
Ca	6,100	738,000	731,900	130,000	137,473	89,700	14,379	22,273	94,280	158,667	250,550	596,600	288	2	3,058	15,204	0,286		
Mg	1,200	148,000	146,800	19,075	23,304	18,764	2,301	4,050	11,213	31,000	57,740	107,080	288	2	2,664	11,703	0,286		
Pb	0,001	0,009	0,008	0,001	0,001	0,001	0,001	0,001	0,001	0,001	0,001	0,003	289	1	3,932	19,290	0,286		
As	0,000	0,043	0,043	0,001	0,002	0,004	0,000	0,000	0,001	0,001	0,002	0,005	289	1	8,273	60,719	0,286		
Cd	0,000	0,008	0,008	0,000	0,000	0,001	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,008	188	102	9,633	95,406	0,474		
NO3	0,500	178,706	178,206	23,402	31,501	30,648	0,500	0,703	9,715	41,719	88,621	164,036	290	0	1,819	4,318	0,285		
NO4	4,400	1490,000	1485,600	53,700	119,222	200,650	6,356	9,178	29,900	130,600	387,800	1320,960	287	3	4,337	21,807	0,287		
Cl	1,500	1620,000	1618,500	31,000	49,418	104,534	2,058	5,990	16,615	54,700	126,800	314,000	285	5	12,328	181,066	0,288		
Trichloethen	0,000	3,087	3,087	0,000	0,000	0,232	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,251	290	0	12,163	148,451	0,288		
Tetraethen	0,000	3,087	3,087	0,000	0,004	0,034	0,000	0,000	0,000	0,000	0,008	0,076	290	0	14,237	219,133	0,285		
Atrazin	0,010	0,153	0,153	0,013	0,019	0,016	0,010	0,010	0,010	0,020	0,020	0,047	290	0	4,438	27,702	0,285		
Simazin	0,010	0,050	0,040	0,010	0,015	0,006	0,010	0,010	0,010	0,019	0,019	0,048	290	0	2,295	6,256	0,285		
LHKW	0,000	7,743	7,743	0,005	0,043	0,478	0,000	0,000	0,002	0,008	0,015	0,035	290	0	15,024	236,754	0,285		
Diuron	0,010	0,068	0,058	0,030	0,031	0,014	0,010	0,010	0,020	0,043	0,075	0,051	290	0	0,075	-1,141	0,285		
Desethylatrazin	0,010	0,185	0,175	0,017	0,025	0,026	0,010	0,010	0,010	0,027	0,068	0,160	290	0	3,672	15,762	0,285		
Isoproturon	0,010	0,045	0,035	0,030	0,030	0,011	0,010	0,010	0,023	0,043	0,037	0,043	290	0	-0,582	-0,785	0,285		
Bromacil	0,010	0,157	0,147	0,020	0,028	0,009	0,010	0,010	0,010	0,050	0,050	0,068	290	0	1,344	4,728	0,285		
Hexazinon	0,010	0,237	0,227	0,011	0,020	0,019	0,010	0,010	0,010	0,027	0,050	0,069	290	0	6,252	62,226	0,285		
Bentazon	0,010	0,283	0,273	0,020	0,031	0,040	0,010	0,010	0,010	0,050	0,050	0,283	73	217	4,516	24,979	0,565		

Anhang III: Tabellen D 1 - 1

Statistische Basisparameter für alle Messtellen des jeweiligen Clusters einer 5-Clusterlösung
Ward-Clustering nach Eliminierung der mittels Single-Linkage-Clustering ermittelten Ausreißer (gemittelte Werte über den Gesamtzeitraum für jede Messtelle)
 Alle Werte als reale Variablenwerte in [µg/l], lediglich LF in [µS/m] und Atrazin, Diuron, Desethylatrazin, Isoproturon, Bromacil, Hexazinon und Bentazon in [µg/l]

Cluster 5	Minimum	Maximum	Spannweite	Median	Mittelwert	Stabw.	Perzentile	1	5	25	75	95	99	N Gültig	Fehlend	Schief	Stoffhier Schiefe	Kurtosis	Stoffeiler Kurtosis
LF	61.380	90.113	28.733	67.887	72.554	11,726	61,380	61,380	61,380	63,156	86,183	90,113	90,113	8	0	0,788	0,752	-1,179	1,481
pH	6.866	7.492	0.625	7.125	7.183	0.223	6.866	6.866	6.866	7.024	7.406	7.492	7.492	8	0	0.183	0.752	-1.416	1.481
Na	2.500	36.000	33.500	11.650	15.250	11,315	2,500	2,500	2,500	6,875	24,925	36,000	36,000	8	0	0,977	0,752	0,129	1,481
K	0.300	6.750	6.450	2.200	2.656	2.389	0.300	0.300	0.300	0.525	4.625	6.750	6.750	8	0	0.652	0.752	-0.870	1.481
Ca	66.333	145.200	78.867	109.600	108.019	26,551	66,333	66,333	66,333	82,750	128,063	145,200	145,200	8	0	-0,394	0,752	-0,588	1,481
Mg	7.900	42.333	34.433	19.975	21.765	11,749	7,900	7,900	7,900	11,725	31,875	42,333	42,333	8	0	0,767	0,752	-0,162	1,481
Pb	0.001	0.001	0.000	0.001	0.001	0.000	0.001	0.001	0.001	0.001	0.001	0.001	0.001	8	0	2,828	0,752	8,000	1,481
As	0.001	0.005	0.005	0.001	0.002	0.002	0.001	0.001	0.001	0.001	0.004	0.005	0.005	8	0	1,408	0,752	-0,002	1,481
Cd	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	1	7	0.000	0.000	0.000	1.481
NO3	15.325	80.500	65.175	33.733	42.013	24,176	15,325	15,325	15,325	22,095	65,000	80,500	80,500	8	0	0,586	0,752	-1,379	1,481
SO4	16.000	105.000	89.000	32.850	44.206	30,156	16,000	16,000	16,000	24,950	65,788	105,000	105,000	8	0	1,502	0,752	1,509	1,481
Cl	13.850	69.200	55.350	23.500	29.456	18,751	13,850	13,850	13,850	14,425	38,425	69,200	69,200	8	0	1,548	0,752	2,476	1,481
Trichloethen	0.000	0.004	0.004	0.000	0.001	0.001	0.000	0.000	0.000	0.000	0.001	0.004	0.004	8	0	2,479	0,752	6,404	1,481
Tetraetherehen	0.000	0.788	0.788	0.000	0.099	0.279	0.000	0.000	0.000	0.000	0.001	0.788	0.788	8	0	2,828	0,752	8,000	1,481
Atrazin	0.400	1.335	0.935	0.880	0.893	0.333	0.400	0.400	0.400	0.600	1.226	1.335	1.335	8	0	-0,076	0,752	-1,271	1,481
Simazin	0.010	0.100	0.090	0.050	0.051	0.032	0.010	0.010	0.010	0.017	0.078	0.100	0.100	8	0	0,077	0,752	-0,912	1,481
LHKW	0.001	0.792	0.792	0.003	0.102	0.279	0.001	0.001	0.001	0.002	0.005	0.792	0.792	8	0	2,828	0,752	8,000	1,481
Diuron	0.023	0.067	0.043	0.050	0.049	0.012	0.023	0.023	0.023	0.050	0.050	0.067	0.067	8	0	-1,232	0,752	4,270	1,481
Desethylatrazin	0.237	1.249	1.012	0.623	0.697	0.337	0.237	0.237	0.237	0.431	0.964	1.249	1.249	8	0	0,362	0,752	-0,754	1,481
Isoproturon	0.023	0.053	0.029	0.050	0.047	0.010	0.023	0.023	0.023	0.050	0.050	0.053	0.053	8	0	-2,779	0,752	7,807	1,481
Bromacil	0.010	0.280	0.270	0.050	0.106	0.103	0.010	0.010	0.010	0.027	0.205	0.280	0.280	8	0	0,854	0,752	-1,009	1,481
Hexazinon	0.010	0.638	0.628	0.056	0.171	0.231	0.010	0.010	0.010	0.010	0.343	0.638	0.638	8	0	1,468	0,752	1,366	1,481
Bentazon	0.050	0.120	0.070	0.085	0.085	0.049	0.050	0.050	0.050	0.050	0.120	0.120	0.120	2	6	0.000	0.000	0.000	1.481

Anhang III: Tabellen D 1 - 1

Statistische Basisparameter für alle Messstellen des jeweiligen Clusters einer 7-Clusterlösung
Ward-Clustering nach Eliminierung der mittels Single-Linkage-Clustering ermittelten Ausreißer (gemittelte Werte über den Gesamtzeitraum für jede Messstelle)
Alle Werte als reale Variablenwerte in [mg/l], lediglich LF in [mg/Sim] und Atrazin, Simazin, Diuron, Desethylatrazin, Isoproturon, Bromacil, Hexazinon und Bentazon in [µg/l]

Table with columns: Cluster 1, Minimum, Maximum, Spannweite, Median, Mittelwert, Stdbw., Perzentile 1, 5, 25, 50, 75, 95, 99, N gültig, Fehlend, Schiefe, Stetfelter Schiefe, Kurtosis, Stofffehler Kurtosis.

Table with columns: Cluster 2, Minimum, Maximum, Spannweite, Median, Mittelwert, Stdbw., Perzentile 1, 5, 25, 50, 75, 95, 99, N gültig, Fehlend, Schiefe, Stetfelter Schiefe, Kurtosis, Stofffehler Kurtosis.

Anhang III: Tabellen D 1 - 1

Statistische Basisparameter für alle Messtellen des jeweiligen Clusters einer 7-Clusterlösung
Ward-Clustering nach Eliminierung der mittels Single-Linkage-Clustering ermittelten Ausreißer (gemittelte Werte über den Gesamtzeitraum für jede Messtelle)
 Alle Werte als reale Variablenwerte in [mg/l], lediglich LF in [mS/m] und Atrazin, Simazin, Diuron, Desethylatrazin, Isoproturon, Bromacil, Hexazinon und Bentazon in [µg/l]

Cluster3	Minimum	Maximum	Spannweite	Median	Mittelwert	Stabw.	Perzentile 1	5	25	75	95	99	N Gültig	Fehlend	Schiefe	Stoßfehler Schiefe	Kurtosis	Stoßfehler Kurtosis
LF	32,760	228,600	195,820	104,666	113,422	45,976	32,780	32,780	86,835	132,330	228,600	228,600	18	0	0,925	0,536	1,427	1,038
pH	6,828	7,214	0,386	7,111	7,083	0,115	6,828	6,828	6,986	7,190	7,214	7,214	18	0	-2,015	0,536	-0,566	1,038
Na	9,000	96,200	89,200	24,000	37,656	31,229	9,000	9,000	14,000	62,000	96,200	96,200	17	1	1,118	0,550	0,550	1,063
K	0,900	14,010	13,110	3,300	4,822	3,881	0,900	0,900	2,200	7,000	15,000	15,000	17	1	1,549	0,550	2,075	1,063
Ca	44,000	234,000	190,000	150,000	154,228	40,220	44,000	44,000	130,750	181,750	234,000	234,000	18	0	-0,661	0,536	2,687	1,038
Mg	13,000	77,800	64,800	29,167	32,056	17,410	13,000	13,000	18,000	39,250	77,800	77,800	16	1	2,266	0,536	1,498	1,038
Pb	0,001	0,004	0,004	0,001	0,001	0,001	0,001	0,001	0,001	0,001	0,004	0,004	16	2	2,803	0,564	7,662	1,091
As	0,001	0,019	0,019	0,002	0,004	0,005	0,001	0,001	0,001	0,007	0,019	0,019	16	2	2,094	0,564	4,818	1,091
Cd	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	17	0	0,097	0,536	-1,219	1,038
NO3	0,500	57,160	56,660	24,920	24,479	17,939	0,500	0,500	8,135	40,195	57,160	57,160	17	1	0,526	0,550	-0,234	1,063
SO4	8,000	373,000	365,000	123,650	149,665	107,865	8,000	8,000	72,500	221,500	373,000	373,000	17	1	0,822	0,550	0,780	1,063
Cl	21,000	176,000	155,000	71,000	78,259	47,072	21,000	21,000	41,000	112,500	176,000	176,000	17	1	0,210	0,536	-0,285	1,063
Trichloethen	0,000	0,503	0,503	0,001	0,032	0,116	0,000	0,000	0,000	0,008	0,503	0,503	18	0	4,210	0,536	17,802	1,038
Tetrahydroethen	0,000	0,813	0,813	0,065	0,088	0,222	0,000	0,000	0,000	0,033	0,813	0,813	18	0	2,853	0,536	7,551	1,038
Atrazin	0,010	0,273	0,263	0,063	0,079	0,075	0,010	0,010	0,028	0,090	0,273	0,273	18	0	1,705	0,536	2,553	1,038
Simazin	0,010	0,667	0,657	0,060	0,040	0,168	0,010	0,010	0,025	0,050	0,667	0,667	18	0	-0,650	0,536	-0,695	1,038
LinKW	0,020	6,571	6,559	0,011	0,429	1,545	0,020	0,020	0,024	0,038	6,571	6,571	18	0	4,140	0,536	17,338	1,038
Diuron	0,010	0,120	0,110	0,060	0,063	0,030	0,010	0,010	0,050	0,093	0,120	0,120	18	0	0,927	0,536	0,968	1,038
Desethylatrazin	0,010	0,657	0,647	0,067	0,122	0,197	0,010	0,010	0,043	0,141	0,657	0,657	18	0	2,673	0,536	8,038	1,038
Isoproturon	0,010	0,990	0,940	0,044	0,094	0,313	0,010	0,010	0,046	0,090	0,990	0,990	18	0	-2,171	0,536	3,682	1,038
Bromacil	0,050	1,247	1,197	0,053	0,632	0,359	0,050	0,050	0,450	0,814	1,247	1,247	18	0	0,026	0,536	-0,281	1,038
Hexazinon	0,010	1,743	1,733	0,186	0,380	0,427	0,010	0,010	0,093	0,547	1,743	1,743	18	0	2,157	0,536	5,469	1,038

Cluster4	Minimum	Maximum	Spannweite	Median	Mittelwert	Stabw.	Perzentile 1	5	25	75	95	99	N Gültig	Fehlend	Schiefe	Stoßfehler Schiefe	Kurtosis	Stoßfehler Kurtosis
LF	7,286	261,400	254,104	75,051	76,542	30,821	10,176	24,279	61,525	89,869	121,448	195,121	438	0	1,297	0,117	6,444	0,233
pH	5,284	8,134	2,850	7,176	7,174	0,269	6,150	6,801	7,082	7,301	7,507	7,507	438	0	-2,035	0,117	12,693	0,233
Na	1,500	176,000	174,500	9,200	14,966	18,386	2,200	3,200	5,700	16,000	41,150	102,360	431	7	4,185	0,117	24,203	0,235
K	0,300	72,000	71,700	1,900	3,175	5,105	0,400	0,500	1,120	3,600	9,400	22,960	411	27	8,392	0,120	96,555	0,240
Ca	9,000	616,500	607,500	119,000	120,756	55,989	10,738	28,450	98,330	141,000	193,306	369,222	433	5	2,788	0,117	20,506	0,234
Mg	1,300	90,667	89,367	19,050	20,551	13,331	1,560	3,825	11,100	26,200	45,425	66,800	429	9	1,526	0,118	4,038	0,235
Pb	0,000	0,016	0,015	0,001	0,001	0,001	0,001	0,001	0,001	0,001	0,003	0,003	422	16	6,061	0,119	41,940	0,237
As	0,000	0,142	0,142	0,001	0,002	0,007	0,000	0,000	0,001	0,002	0,007	0,007	422	16	16,280	0,119	302,854	0,237
Cd	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	47	391	1,066	0,347	0,362	0,681
NO3	0,263	156,647	156,385	23,385	27,629	23,736	0,470	0,685	10,918	36,655	73,834	116,843	438	0	1,797	0,117	4,632	0,233
SO4	3,500	1420,000	1416,500	40,000	72,945	129,317	4,432	7,080	21,000	81,700	197,160	822,120	431	7	6,849	0,118	58,096	0,235
Cl	0,500	194,000	193,500	24,000	30,666	27,351	2,426	4,845	12,850	40,075	68,620	177,260	438	10	2,738	0,118	11,231	0,235
Trichloethen	0,000	0,193	0,193	0,000	0,001	0,009	0,000	0,000	0,000	0,000	0,002	0,002	438	0	13,239	0,117	205,769	0,233
Tetrahydroethen	0,000	0,189	0,189	0,000	0,003	0,016	0,000	0,000	0,000	0,001	0,016	0,016	438	0	4,758	0,117	71,740	0,233
Atrazin	0,010	0,192	0,182	0,020	0,024	0,022	0,010	0,010	0,012	0,023	0,067	0,150	438	0	4,733	0,117	22,730	0,233
Simazin	0,010	0,067	0,057	0,016	0,016	0,006	0,010	0,010	0,010	0,020	0,020	0,028	438	0	2,196	0,117	16,328	0,233
LinKW	0,000	0,323	0,323	0,005	0,008	0,022	0,000	0,000	0,003	0,007	0,020	0,020	438	0	9,428	0,117	108,182	0,233
Diuron	0,035	0,100	0,065	0,050	0,049	0,004	0,040	0,040	0,050	0,050	0,050	0,052	438	0	4,691	0,117	75,717	0,233
Desethylatrazin	0,010	0,130	0,120	0,023	0,033	0,024	0,010	0,010	0,020	0,034	0,090	0,118	438	0	1,925	0,117	3,116	0,233
Isoproturon	0,035	0,216	0,181	0,050	0,053	0,012	0,044	0,044	0,050	0,050	0,067	0,100	438	0	8,027	0,117	93,900	0,233
Bromacil	0,010	0,167	0,157	0,046	0,016	0,016	0,010	0,020	0,020	0,020	0,050	0,075	438	0	1,360	0,117	8,829	0,233
Hexazinon	0,010	0,133	0,123	0,020	0,024	0,013	0,010	0,010	0,020	0,020	0,050	0,060	438	0	2,476	0,117	13,149	0,233
Bentazon	0,010	1,400	1,390	0,050	0,051	0,118	0,010	0,010	0,020	0,020	0,060	0,928	136	302	11,208	0,208	128,939	0,413

Anhang III: Tabellen D 1 - 1

Statistische Basisparameter für alle Messtellen des jeweiligen Clusters einer 7-Clusterlösung
Ward-Clustering nach Eliminierung der mittels Single-Linkage-Clustering ermittelten Ausreißer (gemittelte Werte über den Gesamtzeitraum für jede Messtelle)
 Alle Werte als reale Variablenwerte in [mg/l], lediglich LF in [mg/m] und Atrazin, Simazin, Diuron, Desethylatrazin, Isoproturon, Bromacil, Hexazinon und Bentazon in [µg/l]

Cluster	Perzentile					N Gültig	Schiefe					Stofflicher Kurkosis							
	1	5	25	75	95		99	Fehlend	95	Stofflicher Kurkosis									
	Minimum	Maximum	Spannweite	Median	Mittelwert	Stabw.	Stabw.	Perzentile	5	25	75	95	99	N Gültig	Fehlend	Schiefe	Stofflicher Kurkosis	Kurkosis	Stofflicher Kurkosis
LF	83,12	619,80	611,488	83,082	87,899	55,470	12,130	20,799	58,541	103,345	160,248	319,396	290	0	3,931	0,143	30,930	0,285	0,285
pH	5,908	8,022	2,114	7,159	7,104	0,266	5,987	6,427	7,053	7,273	7,439	7,593	290	0	-1,580	0,143	3,715	0,285	0,285
Na	1,700	590,00	588,300	11,750	22,118	42,466	2,795	4,625	7,900	24,000	66,750	179,000	284	6	9,424	0,146	115,968	0,286	0,286
K	0,400	66,000	65,600	2,263	4,212	6,453	0,449	0,800	1,400	4,838	13,165	39,330	280	10	5,463	0,146	39,516	0,286	0,286
Ca	6,100	738,000	731,900	130,000	137,473	69,700	14,379	22,273	94,280	158,667	250,550	596,600	288	2	3,058	0,144	15,204	0,286	0,286
Mg	1,200	148,000	146,800	19,075	23,304	18,764	2,301	4,050	11,213	31,000	57,740	107,080	288	2	2,664	0,144	11,703	0,286	0,286
Pb	0,000	0,008	0,008	0,001	0,001	0,001	0,001	0,001	0,001	0,001	0,003	0,007	289	1	3,932	0,143	19,290	0,286	0,286
As	0,000	0,043	0,043	0,001	0,002	0,004	0,000	0,000	0,000	0,002	0,005	0,021	289	1	8,273	0,143	80,719	0,286	0,286
Cd	0,000	0,008	0,008	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,001	0,001	188	188	0,633	0,239	95,406	0,474	0,474
NO3	0,500	178,706	178,206	23,402	31,501	30,648	6,500	9,715	41,719	88,621	164,036	320,960	290	3	1,819	0,143	4,318	0,285	0,285
SO4	4,400	1490,000	1485,600	53,700	119,222	200,650	9,178	29,900	130,600	387,800	887,000	1320,960	287	3	4,337	0,144	21,807	0,285	0,285
Cl	1,500	1620,000	1618,500	31,000	49,418	104,534	2,058	5,990	16,615	54,700	128,800	314,000	285	5	12,328	0,144	181,066	0,288	0,288
Trichloethen	0,000	3,067	3,067	0,000	0,020	0,232	0,000	0,000	0,000	0,000	0,003	0,021	290	0	12,163	0,143	148,451	0,285	0,285
Tetrachloethen	0,000	0,535	0,535	0,000	0,004	0,034	0,000	0,000	0,000	0,000	0,008	0,026	290	0	14,237	0,143	219,133	0,285	0,285
Atrazin	0,010	0,153	0,153	0,013	0,019	0,016	0,010	0,010	0,010	0,020	0,047	0,103	290	0	4,438	0,143	27,702	0,285	0,285
Simazin	0,010	0,050	0,040	0,010	0,015	0,007	0,010	0,010	0,010	0,010	0,028	0,048	290	0	2,245	0,143	6,256	0,285	0,285
ULKW	0,000	7,743	7,743	0,005	0,043	0,476	0,000	0,000	0,002	0,008	0,015	0,035	290	0	15,024	0,143	236,754	0,285	0,285
Diuron	0,010	0,088	0,058	0,030	0,031	0,014	0,010	0,010	0,020	0,043	0,060	0,051	290	0	0,075	0,143	1,141	0,285	0,285
Desethylatrazin	0,010	0,185	0,175	0,017	0,025	0,026	0,010	0,010	0,027	0,068	0,160	0,160	290	0	3,872	0,143	15,762	0,285	0,285
Isoproturon	0,010	0,045	0,035	0,033	0,011	0,011	0,010	0,010	0,023	0,043	0,088	0,160	290	0	-0,362	0,143	-0,765	0,285	0,285
Bromacil	0,010	0,157	0,147	0,020	0,028	0,020	0,010	0,010	0,050	0,090	0,160	0,160	290	0	1,344	0,143	4,728	0,285	0,285
Hexazinon	0,010	0,237	0,227	0,011	0,020	0,019	0,010	0,010	0,027	0,050	0,090	0,160	290	0	6,252	0,143	62,226	0,285	0,285
Bentazon	0,010	0,283	0,273	0,020	0,031	0,040	0,010	0,010	0,010	0,050	0,050	0,050	73	217	4,516	0,281	24,979	0,555	0,555

Cluster	Perzentile					N Gültig	Schiefe					Stofflicher Kurkosis							
	1	5	25	75	95		99	Fehlend	95	Stofflicher Kurkosis									
	Minimum	Maximum	Spannweite	Median	Mittelwert	Stabw.	Stabw.	Perzentile	5	25	75	95	99	N Gültig	Fehlend	Schiefe	Stofflicher Kurkosis	Kurkosis	Stofflicher Kurkosis
LF	38,171	101,441	63,270	76,333	73,886	20,028	38,171	64,400	86,667	101,441	101,441	101,441	7	0	-0,668	0,794	1,112	1,587	1,587
pH	6,689	7,658	0,969	7,414	7,243	0,377	6,689	6,755	7,516	7,658	7,658	7,658	7	0	-0,803	0,794	-1,044	1,587	1,587
Na	3,200	34,500	31,300	13,500	15,943	10,447	3,200	3,200	21,700	34,500	34,500	34,500	7	0	0,772	0,794	0,560	1,587	1,587
K	0,400	12,750	12,350	3,505	5,229	5,080	0,400	0,600	11,600	12,750	12,750	12,750	7	0	0,777	0,794	-1,228	1,587	1,587
Ca	48,900	188,000	141,100	120,200	114,734	48,782	48,900	73,333	148,000	188,000	188,000	188,000	7	0	0,105	0,794	-0,119	1,587	1,587
Mg	5,800	30,527	24,727	18,414	20,083	9,837	5,800	12,233	29,525	30,527	30,527	30,527	7	0	-0,192	0,794	-1,743	1,587	1,587
Pb	0,001	0,007	0,007	0,001	0,002	0,002	0,001	0,001	0,003	0,007	0,007	0,007	7	0	2,110	0,794	4,736	1,587	1,587
As	0,000	0,003	0,003	0,001	0,001	0,001	0,000	0,000	0,002	0,003	0,003	0,003	7	0	0,881	0,794	-0,395	1,587	1,587
Cd	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	3	4	-1,732	1,225	-0,351	1,587	1,587
NO3	6,800	91,933	85,133	30,533	33,718	31,537	6,800	7,840	46,547	91,933	91,933	91,933	7	0	1,158	0,794	0,807	1,587	1,587
SO4	4,300	123,050	118,750	38,000	54,238	45,823	4,300	20,000	106,500	123,050	123,050	123,050	7	0	0,653	0,794	-1,318	1,587	1,587
Cl	7,900	56,150	50,250	28,000	25,607	15,047	7,900	8,800	40,359	56,150	56,150	56,150	7	0	0,767	0,794	-0,340	1,587	1,587
Trichloethen	0,000	0,001	0,001	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,001	0,001	0,001	0,001	7	0	1,300	0,794	-0,363	1,587	1,587
Tetrachloethen	0,000	0,001	0,001	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,001	0,001	0,001	7	0	1,497	0,794	3,492	1,587	1,587
Atrazin	0,010	0,103	0,093	0,035	0,042	0,030	0,010	0,023	0,050	0,103	0,103	0,103	7	0	1,652	0,794	3,492	1,587	1,587
ULKW	0,153	0,319	0,166	0,214	0,223	0,061	0,153	0,160	0,278	0,319	0,319	0,319	7	0	0,457	0,794	-0,906	1,587	1,587
Diuron	0,000	0,009	0,008	0,002	0,004	0,003	0,000	0,000	0,002	0,009	0,009	0,009	7	0	1,075	0,794	-0,891	1,587	1,587
Desethylatrazin	0,020	0,078	0,058	0,050	0,050	0,017	0,020	0,020	0,050	0,078	0,078	0,078	7	0	-0,179	0,794	3,016	1,587	1,587
Isoproturon	0,010	0,060	0,050	0,037	0,048	0,037	0,010	0,010	0,057	0,060	0,060	0,060	7	0	-0,141	0,794	-0,054	1,587	1,587
Bromacil	0,035	0,050	0,015	0,050	0,048	0,006	0,035	0,035	0,050	0,050	0,050	0,050	7	0	-2,646	0,794	7,000	1,587	1,587
Hexazinon	0,020	0,075	0,065	0,050	0,049	0,016	0,020	0,020	0,050	0,075	0,075	0,075	7	0	-0,489	0,794	3,112	1,587	1,587
Bentazon	0,037	0,050	0,013	0,043	0,043	0,009	0,037	0,037	0,050	0,050	0,050	0,050	2	5	0,153	0,794	0,192	1,587	1,587

Anhang III: Tabellen D 1 - 1

Statistische Basisparameter für alle Messstellen des jeweiligen Clusters einer 7-Clusterlösung
Ward-Clustering nach Eliminierung der mittels Single-Linkage-Clustering ermittelten Ausreißer (gemittelte Werte über den Gesamtzeitraum für jede Messstelle)
 Alle Werte als reale Variablenwerte in [mg/l], lediglich LF in [mS/m] und Atrazin, Simazin, Duron, Desethylatrazin, Isoproturon, Bromacil, Hexazinon und Bentazon in [µg/l]

Cluster7	Minimum	Maximum	Spannweite	Median	Mittelwert	Stabw.	Perzentile	5	25	75	95	99	N	Fehlend	Schiefe	Stetföher Schiefe	Kurtosis	Stetföher Kurtosis
LF	61,380	90,113	28,733	67,887	72,554	11,726	61,380	61,380	63,156	66,163	69,113	70,113	8	0	0,788	0,752	-1,179	1,481
pH	6,866	7,482	0,616	7,125	7,183	0,223	6,866	6,866	7,024	7,406	7,482	7,482	8	0	0,183	0,752	-1,416	1,481
Na	2,500	36,000	33,500	11,650	15,250	11,315	2,500	2,500	6,875	24,925	36,000	36,000	8	0	0,977	0,752	0,129	1,481
K	0,300	6,750	6,450	2,200	2,656	2,389	0,300	0,300	0,525	4,625	6,750	6,750	8	0	0,652	0,752	-0,870	1,481
Ca	66,333	145,200	78,867	108,600	108,019	26,581	66,333	66,333	82,750	128,063	145,200	145,200	8	0	-0,394	0,752	-0,588	1,481
Mg	7,900	42,333	34,433	19,975	21,765	11,749	7,900	7,900	11,725	31,875	42,333	42,333	8	0	0,767	0,752	-0,162	1,481
Pb	0,001	0,001	0,000	0,001	0,001	0,000	0,001	0,001	0,001	0,001	0,001	0,001	8	0	0,828	0,752	8,000	1,481
As	0,001	0,005	0,005	0,001	0,002	0,002	0,001	0,001	0,001	0,004	0,005	0,005	8	0	1,408	0,752	-0,002	1,481
Cd	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	1	7	0,000	0,752	-0,002	1,481
NO3	15,325	80,500	65,175	33,733	42,019	24,176	15,325	15,325	22,095	65,000	80,500	80,500	8	0	0,666	0,752	-1,379	1,481
SO4	16,000	105,000	89,000	32,850	44,206	30,156	16,000	16,000	24,950	65,788	105,000	105,000	8	0	1,502	0,752	1,509	1,481
Cl	13,850	69,200	55,350	23,500	29,456	18,751	13,850	13,850	14,425	38,425	69,200	69,200	8	0	1,548	0,752	2,476	1,481
Trichloethen	0,000	0,004	0,004	0,000	0,001	0,001	0,000	0,000	0,000	0,001	0,004	0,004	8	0	2,479	0,752	6,404	1,481
Tetrachloethen	0,000	0,788	0,788	0,000	0,099	0,279	0,000	0,000	0,000	0,001	0,788	0,788	8	0	2,828	0,752	8,000	1,481
Atrazin	0,400	1,335	0,935	0,880	0,893	0,333	0,400	0,400	0,600	1,226	1,335	1,335	8	0	-0,076	0,752	-1,271	1,481
Simazin	0,100	0,990	0,890	0,650	0,651	0,332	0,100	0,100	0,117	0,778	0,990	0,990	8	0	0,077	0,752	-0,912	1,481
URKW	0,001	0,792	0,792	0,003	0,102	0,276	0,001	0,001	0,002	0,005	0,792	0,792	8	0	2,828	0,752	8,000	1,481
Duron	0,023	0,057	0,043	0,060	0,049	0,043	0,023	0,023	0,050	0,050	0,067	0,067	8	0	-1,232	0,752	4,270	1,481
Desethylatrazin	0,237	1,249	1,012	0,623	0,697	0,337	0,237	0,237	0,431	0,984	1,249	1,249	8	0	0,362	0,752	0,754	1,481
Isoproturon	0,023	0,053	0,029	0,050	0,047	0,010	0,023	0,023	0,050	0,053	0,053	0,053	8	0	-2,179	0,752	7,807	1,481
Bromacil	0,010	0,280	0,270	0,050	0,106	0,103	0,010	0,010	0,027	0,205	0,280	0,280	8	0	0,854	0,752	-1,009	1,481
Hexazinon	0,010	0,638	0,628	0,050	0,171	0,231	0,010	0,010	0,010	0,343	0,638	0,638	8	0	1,468	0,752	1,366	1,481
Bentazon	0,050	0,120	0,070	0,065	0,085	0,049	0,050	0,050	0,050	0,120	0,120	0,120	2	6	0,000	0,752	0,000	1,481

Anhang III: Tabellen D 1 - 2

Statistische Basisparameter für alle Messstellen des jeweiligen Clusters einer 5-Clusterlösung
K-means-Clustering nach Eliminierung der mittels Single-Linkage-Clustering ermittelten Ausrisser und Festlegung der Clusteranzahl mittels Ward-Clustering (gemittelte Werte über den Gesamtzeitraum für jede Messstelle)
 Alle Werte als reale Variablenwerte in [mg/l], lediglich LF in [mS/m] und Atrazin; Simazin; Diuron; Desethylatrazin; Isoprotruron, Bromacil, Hexazinon und Bentazon in [µg/l]

Cluster 1	Perzentile								N gültig	Fehlend	Schiefe	Stoßfehler Schiefe	Kurtosis	Stoßfehler Kurtosis		
	Minimum	Maximum	Spannweite	Median	Mittelwert	Stdabw.	1	5							25	75
LF	38,033	101,441	63,408	67,690	66,860	22,355	38,033	38,033	42,336	84,583	101,441	101,44	-0,032	0,717	-1,148	1,400
pH	6,610	7,658	1,048	7,252	7,129	0,402	6,610	6,610	6,722	7,466	7,658	7,66	-0,108	0,717	-1,993	1,400
Na	3,200	34,500	31,300	15,000	16,200	9,123	3,200	3,200	9,500	20,675	34,500	34,50	0,000	0,717	1,206	1,400
K	0,400	12,750	12,350	3,480	4,632	4,581	0,400	0,400	1,100	8,625	12,750	12,75	0,000	1,147	-0,959	1,400
Ca	46,900	188,000	141,100	100,947	101,634	48,298	46,900	46,900	58,883	136,879	188,000	188,00	0,000	0,525	-0,597	1,400
Mg	5,800	30,527	24,727	14,750	17,335	10,128	5,800	5,800	7,717	29,429	30,527	30,53	0,000	0,358	-1,777	1,400
Pb	0,001	0,007	0,007	0,001	0,002	0,002	0,001	0,001	0,001	0,001	0,001	0,01	0,000	2,403	6,141	1,400
As	0,000	0,003	0,003	0,001	0,001	0,001	0,001	0,000	0,001	0,002	0,003	0,00	0,000	1,050	0,717	1,400
Cd	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,00	-1,732	1,225	-	-
NO3	6,800	91,933	85,133	15,625	29,533	28,662	6,800	6,800	8,004	45,374	91,933	91,93	0,000	0,717	2,046	1,400
SO4	4,300	123,050	118,750	36,000	48,939	41,596	4,300	4,300	18,500	86,650	123,050	123,05	0,000	0,978	-0,327	1,400
Cl	7,900	58,150	50,250	30,250	27,228	16,815	7,900	7,900	8,800	37,175	58,150	58,15	0,000	0,423	-0,160	1,400
Trichloethen	0,000	0,003	0,003	0,000	0,001	0,001	0,000	0,000	0,000	0,001	0,003	0,00	0,000	0,717	3,750	1,400
Tetrachloethen	0,000	0,199	0,198	0,000	0,022	0,066	0,000	0,000	0,000	0,001	0,199	0,20	0,000	3,000	9,000	1,400
Atrazin	0,010	0,167	0,157	0,042	0,061	0,050	0,010	0,010	0,027	0,094	0,167	0,17	0,000	1,387	1,640	1,400
Simazin	0,125	0,319	0,194	0,193	0,201	0,068	0,125	0,125	0,140	0,260	0,319	0,32	0,000	0,717	-0,803	1,400
LHKW	0,000	0,203	0,203	0,002	0,025	0,087	0,000	0,000	0,001	0,009	0,203	0,20	0,000	2,988	8,945	1,400
Diuron	0,020	0,110	0,090	0,050	0,057	0,026	0,020	0,020	0,050	0,071	0,110	0,11	1,000	1,062	2,108	1,481
Desethylatrazin	0,010	0,153	0,143	0,039	0,055	0,042	0,010	0,010	0,030	0,068	0,153	0,15	0,000	0,717	4,251	1,481
Isoprotruron	0,035	0,050	0,015	0,050	0,048	0,005	0,035	0,035	0,035	0,050	0,050	0,05	-2,828	0,752	8,000	1,481
Bromacil	0,020	0,085	0,065	0,050	0,053	0,018	0,020	0,020	0,050	0,063	0,085	0,09	0,000	0,124	1,437	1,400
Hexazinon	0,010	0,095	0,085	0,050	0,052	0,029	0,010	0,010	0,029	0,081	0,095	0,10	0,000	0,195	-0,997	1,400
Bentazon	0,037	0,050	0,013	0,043	0,043	0,009	0,037	0,037	0,037	0,050	0,050	0,05	7,000	0,913	5,000	2,000

Cluster 2	Perzentile								N gültig	Fehlend	Schiefe	Stoßfehler Schiefe	Kurtosis	Stoßfehler Kurtosis		
	Minimum	Maximum	Spannweite	Median	Mittelwert	Stdabw.	1	5							25	75
LF	52,034	98,700	46,666	73,400	73,920	13,856	52,034	52,034	63,156	86,885	98,700	98,70	0,000	0,315	-0,667	1,232
pH	6,866	7,492	0,625	7,125	7,185	0,205	6,866	6,866	7,031	7,406	7,492	7,49	0,000	0,252	-1,292	1,232
Na	2,500	36,000	33,500	9,800	12,467	10,291	2,500	2,500	4,150	17,300	36,000	36,00	0,000	1,326	1,341	1,232
K	0,200	40,000	39,800	1,900	5,438	11,078	0,200	0,200	0,525	4,625	40,000	40,00	0,000	3,257	10,934	1,232
Ca	66,333	156,000	89,667	119,000	116,453	26,967	66,333	66,333	105,071	137,458	156,000	156,00	0,000	-0,511	-0,308	1,232
Mg	1,300	42,333	41,033	17,517	18,628	12,551	1,300	1,300	8,525	27,625	42,333	42,33	0,000	0,404	-0,348	1,232
Pb	0,001	0,001	0,000	0,001	0,001	0,000	0,001	0,001	0,001	0,001	0,001	0,00	0,000	3,464	12,000	1,232
As	0,000	0,005	0,005	0,001	0,002	0,002	0,000	0,000	0,001	0,003	0,005	0,01	0,000	1,335	-0,101	1,232
Cd	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,00	11,000	0,436	-1,197	1,232
NO3	10,760	80,500	69,740	34,374	41,378	23,396	10,760	10,760	22,095	65,000	80,500	80,50	0,000	0,637	0,667	1,232
SO4	13,000	105,000	92,000	32,850	41,863	28,598	13,000	13,000	17,750	67,075	105,000	105,00	0,000	1,175	0,667	1,232
Cl	13,200	69,200	56,000	23,500	28,279	17,031	13,200	13,200	14,425	38,425	69,200	69,20	0,000	3,038	1,822	1,232
Trichloethen	0,000	0,004	0,004	0,000	0,001	0,001	0,000	0,000	0,000	0,001	0,004	0,00	0,000	4,000	9,668	1,232
Tetrachloethen	0,000	0,788	0,788	0,000	0,066	0,228	0,000	0,000	0,000	0,000	0,788	0,79	0,000	3,464	12,000	1,232
Atrazin	0,252	1,335	1,083	0,631	0,719	0,374	0,252	0,252	0,413	1,082	1,335	1,34	0,000	0,487	-1,197	1,232
Simazin	0,010	0,100	0,090	0,044	0,029	0,010	0,010	0,010	0,015	0,066	0,100	0,10	0,000	0,300	0,564	1,232
LHKW	0,001	0,792	0,792	0,003	0,069	0,228	0,001	0,001	0,002	0,006	0,792	0,79	0,000	3,464	11,997	1,232
Diuron	0,023	0,067	0,043	0,050	0,049	0,009	0,023	0,023	0,060	0,050	0,067	0,07	0,000	-1,539	6,568	1,232
Desethylatrazin	0,237	1,249	1,012	0,549	0,620	0,301	0,237	0,237	0,403	0,890	1,249	1,25	0,000	0,866	0,210	1,232
Isoprotruron	0,023	0,053	0,029	0,050	0,048	0,008	0,023	0,023	0,050	0,050	0,053	0,05	0,000	-3,409	11,742	1,232
Bromacil	0,010	0,280	0,270	0,091	0,091	0,085	0,010	0,010	0,047	0,151	0,280	0,28	0,000	0,637	-0,948	1,232
Hexazinon	0,010	0,638	0,628	0,058	0,131	0,194	0,010	0,010	0,100	0,175	0,638	0,64	0,000	2,054	0,637	1,232
Bentazon	0,050	0,120	0,070	0,050	0,064	0,031	0,050	0,050	0,050	0,085	0,120	0,12	7,000	2,236	5,000	2,000

Anhang III: Tabellen D 1 - 2

Statistische Basisparameter für alle Messstellen des jeweiligen Clusters einer 5-Clusterlösung
K-means-Clustering nach Eliminierung der mittels Single-Linkage-Clustering ermittelten Ausreisser und Festlegung der Clusteranzahl mittels Ward-Clustering (gemittelte Werte über den Gesamtzeitraum für jede Messteile)
 Alle Werte als reale Variablenwerte in [mg/l], lediglich LF in [mgS/m] und Atrazin; Diuron; Desethylatrazin; Isoprotruron, Bromacil, Hexazinon und Bentazon in [µg/l]

Cluster 3	Minimum	Maximum	Spannweite	Median	Mittelwert	Stdabw.	Perzentile					N gültig	Fehlend	Schiefe	Stofffehler Schiefe	Kurtosis	Stofffehler Kurtosis	
							1	5	25	75	95							99,00
LF	26,725	138,600	111,875	90,983	86,823	46,927	26,725	26,725	39,835	129,650	138,600	138,600	4	0,00	-0,481	1,014	0,453	2,619
pH	6,410	7,560	1,150	7,117	7,051	6,410	6,410	6,540	6,540	7,496	7,560	7,560	4	0,00	-0,625	1,014	-0,634	2,619
Na	2,500	23,750	21,250	13,125	13,125	15,026	2,500	2,500	2,500	23,750	23,750	23,750	2	2,00				
K	1,300	4,850	3,550	3,075	3,075	2,510	1,300	1,300	1,300	4,850	4,850	4,850	2	2,00				
Ca	104,100	163,433	59,333	133,767	133,767	41,955	104,100	104,100	104,100	163,433	163,433	163,433	2	2,00				
Mg	18,167	46,850	28,683	32,508	32,508	20,282	18,167	18,167	18,167	46,850	46,850	46,850	2	2,00				
Pb	0,001	0,001	0,000	0,001	0,001	0,000	0,001	0,001	0,001	0,001	0,001	0,001	3	1,00	1,732	1,225		
As	0,000	0,009	0,008	0,001	0,003	0,005	0,000	0,000	0,000	0,009	0,009	0,009	3	1,00	1,724	1,225		
Cd	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	1	3,00				
NO3	0,520	103,100	102,580	5,500	28,655	49,761	0,520	0,520	0,928	79,538	103,100	103,100	4	0,00	1,969	1,014	3,891	2,619
SO4	43,000	123,650	80,650	83,325	83,325	57,028	43,000	43,000	43,000	123,650	123,650	123,650	2	2,00				
Cl	12,200	44,000	31,800	28,100	28,100	22,486	12,200	12,200	12,200	44,000	44,000	44,000	2	2,00				
Trichlorethen	0,000	0,001	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,001	0,001	0,001	3	1,00	1,652	1,225		
Tetrachlorethen	0,000	0,001	0,001	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,001	0,001	0,001	3	1,00	1,732	1,225		
Atrazin	0,010	0,010	0,000	0,010	0,010	0,010	0,010	0,010	0,010	0,010	0,010	0,010	1	3,00				
Simazin	0,010	0,010	0,000	0,010	0,010	0,010	0,010	0,010	0,010	0,010	0,010	0,010	1	3,00				
LHKW	0,000	0,005	0,005	0,003	0,003	0,003	0,000	0,000	0,000	0,005	0,005	0,005	3	1,00	0,119	1,225		
Diuron	0,050	0,050	0,000	0,050	0,050	0,050	0,050	0,050	0,050	0,050	0,050	0,050	1	3,00				
Desethylatrazin	0,030	0,030	0,000	0,030	0,030	0,030	0,030	0,030	0,030	0,030	0,030	0,030	1	3,00				
Isoprotruron	0,050	0,050	0,000	0,050	0,050	0,050	0,050	0,050	0,050	0,050	0,050	0,050	3	1,00	1,225	1,225		
Bromacil	0,050	0,050	0,000	0,050	0,050	0,050	0,050	0,050	0,050	0,050	0,050	0,050	1	3,00				
Hexazinon	1,743	1,743	0,000	1,743	1,743	1,743	1,743	1,743	1,743	1,743	1,743	1,743	1	3,00				
Bentazon													0	4,00				

Cluster 4	Minimum	Maximum	Spannweite	Median	Mittelwert	Stdabw.	Perzentile					N gültig	Fehlend	Schiefe	Stofffehler Schiefe	Kurtosis	Stofffehler Kurtosis	
							1	5	25	75	95							99,00
LF	65,400	129,250	63,850	77,762	93,405	28,366	65,400	65,400	70,900	123,733	129,250	129,250	5	1,00	0,559	0,913	-2,617	2,000
pH	6,855	7,575	0,720	7,114	7,179	6,855	6,855	6,855	6,918	7,504	7,575	7,575	6	0,00	0,436	0,845	-1,839	1,741
Na	7,900	20,300	12,400	18,840	15,680	6,777	7,900	7,900	7,900	20,300	20,300	20,300	3	3,00	-1,642	1,225		
K	0,540	10,200	9,660	4,100	4,947	4,885	0,540	0,540	0,540	10,200	10,200	10,200	3	3,00	0,756	1,225		
Ca	100,000	192,580	92,580	124,000	133,556	35,865	100,000	100,000	106,500	165,390	192,580	192,580	5	1,00	1,430	0,913	2,269	2,000
Mg	2,760	24,900	22,140	15,600	14,524	10,612	2,760	2,760	3,680	24,830	24,900	24,900	5	1,00	-0,145	0,913	-2,932	2,000
Pb	0,001	0,003	0,003	0,001	0,004	0,002	0,001	0,001	0,001	0,003	0,003	0,003	6	0,00	0,930	0,845	-0,229	1,741
As	0,001	0,012	0,012	0,002	0,004	0,005	0,001	0,001	0,001	0,007	0,012	0,012	6	0,00	1,812	0,845	3,091	1,741
Cd	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	2	4,00				
NO3	0,500	43,000	42,500	15,967	18,196	16,090	0,500	0,500	2,874	33,308	43,000	43,000	6	0,00	0,596	0,845	-0,596	1,741
SO4	14,600	197,000	182,400	45,800	85,800	97,557	14,600	14,600	14,600	197,000	197,000	197,000	3	3,00	1,555	1,225		
Cl	26,250	53,800	27,550	49,600	43,217	14,843	26,250	26,250	26,250	53,800	53,800	53,800	3	3,00	-1,577	1,225		
Trichlorethen	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,001	0,001	6	0,00	2,413	0,845	5,852	1,741
Tetrachlorethen	0,000	0,009	0,009	0,001	0,002	0,004	0,000	0,000	0,000	0,005	0,009	0,009	6	0,00	0,845	0,845	2,202	2,000
Atrazin	0,010	0,020	0,010	0,012	0,014	0,005	0,010	0,010	0,010	0,019	0,020	0,020	4	2,00	1,194	1,014	0,436	2,619
Simazin	0,010	0,020	0,010	0,010	0,013	0,005	0,010	0,010	0,010	0,018	0,020	0,020	4	2,00	2,000	1,014	4,000	2,619
LHKW	0,001	0,010	0,009	0,004	0,005	0,003	0,001	0,001	0,003	0,006	0,010	0,010	6	0,00	1,095	0,845	2,787	1,741
Diuron	0,048	0,050	0,002	0,049	0,049	0,048	0,048	0,048	0,048	0,048	0,050	0,050	2	4,00				
Desethylatrazin	0,010	0,039	0,029	0,016	0,020	0,014	0,010	0,010	0,010	0,035	0,039	0,039	4	2,00	1,135	1,014	0,142	2,619
Isoprotruron	0,143	0,216	0,073	0,180	0,180	0,052	0,143	0,143	0,143	0,216	0,216	0,216	2	4,00				
Bromacil	0,034	0,050	0,016	0,042	0,042	0,011	0,034	0,034	0,034	0,050	0,050	0,050	2	4,00				
Hexazinon	0,034	0,060	0,026	0,047	0,047	0,018	0,034	0,034	0,034	0,060	0,060	0,060	2	4,00				
Bentazon	0,040	0,050	0,010	0,045	0,045	0,007	0,040	0,040	0,040	0,050	0,050	0,050	2	4,00				

Anhang III: Tabellen D 1 - 2

Statistische Basisparameter für alle Messstellen des jeweiligen Clusters einer 5-Clusterlösung
K-means-Clustering nach Eliminierung der mittels Single-Linkage-Clustering ermittelten Ausreisser und Festlegung der Clusteranzahl mittels Ward-Clustering (gemittelte Werte über den Gesamtzeitraum für jede Messstelle)
 Alle Werte als reale Variablenwerte in [mg/l], lediglich LF in [mS/m] und Atrazin; Diuron; Desethylatrazin; Isoproturon, Bromacil, Hexazinon und Bentazon in [µg/l]

Cluster 5	Minimum	Maximum	Spannweite	Median	Mittelwert	Stabdw.	Perzentile 1	5	25	75	95	99,00	N Gültig	Fehlend	Schiefe	Stärkster Schiefe	Kurtosis	Stärkster Kurtosis
LF	2,764	619,800	617,036	75,252	79,171	40,533	5,387	20,934	60,004	91,989	142,775	235,03	1552	0,00	3,033	0,062	26,262	0,124
pH	4,788	9,090	4,302	7,172	7,139	0,342	5,797	6,522	7,064	7,298	7,529	8,00	1552	0,00	-1,708	0,062	10,089	0,124
Na	0,700	590,000	589,300	10,500	17,335	26,545	1,333	2,651	5,900	18,500	53,618	123,13	1516	36,00	9,154	0,063	155,309	0,126
K	0,100	166,000	165,900	1,930	3,550	6,766	0,237	0,500	1,200	3,700	10,506	28,26	1478	74,00	12,266	0,064	244,556	0,127
Ca	1,450	738,000	736,550	118,842	122,590	68,051	4,881	20,295	94,829	144,000	212,350	412,67	1532	20,00	2,899	0,063	18,059	0,125
Mg	0,514	148,000	147,486	18,567	21,293	15,928	1,236	3,044	10,088	28,800	50,000	75,32	1520	32,00	1,998	0,063	8,287	0,125
Pb	0,000	0,041	0,041	0,001	0,001	0,002	0,000	0,000	0,001	0,001	0,003	0,01	1502	50,00	11,809	0,063	173,810	0,126
As	0,000	0,142	0,142	0,001	0,002	0,005	0,000	0,000	0,001	0,002	0,007	0,02	1503	49,00	15,393	0,063	348,185	0,126
Cd	0,000	0,008	0,008	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,00	367	1185,00	15,665	0,127	270,803	0,254
NO3	0,100	194,200	194,100	22,560	28,374	25,422	0,208	0,595	10,189	38,800	80,075	116,33	1552	0,00	1,814	0,062	5,104	0,124
SO4	0,722	1490,000	1489,278	41,650	86,362	153,393	3,682	7,600	23,013	88,550	278,280	893,70	1520	32,00	5,327	0,063	34,727	0,125
Cl	0,100	1620,000	1619,900	27,100	36,657	56,137	1,311	3,692	14,500	43,483	97,350	189,75	1509	43,00	16,483	0,063	429,262	0,126
Trichloethen	0,000	3,067	3,067	0,000	0,007	0,106	0,000	0,000	0,000	0,000	0,006	0,11	1552	0,00	24,378	0,062	64,1506	0,124
Tetrachloethen	0,000	2,545	2,545	0,000	0,010	0,086	0,000	0,000	0,000	0,000	0,021	0,19	1552	0,00	20,108	0,062	519,712	0,124
Atrazin	0,010	0,525	0,515	0,030	0,038	0,038	0,010	0,010	0,016	0,050	0,088	0,23	1551	1,00	5,124	0,062	43,486	0,124
Isoproturon	0,010	0,103	0,093	0,020	0,028	0,016	0,010	0,010	0,013	0,046	0,050	0,06	1551	0,00	0,599	0,062	-0,484	0,124
LHKW	0,000	16,863	16,862	0,005	0,045	0,605	0,000	0,001	0,003	0,008	0,036	0,44	1552	0,00	22,476	0,062	547,720	0,124
Diuron	0,010	0,420	0,410	0,050	0,048	0,020	0,010	0,020	0,050	0,050	0,050	0,10	1441	111,00	9,252	0,064	144,570	0,129
Desethylatrazin	0,010	0,657	0,647	0,034	0,048	0,085	0,010	0,010	0,020	0,050	0,147	0,29	1551	1,00	4,526	0,062	29,767	0,124
Isoproturon	0,010	0,110	0,100	0,050	0,046	0,012	0,010	0,020	0,043	0,050	0,057	0,07	1550	2,00	-0,875	0,062	3,208	0,124
Bromacil	0,010	1,247	1,237	0,050	0,052	0,079	0,010	0,010	0,023	0,050	0,081	0,41	1551	1,00	9,856	0,062	117,171	0,124
Hexazinon	0,010	0,867	0,857	0,035	0,041	0,048	0,010	0,010	0,020	0,050	0,087	0,19	1551	1,00	9,175	0,062	122,877	0,124
Bentazon	0,010	1,400	1,390	0,050	0,045	0,071	0,010	0,010	0,020	0,050	0,050	0,18	411	1141,00	17,003	0,120	321,617	0,240

Anhang III: Tabellen D 1 - 2

Statistische Basisparameter für alle Messstellen des jeweiligen Clusters einer 7-Clusterlösung
K-means-Clustering nach Eliminierung der mittels Single-Linkage-Clustering ermittelten Ausreisser und Festlegung der Clusteranzahl mittels Ward-Clustering (gemittelte Werte über den Gesamtzeitraum für jede Messstelle)
 Alle Werte als reale Variablenwerte in [mg/l], lediglich LF in [mS/m] und Atrazin in [µg/l]

Cluster 1	Minimum	Maximum	Spannweite	Median	Mittelwert	Stdabw.	Perzentile							N Gültig	Fehlend	Stofflicher Schiefe	Kurtosis	Stofflicher Kurtosis	
							1	5	25	75	95	99							
LF	76,400	129,250	52,850	97,988	100,407	27,314	76,400	76,400	76,740	126,491	129,250	129,250	129,250	4	1	0,137	1,014	-5,189	2,619
pH	6,855	7,575	0,720	7,023	7,119	0,286	6,855	6,855	6,897	7,390	7,575	7,575	7,575	5	0	-1,252	0,913	1,234	2,000
Na	7,900	20,300	12,400	18,840	15,680	6,777	7,900	7,900	7,900	20,300	20,300	20,300	20,300	3	2	-1,642	1,225	1,234	2,000
K	0,540	10,200	9,660	4,100	4,947	4,885	0,540	0,540	0,540	10,200	10,200	10,200	10,200	3	2	0,756	1,225	1,234	2,000
Ca	113,000	192,580	79,580	131,100	141,945	35,298	113,000	113,000	115,750	178,985	192,580	192,580	192,580	4	1	1,512	1,014	2,346	2,619
Mg	2,760	24,900	22,140	14,680	14,295	12,234	2,760	2,760	3,220	24,865	24,900	24,900	24,900	4	1	-0,019	1,014	-5,887	2,619
Pb	0,001	0,002	0,002	0,001	0,001	0,001	0,001	0,001	0,001	0,001	0,002	0,002	0,002	5	0	1,037	0,913	0,483	2,000
As	0,000	0,012	0,012	0,002	0,004	0,005	0,001	0,001	0,001	0,009	0,012	0,012	0,012	2	0	1,556	0,913	2,016	2,000
NO3	0,500	30,077	29,577	14,600	13,235	11,791	0,500	0,500	2,083	30,077	30,077	30,077	30,077	5	0	0,485	0,913	-0,534	2,000
SO4	14,600	197,000	182,400	45,800	85,800	97,557	14,600	14,600	14,600	197,000	197,000	197,000	197,000	3	2	1,535	1,225	1,225	2,000
Cl	26,250	53,800	27,550	49,600	43,217	14,843	26,250	26,250	26,250	53,800	53,800	53,800	53,800	3	2	-1,577	1,225	1,225	2,000
Trichlorethen	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	5	0	2,236	0,913	5,000	2,000
Tetrachlorethen	0,000	0,004	0,004	0,000	0,001	0,002	0,000	0,000	0,000	0,003	0,004	0,004	0,004	5	0	1,951	0,913	3,789	2,000
Atrazin	0,010	0,020	0,010	0,012	0,014	0,005	0,010	0,010	0,010	0,019	0,020	0,020	0,020	4	1	1,194	1,014	0,436	2,619
Simazin	0,010	0,020	0,010	0,010	0,013	0,005	0,010	0,010	0,010	0,018	0,020	0,020	0,020	4	1	2,000	1,014	4,000	2,619
LHKW	0,001	0,005	0,004	0,004	0,004	0,002	0,001	0,001	0,002	0,005	0,005	0,005	0,005	5	0	-1,702	0,913	3,321	2,000
Diuron	0,048	0,050	0,002	0,049	0,049	0,001	0,048	0,048	0,048	0,048	0,050	0,050	0,050	2	3	1,135	1,014	0,142	2,619
Desethylarazin	0,010	0,039	0,029	0,016	0,020	0,010	0,010	0,010	0,010	0,035	0,039	0,039	0,039	4	1	0,039	0,913	3,789	2,000
Isoproturon	0,143	0,216	0,073	0,180	0,180	0,052	0,143	0,143	0,143	0,216	0,216	0,216	0,216	2	3	0,050	0,913	0,050	2,000
Bromacil	0,034	0,050	0,016	0,042	0,042	0,034	0,034	0,034	0,034	0,050	0,050	0,050	0,050	2	3	0,060	0,913	0,060	2,000
Hexazinon	0,034	0,060	0,026	0,047	0,047	0,018	0,034	0,034	0,034	0,060	0,060	0,060	0,060	2	3	0,060	0,913	0,060	2,000
Beitazon	0,040	0,050	0,010	0,045	0,045	0,007	0,040	0,040	0,040	0,050	0,050	0,050	0,050	2	3	0,050	0,913	0,050	2,000

Cluster 2	Minimum	Maximum	Spannweite	Median	Mittelwert	Stdabw.	Perzentile							N Gültig	Fehlend	Stofflicher Schiefe	Kurtosis	Stofflicher Kurtosis	
							1	5	25	75	95	99							
LF	38,033	101,441	63,408	67,690	66,860	22,355	38,033	38,033	42,336	84,583	101,441	101,441	101,441	9	0	-0,032	0,717	-1,148	1,400
pH	6,610	7,658	1,048	7,252	7,129	0,402	6,610	6,610	6,722	7,466	7,658	7,658	7,658	9	0	-0,108	0,717	-1,983	1,400
Na	3,200	34,500	31,300	15,000	16,200	9,123	3,200	3,200	3,200	20,675	34,500	34,500	34,500	9	0	0,697	0,717	1,206	1,400
K	0,400	12,750	12,350	3,480	4,632	4,581	0,400	0,400	1,100	8,625	12,750	12,750	12,750	9	0	1,147	0,717	-0,059	1,400
Ca	46,900	188,000	141,100	100,947	101,634	48,298	46,900	46,900	55,783	136,879	188,000	188,000	188,000	9	0	0,525	0,717	-0,597	1,400
Mg	5,800	30,527	24,727	14,750	17,335	10,128	5,800	5,800	7,717	29,429	30,527	30,527	30,527	9	0	0,358	0,717	-1,777	1,400
Pb	0,001	0,007	0,007	0,001	0,002	0,002	0,001	0,001	0,001	0,002	0,007	0,007	0,007	9	0	2,403	0,717	6,141	1,400
As	0,000	0,003	0,003	0,001	0,001	0,001	0,000	0,000	0,001	0,003	0,003	0,003	0,003	9	0	1,050	0,717	0,582	1,400
Cl	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	3	6	-1,732	1,225	2,046	1,400
NO3	6,800	91,933	85,133	15,625	29,353	28,662	6,800	6,800	8,004	45,374	91,933	91,933	91,933	9	0	0,978	0,717	-0,327	1,400
SO4	4,300	123,050	118,750	36,000	48,939	41,596	4,300	4,300	18,500	86,630	123,050	123,050	123,050	9	0	0,978	0,717	-0,327	1,400
Cl	7,900	58,150	50,250	30,250	27,228	16,815	7,900	7,900	8,800	37,175	58,150	58,150	58,150	9	0	1,952	0,717	-0,160	1,400
Trichlorethen	0,000	0,003	0,003	0,000	0,001	0,001	0,000	0,000	0,000	0,001	0,003	0,003	0,003	9	0	0,423	0,717	0,423	1,400
Tetrachlorethen	0,000	0,199	0,198	0,000	0,022	0,068	0,000	0,000	0,001	0,022	0,199	0,199	0,199	9	0	3,000	0,717	9,000	1,400
Atrazin	0,010	0,167	0,157	0,042	0,061	0,050	0,010	0,010	0,027	0,094	0,167	0,167	0,167	9	0	1,387	0,717	1,640	1,400
Simazin	0,125	0,319	0,194	0,193	0,201	0,125	0,125	0,125	0,140	0,260	0,319	0,319	0,319	9	0	0,564	0,717	-0,803	1,400
LHKW	0,000	0,203	0,203	0,025	0,026	0,067	0,000	0,000	0,001	0,009	0,203	0,203	0,203	9	0	2,988	0,717	8,945	1,400
Diuron	0,020	0,110	0,090	0,050	0,057	0,026	0,020	0,020	0,050	0,071	0,110	0,110	0,110	8	1	1,062	0,752	2,108	1,481
Desethylarazin	0,010	0,153	0,143	0,039	0,055	0,042	0,010	0,010	0,030	0,068	0,153	0,153	0,153	9	0	1,866	0,717	4,251	1,400
Isoproturon	0,035	0,050	0,015	0,050	0,048	0,005	0,035	0,035	0,050	0,050	0,050	0,050	0,050	8	1	-2,828	0,752	8,000	1,481
Bromacil	0,020	0,085	0,065	0,050	0,053	0,018	0,020	0,020	0,050	0,063	0,085	0,085	0,085	9	0	0,124	0,717	1,437	1,400
Hexazinon	0,010	0,095	0,085	0,050	0,052	0,010	0,010	0,029	0,050	0,081	0,095	0,095	0,095	9	0	0,195	0,717	-0,997	1,400
Beitazon	0,037	0,050	0,013	0,043	0,043	0,009	0,037	0,037	0,037	0,050	0,050	0,050	0,050	2	7	0,050	0,717	0,050	2,000

Anhang III: Tabellen D 1 - 2

Statistische Basisparameter für alle Messstellen des jeweiligen Clusters einer 7-Clusterlösung
K-means-Clustering nach Eliminierung der mittels Single-Linkage-Clustering ermittelten Ausreisser und Festlegung der Clusteranzahl mittels Ward-Clustering (gemittelte Werte über den Gesamtzeitraum für jede Messstelle)
 Alle Werte als reale Variablenwerte in [µg/l], lediglich LF in [mS/m] und Atrazin; Simazin; Diuron; Desethylatrazin; Isoproturon; Bromacil; Hexazinon und Bentazon in [µg/l]

Cluster 5	Minimum	Maximum	Spannweite	Median	Mittelwert	Stdabw.	Perzentile	1	5	25	75	95	99	N Gültig	Fehlend	Schiefte	Stdfehler Schiefe	Kurtosis	Stdfehler Kurtosis
LF	2.764	619,800	617,036	75,100	78,615	40,130	5,356	20,804	59,829	91,335	142,374	235,452	1533	0	3,118	0,063	27,729	0,125	
pH	4,788	9,090	4,302	7,172	7,140	0,344	5,795	6,520	7,066	7,300	7,531	7,708	1533	0	-1,708	0,063	9,979	0,125	
Na	0,700	590,000	589,300	10,400	17,157	28,473	1,325	2,600	5,885	18,400	52,077	125,090	1498	35	9,313	0,063	159,093	0,126	
K	0,100	166,000	165,900	1,900	3,543	6,789	0,235	0,500	1,200	3,700	10,500	28,320	1459	74	12,238	0,064	243,017	0,128	
Ca	1,450	738,000	736,550	118,000	122,051	67,940	4,857	20,025	94,449	143,083	212,250	412,850	1514	19	2,933	0,063	18,401	0,126	
Mg	0,514	148,000	147,486	18,325	21,067	15,740	1,227	3,035	9,950	28,511	48,728	71,970	1502	31	2,035	0,063	8,763	0,126	
Pb	0,000	0,041	0,041	0,001	0,002	0,000	0,000	0,000	0,000	0,001	0,001	0,003	0,008	48	11,762	0,064	172,248	0,127	
As	0,000	0,142	0,142	0,001	0,002	0,005	0,000	0,000	0,001	0,001	0,002	0,006	0,020	47	15,486	0,063	350,225	0,127	
Cd	0,000	0,008	0,008	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,001	1166	15,665	0,127	270,803	0,254	
NO3	0,100	194,200	194,100	22,560	28,341	25,481	0,205	0,596	10,180	38,795	80,019	116,465	1533	0	1,820	0,063	5,117	0,125	
SO4	0,722	1490,000	1489,278	41,000	85,282	152,672	3,608	7,600	23,000	87,183	275,900	895,320	1501	32	5,399	0,063	35,620	0,126	
Cl	0,100	1620,000	1619,900	27,000	36,105	56,076	1,308	3,637	14,100	43,000	96,000	190,360	1490	43	16,752	0,063	437,344	0,127	
Trichlorethen	0,000	0,983	0,983	0,000	0,003	0,033	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,005	0,065	1533	0,063	0,063	537,504	0,125	
Tetrachlorethen	0,000	2,545	2,545	0,000	0,009	0,082	0,000	0,000	0,000	0,000	0,019	0,185	0,199	0	22,451	0,063	622,730	0,125	
Atrazin	0,010	0,525	0,515	0,030	0,037	0,037	0,010	0,010	0,016	0,016	0,050	0,085	0,129	1	5,332	0,063	47,794	0,125	
Simazin	0,010	0,103	0,093	0,020	0,028	0,016	0,010	0,010	0,012	0,045	0,050	0,050	0,060	1	0,592	0,063	-0,566	0,125	
LHKW	0,000	16,863	16,862	0,005	0,034	0,347	0,000	0,001	0,003	0,008	0,032	0,249	0,499	1533	0	27,827	0,063	793,402	0,125
Diuron	0,010	0,420	0,410	0,050	0,048	0,020	0,010	0,020	0,050	0,050	0,050	0,050	0,089	111	9,636	0,065	153,776	0,130	
Desethylatrazin	0,010	0,577	0,567	0,034	0,047	0,052	0,010	0,010	0,020	0,020	0,050	0,131	0,280	1	4,295	0,063	26,197	0,125	
Isoproturon	0,010	0,110	0,100	0,050	0,046	0,012	0,010	0,020	0,043	0,043	0,050	0,057	0,069	3	-0,863	0,063	3,252	0,125	
Bromacil	0,010	0,320	0,310	0,050	0,044	0,027	0,010	0,010	0,020	0,020	0,076	0,154	0,154	1	3,791	0,063	30,018	0,125	
Hexazinon	0,010	0,790	0,780	0,035	0,039	0,039	0,010	0,010	0,020	0,020	0,050	0,081	0,143	1	9,420	0,063	149,703	0,125	
Bentazon	0,010	1,400	1,390	0,050	0,045	0,071	0,010	0,010	0,020	0,020	0,050	0,050	0,179	1122	17,003	0,120	321,617	0,240	

Cluster 6	Minimum	Maximum	Spannweite	Median	Mittelwert	Stdabw.	N Gültig	Fehlend
LF	127,080	215,340	88,260	171,210	171,210	62,409	2	0
pH	7,014	7,126	0,112	7,070	7,070	0,079	2	0
Na	7,900	7,900	0,000	7,900	7,900	0,000	1	0
K	2,700	7,600	4,900	5,150	5,150	3,465	2	0
Ca	142,000	380,000	238,000	261,000	261,000	168,291	2	0
Mg	67,000	80,000	13,000	73,500	73,500	9,192	2	0
Pb	0,001	0,001	0,000	0,001	0,001	0,000	2	0
As	0,002	0,004	0,002	0,003	0,003	0,001	2	0
Cd	21,400	30,380	8,980	25,890	25,890	6,350	2	0
NO3	60,000	870,000	810,000	465,000	465,000	572,756	2	0
SO4	48,000	142,000	94,000	95,000	95,000	66,468	2	0
Cl	2,500	3,067	0,567	2,783	2,783	0,401	2	0
Trichlorethen	0,024	0,176	0,152	0,100	0,100	0,107	2	0
Tetrachlorethen	0,010	0,050	0,040	0,030	0,030	0,028	2	0
Atrazin	0,010	0,050	0,040	0,030	0,030	0,028	2	0
Simazin	0,010	0,050	0,040	0,030	0,030	0,028	2	0
LHKW	2,524	7,743	5,219	5,134	5,134	3,690	2	0
Diuron	0,050	0,050	0,000	0,050	0,050	0,000	2	0
Desethylatrazin	0,010	0,050	0,040	0,030	0,030	0,028	2	0
Isoproturon	0,035	0,035	0,000	0,035	0,035	0,000	2	0
Bromacil	0,010	0,050	0,040	0,030	0,030	0,028	2	0
Hexazinon	0,010	0,050	0,040	0,030	0,030	0,028	2	0
Bentazon	0,010	0,050	0,040	0,030	0,030	0,028	2	0

Anhang III: Tabellen D 1 - 2

Statistische Basisparameter für alle Messstellen des jeweiligen Clusters einer 7-Clusterlösung
K-means-Clustering nach Eliminierung der mittels Single-Linkage-Clustering ermittelten Ausreisser und Festlegung der Clusteranzahl mittels Ward-Clustering (gemittelte Werte über den Gesamtzeitraum für jede Messstelle)
 Alle Werte als reale Variablenwerte in [mg/l], lediglich LF in [mS/m] und Atrazin; Simazin; Diuron; Desethylatrazin; Isoproturon; Bromacil; Hexazinon und Bentazon in [µg/l]

Cluster 7	Perzentile										N Gültig	Fehlend	Schiefe	Stichfehler Schiefe	Kurtosis	Stichfehler Kurtosis	
	Minimum	Maximum	Spannweite	Median	Mittelwert	Stdabw.	1	5	25	75							95
LF	32,780	228,600	195,820	107,980	115,510	46,044	32,780	32,780	86,835	133,875	228,600	228,600	0	0,785	0,536	1,235	1,038
pH	6,828	7,214	0,386	7,088	7,075	0,116	6,828	6,828	6,986	7,181	7,214	7,214	18	-0,595	0,536	-0,543	1,038
Na	9,000	98,200	89,200	24,000	33,553	29,371	9,000	9,000	14,000	38,500	98,200	98,200	1	1,530	0,550	1,006	1,063
K	0,990	15,000	14,010	3,000	4,035	3,500	0,990	0,990	1,900	5,550	15,000	15,000	17	2,170	0,550	5,485	1,063
Ca	44,000	209,000	165,000	150,000	152,975	38,678	44,000	44,000	130,500	184,500	209,000	209,000	1	-1,156	0,550	2,930	1,063
Mg	13,000	77,800	64,800	31,000	34,820	17,339	13,000	13,000	20,867	44,500	77,800	77,800	1	0,946	0,550	0,935	1,063
Pb	0,001	0,004	0,004	0,001	0,001	0,001	0,001	0,001	0,001	0,001	0,004	0,004	16	2,818	0,564	7,715	1,091
As	0,001	0,019	0,019	0,002	0,004	0,005	0,001	0,001	0,001	0,004	0,019	0,019	2	2,985	0,564	9,899	1,091
Cd	0,500	86,680	86,180	32,575	32,233	21,063	0,500	0,500	15,550	45,009	86,680	86,680	0	0,762	0,536	1,251	1,038
NO3	8,000	280,000	272,000	143,000	139,000	84,430	8,000	8,000	72,500	196,000	280,000	280,000	1	0,049	0,550	-0,972	1,063
SO4	21,000	176,000	155,000	71,000	78,141	42,774	21,000	21,000	42,000	112,500	176,000	176,000	17	0,700	0,550	0,077	1,063
Cl	0,000	0,503	0,503	0,001	0,034	0,118	0,000	0,000	0,000	0,016	0,503	0,503	0	4,200	0,536	17,738	1,038
Tetrachloethen	0,000	0,813	0,813	0,000	0,113	0,228	0,000	0,000	0,000	0,092	0,813	0,813	18	2,381	0,536	5,157	1,038
Atrazin	0,010	0,273	0,263	0,070	0,093	0,075	0,010	0,010	0,050	0,128	0,273	0,273	17	1,422	0,550	1,420	1,063
Simazin	0,010	0,093	0,083	0,060	0,047	0,019	0,010	0,010	0,040	0,050	0,093	0,093	1	0,024	0,550	2,003	1,063
LHKW	0,002	6,571	6,569	0,015	0,456	1,540	0,002	0,002	0,007	0,102	6,571	6,571	18	4,124	0,936	17,246	1,038
Diuron	0,010	0,120	0,110	0,050	0,068	0,031	0,010	0,010	0,050	0,085	0,120	0,120	17	0,694	0,550	0,112	1,063
Desethylatrazin	0,010	0,657	0,647	0,080	0,147	0,158	0,010	0,010	0,050	0,223	0,657	0,657	1	2,302	0,550	6,471	1,063
Isoproturon	0,010	0,050	0,040	0,050	0,041	0,014	0,010	0,010	0,035	0,050	0,050	0,050	0	-1,489	0,536	0,935	1,038
Bromacil	0,360	1,247	0,887	0,637	0,706	0,277	0,360	0,360	0,505	0,843	1,247	1,247	1	0,917	0,550	-0,057	1,063
Hexazinon	0,010	0,867	0,857	0,157	0,232	0,214	0,010	0,010	0,092	0,313	0,867	0,867	1	1,930	0,550	4,057	1,063
Bentazon													18				

Anhang III: Tabellen D 2 - 1

F- und T-Werte der gebildeten Cluster bei Ward-Clustering nach Eliminierung

7er Lösung

F-Werte	Cluster 1	Cluster 2	Cluster 3	Cluster 4	Cluster 5	Cluster 6	Cluster 7
LF	0,37	0,79	1,44	0,65	2,10	0,27	0,09
pH	1,00	1,02	0,17	0,91	1,11	1,79	0,62
Na	0,34	0,66	1,43	0,50	2,64	0,16	0,19
K	0,83	1,46	0,31	0,53	0,85	0,53	0,12
Ca	0,32	0,92	0,37	0,72	1,85	0,50	0,16
Mg	0,79	1,00	1,23	0,72	1,43	0,39	0,56
Pb	0,86	1,70	0,23	0,63	0,25	1,29	0,00
As	0,10	0,58	0,95	2,10	0,57	0,03	0,15
Cd	0,04	0,22	0,00	0,01	2,46	0,01	0,00
NO3	1,13	0,86	0,49	0,85	1,42	1,51	0,89
SO4	0,12	1,02	0,44	0,71	1,70	0,09	0,04
Cl	0,30	0,39	0,73	0,25	3,61	0,12	0,12
Trichlorethen	0,14	0,20	1,16	0,01	4,50	0,00	0,00
Tetrachlorethen	9,80	0,43	5,96	0,03	0,14	0,00	9,42
Atrazin	1,48	0,03	0,90	0,08	0,04	0,15	17,94
Simazin	1,02	0,22	0,71	0,07	0,11	7,88	2,17
LHKW	11,93	0,02	6,15	0,00	0,59	0,00	0,20
Diuron	0,29	1,59	2,32	0,04	0,51	0,71	0,35
Desethylatrazin	2,02	0,06	3,78	0,09	0,11	0,04	17,55
Isoproturon	0,40	0,18	1,14	0,90	0,72	0,21	0,60
Bromacil	0,71	0,09	19,45	0,04	0,06	0,04	1,58
Hexazinon	0,30	0,17	38,66	0,03	0,08	0,10	11,33
Bentazon	0,00	0,06	0,00	2,71	0,31	0,02	0,48

Grundgesamtheit 1464 Mst.

t-Werte	Cluster 1	Cluster 2	Cluster 3	Cluster 4	Cluster 5	Cluster 6	Cluster 7
LF	-0,13	-0,01	0,85	-0,11	0,19	-0,18	-0,21
pH	-0,07	0,02	-0,23	0,09	-0,16	0,33	0,12
Na	-0,16	-0,01	0,77	-0,10	0,17	-0,06	-0,09
K	-0,04	0,02	0,16	-0,08	0,07	0,22	-0,15
Ca	-0,08	-0,02	0,43	-0,08	0,17	-0,17	-0,28
Mg	-0,25	0,01	0,67	-0,06	0,11	-0,09	0,01
Pb	-0,06	0,02	-0,03	0,00	-0,02	0,53	-0,21
As	-0,13	0,00	0,41	0,03	-0,02	-0,15	-0,04
Cd	-0,08	-0,03	-0,26	-0,19	0,14	-0,13	-0,07
NO3	0,46	-0,04	-0,21	-0,09	0,06	0,15	0,47
SO4	-0,23	0,01	0,40	-0,10	0,20	-0,22	-0,29
Cl	0,00	-0,02	0,73	-0,13	0,21	-0,23	-0,16
Trichlorethen	0,01	-0,02	0,23	-0,06	0,11	-0,07	-0,06
Tetrachlorethen	0,41	-0,01	0,85	-0,08	-0,08	-0,12	0,97
Atrazin	1,11	0,01	0,45	-0,26	-0,33	-0,03	10,79
Simazin	0,31	0,60	0,48	-0,62	-0,68	8,89	0,98
LHKW	0,45	-0,04	0,61	-0,06	-0,01	-0,07	0,09
Diuron	0,21	0,29	0,78	0,07	-0,82	0,10	0,05
Desethylatrazin	1,98	-0,07	0,84	-0,27	-0,38	-0,21	7,98
Isoproturon	0,39	0,17	-0,18	0,57	-1,33	0,14	0,07
Bromacil	0,18	0,05	7,10	-0,20	-0,31	-0,05	0,65
Hexazinon	0,05	0,20	4,89	-0,29	-0,36	-0,06	1,85
Bentazon	0,05	0,02	0,02	0,07	-0,22	-0,04	0,54

Grundgesamtheit 1464 Mst.

Anhang III: Tabellen D 2 - 1

F- und T-Werte der gebildeten Cluster bei Ward-Clustering nach Eliminierung

5er Lösung

F-Werte	Cluster 1	Cluster 2	Cluster 3	Cluster 4	Cluster 5
LF	0,73	1,44	0,65	2,10	0,09
pH	1,02	0,17	0,91	1,11	0,62
Na	0,61	1,43	0,50	2,64	0,19
K	1,36	0,31	0,53	0,85	0,12
Ca	0,83	0,37	0,72	1,85	0,16
Mg	0,98	1,23	0,72	1,43	0,56
Pb	1,58	0,23	0,63	0,25	0,00
As	0,51	0,95	2,10	0,57	0,15
Cd	0,20	0,00	0,01	2,46	0,00
NO3	0,93	0,49	0,85	1,42	0,89
SO4	0,90	0,44	0,71	1,70	0,04
Cl	0,37	0,73	0,25	3,61	0,12
Trichlorethen	0,19	1,16	0,01	4,50	0,00
Tetrachlorethen	1,71	5,96	0,03	0,14	9,42
Atrazin	0,37	0,90	0,08	0,04	17,94
Simazin	1,08	0,71	0,07	0,11	2,17
LHKW	1,66	6,15	0,00	0,59	0,20
Diuron	1,40	2,32	0,04	0,51	0,35
Desethylatrazin	0,82	3,78	0,09	0,11	17,55
Isoproturon	0,21	1,14	0,90	0,72	0,60
Bromacil	0,18	19,45	0,04	0,06	1,58
Hexazinon	0,19	38,66	0,03	0,08	11,33
Bentazon	0,05	0,00	2,71	0,31	0,48

Grundgesamtheit 1464 Mst.

t-Werte	Cluster 1	Cluster 2	Cluster 3	Cluster 4	Cluster 5
LF	-0,03	0,85	-0,11	0,19	-0,21
pH	0,01	-0,23	0,09	-0,16	0,12
Na	-0,03	0,77	-0,10	0,17	-0,09
K	0,01	0,16	-0,08	0,07	-0,15
Ca	-0,03	0,43	-0,08	0,17	-0,28
Mg	-0,02	0,67	-0,06	0,11	0,01
Pb	0,01	-0,03	0,00	-0,02	-0,21
As	-0,02	0,41	0,03	-0,02	-0,04
Cd	-0,04	-0,26	-0,19	0,14	-0,07
NO3	0,03	-0,21	-0,09	0,06	0,47
SO4	-0,03	0,40	-0,10	0,20	-0,29
Cl	-0,02	0,73	-0,13	0,21	-0,16
Trichlorethen	-0,02	0,23	-0,06	0,11	-0,06
Tetrachlorethen	0,05	0,85	-0,08	-0,08	0,97
Atrazin	0,16	0,45	-0,26	-0,33	10,79
Simazin	0,64	0,48	-0,62	-0,68	0,98
LHKW	0,02	0,61	-0,06	-0,01	0,09
Diuron	0,27	0,78	0,07	-0,82	0,05
Desethylatrazin	0,21	0,84	-0,27	-0,38	7,98
Isoproturon	0,20	-0,18	0,57	-1,33	0,07
Bromacil	0,06	7,10	-0,20	-0,31	0,65
Hexazinon	0,18	4,89	-0,29	-0,36	1,85
Bentazon	0,03	0,03	0,07	-0,22	0,54

Grundgesamtheit 1464 Mst.

Anhang III: Tabellen D 2 - 2

F- und T-Werte der gebildeten Cluster K-means

7er Lösung

F-Werte	Cluster 1	Cluster 2	Cluster 3	Cluster 4	Cluster 5	Cluster 6	Cluster 7
LF	0,51	0,34	0,13	1,50	1,10	k.B.	1,45
pH	1,03	2,03	0,53	3,15	1,49	k.B.	0,17
Na	0,07	0,12	0,16	0,33	1,03	k.B.	1,26
K	0,49	0,43	2,52	0,13	0,95	k.B.	0,25
Ca	0,29	0,54	0,17	0,41	1,06	k.B.	0,34
Mg	0,61	0,42	0,64	1,68	1,01	k.B.	1,22
Pb	0,13	1,08	0,00	0,01	1,16	k.B.	0,23
As	0,98	0,02	0,13	0,88	1,08	k.B.	0,80
Cd	0,00	0,01	0,00	0,00	0,78	k.B.	0,00
NO3	0,21	1,24	0,83	3,75	0,98	k.B.	0,67
SO4	0,40	0,07	0,03	0,14	0,98	k.B.	0,30
Cl	0,07	0,09	0,10	0,17	1,04	k.B.	0,60
Trichlorethen	0,00	0,00	0,00	0,00	0,09	k.B.	1,16
Tetrachlorethen	0,00	0,53	6,28	0,00	0,82	k.B.	6,29
Atrazin	0,00	0,40	22,59	0,00	0,23	k.B.	0,91
Simazin	0,05	9,77	1,74	0,00	0,55	k.B.	0,79
LHKW	0,00	0,01	0,13	0,00	0,77	k.B.	6,11
Diuron	0,00	1,76	0,23	0,00	0,98	k.B.	2,37
Desethylatrazin	0,03	0,27	13,93	0,00	0,42	k.B.	3,84
Isoproturon	17,30	0,18	0,40	0,00	0,86	k.B.	1,32
Bromacil	0,02	0,05	1,09	0,00	0,11	k.B.	11,52
Hexazinon	0,07	0,18	8,02	0,00	0,32	k.B.	9,70
Bentazon	0,01	0,02	0,19	0,00	0,99	k.B.	0,00

Grundgesamtheit 1464 Mst.

k.B. = keine Berechnung möglich

t-Werte	Cluster 1	Cluster 2	Cluster 3	Cluster 4	Cluster 5	Cluster 6	Cluster 7
LF	0,51	-0,36	-0,18	0,16	-0,06	2,36	0,91
pH	-0,10	-0,07	0,13	-0,35	-0,03	-0,28	-0,26
Na	-0,07	-0,05	-0,19	-0,17	-0,02	-0,37	0,61
K	0,18	0,13	0,25	-0,09	-0,02	0,21	0,05
Ca	0,24	-0,37	-0,15	0,11	-0,06	2,04	0,41
Mg	-0,47	-0,27	-0,19	0,70	-0,03	3,32	0,85
Pb	0,07	0,36	-0,22	-0,18	0,00	-0,23	-0,04
As	0,38	-0,15	-0,06	0,24	0,00	0,16	0,30
Cd	-0,26	-0,13	-0,07	-0,26	-0,07	-0,46	-0,46
NO3	-0,65	-0,02	0,45	-0,05	-0,06	-0,16	0,09
SO4	-0,02	-0,26	-0,30	-0,03	-0,02	2,44	0,33
Cl	0,09	-0,20	-0,18	-0,18	-0,03	1,04	0,73
Trichlorethen	-0,07	-0,06	-0,06	-0,07	-0,04	25,39	0,24
Tetrachlorethen	-0,11	0,12	0,60	-0,12	-0,02	0,98	1,12
Atrazin	-0,39	0,21	8,57	-0,43	-0,09	-0,18	0,62
Simazin	-0,78	7,89	0,66	-0,89	-0,08	0,03	0,79
LHKW	-0,07	-0,04	0,04	-0,07	-0,02	8,16	0,66
Diuron	0,07	0,47	0,07	0,11	-0,01	0,11	0,91
Desethylatrazin	-0,43	0,00	7,02	-0,31	-0,09	-0,31	1,15
Isoproturon	10,78	0,16	0,15	0,31	-0,03	-0,90	-0,38
Bromacil	-0,14	0,00	0,46	-0,04	-0,11	-0,29	8,02
Hexazinon	0,04	0,11	1,26	24,75	-0,07	-0,21	2,73
Bentazon	-0,02	-0,04	0,25	-0,64	-0,01	-0,64	-0,64

Grundgesamtheit 1464 Mst.

Anhang III: Tabellen D 2 - 2

F- und T-Werte der gebildeten Cluster K-means

5er Lösung

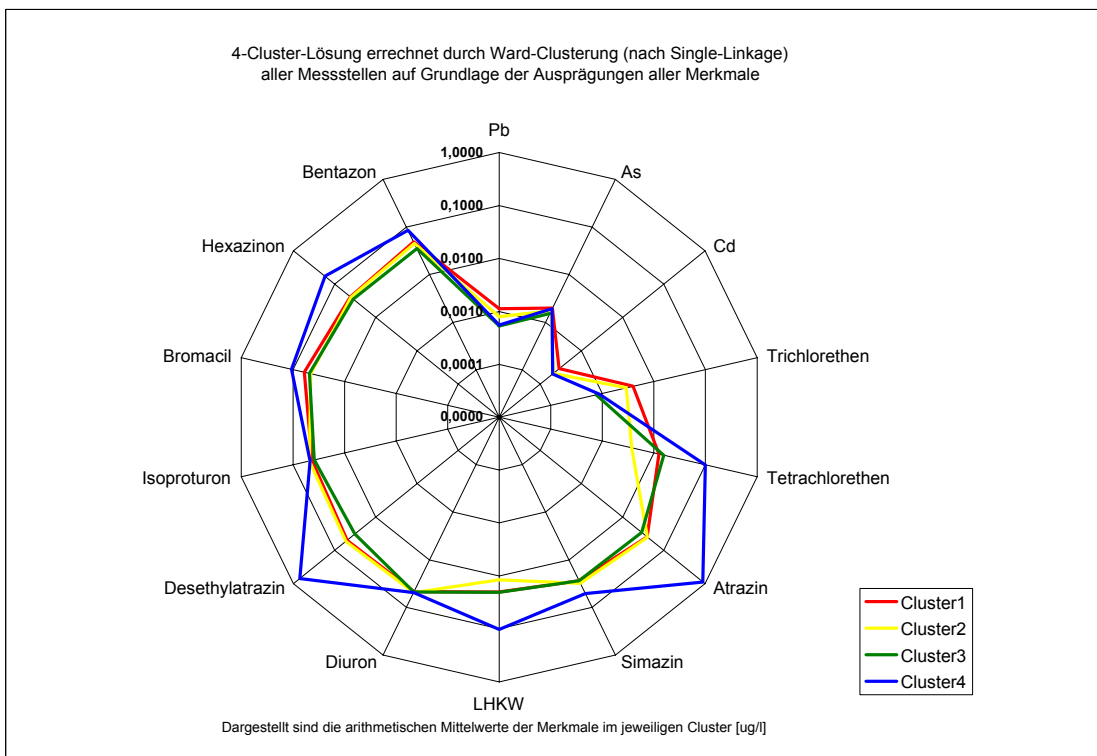
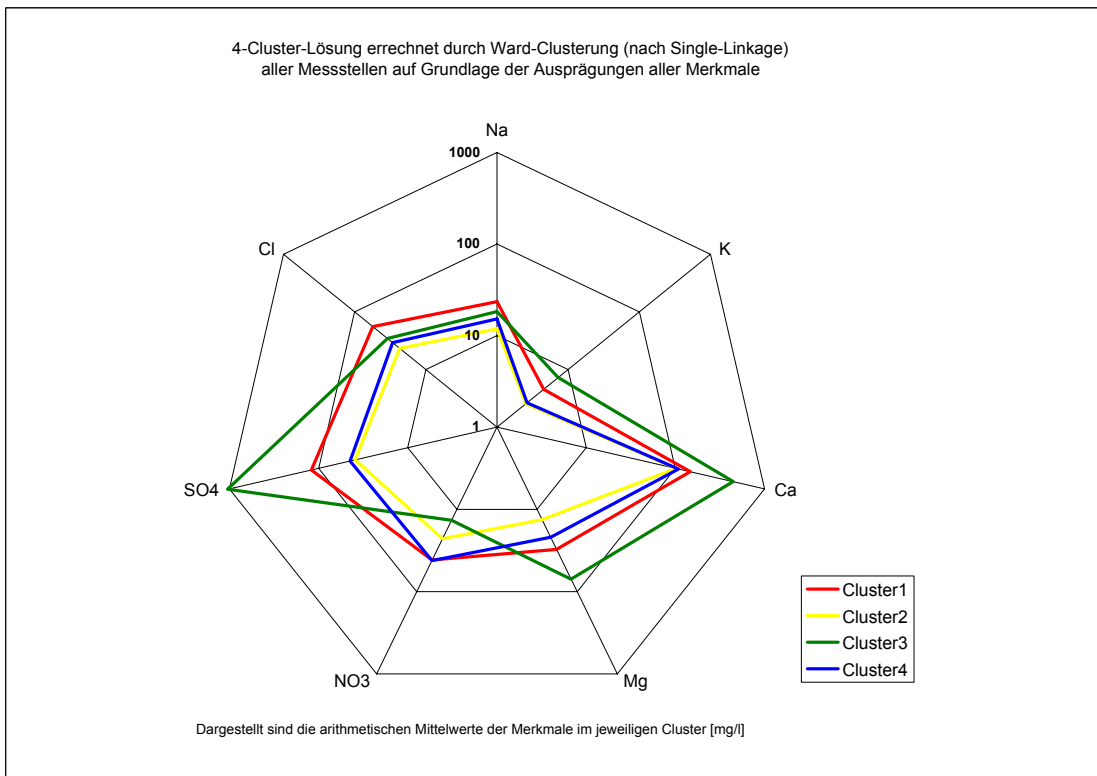
F-Werte	Cluster 1	Cluster 2	Cluster 3	Cluster 4	Cluster5
LF	0,34	0,13	1,50	0,55	1,12
pH	2,03	0,53	3,15	1,10	1,48
Na	0,12	0,16	0,33	0,07	1,03
K	0,43	2,52	0,13	0,49	0,94
Ca	0,54	0,17	0,41	0,30	1,07
Mg	0,42	0,64	1,68	0,46	1,03
Pb	1,08	0,00	0,01	0,28	1,15
As	0,02	0,13	0,88	0,83	1,08
Cd	0,01	0,00	0,00	0,00	0,78
NO3	1,24	0,83	3,75	0,39	0,98
SO4	0,07	0,03	0,14	0,40	0,99
Cl	0,09	0,10	0,17	0,07	1,04
Trichlorethen	0,00	0,00	0,00	0,00	0,95
Tetrachlorethen	0,53	6,28	0,00	0,00	0,90
Atrazin	0,40	22,59	0,00	0,00	0,24
Simazin	9,77	1,74	0,00	0,05	0,56
LHKW	0,01	0,13	0,00	0,00	0,94
Diuron	1,76	0,23	0,00	0,00	1,00
Desethylatrazin	0,27	13,93	0,00	0,03	0,47
Isoproturon	0,18	0,40	0,00	17,30	0,87
Bromacil	0,05	1,09	0,00	0,02	0,94
Hexazinon	0,18	8,02	0,00	0,07	0,50
Bentazon	0,02	0,19	0,00	0,01	0,99

Grundgesamtheit 1464 Mst.

t-Werte	Cluster 1	Cluster 2	Cluster 3	Cluster 4	Cluster5
LF	-0,36	-0,18	0,16	0,33	-0,04
pH	-0,07	0,13	-0,35	0,11	-0,03
Na	-0,05	-0,19	-0,17	-0,07	-0,01
K	0,13	0,25	-0,09	0,18	-0,02
Ca	-0,37	-0,15	0,11	0,11	-0,05
Mg	-0,27	-0,19	0,70	-0,45	-0,02
Pb	0,36	-0,22	-0,18	0,24	0,00
As	-0,15	-0,06	0,24	0,30	0,00
Cd	-0,13	-0,07	-0,26	-0,26	-0,07
NO3	-0,02	0,45	-0,05	-0,45	-0,06
SO4	-0,26	-0,30	-0,03	-0,02	-0,01
Cl	-0,20	-0,18	-0,18	0,09	-0,02
Trichlorethen	-0,06	-0,06	-0,07	-0,07	0,00
Tetrachlorethen	0,12	0,60	-0,12	-0,09	-0,01
Atrazin	0,21	8,57	-0,43	-0,39	-0,08
Simazin	7,89	0,66	-0,89	-0,78	-0,07
LHKW	-0,04	0,04	-0,07	-0,07	0,00
Diuron	0,47	0,07	0,11	0,07	0,00
Desethylatrazin	0,00	7,02	-0,31	-0,43	-0,08
Isoproturon	0,16	0,15	0,31	10,78	-0,03
Bromacil	0,00	0,46	-0,04	-0,14	-0,02
Hexazinon	0,11	1,26	24,75	0,04	-0,04
Bentazon	-0,04	0,25	-0,64	-0,02	-0,01

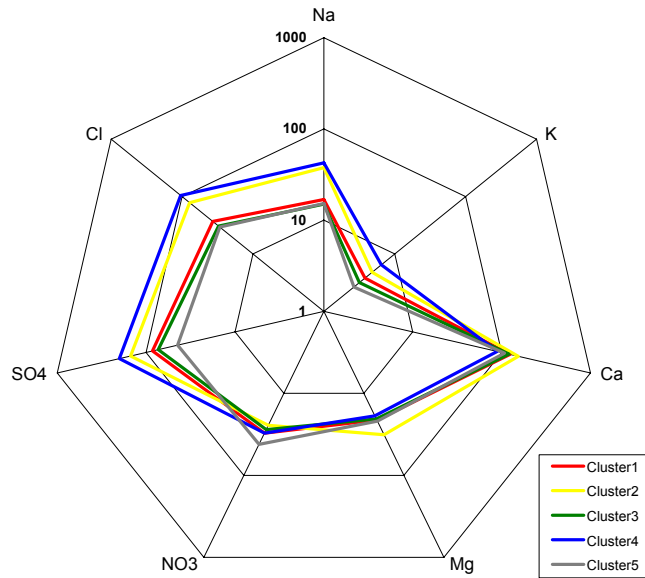
Grundgesamtheit 1464 Mst.

Anhang IV: Diagramme A 2



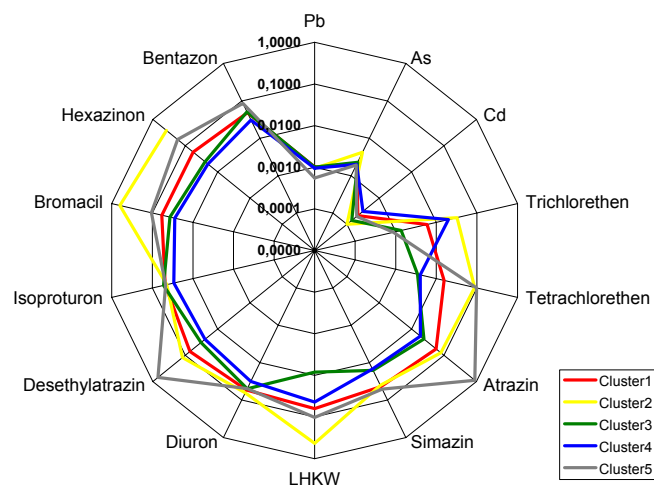
Anhang IV: Diagramme B 1

5-Cluster-Lösung errechnet durch Ward-Clustering aller Messstellen aufgrund der anthropogen beeinflussten Parameter



Dargestellt sind die arithmetischen Mittelwerte der Merkmale im jeweiligen Cluster [mg/l]

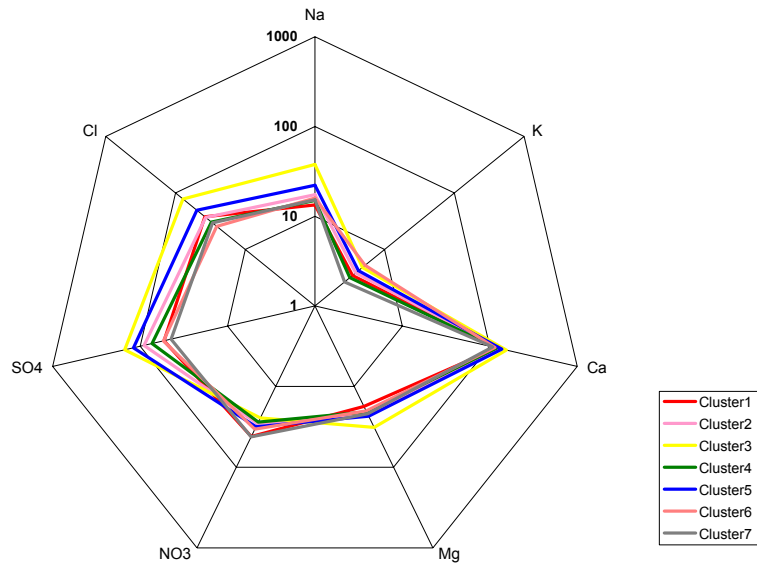
5-Cluster-Lösung errechnet durch Ward-Clustering aller Messstellen aufgrund der anthropogen beeinflussten Parameter



Dargestellt sind die arithmetischen Mittelwerte der Merkmale im jeweiligen Cluster [µg/l]

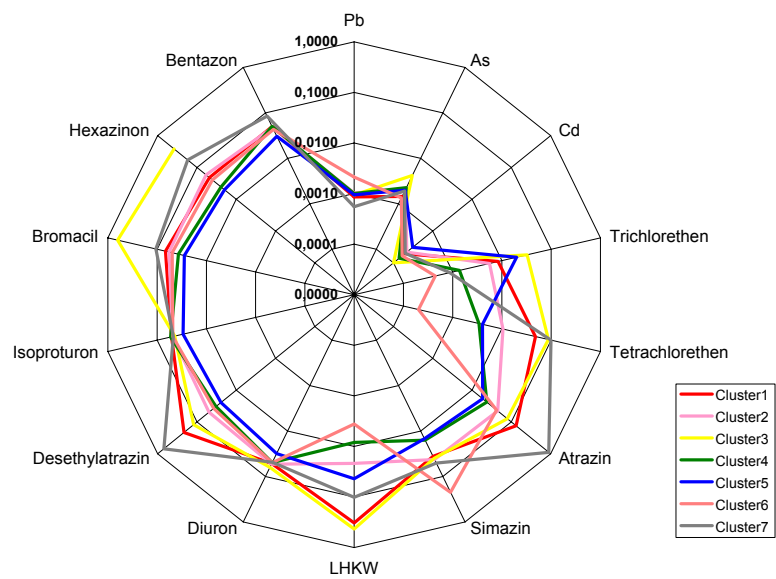
Anhang IV: Diagramme B 1

7-Cluster-Lösung errechnet durch Ward-Clustering aller Messstellen aufgrund der anthropogen beeinflussten Parameter



Dargestellt sind die arithmetischen Mittelwerte der Merkmale im jeweiligen Cluster [mg/l]

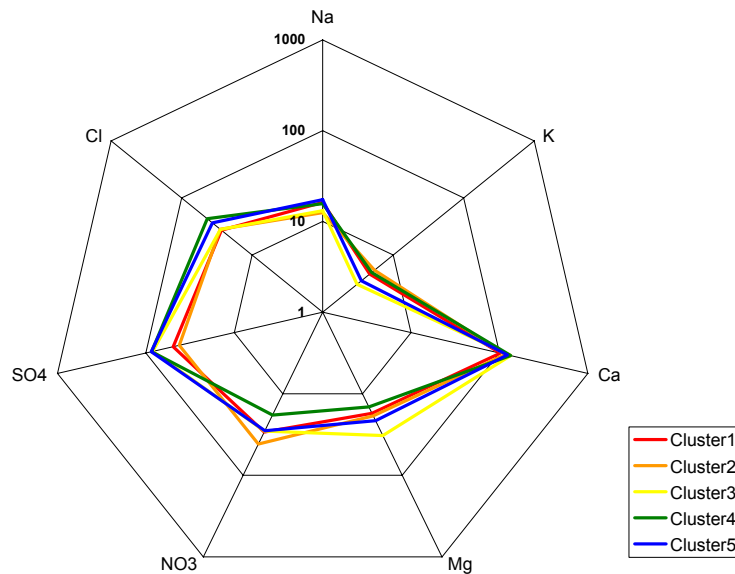
7-Cluster-Lösung errechnet durch Ward-Clustering aller Messstellen aufgrund der anthropogen beeinflussten Parameter



Dargestellt sind die arithmetischen Mittelwerte der Merkmale im jeweiligen Cluster [ug/l]

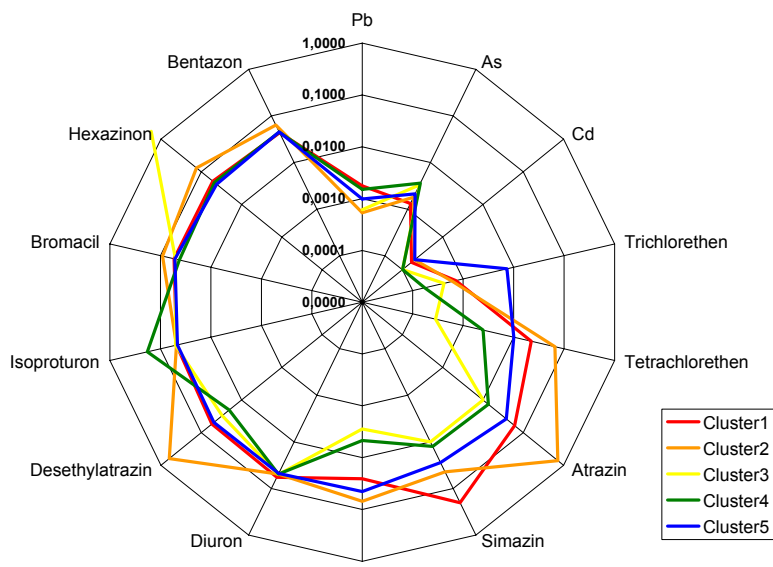
Anhang IV: Diagramme B 2

5-Cluster-Lösung errechnet durch k-means-Clustering aller Messstellen aufgrund der anthropogen beeinflussten Parameter



Dargestellt sind die arithmetischen Mittelwerte der Merkmale im jeweiligen Cluster [mg/l]

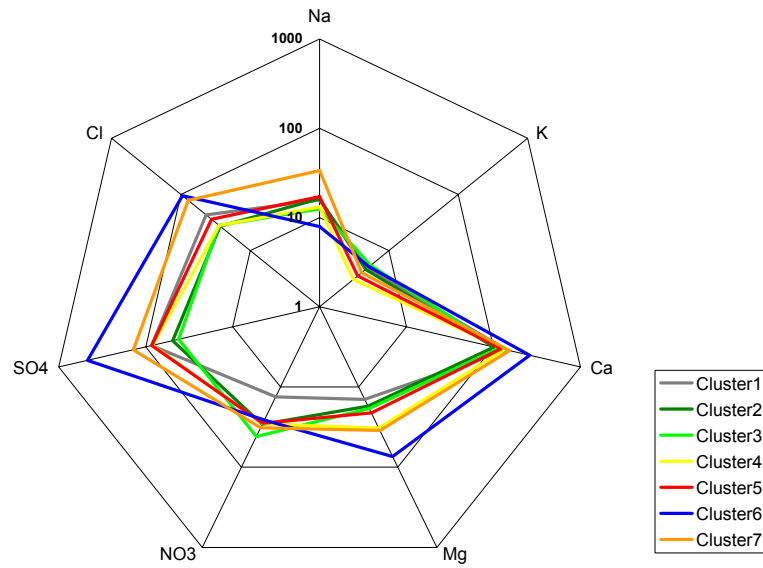
5-Cluster-Lösung errechnet durch k-means-Clustering aller Messstellen aufgrund der anthropogen beeinflussten Parameter



Dargestellt sind die arithmetischen Mittelwerte der Merkmale im jeweiligen Cluster [µg/l]

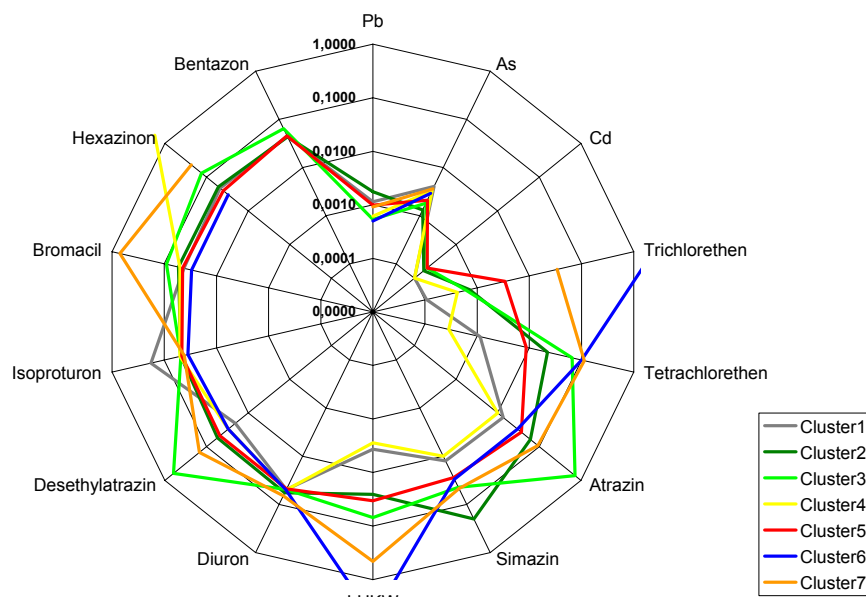
Anhang IV: Diagramme B 2

7-Cluster-Lösung errechnet durch k-means-Clustering aller Messstellen aufgrund der anthropogen beeinflussten Parameter



Dargestellt sind die arithmetischen Mittelwerte der Merkmale im jeweiligen Cluster [mg/l]

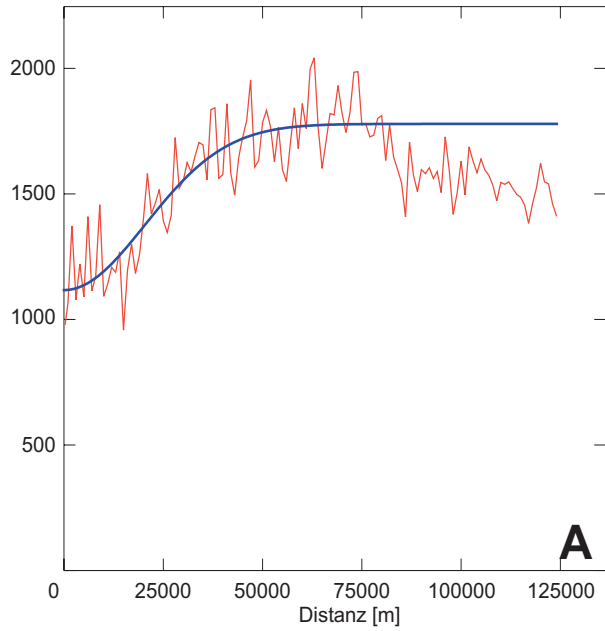
7-Cluster-Lösung errechnet durch k-means-Clustering aller Messstellen aufgrund der anthropogen beeinflussten Parameter



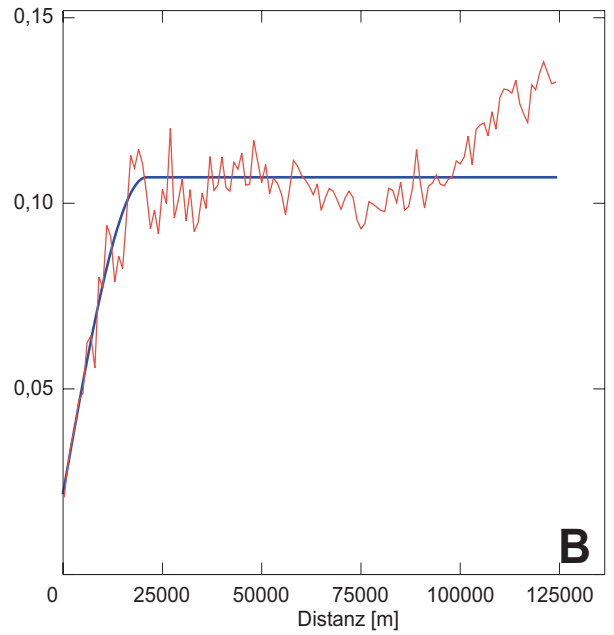
Dargestellt sind die arithmetischen Mittelwerte der Merkmale im jeweiligen Cluster [ug/l]

Anhang V: Variogramme A 1

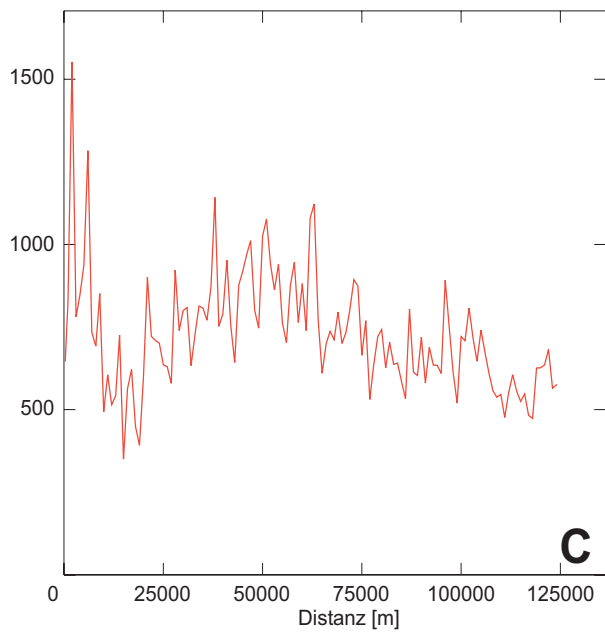
Experimentelle omnidirektionale Variogramme und angepasste Variogrammodelle



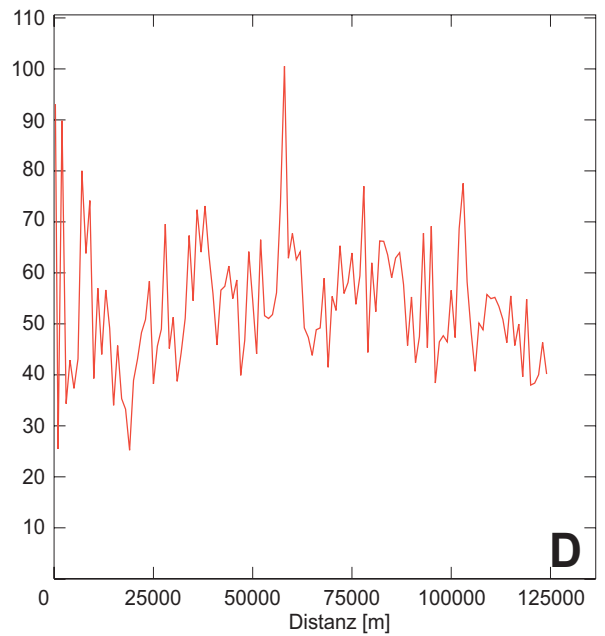
Leitfähigkeit



pH



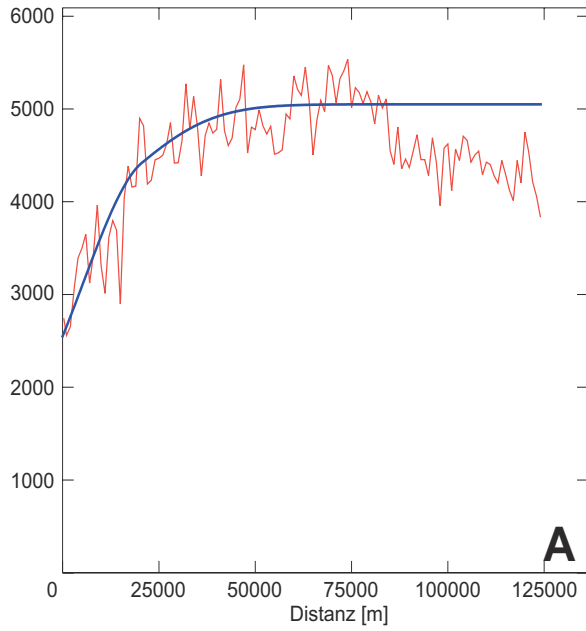
Natrium



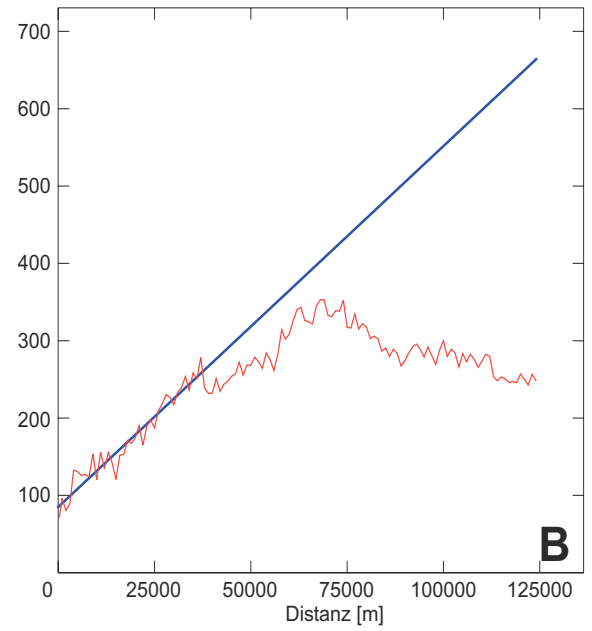
Kalium

Anhang V: Variogramme A 1

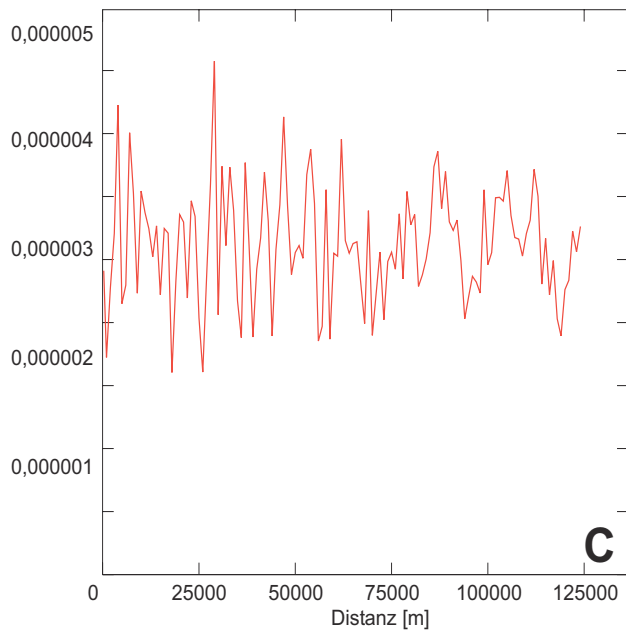
Experimentelle omnidirektionale Variogramme und angepasste Variogrammmodelle



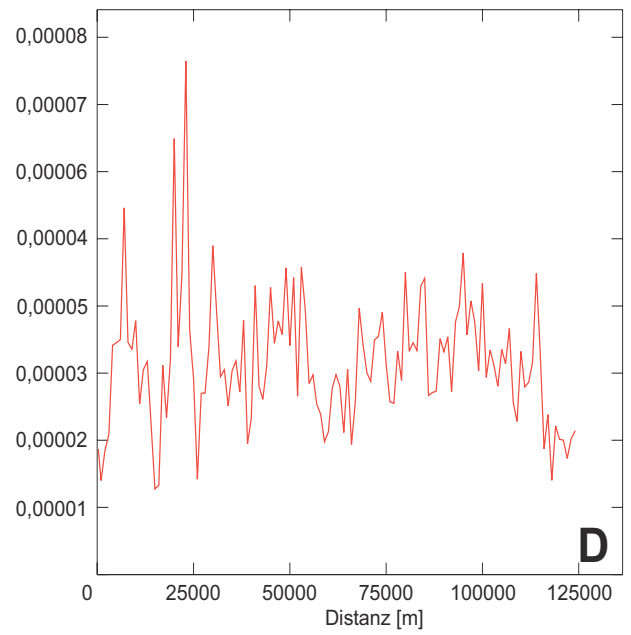
Calcium



Magnesium



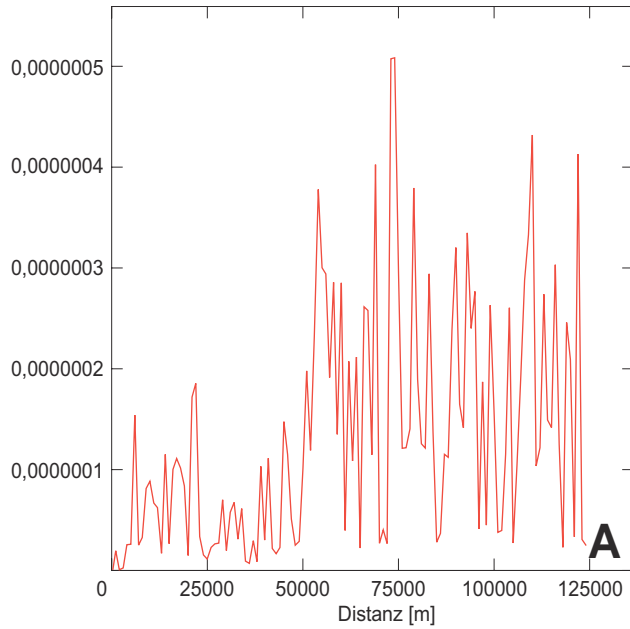
Blei



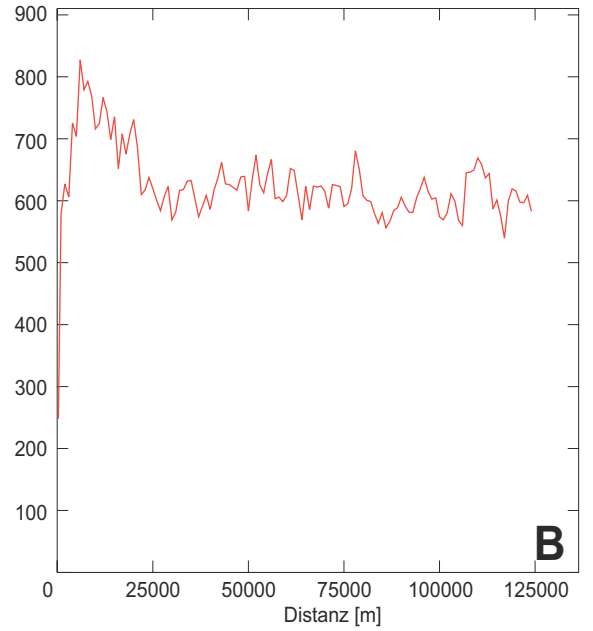
Arsen

Anhang V: Variogramme A 1

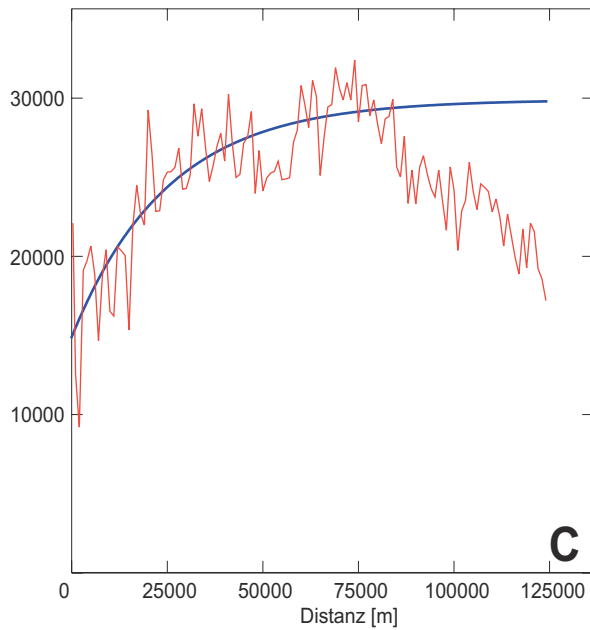
Experimentelle omnidirektionale Variogramme und angepasste Variogrammmodelle



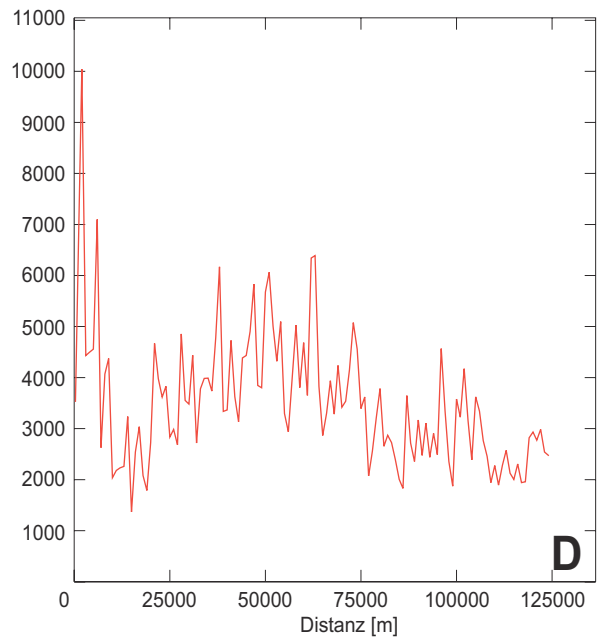
Cadmium



Nitrat



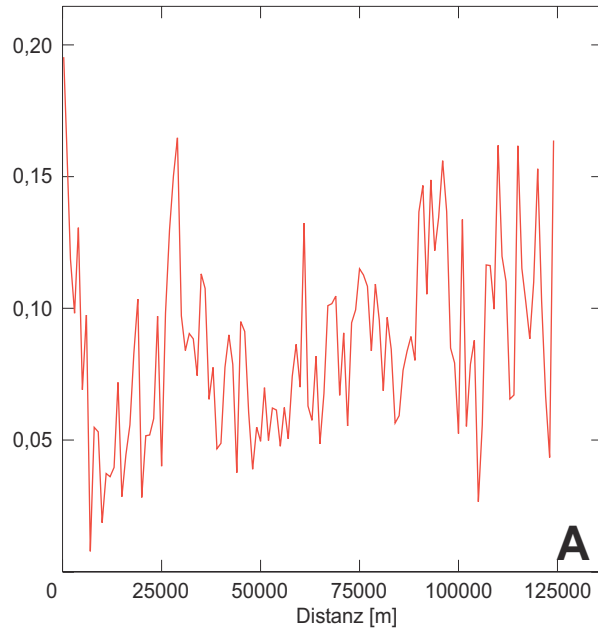
Sulfat



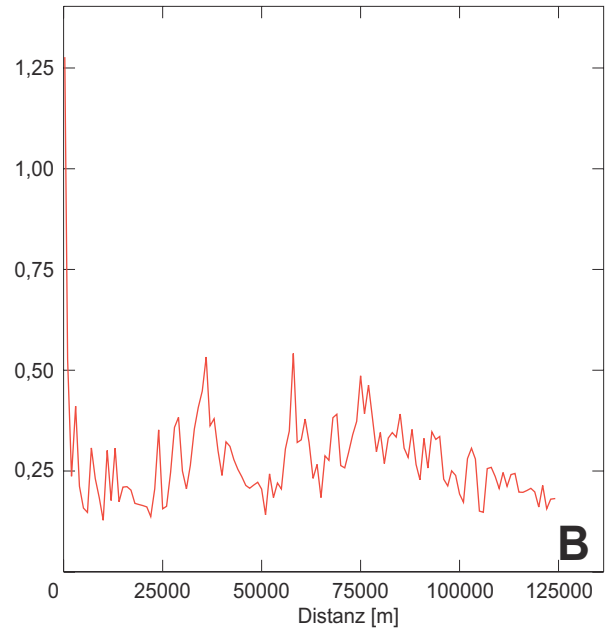
Chlor

Anhang V: Variogramme A 1

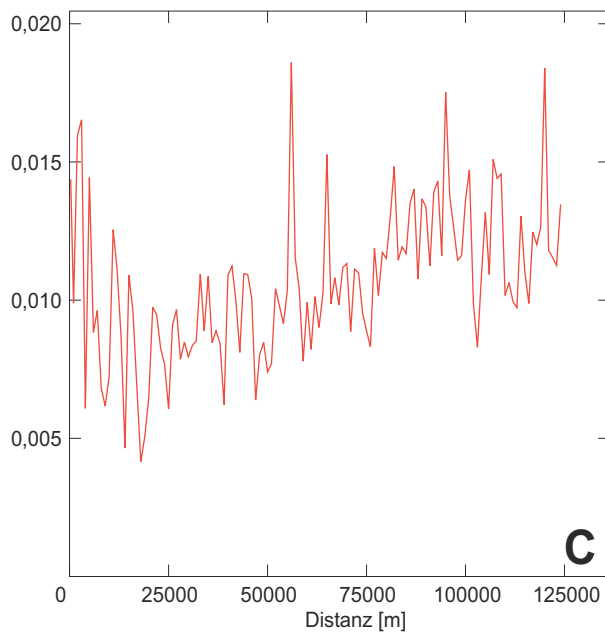
Experimentelle omnidirektionale Variogramme und angepasste Variogrammmodelle



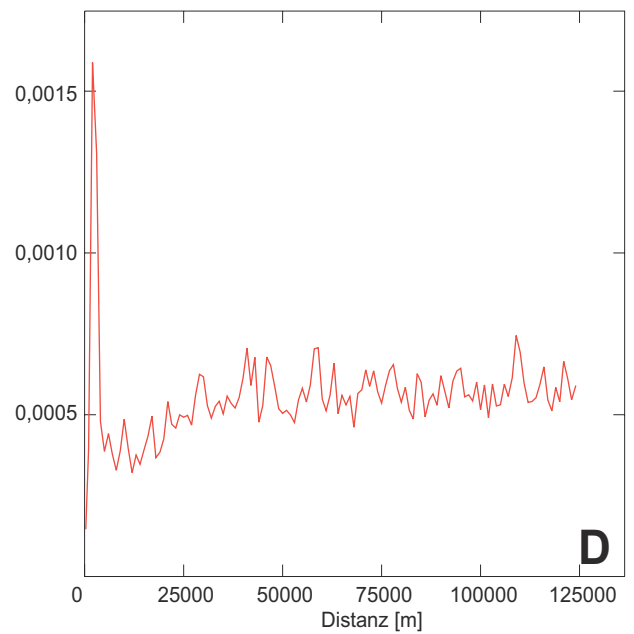
Trichlorethen



Tetrachlorethen



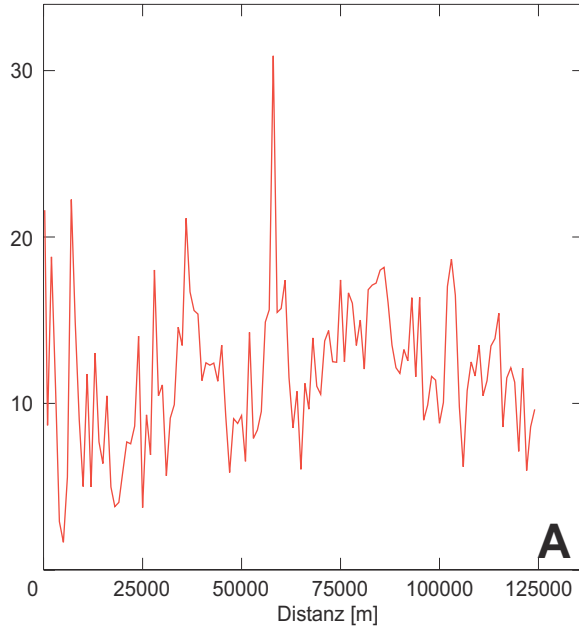
Atrazin



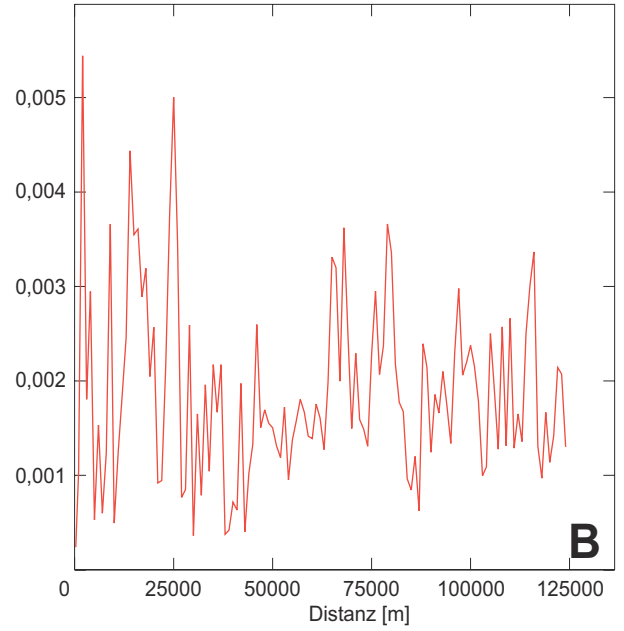
Simazin

Anhang V: Variogramme A 1

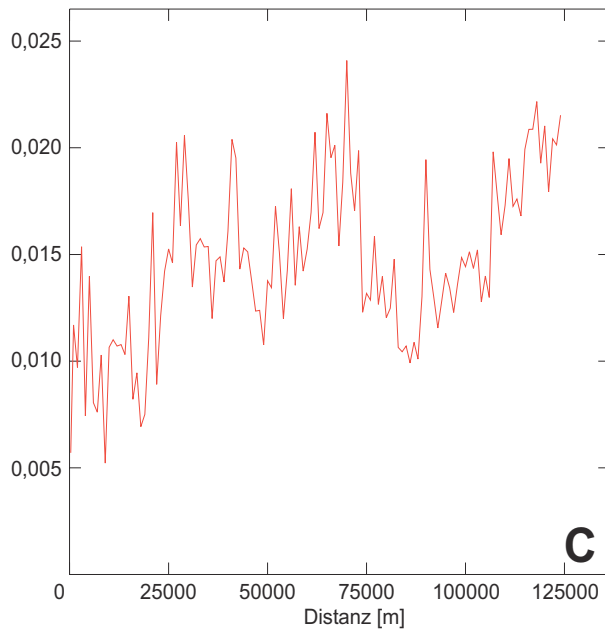
Experimentelle omnidirektionale Variogramme und angepasste Variogrammodelle



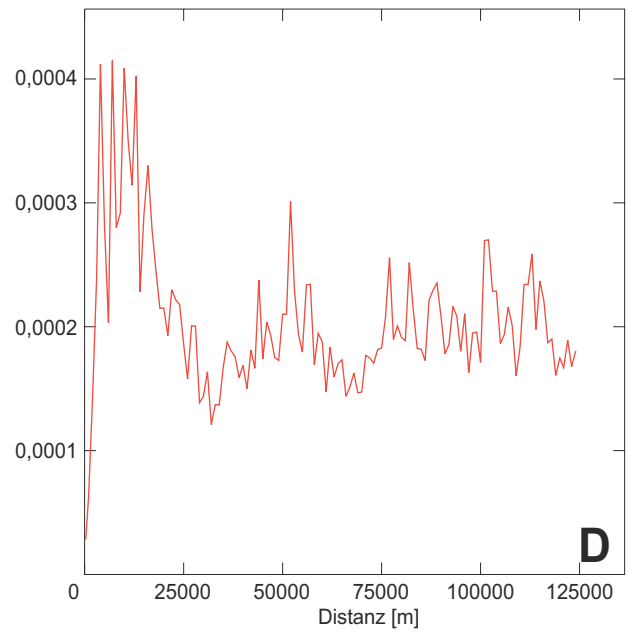
LHKW



Diuron



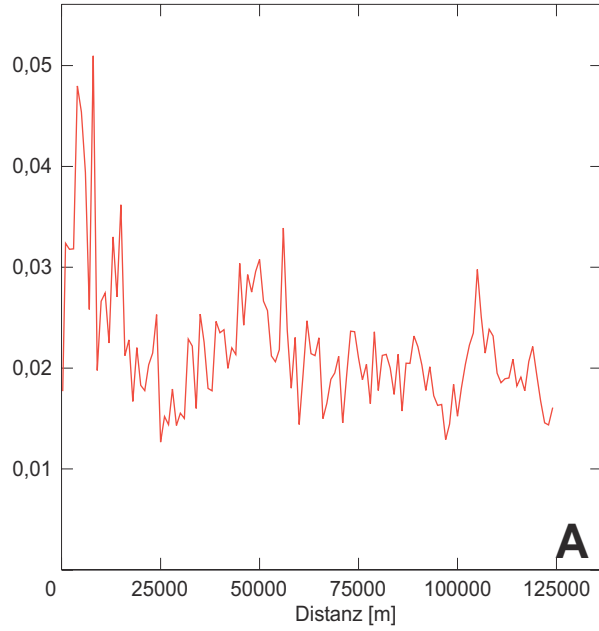
Desethylatrazin



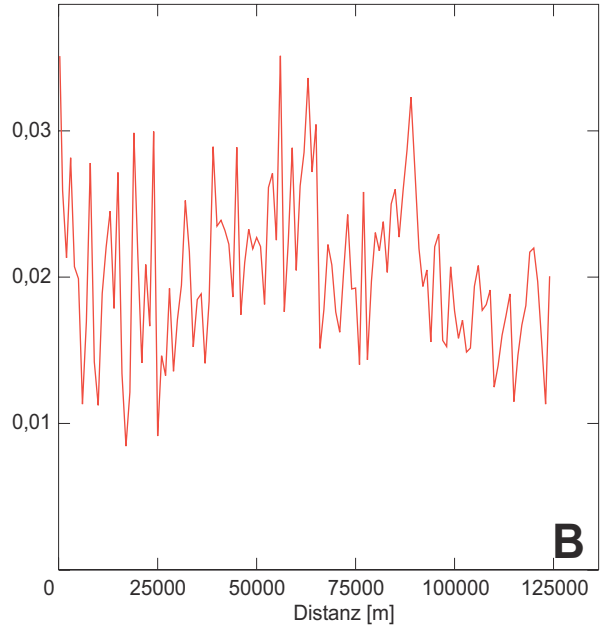
Isoproturon

Anhang V: Variogramme A 1

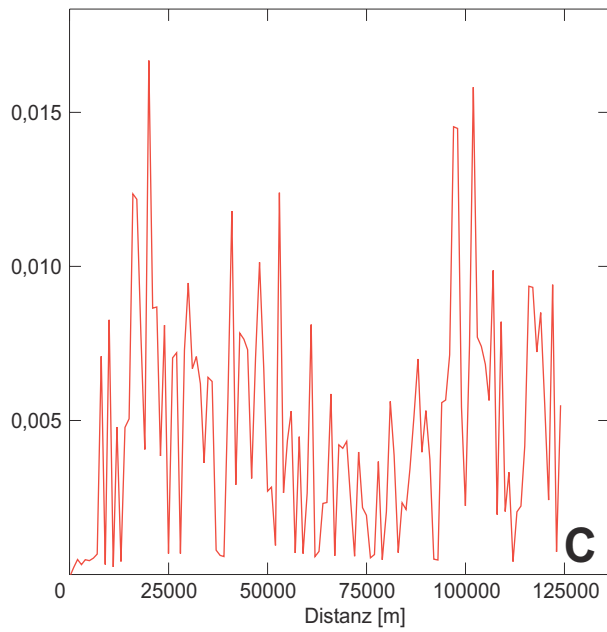
Experimentelle omnidirektionale Variogramme und angepasste Variogrammmodelle



Bromacil



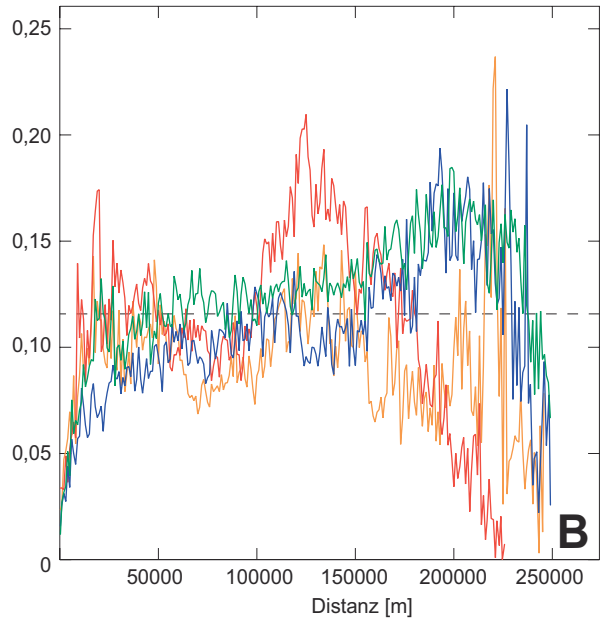
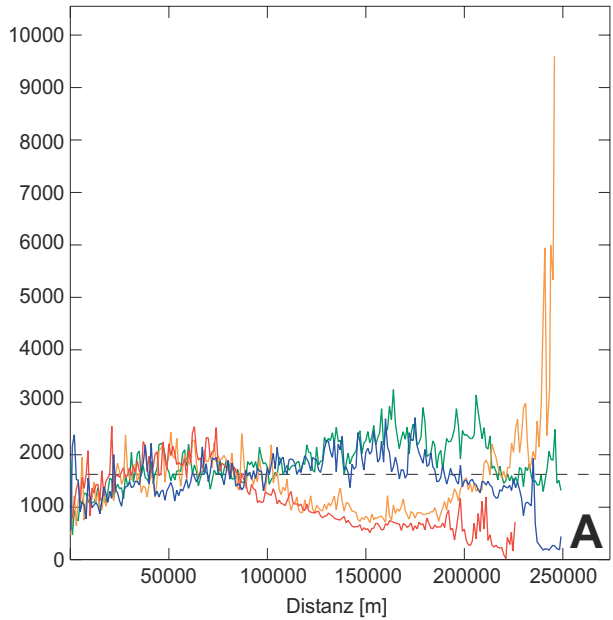
Hexazinon



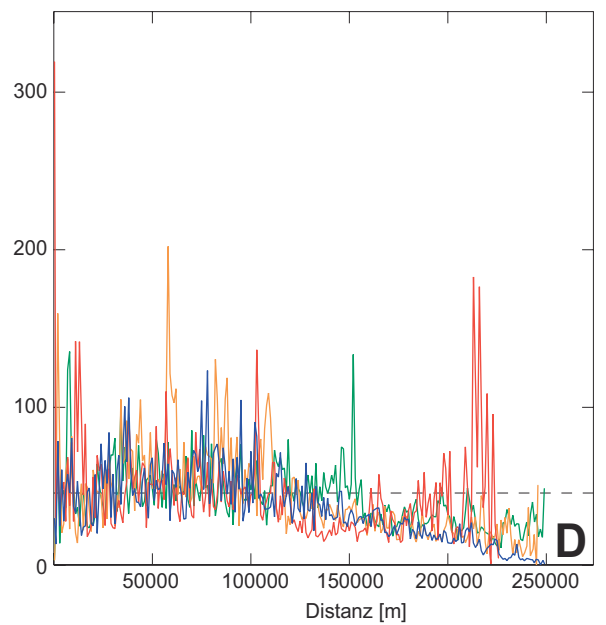
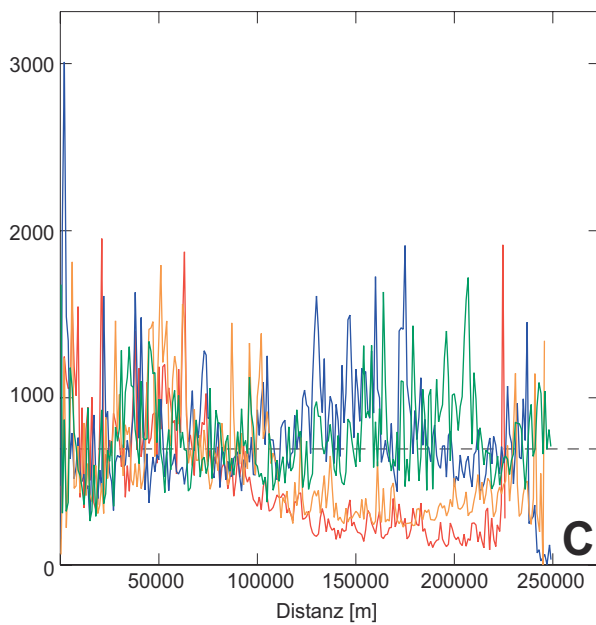
Bentazon

Anhang V: Variogramme A 2

Experimentelle gerichtete Variogramme

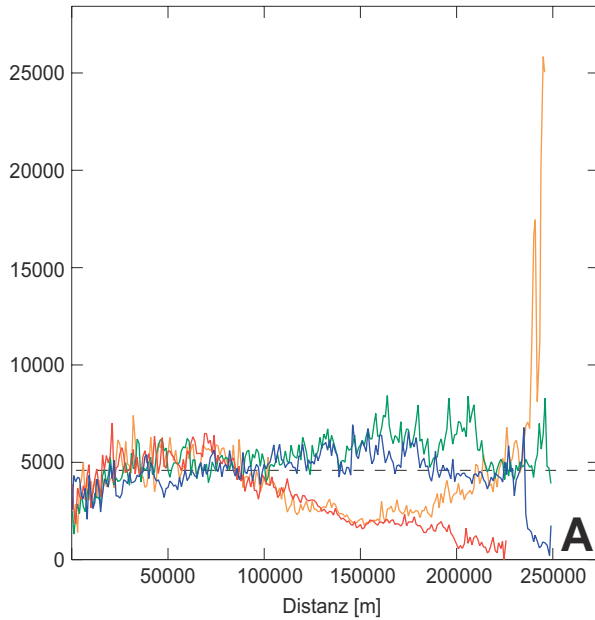


Richtungen:
(1) N - S (0°)
(2) NO - SW (45°)
(3) W - O (90°)
(4) NW - SO (135°)

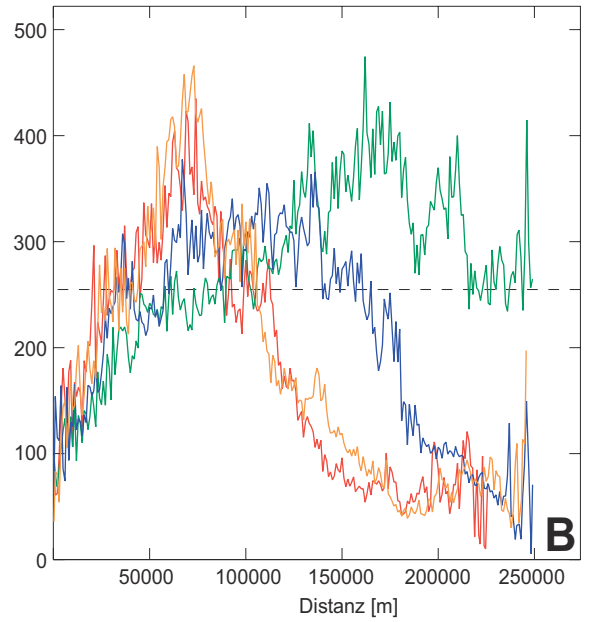


Anhang V: Variogramme A 2

Experimentelle gerichtete Variogramme

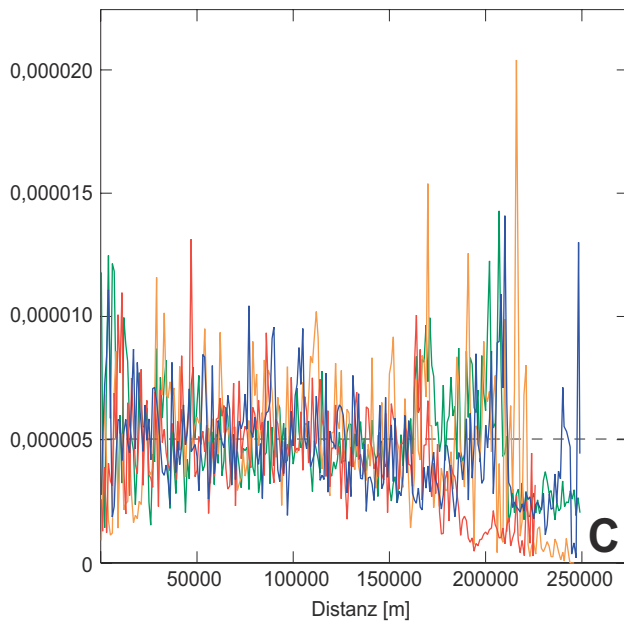


Calcium

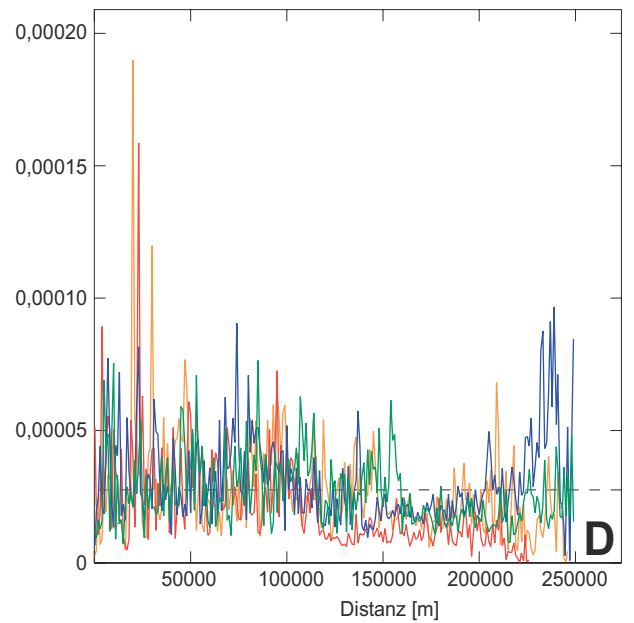


Magnesium

Richtungen:
(1) N - S (0°)
(2) NO - SW (45°)
(3) W - O (90°)
(4) NW - SO (135°)



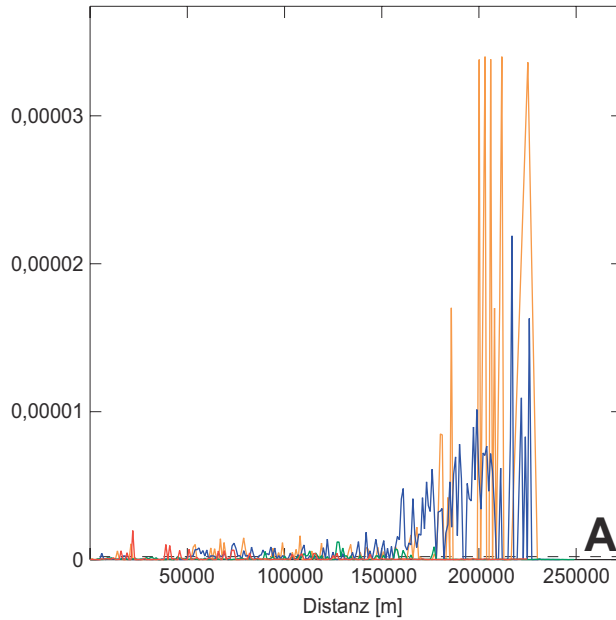
Blei



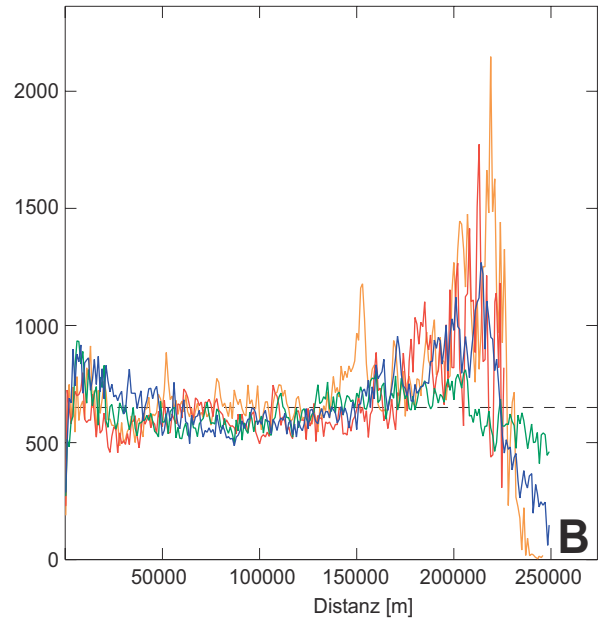
Arsen

Anhang V: Variogramme A 2

Experimentelle gerichtete Variogramme

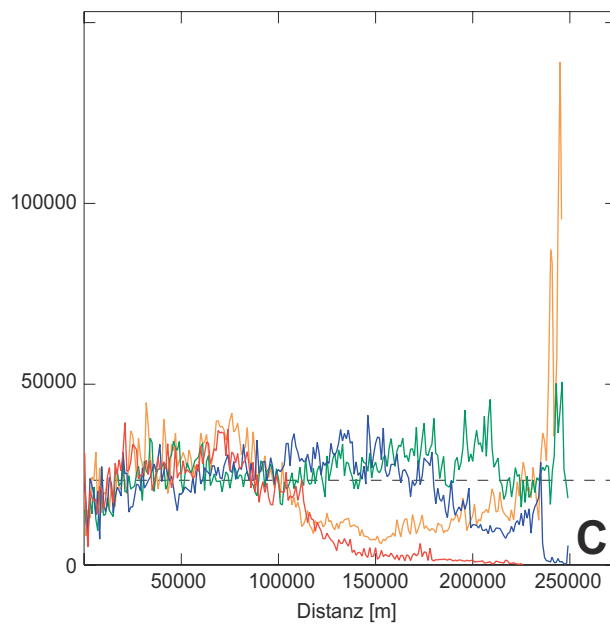


Cadmium

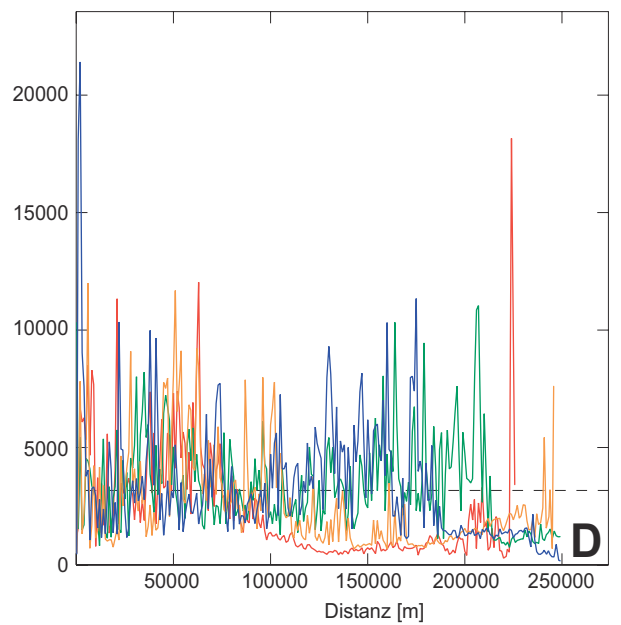


Nitrat

Richtungen:
(1) N - S (0°)
(2) NO - SW (45°)
(3) W - O (90°)
(4) NW - SO (135°)



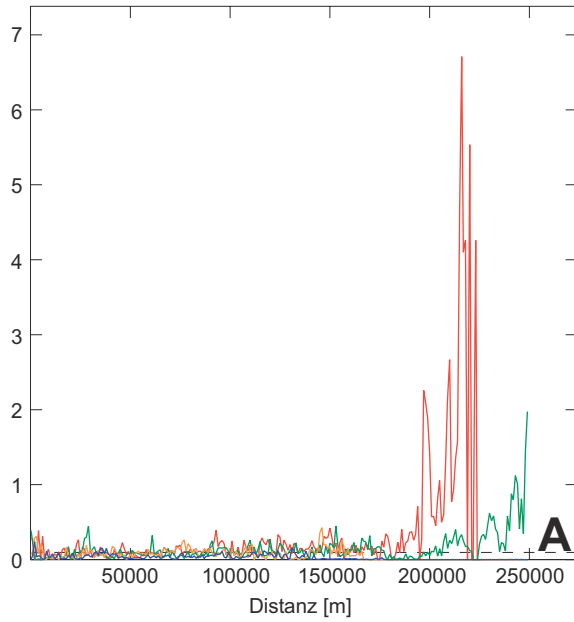
Sulfat



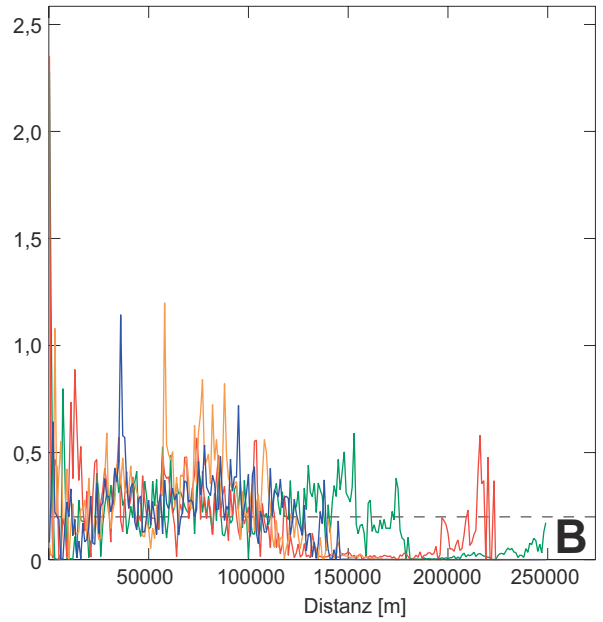
Chlor

Anhang V: Variogramme A 2

Experimentelle gerichtete Variogramme

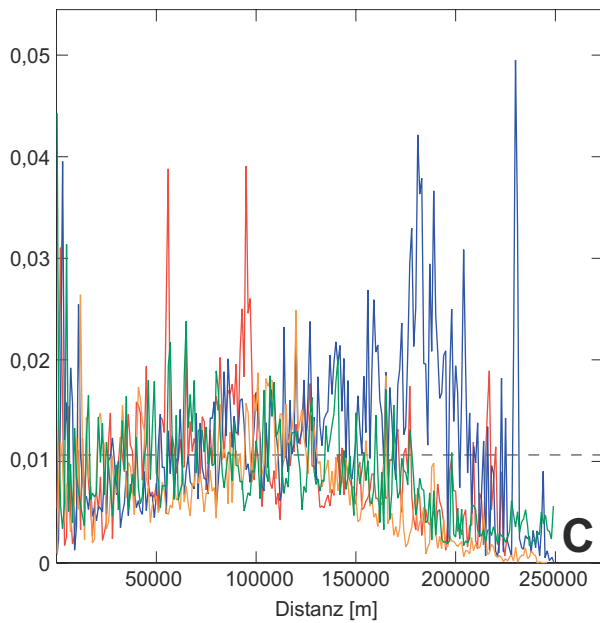


Trichlorethen

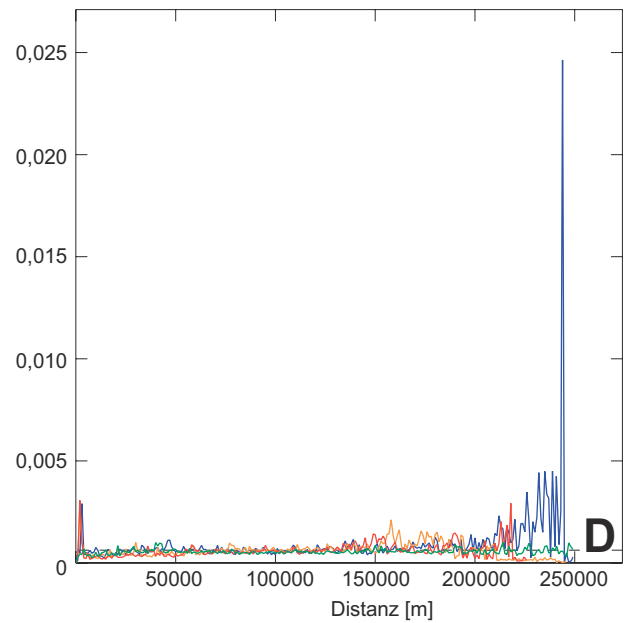


Tetrachlorethen

Richtungen:
(1) N - S (0°)
(2) NO - SW (45°)
(3) W - O (90°)
(4) NW - SO (135°)



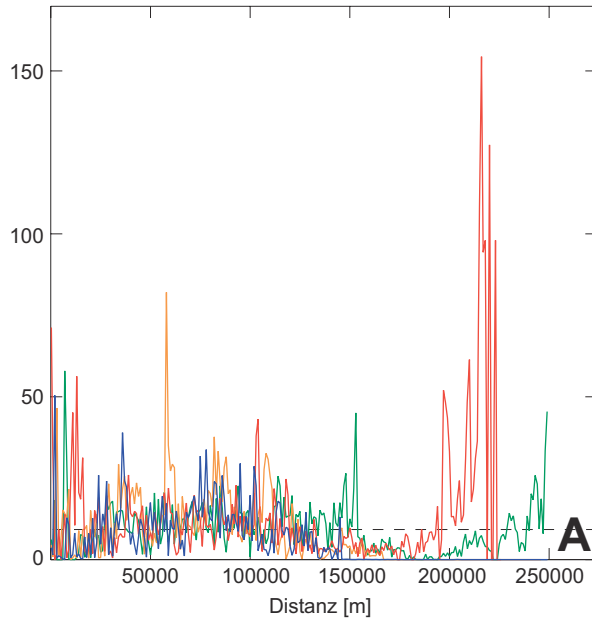
Atrazin



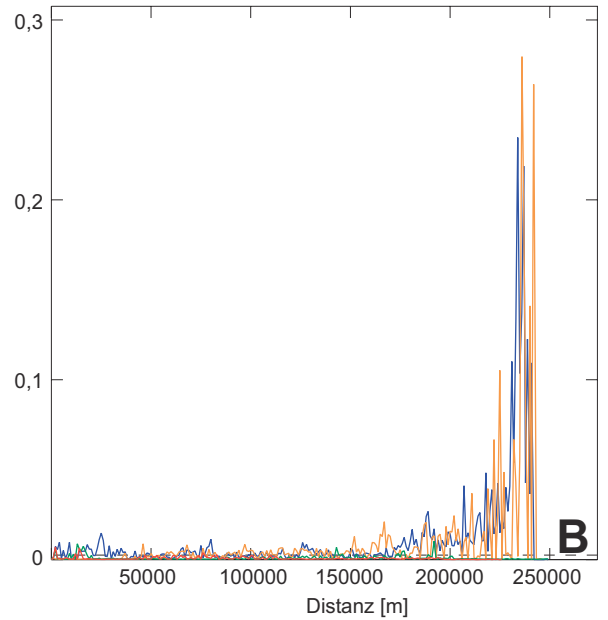
Simazin

Anhang V: Variogramme A 2

Experimentelle gerichtete Variogramme

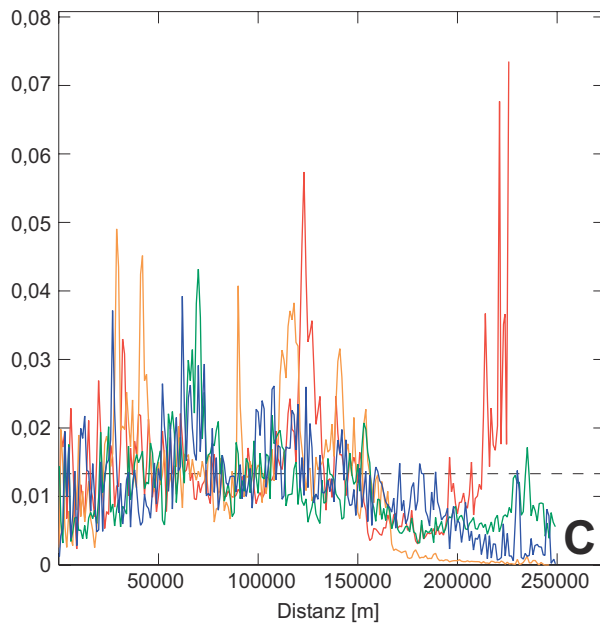


LHKW

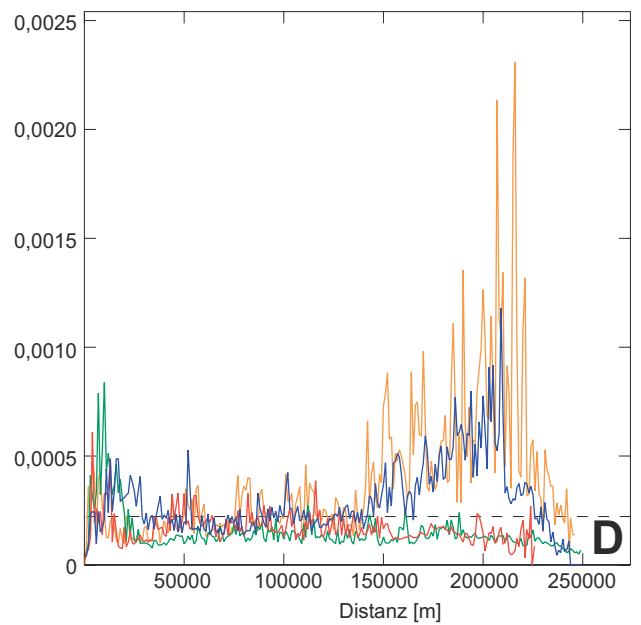


Diuron

Richtungen:
(1) N - S (0°)
(2) NO - SW (45°)
(3) W - O (90°)
(4) NW - SO (135°)



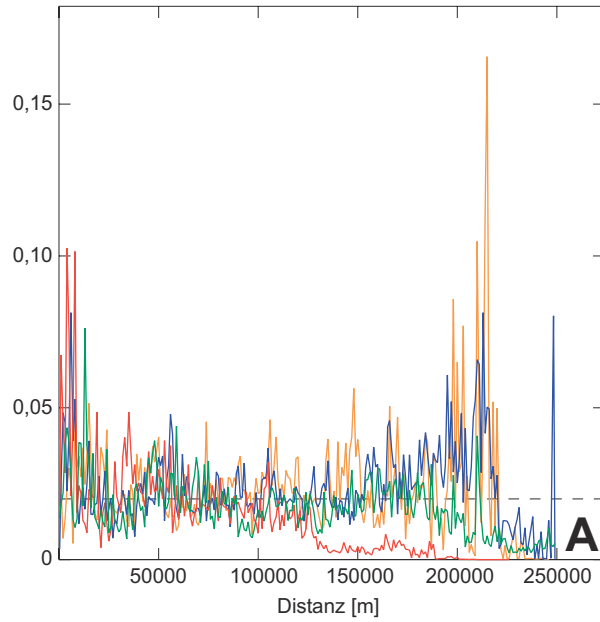
Desethylatrazin



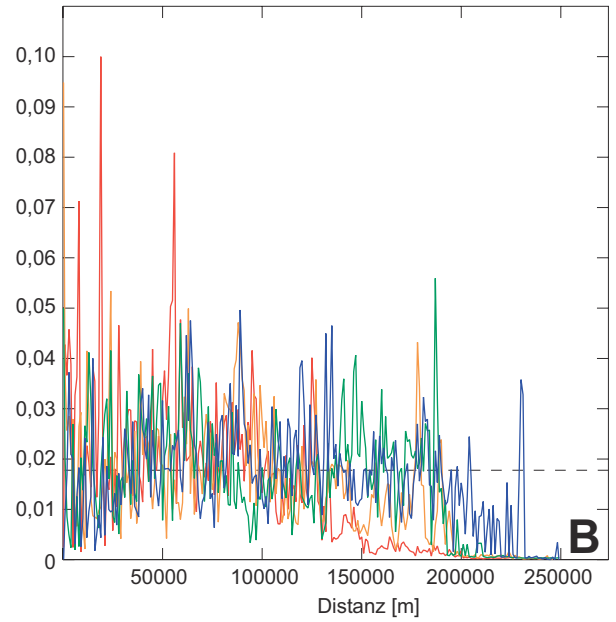
Isoproturon

Anhang V: Variogramme A 2

Experimentelle gerichtete Variogramme

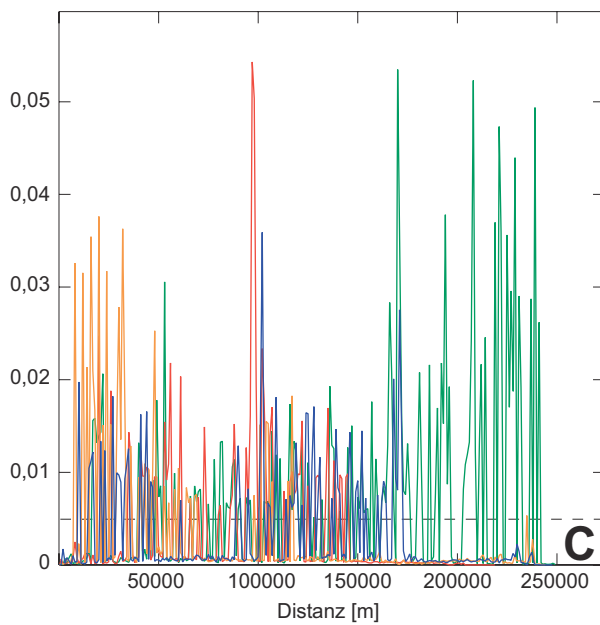


Bromacil



Hexazinon

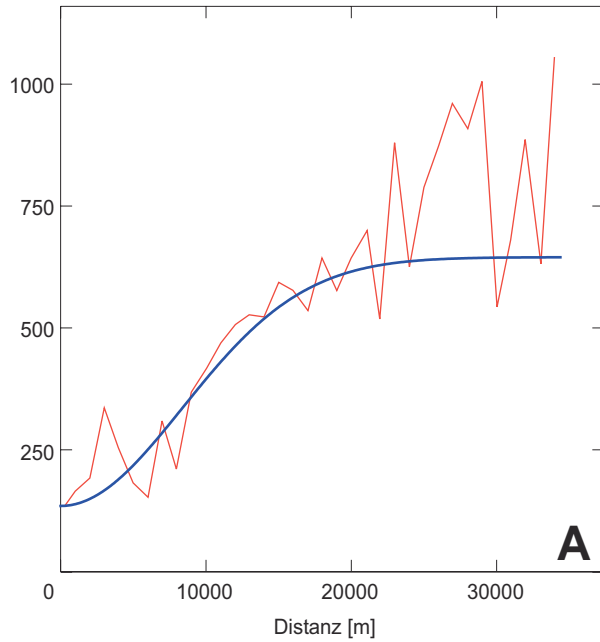
Richtungen:
(1) N - S (0°)
(2) NO - SW (45°)
(3) W - O (90°)
(4) NW - SO (135°)



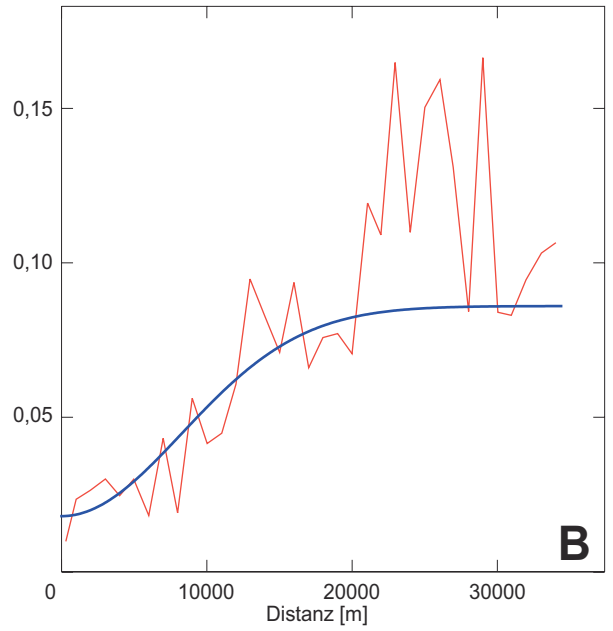
Bentazon

Anhang V: Variogramme B

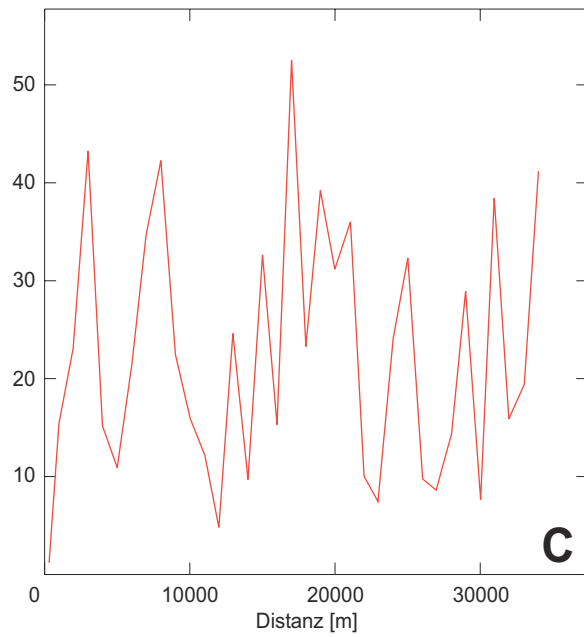
Experimentelle omnidirektionale Variogramme und angepasste Variogrammmodelle
(Einzugsgebiet Enz)



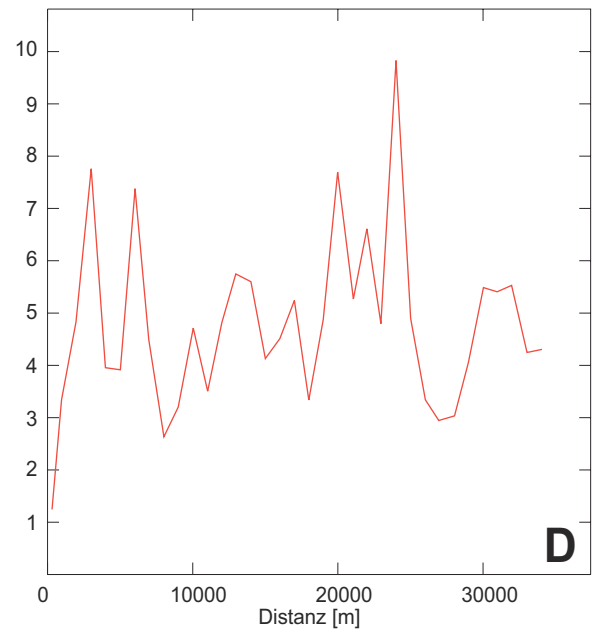
Leitfähigkeit



pH-Wert



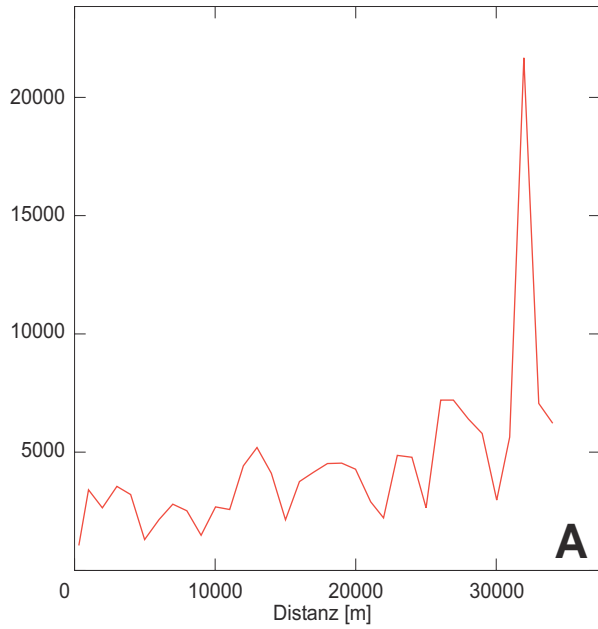
Natrium



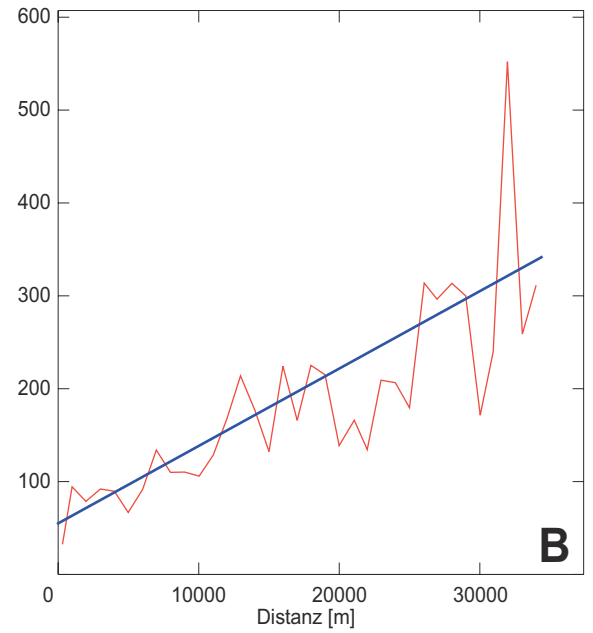
Kalium

Anhang V: Variogramme B

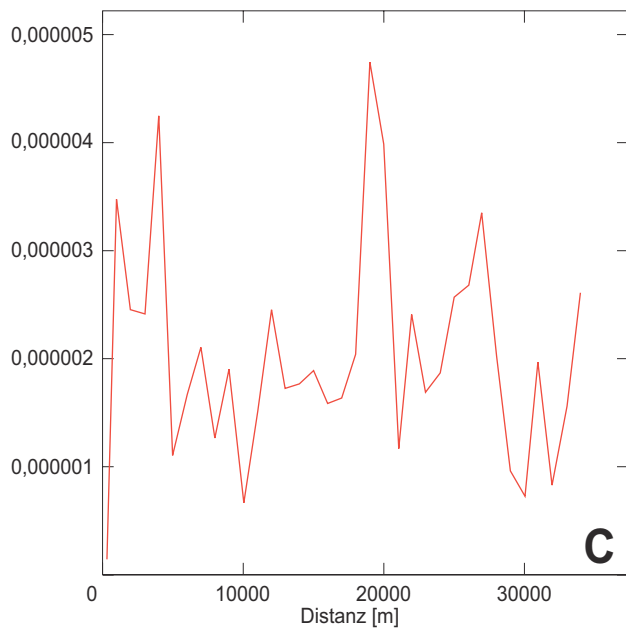
Experimentelle omnidirektionale Variogramme und angepasste Variogrammmodelle
(Einzugsgebiet Enz)



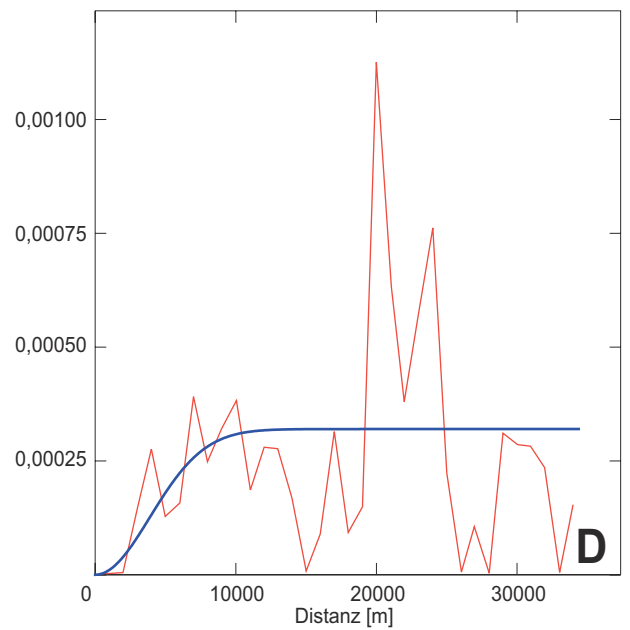
Calcium



Magnesium



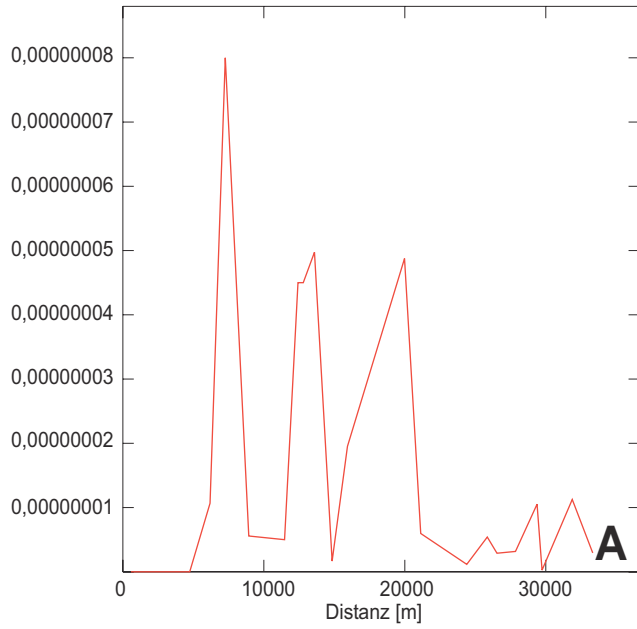
Blei



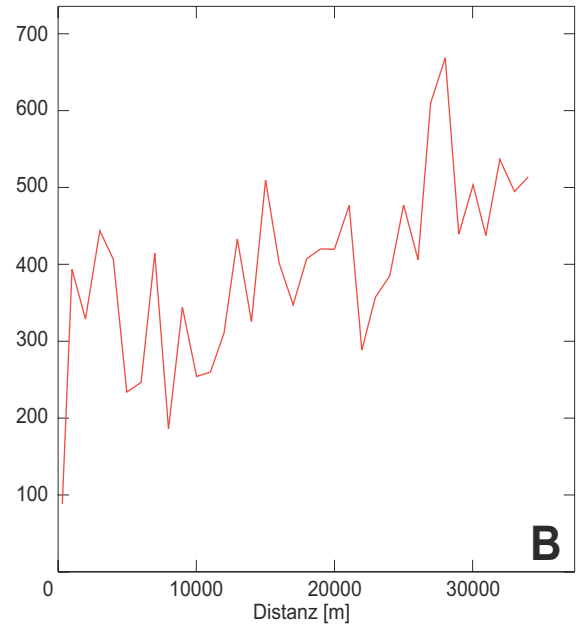
Arsen

Anhang V: Variogramme B

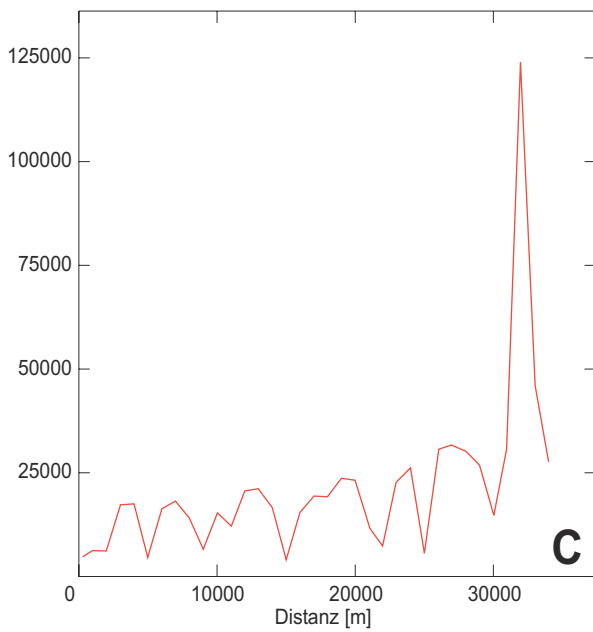
Experimentelle omnidirektionale Variogramme und angepasste Variogrammodelle
(Einzugsgebiet Enz)



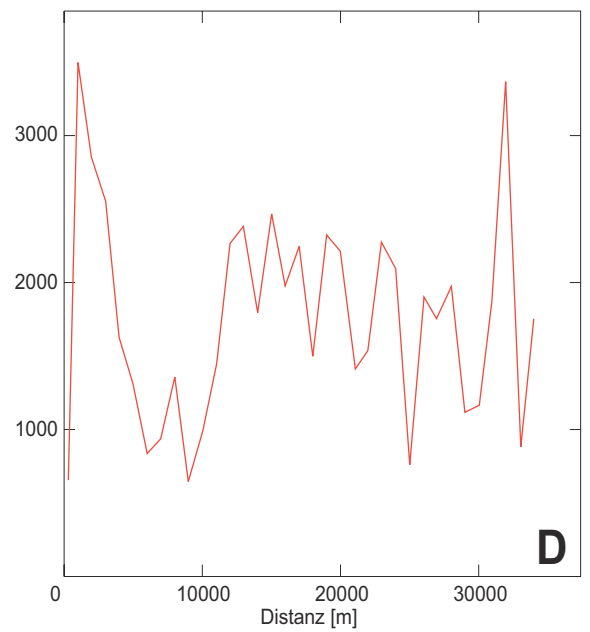
Cadmium



Nitrat



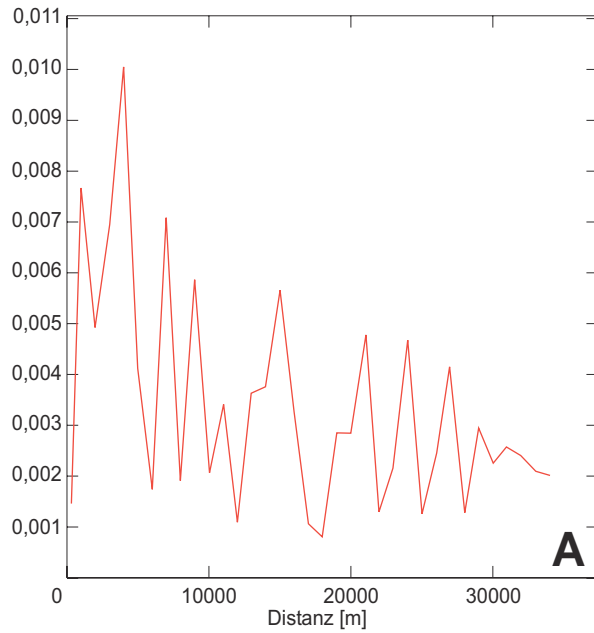
Sulfat



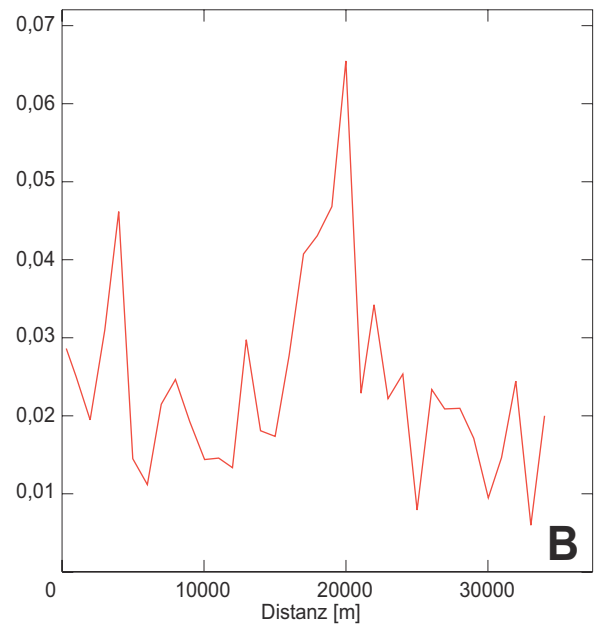
Chlor

Anhang V: Variogramme B

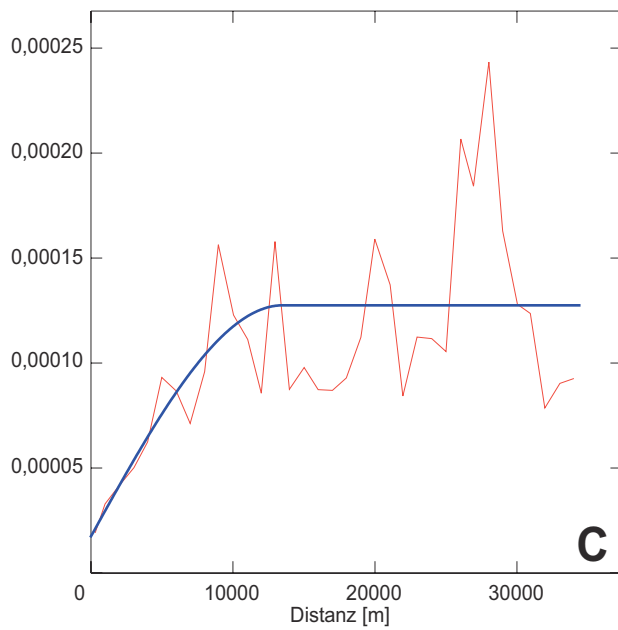
Experimentelle omnidirektionale Variogramme und angepasste Variogrammmodelle
(Einzugsgebiet Enz)



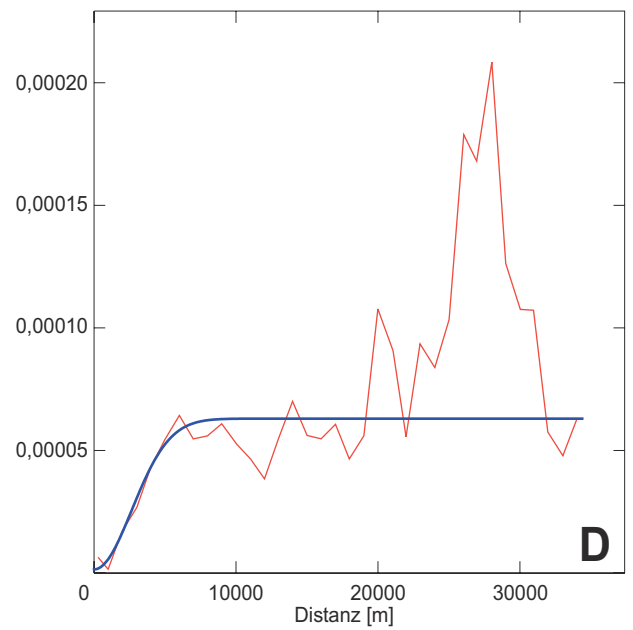
Trichlorethen



Tetrachlorethen



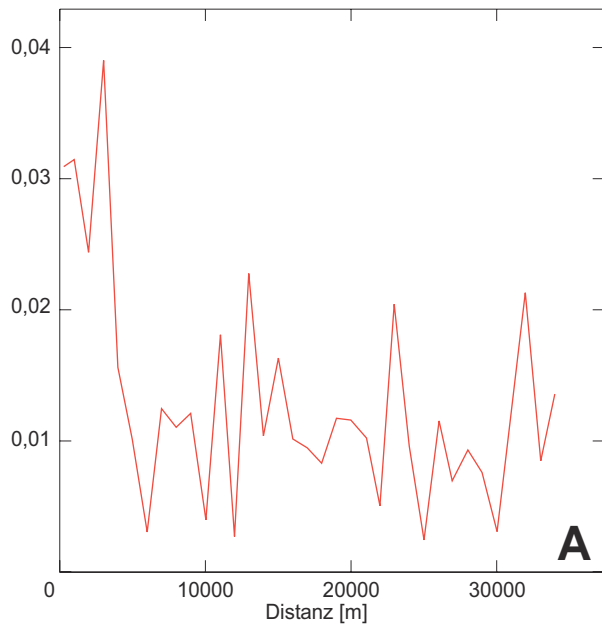
Atrazin



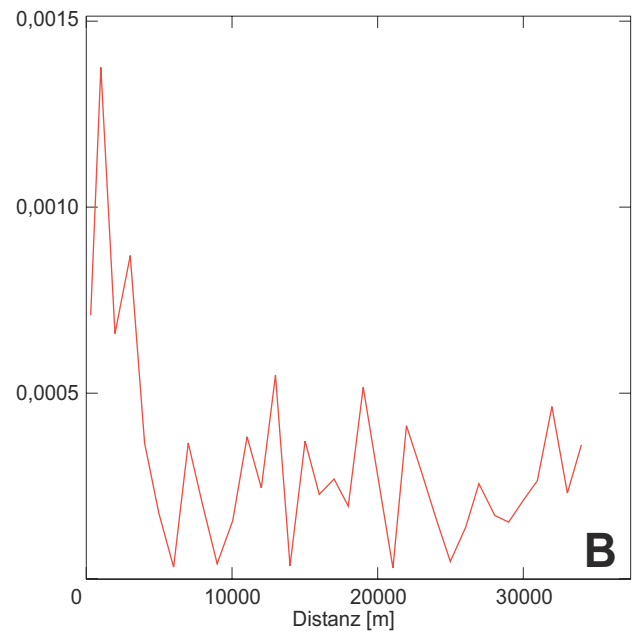
Simazin

Anhang V: Variogramme B

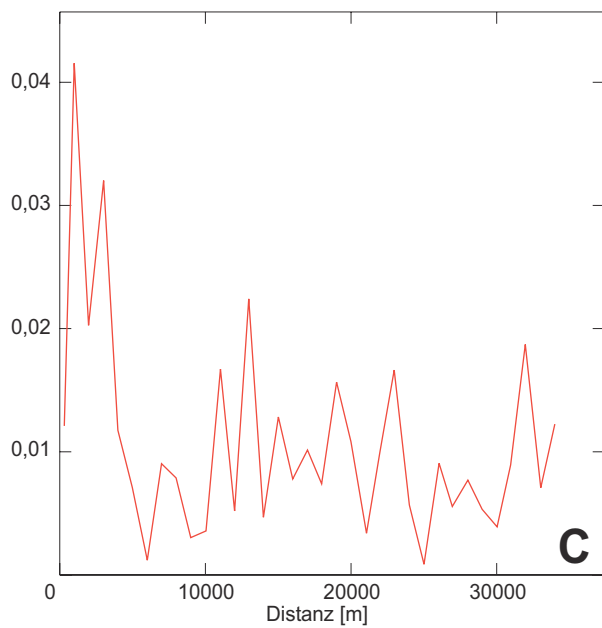
Experimentelle omnidirektionale Variogramme und angepasste Variogrammmodelle
(Einzugsgebiet Enz)



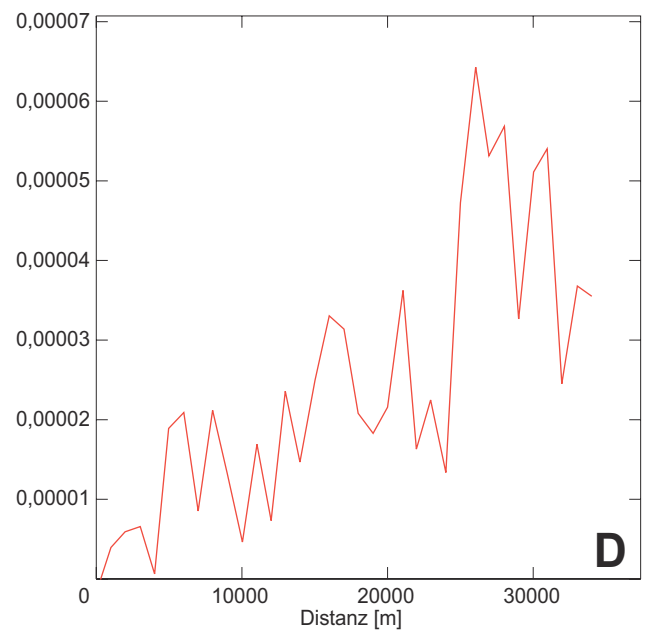
LHKW



Diuron



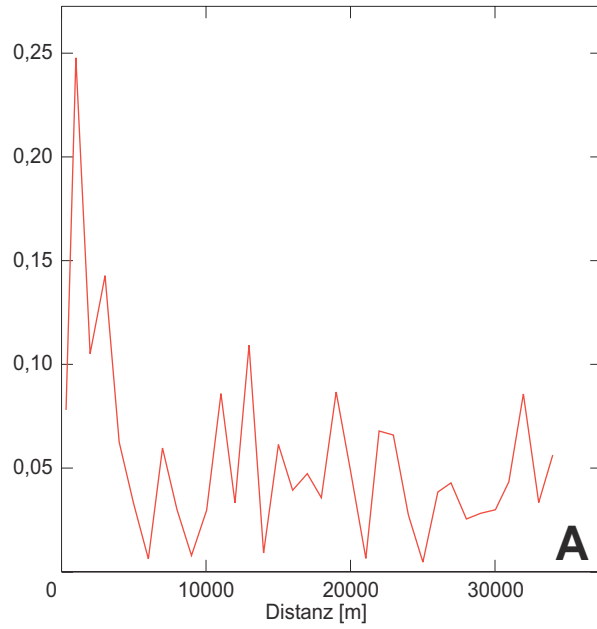
Desethylatrazin



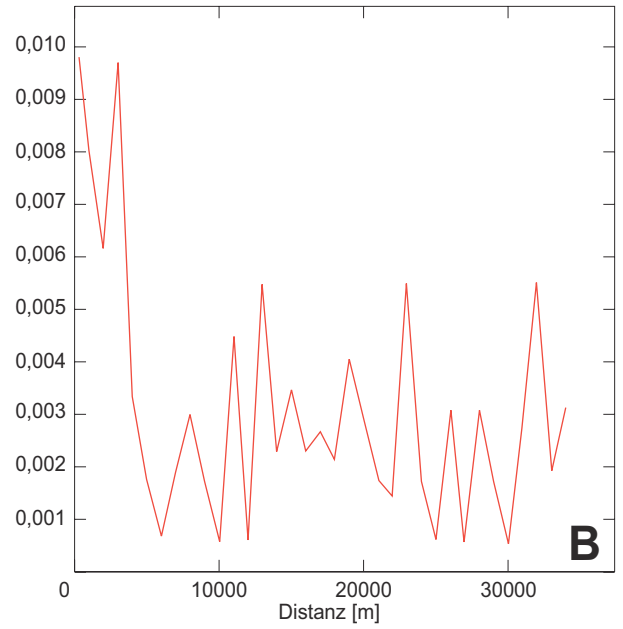
Isoproturon

Anhang V: Variogramme B

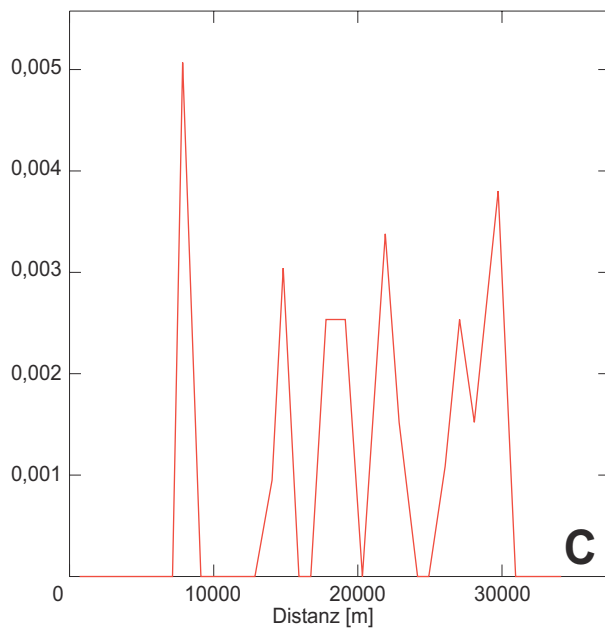
Experimentelle omnidirektionale Variogramme und angepasste Variogrammmodelle
(Einzugsgebiet Enz)



Bromacil



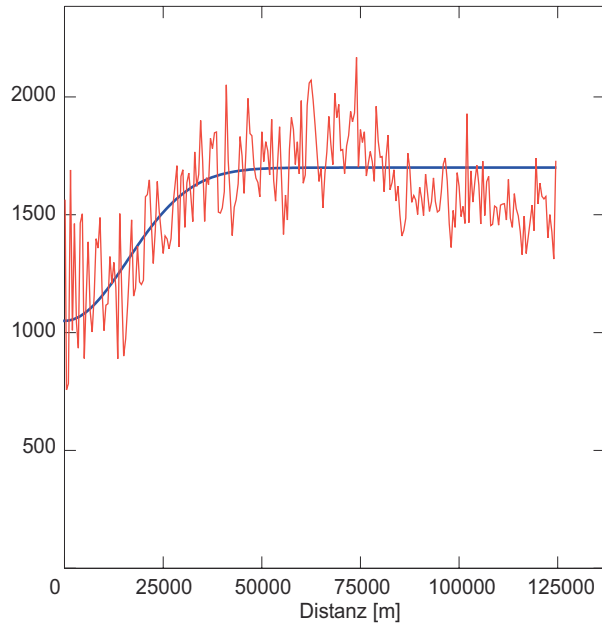
Hexazinon



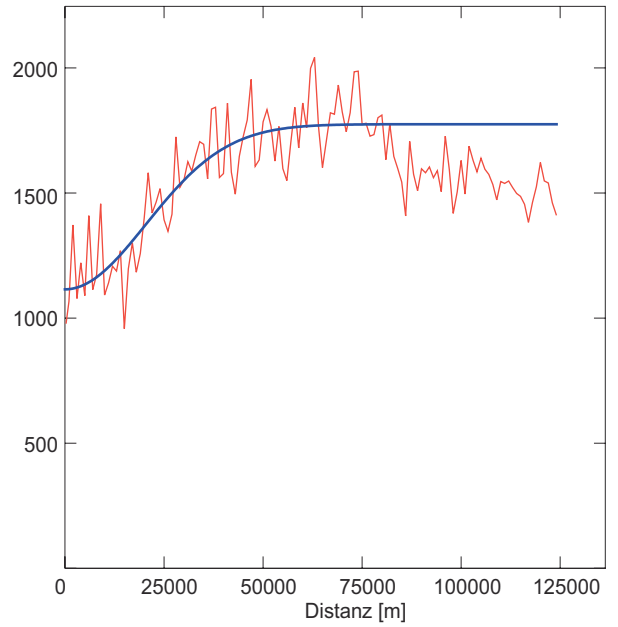
Bentazon

Anhang V: Variogramme C

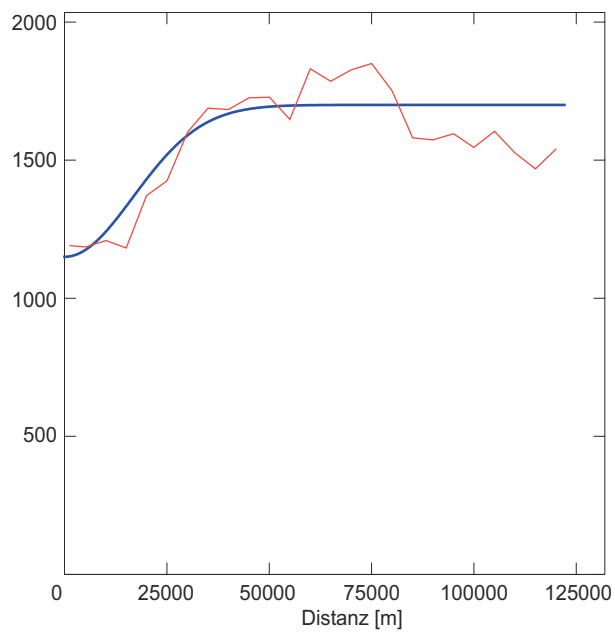
Vergleich unterschiedlicher Schrittweiten bei Variogramm und -modellanpassung
Beispiel Grundwasserleitfähigkeit



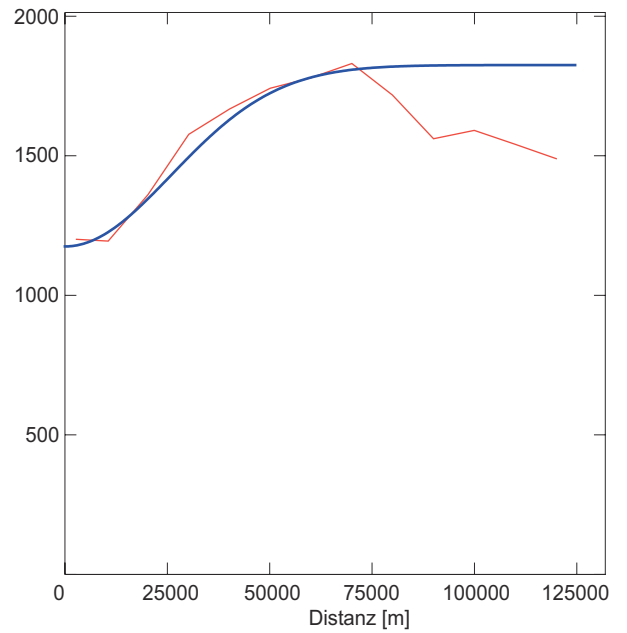
Schrittweite 500m - 250 Schritte



Schrittweite 1000m - 125 Schritte



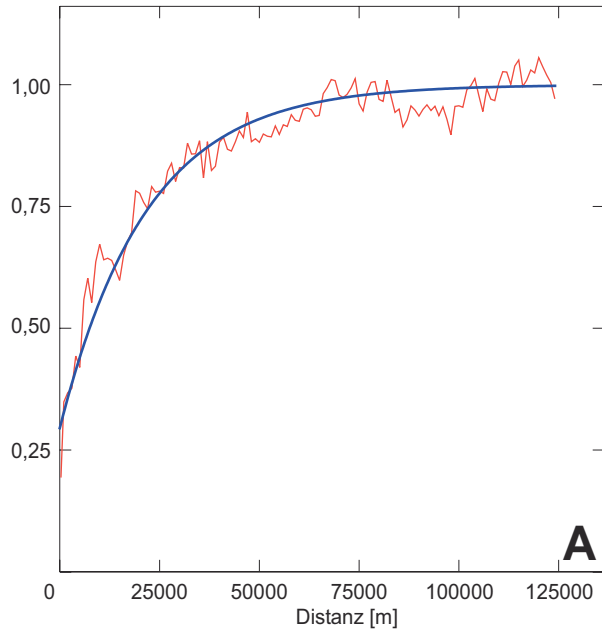
Schrittweite 5000m - 25 Schritte



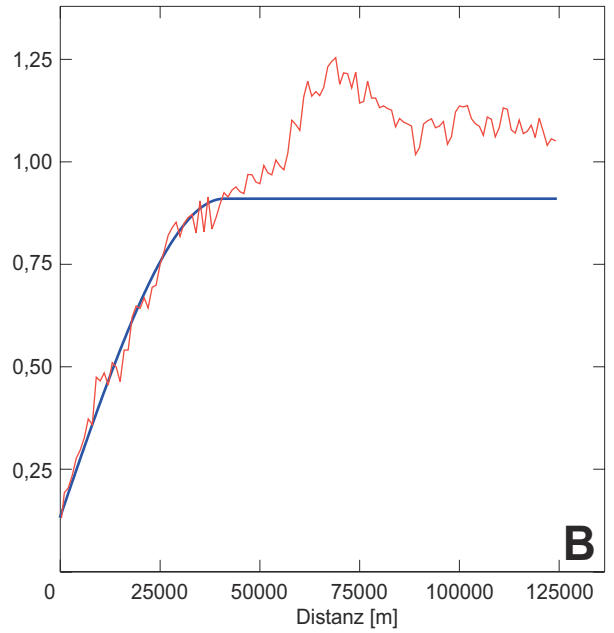
Schrittweite 10000m - 13 Schritte

Anhang V: Variogramme D

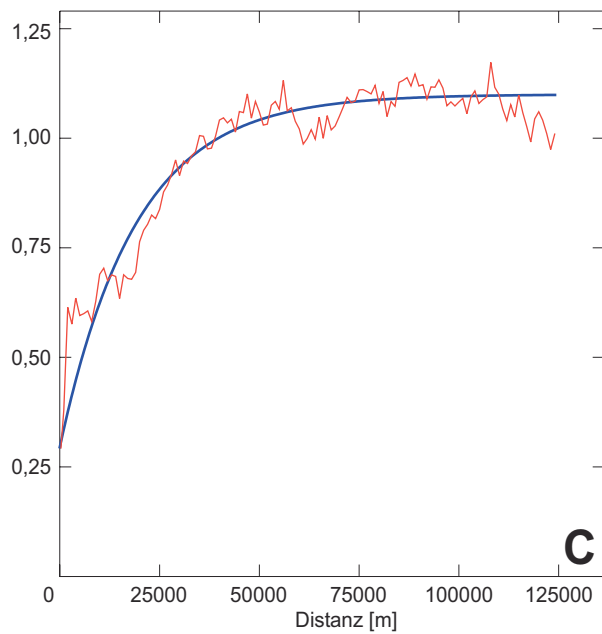
Variogramme und angepasste Variogrammmodelle nach Transformation



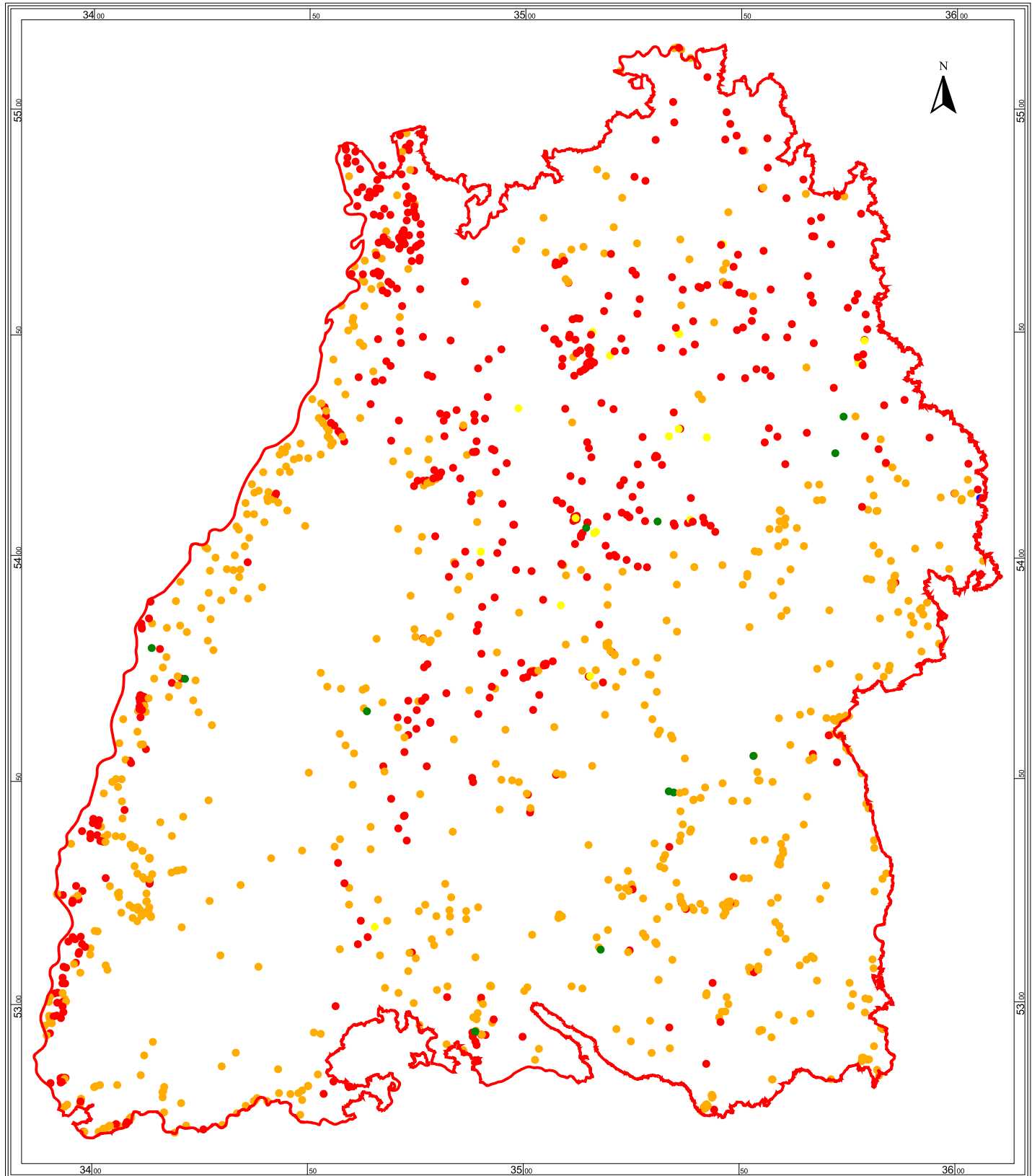
Leitfähigkeit



Magnesium



Simazin



Clusterungen der Messstellen der Grundwasserbeschaffenheitsmessnetze in Baden-Württemberg

Clusterung auf Grundlage aller Parameter
6-Cluster-Lösung nach direkter Ward-Clusterung

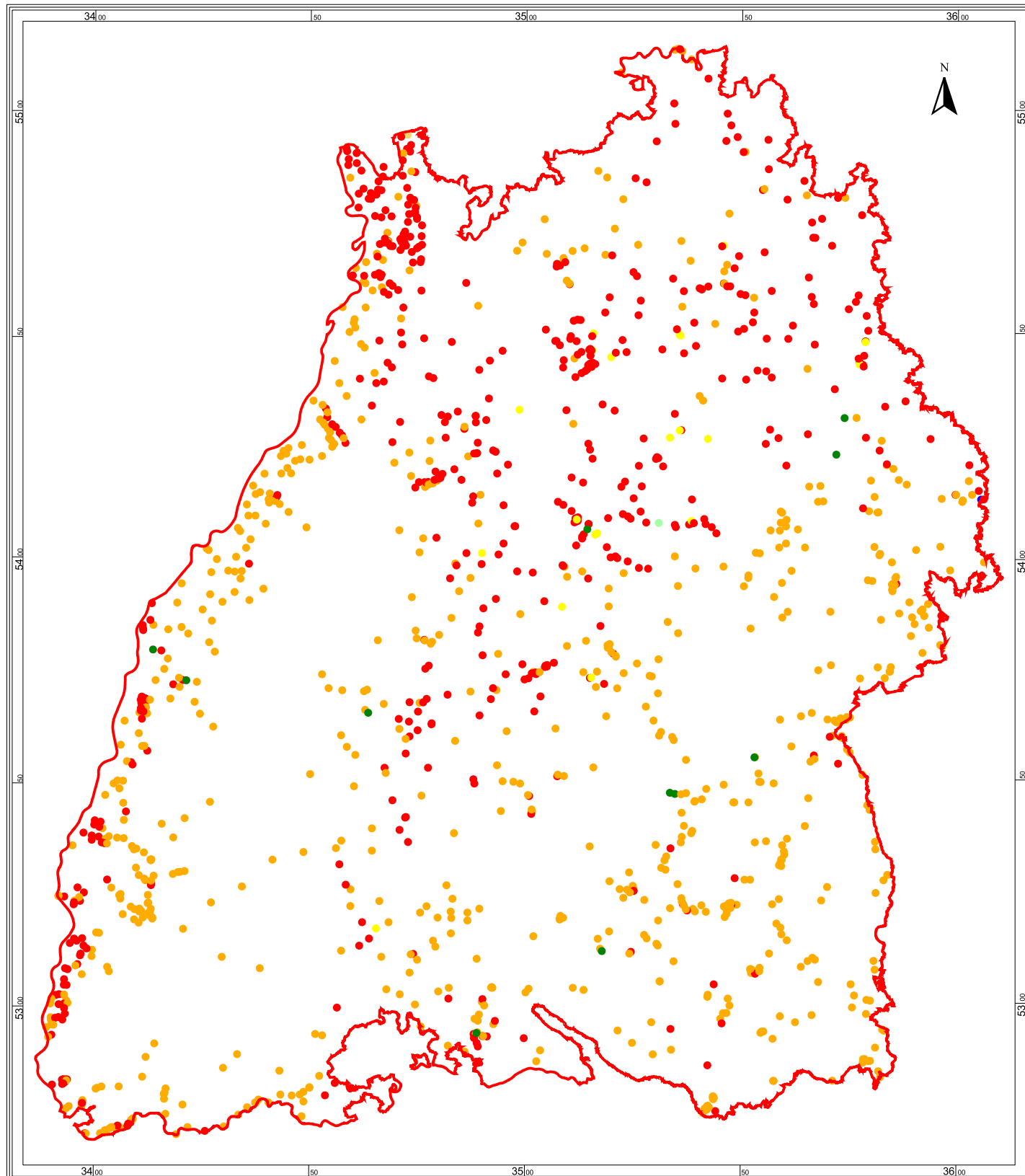
Messstellenzugehörigkeit zu Cluster

- | | | | |
|---|---|---|---|
| ● | 1 | ● | 4 |
| ● | 2 | ● | 5 |
| ● | 3 | ● | 6 |

□ Landesgrenze

1:1250000

Datengrundlage: JDK 1994 - 1998, LfU
Bearbeitung: D. Stietenroth (2005)



Clusteringen der Messstellen der Grundwasserbeschaffenheitsmessnetze in Baden-Württemberg

Clustering auf Grundlage aller Parameter
8-Cluster-Lösung nach direkter Ward-Clustering

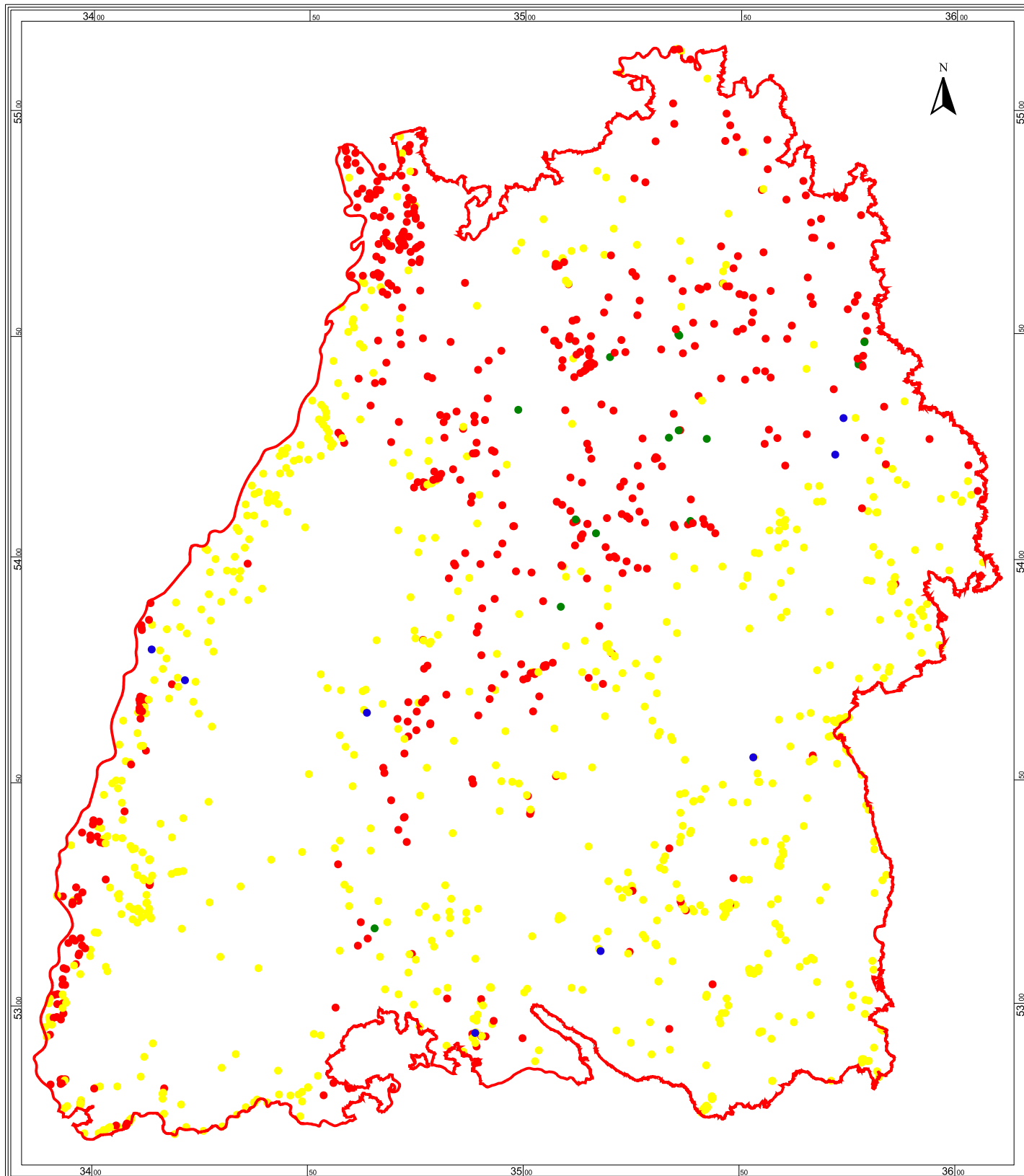
Messstellenzugehörigkeit zu Cluster

- | | | | |
|---|---|---|---|
| ● | 1 | ● | 5 |
| ● | 2 | ● | 6 |
| ● | 3 | ● | 7 |
| ● | 4 | ● | 8 |

□ Landesgrenze

1:1250000

Datengrundlage: JDK 1994 - 1998, LfU
Bearbeitung: D. Stietenroth (2005)



Clusterungen der Messstellen der Grundwasserbeschaffenheitsmessnetze in Baden-Württemberg

Clusterung auf Grundlage aller Parameter - 4-Cluster-Lösung nach Ward-Clusterung

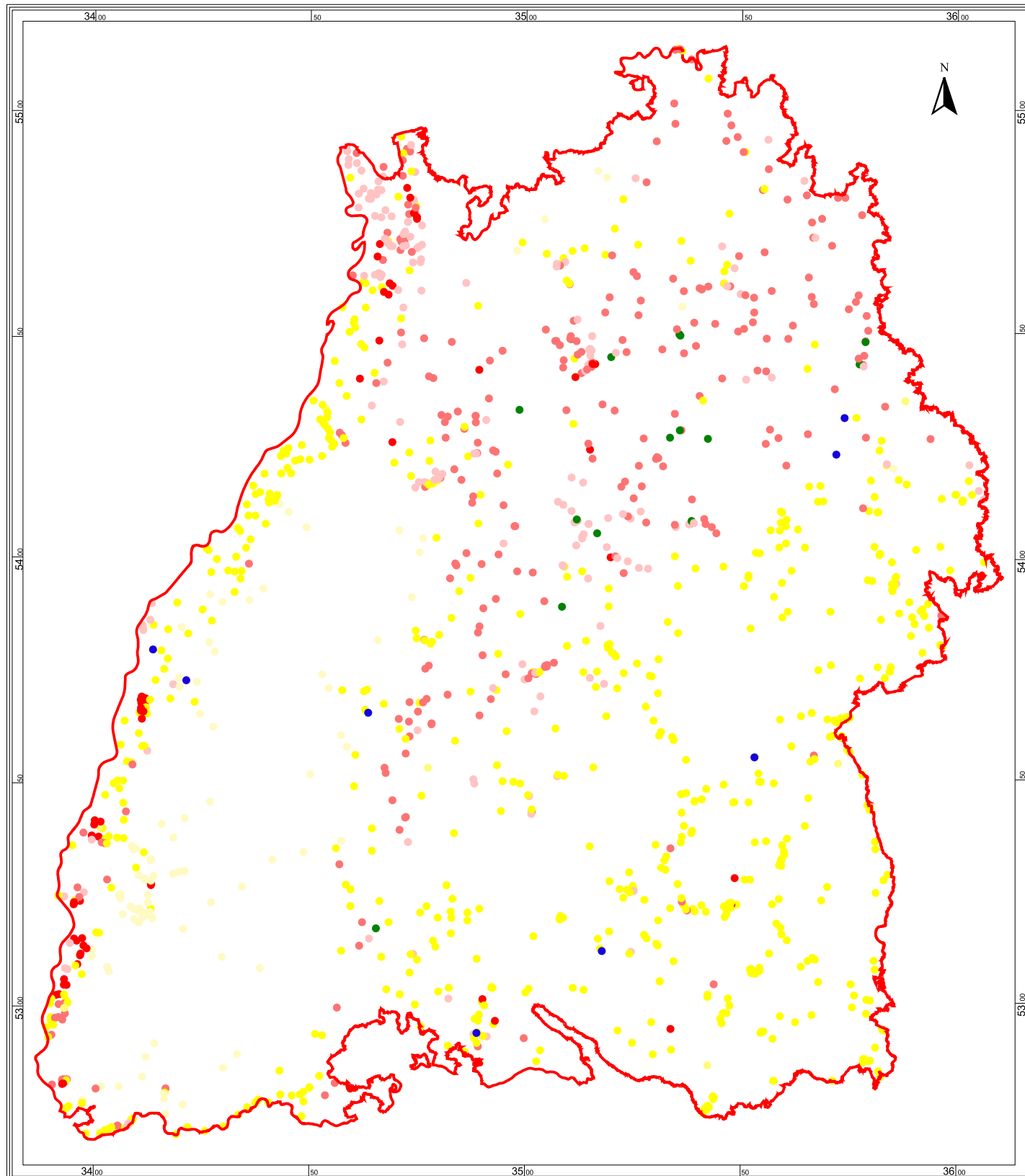
Messstellenzugehörigkeit zu Cluster

- | | | | |
|---|---|---|---|
| • | 1 | • | 3 |
| • | 2 | • | 4 |

1:1250000

Landesgrenze

Datengrundlage: JDK 1994 - 1998, LfU
 Bearbeitung: D. Stietenroth (2005)



Clusteringen der Messstellen der Grundwasserbeschaffenheitsmessnetze in Baden-Württemberg

Clustering auf Grundlage aller Parameter - 8-Cluster-Lösung nach Ward-Clustering

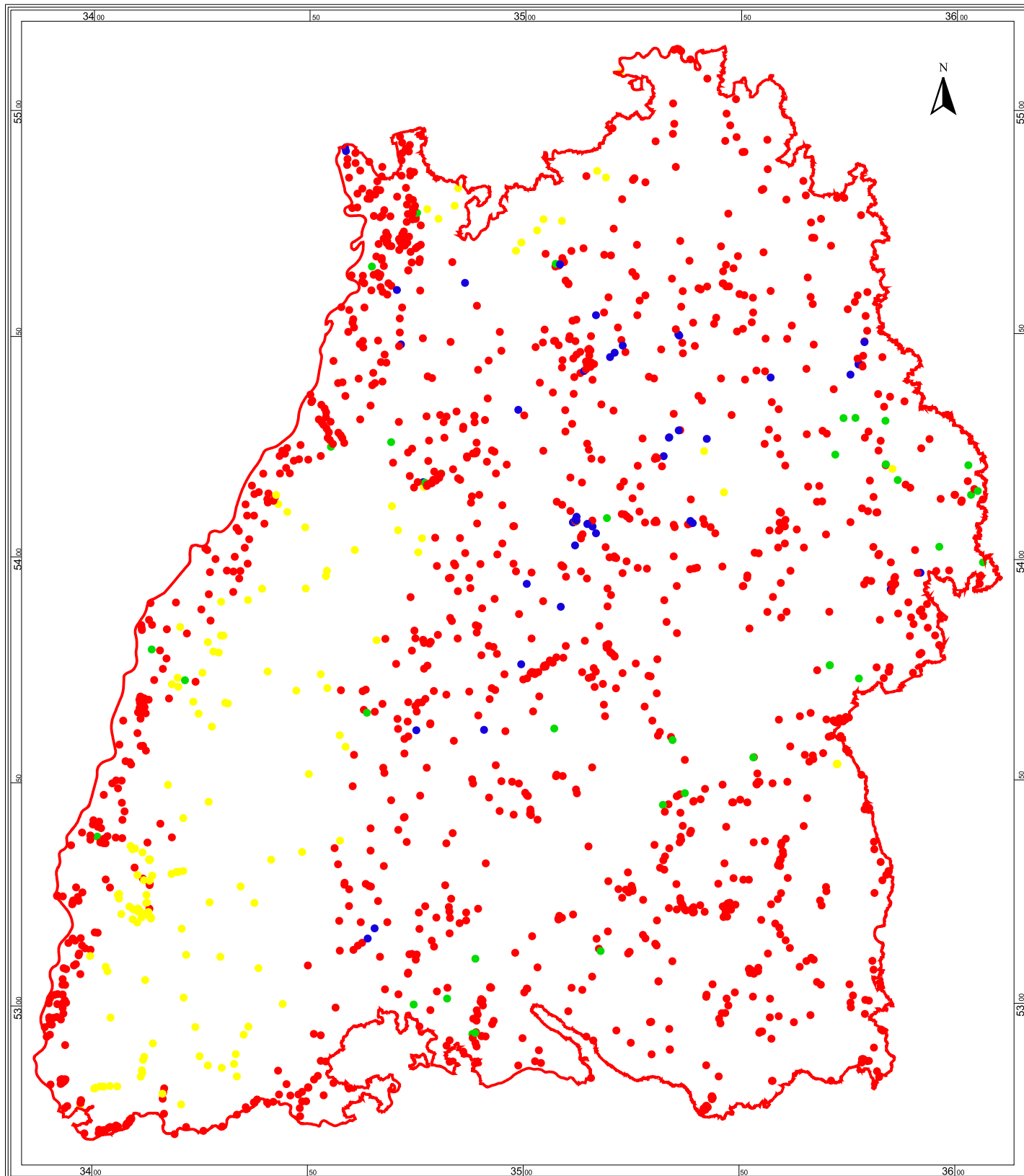
Messstellenzugehörigkeit zu Cluster

- | | | | |
|---|---|---|---|
| ● | 1 | ● | 5 |
| ● | 2 | ● | 6 |
| ● | 3 | ● | 7 |
| ● | 4 | ● | 8 |

Landesgrenze

1:1250000

Datengrundlage: JDK 1994 - 1998, LfU
Bearbeitung: D. Stietenroth (2005)



Clusterungen der Messstellen der Grundwasserbeschaffenheitsmessnetze in Baden-Württemberg

Clusterung auf Grundlage aller Parameter - 4-Cluster-Lösung nach k-means-Clusterung

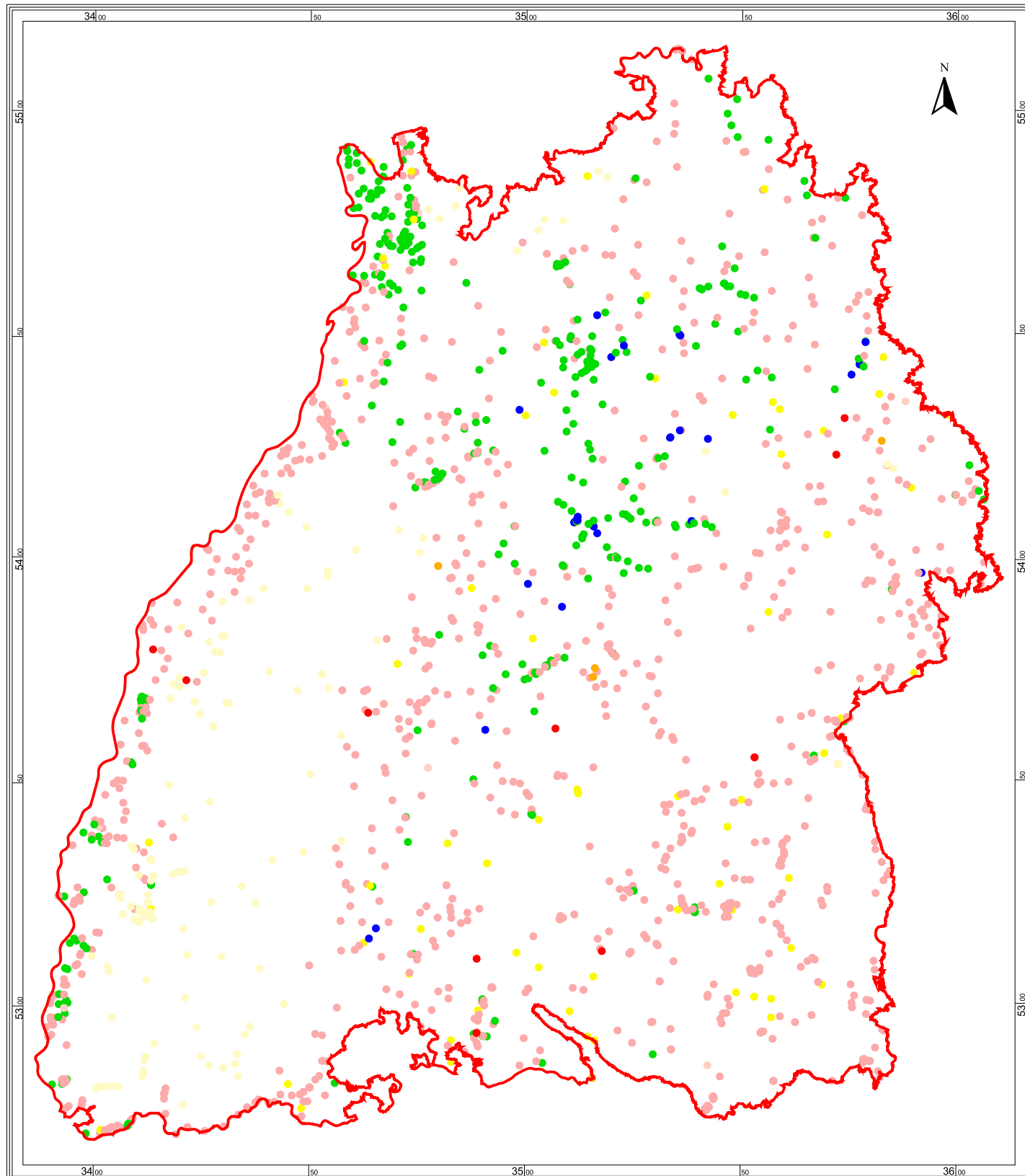
Messstellenzugehörigkeit zu Cluster

- | | |
|-----|-----|
| ● 1 | ● 3 |
| ● 2 | ● 4 |

1:1250000

Landesgrenze

Datengrundlage: JDK 1994 - 1998, LfU
Bearbeitung: D. Stietenroth (2005)



Clusterungen der Messstellen der Grundwasserbeschaffenheitsmessnetze in Baden-Württemberg

Clusterung auf Grundlage aller Parameter - 8-Cluster-Lösung nach k-means-Clusterung

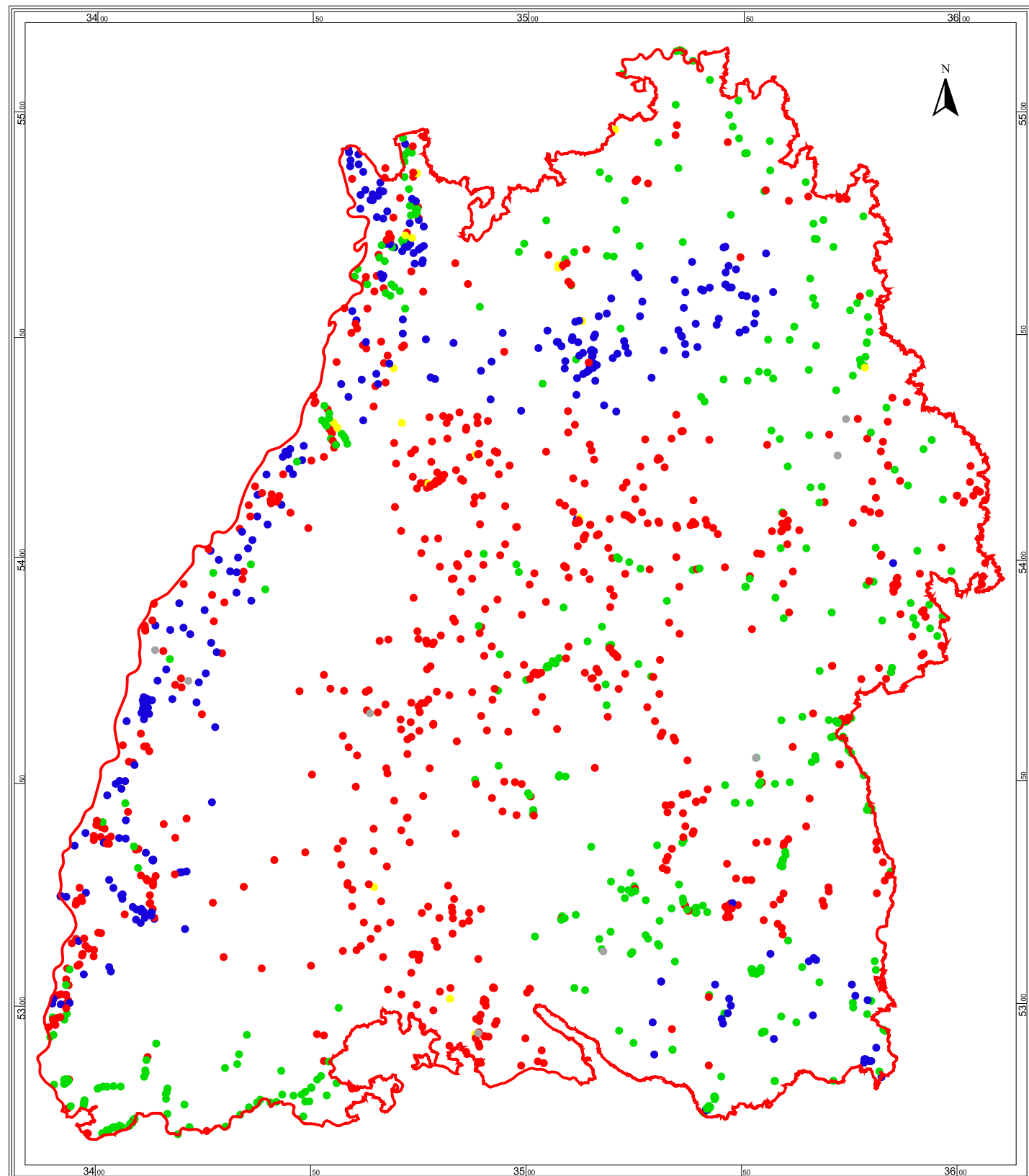
Messstellenzugehörigkeit zu Cluster

- | | | | |
|---|---|---|---|
| ● | 1 | ● | 5 |
| ● | 2 | ● | 6 |
| ● | 3 | ● | 7 |
| ● | 4 | ● | 8 |

Landesgrenze

1:1250000

Datengrundlage: JDK 1994 - 1998, LfU
Bearbeitung: D. Stietenroth (2005)



Clusterungen der Messstellen der Grundwasserbeschaffenheitsmessnetze in Baden-Württemberg

Clusterung auf Grundlage der vorwiegend anthropogen beeinflussten Parameter
5-Cluster-Lösung der Ward-Clusterung

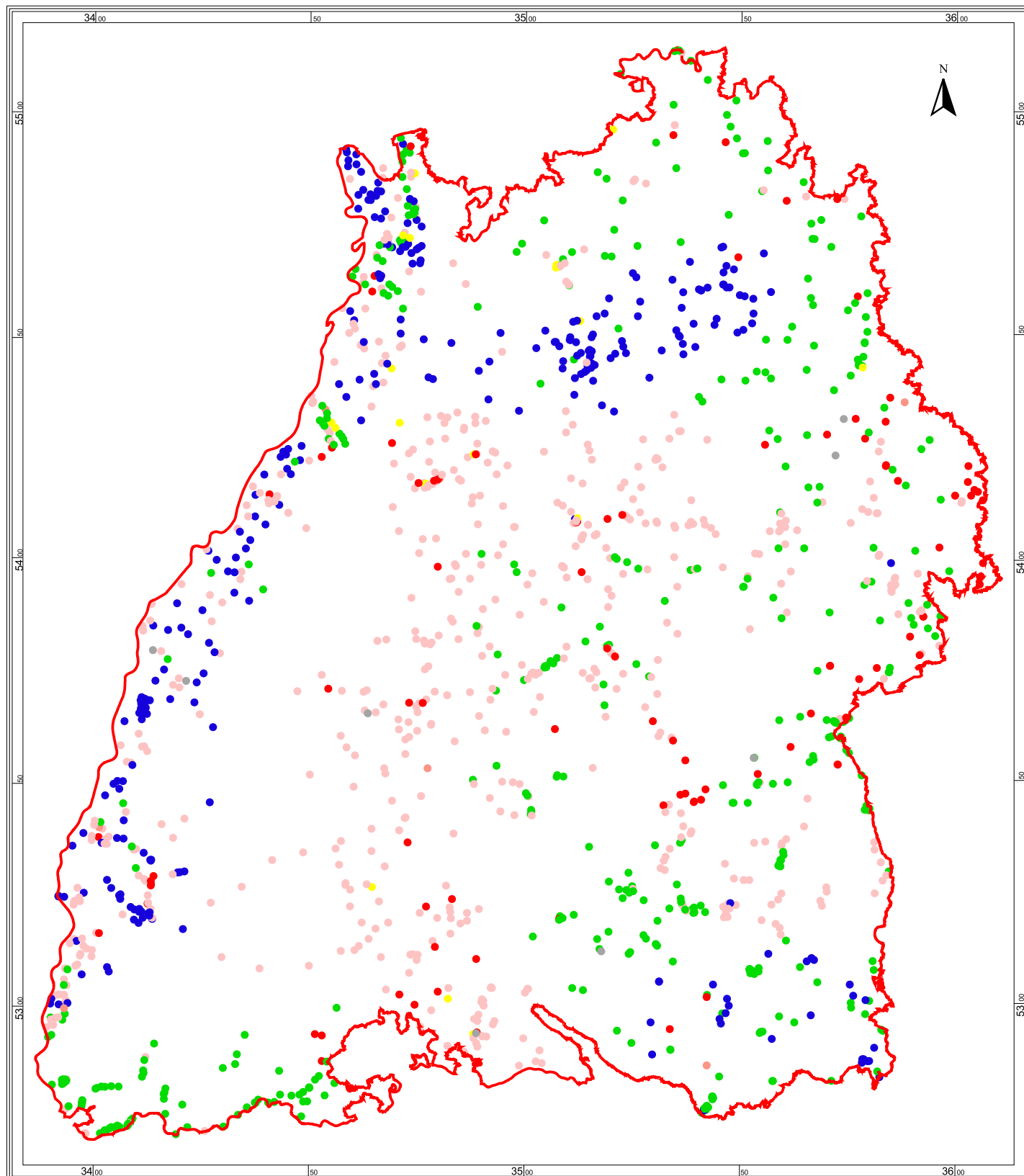
Messstellenzugehörigkeit zu Cluster

- | | |
|---|--|
| ● 1 | ● 3 |
| ● 2 | ● 4 |
| | ● 5 |

1:1250000

Landesgrenze

Datengrundlage: JDK 1994 - 1998, LfU
Bearbeitung: D. Stietenroth (2005)



Clusterungen der Messstellen der Grundwasserbeschaffenheitsmessnetze in Baden-Württemberg

Clusterung auf Grundlage der vorwiegend anthropogen beeinflussten Parameter -
7-Cluster-Lösung der Ward-Clusterung

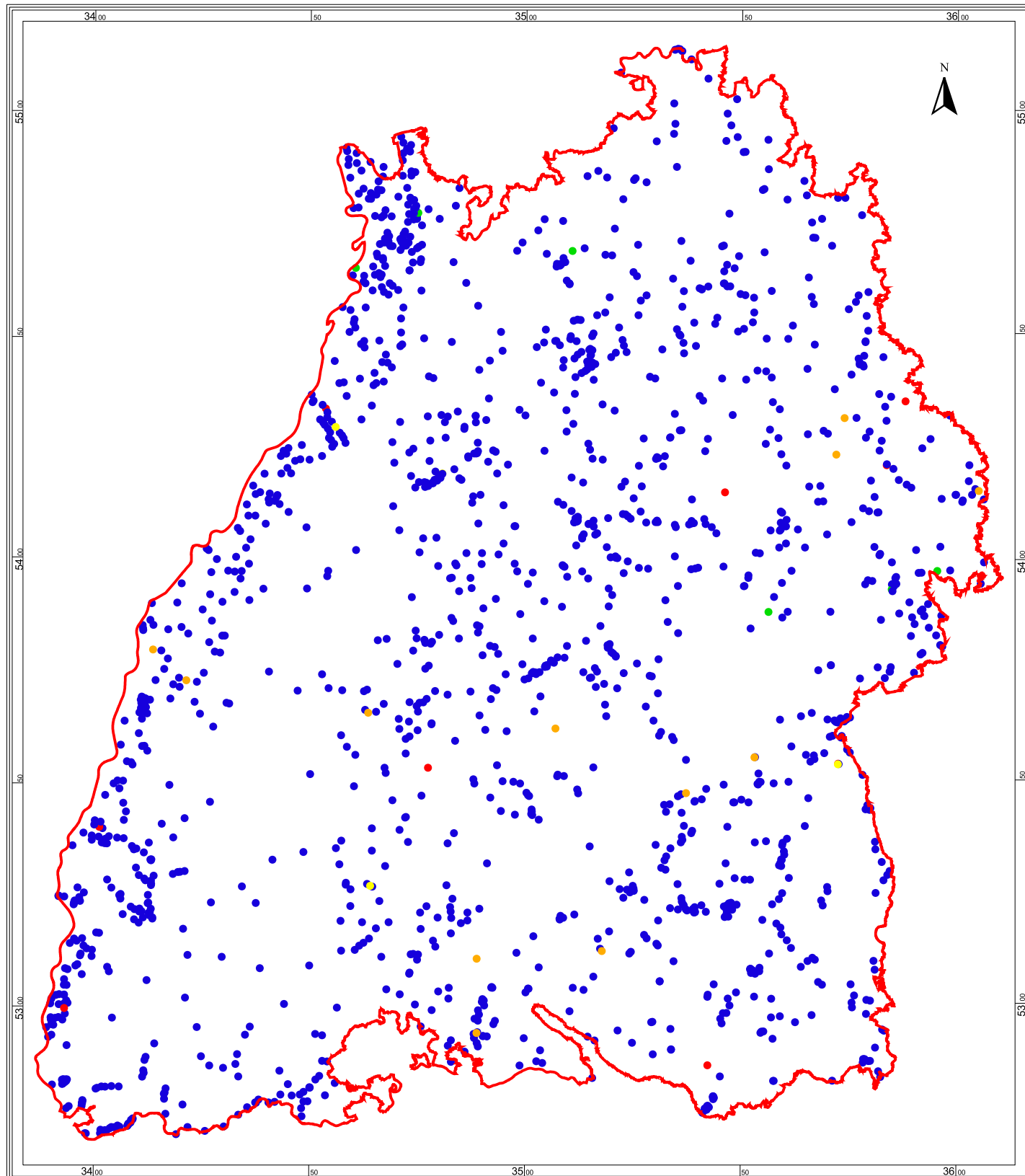
Messstellenzugehörigkeit zu Cluster

- | | | | |
|---|---|---|---|
| ● | 1 | ● | 4 |
| ● | 2 | ● | 5 |
| ● | 3 | ● | 6 |
| | | ● | 7 |

□ Landesgrenze

1:1250000

Datengrundlage: JDK 1994 - 1998, LfU
Bearbeitung: D. Stietenroth (2005)



Clusterungen der Messstellen der Grundwasserbeschaffenheitsmessnetze in Baden-Württemberg

Clusterung auf Grundlage der vorwiegend anthropogen beeinflussten Parameter
5-Cluster-Lösung nach k-means-Clusterung

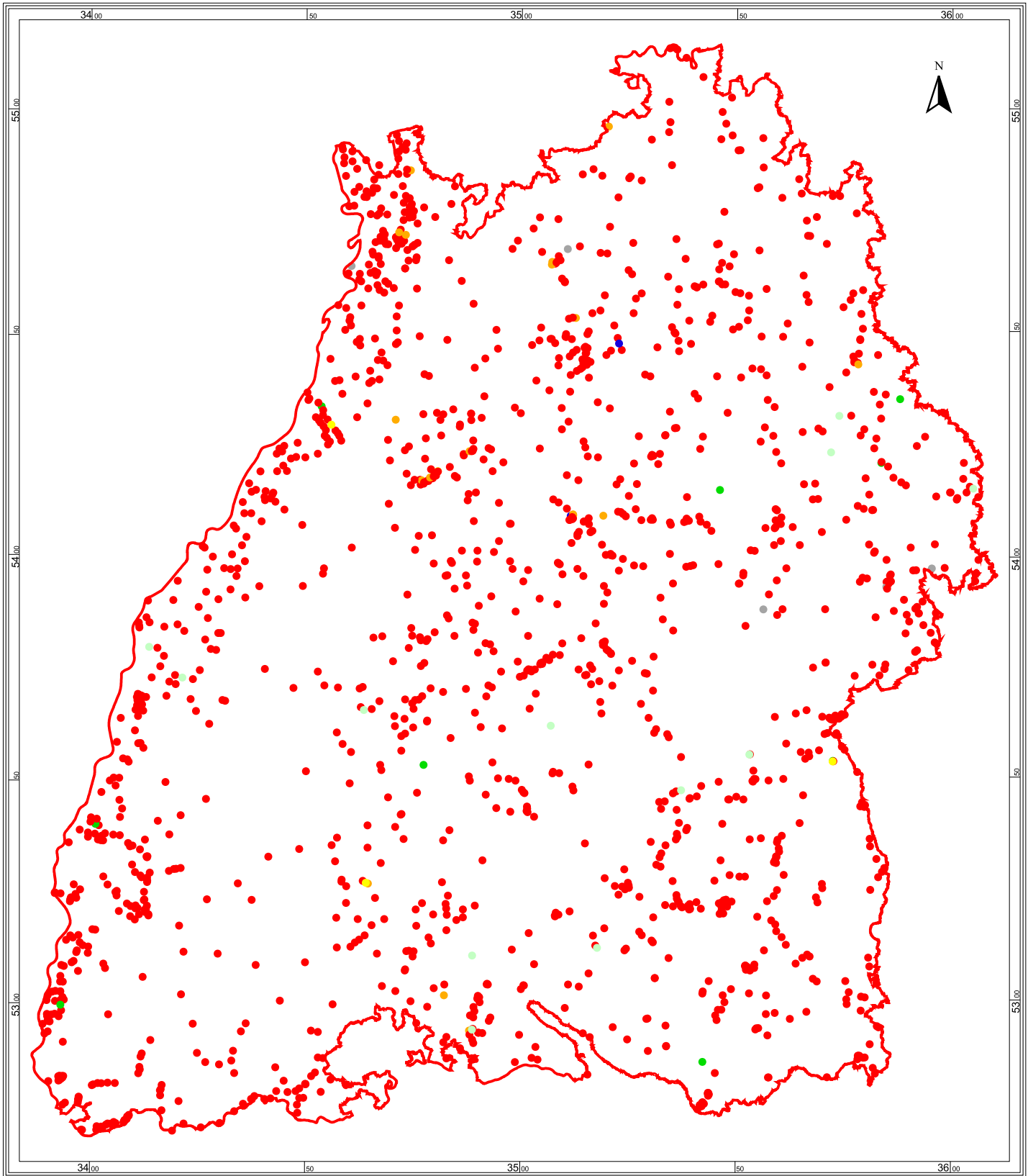
Messstellenzugehörigkeit zu Cluster

- | | | | |
|---|---|---|---|
| ● | 1 | ● | 3 |
| ● | 2 | ● | 4 |
| | | ● | 5 |

▭ Landesgrenze

1:1250000

Datengrundlage: JDK 1994 - 1998, LfU
Bearbeitung: D. Stietenroth (2005)



Clusterungen der Messstellen der Grundwasserbeschaffenheitsmessnetze in Baden-Württemberg

Clusterung auf Grundlage der vorwiegend anthropogen beeinflussten Parameter
7-Cluster-Lösung nach k-means-Clusterung

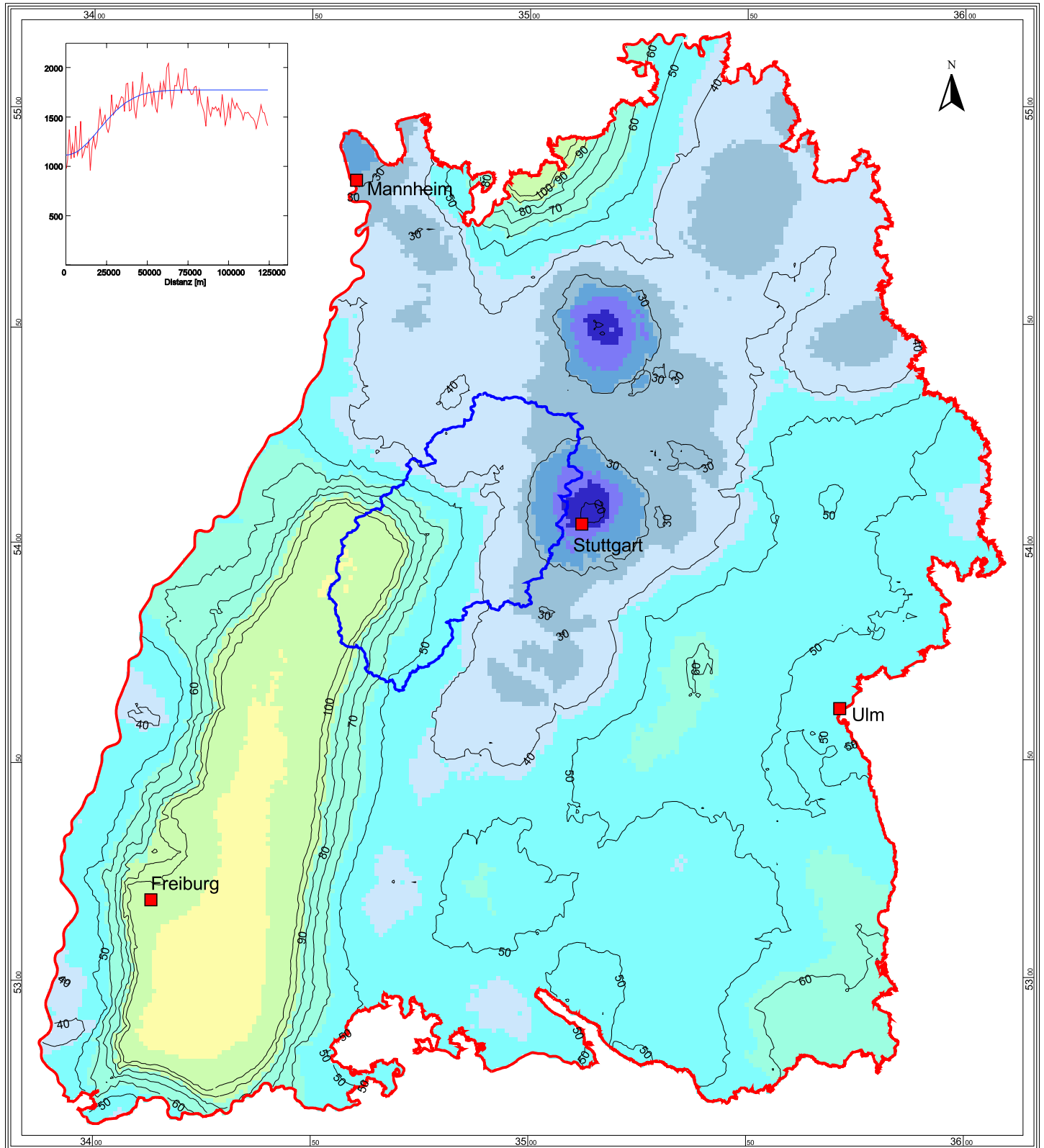
Messstellenzugehörigkeit zu Cluster

- | | | | |
|---|---|---|---|
| ● | 1 | ● | 4 |
| ● | 2 | ● | 5 |
| ● | 3 | ● | 6 |
| | | ● | 7 |

Landesgrenze

1:1250000

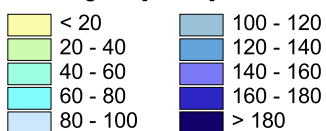
Datengrundlage: JDK 1994 - 1998, LfU
Bearbeitung: D. Stietenroth (2005)



Leitfähigkeit des oberflächennahen Grundwassers in Baden-Württemberg

geschätzt mittels Ordinary Kriging aus Daten der Landesmessnetze

Leitfähigkeit [mS/m]

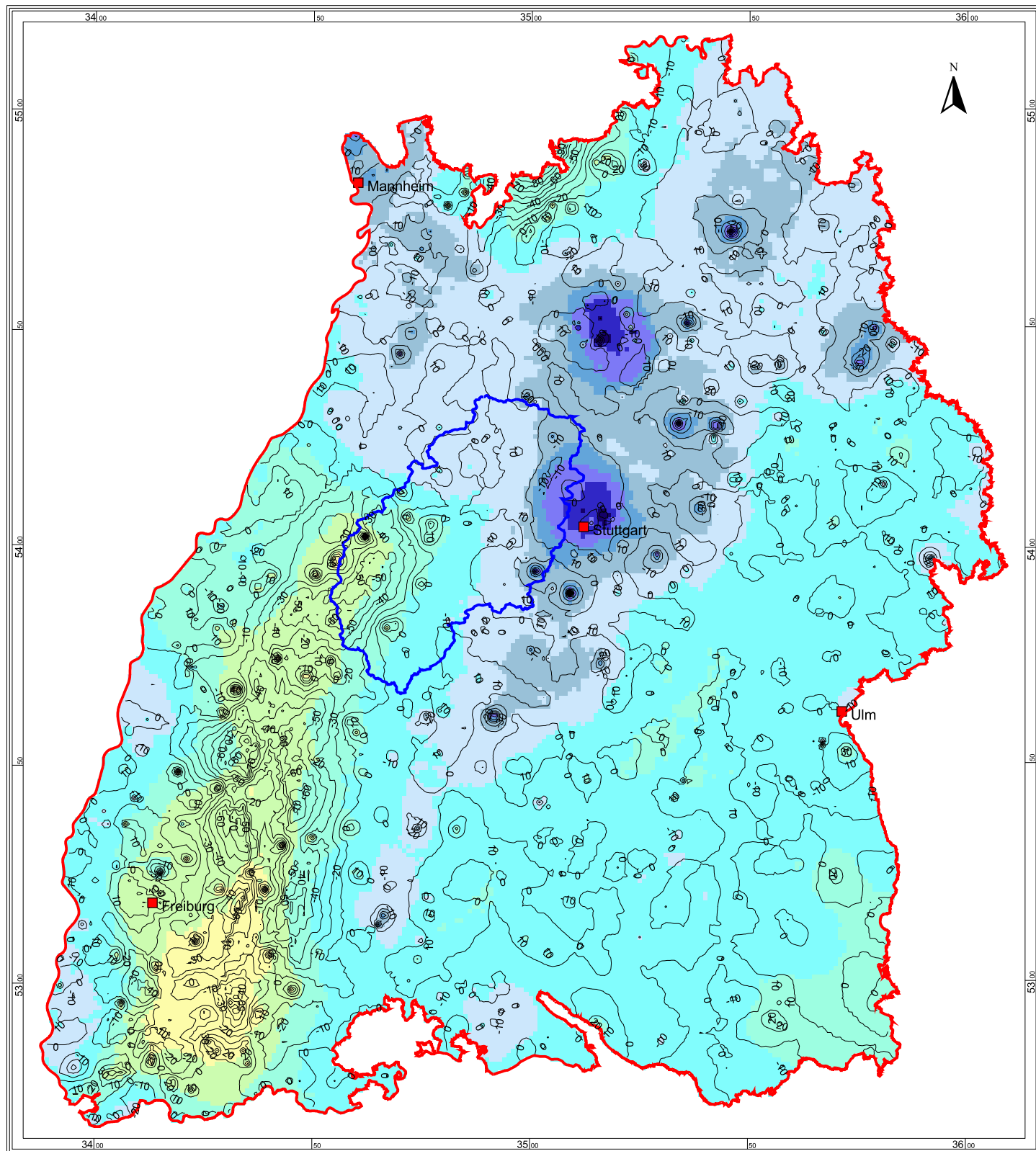


- Landesgrenze Baden-Württemberg
- Flächen außerhalb Baden-Württembergs (ohne Schätzwerte)
- Flussgebiet Enz
- prozentualer Schätzfehler

Datengrundlage: JDK 1994 - 1998, LfU
Zellengröße: 1000 x 1000 m
Bearbeitung: D. Stietenroth (2005)

Die Skizze oben links im Kartenfeld zeigt das der Schätzung zugrundeliegende omnidirektionale Variogramm und das daran angepasste -modell: Empirisches Variogramm aus Messdaten Zeitraum 1994 - 1998 an 1595 Messstellen. 2 Strukturen (Nugget, Gauß), Gesamtreichweite 50km.

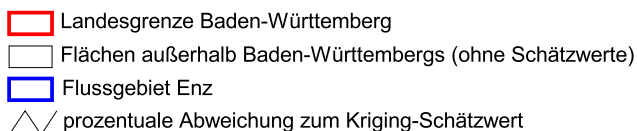
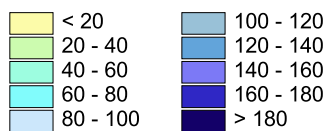
1:1250000



Leitfähigkeit des oberflächennahen Grundwassers in Baden-Württemberg

interpoliert mittels IDW aus Daten der Landesmessnetze

Leitfähigkeit [mS/m]

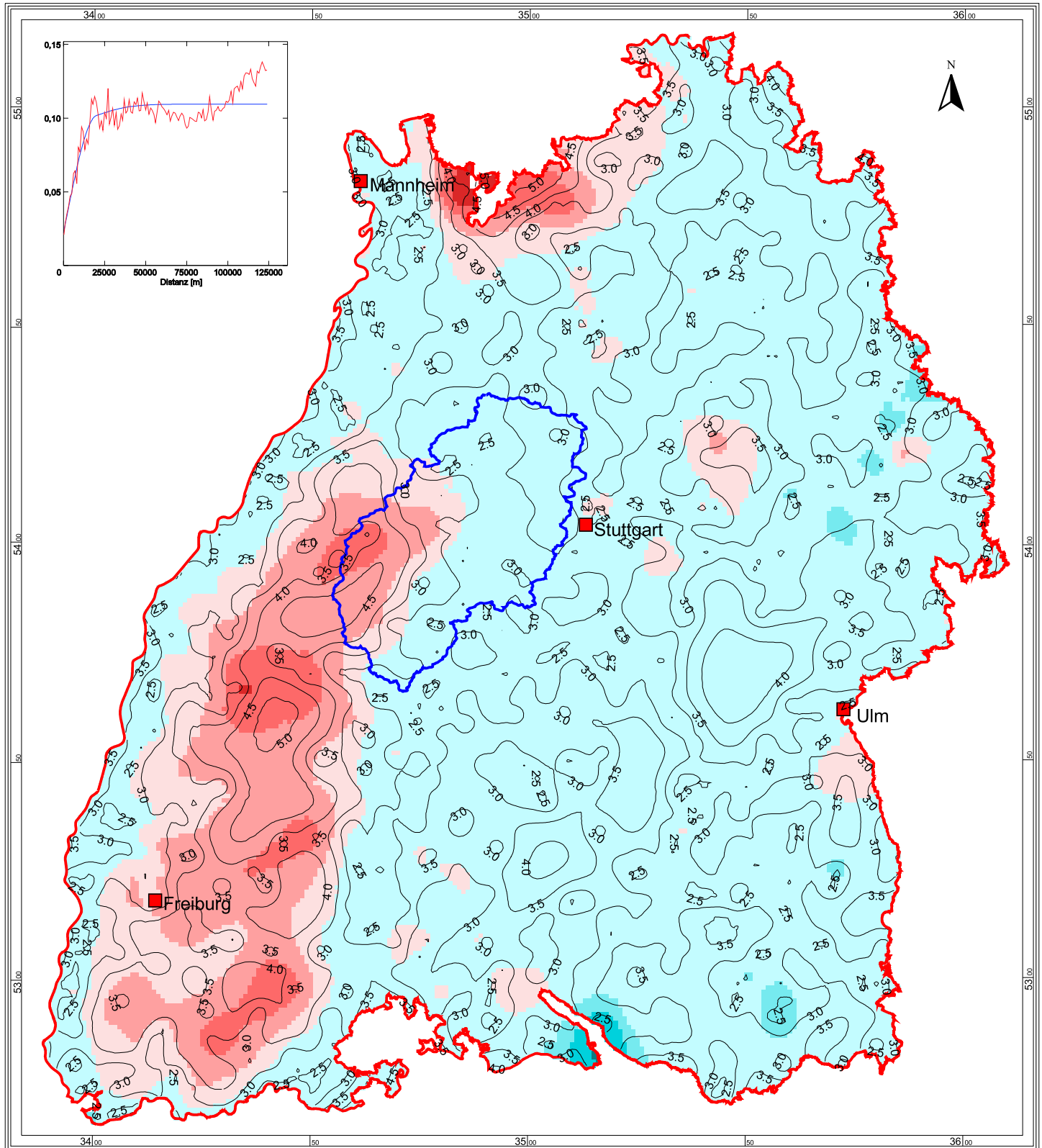


Datengrundlage: JDK 1994 - 1998, LfU

Zellengröße: 1000 x 1000 m

Bearbeitung: D. Stietenroth (2005)

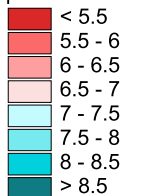
1:1250000



pH-Werte des oberflächennahen Grundwassers in Baden-Württemberg

geschätzt mittels Ordinary Kriging aus Daten der Landesmessnetze

pH-Schätzwerte

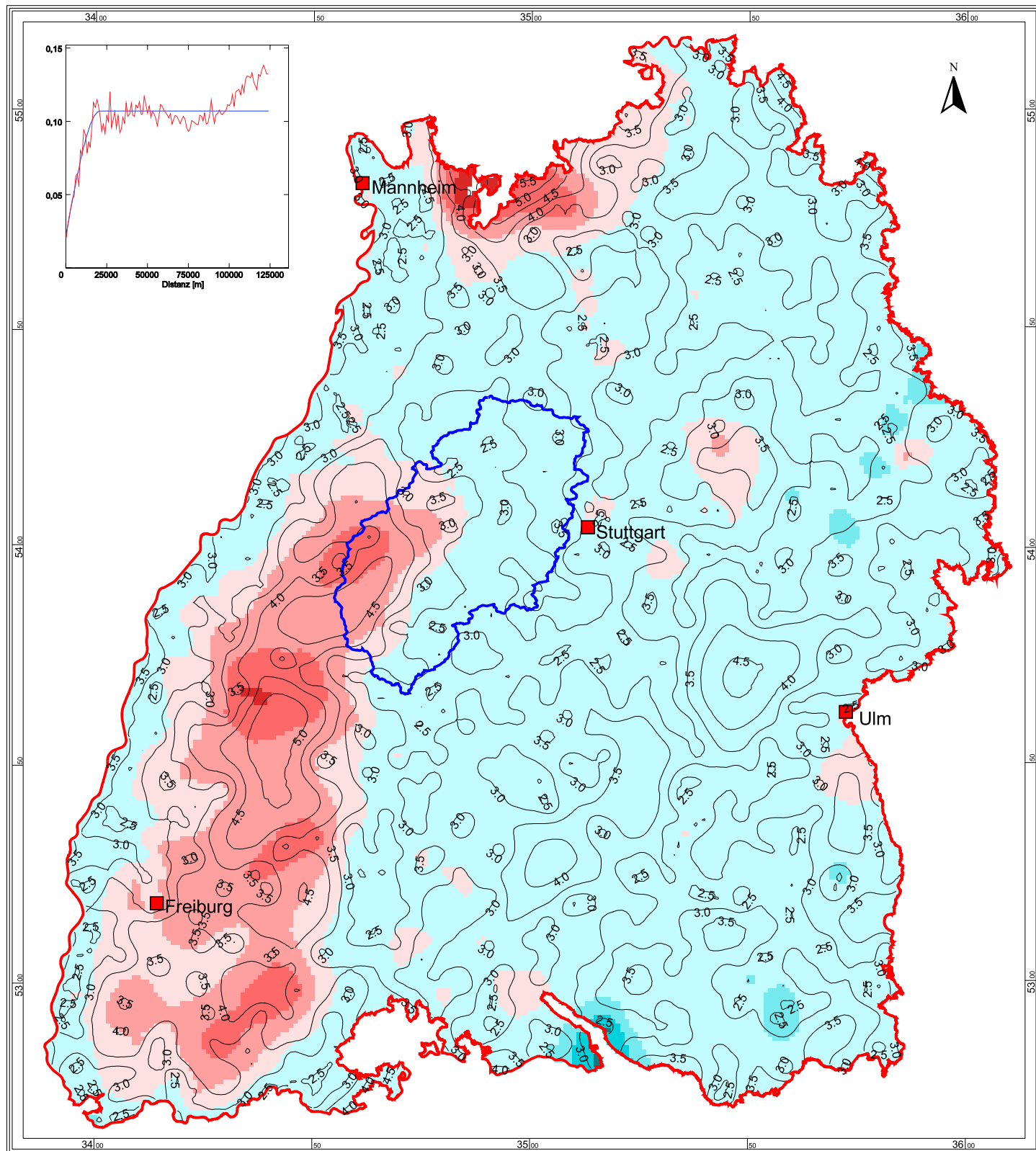


- Landesgrenze Baden-Württemberg
- Flächen außerhalb Baden-Württembergs (ohne Schätzwerte)
- Flussgebiet Enz
- prozentualer Schätzfehler

Die Skizze oben links im Kartenfeld zeigt das der Schätzung zugrundeliegende omnidirektionale Variogramm und das daran angepasste -modell: Empirisches Variogramm aus Messdaten Zeitraum 1994 - 1998 an 1596 Messstellen. 3 Strukturen (Nugget, Sphärisch, Gauß), Gesamtreichweite 70km.

1:1250000

Datengrundlage: JDK 1994 - 1998, LfU
Zellengröße: 1000 x 1000 m
Bearbeitung: D. Stietenroth (2005)



**pH-Werte des oberflächennahen Grundwassers
in Baden-Württemberg**
geschätzt mittels Ordinary Kriging aus Daten der Landesmessnetze

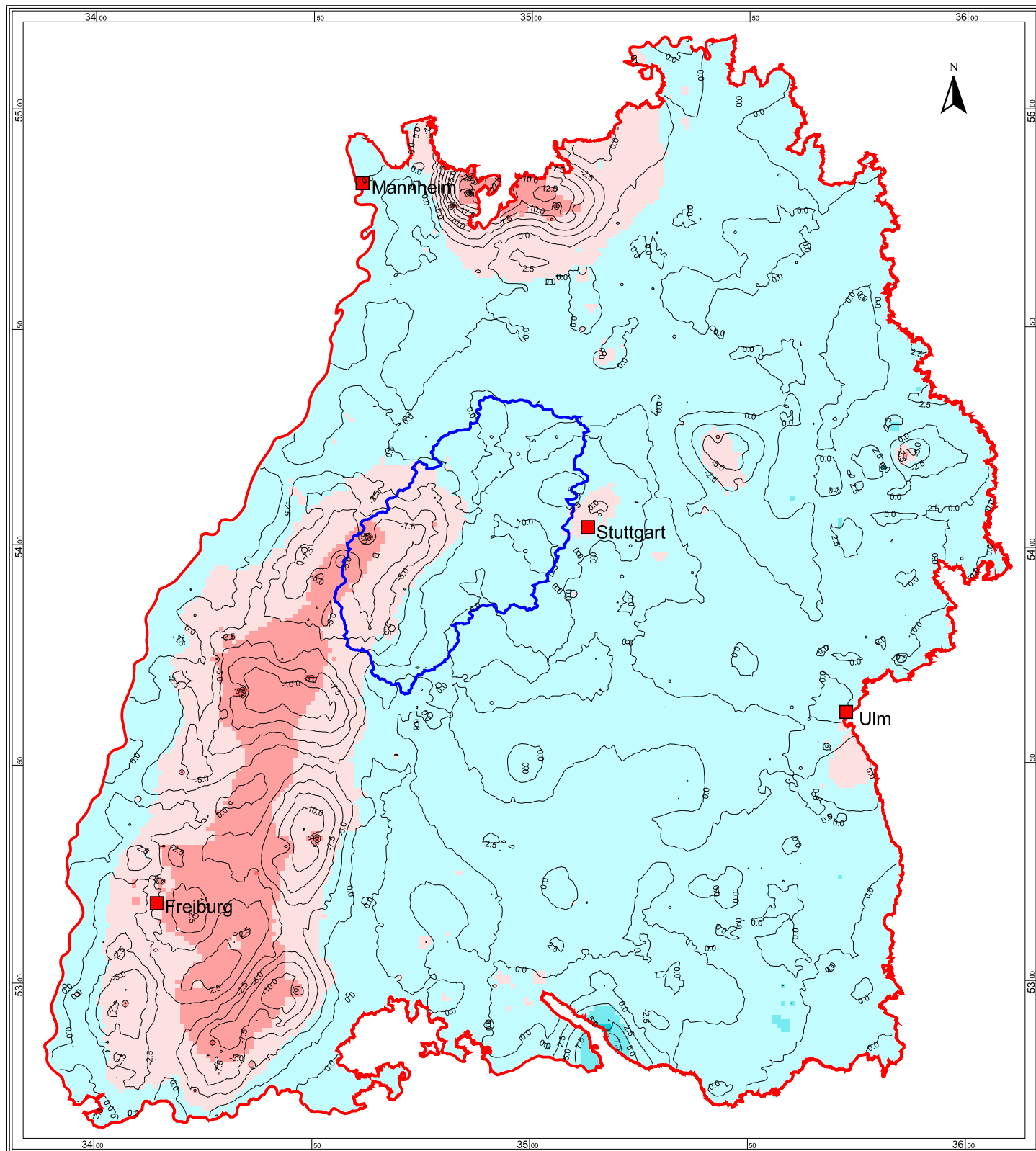
- < 5.5
- 5.5 - 6
- 6 - 6.5
- 6.5 - 7
- 7 - 7.5
- 7.5 - 8
- 8 - 8.5
- > 8.5

- Landesgrenze Baden-Württemberg
- Flächen außerhalb Baden-Württembergs (ohne Schätzwerte)
- Flussgebiet Enz
- prozentualer Schätzfehler

Die Skizze oben links im Kartenfeld zeigt das der Schätzung zugrundeliegende omnidirektionale Variogramm und das daran angepasste -modell: Empirisches Variogramm aus Messdaten Zeitraum 1994 - 1998 an 1596 Messstellen. 2 Strukturen (Nugget, Sphärisch), Gesamtreichweite 21km.

1:1250000

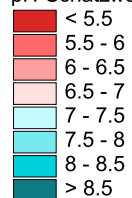
Datengrundlage: JDK 1994 - 1998, LfU
Zellengröße: 1000 x 1000 m
Bearbeitung: D. Stietenroth (2005)



pH-Werte des oberflächennahen Grundwassers in Baden-Württemberg

interpoliert mittels IDW aus Daten der Landesmessnetze

pH-Schätzwerte



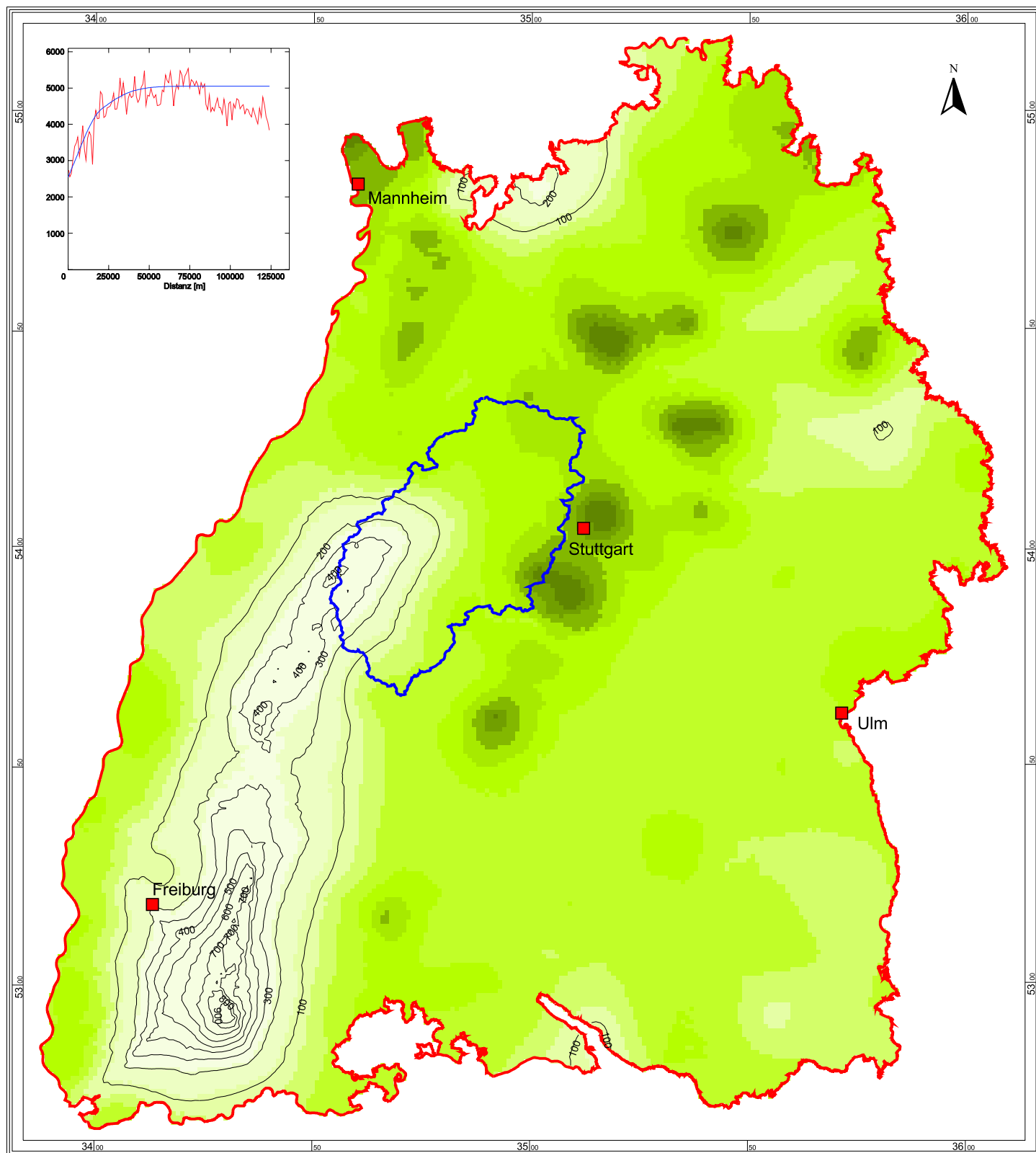
- Landesgrenze Baden-Württemberg
- Flächen außerhalb Baden-Württembergs (ohne Schätzwerte)
- Flussgebiet Enz
- prozentuale Abweichung zum Kriging-Schätzwert

1:1250000

Datengrundlage: JDK 1994 - 1998, LfU

Zellengröße: 1000 x 1000 m

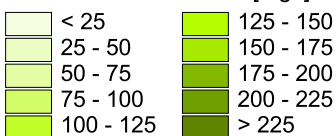
Bearbeitung: D. Stietenroth (2005)



Calcium-Konzentration des oberflächennahen Grundwassers in Baden-Württemberg

geschätzt mittels Ordinary Kriging aus Daten der Landesmessnetze

Calcium-Konzentration [mg/l]

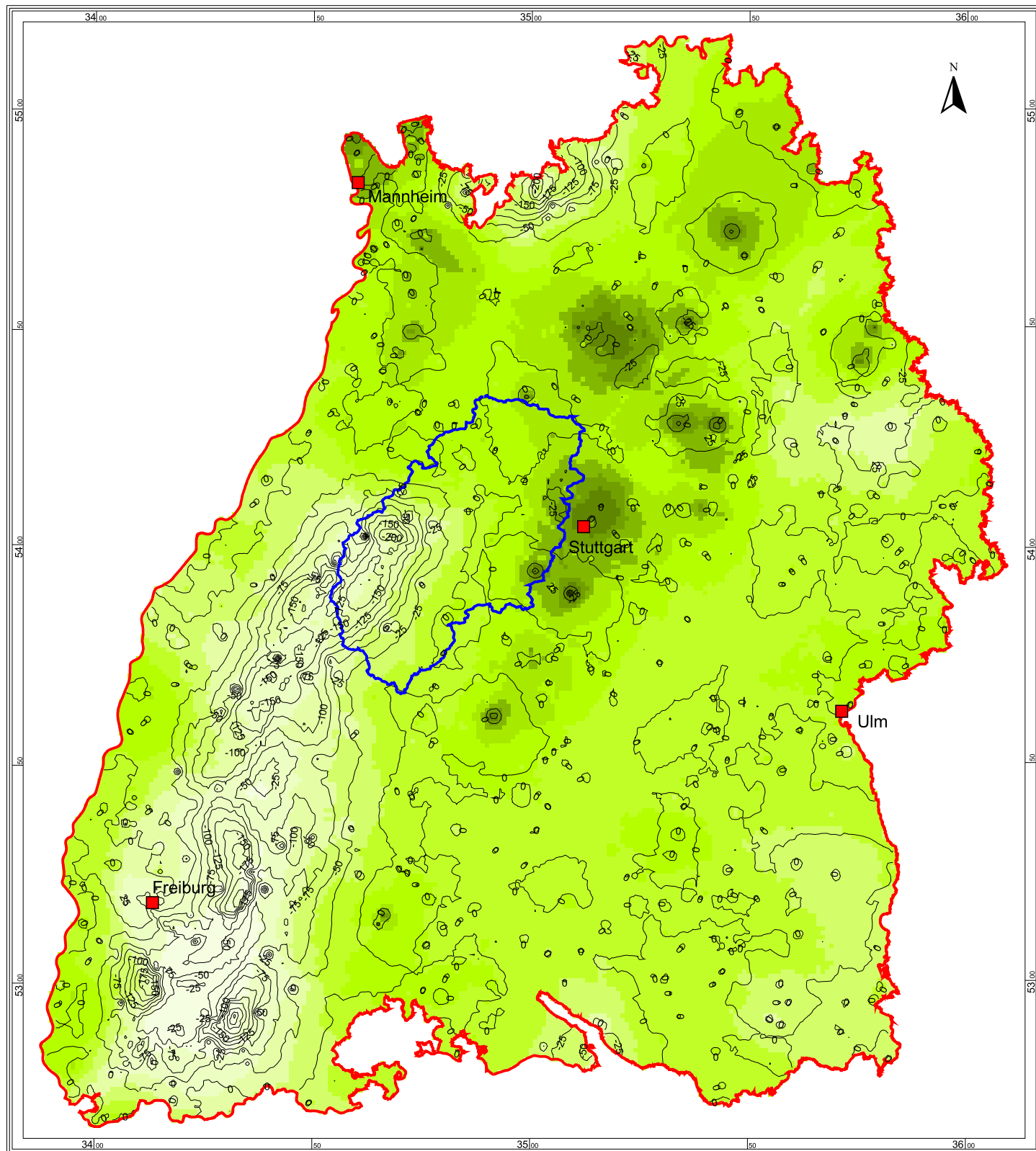


- Landesgrenze Baden-Württemberg
- Flächen außerhalb Baden-Württembergs (ohne Schätzwerte)
- Flussgebiet Enz
- prozentualer Schätzfehler

Datengrundlage: JDK 1994 - 1998, LfU
 Zellengröße: 1000 x 1000 m
 Bearbeitung: D. Stietenroth (2005)

Die Skizze oben links im Kartenfeld zeigt das der Schätzung zugrundeliegende omnidirektionale Variogramm und das daran angepasste -modell: Empirisches Variogramm aus Messdaten Zeitraum 1994 - 1998 an 1573 Messstellen. 3 Strukturen (Nugget, Sphärisch, Gauß), Gesamtreichweite 68,25km.

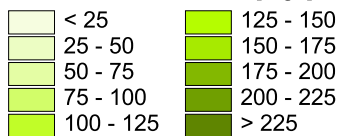
1:1250000



Calcium-Konzentration des oberflächennahen Grundwassers in Baden-Württemberg

interpoliert mittels IDW aus Daten der Landesmessnetze

Calcium-Konzentration [mg/l]



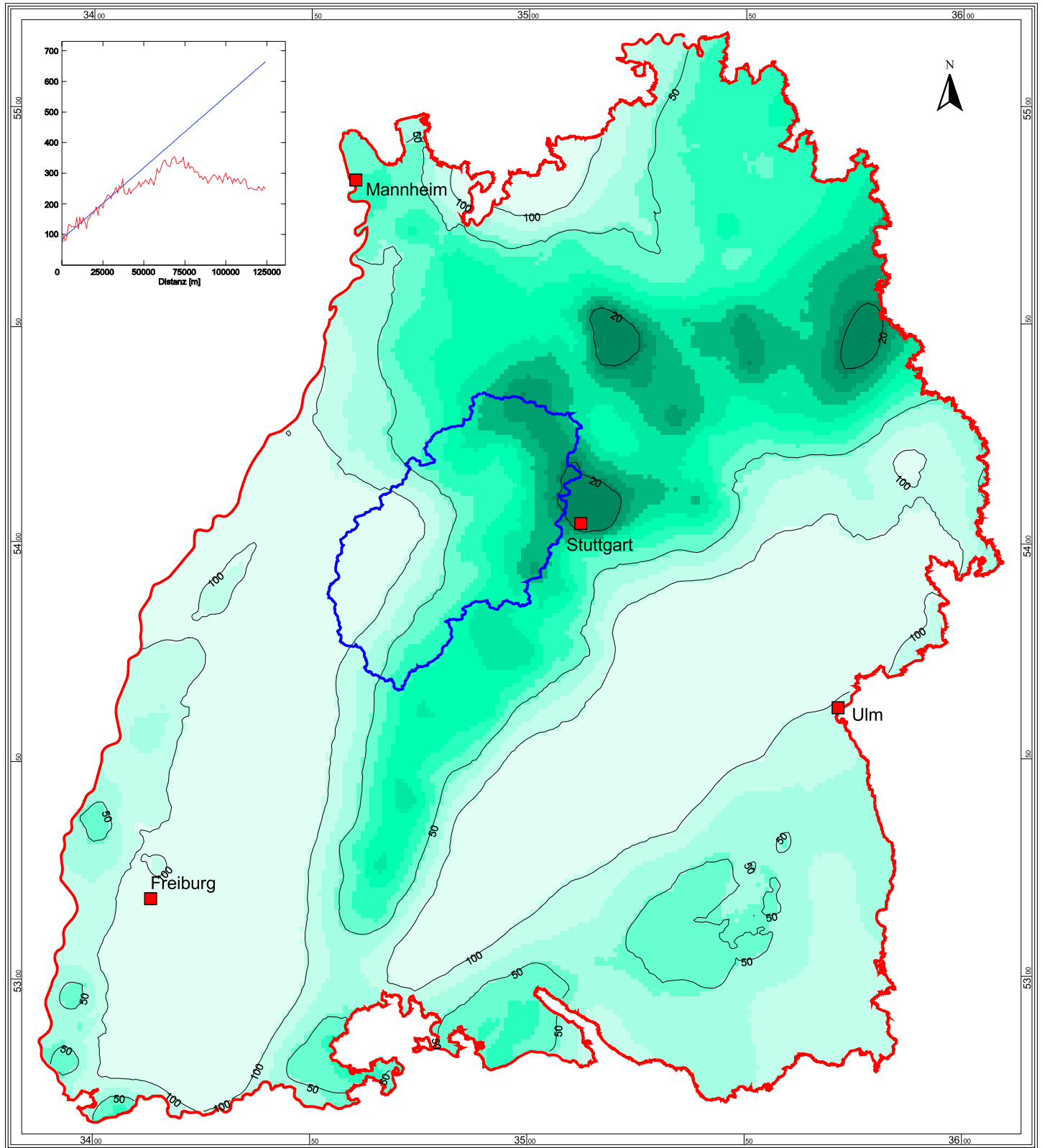
- Landesgrenze Baden-Württemberg
- Flächen außerhalb Baden-Württembergs (ohne Schätzwerte)
- Flussgebiet Enz
- prozentuale Abweichung zum Kriging-Schätzwert

Datengrundlage: JDK 1994 - 1998, LfU

Zellengröße: 1000 x 1000 m

Bearbeitung: D. Stietenroth (2005)

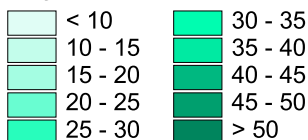
1:1250000



Magnesium-Konzentration des oberflächennahen Grundwassers in Baden-Württemberg

geschätzt mittels Ordinary Kriging aus Daten der Landesmessnetze

Magnesium-Konzentration [mg/l]



- Landesgrenze Baden-Württemberg
- Flächen außerhalb Baden-Württembergs (ohne Schätzwerte)
- Flussgebiet Enz
- prozentualer Schätzfehler

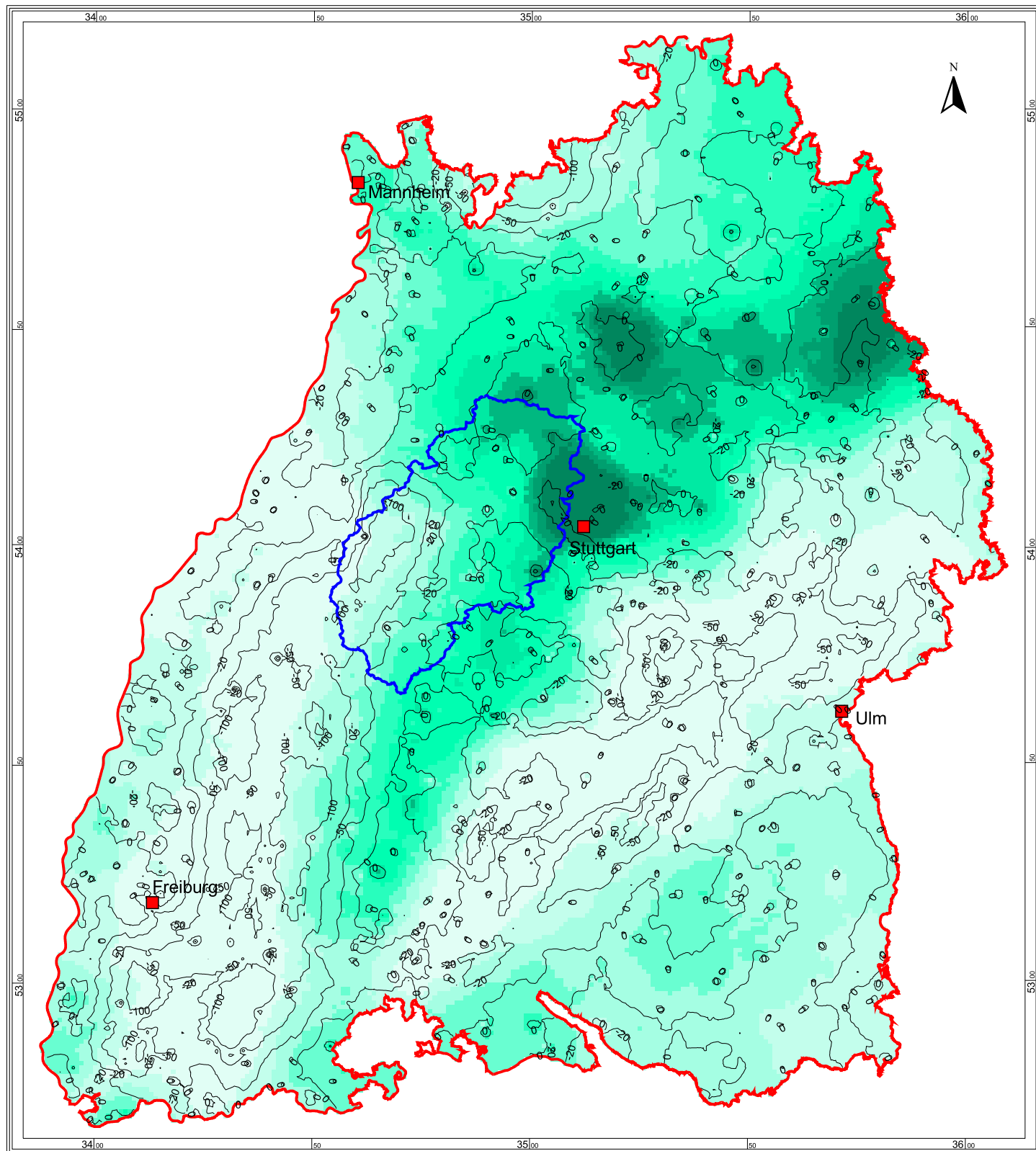
Datengrundlage: JDK 1994 - 1998, LfU

Zellengröße: 1000 x 1000 m

Bearbeitung: D. Stietenroth (2005)

Die Skizze oben links im Kartenfeld zeigt das der Schätzung zugrundeliegende omnidirektionale Variogramm und das daran angepasste -modell: Empirisches Variogramm aus Messdaten Zeitraum 1994 - 1998 an 1561 Messstellen. 2 Strukturen (Nugget, Gauß), Gesamtreichweite 37,5km.

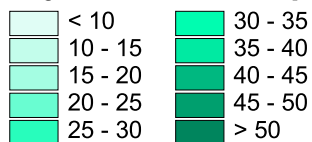
1:1250000



Magnesium-Konzentration des oberflächennahen Grundwassers in Baden-Württemberg

interpoliert mittels IDW aus Daten der Landesmessnetze

Magnesium-Konzentration [mg/l]



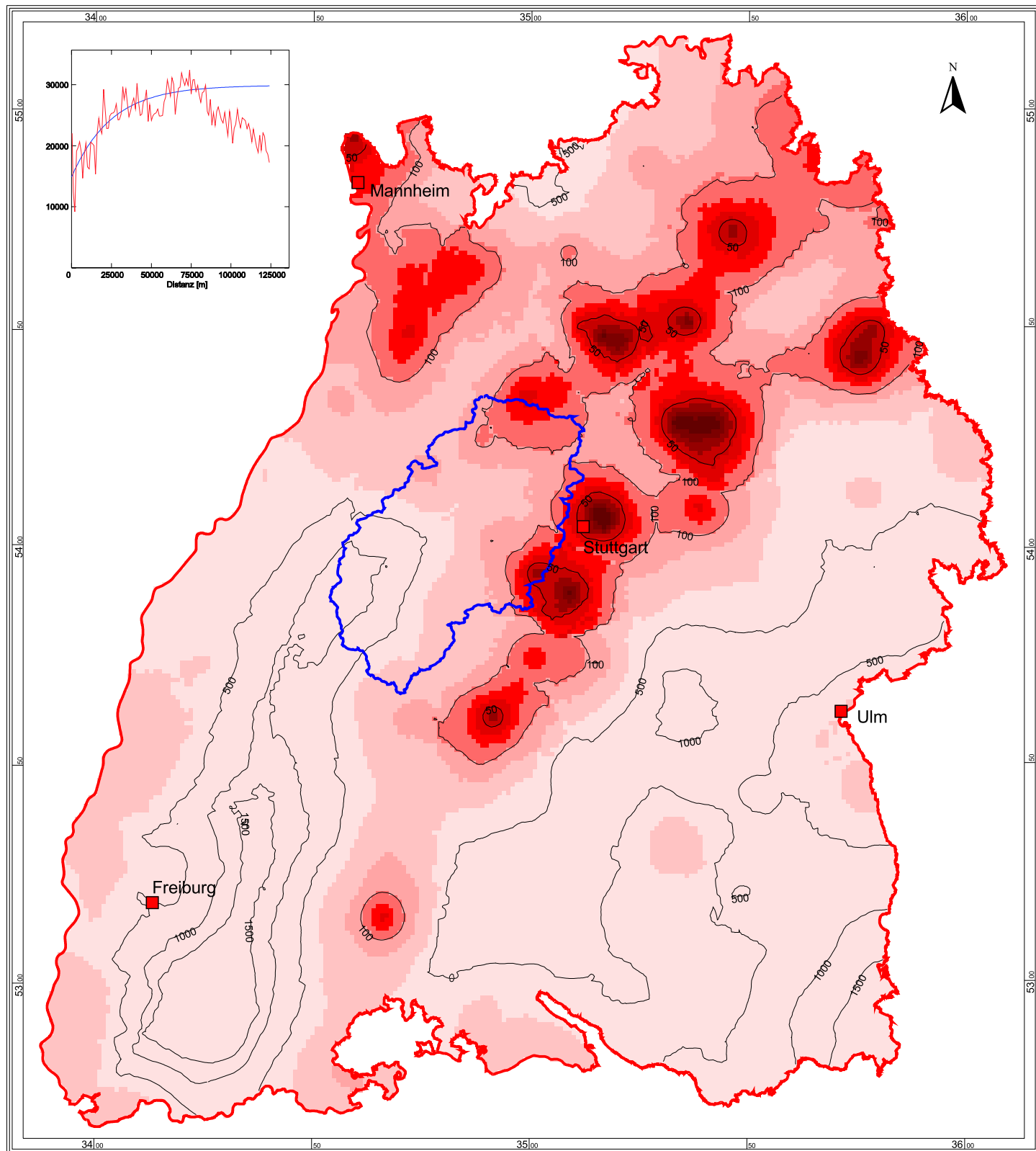
- Landesgrenze Baden-Württemberg
- Flächen außerhalb Baden-Württembergs (ohne Schätzwerte)
- Flussgebiet Enz
- prozentuale Abweichung zum Kriging-Schätzwert

Datengrundlage: JDK 1994 - 1998, LfU

Zellengröße: 1000 x 1000 m

Bearbeitung: D. Stietenroth (2005)

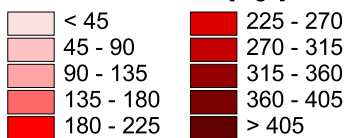
1:1250000



Sulfat-Konzentrationen des oberflächennahen Grundwassers in Baden-Württemberg

geschätzt mittels Ordinary Kriging aus Daten der Landesmessnetze

Sulfat-Konzentration [mg/l]



- Landesgrenze Baden-Württemberg
- Flächen außerhalb Baden-Württembergs (ohne Schätzwerte)
- Flussgebiet Enz
- prozentualer Schätzfehler

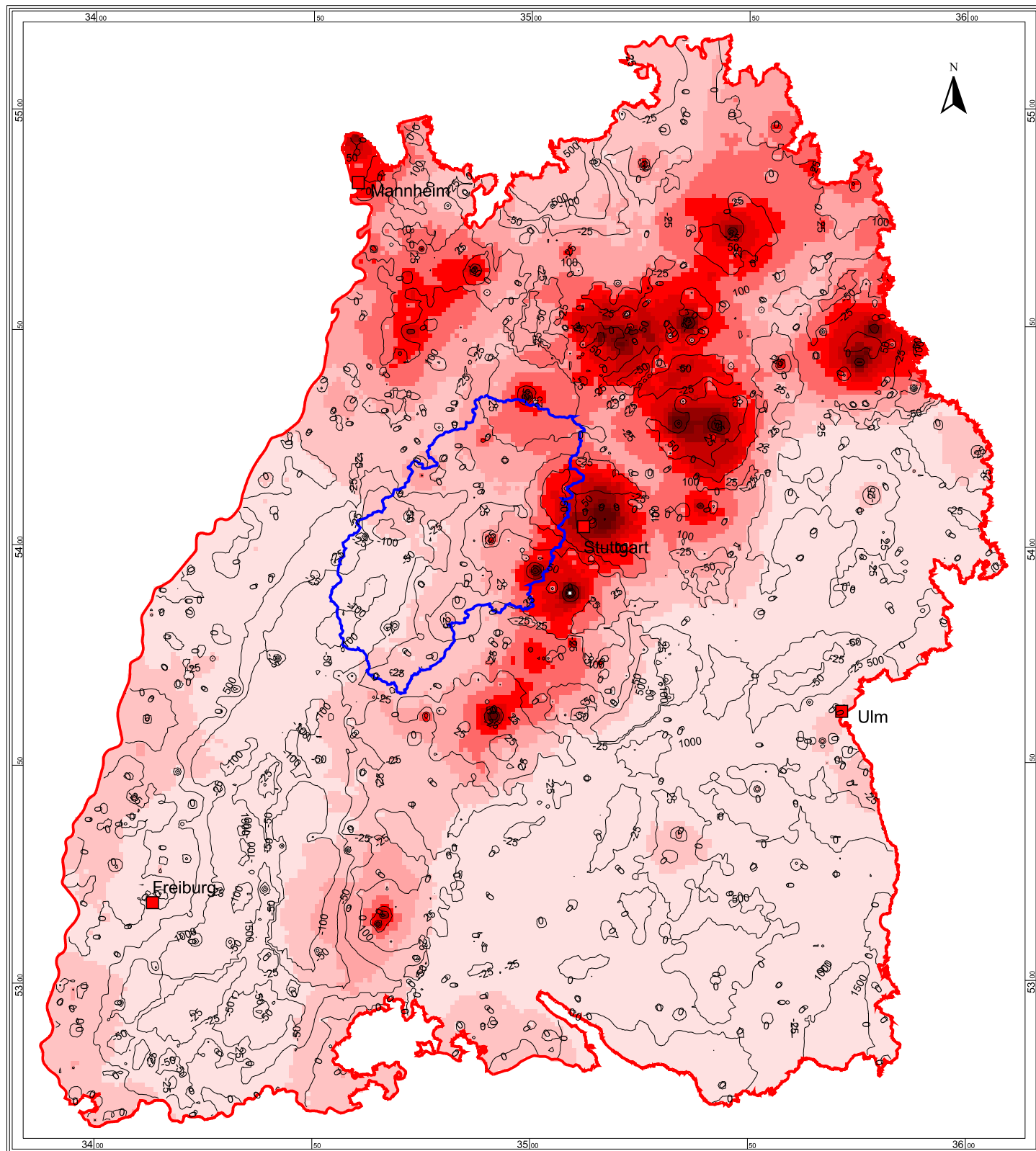
Datengrundlage: JDK 1994 - 1998, LfU

Zellengröße: 1000 x 1000 m

Bearbeitung: D. Stietenroth (2005)

Die Skizze oben links im Kartenfeld zeigt das der Schätzung zugrundeliegende omnidirektionale Variogramm und das daran angepasste -modell: Empirisches Variogramm aus Messdaten Zeitraum 1994 - 1998 an 1559 Messstellen. 2 Strukturen (Nugget, Exponentiell), Gesamtreichweite 75km.

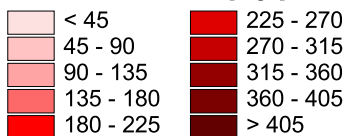
1:1250000



Sulfat-Konzentrationen des oberflächennahen Grundwassers in Baden-Württemberg

interpoliert mittels IDW aus Daten der Landesmessnetze

Sulfat-Konzentration [mg/l]



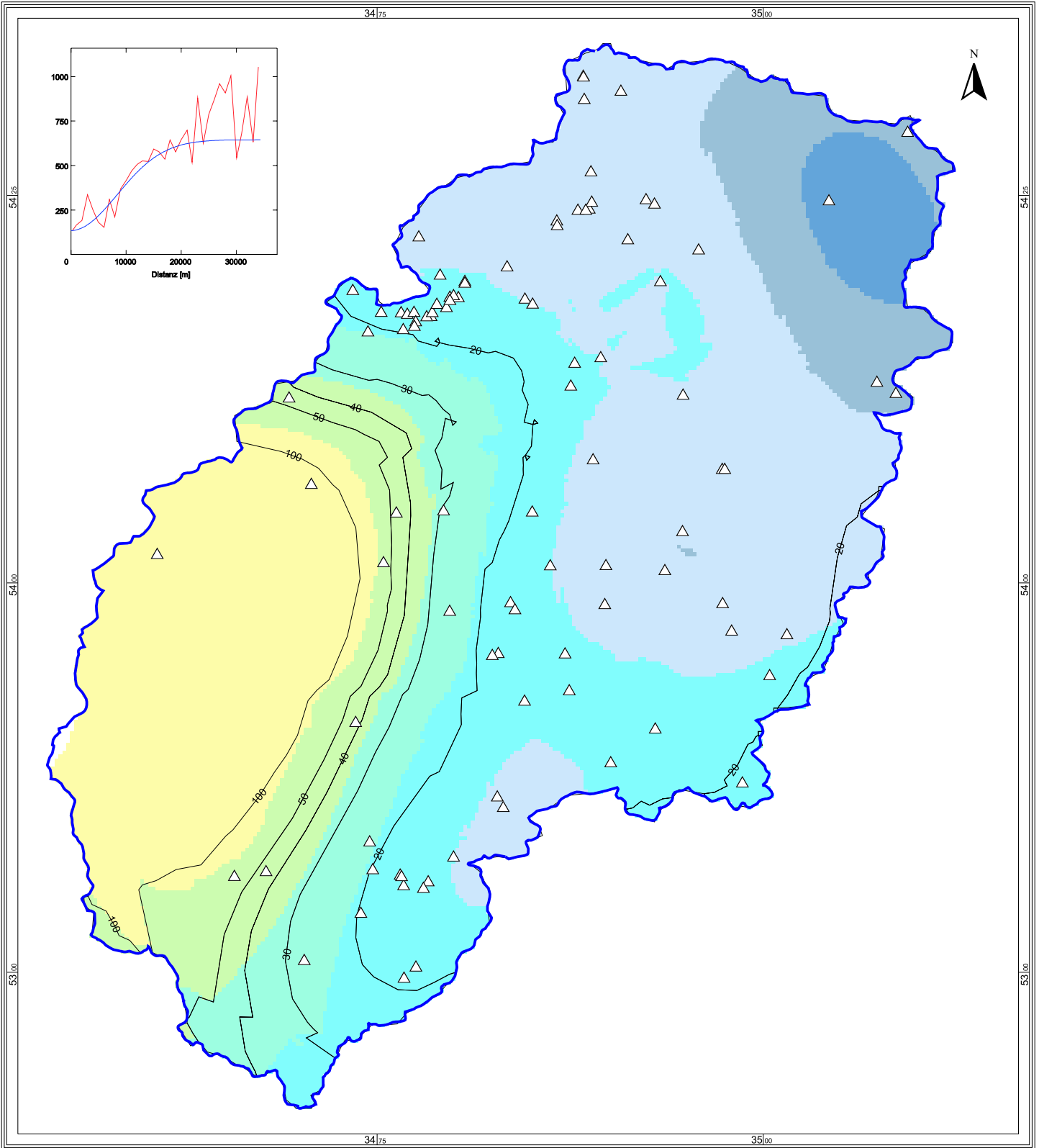
- Landesgrenze Baden-Württemberg
- Flächen außerhalb Baden-Württembergs (ohne Schätzwerte)
- Flussgebiet Enz
- prozentuale Abweichung zum Kriging-Schätzwert

Datengrundlage: JDK 1994 - 1998, LfU

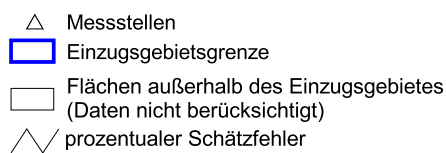
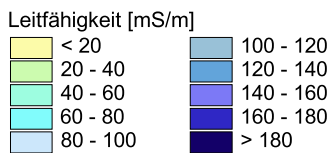
Zellengröße: 1000 x 1000 m

Bearbeitung: D. Stietenroth (2005)

1:1250000

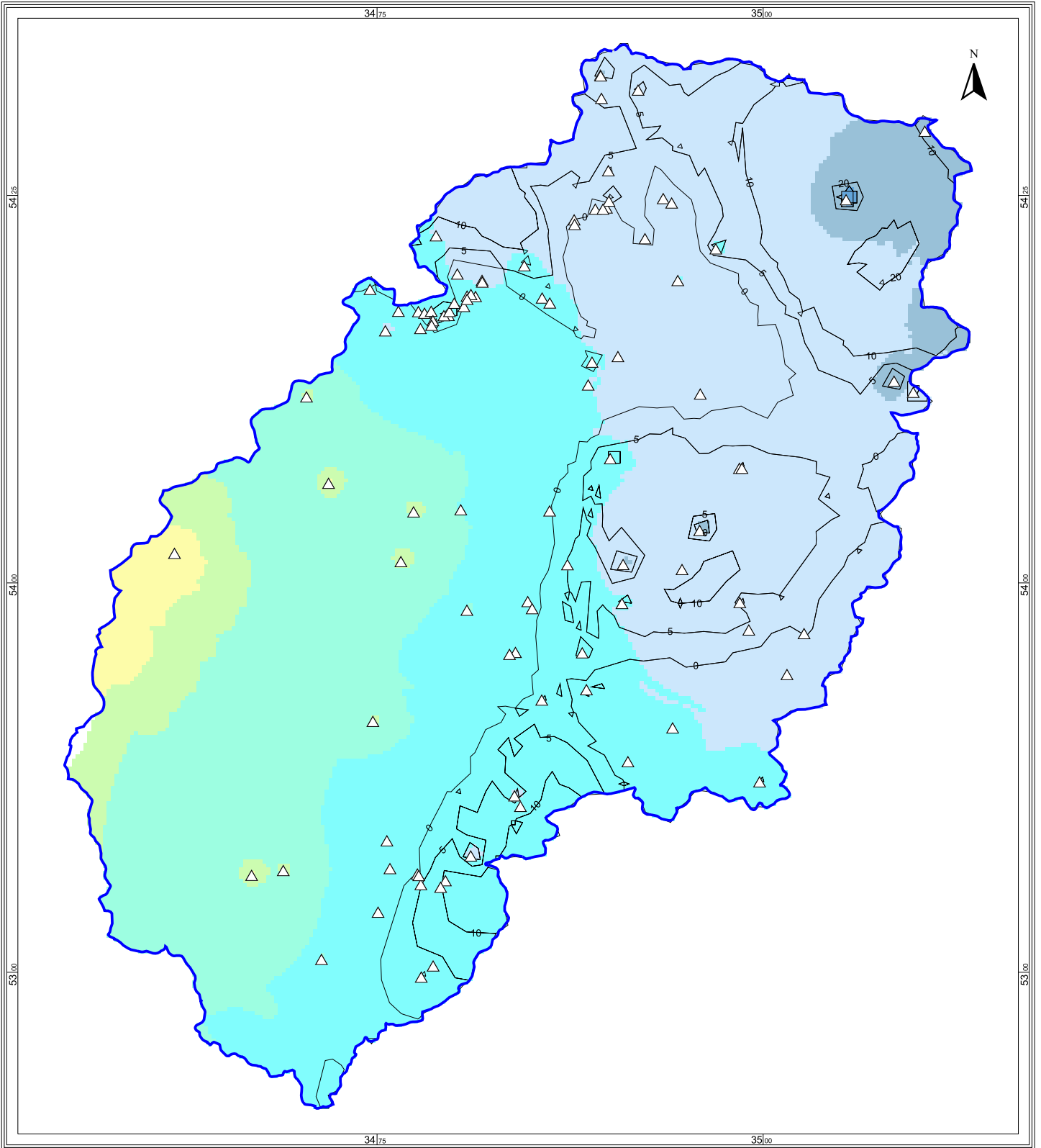


Leitfähigkeit des oberflächennahen Grundwassers im Einzugsgebiet der Enz geschätzt mittels Ordinary Kriging aus Daten der Landesmessnetze



Datengrundlage: JDK 1994 - 1998, LFU
Zellengröße: 250 x 250 m
Bearbeitung: D. Stietenroth (2005)

1:350000



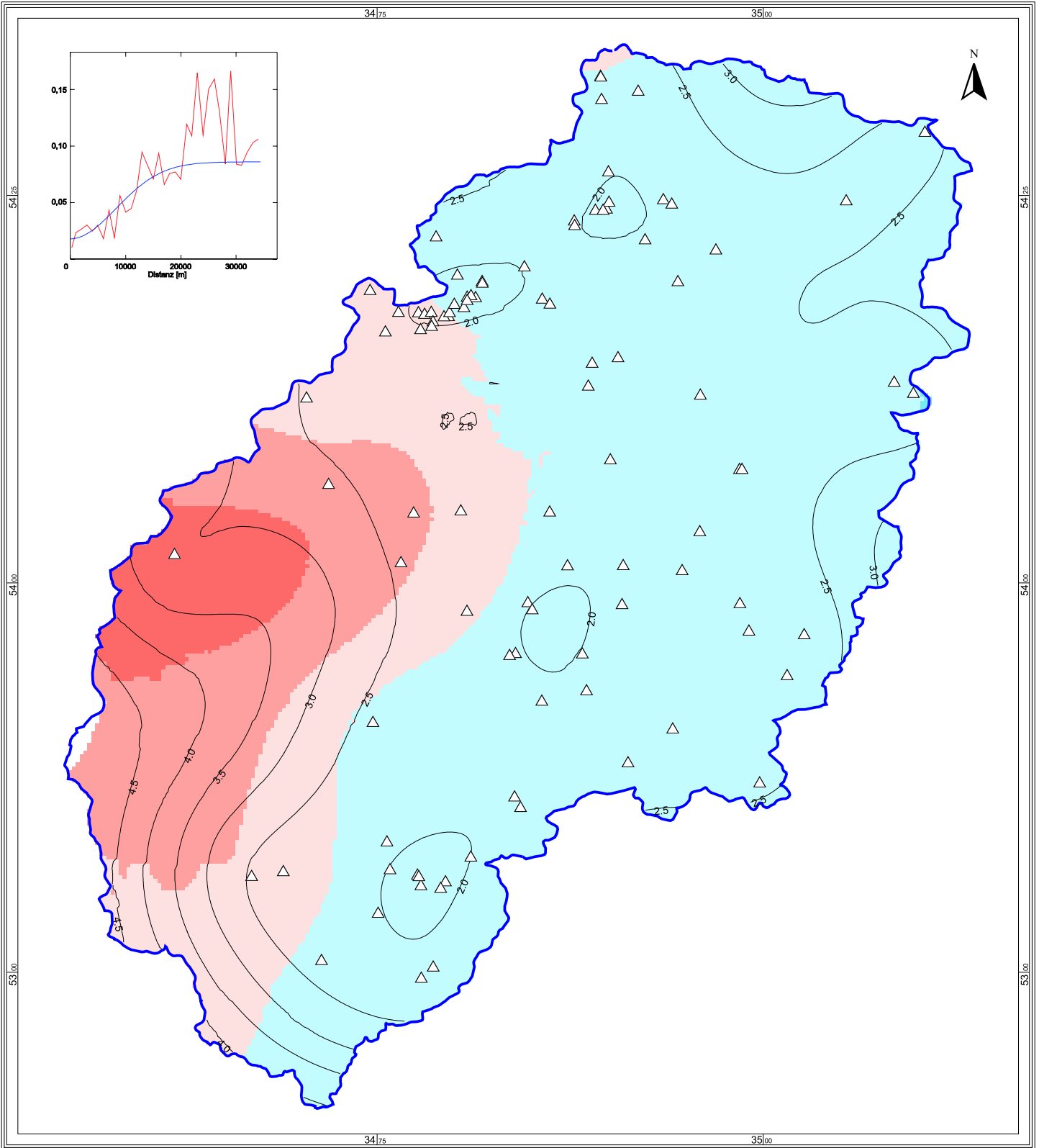
**Leitfähigkeit des oberflächennahen Grundwassers
im Einzugsgebiet der Enz**
interpoliert mittels IDW aus Daten der Landesmessnetze

Leitfähigkeit [mS/m]	
 < 20	 100 - 120
 20 - 40	 120 - 140
 40 - 60	 140 - 160
 60 - 80	 160 - 180
 80 - 100	 > 180

- Messstellen
- Einzugsgebietsgrenze
- Flächen außerhalb des Einzugsgebietes (Daten nicht berücksichtigt)
- prozentuale Abweichung zum Kriging-Schätzwert

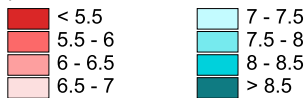
Datengrundlage: JDK 1994 - 1998, LFU
Zellengröße: 250 x 250 m
Bearbeitung: D. Stietenroth (2005)





1:350000



**pH-Werte des obeflächennahen Grundwassers
im Einzugsgebiet der Enz**
geschätzt mittels Ordinary Kriging aus Daten der Landesmessnetze

pH-Schätzwerte



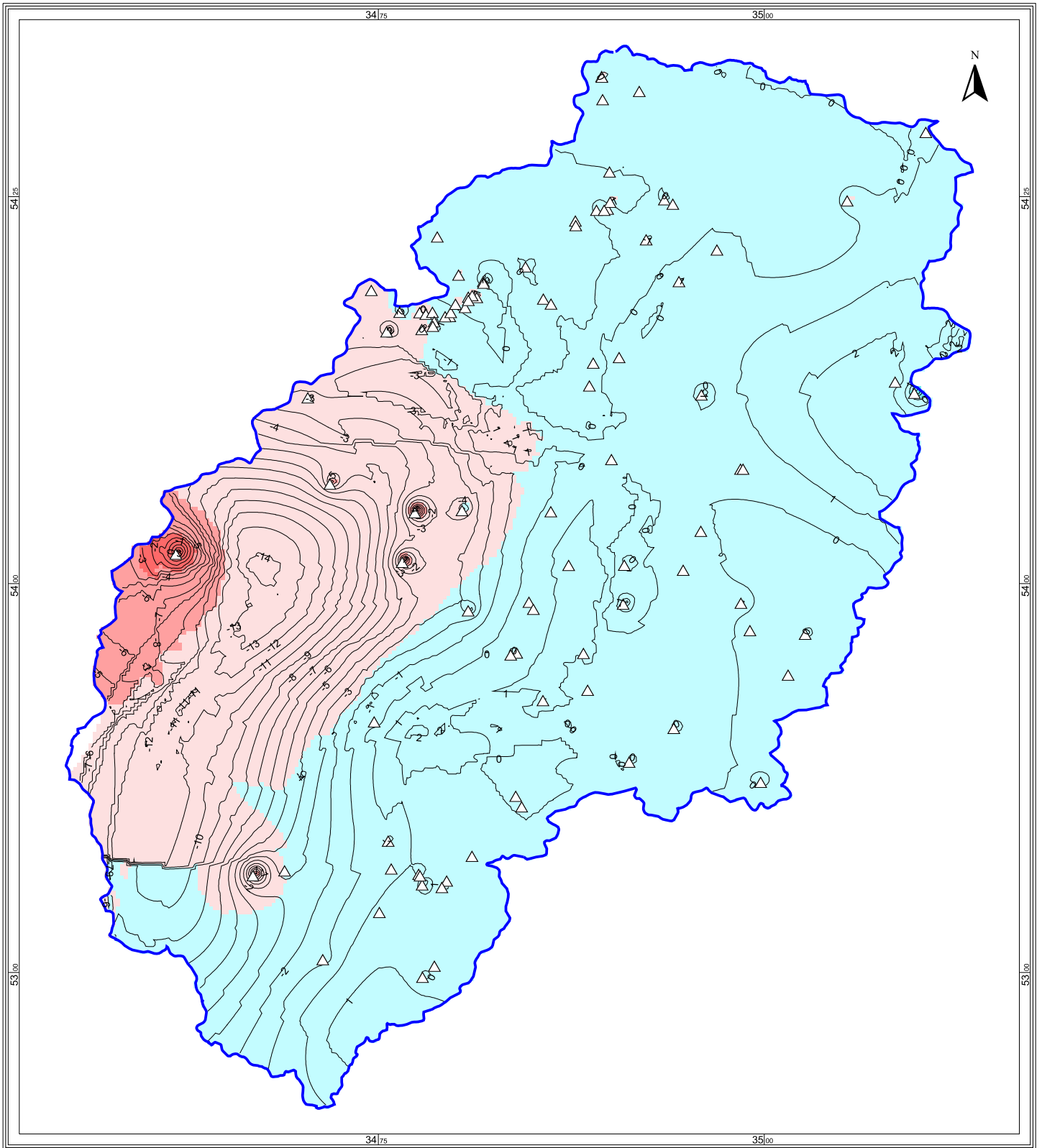
-  Messstellen
-  Einzugsgebietsgrenze
-  Flächen außerhalb des Einzugsgebietes
(Daten nicht berücksichtigt)
-  prozentualer Schätzfehler

Datengrundlage: JDK 1994 - 1998, LFU

Zellengröße: 250 x 250 m

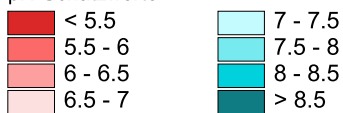
Bearbeitung: D. Stietenroth (2005)





1:350000



**pH-Werte des oberflächennahen Grundwassers
im Einzugsgebiet der Enz**
interpoliert mittels IDW aus Daten der Landesmessnetze

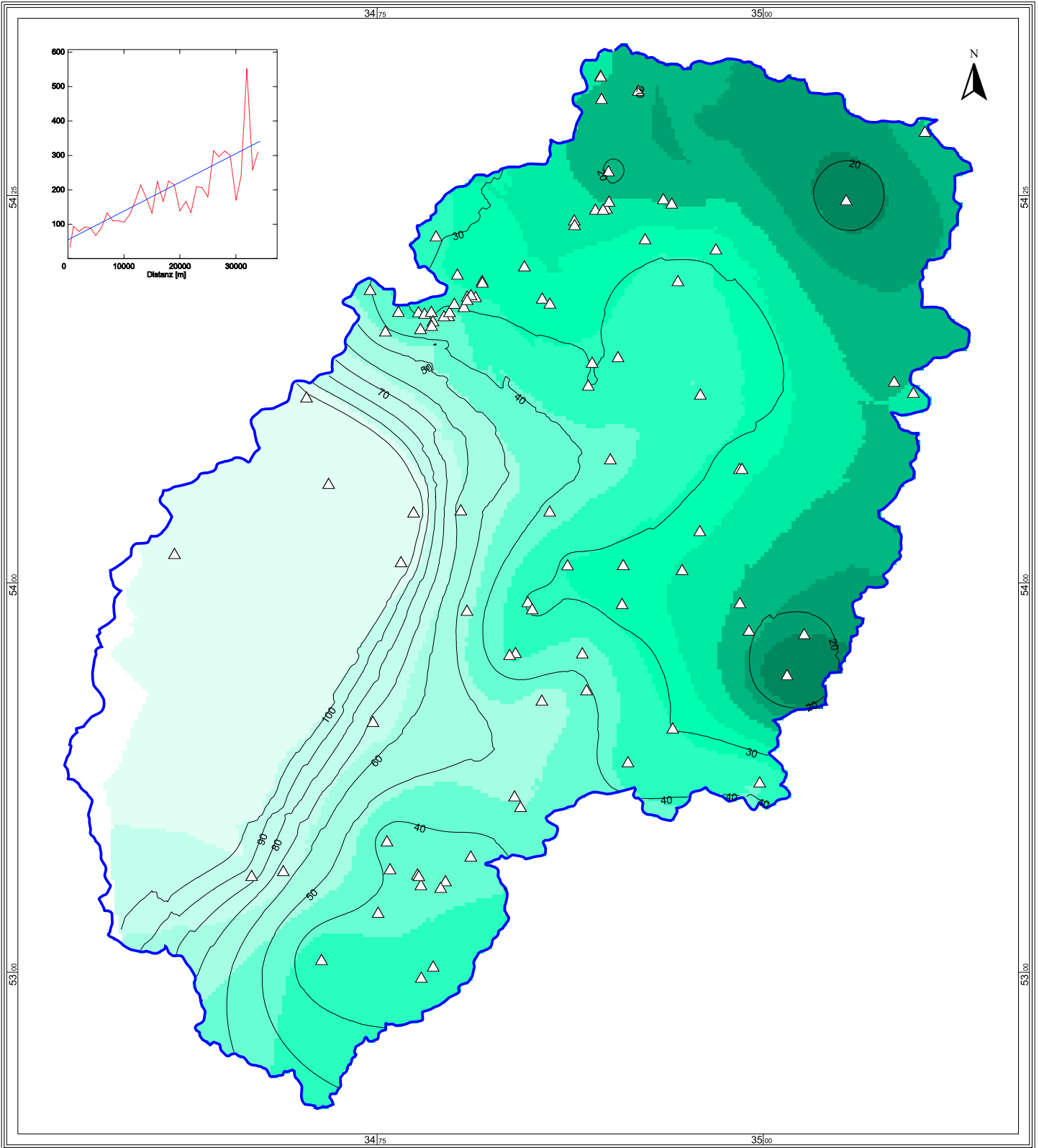
pH-Schätzwerte



-  Messstellen
-  Einzugsgebietsgrenze
-  Flächen außerhalb des Einzugsgebietes
(Daten nicht berücksichtigt)
-  prozentuale Abweichung zum Kriging-Schätzwert

Datengrundlage: JDK 1994 - 1998, LfU
Zellengröße: 250 x 250 m
Bearbeitung: D. Stietenroth (2005)

1:350000



Magnesium-Konzentration des oberflächennahen Grundwassers in Baden-Württemberg

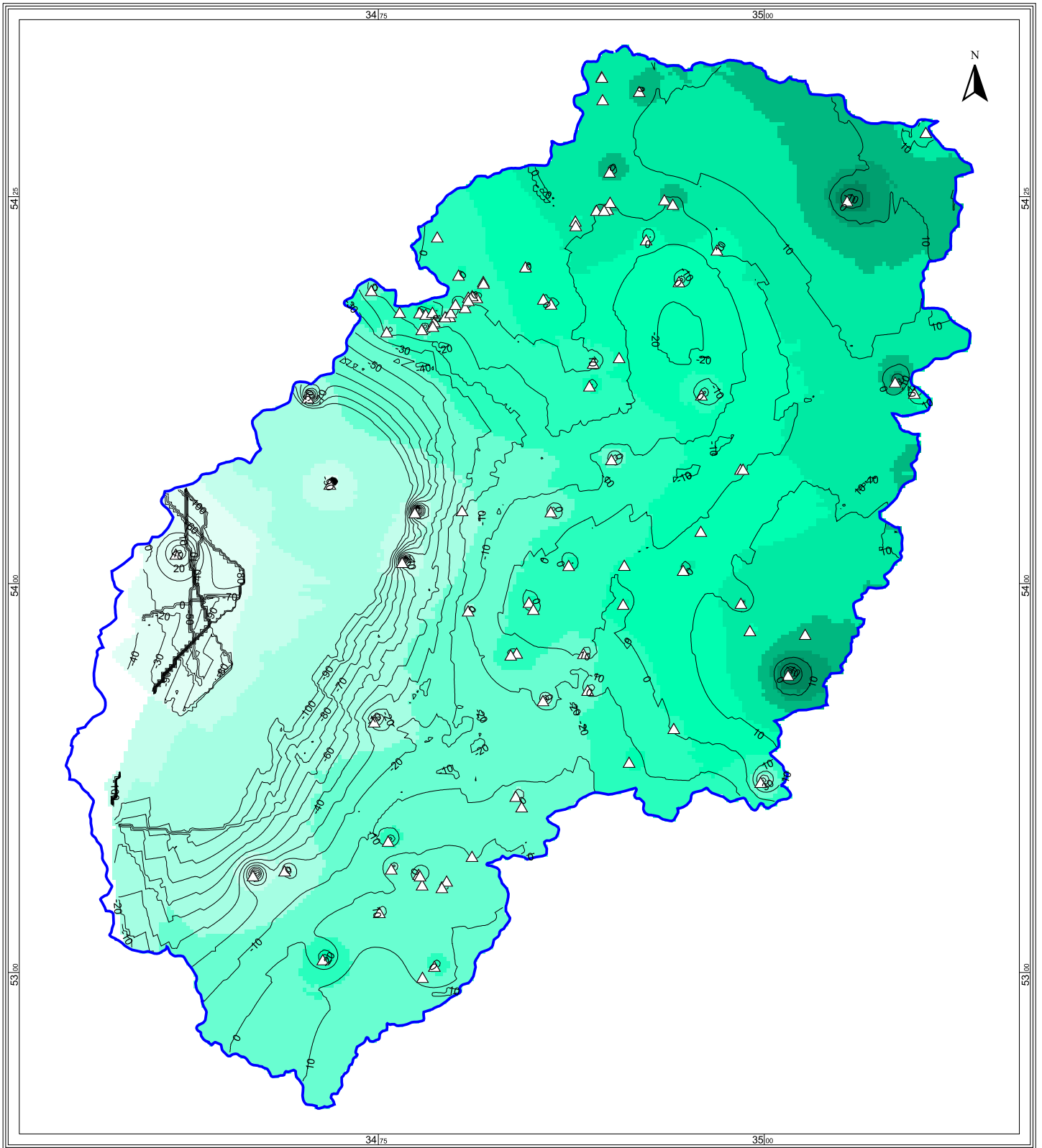
geschätzt mittels Ordinary Kriging aus Daten der Landesmessnetze

Magnesium-Konzentration [mg/l]	
< 10	30 - 35
10 - 15	35 - 40
15 - 20	40 - 45
20 - 25	45 - 50
25 - 30	> 50

- △ Messstellen
- Einzugsgebietsgrenze
- Flächen außerhalb des Einzugsgebietes (Daten nicht berücksichtigt)
- ∧/∨ prozentualer Schätzfehler

Datengrundlage: JDK 1994 - 1998, LfU
Zellengröße: 250 x 250 m
Bearbeitung: D. Stietenroth (2005)

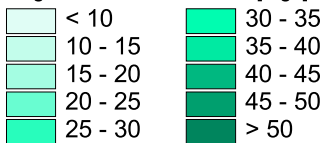
1:350000



Magnesium-Konzentration des oberflächennahen Grundwassers in Baden-Württemberg

interpoliert mittels IDW aus Daten der Landesmessnetze

Magnesium-Konzentration [mg/l]



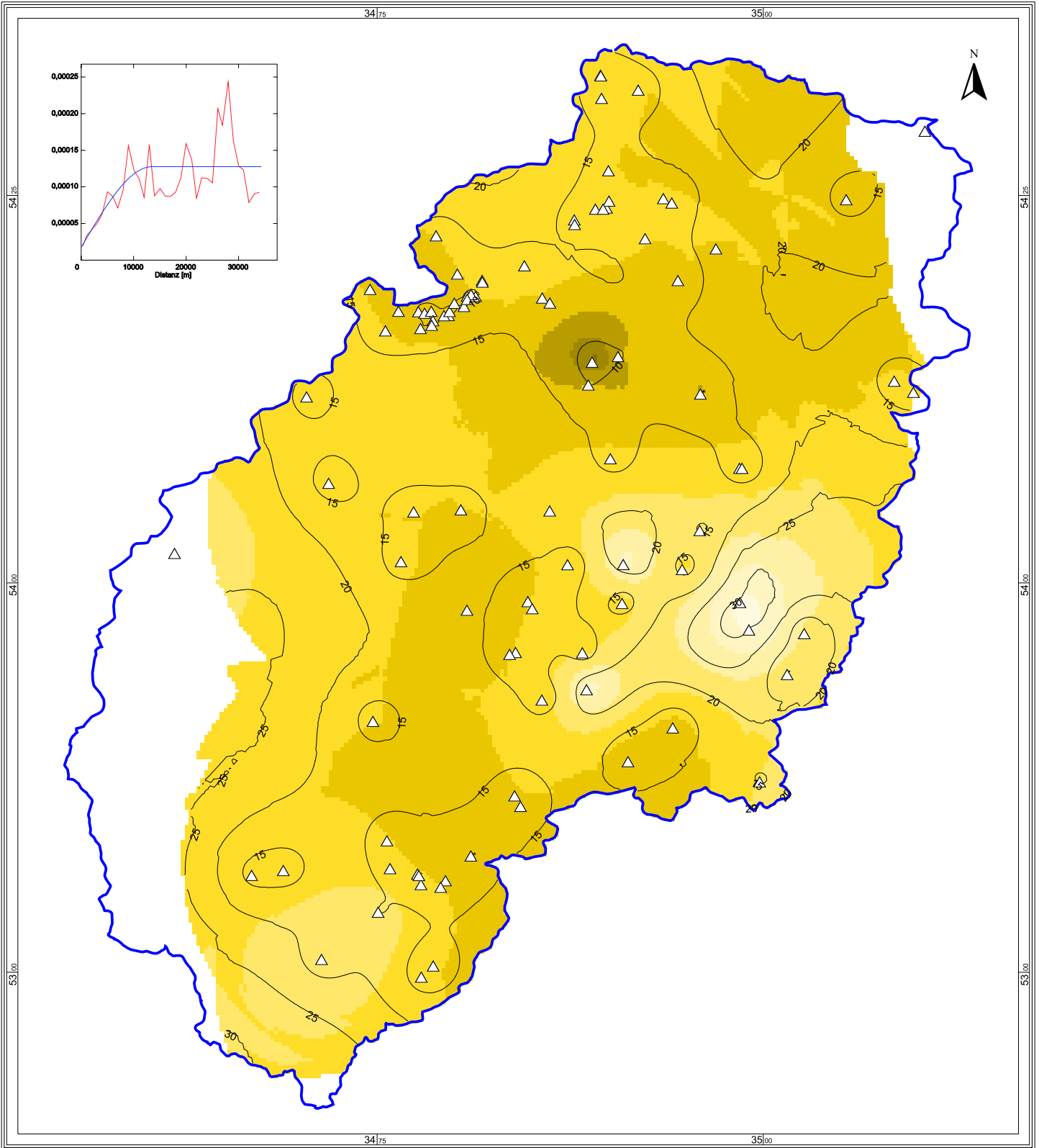
- Messstellen
- Einzugsgebietsgrenze
- Flächen außerhalb des Einzugsgebietes
(Daten nicht berücksichtigt)
- prozentuale Abweichung zum Kriging-Schätzwert

Datengrundlage: JDK 1994 - 1998, LFU

Zellengröße: 250 x 250 m

Bearbeitung: D. Stietenroth (2005)

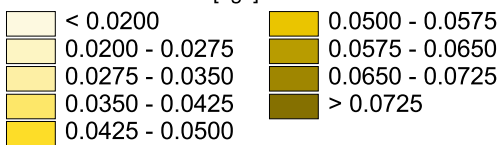
1:350000



Atrazin-Konzentration des oberflächennahen Grundwassers in Baden-Württemberg

geschätzt mittels Ordinary Kriging aus Daten der Landesmessnetze

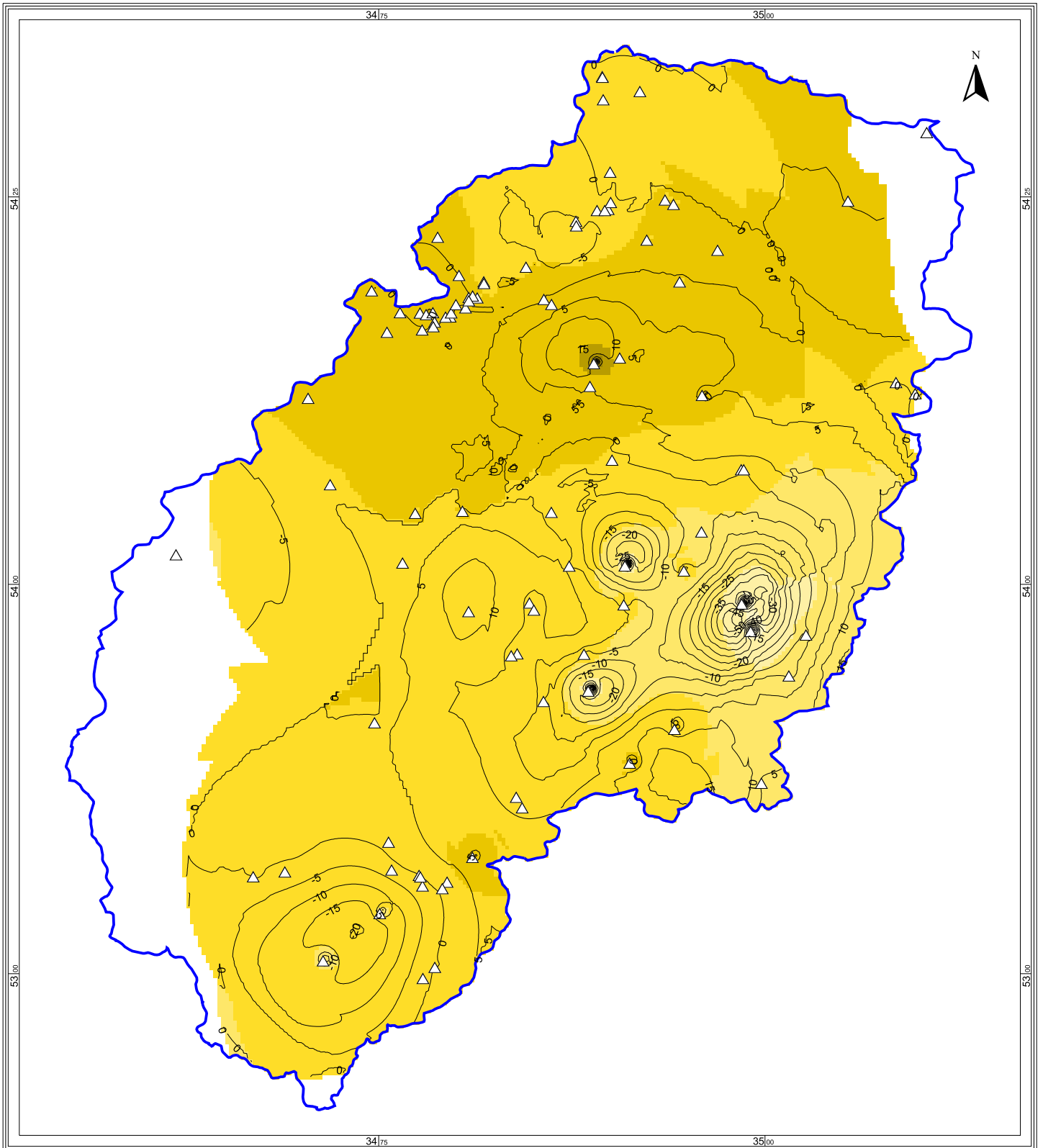
Atrazin-Konzentration [ug/l]



- Messstellen
- Einzugsgebietsgrenze
- Flächen außerhalb des Einzugsgebietes
(Daten nicht berücksichtigt)
- prozentualer Schätzfehler

Datengrundlage: JDK 1994 - 1998, LFU
Zellengröße: 250 x 250 m
Bearbeitung: D. Stietenroth (2005)

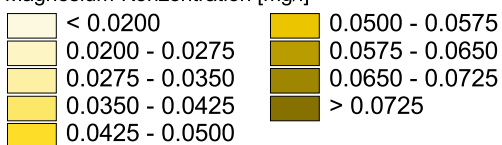
1:350000



Atrazin-Konzentration des oberflächennahen Grundwassers in Baden-Württemberg

interpoliert mittels IDW aus Daten der Landesmessnetze

Magnesium-Konzentration [mg/l]



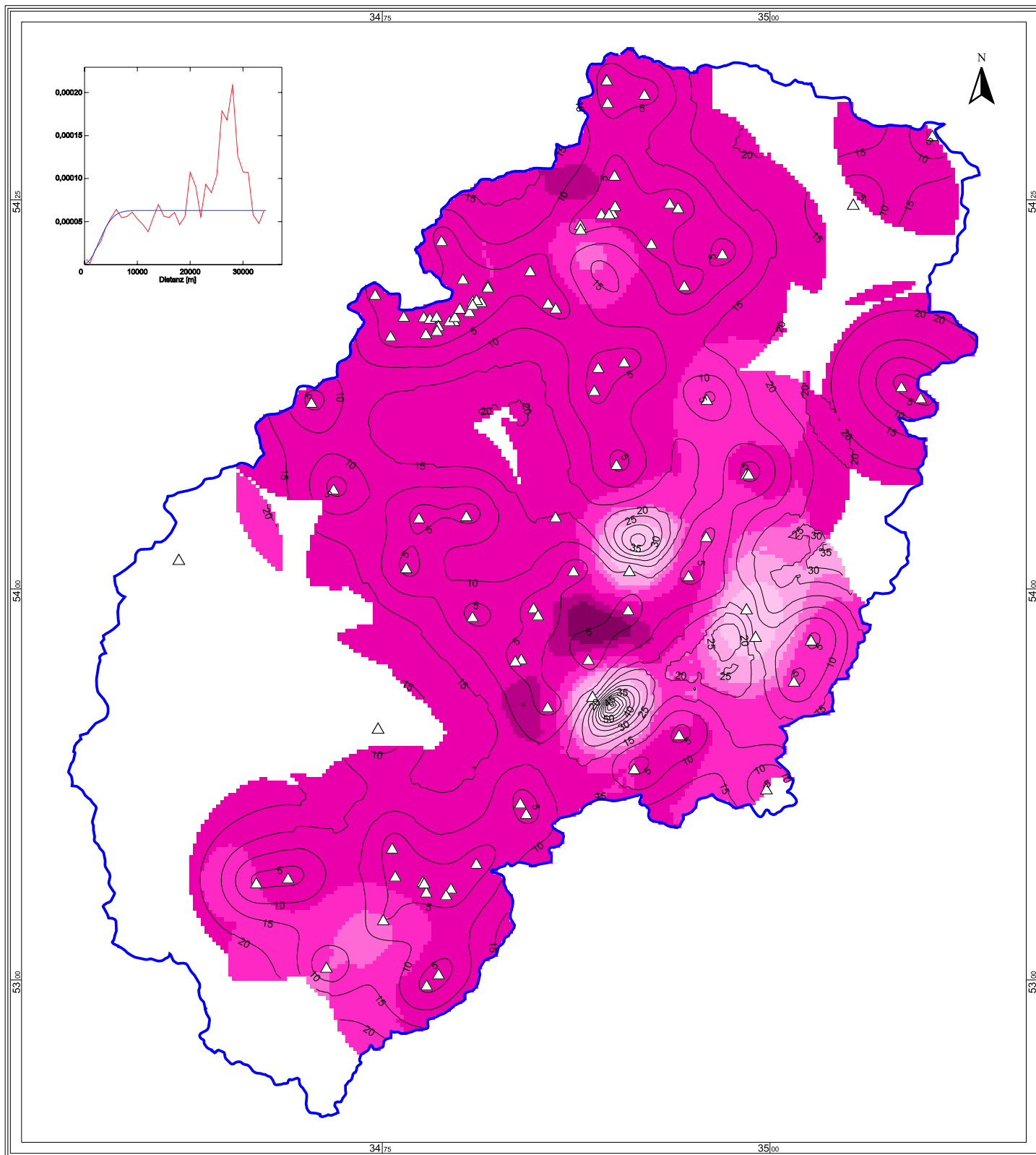
- Messstellen
- Einzugsgebietsgrenze
- Flächen außerhalb des Einzugsgebietes
(Daten nicht berücksichtigt)
- prozentuale Abweichung zum Kriging-Schätzwert

Datengrundlage: JDK 1994 - 1998, LfU

Zellengröße: 250 x 250 m

Bearbeitung: D. Stietenroth (2005)

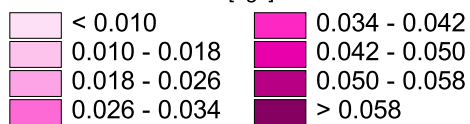
1:350000



Simazin-Konzentration des oberflächennahen Grundwassers in Baden-Württemberg

geschätzt mittels Ordinary Kriging aus Daten der Landesmessnetze

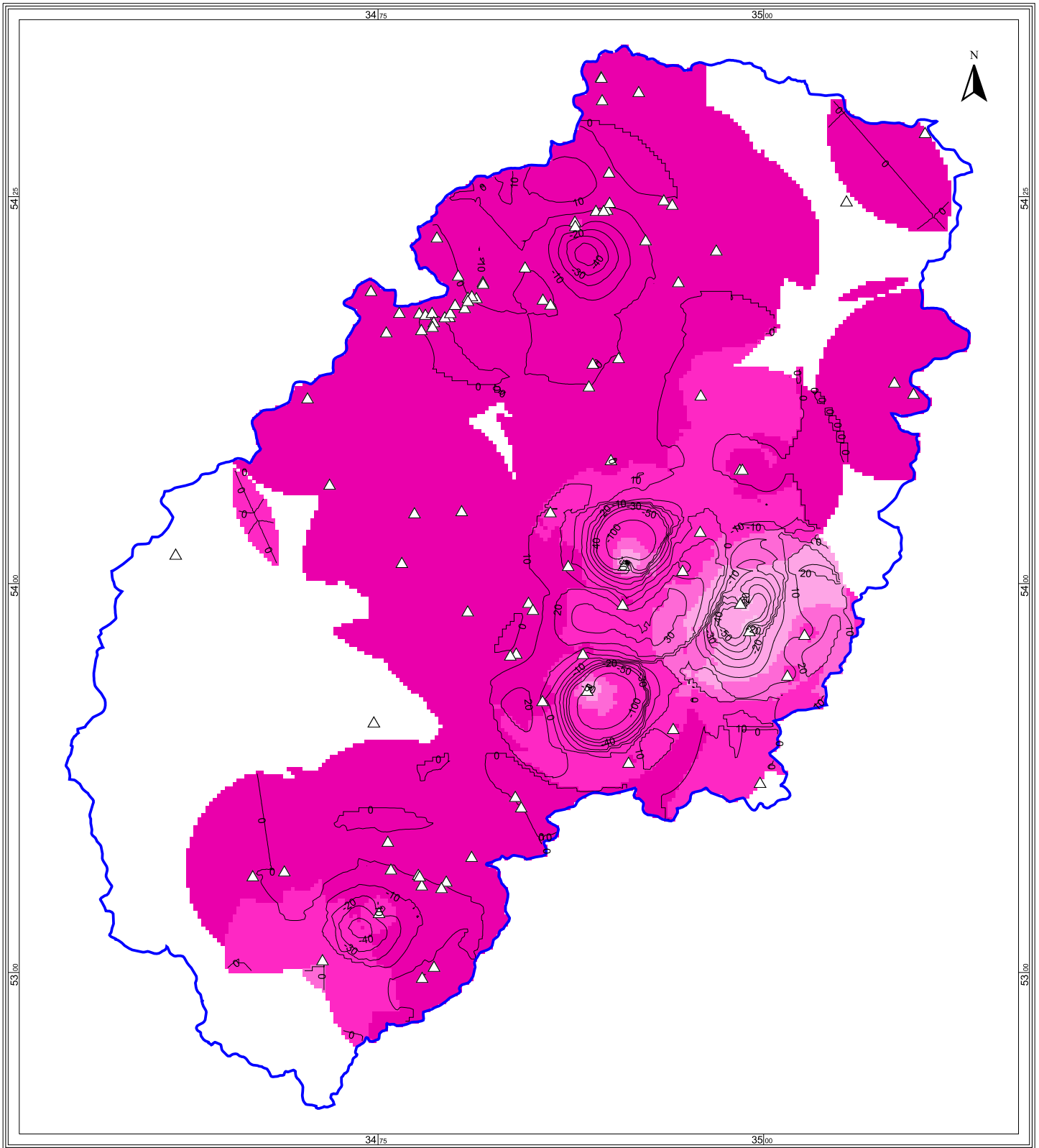
Simazin-Konzentration [µg/l]



- △ Messstellen
- Einzugsgebietsgrenze
- Flächen außerhalb des Einzugsgebietes (Daten nicht berücksichtigt)
- ∠ prozentualer Schätzfehler

Datengrundlage: JDK 1994 - 1998, LFU
Zellengröße: 250 x 250 m
Bearbeitung: D. Stietenroth (2005)

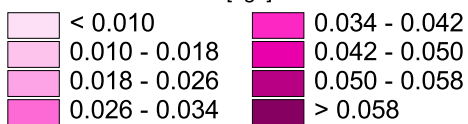
1:350000



Simazin-Konzentration des oberflächennahen Grundwassers in Baden-Württemberg

interpoliert mittels IDW aus Daten der Landesmessnetze

Simazin-Konzentration [µg/l]



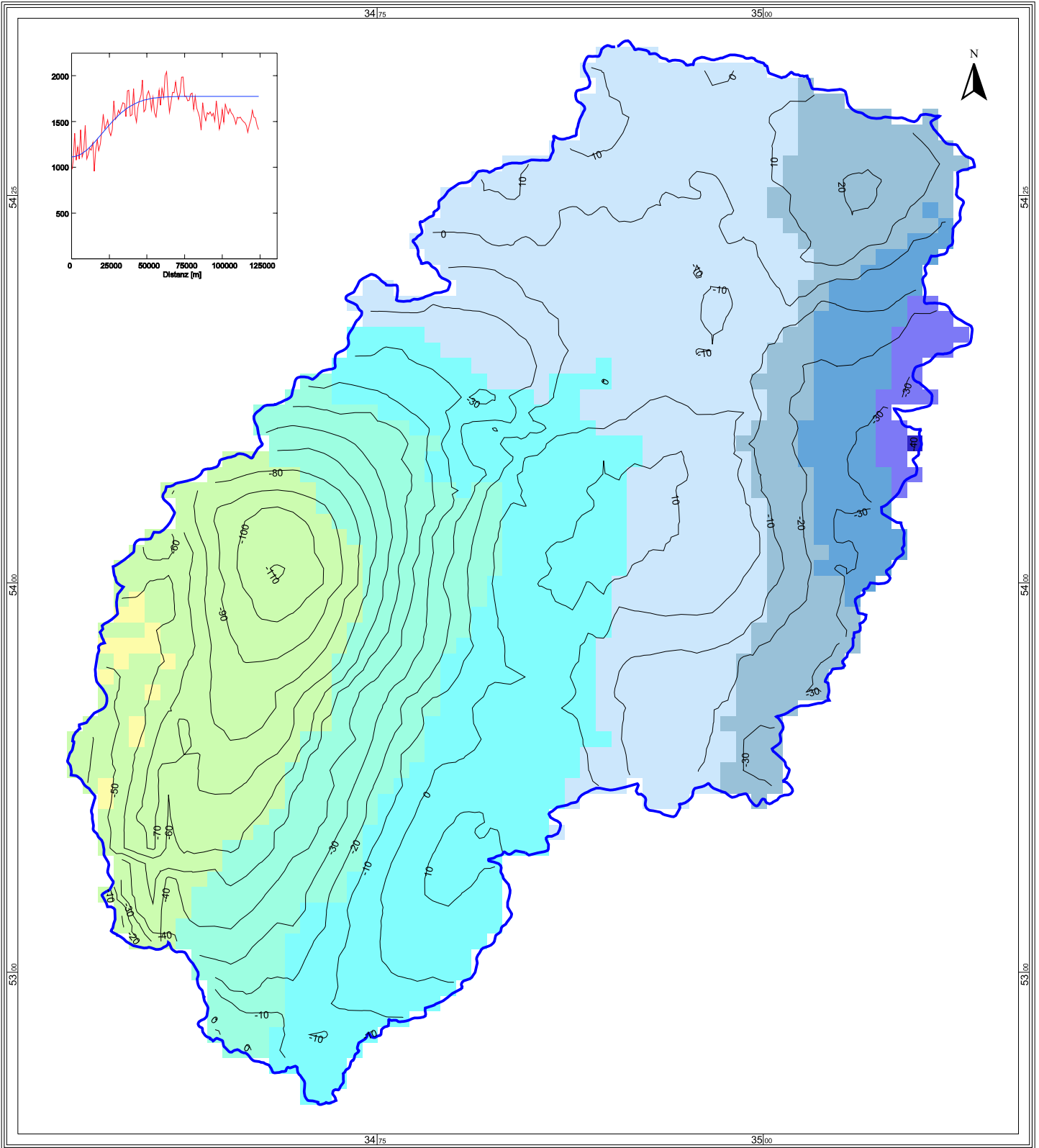
- △ Messstellen
- Einzugsgebietsgrenze
- Flächen außerhalb des Einzugsgebietes (Daten nicht berücksichtigt)
- ∧/∨ prozentuale Abweichung zum Kriging-Schätzwert

Datengrundlage: JDK 1994 - 1998, LfU

Zellengröße: 250 x 250 m

Bearbeitung: D. Stietenroth (2005)

1:350000



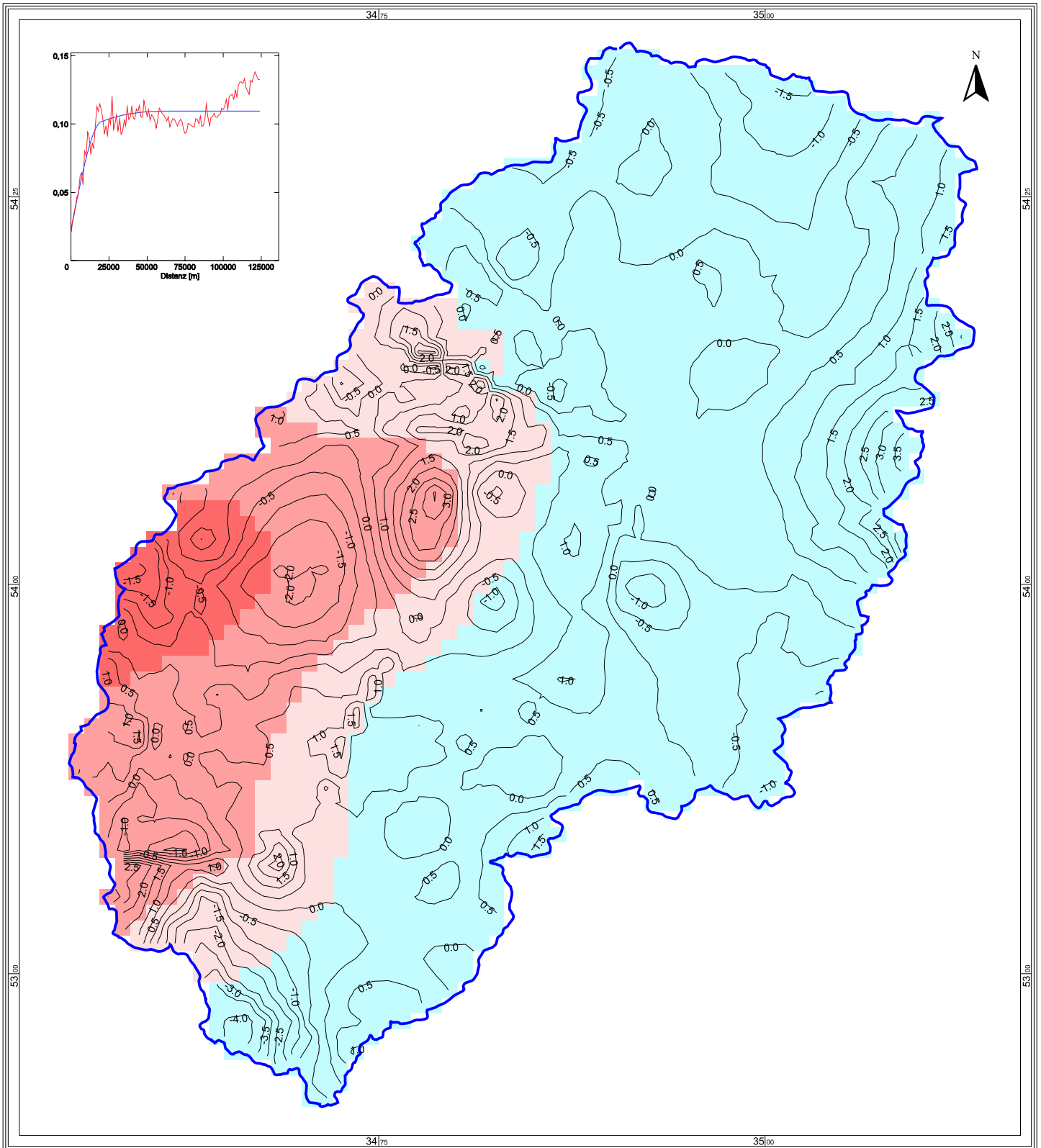
Leitfähigkeit des oberflächennahen Grundwassers im Einzugsgebiet der Enz:
 Ausschnitt der Schätzung für die gesamte Landesfläche und
 Abweichung zu der Schätzung für das Einzugsgebiet

Leitfähigkeit [mS/m]	
< 20	100 - 120
20 - 40	120 - 140
40 - 60	140 - 160
60 - 80	160 - 180
80 - 100	> 180

- △ Messstellen
- Einzugsgebietsgrenze
- Flächen außerhalb des Einzugsgebietes (Daten nicht berücksichtigt)
- ∧ prozentuale Abweichung des Kriging-Schätzwerts der geostatistischen Untersuchung des Einzugsgebietes

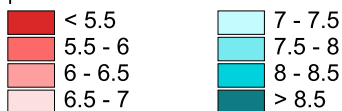
Datengrundlage: JDK 1994 - 1998, LfU
 Zellengröße: 250 x 250 m
 Bearbeitung: D. Stietenroth (2005)

1:350000



pH-Werte des oberflächennahen Grundwassers im Einzugsgebiet der Enz:
 Ausschnitt der Schätzung für die gesamte Landesfläche und
 Abweichung zu der Schätzung für das Einzugsgebiet

pH-Schätzwerte



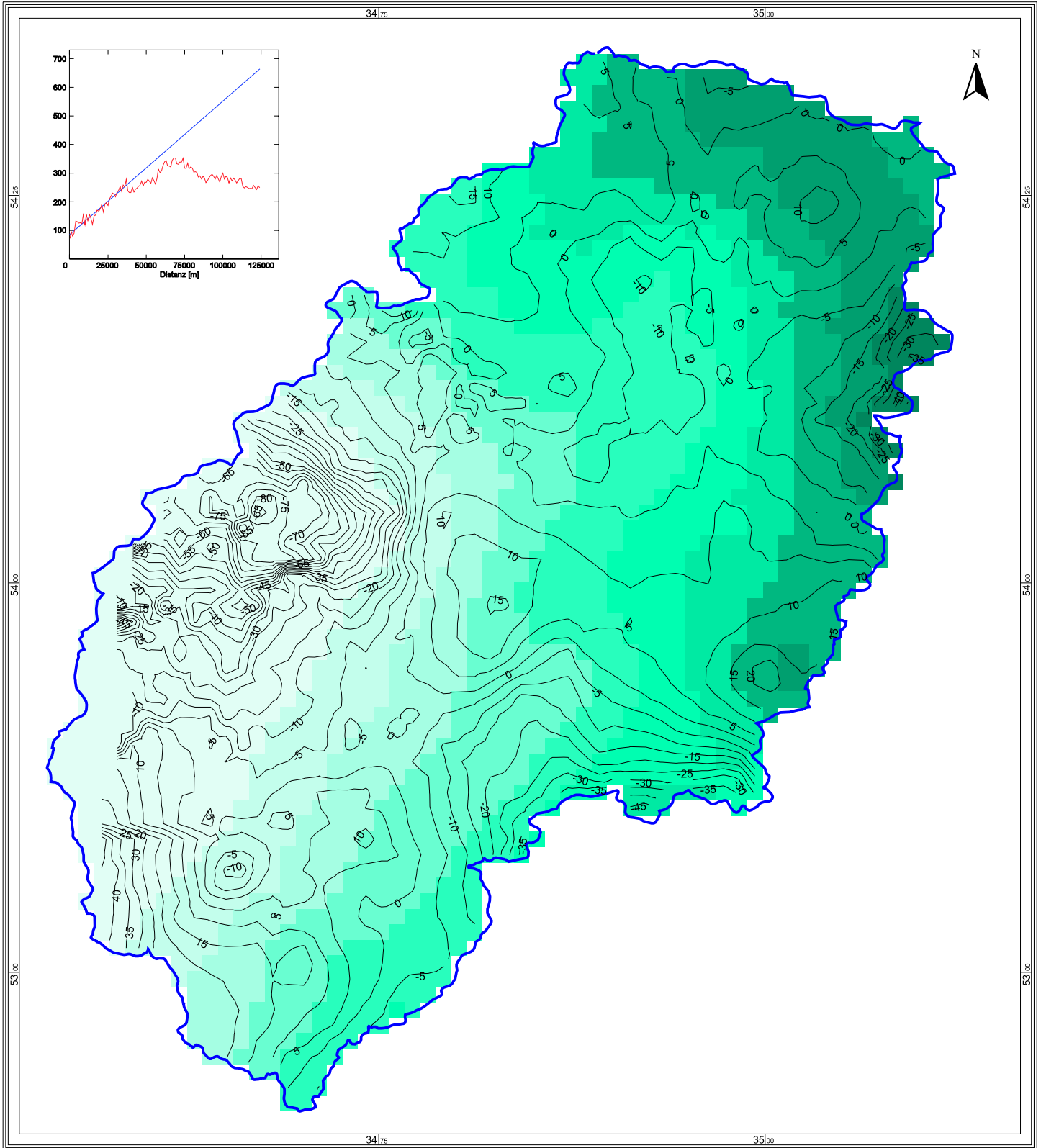
- Messstellen
- Einzugsgebietsgrenze
- Flächen außerhalb des Einzugsgebietes (Daten nicht berücksichtigt)
- prozentuale Abweichung des Kriging-Schätzwerts der geostatistischen Untersuchung des Einzugsgebietes

Datengrundlage: JDK 1994 - 1998, LfU

Zellengröße: 250 x 250 m

Bearbeitung: D. Stietenroth (2005)

1:350000



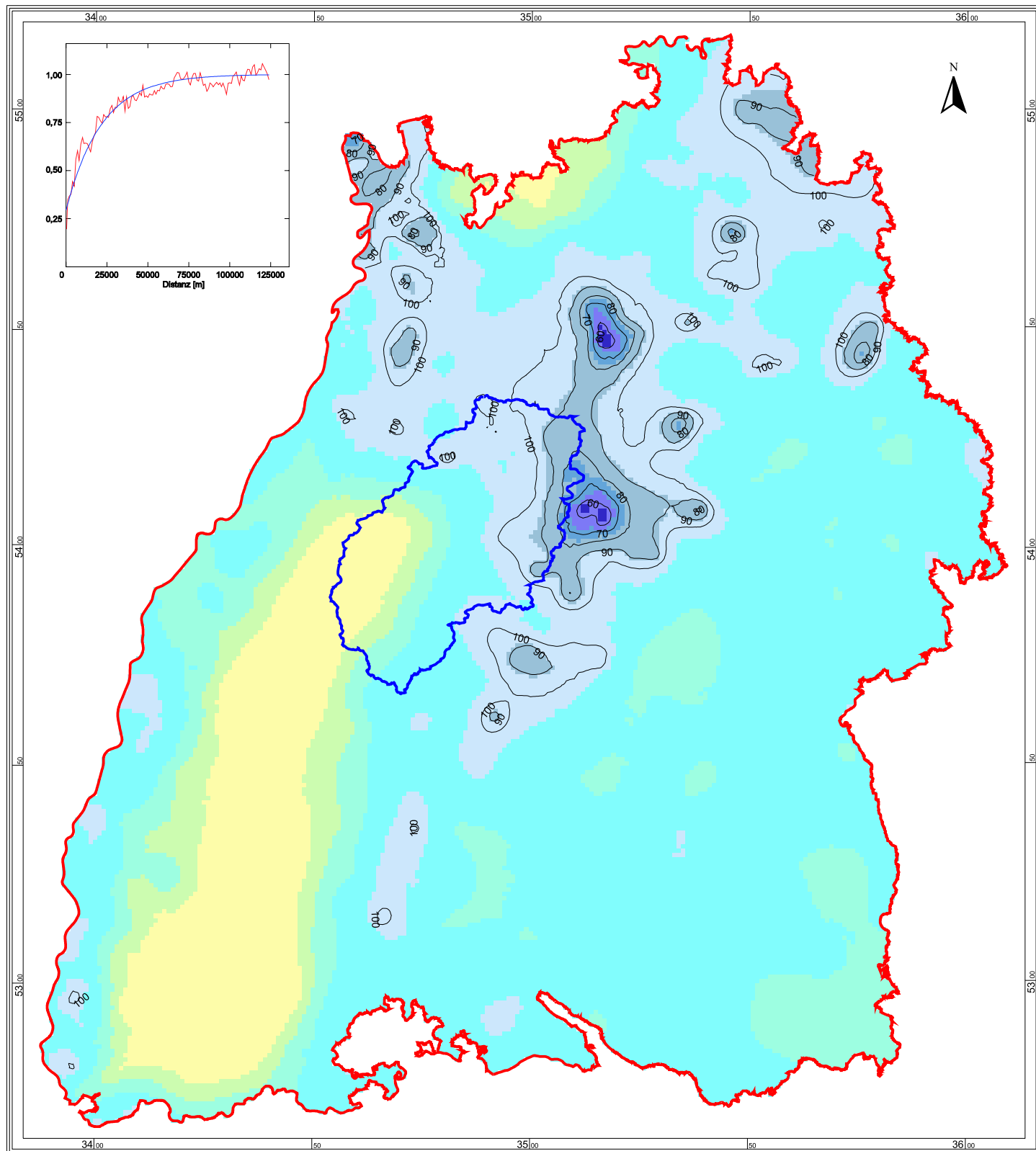
**Magnesium-Konzentration des oberflächennahen Grundwassers
im Einzugsgebiet der Enz:
Ausschnitt der Schätzung für die gesamte Landesfläche und
Abweichung zu der Schätzung für das Einzugsgebiet**

Magnesium-Konzentration [mg/l]	
< 10	30 - 35
10 - 15	35 - 40
15 - 20	40 - 45
20 - 25	45 - 50
25 - 30	> 50

- △ Messstellen
- Einzugsgebietsgrenze
- Flächen außerhalb des Einzugsgebietes (Daten nicht berücksichtigt)
- ∧ prozentuale Abweichung des Kriging-Schätzwerts der geostatistischen Untersuchung des Einzugsgebietes

Datengrundlage: JDK 1994 - 1998, LFU
Zellengröße: 250 x 250 m
Bearbeitung: D. Stietenroth (2005)

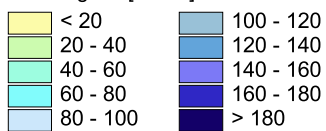
1:350000







Leitfähigkeit des oberflächennahen Grundwassers in Baden-Württemberg

geschätzt mittels Ordinary Kriging aus Daten der Landesmessnetze nach
geostatistischer Analyse der transformierten Daten und anschliessender Rücktransformation

Leitfähigkeit [mS/m]



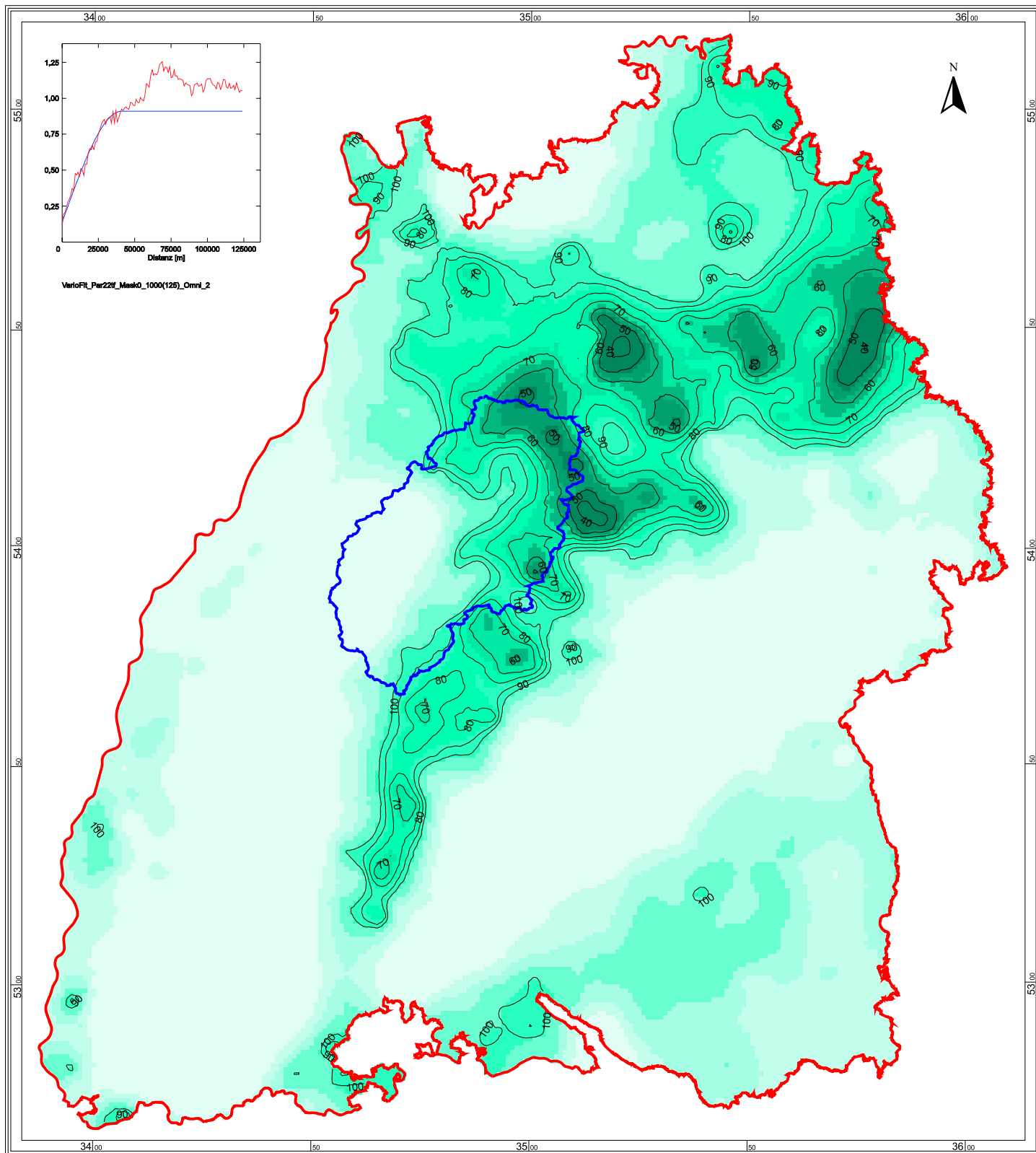
-  Landesgrenze Baden-Württemberg
-  Flächen außerhalb Baden-Württembergs (ohne Schätzwerte)
-  Flussgebiet Enz
-  prozentualer Schätzfehler

Datengrundlage: JDK 1994 - 1998, LfU

Zellengröße: 1000 x 1000 m

Bearbeitung: D. Stietenroth (2005)

1:1250000



Magnesium-Konzentrationen des oberflächennahen Grundwassers in Baden-Württemberg

geschätzt mittels Ordinary Kriging aus Daten der Landesmessnetze nach geostatistischer Analyse der transformierten Daten und anschließender Rücktransformation

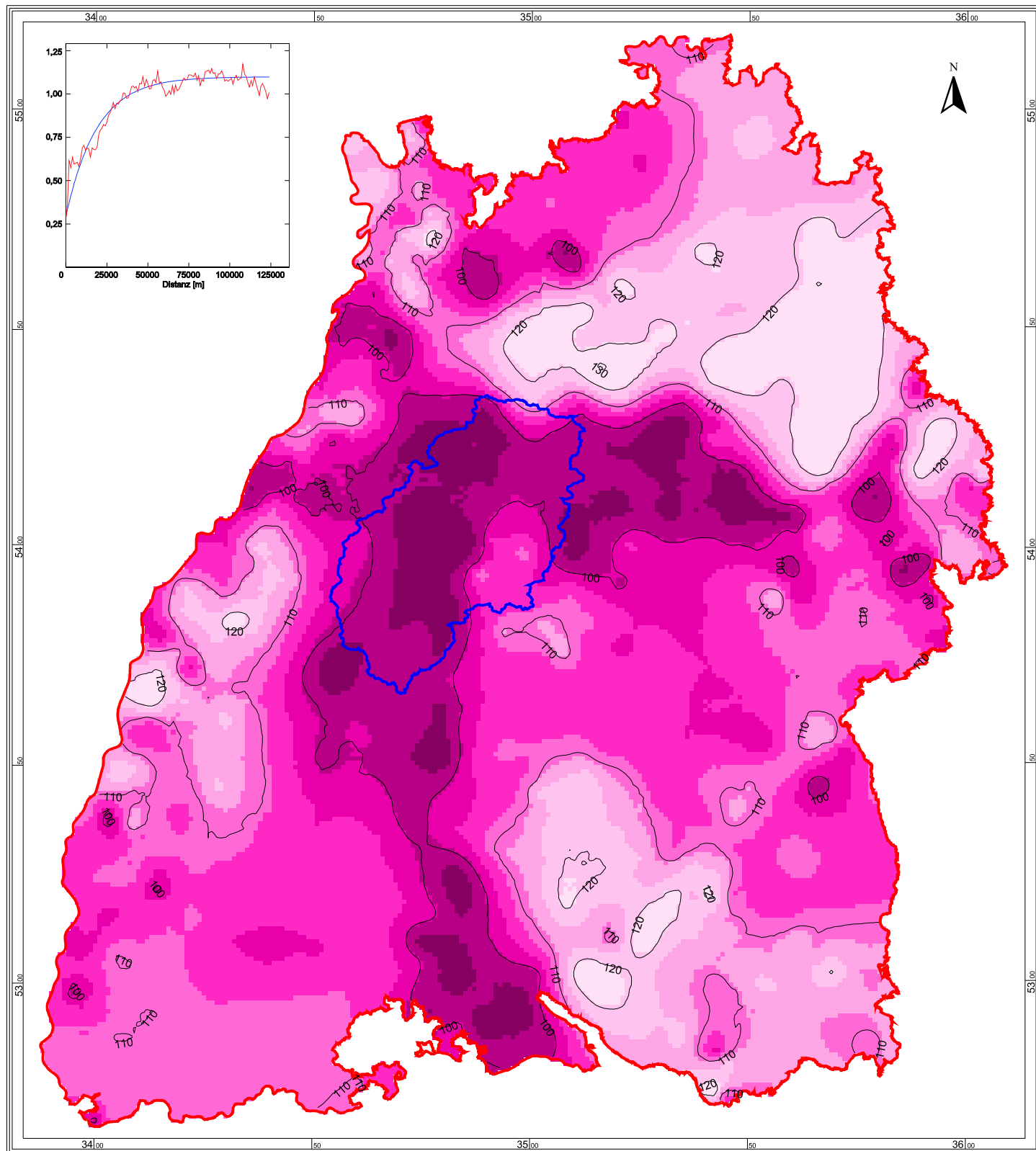
Magnesium-Konzentration [mg/l]

	< 10		30 - 35
	10 - 15		35 - 40
	15 - 20		40 - 45
	20 - 25		45 - 50
	25 - 30		> 50

- Landesgrenze Baden-Württemberg
- Flächen außerhalb Baden-Württembergs (ohne Schätzwerte)
- Flussgebiet Enz
- prozentualer Schätzfehler

Datengrundlage: JDK 1994 - 1998, LfU
 Zellengröße: 1000 x 1000 m
 Bearbeitung: D. Stietenroth (2005)

1:1250000



Simazin-Konzentrationen des oberflächennahen Grundwassers in Baden-Württemberg

geschätzt mittels Ordinary Kriging aus Daten der Landesmessnetze nach geostatistischer Analyse der transformierten Daten und anschließender Rücktransformation

Simazin-Konzentration [ug/l]

- < 0.0365
- 0.0365 - 0.0380
- 0.0380 - 0.0395
- 0.0395 - 0.0410
- 0.0410 - 0.0425
- 0.0425 - 0.0440
- 0.0440 - 0.0455
- > 0.0455

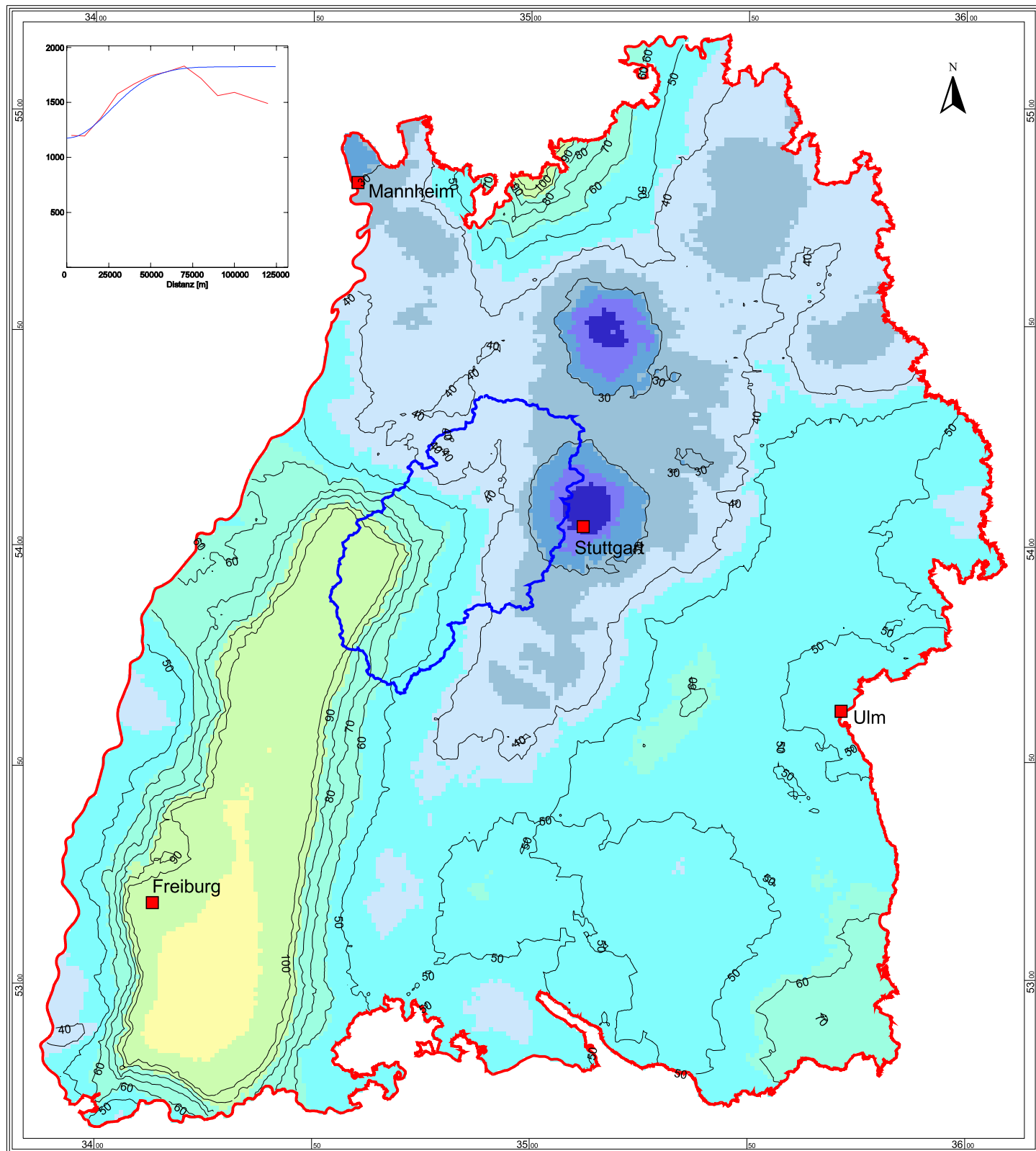
- Landesgrenze Baden-Württemberg
- Flächen außerhalb Baden-Württembergs (ohne Schätzwerte)
- Flussgebiet Enz
- prozentualer Schätzfehler

Datengrundlage: JDK 1994 - 1998, LfU

Zellengröße: 1000 x 1000 m

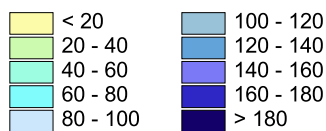
Bearbeitung: D. Stietenroth (2005)





1:1250000



**Leitfähigkeit des oberflächennahen Grundwassers
in Baden-Württemberg**
geschätzt mittels Ordinary Kriging aus Daten der Landesmessnetze

Leitfähigkeit [mS/m]

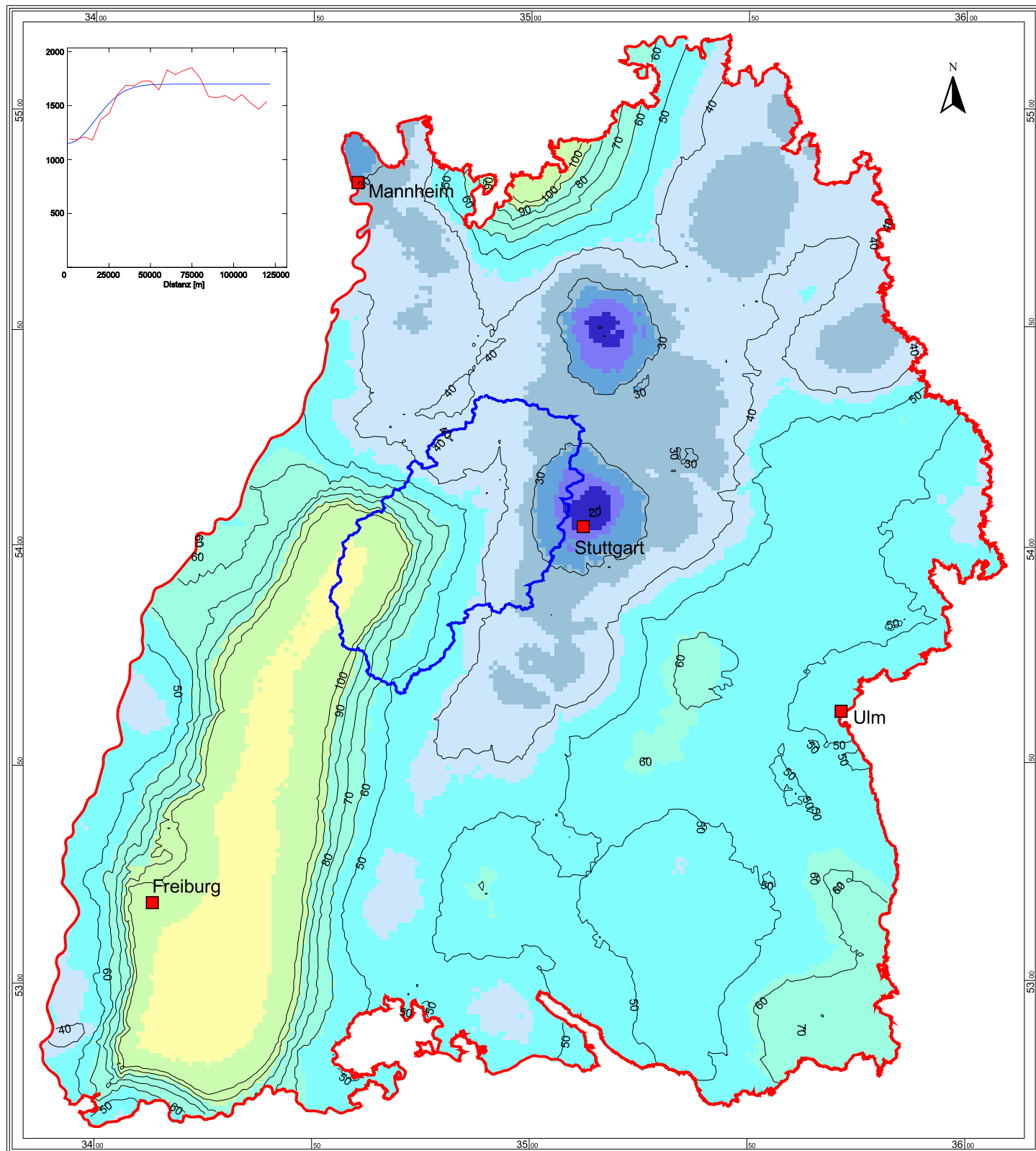


-  Landesgrenze Baden-Württemberg
-  Flächen außerhalb Baden-Württembergs (ohne Schätzwerte)
-  Flussgebiet Enz
-  prozentualer Schätzfehler

Datengrundlage: JDK 1994 - 1998, LfU
Zellengröße: 1000 x 1000 m
Bearbeitung: D. Stietenroth (2005)

Schrittweite im Variogrammmodell: 10000m - 13 Schritte

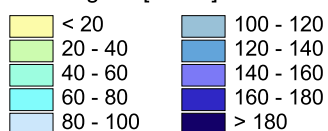
1:1250000



Leitfähigkeit des oberflächennahen Grundwassers in Baden-Württemberg

geschätzt mittels Ordinary Kriging aus Daten der Landesmessnetz

Leitfähigkeit [mS/m]



- Landesgrenze Baden-Württemberg
- Flächen außerhalb Baden-Württembergs (ohne Schätzwerte)
- Flussgebiet Enz
- prozentualer Schätzfehler

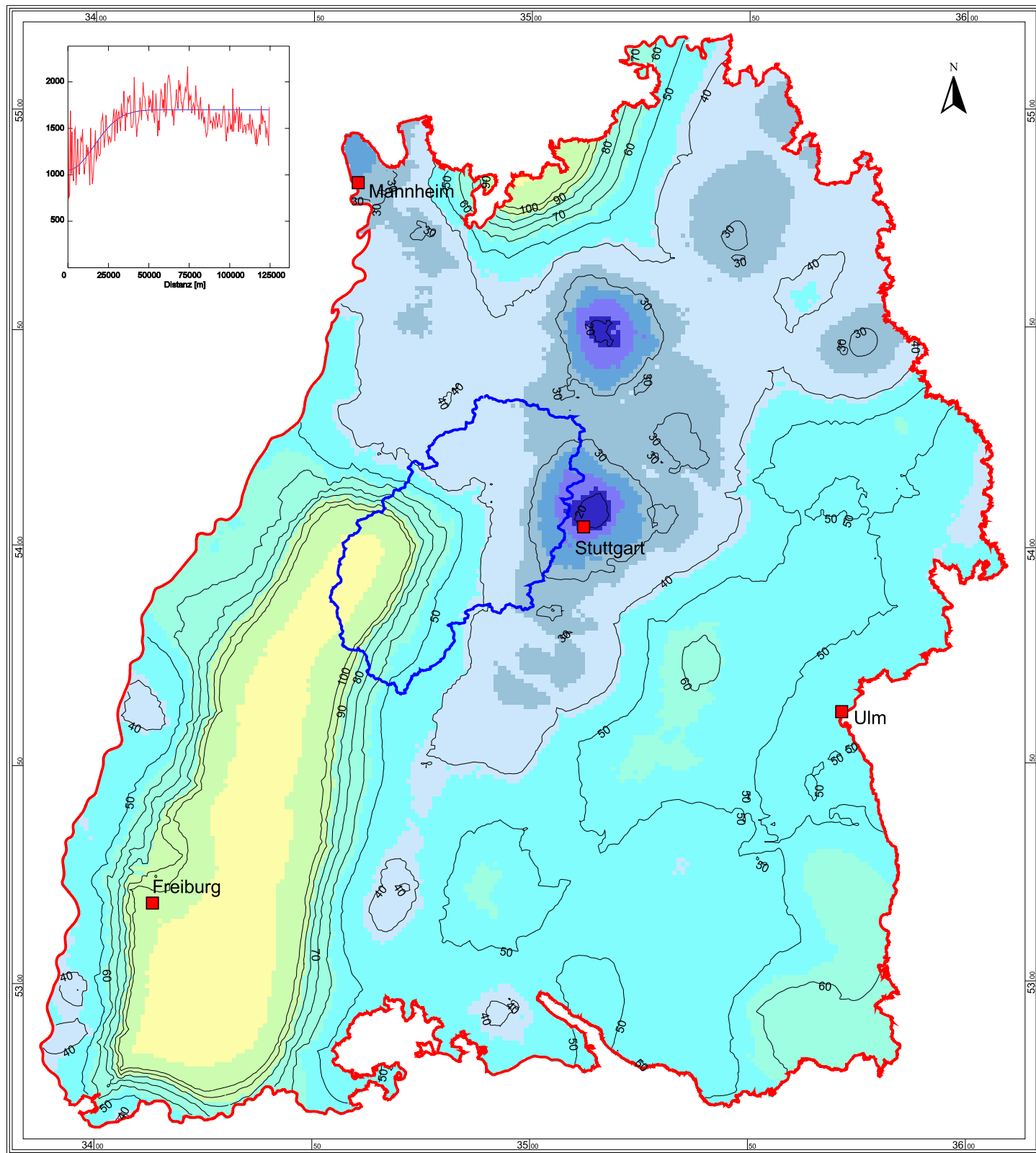
Datengrundlage: JDK 1994 - 1998, LfU

Zellengröße: 1000 x 1000 m

Bearbeitung: D. Stietenroth (2005)

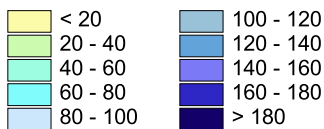
Schrittweite im Variogrammmodell: 5000m - 25 Schritte





1:1250000



**Leitfähigkeit des oberflächennahen Grundwassers
in Baden-Württemberg**
geschätzt mittels Ordinary Kriging aus Daten der Landesmessnetze

Leitfähigkeit [mS/m]



-  Landesgrenze Baden-Württemberg
-  Flächen außerhalb Baden-Württembergs (ohne Schätzwerte)
-  Flussgebiet Enz
-  prozentualer Schätzfehler

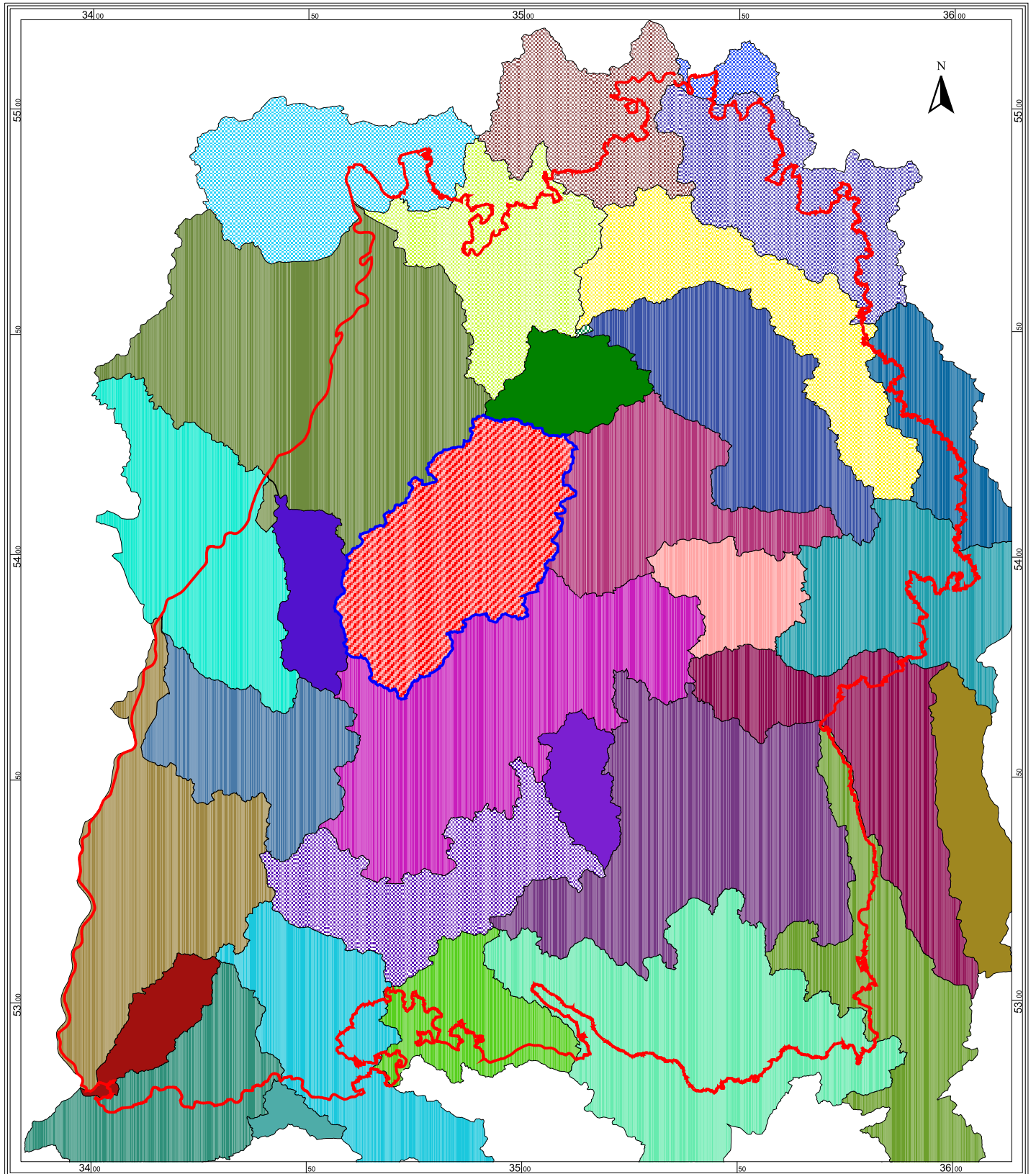
Datengrundlage: JDK 1994 - 1998, LfU

Zellengröße: 1000 x 1000 m




Bearbeitung: D. Stietenroth (2005)

Schrittweite im Variogrammmodell: 500m - 250 Schritte

1:1250000

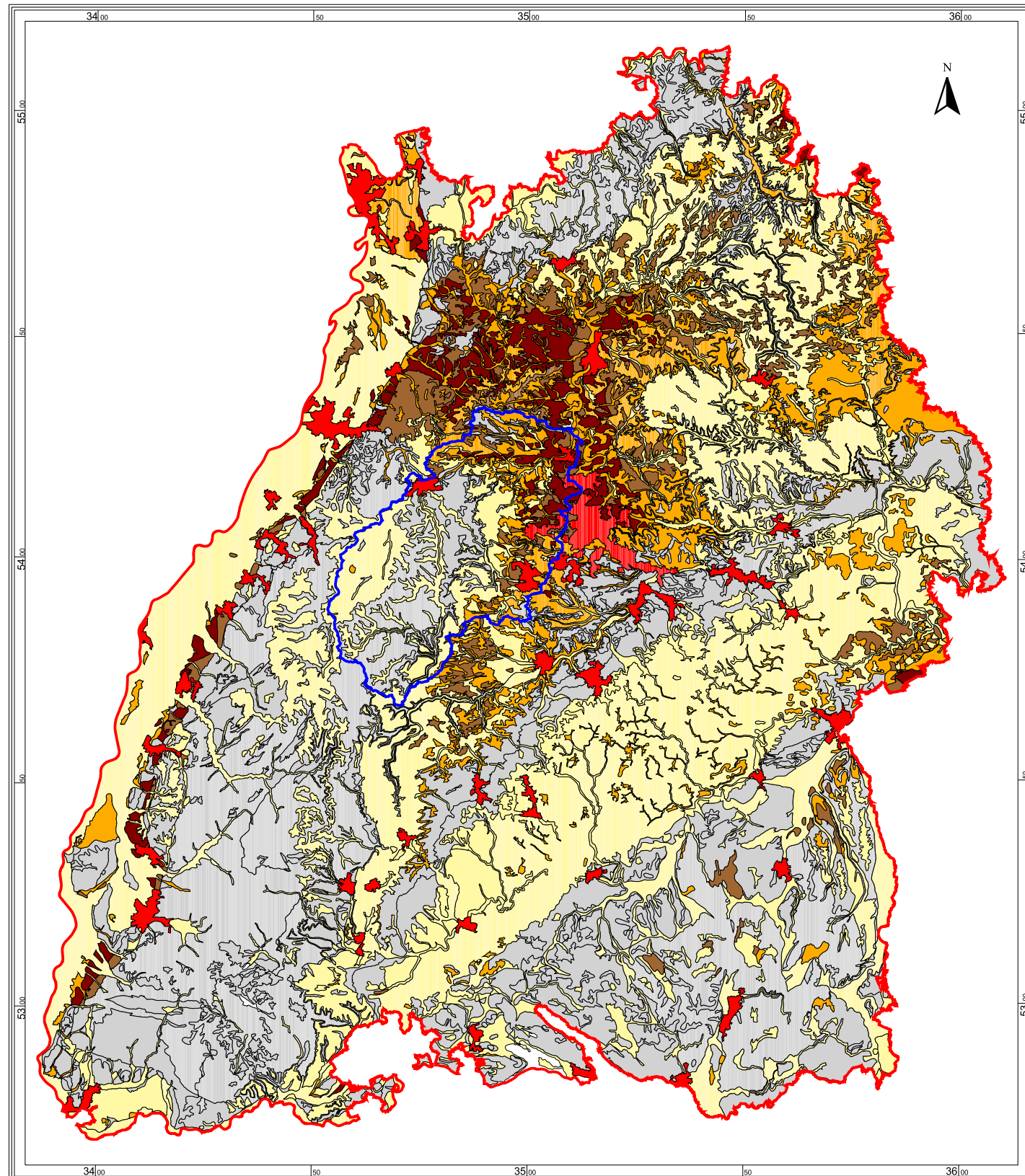


Flusseinzugsgebiete in Baden-Württemberg









-  Landesgrenzen Baden-Württemberg
-  Einzugsgebiet Enz
-  weitere Einzugsgebiete (verschiedene Farben)

1:1250000

Bearbeitung: D. Stietenroth (2005)

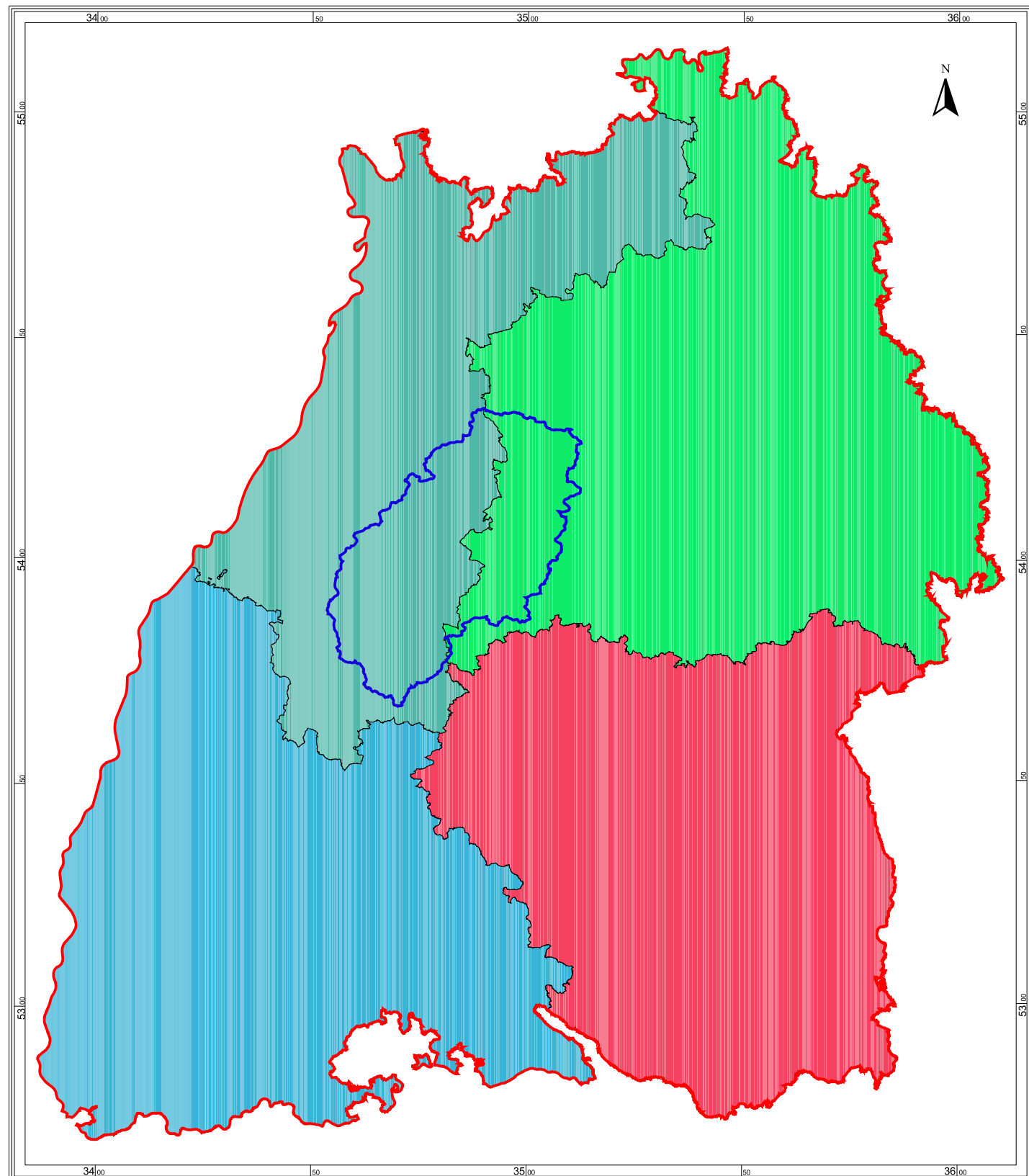


Schutzfunktion der Grundwasserüberdeckung in Baden-Württemberg nach Hölting







- | | |
|---|--|
|  sehr gering |  Landesgrenze Baden-Württemberg |
|  gering |  Flussgebiet Enz |
|  mittel | |
|  hoch | |
|  Grundwassergeringleiter | |
|  Siedlungsflächen | |

1:1250000

Datengrundlage: LGRB
 Bearbeitung: D. Stietenroth (2005)

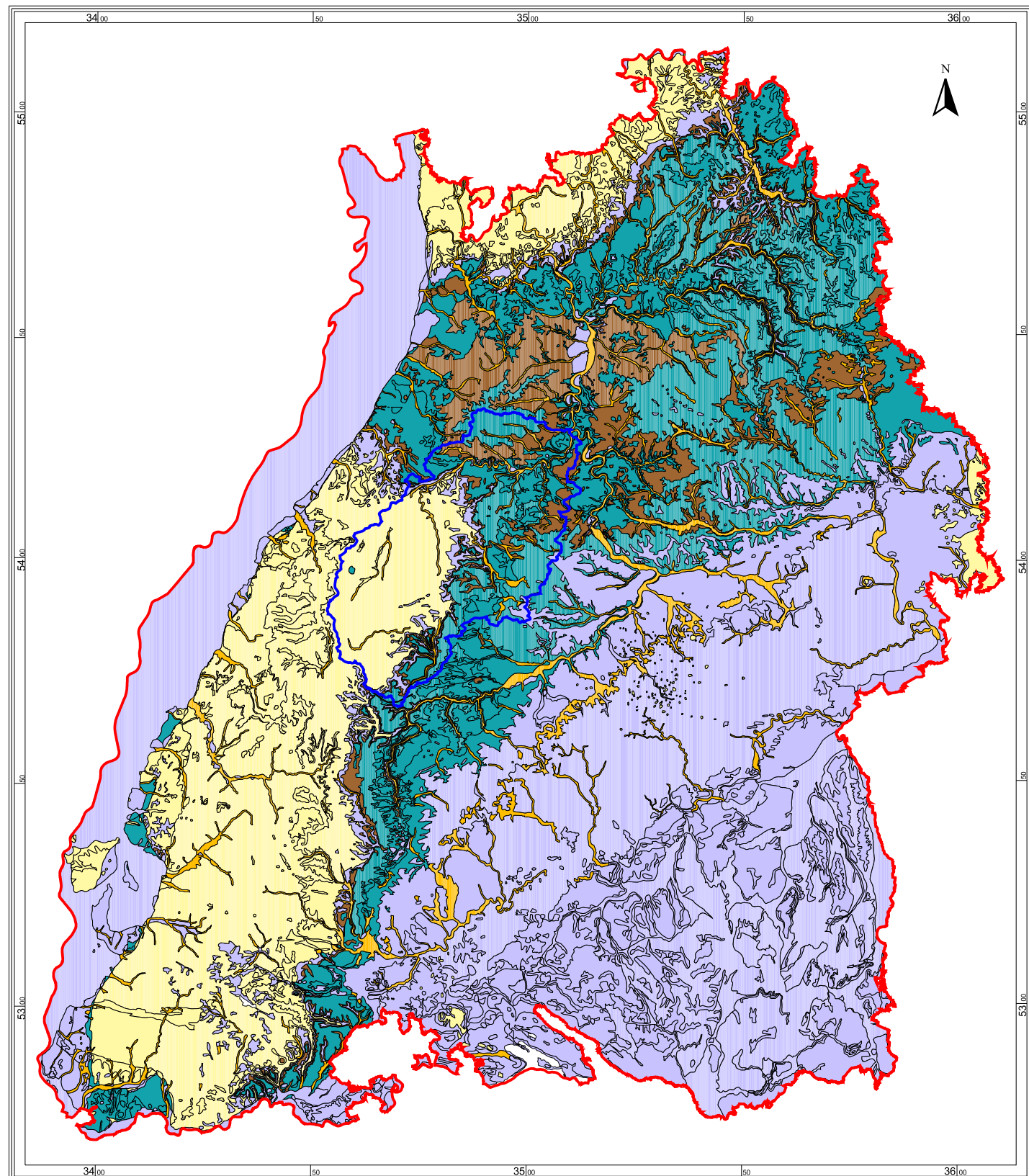


Regierungsbezirke in Baden-Württemberg

-  Einzugsgebiet Enz
-  Landesgrenze Baden-Württemberg
-  Regierungsbezirk Tübingen
-  Regierungsbezirk Stuttgart
-  Regierungsbezirk Karlsruhe
-  Regierungsbezirk Freiburg

1:1250000

Datengrundlage: LfU
Bearbeitung: D. Stietenroth (2005)

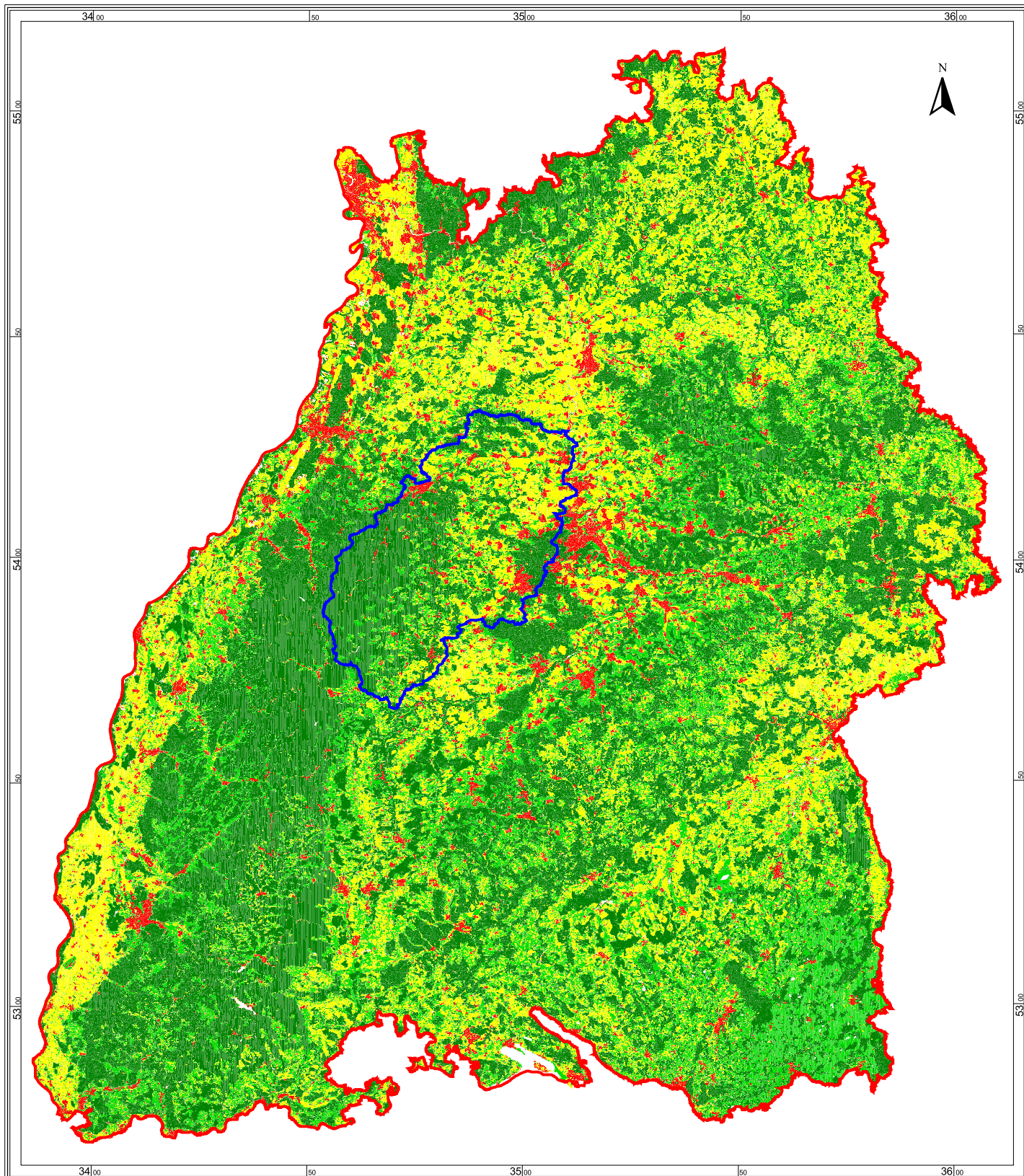


Geogene Grundwasserbeschaffenheit in Baden-Württemberg

- Einzugsgebiet Enz
- Landesgrenze Baden-Württemberg
- Holozän
- geringer Lösungsinhalt
- mittlerer Lösungsinhalt (Ca-HCO₃)
- mittlerer Lösungsinhalt (Ca-Mg-HCO₃)
- mittlerer bis hoher Lösungsinhalt

1:1250000

Datengrundlage: LGRB
 Bearbeitung: D. Stietenroth (2005)



Hauptlandnutzungsklassen in Baden-Württemberg

- Landesgrenze Baden-Württemberg
- Einzugsgebiet Enz
- Wald
- Grünland
- Acker
- Siedlungsflächen

1:1250000

Datengrundlage: LfU (Landsat 1993)
 Bearbeitung: D. Stietenroth (2005)

Lebenslauf

Name: Stietenroth

Vorname: Daniel

Geburtsdatum: 17.02.1972

Geburtsort: Northeim

Staatsangehörigkeit: deutsch

Schulbesuche: 1978 – 1982 Grundschule, Göttingen
1982 – 1984 Orientierungsstufe Lutherschule, Göttingen
1984 – 1992 Theodor-Heuss-Gymnasium, Göttingen

Abschluss: 05/1992 Abitur, Theodor-Heuss-Gymnasium, Göttingen

Zivildienst: 08/1992 – 10/1993 Club 68 e.V., Hamburg

Studium: 10/1993 – 09/1999 Geographie (Dipl.), Georg-August-Universität Göttingen

Abschluss: 06/1999 Dipl.-Geogr., Fakultät für Geowissenschaften, Georg-August-Universität Göttingen

Stipendium: 10/1999 – 07/2002 DFG-Graduiertenkolleg „Integrative Umweltbewertung“, Christian-Albrecht-Universität Kiel

Berufstätigkeit: 08/2002 – 07/2003 Wissenschaftlicher Angestellter am Geographischen Institut, Georg-August-Universität Göttingen

seit 08/2003 Geschäftsführender Koordinator des DFG-SFB552 „STORMA“ am Forschungs- und Studienzentrum der Agrar- und Forstwissenschaften der Tropen und Subtropen der Georg-August-Universität Göttingen