

Wurde ein Standort über 2000 m vom alten Standort verlegt, ist eine neue Standort-ID zu vergeben. Der alte Standort ist ebenso wie der Grund für die Verlegung in dem Kommentarfeld des Probenentnahmeprotokolls zu dokumentieren.

Die ausgefüllten Probenentnahmeprotokolle als Kopie (mitsamt der entnommenen Moosproben, s.o) sind an den Moospräparator zu verschicken. Die im Feld aufgenommenen Standortprotokolle sind in die Access-Moos-Datenbank zu digitalisieren und an die Koordinationsstelle per E-Mail zu übermitteln.

3 Optimierung der Datenbankstruktur

Aufgrund der Vielzahl der im Moos-Monitoring erhobenen Daten ist das *Datenhandling* wichtig. Bereits in den beiden Vorgängerprojekten wurde aus diesem Grund die in Kapitel 2 erwähnte Access-Datenbankanwendung (= UBA-Moos-Datenbank) entwickelt. Diese Anwendung bildete neben dem Moos-GIS (→ Kapitel 5) das Basiswerkzeug für die digitale Zusammenführung der verschiedenen Informationsschichten im Moos-Monitoring 2000. Aufgrund der heterogenen Datenstruktur konnte die Zusammenführung der in den bisherigen drei Moos-Monitoring-Projekten erhobenen Daten nicht vollständig durchgeführt werden. Um dies zukünftig zu gewährleisten, wurde daher die bisherige Datenbankstruktur im Moos-Monitoring überarbeitet (→ Kapitel 3.1). Vor dem Hintergrund der Planung eines zukünftigen Moos-Monitorings wurde weiterhin ein Konzept für ein Internet- und GIS-gestütztes Umweltmonitoring (IGUS) erarbeitet (→ Kapitel 3.2).

In den nachstehenden Ausführungen wird zwischen *standortbeschreibenden Datensätzen* und *Laborergebnissen* unterschieden. Bei den standortbeschreibenden Datensätzen handelt es sich um die auf der Basis der Eingabemaske der UBA-Moos-Datenbank von den Probenentnehmern bzw. den Auftragneh-

mern digitalisierten Standortkriterien. Die Laborergebnisse entsprechen den in den Moosproben gemessenen Elementgehalten.

3.1 Überarbeitung der bisherigen Datenbankstruktur

Hintergründe. Ein wesentliches Ziel des Moos-Monitorings ist es, die aus den chemischen Moosanalysen gewonnenen Ergebnisse in Beziehung zu natürlichen und anthropogenen Standortfaktoren zu setzen. Aus diesem Grund haben die Probenentnehmer in allen drei Moos-Monitoring-Vorhaben in das Probenentnahmeformular der UBA-Moos-Datenbank Standortbeschreibungen eingetragen (→ Kapitel 2; Anhang C). Die im Gelände dokumentierten Standortkriterien wurden jeweils nach Abschluss der Probenentnahme in die Access-Anwendung überführt. Die automatisierte Verknüpfung der im Labor analysierten Elementgehalte mit den jeweiligen standortbeschreibenden Datensätzen sollte anschließend über den Import der als ASCII- oder Excel-Tabelle vorliegenden Labordatensätze in die UBA-Moos-Datenbank erfolgen.

Zielsetzung. Eine Überprüfung der dieser Access-Anwendung zugrunde liegenden Datenbankstruktur ergab, dass die Zusammenführung der in den bisherigen Moos-Monitoring-Vorhaben erhobenen Daten nicht ohne erhebliche Zusatzen gewährleisten werden konnte. Gründe hierfür sind v.a. die heterogene Struktur der in den bisherigen Moos-Monitoring-Vorhaben angelegten Datentabellen. Eine Zusammenführung und automatisierte Auswertung der Ergebnisse der chemischen Moos-Analytik und der Standortbeschreibungen konnte im Bearbeitungszeitraum des Moos-Monitorings 2000 daher nicht durchgeführt werden. Auch wies die UBA-Moos-Datenbank als Instrumentarium für die Zusammenführung von standortbeschreibenden Datensätzen und Laborergebnissen Redundanzen auf, was einen optimalen Datenzugriff, eine flexible Datenhaltung sowie die eindeutige Verknüpfung von Labor- und Standortdaten verhinderte.

Die Ziele bei der Überarbeitung der bisherigen Art der Datenhaltung im Moos-Monitoring waren demnach die

- Homogenisierung der in den bisherigen Moos-Monitoring-Vorhaben angelegten Datentabellen (→ Kapitel 3.1.1) sowie
- die Optimierung von Datenzugriff und Datenhaltung innerhalb der UBA-Moos-Datenbank (→ Kapitel 3.1.2).

3.1.1 Homogenisierung der Datentabellen

Allgemeines. Die dem Moos-Monitoring zugrundeliegende Art der Datenstrukturierung entspricht dem sogenannten relationalen Datenbankmodell, das von CODD entwickelt wurde (CODD 1991). In diesem Datenbankmodell werden Daten in weitgehend unabhängig voneinander vorliegenden Tabellen gespeichert. Eine Tabelle besteht dabei aus Reihen, die den Datensatz enthalten (hier die Probenentnahmestandorte) und aus Spalten, welche die Attribute enthalten (hier die Standortkriterien sowie die analytischen Messergebnisse). Die in einer relationalen Datenbank vorliegenden Tabellen sind im Idealfall durch Spalten mit gleichen Attributen verknüpft. Dies wird im allgemeinen durch eine einheitliche ID-Struktur gewährleistet.

Datengrundlagen. Die zu Beginn des Moos-Monitorings übernommenen Datentabellen lagen nicht in einer einheitlichen Datenbankdatei vor, sondern in Form der UBA-Access-Datenbank (Quelle: UBA) sowie zweier ASCII-Dateien (Quelle: BGR). Die Access-Anwendung beinhaltete sämtliche im Moos-Monitoring 1990 (n = 608) und 1995 (n = 1157) aufgenommenen standortbeschreibenden Datensätze. Die zwei ASCII-Tabellen wurden freundlicherweise von Herrn Dr. Siewers von der BGR Hannover zur Verfügung gestellt und enthalten jeweils die Laborergebnisse des Moos-Monitorings 1990 (n = 592) und 1995 (n = 1025).

Die Ergebnisse aus dem Moos-Monitoring 2000 lagen nach Abschluss der Probenentnahme und chemischen Moos-Analytik in Form von 15 UBA-Access-Dateien (n = 1069) und einer MS Excel-Tabelle (n = 1069) vor. Die Access-Anwendungen enthielten die im Moos-Monitoring 2000 aufgenommenen standortbeschreibenden Datensätze aus den Ländern. Bei der MS Excel Tabelle handelt es sich um die Laborergebnisse der LUFA Hameln.

Die hier vorgestellten Datengrundlagen hatten unterschiedlich strukturierte Datentabellen. Dies äußerte sich vor allem in einer uneinheitlichen ID-Struktur, was die fehlerfreie automatisierte Verknüpfung der einzelnen Datentabellen verhindert. Im Folgenden werden die Arbeitsschritte zur Schaffung einer einheitlichen ID-Struktur erläutert. Diese gliedern sich in die Sichtung des Datenmaterials sowie die Schaffung einer einheitlichen Syntaxstruktur. Dabei wird zwischen Proben- und Standort-ID unterschieden. Bei der Standort-ID handelt es sich um die Standortkennung einer ausgewählten Probenentnahmestelle (z.B. BB15). Diese kann allerdings mehrfach innerhalb einer Moos-Monitoringphase beprobt worden sein. Demzufolge erhält eine Probenentnahmestelle mehrere Proben-ID's (z.B. BB15-1, BB15-2).

Sichtung des Datenmaterials. Zunächst galt es, die Qualität der standortbeschreibenden Datensätze sowie der Laborergebnisse hinsichtlich Vollständigkeit, Richtigkeit und Verknüpfbarkeit zu überprüfen.

Vollständigkeit. Die aus dem Moos-Monitoring 1990 und 1995 stammenden Laborergebnisse und standortbeschreibenden Datensätze wichen im Gegensatz zu denen aus dem Moos-Monitoring 2000 in ihrer Anzahl voneinander ab. Die zahlenmäßige Abweichung war in der Dokumentation von Mehrfachbeprobungen desselben Standorts in der UBA-Moosdatenbank begründet. Die von der BGR gelieferten Laborergebnisse hingegen enthalten die Ergebnisse der Metalluntersuchungen der jeweils prioritären Moosart pro Standort. Wurden am Standort mehrere Proben derselben Moosart entnommen, wurden die Analyse-

ergebnisse gemittelt. In den Datensätzen des Moos-Monitoring 2000 lagen die Laborergebnisse vollständig inkl. der Ergebnisse der Mehrfachbeprobungen vor.

Richtigkeit. Ein Abgleich der Datensätze aus den drei Moos-Monitoring-Projekten im GIS zeigte, dass in nicht in allen Fällen der in der Probenentnahmerichtlinie festgesetzte Toleranzradius von 2000 m eingehalten wurde. So enthielten viele Standorte die gleiche Standort-ID, obwohl sie mehr als 2000 m vom alten Standort verlegt wurden. Eine weitere Überprüfung ergab, dass die Vergabe der Standort-IDs nicht über alle drei Moos-Monitoringphasen eingehalten wurde.

Verknüpfbarkeit. Das Verknüpfen der standortbeschreibenden Datensätze mit den Laborergebnisdatsätzen geschieht im Idealfall über die innerhalb eines Moos-Monitoring-Projektes vergebenen Proben-ID. Da sich die Syntax der Proben-IDs der standortbeschreibenden Datensätze von denen der Laborergebnisse in allen drei Moos-Monitoringphasen in den meisten Fällen voneinander unterscheiden, war eine automatisierte Verknüpfung nicht möglich.

Schaffung einer einheitlichen Syntaxstruktur. Da die Vergabe von Standort-IDs in den drei bisherigen Moos-Monitoring-Projekten nicht einheitlich verlief, wurde in einem ersten Schritt nach einem festgelegten Toleranzradius von 2000 m im GIS nach durchgängig beprobten Standorten gesucht. Die Ergebnisse dieser Arbeiten enthält der Berichtsteil I. Die so ermittelten „gleichen Standorte“ wurden mit einer eindeutigen Standort-ID versehen. Alle übrigen in den drei Moos-Monitoring-Projekten beprobten Standorte enthielten ebenfalls eine neue Standort-ID.

Die analytischen Laborergebnisse korrespondieren nicht nur mit dem Standort, sondern im Falle einer Mehrfachbeprobung v.a. mit der Probenentnahme. Auch kann ein Standort in allen drei Beprobungsphasen beprobt worden sein. Dem-

zufolge erhielt jede Probe neben der Standort-ID zusätzlich eine eigene Proben-ID.

Ergebnis. Durch die Überarbeitung und Homogenisierung der in den Moos-Monitoring-Vorhaben von 1990, 1995 und 2000 erzeugten Datentabellen konnte eine vereinheitlichte Tabellenstruktur geschaffen werden. Mit dieser vereinheitlichten Datengrundlage ist nun ein einfacher und schneller und fehlerfreier Zugriff auf die Moos-Monitoring-Daten möglich. Die Anzahl der in den Datentabellen enthaltenden standortbeschreibenden Datensätze beläuft sich auf 2864. Von diesen 2864 Datensätzen sind 2646 mit Informationen über Elementgehalte aus Moosproben versehen.

3.1.2 Optimierung der UBA-Moos-Datenbankstruktur

Bisherige UBA-Moos-Datenbankstruktur. Die Datenstrukturierung innerhalb der UBA-Access-Datenbank fußt auf fünf miteinander verknüpften Tabellen. Von diesen Tabellen enthält eine Tabelle sämtliche Inhalte der im Probenentnahmeprotokoll abgefragten Standortkriterien (→ Anhang C.4). Die anderen vier Tabellen bestehen aus einer Spalte mit Angaben zur Baumart, zum Bodentyp, zum Land und zur Exposition. Neben den Datentabellen bilden die mit diesen verbundene Eingabeoberfläche (entsprechend dem Probenentnahmeprotokollformular) sowie einige Abfragetools das Grundgerüst der UBA-Moos-Datenbank.

Redundanz. Bei der Überprüfung der UBA-Moos-Datenbankstruktur konnten typische Redundanzerscheinungen ausgemacht werden. Vor dem Hintergrund eines optimalen Datenzugriffs sowie einer flexiblen Datenhaltung ist es allerdings wichtig, auf die Vermeidung redundanter Datenhaltung zu achten. Es wurden mehrere Gruppen von Spalten gesichtet, die über den gleichen Inhalt eine Aussage machen. So wurden beispielsweise für die Witterung entspre-

chend der möglichen Antworten (z.B. sonnig, windstill) sieben Spalten angelegt, in die 0 für falsch und 1 für wahr eingetragen werden können. Ein weiteres Redundanzkriterium bildete die Wiederholung von Zeilen einer bestimmten Spalte. Um innerhalb der UBA-Moos-Datenbank einen optimalen Datenzugriff zu gewährleisten, wurden diese Redundanzerscheinungen durch Normalisierung der Datentabellen minimiert. Normalisierung ist ein Verfahren, bei dem Relationschemata (= Tabellen) soweit zerlegt werden, bis keine redundanten Daten mehr vorhanden sind. Die Normalisierung der Datentabellen erfolgt über die Zusammenfassung und Auslagerung von Spalten.

Zusammenfassen von Spalten. Die Zusammenfassung von Spalten soll an dem oben beschriebenen Beispiel der Spaltengruppe Witterung vorgeführt werden. Die Tabelle 2 zeigt, wie die ursprünglichen sieben die Witterung beschreibenden Spalten (*Witterung sonnig* – *Witterung NEU*) zu einer Spalte zusammengefasst worden sind. (*Witterung CODE*). Neben dem geschilderten Beispiel wurden noch weitere Spaltengruppen zusammengefasst, so dass die Spaltenmenge von insgesamt 84 auf 47 reduziert werden konnte.

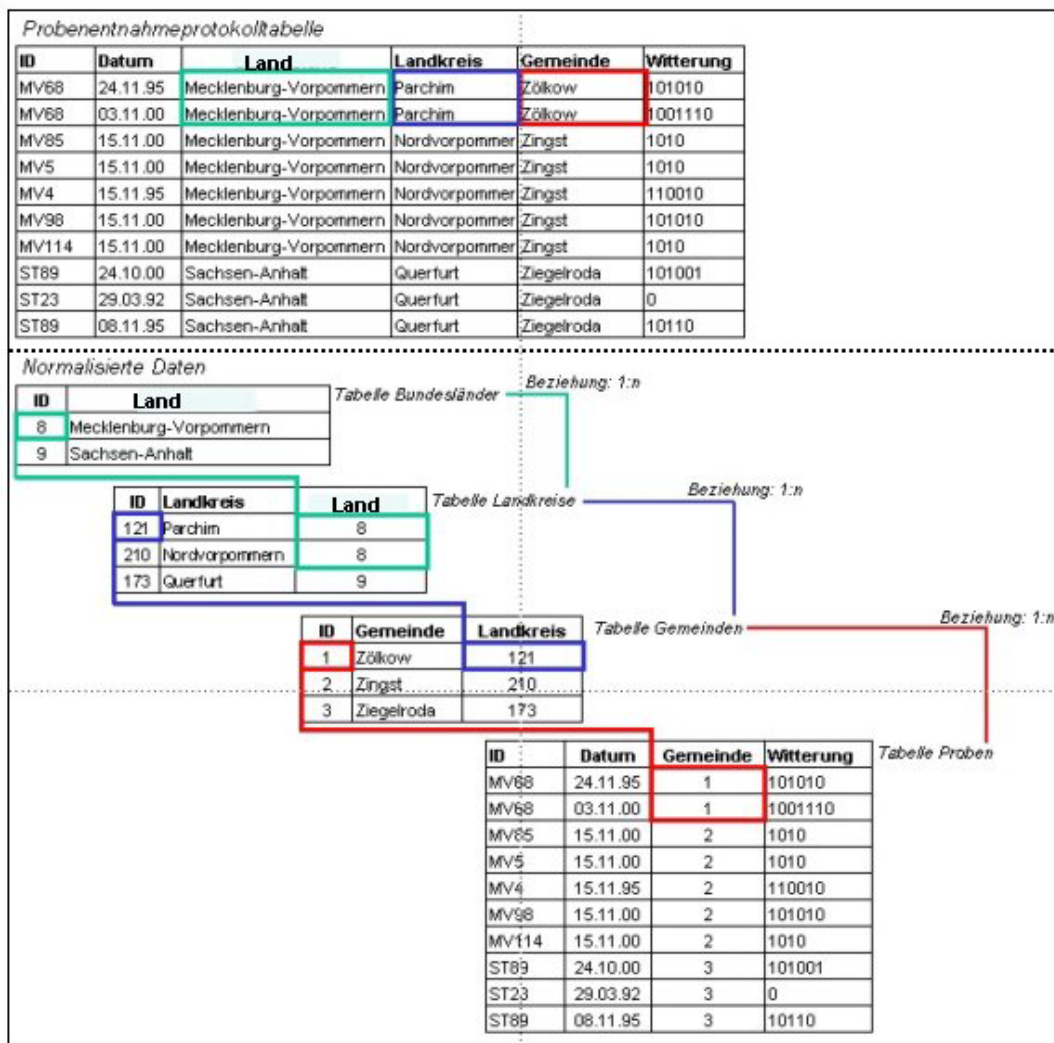
Tabelle 2: Zusammenfassung von Spalten in der UBA-Moosdatenbank

Witterung sonnig	Witterung bewölkt	Witterung regnerisch	Witterung windig	Witterung windstill	Witterung trocken	Witterung NEU	Witterung CODE
0	-1	-1	0	0	0	0	110000
0	-1	0	0	-1	-1	0	100110
0	-1	-1	-1	0	0	0	111000
0	0	0	0	0	0	-1	1
0	-1	0	0	-1	-1	0	100110
-1	0	0	0	-1	-1	0	1000110

Auslagerung von Spalten. Nachdem die Spaltenanzahl durch Zusammenfassung von Spaltengruppen auf ein optimales Maß reduziert wurde, bestand der Schritt 2 der Normalisierung in dem Absuchen der Zeilen der Datentabellen nach sich ständig wiederholenden Spalteninhalten. Um dies zu vermeiden, wurden redundante Datensätze in neue Tabellen ausgelagert und mit der Ausgangstabelle über sogenannte 1:n Beziehungen verknüpft. Ein Beispiel einer

derartigen Normalisierung zeigt die Abbildung 1. Hier zeigen die in der als *Probenentnahmeprotokolltabelle* bezeichneten unveränderten Ausgangstabelle in den Spalten *Land*, *Landkreise* und *Gemeinde* sich wiederholende Zeileninhalte (z.B. Mecklenburg-Vorpommern in der Spalte Land). Durch Auslagerung dieser redundanten Datensätze in eigene Tabellen wurde die Struktur normalisiert.

Abbildung 1: Auslagern von Spalten in der UBA-Moos-Datenbank



Fazit. Durch die in den Kapiteln 3.1.1 und 3.1.2 vorgestellte Überarbeitung der Datenbankstruktur im Moos-Monitoring konnte eine Vereinheitlichung und Vereinfachung der Art der Datenhaltung erzielt werden. Dies hat nicht nur den Vorteil einer Verbesserung des bisherigen Datenbanksystems, sondern beinhaltet

auch die Basis für die Integration der Moos-Monitoring-Daten in andere Datenbanksysteme. Eine Möglichkeit wird in dem folgenden Kapitel 3.2 in Form eines Internet- und GIS-gestützten Umweltmonitoringsystems (IGUS) vorgestellt.

Die überarbeitete UBA-Moos-Datenbank liegt dem Abschlussbericht in Form einer CD bei. Die dazugehörige Anleitung befindet sich im Anhang C.5.

3.2 Konzept für ein Internet- und GIS-gestütztes Umweltmonitoring-System (IGUS)

Veranlassung und Zielsetzung. Viele der Probleme in dem vom Bund, von den 15 Ländern und den drei Projektpartnern durchgeführten Moos-Monitoring 2000 waren auf eine dezentrale Datenhaltung zurückzuführen. So werden in einem derart breit angelegten Monitoring-Vorhaben viele Tabellen in Form von MS Access-, Excel- und ASCII-Dateien erzeugt, die ständig zusammengeführt und aktualisiert werden müssen. Weitere Problembereiche wurden bei einer nach der Probenentnahme durchgeführten Befragung der Probenentnehmer deutlich. So wurde von einigen Probenentnehmern ausreichend kartografische Informationen verlangt, um sowohl bestehende als auch neue Probenentnahmestellen auffindbar zu machen (→ Anhang C.2). Internet und GIS bieten erweiterte Möglichkeiten der Datenverarbeitung und -haltung. Im Hinblick auf ein zukünftiges Moos-Monitoring sowie die Schaffung eines zentralen Datenbanksystems wurde ein Konzept für ein *Internet- und GIS-gestütztes Umweltmonitoring-System (IGUS)* entworfen. Mit dem IGUS wird Folgendes erreicht: Flexibilisierung und Verknüpfung von Datenhaltung und -transfer.

In diesem Kapitel 3.2 wird zunächst eine kurze Einführung in die technischen Grundlagen des IGUS gegeben. Es folgt eine Darstellung der bisherigen Arbeitsabläufe im Moos-Monitoring, um anschließend die mit IGUS erzielbaren Verbesserungen zu benennen.

In den Abbildungen 2 und 3 sowie in den schriftlichen Ausführungen wird zwischen Daten- und Materialflüssen unterschieden. Die Daten sind standortbeschreibende Datensätze sowie die analytischen Laborergebnisse. Bei den Materialflüssen handelt es sich um die Moosproben sowie die mit diesen verschickten analogen Probenprotokolle.

Technische Grundlagen. Die kombinierte Nutzung von Internet und GIS konnte durch die bisher im Moos-Monitoring eingesetzte Softwarestruktur nicht geleistet werden. Für die Durchführung eines zukünftigen Moos-Monitorings mit IGUS wachsen somit die Anforderungen an die bereitzustellenden Datenbank- und GIS-Funktionalitäten. Das eigentliche Datenbanksystem wird im IGUS durch eine MySQL-Datenbank gebildet, in der alle im Moos-Monitoring vorhandenen Sachdaten (Standortdaten, Messdaten) gespeichert werden. Diese Datenbank korrespondiert mit einem Geodaten-Mapserver, der die GIS-Funktionalitäten bereitstellt. Hierbei wird mit dem ARC IMS Mapserver wie beim Moos GIS (→ Kapitel 5) ein Softwareprodukt der Firma ESRI verwendet. Mit dieser Software ist es möglich, im Internet räumliche Informationen in Form von thematischen Karten [grafisch] darzustellen und durch die Anwendung von geometrischen Funktionen abfragbar zu machen. IGUS kann mit jedem herkömmlichen Web-Browser (z.B. Internet Explorer, Netscape), die über HTML- und PHP- Dokumente den Zugriff auf die Sach- und Geodaten ermöglichen, verwendet werden.

Daten- und Materialflüsse bisher. Die Daten- und Materialflüsse aus dem Moos-Monitoring 1990, 1995 und 2000 sind der Abbildung 2 zu entnehmen. Wie in der Probenentnahmerichtlinie vorgeschrieben, mussten bei der Probenentnahme Standortbeschreibungen gemäß Eingabeformular der UBA-Moos-Datenbank angefertigt werden (→ Kapitel 2). Das Auffinden von Probenentnahmestellen erfolgte über analoges Kartenmaterial, das von den jeweiligen Koordinationsstellen der Länder zur Verfügung gestellt wurde. Die Digitalisierung der entsprechenden Informationen in die UBA-Access-Anwendung wurde

entweder durch die beauftragten Probenentnehmer selbst oder von den jeweiligen Länderbehörden durchgeführt, um anschließend an den vom UBA beauftragten Forschungsnehmer weitergeleitet zu werden. Dort wurden alle Access-Dateien der Ländern in *einer* zusammengeführt.

Die Moosproben wurden gemäß der in Kapitel 2 beschriebenen Vorgehensweise verpackt und an den Moospräparator weitergeleitet. Von dort gelangten die gereinigten Moosproben in das Labor, wo die chemische Moos-Analytik durchgeführt wurde. Die Ergebnisse der Analytik wurden per E-Mail an den Forschungsnehmer weitergeleitet, wo sie in das Datenbanksystem eingefügt und mit den standortbeschreibenden Datensätzen verknüpft wurden. Abschließend erfolgte die statistische Auswertung der Daten, wobei im Moos-Monitoring 2000 lokal vorhandene GIS-Programme zum Einsatz kamen (→ Kapitel 5).

Zwischenfazit. Die bisherigen Arbeitsabläufe im Moos-Monitoring in Bezug auf Datensammlung und Datenverarbeitung gestalteten sich sehr aufwendig und fehleranfällig. Der Grund ist in der anfänglichen dezentralen Datenhaltung und der späteren Zusammenführung dieser Datenbestände in der UBA-Moos-Datenbank zu sehen. Dieser Ablauf enthält viele potenzielle Fehlerquellen und verzögert die Verfügbarkeit der Ergebnisse des Moos-Monitorings.

Daten- und Materialflüsse mit IGUS. Die durch den Einsatz des IGUS bedingten Veränderungen bei der Durchführung eines Moos-Monitoring-Projektes sind der Abbildung 3 zu entnehmen. Die Integration von GIS-Funktionalitäten in dem IGUS ermöglicht es dem Probenentnehmer, sich vor Beginn der Probenentnahme ausreichend kartografische Informationen zu beschaffen, um sowohl bestehende als auch neue Probenentnahmestellen auffindbar zu machen. So stellt das IGUS die in den Vorgängerprojekten generierten Daten zur Standort-suche zur Verfügung. Bei der Wiederbeprobung von Probenentnahmestandorten können die relevanten Informationen recherchiert und als Orientierung bei der Neubeprobung genutzt werden. Weiterhin besteht die Möglichkeit, den

Standort mit zur Verfügung stehenden digitalen Karten grafisch darzustellen. Bei diesen Karten handelt es sich im Idealfall um hochauflösende kartografische Vektordaten wie z.B. ATKIS-Daten. Es können allerdings auch niedriger aufgelöste georeferenzierte topographische Rasterkarten verwendet werden. In diesen Karten können Ausschlusskriterien aus der Probenentnahmerichtlinie (z.B. Mindestabstände zu potenziellen Emissionsquellen) angezeigt werden (→ Kapitel 2).

Sobald die Probenentnahme im Gelände abgeschlossen ist, können die Daten über das Internet in das System eingegeben und so alle Beteiligten über den Stand der Probenentnahme informiert werden. Die Datenrechte werden dabei durch Password-geschützte Seiten garantiert. Die Laborergebnisse werden nach Abschluss der chemischen Moos-Analytik ebenfalls in das IGUS integriert. Dabei erfolgt die Anbindung an die standortbeschreibenden Datensätze automatisch. Auf der Basis der zusammengeführten Daten bietet das IGUS weiterhin die Möglichkeit, die analytischen Laborergebnisse kartografisch zu veranschaulichen und Vorauswertungen vorzunehmen. So können bei nicht plausiblen Werten umgehend Nachuntersuchungen angeordnet werden.

Fazit. Im Gegensatz zu den Abläufen des bisherigen Moos-Monitorings bietet der Einsatz des IGUS die Möglichkeit, Daten von Anfang an zentral über das Internet unter konstanten Bedingungen aufzunehmen, zu speichern und abzurufen. Dadurch entfallen die Arbeitsbereiche Datensammlung, -aufbereitung sowie -zusammenführung. Eingabefehler sowie Fehler bei der Verknüpfung der generierten Informationsschichten werden vermieden. Mit Hilfe der in das IGUS implementierten GIS-Funktionalitäten können weiterhin die in der Probenentnahmerichtlinie vorgegebenen Toleranzradien und Mindestabstände zu potenziellen Emissionsquellen überprüft werden.

Abbildung 2: Arbeitsabläufe im Moos-Monitoring bisher

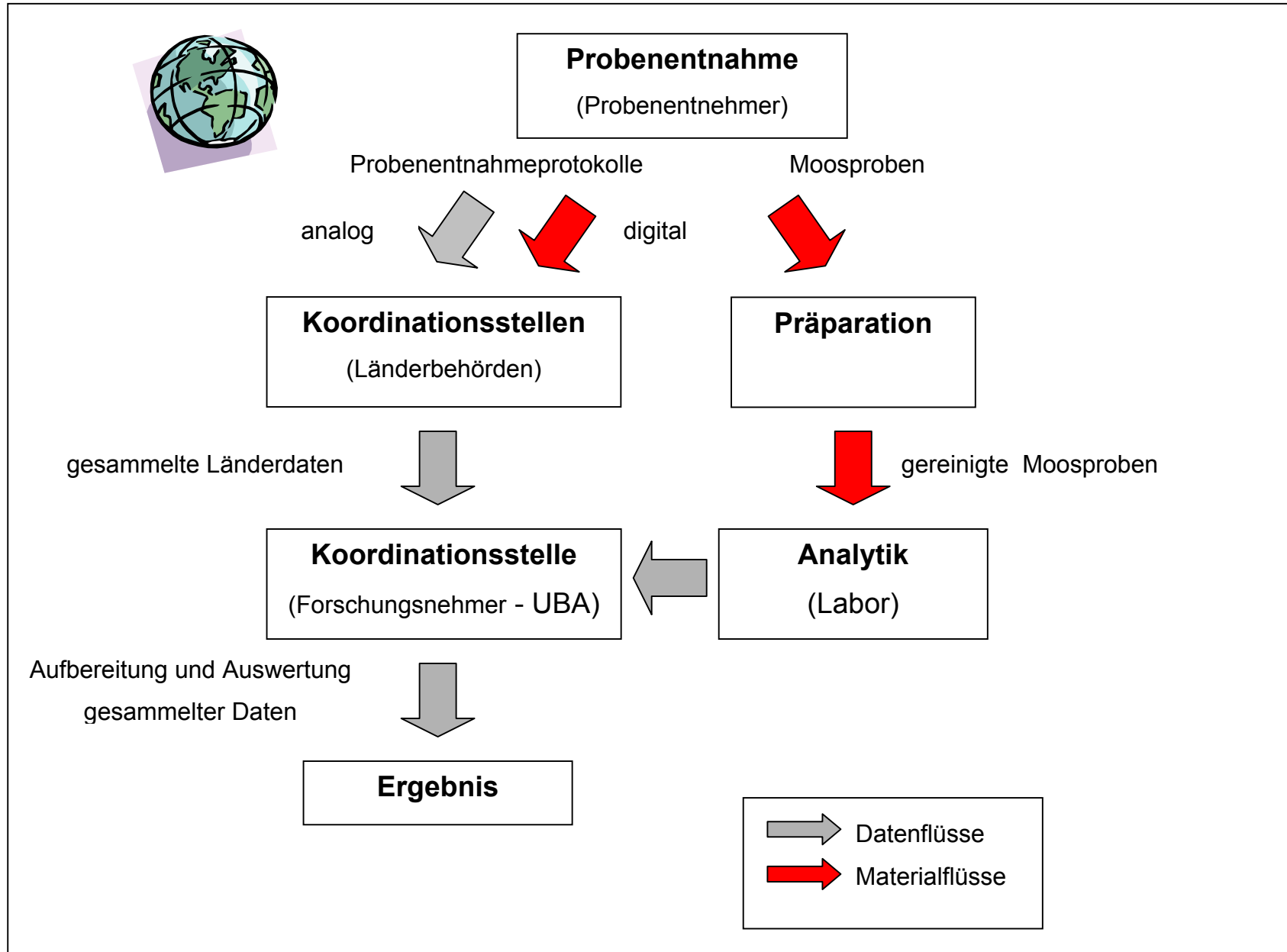
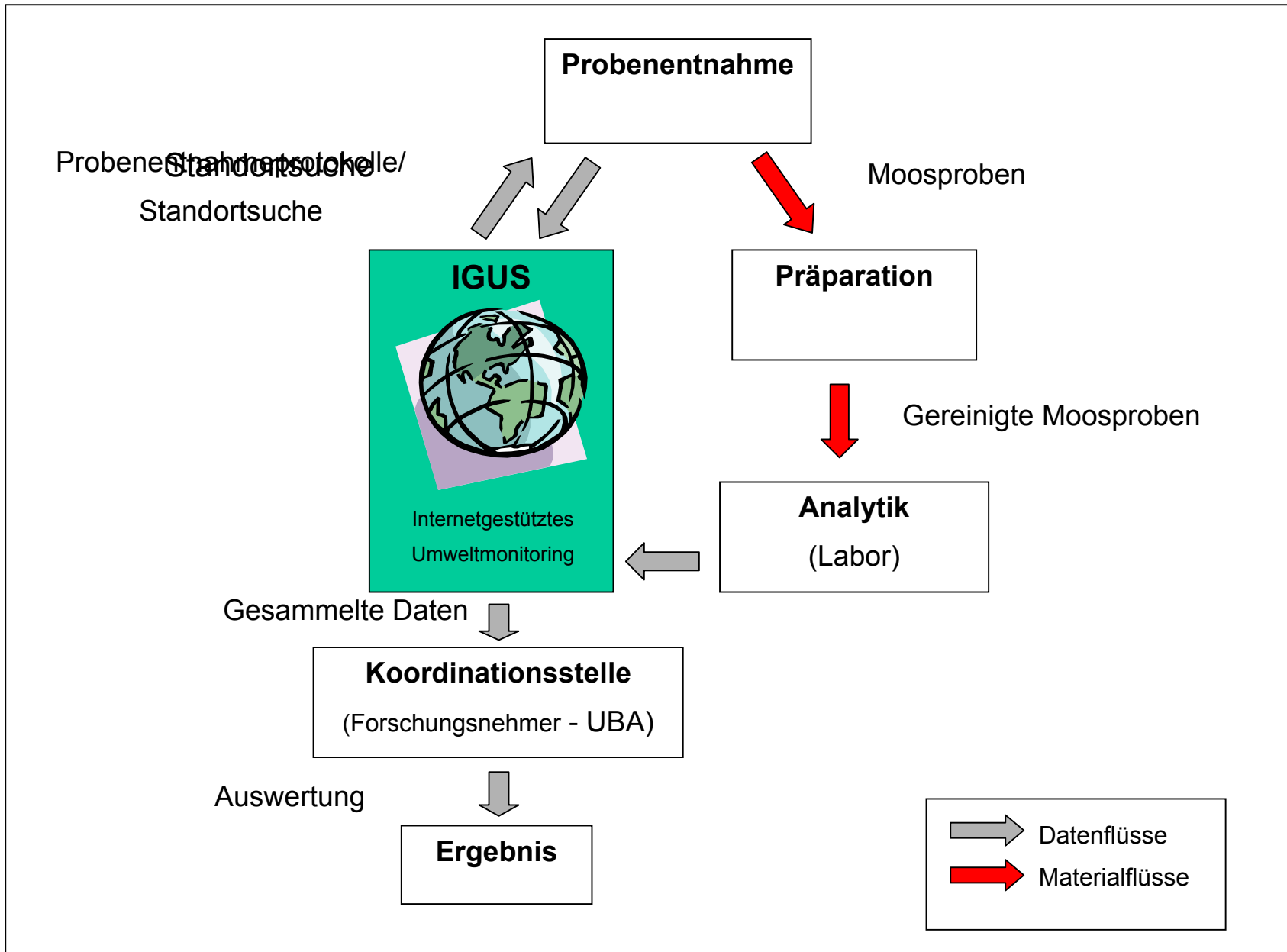


Abbildung 3: Arbeitsabläufe mit IGUS



4 Geostatistische Analyse ausgewählter Moos-Monitoringdaten 2000

Hintergründe. Der Projektauftrag im Moos-Monitoring 2000 sah vor, bereits im Vorfeld der Probenentnahme fachlich und statistisch begründete Optimierungsvorschläge zur Messnetzanordnung zu erbringen. Aufgrund des geringen Zeitabstands zwischen Beginn des Projektes (15.08.00) und der Probenentnahme im September/Oktober 2000 war dies nicht möglich. Durch Verlängerung der Bearbeitungszeit des Moos-Monitoring 2000 bis Ende September 2002 sollten Optimierungsvorschläge für ein mögliches Moos-Monitoring 2005 ausgearbeitet werden. Die hierfür vorgesehene Methodik sieht den kombinierten Einsatz dreier fortgeschrittener statistischer Verfahren vor:

1. Geostatistik (Variogrammanalyse, Kriging),
2. multivariate Clusteranalyse sowie
3. Nachbarschaftsanalyse.

Mit Hilfe geostatistischer Verfahren werden optimale Flächenschätzungen für die im Moos-Monitoring 2000 ermittelten Elementeinträge berechnet. Die daraus resultierenden Ergebnisse werden mit Hilfe multivariater Clustermethoden zu Belastungsindikatoren statistisch begründet aggregiert. Der Einsatz nachbarschaftsanalytischer Verfahren erlaubt eine quantifizierbare Einschätzung und Prüfung der raumstrukturellen Landschaftsrepräsentanz (SCHRÖDER et al. 2001). Mit der Nachbarschaftsanalyse können definierten Rasterzellen hinsichtlich charakteristischer Merkmale wie Landnutzung, naturräumlicher Ausstattung und eben den Ergebnissen der Clusteranalyse quantitativ beschrieben werden. Messnetze können so gezielt ergänzt oder ausgedünnt werden.

Diese Arbeiten konnten im August und September nicht vollständig durchgeführt werden. Da die optimierten Flächenschätzungen (s.o. Zf. 1) den cluster-

und nachbarschaftsanalytischen Auswertungen (s.o. Zf. 2,3) zugrunde liegen, wurde dieses Aufgabenfeld bearbeitet.

Zielsetzung. Unter Zuhilfenahme geostatistischer Methoden sollen für die Elemente Al, As, Cd, Cr, Cu, Fe, Hg, Ni, Pb, Sb, Ti, V und Zn Flächenschätzungen durchgeführt werden. Dabei stehen vier Fragestellungen im Vordergrund:

1. Wie kann man geostatistische Methoden zur optimierten Ableitung von Flächenschätzungen für die beschriebenen Elementverteilungen einsetzen?
2. Welche statistischen Kenngrößen erlauben eine Einschätzung der Schätzgüte jeder berechneten Flächenkarte?
3. Wie kann man sog. Ausreißer mit geostatistischen Verfahren identifizieren?
4. Welche Möglichkeiten bieten die Instrumente Moos-GIS und Moosdatenbank zur Überprüfung dieser Ausreißer?

Vorgehen. Im Kapitel 4.1 wird zunächst ein kurzer Abriss über Grundlagen geostatistischer Methoden gegeben. Die statistisch-methodischen Aspekte der geostatistische Analyse der Elementkonzentrationen von Al, As, Cd, Cr, Cu, Fe, Hg, Ni, Pb, Sb, Ti, V und Zn im Moos-Monitoring 2000 [inkl. Ergebnisse] wird in den Kapiteln 4.2 bis 4.5 beschrieben. Die räumlichen Strukturen der betrachteten Elementkonzentrationen in Moosen wurden bereits im Berichtsteil I ausführlich dargestellt (SCHRÖDER 2002 a). Im Folgenden werden vier Bearbeitungsschritte dargestellt:

1. Datenanalyse und -transformation (→ Kapitel 4.2),
2. Variogrammanalysen (→ Kapitel 4.3),
3. Kriginginterpolation (→ Kapitel 4.4) sowie
4. Ausreißerererkennung und -bewertung (→ Kapitel 4.5).

Die Variogrammanalysen und Kriginginterpolationen wurden mit der Software ISATIS durchgeführt. Zusätzliche statistische Analysen erfolgten mit der Statistik-Software SPSS sowie mit MS Excel. Die kartografische Aufarbeitung und Visualisierung der Ergebnisse erfolgte mit ArcView GIS (→ Kapitel 5).

4.1 Theoretische Grundlagen

Im Folgenden wird eine kurze Einführung in geostatistische Methoden gegeben. Die Darstellung beschränkt sich auf eine textliche Beschreibung ohne Berücksichtigung mathematischer Formeln. Entsprechende ausführlichere Erklärungen sind der Literatur (→ Kapitel 7) zu entnehmen.

Allgemeines. Geostatistische Verfahren ermöglichen es, Messnetze hinsichtlich ausgewählter Messparameter auf ihre räumliche Aussagekraft zu überprüfen. Aus einer Stichprobe (im Moos-Monitoring: Elementkonzentrationen, gemessen an 1028 deutschen Standorten) soll die Wahrscheinlichkeitsstruktur der Grundgesamtheit (im Moos-Monitoring: flächenhafte Elementkonzentrationen für Gesamtdeutschland) geschätzt werden. Die Geostatistik gründet auf der Theorie regionalisierter Variabler und basiert auf Erkenntnissen aus empirischen Arbeiten über Goldlagerstätten in Südafrika (MATHERON 1971). Die beiden Basiselemente der Geostatistik sind Variogrammanalyse und Kriging.

Variogrammanalyse. Der Geostatistik liegt die Annahme zugrunde, dass Messwerte benachbarter Standorte sich ähnlicher sind als Messwerte weiter entfernt liegender Standorte (= Erhaltensneigung). Diese Annahme wird mit der Variogrammanalyse überprüft. Dazu bildet man innerhalb vorzugegebener Distanzintervalle die mittleren quadrierten Differenzen der Probenwerte (= Semivarianzen) und trägt diese in einem Koordinatensystem zu den jeweiligen Distanzen auf. Man erhält so das sogenannte *experimentelle Variogramm* (→ Abb. 4) Wenn die Semivarianzen mit zunehmender Messpunktdistanz steigen, so weist dies auf eine distanzabhängige Struktur im Datenfeld hin².

² Neben Entfernungsintervallen können Winkelklassen zur Überprüfung richtungsabhängiger Strukturen im Datenfeld gebildet werden. Unterscheiden sich die Variogramme unterschiedlicher Richtungen spricht man von sogenannten Anisotropien. In der vorliegenden Ausführung wurde dies aus Zeitgründen nicht überprüft. Es wurden lediglich richtungsunabhängige *omnidirektionale* Variogramme berechnet.

Abbildung 4: Beispiel eines omnidirektionalen experimentellen Variogramms (Hg im Moos-Monitoring 2000)

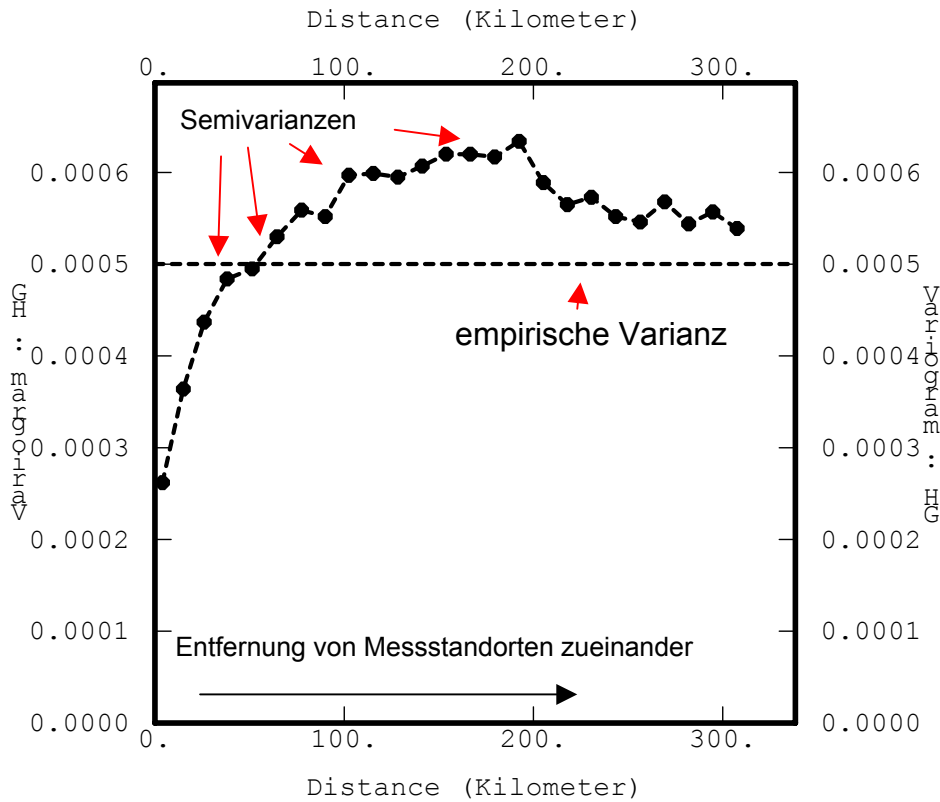
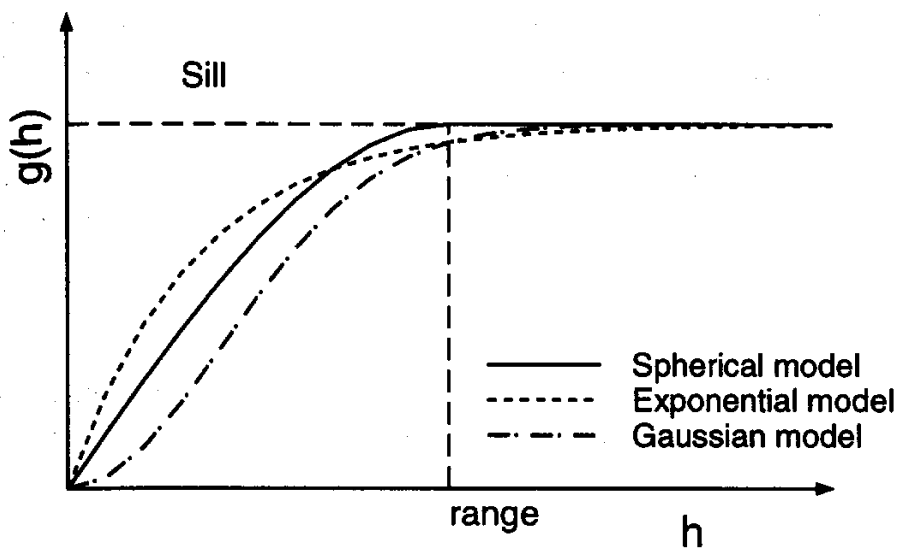


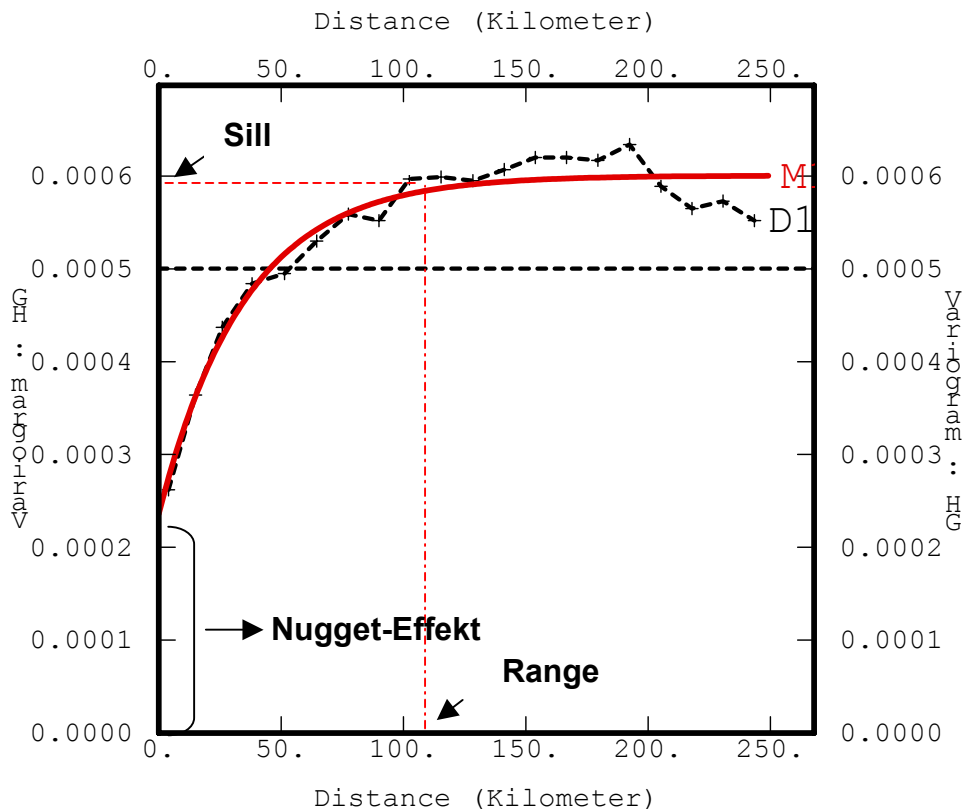
Abbildung 5: Variogrammmodelle



Für die Ableitung der für die nachfolgende Kriging-Interpolation notwendigen Parameter Extrapolationsradius und Wichtungsfaktoren ist es nötig, diesem experimentellen Variogramm ein *Modellvariogramm* anzupassen. Hierfür existieren unterschiedliche mathematische Modelle. Beispiele finden sich in der Abbildung 5.

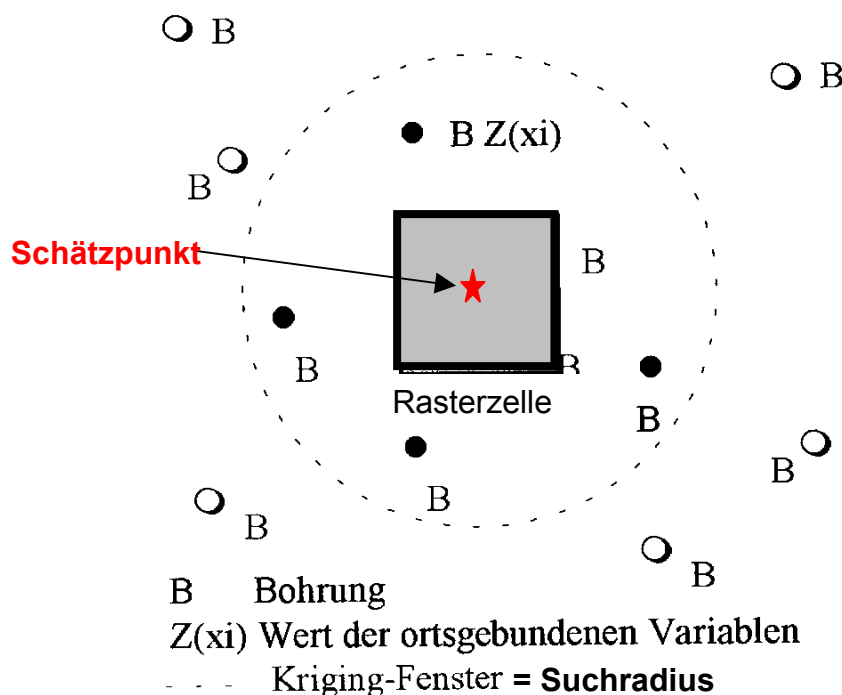
Die maximale räumliche Aussagekraft der punkthaften Messwerte ergibt sich aus der Projektion der Scheitelkurve des Modellvariogramms auf die Distanzachse (\rightarrow Abb. 6). Innerhalb dieses Bereiches (range) wird eine Interpolation zwischen Messpunkten als statistisch sinnvoll angenommen. Die Abbildung 6 zeigt den Schnittpunkt des Modellvariogramms mit der Ordinate oberhalb des Ursprungs des Koordinatensystems. Dieser Abstand zwischen Schnittpunkt und Ursprung wird als Nugget-Effekt bezeichnet und deutet auf starke standörtliche Variabilitäten hin.

Abbildung 6: Beispiel einer Modellanpassung (Hg im Moos-Monitoring 2000)



Kriging. Nach einer positiven geostatistischen Prüfung des Datenmaterials per Variogrammanalyse und der Auswahl eines geeigneten Modellvariogramms wird zur Regionalisierung der Datenpunkte das Kriging-Verfahren angewendet³. Hierbei wird in einem definierten Raster unter der Bedingung der Minimierung der Schätzvarianz eine nach Entfernung gewichtete Berechnung der Schätzwerte durchgeführt. Der ermittelte Schätzwert steht dabei für den Mittelpunkt der Rasterzelle und wird auf deren räumliches Ausmaß verallgemeinert (→ Abb. 7). Die durch die Variogrammanalyse abgeleitete Modellfunktion geht in Form des Suchradius (Kriging-Fenster) und der Wichtungsfaktoren als Parameter in die Kriging-Berechnung ein.

Abbildung 7: Schätzung eines Rasterzellenwertes (verändert nach AKIN 1983)



³ Mit dem Begriff Kriging werden ein ganze Reihe von Schätzverfahren zusammengefasst, die alle eine Minimierung der Schätzvarianz zum Ziel haben (HEINRICH 1994). Je nach Annahmen unterscheidet man u.a. zwischen Simple kriging, Ordinary kriging, Universal kriging oder Cokriging. In der vorliegenden Ausführung wird das Ordinary Kriging behandelt.

Schätzgütekriterien. Zur Beurteilung der Güte der mit dem Kriging ermittelten Schätzergebnisse gibt es drei unterschiedliche Verfahren:

1. Berechnung der Krigingvarianz,
2. Kreuzvalidierung sowie
3. Messwert-Rasterwertvergleich.

Krigingvarianz. Die Krigingvarianz ist die minimierte Schätzvarianz zwischen wahrem und geschätzten Wert. Da der wahre Wert unbekannt ist, hängt die Krigingvarianz nur vom Variogramm und der relativen Geometrie der Messpunkte ab (HEINRICH 1994). Höchste Werte weisen somit diejenigen Bereiche auf, die von den Messpunkten am meisten entfernt liegen.

Kreuzvalidierung. Kreuzvalidierung ist ein in der Geostatistik gebräuchliches Instrument, um für ein gewähltes experimentelles Variogramm eine optimierte Modellanpassung durchzuführen. Aus der Gesamtmenge der Messpunkte wird nacheinander je ein Wert dem Datensatz entnommen und durch Kriging mit dem gewählten Modellvariogramm neu geschätzt. Die Differenzen zwischen Mess- und Schätzwerten werden anschließend durch geeignete statistische Kennzahlen beschrieben.

Messwert-Rasterwertvergleich. Beim Messwert-Rasterwertvergleich werden die Messpunkte mit den jeweiligen Flächenkarten im GIS verschnitten. Jeder Messpunkt wird dabei mit einem Rasterzellenwert verglichen und somit nicht mit dem geometrisch exakten Schätzwert. Die Differenzen zwischen Mess- und Rasterwerten werden anschließend wie bei der Kreuzvalidierung durch geeignete statistische Kenngrößen beschrieben.

4.2 Datenanalyse und -transformation

Normalverteilung? Die Anwendung geostatistischer Methoden liefert nur dann die besten Ergebnisse, wenn die zu behandelnden Daten normalverteilt sind (WEBSTER & OLIVER 2001). Wenige übermäßig hohe Werte beispielsweise führen zu übermäßig hohen Variogrammwerten und verzerren somit die durch das Variogramm wiedergegebene räumliche Autokorrelation. Besonders asymmetrische, positiv schiefe Verteilungsformen weisen derartige Charakteristika auf. Vor einer geostatistische Analyse von Messdaten ist es somit notwendig, sich mit Hilfe der deskriptiven Statistik Klarheit über die Struktur und Verteilungsform der Messdatensätze zu verschaffen. Schiefe Verteilungsformen können so identifiziert und beispielsweise durch Lognormal-Transformation in eine Normalverteilung überführt werden.

Wie die in der Tabelle 3 zusammengetragenen Parameter sowie die im Anhang E.1.1 zusammengestellten Histogramme zeigen, weisen alle 13 Elemente eine deutliche positive Schiefe auf. Die Schiefe liegt in allen Fällen über 1, besonders hohe Werte zeigen V (= 7,6), Al (= 3,7), Fe (= 3,6) und Hg (= 3,5). Die Abweichung von der Normalverteilung wird auch durch die Kolmogorow-Smirnow-Teststatistik untermauert. In keinem Fall kann, selbst bei der Wahl eines sehr kleinen Signifikanzniveaus, die Nullhypothese, die beobachtete Verteilungsform entspreche einer Normalverteilung, beibehalten werden. WEBSTER & OLIVER (2001) weisen allerdings darauf hin, dass derartige Tests bei Datenmengen von mehr als 100 nur eingeschränkte Aussagekraft besitzen. Die Nullhypothese wird bei großen Datensätzen schneller abgelehnt. Weiterhin auffällig ist die hohe Streuung der Messwerte. Mit Ausnahme von Sb, Cu und Zn weisen alle Elemente Variationskoeffizienten von mehr als 45 % auf.

Lognormaltransformation. Um die Verteilungsform der Messdaten einer Normalverteilung anzunähern, schlagen WEBSTER & OLIVER (2001) ab einer Schiefe von mehr als 1 eine Lognormaltransformation der Rohdaten vor. Da alle

hier betrachteten 13 Elementverteilungen Schiefen von mehr als 1 [$\mu\text{g/g}$]³ aufweisen, wurde die Lognormaltransformation durchgeführt und die Ergebnisse erneut in Form von Histogrammen dargestellt (→ Anhang E.1.2). Alle Histogramme zeigen nun eine deutliche Annäherung an eine Normalverteilung. Entsprechend der Kolmogorow-Smirnow-Teststatistik der Tabelle 3 weisen die Verteilungen von Cu, Fe, Pb, Sb, Ti, V und Zn auf einem Signifikanzniveau von 1 % Normalverteilung auf.

Trotz der festgestellten Abweichung der nichttransformierten Messdatenverteilungen von der Normalverteilung sind Variogrammanalysen (→ Kapitel 4.3) und Kriginginterpolationen (→ Kapitel 4.4) sowohl für die Originaldaten als auch für die lognormaltransformierten Daten durchgeführt worden. Im Kapitel 4.4 werden die Ergebnisse bezüglich ihrer Schätzgüte gegenübergestellt.

Tabelle 3: Deskriptiv-statistische Parameter ausgewählter Elemente aus dem Moos-Monitoring 2000 (Teil 1)

	Al	As	Cd	Cr	Cu	Fe	Hg
Anzahl Werte	1028	1026	1027	1025	1027	1026	1028
Mittelwert [$\mu\text{g/g}$]	389	0,210	0,243	1,03	7,5	409	0,047
Median [$\mu\text{g/g}$]	307	0,160	0,210	0,91	7,1	343	0,041
Standardabw. [$\mu\text{g/g}$]	294	0,159	0,121	0,48	2,5	273	0,022
Varianz [$\mu\text{g/g}$] ²	86390	0,025	0,015	0,23	6,4	74469	0,001
Variationskoef. [%]	75,62	75,38	49,53	46,57	33,62	66,71	48,05
Spannweite [$\mu\text{g/g}$]	2707	1,260	1,455	4,16	23,1	2722	0,296
Schiefe	3,7	3,0	3,2	2,4	1,8	3,6	3,5
p^4 (Kolmog.-Smirnov.) – untransf.	0	0	0	0	0	0	0
p(Kolmog.-Smirnov.) – Ln-transf.	0,00020	0,00001	0,00013	0,00118	0,66290	0,01399	0,00195

⁴ Mit dem Kolmogorov-Smirnov-Test wird die beobachtete kumulative Verteilungsfunktion der Messwerte für eine Messgröße mit einer festgelegten theoretischen Verteilung, hier der Normalverteilung, verglichen. Wenn p sehr klein ist (in der Regel kleiner als 0,05 oder 0,01), wird die Nullhypothese (beobachtete Verteilungsform = Normalverteilung) abgelehnt (Bei Beibehaltung der Nullhypothese auf dem 1 % Signifikanzniveau sind die p-Werte der Tabelle 3 fett gedruckt.)

Tabelle 3: Deskriptiv-statistische Parameter ausgewählter Elemente aus dem Moos-Monitoring 2000 (Teil 2)

	Ni	Pb	Sb	Ti	V	Zn
Anzahl Werte	1028	1026	1028	1023	1027	1026
Mittelwert [$\mu\text{g/g}$]	1,34	5,51	0,167	10,1	1,2	45,0
Median [$\mu\text{g/g}$]	1,13	4,62	0,150	7,9	1,1	41,0
Standardabw. [$\mu\text{g/g}$]	0,67	3,44	0,074	7,8	0,8	18,0
Varianz [$\mu\text{g/g}^2$]	0,44	11,81	0,006	60,3	0,7	323,5
Variationskoef. [%]	49,86	62,36	44,44	76,72	65,46	40,00
Spannweite [$\mu\text{g/g}$]	4,68	27,80	0,470	73,8	16,2	218,8
Schiefe	1,6	2,6	1,4	3,3	7,6	2,7
p (Kolmog.-Smirnov. GOF) - untransf.	0	0	0	0	0	0
p(Kolmog.-Smirnov. GOF) - Ln-transf.	0,00040	0,02239	0,01558	0,01239	0,20704	0,13358

4.3 Durchführung der Variogrammanalysen

Die Durchführung einer Variogrammanalyse lässt sich in die Bearbeitungsschritte experimentelle Variogrammschätzung und Modellanpassung unterteilen:

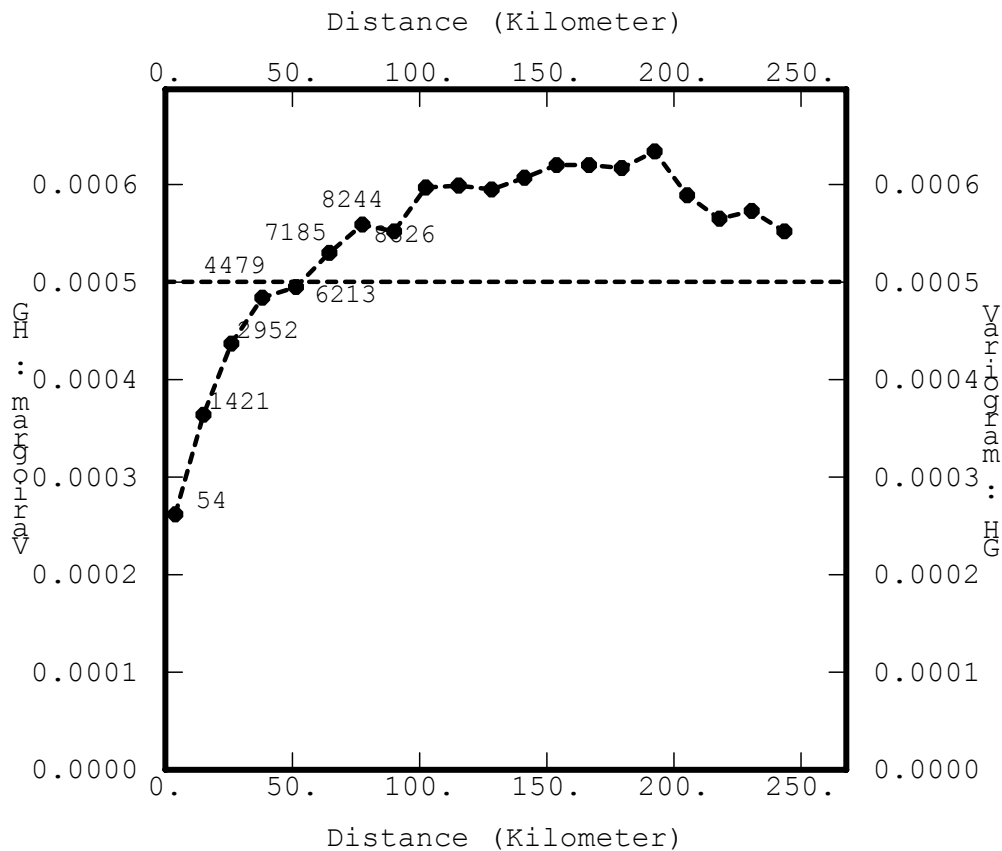
Experimentelle Variogrammschätzung. Das experimentelle Variogramm dient der Schätzung des der Messwertverteilung zugrundeliegenden räumlichen Prozesses. Dessen Ableitung ist daher große Aufmerksamkeit zu widmen. Vom Anwender müssen zwei Eingabeparameter festgesetzt werden: die Schrittweite und die maximale räumliche Ausdehnung des Variogramms.

Die Schrittweite gibt die Größe der Distanzintervalle vor, innerhalb derer die Semivarianzen berechnet werden. Nach OLEA (1999) ist die Qualität einer Schätzung besonders von der Auflösung und damit Genauigkeit des experimentellen Variogramms nahe dem Ursprung abhängig. Auf der anderen Seite sollten aber nicht weniger als 30 Probenpaare in den Distanzintervallen vorhanden sein. In den hier durchgeführten Variogrammberechnungen entspricht die Schrittweite der mittleren Entfernung der Messpunkte zu ihrem jeweils nächsten Nachbarn (WEBSTER & OLIVER 2001). Diese beträgt im Moosmessnetz 2000 12,82 km. Die Abbildung 8 zeigt anhand des Beispiels Hg die Anzahl der Probenpaare innerhalb der ersten acht Distanzintervalle. Im ersten Distanzintervall werden 54 Probenpaare gezählt. In den darauffolgenden Distanzklassen werden mehr als 1000 Probenpaare zur Berechnung eines Variogrammwertes herangezogen⁵.

⁵ Die Software ISATIS legt das erste Distanzintervall automatisch auf die Hälfte der vom Anwender gewählten Distanz fest (hier: 6,4 km) (BLEINNES et al 2001). Dies erklärt den großen zahlenmäßigen Unterschied zwischen der ersten und den darauffolgenden Klassen.

Die maximale Entfernung, ab wann für Probenpaare noch Variogrammwerte ermittelt werden, sollte nach JOURNEL & HUIJBREGTS (1978) die Hälfte der maximalen horizontalen Ausdehnung des Untersuchungsgebietes nicht überschreiten. Hier wurde die maximale Distanz der jeweiligen Variogramme auf 250-300 km beschränkt.

Abbildung 8: Experimenteles Variogramm von Hg im Moos-Monitoring 2000 inkl. Probenpaare der ersten acht Distanzintervalle



Modellanpassung. Wie die Erstellung des experimentellen Variogramms ist auch die Anpassung eines Modellvariogramms mit großen Unsicherheiten verbunden. Die Modellanpassung erfolgte hier interaktiv am Bildschirm, wobei versucht wurde, besonders die Bereiche nahe des Ursprungs möglichst genau anzupassen. Dort, wo aufgrund des unregelmäßigen Verlaufs des experimentellen

Variogramms Unsicherheiten in der Anpassung vorlagen, wurden bis zu drei verschiedene Modelle angepasst und durch Kreuzvalidierung (→ Kapitel 4.1, 4.4) miteinander verglichen.

Ergebnisse. Die für die Elementkonzentrationen von Al, As, Cd, Cr, Cu, Fe, Hg, Ni, Pb, Sb, Ti, V und Zn durchgeführten Variogrammanalysen finden sich im Anhang E.2. Dabei sind pro Element jeweils vier Variogrammdarstellungen aufgeführt:

1. experimentelles Variogramm der Originaldaten inkl. Anzahl der Probenpaare der ersten acht Distanzintervalle (→ Abb. 8),
2. Modellanpassung an das experimentelle Variogramm der Originaldaten,
3. Modellanpassung an das experimentelle Variogramm der lognormaltransformierten Daten sowie
4. Modellanpassung an das experimentelle Variogramm der lognormaltransformierten Daten ohne Ausreißer (→ Kapitel 4.5).

Variogramme der Originaldaten. Die Variogramme der Originaldaten weisen für alle Elemente bei der vorgegebenen Schrittweite auf deutliche räumliche Autokorrelationen hin. Nur Cd und Cu zeigen für die erste Distanzklasse höhere Semivarianzen als in der darauffolgenden. Bis auf Al, Cr, Fe und mit Einschränkung Ti deuten alle Variogrammschätzungen durch einen hohen Nugget-Effekt auf ausgeprägte Messwertunterschiede in den ersten Distanzklassen hin. Besonders hohe Nugget-Effekte zeigen sich bei As, Cd, Cu und Zn. Bis auf Ti (Exponentielles Modell) wurden überall Mischmodelle (Nugget-Exponentielles Modell bzw. Nugget-Exponentiell-Sphärisches Modell) an das experimentelle Variogramm angepasst. Die dadurch bedingte Reichweiten reichen von 33 km bei Fe bis zu 169 km bei Zn.

Variogramme der lognormaltransformierten Daten. Durch die Lognormaltransformation konnte in allen Fällen eine deutliche Glättung der experimentellen Variogramme erreicht werden. Die Anpassung von Modellvariogrammen

konnte daher mit wesentlich weniger Aufwand durchgeführt werden. Es zeigt sich, dass durch die Lognormaltransformation in allen Fällen das Verhältnis von Sill zu Nugget-Effekt verkleinert wurde. Es wurde kein Modell verwendet, das keinen Nugget-Effekt modelliert. Die verwendeten Kombinationen sind Nugget-Exponentielles Modell, Nugget-Exponentiell-Sphärisches Modell und Nugget-Gauß'sches Modell. Die ermittelten Reichweiten reichen von 89 km (V) bis zu 248 km (Hg).

4.4 Durchführung der Krigingprozeduren

Nach der Wahl eines geeigneten Modellvariogramms werden nun bei dem Kriging, hier dem *Ordinary Kriging*, für ein vorgegebenes Punktraster Schätzwerte ermittelt. Die maximale Autokorrelationsreichweite sowie die Wichtungsfaktoren der Messwerte, die zur Berechnung eines Rasterpunkts herangezogen werden, leiten sich dabei aus dem Modellvariogramm ab. Ausgehend von der in der Probenahmerichtlinie festgesetzten maximalen Verlegungsdistanz einer Probenentnahmestelle von 2 km, wurde ein Proberaster von 4 X 4 km² festgelegt (→ Kapitel 2). Die in ISATIS mit Kriging räumlich interpolierten lognormaltransformierten Daten wurden rücktransformiert und ins GIS überführt.

Schätzgütekriterien. Für den Empiriker ist es wichtig zu wissen, inwieweit die vollzogene Schätzung von den wahren Messwerten abweicht. Im Idealfall wären Nachbeprobungen durchzuführen, um die geschätzten Werte den neu gemessenen Werten gegenüberzustellen. Da eine derartige Nachbeprobung mit viel Aufwand verbunden ist, liefert die Kombination von GIS und Geostatistik Möglichkeiten, aus den bereits erhobenen Daten Schätzfehler bzw. Schätzgütekriterien abzuleiten. Die Verfahren hierfür wurden in Kapitel 4.1 erwähnt:

- die Berechnung der Krigingvarianz
- die Kreuzvalidierung sowie
- der Messwert-Rasterwertvergleich.

Krigingvarianz. Da die Krigingvarianz nur vom Variogramm und nicht von den Messwerten abhängt, ist diese für die lokale Schätzung nach JOURNEL (1986) kein Maß (HEINRICH 1994). Da hier die Genauigkeit der lokalen Schätzung im Vordergrund stehen soll und zudem die Bestimmung der Krigingvarianz ein rechenaufwendiges Verfahren darstellt, wird von deren Berechnung und kartografischen Aufarbeitung abgesehen.

Kreuzvalidierung. Die Kreuzvalidierung bietet eine gute Möglichkeit, die Genauigkeit einer lokalen Schätzung nachzuvollziehen. Die Messwerte werden anhand der durch das Modellvariogramm festgesetzten Parameter (Reichweite, Wichtungsfaktoren) neu berechnet. Die Abweichung von wahren und geschätzten Wert ist also ein direktes Maß dafür, wie gut das Modell den [wahren] räumlichen Prozess wiedergibt. Mit der Software ISATIS ist es möglich, die Ergebnisse der Kreuzvalidierung in ein Tabellenkalkulationsprogramm, wie MS Excel zu exportieren und dort weiter auszuwerten. In Ergänzung zu den in der Geostatistik gebräuchlichen Kreuzvalidierungsgrößen konnten so noch weitere Parameter abgeleitet werden. Insgesamt wurden fünf Schätzgütekennzahlen berechnet:

1. Mittlerer Fehler (= Mean Error – ME),
2. Mittlerer standardisierter Fehler (= Mean Standardized Error – MSE),
3. Mittlerer absoluter Fehler (= Mean Absolute Error – MAE),
4. Mittlerer prozentualer Fehler (= Mean Percental Error – MPE) und
5. Korrelationskoeffizient nach Pearson (= K).

Mittlerer Fehler (ME). Der mittlere Fehler entspricht dem Mittelwert der Differenzen zwischen wahren und geschätztem Wert. Diese Kennzahl sagt etwas aus über Über- bzw. Unterschätzungstendenzen des verwendeten Modells. Im Idealfall ist der mittlere Fehler 0.

Mittlerer standardisierter Fehler (MSE). Dies ist eine in der Geostatistik gebräuchlicher Kenngröße und entspricht der mittleren quadrierten Abweichung zwischen Messwert und Schätzwert, standardisiert an der Krigingvarianz. Im Idealfall sollte nach WEBSTER & OLIVER (2001) die quadrierte Abweichung der Krigingvarianz entsprechen und der mittlere standardisierte Fehler somit 1 sein.

Mittlerer absoluter Fehler (MAE). Zur Berechnung des mittleren absoluten Fehlers werden die Abweichungsbeträge zwischen Messwert und Schätzwert gemittelt. Dadurch wird das Egalisieren von negativen und positiven Werten verhindert und man erhält ein Maß dafür, wie stark die geschätzten von den gemessenen Werten abweichen.

Mittlerer prozentualer Fehler (MPE). Der mittlere absolute Fehler sagt direkt nichts darüber aus, wie hoch die relativen Abweichungen zwischen Mess- und Schätzwerten sind. Setzt man den jeweiligen Messwert gleich 100 %, so kann die Differenz zwischen Mess- und Schätzwert in Prozent angegeben werden. Der mittlere prozentuale Fehler ist der Mittelwert der so berechneten prozentualen Abweichungen. Schätzungen unterschiedlicher Messgrößen können so vergleichbar gemacht werden.

Korrelationskoeffizient nach Pearson (K). OLEA (1999) schlägt den Korrelationskoeffizienten nach Pearson zwischen Mess- und Schätzergebnissen als Gütekennzahl vor. Dieser ist im Idealfall 1.

Messwert-Rasterwertvergleich. Durch die Verschneidung von Punkt- und Rasterdaten im GIS können die Messwerte den Rasterwerten direkt gegenübergestellt werden. Hier werden alle Messwerte mit allen Schätzwerten simultan verglichen. Dabei muss berücksichtigt werden, dass ein Rasterwert eine räumliche Verallgemeinerung des Mittelpunkts einer Rasterzelle darstellt. Die Gegenüberstellung von Mess- und Rasterwert ist somit mit geometrischen Un-

genauigkeiten behaftet. Bei dem hier verwendeten Raster von 4 X 4 km² kann der Messpunkt somit maximal kleiner gleich 2 km von dem geschätzten Punkt entfernt liegen. Die so ermittelten Messwert-Rasterwertdifferenzen wurden wie bei der Kreuzvalidierung zu den Schätzgütekennzahlen mittlerer absoluter Fehler, mittlerer prozentualer Fehler und Korrelationskoeffizient nach Pearson zusammengefasst. Der mittlere standardisierte Fehler ist ein Fehlermaß, dessen Ableitung bei einem Messwert-Rasterwertvergleich nicht möglich ist. Der mittlere Fehler wurde hier nicht berechnet.

Ergebnisse. Die Ergebnisse der durchgeführten Krigingberechnungen sind im Anhang 7.1 für die Originaldaten und im Anhang 7.2 für die lognormaltransformierten Daten kartografisch aufgearbeitet worden. Jeweils 12 der 13 Karten enthalten neben den Ergebnissen der Schätzgüteberechnungen auch Angaben über die von SIEWERS et al. (2000) ermittelten Standortvariabilitäten. Für AI lagen diesbezügliche Angaben nicht vor. Für die restlichen 12 betrachteten Elemente ist es somit möglich, die Schätzgüte an der empirisch bedingten Ungenauigkeit zu messen. Eine tabellarische Auflistung der Ergebnisse der Kreuzvalidierung sowie des Messwert-Rasterwertabgleichs ist Tabelle 4 und Tabelle 5 zu entnehmen.

Wie einleitend erwähnt, werden die im Anhang A.7 enthaltenden Karten hier nicht im einzelnen beschrieben dies ist in aller Ausführlichkeit bereits im Berichtsteil I geschehen (SCHRÖDER et al 2002 a).

Optische Gesichtspunkte. Ein optischer Vergleich der im Berichtsteil I dargestellten Inverse Distance Weighted (IDW)-Karten und der im Anhang A.7 enthaltenden Krigingkarten zeigt für die Kriging-Schätzungen im Allgemeinen größere zusammenhängende Flächen. Auch werden örtliche Anomalien in den Kriging-Karten nicht so stark betont wie in den IDW-Karten. Dies ist allerdings mehr auf den im IDW-Verfahren verwendeten geringen Interpolationsradius zurückzuführen als auf das Verfahren selbst. Ein statistischer Vergleich der IDW- und der

Kriging-Ergebnisse bleibt einer weiteren Untersuchung vorbehalten. Die Kriging-Ergebnisse der Original- und der lognormaltransformierten Daten zeigen geringfügig höhere Schätzwerte für die Originaldaten. Die räumlichen Muster zeigen allerdings bei beiden Vorgehensweisen starke Ähnlichkeiten.

Kriging-Ergebnisse der Originaldaten. Gemessen an den mittleren prozentualen Fehlern der *Kreuzvalidierung* weisen die Kriging-Ergebnisse der Originaldaten eine unbefriedigende Schätzqualität auf (→ Tabelle 4). Für Al, As, Fe, Ti und Sb liegen die Unsicherheiten höher als 40 %. Die Karten im Anhang 7.1 zeigen weiterhin, dass die Werte mit Ausnahme von Cr zum größten Teil deutlich über der Standortvariabilität liegen. Die berechneten Korrelationskoeffizienten liegen alle unter 0.6, Fe, Ti, und V gar unter 0.5. Die jeweiligen mittleren Fehler und mittleren standardisierten Fehler weisen hingegen unproblematische Werte auf. So liegen die mittleren Fehler alle nahe bei 0, was bedeutet, dass im Mittel sich Über- bzw. Unterschätzung des Modells ausgleichen. Die mittleren standardisierten Fehler liegen nahe bei 1. Dies bedeutet, dass die durch das Variogramm wiedergegebene Krigingvarianz im Mittel den Varianzen der Schätzwert-Messwert Differenzen entsprechen.

Die Schätzgüteparameter der *Messwert-Rasterwertvergleiche* weisen wesentlich bessere Werte auf (→ Tabelle 5). So liegen die mittleren prozentualen Fehler mit Ausnahme von As unter 30 %. Neben Cr zeigen hier auch As, Hg, Ni und Ti höhere Standortvariabilitäten als prozentuale Schätzgütefehler. Alle anderen Werte liegen zum größten Teil nur knapp über den empirischen Abweichungen. Die durch diese Vorgehensweise ermittelten Korrelationen zwischen Mess- und Rasterwerten zeigen sehr hohe signifikante Werte auf. Mit Ausnahme von Cd (= 0.68) liegen alle Koeffizienten über 0.8.

Kriging-Ergebnisse der lognormaltransformierten Daten. Im Vergleich zu den *Kreuzvalidierungsergebnissen* der Kriging-Ergebnisse der Originaldaten weisen die Kriging-Ergebnisse der lognormaltransformierten Daten zum Teil

bessere Werte auf (→ Tabelle 4). Dies äußert sich vor allem bei dem Vergleich der mittleren absoluten und prozentualen Schätzwerte. Für As und Ti können Verbesserungen von über 10 %, bei Sb von knapp 20 % aufgezeigt werden. Lediglich Cd, Cr, Cu, Hg, Ni und Zn zeigen schwache Verbesserungen von unter 3 %. As, Cr, Fe, Hg und Ni weisen im Vergleich zu den Standortvariabilitäten niedrigere prozentuale Fehler auf. Die Korrelationen sind gegenüber den Originaldaten zum Teil stärker ausgeprägt, doch liegen diese bis auf Ni (= 0,6) noch immer unter 0,6. Die mittleren standardisierten Fehler liegen im Vergleich zu den Originaldaten bis auf As, Pb, Ti und Sb näher an 1. Wie der optischen Vergleich der Kriging-Ergebnisse bereits angedeutet hatte, zeigen sich anhand des mittleren Fehler deutliche Unterschätzungstendenzen. Dies verwundert nicht, da durch die Lognormaltransformation der Messwerte höhere Werte in ihrem Einfluss auf das Krigingergebnis gemindert werden.

Die Schätzgüteparameter der Ergebnisse des *Messwert-Rasterwertvergleichs* weisen keine eindeutigen Tendenzen zugunsten der lognormaltransformierten Krigingergebnisse auf (→ Tabelle 5). So sind nur bei Al, As, Cd und Zn niedrigere mittlere prozentuale Fehler festzuhalten. Bis auf Cd zeigen sich gar schwächere Korrelationen als bei den Originaldaten, doch liegen diese noch immer in allen Fällen über 0,75.

Tabelle 4: Schätzgütekriterien - Kreuzvalidierung

	Originaldaten						Ln-transformiert					
	n	ME [µg/g]	MSE	MAE [µg/g]	MPE [%]	K*	n	ME [µg/g]	MSE	MAE [µg/g]	MPE [%]	K*
Al	1028	1,54	1,37	151,1	41,5	0,55	1028	40,9	0,94	134	33,3	0,58
As	1026	-0,001	0,97	0,084	47,0	0,51	1026	0,02	1,04	0,08	35,1	0,56
Cd	1027	-0,0001	1,18	0,064	27,4	0,5	1027	0,02	1,04	0,06	24,5	0,54
Cr	1025	0,002	1,08	0,264	25,9	0,56	1025	0,06	0,98	0,25	23,3	0,58
Fe	1026	-0,708	1,21	154,2	40,8	0,44	1026	37,98	0,95	133	31,4	0,52
Cu	1027	-0,004	0,88	1,54	21,6	0,55	1027	0,26	0,98	1,52	20,6	0,54
Hg	1028	-0,0004	0,88	0,012	26,9	0,55	1028	0,003	0,95	0,01	24,8	0,55
Ni	1028	0,0002	1,07	0,382	31,2	0,59	1028	0,09	1,01	0,37	27,4	0,6
Pb	1026	-0,0115	1,00	1,882	37,8	0,53	1026	0,48	0,98	1,77	31,2	0,54
Ti	1023	-0,005	1,04	4,13	47,3	0,49	1023	1,2	0,94	3,73	36,5	0,54
Sb	1028	-0,00005	0,98	0,085	47,0	0,51	1028	0,01	1,05	0,04	28,4	0,55
V	1027	0,00037	1,101	0,409	37,7	0,48	1027	0,11	0,94	0,39	32,5	0,45
Zn	1026	-0,0061	0,968	10,32	23,9	0,53	1026	1,96	1,04	10,1	22,3	0,53

* Alle hier aufgeführten Korrelationskoeffizienten sind auf dem 1 % Niveau signifikant.

Tabelle 5: Schätzgütekriterien – Messwert-Rasterwertabgleich

	n	Originaldaten			Ln-transformiert		
		MAE [µg/g]	MPE [%]	K*	MAE [µg/g]	MPE [%]	K*
Al	1028	96,09	22,45	0,84	96,30	22,31	0,84
As	1026	0,058	31,99	0,85	0,058	25,56	0,77
Cd	1027	0,056	23,47	0,68	0,044	16,71	0,82
Cr	1025	0,10	10,14	0,96	0,14	12,30	0,92
Fe	1026	60,61	15,44	0,94	89,29	19,62	0,85
Cu	1027	1,15	15,99	0,82	1,37	18,24	0,66
Hg	1028	0,009	19,36	0,81	0,010	19,85	0,75
Ni	1028	0,24	19,64	0,90	0,26	19,05	0,84
Pb	1026	0,94	18,64	0,95	1,42	24,14	0,75
Ti	1023	1,60	17,42	0,95	2,75	24,78	0,81
Sb	1028	0,03	20,55	0,85	2,75	24,78	0,81
V	1027	0,23	21,24	0,91	0,29	22,90	0,76
Zn	1026	7,71	17,55	0,80	7,62	16,19	0,78

* Alle hier aufgeführten Korrelationskoeffizienten sind auf dem 1 % Niveau signifikant.

Fazit. Der Schätzgütevergleich der Krigingergebnisse der Originaldaten und lognormaltransformierten Daten zeigt bei den Kreuzvalidierungsergebnissen z.T. deutlich bessere Werte für die transformierten Messdaten. Die einzige qualitative Einschränkung beruht auf einer tendenziellen Unterschätzung besonders hoher Werte. Da bei dem Messwert-Rasterwertvergleich keine eindeutigen Tendenzen festzustellen sind, stützt sich die in Kapitel 4.5 beschriebene geostatistisch abgeleitete Ausreißerererkennung auf die Kriging-Flächen-schätzung der lognormaltransformierten Messdaten.

4.5 Ausreißererkenkung und –bewertung

Zielsetzung. In den Kapiteln 4.3 und 4.4 werden die Ergebnisse der geostatistischen Analyse von 13 ausgewählten Elementen im Moos-Monitoring 2000 detailliert beschrieben. Variogrammanalyse und Kriging wurden jeweils mit allen Messwerten durchgeführt. Nicht berücksichtigt wurden Daten, die auf Wunsch der Länder als unplausibel eingestuft wurden (SCHRÖDER 2002 a). Die z.T. schlechte Schätzqualität der Krigingergebnisse könnte möglicherweise mit der Beibehaltung von weiteren unplausiblen Messwerten im Datensatz zu tun haben. Im Folgenden sollen geostatistische Verfahren dazu verwendet werden, derartige Werte im Datensatz zu identifizieren. Die so ermittelten Standorte werden anschließend mit den in der Moosdatenbank abgelegten Standortinformationen abgeglichen und im Moos-GIS veranschaulicht. Da Standorte identifiziert werden sollen, deren Elementgehalte eine schlechte Schätzqualität verursachen, werden diese im Folgenden als *räumliche Ausreißer* bezeichnet.

Vorgehen. Im Gegensatz zu herkömmlichen statistischen Vorgehensweisen zur Identifizierung von Ausreißern wird hier ein alternatives Verfahren angewendet. So wurden nicht die Messwertverteilungen, sondern die durch die Kreuzvalidierung ermittelten Differenzen zwischen wahren und geschätzten Werten der Ausreißererkenkung zugrundegelegt. Als Grenzkriterium zur Ausreißeridentifizierung wurde der 1.5 fache Interquartilabstand vom 25. bzw. 75. Quartil der Fehlerverteilung festgesetzt. Dabei muss erwähnt werden, dass nicht nur Standorte extrahiert werden, die besonders hohe Werte aufweisen. Auch besonders niedrige Werte werden als Ausreißer ausgemacht und dem Datensatz entnommen.

Für alle 13 Elemente wurden auf diese Art räumliche Ausreißer extrahiert, ins GIS überführt und dort mit den Informationen der Moos-Datenbank verknüpft. Um weiterhin die Auswirkung der Extraktion dieser Ausreißer auf das Schätzergebnis einstufen zu können, wurden die ausreißereliminierten Datensätze in

ISATIS erneut mit Kriging räumlich verallgemeinert und kreuzvalidiert. Da in Kapitel 4.5 die lognormaltransformierten Daten die besseren Schätzgütwerte aufwiesen, wurde auch hier mit transformierten Messwerten gearbeitet.

Tabelle 6: Schätzgütekriterien der Kreuzvalidierung der lognormaltransformierten Daten – ohne räumliche Ausreißer

	n	ME [µg/g]	MSE	MAE [µg/g]	MPE [%]	K*
Al	958	19,97	0,98	92,1	29,0	0,62
As	954	0,011	1,03	0,05	30,4	0,68
Cd	971	0,008	1,05	0,05	21,7	0,64
Cr	975	0,033	1,01	0,2	20,7	0,65
Fe	969	20,15	0,99	97,1	27,9	0,58
Cu	994	0,192	1,02	1,34	19,2	0,56
Hg	968	0,002	1,02	0,009	21,9	0,6
Ni	964	0,053	1,05	0,28	24,0	0,67
Pb	952	0,250	0,99	1,26	26,9	0,61
Ti	953	0,622	0,97	2,57	31,6	0,64
Sb	979	0,007	1,00	0,04	26,5	0,56
V	976	0,059	1,00	0,29	27,6	0,58
Zn	991	1,311	1,08	8,57	20,7	0,58

Verbesserung der Schätzqualität? Die Tabelle 6 zeigt die Ergebnisse der Kreuzvalidierung aller 13 Berechnungen. Maximal wurden die Datensätze bis auf n = 952 Messwerte reduziert (Pb). Am wenigsten Standorte wurden bei Cu aus dem Datensatz entnommen (n = 36). Bei allen 13 Elementen konnte durch die Ausdünnung eine [sichtbare] Veränderung der Schätzqualität erzielt werden. Die Korrelationen zwischen gemessenen und geschätzten Werten liegen in sie-

ben Fällen über 0.6, die mittleren prozentualen und absoluten Fehler sind geringer als bei den Kreuzvalidierungsergebnissen der vollständigen Datensätze. Wie bei den lognormaltransformierten Krigingergebnissen der vollständigen Datensätze ist allerdings auch hier eine tendenzielle Unterschätzung festzuhalten. Die der Kreuzvalidierung zugrundeliegenden Variogramme sind im Anhang E.2 einzusehen. Durch die Eliminierung besonders problematischer Werte zeigen die experimentelle Variogramme hier noch kontinuierlichere Verläufe als die der lognormaltransformierten vollständigen Daten.

Überprüfung im Moos-GIS. Es wurden insgesamt 286 Standorte ausgemacht, deren Messdaten nach der beschriebenen Vorgehensweise als räumliche Ausreißer bezeichnet werden können. Eine kartografische Übersicht dieser Standorte findet sich im Anhang A.8.1. Von den 286 Standorten weisen 23 Standorte bei allen 13 Elementen jeweils höhere Schätz- als Messwerte auf. Die Karte in Anhang A.8.1 zeigt, dass diese Standorte in allen Fällen in unmittelbarer Nähe von stark unterschätzten Messpunkten liegen. Dies lässt darauf schließen, dass die hohen Abweichungen der Messwerte dieser 23 Standorte auf den Einfluss besonders hoher Werte zurückzuführen sind. Die Überprüfung mit Hilfe der standortbeschreibenden Datensätze der Moos-Datenbank konzentrierte sich daher nur auf die übrigen 263 Messstandorte, die in Bezug auf mindestens eins der 13 Elemente stark unterschätzt wurde. Die dabei durchgeführten Datenbankabfragen beziehen sich auf

- Abstände zu Autobahnen (→ Anhang A.8.2),
- Abstände zu Industrieanlagen (→ Anhang A.8.3),
- Abstände zu Landstraßen (→ Anhang A.8.4),
- Abstände zu Wohnsiedlungen (→ Anhang A.8.5) sowie
- entnommene Moosarten (→ Anhang A.8.6).

Die Abfrageergebnisse sind in den Anhängen A.8.2 bis A.8.6 kartografisch aufgearbeitet worden. Die dort vorgenommene Klassifizierung der Entfernung zu

potenziellen Emissionsquellen richtet sich nach den festgelegten Mindestabständen der modifizierten Probenentnahmerichtlinie (→ Kapitel 3).

Abstände zu Autobahnen. Von den 263 Standorten weisen 200 keine Angaben über den Einfluss nahegelegener Autobahnen auf. 45 Standorte sind mindestens 1000 m, 18 Standorte weniger als 1000 m von einer Autobahn entfernt. 2 Standorte unterschreiten den in der Probenentnahmerichtlinie festgesetzten Mindestabstand von 300 m.

Abstände zu Industrieanlagen. Von den 263 Standorten weisen 206 keine Angaben über eine mögliche Nähe zu Industriestandorten auf. 38 der restlichen 57 Standorte liegen mehr als 1 km von der jeweiligen Industrieanlage entfernt. 4 Standorte unterschreiten den in der Probenentnahmerichtlinie festgesetzten Mindestabstand von 300 m.

Abstände zu Landstraßen. 72 der 263 Standorte unterschreiten den in der Probenentnahmerichtlinie festgesetzten Mindestabstand von 300 m. 188 Standorte liegen weniger als 1000 m von der nächsten Landstraße entfernt. Zu 20 Standorten sind keine diesbezügliche Angaben gemacht worden.

Abstände zu Wohnsiedlungen. 115 Standorte liegen weniger als 1 km von der nächsten Wohnsiedlung entfernt, 23 Standorte weniger als 300 m (festgesetzter Mindestabstand). Zu 39 Standorten wurden keine Angaben gemacht.

Entnommene Moosarten. Von den 263 Standorten wurden an 40 Standorten Fehlarten (= 15,2 %) entnommen und an 106 Standorten *Hypnum cupressiforme* (= 40,3 %). Im Vergleich dazu wurde bundesweit *Hypnum cupressiforme* zu 23,9 % entnommen, Fehlarten zu 6,7 %. Somit zeigt sich ein deutlicher prozentueller Überschuss bei den 263 Standorten. Der Rest der entnommenen Moosarten verteilt sich vorwiegend auf *Pleurozium schreberi* (= 24 %) und *Scleropodium purum* (20 %).

Fazit. Kapitel 4 beschreibt Anwendung geostatistischer Methoden zum Zwecke optimierter Flächenschätzungen für die Elementkonzentrationen von Al, As, Cd, Cr, Cu, Fe, Hg, Ni, Pb, Sb, Ti, V und Zn. Die Ergebnisse werden mit Hilfe ausgewählter Schätzgütekennzahlen beschrieben. Dies entspricht dem ersten Schritt der vom Forschungsnehmer ursprünglich vorgesehenen Messnetzoptimierung, bei der geostatistische Verfahren mit multivariaten Cluster- und Nachbarschaftsanalysen kombiniert werden. Eine derartige statistisch begründete Messnetzoptimierung sollte zu einem späteren Zeitpunkt unbedingt nachgeholt werden. Auch sollten andere geostatistische Ansätze erprobt werden, um eine möglichst optimale Schätzqualität zu erhalten.

Um dennoch in Ansätzen Empfehlungen für ein zukünftiges Moos-Monitoring auszusprechen, wurden in Kapitel 4.5 geostatistische Methoden zur Identifikation von Standorten verwendet, die eine Herabsetzung der Schätzqualität verursachen. Es konnten 263 Standorte ausgemacht werden, denen im Moos-Monitoring 2005 erhöhte Aufmerksamkeit bei der Beprobung geschenkt werden sollte. Diese Standorte wurden mit Hilfe der standortbeschreibenden Datensätze der UBA-Moos-Datenbank im Moos-GIS überprüft und ausgewertet. Dabei konnten bezüglich der Abstände der Standorte zu potenziellen Emissionsquellen Unterschreitungen der in der Probenentnahmerichtlinie festgesetzten Mindestabstände ausgemacht werden.

5 Entwicklung eines Moos-GIS

Zielsetzung. Ziel des Moos-Monitoringprojektes 2000 war es, zur kartografischen Aufarbeitung und statistische Verknüpfung der in allen drei Moos-Monitoring-Projekten erhobenen Daten ein *Moos-GIS* aufzubauen. Ein GIS ist ein aus Hardware, Software und Daten bestehendes computergestütztes Werkzeug, mit dem geografisch verortete Objekte digital erfasst, gespeichert, verwaltet und analysiert werden können. Die Besonderheit des im Folgenden vorge-

stellten Moos-GIS gegenüber anderen Geografischen Informationssystemen besteht einerseits in der verwendeten GIS-Software, vor allem aber in den Daten, die mit dieser Software verarbeitet werden.

ArcView GIS. Für den Aufbau des Moos-GIS wurde mit dem GIS-Softwareprodukt ArcView GIS der Firma ESRI eine Software verwendet, die sich durch eine weite Verbreitung in Umweltbehörden auszeichnet. Der Vorteil dieser Software ist die im Vergleich zu anderen GIS-Programmen leichte Bedienbarkeit und Anpassungsfähigkeit. Die Programmarchitektur von ArcView GIS gliedert sich im wesentlichen in zwei Komponenten: Programmoberfläche und Geobjekte.

Programmoberfläche. Die Programmoberfläche von ArcView wird durch sogenannte ArcView Projektdateien bzw. Projekte gebildet. In Form eines modularen Aufbau werden dem Anwender unterschiedliche Möglichkeiten bei der Analyse, Abfrage und Visualisierung räumlicher Daten zur Verfügung gestellt. Die für den Benutzer des Moos-GIS wichtigen Programmelemente sind die Module *Views*, *Tables* und *Layouts*.

Views. Die *Views* bilden innerhalb von ArcView GIS das zentrale Programmelement zur Visualisierung und Analyse räumlicher Daten. Es können sowohl geometrische Grundstrukturen (ohne Attributinformation) wie auch sogenannte Themen, dies sind die Geobjekte in ArcView, dargestellt werden. Hierbei kann es sich sowohl um Vektor-(ArcView-Shape-Dateien, ARC/INFO-Coverages) als auch Rasterdaten (ARC/INFO-GRIDS sowie z.B. TIFF-, Bitmap- und JPEG-Daten) handeln. Die Dateien, aus denen die Geobjekte generiert werden, sind mit der Programmoberfläche lediglich dynamisch verknüpft. Alle Themen eines Views sind in einem interaktiven Inhaltsverzeichnis aufgeführt, in dem die Themen aktiviert bzw. deaktiviert werden können.

Tables. Mit *Tables* besitzt ArcView GIS ein eigenes Datenbank-Modul. Hier werden die den in den Views dargestellten Geoobjekten zugewiesenen Sachdaten in Form von Tabellen verwaltet. Auch können ASCII- und dBase-Dateien in das Tables-Modul eingelesen und dann in einem View als sogenanntes *Ereignisthema* dargestellt werden.

Layouts. Mit dem *Layout*-Modul können [analoge] Karten erstellt werden. Neben den in den Views zusammengestellten Geoobjekten können Maßstabsleisten, Legenden oder Diagramme hinzugefügt werden.

Geoobjekte. Die Art der Geoobjekte und die mit diesen Objekten verknüpften Informationsschichten bilden im Moos-GIS die eigentliche Besonderheit gegenüber anderen ArcView GIS-Anwendungen. Die Geoobjekte im Moos-GIS werden vor allem durch die in den Moos-Monitoring-Projekten 1990, 1995 und 2000 generierten Messnetzgeometrien gebildet. Diese sind mit den standortbeschreibenden Informationen sowie den Ergebnissen der chemischen Moos Analytik verknüpft. Zusätzlich wurden sogenannten *Metadaten* an die Messnetzgeometrien angebunden. Bei diesen Metadaten handelt es sich um Informationen über Organisation und Durchführung des Moos-Monitoring Programms, die in dem FuE-Vorhaben 299 82 212 / 02 „Konkretisierung des Umweltbeobachtungsprogrammes im Rahmen eines Stufenkonzeptes der Umweltbeobachtung des Bundes und der Länder“ aus den Abschlussberichten der Moos-Monitoring-Vorhaben 1990 und 1995 extrahiert wurden (SCHRÖDER et. al. 2001). Neben den punktuellen Messnetzgeometrien sind im Moos-GIS auch Rasterdaten, wie die im Berichtsteil I dargestellten Ergebnisse der IDW-Flächenberechnungen integriert.

Ergebnisse. Das mit der GIS-Software ArcView GIS erstellte Moos-GIS ist eine Ansammlung von je nach Anwendungsschwerpunkt generierten ArcView-Projektdateien, die auf in speziellen Ordnern abgelegte Quelldaten zurückgreifen. Flächen- und Punktdaten sind jeweils mit kartografischen Informationen

über Flüsse und Ländergrenzen hinterlegt. Entsprechend den in den Berichtsteilen I bis III beschriebenen Inhalten wurden dreizehn Projektdateien mit folgenden Inhalten angelegt:

- Messnetzgeometrien inkl. Attribut⁶- und Metadaten der Moos-Monitoring-Vorhaben von 1990, 1995 und 2000 (*Messnetzübersichten.apr*),
- Klassifizierte Punktkarten der Messwerte der Moos-Monitoring-Vorhaben von 1990, 1995 und 2000 (*AnhangA.1.apr*, *AnhangA.2.apr*, *AnhangA.3.apr*),
- Standortbezogene Entwicklung der Metallbelastung in Moosen zwischen 1990 und 2000 (*AnhangA.4.apr*) bzw. 1995 und 2000 (*AnhangA.5.apr*),
- Ergebnisse der geostatistischen Analysen für das Moos-Monitoring 2000 (*AnhangA.7.1*, *AnhangA.7.2*, *Anhang A.8*) sowie
- Ergebnisse der IDW-Berechnungen für das Moos-Monitoring 1990, 1995 und 2000 (*IDW_1990.apr*, *IDW_1995.apr*, *IDW_2000.apr*).

Aus dem FuE-Vorhabens 299 82 212 / 02 (SCHROEDER et. al. 2001) wurden weiterhin die Ergebnisse von Kriging- und Cluster-Berechnungen für das Moos-Monitoring 1990 in einem ArcView-Projekt abgelegt (*Ergebnisse_UB.apr*).

Die vorgestellten Projektdateien sind einschließlich der Quelldateien dem vorliegenden Abschlussbericht in Form einer CD beigelegt.

6 Zusammenfassung und Ausblick

In dem FuE-Vorhaben 200 64 218 „Moos-Monitoring 2000“ wurde der in ausgewählten Moosarten akkumulierte Eintrag von 20 Metall- und Schwermetallelementen deutschlandweit methodenharmonisiert, qualitätskontrolliert erfasst. Das Vorhaben knüpft inhaltlich und methodisch an zwei bereits 1990 und 1995

⁶ Bei den Attributinformationen handelt es sich sowohl um die standortbeschreibenden Informationen aus der UBA-Moos-Datenbank als auch um die Ergebnisse der chemischen Moos-Analytik.

in Deutschland durchgeführte Moos-Monitoringprogramme an und ist eingebettet in das europaweite EMEP/ECE Projekt "Atmospheric Heavy Metal Deposition in Europe - estimations based on moss analysis". Das Moos-Monitoring 2000 wurde wie 1990 und 1995 in Zusammenarbeit von Bund und Ländern durchgeführt. Der Bund-/Länderarbeitskreis „Bioindikation/Wirkungsermittlung“ hat das Vorhaben fachlich begleitet.

Zusammenfassung. Die Ergebnisse des Vorhabens werden in drei Berichtsteilen vorgelegt. In dem Berichtsteil I werden die Ergebnisse des Moos-Monitorings 2000 nach dem Vorbild der Abschlussberichte der Moos-Monitoring Vorhaben 1990 und 1995 statistisch ausgewertet sowie textlich und kartografisch dargestellt (SCHRÖDER et al. 2002 a). In Berichtsteil II werden auf Wunsch der Länder die Ergebnisse des Moos-Monitoring 2000 moosartenspezifisch ausgewertet sowie ein Schwermetallindex entwickelt (SCHRÖDER et al. 2002 b). Der hier vorliegende Berichtsteil III widmet sich ausschließlich Optimierungsfragen des Moos-Monitoring. Es wurden vier Optimierungsziele ausgearbeitet:

- Optimierung der Moosprobenentnahme (→ Kapitel 2),
- Optimierung der Datenbankstruktur (→ Kapitel 3),
- geostatistische Analyse der Elementkonzentrationen von Al, As, Cd, Cr, Cu, Fe, Hg, Ni, Pb, Sb, Ti, V und Zn im Moos-Monitoring 2000 (→ Kapitel 4) sowie
- Integration von messstandortbeschreibenden Angaben, Messdaten sowie daraus statistisch abgeleiteter Flächendaten in einem Moos-GIS (Geografisches Informationssystem (→ Kapitel 5).

Ausgehend von den Erfahrungen der Moos-Monitoring-Projekte 1990, 1995 und 2000 wurden von den Probenentnehmern der Länder kritische Anmerkungen zur Durchführung des Moos-Monitorings allgemein und speziell zur Probenentnahmerichtlinie gemacht (→ Kapitel 2, Anhang C.2, C.3). Deshalb wird in dem vorliegenden Berichtsteil III ein Entwurf einer präzisierten Probenentnahmericht-

linie vorgestellt. Diese modifizierte Richtlinie umfasst Vorschriften für die Durchführung der Probenentnahme am Standort und für die Dokumentation der Probenentnahmebedingungen und Standortkriterien, welche für die Messdatenqualität und -auswertung wichtig sind.

Durch die Überarbeitung der Datenbankstruktur im Moos-Monitoring konnte weiterhin eine Vereinheitlichung und Vereinfachung der Art der Datenhaltung erzielt werden. Eine Zusammenführung und automatisierte Auswertung der Ergebnisse der chemischen Moos-Analytik und der Standortbeschreibungen aller drei Moos-Monitoringphasen ist daher in Zukunft möglich. Die überarbeitete Datenbankstruktur bildet weiterhin die Basis für die Integration der Moos-Monitoring-Daten in andere Datenbanksysteme, wie z.B. das in dem vorliegenden Bericht vorgestellte Internet- und GIS-gestützte Umweltmonitoring-System (IGUS).

Im Kapitel 4 werden geostatistische Methoden angewendet, um optimierte Flächenschätzungen für die Elementkonzentrationen von Al, As, Cd, Cr, Cu, Fe, Hg, Ni, Pb, Sb, Ti, V und Zn abzuleiten. Die Ergebnisse werden mit Hilfe ausgewählter Schätzgüteparameter beschrieben. Dies entspricht dem ersten Schritt der vom Forschungsnehmer ursprünglich vorgesehenen Messnetzoptimierung, bei der geostatistische Verfahren mit multivariaten Cluster- und Nachbarschaftsanalysen kombiniert werden. In dem ersten, dem geostatistischen Schritt der Messnetzoptimierung werden 263 Standorte identifiziert, denen im Moos-Monitoring 2005 erhöhte Aufmerksamkeit bei der Beprobung zukommen sollte. Die dort gemessenen Metallgehalte sind auffällig: Sie rangieren außerhalb des 1.5-Fachen des Interquartilabstands vom 25. bzw. 75. Quartil der Schätzfehlerverteilungen. Diese so bestimmten auffälligen Standorte wurden mit Hilfe der standortbeschreibenden Datensätze der UBA-Moos-Datenbank im Moos-GIS im Hinblick auf Standortfaktoren ausgewertet welche die Messwerte beeinflussen können:

- Abstände zu Autobahnen (→ Anhang A.8.2),

- Abstände zu Industrieanlagen (→ Anhang A.8.3),
- Abstände zu Landstraßen (→ Anhang A.8.4),
- Abstände zu Wohnsiedlungen (→ Anhang A.8.5) sowie
- entnommene Moosarten (→ Anhang A.8.6).

Die kartografische Aufarbeitung sämtlicher in den Berichten I bis III vorgestellten Ergebnissen im Moos-GIS bietet eine Grundlage für weitere räumliche Verknüpfungen mit anderen Umweltbeobachtungsprogrammen. Das Moos-GIS beinhaltet insgesamt dreizehn ArcView Projektdateien und liegt dem Abschlussbericht als CD bei.

Ausblick. Aufgrund der im Moos-Monitoring 2000 nachträglich geforderten moosartenspezifischen Auswertungen konnten nicht alle geplanten Arbeiten durchgeführt werden. Diese sollten das bisherige Moos-Monitoring methodisch weiterentwickeln:

- weiterführende Optimierungsvorschläge für die Messnetzgestaltung eines Moos-Monitorings 2005 (→ Kapitel 4),
- statistische Beschreibung der Entwicklung der Metallbelastung in Deutschland zwischen 1990 und 2000,
- ausführlicher statistischer Abgleich der Messergebnisse des Moos-Monitorings 2000 mit den messstandortbeschreibenden Angaben der UBA-Moosdatenbank,
- Ermittlung von Belastungsfaktoren und Immissionsprofilen mit multivariatstatistischen Verfahren und kriteriengeleiteten Ansätzen,
- statistischer Abgleich der Elementgehalte mit Ergebnissen anderer Umweltbeobachtungsprogramme.

Diese Weiterentwicklungen des Moos-Monitoring sollten rechtzeitig vor der für 2005 geplanten Messkampagne begonnen und abgeschlossen werden. Nur so kann sichergestellt werden, dass die Effizienz des in seiner räumlichen Dichte einmaligen und in seinem Methodenharmonisierungsgrad vorbildlichen Mess-

netz weiter gesteigert und entsprechend den Anforderungen des §12 BNatSchNeuregG mit Daten anderer Umweltbeobachtungsprogramme gesteigert werden kann.