

Paul L. Ohlert, Martin Bach & Lutz Breuer

Verfahren zur Regionalisierung der Nitratkonzentration im Grundwasser

Methods for regionalisation of nitrate concentration in groundwater

In der "Allgemeinen Verwaltungsvorschrift zur Ausweisung der mit Nitrat belasteten und eutrophierten Gebiete" (AVV GeA) sind für die immissionsbasierte Abgrenzung der mit Nitrat belasteten Gebiete geostatistische und deterministische Regionalisierungsverfahren vorgesehen. Die Leistungsfähigkeit bzw. die Unsicherheit der Verfahren Inverse Distanzgewichtung (IDW), Ordinary Kriging (OK) und Voronoi-Polygone (VP) im Hinblick auf diese Aufgabe sind bislang nicht untersucht worden. Für diese Verfahren werden daher vier Aspekte der Interpolation der Nitratkonzentration im Grundwasser analysiert: (1) Einfluss der Verfahrensparameter auf die Regionalisierung, (2) räumliche Autokorrelation der Nitratkonzentrationen zwischen den Messstellen, (3) Prognosegüte der Verfahren sowie (4) Unterschiede der geschätzten Verteilung der Nitratkonzentrationen im Grundwasser bei flächendeckender Regionalisierung. Bei der ersten Untersuchung wurde eine extern modellierte Karte der Nitratkonzentration im Grundwasser in Bayern als Referenzverteilung verwendet, die anderen Auswertungen basieren auf einem Datensatz von 5.790 Grundwassermessstellen in Bayern. Die Analyse der räumlichen Korrelation zeigt, dass ab einer Reichweite von etwa 0,7 km kein Zusammenhang der Nitratwerte zwischen Messstellen besteht. Bei Kreuzvalidierung der 5.790 Messstellen mit den drei Verfahren tritt ein mittlerer absoluter Fehler zwischen gemessenen und interpolierten Konzentrationen von rund 7 bis 8 mg NO₃/l auf, die relative Unsicherheit der Verfahren beträgt rund 43 % bis 49 %. Oberhalb des Grenzwerts der EG-Nitratrictlinie und der europäischen Wasserrahmenrichtlinie (EG-WRRL) von 50 mg NO₃/l wird die Konzentration im Mittel um 28 bis 29 mg NO₃/l zu niedrig interpoliert; die Anzahl der Messstellen > 50 mg NO₃/l wird um rund 44 % (IDW), 56 % (OK) bzw. 20 % (VP) unterschätzt. Bei einer landesweiten Interpolation in Bayern mit den drei Verfahren werden zwischen rund 3 % und 10 % Flächenanteil mit einer Konzentration von über 50 mg NO₃/l ausgewiesen. Aus Sicht der Autoren sind die untersuchten Verfahren für eine problemadäquate Abgrenzung der mit Nitrat belasteten Gebiete nicht geeignet.

Schlagwörter: Grundwasser, Inverse Distanzgewichtung, Interpolation, Kriging, Nitrat, Regionalisierung, Voronoi-Verfahren

In the "Administrative regulation on the delineation of nitrate vulnerable and eutrophic zones" (AVV GeA), geostatistical and deterministic regionalisation methods are provided for the immission-based delineation of nitrate vulnerable zones in Germany. The performance and the uncertainty of the methods for this purpose have not been evaluated so far. For the methods Inverse Distance Weighting (IDW), Ordinary Kriging (OK) and Voronoi Polygons (VP) for the interpolation of nitrate concentrations in groundwater, we analysed four aspects: (1) effect of the method parameterisation on the regionalisation, (2) spatial correlation of nitrate concentrations between the monitoring sites, (3) prediction quality of the methods and (4) differences in the distribution of nitrate concentrations in groundwater with state-wide interpolation. The study on (1) uses an externally modelled map of groundwater nitrate concentrations in Bavaria as reference distribution; the evaluations on (2) to (4) are based on a data set of 5,790 groundwater monitoring sites in Bavaria. The analysis of the spatial correlation shows that beyond a range of about 0.7 km there is no correlation of the nitrate values between monitoring sites. Cross-validation of the 5,790 monitoring sites with the three methods results in a mean absolute error between measured and interpolated concentrations of about 7 to 8 mg NO₃/l; the relative uncertainty of the methods is about 43% to 49%. Above the threshold of the Nitrates Directive and the Water Framework Directive of 50 mg NO₃/l, the concentration is interpolated on average 28 to 29 mg NO₃/l too low and the number of measuring sites > 50 mg NO₃/l is reduced by about 44% (IDW), 56% (OK) and 20% (VP). The state-wide interpolation with the three methods shows between about 3% and nearly 10% of land area with a concentration above 50 mg NO₃/l. From the authors' point of view, the suitability of the three methods is to be assessed critically for an adequate delineation of nitrate vulnerable zones.

Keywords: groundwater, inverse distance weighting, interpolation, kriging, nitrate, regionalisation, voronoi

1 Einleitung

Der Europäische Gerichtshofs (EuGH) hat mit Urteil vom 21. Juni 2018 festgestellt, dass die Bundesrepublik Deutschland die Nitratrictlinie nachhaltig verletzt. Zur Umsetzung des EuGH-Urteils wurde im Jahr 2020 die Düngeverordnung (DüV) novelliert. § 13a DüV (vom 28. April 2020) verpflichtet seitdem die Landesregierungen dazu, für diejenigen Gebiete von Grundwasserkörpern, die den Nitrat-Grenzwert von 50 mg NO₃/l überschreiten oder die eine Konzentration von über 37,5 mg NO₃/l und einen steigenden Trend aufweisen, besondere Anforderungen an den Grundwasserschutz festzulegen. In diesen Gebieten müssen die Landwirtschaftsbetriebe unter anderem ihre Stickstoffdüngung um 20 % gegenüber dem nach DüV berechneten Düngebedarf

reduzieren. Zur Vereinheitlichung der Vorgehensweise der Länder wurde am 3. November 2020 die erste Fassung der "Allgemeinen Verwaltungsvorschrift zur Ausweisung der mit Nitrat belasteten und eutrophierten Gebiete" (AVV GeA) erlassen. Diese erste Fassung der AVV GeA und die Gebietskulisse der damit ausgewiesenen "roten Gebiete" wurden von der EU-Kommission zurückgewiesen. Daraufhin wurde am 8. Juli 2022 eine Neufassung vom Bundesrat beschlossen (AVV GeA 2022), in der die Verkleinerung der "roten Gebiete" mittels einer nachgeschalteten Ermittlung von Flächen mit hohem Emissionsrisiko auf Grundlage des Modellansatzes AGRUM DE nicht mehr Bestandteil der Ausweisung ist. Für die immissionsbasierte Abgrenzung der mit Nitrat belasteten Gebiete sieht die AVV GeA 2022 (Anlage 2 und 3) geostatistische Regionalisierungsverfahren vor, übergangsweise (bis

2028) sind auch deterministische Verfahren zulässig (hilfsweise auch eine Abgrenzung nach hydrogeologischen Kriterien). Als deterministische Verfahren werden Inverse Distanzgewichtung (IDW) und Voronoi-Polygone (VP) angewendet, geostatistische Verfahren werden in der AVV GeA nicht explizit aufgeführt. In der Vergangenheit wurden von einzelnen Bundesländern verschiedene Kriging-Varianten angewendet. Keines der genannten Regionalisierungsverfahren wurde bislang im Hinblick auf die Fragestellung untersucht, ob damit eine problemadäquate Flächenausweisung für den Schutz der Grundwasservorkommen gewährleistet ist.

In der Literatur finden sich eine Reihe von Veröffentlichungen, in denen IDW und Ordinary Kriging (OK) sowie zum Teil weitere Verfahren für die Regionalisierung von hydrogeologischen Größen herangezogen werden:

VAROUCHAKIS & HRISTOPOULOS (2013) vergleichen unter anderem die drei Verfahren IDW, OK und Delauny Kriging (die Delauny-Triangulation ist der duale Graph der VP) zur Interpolation der Grundwasserhöhe und erzielen mit den Methoden OK, Universal Kriging und Delauny Kriging die beste Übereinstimmung (Bewertung mittels Kreuzvalidierung).

ZIRAKBASH et al. (2020) beziehen zehn Methoden in ihren Vergleich mit ein und zeigen, dass die Verfahren Topo to Raster, Natural Neighbor, OK und Bayesian Kriging für die Interpolation der Grundwasserhöhe den anderen Verfahren überlegen sind.

ELUMALAI et al. (2017) interpolieren die räumliche Verteilung von Grundwassergüteparametern in einem 582 km² großen Einzugsgebiet mit sehr heterogenem Ergebnis: Mit IDW wird 70 % des Grundwasserkörpers als "belastet" ausgewiesen, mit OK dagegen nur 28 %, wobei die Autoren auf die möglichen Ursachen dieser Diskrepanz nicht weiter eingehen.

Die Arsen-Konzentration im Grundwasser in Texas (USA) wurde von GONG et al. (2014) ausgehend von rund 8.000 Messstellen mit IDW und drei Kriging-Verfahren interpoliert, wobei mit IDW der höchste Korrelationskoeffizient in der Kreuzvalidierung erreicht wird.

MUELLER et al. (2004) vergleichen die Eignung von IDW und OK für die Regionalisierung von Bodeneigenschaften im Parzellenmaßstab und schlussfolgern, dass für Datensätze ohne Struktur im Semivariogramm IDW das bessere Verfahren darstellt.

In einer 605 km² großen Region wurde der Flächenanteil mit hohen Konzentrationen von drei Schwermetallen im Boden mit IDW und OK (sowie zwei weiteren Regionalisierungsverfahren) ähnlich geschätzt, lag jedoch insgesamt niedriger als der prozentuale Anteil der belasteten Bodenproben (XIE et al., 2011).

In einem faktoriellen Design wurde von ZIMMERMAN et al. (1999) der Einfluss der Parametrisierung ausgewertet, OK ergab dabei generell um 20 bis 30 % bessere Werte des Root Mean Square Error als IDW.

Anhand von neun synthetischen Datensätzen untersuchten BABAK & DEUTSCH (2009) die Güte der Methoden IDW und OK mit unterschiedlicher globaler oder lokaler Parametrisierung und erzielten in jeweils vier Fällen mit IDW und mit OK das beste Ergebnis.

TABANDEH et al. (2021) verglichen die Interpolation des Gesamtgehalts an gelösten Stoffen für zwei Grundwasserkörper mit 24 verschiedenen Interpolationsverfahren bzw. -varianten und erreichten mit IDW und OK (mit mehreren Variogramm-Funktionen) ähnlich gute Ergebnisse. In einer Literaturübersicht listen diese Autoren weiterhin 37 Untersuchungen aus verschiedenen Fachgebieten auf, in denen jeweils mehrere Interpolationsver-

fahren zur Anwendung kamen. Dabei wurde die Methode OK in 16, Universal Kriging in sieben und IDW in drei Studien als beste Methode genannt, in den übrigen Fällen gab es keine eindeutige Präferenz oder es wurde ein anderes Verfahren als beste Methode aufgeführt.

Zur Leistungsfähigkeit und zur Unsicherheit von IDW, OK und VP speziell bei der Interpolation der Nitratkonzentration im Grundwasser liegen nur sehr wenige Veröffentlichungen vor. CHARIZOPOULOS et al. (2018) vergleichen ohne eindeutiges Ergebnis vier verschiedene Formen von Sektoren, innerhalb derer die Messstellen in einem 446 km² großen Areal für die IDW-Interpolation herangezogen werden.

MUKHERJEE & SINGH (2021) verwenden zehn Methoden zur räumlich-zeitlichen Interpolation der Nitratkonzentration im Grundwasser in einer 4.545 km² großen Region in Indien und sprechen sich für Kriging als bestem Verfahren aus.

Die unterschiedliche Repräsentativität von Grundwassermessnetzen wird von BACH et al. (2020) für Deutschland aufgezeigt.

Für das Land Mecklenburg-Vorpommern wurde die Eignung verschiedener Regionalisierungsverfahren für die Bewertung des chemischen Grundwasserzustands geprüft (LUNG, 2021). Im Ergebnis wurde ein hybrides deterministisch-geostatistisches Verfahren entwickelt, das VP mit Variogrammen zur Schätzung des Ausdehnungsfehlers kombiniert.

In einer IDW-Anwendung von OHLERT et al. (2022) zeigte sich für Bayern eine systematische Unterschätzung der ausgewiesenen Flächen. Infolgedessen würden dann auch zu wenig Landwirtschaftsflächen ausgewiesen, auf denen besondere Maßnahmen zum Schutz des Grundwassers nach § 13a Düngeverordnung ergriffen werden müssen. Vor diesem Hintergrund werden in der hier vorgestellten Untersuchung die Güte bzw. die Unsicherheiten der Regionalisierungsverfahren IDW, OK und VP exemplarisch anhand der Anwendung für das Land Bayern vergleichend analysiert.

2 Methodik und Datengrundlage

2.1 Interpolationsverfahren

Inverse Distanzgewichtung schätzt den unbekanntem Wert Z^* am Punkt x_0 ausgehend von einer gegebenen Anzahl n benachbarter Messstellen (Stützstellen) x_j , wobei die Messwerte mit einer inversen Funktion der Distanzen zwischen dem zu interpolierenden Punkt und den Messwerten gewichtet werden:

$$Z^*(x_0) = \sum_{i=1}^n \lambda_i Z(x_i) \quad \text{Gl. 1}$$

mit dem Messwert $Z(x_j)$ an der Messstelle x_j und dessen Gewichtung λ_j . Die Gewichtung wird berechnet mit

$$\lambda_i = d_i^{-p} / \sum_{i=1}^n d_i^{-p} \quad \text{Gl. 2}$$

mit Euklid'scher Distanz d_i zwischen dem zu interpolierenden Punkt x_0 und Messstelle x_i , Anzahl der Messstellen n , die in die Interpolation von x_0 einbezogen werden, und Exponent p , der bestimmt, wie stark das Gewicht der Messstelle x_i abnimmt, wenn der Abstand d_i wächst (XIE et al., 2011).

Kriging ist die Sammelbezeichnung für geostatistische Interpolationsverfahren, bei denen die Gewichte der in die Interpolation einbezogenen Messwerte so bestimmt werden, dass die

Schätzfehlervarianz minimiert wird. Mit der Interpolation wird der unbekannte Wert $Z^*(x_0)$ aus den Werten $Z(x_i)$ der n benachbarten Messstellen x_i mit einem Gewichtungsfaktor w (Krigeschätzer) gewichtet

$$Z^*(x_0) = \sum_{i=1}^n w_i Z(x_i) \tag{Gl. 3}$$

Die Gewichte w_i für einen Punkt x_0 werden so bestimmt, dass (i) der Schätzfehler $F(x_0) = Z^*(x_0) - Z(x_0) = \sum w_i Z(x_i) - Z(x_0)$ im Mittel gleich 0 ist und (ii) die Varianz des Schätzfehlers $VAR[F(x_0)]$ minimiert wird. Dazu wird die Extremwertaufgabe $VAR[F(x_0)] = \min$ mit der Nebenbedingung gelöst, dass der Erwartungswert des Schätzfehlers $E[F(x_0)] = 0$ wird; woraus die Summe über die Gewichte $\sum w_i = 1$ folgt. Die Extremwertaufgabe führt zu einem linearen Gleichungssystem, dessen eindeutige Lösung die Gewichte des Krigeschätzers sind (BLÖSCHL, 2006; HINTERDING et al., 2003). Die räumliche Autokorrelation der Messwerte wird mit dem Semivariogramm $\gamma(h)$ als Funktion des Abstands h beschrieben

$$\gamma(h) = \frac{1}{2} N(h)^{-1} \sum_{i=1}^N [Z(x_i) - Z(x_i + h)]^2 \tag{Gl. 4}$$

mit N als Anzahl der Messwertpaare mit Abstand h sowie $Z(x_i)$ und $Z(x_i + h)$ als den Werten der Messgröße an den Orten x_i und $x_i + h$. An die Semivarianz-Werte können verschiedene Semivariogramm-Funktionen (bspw. linear, sphärisch, exponentiell, Gauß) angepasst werden, um den Verlauf von $\gamma(h)$ über den ausgewerteten Abstandsbereich 0 bis h mathematisch zu beschreiben. Von den verschiedenen Kriging-Verfahren wird hier nur Ordinary Kriging untersucht.

Mit dem Voronoi-Verfahren (auch Thiessen-Polygone, Dirichlet-Zerlegung) wird eine Fläche ausgehend von einer vorgegebenen Menge an Punkten (Messwerten) $Z(x_p), Z(x_q)$ so in Polygone unterteilt, dass alle Punkte $Z^*(x_0)$ innerhalb eines Polygons näher zu dessen Zentrum x_p liegen als zum Zentrum x_q eines anderen Polygons

$$Z^*(x_0) = Z(x_p) \mid d_p \leq d_q \text{ für alle } p \neq q \tag{Gl. 5}$$

mit d_p und d_q Euklid'schen Distanzen zwischen dem Punkt x_0 und den vorgegebenen Punkten x_p und x_q (AURENHAMMER & KLEIN, 2000).

2.2 Untersuchungsansätze

Die Güte und die Unsicherheit der drei Verfahren in Bezug auf die Prognose der Höhe und der räumlichen Verteilung der Nitratkonzentration im Grundwasser wird mit den folgenden Ansätzen vergleichend untersucht.

- 1) Variation der Verfahrensparameter: Einfluss der Stichprobendichte und -position sowie unterschiedlicher Parametrisierung der Verfahren auf das Ergebnis der Regionalisierungen.
- 2) Analyse der räumlichen Korrelation der Nitratkonzentrationen zwischen den Messstellen: Prüfung der Hypothese der Verfahren IDW und OK, dass die Werte umso ähnlicher sind, je näher die Messstellen zueinander liegen.
- 3) Kreuzvalidierung der Nitratkonzentration in den Messstellen: Bewertung der operationalen Prognosegüte für jedes Verfah-

ren anhand des Vergleichs der interpolierten Nitratkonzentrationen mit den gemessenen Werten.

- 4) Flächendeckende Regionalisierung (Karten) der Nitratkonzentration im Grundwasser in Bayern auf Basis von 5.790 Messstellen: Vergleich des Flächenumfangs und der Kongruenz der Areale mit einer Konzentration von über 50 mg NO_3/l im Grundwasser nach den drei Verfahren (IDW, OK, VP).

Die Bewertung erfolgt anhand statistischer Maßzahlen für die interpolierten Konzentrationen, insbesondere dem mittleren absoluten Fehler (Mean Absolute Error, MAE) als Maß für die Unsicherheit der geschätzten Werte. Weiterhin werden die Flächenanteile verglichen, für die eine Überschreitung des Schwellenwertes von 50 mg NO_3/l im Grundwasser berechnet wird. Die Berechnungen wurden mit der Software R vers. 4.0.2 mit folgenden Paketen durchgeführt: IDW Interpolation und Kriging: "gstat" (vers. 2.0.6), Anpassung der Semivariogramm-Funktionen: "fit.variogram", Voronoi: "spatstat" (vers. 1.64.1).

2.3 Datengrundlagen

Für die Untersuchungsansätze 2) bis 4) wurde ein Datensatz mit 7.735 Grundwassermessstellen (Ausweisungsmessnetz und zusätzliche Messstellen) des Bayerischen Landesamts für Umwelt verwendet. Für die Bewertung nach EG-WRRL maßgebliche Nitratkonzentration einer Messstelle ist gemäß Allgemeiner Verwaltungsvorschrift zur Ausweisung von mit Nitrat belasteten und eutrophierten Gebieten (AVV GeA) der Mittelwert aus den jährlichen Maxima der Einzelmessungen der Jahre 2016 bis 2019 (für einige Messstellen 2011 bis 2019, in Einzelfällen bis 2020). Im Datensatz sind lokale Cluster von Messstellen mit identischer Nitratkonzentration vertreten; in der Regel Brunnengalerien, bei denen alle Einzelbrunnen in der Datenbank separat aufgeführt sind. Wenn bei einer Interpolation ein Teil oder alle Stützstellen sehr eng benachbart sind und identische Messwerte aufweisen, dann tritt ein ausgeprägter Bullaugen-Effekt in Erscheinung, das heißt, in der Umgebung dieser Messstellen wird der interpolierte Wert weitgehend durch den Wert dieses Clusters determiniert. Um diesen Effekt zu vermeiden, wurde der Datensatz aggregiert: Jeweils alle Messstellen mit identischer Nitratkonzentration, die innerhalb desselben Rasters von 1 km x 1 km Größe liegen, wurden zu einer einzigen Messstelle zusammengefasst, insgesamt betraf das 1.930 Messstellen. Weiterhin wurde bei 15 Messstellenpaaren mit identischen Koordinaten jeweils nur die Messstelle mit dem höheren Konzentrationswert beibehalten. Der Datensatz wurde dadurch auf 5.790 Messstellen reduziert (Abb. S1 im Supplement), die Anzahl der Messstellen mit einer Konzentration von über 50 mg NO_3/l ($n = 277$) wurde dabei nicht verändert.

Für die flächenbezogenen Untersuchungen (Kap. 3.1 und 3.4) wurde die Hydrogeologische Karte Bayern 1 : 500.000 (LFU, 2009) im Raster von 1 km x 1 km des GeoGitter Deutschland (BKG, 2017) gerastert, Bayern wird darin durch 70.634 Raster repräsentiert. Für die Umsetzung der WRRL sind 260 Grundwasserkörper (GWK) ausgewiesen, von denen nach WRRL-Bewertung 77 nicht im "guten Zustand" in Bezug auf den Parameter Nitrat sind (bezogen auf den o. g. Auswertungszeitraum). Aus dem Landbedeckungsmodell Deutschland (LBM-DE2018; BKG, 2019) wurde die Landwirtschaftsfläche (LF) in den Rastern ausgewertet, die nach LBM-DE2018 34.829 km² umfasst (49,3 % der Landesfläche). Die Hydrogeologische Karte unterscheidet 18 hydrogeo-

logische Einheiten (HGE; Abb. 1; Tab. S1 im Supplement), für die teilweise die Ergebnisse separat ausgewertet werden.

Im Untersuchungsansatz 1) wird für die Zufallsziehung der Stützstellen der Interpolation aus einer Grundgesamtheit eine modellierte Karte der Nitratkonzentration im Grundwasser (Abb. 2) als Referenzkarte verwendet (Kap. 3.1), die von KNOLL et al. (2020) mittels Random-Forest (RF) generiert wurde. RF ist ein Regressionsverfahren aus der Gruppe der Maschinellen Lernverfahren, bei dem zunächst anhand von Messwerten und assoziierten Prädiktoren ein Entscheidungsalgorithmus trainiert und anschließend für alle Elemente (hier: Raster) ohne Messwert aus den Werten der Prädiktoren mittels des RF-Algorithmus die Zielgröße geschätzt wird.

3 Ergebnisse

3.1 Variation der Verfahrensparameter

Das Ergebnis eines Regionalisierungsverfahrens hängt von mehreren Faktoren ab: (i) Anzahl (Dichte) der Stichproben, die aus der Grundgesamtheit der Werte einer regionalisierten Variablen innerhalb eines Untersuchungsgebietes gezogen werden, (ii) Position (räumliche Verteilung) der Stichproben in diesem Gebiet und (iii) Parameter des verwendeten Interpolationsverfahrens. Die Effekte dieser Faktoren wurden für folgende Faktorstufen untersucht.

- (i) Anzahl der Stichproben, d. h. der Stützstellen eines Regionalisierungsverfahrens: $s = 1.412, 3.531, 7.063$. Diese Anzahlen entsprechen einer Messnetzdichte von einer Messstelle pro 50, 20 und 10 km², bezogen auf die 70.634 Raster für Bayern.
- (ii) Position der Stützstellen: jeweils 100 Zufallsziehungen der Stützstellen (Monte-Carlo-Verteilung) für IDW und OK, 30 Zufallsziehungen für VP (reduzierte Anzahl aufgrund längerer Rechenzeit).
- (iii) Variation der Verfahrensparameter:
 - Inverse Distanzgewichtung
 - Anzahl der Stützstellen, die in die Interpolation eines Punktes einbezogen werden (Gl. 1): $n = 4, 8, 12, 16$
 - Exponent der Gewichtung (Gl. 2): $p = 1, 1.5, 2, 4$
 - Ordinary Kriging
 - Anzahl der Stützstellen, die in die Interpolation eines Punktes einbezogen werden (Gl. 3): $n = 4, 8, 12, 16$
 - Maximale Distanz der berücksichtigten Nachbarn zum Interpolationspunkt: $maxDist = 10 \text{ km}, 20 \text{ km}, 40 \text{ km}$
 - Distanzintervalle (Abstandsklassen), für die im Semivariogramm die Semivarianzen zusammengefasst werden: $width = 200 \text{ m}, 500 \text{ m}, 1.000 \text{ m}$
 - Funktion, die an das Semivariogramm angepasst wird: $fkt = \text{exponentiell, sphärisch, Gauß}$
 - Voronoi
 - Keine variablen Verfahrensparameter

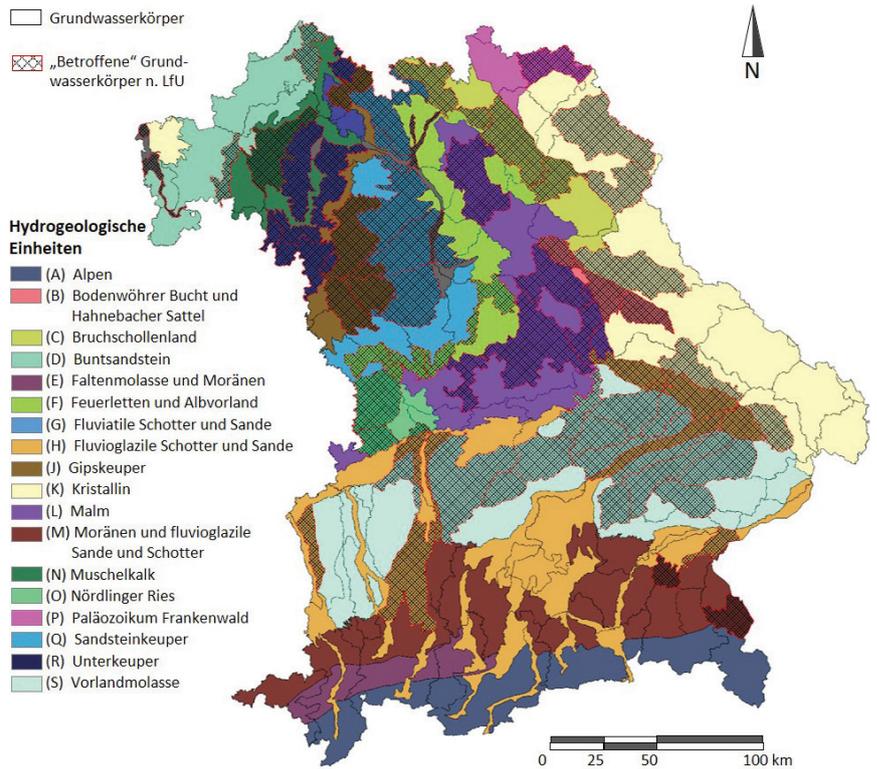


Abbildung 1 Hydrogeologische Einheiten der Hydrogeologischen Karte Bayern 1 : 500.000 (LFU, 2009) und Grundwasserkörper nach Einteilung entsprechend EG-WRRRL (LFU, 2021). *Hydrogeological units of the Hydrogeological Map of Bavaria 1:500,000 (LFU, 2009) and groundwater bodies according to the Water Framework Directive classification (LFU, 2021).* © Bayerisches Landesamt für Umwelt

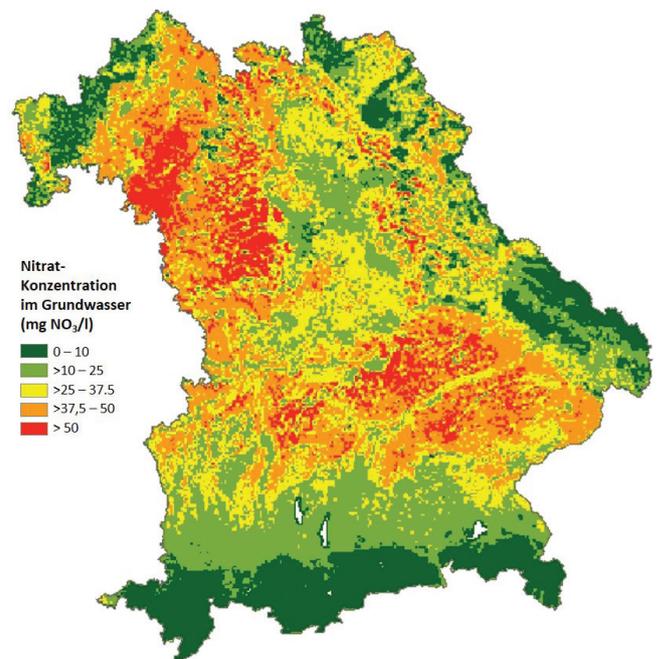


Abbildung 2 Random-Forest-Modellierung (1 km x 1 km) der Nitratkonzentration im Grundwasser in Bayern (Auszug aus KNOLL et al., 2020). *Random forest modelling (1 km x 1 km) of nitrate concentration in groundwater in Bavaria (extract from KNOLL et al., 2020).* Geometrie: © GeoBasis-DE/BKG (2018)

Als Grundgesamtheit, aus der die Konzentrationswerte der Stützstellen gezogen werden, wurde das RF-Modell von KNOLL et al. (2020) als Referenzkarte zugrunde gelegt (Abb. 2). Insgesamt wurden mit IDW für 48 Parameterkombinationen ($3 \times 4 \times 4 = 48$) und mit OK für 324 Parameterkombinationen ($3 \times 4 \times 3 \times 3 \times 3 = 324$), jeweils mit 100 Zufallsverteilungen der $s = 1.412, 3.531$ und 7.063 Stützstellen, die Nitratkonzentration für $(70.634 - s)$ zu interpolierende Raster berechnet. VP wurde für jeweils 30 Zufallsverteilungen der $s = 1.412, 3.531$ und 7.063 Stützstellen berechnet.

In Tabelle 1 sind die statistischen Maßzahlen für die mit der Methode der Inversen Distanzgewichtung (IDW), des Ordinary Kriging (OK) und der Voronoi-Polygone (VP) regionalisierten Nitratkonzentrationen aufgeführt, gemittelt über die Faktorstufen der Parameter (Ergebnisse der einzelnen IDW- und OK-Kombinationen s. Tab. S2 und S3 im Supplement). Die Mittelwerte sind für alle drei Verfahren und Parameterstufen nahezu identisch und stimmen mit dem Mittel der Grundgesamtheit von $28,49 \text{ mg NO}_3/\text{l}$ überein. Methodisch bedingt werden bei VP die Maxima getroffen, bei IDW und OK dagegen generell geglättet. Für die Minima treten mit OK mit der Anpassung einer Gauß-Funktion an das Semivariogramm auch negative Werte auf, im Höchstfall betrifft das rund 100 negative Werte (von 70.634), die niedrigsten Werte erreichen rund $-12 \text{ mg NO}_3/\text{l}$. Die negativen Minima für Gauß'sche Semivariogramm-Funktionen führen auch in Tabelle 1 zu negativen Minima bei der Auswertung aggregiert für Parameterstufen.

Von den in Tabelle 1 dargestellten Parametern verursacht die Anzahl der Stützstellen die größte Variation. In Bezug auf die Korrelationskoeffizienten (COR) zwischen Grundgesamtheit und interpolierter Verteilung und den mittleren absoluten Fehlern (MAE) verbessert sich bei allen drei Verfahren die Güte der Interpolation mit zunehmender Dichte der Stützstellen. Die übrigen Parameter der Verfahren IDW und OK beeinflussen die Ergebnisse zu COR und MAE nur marginal. Mit IDW wird der größte Anteil von Rastern mit einer Konzentration von über $50 \text{ mg NO}_3/\text{l}$ ($R_a > 50$) jeweils für die Kombinationen mit der kleinsten Anzahl einbezogener Stützstellen ($n = 4$) und dem größten IDW-Exponenten ($p = 4$) interpoliert. Für OK sind die zwölf Parameterkombinationen mit dem höchsten Anteil an Rastern $> 50 \text{ mg NO}_3/\text{l}$ jeweils durch $s = 7063, \text{maxDist} = 40$ und $\text{fkt} = \text{Gauß}$ gekennzeichnet, für die Parameter n und width treten dabei verschiedene Werte auf. Die Anteile der Raster $> 50 \text{ mg NO}_3/\text{l}$ bleiben nach Regionalisierung mit IDW und OK aber generell erheblich unter dem tatsächlichen Anteil in der Grundgesamtheit von $8,29 \%$. Das VP-Verfahren erzeugt dagegen einen Anteil an Rastern $> 50 \text{ mg NO}_3/\text{l}$, der sich der Grundgesamtheit stärker annähert bzw. damit fast übereinstimmt.

Die Untersuchung der Verfahrensparameter zeigt, dass die Variabilität der interpolierten Nitratkonzentrationen am stärksten von der Position (Zufallsverteilung) der Stützstellen beeinflusst wird. Für jedes Verfahren wurden daher für eine ausgewählte Parameterkombination (IDW: $s = 7.063, n = 8, p = 2$; OK: $s = 7.063, n = 16, \text{maxDist} = 10 \text{ km}, \text{width} = 200 \text{ m}$, sphärisches Variogramm; VP: $s = 7.063$) auch die Häufigkeitsverteilung der Nitratkonzentration sowie die Kongruenz der Anzahl an Rastern $> 50 \text{ mg NO}_3/\text{l}$ innerhalb der 100 bzw. 30 Zufallsverteilungen ausgewertet. Abbildung 3 verdeutlicht, dass die Häufigkeitsdichte der Nitratkonzentration mit IDW und OK gegenüber der Grundgesamtheit für

mittlere Nitratkonzentrationen (10 bis ca. 40 mg/l) überschätzt und in den Randbereichen der Konzentrationswerte unterschätzt wird, was insbesondere die Nitratkonzentrationen im höheren Bereich betrifft. Mit VP wird dagegen die Häufigkeitsverteilung der Grundgesamtheit nahezu identisch reproduziert.

Der Anteil der Raster mit einer Konzentration von über $50 \text{ mg NO}_3/\text{l}$ beträgt im Mittel der 100 Interpolationen mit IDW rund $4,5 \%$ und mit OK rund $4,8 \%$, was gegenüber dem Wert der Grundgesamtheit des Random-Forest-Modells von $8,3 \%$ eine Unterschätzung von rund 46% bzw. 42% bedeutet (Tab. 2). Die Spanne des Anteils der Raster $> 50 \text{ mg NO}_3/\text{l}$ umfasst $1,0$ bzw. $1,2$ Prozentpunkte. Aufgrund der unterschiedlichen Position von Stützstellen (Messstellen) im Zuge der 100 zufällig gezogenen Interpolationen kann somit für die hier zugrundeliegende Referenzkarte die aggregierte Fläche mit einer Konzentration von über $50 \text{ mg NO}_3/\text{l}$ mit IDW-Interpolation zwischen rund $4,0 \%$ und $5,0 \%$ variieren, mit OK zwischen rund $4,2$ und $5,4 \%$. Mit VP werden dagegen im Mittel $7,5 \%$ an Rastern mit $> 50 \text{ mg NO}_3/\text{l}$ bestimmt, was nur etwas weniger ist als der Wert der Grundgesamtheit. Im Maximum von 30 Interpolationen mit zufällig gezogenen Stützstellen werden mit der VP-Interpolation nur 198 Raster $> 50 \text{ mg NO}_3/\text{l}$ weniger ausgewiesen. In Tabelle 2 ist zusätzlich die Anzahl der deckungsgleichen Raster $> 50 \text{ mg NO}_3/\text{l}$ angegeben, das heißt derjenigen Raster, die sowohl in der Grundgesamtheit (RF-Modell) als auch mit einem Regionalisierungsverfahren übereinstimmend in diese Kategorie eingestuft werden. Bezogen auf die Anzahl der Raster, die gemäß dem jeweiligen Interpolationsverfahren über $50 \text{ mg NO}_3/\text{l}$ liegen, sind das für IDW-Verfahren nur rund 67% und für die OK-Methode nur rund 65% , wobei sich die Angaben jeweils auf das Mittel beziehen. Die Prozentwerte für Minimum bzw. Maximum weichen davon etwas ab. Obwohl das VP-Verfahren eine ähnliche Anzahl Raster $> 50 \text{ mg NO}_3/\text{l}$ wie die Grundgesamtheit ausweist, beträgt hier der Anteil der deckungsgleichen Raster nur 52% .

3.2 Analyse der räumlichen Korrelation

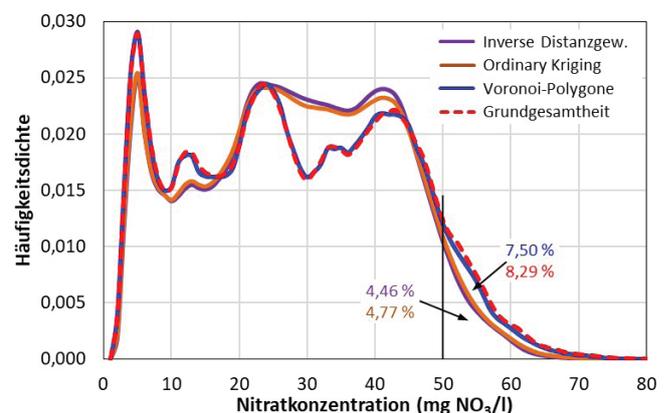


Abbildung 3 Häufigkeitsdichte der Nitratkonzentration (70.634 Raster) sowie Flächenanteile von über $50 \text{ mg NO}_3/\text{l}$ nach Regionalisierung mit drei Verfahren (Mittel aus 100 bzw. 30 Interpolationen) und in der Grundgesamtheit (Random-Forest-Modell).
Frequency density of nitrate concentration (70,634 grids) and area fractions $> 50 \text{ mg NO}_3/\text{l}$ with regionalisation by three methods (mean of 100 or 30 interpolations) and in the population (Random Forest model).

Tabelle 1
 Statistische Maßzahlen^a der Interpolation der Nitratkonzentration im Grundwasser in Bayern (70.634 Raster) mit zufällig verteilten Stützstellen, aggregiert über die Parameterstufen^b.
Statistical measures of interpolated nitrate concentration in groundwater in Bavaria (70,634 grids) with randomly distributed sampling grids, aggregated over parameter levels.

Parameter	Wert	Anzahl	Mittel	MIN	MAX	SD	MAE	COR	Ra>50	
		Komb. (k)	mg NO ₃ /l	-	%					
Inverse Distanzgewichtung (100 Zufallsverteilungen)										
Stützstellen insgesamt (s)	1.412	16	28,51	3,2	68,5	13,52	6,60	0,814	4,28	
	3.531	16	28,50	3,1	69,3	13,80	5,93	0,847	4,54	
	7.063	16	28,50	3,1	69,8	13,96	5,40	0,872	4,50	
Einbezogene Stützstellen (n) pro Interpolation	4	12	28,50	3,0	71,6	14,19	6,01	0,839	5,23	
	8	12	28,51	3,1	69,3	13,79	5,94	0,845	4,48	
	12	12	28,51	3,2	68,3	13,60	5,96	0,847	4,14	
IDW-Exponent (p)	16	12	28,51	3,2	67,5	13,47	5,99	0,847	3,92	
	1	12	28,52	3,3	64,3	13,32	6,05	0,845	3,65	
	1,5	12	28,50	3,2	67,2	13,51	5,93	0,849	3,98	
IDW-Exponent (p)	2	12	28,51	3,1	70,1	13,74	5,88	0,849	4,39	
	4	12	28,51	3,0	75,1	14,47	6,05	0,835	5,75	
	Ordinary Kriging (100 Zufallsverteilungen)									
Stützstellen insgesamt (s)	1.412	108	28,53	2,4	70,0	13,39	6,58	0,816	4,06	
	3.531	108	28,51	1,0	73,2	13,84	5,86	0,850	4,69	
	7.063	108	28,50	-0,5	76,1	14,23	5,30	0,875	5,09	
Einbezogene Stützstellen (n) pro Interpolation	4	81	28,51	1,2	73,6	14,09	5,95	0,843	5,09	
	8	81	28,51	0,9	73,1	13,83	5,89	0,848	4,62	
	12	81	28,51	0,9	72,9	13,72	5,90	0,849	4,43	
Maximale Distanz (maxDist)	16	81	28,51	0,8	72,8	13,65	5,92	0,848	4,31	
	10 km	108	28,52	1,9	71,8	13,77	5,90	0,847	4,49	
	20 km	108	28,51	1,2	72,8	13,74	5,90	0,848	4,48	
Distanz-Intervall (width)	40 km	108	28,51	-0,2	74,7	13,94	5,94	0,845	4,88	
	200 m	108	28,51	1,0	73,0	13,81	5,92	0,847	4,60	
	500 m	108	28,51	1,0	73,1	13,82	5,91	0,847	4,61	
Funktionstyp Semivariogramm (fkt)	1.000 m	108	28,51	0,8	73,2	13,83	5,92	0,847	4,64	
	Expon.	108	28,51	3,0	70,3	13,78	5,85	0,850	4,50	
	Gauß	108	28,52	-2,3	77,0	13,78	5,98	0,845	4,56	
Voronoi (30 Zufallsverteilungen)	Sphär.	108	28,51	2,2	72,0	13,90	5,92	0,846	4,78	
	Stützstellen insgesamt (s)	1.412	1	28,55	3,0	73,8	15,60	7,69	0,748	8,22
		3.531	1	28,49	2,9	77,0	15,54	6,79	0,795	7,86
7.063		1	28,52	2,9	77,9	15,55	6,10	0,830	7,50	
Grundgesamtheit (Random-Forest-Modell)										
		---	28,49	2,7	81,1	15,53			8,29	

^a Maßzahlen: Mittel: Mittelwert; MIN: Minimum; MAX: Maximum; SD: Standardabweichung; MAE: mean absolute error; COR: Korrelationskoeffizient; Ra > 50: Anteil der Raster mit einer Konzentration von über 50 mg NO₃/l.

^b Auswertung: Mittel, MIN, MAX, SD, MAE: gemittelt über k Parameterkombinationen x 100 [30] Interpolationen x (70.634 - s) Raster; COR, Ra > 50: gemittelt über k Parameterkombinationen x 100 [30] Interpolationen.

Deterministische und geostatistische Interpolationsverfahren basieren auf der Hypothese, dass die zu interpolierende Größe räumlich autokorreliert ist. Zur Überprüfung wurden die Differenzen der Nitratkonzentrationen und die Distanzen zwischen allen Messstellen berechnet und für die 103.531 Differenzen bis zu einer Distanz von 10 km ausgewertet. Für das Semivariogramm (Abb. 4) wurde die Werteverteilung der quadrierten Differenzen (in Abb. 4 dargestellt: 10-Perzentil, Mittelwert, 90-Perzentil) im

Distanzbereich von 0 bis 10 km mit einer Intervallbreite von 100 m ermittelt, die Anzahl der Semivarianzen in den 100 Intervallen reicht von 518 bis 1.726. Für die Semivarianzen ist eine räumliche Abhängigkeit nur bis zur Distanzklasse 0,6 bis 0,7 km zu erkennen. Für den Distanzbereich ab 1 km besteht bei der Auswertung für Bayern insgesamt keine statistisch signifikante Korrelation (für Signifikanzniveau $p \leq 0,01$) zwischen den Intervallmittelwerten der Semivarianz und der Distanz. Eine Auswertung

Tabelle 2

Anzahl an Rastern mit einer Nitratkonzentration von über 50 mg NO₃/l im Grundwasser in Bayern (70.634 Raster) insgesamt und deckungsgleich mit der Grundgesamtheit (GG) nach Interpolation mit Inverser Distanzgewichtung, Ordinary Kriging und Voronoi-Polygone (Parameter s. Text), jeweils Mittelwert und Spannweite aus 100 bzw. 30 Interpolationen mit 7.063 zufällig verteilten Stützstellen.
Number of grids with nitrate concentration above 50 mg NO₃/l in groundwater in Bavaria (70,634 grids) in total and congruent with the population (GG) interpolated by Inverse Distance Weighting, Ordinary Kriging and Voronoi polygons (parameters see text), mean and range from 100 or 30 interpolations with 7,063 randomly distributed sampling points.

Verfahren		Raster über 50 mg NO ₃ /l insgesamt		Raster über 50 mg NO ₃ /l deckungsgleich mit GG	
		Anzahl (= km ²)	Anteil Landesfläche	Anzahl	Anteil an "insgesamt"
Inverse Distanzgewichtung (100 Interpolationen)	Minimum	2.801	3,97 %	1.897	67,7 %
	Mittel	3.149	4,45 %	2.115	67,2 %
	Maximum	3.521	4,98 %	2.326	66,1 %
Ordinary Kriging (100 Interpolationen)	Minimum	2.980	4,22 %	1.932	64,8 %
	Mittel	3.369	4,77 %	2.197	65,2 %
	Maximum	3.819	5,41 %	2.409	63,1 %
Voronoi-Polygone (30 Interpolationen)	Minimum	4.892	6,93 %	2.647	54,1 %
	Mittel	5.297	7,50 %	2.766	52,2 %
	Maximum	5.661	8,01 %	2.891	51,1 %
Grundgesamtheit		5.859	8,29 %	---	---

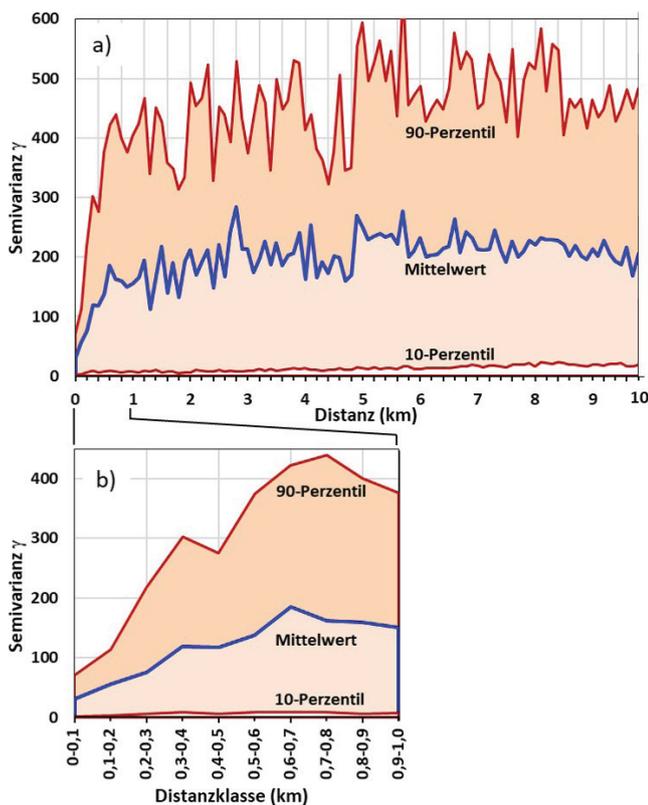


Abbildung 4
 Semivariogramm $\gamma(h)$ der Nitratkonzentration der 5.790 Grundwassermessstellen in Bayern: Mittelwert, 10-Perzentil und 90-Perzentil der Semivarianzen als Funktion der Distanz der Messstellen, gemittelt für 100-m-Distanzklassen; a) von 0-0,1 bis 9,9-10,0 km; b) Ausschnitt von 0-0,1 bis 0,9-1,0 km.
Semivariogram $\gamma(h)$ of the nitrate concentration of 5,790 groundwater monitoring sites in Bavaria: mean, 10th percentile and 90th percentile of the semi-variances as function of the distance of the monitoring sites, averaged for 100 m distance classes; a) from 0-0.1 to 9.9-10.0 km; b) section from 0-0.1 to 0.9-1.0 km.

separat für die 18 HGE (hydrogeologische Einheiten) ergibt für zehn HGE keine statistisch signifikante Korrelation, für acht HGE wird ein statistisch signifikanter Korrelationskoeffizient ermittelt, wobei der Wert in den meisten Fällen $R < 0,05$ liegt, der höchste Korrelationskoeffizient erreicht $R = 0,11$. Ergänzend wurden in gleicher Weise die Absolutbeträge der Konzentrationsdifferenzen ausgewertet (Abb. S2 im Supplement). Das Gesamtmittel der Absolutbeträge (bis 10 km Distanz) beträgt 12,4 mg NO₃/l, analog zur Semivarianz ist eine räumliche Abhängigkeit der absoluten Differenzen nur bis zur Distanzklasse 0,6 bis 0,7 km zu erkennen.

3.3 Kreuzvalidierung der Messstellen

Mit einer Kreuzvalidierung (leave-one-out cross validation) wird die Vorhersagegüte der Verfahren beurteilt. Nacheinander wird jede der 5.790 Messstellen aus dem Datensatz entfernt und für diesen Punkt anschließend die Nitratkonzentration aus den Werten der benachbarten Messstellen mit den drei Verfahren mit den folgenden Parametern (Kap. 3.1) interpoliert: IDW: $n = 8$ Stützstellen, IDW-Exponent $p = 2$; OK: $n = 16$ Stützstellen, $maxDist = 10$ km, OK-Distanzintervall $width = 200$ m, exponentielles Semivariogramm. Die Mittelwerte der gemessenen und der interpolierten Konzentrationen sind annähernd identisch (Tab. 3). Die niedrigeren Maxima und die geringeren Standardabweichungen der Kreuzvalidierten Werte verdeutlichen, dass die IDW- bzw. OK-Interpolation die Konzentrationsverteilung gegenüber den Messwerten nivellieren. Der mittlere absolute Fehler beträgt jeweils rund 7 mg NO₃/l, was einem relativen Absolutfehler von rund 43 % entspricht. Die Distanzen zu den 8 (IDW) bzw. 16 (OK) Messstellen, die als Stützstellen der Interpolation dienen, betragen im Mittel 918 m für die nächstgelegene und 4.433 m (IDW) bzw. 6.892 m (OK) für die am weitesten entfernte einbezogene Stützstelle. Die Korrelationskoeffizienten zwischen Messwerten und interpolierten Nitratwerten liegen geringfügig über 0,7 entsprechend einem Bestimmtheitsmaß von rund 50 %, das heißt, IDW- und OK-Interpolation geben nur rund die Hälfte der tatsächlichen Streuung der Messwerte wieder. IDW und OK

Tabelle 3
 Statistische Maßzahlen der gemessenen und mit Kreuzvalidierung interpolierten Nitratkonzentrationen für die drei Verfahren Inverse Distanzgewichtung (IDW), Ordinary Kriging (OK) und Voronoi-Polygone (VP) (5.790 Grundwassermessstellen in Bayern).
 Statistical measures of nitrate concentrations measured and interpolated with cross-validation for three methods Inverse Distance Weighting (IDW), Ordinary Kriging (OK) and Voronoi polygons (VP) (5,790 groundwater monitoring sites in Bavaria).

Maßzahl	Messwerte (Ist)	Interpolationsverfahren		
		IDW	OK	VP
Mittelwert (mg NO ₃ /l)	16,62	16,22	16,36	16,24
Minimum (mg NO ₃ /l)	0,0	0,0	-0,1	0,0
Maximum (mg NO ₃ /l)	395,0	269,7	285,5	300,0
Standardabweichung (mg NO ₃ /l)	19,30	15,98	15,15	17,99
Mittlerer absoluter Fehler (mg NO ₃ /l)		7,03	6,96	7,89
Korrelation zw. Messwerten und interpolierten Werten		0,710	0,721	0,640
Messstellen über 50 mg NO ₃ /l (Anzahl)	277	154	122	222
- in % der tatsächlichen Anzahl		55,6 %	44,0 %	80,1 %
Interpolation und Messtelle übereinstimmend über 50 mg NO ₃ /l (Anzahl)		84	71	94

reduzieren die interpolierte Werteverteilung in Bezug auf die Anzahl der Messstellen mit Konzentrationen über 50 mg NO₃/l erheblich: Tatsächlich sind 277 Messstellen mit einer Konzentration von über 50 mg NO₃/l vorhanden, mit IDW-Kreuzvalidierung vermindert sich diese Zahl auf 154 Messstellen (rund 56 % des Ausgangswertes) und mit OK auf 122 (rund 44 %). Mit VP wird mit rund 7,9 mg NO₃/l ein etwas höherer MAE und mit 0,64 eine geringere Korrelation zwischen gemessenen und interpolierten Werten ermittelt. Die Anzahl der interpolierten Konzentrationen von über 50 mg NO₃/l steigt mit VP auf 222, was 80 % des Ist-Wertes entspricht. Für alle drei Verfahren ist jedoch festzustellen, dass nur ein Teil der Messstellen, für die mittels Kreuzvalidierung eine Konzentration von über 50 mg NO₃/l ermittelt wird, auch mit ihrem tatsächlichen Wert in diese Klasse fallen, das heißt, nach Messung und Interpolation übereinstimmend als > 50 mg NO₃/l eingestuft werden. Mit VP entsprechen von den 222 interpolierten Werten > 50 mg NO₃/l nur 94 Messstellen (rund 42 %) einem Messwert > 50 mg NO₃/l. Die übrigen 58 % werden als "belastet" ausgewiesen, obwohl die Messstellen tatsächlich eine niedrigere Konzentration aufweisen. Für IDW und OK sind die Anteile nicht übereinstimmender Messstellen mit 45 % und 42 % etwas geringer.

Die Differenzen zwischen Messwert und interpolierter Nitratkonzentration zeigen für alle drei Verfahren eine lineare Abhängigkeit von der gemessenen Konzentration (Abb. 5), die interpolierte Konzentration wird im Bereich oberhalb von rund 16 mg NO₃/l systematisch unterschätzt. Für die 277 Messstellen über 50 mg NO₃/l wird die Konzentration bei einer Kreuzvalidierung im Durchschnitt um 28,6 (IDW), 29,3 (OK) bzw. 27,9 mg NO₃/l (VP) zu niedrig interpoliert, was mittleren relativen Fehlern von rund 39 % (IDW), 40 % (OK) bzw. 38 % (VP) entspricht. Für IDW besteht kein Zusammenhang zwischen den Konzentrationsdifferenzen und der Summe der IDW-Gewichte λ_i (Gl. 2), das heißt, der absolute Fehler der IDW-Interpolation ist unabhängig von der Distanz der acht Stützstellen zur interpolierten Messstelle.

Die Kreuzvalidierung wurde außerdem separat für die 18 HGE durchgeführt, das heißt, für die Interpolation wurden jeweils nur Stützstellen innerhalb der gleichen HGE herangezogen, um die Heterogenität der Verfahren bei Anwendung in den einzel-

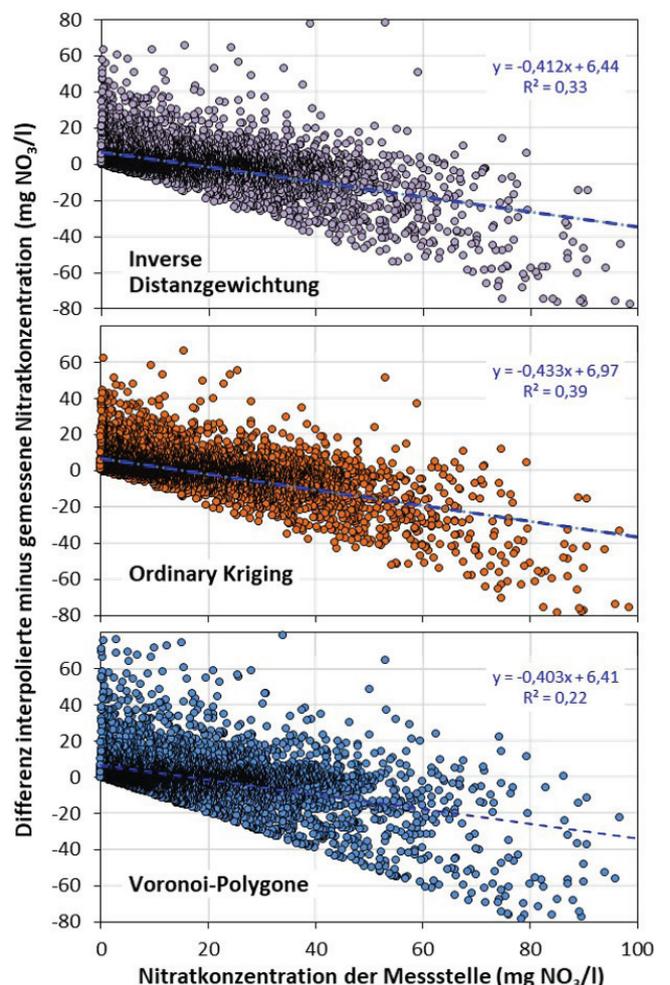


Abbildung 5
 Differenz zwischen mittels Kreuzvalidierung interpolierten und gemessenen Nitratkonzentrationen an 5.790 Messstellen in Bayern als Funktion des Messwerts (Werte für x > 100, y < -80 oder y > 80 nicht dargestellt).
 Difference between nitrate concentrations interpolated by cross-validation and measured in 5,790 monitoring sites in Bavaria as a function of measured concentration (values for x > 100, y < -80 or y > 80 not shown).

Tabelle 4

Maßzahlen der interpolierten Nitratkonzentration, der Anzahl Raster (1 km x 1 km) mit Konzentration über 50 mg NO₃/l im Grundwasser in Bayern (70.634 Raster) und der Landwirtschaftsfläche (LF) in diesen Rastern nach drei Regionalisierungsverfahren (Basis: 5.790 Messstellen), ohne (Bayern insgesamt) und mit Berücksichtigung der Grenzen der hydrogeologischen Einheiten (HGE separat).

Measures of the interpolated nitrate concentration, number of grids (1 km x 1 km) with concentrations above 50 mg NO₃/l in groundwater in Bavaria (70,634 grids) and agriculturally used area (LF) in these grids according to three regionalisation methods (database: 5,790 monitoring sites), without (Bavaria as a whole) and with consideration of the boundaries of the hydrogeological units (HGE separately).

Maßzahl	Inverse Distanzgewichtung		Ordinary Kriging		Voronoi-Polygone	
	Bayern insgesamt	HGE separat	Bayern insgesamt	HGE separat	Bayern insgesamt	HGE separat
Mittelwert (mg NO ₃ /l)	19,93	20,58	20,12	20,70	20,65	21,16
Minimum (mg NO ₃ /l)	0,0	0,0	0,1	-3,4	0,0	0,0
Maximum (mg NO ₃ /l)	270,1	270,1	274,2	317,2	395,0	395,0
Standardabweichung (mg NO ₃ /l)	14,57	15,71	13,48	15,65	21,22	21,71
Anzahl Raster > 50 mg NO ₃ /l in Bayern (= Flächen in km ²)	2.165	3.071	1.569	2.897	6.234	6.897
- Anteil der Landesfläche in Bayern	3,07 %	4,35 %	2,22 %	4,10 %	8,83 %	9,76 %
Landwirtschaftsfläche (km ²) in den Rastern > 50 mg NO ₃ /l	1.444	2.068	1.070	1.940	3.927	4.367
- Anteil an der Landesfläche in Bayern	4,15 %	5,94 %	3,07 %	5,57 %	11,28 %	12,54 %

nen hydrogeologischen Regionen zu erfassen. Die Ergebnisse zeigen eine sehr große Spannweite der Güte von HGE-spezifischen Interpolationen (Tab. S1 im Supplement), der mittlere absolute Fehler reicht von rund 1 mg NO₃/l in der HGE Alpen (alle Verfahren) bis zu 21,7 (IDW), 23,3 (OK) bzw. 23,9 mg NO₃/l (VP) in der HGE Nördlinger Ries. Zwischen der Messstellendichte und dem mittleren absoluten Fehler besteht dabei kein statistischer Zusammenhang. Die Anzahl der Messstellen, für die eine Konzentration von über 50 mg NO₃/l interpoliert wird, erhöht sich bei HGE-separater Kreuzvalidierung geringfügig auf 171 (IDW), 137 (OK) und 230 (VP).

3.4 Flächendeckende Interpolation

Im Rahmen der Allgemeinen Verwaltungsvorschrift zur Ausweisung von mit Nitrat belasteten und eutrophierten Gebieten (AVV GeA) werden die Regionalisierungsverfahren dazu herangezogen, die Gebiete mit einer Konzentration von über 50 mg NO₃/l im Grundwasser für ein Bundesland auszuweisen. Ausgehend von den 5.790 Messstellen wurden dafür mit IDW, OK und VP die Nitratkonzentrationen für das 1 km x 1 km große Raster interpoliert, zum einen für Bayern als Ganzes und zum anderen separat für die HGE, das heißt, es wurden nur die Messstellen innerhalb der gleichen HGE als Stützstellen der Interpolation verwendet. Die Interpolationen mit IDW und OK zeigen in Bezug auf die statistischen Maßzahlen ähnliche Ergebnisse (Tab. 4). Mit IDW wird für Bayern insgesamt mit 2.165 km² fast 600 km² mehr Fläche über 50 mg NO₃/l ermittelt als mit OK. Die Interpolation separat für HGE führt tendenziell zu einer stärkeren Streuung der Nitratkonzentrationen, zu einer größeren Anzahl an Rastern > 50 mg NO₃/l und zu einem höheren Anteil an "betroffener" Landwirtschaftsfläche gegenüber einer Interpolation ohne Berücksichtigung der HGE-Grenzen (Bayern insgesamt). Im Vergleich zu IDW und OK weisen VP mit 6.234 km² eine wesentlich größere Fläche über 50 mg NO₃/l aus und infolgedessen auch eine deutlich größere "betroffene" Landwirtschaftsfläche. Mit VP (für HGE separat) wird gegenüber der Variante IDW (Bayern insgesamt) mehr als die dreifache Landwirtschaftsfläche in Rastern > 50 mg NO₃/l interpoliert.

Die Regionalisierung für Bayern wurde für ein 1 km x 1 km großes Raster durchgeführt. Um den Einfluss der Rastergröße zu untersuchen, wurde exemplarisch die Nitratkonzentration mit IDW auch für ein 100 m x 100 m großes Raster interpoliert. Die Ergebnisse sind nahezu identisch, der Mittelwert beträgt 19,94 mg NO₃/l, die Standardabweichung 14,57 mg NO₃/l und der Anteil der Landesfläche mit einer Nitratkonzentration von über 50 mg NO₃/l bleibt mit 3,1 % nahezu unverändert (Tab. 4).

Abbildung 6 zeigt die Karten der Verteilung der Nitratkonzentration im Grundwasser in Bayern (in fünf Klassen) nach den drei Verfahren. Das großräumige Verteilungsmuster ist mit IDW und OK für die beiden Varianten – Bayern insgesamt und HGE separat – relativ ähnlich, mit Berücksichtigung der HGE ist die Interpolation durch ausgeprägte Konzentrations sprünge an vielen HGE-Grenzen gekennzeichnet. Mit VP wird gegenüber IDW und OK um mehr als das Doppelte an Fläche in der Klasse > 50 mg NO₃/l ermittelt. Jede der 277 Messstellen mit einer Konzentration von über 50 mg NO₃/l bildet hierbei das Zentrum eines Voronoi-Polygons dieser Konzentrationsklasse, die mittlere Größe dieser Polygone beträgt rund 25 km² (Variante HGE separat).

Mit Blick auf die AVV GeA ist weiterhin von Interesse, inwieweit die drei Verfahren zu übereinstimmenden Ergebnissen führen. Die Korrelationen der Nitratkonzentration zwischen IDW und OK betragen für beide Varianten (Bayern gesamt und HGE separat) rund 0,9. Die Koeffizienten zwischen VP und den beiden anderen Verfahren sind mit 0,711 bis 0,848 durchweg geringer (Tab. 5). Die Anzahl deckungsgleicher Raster > 50 mg NO₃/l verdeutlicht die Lagediskrepanzen, die bei der Anwendung unterschiedlicher Verfahren auftreten. Von den Rastern > 50 mg NO₃/l, die mit den drei Verfahren jeweils für Bayern insgesamt interpoliert werden, sind mit IDW und OK nur rund 94 % und mit VP nur 91 % auch deckungsgleich mit den entsprechenden Rastern der Interpolation für HGE separat, für die übrigen Raster wird eine Konzentration von ≤ 50 mg NO₃/l ausgewiesen. Noch geringer fallen die Kongruenzen zwischen den Verfahren aus: nach IDW- und OK-Interpolation sind für Bayern gesamt 1.060 Raster > 50 mg NO₃/l

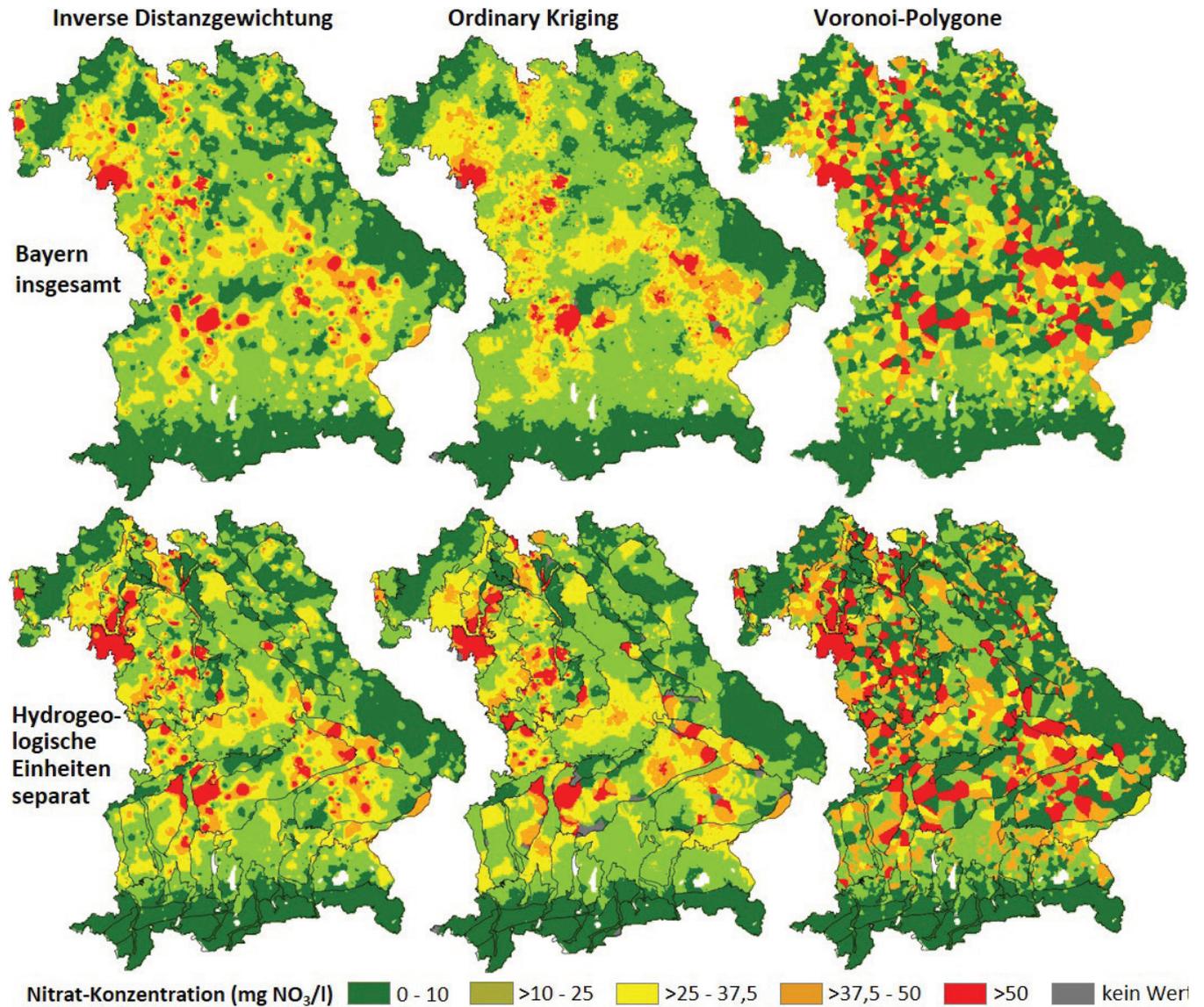


Abbildung 6

Räumliche Verteilung der Nitratkonzentration (5 Klassen) im Grundwasser in Bayern (70.634 Raster, 1 km x 1 km) nach drei Regionalisierungsverfahren (Basis: 5.790 Messstellen), ohne (Bayern insgesamt) und mit Berücksichtigung der HGE-Grenzen (Hydrogeologische Einheiten separat).

Spatial distribution of nitrate concentrations (5 classes) in groundwater in Bavaria (70,634 grids 1 km x 1 km) according to three regionalisation methods (database: 5,790 monitoring sites), without (Bavaria as a whole) and with consideration of the HGE boundaries (hydrogeological units separately).

Verfahren		IDW		OK		VP	
		Bayern insgesamt	HGE separat	Bayern insgesamt	HGE separat	Bayern insgesamt	HGE separat
IDW	Bayern insgesamt		2.048	1.060	1.236	1.993	1.938
	HGE separat	0,923		1.094	1.920	2.389	2.784
OK	Bayern insgesamt	0,903	0,857		1.278	1.249	1.240
	HGE separat	0,812	0,895	0,879		1.836	2.360
VP	Bayern insgesamt	0,831	0,775	0,723	0,668		5.649
	HGE separat	0,786	0,848	0,711	0,760	0,879	

deckungsgleich, bezogen auf die 1.569 Raster $> 50 \text{ mg NO}_3/\text{l}$ nach OK entspricht das nur 68 %. Die Schnittmenge aus allen drei Verfahren und jeweils zwei Varianten umfasst sogar nur 831 Raster $> 50 \text{ mg NO}_3/\text{l}$.

4 Diskussion und Fazit

Der vorliegende Beitrag untersucht die Güte bzw. die Unsicherheiten einer Regionalisierung der Nitratkonzentration im Grundwasser. Im Mittelpunkt steht dabei die Frage, ob bzw. inwieweit die Verfahren IDW, OK und VP geeignet sind, den Flächenumfang und die Lage von "belasteten" Grundwasserarealen zutreffend zu ermitteln. Die Variation der Verfahrensparameter verdeutlicht, dass die Variabilität der interpolierten Nitratkonzentrationen am stärksten von der Position der Stützstellen beeinflusst wird. Eine unterschiedliche Parametrisierung von IDW und OK wirkt sich dagegen (in den hier untersuchten Spannbreiten der Parameter) auf das Ergebnis nur vergleichsweise gering aus. Die Prämisse einer Interpolation mit IDW und OK, dass die Nitratkonzentration an dem zu interpolierenden Punkt den Werten der einbezogenen Messstellen umso ähnlicher ist, je näher die Punkte zueinander liegen, ist für die hier ausgewerteten Messstellen bestenfalls bis zu einer Reichweite von etwa 0,7 km erfüllt. Über diesen Abstand hinaus besteht keine räumliche Korrelation der Messwerte und somit auch nicht für die interpolierten Werte. An das Semivariogramm kann keine Funktion angepasst werden, deren Steigung im Range-Bereich signifikant von Null abweicht, was beispielsweise auch WRIEDT et al. (2019) bei der Regionalisierung der Nitratkonzentration in den norddeutschen Lockergesteinsgebieten mittels OK festgestellt haben. Die Autoren vermuten, dass diese Feststellung für die Grundwassermessnetze in allen Bundesländern gilt. Die Allgemeine Verwaltungsvorschrift zur Ausweisung von mit Nitrat belasteten und eutrophierten Gebieten AVV GeA (2022) setzt für die Anwendung eines geostatistischen Verfahrens voraus, dass ein flächendeckender Mess-Datensatz vorliegt. Mit einer räumlichen Korrelation von Konzentrationswerten im Grundwasser bis zu etwa 0,7 km liegt die Flächenrepräsentativität einer Messstelle in der Größenordnung von rund 2 km². Interpretiert man die Voraussetzung der AVV GeA dahingehend, dass der Mess-Datensatz flächendeckend repräsentativ sein muss, dann würde das allein für die rund 168.000 km² Landwirtschaftsfläche in Deutschland eine Messstellenanzahl in der Größenordnung von mehreren Zehntausend erfordern, für Bayern ergäbe sich ein Bedarf von mindestens 15.000 zusätzlichen Messstellen. Die AVV GeA (2022) lässt die Frage offen, wie zu verfahren ist, wenn die Plausibilität für die Anwendung eines geostatistischen Verfahrens nicht gegeben ist.

Die Kreuzvalidierung der Messstellen zeigt einen MAE zwischen gemessener und interpolierter Konzentration von rund 7,0 mg NO₃/l für IDW und OK sowie von 7,9 mg NO₃/l für VP, die Unsicherheit der Interpolationsverfahren über den gesamten Schätzbereich ist damit auf rund 43 % bzw. 49 % zu beziffern. Im Bereich oberhalb des Mittelwerts werden die interpolierten Konzentrationen von allen drei Verfahren bei der Kreuzvalidierung systematisch unterschätzt. Die Unterschätzung wächst mit zunehmender Konzentration und erreicht im "kritischen" Konzentrationsbereich über 50 mg NO₃/l, im Mittel 28 bis 29 mg NO₃/l. Infolgedessen wird auch die Zahl der Messstellen mit einer Konzentration von über 50 mg NO₃/l zu gering geschätzt, die Interpolation mit IDW vermindert den wahren Wert von 277 auf 154 und mit OK sogar auf nur 122 Messstellen (Variante Bayern

insgesamt). Diese interpolierten Messstellen $> 50 \text{ mg NO}_3/\text{l}$ sind zudem nur zum Teil identisch mit den Messstellen, die auch tatsächlich über dem Grenzwert liegen. Bei der Kreuzvalidierung werden mit IDW rund 45 % und mit OK rund 42 % Messstellen als nitratbelastet interpoliert, die dies eigentlich nicht sind, das heißt, sie werden als "falsch positiv" eingestuft. Noch stärker ausgeprägt zeigt sich dieser Effekt für VP: Die Anzahl der interpolierten Werte $> 50 \text{ mg NO}_3/\text{l}$ liegt zwar mit 222 in der Größenordnung der 277 Messwerte, von diesen 222 sind aber 128 (rund 58 %) Messstellen, deren tatsächliche Konzentration weniger als 50 mg NO₃/l beträgt. Umgekehrt wird für fast zwei Drittel der Messstellen, die tatsächlich mehr als 50 mg NO₃/l aufweisen, mit VP eine "unkritische" Konzentration interpoliert.

Auch bei der flächendeckenden Interpolation mit den drei Verfahren (mit jeweils zwei Varianten: Bayern gesamt und HGE separat; Abb. 6) zeigt sich ein sehr heterogenes Bild bezüglich der Flächenanteile und der räumlichen Verteilungsmuster der Grundwasserareale $> 50 \text{ mg NO}_3/\text{l}$. Je nach Verfahren bzw. Variante werden dafür in Bayern zwischen rund 3 % und fast 10 % der Landesfläche als belastet identifiziert. Für die Landwirtschaftsflächen, die als "rote Gebiete" ausgewiesen werden, reicht die Spanne sogar von rund 3 % bis über 12 % (Tab. 4). An dieser Stelle wird ausdrücklich darauf hingewiesen, dass die Ergebnisse in Bezug auf die Unterschätzung des tatsächlichen Flächenanteils mit einer Konzentration von über 50 mg NO₃/l nicht eins-zu-eins übertragbar sind auf die Abgrenzung von "roten Gebieten" in Bayern, da die durchgeführte flächendeckende Interpolation im Abschnitt 3.4 mit dem Vorgehen der bayerischen Landesverwaltung nur bedingt vergleichbar ist.

Aus der Perspektive eines Landwirtschaftsbetriebs, dessen Fläche bei Anwendung des einen Verfahrens möglicherweise in die Gebietskulisse mit Düngungsbeschränkungen fällt, mit einem anderen Verfahren davon aber nicht betroffen wäre, erscheint das Ergebnis der Ausweisung der "roten Gebiete" daher mit einer gewissen Willkür behaftet. Diejenigen Bundesländer, die in der Vergangenheit bei der Umsetzung der AVV GeA ein deterministisches oder geostatistisches Verfahren verwendet haben, haben (bis auf eine Ausnahme) keine Begründung für die Wahl ihres Verfahrens und dessen jeweilige Parametrisierung gegeben (zumindest nicht öffentlich einsehbar). Nur Mecklenburg-Vorpommern hat seine Entscheidung für das VP-Verfahren auf Basis eines Fachgutachtens (LNUG, 2021) getroffen. Von einem bundeseinheitlichen Vorgehen sind die Bundesländer derzeit (Stand September 2022) offensichtlich weit entfernt. Als weitere Kritikpunkte sind anzuführen, dass in der AVV GeA keine Ausführungen dazu gemacht werden, wie die Messstellen mit einer Konzentration von über 37,5 mg NO₃/l und mit steigendem Trend in die Interpolation eingeführt werden. Ein kategoriales Merkmal wie "steigender Trend" kann mit IDW und OK nicht interpoliert werden. Außerdem fehlen Vorgaben zur Größe bzw. zum Zuschnitt der räumlichen Einheiten, für welche die Interpolation und anschließend die Abgrenzung vorgenommen wird (Feldschläge, Rasterzellen, andere Abgrenzungen?). Auch diese Faktoren beeinflussen das Ergebnis der Gebietsausweisung und wirken sich unmittelbar auf die Betroffenheit der Landwirtschaft aus.

Als Fazit ist aus Sicht der Autoren festzuhalten, dass – in Anbetracht der systematischen Unterschätzung von Arealen mit höheren Nitratkonzentrationen sowie der unzureichenden Lageübereinstimmung zwischen gemessenen und interpolierten

Werten über 50 mg NO₃/l – die drei untersuchten Verfahren für eine statistisch belastbare und problemadäquate Abgrenzung von mit Nitrat belasteten Gebieten nicht geeignet sind. Die Autoren können gegenwärtig allerdings auch keine leistungsfähigere Alternative anbieten. Dies erfordert weitere Untersuchungen, mit welcher Methodik Nitratmesswerte im Grundwasser bestmöglich regionalisiert werden können. Im Rahmen der momentan (Stand September 2022) laufenden Ausweisung von "roten Gebieten" sollte jedoch darauf hingewiesen werden, dass die aktuell abzugrenzenden "roten Gebiete" nur ein Zwischenergebnis darstellen. Zum einen werden bei der in fünf Jahren anstehenden Evaluierung der AVV GeA die derzeit angewendeten Regionalisierungsverfahren gegebenenfalls durch eine andere Methodik abgelöst. Zum anderen müssen spätestens ab dem Jahr 2026 bei der immissionsbasierten Abgrenzung erstmals "denitrifizierende Verhältnisse" im Grundwasser berücksichtigt werden. Beide Faktoren zusammen werden wahrscheinlich eine deutliche Ausweitung und einen erheblich veränderten Zuschnitt der "roten Gebiete" zur Folge haben. Dies sollte nach Meinung der Autoren frühzeitig und offen angesprochen werden, nicht zuletzt, um die Akzeptanz der Landwirtschaft gegenüber der Ausweisung von "roten Gebieten" nicht noch weiter zu beeinträchtigen.

Discussion and Conclusions

Our study examines the accuracy of regionalisation methods for nitrate concentrations in groundwater of Bavaria, Germany. We focus on the suitability of Inverse Distance Weighting (IDW), Ordinary Kriging (OK) and Voronoi (VP) polygons for accurately determining the area and the location of "polluted" groundwater areas (i.e., nitrate concentrations > 50 mg NO₃/l). The IDW and OK interpolation methods are based on the premise that the closer two points are to each other, the more similar the nitrate concentration at the point to be interpolated is to the values of the measured points included. However, this premise is fulfilled for the measuring sites evaluated here in the best case only up to a range of about 0.7 km (Fig. 4). Beyond this distance, there is no spatial correlation of nitrate values between measuring sites and thus also not for interpolated points. No function can be fitted to the semivariogram, whose slope differs significantly from zero within the range. We assume that this finding holds for the groundwater monitoring networks in all federal states in Germany.

With a spatial correlation of concentration values up to about 0.7 km, the spatial representativeness of a monitoring site is about 2 km². The AVV GeA (2022) presupposes for the application of a geostatistical method that an area-wide measurement data set is available. If one interprets this prerequisite that the measurement data set must be representative of the entire area, then a number of measurement points in the order of several tens of thousands for the 168,000 km² of agricultural land in Germany alone is required; the federal state Bavaria would need at least 15,000 additional measuring stations. The AVV GeA (2022) does not tackle the question of how to proceed if the plausibility for the application of a geostatistical method is not given.

The cross-validation of the 5,790 monitoring sites shows a mean absolute error between measured and interpolated concentration of about 7.0 mg NO₃/l for IDW and OK and of 7.9 mg NO₃/l for VP. The uncertainty of the interpolation methods over the entire prediction range can thus be estimated to be around 43% and

49%, respectively (Tab. 3). In the range above 16 mg NO₃/l, the interpolated concentrations are systematically underestimated by all three methods in the cross-validation. The underestimation increases with increasing concentration and reaches an average of approx. 28 to 29 mg NO₃/l in the "critical" concentration range above 50 mg NO₃/l (Fig. 5). As a result, the number of 277 monitoring sites with a concentration > 50 mg NO₃/l is reduced to 154 after interpolation with IDW and to 122 with OK. Moreover, the interpolated monitoring sites > 50 mg NO₃/l are only partly identical with the sites that are actually above 50 mg NO₃/l; with cross-validation, IDW interpolates 70 (approx. 45%) and OK 51 (approx. 42%) monitoring sites as nitrate polluted which are actually not. This effect is even more pronounced for the VP method: the number of interpolated values > 50 mg NO₃/l is 222, which is more in the order of magnitude of the 277 measured values, but 128 (about 58%) of these are measuring points whose actual concentration is less than 50 mg NO₃/l. Conversely, a "non-critical" concentration is interpolated with VP for 183 of 277 monitoring sites (66%) that actually exceed 50 mg NO₃/l.

The state-wide interpolation with the three methods also shows a very heterogeneous picture with regard to the area shares and the spatial patterns of the groundwater areas > 50 mg NO₃/l (Fig. 6). Depending on the method, between about 3% and almost 10% of the land area of Bavaria is interpolated above 50 mg NO₃/l. For the used agricultural area designated as "red zones", this ranges from around 3% to more than 12% (Tab. 4). (Note: our results are not one-to-one comparable to the delineation of "red zones" in Bavaria with regard to the underestimation of the actual share of land > 50 mg NO₃/L, as the methodology used here is only partly comparable with the approach of the Bavarian state administration). From the perspective of a farmer, whose farmland might fall into the zone with fertiliser restrictions if one of the methods is applied, but would not be affected by it with another method, the choice of the regionalisation procedure is of outstanding importance. However, those federal states that applied a deterministic or geostatistical approach when implementing the AVV GeA have (with one exception) not provided any justification for the choice of their method and its parameterisation (at least not documented to the public). Only Mecklenburg-Western Pomerania based its decision for the VP method on an expert report (LNUG, 2021). At present, the federal states are obviously far away from a nationally consistent method, as demanded by the European Commission. Further points of criticism are that the AVV GeA does not specify how monitoring sites with a concentration above 37.5 mg NO₃/l and increasing trend are to be introduced into the method (a categorical item such as "increasing trend" cannot be interpolated with IDW and OK). In addition, specifications are lacking on the size or the shape of the spatial units for which the interpolation and subsequently the delineation is carried out (field plots, grid cells, other units?). All of these factors affect the results of the delineation of nitrate vulnerable zones and have a direct impact on the extent to which agriculture is affected.

We conclude that – in view of the systematic underestimation of higher nitrate concentrations and the poor congruence of measured and interpolated values above 50 mg NO₃/l – the methods are not suitable for an adequate and polluter-addressed delineation of nitrate vulnerable zones. However, the authors cannot currently offer a more efficient alternative. This requires further research on which is the best methodology for regionalising of ni-

trate concentration in groundwater. In the context of the currently ongoing delineation of "red zones", however, we are convinced that it should be pointed out that the "red zones" currently to be delineated represent only an interim situation. On the one hand, when the AVV GeA is evaluated in five years' time, the currently applied regionalisation procedures may be replaced by a different methodology. Secondly, from 2026 at the latest, "denitrifying conditions" in groundwater must be taken into account for the first time in immission-based delineation. Both factors together are likely to result in a significant expansion and a substantially changed location of the "red zones". In the authors' opinion, this should be addressed early and openly, not least in order not to further impair the acceptance of farmers towards the delineation of "red zones".

Datenverfügbarkeit

Die Nitratkonzentrationswerte der 7.735 Messstellen stehen im Datenrepositorium des Deutschen GeoForschungsZentrum GFZ zur Verfügung unter <https://doi.org/10.5880/figeo.2022.033>. Die im Rahmen der Studie erzeugten Datensätze können auf ordnungsgemäße Anfrage von den Verfassern erhalten werden, soweit die Daten öffentlich verfügbar gemacht werden dürfen.

Danksagung

Dem Bayerischen Landesamt für Umwelt ist für die Bereitstellung der Datensätze und die kooperative Unterstützung zu danken. Die Untersuchung wurde teilweise vom Bayerischen Landesamt für Umwelt (Az. 91-0270-93178/2021) und dem Umweltbundesamt (FKZ 3718 72 2180) gefördert.

Supplementband

Ergänzende Information können online abgerufen werden unter <http://dx.doi.org/10.22029/jlupub-7722>.

Anschriften der Verfasser

Paul L. Ohlert
Dr. Martin Bach
Prof. Dr. Lutz Breuer
Justus-Liebig-Universität Gießen
Institut für Landschaftsökologie und Ressourcenmanagement
Heinrich-Buff-Ring 26
35392 Gießen
paul.l.ohlert@en.uni-giessen.de
martin.bach@umwelt.uni-giessen.de
lutz.breuer@umwelt.uni-giessen.de

Literaturverzeichnis

- AVV GeA (2022): Allgemeine Verwaltungsvorschrift zur Ausweisung von mit Nitrat belasteten und eutrophierten Gebieten. Neufassung, Bundesratsbeschluss vom 8. Juli 2022, Bundesrat Drucksache 275/22.
- AURENHAMMER, F. & R. KLEIN (2000): Voronoi Diagrams. In: J.R. SACH & J. URRUTIA (ed.), Handbook of computational geometry, Chapter 5. Elsevier, 201-283.
- BABAK, O. & C.V. DEUTSCH (2009). Statistical approach to inverse distance interpolation. *Stoch. Environ. Res. Risk Assess.* 23, 543–553. DOI: 10.1007/s00477-008-0226-6.
- BACH, M., L. KNOLL, U. HÄUBERMANN & L. BREUER (2020): Nitratbelastung des Grundwassers in Deutschland – Ist das Messnetz schuld? *WasserWirtschaft* 06/2020, 12-17.
- BKG (2018): Geographische Gitter für Deutschland – GeoGitter. Bundesamt f. Kartographie und Geodäsie (BKG).
- BKG (2019): Digitales Landbedeckungsmodell für Deutschland – LBM-DE2018. Dokumentation. Bundesamt für Kartographie und Geodäsie (BKG).
- BLÖSCHL, G. (2006): Geostatistische Methoden bei der hydrogeologischen Regionalisierung. *Wiener Mitteilungen* Band 197, 21-39.
- CHARIZOPOULOS, N., E. ZAGANA & A. PSILOVIKOS (2018): Assessment of natural and anthropogenic impacts in groundwater, utilizing multivariate statistical analysis and inverse distance weighted interpolation modeling: the case of a Scopia basin (Central Greece). *Environmental Earth Sciences* 77:380, 18 pp. DOI: 10.1007/s12665-018-7564-6.
- ELUMALAI, V., K. BRINDHA, B. SITHOEL & E. LAKSHMANAN (2017): Spatial interpolation methods and geostatistics for mapping groundwater contamination in a coastal area. *Environ. Sci. Pollut. Res.* 24, 11601–11617. DOI: 10.1007/s11356-017-8681-6.
- HINTERDING, A., A. MÜLLER, N. GERLACH & F. GABEL (2003): Geostatistische und statistische Methoden und Auswerteverfahren für Geodaten mit Punkt- bzw. Flächenbezug. Abschlussbericht. Bundesländer-Arbeitsgemeinschaft Bodenschutz (LABO).
- KNOLL, L., L. BREUER & M. BACH (2020): Nation-wide estimation of groundwater redox conditions and nitrate concentrations through machine learning. *Environ. Res. Lett.* 15, 064004. DOI: 10.1088/1748-9326/ab7d5c.
- LI, J. & A.D. HEAP (2008): A Review of Spatial Interpolation Methods for Environment Scientists. *Geoscience Australia Record* 2008/23, Canberra, 137 pp.
- LFU (2009): Hydrogeologische Karte von Bayern 1:500 000 (HK500). Bayerisches Landesamt für Umwelt (LFU).
- LFU (2021): Abgrenzung der Grundwasserkörper in Bayern. Bayerisches Landesamt für Umwelt (LFU) (unpublished).
- LNUG (2021): Identifizierung eines Regionalisierungsverfahrens zur Bewertung des chemischen Zustands von Grundwasserkörpern nach Grundwasserverordnung (GrwV) und Anwendung des Verfahrens in M-V. Abschlussbericht. Landesamt für Umwelt, Naturschutz und Geologie (LNUG) Mecklenburg-Vorpommern.
- MUELLER, T.G., N.B. PUSULURI, K.K. MATHIAS, et al. (2004): Map Quality for Ordinary Kriging and Inverse Distance Weighted Interpolation. *Soil Sci. Soc. Am. J.* 68, 2042-2047. DOI: 10.2136/sssaj2004.2042.
- MUKHERJEE, I. & U.K. SINGH (2021): Characterization of groundwater nitrate exposure using Monte Carlo and Sobol sensitivity approaches in the diverse aquifer systems of an agricultural semiarid region of Lower Ganga Basin, India. *Sci. Total Environ.* 787, 147657. DOI: 10.1016/j.scitotenv.2021.147657.
- OHLERT, P.L., M. BACH & L. BREUER (2022): Accuracy assessment of Inverse Distance Weighting interpolation of groundwater nitrate concentrations in Bavaria (Germany). *Environ. Sci. Poll. Res.* DOI: 10.1007/s11356-022-22670-0.
- OHMER, M., T. LIESCH, N. GOEPPERT & N. GOLDSCHIEDER (2017): On the optimal selection of interpolation methods for groundwater contouring: An example of propagation of uncertainty regarding inter-aquifer exchange. *Adv. Water Res.* 109, 121–132. DOI: 10.1016/j.advwatres.2017.08.016.
- TABANDEH, S.M., M. KHOLGHI & S.A. HOSSEINI (2021): Groundwater quality assessment in two shallow aquifers with different hydrogeological characteristics (case study: Lenjanat and Babol–Amol aquifers in Iran). *Environ. Earth Sci.* 80, 427. DOI: 10.1007/s12665-021-09690-8.
- WRIEDT, G., D. DE VRIES, T. EDEN & C. FEDEROLF (2019): Regionalisierte Darstellung der Nitratbelastung im Grundwasser Niedersachsens. *Grundwasser – Z. Fachsektion Hydrogeologie*. DOI: 10.1007/s00767-019-00415-0.

- VAROUCHAKIS, E.A. & D.T. HRISTOPULOS (2013): Comparison of stochastic and deterministic methods for mapping groundwater level spatial variability in sparsely monitored basins. *Environ. Monit. Assess.* 185(1), 1-19. DOI: 10.1007/s10661-012-2527-y.
- XIE, Y., T.B. CHEN, M. LEI, J. YANG, Q.J. GUO, B. SONG & X.Y. ZHOU (2011): Spatial distribution of soil heavy metal pollution estimated by different interpolation methods: accuracy and uncertainty analysis. *Chemosphere* 82(3), 468-476. DOI: 10.1016/j.chemosphere.2010.09.053.
- ZIMMERMAN, D., C. PAVLIK, A. RUGGLES & M.P. ARMSTRONG (1999): An Experimental Comparison of Ordinary and Universal Kriging and Inverse Distance Weighting. *Math. Geol.* 31(4), 375-390. DOI: 10.1023/A:1007586507433.
- ZIRAKBASH, T., R. ADMIRAAL, A. BORONINA, M. ANDA & P.A. BAHRI (2020): Assessing Interpolation Methods for Accuracy of Design Groundwater Levels for Civil Projects. *J. Hydrol. Eng.* 25(9), 04020042. DOI: 10.1061/(ASCE)HE.1943-5584.0001982.