

Schadstoffmuster in der regionalen Grundwasserkontamination der mitteldeutschen Industrie- und Bergbauregion Bitterfeld-Wolfen

Dissertation
zur Erlangung des akademischen Grades
doctor rerum naturalium (Dr. rer. nat.)

vorgelegt der
Mathematisch-Naturwissenschaftlich-Technischen Fakultät
(mathematisch-naturwissenschaftlicher Bereich)
der Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg

von

Annegret H. Thieken

geboren am 26. Januar 1970 in Cloppenburg

Gutachter/in:

1. Prof. Dr. Peter Wycisk
2. Prof. Dr. Bernd Diekkrüger
3. Prof. Dr. Maria-Theresia Schafmeister

Halle (Saale), verteidigt am 17.12.2001

urn:nbn:de:gbv:3-000003928

[<http://nbn-resolving.de/urn/resolver.pl?urn=nbn%3Ade%3Agbv%3A3-000003928>]

Danksagung

"Die meisten Künstler und Künstlerinnen wissen, dass ihnen ohne eine Reihe anderer Menschen ein bestimmtes Kunstwerk nie gelungen wäre."

Velma Wallis

Was für die Kunst gilt, trifft auch auf die Wissenschaft zu. Eine Dissertation braucht Unterstützung: materielle, geistige und moralische.

Diese Dissertation habe ich während meiner Tätigkeit als wissenschaftliche Mitarbeiterin am Institut für geologische Wissenschaften der Universität Halle begonnen und am Geo-ForschungsZentrum Potsdam abgeschlossen. Inhaltlich war die vorliegende Arbeit an das BMBF-Forschungsvorhaben "Sanierungsforschung in regional kontaminierten Aquiferen" (SAFIRA), Teilprojekt E 1.1 "Umwelt- und Raumverträglichkeit", im Fachgebiet Umweltgeologie der Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg angebunden. Für die finanzielle und materielle Unterstützung möchte ich allen beteiligten Institutionen danken.

Für die Bereitstellung der Daten möchte ich mich beim Landratsamt Bitterfeld und beim Ökologischen Großprojekt Bitterfeld-Wolfen im Regierungspräsidium Dessau herzlich bedanken. Hier gilt mein besonderer Dank Herrn Dr. Fred Walkow.

Herrn Prof. Dr. Peter Wycisk möchte ich für seinen Einsatz, diese Arbeit zu ermöglichen, danken. Herrn Prof. Dr. Bernd Diekkrüger und Frau Prof. Dr. Maria-Theresia Schafmeister bin ich für die zügige und engagierte Begutachtung der Arbeit sehr dankbar.

Ganz besonders bedanke ich mich bei Dr. Maximilian Köhne, Dipl.-Geol. Silke Köppen, Dipl.-Geoökol. Meike Müller und Dipl.-Geoökol. Ralf Nießen für die kritische Durchsicht des Manuskriptes und für viele wertvolle Hinweise.

Abschließend möchte ich zahlreichen Menschen aus meinem familiären, privaten und kollektiven Umfeld meinen allerherzlichsten Dank ausdrücken. Sie wurden nicht müde, mich durch Diskussionen, kritische Bemerkungen, aufmunternde Worte, Verständnis, Unterstützung und viele kleine Aufmerksamkeit immer wieder zu motivieren, dieses Werk zu vollenden. Ihre Liste würde diese Seite sicher füllen. Nochmals vielen Dank!

Annegret Thieken, 30. Juli 2001

Erklärung

Hiermit erkläre ich, die vorliegende Arbeit selbständig und ohne fremde Hilfe verfasst und keine anderen als die angegebenen Hilfsmittel verwendet zu haben. Den benutzten Werken wörtlich oder inhaltlich entnommene Stellen sind als solche gekennzeichnet.

Potsdam, 30. Juli 2001

Annegret Thieken

Inhaltsverzeichnis

1	Einführung und Grundlagen	1
1.1	Regionale Grundwasserkontaminationen im Raum Bitterfeld-Wolfen: Problemstellung und Zielsetzung	1
1.2	Strukturierung multivariater Umweltdaten	3
1.2.1	Rankingverfahren: Strukturieren durch Generalisieren und Ordnen	3
1.2.2	Statistische Strukturanalysen	5
1.3	Untersuchungsstrategie	8
2	Das Untersuchungsgebiet: die Region Bitterfeld-Wolfen	11
2.1	Lage und Landschaftsgliederung	11
2.2	Geologie und Hydrogeologie	13
2.3	Entwicklung und Umweltfolgewirkungen von Bergbau und Chemieindustrie	16
2.3.1	Entwicklung des Braunkohlenbergbaus	17
2.3.2	Einflüsse des Bergbaus auf die geologischen und hydrogeologischen Verhältnisse	18
2.3.3	Entwicklung und Produktion der chemischen Industrie	20
2.3.4	Stoffliche Belastungen der Umwelt	25
3	Datenmaterial und Methoden der Datenanalyse	29
3.1	Grundwassermonitoringdaten: Datenmaterial und Datenhaltung	29
3.1.1	Charakterisierung und Konsolidierung der verwendeten Datenbestände	30
3.1.2	Datenhaltung: Entwurf und Implementierung eines Datenbankschemas	35
3.1.3	Auswahl von Teildatensätzen für die Datenanalyse	37
3.1.4	Beurteilung der Datenqualität	38
3.2	Daten zum Umweltverhalten und zur Abbaubarkeit der Stoffe	40
3.3	Methoden der Datenanalyse	44
3.3.1	Messniveaus, Datentransformation und Anwendbarkeit von Verfahren	44
3.3.2	Bestimmung von Kontaminationskriterien und Kontaminationsprofilen	46
3.3.3	Hasse-Diagramm-Technik	48
3.3.4	Korrelationsanalysen	48
3.3.5	Hauptkomponentenanalyse	50
3.3.6	Clusteranalysen	53
4	Ranking von organischen Schadstoffen: Ergebnisse und Diskussion	59
4.1	Durchschnittliche Kontaminationskriterien (1991-1998)	59
4.1.1	Vergleichsdatensätze	59
4.1.2	Kontaminationskriterium "Emissions-Nachweishäufigkeit"	60
4.1.3	Kontaminationskriterium "Mittlere Emissionskonzentration"	63
4.1.4	Ranking der Kontaminationskriterien am Beispiel der leichtflüchtigen halogenierten Kohlenwasserstoffe (LHKW)	66

4.1.5	Stoffgruppenübergreifendes Ranking: Durchschnittliche Kontaminationsprofile, Cluster und Hasse-Diagramme für Bitterfeld-Wolfen.....	69
4.1.6	Klassifizierung der untersuchten Stoffgruppen nach ihrem Umweltverhalten.....	73
4.2	Räumlich und zeitlich differenzierte Kontaminationskriterien.....	75
4.2.1	Flächenhafte Differenzierung der Kontaminationskriterien zur Bestimmung der lokalen und regionalen Relevanz von Stoffen.....	75
4.2.2	Nach Grundwasserleitern differenzierte Kontaminationskriterien.....	77
4.2.3	Zeitlich differenzierte Kontaminationsprofile für 1996 und 1997	79
4.2.4	Zusammenfassende Bewertung der verschiedenen Einflussfaktoren und Ableitung der wichtigsten Stoffgruppen und Einzelstoffe	81
4.3	Diskussion.....	83
5	Statistische Strukturanalyse: Ergebnisse und Diskussion	91
5.1	Stoffgruppenübergreifende summarische Betrachtung.....	91
5.1.1	Korrelationsanalysen	92
5.1.2	Hauptkomponentenanalysen	93
5.1.3	Stabilität der Kontaminationsfaktoren.....	97
5.1.4	Räumliche Muster der Kontaminationsfaktoren (Clusteranalysen)	99
5.1.5	Interpretation und Diskussion der Kontaminationsfaktoren	102
5.2	Stoffgruppenübergreifende Analyse ausgewählter Einzelstoffe	103
5.2.1	Korrelationsanalysen	104
5.2.2	Hauptkomponentenanalysen	104
5.2.3	Stabilität der Kontaminationsfaktoren.....	108
5.2.4	Räumliche Muster der Kontaminationsfaktoren (Clusteranalysen)	109
5.2.5	Interpretation und Diskussion der Kontaminationsfaktoren	113
5.3	Analyse von leichtflüchtigen halogenierten Kohlenwasserstoffen	114
5.3.1	Korrelationsanalysen	114
5.3.2	Hauptkomponentenanalysen	115
5.3.3	Stabilität der Kontaminationsfaktoren.....	118
5.3.4	Räumliche Muster der Kontaminationsfaktoren (Clusteranalysen)	121
5.3.5	Einfluss des Messniveaus der Originaldaten auf die Ergebnisse der Clusteranalyse.....	125
5.3.6	Interpretation und Diskussion der Kontaminationsfaktoren	132
5.4	Diskussion der eingesetzten Methoden	134
6	Schlussfolgerungen und Ausblick	137
Zusammenfassung		141
Literaturverzeichnis.....		145
Anhang		

Abbildungsverzeichnis

Abbildung 1.1: Visualisierung der partiellen Ordnung der fünf Objekte A, B, C, D und E, die durch die Kriterien K1 und K2 charakterisiert werden.	5
Abbildung 1.2: Untersuchungsstrategie zur Strukturierung der organischen Verunreinigungen in der regionalen Grundwasserbelastung in Bitterfeld-Wolfen.....	9
Abbildung 2.1: Lage und Landschaftsgliederung des Untersuchungsgebietes sowie die Grundwassergleichen im Herbst 1996 nach Angaben der GFE (1996)..	11
Abbildung 2.2: Geologischer Übersichtsschnitt in Bitterfeld (aus: Ruske et al., 1999).....	14
Abbildung 2.3: Braunkohlenförderung im Bitterfelder Revier (zusammengestellt aus: Liehmann, 1993, 1996; Bitterfelder Bergleute e.V., 1998).....	18
Abbildung 2.4: Formen anthropogener Umlagerung im Raum Bitterfeld (aus: Burchardt & Strobel, 1992).....	19
Abbildung 2.5: Stufen der Anwendungsmuster von Chemikalien (verändert nach: Parlar & Angerhöfer, 1995).....	22
Abbildung 2.6: Produktion von technischem HCH und Lindan im Chemiekombinat Bitterfeld (CKB) und in der DDR insgesamt (Datenquelle: Heinisch, 1992).	24
Abbildung 2.7: Boden- und Grundwasserbelastungen auf dem Werksgelände der Chemie AG Bitterfeld-Wolfen (aus: MUN, 1994).	26
Abbildung 3.1: Messstellen mit Filterstrecken im quartären (GWL100) und tertiären (GWL500) Grundwasserleiter im Untersuchungsgebiet.	31
Abbildung 3.2: Beprobungshäufigkeit der 377 Grundwassermessstellen von 1991 bis 1998.....	33
Abbildung 3.3: Entitäten-Relationen-Modell für ein Grundwassermonitoring (Entitäten sind als Rechtecke dargestellt, Relationen als Rauten).	36
Abbildung 3.4: Verknüpfung von Tabellen in MS Access.	36
Abbildung 3.5: Reaktive Halbwertszeiten von Stoffen im Grundwasser (Angaben in Jahren), Datenquelle: Caltox-Datenbank (Scheringer, 1997).	40
Abbildung 3.6: Abbauwege von Tetrachlormethan, Trichlormethan und Dichlormethan (nach Angaben in: Rippen, 1987-1998; Devlin & Müller, 1999).....	41
Abbildung 3.7: Abbauwege von chlorierten Ethanen und Ethenen (zusammengestellt aus: Rippen, 1987-1998; Wittsiepe, 1993).	42
Abbildung 3.8: Abbaureaktionen für die vollständige Mineralisierung von BTEX-Aromaten mit verschiedenen Oxidationsmitteln am Beispiel des Benzens (aus: Wisotzky & Eckert, 1997).....	42
Abbildung 3.9: Abbauwege der Chlorbenzene (zusammengestellt aus: Rippen, 1987-1998).	43
Abbildung 3.10: Abbauwege von DDT in wässriger Phase (aus: Heberer & Dünnbier, 1999).	44
Abbildung 3.11: A: Graphische Darstellung eines standardisierten Datensatzes aus 16 Objekten und den Eigenschaften E_1 und E_2 mit Schwerpunkt und Hauptachsen. B: Varimax-Rotation der Hauptkomponentenmatrix (aus: Hartung & Elpelt, 1999).	51

Abbildung 3.12: Bestimmung der Distanz zwischen den Clustern C_u und C_t mit den Verfahren Average Linkage between Groups, Single Linkage und Complete Linkage (nach: Kaufman & Rousseeuw, 1990; Hartung & Elpelt, 1999).	55
Abbildung 3.13: Exemplarische Ergebnisse von Clusteranalysen. A) Dendrogramm einer hierarchischen Analyse. B) Partition aus einer Clusterzentrenanalyse.	56
Abbildung 4.1: Die 25 häufigsten Stoffe im Datensatz 9198M.	61
Abbildung 4.2: Stoffreihung nach dem Median der nachgewiesenen Konzentrationen für die ersten 25 Stoffe im Datensatz 9198M.	64
Abbildung 4.3: Permutationsdiagramm mit den Kontaminationskriterien Emissions-Nachweishäufigkeit und mittlere Emissionskonzentration für die Gruppe der LHKW im Datensatz 9198M.	67
Abbildung 4.4: Dendrogramm der Clusteranalyse mit den Bewertungszahlen für die Emissions-Nachweishäufigkeiten und mittleren Emissionskonzentrationen der LHKW im Datensatz 9198M (Methode: quadrierte euklidische Distanz, Ward-Algorithmus).....	67
Abbildung 4.5: Hasse-Diagramm mit den Emissions-Nachweishäufigkeiten und mittleren Emissionskonzentrationen der LHKW im Datensatz 9198M. A: Einzelstoffe B: Clustermittelwerte für die 3 Clusterlösung aus Abbildung 4.4.....	68
Abbildung 4.6: Hasse-Diagramme mit den Kontaminationskriterien Emissions-Nachweishäufigkeit und mittlere Emissionskonzentration aus dem Datensatz 9198M. A: Einzelstoffe, B: Clusterzentren aus Tabelle 4.7.....	72
Abbildung 4.7: Dendrogramm der Clusteranalyse mit physikochemischen Parametern.	74
Abbildung 4.8: Räumliche Verbreitung der Einzelstoffe (als Rauten dargestellt) und Stoffgruppen (Kreise) im Datensatz 9198M.....	77
Abbildung 5.1: Faktorladungen und Faktorwerte der 5-Komponentenlösung der summarischen Merkmale im Datensatz H96.	95
Abbildung 5.2: Entwicklung des Clusterkriteriums der hierarchischen Clusteranalyse mit den Faktorwerten der 5-Komponentenlösung aus Abbildung 5.1 (summarische Merkmale, Datensatz H96, $n = 143$). Verfahren: quadrierte euklidische Distanz, Average Linkage between Groups.....	99
Abbildung 5.3: Verschiedene 6-Clusterlösungen mit den Faktorwerten der 5-Komponentenlösung aus Abbildung 5.1 (summarische Merkmale, Datensatz H96, $n = 143$).....	100
Abbildung 5.4: 6-Clusterlösung (quadrierte euklidische Distanz, Ward-Methode) mit den Faktorwerten der 5-Komponentenlösung aus Abbildung 5.1 (summarische Merkmale, Datensatz H96, $n = 143$). A: Verteilung der Cluster im Untersuchungsgebiet. B: Hasse-Diagramm der Clusterzentren.....	101
Abbildung 5.5: Faktorladungen und Faktorwerte für die 3-Komponentenlösung der Hauptkomponentenanalyse mit zehn ausgewählten Stoffen.	106
Abbildung 5.6: Verschiedene 7-Clusterlösungen für die Faktorwerte aus Abbildung 5.5 (Datensatz H96, $n = 148$, 10 ausgewählte Einzelstoffe).....	109
Abbildung 5.7: Räumliche Anordnung der Cluster (A) und Hasse-Diagramme der Clusterzentren (B) für die Faktorwerte der 3-Komponentenlösung mit zehn Einzelstoffen in den Datensätzen H96 und S97 (vgl. Tabelle 5.8); Verfahren: quadrierte euklidische Distanz, Ward-Methode.	110
Abbildung 5.8: 7-Clusterlösung der Faktorwerte der 6-Komponentenlösung mit zehn Einzelstoffen sowie Vor-Ort- und Summenparametern (Tabelle 5.7, Datensatz H96, n	

= 143), Verfahren: quadrierte euklidische Distanz, Ward-Methode. A: räumliche Anordnung der Cluster. B: Hasse-Diagramm der Clusterzentren.....	112
Abbildung 5.9: Screeplot der Eigenwerte aus der Hauptkomponentenanalyse mit zehn LHKW (Datensatz H96, log-transformierte Werte, n = 198).....	116
Abbildung 5.10: Faktorwerte der 2-Komponentenlösung mit zehn LHKW im Herbst 1996.....	117
Abbildung 5.11: Faktorladungen für die 2-Komponentenlösung der LHKW unter Verwendung der verschiedenen Datensätze aus Tabelle 5.13 mit log-transformierten Werten (A) und Rangzahlen (B).....	120
Abbildung 5.12: 6-Clusterlösung für die Faktorwerte der 2-Komponentenlösung der LHKW aus Tabelle 5.11 (Datensatz H96, n = 198).....	121
Abbildung 5.13: 6-Clusterlösung (quadrierte euklidische Distanz, Ward-Methode) der Faktorwerte der 2-Komponentenlösung mit den LHKW (Datensatz H96, n = 198): A: Räumliche Verteilung der Cluster. B: Hasse-Diagramm der Clusterzentren.	123
Abbildung 5.14: 6-Clusterlösung (quadrierte euklidische Distanz, Ward-Methode) der Faktorwerte der 2-Komponentenlösung mit den LHKW (Datensatz S97, n = 207): A: Räumliche Verteilung der Cluster. B: Hasse-Diagramm der Clusterzentren.	123
Abbildung 5.15: Redoxvermögen (rH-Werte) in den Datensätzen H96 (A) und S97 (B).....	124
Abbildung 5.16: Räumliches Muster der 5-Clusterlösung mit binären Daten der LHKW (RG = NWG); Verfahren: Einfache Übereinstimmung (EÜ), Average Linkage between Groups (AL).	126
Abbildung 5.17: 5-Clusterlösung mit den Rangzahlen der LHKW im Herbst 1996 und im Sommer 1997 (Verfahren: euklidische Distanz, Average Linkage between Groups)	128
Abbildung 5.18: 5-Clusterlösung der logarithmierten und z-transformierten LHKW im Herbst 1996 und im Sommer 1997. Verfahren: quadrierte euklidische Distanz (QED), Ward-Methode (WA).....	130
Abbildung 5.19: 5-Clusterlösung (quadrierte euklidische Distanz, Ward-Methode) mit den Faktorwerten der 2-Komponentenlösung der LHKW im Herbst 1996 und im Sommer 1997.....	131

Tabellenverzeichnis

Tabelle 2.1: Landschaftseinheiten nach Krönert (1997) und Teilgebiete im Untersuchungsgebiet (vgl. Abbildung 2.1).....	12
Tabelle 2.2: Produktionsschwerpunkte der Chemischen Betriebe (vor 1945) (aus: Plumpe, 1990; Albrecht & Kretschmer, 1993; Hentzsch, 1996; Finger, 1996).....	21
Tabelle 2.3: Chlorproduktion und Cl ₂ -Gesamtemissionen des Chemiekombinats Bitterfeld (aus: Emissionsbericht des CKB 1989, zitiert in Heinisch, 1992).	24
Tabelle 2.4: Zusammensetzung des technischen DDT-Gemisches (nach Perkow 1968, zitiert in Heinisch, 1992).	24
Tabelle 2.5: Zusammensetzung von technischem HCH (aus: Heinisch, 1992).....	24
Tabelle 2.6: Emissionen ausgewählter Luftschadstoffe in 1000 t/a im ChemiePark Bitterfeld (aus: Umweltreport Bitterfeld 1996, zitiert in Dühr, 1999).	25
Tabelle 2.7: Entwicklung der Schadstofffrachten in der Mulde von 1989 bis 1991 (aus: Kompa & Maczey, 1992).....	26
Tabelle 2.8: Wesentliche Altablagerungen und Deponien im Kreis Bitterfeld (aus: Köhler et al., 1992).	27
Tabelle 3.1: Inkonsistenzen, Redundanzen und Fehlerquellen in den vorliegenden Datenbeständen.	30
Tabelle 3.2: Übersicht der Beprobungskampagnen vom Landkreis Bitterfeld (LK) und dem Ökologischen Großprojekt Bitterfeld-Wolfen (ÖGP).	32
Tabelle 3.3: Bewertung des Censorings in einem Datensatz.	34
Tabelle 3.4: Redoxvermögen von Lösungen ausgedrückt als rH-Wert (nach: Hölting, 1996).	34
Tabelle 3.5: Ausgewählte Teildatensätze (Beschreibung und Abkürzung).	37
Tabelle 3.6: Charakteristika und Qualitätsmerkmale der vorliegenden Datenbestände.	39
Tabelle 3.7: Verschiedene Messniveaus und angemessene statistische Verfahren (zusammengestellt nach Siegel, 1987; Kaufman & Rousseeuw, 1990).	46
Tabelle 3.8: Klasseneinteilung der Gesamt-Bewertungszahlen im Kontaminationsprofil.	47
Tabelle 3.9: Vierfelder-Kontingenz-Tabelle	54
Tabelle 4.1: Charakteristika der Untersuchungen in den USA, in Westdeutschland und in Bitterfeld-Wolfen.....	60
Tabelle 4.2: Emissions-Nachweishäufigkeit im Datensatz 9198M mit verschiedenen Relevanzgrenzen sowie in den Datensätzen WD93 und USA8186..	62
Tabelle 4.3: Geringfügigkeitsschwellen sowie Prüf- und Maßnahmenschwel-lenwerte für organische Stoffe/Stoffgruppen bei der Hauptuntersuchung von Grundwasser.....	63
Tabelle 4.4: Mittlere Emissionskonzentrationen der Stoffe im Datensatz 9198M mit verschiedenen Relevanzgrenzen sowie im Datensatz WD93..	65
Tabelle 4.5: Kontaminationsprofil der LHKW aus dem Datensatz 9198M.	66
Tabelle 4.6: Kontaminationsprofil der 63 Stoffe im Datensatz 9198M.	70
Tabelle 4.7: 6-Clusterlösung mit den Bewertungszahlen für die Emissions-Nachweishäufigkeiten und mittleren Emissionskonzentrationen der 63 Stoffe im Datensatz 9198M (Methode: quadrierte euklidische Distanz, Ward-Algorithmus).	71

Tabelle 4.8: Emissions-Nachweishäufigkeiten (ENH, Angaben in %) der Stoffgruppen je Landschaftseinheit (Datensatz 9198M, n = Anzahl der Messstellen).....	75
Tabelle 4.9: Mittlere Emissionskonzentrationen (MEK, Angaben in µg/l) der Stoffgruppen je Landschaftseinheit (Datensatz 9198M, n = Anzahl der Messstellen).....	76
Tabelle 4.10: Kontaminationsprofil der Stoffe mit mehr als 2500 Bewertungspunkten im GWL100 und GWL500 (Datensatz 9198M).....	78
Tabelle 4.11: Änderung der absoluten Ränge und Rangkorrelationen für die Kontaminationskriterien ENH und MEK sowie die Gesamtbewertungszahlen zwischen GWL100 und GWL500 (Datensatz 9198M, Anzahl der Stoffe p = 54).....	78
Tabelle 4.12: Die ersten 15 Stoffe im Kontaminationsprofil der Datensätze H96_(H96∩S97), S97_(H96∩S97) und 9198M.....	80
Tabelle 4.13: Absolute Rangänderungen und Spearman'sche Rangkorrelationskoeffizienten zwischen den Datensätzen H96_(H96∩S97) und S97_(H96∩S97) für ENH, MEK und BZ _{ges}	80
Tabelle 4.14: Spearman'sche Rangkorrelationskoeffizienten r zwischen den Stoffreihenfolgen bezüglich der Emissions-Nachweishäufigkeit (ENH), der mittleren Emissionskonzentration (MEK) und der Gesamtbewertungszahl (BZ _{ges}) in verschiedenen Teildatensätzen.....	82
Tabelle 5.1: Korrelationskoeffizienten nach Pearson zwischen Vor-Ort-Parametern, Summenparametern sowie Summenangaben für LHKW, BTEX-Aromaten, Chlorbenzene und HCH-Isomere.....	92
Tabelle 5.2: Rangkorrelationen zwischen Vor-Ort-Parametern, Summenparametern und den Summenangaben für LHKW, BTEX-Aromaten, Chlorbenzene und HCH-Isomere.....	93
Tabelle 5.3: Eigenwerte, erklärte Gesamtvarianz und Markiertvariablen in den rotierten Komponentenmatrizen (Varimax-Rotation) der summarischen Merkmale (Datensatz H96, n = 143).....	94
Tabelle 5.4: Faktorbildung in Abhängigkeit von der Stichprobe (summarische Merkmale).....	98
Tabelle 5.5: Korrelationsmatrix nach Pearson mit ausgewählten Einzelstoffen und den Summenangaben der LHKW, BTEX-Aromaten, Chlorbenzene und HCH-Isomere.....	104
Tabelle 5.6: Eigenwerte, erklärte Gesamtvarianz und Markiertvariablen für Hauptkomponentenanalysen mit zehn ausgewählten Einzelstoffen (Datensatz H96).....	105
Tabelle 5.7: Kommunalitäten und Faktorladungen in der rotierten Komponentenmatrix mit zehn ausgewählten Einzelstoffen, Vor-Ort- und Summenparametern.....	107
Tabelle 5.8: Kontaminationsfaktoren der zehn ausgewählten Einzelstoffe (log-transformierte Werte) in Abhängigkeit von der Stichprobe.....	108
Tabelle 5.9: Korrelationen nach Pearson zwischen den Einzelstoffen der Stoffgruppe LHKW.....	115
Tabelle 5.10: Rangkorrelationen zwischen den Einzelstoffen der Stoffgruppe LHKW.....	115
Tabelle 5.11: Kommunalitäten und Faktorladungen der rotierten Komponentenmatrix (Varimax-Rotation) mit zwei Hauptkomponenten für die Stoffgruppe LHKW.....	116
Tabelle 5.12: Kommunalitäten und Faktorladungen für LHKW, pH, Eh und AOX (Herbst 1996).....	117
Tabelle 5.13: Anteile der erklärten Gesamtvarianz in Hauptkomponentenanalysen mit zehn LHKW und verschiedenen Datensätzen (Angaben in %).....	118
Tabelle 5.14: Anzahl der Proben pro Cluster und pro Grundwasserleiter in den 6-Clusterlösungen mit Faktorwerten für die LHKW in den Datensätzen H96 und S97.....	122

Tabelle 5.15: Anzahl der möglichen und beobachteten Stoffkombinationen von zehn LHKW.	126
Tabelle 5.16: Nachweise der LHKW pro Cluster in Abbildung 5.16 (Angaben in % pro Cluster).....	126
Tabelle 5.17: Anzahl der Proben der 5-Clusterlösung (einfache Übereinstimmung, Average Linkage between Groups) mit binären Daten der LHKW (RG = NWG) pro Grundwasserleiter.....	127
Tabelle 5.18: Anzahl der Proben pro Cluster (LHKW, Rangzahlen, euklidische Distanz, Average Linkage between Groups) und ihre Zuordnung zu den Grundwasserleitern. ...	129
Tabelle 5.19: Anzahl der Proben pro Cluster (logarithmierte, z-transformierte LHKW, quadrierte euklidische Distanz, Ward-Methode) und ihre Zuordnung zu den Grundwasserleitern.	129
Tabelle 5.20: Anzahl der Messstellen pro Cluster (LHKW, Faktorwerte der 2-Komponentenlösung, quadrierte euklidische Distanz, Ward-Verfahren) und ihre Zugehörigkeit zu den Grundwasserleitern.....	132

Abkürzungsverzeichnis

τ	Rangkorrelationskoeffizient nach Kendall
ρ	Rangkorrelationskoeffizient nach Spearman
1112PCA	1,1,1,2-Tetrachlorethan
111TCA	1,1,1-Trichlorethan
1122PCA	1,1,2,2-Tetrachlorethan
1234TeCB	1,2,3,4-Tetrachlorbenzen
123TCB	1,2,3-Trichlorbenzen
1245TeCB	1,2,4,5- und 1,2,3,5-Tetrachlorbenzen
124TCB	1,2,4-Trichlorbenzen
12DCA	1,2-Dichlorethan
12DCB	1,2-Dichlorbenzen
12X	o-Xylen
135TCB	1,3,5-Trichlorbenzen
13DCB	1,3-Dichlorbenzen
13X	m-Xylen
14DCB	1,4-Dichlorbenzen
14X	p-Xylen
23DCNB	2,3-Dichlornitrobenzen
246TCP	2,4,6-Trichlorphenol
24DCNB	2,4-Dichlornitrobenzen
24DCP	2,4-Dichlorphenol
24DNP	2,4-Dinitrophenol
25DCNB	2,5-Dichlornitrobenzen
2CA	o-Chloranilin
2CNB	o-Nitrochlorbenzen
2CP	2-Chlorphenol
2NP	2-Nitrophenol
3N4CP	4-Chlor-3-Nitrophenol
4CA	p-Chloranilin
4CNB	p-Nitrochlorbenzen
4CP	4-Chlorphenol
4N2CP	2-Chlor-4-Nitrophenol
4NP	4-Nitrophenol
6N2CP	2-Chlor-6-Nitrophenol
AGFA	Aktiengesellschaft für Anilinfarben zu Berlin
aHCH	alpha-HCH
AL	Average Linkage between Groups
AOX	adsorbierbare organische Halogenverbindungen
B	Benzen
bHCH	beta-HCH
BKW	Braunkohlenwerk
BMBF	Bundesministerium für Bildung und Forschung
BSB	biologischer Sauerstoffbedarf
BTEX	Benzen, Toluol, Ethylbenzen und Xylene (BTEX-Aromaten)

Abkürzungsverzeichnis

BVV	Bitterfelder Vermögensverwaltung Chemie GmbH
BZ	Bewertungszahl
BZ-ENH	Bewertungszahl für die Emissions-Nachweishäufigkeit
BZ _{ges}	Gesamt-Bewertungszahl, $BZ_{ges} = BZ-ENH \cdot BZ-MEK$
BZ-MEK	Bewertungszahl für die mittlere Emissionskonzentration
CA	Chloraniline
CAG	Chemie AG Bitterfeld-Wolfen
CB	Chlorbenzene
CFGE	Chemische Fabrik Griesheim-Elektron
cis12DCE	cis 1,2-Dichlorethen
CKB	VEB Chemiekombinat Bitterfeld
CP	Chlorphenole
CSB	chemischer Sauerstoffbedarf
DCM	Dichlormethan
DDD	1,1-Dichlor-2,2-bis-(4-chlorphenyl)-ethan
DDE	1,1,-Bis-(4-chlorphenyl)-2,2-dichlorethen
DDT	1,1,1-Trichlor-2,2-bis-(p-Chlorphenyl)-ethan
DDT/D/E	DDT-, DDD- und DDE-Isomere
dHCH	delta-HCH
DIM	Dimethoat
DOC	dissolved organic carbon (gelöster organischer Kohlenstoff)
EB	Ethylbenzen
ED	euklidische Distanz
Eh	Redoxpotenzial, bezogen auf die Wasserstoffelektrode bei 25 °C
E _j	Eigenschaft j, j = 1...p
EKB	Elektrochemisches Kombinat Bitterfeld
ENH	Emissions-Nachweishäufigkeit [%]
ER-Modell	Entitäten-Relationen-Modell
gHCH	gamma-HCH (Lindan)
GOK	Geländeoberkante
GWL	Grundwasserleiter
GWL100	quartärer Grundwasserleiter
GWL500	tertiärer Grundwasserleiter (Bitterfelder Glimmersande)
GWL800	tertiärer Grundwasserleiter (Eozäne Sande)
HCB	Hexachlorbenzen
HCH	Hexachlorcyclohexan (alle Isomere)
HDT	Hasse-Diagramm-Technik
HK	Hauptkomponente
HKA	Hauptkomponentenanalyse
IG Farben	Interessengemeinschaft Farbenindustrie Aktiengesellschaft
k _f	gesättigte hydraulische Leitfähigkeit [m/s]
KM	k-means (Clusterzentrenanalyse)
K _{ow}	Oktanol-Wasser-Verteilungskoeffizient
LBT	Leuchtbakterientest
Lf	Leitfähigkeit
LHKW	leichtflüchtige halogenierte Kohlenwasserstoffe (halogenierte Methane, Ethane und Ethene)
LK	Landkreis Bitterfeld
LMBV	Lausitzer und Mitteldeutsche Bergbau Verwaltungsgesellschaft mbH

X

MCB	Monochlorbenzen
MeCP	4-Chlor-3-Methylphenol
MeDNP	4,6-Dinitro-2-methylphenol
MEK	mittlere Emissionskonzentration, gemessen durch den Median der nachgewiesenen Konzentrationen [$\mu\text{g}/\text{l}$]
MKZ	Messstellenkennzeichen
n	Anzahl der untersuchten Objekte
NCB	Nitrochlorbenzene
NCP	Nitrochlorphenole
NP	Nitrophenole
NWG	analytische Nachweisgrenze
O ₂	Sauerstoff
ODBC	Open Data Base Connectivity
ÖGP	Ökologisches Großprojekt Bitterfeld-Wolfen
O _i	Objekt i, i = 1...n
opDDD	o,p-DDD
opDDE	o,p-DDE
opDDT	o,p-DDT
ORWO	ORiginal WOlfen
p	Anzahl der untersuchten Eigenschaften
PAK	polyzyklische, aromatische Kohlenwasserstoffe
PCB	Pentachlorbenzen
PCE	Tetrachlorethen
PCP	Pentachlorphenol
PI	Phenolindex
ppDDD	p,p-DDD
ppDDE	p,p-DDE
ppDDT	p,p-DDT
PTM	Parathionmethyl
PVC	Polyvinylchlorid
QED	quadrierte euklidische Distanz
RG	Relevanzgrenze (entspricht i.d.R. der analytischen Nachweisgrenze)
rH	Redoxvermögen einer Wasserprobe
ROK	Rohroberkante (einer Grundwassermessstelle)
SAFIRA	Sanierungsforschung in regional kontaminierten Aquiferen
Sal	Salinität
T	Wassertemperatur
TCE	Trichlorethen
TCM	Trichlormethan
TCNB	2,3,4-Trichlornitrobenzen
TeCM	Tetrachlormethan
TeCNB	2,3,5,6-Tetrachlornitrobenzen
To	Toluen
TOC	total organic carbon (gesamter organischer Kohlenstoff)
trans12DCE	trans 1,2-Dichlorethen
VC	Vinylchlorid
VEB	Volkseigener Betrieb
WA	Ward's Methode (Clusteranalyse)
WVV	Wolfener Vermögensverwaltung Chemie GmbH

1 Einführung und Grundlagen

1.1 Regionale Grundwasserkontaminationen im Raum Bitterfeld-Wolfen: Problemstellung und Zielsetzung

Mit zahlreichen Braunkohlentagebauen und den drei großen Chemiestandorten Bitterfeld-Wolfen, Leuna und Buna lag in Mitteldeutschland zwischen Bitterfeld, Halle und Leipzig das industrielle Zentrum der ehemaligen DDR: das "Chemiedreieck". Die Karbochemie ging mit einer unzureichenden Reinigung und Entsorgung von Abfällen, Abwässern und Abluft einher und verursachte daher schwere Umweltschäden. Da in der DDR ab 1982 alle Umweltdaten zur "vertraulichen Verschlussache" erklärt wurden, wurde der Öffentlichkeit das Ausmaß der Verschmutzungen von Wasser, Luft und Boden erst nach der politischen Wende 1989/90 bekannt (vgl. Heinisch, 1992). Besondere Aufmerksamkeit erhielt die als hoch belastet eingestufte Industrieregion Bitterfeld-Wolfen, deren regional mit organischen Substanzen verunreinigtes Grundwasser auch im Mittelpunkt der vorliegenden Arbeit steht.

In Bitterfeld-Wolfen wurde von 1839 bis 1993 Braunkohle im Tagebau gefördert; seit 1893 ist Chemieindustrie in der Region ansässig. Beide Industriezweige sind eng miteinander verzahnt: Die Braunkohle war die wichtigste Energiequelle für die Chemiebetriebe. Andererseits wurden viele Tagebaurestlöcher nach Beendigung der Braunkohlenförderung zur Deponierung von Abfallstoffen der chemischen Industrie genutzt (MUN, 1994). Auf diese Weise entstanden im Raum Bitterfeld-Wolfen ca. 20 Altablagerungen mit einem Deponieinventar von über 50 Mio. t Abfall (Lindemann, 2000). Zum Teil standen bzw. stehen diese Deponien im direkten Kontakt mit dem Grundwasser, wodurch kontaminiertes Sickerwasser ungehindert in das Grundwasser eindringen kann (MUN, 1994; Lampe et al., 1995). Außerdem erfolgten Stoffeinträge von den Betriebsflächen der Chemieindustrie und aus den Abwasserkanälen Schachtgraben und Spittelwasser, denen Abwässer der chemischen Großbetriebe ungeklärt zugeleitet wurden. Insgesamt ist das Grundwasser auf einer Fläche von 25 km² mit organischen Schadstoffen belastet, das geschätzte Volumen beträgt 200 Mio. m³ (Peter et al., 1995). Da viele Stoffe bereits über einen langen Zeitraum eingetragen worden sind, sind sie großräumig vermischt und können einzelnen Eintragsquellen nicht mehr zugeordnet werden. Daher wird das verunreinigte Grundwasser als eigenständiger Schadstoffherd angesehen, von dem unabhängig vom weiteren Schadstoffeintrag aus der Bodenzone eine Gefahr für weitere Schutzgüter ausgeht (Peter et al., 1995; Großmann et al., 2000).

Eine Vielzahl von Altlasten in den neuen Bundesländern ist durch solche regionalen Grundwasserkontaminationen gekennzeichnet (Großmann et al., 2000). Sie wurden durch Altlastencluster, d.h. durch zahlreiche, z.T. benachbarte, z.T. miteinander verzahnte Altablagerungen und Altstandorte, verursacht. Für ihre Untersuchung und Sanierung existieren bislang keine standardisierten Methoden (Wycisk et al., 1997). Die herkömmliche Untersuchung und Sanierung von Altlasten ist für lokale Eintragsquellen entwickelt worden (vgl. Barkowski et al., 1993; Toussaint, 1998). Dabei wird u.a. die Grundwasserqualität im An- und Abstrom der Kontaminationsquelle erfasst und gegenübergestellt. Um die Beeinträchti-

gung des Grundwassers und damit einhergehende Gefährdungen zu bewerten, werden die Stoffkonzentrationen mit Prüfwerten (z.B. LAWA, 1993; VROM, 1993 u.ä.) verglichen, wobei die lokale geologische und hydrogeologische Situation sowie die Nutzung des Grundwassers in die Risikobewertung einfließen. Die herkömmliche Sanierung von lokalen Schäden erfolgt durch Sicherungsmaßnahmen oder Dekontaminationsmaßnahmen (*pump-and-treat*-Verfahren) (vgl. Rehner, 1998; Held, 1998).

Für regionale Verunreinigungen sind die erwähnten Methoden nicht geeignet, da einzelne Eintragsquellen nicht mehr voneinander abgrenzbar sind, insbesondere, wenn die Grundwasserströmung durch Sumpfungmaßnahmen des Bergbaus beeinflusst wird. Eine Gefährdungs- und Risikoabschätzung ist auf einer regionaler Skala aufgrund diverser Nutzungskonflikte komplexer und erfordert regionalisierte Risikoanalysen. Schließlich stößt auch eine Sanierung durch *pump-and-treat*-Verfahren bei einer Kontamination von mehreren km² an finanzielle und technische Grenzen. Daher sollen im BMBF-Forschungsvorhaben **SanierungsForschung In Regional kontaminierten Aquiferen (SAFIRA)**, in dessen Teilprojekt E 1.1 "Umwelt- und Raumverträglichkeit" die vorliegende Arbeit entstand, neue Untersuchungsmethoden und Sanierungstechnologien für regionale Verunreinigungen erprobt werden (Weiß et al., 1997, 1999).

Wie bei lokalen Verunreinigungen steht auch bei komplexen regionalen Verunreinigungen die räumliche und stoffliche Erfassung des Schadens an erster Stelle. In den vergangenen Jahren wurden im Raum Bitterfeld-Wolfen Monitoringprogramme von verschiedenen Betreibern mit unterschiedlicher Zielsetzung parallel initialisiert. In der Region ist die Grundwasserqualität regional sowie lokal an ausgewählten Altablagerungen und Altstandorten zu erfassen. Gleichzeitig muss die komplexe hydraulische Situation durch den Grundwasseranstieg in den Tagebaurestlöchern kontrolliert werden. Diese Aufgaben unterliegen verschiedenen Entscheidungsträgern: der Lausitzer und Mitteldeutschen Bergbau Verwaltungs-GmbH (LMBV), der Bitterfelder Vermögensverwaltung Chemie GmbH (BVV) sowie dem Landkreis Bitterfeld. Seit 1996 wird das Monitoring für den gesamten Großraum Bitterfeld im Ökologischen Großprojekt Bitterfeld-Wolfen (ÖGP) zwischen den Institutionen abgestimmt. Die insgesamt über 600 Messstellen der verschiedenen Betreiber netze werden gemeinsam beprobt, die Datenerfassung und -aufbereitung erfolgt zentral, und der Datenaustausch ist gewährleistet (Lindemann, 2000).

Wie auch an vergleichbaren Schadensfällen festzustellen ist, erfolgt die Untersuchung der Grundwasserbelastung in Bitterfeld-Wolfen iterativ und unterliegt sich laufend ändernden Rahmenbedingungen, wie verfügbaren finanziellen Mitteln, Analysemethoden, verbessertem Wissensstand, geänderten Zuständigkeiten und Möglichkeiten zur Zusammenarbeit zwischen verschiedenen Verantwortlichen und Entscheidungsträgern. So war die konkrete Zusammensetzung der organischen Belastung, d.h. die einzelnen organischen Verbindungen, bis 1995 weitgehend unbekannt (Peter et al., 1995). Daraus ergaben sich insbesondere Schwierigkeiten für die Kalibrierung und Validierung von Transportmodellierungen (Schulz-Terfloth & Walkow, 1996). Des Weiteren war die räumliche Abgrenzung der Kontamination aufgrund der geringen Messstellendichte nicht möglich. Im abgestimmten Großraum-Monitoring des ÖGP wurden daher z.B. 1996 an etwa 200 Messstellen neben Vor-Ort- und Summenparametern mehr als 60 organische Einzelstoffe analysiert.

Wenn an 200 Messstellen 60 Parameter (d.h. 60 Dimensionen) erhoben werden, entstehen 12000 Einzelwerte. Solche multidimensionalen Datenbestände sind dem menschlichen Gehirn nur schwer zugänglich, da es Zahlenkolonnen im Gegensatz zu Mustern oder Bildern nicht leistungsfähig verarbeiten kann und da das menschliche Vorstellungsvermögen bei

mehr als drei Dimensionen scheitert (Winterstein & Adler, 1997). Man benötigt daher Methoden, die aus umfangreichen Datenbeständen interessante, nützliche und neuartige Informationen, die in den Ausgangsdaten nicht explizit gespeichert sind, automatisch extrahieren (Koperski et al., 1996). Solche Verfahren stellt die multivariate Statistik zur Verfügung: Varianz-, Regressions-, Korrelations-, Hauptkomponenten-, Diskriminanz- oder Clusteranalysen decken Beziehungen zwischen mehreren Variablen auf (vgl. Röhr, 1993; Henrion & Henrion, 1995; Stoyan et al. 1997 oder Hartung & Elpelt, 1999).

Darüber hinaus wurden in den letzten Jahren in der Informatik in den Bereichen Datenbanken, künstliche Intelligenz und Visualisierung weitere Verfahren entwickelt: Generalisierungsverfahren, Klassifikationsregeln, Assoziationsregeln, Trendanalysen, Entscheidungsbäume, Regressionsbäume und neuronale Netze (vgl. Chen et al., 1996; Koperski et al., 1996). Die Methoden werden unter den Stichwörtern "*Data mining*", "*Knowledge Discovery in Databases*" oder "Mustererkennung" zusammengefasst. Durch die automatisierte Datenerfassung und die damit einhergehende Datenflut sind diese Methoden bereits in vielen Bereichen essentielle Werkzeuge der Datenverarbeitung geworden (Chen et al., 1996).

Ziel der vorliegenden Arbeit ist es, Entscheidungen über das weitere Vorgehen im Grundwassermonitoring zu unterstützen, indem Datensätze aus den Jahren 1991 bis 1999 retrospektiv unter folgenden Gesichtspunkten ausgewertet werden: Es soll ein Schadstoffprofil für die Region erstellt werden, aus dem hervorgeht, welche Einzelstoffe und Stoffgruppen das Grundwasser großräumig verunreinigen und welche nur lokal auftreten. Des Weiteren soll überprüft werden, ob bzw. welche Parameter redundante Information liefern. Außerdem soll die Analyse zum besseren Verständnis über die Zusammensetzung der Kontamination beitragen, Aufschluss über das Umweltverhalten von Stoffen geben sowie eventuelle Rückschlüsse auf Eintragsquellen erlauben.

Ein übergeordnetes Ziel der Arbeit besteht darin, eine übertragbare Untersuchungsstrategie für regionale Grundwasserkontaminationen zu entwickeln. Dazu sind aus dem verfügbaren Methodenspektrum geeignete Verfahren auszuwählen. Daher wird im Folgenden ein Überblick über unterschiedliche Herangehensweisen zur Strukturierung von Daten gegeben, die in der Hydrogeologie und Umweltchemie eingesetzt werden. Diese lassen sich zu zwei wesentlichen Strategien zusammenfassen: Strukturieren durch Generalisieren und Ordnen (Rankingverfahren) sowie statistische Strukturanalysen.

1.2 Strukturierung multivariater Umweltdaten

1.2.1 Rankingverfahren: Strukturieren durch Generalisieren und Ordnen

Bei der Erkundung von Altstandorten und Altablagerungen werden Grundwasserproben auf eine Vielzahl von Substanzen untersucht, um Gefährdungen für das Grundwasser bzw. vorhandene Grundwassernutzungen abschätzen zu können. Plumb (1987, 1991, 1992) und Kerndorff et al. (1992) betonen jedoch, dass sich trotz der heterogenen chemischen Zusammensetzung von Abfallstoffen letztlich nur wenige dieser Stoffe über Sickerwasseremissionen im Grundwasser ausbreiten. So wurden z.B. von etwa 1200 Verbindungen zwar 425 mindestens ein Mal im Umfeld von Altablagerungen und Deponien nachgewiesen, aber 75 % aller Nachweise entfielen auf nur 31 Verbindungen (Plumb, 1992).

Um den stofflichen Einfluss von Sickerwasseremissionen aus Altablagerungen auf das Grundwasser zu charakterisieren, wurde ein Rankingverfahren entwickelt, in dem für alle

analysierten Einzelstoffe im Umfeld von Deponien und Altablagerungen stoffspezifisch generalisierte, summarische Größen (**Kontaminationskriterien**) ermittelt werden. Diese sowohl qualitative als auch quantitative Aspekte der Stoffe im Grundwasser erfassen und voneinander unabhängig sein, d.h. wenig redundante Information enthalten (Kerndorff et al., 1993; Kerndorff, 1995). Kerndorff et al. (1993) berücksichtigen zwei Kontaminationskriterien: die Emissions-Nachweishäufigkeit (ENH) und die mittlere Emissionskonzentration (MEK), die auf einer einheitlichen Skala normiert und zu einer Gesamtbewertungszahl verknüpft werden. Eine hohe Gesamtbewertungszahl bedeutet, dass ein Stoff sowohl häufig als auch in hohen Konzentrationen im Grundwasser vorhanden und damit besonders relevant für diesen Ausbreitungspfad ist. Eine Reihung der Stoffe nach abnehmender Gesamtbewertungszahl (Ranking) wird im Folgenden **Kontaminationsprofil** genannt. Es wird von Stoffen mit einem hohen Transfer- und Persistenzpotenzial angeführt.

Untersuchungen im Grundwasserabstrom von 205 Altablagerungen in Westdeutschland ergaben für halogenierte Methane, Ethane und Ethene, die zusammen die Gruppe der leichtflüchtigen halogenierten Kohlenwasserstoffe (LHKW) bilden, für Benzen, Toluol und die Xylene (BTEX-Aromaten) sowie für weitere Benzen-Derivate hohe Gesamtbewertungszahlen (Kerndorff et al., 1993). Bemerkenswert dabei ist, dass auch Stoffe, die nicht primär abgelagert wurden, aber wichtige Abbauprodukte sind, sehr hohe Gesamtbewertungszahlen erhielten: Dies gilt beispielsweise für die LHKW cis 1,2-Dichlorethen und Vinylchlorid, die Abbauprodukte der LHKW Tri- und Tetrachlorethen sind. Auch im Grundwasser von 500 Altablagerungen und Deponien in den USA wurden Vertreter der LHKW am häufigsten nachgewiesen (Plumb, 1987, 1991, 1992).

Da in den genannten Untersuchungen die Kontaminationskriterien für alle Altablagerungen gemeinsam ermittelt wurden, können die Ergebnisse als Kontaminationsprofil von „durchschnittlichen“ Altablagerungen in Westdeutschland bzw. in den USA interpretiert werden. Sie dienen daher als Richtlinie für die Untersuchung weiterer Altablagerungen. Auf Grundwasserleiter, die - wie in Bitterfeld-Wolfen - durch Einträge aus diversen Altablagerungen, Sondermülldeponien und Altstandorten regional kontaminiert sind, sind die Ergebnisse jedoch nur eingeschränkt übertragbar, da hier wahrscheinlich produktionsspezifische Stoffe einen starken Einfluss haben. In dieser Arbeit soll jedoch der methodische Ansatz, eine Fülle von Einzelstoffanalysen durch Kontaminationskriterien zu generalisieren und in Kontaminationsprofilen zu ordnen, auf regionale Grundwasserkontaminationen übertragen werden.

Für den Eintrag von Pestiziden in Fließgewässer führten Dobel et al. (2000) ein ähnliches Stoffranking durch, in das neben den Nachweishäufigkeiten und den mittleren bzw. maximalen nachgewiesenen Konzentrationen auch die Nachweisgrenzen eingingen. Im Gegensatz zu Kerndorff et al. (1993) wählten Dobel et al. (2000) die **Hasse-Diagramm-Technik** (HDT) als Rankingverfahren. Die HDT basiert auf der Theorie der partiell geordneten Mengen und umfasst die Konstruktion sowie die Analyse von Hasse-Diagrammen (Brüggemann & Halfon, 2000). Partielle Ordnungen unterscheiden sich von einer totalen Ordnung, wie den Kontaminationsprofilen, durch folgende Aspekte (Brüggemann & Halfon, 2000):

In einer totalen Ordnung besteht die Beziehung "Stoff 1 > Stoff 2 > ... > Stoff p". Gehen mehrere Kriterien in die Konstruktion einer totalen Ordnung ein, ist diese Beziehung jedoch nur dann vollständig gültig, wenn sie für *alle* Kontaminationskriterien gilt. Bringen einzelne Kontaminationskriterien unterschiedliche Ordnungen der Stoffe hervor, gibt es Unvergleichbarkeiten und Antagonismen zwischen den Stoffen (vgl. Abbildung 1.1). Dennoch könnte für einen Teil der Stoffe (z.B. für A, C und D sowie für A, E, B und D in Abbildung 1.1.) die oben genannte Beziehung zutreffen; sie bilden die verbleibende Restordnung.

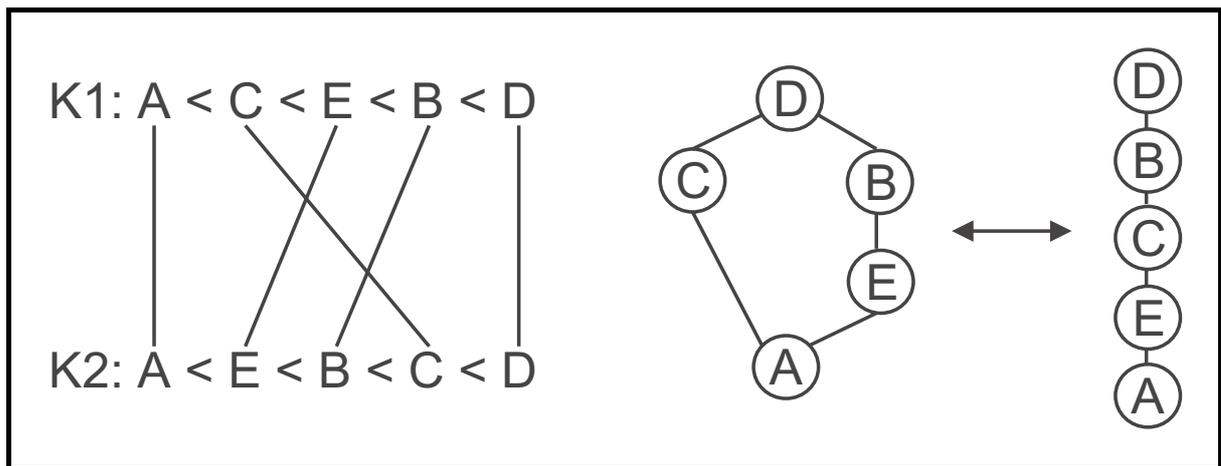


Abbildung 1.1: Visualisierung der partiellen Ordnung der fünf Objekte A, B, C, D und E, die durch die Kriterien K1 und K2 charakterisiert werden. Da beide Kriterien unterschiedliche Rangfolgen zwischen den Objekten hervorbringen, besteht keine totale, nur eine partielle Ordnung, die im Permutationsdiagramm (links) oder im Hasse-Diagramm (Mitte) visualisiert werden kann (aus: Brüggemann & Halfon, 1995). Zum Vergleich ist rechts die totale Ordnung dargestellt, die durch Multiplikation von K1 und K2 entsteht.

Da mit Hasse-Diagrammen der Einfluss einzelner Kriterien auf das Gesamtergebnis untersucht werden kann, ist diese Technik ein wichtiges Hilfsmittel für multikriterielle Bewertungen (Brüggemann & Halfon, 2000). Daher wurde diese Technik bereits für viele Fragestellungen im Umweltbereich angewendet, u.a. zur ökotoxikologischen Beurteilung von Chemikalien (Brüggemann & Steinberg, 1998; Brüggemann et al., 1999) sowie zur Bewertung von Schwermetallen im Boden (Brüggemann & Steinberg, 1999) und Pestiziden in Fließgewässern (Dobel et al., 2000).

In den bislang erwähnten Untersuchungen basiert das Stoffranking auf gemessenen Stoffkonzentrationen in der Umwelt. Um das aus den gemessenen Daten resultierende Ranking erklären zu können, verglichen Dobel et al. (2000) es mit einem Rankingmodell, in das Gebrauchsdaten der Pestizide sowie wichtige physikochemische Stoffeigenschaften eingingen. Die höchste Übereinstimmung zwischen Daten und Modell betrug 89 %.

Darüber hinaus werden Rankingverfahren benutzt, um Stoffe bezüglich ihres generellen Umweltverhaltens einzuordnen und zu vergleichen. Dies erfolgt mittels physikochemischer Eigenschaften. Zum Beispiel bestimmten Kerndorff et al. (1993) ein Grundwassergängigkeitspotenzial, das ein Maß für die Ausbreitung und Persistenz von Stoffen im Grundwasser ist. Ähnlich schätzten Mohs & Martin (1997) mit Mobilitätsäquivalenten ein stoffspezifisches Grundwasserverschmutzungspotenzial von belasteten Böden ab.

Für die regionale Grundwasserkontamination in Bitterfeld-Wolfen ist zu prüfen, wie Kontaminationskriterien und Rankingverfahren eingesetzt werden können, um Stoffe mit regionaler und lokaler Verbreitung zu separieren und hinsichtlich ihres Umweltverhaltens zu charakterisieren.

1.2.2 Statistische Strukturanalysen

Bei einer hohen Anzahl von Messstellen und Variablen wird die Interpretation eines Datensatzes immer schwerer, da univariate oder bivariate statistische Auswertungen keine Zusammenhänge zwischen mehreren Variablen aufdecken können. Hier bieten Methoden der multivariaten Statistik einen Ausweg: Sie suchen in mehrdimensionalen Datenräumen nach

komplexen Zusammenhängen und bilden diese Datenräume ohne großen Informationsverlust zwei- oder dreidimensional ab (Winterstein & Adler, 1997). Dabei werden vor allem Faktoren- oder Hauptkomponentenanalysen in Verbindung mit Clusteranalysen oder geostatistischen Verfahren eingesetzt. Diese Kombination von Verfahren wird im Folgenden mit dem Begriff der statistischen Strukturanalyse zusammengefasst.

Die **Hauptkomponentenanalyse** (HKA) ist ein Spezialfall der Faktorenanalyse (Stoyan et al., 1997). Sie basiert auf der Korrelationsmatrix oder der Kovarianzmatrix, in der die linearen Zusammenhänge zwischen allen untersuchten Merkmalen beschrieben werden. Die HKA benutzt diese Matrix, um redundante Merkmale zu finden, und bildet neue, künstliche, unkorrelierte Merkmale als Linearkombination der ursprünglich gemessenen Merkmale. Dabei wird der größte Informationsgehalt der Daten auf die erste Hauptachse abgebildet, der zweitgrößte auf die zweite usw. (Henrion & Henrion, 1995). Die neuen Merkmale werden als **Hauptkomponenten**, **Faktoren** oder auch **Kontaminationsfaktoren** bezeichnet und sind fachlich zu interpretieren. Dies erfolgt mit Hilfe der gemessenen Variablen, die stark mit einer Hauptkomponente korrelieren, d.h. hohe Faktorladungen aufweisen. Die Zuordnung der ursprünglichen Variablen zu den Hauptkomponenten und deren Interpretierbarkeit kann durch nachfolgende Rotation des neuen Koordinatensystems noch verbessert werden (Stoyan et al., 1997).

Hauptkomponentenanalysen werden in der Hydrogeologie und Umweltchemie für diverse Fragestellungen angewendet. So können sich Merkmale, die in einer Hauptkomponente zusammengefasst werden, gegenseitig ohne großen Informationsverlust ersetzen, d.h. schwer messbare Parameter können durch andere Parameter ersetzt werden, um Analytikkosten einzusparen (vgl. Aruga et al., 1993; Flachowski & Rudolph, 1996). Außerdem charakterisieren Stoffe, die mit einem Faktor korrelieren, gemeinsame Belastungsquellen und identifizieren Transportwege oder Wirkungsmechanismen (Soldt & Einax, 1998). Beispielhaft seien hier die Ergebnisse einiger Untersuchungen erwähnt.

Aruga et al. (1993) weisen mit der HKA städtische und industrielle Kontaminationsquellen in Fließgewässern aus. Um die Ursachen von Bodenkontaminationen (Metalle) im Umfeld (35 km²) eines Düngemittelwerkes zu klären, setzten Soldt & Einax (1998) multivariate und geostatistische Methoden ein und konnten damit Bestandteile der gas- und staubförmigen Emissionen des Düngemittelwerkes von geogenen Belastungen und von Belastungen durch Düngemittleinsatz auf landwirtschaftlichen Nutzflächen trennen. Mit ähnlichen Methoden analysierte Tao (1998) auf einer regionalen Skala die Gehalte von Spurenelementen im Boden und illustrierte, dass durch die Ionenradii zusammen mit den Elementladungen die Gruppierung der Spurenelemente in den Faktoren erklärt werden kann. Auf ähnliche Weise wurden Kontaminationsquellen z.B. bei Razack & Dazy (1990), Ritzi et al. (1993), Olmez et al. (1994), Ribeiro & Macedo (1995), Berlekamp et al. (1995), Subbarao et al. (1996), Rudolph (1999), Suk & Lee (1999) und Papatheodorou et al. (1999) identifiziert. Auch in und um die Region Bitterfeld-Wolfen wurden HKA bereits eingesetzt, um Kontaminationen in Wasser und Sedimenten von Mulde und Elbe zu charakterisieren (Kluge et al., 1996; Götz et al., 1998; Fuchs, 1999).

Die untersuchten Stichproben umfassen meistens etwa 10² Objekte und 10-20 Variablen. Bevorzugtes Verfahren ist die Hauptkomponentenanalyse mit nachfolgender Varimax-Rotation. Paatero & Tapper (1994) stellen hingegen eine neue Variante der Faktorenanalyse vor, die *Positive Matrix Factorization*, die für Umweltdaten bessere Ergebnisse als die herkömmliche HKA erzielen soll. Anwendungen dieser Methode werden in z.B. Juntto & Paatero (1994) und Paterson et al. (1999) gezeigt. Da für diese Methode Angaben zur Streuung der

Eingangsdaten, die aus Wiederholungsmessungen gewonnen werden können, benötigt werden, ist ihr Einsatz jedoch oftmals, wie auch im vorliegenden Fall, nicht möglich.

Mit Faktorwerten, die den Einfluss eines Faktors auf ein Objekt beschreiben, kann man Aussagen über die räumliche Verteilung der Faktoren machen. Damit kann man auf Kontaminationsquellen zurückschließen und räumliche Verteilungsmuster und Belastungszonen erkennen, wodurch u.a. die Interpretation der Faktoren unterstützt wird. Bei einer Vielzahl von Variablen geht man häufig so vor, dass die Dimension der Variablen durch die HKA reduziert wird. Nachfolgend wird eine Clusteranalyse mit der reduzierten Anzahl der Variablen (den Faktorwerten) vorgenommen, um die untersuchten Objekte zu klassifizieren. Diese Strategie wendeten u.a. Aruga et al. (1993), Ribeiro & Macedo (1995), Fuchs (1999) und Suk & Lee (1999) an.

Mit **Clusteranalysen** werden aus einer Menge von Objekten ähnliche Objekte zu Gruppen, Klassen oder Clustern zusammengefasst, wobei sich die einzelnen Gruppen deutlich voneinander unterscheiden sollen. Ziel ist es, Gruppen zu finden, die bereits implizit in den Daten vorhanden sind. Clusteranalyse ist auch bekannt als automatische Klassifikation, numerische Taxonomie, Botryologie oder typologische Analyse (Kaufman & Rousseeuw, 1990). Dafür stehen zahlreiche Verfahren zur Verfügung. Um die Klassifikationsergebnisse abzusichern, sollten verschiedene Methoden angewendet werden (Götz et al., 1998).

Eingangsdaten für eine Clusteranalyse können gemessene Werte, aber auch abgeleitete Größen wie die Faktorwerte aus der Faktoren- oder Hauptkomponentenanalyse (s.o.) sein. Die Kombination von Hauptkomponenten- und Clusteranalysen hat zwei Nachteile: Erstens könnte die Beschreibung der Cluster unklar sein, wenn die Hauptkomponenten nicht eindeutig interpretiert werden können. Zweitens könnten die Hauptkomponenten bzw. die Faktorwerte undeutliche Cluster produzieren und die "tatsächliche" Anzahl der Cluster verdecken (Fowkles et al., 1988). Wenn möglich sollten daher zum Vergleich Clusteranalysen mit den Originalwerten durchgeführt werden.

Nachteil der Clusteranalyse ist, dass sie nur Aussagen an den gemessenen Probenahmepunkten zulässt. Wünschenswert ist jedoch eine Aussage über die Stoffverteilung im ganzen Untersuchungsgebiet, d.h. eine kontinuierliche räumliche Darstellung von Stoffkonzentrationen oder Faktorwerten, die über die Probenahmepunkte hinaus geht. Dies kann durch **Interpolation** erreicht werden. Mit Hilfe der gemessenen Werte an den Probenahmepunkten werden Schätzwerte auf einem regelmäßigen Gitter, das das ganze Untersuchungsgebiet abdeckt, berechnet. Daraus können Isolinien, d.h. Linien gleicher Konzentration, konstruiert werden (vgl. Isaaks & Srivastava, 1990; Schafmeister, 1999). Voraussetzung für die Interpolation eines Parameters ist jedoch, dass dieser eine Autokorrelation (räumliche Korrelationsstruktur) aufweist. Art und Ausmaß der Autokorrelation kann mit geostatistischen Methoden, insbesondere mit der Variographie, analysiert werden. Besteht keine Autokorrelation, d.h. sind die Messwerte stochastisch verteilt oder weisen eine hohe mikroskalige Varianz auf, ist eine Interpolation nicht sinnvoll (Diekkrüger et al., 1996).

Auch Interpolationsverfahren können mit den Ergebnissen der Hauptkomponentenanalyse verbunden werden. So erstellten z.B. Berlekamp et al. (1995) und Subbarao et al. (1996) mit dem Interpolationsverfahren *Inverse Distance Weighting* (IDW) Isolinienkarten aus den Faktorwerten, um räumliche Verbreitungsmuster der Faktoren zu visualisieren. Tao (1998) analysierte die Faktorwerte hingegen mit geostatistischen Methoden, um die räumliche Korrelationsstruktur der Faktoren zu verdeutlichen. Die Variogramme der einzelnen Spurenelemente ließen sich visuell in Gruppen einteilen, und diese Gruppen entsprachen den Variogrammen der zugehörigen Faktorwerte aus der Hauptkomponentenanalyse.

In der Hydrogeologie, insbesondere bei der Darstellung von Stoffverteilungen im Grundwasser, wird die Anwendung von Interpolationsverfahren z.T. sehr kritisch beurteilt (vgl. Burger & Schafmeister, 2000). Wenn die Grundwasserströmung nicht ausreichend berücksichtigt wird, erscheinen in interpolierten Karten z.T. unrealistische Stoffausbreitungen entgegen der Fließrichtung. Daher werden in dieser Arbeit raumbezogene Auswertungen mit Verfahren der Clusteranalyse durchgeführt.

In den oben genannten Arbeiten wurden vor allem anorganische Stoffe (Anionen, Kationen, Schwermetalle) sowie Vor-Ort-Parameter (pH-Wert, Leitfähigkeit) berücksichtigt. Organische Substanzen wurden bislang nur selten oder nur summarisch in statistische Strukturanalysen einbezogen. Dies ist vor allem auf zwei methodische Schwierigkeiten zurückzuführen, die bei organischen Schadstoffen deutlicher hervortreten als bei anorganischen Schadstoffen: *Censoring*, d.h. "Abschneiden" der statistischen Verteilung an der analytischen Nachweisgrenze, und rechtsschiefe Verteilungen. Diese beiden Punkte müssen daher bei der Anwendung statistischer Verfahren auf Grundwasserdaten aus Bitterfeld-Wolfen thematisiert werden.

Außerdem werden in den genannten Studien häufig anthropogene Belastungen von geogenen unterschieden. Werden nur organische Schadstoffe untersucht, ist eine solche Trennung nicht möglich, da organische Schadstoffe in der Regel nicht in der Natur vorkommen. Daher stellt sich die Frage, ob in einer statistischen Strukturanalyse auch verschiedene Quellen organischer Schadstoffe identifiziert werden können. Eine derartige Untersuchung existiert bislang nicht.

1.3 Untersuchungsstrategie

In dieser Arbeit sollen heterogene Datenbestände unterschiedlicher Herkunft, die für regionale Grundwasserkontaminationen typisch sind, zusammengeführt und hinsichtlich regional relevanter Aspekte ausgewertet werden. Dafür wurden dem Fachgebiet Umweltgeologie der Martin-Luther-Universität Halle im Rahmen des Forschungsprojektes SAFIRA Beispieldatensätze aus den Jahren 1991 bis 1999 vom Landratsamt Bitterfeld und dem ÖGP am Regierungspräsidium Dessau zur Verfügung gestellt. Die beispielhafte Betrachtung dieser Datensätze soll Antworten auf folgende Fragen liefern:

- Welche Einzelstoffe und Stoffgruppen verunreinigen das Grundwasser großräumig, d.h. regional, welche treten nur lokal auf?
- Gibt es Ähnlichkeiten und Redundanzen zwischen gemessenen Parametern?
- Kann man verschiedene Kontaminationsfaktoren und Belastungszonen ausweisen?

Unter Nutzung der in den Kapiteln 1.2.1 und 1.2.2 vorgestellten Methoden wurde folgendes Untersuchungskonzept entwickelt (Abbildung 1.2):

Um die verfügbaren Datenbestände optimal zu nutzen, werden die Daten unterschiedlicher Herkunft in einer Datenvorverarbeitung konsolidiert und in einer Datenbank zusammengeführt. Außerdem werden die Daten hinsichtlich ihrer Qualität beurteilt. Daraus sollen Vorschläge zur Verbesserung der Datenqualität abgeleitet sowie geeignete, d.h. bezüglich ihrer Qualität (z.B. Nachweisgrenzen) sowie bezüglich der räumlichen und zeitlichen Repräsentation vergleichbare Teildatensätze für die nachfolgenden Auswertungen benannt werden.

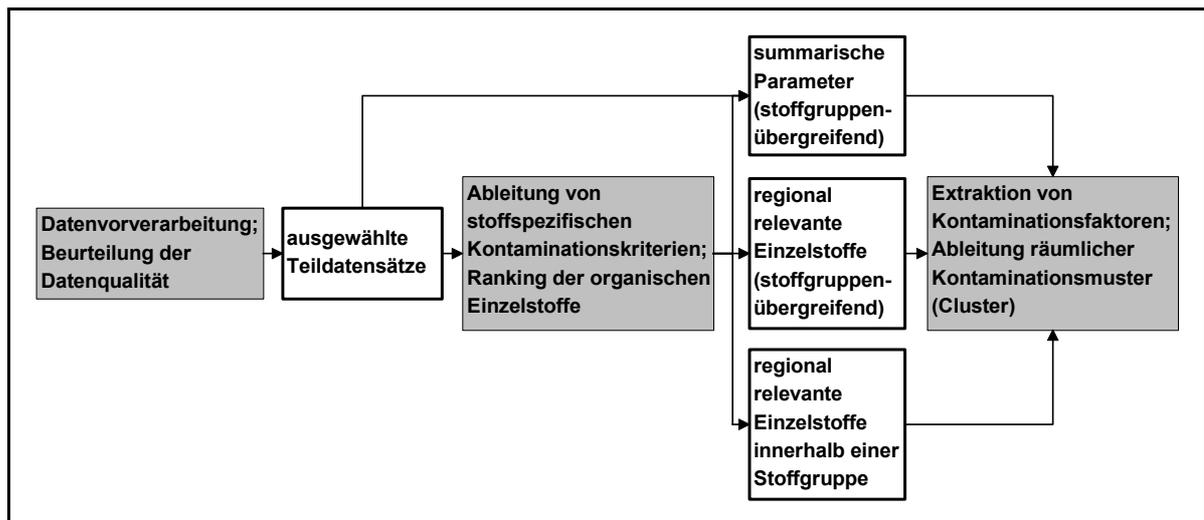


Abbildung 1.2: Untersuchungsstrategie zur Strukturierung der organischen Verunreinigungen in der regionalen Grundwasserbelastung in Bitterfeld-Wolfen.

In einem zweiten Schritt sind aus den selektierten Teildatensätzen regional relevante Stoffgruppen und Einzelstoffe zu extrahieren. Zu diesem Zweck soll in Anlehnung an Kerndorff et al. (1993) mit Hilfe von Kontaminationskriterien ein Kontaminationsprofil erstellt werden, das durch die Hasse-Diagramm-Technik sowie Clusteranalysen ergänzt werden soll, um partielle Ordnungen sichtbar zu machen.

Um Aussagen zu unterschiedlichen Kontaminationsfaktoren und deren Verteilungsmustern im Untersuchungsgebiet machen zu können, werden im dritten Untersuchungsschritt statistische Strukturanalysen (Korrelations-, Hauptkomponenten- und Clusteranalysen) durchgeführt (Abbildung 1.2). Darin sollen drei Merkmalsgruppen untersucht werden: Zunächst werden in einer summarischen Betrachtung Vor-Ort-Parameter, Summenparameter und die Summenangaben für ausgewählte Stoffgruppen analysiert. Eine detailliertere stoffgruppenübergreifende Analyse wird mit den für die Region insgesamt 10-15 wichtigsten Einzelstoffen, die aus dem Ranking resultieren, durchgeführt. Schließlich werden Kontaminationsfaktoren und räumliche Muster für alle Einzelstoffe, die zur insgesamt wichtigsten Stoffgruppe in der untersuchten Grundwasserkontamination gehören, abgeleitet (Abbildung 1.2). Durch die Gegenüberstellung von summarischer Betrachtung und Einzelstoffbetrachtungen ist zu prüfen, ob Leitsubstanzen für bestimmte Stoffgruppen ermittelt werden können.

Die Methoden der Geostatistik werden zunächst nicht eingesetzt (s.o.). Ebenso wenig erfolgt eine toxikologische Bewertung der Schadstoffkonzentrationen, da eine Gefährdungsabschätzung kein Ziel dieser Arbeit ist.

Die in Abbildung 1.2 dargestellte Untersuchungsstrategie zur Strukturierung regionaler Grundwasserbelastungen wird im Folgenden exemplarisch für die Region Bitterfeld-Wolfen umgesetzt. Damit sollen sowohl Beiträge zum besseren Verständnis der Grundwasserbelastung im Untersuchungsgebiet als auch Vorschläge für die Fortführung der Monitoringprogramme geliefert werden, um finanzielle Mittel effektiv einzusetzen. Darüber hinaus wird eine methodische Handlungsanweisung für ähnliche Schadensfälle und Problemstellungen bereitgestellt.

Bevor die Ergebnisse der Analyse in den Kapiteln 4 und 5 vorgestellt und diskutiert werden, wird ein Überblick über das Untersuchungsgebiet (Kapitel 2) sowie über das Datenmaterial und die Methoden (Kapitel 3) gegeben.

2 Das Untersuchungsgebiet: die Region Bitterfeld-Wolfen

2.1 Lage und Landschaftsgliederung

Der Landkreis Bitterfeld liegt im Regierungsbezirk Dessau, im Südosten des Landes Sachsen-Anhalt und lässt sich dreiteilen: Im Westen befinden sich Lößfilde mit intensiver Landwirtschaft, in der Mitte ein stark industrialisierter Bereich mit Bergbau, Chemieindustrie und Besiedlung sowie im Norden und Osten Heiden mit Forstwirtschaft und naturnahen Räumen. Der zentrale Teil mit den Städten Bitterfeld und Wolfen ist Untersuchungsgebiet dieser Arbeit (Abbildung 2.1). Es wird im Osten durch den Verlauf der Mulde und den Tagebau Goitzsche begrenzt. Im Süden endet es in etwa an der B 100 auf Höhe der Ortschaft Roitzsch und im Westen an der A 9. Am nördlichen Rand liegen die Ortschaften Thurland und Raguhn. Insgesamt umfasst das Untersuchungsgebiet ca. 160 km².

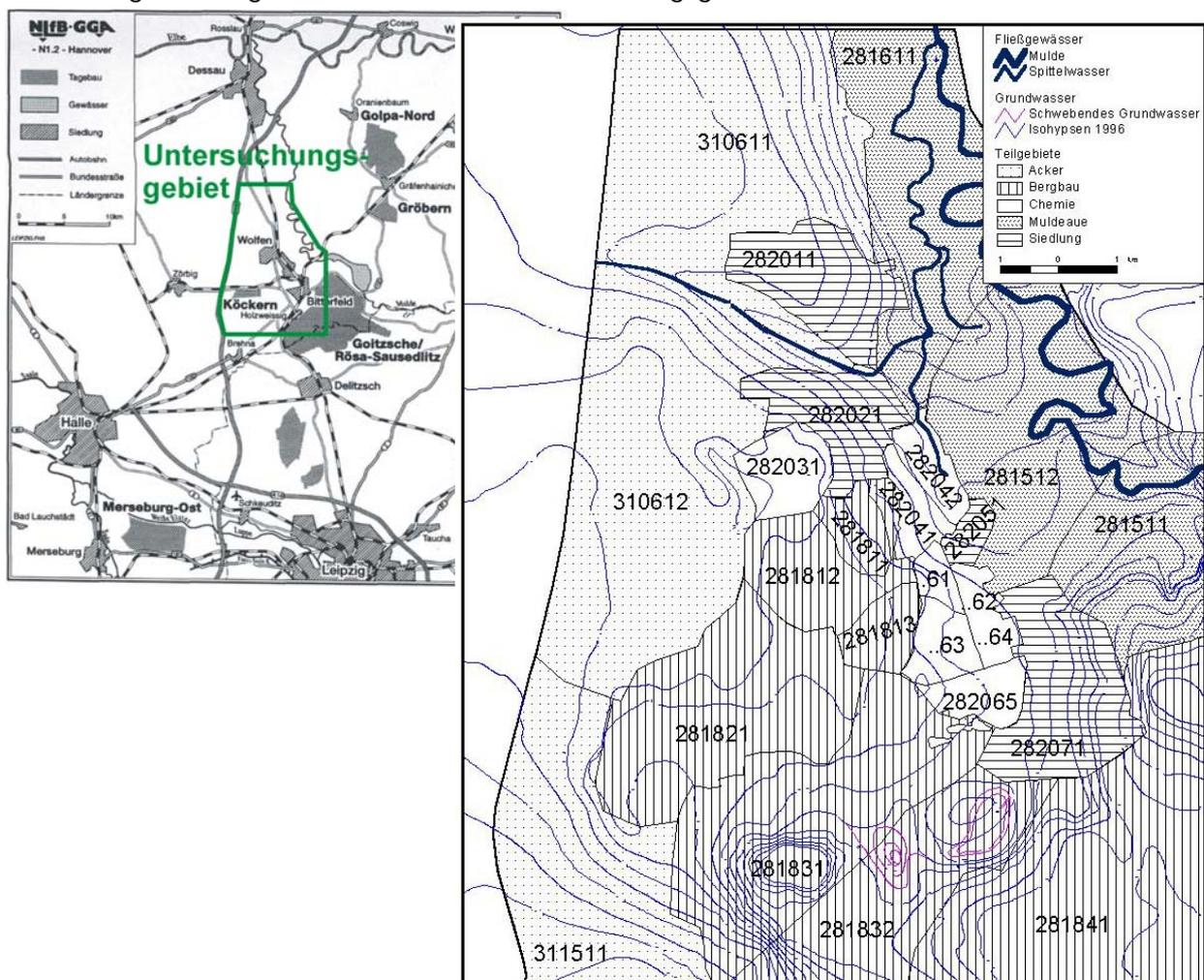


Abbildung 2.1: Lage und Landschaftsgliederung des Untersuchungsgebietes sowie die Grundwassergleichen im Herbst 1996 nach Angaben der GFE (1996). Die Nummerierung der Teilgebiete ist in Tabelle 2.1 erklärt.

Tabelle 2.1: Landschaftseinheiten nach Krönert (1997) und Teilgebiete im Untersuchungsgebiet (vgl. Abbildung 2.1).

Landschaftseinheit	Teilgebiet	Nr.	Besonderheiten/Nutzung
Bitterfelder Muldental (2815)	Muldental Greppin-Muldenstein-Bitterfeld	281512	Abstrom Chemie
	Altes Muldental	281521	Verlegung der Mulde ¹
Jessnitz-Dessauer Muldental (2816)	Muldental Jessnitz-Raguhn	281611	Abstrom Chemie
Bitterfelder Bergbaugebiet (2818)	Grube Johannes	281811	Deponie
	Gruben Hermine und Karl Ferdinand	281812	Deponie
	Gruben Louise, Antonie und Marie	281813	(HCH-)Deponie
	Tagebaue zwischen Sandersdorf, Ramsin und Zscherndorf	281821	Deponie
	Tagebaue Deutsche Grube und Auguste (Freiheit III)	281831	Sondermülldeponie
	Tagebau Auguste Südfeld (Freiheit IV)	281832	Deponie
	Tagebaue Holzweißig und Goitsche	281841	Rekultivierung/Erholung
Stadtlandschaft Bitterfeld-Wolfen (2820)	Wolfen-Nord, Jessnitz, Bobbau	282011	Siedlung
	Wolfen	282021	Siedlung, Abstrom Chemie
	Wolfen Filmfabrik	282031	Gewerbe und Industrie
	CAG-Werksteil Wolfen-West (Farbenfabrik) ² , Grube Greppin	282041	Gewerbe und Industrie, Deponie
	CAG-Werksteil Wolfen-Ost (Farbenfabrik) ²	282042	Gewerbe und Industrie
	Greppin	282051	Siedlung, Abstrom Chemie
	CAG-Werksteil Bitterfeld Nord ²	282061	Gewerbe und Industrie
	CAG-Werksteil Bitterfeld Nordost ²	282062	Gewerbe und Industrie
	CAG-Werksteil Bitterfeld Mitte-West ²	282063	Gewerbe und Industrie
	CAG-Werksteil Bitterfeld Mitte-Ost ²	282064	Gewerbe und Industrie
	CAG-Werksteil Bitterfeld Süd ²	282065	Gewerbe und Industrie
	Bitterfeld	282071	Siedlung, Abstrom Chemie
Quellendorf-Thalheimer Ackerland (3106)	Thurländer Ackerfläche	310611	Landwirtschaft, Anstrom
	Thalheimer Ackerfläche	310612	Landwirtschaft, Anstrom
Halle-Brehnaer Ackerland (3115)	Zörbiger Lößacker Hochfläche und Brehnaer Ackerfläche	311511	Landwirtschaft, Anstrom

¹ Aufgrund einer Erweiterung des Tagebaus Goitsche wurde 1975 die Mulde so verlegt, dass der neue Flusslauf das Restloch des Tagebaus Muldenstein flutete. Dadurch entstand der Muldestausee. Die alte Muldeau verlor damit ihre ökologische Funktion.

² CAG: Chemie AG Bitterfeld-Wolfen.

Krönert (1997) hat für den Landkreis Bitterfeld Landschaftseinheiten ausgewiesen, die für das Untersuchungsgebiet unter Berücksichtigung der vorherrschenden Landnutzung und der Grundwasserströmung in kleinere Teilgebiete unterteilt wurden (Abbildung 2.1, Tabelle 2.1). Im westlichen Teil des Untersuchungsgebietes befinden sich ausgeräumte Agrarlandschaften. Der östliche Teil untergliedert sich in (Krönert, 1997, Abbildung 2.1, Tabelle 2.1):

- die Stadtlandschaft Bitterfeld-Wolfen mit Bitterfeld, Wolfen sowie den Industriegebieten der Chemie AG Bitterfeld-Wolfen (CAG) und der ehemaligen Filmfabrik Wolfen,
- die Auellandschaft des Jessnitz-Dessauer Muldentals,
- die Bergbaufolgelandschaft Bitterfelder Muldental und
- das Bitterfelder Bergbaugebiet.

Bevor auf die Entwicklung und Verknüpfung von Bergbau und Chemieindustrie und deren Umweltauswirkungen eingegangen wird, werden die geologischen und hydrogeologischen Verhältnisse erläutert.

2.2 Geologie und Hydrogeologie

Der prätertiäre Untergrund in Mitteldeutschland ist aus Bruchschollen aufgebaut, deren Heraushebung während der saxonischen Tektogenese in der Kreide vor etwa 80-100 Mio. Jahren stattfand (Knoth et al., 1998). Die Bruchstörungen verlaufen vorherrschend in NW-SE-Richtung. Die prätertiäre Basis des Bitterfelder Raumes gehört zur Halle-Wittenberger Scholle (Knoth & Schwab, 1972). Sie ist im Südwesten an der Halleschen Störung und im Nordosten am Wittenberger Abbruch, der den Rand zur Norddeutschen Senke bildet, herausgehoben. Durch die Köthen-Bitterfelder Störungszone wird sie in eine südwestliche Teilscholle, die Hallesche Mulde, und eine nordöstliche, die Südanhaltinische Mulde, geteilt (Jordan & Weder, 1995).

Die Scholle besteht aus mehreren tausend Meter mächtigen Gesteinen des Karbons und Perms. In eine Folge von Sedimentgesteinen (Sandsteinen, Konglomeraten, Grauwacken, Tonschiefern und Schluffsteinen) intrudierten im Rotliegenden über 1000 m mächtige Porphyre und Tuffe (Altermann & Ruske, 1997). Da das Untersuchungsgebiet während der saxonischen Tektogenese Abtragungsgebiet war, fehlen die mesozoischen Schichtfolgen der Trias, des Jura und der Kreide. Die paläozoischen Gesteine wurden zum Teil erodiert, zum Teil verwitterten sie zu einer kaolinreichen Deckschicht, die einen guten Grundwasserstauer darstellt (Knoth et al., 1998). Mit Ausnahme einiger oberflächennaher Inseln im Muldental befindet sich die Oberfläche des Prätertiärs in etwa 80-100 m Tiefe (Krapp & Ruske, 1992).

Tertiär

Auf der Halle-Wittenberger-Scholle beginnen die tertiären Ablagerungen im Eozän und reichen bis in das tiefere Miozän. Insgesamt ist die Sedimentfolge durch die Randlage zur Norddeutschen Senke und durch den Wechsel von Trans-/Regressionen, also einen Wechsel von marinen und festländischen Verhältnissen, gekennzeichnet. Durch folgenden Ablagerungszyklus alternieren gut wasserleitende mit schlecht oder wenig wasserleitenden Schichten: Bei Transgressionen sedimentierten zunächst Kiese und Sande. Die Ablagerungen werden zum Hangenden feinkörniger; die Schichtfolge schließt mit Tonen ab. Bei Regression entwickelten sich unter subtropischem Klima ausgedehnte Sumpfmoores, aus denen z.T. ausgedehnte Braunkohlenflöze hervorgingen (Walter, 1992).

Im Oberen Eozän wurden unter brackisch-ästuarischen bis kontinentalen Bedingungen die Gölzauer Schichten abgelagert. Sie bestehen aus Tonen, Schluffen, fluviatilen Sanden sowie kohligten Bildungen und füllen vor allem die Senken der alten (prätertiären) Landoberfläche. Über dem untersten Flözhorizont, Flöz Bruckdorf, sind gut wasserleitende Sandschichten anzutreffen, die 15-20 m mächtig sind. Diese Eozänen Sande bilden das Grundwasserstockwerk GWL800, das z.T. salzwasserführend (Jordan & Weder, 1995) und gespannt ist (Braun & Krapp, 1992). Abgeschlossen wird es von einem zweiten Flöz, dem Flöz Gröbers, dessen Mächtigkeit zwischen 1-8 m schwankt. Es ist im Untersuchungsgebiet nicht überall zu finden (Krapp & Ruske, 1992).

Diskordant liegen die Rupelbasissande und darauf die Rupel- oder Septarientone mit einer Mächtigkeit von 10-25 m auf. Diese Schichten sedimentierten während der Rupeltransgression, die bis ins Mittlere Oligozän anhielt. Sie sind im Untersuchungsgebiet in einer Tiefe von 50-60 m anzutreffen (Abbildung 2.2). Die Tone bilden einen wichtigen flächendeckenden Grundwasser-Nichtleiter mit sehr geringer Durchlässigkeit von $k_f < 10^{-10}$ m/s (Krapp & Ruske, 1992). Daher werden für umweltrelevante Fragestellungen tieferliegende Grundwasserleiter, wie der GWL800, nicht betrachtet.

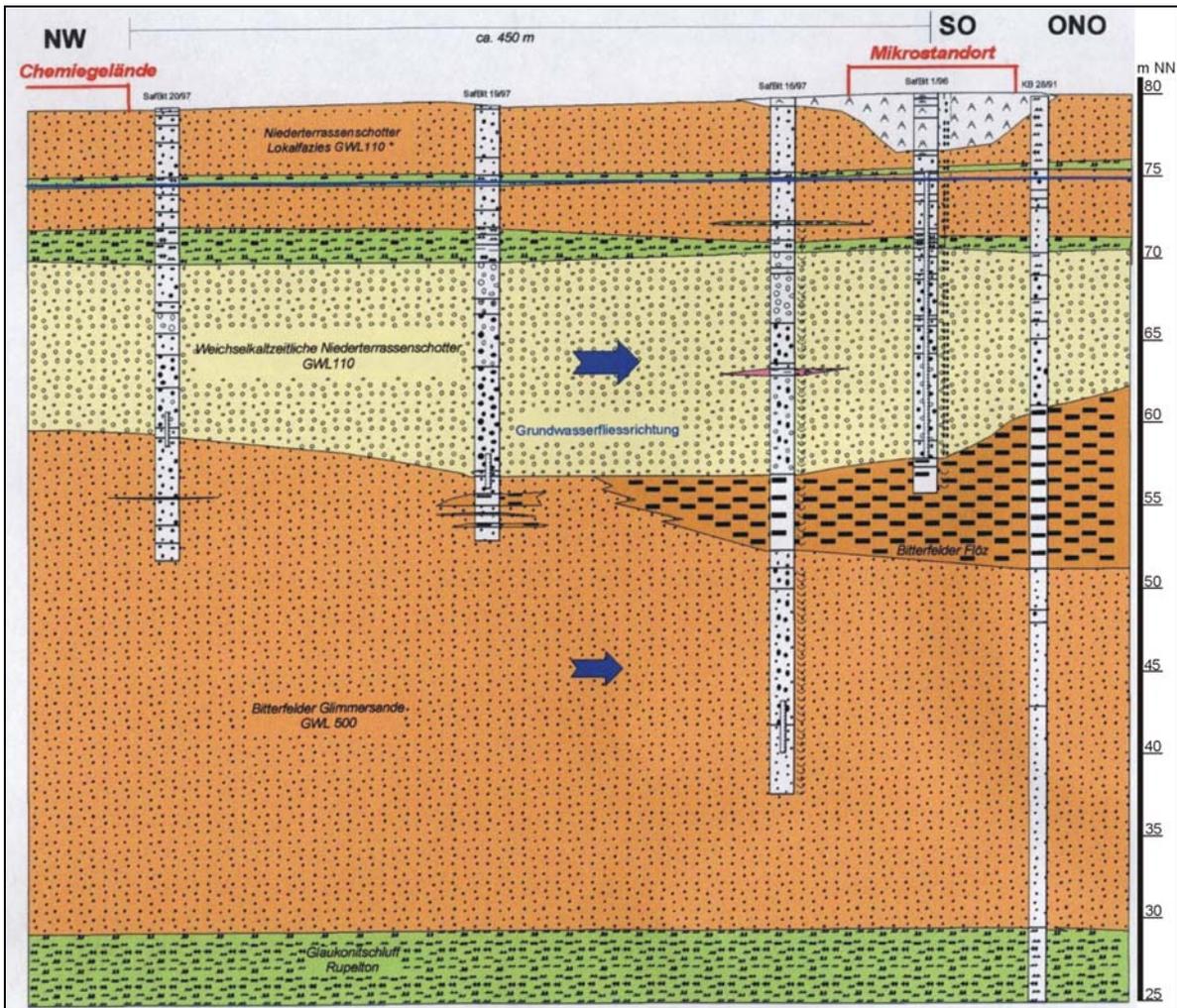


Abbildung 2.2: Geologischer Übersichtsschnitt in Bitterfeld (aus: Ruske et al., 1999).

An die konkordant aufliegenden Glaukonitsande und -schluffe des Oberen Oligozäns schließen die Bitterfelder Glimmersande an, die in einer Tiefe von 20-40 m relativ homogen auftreten und 20-30 m mächtig sein können (Abbildung 2.2). Sie sedimentierten im Oberen Oligozän und im Miozän, als die zunehmende Regression zu einer Flachwasserfazies mit schluffigen glimmerführenden Feinsanden führte. Die Glimmersande bilden den wichtigsten Grundwasserleiter des Tertiärs (GWL500). Die k_f -Werte der Fein- und Mittelsande schwanken zwischen ca. 10^{-5} bis $5 \cdot 10^{-4}$ m/s (Krapp & Ruske, 1992).

Im Miozän folgt der Bitterfelder Flözhorizont, der aus zwei Braunkohlenbänken, in die tonige Schichten eingeschaltet sind, besteht. Die Braunkohlenflöze sind mit bis zu 10 m Mächtigkeit vergleichsweise geringmächtig, aber annähernd gleich ausgebildet. Der Bitterfelder Decktonkomplex schließt das Tertiärprofil im Hangenden ab. Zusammen mit dem Bitterfelder Braunkohlenkomplex stellte er ursprünglich einen ausgedehnten Grundwassergeringleiter dar. Pliozäne Ablagerungen wurden im Untersuchungsgebiet nicht nachgewiesen.

Quartär

Über den tertiären Ablagerungen sind verschiedene quartäre Sedimente zu finden. Im Pleistozän wechselten Warmzeiten mit warmgemäßigem Klima und Kaltzeiten mit arktischem Klima. Im nord- und mitteldeutschen Raum unterscheidet man das Elster-, Saale- und Weichselglazial, die vom Holstein- und Eeminterglazial unterbrochen wurden. Während der Kaltzeiten drangen mächtige Inlandeismassen aus Skandinavien nach Süden vor. Die ver-

stärkte Abkühlung und der Wechsel von Akkumulation und Erosion führten zu einer terrassenförmigen Aufschotterung durch die Flüsse. Die älteste, noch vorhandene Terrasse im Raum Bitterfeld ist die untere frühpleistozäne Saaleterrasse bzw. die Frühelsterterrasse der Saale. Sie ist unter jüngerer Bedeckung weit verbreitet (Knoth, 1995).

Das Untersuchungsgebiet war sowohl im Elsterglazial als auch im Saaleglazial (Drenthe-Stadial mit Zeitzer und Leipziger Phase) zweimal vom Eis bedeckt. Dabei wurden Geschiebemergel der Grundmoränen und Sande abgelagert. Die Geschiebemergel sind vor allem im Süden und Osten des Landkreises Bitterfeld zu finden. Die Sande sind in die Geschiebemergel eingeschaltet oder überdecken sie. In der Regel sind die Elster-Grundmoränen 10-20 m mächtig. Rinnenförmige Strukturen, die mit Moränenmaterial gefüllt sind, erreichen jedoch Mächtigkeiten von 50-70 m (Knoth, 1995); sie durchschneiden die Braunkohlenflöze und Glimmersande, so dass hydraulischer Kontakt zwischen tertiären und quartären Grundwasserstockwerken besteht, der durch den Braunkohlentagebau noch verbessert wurde (s. Kapitel 2.3.2). Die Elster-Grundmoränen zeichnen sich durch einen hohen Anteil an aufgearbeiteten tertiären Sedimenten und älteren Flussschottern aus. Die Anteile an Quarz und Kohlepartikeln sind daher oft erhöht (Knoth, 1995).

Aus der Holstein-Warmzeit sind limnische Ablagerungen bekannt. Wichtiger ist jedoch die Aufschotterung der Mittel- oder Hauptterrassen, die vermutlich in drei Phasen verlief (Knoth, 1995):

- in der Elster-Kaltzeit bis zur frühen Holstein-Warmzeit,
- in der Fuhne-Kaltphase und
- in der Dömnitz-Warmzeit bis zur frühen Saale-Kaltzeit.

Die Hauptterrassen begleiten die Flussläufe der Saale, Mulde und Elster. Weiße Elster und Mulde waren nördlich von Leipzig und bei Bitterfeld vereint, so dass westlich der heutigen Mulde diese Terrasse flächendeckend auftritt. Ihre Akkumulation endete, als das Inlandeis der Saale-Kaltzeit vorstieß. Die Schotter der Mulde enthalten Gerölle von Graniten, Granuliten und nordwestsächsischen Vulkaniten. Die Grundmoränen der Saale-Kaltzeit sind etwa 5-10 m mächtig. Sie unterscheiden sich in der Korngrößenzusammensetzung nur wenig von den elsterzeitlichen Geschiebemergeln, haben jedoch einen höheren Kalkgehalt (Knoth, 1995).

Im Warthe-Stadial des Saaleglazials sowie im Weichselglazial drangen die Inlandgletscher nicht in das Untersuchungsgebiet vor. Daher wirkten periglaziale Frostwechselprozesse, die das vorhandene Material überformten oder umlagerten. Außerdem wurden äolische Sedimente abgelagert: 0,05-3 m Geschiebedecksand, Löß und vor allem Sandlöß bedecken alle Flächen außerhalb der Flusstäler (Krapp & Ruske, 1992). In den Flusstälern setzte zu Beginn der Weichsel-Kaltzeit eine Tiefenerosion ein, der die Akkumulation der Niederterrassenschotter folgte. Die Niederterrasse der Mulde ist im Durchschnitt ca. 8 m mächtig; lokal werden jedoch 12 m erreicht. Sie besteht überwiegend aus groben Schottern und Kiesen (Knoth, 1995).

Im postglazialen Holozän fanden erodierende Prozesse in den Flussniederungen statt. So sind die jüngeren Flusskiese der Mulde, die das heutige Tal der Mulde ausfüllen, sowie begleitende oberflächennahe Talsande fluvialen, holozänen Ursprungs. Des Weiteren sedimentierten bei Überflutungen sandige Schluffe und organisch durchsetzte Tone. In den heutigen Auen sind 1-2 m mächtige Auenlehme und -sande die jüngsten Ablagerungen (Knoth, 1995). Auf den weichselzeitlichen Decksedimenten bildeten sich folgende Bodenregionen

(Meyer & Krönert, 1998): schwarzerdebestimmte Lößlandschaften, sandbeeinflusste Landschaften auf den Geschiebedecksanden, Sandlößlandschaften und Auelandschaften.

Grundwasserführend sind die jüngeren Flussschotter der Mulde sowie die Sande und Kiese der Saale- und Elster-Kaltzeit. Als Grundwassergeringleiter fungiert der saalezeitliche Geschiebemergel. Allerdings sind die gut durchlässigen Schichten großräumig hydraulisch miteinander verbunden, so dass sie als einheitliches quartäres Grundwasserstockwerk (GWL100) betrachtet werden können; es ist etwa 15 m mächtig (Krapp & Ruske, 1992). In der Flussniederung der Mulde wird der Grundwasserleiter z.T. von Auelehmen überdeckt, so dass gespannte Verhältnisse auftreten können. Die k_f -Werte der pleistozänen Sande und Kiese liegen bei ca. 10^{-3} m/s (Krapp & Ruske, 1992). Durch den zyklischen Wechsel der Sedimentationsbedingungen sind die Terrassenschotter jedoch horizontal gegliedert, was zu wechselnder Korngrößenzusammensetzung und damit zu unterschiedlichen Durchlässigkeiten führt (Ruske et al., 1997).

Entwässerungssysteme

Hydrographisch gehört das Untersuchungsgebiet zum Einzugsgebiet der Elbe. Es wird durch die Mulde, die bei Dessau in die Elbe mündet, und ihre Nebenflüsse, Fuhne, Leine und Lober, entwässert. Ursprünglich strömte das Grundwasser aus dem quartären Grundwasserleiter diesen Vorflutern weitflächig unter einem Gefälle von ca. 1 ‰ mit einer Fließgeschwindigkeit von etwa 0.5 m/d in NE-Richtung zu (Braun & Krapp, 1992). Dieses recht einfache Bild wurde jedoch durch Grundwasserhebungsmaßnahmen stark verändert (vgl. Abbildung 2.1, Kapitel 2.3.2).

2.3 Entwicklung und Umweltfolgenwirkungen von Bergbau und Chemieindustrie

Die Miozänen Braunkohlenflöze wurden in Bitterfeld seit Mitte des 19. Jahrhunderts abgebaut und waren entscheidend für die Ansiedlung chemischer Industrie am Ende des 19. Jahrhunderts, die sich in den folgenden Jahrzehnten zur Großindustrie entwickelte. Die jahrzehntelangen bergbaulichen und industriellen Aktivitäten hinterließen in Bitterfeld-Wolfen schwerwiegende Veränderungen und Belastungen des Landschaftshaushaltes:

- Der Abbau von Braunkohlenflözen und die Verkippung von Abraum und Abfällen haben die gewachsenen geologischen Verhältnisse stark verändert.
- Stoffemissionen aus den Betrieben und Deponien verunreinigten Luft, Boden, Oberflächengewässer und Grundwasser gravierend und großräumig. Im Landkreis Bitterfeld waren 1991 199 Altstandorte und 132 Altablagerungen erfasst, wobei 23 Altablagerungen ein hohes Gefährdungspotential aufwiesen (TÜV Rheinland, 1992).
- Die Sumpfungmaßnahmen in den Tagebauen beeinflussten die Grundwasserströmung und damit auch die Ausbreitung von Schadstoffen.

Aufgrund der desolaten Umweltsituation wurden Anfang der 1990er Jahre zahlreiche Maßnahmen zur kurzfristigen Gefahrenabwehr sowie zur längerfristigen Regeneration und zur Überwindung des unzureichenden Kenntnisstandes ergriffen (Dühr, 1999; Lindemann, 2000). Zu den zahlreichen Forschungs- und Entwicklungsprogrammen, die neben umweltmedizinischen Aspekten vor allem die Erkundung und Sanierung der Boden- und Grundwasserkontaminationen beinhalteten, gehören:

- das Sofortprogramm Bitterfeld (Thielebeule, 1991),
- das Ökologische Sanierungs- und Entwicklungskonzept Leipzig/Bitterfeld/Halle/Merseburg (TÜV Rheinland, 1992),
- das Nationale Sonderprogramm Bitterfeld - Halle - Merseburg (MUN, 1994)
- die Ökologischen Großprojekte Chemie AG Bitterfeld-Wolfen und Filmfabrik Wolfen (Lindemann, 2000) und
- Sanierungsforschung in regional kontaminierten Aquiferen (Weiß et al., 1997, 1999).

Im Folgenden wird auf die wichtigsten industriellen Entwicklungen und deren Umweltfolgen eingegangen.

2.3.1 Entwicklung des Braunkohlenbergbaus

Versuche, Braunkohle zu fördern, begannen in Bitterfeld Anfang des 19. Jahrhunderts, waren jedoch erst ab 1839 erfolgreich, nachdem Dampfmaschinen und Pumpen zur Hebung des Grundwassers eingesetzt wurden (Liehmann, 1993). In den folgenden Jahren entstanden weitere Braunkohlengruben um Bitterfeld, Greppin, Holzweißig, Muldenstein, Sandersdorf, Thalheim, Wolfen und Zscherndorf. Aufschluss, Ende und Folgenutzung der Gruben und späteren Tagebaue sind im Anhang A 2.1 zusammengestellt. Sie gehörten zum Bitterfelder Revier, das sich über Bitterfeld und Gräfenhainichen, im Süden bis nach Delitzsch und Brehna, im Norden bis nach Köthen und Wittenberg erstreckte (Liehmann, 1996). Die Hauptlagerungen des Reviers lagen zwischen Wolfen, Brehna und Delitzsch. Abgebaut wurde das Miozäne Bitterfelder Braunkohlenflöz (s.o.). Die Jahresförderung an Braunkohle ist in Abbildung 2.3 dargestellt.

Der hohe Wassergehalt und damit schlechte Heizwert der Bitterfelder Kohle war ein Wettbewerbsnachteil, der durch das Braunkohlenbrikett kompensiert wurde. Die ersten Brikettfabriken entstanden 1872 an der Deutschen Grube sowie an den Gruben Antonie und Louise. 1908 folgte die Holzweißiger Brikettfabrik der Grube Leopold (Liehmann, 1993).

Bei der Braunkohlenförderung fielen die Bitterfelder Decktone als Abraum an. Diese hochwertigen Tone waren Basis für Ziegeleien und Tonwarenfabriken, die vor allem Tonröhren herstellten, welche in der Kanalisation und später in der chemischen Industrie eingesetzt wurden (Liehmann, 1993). Neben den Brikettfabriken und der Keramikindustrie entwickelte sich als dritter Zweig die Eisen- und Stahlindustrie.

Ab 1890 war eine Rezession unter den drei genannten Industriezweigen zu verzeichnen. Demgegenüber erblühte die chemische Industrie, weil Seifen, Papier, Farben und Textilien sehr gefragt waren. Neben zahlreichen Teerfarbenfabriken entstanden Fabriken, die Grundchemikalien wie Soda oder Schwefelsäure herstellten. Viele Produktionstechniken waren energieintensiv und nur in Großanlagen rentabel, so dass Standorte mit einer billigen Energiequelle gesucht wurden. Mit der Ansiedlung der Chemiebetriebe 1893 stieg die Braunkohlenförderung im Bitterfelder Revier stetig an (Abbildung 2.3). Die chemischen Werke vereinbarten bei ihrer Niederlassung Kohlenlieferungen mit den ansässigen Braunkohlenwerken. Die Verträge schrieben z.T. bereits den Versturz von Aschen und Produktionsrückständen in die Kohlengruben fest (Hentzsch, 1996), wodurch vermutlich bereits Schadstoffe ins Grundwasser gelangten. Später gingen die Betriebe dazu über, sich eine eigene Rohstoffbasis zu schaffen. Nach der Fusion zur IG Farben (s.u.) entwickelte sich dieser Konzern in den zwanziger Jahren zum zweitgrößten Kohlenproduzenten in Deutschland. Die Großchemie besaß Ende der 1920er Jahre 90 % der Bitterfelder Lagerstätten. Der große Bedarf an Braunkohle erforderte immer bessere Abbautechniken: 1928/1933 setzte die Großraumförderung in den Gruben ein (Liehmann, 1993).

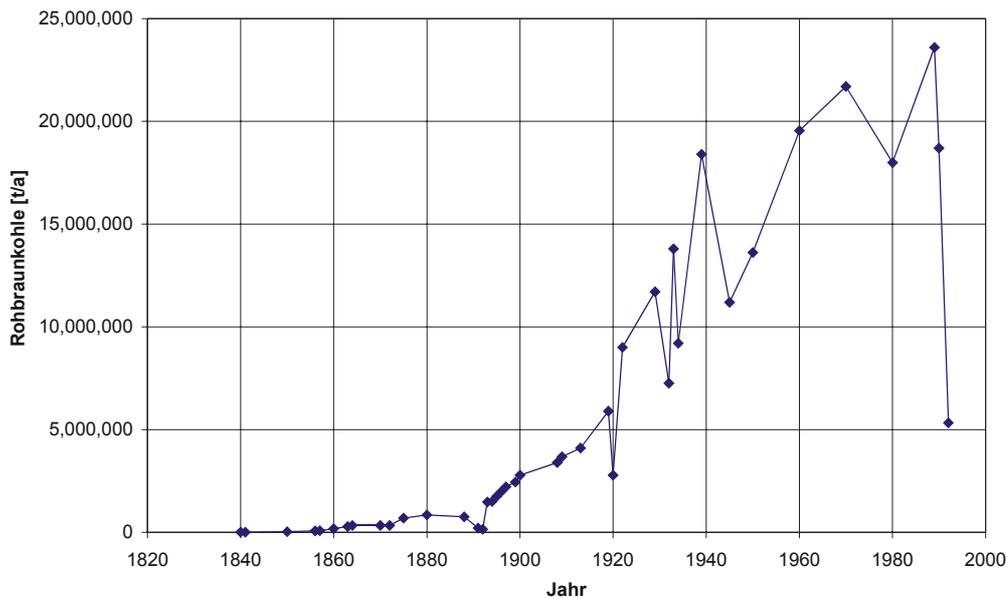


Abbildung 2.3: Braunkohlenförderung im Bitterfelder Revier (zusammengestellt aus: Liehmann, 1993, 1996; Bitterfelder Bergleute e.V., 1998).

Die Braunkohle war die wichtigste Energiequelle für die Chemiebetriebe und wurde überwiegend in Kraftwerken verfeuert. Die hohen Aschemengen wurden in ausgekohlte Gruben eingebracht. Die Asche vom Kraftwerk Süd wurde in die Gruben Luise und Marie sowie von 1955 bis 1990 in die Grube Freiheit IV gespült. Für das Kraftwerk der Filmfabrik wurde die Grube Hermine, für das Kraftwerk der Farbenfabrik die Grube Greppin (1918-1955) genutzt. Die Aschen haben ein hohes Sorptionsvermögen, was die Mobilität von organischen Schadstoffen verringert. Allerdings ist nichts über ihre Langzeitwirkung bekannt.

1948 wurden Tagebaue und Brikettfabriken in Braunkohlenwerken (BKW) und 1980 im VEB Braunkohlenkombinat Bitterfeld (BKK) zusammengefasst. Anfang der achtziger Jahre ging die Förderung im Bitterfelder Revier zurück, was auf den bevorzugten Ausbau des Lausitzer Reviers zurückzuführen ist. In den 80er Jahren erfolgte jedoch ein erneuter Ausbau der Tagebaue (z.B. Rösa) bzw. ein beschleunigter Abbau von Feldern (z.B. Köckern).

Nach der politischen Wende 1989 wurde die Braunkohlenförderung in Bitterfeld-Wolfen bis 1993 eingestellt. Daher mussten die bisherigen Landschaftsplanungen durch Planungen zur Sanierung der Bergbaufolgelandschaften ersetzt werden. Insgesamt wurde in den mitteldeutschen Tagebauen der Abbau seit 1989 von ca. 115 Mio. t/a auf ca. 16 Mio. t/a reduziert (Meinicke & Ebersbach, 1996). Dieser drastische Rückgang ist zum einen auf einen verminderten Energiebedarf durch den Zusammenbruch der Industrie zurückzuführen. Des Weiteren wurde die Braunkohle weitgehend durch Gas, Öl oder Steinkohle ersetzt: Aus einer Tonne Erdöl kann dieselbe Menge an Endprodukten produziert werden wie aus 20 t Braunkohle (Liehmann, 1998).

2.3.2 Einflüsse des Bergbaus auf die geologischen und hydrogeologischen Verhältnisse

Insgesamt sind 9 % der Fläche im gesamten Landkreis Bitterfeld durch den Bergbau beeinflusst (Villwock, 1997), im Untersuchungsgebiet mindestens ein Drittel der Fläche (vgl. Abbildung 2.1). Durch den Abbau der Braunkohlenflöze und die Verkippung des nicht nutzbaren Abraums ist das gewachsene geologische Profil (Kapitel 2.2) z.T. bis zu den Bitterfelder Glimmersanden gestört. Weiträumig fehlen heute die grundwasserstauenden Schichten des Miozän (Bitterfelder Flöz und Deckton). Aufgrund des engen hydraulischen Kon-

taktes werden die quartären Schichten, der umgelagerte Abraum (Kippen) und die Glimmersande in den Bergbaufolgelandschaften als zusammenhängender Aquifer betrachtet (Krapp & Ruske, 1992).

Typisch für das Bitterfelder Revier sind Zugbetriebstagebaue, in denen der Abraum mit Absetzern so verkippt wird, dass der größte Teil der Tagebauflächen wieder flaches Ackerland wird. In der Anlaufphase eines Tagebaus wird der Abraum in einen älteren Tagebau verkippt. Nach dem Auslaufen der Kohlenförderung wird das verbleibende Restloch durch aufsteigendes Grundwasser oder durch Flutung mit Fremdwasser zu einem Restsee, oder es wird mit Fremdmaterial verfüllt. Burchardt & Strobel (1992) unterscheiden drei Arten von Auffüllungen (Abbildung 2.4):

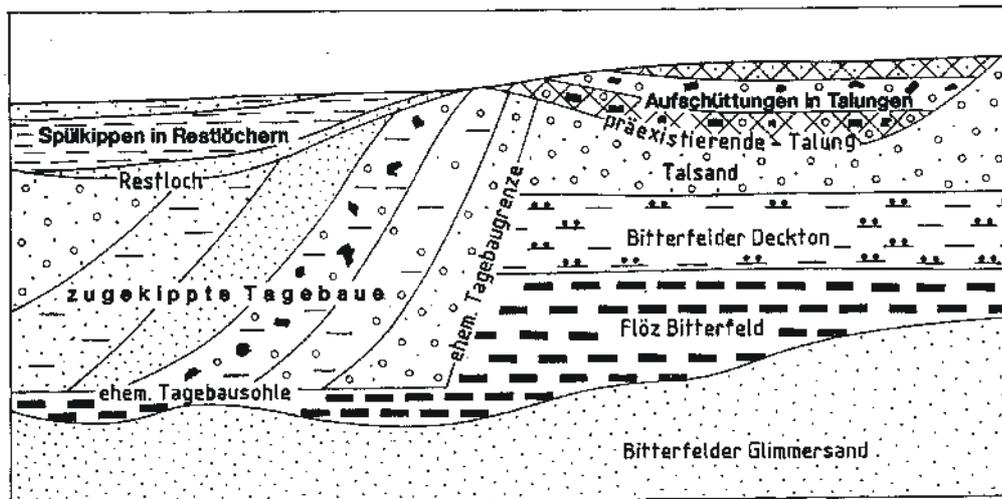


Abbildung 2.4: Formen anthropogener Umlagerung im Raum Bitterfeld (aus: Burchardt & Strobel, 1992).

1. Restlöcher wurden mit Abraum aus anderen Tagebauen, Asche und Bauschutt aufgefüllt. Die Schichten ändern ihre Zusammensetzung in horizontaler und vertikaler Richtung rasch, da die Abraummassen oft aus großen Höhen als Gleiskippen verkippt wurden.
2. Einige Tagebaurestlöcher wurden als Deponien oder Absetzbecken für flüssige und pastöse chemische Abfälle genutzt (vgl. Anhang A 2.1, Tabelle 2.8). Diese wurden auf Spülkippen zusammen mit Aschen eingespült und schwemmten so die Restlöcher zu. Zum Teil wurde vorher oder gleichzeitig quartäres Lockermaterial verkippt. Insbesondere ungesicherte Restlochdeponien (d.h. Deponien ohne Basisabdichtung) gefährden das Grundwasser stark. Solche Altlagerungen sind in Tabelle 2.8 mit der Priorität I gekennzeichnet.
3. Auch in nicht von Bergbau beeinflussten Gebieten sind Auffüllungen mit Sedimenten des Quartärs, Bauschutt, Asche und Schlacken zu finden. Diese lagenweise aufgeschütteten Schichten dienten größtenteils zur Planierung bei Bauvorhaben. Ihre vertikale Zusammensetzung ändert sich stark; ihre Mächtigkeiten sind gering (< 1 m bis maximal 5 m).

Die ursprünglichen Grundwasserverhältnisse wurden und werden z.T. noch immer durch Sumpfungmaßnahmen, d.h. Grundwasserentnahmen in den Tagebauen, und durch Flutungmaßnahmen verändert. Durch die Grundwasserabsenkungen in den Tagebauen Köckern und Goitsche sowie durch die nach Norden abfließende Mulde, bildete sich westlich der Industriegebiete eine prägnante Grundwasserscheide mit geringem hydraulischen

Gefälle. Sie verlief von Wolfen in südwestlicher Richtung über Landsberg und Queis bis Schkeuditz (Peter et al., 1995).

Abbildung 2.1 zeigt die Grundwassergleichen von 1996. Deutlich erkennbar ist die Absenkung um den Tagebau Goitsche im Südosten. Im Süden sind Absenktrichter der Restlöcher Freiheit III und Freiheit IV zu sehen. Da 1996 der Tagebau Köckern bereits geflutet wurde, wird das Grundwasser hier nicht mehr stark abgesenkt. Auch die Grundwasserscheide tritt im Vergleich zu den Vorjahren nicht mehr auf. Die Flutungen der Tagebaue Köckern und Goitsche spiegeln sich also bereits im Isohypsenbild wider: Die ursprünglichen Fließverhältnisse in Richtung der Mulde stellen sich wieder ein.

In der Region gibt es zahlreiche Tagebaurestseen. Durch die Flutung des Tagebaus Goitsche entsteht bis 2002 eine Wasserfläche von 24 km². Insgesamt steigt die Wasserfläche im Landkreis Bitterfeld von etwa 15 km² auf über 40 km² (Villwock, 1997). Aus der erhöhten Evaporation können zusammen mit einer erhöhten Transpiration aufgrund der Vegetationsentwicklung niedrigere Grundwasserneubildungs- und Abflussraten sowie Einflüsse auf das Mikroklima resultieren. Das Untersuchungsgebiet liegt am Rande des mitteldeutschen Trockengebietes und erhält mittlere jährliche Niederschlagsmengen von nur etwa 580-620 mm, von denen etwa drei Viertel verdunsten und der Rest direkt oder als Grundwasserneubildung/Basisabfluss abfließt (Trefflich, 1997). Daher hinterlassen die Wasserentnahmen in den Tagebauen und die Flutungen der Restlöcher ein Wasserdefizit, das erst in Jahrzehnten wieder ausgeglichen werden kann.

2.3.3 Entwicklung und Produktion der chemischen Industrie

Die Ansiedlung von chemischer Industrie begann in Bitterfeld 1893 durch die Elektrochemischen Werke, Berlin und die Chemische Fabrik Griesheim-Elektron (CFG). Die Aktiengesellschaft für Anilinfarben zu Berlin (AGFA) errichtete 1895 die Greppiner Fabrik (später Farbenfabrik Wolfen oder Wolfen-Farben) und 1909 eine Filmfabrik in Wolfen. Die Produktionsbereiche der Betriebe sind Tabelle 2.2 zu entnehmen. Neben der verkehrsgünstigen Lage und der vergleichsweise preiswerten Braunkohle waren folgende Standortvorteile von Bedeutung (Kretschmer, 1993):

- die Nähe zu den Kalisalzlagerstätten im Bernburger und Staßfurter Revier,
- Tonrohstoffe (Bitterfelder Decktone),
- ausreichende Wasservorräte (Mulde, Pumpwasser der Tagebaue),
- günstige Möglichkeiten der Abwasserrückleitung und
- die Nutzung von Tagebaurestlöchern als Deponien,
- niedrige Bodenpreise und niedrige Lohnkosten (am Ende des 19. Jahrhunderts) sowie
- eine produktive Baustoffindustrie.

Neben den genannten Unternehmen siedelten sich weitere Betriebe an: die Farbenfabrik Hochstetter und Banse in Bitterfeld, die Chemische Fabrik Salzbergwerk Neustaßfurt und Teilnehmer bei Zscherndorf, die Maintalwerke mit den Fabrikationen von Chlorbenzol und Monochloressigsäure in Bitterfeld und die Chemischen Werke Zscherndorf GmbH bei Zscherndorf (Albrecht & Kretschmer, 1993). Diese Werke werden später kaum noch erwähnt, da kleine und spezialisierte Chemiebetriebe durch die rasche Entwicklung in der Forschung wieder vom Markt verdrängt wurden. Großbetriebe hingegen erweiterten ihre Produktion sowohl horizontal in der Angebotsbreite als auch vertikal durch Einbeziehung aller Schritte von den Grundchemikalien bis zu den Handelswaren (Abbildung 2.5). Auf diese Weise blieben in Deutschland innerhalb von 30 Jahren nur wenige große und kapitalkräftige Unternehmen übrig, aus denen 1925 der Großkonzern IG Farben hervorging. Darin über-

nahm die BASF die Firmenvermögen von BAYER, HOECHST, AGFA, Weiler-ter-Meer sowie der CFGE und änderte ihren Namen in Interessengemeinschaft Farbenindustrie Aktiengesellschaft (IG Farben) (Tammen, 1978).

Der Kern der **IG Farben** bestand aus den acht Werken Merseburg (Leuna), Oppau, Leverkusen, Ludwigshafen, Hoechst, Wolfen-Film, Bitterfeld und Wolfen-Farben. Durch Anteile an Aktiengesellschaften oder durch direkt abhängige Tochterunternehmen war die IG Farben an über 40 weiteren Betrieben im In- und Ausland beteiligt. In der IG Farben blieben die Firmennamen erhalten, aber die Werke wurden gemeinsam organisiert, Forschung und Produktion rationalisiert und konzentriert. Die Werke Bitterfeld und Wolfen-Farben wurden der Betriebsgemeinschaft (BG) Mitteldeutschland, Wolfen-Film der BG Berlin zugeteilt. Neben diesen regionalen Strukturen wurden vier Verkaufsgemeinschaften (VG) und drei produktionstechnische Sparten gegründet, in denen technisch verwandte Produktionen oder chemisch verwandte Produkte zusammengefasst wurden (Tammen, 1978).

Der wirtschaftliche Erfolg der chemischen Industrie hatte insbesondere in den beiden Weltkriegen große Bedeutung (vgl. Tammen, 1978; Schneckenburger, 1988; Martinetz, 1996). Im ersten Weltkrieg entwickelte und lieferte die Chemie Sprengstoffe, Giftgase¹ und andere Rüstungsgüter. Ab 1933 trieb die Autarkiepolitik der Nationalsozialisten die Entwicklung in der Chemie stark voran. Durch Konzentration von Forschung, Produktion und Verkauf konnte die IG Farben auf diversen Gebieten Innovationen vorweisen (Schneckenburger, 1988; Plumpe, 1990). Für Bitterfeld-Wolfen sind die Bereiche der Leichtmetalle, Kunststoffe und Kunstfasern sowie die Fotoindustrie relevant (vgl. Tabelle 2.2)².

Nach dem zweiten Weltkrieg wurde der Auslandsbesitz der IG Farben eingezogen, die Patente veröffentlicht und das Unternehmen liquidiert. Die Produktionseinheiten der IG Farben unterstanden den Besatzern der jeweiligen Zone, Bitterfeld-Wolfen somit vom 14./15.04.1945 bis 30.06.1945 der amerikanischen, ab 01.07.1945 der sowjetischen Macht.

Tabelle 2.2: Produktionsschwerpunkte der Chemischen Betriebe (vor 1945) (aus: Plumpe, 1990; Albrecht & Kretschmer, 1993; Hentzsch, 1996; Finger, 1996).

	Standort	Schwerpunkte
CFGE	Bitterfeld-Süd	anorganische Produkte: z.B. Chlor, Natronlauge, Kalilauge, Phosphor Schwermetalle Leichtmetalle: u.a. Aluminium, Magnesium Stahlveredler: Chrom, Wolfram, Molybdän, etc. Kunststoffe: vor allem Polyvinylchlorid (PVC)
Elektrochemische Werke (ab 1920/21 zur CFGE)	Bitterfeld-Nord	anorganische Produkte: u.a. Chlor, Phosphor organische Stoffe: u.a. Monochlorbenzen, Monochloressigsäure
AGFA, Wolfen-Farben	Greppin / Wolfen	Azo- und Anilinfarben organische Stoffe: u.a. Nitrobenzol, Anilin, Naphtol Säuren: z.B. Naphtylaminsulfonsäuren, Salpetersäure
AGFA, Wolfen-Film	Wolfen	Filme: Schwarz-Weiß-Filme, Farbfilme, Tonfilme Magnetbänder Kunstfasern: Nitrozellulose, Viskose, Acetatseide Kunststoffe: PVC, Polyamid (PA, Nylon, Perlon, Dederon), Polyacrylnitril (PAN, Dralon)

¹ Im ersten Weltkrieg setzte Deutschland erstmals 1915 die Giftgase Chlor und Phosgen ein. Chlor und Phosgen sind Vorprodukte bzw. Abfallprodukte bei der Farbstoffherstellung (Martinetz, 1996).

² Für den zweiten Weltkrieg wurden insgesamt 160 Haupterzeugnisse der IG-Werke in Bitterfeld und Wolfen ausschließlich für die Rüstung hergestellt (Hentzsch, 1996).

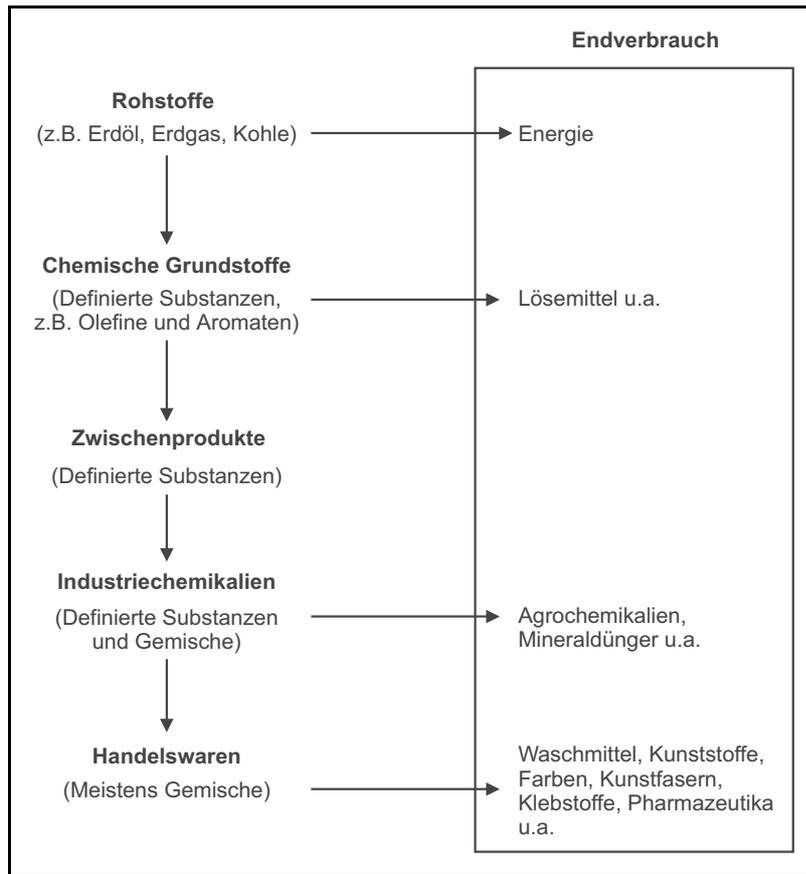


Abbildung 2.5: Stufen der Anwendungsmuster von Chemikalien (verändert nach: Parlar & Angerhöfer, 1995).

In der sowjetischen Besatzungszone wurden die IG Farben-Werke entweder demontiert oder in so genannte Sowjetaktiengesellschaften eingebracht. 1952 wurden die ehemaligen Werke der CFGE als VEB Elektrochemisches Kombinat Bitterfeld (EKB) und die ehemalige AGFA-Farbenfabrik als VEB Farbenfabrik Wolfen an die DDR übergeben. Das EKB wurde 1969 mit der Farbenfabrik Wolfen zum VEB **Chemiekombinat Bitterfeld (CKB)** vereinigt.

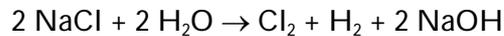
Die **Filmfabrik** wurde 1954 als VEB Film- und Chemiefaserwerk AGFA Wolfen Staatsbetrieb. Unter Druck der DDR-Regierung kündigte die Filmfabrik 1963 das Warenzeichen-Abkommen mit dem AGFA-Werk in Leverkusen und führte das Warenzeichen ORWO (Original WOlfen) ein.

Die Produktion entwickelte sich zunächst nur langsam, da es Rohstoffprobleme, Absatzschwierigkeiten, technische Störungen und Stromeinschränkungen gab (Hentzsch, 1996). Dies änderte sich mit dem Chemieprogramm von 1958, das eine Verdopplung der chemischen Produktion bis 1965 und eine wirtschaftliche Vernetzung mit den Ostblockstaaten vorsah. Unter der Parole „Chemie gibt Brot, Wohlstand und Schönheit“ wurde die traditionelle, aber umweltbelastende Karbochemie ausgebaut und die Petrochemie in Mitteldeutschland aufgebaut. Nach 1970 wurden in Bitterfeld-Wolfen die Standorte der Vorkriegszeit um Flächen westlich von Greppin mit neuen Industrieanlagen erweitert, so dass eine geschlossene industrielle Zone zwischen Bitterfeld und Wolfen entstand. 1989 nahm das CKB 849 ha mit 115 km Gleisanlagen und über 50 km Rohrbrücken, die Filmfabrik 339 ha ein (Dühr, 1999).

Nach und nach wirkte sich das Alter der Anlagen negativ auf die Effizienz der Produktion und auf die Belastung der Umwelt aus. Bei zu hohen Kosten und mit großem Personalaufwand wurde trotzdem ein breites Produktspektrum angeboten: anorganische und organi-

sche Grundstoffe, Metalle, Ionenaustauscher, Pflanzenschutzmittel, Farbstoffe, Kunststoffe, Waschmittel und Synthesefasern sowie andere Konsumgüter. Insgesamt wurden im EKB 2700 verkaufsfähige Produkte hergestellt, im CKB über 4500 (Hentzsch, 1996).

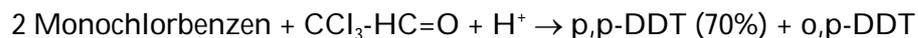
Bestimmend für die Region Bitterfeld-Wolfen ist die **Chlorchemie**. Die Elektrochemischen Werke und die CFGE bauten 1894 Anlagen zur Chloralkali-Elektrolyse. Darin werden Natronlauge und Chlorgas mit Strom erzeugt:



Natronlauge wurde vor allem in der Seifenproduktion gebraucht. War das Chlorgas zu Beginn des 20. Jahrhunderts noch ein Abfallprodukt, hingen am Ende des 20. Jahrhunderts über 60 % der chemischen Industrie (bezogen auf den Umsatz) direkt oder indirekt vom Chlor ab. Zwei Drittel der Produkte sind letztlich nicht mehr chloriert, werden aber über chlorierte Zwischenprodukte hergestellt (van Embden, 1991). Mittlerweile hat sich die Absatzlage umgedreht: Der Markt und Absatz chlororganischer Produkte ist weltweit so groß, dass die riesigen Mengen an Natronlauge kaum zu verwerten sind (von Osten, 1991).

Das EKB/CKB war der größte Chlor- und Chlorprodukterzeuger der DDR. Dort produzierte man etwa die Hälfte des Chlorgases. 1981 ging die Chlor IV-Anlage bei Greppin in Betrieb, wodurch die Produktion nochmals deutlich anstieg (Tabelle 2.3). Mit dem größten Teil des Chlorgases wurden in Bitterfeld-Wolfen leichtflüchtige halogenierte Kohlenwasserstoffe (LHKW) hergestellt, während die Produktion von Chloraromaten stetig abnahm (Heinisch, 1992). Diese Substanzen werden z.B. als Lösemittel eingesetzt, sind aber auch Zwischenprodukte bei der Herstellung anderer Stoffe, wie Farbstoffe oder Pestizide (vgl. Anhang A 2.2). Aufgrund der Stoffvielfalt ist es unmöglich, alle möglichen Ausgangs-, Zwischen- und Endprodukte und deren Produktionsmengen zu erfassen. Besondere Aufmerksamkeit sollen jedoch die beiden Organochlor-Pestizide DDT und HCH (Lindan) erhalten, da sie in Bitterfeld in großen Mengen produziert wurden und eine hohe Umweltrelevanz besitzen.

Die Verbindung **DDT** (1,1,1-Trichlor-2,2-bis-(p-Chlorphenyl)-ethan) wurde erstmals 1874 durch Zeidler synthetisiert, ihre insektizide Wirkung 1939 durch Müller entdeckt. Sie wird durch eine Kondensationsreaktion zwischen Chlorbenzenen und Chloral unter Einfluss von Schwefelsäure hergestellt:



Das technische Gemisch enthält verschiedene DDT- und DDD-Isomere (Tabelle 2.4) und bis zu 2,5 % Chlorbenzen. Vor der Weiterverarbeitung wird es umkristallisiert, so dass die handelsüblichen Präparate für Pflanzenschutz und Hygiene geringere Anteile an den o,p-Isomeren und DDD haben. Der DDT-Wirkstoff wurde im CKB bis 1973 mit ca. 2500 t/a hergestellt (1968: 7500 t/a) (Heinisch, 1992).

Da DDT sehr persistent ist, wird es durch meteorologische Abläufe global verteilt und sammelt sich in bestimmten Umweltkompartimenten an. Die Anreicherung in marinen Nahrungsketten verursachte z.B. einen Rückgang von Seevögelpopulationen. Daher wurde der hohe Einsatz von DDT als Pestizid zur Malariabekämpfung seit den 1970er Jahren immer weiter eingeschränkt (Henschler, 1994).

Hexachlorcyclohexan (HCH) wurde von Michael Faraday 1825 erstmals synthetisiert. Die insektizide Eigenschaft des gamma-Isomers wurde 1941/42 entdeckt und nach v. d. Linden, der es 1912 aus einem technischen Gemisch isolierte, Lindan genannt. Hergestellt wird HCH aus Benzen, das unter UV-Strahlung chloriert wird. Da dabei fünf der acht möglichen Isomere entstehen, enthält technisches HCH nur zu 9-18 % das gamma-Isomer (Tabelle 2.5). Die

anderen Isomere werden fast ausschließlich deponiert, in Bitterfeld zum größten Teil in der Grube Antonie (vgl. Anhang A 2.1., Tabelle 2.8). Die Produktion von technischem HCH und Lindan erfolgte im CKB bis 1982, die Mengen sind Abbildung 2.6 zu entnehmen.

Tabelle 2.3: Chlorproduktion und Cl₂-Gesamtemissionen des Chemiekombinats Bitterfeld (aus: Emissionsbericht des CKB 1989, zitiert in Heinisch, 1992).

Jahr	Chlorproduktion [t/a]	Cl ₂ Gesamtemission [t/a]
1970	165000	11612
1975	167800	3120
1980	169200	2579
1985	256400	1631
1988	---	1317
1989	278700	1145

Tabelle 2.4: Zusammensetzung des technischen DDT-Gemisches (nach Perkow 1968, zitiert in Heinisch, 1992).

Verbindung	prozentualer Anteil
p,p-DDT	63 – 77
o,p-DDT	15 – 21
o,o-DDT	0,5 – 1
p,p-DDD	0,3 – 4
o,p-DDD	0,4
sonstige	0,5 – 2

Tabelle 2.5: Zusammensetzung von technischem HCH (aus: Heinisch, 1992).

Isomere	min. Anteil [%]	max. Anteil [%]	häufigste Zahl [%]
alpha	55	70	65
beta	5	14	8
gamma	9	18	14
delta	2	10	6
epsilon	1	5	2

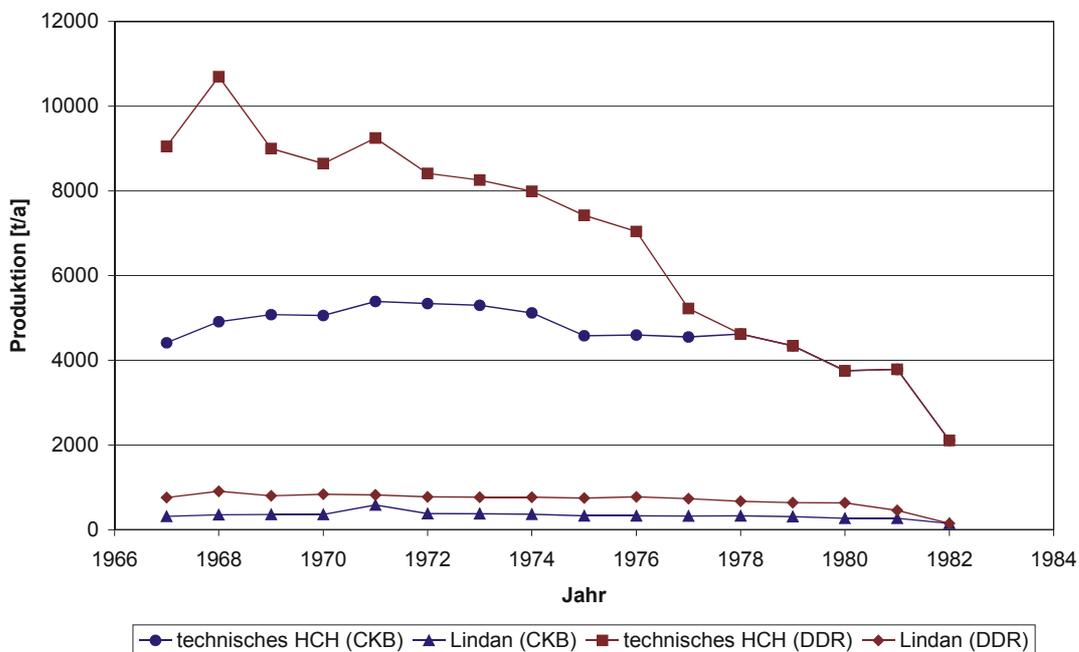


Abbildung 2.6: Produktion von technischem HCH und Lindan im Chemiekombinat Bitterfeld (CKB) und in der DDR insgesamt (Datenquelle: Heinisch, 1992).

Mit der politischen Wende 1989/90 wurden die Chemiekombinate aufgelöst; man bildete die **Chemie AG Bitterfeld-Wolfen (CAG)** und die **Filmfabrik Wolfen AG** (MUN, 1994). Die Liquidation der Filmfabrik Wolfen wird seit 1994 von der Wolfener Vermögensverwaltung i.L. AG (WVV) durchgeführt. Daneben entstand 1994 die Bitterfelder Vermögensverwaltung Chemie GmbH (BVV).

Der politische Wandel veränderte alle Wirtschafts- und Lebensbereiche grundlegend. Durch die Währungsumstellung, den Wegfall traditioneller Märkte bei gleichzeitiger Konfrontation mit dem Weltmarkt waren viele Betriebe nicht mehr wettbewerbsfähig. Die fehlende Konkurrenzfähigkeit vieler Ostprodukte und die Privatisierung kamen erschwerend hinzu (Dühr, 1999). So wurden in Bitterfeld-Wolfen flächenhaft veraltete Anlagen stillgelegt und abgebrochen: Von den ursprünglich 90 Anlagen waren 1991 bereits 40 stillgelegt (Ihl, 1999).

Nachdem belastete Betriebsflächen saniert waren (vgl. Lindemann, 2000), versuchte man, chemische Industrie mit modernen Anlagen sowie Gewerbe- und Dienstleistungsbetriebe im ChemiePark Bitterfeld und im Industriepark Wolfen-Thalheim (seit 1997/98 ChemiePark Bitterfeld-Wolfen), neu anzusiedeln (vgl. Dühr, 1999). Die gute Infrastruktur in Bitterfeld (Vernetzung der Betriebe, Anlagen zur Produktion von Chlor und Phosphor) und die Chemieakzeptanz sorgten dafür, dass sich bis 1999 schon 200 neue Firmen niedergelassen haben. In Wolfen verlief die Ansiedlung schleppender (Ihl, 1999). Die aktuellen Entwicklungen werden vielfach kritisiert, da ausdrücklich an der Chlorchemie festgehalten wird (vgl. Henseling, 1992).

2.3.4 Stoffliche Belastungen der Umwelt

Eine nicht auf Langfristsicherheit auslegte Entsorgung von Produktionsrückständen sowie veraltete Anlagen und Produktionsverfahren führten zu einer unkontrollierten Stofffreisetzung in Luft, Boden, Oberflächenwasser und Grundwasser. Die Belastung eines Mediums hängt nicht nur von Art und Ausmaß der Stoffeinträge, sondern auch von seiner Beschaffenheit ab: Die Transportgeschwindigkeit im Medium, der Transfer zwischen den Medien sowie die Reaktions- und Aufnahmefähigkeit eines Mediums bestimmen die räumliche und zeitliche Reichweite und Dynamik einer Belastung (Beschränkung auf den Eintragsort oder Transfer in andere Gebiete oder Medien). So reagieren Luft und Fließgewässer relativ schnell auf Veränderungen, während Boden und Grundwasser träger sind. Hier können auch viele wichtige und effektive Abbauprozesse (z.B. photochemische Reaktion) gar nicht wirksam werden, so dass viele Stoffe im Grundwasser persistenter sind als in anderen Medien.

Die Entwicklung von immissionsbedingten Stoffeinträgen in Bitterfeld und Umgebung beschreiben Neumeister et al. (1997) und Popp et al. (2000). Die **Luftbelastung** erfolgte durch die (ungefilterte) Abluft aus den Kraftwerken und den Chemieanlagen und ist seit 1989 deutlich zurückgegangen (Tabelle 2.3, Tabelle 2.6). Zwischen 1970 und 1980 verbesserte sich die Luft bereits: Durch die Stilllegung bzw. Modernisierung des Kraftwerkes Süd ging z.B. der Ascheeinfall um 75-80 % zurück (Hentzsch, 1996).

Tabelle 2.6: Emissionen ausgewählter Luftschadstoffe in 1000 t/a im ChemiePark Bitterfeld (aus: Umweltreport Bitterfeld 1996, zitiert in Dühr, 1999).

Jahr	SO ₂	Staub	Cl ₂	HCl	NO _x
1970	120.00	58.00	11.60	3.10	7.80
1980	45.00	15.00	2.60	0.60	6.40
1989	42.60	18.90	1.20	0.50	7.40
1992	4.96	1.00	0.02	0.10	0.47
1995	1.5	0.14	< 0.01	< 0.01	0.17

Tabelle 2.7: Entwicklung der Schadstofffrachten in der Mulde von 1989 bis 1991 (aus: Kompa & Maczey, 1992).

	Mulde bei Bad Dübener ¹			Mulde bei Dessauer ²		
	1989	1990	1991	1989	1990	1991
Chlorid [t/a]	129 000	82 000	73 000	148 000	94 000	63 000
Sulfat [t/a]	227 000	155 000	114 000	278 000	200 000	168 000
CSB [t/a]	43 000	22 000	17 000	60 000	35 000	16 000
Trübstoffe [t/a]	176 000	28 000	33 000	60 000	30 000	22 000

¹Gütepegel vor Eintritt der Mulde in das Untersuchungsgebiet.

²Gütepegel vor Eintritt der Mulde in die Elbe.

Eine stoffliche **Belastung der Fließgewässer** erfolgte vorrangig über das Spittelwasser und den Schachtgraben, in die Chemieabwässer ungeklärt eingeleitet wurden. Die Belastung der Fließgewässer ging außerdem weit über die Industrieregion hinaus. So galt nicht nur die Mulde als der dreckigste Fluss Europas, sondern auch die Qualität der Elbe war durch die Abwässer aus den mitteldeutschen Industriegebieten beeinträchtigt (Götz et al., 1998). Durch Stilllegung der Großchemie ist die Stoffbelastung in wenigen Jahren deutlich zurückgegangen (Tabelle 2.7): Der chemische Sauerstoffbedarf (CSB) wurde um 80 % reduziert (Kompa & Maczey, 1992), so dass sich auch der ökologische Zustand der Fließgewässer spürbar verbessert hat.

Die **Bodenbelastungen** auf dem Werksgelände der CAG wurden im Nationalen Sonderprogramm untersucht. 20 % der Werksflächen wiesen hohe bis sehr hohe, 55 % mäßige bis deutliche und 25 % nur relativ geringe Boden- und Grundwasserbelastungen auf (MUN, 1994, Abbildung 2.7). Durch die Abwassereinleitungen sind auch die Böden der Muldeau in Abhängigkeit von ihrer Überschwemmungshäufigkeit belastet (Ruske & Lauer, 1995).

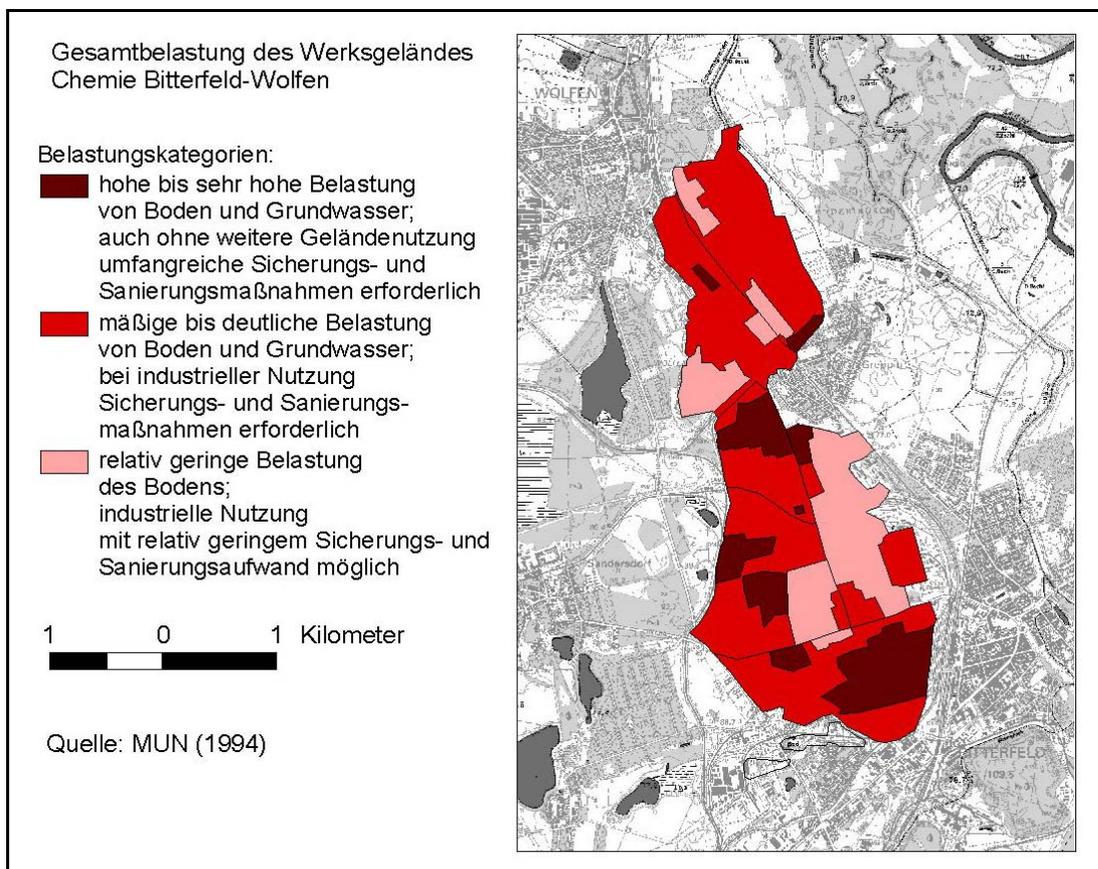


Abbildung 2.7: Boden- und Grundwasserbelastungen auf dem Werksgelände der Chemie AG Bitterfeld-Wolfen (aus: MUN, 1994).

Tabelle 2.8: Wesentliche Altablagerungen und Deponien im Kreis Bitterfeld (aus: Köhler et al., 1992).

Altablagerungen und Deponien	Volumen [Mio. m ³]	Deponieinhalt	Deponiesohle im Grundwasser?	Gefährdungspfade	Priorität ¹
Grube Antonie	5 - 6	HCH, Schwermetallschlämme, CKW, PAK	Ja	Grundwasser, Luft, direkter Kontakt	I
Grube Greppin	2.5	Neutraschlämme (CKW, Phenole)	Ja	Grundwasser, Luft, direkter Kontakt	I
Klärteiche Süd (CAG Bitterfeld Mitte-West)	1	Industrieschlämme, PCDD/F, Schwermetalle	Ja	Grundwasser, Luft, direkter Kontakt	I
Sonderdeponie Freiheit III	2	Industrieschlämme, Asche, Bauschutt	nein	Grundwasser	I
Verspüldeponie Hermine	20	Asche, Asbest, Schwermetalle	ja	Grundwasser, Luft, direkter Kontakt	I
Sonderdeponie Freiheit IV	10	Asche (Hg), Phosphorverbindungen	nein	Grundwasser, Luft, direkter Kontakt	I
Grube Johannes "Silbersee"	5	Schlämme (Schwermetalle, CKW)	ja	Grundwasser, Luft	I
Grube Marie (CAG-Bitterfeld Mitte-West)	0.5	Industrieschlämme, Fäkalien	ja	Grundwasser, Luft, direkter Kontakt	I
Grube Johannes	0.5	Industrieabfälle, (CKW), Bauschutt	ja	Grundwasser	II
Brifa I Bitterfeld (bei Holzweißig)	0.8	Hausmüll, Bauschutt	nein	Grundwasser	II
Ehemalige Hausmülldeponie	0.5	Hausmüll, Bauschutt	ja	Grundwasser	II
Deponie Sandersdorf	1	Hausmüll, Industrieabfälle	ja	Grundwasser	II
Bergische Kiesgrube	0.4	CKW, Phenole, PAK	ja	Grundwasser	II
Althalde Übergabebahnhof (CAG Bitterfeld Mitte-West)	0.5	HCH, Schwermetalle	ja	Grundwasser	II
Verspüldeponie SE-Bitterfeld (bei Holzweißig)	1.5	Asche, Schwermetalle	nein	Grundwasser	II
Deponie Heidelberg	0.7	Bauschutt, CKW	nein	Grundwasser	II
Chromteiche (CAG Süd)	0.5	Chrom	ja	Grundwasser	III
Titanteich (CAG Bitterfeld Mitte-West)	0.1	Titan, HCH, Schwermetalle	ja	Grundwasser	III

¹ Priorität: I: kurzfristiger Handlungsbedarf, II: mittelfristiger Handlungsbedarf, III: langfristiger Handlungsbedarf.

Obwohl inzwischen große Teile der Werksflächen durch den Aushub kontaminierten Bodenmaterials saniert worden sind (vgl. Lindemann, 2000), kann **kontaminiertes Grundwasser** weiterhin Mensch und Natur gefährden. Insbesondere ungesicherte Deponien in Tagebaurestlöchern beinhalten ein hohes Gefährdungspotential (Tabelle 2.8). Stoffeinträge aus diesen Deponien und von den Betriebsflächen der chemischen Industrie verunreinigten die Grundwasserleiter über eine Gesamtmächtigkeit von 40 m (Peter et al., 1995). Da die Einträge über einen Zeitraum von mehr als 100 Jahren stattfanden, sind die Schadstoffe großräumig vermischt und können bestimmten Betriebsflächen und einzelnen Deponien meistens nicht mehr zugeordnet werden. Der gesamte kontaminierte Grundwasserbereich (rund 25 km² mit einem kontaminierten Wasservolumen von 200 Mio. m³) wird deshalb als eigenständiger Schadstoffherd betrachtet (Peter et al., 1995).

Aufgrund der ausgeprägten Grundwasserscheide (vgl. Kapitel 2.3.2) und der geringen Fließgeschwindigkeiten wurden die Schadstoffe zunächst kaum verlagert. Diese stabile Situation wurde durch Wasserentnahmen auf den Betriebsflächen unterstützt (Schulz-Terfloth & Walkow, 1996). Mit dem derzeitigen Grundwasseranstieg gehen jedoch höhere Abstrommengen, Schadstofffrachten und Transportgeschwindigkeiten einher (Peter et al., 1995). Die Gebiete im nördlichen und östlichen Abstrombereich der Chemieindustrie, z.B. die Fließ-

gewässer Fuhne, Mulde und Spittelwasser, die großräumig auch die Elbe belasten, werden als besonders gefährdete Schutzgüter eingestuft. Des Weiteren wird das Landschaftsschutzgebiet Saalegaster Forst erwähnt (Peter et al., 1995). Außerdem nutzen kommunale Wasserwerke (Zörbig, Plötz, Landsberg u.a.) den quartären Grundwasserleiter (Jordan & Weder, 1995). Daher sind Trink- und Brauchwassergewinnungsanlagen (z.B. Wasserwerk Bobbau) und Vorranggebiete für die Trinkwassergewinnung (Bobbau-Tornau v.d. Heide-Schiernau und Thalheim-Zörbig-Quetzdölsdorf) durch Schadstoffeinträge gefährdet (Peter et al., 1995).

Der derzeitige Grundwasserwiederanstieg in den Tagebaurestlöchern ist bei enger Nachbarschaft von Bergbau, Industrie und Siedlungen problematisch: Die neuen Fließverhältnisse mobilisieren Kontaminationen, vor allem im Zentralbereich der CAG, wenn kontaminierte Bodenbereiche und Deponien vom aufsteigenden Grundwasser erfasst werden. Darüber hinaus ist z.B. die Widerstandsfähigkeit von Bausubstanzen bei erhöhtem Grundwasserstand und die Gefährdung von Menschen zu bedenken, wenn in vernässungsgefährdeten Gebieten kontaminiertes Wasser in Keller eindringt (Peter et al., 1995; Schulz-Terfloth & Walkow, 1996). Um dies zu vermeiden, werden die Grundwasserverhältnisse, u.a. bei der Sondermülldeponie Freiheit III, durch gezielte Wasserentnahmen kontrolliert (Lindemann, 2000).

Peter et al. (1995) charakterisieren die Grundwasserbelastung wie folgt:

- Mäßig belastetes Grundwasser findet sich horizontal in NS-Richtung über eine Länge von 10.5 km und in EW-Richtung über durchschnittlich 3 km (max. 6.5 km).
- Starke Grundwasserkontaminationen sind in NS-Richtung auf ca. 8 km, in EW-Richtung von durchschnittlich 2 km (max. 6 km) zu beobachten.
- Aus den Betriebsflächen strömen stark kontaminierte Abstromfahnen in nördlicher, östlicher und südlicher Richtung ab.
- In tieferen Grundwasserbereichen ist die Schadstoffausbreitung weiter fortgeschritten als oberflächennah.
- Die mittlere Ausbreitungsgeschwindigkeit des kontaminierten Grundwasserbereiches wird mit 100-200 m/a abgeschätzt.
- Flächendeckend ist das Grundwasser mit halogenierten Kohlenwasserstoffen belastet. Außerdem treten lokale Belastungen durch Schwermetalle, Phenole und BTEX-Aromaten (insbesondere Benzen) auf.

Zum Zeitpunkt der Veröffentlichung von Peter et al. (1995) existierte kein umfassendes Bild über die kontaminierenden Einzelstoffe. Detaillierte Untersuchungen gab es zu einzelnen Standorten oder Deponien (z.B. Lampe et al., 1995; Barkowski & Watzke, 1992). Eine großräumige schadstoffspezifische Betrachtung der Grundwasserbelastung lag nicht publiziert vor.

3 Datenmaterial und Methoden der Datenanalyse

Das Landratsamt Bitterfeld und das Regierungspräsidium Dessau stellten dem Fachgebiet Umweltgeologie der Universität Halle im Rahmen von SAFIRA zwei Datenbestände über die Beschaffenheit des Grundwassers in der Region Bitterfeld-Wolfen zur Verfügung: Der eine Datenbestand entstand durch das Monitoring des Landkreises Bitterfeld (LK-Monitoring) in den Jahren 1991 bis 1999, der andere wurde 1996 und 1997 im Ökologischen Großprojekt Bitterfeld-Wolfen (ÖGP) erhoben. Diese Rohdaten wurden ergänzt durch:

- den Prüfbericht Nr. 549/96 der Wolfener Umweltanalytik GmbH (WUA, 1996) mit allen Analysewerten zur Beprobungskampagne des ÖGP im Herbst 1996,
- Gutachten und Karten zur Grundwassersituation (topographische Karten, Grundwassergleichenpläne, Flurabstandskarten und Belastungskarten) für die Jahre 1996 bis 1999, erstellt im Auftrag des Landkreises Bitterfeld von der Geologischen Forschung und Entwicklung GmbH (GFE, 1996, 1997, 1998, 1999) sowie
- Ausbaupläne und Schichtenverzeichnisse der Messstellen des Landkreises und auf dem SAFIRA-Versuchsstandort (vgl. Ruske et al., 1999).

In diesem Kapitel wird als erste Stufe des Untersuchungskonzeptes (Abbildung 1.2) die Zusammensetzung der beiden Datenbestände sowie ihre Aufbereitung und Haltung in einer Datenbank beschrieben. Darüber hinaus werden die Daten hinsichtlich ihrer Qualität bewertet. Daraus ergeben sich auswertbare Teildatensätze sowie Vorschläge zur Verbesserung der Datenqualität. Außerdem werden Daten zum Umweltverhalten der untersuchten Stoffe und die Methoden der Datenanalyse, die in den nachfolgenden Untersuchungsschritten eingesetzt werden, erläutert.

3.1 Grundwassermonitoringdaten: Datenmaterial und Datenhaltung

Die beiden Beispieldatenbestände stammen aus zwei Monitoringprogrammen, die aufgrund der unterschiedlichen Zuständigkeiten der Betreiber in ihrer Komplexität differieren. Dies gilt für die räumliche Ausdehnung, Anordnung und Dichte des Messstellennetzes sowie für den Umfang der Beprobungen. Außerdem sind die Daten unterschiedlich digital aufbereitet: Im LK-Monitoring besteht für jede Messstelle ein Datenblatt (in MS Excel), das fortgeschrieben wird, während im ÖGP alle untersuchten Grundwasserproben in einer Tabelle (ebenfalls unter MS Excel) zusammengefasst werden. Dies erschwert die Zusammenführung der Datenbestände und die Erstellung von Teildatensätzen für die nachfolgenden Auswertungen. Darüber hinaus bestehen z.T. redundante und inkonsistente Einträge. Um dies zu vermeiden, ist es sinnvoll, die Daten in einer einheitlichen Datenbank zu organisieren.

Hauptziel bei der Entwicklung des in Kapitel 3.1.2 vorgestellten Datenbankschemas war es, die verfügbaren Datenbestände vollständig zu erfassen und spezifische Suchabfragen und Routinen bereitzustellen, die die in Kapitel 1.3 vorgestellte Untersuchungsstrategie unterstützen. Das entwickelte Datenbankschema kann jedoch für zukünftige Anwendungen und Fragestellungen weiterverwendet und fortgeschrieben werden.

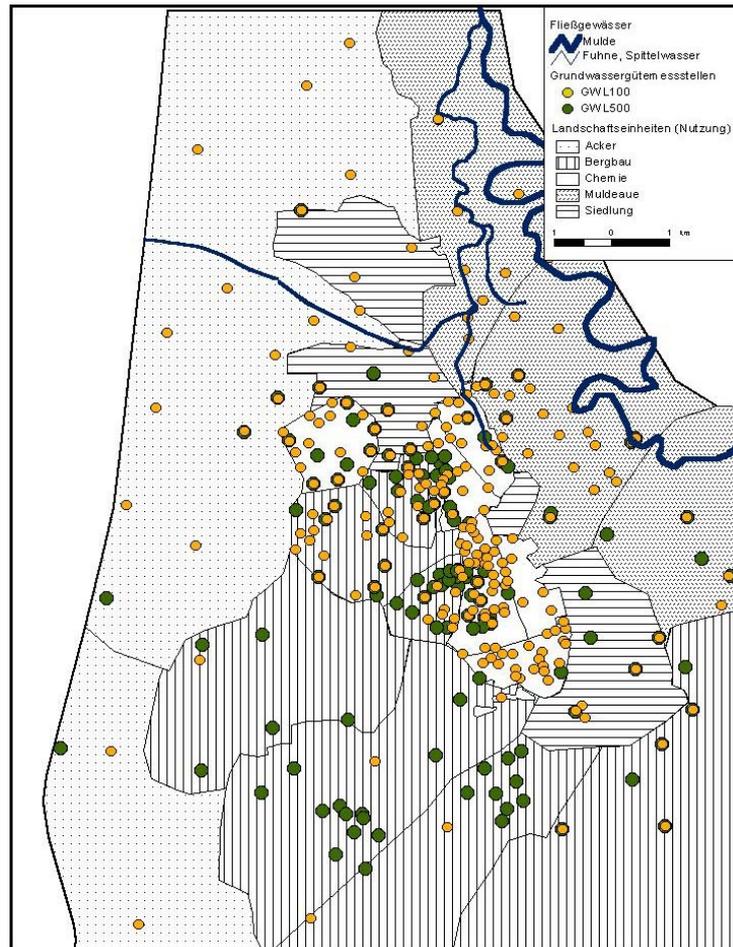


Abbildung 3.1: Messstellen mit Filterstrecken im quartären (GWL100) und tertiären (GWL500) Grundwasserleiter im Untersuchungsgebiet.

Von den insgesamt 377 Messstellen entfallen 236 auf den quartären Grundwasserleiter (GWL100), 140 auf die tertiären Bitterfelder Glimmersande (GWL500) (Abbildung 3.1). Eine Messstelle ist in den Eozänen Sanden (GWL800) verfiltert. Die Messstellen mit Filterstrecken im quartären Grundwasserleiter decken das gesamte Untersuchungsgebiet ab; besonders viele sind auf dem Werksgelände der CAG installiert (Abbildung 3.1). Die Messstellen mit Anbindung an den tertiären Grundwasserleiter sind hingegen eher in Clustern um bekannte Ablagerungen, d.h. um die Gruben Antonie, Marie, Johannes, Greppin sowie Freiheit III und IV angeordnet (vgl. Abbildung 3.1). Auf dem Gelände der Filmfabrik sind sie relativ gleichmäßig verteilt, während weiter im Norden des Untersuchungsgebietes nur sehr wenige Messstellen im GWL500 verfiltert sind (Abbildung 3.1).

Beprobungskampagnen

In den vorliegenden Datenbeständen können die in Tabelle 3.2 benannten Beprobungskampagnen unterschieden werden. Es wird deutlich, dass eine sehr unterschiedliche Datendichte zu den einzelnen Zeitschnitten besteht. Im LK-Monitoring wurden in den Jahren 1991 bis 1998 jährliche Beprobungskampagnen durchgeführt. Im Herbst 1999 fand keine Beprobung statt, sondern nur eine Messung der Grundwasserstände, um die hydraulische Situation in Folge der Flutungen der Tagebaue Goitsche und Köckern zu kontrollieren. Das Messstellennetz umfasst maximal 73 Messstellen im Sommer 1994, die relativ gleichmäßig über das gesamte Untersuchungsgebiet verteilt sind. Der Bereich der CAG wird allerdings nur durch wenige Messstellen abgedeckt. Das LK-Messnetz wurde sukzessive durch weitere Mess-

stellen ergänzt, andere konnten aufgrund technischer Schäden jedoch nicht weiter berücksichtigt werden (GFE, 1999). So wurden in den Jahren 1996 bis 1998 jeweils nur 24 identische Messstellen in das Monitoring einbezogen.

Im ÖGP wurden die Messstellen der Chemieunternehmen (BVV und WVV) mit denen des Landkreises und der Braunkohlengesellschaft (LMBV) zusammengefasst. Im Herbst 1996 fand eine umfangreiche Beprobung statt, die durch eine Qualitätssicherung begleitet wurde: Alle Messstellen wurden mit einer Kamera abgefahren, und es wurde geprüft, ob der Ausbau ordnungsgemäß vollzogen worden war und die Filterstrecken intakt waren (persönliche Mitteilung Dr. Walkow). Die Untersuchung schloss insgesamt 198 Messstellen ein (Tabelle 3.2). Die Messstellen befinden sich schwerpunktmäßig im Bereich der Chemiebetriebe (CAG und Filmfabrik), der angrenzenden Bergbaufolgelandschaften und der Grundwasserabstromgebiete in Richtung der Mulde, während die landwirtschaftlichen Nutzflächen im Grundwasseranstrom kaum berücksichtigt wurden. Im Jahr 1997 wurden insgesamt vier Beprobungskampagnen durchgeführt (Tabelle 3.2), die unterschiedliche Teile des Untersuchungsgebietes abdeckten und differierende Parameterkataloge umfassten.

Da die Beprobungskampagne vom Juli 1997 (Sommer 97 I) von beiden Betreibern gemeinsam durchgeführt wurde, wurden die Ergebnisse z.T. in beiden Datenbeständen festgehalten. Werden die 27 redundanten Einträge entfernt, bleiben insgesamt verschiedene 905 Grundwasserproben übrig, aus denen die Beprobungshäufigkeit der Messstellen ermittelt wurde (Abbildung 3.2): Die meisten Messstellen (152) wurden nur einmal beprobt, drei Messstellen hingegen bis zu elfmal. Eine Betrachtung der zeitlichen Entwicklung der Grundwasserqualität ist mit dem vorliegenden Datenbestand also nur an sehr wenigen Messstellen möglich.

Aus der unterschiedlichen Beprobungshäufigkeit ergibt sich eine beschränkte Vergleichbarkeit der einzelnen Beprobungskampagnen. Hinzu kommt, dass der Parameterkatalog an einzelnen Messstellen und in den Kampagnen nur selten übereinstimmt (s.u.). Daher ist es sinnvoll, vergleichbare Beprobungskampagnen zu bestimmen und nur diese auszuwerten (siehe Kapitel 3.1.2).

Tabelle 3.2: Übersicht der Beprobungskampagnen vom Landkreis Bitterfeld (LK) und dem Ökologischen Großprojekt Bitterfeld-Wolfen (ÖGP).

Kampagne	Auftraggeber	Beprobungszeitraum	Anzahl der beprobten Messstellen	davon im GWL100	davon im GWL500	davon im GWL800
Sommer 91	LK	11.07.1991	1	0	1	0
Winter 92	LK	01.02.1992 - 28.02.1992	55	27	28	0
Herbst 92	LK	01.12.1992 - 20.02.1992	42	23	19	0
Sommer 93	LK	01.08.1993 - 02.09.1993	57	28	29	0
Herbst 93	LK	08.11.1993 - 18.11.1993	13	12	1	0
Sommer 94	LK	21.06.1994 - 17.10.1994	73	41	32	0
Herbst 95	LK	08.11.1995 - 21.11.1995	35	18	17	0
Winter 96	LK	15.02.1996 - 18.02.1996	10	4	6	0
Sommer 96	LK	01.07.1996 - 30.07.1996	25	13	12	0
Herbst 96 I	ÖGP	28.10.1996 - 12.12.1996	198	124	74	0
Herbst 96 II	LK	09.12.1996 - 13.12.1996	24	11	13	0
Frühjahr 97	ÖGP	12.05.1997 - 23.05.1997	61	36	25	0
Sommer 97 I	ÖGP/LK	07.07.1997 - 21.07.1997	50	29	21	0
Sommer 97 II	ÖGP	04.08.1997 - 29.08.1997	100	68	32	0
Sommer 97 III	ÖGP	26.08.1997 - 29.09.1997	111	77	34	0
Herbst 97	LK	01.11.1997 - 30.11.1997	25	12	13	0
Herbst 98	LK	17.11.1998 - 24.11.1998	25	11	13	1

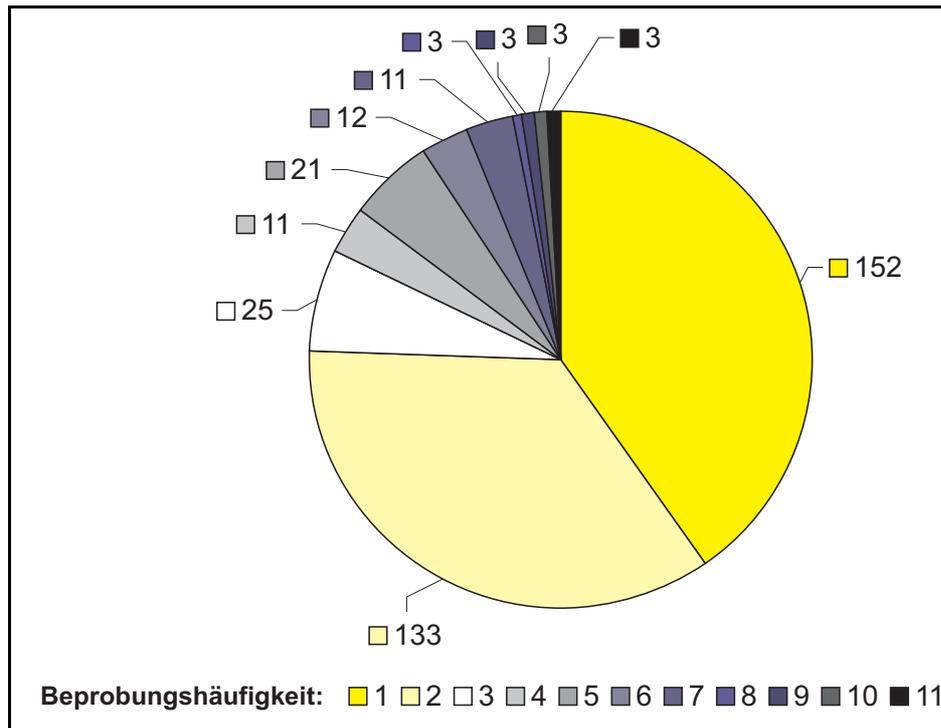


Abbildung 3.2: Beprobungshäufigkeit der 377 Grundwassermessstellen von 1991 bis 1998.

Parameterkataloge

Im Anhang A 3.1 sind der maximale Parameterkatalog, d.h. alle Parameter, die in einem der beiden Datenbestände auftauchen, sowie die Anzahl der verfügbaren Messwerte pro Parameter (aufgeschlüsselt nach Beprobungskampagnen) festgehalten. Die Aufstellung vermittelt einen Eindruck über die Heterogenität des Parameterumfangs und die geringe Kontinuität bei der Untersuchung des Grundwassers in der Region Bitterfeld-Wolfen. Solche heterogenen Datenbestände entstehen typischerweise aus der iterativen Untersuchung von Grundwasserbelastungen und sind u.a. durch wechselnde Zuständigkeiten und finanzielle Beschränkungen bedingt.

Im LK-Monitoring wurden vor allem Vor-Ort-Parameter, Summenparameter (AOX, Phenolindex, CSB, TOC) und anorganische Parameter gemessen (vgl. Anhang A 3.1; Hartmann & Guhra, 1992). Organische Verbindungen wurden zunächst nur teilweise untersucht, wobei leichtflüchtige, chlorierte Kohlenwasserstoffe (LHKW), Chlorbenzene und BTEX-Aromaten berücksichtigt wurden, aber keine Stoffgruppe durchgängig erfasst wurde.

Im ÖGP besteht der Parameterkatalog aus einer großen Anzahl von organischen Stoffen. Anorganische Parameter wurden hingegen nur vereinzelt gemessen. Durchgängig wurden an allen Messstellen Vor-Ort-Parameter und zehn LHKW untersucht. Für alle anderen Parameter liegt meistens ein geringerer Stichprobenumfang vor (Anhang A 3.1).

Auffällig ist, dass z.B. bei den Chlorbenzenen insgesamt 606 Datensätze eine Summenangabe für diese Stoffgruppe enthalten, aber die Werte für die Einzelverbindungen fehlen. So gibt es nur 507 Einträge für Monochlorbenzen, 486 für die Dichlorbenzene und etwa 260 für die Tri-, Tetra-, Penta- und Hexachlorbenzene (vgl. Anhang A 3.1). Dieses Beispiel zeigt, dass in den Beprobungskampagnen mehr Parameter erhoben wurden als digital festgehalten worden sind. Der Datensatz "Herbst 96 I" konnte mit Hilfe des Originalprüfberichtes des Labors (WUA, 1996) durch die Einzelstoffanalysen erweitert werden. Für die anderen Kampagnen war dies nicht möglich.

Des Weiteren konnten Übertragungsfehler für die Beprobungskampagne "Herbst 96 I" mit Hilfe des Prüfberichtes korrigiert werden. Die anderen Datensätze wurden auf Konsistenz und Plausibilität geprüft, indem aus den Konzentrationen der Einzelstoffe einer Stoffgruppe eine Summe errechnet und mit der angegebenen Summe verglichen wurde. Außerdem wurden die Extremwerte (Maxima) durch Vergleich mit früheren Messungen auf Plausibilität geprüft. Des Weiteren wurden die Bezeichnungen der Parameter vereinheitlicht und die Konzentrationsangaben in einheitliche Einheiten überführt.

Verarbeitung von Werten unterhalb der analytischen Nachweisgrenzen

Bei der chemischen Analyse von organischen Stoffen treten immer wieder Proben auf, in denen die Stoffkonzentrationen unterhalb der analytischen Nachweisgrenzen (NWG) liegen. Die konkreten Messwerte sind daher mit großen Fehlern behaftet und werden in den Analyseberichten als "< NWG" angegeben. Im Gegensatz zu „richtigen“, d.h. exakten Messwerten ist eine Angabe < NWG keine numerische Variable: Sie bildet keinen Wertepunkt auf einer Skala ab, sondern beschreibt einen Wertebereich. Damit wird die kontinuierliche Verteilung der Daten an der analytischen Nachweisgrenze abgeschnitten (*Censoring*). Eine Bewertung des Censorings ist in Tabelle 3.3 zusammengestellt.

Da Proben mit Werten < NWG wertvolle Informationen über das Vorkommen und die Verbreitung von Stoffen liefern, müssen sie in den Datenbestand integriert werden. In den Rohdaten wurden verschiedene Varianten gefunden (vgl. Tabelle 3.1), im konsolidierten Datensatz wurden Werte < NWG durchgängig durch den Wert der halben Nachweisgrenze substituiert. Dies entspricht der allgemeinen Vorgehensweise in der (wasser-)chemischen Praxis, wird aber kontrovers diskutiert. So bemängelt Helsel (1990), dass dem Verfahren eine theoretische Grundlage entbehrt. Einige Untersuchungen (z.B. Aruga, 1997; Clarke, 1998) zeigen jedoch, dass diese einfache Substitution bei statistischen Auswertungen ähnlich gute Ergebnisse liefert wie komplizierte Verfahren (Regression, Maximum Likelihood Schätzer).

Problematisch ist, dass die Nachweisgrenzen zwischen den Beprobungskampagnen schwanken. Ersetzt man, wie z.B. von Helsel (1990) vorgeschlagen, alle Werte unterhalb der höchsten Nachweisgrenze, d.h. auch Werte, die zu einem anderen Zeitpunkt mit einer besseren Nachweisgrenze exakt gemessen wurden, durch die Hälfte dieser Nachweisgrenze, verliert man sehr viel Information. Daher wurden alle Einträge, die mit "< NWG" angegeben wurden, mit der Hälfte der kleinsten Nachweisgrenze ersetzt. Dadurch entsteht zwar der Eindruck einer höheren Genauigkeit, aber alle "richtigen" Messwerte bleiben erhalten. Zur besseren Kontrolle und Nachvollziehbarkeit ist es daher wichtig, Nachweis- oder Bestimmungsgrenzen in der Datenbank zu dokumentieren.

Tabelle 3.3: Bewertung des Censorings in einem Datensatz.

Anteil von Werten < NWG in einer Stichprobe	Bewertung des Censorings
0 – 25 %	geringes Censoring
25 – 50 %	moderates Censoring
50 – 90 %	starkes Censoring
> 90 %	hochgradiges Censoring

Tabelle 3.4: Redoxvermögen von Lösungen ausgedrückt als rH-Wert (nach: Hölting, 1996).

rH-Wert	Eigenschaft der Lösung
0 – 9	stark reduzierende Eigenschaften
9 – 17	vorwiegend schwach reduzierende Eigenschaften
17 – 25	indifferente Systeme
25 – 34	vorwiegend schwach oxidierende Eigenschaften
34 – 42	stark oxidierend

Weiterverarbeitung von Daten: Berechnung des Redoxvermögens

Die gemessene Redoxspannung wurde wie folgt in ein Redoxpotenzial, bezogen auf die Wasserstoffelektrode bei 25 °C, umgerechnet (nach GFE, 1999):

$$E_h = E_{h(\text{gemessen})} - 0.591 (T - 25) + 208.$$

Aus den Redoxpotenzialen und den pH-Werten wurde daraus der rH-Wert nach Hölting (1996, S. 211ff) berechnet:

$$rH = 2 (E_h/EN) + 2 \text{ pH}$$

mit: EN: NERNST-Spannung; EN = 59.16 mV bei 25 °C.

Der rH-Wert ist der negative dekadische Logarithmus des Wasserstoffpartialdruckes, mit dem eine Platinelektrode beladen sein müsste, um eine der Lösung entsprechende Reduktionswirkung auszuüben. Er charakterisiert das Redoxvermögen einer Wasserprobe (Tabelle 3.4).

3.1.2 Datenhaltung: Entwurf und Implementierung eines Datenbankschemas

Für den konsolidierten Gesamtdatensatz wurde ein konzeptioneller Datenbankentwurf als Entitäten-Relationen-Modell (ER-Modell) entwickelt (Abbildung 3.3). Dieser ist systemunabhängig und beschreibt die Objekte und ihre Zusammenhänge rein inhaltlich (semantisches Datenmodell). Entitäten sind eindeutig identifizierbare, reale Dinge (z.B. eine Grundwasserprobe) (Bartelme, 1995). Eine Klasse von Entitäten besitzt gemeinsame charakteristische Eigenschaften (Attribute), die für jede Entität unterschiedliche Werte annehmen. Attribute, durch deren Werte sich die Entitäten in einer Klasse eindeutig voneinander unterscheiden, werden Schlüsselattribute (Primärschlüssel, *primary key*) genannt.

Darüber hinaus gibt es zwischen den Entitätsklassen Beziehungen oder Beziehungsmöglichkeiten (Relationen). Diese haben eine Kardinalität, die angibt, auf wie viele Objekte der zweiten Klasse sich ein Element der ersten Klasse beziehen kann. In Beziehungen vom Typ 1:1 steht jedes Objekt der ersten Klasse mit höchstens einem Objekt der zweiten Klasse in Verbindung (z.B. bei "IS A" – Beziehungen, s.u.). Häufiger sind Beziehungen vom Typ 1:n. Darin steht ein Element der ersten Klasse mit keinem, einem oder mehreren Objekt(en) der zweiten Klasse in Verbindung. Jedes Element der zweiten Klasse bezieht sich jedoch auf höchstens ein Element der ersten. So stammt eine Probe aus genau einer Messstelle, aber aus einer Messstelle können mehrere Proben entnommen werden.

Das ER-Modell (Abbildung 3.3) berücksichtigt auch gewisse Zusatzinformationen zu den Probenahmekampagnen, wie eingesetzte Analysemethoden und Nachweisgrenzen. Allerdings werden diese nur generalisiert für eine Beprobungskampagne festgehalten. Außerdem wurden Grundwasserproben durch sogenannte "IS A" – Beziehungen in Schöpfproben und Pumpproben unterschieden. Damit ist es möglich, für diese Probentypen spezifische Eigenschaften zu modellieren (z.B. Pumpdauer und –leistung bei den Pumpproben). Insgesamt ermöglichen diese Angaben, die Entstehung und Qualität der Daten transparent und nachvollziehbar zu gestalten.

Logischer Entwurf und Implementierung eines relationalen Datenbankschemas

Das ER-Modell aus Abbildung 3.3 wurde in MS Access als relationales Datenbankschema formuliert (Abbildung 3.4). Dies erlaubt eine laufende Aktualisierung und Erweiterung des Datenbestandes sowie eine Anbindung an das Geo-Informationssystem ArcView und das Statistikprogramm SPSS über die Schnittstelle ODBC (Open DataBase Connectivity).

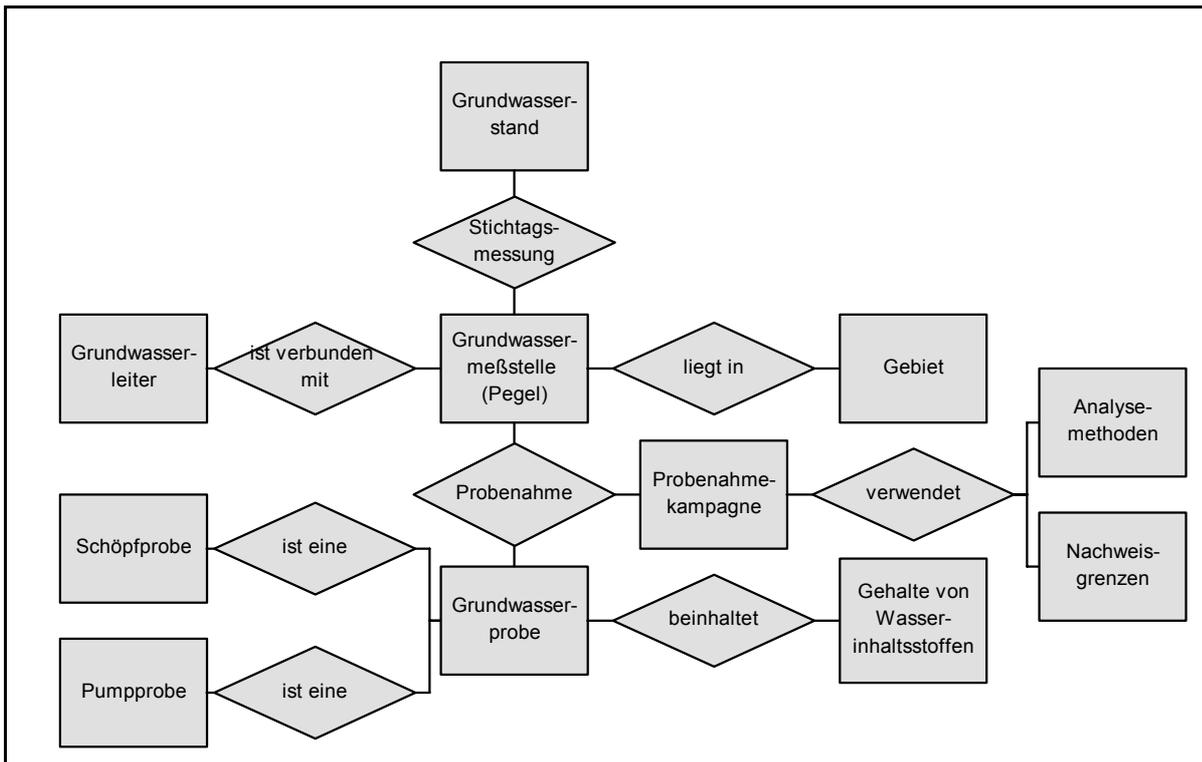


Abbildung 3.3: Entitäten-Relationen-Modell für ein Grundwassermonitoring (Entitäten sind als Rechtecke dargestellt, Relationen als Rauten).

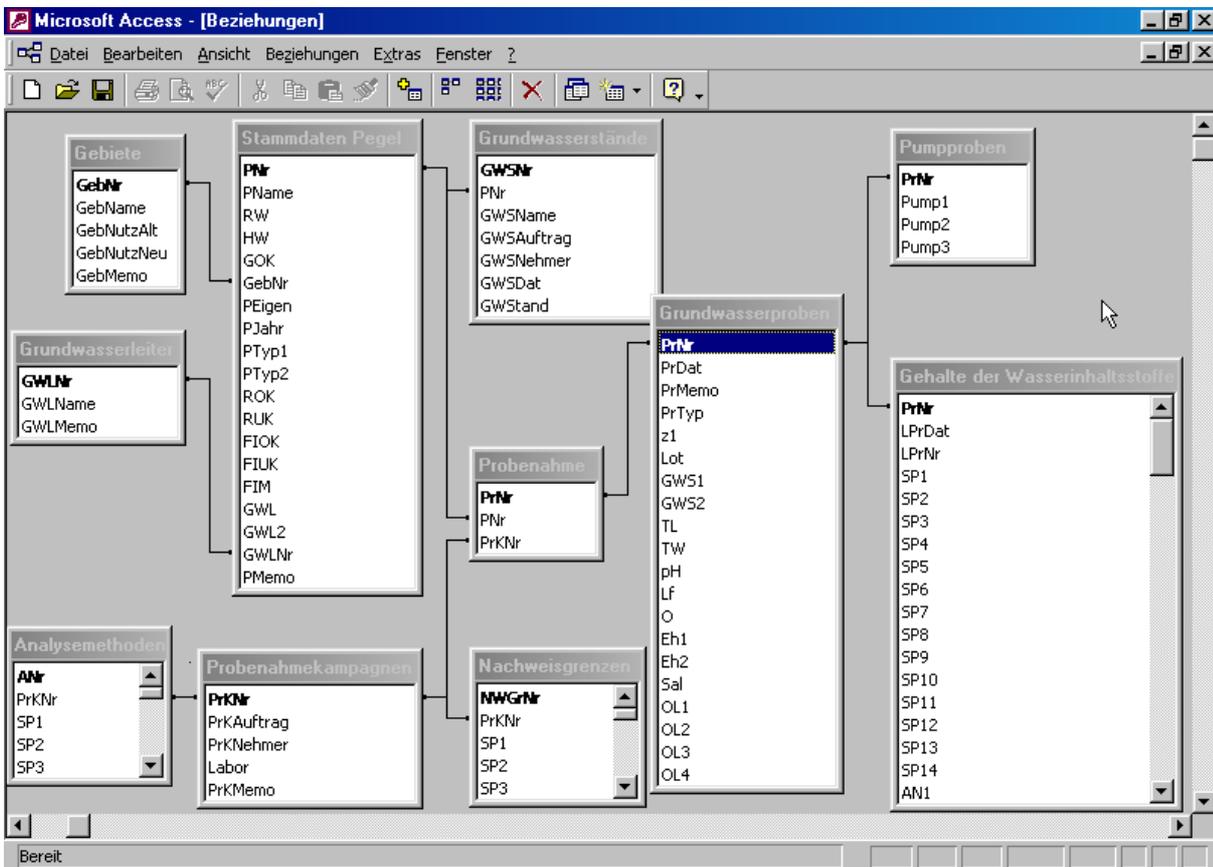


Abbildung 3.4: Verknüpfung von Tabellen in MS Access.

Im relationalen Datenmodell werden Relationen (die nicht mit den Relationen im ER-Modell identisch sind) durch Tabellen dargestellt. In den Spalten der Tabellen werden Attribute und ihre Wertebereiche definiert; in den Zeilen erfolgen die Dateneinträge (Tupel). Das entwickelte relationale Datenbankschema, d.h. die Tabellen und ihre Verknüpfung, ist in Abbildung 3.4 visualisiert. Darin sind die Primärschlüssel der Relationen fett hervorgehoben sowie die Attribute, die zwei Tabellen miteinander verknüpfen (*relate item*), angezeigt.

Mit diesem Datenbankschema können über Abfragen Teildatensätze erstellt werden, die in fachspezifischen Softwareprogrammen weiterverarbeitet und analysiert werden. Bei einer Abfrage können auch neue Felder durch Operationen erstellt werden, z.B. kann das Redoxvermögen berechnet werden.

3.1.3 Auswahl von Teildatensätzen für die Datenanalyse

Aus dem Konsolidierungsprozess geht hervor, dass die vorliegenden Datenbestände aufgrund ihrer Heterogenität (räumliche und zeitliche Erhebungsdichte, Parameterkatalog) nur auszugsweise ausgewertet werden können.

Um die räumliche Erhebungsdichte und die Parameterdichte maximal auszunutzen, wurde aus dem Gesamtdatenbestand ein Datensatz mit Mittelwerten pro Messstelle und Substanz erstellt. Dieser Datensatz entspricht somit einem Durchschnittsszenario der Belastung in den Jahren 1991 bis 1998 an allen 377 Messstellen.

Darüber hinaus wurden einige Beprobungskampagnen des ÖGP für eine detaillierte Auswertung ausgewählt, da die Probenahmetechnik, die Dokumentation der Methoden, die Bestimmungsgrenzen sowie der Parameterumfang relativ vergleichbar sind. Die ausgewählten Datensätze enthalten Proben von den Betriebsflächen der Chemiebetriebe (CAG und Filmfabrik), aus den Bergbaufolgelandschaften sowie den Austragsgebieten (Siedlungsbereichen, Muldeaeue, Goitsche). Ausgewählt wurden die Beprobungskampagnen "Herbst 96 I", "Sommer 97 II" und "Sommer 97 III" (Tabelle 3.2). Die Daten der Kampagne "Herbst 96 I" konnten durch den Laborbericht (WUA, 1996) geprüft und vervollständigt werden, wodurch ihre Qualität abgesichert ist. Aus Tabelle 3.2 geht hervor, dass die Beprobungskampagnen "Sommer 97 II" und "Sommer 97 III" zusammengefasst werden können, da sie sich zeitlich überschneiden und der Parameterumfang in etwa vergleichbar ist. In beiden Kampagnen wurde nur eine Messstelle doppelt beprobt, so dass mit 210 Messstellen eine ähnlich hohe räumliche Messstellendichte erreicht wird wie im "Herbst 96 I". Außerdem kann eine Schnittmenge gebildet werden: 122 Messstellen wurden sowohl 1996 als auch 1997 beprobt.

Für die ausgewählten Datensätze wurden die Bezeichnungen in Tabelle 3.5 gewählt. Der Stichprobenumfang entspricht für einzelne Parameter nicht immer dem maximalen Stichprobenumfang (vgl. Anhang A 3.1). Darauf wird bei den einzelnen Auswertungen hingewiesen. Ebenso wird vermerkt, wenn nur bestimmte Teildatensätze, z.B. Daten von Messstellen aus einem Grundwasserleiter und aus speziellen Teilgebieten betrachtet werden.

Tabelle 3.5: Ausgewählte Teildatensätze (Beschreibung und Abkürzung).

Beschreibung des Teildatensatzes	maximaler Stichprobenumfang	Abkürzung
Durchschnittsszenario für die Jahre 1991 bis 1998	377	9198M
Messstellen aus der Kampagne Herbst 96 I	198	H96
Messstellen aus den Kampagnen Sommer 97 II und III	210	S97
Messstellen, die sowohl im Herbst 1996 I als auch im Sommer 1997 II/III beprobt wurden (Schnittmenge)	122	H96_(H96∩S97), S97_(H96∩S97)

3.1.4 Beurteilung der Datenqualität

In Kapitel 2.3.4 wurde darauf hingewiesen, dass die enge Verzahnung von Industrie und Bergbau eine gemeinsame Analyse und Bewirtschaftung des Grundwassers erfordert, z.B. damit Altlasten durch Flutungsmaßnahmen nicht mit dem Grundwasser in Kontakt treten. Diese Notwendigkeit erfordert eine Kommunikation zwischen den beteiligten Organisationen und eine Verständigung über Datenerhebung sowie eine Formalisierung und Standardisierung der Datenhaltung, damit ein effizienter und erfolgreicher (d.h. möglichst zügiger und fehlerfreier) Datenaustausch stattfinden kann (vgl. Lindemann, 2000).

Qualitätskontrolle und -sicherung sind wesentliche Maßnahmen beim Aufbau eines Informationssystems und umso schwieriger, je mehr Nutzer daran beteiligt sind. Ein Informationssystem besteht aus Hardware, Software und Daten. Die Daten stellen dabei den mit Abstand kostenintensivsten Teil dar und weisen eine nahezu unbegrenzte Lebensdauer auf. Daher ist ein qualitätsbewusstes Vorgehen bei der Erfassung, Speicherung und Pflege der Daten unumgänglich (Baltzer & Caspary, 1992).

Qualität ist nach ISO 8402 die Gesamtheit von Merkmalen einer Einheit bezüglich ihrer Eignung, festgelegte und vorausgesetzte Erfordernisse zu erfüllen. Demnach hängt Datenqualität auch von den Nutzeranforderungen und -erwartungen ab, so dass die Beurteilung von Daten stets relativ ist (Caspary, 1992). Dennoch können einige generelle Aussagen getroffen werden.

Allgemeine Qualitätsmerkmale von digitalen Daten sind die unmittelbare Verfügbarkeit aktueller Daten, die Erfassung verfügbarer Daten in einem einheitlichen Format und nach einheitlichen Standards und Qualitätsanforderungen, um die Vergleichbarkeit von Daten zu gewährleisten und Datenfriedhöfe zu vermeiden (Baltzer & Caspary, 1992). Weiterhin sollten Daten vollständig, zuverlässig, anschaulich, verständlich und lesbar sein. Die Qualität geometrisch-topologischer Daten wird außerdem durch die Genauigkeit von Position und Geometrie (z.B. Lagestandardabweichung, Höhenstandardabweichung), durch strukturelle Konsistenz sowie durch Grad und Art der Generalisierung beschrieben. Thematische Daten zeichnen sich neben der Attributgenauigkeit (Messgenauigkeit) durch die Vollständigkeit der Attribute sowie die Richtigkeit der Attributzuweisung und -abgrenzung aus (Caspary, 1992).

Die Charakteristika der beiden vorliegenden Datenbestände und die Bewertung einiger Qualitätsmerkmale sind in Tabelle 3.6 zusammengestellt. Der vorangegangene Konsolidierungsprozess hat gezeigt, dass in den beiden betrachteten Datenbeständen Inkonsistenzen und Redundanzen vorhanden sind und die Datenerfassung z.T. unvollständig ist (vgl. Tabelle 3.1). Die Attributgenauigkeit durch systematische und zufällige Fehler bei der Datenerfassung kann aus dem verfügbaren Datensatz nicht abgeschätzt werden. Hierzu wären Wiederholungsmessungen und kürzere Beprobungsintervalle notwendig.

Aus dem Konsolidierungsprozess lassen sich einige allgemeine Vorschläge zur Verbesserung der Datenaufnahme und Datenhaltung eines Grundwassermonitorings ableiten. Die Datenaufnahme sollte durch ein Qualitätsmanagement begleitet werden, indem durch den/die Auftraggeber in einer detaillierten Aufgabenbeschreibung mindestens zu folgenden Punkten Anforderungen festgelegt bzw. detaillierte Vorgaben gemacht werden:

- eindeutige Bezeichnungen der Messstellen und Parameter,
- zu untersuchender Parameterumfang mit geforderter Messgenauigkeit, d.h. Festlegung von Mindestnachweisgrenzen bei der Ausschreibung, wobei die Nachweisgrenzen so gewählt werden sollten, dass ein Vergleich mit gängigen Richtwerten möglich ist,
- Dokumentation der Probenahme (Probenahmeart, Grundwasserstand, Vor-Ort-Parameter, Geräte etc.) und der Laboruntersuchungen (Methoden, Nachweisgrenzen),
- digitale Aufbereitung der Messwerte (technisches Format, Vollständigkeit, Einheiten, Behandlung der Werte unterhalb der analytischen Nachweisgrenze) und
- Übergabe analoger und digitaler Ergebnisdokumente.

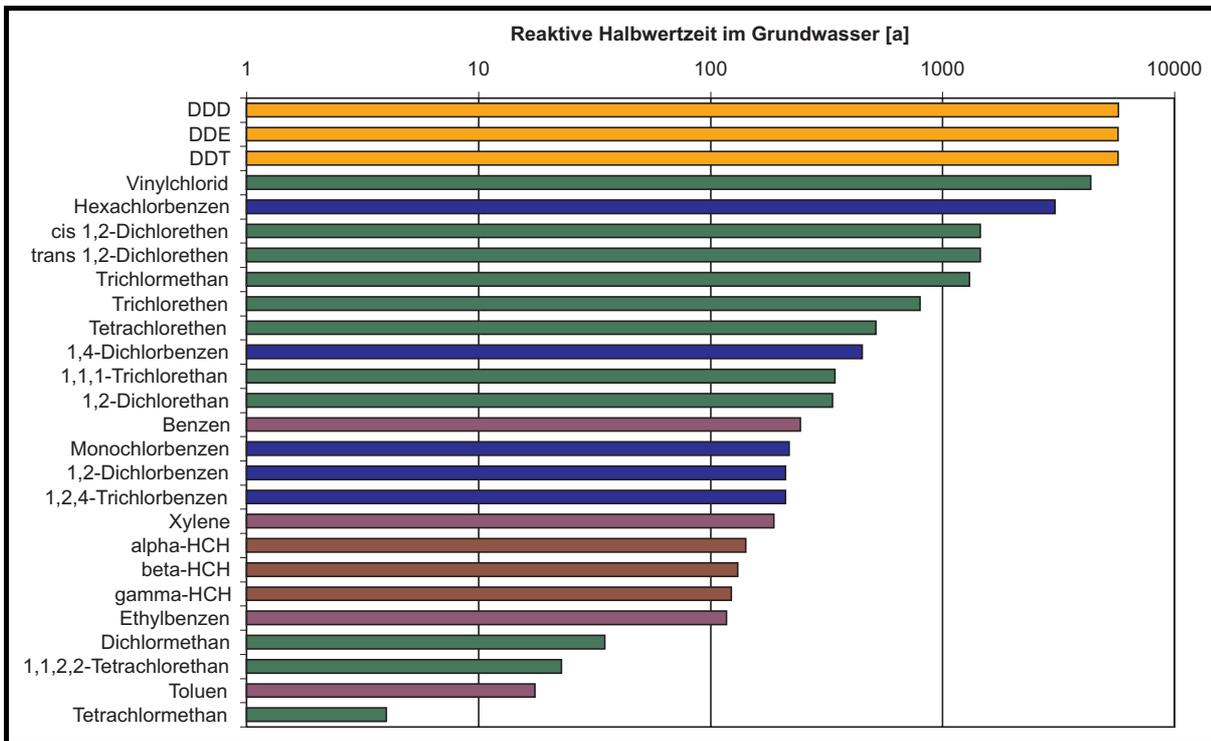
Die genannten Punkte gewährleisten erhöhte Vollständigkeit und Konsistenz der Daten. Durch die Dokumentation von Angaben über Herkunft, Bestimmungsmethoden, Messgeräte, Nachweis- bzw. Bestimmungsgrenzen wird die Datenerfassung und Qualität transparenter. Die Vollständigkeit der Angaben ermöglicht, die Plausibilität der Daten zu prüfen und detaillierte Auswertungen vorzunehmen. Eine Verfügbarkeit ist gewährleistet, wenn alle erhobenen Daten digital erfasst und so bereitgestellt werden, dass alle Beteiligten darauf zugreifen können. Das in Kapitel 3.1.2 vorgestellte Datenbanksystem wurde für die Belange dieser Arbeit erstellt, stellt aber auch einen Vorschlag für eine standardisierte und gemeinsame Datenhaltung auf regionaler Ebene dar.

Tabelle 3.6: Charakteristika und Qualitätsmerkmale der vorliegenden Datenbestände.

	LK-Datenbestand	ÖGP-Datenbestand
digitale Aufbereitung	Datenblatt pro Messstelle in MS Excel Vorteil: gute Visualisierung von Zeitreihen Nachteil: hoher Aufwand bei der Erstellung räumlicher Teildatensätze	Tabelle mit allen Grundwasserproben, inkl. Angaben zu den Messstellen und Beprobungen Vorteil: leichtere Erstellung von Teildatensätzen Nachteil: fehlende Abfragemöglichkeiten, redundante Angaben zu den Messstellen
Anzahl Messstellen	86	343
Messstelleninformation	Lage, Bohrprofile, Ausbaupläne mit ROK, Lage der Filterstrecke und verwendeten Materialien	Lage, ROK, GWL-Anbindung (nicht durchgängig und z.T. inkonsistent)
Anzahl Proben	413 von 1991 bis 1998	519 in 1996 und 1997
Angaben zur Probenahme	Probedatum	Angaben zu Probenahmedatum, -ort, -gewinnung, Organoleptik
Angaben zu den Laboranalysen (Methoden, NWG)	nicht systematisch erfasst	nicht systematisch erfasst (z.T. WUA (1996) zu entnehmen)
Reproduzierbarkeit der Werte	nicht untersucht	nicht untersucht
Angaben zur Datenaufbereitung	vereinzelt	keine
Vollständigkeit der Angaben	vereinzelt fehlen Vor-Ort-Parameter sowie Einzelstoffanalysen für Xylene, Chlorbenzene und Chlorphenole	fehlende Einzelstoffanalysen für Xylene, Tri- bis Hexachlorbenzenen, Chlorphenole, Nitrophenole, Nitrochlorbenzene, Nitrochlorphenole und PAK

3.2 Daten zum Umweltverhalten und zur Abbaubarkeit der Stoffe

Um die im Monitoring untersuchten Stoffe hinsichtlich ihres Umweltverhaltens zu charakterisieren und damit eine Interpretations- und Diskussionsgrundlage für die Analysen in Kapitel 4 und 5 zu schaffen, wurden physikochemische Eigenschaften aus dem Handbuch für Umweltchemikalien (Rippen, 1987-1998) und der Caltox-Datenbank (nach Scheringer, 1997) zusammengetragen (Anhang A 3.2 bis A 3.7).



Färbung erfolgte nach Stoffgruppen: ●: LHKW, ●: BTEX, ●: CB, ●: HCH, ●: DDT/D/E, ●: sonstige.

Abbildung 3.5: Reaktive Halbwertszeiten von Stoffen im Grundwasser (Angaben in Jahren), Datenquelle: Caltox-Datenbank (Scheringer, 1997).

Für das Vorkommen von Stoffen im Grundwasser ist neben den physikochemischen Eigenschaften und den Eintragsmustern die Abbaubarkeit der Stoffe von Bedeutung. Bekannte Abbauketten werden daher im Folgenden für ausgewählte Stoffgruppen dargestellt. Wie Abbildung 3.5 zu entnehmen ist, herrschen im Grundwasser sehr große Unterschiede in der Persistenz von Stoffen. Der tatsächliche Abbau kann jedoch erheblich von den Angaben in Abbildung 3.5 abweichen, da er durch lokale Gegebenheiten wie Redoxbedingungen, pH-Werte, Anwesenheit von Elektronenakzeptoren etc. entscheidend beeinflusst wird. Daher haben die folgenden Ausführungen eher allgemeinen Charakter.

Leichtflüchtige chlorierte Kohlenwasserstoffe (LHKW)

Zur Gruppe der LHKW gehören chlorierte Methane, Ethane und Ethene. Diese Stoffe zeichnen sich generell durch eine hohe Mobilität im Grundwasser aus. Man kann folgende Abbauketten unterscheiden:

Der Abbau von Tetrachlormethan findet sowohl biotisch als auch abiotisch statt und hat eine vergleichsweise geringe Halbwertszeit (Abbildung 3.5). Tetrachlormethan wird sehr gut unter anaeroben Bedingungen (denitrifizierend, methanogen sowie sulfatreduzierend) abgebaut (Devlin & Müller, 1999). Unter denitrifizierenden und methanogenen Bedingungen

entsteht vor allem Trichlormethan, aber auch Dichlormethan (Abbildung 3.6). Bei Anwesenheit von Pyrit wird der abiotische Abbauweg gefördert, aus dem Trichlormethan und CS_2 in einem charakteristischen Verhältnis von 2:1 hervorgehen (Devlin & Müller, 1999). Außerdem existieren konkurrierende Abbauwege, bei denen neben Tri- und Dichlormethan u.a. Kohlendioxid, Kohlenmonoxid und Formaldehyd entstehen.

Trichlormethan wird weiter zu Dichlormethan reduziert, das sowohl anaerob als auch aerob umgesetzt werden kann (Abbildung 3.6). Insgesamt ist Dichlormethan recht gut abbaubar (Abbildung 3.5).

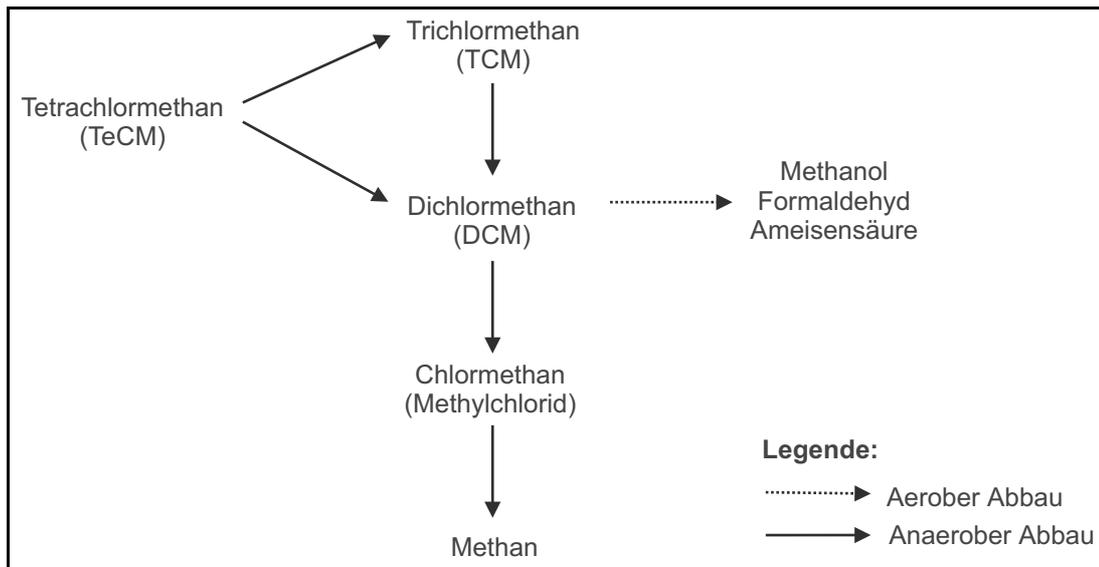


Abbildung 3.6: Abbauwege von Tetrachlormethan, Trichlormethan und Dichlormethan (nach Angaben in: Rippen, 1987-1998; Devlin & Müller, 1999).

Für die chlorierten Ethane und Ethene existieren die Abbauwege in Abbildung 3.7: Tetrachlorethen ist aerob nicht abbaubar. Unter anaeroben Bedingungen werden Tetra- und Trichlorethen hingegen durch Mikroorganismen abgebaut. Dabei werden 1,1-Dichlorethen sowie cis und trans 1,2-Dichlorethen gebildet, wobei das cis-Isomer bevorzugt entsteht. Dies verweist auf einen stereospezifischen, biologisch katalysierten Prozess (Nerger, 1990). Die zweifach chlorierten Ethene können weiter zu Vinylchlorid umgesetzt werden, das schließlich gänzlich mineralisiert werden kann. Prinzipiell ist Vinylchlorid unter aeroben und anaeroben Bedingungen abbaubar. Allerdings ist die Reaktion sehr langsam, so dass für Vinylchlorid sehr lange Halbwertszeiten angegeben werden (Abbildung 3.5). In Anwesenheit von Pyrit ist Ethin das Hauptabbauprodukt von Tetra- und Trichlorethen (Butler & Hayes, 1999).

Allgemein wird angenommen, dass höher chlorierte Ethene unter reduzierenden Bedingungen schneller dehalogeniert werden als die gering chlorierten Ethene, wobei Vinylchlorid die geringsten Umsetzungsraten aufweist und sich anreichern kann (Haston & McCarty, 1999). Ursache dafür sind Produkte, die bei hohen Redoxpotenzialen entstehen und die Elektronen-Transfer-Mediatoren, die für die komplette Dehalogenierung von Tetrachlorethen notwendig sind, immobilisieren. Bei eher negativen Redoxpotenzialen und niedrigen pH-Werten tritt dieser Effekt nicht auf (Glod et al., 1997a, 1997b). So kann sich eine Grundwasserkontamination in fünf Jahren von den Primärkontaminanten (Tetra-/Trichlorethen) zu den Sekundärkontaminanten (Dichlorethene, Vinylchlorid) verlagern (Nerger, 1990).

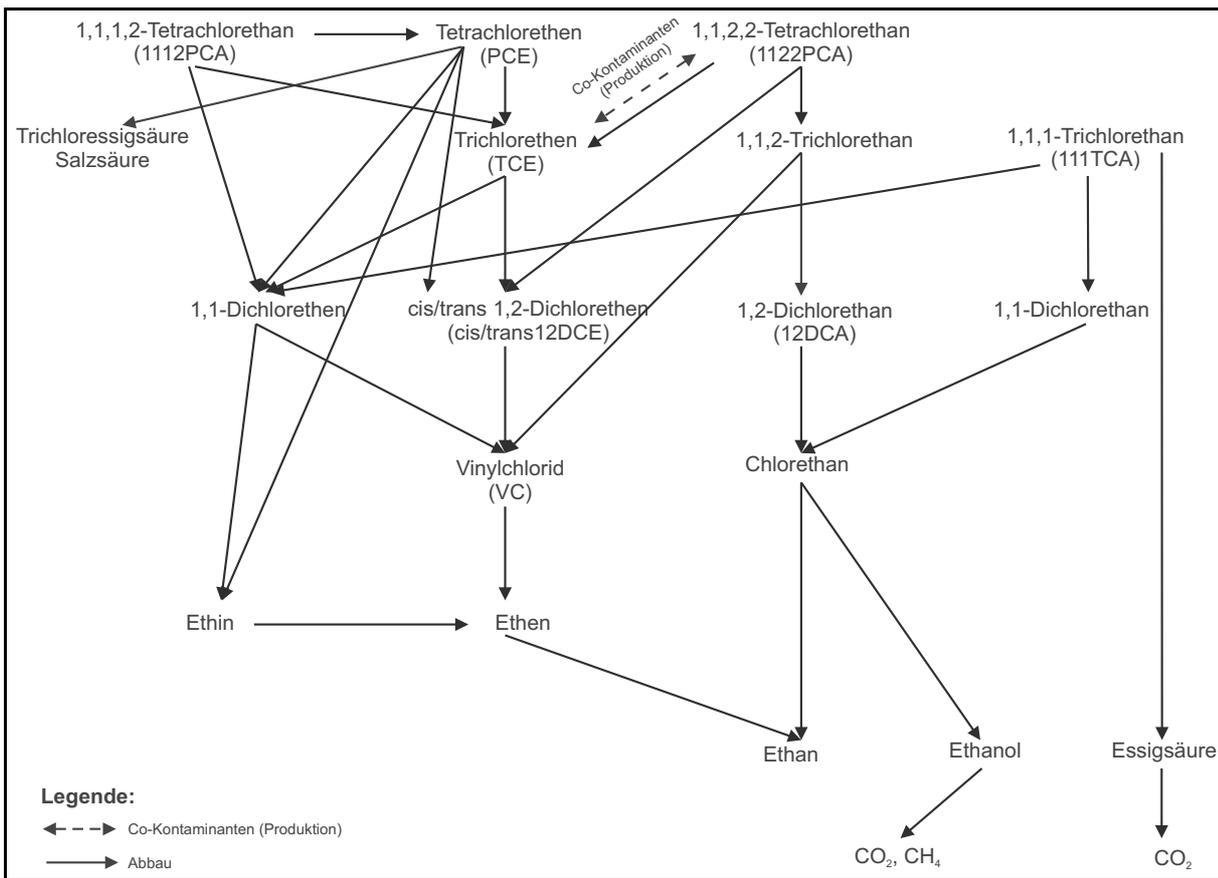


Abbildung 3.7: Abbauewege von chlorierten Ethanen und Ethenen (zusammengestellt aus: Rippen, 1987-1998; Wittsiepe, 1993).

BTEX-Aromaten

BTEX-Aromaten werden sowohl unter aeroben als auch unter anaeroben Bedingungen vollständig mineralisiert. Unter anaeroben Bedingungen können Nitrat, Eisen (Fe^{3+}), Mangan (Mn^{4+}) sowie Sulfat als Elektronenakzeptoren fungieren (Kazumi et al., 1997; Wisotzky & Eckert, 1997). Abbildung 3.8 zeigt am Beispiel des Benzens die Abbauprodukte.

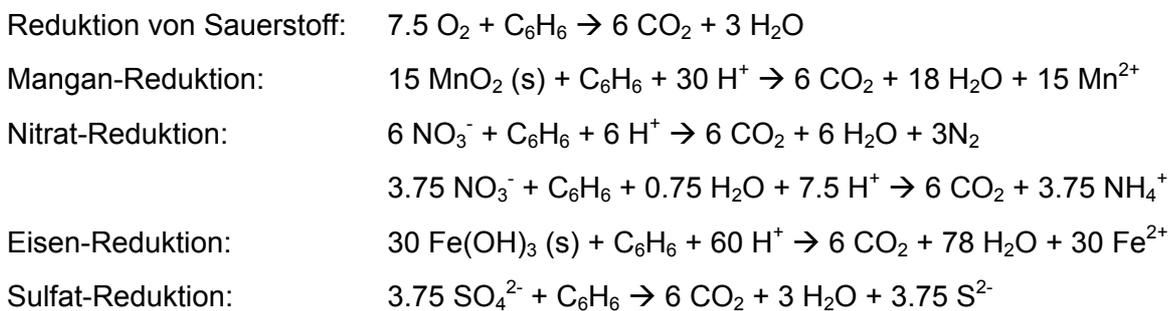


Abbildung 3.8: Abbaureaktionen für die vollständige Mineralisierung von BTEX-Aromaten mit verschiedenen Oxidationsmitteln am Beispiel des Benzens (aus: Wisotzky & Eckert, 1997).

Chlorbenzene

Der Abbau der Chlorbenzene ist vergleichsweise wenig untersucht. Doch lässt sich für die verschiedenen Spezies folgende Abbaukette von Hexachlorbenzen zu Monochlorbenzen formulieren (Abbildung 3.9). Monochlorbenzen kann weiterhin zu Benzen umgesetzt werden, das, wie bereits dargestellt, aerob und anaerob abgebaut wird.

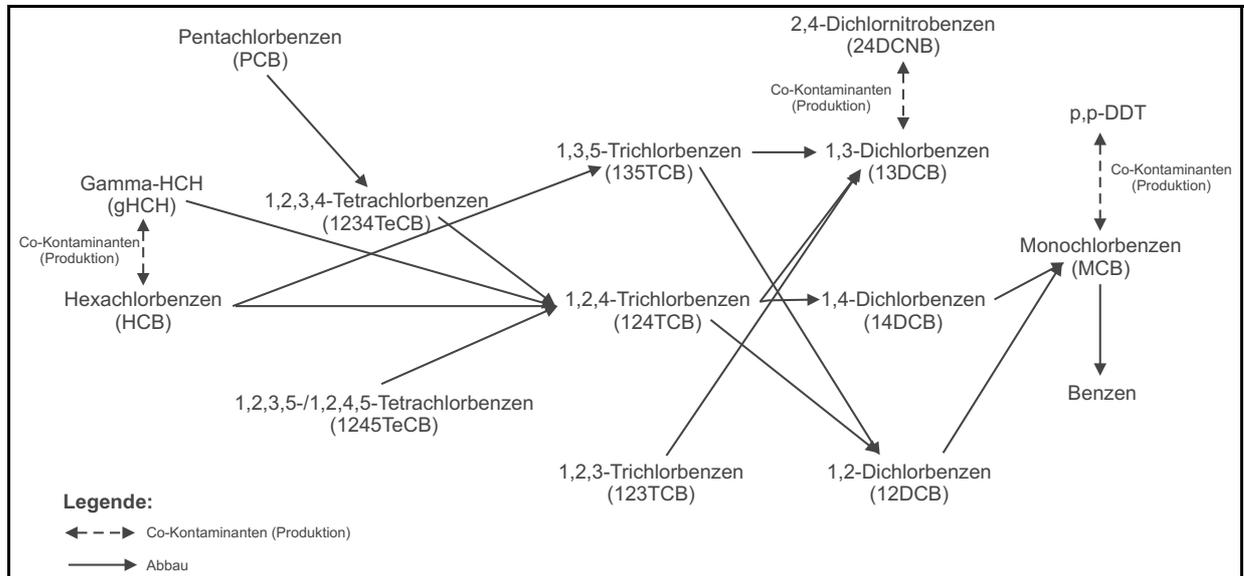


Abbildung 3.9: Abbauwege der Chlorbenzene (zusammengestellt aus: Rippen, 1987-1998).

HCH-Isomere

HCH-Isomere sind stabil gegenüber Licht, hohen Temperaturen, heißem Wasser und Säure, durch Basen werden sie hingegen dechloriert. Bei pH 8 und 5 °C beträgt die Halbwertszeit der hydrolytischen Umsetzung 26 Jahre für das alpha-Isomer und 42 Jahre für das gamma-Isomer (Willett et al., 1998). Für die Halbwertszeit im Grundwasser werden jedoch noch längere Zeiträume angegeben (Abbildung 3.5).

Die physikochemischen Eigenschaften der HCH-Isomere werden durch die Stellung der Chloratome in axialer und äquatorialer Richtung bestimmt. Beim beta-Isomer sind alle Chloratome in äquatorialer Richtung angeordnet, was eine große physikalische und biologische Stabilität und Persistenz verursacht. Beta-HCH hat einen wesentlich geringeren Dampfdruck und einen sehr viel höheren Schmelzpunkt als das alpha-Isomer (Anhang A 3.5). Darüber hinaus akkumuliert es stärker im Fettgewebe (Willett et al., 1998).

Aufgrund ihrer Lipophilie kommen HCH-Isomere vor allem in Böden und Sedimenten vor. Es gibt sowohl aerobe als auch anaerobe Bodenbakterien, die alle HCH-Isomere abbauen können. Die Abbauraten folgen der Reihung: alpha > gamma > delta >> beta. Unter anaeroben Bedingungen entstehen Monochlorbenzen und Benzen als Endprodukte, die unter aeroben Bedingungen gut abgebaut werden können (Middeldorp et al., 1996).

DDT/D/E-Isomere

Wie Abbildung 3.5 zeigt, sind DDT/D/E im Grundwasser sehr persistent. Trotzdem werden Abbauwege identifiziert. Nach Untersuchungen im Teltower Kanal in Umgebung des DDT-Produktionsstandortes Berlin-Chemie Adlershof/Grünau schlagen z.B. Heberer & Dünnbier (1999) folgenden Abbauweg für DDT im Wasser vor (Abbildung 3.10): DDT wird anaerob zu

DDD und weiter bis zu DDA umgesetzt. Alternativ wird aus DDT das persistenterere DDE gebildet. Die Umsetzungen scheinen nicht stereoselektiv zu sein, so dass das ursprüngliche Verhältnis zwischen o,p- und p,p-Isomeren in der Abbaukette erhalten bleibt (Heberer & Dünnebier, 1999).

Da DDD etwas besser wasserlöslich ist als DDE und DDT (vgl. Anhang A 3.6), wird im Teltower Kanal der Abbauweg über DDD bis zu DDA gegenüber dem Abbauweg zu DDE bevorzugt. Bislang wird DDA nur selten untersucht, da es aufgrund seiner polaren Molekülstruktur nicht zusammen mit den anderen Metaboliten analysiert werden kann (Heberer & Dünnebier, 1999). Um den Abbau von DDT in der Umwelt zu beurteilen, wird in der Regel das Verhältnis von DDT : DDE herangezogen. DDD eignet sich dafür nicht, da es im technischen Gemisch in deutlichen Mengen vorkommt (vgl. Tabelle 2.4).

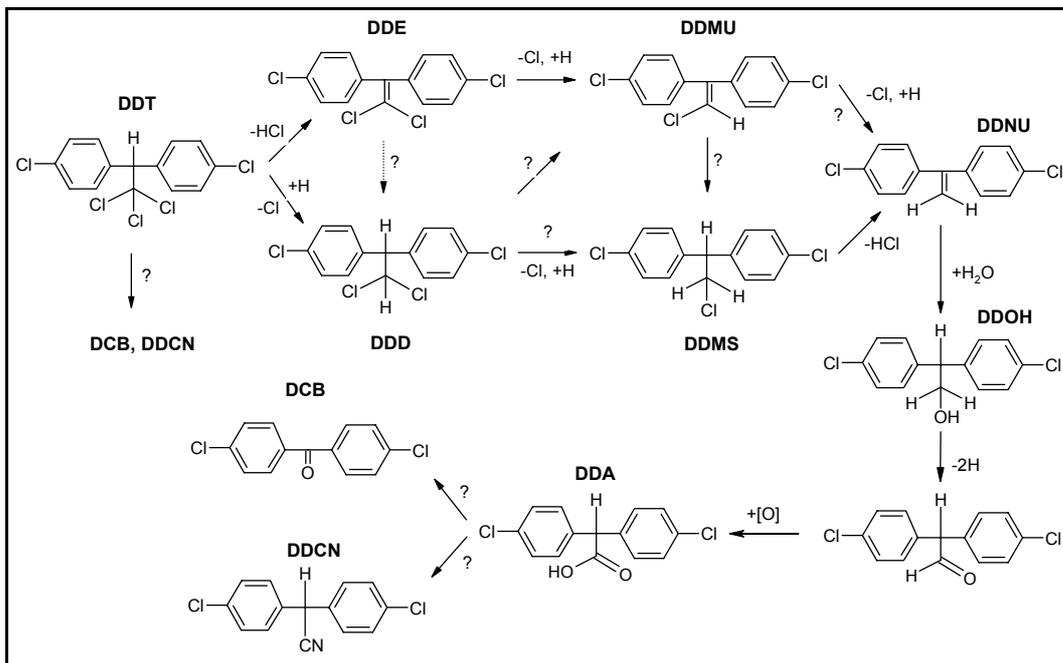


Abbildung 3.10: Abbauwege von DDT in wässriger Phase (aus: Heberer & Dünnebier, 1999).

3.3 Methoden der Datenanalyse

In Kapitel 1.3 wurde das Untersuchungskonzept der Arbeit vorgestellt. Die einzusetzenden Analysemethoden für das Stofffranking und die statistische Strukturanalyse werden im Folgenden erläutert. Da statistische Verfahren bestimmte Anforderungen an die Eingangsdaten stellen, folgen zunächst einige Bemerkungen zum Messniveau sowie zur Verteilung und Transformation von Daten. Damit werden auch die methodischen Schwierigkeiten, die bei der Auswertung der Monitoringdaten auftreten können, verdeutlicht.

3.3.1 Messniveaus, Datentransformation und Anwendbarkeit von Verfahren

Im Grundwassermonitoring werden multivariate, mehrdimensionale Daten erzeugt, d.h. an einer Reihe von Objekten (Grundwassermessstellen bzw. Grundwasserproben) wird ein Set von Eigenschaften gemessen. Es entsteht eine $n \times p$ -Datenmatrix X :

$$X = \begin{pmatrix} x_{11} & x_{12} & \cdots & x_{1j} & \cdots & x_{1p} \\ x_{21} & x_{22} & \cdots & x_{2j} & \cdots & x_{2p} \\ \vdots & \vdots & & \vdots & & \vdots \\ x_{i1} & x_{i2} & \cdots & x_{ij} & \cdots & x_{ip} \\ \vdots & \vdots & & \vdots & & \vdots \\ x_{n1} & x_{n2} & \cdots & x_{nj} & \cdots & x_{np} \end{pmatrix}$$

- mit: n: Anzahl der Objekte (Index: $i = 1, \dots, n$),
 p: Anzahl der beobachteten Eigenschaften (Merkmale, Variablen, Attribute oder Parameter; Index: $j = 1, \dots, p$),
 x_{ij} : Messwert der Eigenschaft j am Objekt i.

Man unterscheidet folgende Messniveaus (vgl. Siegel, 1987; Kaufman & Rousseeuw, 1990; Hartung et al., 1999):

- die qualitative Nominal- oder Klassifikationsskala mit dem Sonderfall der binären Daten: ein Merkmal ist vorhanden (1) oder nicht (0),
- die Ordinal- oder Rangskala mit den Beziehungen "größer als", "kleiner als", "gleich",
- die quantitative Intervallskala und
- die quantitative Verhältnisskala mit einem echten Nullpunkt.

In einem Grundwassermonitoring werden die meisten Daten auf der Verhältnisskala gemessen. Eine Besonderheit ist, dass Stoffkonzentrationen nicht bis zum Nullpunkt gemessen werden können, sondern nur bis zu einer analytisch bedingten Nachweisgrenze (NWG), so dass die Verteilung unterhalb der NWG abgeschnitten ist (*Censoring*, siehe Kapitel 3.1.1). Daten der Verhältnisskala und Werte $< \text{NWG}$ können folgendermaßen skaliert werden: Auf der Nominal- oder Klassifikationsskala können binäre Daten mit der Nachweisgrenze als Klassifikationsgrenze generiert werden. Auf der Ordinalskala erhalten alle Messwerte der Verhältnisskala Rangzahlen. Dazu werden die Werte x_1, \dots, x_n nach ihrer Größe geordnet und durch die Rangzahlen $R(x_1), \dots, R(x_n)$ ersetzt, so dass $R(x_{\min}) = 1$ und $R(x_{\max}) = n$, wobei n die Anzahl der Werte angibt. Die Werte $< \text{NWG}$ erhalten einheitlich die kleinste Rangzahl. Besetzen mehrere Objekte denselben Rang, erhalten diese den Mittelwert der zu vergebenden Rangzahlen. Wie bereits in Kapitel 3.1.1 erläutert und umgesetzt, ist es auf der Verhältnisskala üblich, die Hälfte der Nachweisgrenze für die Werte $< \text{NWG}$ anzusetzen.

In Tabelle 3.7 ist zusammengestellt, welche statistischen Verfahren bei welchem Messniveau einzusetzen sind. Verfahren, die auf Werte eines niedrigen Messniveaus anwendbar sind, sind auch für Werte eines höheren Messniveaus nutzbar. Viele statistische Methoden erfordern normalverteilte Daten. Datensätze über anthropogen verursachte Schadstoffbelastungen folgen hingegen häufig einem exponentiellen Verlauf, d.h. sie sind stark rechtschief (linkssteil) verteilt. Liegt eine log-Normalverteilung vor, ist eine logarithmische Transformation der Originaldaten, z.B. unter der Annahme $Y = \ln(X)$, sinnvoll. Eine Alternative bieten nicht-parametrische (verteilungsfreie) Verfahren. Diese sind auf nominal- oder ordinalskalierte Daten oder auf Daten einer Intervall- oder Verhältnisskala, deren Verteilungsfunktion weitgehend unbekannt ist, anwendbar. Parametrische Verfahren stellen zwar hohe Anforderungen an die Daten, sind aber bei geeigneten Daten aussagekräftiger. Geringfügige Abweichungen von den Voraussetzungen parametrischer Verfahren beeinträchtigen ihre Aussagekraft jedoch nicht.

Tabelle 3.7: Verschiedene Messniveaus und angemessene statistische Verfahren (zusammengestellt nach Siegel, 1987; Kaufman & Rousseeuw, 1990).

	Nominalskala/ Binäre Daten	Ordinalskala	Intervallskala
Maß der zentralen Tendenz	Modus	Median	Mittelwert
Maß für die Streuung	Häufigkeiten	Interquartilsabstand	Standardabweichung
Korrelationsmaße	Kontingenz-Koeffizient	Spearman ρ , Kendall τ , Kendall W	Pearson'sche Produkt-Moment-Korrelation, Multiple Produkte Moment-Korrelation
Distanzmaße zwischen Objekten (für die Clusteranalyse)	einfache Übereinstimmung, Jaccard-Distanz, u.a.	euklidische Distanz, Block-Distanz	euklidische Distanz, Block-Distanz, quadrierte euklidische Distanz, Minkowski-Distanz
Hauptkomponentenanalyse (HKA)	----	HKA mit Spearman'scher Rangkorrelationsmatrix	HKA mit Korrelationsmatrix nach Pearson

Multivariate Methoden erfordern, dass die verschiedenen Merkmale auf dem gleichen Messniveau erhoben wurden und dass die Skalen, d.h. die Messbereiche der Merkmale vergleichbar sind. Daher wird mit der Z-Transformation eine Normierung / Standardisierung der Daten mit dem Mittelwert und der Standardabweichung vorgenommen, so dass der Mittelwert der Z-transformierten Daten 0 und ihre Varianz 1 beträgt:

$$Z\text{-Wert} = \frac{\text{Messwert} - \text{Mittelwert}}{\text{Standardabweichung}}$$

Die wichtigsten der in Tabelle 3.7 genannten Methoden werden im Folgenden erläutert.

3.3.2 Bestimmung von Kontaminationskriterien und Kontaminationsprofilen

In Kapitel 1.2.1 wurde die Strukturierung multivariater Daten durch "Generalisieren und Ordnen" vorgestellt. Diese Strategie wird durch die Ableitung von Kontaminationskriterien und Kontaminationsprofilen umgesetzt. Kontaminationsprofile werden nach Kerndorff et al. (1993) mit den zwei Kontaminationskriterien Emissions-Nachweishäufigkeit (ENH) und mittlere Emissionskonzentration (MEK) bestimmt, die multiplikativ verknüpft werden.

Kontaminationskriterium Emissions-Nachweishäufigkeit

Mit der Emissions-Nachweishäufigkeit (ENH) wird die Häufigkeit eines Stoffes, die in Grundwasserkontaminationen durch anthropogene Einträge verursacht wird, ermittelt. Dazu wird aus einem Datensatz für jede Substanz j die Anzahl der Proben mit Konzentrationen über einer stoffspezifischen Relevanzgrenze RG_j bestimmt. Danach wird deren prozentualer Anteil an den insgesamt auf diesen Stoff untersuchten Proben berechnet (Kerndorff et al., 1993):

$$ENH_j [\%] = \frac{\text{Anzahl der auf Stoff j untersuchten Proben mit Konzentrationen} > RG_j}{\text{Anzahl der auf Stoff j untersuchten Proben}} \cdot 100$$

$$= \frac{n_j > RG_j}{n_j} \cdot 100$$

mit: j: Substanzindex, $j = 1, \dots, p$,
 p: Anzahl der untersuchten Stoffe,
 n_j : Anzahl der auf Stoff j untersuchten Proben und
 ENH_j: Emissions-Nachweishäufigkeit für Stoff j.

Die stoffspezifischen Relevanzgrenzen werden so festgelegt, dass Konzentrationen, die diese Grenze überschreiten, auf Emissionen einer Altablagerung zurückgeführt werden können. Im Gegensatz zu anorganischen Stoffen, die auch natürlicherweise im Grundwasser vorkommen, sind die meisten organischen Stoffe ausschließlich anthropogenen Ursprungs, so dass ihr analytischer Nachweis bereits eine Verunreinigung kennzeichnet. Daher entsprechen die Relevanzgrenzen in der Regel den stoffspezifischen analytischen Nachweisgrenzen ($RG_j = NWG_j$). Aus der Rangordnung der ENH_j ergibt sich die Relevanz eines Stoffes hinsichtlich seiner Verbreitung in Grundwasserkontaminationen.

Kontaminationskriterium mittlere Emissionskonzentration

Mit dem zweiten Kontaminationskriterium, der mittleren Emissionskonzentration (MEK), werden die Absolutkonzentrationen der Stoffe im Grundwasser betrachtet (Kerndorff et al., 1993). Als Maß für die MEK_j eines Stoffes j dient der Schwerpunkt der Verteilung von Konzentrationen über der stoffspezifischen Relevanzgrenze. Dieser kann mit verschiedenen statistischen Lagemaßen geschätzt werden. Da die Konzentrationen in der Regel rechtsschief verteilt sind (s.o.), wird (im Gegensatz zu Kerndorff et al., 1993) die MEK_j in dieser Arbeit durch den robusten Median geschätzt, um (Rück-)Transformationen zu vermeiden. Die Rangordnung der MEK_j zeigt die Relevanz eines Stoffes hinsichtlich seiner Quantität in Grundwasserkontaminationen.

Verknüpfung der beiden Kontaminationskriterien mittels Bewertungszahlen

Um beide Kontaminationskriterien verknüpfen zu können, werden sie auf einer normierten Skala von 1 bis 100 bewertet. Die Bewertung der ENH_j erfolgt linear, wobei dem Stoff mit der maximalen ENH (ENH_{max}) 100 Punkte zugewiesen werden, während Stoffe, die gar nicht nachgewiesen wurden ($ENH_j = 0\%$), nur einen Punkt erhalten. Die Bewertungszahlen (BZ) der anderen Stoffe werden wie folgt berechnet:

$$BZ-ENH_j = 1 + 99 \cdot \frac{ENH_j}{ENH_{max}} \quad \text{mit } j = 1, \dots, p.$$

Da sich die MEK_j über mehrere Größenordnungen erstrecken, werden sie nicht linear, sondern logarithmisch bewertet (Kerndorff et al., 1993). Der logarithmierte Maximalwert der MEK ($LOG10(MEK_{max})$) erhält 100 Bewertungspunkte. Als minimale MEK (MEK_{min}) wird $0.01 \mu\text{g/l}$ angenommen und mit einem Punkt bewertet. Die anderen Bewertungszahlen werden folgendermaßen berechnet:

$$BZ-MEK_j = 1 + 99 \cdot \frac{LOG10(MEK_j) - LOG10(MEK_{min})}{LOG10(MEK_{max}) - LOG10(MEK_{min})} \quad \text{mit } j = 1, \dots, p.$$

Durch Multiplikation der Bewertungszahlen für die Kontaminationskriterien ENH und MEK erhält man schließlich eine Gesamt-Bewertungszahl (BZ_{ges}). Die Abfolge von Stoffen, die absteigend nach ihrer Gesamt-Bewertungszahl sortiert sind, wird Kontaminationsprofil genannt. Zur besseren Übersicht werden die Stoffe in Klassen eingeteilt (Tabelle 3.8).

Tabelle 3.8: Klasseneinteilung der Gesamt-Bewertungszahlen im Kontaminationsprofil.

Klasse BZ_{ges}	Spannweite der $BZ_{ges} = BZ-ENH \cdot BZ-MEK$	
1	5001	... 10000
2	2501	... 5000
3	1251	... 2500
4	626	... 1250
5	313	... 625
6	2	... 312
7	1	

3.3.3 Hasse-Diagramm-Technik

Für die Verknüpfung der beiden Kontaminationskriterien Emissions-Nachweishäufigkeit und Mittlere Emissionskonzentration wurde außerdem die Hasse-Diagramm-Technik (HDT) eingesetzt. Dafür wurde das Software-Programm WHASSE (Brüggemann et al., 1999) verwendet. Die HDT basiert auf der Theorie der partiellen Ordnungen und beinhaltet sowohl die Erstellung als auch die Analyse von Hasse-Diagrammen. Ein Hasse-Diagramm ist die Visualisierung einer partiellen Ordnung von Objekten, die durch verschiedene, zum Teil widersprüchliche Attribute charakterisiert sind (vgl. Abbildung 1.1). Unvergleichbare Objekte befinden sich nebeneinander auf einem Level, während vergleichbare Objekte untereinander in einer Kette oder Reihe angeordnet werden, wobei die Objekte mit den höheren Werten über den Objekten mit geringeren Werten stehen. Ein Hasse-Diagramm wird durch folgende Eigenschaften beschrieben:

- Anzahl der Äquivalenzklassen (Objekte mit gleichen Eigenschaften),
- Anzahl der Level (Höhe des Diagramms),
- die längste Antichain, d.h. die maximale Anzahl unvergleichbarer Elemente auf einem Level (Breite des Diagramms),
- maximale Elemente an der Spitze des Diagramms, d.h. auf dem höchsten Level,
- minimale Elemente auf dem niedrigsten Level,
- eventuell isolierte Elemente, die mit allen anderen Elementen unvergleichbar sind,
- Anzahl der Vergleichbarkeiten zwischen allen Objekten und
- Anzahl der Unvergleichbarkeiten im Diagramm (nach Brüggemann & Halfon, 2000).

Ein weiteres Mittel, um verschiedene Objekte zu vergleichen und um ihre Position im Hasse-Diagramm zu interpretieren, ist die Matrix der nachfolgenden Elemente \mathbf{D} . Die Einträge der Matrix \mathbf{D} werden folgendermaßen berechnet:

$$D_{ij} := \text{card}(G(i) \cap G(j))$$

mit: $i, j = 1, \dots, p,$

card: Kardinalität, d.h. die Anzahl an Elementen,

$G(i), G(j)$: Menge mit der Anzahl der nachfolgenden Elemente, d.h. geringere positionierten Objekten als das Schlüsselement i bzw. j .

Wenn $i = j$ ist, enthält der D-Wert (D_{ij}) die Anzahl aller Nachfolger des Objektes i . Wenn $i \neq j$ ist, gibt der D-Wert die Anzahl der gemeinsamen Nachfolger der beiden Elemente i und j an. Weitere Details sind Brüggemann & Halfon (1995) zu entnehmen.

Prinzipiell kann die HDT im Grundwassermonitoring auf die Ordnung von Merkmalen anhand von Kontaminationskriterien, aber auch auf die Ordnung von Messstellen bzw. Proben mit Hilfe der tatsächlich gemessenen Werte angewendet werden. Bei einer großen Anzahl von Objekten wird ein Hasse-Diagramm jedoch schnell unübersichtlich, so dass vorher eine Klassifikation der Objekte z.B. mit Hilfe der Clusteranalyse erfolgen sollte, um Äquivalenzklassen zu bilden (Brüggemann & Halfon, 2000; Luther et al., 2000).

3.3.4 Korrelationsanalysen

Als weitere Strategie zur Strukturierung multivariater Daten wurden in Kapitel 1.2.2 die Methoden der statistischen Strukturanalyse genannt. Korrelations-, Hauptkomponenten- und Clusteranalyse werden im Folgenden beschrieben. Die Auswertungen wurden mit dem Statistikprogramm SPSS durchgeführt.

Lineare Zusammenhänge zwischen zwei oder mehreren Messgrößen kann man mit Hilfe von Korrelationsanalysen identifizieren. Für die unterschiedlichen Messniveaus von Daten existieren verschiedene Korrelationsmaße (Tabelle 3.7).

Parametrische Korrelation nach Pearson

Für Daten der Intervall- und Verhältnisskala kann der Korrelationskoeffizient nach Pearson berechnet werden. Der Korrelationskoeffizient r ist ein Maß für die Stärke des linearen Zusammenhangs zwischen zwei Zufallsgrößen. Er kann Werte zwischen -1 und 1 annehmen. Für Variablen, zwischen denen ein deterministischer linearer Zusammenhang besteht, beträgt $r = 1$; für unabhängige Variablen ist $r = 0$. Bei intervallskalierten, normalverteilten Daten wird mit dem t-Test getestet, ob sich ein Korrelationskoeffizient signifikant von 0 unterscheidet.

Der Korrelationskoeffizient wird aus einer Stichprobe durch den Produkt-Moment-Korrelationskoeffizienten r nach Pearson geschätzt:

$$r_{xy} = \frac{1}{n-1} \frac{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y})}{s_x s_y}$$

mit: \bar{x}, \bar{y} : Stichprobenmittelwerten,
 s_x, s_y : Stichprobenstandardabweichungen,
 n : Stichprobenumfang.

Untersucht man die Zusammenhänge zwischen mehreren Variablen, ist es sinnvoll, eine Korrelationsmatrix R zu erstellen. Darin sind alle Korrelationskoeffizienten aus jeweils paarweisen Kombinationen der betrachteten p Variablen wie folgt angeordnet:

$$R = \begin{pmatrix} r_{11} = 1 & r_{12} & \cdots & r_{1,p-1} & r_{1p} \\ r_{21} & r_{22} = 1 & \cdots & r_{2,p-1} & r_{2p} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ r_{p-1,1} & r_{p-1,2} & \cdots & r_{p-1,p-1} = 1 & r_{p-1,p} \\ r_{p1} & r_{p2} & \cdots & r_{p,p-1} & r_{pp} = 1 \end{pmatrix}.$$

Da $r_{ij} = r_{ji}$ gilt, erhält man eine symmetrische Matrix. Auf der Hauptdiagonalen stehen die Korrelationen der Variablen mit sich selbst; diese betragen 1.

Rangkorrelationen

Erfüllt ein Datensatz die Voraussetzungen für den Pearson-Korrelationskoeffizienten nicht, kann man auf verschiedene nicht-parametrische Verfahren zurückgreifen: Rangkorrelationskoeffizienten für ordinale Merkmale und Kontingenz-Koeffizienten für nominale Merkmale (Tabelle 3.7). Da der Kontingenz-Koeffizient mit anderen Korrelationsmaßen nicht vergleichbar ist und noch weitere Nachteile hat, sollte er nur eingesetzt werden, wenn andere Korrelationsmaße nicht berechnet werden können (Siegel, 1987), z.B. bei Datensätzen mit einem sehr starken Censoring (Helsel, 1990). Da er in dieser Arbeit nicht sinnvoll eingesetzt werden konnte, werden im Folgenden nur die Rangkorrelationskoeffizienten beschrieben. Sie werden in Kapitel 4 angewendet, um verschiedene Rangfolgen zu vergleichen, und in Kapitel 5, um die Ergebnisse von parametrischen und nicht-parametrischen Korrelationsanalysen gegenüberzustellen. Rangkorrelationskoeffizienten erfordern mindestens ordinal

skalierte Daten. Die Rangkorrelationen zwischen zwei Rangfolgen werden mit zwei Größen berechnet: dem Spearmanschen ρ und dem Kendallschen τ .

Bei **Spearmans ρ** wird die Differenz zwischen den Rangzahlen der Variablen x und y betrachtet. Die Korrelation ist dann vollkommen, wenn alle Objekte in beiden Reihenungen dieselbe Rangzahl bekommen, so dass alle Differenzen 0 betragen. Je größer die Differenzen zwischen den Rangzahlen sind, desto weniger vollkommen ist der Zusammenhang zwischen den beiden Größen. Damit sich positive und negative Differenzen nicht aufheben, gehen die quadrierten Differenzen in die Berechnung ein:

$$\rho = 1 - \frac{6 \sum_{i=1}^n (R(x_i) - R(y_i))^2}{n(n^2 - 1)} \quad \text{mit } n: \text{ Stichprobenumfang.}$$

Bei **Kendalls τ** werden aus den Rangzahlen $R(x_i)$ und $R(y_i)$ zunächst die Größen q_i bestimmt: Dafür werden die $R(x_i)$ sortiert. Aus der dabei entstehenden Reihenfolge der $R(y_i)$ werden die q_i berechnet. Für jeden $R(y_i)$ ist der Wert q_i gleich der Anzahl der $R(y_j)$, die kleiner oder gleich $R(y_i)$ sind und in der Reihenfolge hinter $R(y_i)$ stehen (vgl. Stoyan et al., 1997). Der Korrelations-Koeffizient τ wird wie folgt berechnet:

$$\tau = 1 - \frac{4 \sum_{i=1}^n q_i}{n(n-1)} \quad \text{mit } n: \text{ Stichprobenumfang.}$$

Beide Rangkorrelationskoeffizienten können genauso wie der Korrelationskoeffizient nach Pearson interpretiert werden. Im Vergleich zum Korrelationskoeffizienten nach Pearson beträgt jedoch die Stärke von Spearmans ρ nur 91 %, d.h. um eine Korrelation in einer Population auf demselben Signifikanzniveau wie Pearsons r mit Spearmans ρ festzustellen, braucht man 100 Fälle, während für Pearsons r 91 Fälle ausreichend sind (Siegel, 1987).

3.3.5 Hauptkomponentenanalyse

Die Hauptkomponentenanalyse (HKA) ist ein Spezialfall der Faktorenanalyse. Mit ihrer Hilfe können aus einer Korrelationsmatrix wichtige Informationen extrahiert werden, indem korrelierende Variablen gebündelt und zu neuen, künstlichen, unkorrelierten Variablen zusammengefasst werden. Dadurch wird insgesamt eine Dimensionsreduktion erreicht. Da es sich um ein lineares Verfahren handelt, versagt es bei Nichtlinearitäten (Stoyan et al., 1997).

Hauptkomponenten sollten mit standardisierten (Z-transformierten) Daten berechnet werden. Nach Helsel (1990) ist es auch möglich, die Spearmansche Rangkorrelationsmatrix als Eingangsdaten für die Hauptkomponentenanalyse zu wählen und somit eine nicht-parametrische HKA durchzuführen.

Normalverteilte, korrelierte Daten bilden im Datenraum eine Punktwolke in Form eines Ellipsoids. Für zwei Eigenschaften (d.h. zwei Dimensionen) und 16 Objekte (Datenpunkte) ist dies beispielhaft in Abbildung 3.11-A dargestellt; allgemein erhält man n Datenpunkte im p -dimensionalen Raum. Bei der Hauptkomponentenanalyse wird ein neues Koordinatensystem gewählt, dessen Ursprung im Schwerpunkt des Ellipsoids liegt und dessen Achsen (HK_1 und HK_2 in Abbildung 3.11-A) die Hauptachsen des Ellipsoids darstellen. Im p -dimensionalen Fall entstehen p orthogonale Hauptachsen, wobei die längste Hauptachse (1. Komponente) den größten Anteil der Gesamtvarianz der Daten widerspiegelt, die

2. Komponente ein Maximum der Restvarianz ausschöpft usw.. Die längeren Hauptachsen sind daher von besonderer Bedeutung (Henrion & Henrion, 1995; Hartung & Elpelt, 1999).

Die Längen der Hauptachsen sind proportional zur Wurzel der Eigenwerte der Korrelationsmatrix. Die zugehörigen Eigenvektoren liefern die Richtungen. Somit erhält man ein neues Koordinatensystem aus p unkorrelierten Zufallsgrößen F_l :

$$Z_j = \sum_{l=1}^p c_{jl} F_l \text{ für } j = 1, \dots, p$$

mit: Z_j : normalverteilte Zufallsgrößen der Z-transformierten Originaldaten (Mittelwert = 0 und Varianz = 1),

p : Anzahl der Variablen,

F_l : Hauptkomponenten oder Faktoren (normalverteilte Zufallsgrößen mit dem Mittelwert = 0 und den Varianzen λ_l),

$l = 1 \dots p$ (Laufvariable für Hauptkomponenten),

c_{jl} : Koeffizienten.

Die Koeffizienten c_{jl} können für jede gemessene Variable j und jede Hauptkomponente l in den zugehörigen Eigenwert λ_l und die entsprechenden **Faktorladungen** a_{jl} wie folgt zerlegt werden:

$$c_{jl} = \frac{a_{jl}}{\sqrt{\lambda_l}} \text{ für } j = 1, \dots, p$$

mit: a_{jl} : Faktorladung für die j -te Eigenschaft und die l -te Hauptkomponente,

λ_l : Eigenwerte der Korrelationsmatrix,

$l = 1, \dots, p$ (Index für die Hauptkomponenten).

Die Faktorladungen a_{jl} sagen aus, wie die gemessenen Variablen Z_j aus den neuen Faktoren F_l hervorgehen. Die aus den a_{jl} gebildete Matrix heißt Komponentenmatrix.

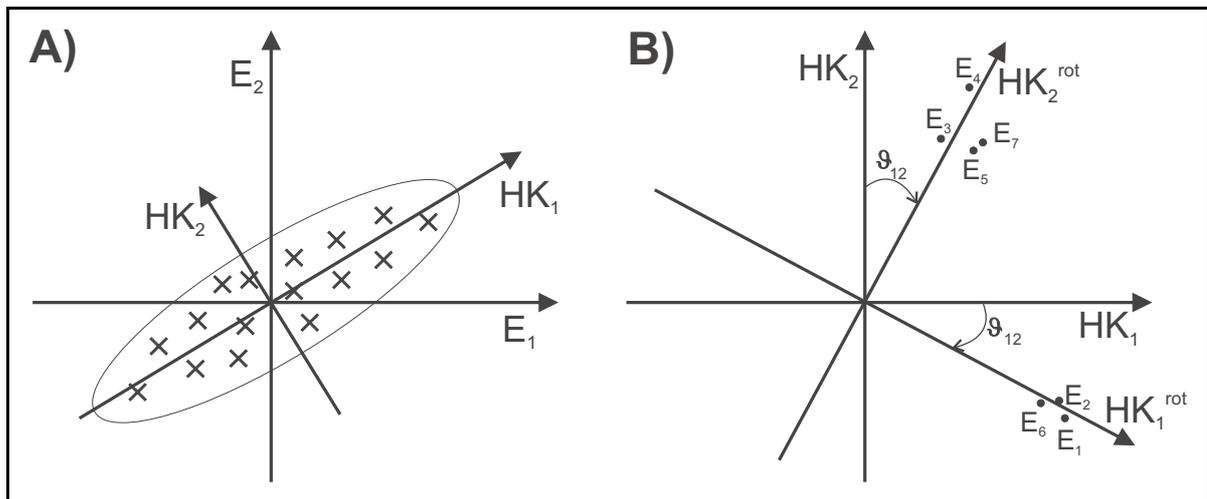


Abbildung 3.11: A: Graphische Darstellung eines standardisierten Datensatzes aus 16 Objekten und den Eigenschaften E_1 und E_2 mit Schwerpunkt und Hauptachsen. B: Varimax-Rotation der Hauptkomponentenmatrix um den Winkel ϑ_{12} (aus: Hartung & Elpelt, 1999).

Da die Summe der Eigenwerte der Anzahl der Variablen entspricht, gilt folgende Beziehung (Stoyan et al., 1997):

$$\sum_{l=1}^p \text{VAR}(F_l) = \sum_{l=1}^p \lambda_l = p = \sum_{j=1}^p \text{VAR}(Z_j).$$

Daher kann man für jede Hauptkomponente F_l ihren **Anteil an der Gesamtvarianz** durch λ_l/p berechnen.

Um eine Dimensionsreduzierung zu erreichen, müssen die Hauptkomponenten F_l , die einen geringen Varianzanteil der Daten beschreiben, vernachlässigt werden. Die Anzahl der signifikanten Hauptkomponenten wird im Allgemeinen mit folgenden heuristischen Kriterien bestimmt (Henrion & Henrion, 1995; Stoyan et al., 1997):

- Nach dem **Kaiserkriterium** werden nur die Hauptkomponenten verwendet, deren Eigenwert größer 1 ist, d.h. deren Streuung überdurchschnittlich ist.
- Im **Screeplot** werden die Eigenwerte gegenüber ihrer Nummer aufgetragen. Man geht davon aus, dass die Eigenwerte von Korrelationsmatrizen aus Datensätzen, die nur Zufallszahlen enthalten, flach gegen Null abfallen. Bei realen Daten weist die Verbindungslinie zwischen den Punkten ab einem bestimmten Eigenwert, der den Beginn des unwesentlichen Teils der Datenstruktur kennzeichnet, einen deutlichen Knick auf. Alle Eigenwerte unterhalb dieses Knicks können vernachlässigt werden.
- Die extrahierten Hauptkomponenten sollen einen bestimmten **Anteil der Gesamtvarianz**, z.B. 80 %, 90 % oder 95 %, erklären.
- Die extrahierten Hauptkomponenten sollen für jede Variable einen bestimmten Varianzanteil, z.B. 80 %, 90 % oder 95 %, erklären. Dies kann mit Hilfe der **Kommunalitäten** beurteilt werden. Die Kommunalitäten h_j geben für jede Variable an, welcher Anteil der Varianz der j -ten Variable durch die extrahierten Hauptkomponenten erklärt wird (vgl. Hartung & Elpelt, 1999). Sie liegen zwischen 0 und 1 (bzw. 0 % und 100 %).

Neben diesen heuristischen Kriterien, die weit verbreitet sind, gibt es statistische Kriterien: den Bartlett-Test auf Sphärizität, dessen Anwendung jedoch oft problematisch ist (Henrion & Henrion, 1995), sowie die Kreuzvalidierung (Wold, 1978).

Für die extrahierten Hauptkomponenten werden die Faktorladungen der einzelnen Variablen bestimmt. Hohe Faktorladungen deuten auf eine hohe Korrelation zwischen den Variablen Z_j und den Faktoren F_l hin. Damit ermöglichen sie eine inhaltliche Interpretation der extrahierten Komponenten. Variablen mit absoluten Faktorladungen > 0.5 werden **Markiervariablen** genannt. Mit ihrer Hilfe erfolgt eine Benennung und Charakterisierung der Faktoren (Röhr, 1993). Hingegen werden Variablen mit Ladungen < 0.10 als Nullladungsvariablen bezeichnet, die von einem Faktor ausgeschlossen sind, d.h. gar nicht mit ihm korrelieren (Röhr, 1993). Darüber hinaus ist die Anordnung der Variablen im Koordinatensystem der Faktoren (Ladungsdiagramm) zu betrachten (Henrion & Henrion, 1995). Die Koordinaten der j -ten Variable im Ladungsdiagramm sind durch ihre Faktorladungen gegeben.

Für ein fiktives Beispiel ist ein Ladungsdiagramm in Abbildung 3.11-B dargestellt. Um die Zuordnung der Variablen zu den Hauptkomponenten zu optimieren und damit eine bessere Interpretation zu erreichen, wird die Komponentenmatrix rotiert. In der orthogonalen **Vari-max-Rotation** wird das gesamte Koordinatensystem so gedreht, dass mit gleichen Streuungen neue unkorrelierte Faktoren entstehen, die hohe Faktorladungen für einige wenige Variablen erhalten (vgl. Hartung & Elpelt, 1999).

Die Messwerte an den einzelnen Objekten können über **Faktorwerte** mit den Hauptkomponenten in Zusammenhang gebracht werden:

$$z_{ij} = \sum_{l=1}^r c_{jl} f_{jl} \quad \text{für } i = 1, \dots, n \text{ und } j = 1, \dots, p$$

mit: r : Anzahl der extrahierten Hauptkomponenten,
 z_{ij} : Messwert der j -ten Eigenschaft am i -ten Objekt,
 c_{jl} : Koeffizient (s.o.),
 f_{jl} : Faktorwerte oder Hauptkomponentenwerte (Realisierungen der Zufallsgrößen F_j),
 n : Stichprobenumfang,
 p : Anzahl der gemessenen Variablen.

Ist $r < p$, können die Faktorwerte nicht exakt bestimmt werden, sondern müssen durch Regression bei gegebenen Messwerten und gegebenen Faktorladungen als kleinste Quadrat-Schätzer geschätzt werden. Die Faktorwerte charakterisieren die Stärke eines Faktors auf ein Objekt. Ihre Betrachtung kann zum besseren Verständnis der Faktoren beitragen.

3.3.6 Clusteranalysen

Mit Clusteranalysen werden aus einer Menge von Objekten ähnliche Objekte zu Gruppen, Klassen oder Clustern zusammengefasst, wobei sich die einzelnen Gruppen deutlich voneinander unterscheiden sollen. Eine Clusteranalyse besteht im Wesentlichen aus zwei Schritten, für die es zahlreiche Algorithmen gibt:

1. Berechnung der Unterschiede oder Gemeinsamkeiten zwischen allen Objekten und
2. Fusionierung der Objekte mit kleinen Unterschieden bzw. großen Gemeinsamkeiten zu Gruppen.

Prinzipiell eignen sich Clusteranalysen auch dazu, um Merkmale zu Gruppen zusammenzufassen. Da diese Variante hier jedoch nicht angewendet wurde, beschränken sich die folgenden Ausführungen im Wesentlichen auf die Distanzmaße und Fusionierungsalgorithmen, die in den Kapiteln 4 und 5 angewendet wurden, um Objekte zu klassifizieren.

Distanzmaße

Man unterscheidet Distanzmaße für die Ähnlichkeit (*similarities* $s(O_i, O_k)$) und die Unähnlichkeit (*dissimilarities* $d(O_i, O_k)$) zwischen zwei Objekten O_i und O_k . Die Distanzmaße eignen sich nur für Daten bestimmter Messniveaus (Tabelle 3.7). Distanzmaße werden aus der $n \times p$ -Datenmatrix bestimmt. Als Ergebnis erhält man symmetrische Distanzmatrix D mit paarweisen Distanzen zwischen allen Objekten:

$$D = \begin{pmatrix} d(O_1, O_1) = 0 & d(O_2, O_1) & \dots & d(O_n, O_1) \\ d(O_1, O_2) & d(O_2, O_2) = 0 & \dots & d(O_n, O_2) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ d(O_1, O_n) & d(O_2, O_n) & \dots & d(O_n, O_n) = 0 \end{pmatrix}.$$

Für **binäre Daten** erhält man für jeweils zwei Objekte O_i und O_k eine Vierfelder-Kontingenz-Tabelle (Tabelle 3.9). Dort wird die Anzahl der übereinstimmenden Variablen in die Felder A und D, die Anzahl der differierenden in die Felder B und C eingetragen. Die Distanz zwischen den Objekten wird anhand der Felder der Kontingenz-Tabelle berechnet. Damit eine symmetrische Distanzmatrix entsteht, sind die Felder B und C gleich zu behandeln.

Tabelle 3.9: Vierfelder-Kontingenz-Tabelle

	O _i	O _k	gesamt
O _i	A	B	A + B
O _k	C	D	C + D
gesamt	A + C	B + D	p

mit: A: Anzahl der Variablen, die an beiden Objekten O_i und O_k vorkommen,
 B: Anzahl der Variablen, die nur am Objekt O_i vorkommen,
 C: Anzahl der Variablen, die nur am Objekt O_k vorkommen,
 D: Anzahl der Variablen, die an keinem der Objekte O_i und O_k vorkommen und
 p = A + B + C + D: Anzahl aller Variablen.

Gebräuchliches Distanzmaß ist die **einfache Übereinstimmung (EÜ)**, die die Anteile an Übereinstimmungen und Unterschieden berücksichtigt.

Nach Kaufman & Rousseeuw (1990) beträgt die Ähnlichkeit: $s(O_i, O_k) = \frac{A + D}{A + B + C + D}$

und die Unähnlichkeit (M-Koeffizient oder Affinitätsindex): $d(O_i, O_k) = \frac{B + C}{A + B + C + D}$.

Die Unähnlichkeit korrespondiert linear mit der Block-Distanz, und ihre Wurzel entspricht der euklidischen Distanz (s.u.). Andere Distanzmaße, wie z.B. Rogers & Tanimoto oder Sokal & Sneath, unterscheiden sich in der Wichtung von Übereinstimmungen und Unterschieden oder berücksichtigen, wie der Jaccard-Koeffizient, die Asymmetrie binärer Daten (Kaufman & Rousseeuw, 1990).

Bei **ordinal- und intervallskalierten Daten** werden die Distanzen zwischen jeweils zwei Objekten O_i und O_k anhand ihrer Merkmalswerte x_j mit j = 1, ..., p bestimmt, wobei p die Anzahl der beobachteten Merkmale ist. Allgemein wird die Distanz zwischen zwei Objekten mit intervallskalierten Merkmalen durch die Minkowski-Distanz ausgedrückt (Kaufman & Rousseeuw, 1990):

$$d(O_i, O_k) = \left(\sum_{j=1}^p |x_{ij} - x_{kj}|^q \right)^{1/z}.$$

Für q = 1 und z = 1 erhält man die Manhattan- oder Block-Distanz, für q = 2 und z = 2 die **euklidische Distanz (ED)**. Ebenso gebräuchlich ist die **quadrierte euklidische Distanz (QED)** mit q = 2 und z = 1. Ordinalskalierte Daten können nur mit der Block-Distanz oder der euklidischen Distanz behandelt werden. Verhältnisskalierte Daten folgen oft einem exponentiellen Verlauf. Daher werden diese Daten entweder zunächst log-transformiert und dann wie intervallskalierte Daten verwendet. Alternativ kann man sie wie ordinalskalierte Daten auf einer kontinuierlichen Skala behandeln und nur ihre Rangzahlen verwenden (Kaufman & Rousseeuw, 1990).

Da Clusteranalysen stark von der Wahl der Maßeinheit abhängen, ist es ratsam, intervallskalierte Daten zu standardisieren, d.h. zu Z-transformieren (siehe Kapitel 3.3.1). Ordinalskalierte Daten sollten auf einen Bereich zwischen 0 und 1 skaliert werden, um gleiche Gewichtungen für alle Variablen zu gewährleisten (Kaufman & Rousseeuw, 1990).

Fusionierungsalgorithmen

Um die Objekte zu Gruppen zusammenzufassen, benötigt man Fusionierungsalgorithmen. Dabei unterscheidet man hierarchische von partitionierenden Clusteranalysen. In den hier angewendeten Clusteranalysen enthält jeder Cluster mindestens ein Objekt und jedes Objekt gehört zu genau einem Cluster. Das bedeutet, dass es höchstens so viele Cluster wie Objekte

gibt, zwei Cluster keine gemeinsamen Objekte haben und alle Cluster zusammen den gesamten Datensatz bilden (Kaufman & Rousseeuw, 1990).

Bei der **hierarchischen Clusteranalyse** unterscheidet man divisive Verfahren von agglomerativen. Divisive Verfahren starten mit einem Cluster, in dem sich alle Objekte befinden und teilen den Cluster solange, bis jedes Objekt einen eigenen Cluster bildet. Bei agglomerativen Verfahren bildet hingegen zunächst jedes Objekt einen eigenen Cluster. In jedem nachfolgenden Schritt werden je zwei Cluster zusammengefügt, bis alle Objekte in einem Cluster vereint sind. Dabei werden in jedem Schritt die beiden Cluster zu einem neuen, übergeordneten Cluster zusammengefasst, die im Sinne einer Distanz am nächsten zueinander liegen. Dafür wird folgender Algorithmus verwendet (Henrion & Henrion, 1995):

1. Berechne die Distanzmatrix D.
2. Suche in D (außerhalb der Hauptdiagonalen) das kleinste Element $d(O_i, O_k)$.
3. Fasse die Objekte O_i und O_k zum Cluster C_u zusammen, der im Folgenden wie ein einziges neues Objekt zu behandeln ist und dem Fusionsindex $d(O_i, O_k)$ zuzuordnen ist.
4. Aktualisiere die Distanzen zwischen allen nicht an der Fusion beteiligten Objekten einerseits und dem fusionierten Objekt andererseits.
5. Falls noch nicht $n-1$ Fusionschritte absolviert wurden, gehe zu 2.

Cluster werden also zunächst mit den Distanzen zwischen den Objekten $d(O_i, O_k)$ gebildet. Um übergeordnete Cluster zu bilden, müssen im Schritt 4 ebenfalls Distanzen zwischen zwei Clustern $d(C_u, C_t)$ berechnet werden. Genau darin unterscheiden sich die verschiedenen Fusionierungsalgorithmen. So wird beim Verfahren "**Average Linkage between Groups**" (AL-Verfahren) angenommen, dass die Unähnlichkeit $d(C_u, C_t)$ zwischen zwei Clustern C_u und C_t der durchschnittlichen Distanz aller Objekte aus den Clustern C_u und C_t entspricht, während beim Verfahren "Single Linkage" (nächst gelegener Nachbar) der kleinste Abstand zwischen zwei Objekten der Cluster und beim Verfahren "Complete Linkage" (entferntester Nachbar) der größte Abstand gesucht wird (Abbildung 3.12).

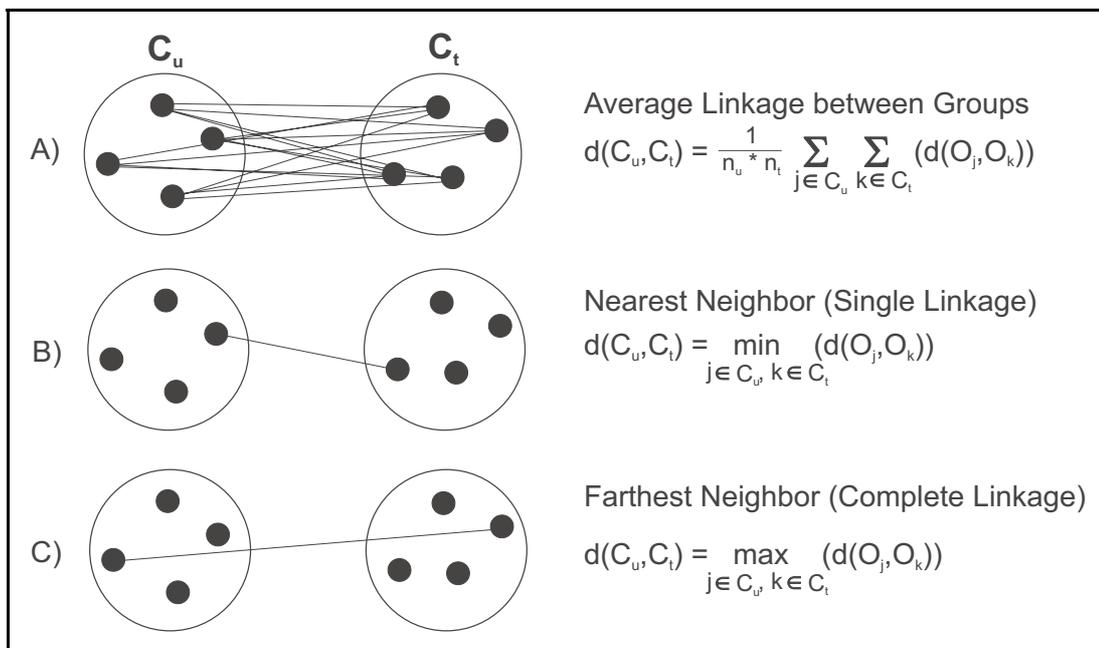


Abbildung 3.12: Bestimmung der Distanz zwischen den Clustern C_u und C_t mit den Verfahren Average Linkage between Groups, Single Linkage und Complete Linkage (nach: Kaufman & Rousseeuw, 1990; Hartung & Elpelt, 1999).

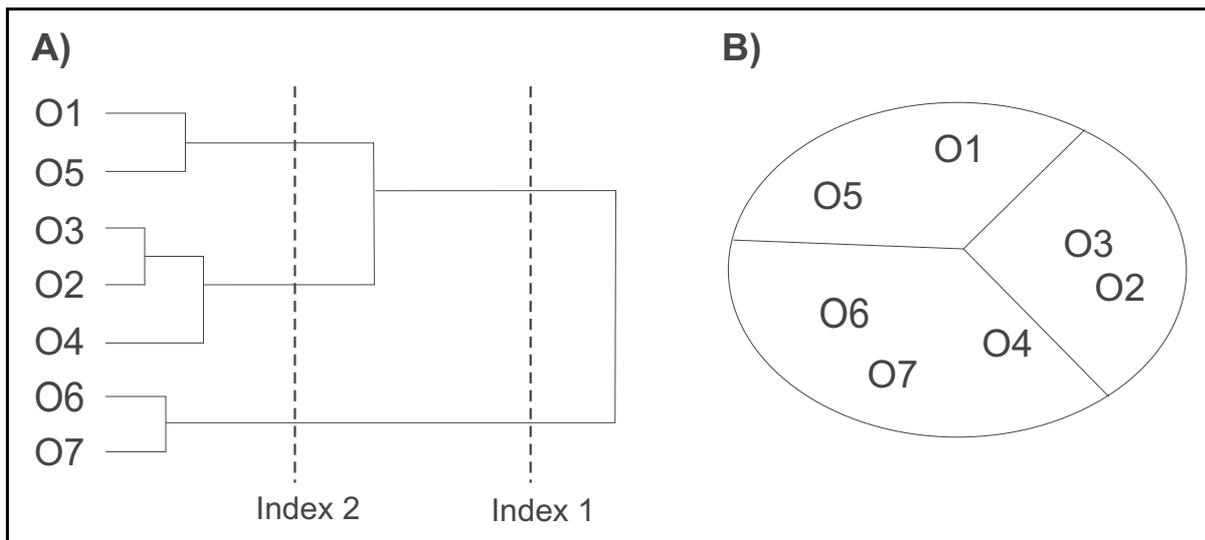


Abbildung 3.13: Exemplarische Ergebnisse von Clusteranalysen. A) Dendrogramm einer hierarchischen Analyse. B) Partition aus einer Clusterzentrenanalyse.

In dieser Arbeit wurden nur das AL-Verfahren und die Ward-Methode angewendet. Diese beiden Verfahren neigen im Gegensatz zu Single oder Complete Linkage am wenigsten zur Kettenbildung (vgl. Kaufman & Rousseeuw, 1990; Henrion & Henrion, 1995; Rudolph, 1999). Die **Ward-Methode** (WA) gewährleistet, dass homogene Cluster mit geringen Abständen der Objekte zu den Clusterzentren erzielt werden, wenn die quadrierte euklidische Distanz verwendet wird (Stoyan et al., 1997).

Die Abstandsaktualisierung in Schritt 4 lässt sich auch mit Hilfe der ursprünglich bekannten Distanzen herleiten. Nach Henrion & Henrion (1995) ergibt sich die Distanz zwischen einem Cluster C_u , der aus den Clustern C_r und C_s gebildet wurde, und einem Cluster C_t wie folgt:

AL-Verfahren:
$$d(C_u, C_t) = \frac{1}{n_r + n_s} (n_r \cdot d(C_r, C_t) + n_s \cdot d(C_s, C_t))$$

Ward-Methode:
$$d(C_u, C_t) = \frac{1}{n} |(n_r + n_t) \cdot d(C_r, C_t) + (n_s + n_t) \cdot d(C_s, C_t) - n_t \cdot d(C_r, C_s)|$$

mit: $n = n_r + n_s + n_t$ und

n_r, n_s, n_t : Anzahl der Objekte in den Clustern C_r, C_s und C_t .

Ergebnis einer hierarchischen Clusteranalyse ist ein Dendrogramm, d.h. ein Baum, der die sukzessive Aufspaltung bzw. Zusammenführung der Objekte zu Clustern visualisiert (Abbildung 3.13-A). In dieser Hierarchie repräsentiert jeder Knoten des Dendrogramms einen Cluster. Die Höhe des Zusammenfassungsniveaus zweier Cluster ist ein Maß für ihre Unähnlichkeit und wird als Index bezeichnet (Henrion & Henrion, 1995). In Abbildung 3.13-A entsteht am Index 1 eine 2-Clusterlösung, am Index 2 eine 3-Clusterlösung. Von einem Cluster im eigentlichen Sinne kann man sprechen, wenn sich eine Objektgruppierung unter einem "langen" Zweig des Dendrogramms befindet, wenn sie also größeren Indexänderungen gegenüber stabil bleibt (Henrion & Henrion, 1995). Diese Stabilität erkennt man, wenn man das Clusterkriterium (i.d.R. die Distanzen) gegenüber der Anzahl der Cluster aufträgt. Nach Kähler (1998) sollte die Clusterlösung näher untersucht werden, bei der der größte relative Zuwachs des Clusterkriteriums erfolgt.

Beim Ward-Algorithmus wird anstelle der Distanz, bei denen zwei Objekte oder Cluster fusioniert werden, die Fehlerquadratsumme angegeben. Diese wächst i.d.R. stetig, nicht sprunghaft. Zur Auswahl einer geeigneten Clusterlösung wird deshalb das so genannte

"elbow"-Kriterium herangezogen. Ähnlich wie beim Screeplot in der Hauptkomponentenanalyse wird die Clusterlösung gewählt, bei der der steile Anstieg des Clusterkriteriums in einen flacheren übergeht, also gewissermaßen "abknickt". Darüber hinaus kann eine kritische Minimal-Distanz, ein Index, festgelegt werden (Ester et al., 1996).

Partitionierende Clusteranalysen oder **Clusterzentrenanalysen** erzeugen durch iteratives Vorgehen aus n Objekten k Cluster, wobei jeder Cluster mindestens ein Objekt beinhalten muss und jedes Objekt genau zu einem Cluster gehört. Zum Beispiel werden die sieben Objekte ($n = 7$) in Abbildung 3.13-B in drei Cluster oder Partitionen ($k = 3$) eingeteilt.

Ein Partitionsalgorithmus startet mit einer Anfangspartition der Objekte und benutzt dann eine iterative Kontrollstrategie, um eine Zielfunktion zu optimieren (Ester et al., 1996). Im k -means Algorithmus wird jeder Cluster durch den Schwerpunkt des Clusters repräsentiert, im k -medoid-Verfahren durch ein Objekt im Cluster, das nahe am Cluster-Schwerpunkt liegt. Partitionsverfahren bestehen also aus zwei Schritten: Zuerst werden k repräsentative Clusterzentren bestimmt, die die Zielfunktion minimieren. Danach wird jedes Objekt dem Cluster zugeordnet, dessen Zentrum ihm am nächsten liegt.

In SPSS ist ein **k-means-Algorithmus** (KM) implementiert. Die Startkonfiguration der Partition wird bestimmt, indem k Objekte mit stark unterschiedlichen Werten ermittelt werden. Zunächst werden die ersten k Objekte der SPSS-Datentabelle als vorläufige Zentren der Cluster festgelegt. Anschließend wird für jedes weitere Objekt das Minimum über alle euklidischen Distanzen (s.o.) errechnet, die es zu den einzelnen Clusterzentren besitzt. Ist dieser minimale Abstand größer als das Minimum der Abstände, die paarweise zwischen den Clusterzentren bestehen, so ersetzt dieses Objekt das Clusterzentrum, das ihm am nächsten liegt (Kähler, 1998).

Nachdem die anfängliche Konfiguration vorliegt, beginnt die Iterationsphase: Zunächst wird jedes Objekt demjenigen Cluster zugeordnet, zu dessen Zentrum es - gemessen durch die euklidische Distanz - am nächsten liegt. Neue Clusterzentren werden in SPSS entweder dann ermittelt, wenn alle Objekte im Rahmen eines Iterationsschrittes bestimmt sind, oder ein Clusterzentrum wird innerhalb eines Iterationsschrittes neu bestimmt, sobald ein Objekt dem Cluster zugeordnet wird. Die Clusterzentren ergeben sich für jede Variable aus dem arithmetischen Mittel aller Objekte eines Clusters (Kähler, 1998).

Nach jedem Iterationsschritt wird die Änderung der Clusterzentren berechnet. Ist die Änderung betragsmäßig kleiner als ein vorgegebenes Konvergenzkriterium, wird die Iteration beendet. Am Ende des letzten Iterationsschrittes werden alle Objekte nochmals ihrem jeweils nächstliegenden Clusterzentrum zugeordnet. Anschließend werden die endgültigen Clusterzentren bestimmt (Kähler, 1998).

Die Anzahl der Cluster k wird vom Benutzer vorgegeben und meistens durch Ausprobieren festgelegt. Bei Partitionen mit unterschiedlichen Clusterzahlen kann das sogenannte F-Kriterium, das in Anlehnung an den F-Test berechnet wird, zur Auswahl einer geeigneten Clusterlösung herangezogen werden (Henrion & Henrion, 1995). Clusterzentrenanalysen eignen sich auch bei sehr großen Datenmengen, die durch hierarchische Verfahren nicht mehr bewältigt werden können (Ester et al., 1996).

4 Ranking von organischen Schadstoffen: Ergebnisse und Diskussion

In diesem Kapitel werden die Kontaminationskriterien Emissions-Nachweishäufigkeit (ENH) und mittlere Emissionskonzentration (MEK) aus den Monitoringdaten abgeleitet und mit Rankingverfahren verknüpft (vgl. Kapitel 3.3.2). Ziel des Stoffrankings ist, die wichtigsten Stoffgruppen und Einzelsubstanzen für die Grundwasserbelastung der Region Bitterfeld-Wolfen zu bestimmen.

Zunächst werden durchschnittliche Kontaminationskriterien ermittelt und vergleichbaren Untersuchungen an Altablagerungen in Westdeutschland (Kerndorff et al., 1993) und in den USA (Plumb, 1992) gegenübergestellt. Daran soll geprüft werden, ob es Stoffe gibt, die in allen drei Datensätzen für den Ausbreitungspfad Grundwasser gleichermaßen relevant sind oder ob in Bitterfeld-Wolfen regionalspezifische Besonderheiten existieren.

Darüber hinaus wird die Sensitivität der Kontaminationskriterien in Bezug auf die Relevanzgrenzen und die Stichprobenauswahl abgeschätzt.

4.1 Durchschnittliche Kontaminationskriterien (1991-1998)

Im Folgenden wird der Durchschnittsdatensatz 9198M (vgl. Tabelle 3.5) ausgewertet. Da nicht alle Substanzen an allen 377 Messstellen erhoben wurden, variieren die Stichprobenumfänge für die einzelnen Stoffe zwischen minimal 83 und maximal 371 Werten (vgl. Anhang A 4.2). Damit sind alle Verbindungen ausreichend repräsentiert.

4.1.1 Vergleichsdatsätze

„Durchschnittliche“ Kontaminationsprofile wurden bereits aus Analysen im Grundwasserabstrom von zahlreichen lokalen Altablagerungen in Westdeutschland (im Folgenden WD93) und den USA (im Weiteren USA8186) erstellt. In Tabelle 4.1 sind die Charakteristika der Datensätze gegenübergestellt.

Die Relevanzgrenzen (RG), die in der Regel den analytischen Nachweiskriterien (NWG) entsprechen, unterscheiden sich deutlich: Mit 0.002 µg/l bis maximal 5 µg/l sind die Nachweiskriterien im Datensatz 9198M im Vergleich zu 0.1 µg/l bis maximal 10 µg/l für WD93 sehr niedrig. Im Datensatz USA8186 wurden die ENH mit einer einheitlichen Relevanzgrenze von 1 µg/l ermittelt.

Um die Ergebnisse aus den drei Datensätzen vergleichen zu können und um die Sensitivität der Auswertungen bezüglich der Relevanzgrenzen zu untersuchen, wird der Datensatz 9198M zusätzlich mit Relevanzgrenzen von minimal 0.1 µg/l, 1 µg/l und 10 µg/l ausgewertet. Aufgrund der unterschiedlichen analytischen Nachweiskriterien entsteht eine einheitliche Relevanzgrenze für alle Stoffe erst in der Variante mit 10 µg/l.

Tabelle 4.1: Charakteristika der Untersuchungen in den USA, in Westdeutschland und in Bitterfeld-Wolfen.

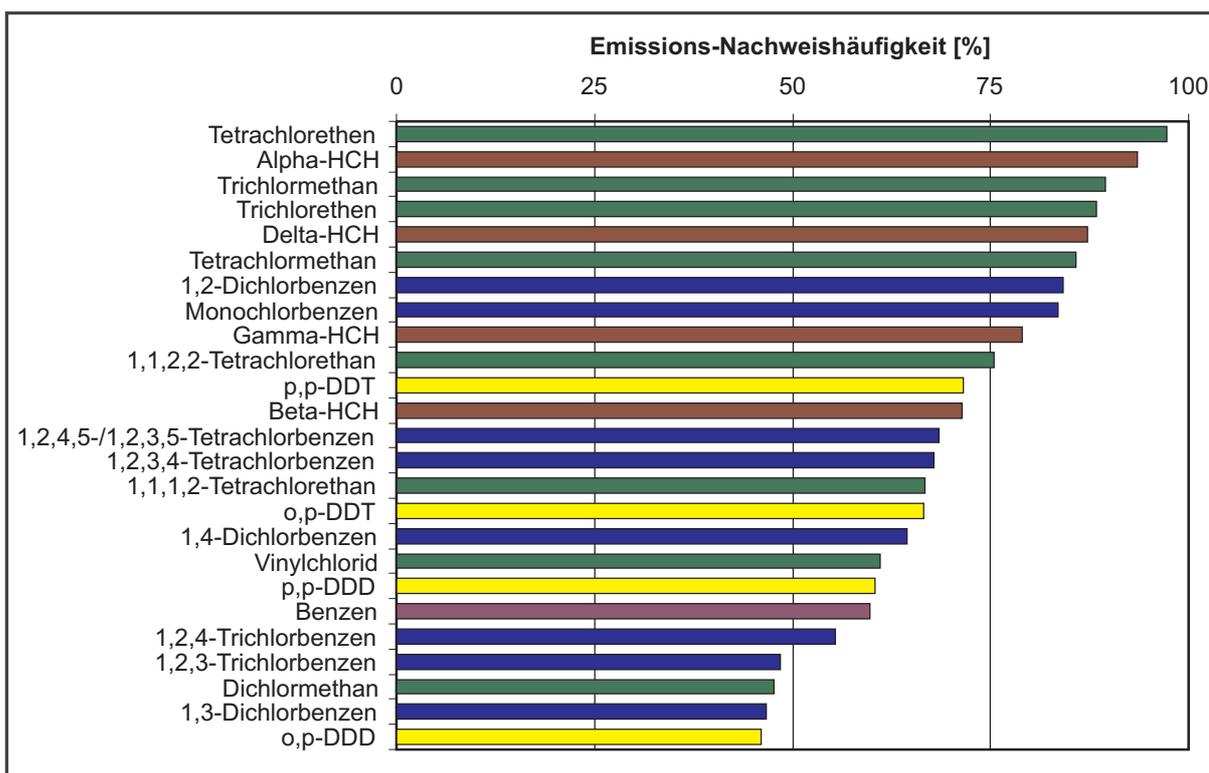
Datensatz	USA8186	WD93	9198M
Region	USA	Westdeutschland	Industrieregion Bitterfeld-Wolfen
Standorte	500 lokale Altablagerungen und Deponien in den USA	205 lokale Altablagerungen im Lockergestein in Westdeutschland (alte BRD)	Regional verflochtenes Netz aus zahlreichen Altstandorten und Altablagerungen (vgl. Kapitel 2.4)
Messstellen	> 5000 im Grundwasserabstrom	405 im Grundwasserabstrom	377
Grundwasserproben	> 30000	2264 (inkl. Anstrom)	905
Beprobungszeitraum	1981-1986	vor 1993	1991-1998
Anzahl der analysierten organischen Stoffe	1164	128	63
Relevanzgrenzen (i.d.R. anal. Nachweisgrenzen)	1 µg/l	0.1 µg/l ... 10 µg/l	0.002 µg/l ... 5 µg/l
Quelle	Plumb (1992), Kerndorff et al. (1993)	Kerndorff et al. (1993)	Rohdaten vom Landratsamt Bitterfeld und dem Regierungspräsidium Dessau

4.1.2 Kontaminationskriterium "Emissions-Nachweishäufigkeit"

In Abbildung 4.1 sind die 25 Stoffe dargestellt, die im Grundwasser in Bitterfeld-Wolfen am häufigsten nachgewiesen werden, wenn man den Datensatz 9198M mit den analytischen Nachweisgrenzen als Relevanzgrenzen (RG = NWG) auswertet. Aus dieser Rangfolge wird sowohl die Häufigkeit der Stoffe im Grundwasser als auch das Ausmaß des Censorings (vgl. Tabelle 3.3) im Datensatz 9198M deutlich. Die höchste ENH beträgt 97 % für Tetrachlorethen; es folgt alpha-HCH mit 94 %. Acht weitere Substanzen werden in mehr als 75 % aller Messstellen nachgewiesen und weisen daher nur geringfügiges Censoring auf. In diesem oberen Bereich in Abbildung 4.1 dominieren klar die Stoffgruppen LHKW und HCH, gefolgt von den Chlorbenzenen. Alle untersuchten LHKW, HCH-Isomere, Chlorbenzene, DDT/D/E-Isomere, BTEX-Aromaten und Chloraniline treten in mindestens 10 % aller beprobten Messstellen auf, während die untersuchten Chlorphenole, Nitrophenole und Nitrochlorbenzene sowie Dimethoat in weniger als 10 % oder gar 5 % der Messstellen nachzuweisen sind. Die letztgenannten Stoffgruppen werden nur punktuell im Untersuchungsgebiet nachgewiesen und weisen hochgradiges Censoring auf. Neun der 63 untersuchten Substanzen, darunter alle untersuchten Nitrochlorphenole und das Pestizid Parathionmethyl, werden gar nicht detektiert (vgl. Anhang A 4.1).

Innerhalb der Stoffgruppe der LHKW fällt eine Abfolge nach dem Chlorierungsgrad der Stoffe auf. Die drei- und vierfach chlorierten LHKW werden häufiger nachgewiesen als die zweifach chlorierten und Vinylchlorid. Bei den Chlorbenzenen ist eine solche Reihung nicht vorhanden. Zwar werden Mono- und 1,2-Dichlorbenzen wesentlich häufiger als die anderen Chlorbenzene nachgewiesen, doch die Tri- und vor allem die Tetrachlorbenzene erreichen höhere ENH als z.B. 1,4- und 1,3-Dichlorbenzen (Abbildung 4.1).

Für die HCH- und DDT/D/E-Isomere bietet sich ein Vergleich mit der Zusammensetzung der technischen Gemische an. Bei den HCH-Isomeren ist – wie im technischen Gemisch – alpha-HCH am häufigsten, beta-HCH am seltensten. Im Vergleich zum technischen Gemisch ist delta-HCH im Grundwasser jedoch deutlich überrepräsentiert (vgl. Tabelle 2.5, Abbildung 4.1). Die Reihung der DDT- und DDD-Isomere nach der ENH entspricht hingegen genau ihrer Häufigkeit im technischen Gemisch, d.h. DDT tritt häufiger auf als DDD und die p,p-Isomere häufiger als die o,p-Isomere (vgl. Tabelle 2.4, Abbildung 4.1).



Färbung erfolgte nach Stoffgruppen: ●: LHKW, ●: BTEX, ●: CB, ●: HCH, ●: DDT/D/E, ●: sonstige.

Abbildung 4.1: Die 25 häufigsten Stoffe im Datensatz 9198M; Relevanzgrenzen entsprechen den analytischen Nachweisgrenzen.

Um die Sensitivität der ENH bezüglich der Relevanzgrenzen zu untersuchen, wurden diese systematisch angehoben und vereinheitlicht (siehe Kapitel 4.1.1). Die Ergebnisse sind in Tabelle 4.2 gegenübergestellt. Darin sind die ENH in Klassen eingeteilt und die Anzahl der Einzelstoffe pro Klasse und Stoffgruppe angegeben; detaillierte Angaben sind im Anhang A 4.1 zu finden. Bei einer $RG \geq 0.1 \mu\text{g/l}$ tritt eine deutliche Abwertung bei allen DDT/D/E-Isomeren, einigen Chlorbenzenen sowie vereinzelt bei den LHKW auf. Bei einer $RG \geq 1 \mu\text{g/l}$ werden die HCH-Isomere sowie weitere Chlorbenzene und LHKW abgewertet. Zum Beispiel fällt die ENH für alle DDT/D/E-Isomere von $>20 \dots 70 \%$ ($RG = \text{NWG} = 0.01 \mu\text{g/l}$) auf weniger als 5% ($RG = 1 \mu\text{g/l}$). Andere ENH, z.B. die der BTEX-Aromaten, ändern sich erst ab einer $RG = 10 \mu\text{g/l}$, da die analytischen Nachweisgrenzen über $1 \mu\text{g/l}$ liegen.

Unterschiedliche Nachweisgrenzen sind aber nicht alleinige Ursache für eine Auf- oder Abwertung eines Stoffes. Dies muss stoffspezifisch betrachtet werden. So bleibt zum Beispiel die ENH der Chloraniline trotz einer empfindlichen NWG von $0.1 \mu\text{g/l}$ auch bei höheren Relevanzgrenzen recht konstant (Tabelle 4.2). Auch die ENH für Tetrachlorethen, das in Abbildung 4.1 mit 97% bei einer NWG von $0.008 \mu\text{g/l}$ den ersten Rang belegt, sinkt zunächst nur auf 94% ($RG = 0.1 \mu\text{g/l}$) und 84% ($RG = 1 \mu\text{g/l}$) und wird damit in diesen drei Varianten am häufigsten nachgewiesen. Erst mit einer $RG = 10 \mu\text{g/l}$ fällt es hinter Monochlorbenzenen zurück.

Aus der Sensitivitätsanalyse lässt sich folgendes über die Verteilung der Stoffe ableiten. Stoffe, die bei hohen Relevanzgrenzen in der Reihung stark zurückfallen, treten in relativ geringen Konzentrationen im Grundwasser auf. Dies gilt z.B. für die HCH- und DDT/D/E-Isomere und die höher chlorierten Benzene (Tri- bis Hexachlorbenzen). Demgegenüber müssen Stoffe, die nicht stark abgewertet werden, wie Tetrachlorethen oder Monochlor-

benzen, in vergleichsweise hohen Konzentrationen auftreten.

Insgesamt wirkt sich eine Erhöhung und Vereinheitlichung der Relevanzgrenzen sehr stark auf die ursprüngliche Stofffreihung aus. Bei einer Relevanzgrenze von 10 µg/l bleibt gegenüber der Referenzvariante (RG = NWG) kein Rang erhalten und alle Stoffe, mit Ausnahme von Monochlorbenzen (ENH = 54 %), weisen mit einer ENH < 50 % mindestens starkes Censoring auf (vgl. Tabelle 4.2). Dies zeigt, dass man bei hohen Relevanzgrenzen sehr viel Information über das tatsächliche Vorkommen der Stoffe im Grundwasser verliert. Relevanzgrenzen von 1 oder 10 µg/l sind als Bewertungsgrundlage für viele Stoffe nicht akzeptabel, da gängige Bewertungsmaßstäbe über diesen Werten liegen (vgl. Tabelle 4.3). Man gewinnt jedoch einen Eindruck über die Konzentrationsverteilung der Stoffe.

Tabelle 4.2: Emissions-Nachweishäufigkeit im Datensatz 9198M mit verschiedenen Relevanzgrenzen sowie in den Datensätzen WD93 und USA8186. Für jede Klasse ist die Anzahl der Einzelstoffe pro Stoffgruppe¹ angegeben.

Datensatz:	9198M	9198M	9198M	9198M	WD93	USA8186
Relevanzgrenzen:	RG = NWG	RG ≥ 0.1 µg/l	RG ≥ 1 µg/l	RG = 10 µg/l	RG = NWG	RG = 1µg/l
100% ≥ ENH > 90% (geringes Censoring)	1 LHKW 1 HCH	1 LHKW	---	---	---	---
90% ≥ ENH > 75% (geringes Censoring)	4 LHKW 2 HCH 2 CB	3 LHKW 1 HCH	2 CB 1 LHKW	---	---	---
75% ≥ ENH > 50% (moderates Censoring)	4 CB 3 DDT/D/E 2 LHKW 1 HCH 1 BTEX	3 HCH 1 CB 1 LHKW 1 BTEX	4 LHKW 1 BTEX 1 CB	1 CB	2 LHKW	---
50% ≥ ENH > 25% (starkes Censoring)	5 CB 3 LHKW 3 BTEX 2 DDT/D/E 1 CA	5 LHKW 3 CB 3 BTEX 1 DDT/D/E 1 CA	3 LHKW 3 BTEX 2 HCH 1 CB 1 CA	3 LHKW	1 LHKW 1 BTEX	2 LHKW
25% ≥ ENH > 10% (starkes Censoring)	2 BTEX 2 LHKW 1 DDT/D/E 1 CA	3 CB 2 BTEX 1 DDT/D/E 1 LHKW 1 CA	3 LHKW 2 HCH 2 BTEX 2 CB 1 CA	7 LHKW 2 CB 1 BTEX 1 CA	6 LHKW 3 BTEX 3 CB 2 Phenole 1 PAK	6 LHKW 1 BTEX 1 Phenol 1 PAK 1 sonstiger
10% ≥ ENH > 0% (hochgradiges Censoring)	5 NCB 5 CP 2 NP 1 sonstiger	5 NCB 5 CP 4 DDT/D/E 2 CB 2 NP 1 LHKW 1 sonstiger	6 DDT/D/E 5 CB 5 NCB 5 CP 2 NP 1 LHKW 1 sonstiger	7 CB 5 BTEX 5 NCB 5 CP 4 DDT/D/E 4 HCH 2 LHKW 1 CA 1 NP 1 sonstiger	8 PAK 7 CP 6 LHKW 5 CB 5 sonstige 2 Phenole 1 BTEX	41 sonstige 12 PAK 12 LHKW 6 CB 6 PCB 5 CP 4 HCH 4 NP 3 BTEX 3 DDT/D/E 3 Phenole
ENH = 0%	3 NCP 2 NCB 2 NP 1 CP 1 sonstiger	3 NCP 2 NCB 2 NP 1 CP 1 sonstiger	3 NCP 2 NCB 2 NP 1 CP 1 sonstiger	3 NP 3 NCP 2 DDT/D/E 2 NCB 1 CB 1 CP 1 sonstiger	5 PAK 1 CB	keine Angabe

¹ LHKW: leichtflüchtige halogenierte Kohlenwasserstoffe; BTEX: Benzen, Toluol, Ethylbenzen und Xylene; CB: Chlorbenzene; HCH: HCH-Isomere; DDT/D/E: DDT-, DDD- und DDE-Isomere; CP: Chlorphenole; CA: Chloraniline; NP: Nitrophenole; NCB: Nitrochlorbenzene; NCP: Nitrochlorphenole; PAK: polyzyklische aromatische Kohlenwasserstoffe.

Tabelle 4.3: Geringfügigkeitsschwellen sowie Prüf- und Maßnahmenschwellenwerte für organische Stoffe/Stoffgruppen bei der Hauptuntersuchung von Grundwasser.

	Geringfügigkeitsschwellen ¹ (aus: Röder et al., 1999)	LAWA, Prüfwert ² (aus: LAWA, 1993)	LAWA, Maßnahmenschwellenwert ³ (aus: LAWA, 1993)
LHKW, gesamt	10 µg/l	2 – 10 µg/l	20 – 50 µg/l
LHKW, karzinogen ⁵	3 µg/l	1 – 3 µg/l	5 – 15 µg/l
Vinylchlorid	0.5 µg/l	---	---
BTEX-Aromaten, gesamt	10 µg/l	10 – 30 µg/l	50 – 120 µg/l
Benzen	1 µg/l	1 – 3 µg/l	5 – 10 µg/l
Chlorphenole, gesamt	1 µg/l	0.5 – 1 µg/l	2 – 5 µg/l
Chlorbenzene, gesamt	1 µg/l	0.5 – 1 µg/l	2 – 5 µg/l
Pestizide, gesamt	0.5 µg/l	0.1 – 0.5 µg/l	1 – 3 µg/l
Pestizide, Einzelstoff	0.1 µg/l	---	---

¹ Geringfügigkeitsschwellen beschreiben einen Grundwasserzustand mit einer anthropogen weitgehend unbeeinflussten Grundwasserbeschaffenheit. Grundwasser kann als geringfügig verunreinigt eingestuft werden, wenn keine relevanten ökotoxischen Wirkungen auftreten können und die Anforderungen der Trinkwasserverordnung eingehalten werden.

² Prüfwerte sind Orientierungswerte⁴, bei deren Unterschreitung ein Gefahrenverdacht i.d.R. ausgeräumt gilt. Bei Überschreitung ist eine weitere Sachverhaltsermittlung geboten.

³ Maßnahmenschwellenwerte sind Orientierungswerte⁴, deren Überschreitung i.d.R. weitere Maßnahmen, z.B. eine Sanierung (Sicherung oder Dekontamination), auslöst.

⁴ Orientierungswerte sind rechtlich nicht verbindlich Werte. Sie dienen als Vergleichsmaßstab.

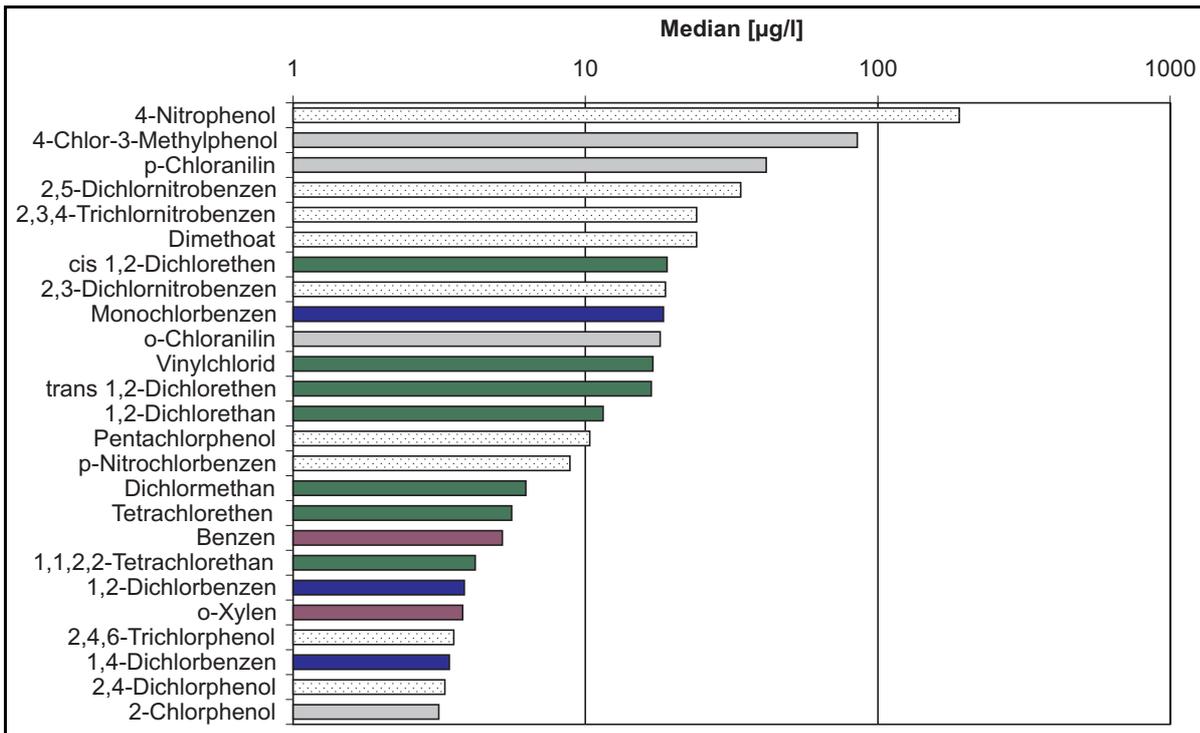
⁵ LHKW, karzinogen: Summe von Tetrachlormethan, Vinylchlorid und 1,2-Dichlorethan.

Abschließend sollen die ENH in Bitterfeld-Wolfen vergleichbaren Untersuchungen gegenübergestellt werden. Bis zu einer RG ≥ 1 werden im Datensatz 9198M wesentlich höhere ENH erzielt als in den Daten aus WD93 und USA8186 (Tabelle 4.2). Äußerst relevant sind in allen Listen die LHKW: So befinden sich in allen Listen etwa 10 LHKW unter den 25 häufigsten Stoffen (Tabelle 4.2), insbesondere Tetra- und Trichlorethen gehören zu den am häufigsten nachgewiesenen Stoffen. Die Reihung der Chlorbenzene und der BTEX-Aromaten unterscheidet sich hingegen: In Bitterfeld-Wolfen werden viele Chlorbenzene, insbesondere Monochlorbenzen und die Dichlorbenzene, häufiger nachgewiesen als die BTEX-Aromaten, während in den Datensätzen WD93 und USA8186 die BTEX-Aromaten, insbesondere Benzen, höhere ENH erhalten.

Gravierende Unterschiede gibt es auch bei den Pestiziden HCH und DDT. Diese sind mit ausreichendem Stichprobenumfang nur im Datensatz USA8186 enthalten, werden dort aber mit einer ENH $< 5\%$ (HCH) bzw. mit einer ENH $< 1\%$ (DDT/D/E) wesentlich seltener nachgewiesen als im Datensatz 9198M (Tabelle 4.2). Andererseits sind Stoffe, die in Bitterfeld-Wolfen nicht untersucht wurden, vor allem Benzen-Derivate, Phenol und Phenol-Derivate sowie Naphthalin (aus der Stoffgruppe der PAK), im Abstrom von Altablagerungen in den USA oder in Westdeutschland relativ häufig nachweisbar, d.h. sie gehören dort zu den 25 häufigsten Substanzen im Grundwasser (vgl. Kerndorff, 1995).

4.1.3 Kontaminationskriterium "Mittlere Emissionskonzentration"

Das Kontaminationskriterium Mittlere Emissionskonzentration (MEK) entspricht dem Median der Konzentrationen über der Relevanzgrenze. Im Datensatz 9198M erstrecken sich die MEK von 0.011 µg/l für Hexachlorbenzen bis 190 µg/l für 4-Nitrophenol, also über vier Größenordnungen (vgl. Anhang A 4.1), wenn die analytischen Nachweisgrenzen als Relevanzgrenzen genommen werden. Für zwölf Stoffe liegen die Mediane über 10 µg/l: u.a. für die LHKW cis und trans 1,2-Dichlorethen, Vinylchlorid und 1,2-Dichlorethan sowie für Monochlorbenzen (Abbildung 4.2). 50 % der Nachweise dieser Einzelstoffe überschreiten demnach bereits die Prüfwerte für die jeweils zugehörige Stoffgruppe (Tabelle 4.3).



Färbung erfolgte nach Stoffgruppen: ●: LHKW, ●: BTEX, ●: CB, ●: sonstige.

Bei nicht eingefärbten Stoffen wurde der Median aus weniger als fünf Messwerten bestimmt und ist daher als unsicher einzustufen.

Abbildung 4.2: Stofffreihung nach dem Median der nachgewiesenen Konzentrationen für die ersten 25 Stoffe im Datensatz 9198M. Relevanzgrenzen entsprechen den analytischen Nachweisgrenzen.

Auch in der Reihung nach der MEK belegen Vertreter der Stoffgruppe LHKW relativ hohe Positionen. Eine MEK > 10 µg/l wird jedoch ebenfalls für 4-Chlor-3-Methylphenol, p- und o-Chloranilin, 2,3- und 2,5-Dichlornitrobenzen, 2,3,4-Trichlornitrobenzen sowie für Dimethoat angegeben (Abbildung 4.2). Diese Stoffe erzielen also trotz geringer ENH eine hohe MEK. Allerdings basieren diese MEK z.T. auf weniger als fünf Einzelwerten, was erstens zeigt, dass sie nur lokal nachgewiesen werden und wodurch zweitens die Schätzung der MEK sehr unsicher wird. Sie sind daher in Abbildung 4.2 nicht eingefärbt und sind bei der Interpretation der Stofffreihung zu vernachlässigen. Alle BTEX-Aromaten und Dichlorbenzene, fünf LHKW sowie alpha-HCH erreichen eine MEK von mehr als 1 µg/l (Abbildung 4.2). Die MEK der anderen drei HCH-Isomere überschreiten 0.1 µg/l und damit z.B. auch die Geringfügigkeitsschwelle für Pestizide im Grundwasser (Tabelle 4.3), während die MEK der DDT/D/E-Isomere eine Größenordnung kleiner sind.

Da die MEK nur aus Werten über den Relevanzgrenzen bestimmt werden, werden sie durch die Höhe der Relevanzgrenzen beeinflusst. Bei erhöhten Relevanzgrenzen steigen die MEK tendenziell bei Substanzen, deren analytische Nachweisgrenze kleiner als die Relevanzgrenze ist, da durch den Wegfall der geringen Messwerte (< 0.1 µg/l, < 1 µg/l bzw. < 10 µg/l) der Schwerpunkt der Verteilung nach rechts verschoben wird. Zum Beispiel steigt für p,p-DDT durch die Anhebung der Relevanzgrenze von 0.01 µg/l auf 0.1 µg/l die MEK von 0.08 µg/l auf 0.16 µg/l, da Werte < 0.1 µg/l ursprünglich mehr als 50 % der Nachweise ausmachten. Vergleichbares gilt für die anderen DDT/D/E-Isomere (vgl. Tabelle 4.4). Erhöhte Relevanzgrenzen bewirken also tendenziell eine Erhöhung der MEK und wirken sich damit entgegengesetzt zur ENH aus. Aufwertungen in der Stofffreihung gibt es im Wesentlichen für die Stoffe, deren ENH deutlich gesunken war (s.o.).

Mit einer Erhöhung der Relevanzgrenzen nimmt auch die Unsicherheit der Abschätzung zu, d.h. die Anzahl der Stoffe, deren MEK auf weniger als fünf Werten basiert. Während in den Varianten RG = NWG und $RG \geq 0.1 \mu\text{g/l}$ nur zehn Stoffe als unsicher eingestuft werden, geschieht dies bei einer $RG \geq 1 \mu\text{g/l}$ für 16, bei einer $RG = 10 \mu\text{g/l}$ sogar für 21 Stoffe, d.h. bei einem Drittel der untersuchten Stoffe (Tabelle 4.4). Eine einheitliche RG von $10 \mu\text{g/l}$ verbessert zwar die Vergleichbarkeit zwischen den Stoffen, die aufgrund der unterschiedlichen Nachweisgrenzen bei kleineren Relevanzgrenzen eingeschränkt ist, bewirkt aber einen nicht akzeptablen Informationsverlust.

Abschließend werden die MEK im Datensatz 9198M ($RG \geq 0.1 \mu\text{g/l}$) mit den Ergebnissen für WD93 verglichen; eine entsprechende Statistik für USA8186 fehlt. Im Gegensatz zum Datensatz WD93 führen in Bitterfeld-Wolfen Chloraniline sowie Chlor- und Nitrophenole die Liste der MEK an (Tabelle 4.4). Bei den LHKW stimmen die Ergebnisse aus beiden Datensätzen überein: Hohe MEK werden für cis und trans 1,2-Dichlorethen, Vinylchlorid, 1,2-Dichlorethan und Dichlormethan erreicht. Die absoluten Werte sind im Datensatz WD93 allerdings z.T. um eine Größenordnung höher als im Datensatz 9198M.

Tabelle 4.4: Mittlere Emissionskonzentrationen¹ der Stoffe im Datensatz 9198M mit verschiedenen Relevanzgrenzen sowie im Datensatz WD93. Für jede Klasse ist die Anzahl der Einzelstoffe pro Stoffgruppe² angegeben.

	9198M, RG = NWG	9198M, RG = 0.1 $\mu\text{g/l}$	9198M, RG = 1 $\mu\text{g/l}$	9198M, RG = 10 $\mu\text{g/l}$	WD93 (ENH > 3%)
1000 $\mu\text{g/l} \geq \text{MEK} > 100\mu\text{g/l}$	1 NP	1 NP	1 NP	2 DDT/D/E 2 HCH (1) 1 NP 1 NCB 1 CA	2 LHKW
100 $\mu\text{g/l} \geq \text{MEK} > 10\mu\text{g/l}$	4 LHKW 3 NCB 2 CP (1) 2 CA 1 CB 1 sonstiger	4 LHKW 3 NCB 2 CP (1) 2 CA 1 CB 1 sonstiger	6 LHKW 5 NCB 2 CB 2 CA 2 CP (1) 1 DDT/D/E 1 sonstiger	12 LHKW (1) 10 CB (4) 6 BTEX 5 CP (4) 4 NCB 2 HCH 2 DDT/D/E 1 CA 1 sonstiger	4 LHKW (1) 1 BTEX 1 CP
10 $\mu\text{g/l} \geq \text{MEK} > 1\mu\text{g/l}$	6 BTEX 5 LHKW 3 CB 3 CP (2) 2 NCB (1) 1 HCH 1 NP	6 BTEX 6 LHKW 4 CB 3 CP (2) 2 NCB (1) 2 HCH 1 NP	9 CB (2) 6 BTEX 6 LHKW 5 DDT/D/E (2) 4 HCH 3 CP (2) 1 NP		5 LHKW (1) 4 BTEX 4 Phenole 3 CB 2 PAK 2 sonstige (1) 1 CP
1 $\mu\text{g/l} \geq \text{MEK} > 0.1\mu\text{g/l}$	3 HCH 2 LHKW 2 CB	6 CB 6 DDT/D/E 2 HCH 2 LHKW			2 LHKW 2 CP 2 PAK 1 CB 1 sonstiger
0.1 $\mu\text{g/l} \geq \text{MEK} > 0.01\mu\text{g/l}$	6 DDT/D/E 5 CB 1 LHKW				

¹ Bei nicht fett gedruckten Substanzgruppen wurden alle MEK der Einzelstoffe dieser Stoffgruppe mit weniger als fünf Werten berechnet und sind daher als unsicher einzustufen. Andernfalls ist die Anzahl von Einzelstoffen mit unsicherer MEK in Klammern vermerkt.

² LHKW: Leichtflüchtige, halogenierte Kohlenwasserstoffe; BTEX: Benzen, Toluol, Ethylbenzen und Xylene; CB: Chlorbenzene; HCH: HCH-Isomere; DDT/D/E: DDT-, DDD- und DDE-Isomere; CP: Chlorphenole; CA Chloraniline; NP: Nitrophenole; NCB: Nitrochlorbenzene; NCP: Nitrochlorphenole; PAK: Polyzyklische, aromatische Kohlenwasserstoffe.

Die MEK für die BTEX-Aromaten sind in WD93 hingegen nur geringfügig höher als im Datensatz 9198M. Die Chlorbenzene, insbesondere Monochlorbenzen und 1,2-Dichlorbenzen, erreichen in Bitterfeld-Wolfen höhere MEK als im Datensatz WD93. Die MEK für die Pestizide können nicht verglichen werden, da sie in den Untersuchungen von Kerndorff et al. (1993) nur an fünf Messstellen oder gar nicht bestimmt wurden.

4.1.4 Ranking der Kontaminationskriterien am Beispiel der leichtflüchtigen halogenierten Kohlenwasserstoffe (LHKW)

Aus den vorangegangenen Ausführungen wird deutlich, dass die LHKW sowohl in Bitterfeld-Wolfen als auch in anderen Grundwasserkontaminationen eine hohe Relevanz haben. Daher wird diese Stoffgruppe exemplarisch mit den verschiedenen Rankingverfahren (Kontaminationsprofile, Clusteranalysen und Hasse-Diagramme) analysiert, bevor in Kapitel 4.1.5 ein stoffgruppenübergreifendes Ranking durchgeführt wird.

Wie in Kapitel 3.3.2 erläutert ist, entsteht durch Normierung der beiden Kontaminationskriterien ENH und MEK mit Bewertungszahlen und deren Multiplikation ein Kontaminationsprofil, in dem die Stoffe mit absteigender Gesamtbewertungszahl angeordnet sind. Für die LHKW aus dem Datensatz 9198M ist dieses Profil der Tabelle 4.5 zu entnehmen: Angeführt wird es von Tetrachlorethen. Diese Substanz erzielt die höchste Bewertungszahl für die ENH sowie eine relativ hohe Bewertungszahl für die MEK. Zwei weitere Substanzen (Trichlorethen und Trichlormethan) erhalten mehr als 5000 Bewertungspunkte und fallen somit in die erste Bewertungsklasse.

Um die unterschiedliche Bewertung der Stoffe durch die beiden Kontaminationskriterien zu zeigen, wurde ein Permutationsdiagramm erstellt (Abbildung 4.3). Darin werden die Stoffe links nach der ENH, rechts nach der MEK geordnet. Gleiche Stoffe werden danach mit Linien verbunden. Wenn eine totale Ordnung unter allen Stoffen herrschte, überschneiden sich die Linien im Permutationsdiagramm nicht. Dann wären alle Stoffe miteinander vergleichbar. Wie Abbildung 4.3 zu entnehmen ist, ist dies für die LHKW aus dem Datensatz 9198M nicht der Fall.

Um die Stoffe hinsichtlich der Zusammensetzung durch die Kontaminationskriterien zu klassifizieren und die Restordnung deutlich zu machen, werden im Folgenden Clusteranalysen (vgl. Kapitel 3.3.6) und die Hasse-Diagramm-Technik (vgl. Kapitel 3.3.3) eingesetzt.

Tabelle 4.5: Kontaminationsprofil der LHKW aus dem Datensatz 9198M.

Substanz	Abkürzung	$BZ_{ges} = BZ-ENH \cdot BZ-MEK$	Klasse BZ_{ges} nach Tabelle 3.8
Tetrachlorethen	PCE	6459	1
Trichlorethen	TCE	5280	1
Trichlormethan	TCM	5022	1
1,1,2,2-Tetrachlorethan	1122PCA	4799	2
Vinylchlorid	VC	4783	2
Dichlormethan	DCM	3254	2
Tetrachlormethan	TeCM	3002	2
cis 1,2-Dichlorethen	cis12DCE	2927	2
1,2-Dichlorethan	12DCA	2095	3
1,1,1,2-Tetrachlorethan	1112PCA	1945	3
trans 1,2-Dichlorethen	trans12DCE	1452	3
1,1,1-Trichlorethan	111TCA	343	5

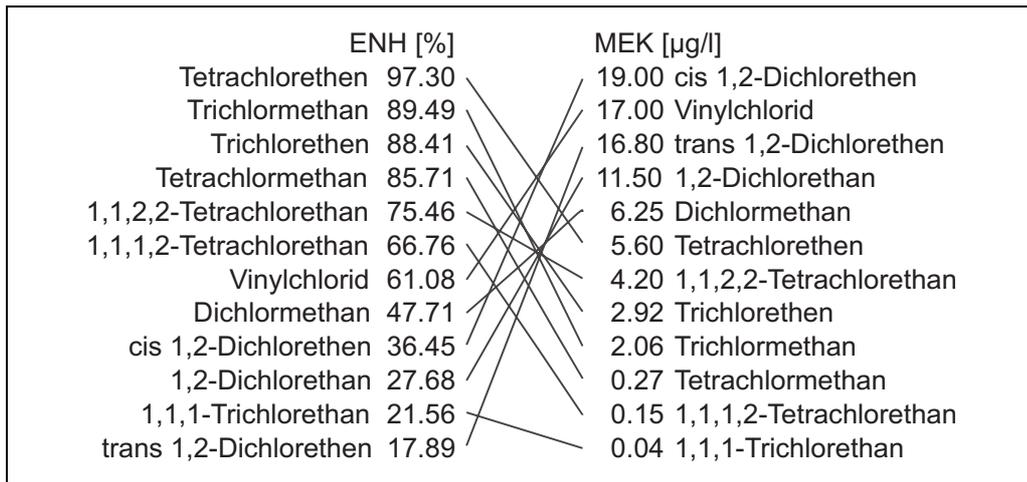


Abbildung 4.3: Permutationsdiagramm mit den Kontaminationskriterien Emissions-Nachweishäufigkeit und mittlere Emissionskonzentration für die Gruppe der LHKW im Datensatz 9198M.

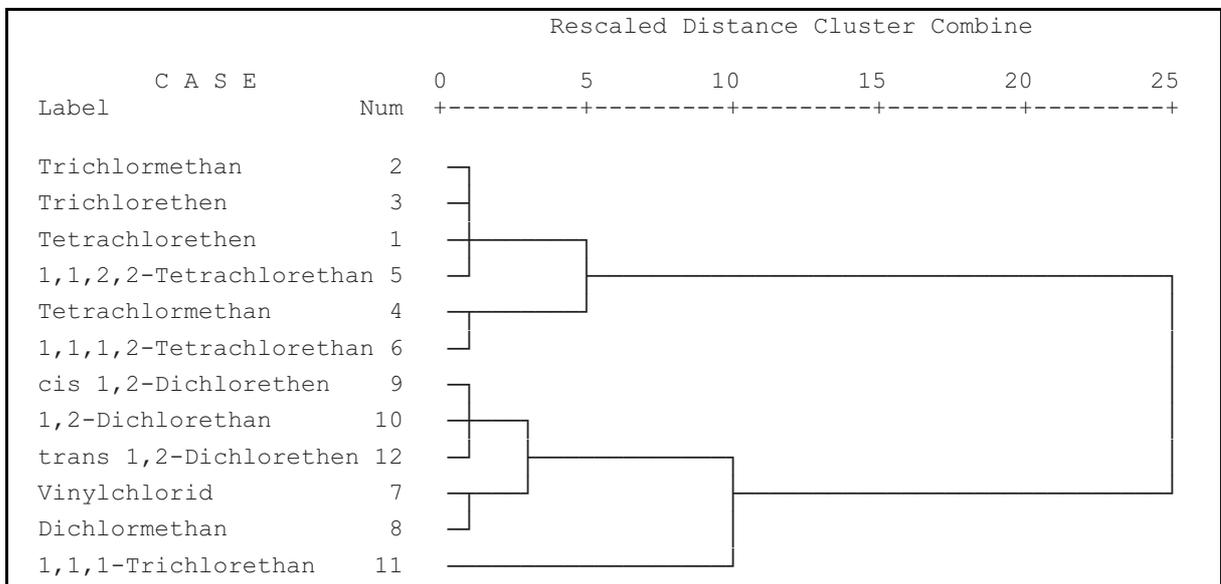


Abbildung 4.4: Dendrogramm der Clusteranalyse mit den Bewertungszahlen für die Emissions-Nachweishäufigkeiten und mittleren Emissionskonzentrationen der LHKW im Datensatz 9198M (Methode: quadrierte euklidische Distanz, Ward-Algorithmus).

Eine Clusteranalyse mit der quadrierten euklidischen Distanz als Abstandsmaß und dem Ward-Algorithmus als Fusionierungsalgorithmus liefert mit den Bewertungszahlen der ENH und MEK das Dendrogramm in Abbildung 4.4. Die Ähnlichkeit der Objekte in einem Cluster ist in der 3-Clusterlösung ausreichend gegeben. Somit können folgende Stoffe zu Gruppen zusammengefasst werden:

1. Trichlormethan, Trichlorethen, Tetrachlorethen, 1,1,1,2-Tetrachlorethan, Tetrachlormethan und 1,1,2,2-Tetrachlorethan;
2. cis/trans 1,2-Dichlorethen, 1,2-Dichlorethen, Vinylchlorid und Dichlormethan;
3. 1,1,1-Trichlorethan.

Auffällig ist, dass die drei- und vierfach chlorierten Substanzen von den ein- und zweifach chlorierten Substanzen in den Clustern getrennt sind. Dies ist auf eine unterschiedliche Zusammensetzung der beiden Kontaminationskriterien zurückzuführen. Die mehrfach chlorierten Substanz des ersten Clusters sind durch hohe Bewertungszahlen für beide Kontami-

nationskriterien, vor allem durch hohe ENH, gekennzeichnet. Die zweifach chlorierten LHKW und Vinylchlorid erhalten zwar relativ hohe Bewertungszahlen für die MEK, aber niedrigere für die ENH (Abbildung 4.3). Im dritten Cluster sind beide Bewertungszahlen sehr niedrig, so dass 1,1,1-Trichlorethan auch im Kontaminationsprofil die niedrigste Gesamtbewertungszahl erhält (Tabelle 4.5).

Das Hasse-Diagramm mit den beiden Kontaminationskriterien ENH und MEK in Abbildung 4.5-A zeigt die bestehende Restordnung anschaulicher als das Permutationsdiagramm. Das Hasse-Diagramm besteht aus fünf Levels (Ebenen), d.h. die längste Kette aus vergleichbaren Stoffen besteht aus den folgenden fünf Stoffen, für die gilt, dass beide Kontaminationskriterien eines Stoffes auf einem höheren Level höher sind als für den nachfolgenden Stoff: Tetrachlorethen (PCE) > Trichlorethen (TCE) und Trichlormethan (TCM) > Tetrachlormethan (TeCM) > 1,1,1,2-Tetrachlorethan (1112PCA) > 1,1,1-Trichlorethan (111TCA). Solche Ketten verweisen auf Rangkorrelationen. Die längste Anti-Kette (Antichain), d.h. die Kette aus nicht vergleichbaren Stoffen, besteht aus sechs Stoffen auf dem zweiten Level. Insgesamt bestehen im Diagramm mehr Unvergleichbarkeiten (80) als Vergleichbarkeiten (26) zwischen den Stoffen, was eine hohe Diversität zwischen den Stoffen indiziert.

Das Diagramm in Abbildung 4.5-A enthält zwei minimale Elemente (1,1,1-Trichlorethan (111TCA) und trans 1,2-Dichlorethen (trans12DCE)) sowie drei maximale Elemente (cis 1,2-Dichlorethen (cis12DCE), Vinylchlorid (VC) und Tetrachlorethen (PCE)). Während die beiden minimalen Elemente auch im Kontaminationsprofil die geringsten Bewertungszahlen erhalten, gilt dies bei den maximalen Elementen nur für Tetrachlorethen. Die anderen beiden Stoffe befinden sich im Kontaminationsprofil in der Mitte (Tabelle 4.5). Aufgrund der hohen MEK werden sie im Hasse-Diagramm gewissermaßen aufgewertet.

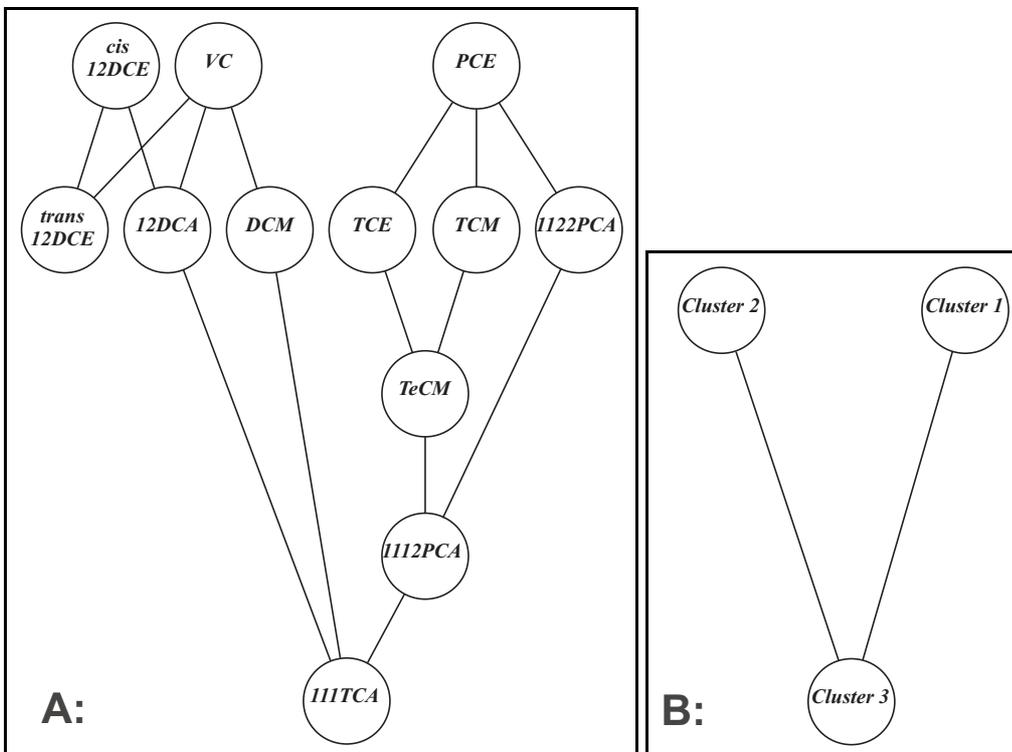


Abbildung 4.5: Hasse-Diagramm mit den Emissions-Nachweishäufigkeiten und mittleren Emissionskonzentrationen der LHKW im Datensatz 9198M. A: Einzelstoffe (Die Abkürzungen sind in Tabelle 4.5 erklärt.) B: Clustermittelwerte für die 3-Clusterlösung aus Abbildung 4.4.

Das Dendrogramm aus der Clusteranalyse (Abbildung 4.4) kann benutzt werden, um generalisierte Hasse-Diagramme zu bilden. Ordnet man die Clusterzentren der 3-Clusterlösung in einem Hasse-Diagramm an, so zeigt sich, dass Cluster 1 (drei- und vierfach chlorierte LHKW) mit dem Cluster 2 (zweifach chlorierte LHKW und Vinylchlorid) nicht vergleichbar ist. Mit dem dritten Cluster (1,1,1-Trichlorethan) hingegen sind beide vergleichbar (Abbildung 4.5-B).

Die Trennung der drei-/vierfach chlorierten LHKW von den ein- bzw. zweifach chlorierten Substanzen entspricht im Wesentlichen einer Einteilung nach Primärkontaminanten und Sekundärkontaminanten, d.h. Abbauprodukten (vgl. Kapitel 3.2) und kann auf unterschiedliche Eintragsmuster der Stoffe oder differierendes Umweltverhalten hinweisen (s.u.).

4.1.5 Stoffgruppenübergreifendes Ranking: Durchschnittliche Kontaminationsprofile, Cluster und Hasse-Diagramme für Bitterfeld-Wolfen

Um das Zusammenspiel und die Stellung der Stoffgruppe LHKW innerhalb des gesamten Stoffspektrums betrachten zu können, werden im Folgenden alle Stoffe im Datensatz 9198M mit den vorgestellten Methoden geordnet. Das Kontaminationsprofil für den Datensatz 9198M ist in Tabelle 4.6 dargestellt. Die Gesamtbewertungszahlen erreichen das theoretische Maximum von 10000 nicht. Der höchste Wert beträgt 6590 für Monochlorbenzen, gefolgt von Tetrachlorethen, Trichlorethen, 1,2-Dichlorbenzen und Trichlormethan, die jeweils mehr als 5000 Bewertungspunkte erreichen. Es folgen fünf weitere LHKW, drei HCH-Isomere, die zwei anderen Dichlorbenzene sowie Benzen und Toluol mit jeweils mehr als 2500 Punkten. In der Gesamtbewertung nehmen Vertreter der LHKW eine wichtige Position ein. Auch Mono- und Dichlorbenzene, Benzen sowie HCH-Isomere sind im oberen Teil des Kontaminationsprofils zu finden, während z.B. die DDT/D/E-Isomere wesentlich niedrigere Ränge erhalten.

Um zu untersuchen, wie sich die Gesamtbewertungszahlen aus den Bewertungszahlen für ENH und MEK zusammensetzen, wurde eine Clusteranalyse durchgeführt. Die Zugehörigkeit der Stoffe zu den Clustern und die Spannweiten der Bewertungszahlen innerhalb der Cluster sind für die 6-Clusterlösung Tabelle 4.7 zu entnehmen. Im ersten Cluster befinden sich die elf Stoffe, die die höchsten Gesamtbewertungszahlen und hohe Bewertungszahlen sowohl für die ENH als auch für die MEK bekommen haben. Im Cluster 6 sind hingegen die Stoffe zusammengefasst, die gar nicht nachgewiesen und daher durchgängig mit dem Wert 1 bewertet wurden. Sie stehen auch am Ende des Kontaminationsprofils (Tabelle 4.6).

Die übrigen Stoffe gehören zu vier verschiedenen Clustern, die z.T. durch starke Unterschiede zwischen BZ-ENH und BZ-MEK charakterisiert sind. Die BZ-ENH der Stoffe im Cluster 2 sind fast durchgängig doppelt so hoch wie die entsprechenden BZ-MEK (Tabelle 4.7). Zum Cluster 3 hingegen gehören Stoffe, deren BZ-ENH < 50 und BZ-MEK > 50 ist. Im Cluster 4 kehrt sich das Verhältnis zwischen BZ-ENH und BZ-MEK noch mal um: Die BZ-MEK liegen durchgängig unter 15 Punkten, für die BZ-ENH werden bis zu 48 Punkte erreicht. Damit sind die Diskrepanzen zwischen beiden Bewertungszahlen nicht so hoch wie im Cluster 5, der die größten Unterschiede zwischen beiden Bewertungszahlen zeigt. Nach Multiplikation der beiden Werte werden diese Stoffe jedoch höchstens mit insgesamt etwa 1000 Punkten bewertet, so dass sie im Kontaminationsprofil stark zurückfallen. Beide Kontaminationskriterien müssen also hoch bewertet werden, damit eine Substanz einen hohen Rang im Kontaminationsprofil erhält. Als Ergänzung zum Kontaminationsprofil liefert die Clusteranalyse jedoch wertvolle Hinweise zur Zusammensetzung der Bewertungszahlen.

Tabelle 4.6: Kontaminationsprofil der 63 Stoffe im Datensatz 9198M.

Färbung erfolgte nach Stoffgruppen: ●: LHKW, ●: BTEX, ●: CB, ●: HCH, ●: DDT/D/E, ●: sonstige.

Substanz	Abkürzung	BZ-ENH	BZ-MEK	BZ _{ges}	Klasse BZ _{ges}	D-Wert
Monochlorbenzen	MCB	86.05	76.58	6590	1	47
Tetrachlorethen	PCE	100.00	64.59	6459	1	46
Trichlorethen	TCE	90.95	58.05	5280	1	34
1,2-Dichlorbenzen	12DCB	86.68	60.82	5272	1	38
Trichlormethan	TCM	92.05	54.56	5022	1	31
1,1,2,2-Tetrachlorethan	1122PCA	77.78	61.70	4799	2	37
Vinylchlorid	VC	63.15	75.74	4783	2	36
alpha-HCH	aHCH	96.22	48.23	4641	2	28
delta-HCH	dHCH	89.70	45.25	4059	2	27
1,4-Dichlorbenzen	14DCB	66.52	59.65	3968	2	28
Benzen	B	61.83	63.84	3947	2	29
Dichlormethan	DCM	49.54	65.69	3254	2	27
Tetrachlormethan	TeCM	88.21	34.03	3002	2	25
cis 1,2-Dichlorethen	cis12DCE	38.08	76.86	2927	2	28
gamma-HCH	gHCH	81.44	34.48	2808	2	25
1,3-Dichlorbenzen	13DCB	48.57	57.26	2781	2	20
Toluen	To	47.62	53.18	2533	2	15
beta-HCH	bHCH	73.61	32.51	2393	3	23
o-Chloranilin	2CA	30.28	76.32	2311	3	23
1,2-Dichlorethan	12DCA	29.17	71.82	2095	3	21
1,1,1,2-Tetrachlorethan	1112PCA	68.93	28.21	1945	3	19
1,2,3,4-Tetrachlorbenzen	1234TeCB	70.00	26.77	1874	3	19
Ethylbenzen	EB	32.52	54.41	1769	3	12
1,2,4-Trichlorbenzen	124TCB	57.33	30.59	1754	3	17
m-Xylen	13X	28.13	57.97	1631	3	13
p,p-DDT	ppDDT	73.88	21.83	1613	3	19
Trans 1,2-Dichlorethen	trans12DCE	19.20	75.63	1452	3	16
o-Xylen	12X	23.35	60.69	1417	3	16
o,p-DDT	opDDT	68.67	18.84	1294	3	17
1,2,4,5- und 1,2,3,5-Tetrachlorbenzen	1245TeCB	70.72	17.47	1235	4	16
p-Xylen	14X	21.04	58.64	1234	4	11
1,3,5-Trichlorbenzen	135TCB	47.29	24.14	1141	4	14
p-Chloranilin	4CA	12.71	84.71	1077	4	20
1,2,3-Trichlorbenzen	123TCB	50.35	19.00	957	4	15
4-Chlor-3-Methylphenol	MeCP	8.27	91.92	760	4	19
p,p-DDD	ppDDD	62.52	10.31	644	4	14
o-Nitrochlorbenzen	2CNB	10.81	55.92	604	5	10
2-Chlorphenol	2CP	8.27	58.80	486	5	10
o,p-DDD	opDDD	47.85	9.80	469	5	12
p-Nitrochlorbenzen	4CNB	5.90	69.19	408	5	12
p,p-DDE	ppDDE	40.28	8.92	359	5	11
2,4,6-Trichlorphenol	246TCP	5.85	60.01	351	5	11
1,1,1-Trichlorethan	111TCA	22.94	14.93	343	5	9
2,4-Dichlorphenol	24DCP	4.63	59.27	275	6	10
2,3-Dichlornitrobenzen	23DCNB	3.45	76.74	265	6	11
o,p-DDE	opDDE	23.72	10.98	260	6	9
Pentachlorphenol	PCP	3.42	70.76	242	6	10
4-Nitrophenol	4NP	2.23	100.00	223	6	13
2,5-Dichlornitrobenzen	25DCNB	2.23	82.71	184	6	12
2,3,4-Trichlornitrobenzen	TCNB	2.23	79.21	176	6	11
Dimethoat	DIM	1.75	79.21	139	6	9
Pentachlorbenzen	PCB	33.31	3.64	121	6	9
2-Nitrophenol	2NP	2.23	54.24	121	6	9
Hexachlorbenzen	HCB	33.75	1.96	66	6	10
4-Chlorphenol	4CP	1.00	1.00	1	7	8
2,4-Dichlornitrobenzen	24DCNB	1.00	1.00	1	7	8
2,3,5,6-Tetrachlornitrobenzen	TeCNB	1.00	1.00	1	7	8
2-Chlor-4-Nitrophenol	4N2CP	1.00	1.00	1	7	8
2-Chlor-6-Nitrophenol	6N2CP	1.00	1.00	1	7	8
4-Chlor-3-Nitrophenol	3N4CP	1.00	1.00	1	7	8
2,4-Dinitrophenol	24DNP	1.00	1.00	1	7	8
4,6-Dinitro-2-methylphenol	MeDNP	1.00	1.00	1	7	8
Parathionmethyl	PTM	1.00	1.00	1	7	8

Tabelle 4.7: 6-Clusterlösung mit den Bewertungszahlen für die Emissions-Nachweishäufigkeiten und mittleren Emissionskonzentrationen der 63 Stoffe im Datensatz 9198M (Methode: quadrierte euklidische Distanz, Ward-Algorithmus).

Cluster	Stoffe	BZ-ENH	BZ-MEK	BZ _{ges}
1	Trichlormethan, 1,1,2,2-Tetrachlorethan, Vinylchlorid, Tri- / Tetrachlorethen, Benzen, Monochlorbenzen, 1,2- und 1,4-Dichlorbenzen, alpha-HCH, delta-HCH	62 ... 100	45 ... 77	3947 ... 6590
2	Tetrachlormethan, 1,1,1,2-Tetrachlorethan, 1,2,3-/1,2,4-/ 1,3,5-Trichlorbenzen, 1,2,3,4-/1,2,4,5- und 1,2,3,5-Tetrachlorbenzen, gamma-HCH, beta-HCH, p,p-/o,p-DDT, p,p-DDD	47 ... 88	10 ... 34	644 ... 3002
3	Dichlormethan, 1,2-Dichlorethan, cis/trans 1,2-Dichlorethen, 1,3-Dichlorbenzen, Ethylbenzen, Toluol, o-/m-/p-Xylen, o-Chloranilin	19 ... 50	53 ... 77	1234 ... 3254
4	1,1,1-Trichlorethan, Penta-/Hexachlorbenzen, o,p-DDD, p,p-/o,p-DDE	23 ... 48	2 ... 15	66 ... 469
5	o-/p-Nitrochlorbenzen, 2,3-/2,5-Dichlornitrobenzen, 2,3,4-Trichlornitrobenzen, 2-Chlorphenol, 2,4-Dichlorphenol, 2,4,6-Trichlorphenol, 4-Chlor-3-Methylphenol, Pentachlorphenol, 2-/4-Nitrophenol, p-Chloranilin, Dimethoat	2 ... 13	54 ... 100	121 ... 1077
6	2,4-Dichlornitrobenzen, 2,3,5,6-Tetrachlornitrobenzen, 4-Chlorphenol, 2,4-Dinitrophenol, 4,6-Dinitro-2-Methylphenol, 2-Chlor-4-Nitrophenol, 2-Chlor-6-Nitrophenol, 4-Chlor-3-Nitrophenol, Parathionmethyl	1	1	1

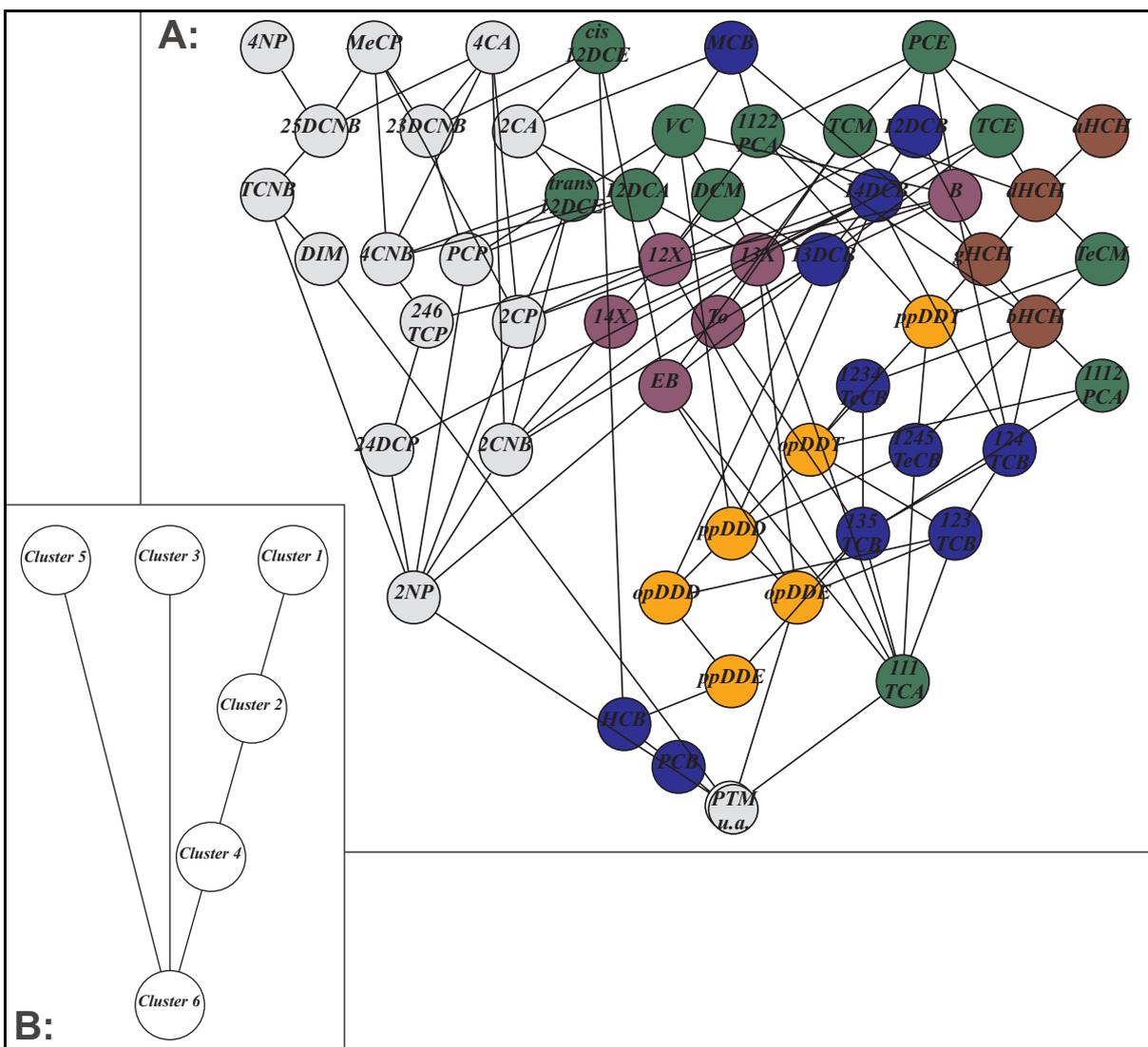
Tabelle 4.7 zeigt, dass unter den untersuchten Stoffen keine vollständige Ordnung hergestellt werden kann. Daher wird mit den ENH und MEK ein Hasse-Diagramm erstellt (Abbildung 4.6-A). Für die hohe Anzahl von Stoffen wird diese Darstellung relativ unübersichtlich. Durch die Anordnung der Clusterzentren als Hasse-Diagramm (Abbildung 4.6-B) werden die wesentlichen Strukturen jedoch schnell sichtbar: Während die Cluster 1, 2, 4 und 6 eine Rangordnung bilden, gilt dies für die Cluster 3 und 5 nicht. Wie oben erwähnt, zeichnen sich diese beiden Cluster durch vergleichsweise hohe MEK und niedrige ENH aus. Vor allem die Stoffe im Cluster 5 werden nur punktuell im Untersuchungsgebiet nachgewiesen. Deshalb kann ihre MEK nur auf einer sehr unsicheren Datenbasis ermittelt werden (vgl. Abbildung 4.2). Vorteilhaft an der Clusteranalyse und der Hasse-Diagramm-Technik ist, dass diese Stoffe damit sichtbar von den anderen Stoffen separiert werden. Die Stoffe im Cluster 3 erhalten trotz vergleichsweise geringer ENH insgesamt recht hohe Bewertungszahlen und Ränge im Kontaminationsprofil. Die Unvergleichbarkeit mit den anderen Stoffen muss wahrscheinlich auf ein anderes Umweltverhalten zurückgeführt werden (siehe Kapitel 4.1.6).

Die Relevanz der Einzelstoffe für die Grundwasserkontamination kann aus der Stellung der Stoffe im Hasse-Diagramm folgendermaßen abgelesen werden. Zum einen ist der Level, auf dem sich ein Stoff befindet, von Belang, zum anderen der Grad seiner Vernetzung, d.h. die Zahl der Nachfolger.

Je höher der Level eines Stoffes im Hasse-Diagramm ist, desto höher sind die Kontaminationskriterien und desto höher ist auch die Relevanz dieses Stoffes für die Grundwasserkontamination zu bewerten. Das Hasse-Diagramm der Einzelstoffe (Abbildung 4.6-A) besteht aus insgesamt 13 Leveln. Das einzige minimale Element wird durch die Substanzen gebildet, die bislang gar nicht im Grundwasser nachgewiesen wurden (vgl. Tabelle 4.6). Diese Stoffe sind für die Grundwasserbelastung wenig relevant, sie stehen auch am Ende des Kontaminationsprofils und werden im Cluster 6 zusammengefasst. Demgegenüber existieren sechs maximale Elemente (Abbildung 4.6-A): 4-Nitrophenol (4NP), 4-Chlor-3-Methylphenol (MeCP), p-Chloranilin (4CA), cis 1,2-Dichlorethen (cis12DCE), Monochlorbenzen (MCB) und Tetrachlorethen (PCE). Ihre Stellung im Hasse-Diagramm legt eine hohe Relevanz der Stoffe nahe. Im Kontaminationsprofil und in der Clusteranalyse werden die genannten Stoffe

jedoch sehr unterschiedlich klassifiziert (Tabelle 4.6, Tabelle 4.7). Die Kontaminationskriterien und die Ergebnisse der Clusteranalyse zeigen, dass die ersten drei dieser Stoffe (aus dem Cluster 5) nur punktuell im Untersuchungsgebiet nachgewiesen werden. Sie sind daher regional von untergeordneter Bedeutung. Ihre hohe Position im Hasse-Diagramm zeigt aber, dass sie lokal durchaus in hohen Mengen auftreten können.

Die Unterscheidung in lokal und regional relevante Stoffe kann man im Hasse-Diagramm durch eine geringe Vernetzung mit anderen Stoffen oder genauer durch die Zahl der Nachfolger, den D-Wert (vgl. Kapitel 3.3.3), bestimmen. Dieser gibt an, mit wie vielen Stoffen ein Stoff vergleichbar ist. Stoffe, die häufig (d.h. flächendeckend) und in vergleichsweise hohen Konzentrationen vorkommen, sind mit vielen anderen Stoffen vergleichbar. Sie sind im Hasse-Diagramm auf einem hohen Level zu finden und haben gleichzeitig viele Nachfolger. Während z.B. p-Chloranilin nur 20 Nachfolger hat, haben Tetrachlorethen und Monochlorbenzen 46 bzw. 47 (Tabelle 4.6).



Färbung erfolgte nach Stoffgruppen: ●: LHKW, ●: BTEX, ●: CB, ●: HCH, ●: DDT/D/E, ●: sonstige. Die Abkürzungen sind Tabelle 4.6 zu entnehmen.

Abbildung 4.6: Hasse-Diagramme mit den Kontaminationskriterien Emissions-Nachweishäufigkeit und mittlere Emissionskonzentration aus dem Datensatz 9198M. A: Einzelstoffe, B: Clusterzentren aus Tabelle 4.7.

25 oder mehr Nachfolger haben alle Stoffe aus dem Cluster 1 in Tabelle 4.7 sowie Di- und Tetrachlormethan, gamma-HCH und cis 1,2-Dichlorethen, die zu den Clustern 2 und 3 gehören (Tabelle 4.6, Tabelle 4.7). Außerdem belegen diese Stoffe die ersten 15 Ränge im Kontaminationsprofil. Sie könnten daher als eine Art regionale Leitparameter für die Grundwasserkontamination fungieren, d.h. sie sollten kontinuierlich erhoben und ausgewertet werden. Die regionale Relevanz und Repräsentativität dieser Stoffe muss jedoch durch räumlich differenzierte Kontaminationskriterien belegt werden. Dies erfolgt in Kapitel 4.2.

4.1.6 Klassifizierung der untersuchten Stoffgruppen nach ihrem Umweltverhalten

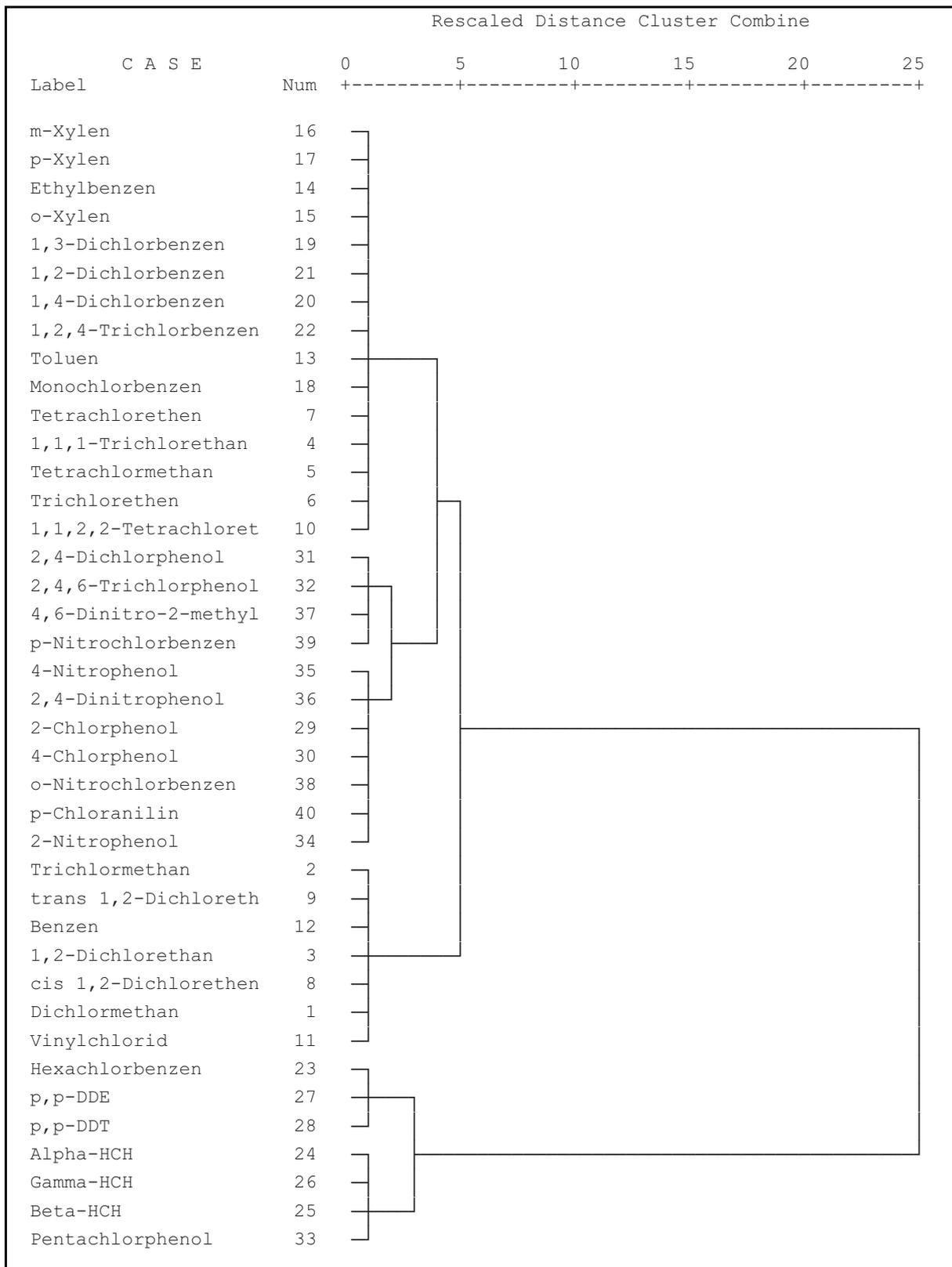
Um zu klären, ob das Stoffranking im Kontaminationsprofil und im Hasse-Diagramm bzw. die Stoffklassifizierung in der Clusteranalyse durch Stoffeigenschaften erklärt werden kann, wurde mit einigen physikochemischen Parametern eine Clusteranalyse durchgeführt.

Wichtig für das Auftreten von Stoffen im Grundwasser ist das Transferpotenzial der Stoffe, das die Tendenz eines Stoffeintrags aus Bodenverunreinigungen ins Grundwasser sowie die Mobilität der Stoffe im Grundwasser angibt. Das Transferpotenzial hängt vor allem von der Wasserlöslichkeit, dem Dampfdruck und dem Oktanol-Wasser-Verteilungskoeffizienten ab (Kerndorff et al., 1993). Eine Clusteranalyse mit diesen Größen teilt die Stoffe in zwei große Gruppen (Abbildung 4.7): Zum kleineren Cluster gehören die HCH- und DDT/D/E-Isomere sowie Hexachlorbenzen und Pentachlorphenol. Diese Stoffe sind durch einen sehr niedrigen Dampfdruck und eine geringe Wasserlöslichkeit sowie hohe Werte für den Oktanol-Wasser-Verteilungskoeffizienten gekennzeichnet. Daher reichern sie sich in Fettdepots und Nahrungsketten an, haben aber generell ein geringes Transferpotenzial vom Boden ins Grundwasser bzw. im Grundwasser.

Die Stoffe im großen Cluster in Abbildung 4.7 haben hingegen einen sehr hohen Dampfdruck, eine bessere Wasserlöslichkeit und geringere Oktanol-Wasser-Verteilungskoeffizienten. Diese Eigenschaften begünstigen ihre Ausbreitung im Grundwasser, d.h. diese Stoffe weisen ein hohes Transferpotenzial auf.

Das Stoffranking in den vorgegangenen Kapitel zeigt, dass nicht alle Stoffe aus dem oberen Cluster in Abbildung 4.7 häufig und in großen Mengen im Grundwasser vorkommen. Die Clustereinteilung der Stoffe in Abbildung 4.7 entspricht also nur teilweise der Einteilung der Stoffe nach der ENH und MEK in Tabelle 4.7.

Zum einen können die Stoffe aus dem oberen Cluster noch weiter unterteilt werden, wodurch eine bessere Übereinstimmung mit dem Stoffranking entsteht. Zum Beispiel werden im nächsten Schritt Vinylchlorid, die zweifach chlorierten LHKW, Trichlormethan und Benzen abgespalten. Zum anderen sind zur Interpretation des Stoffrankings neben den physikochemischen Eigenschaften auch die Eintragsmuster (diffuse oder punktuelle Einträge, einmalige und kontinuierliche Einträge, Eintragsdauer und Eintragsmengen) sowie die Abbaubarkeit der Stoffe zu betrachten. So kann z.B. die hohe Nachweishäufigkeit der HCH-Isomere durch die hohe Persistenz (vgl. Abbildung 3.5) und die hohen Abfallmengen (Abbildung 2.6) erklärt werden. Das Zusammenspiel zwischen Stoffeigenschaften, Eintragsmustern und den Ergebnissen des Stoffrankings ist daher in Kapitel 4.3 zu diskutieren.



Verfahren: Ward-Algorithmus, quadrierte euklidische Distanz.
 Merkmale: Wasserlöslichkeit bei 20 °C, Dampfdruck bei 20 °C und Oktanol-Wasser-Verteilungs-
 koeffizient K_{ow} ; alle Werte wurden logarithmiert und Z-transformiert.
 Datenquelle: Rippen (1987-1998).

Abbildung 4.7: Dendrogramm der Clusteranalyse mit physikochemischen Parametern.

4.2 Räumlich und zeitlich differenzierte Kontaminationskriterien

Da in den bisherigen Auswertungen weder die Verteilung der Messstellen im Untersuchungsgebiet noch die zeitliche Komponente gewichtet wurde, werden Kontaminationskriterien nun in verschiedenen räumlich oder zeitlich begrenzten Stichproben ermittelt.

4.2.1 Flächenhafte Differenzierung der Kontaminationskriterien zur Bestimmung der lokalen und regionalen Relevanz von Stoffen

Um die räumliche Anordnung und z.T. Häufung der Messstellen im Untersuchungsgebiet zu berücksichtigen und um Informationen über die Ausdehnung der Kontaminanten zu erhalten, wurde der Datensatz 9198M je Landschaftseinheit und je Teilgebiet aus Tabelle 2.1 ausgewertet. In den Landschaftseinheiten wurden die Teilgebiete nach Nutzungen zusammengefasst. Unterschieden wurden die Einheiten Muldeau, Siedlungen, Chemieindustrie (CAG und Filmfabrik), Bergbaufolgelandschaften und Agrarlandschaften.

Die ENH der untersuchten Stoffgruppen wurden anhand der Summenangaben pro Stoffgruppe ermittelt und sind in Tabelle 4.8 zusammengefasst. Die Ergebnisse der Einzelstoffanalyse befinden sich im Anhang A 4.2. Die LHKW, BTEX-Aromaten und Chlorbenzene (CB) wurden in allen Landschaftseinheiten umfangreich untersucht und überall zu mehr als 60 % nachgewiesen. In fast allen Landschaftseinheiten gilt für die ENH die Reihenfolge: LHKW > CB > BTEX. LHKW und Chlorbenzene sind abgesehen von den Agrarlandschaften in allen Landschaftseinheiten sehr weit verbreitet und weisen daher eine flächenhafte, ubiquitäre Belastung auf. Für die HCH- und DDT/D/E-Isomere lassen sich keine Aussagen für die Agrarlandschaften machen; in allen anderen Landschaftseinheiten werden sie jedoch ebenfalls sehr häufig nachgewiesen (HCH: ENH > 90 %, DDT/D/E-Isomere: ENH > 60 %).

Man muss davon ausgehen, dass diese fünf Stoffgruppen im ganzen Untersuchungsgebiet vorhanden sind. Die höchsten ENH finden sich sowohl für die Stoffgruppen insgesamt als auch für die Einzelstoffe im Grundwasser unterhalb der Betriebsflächen der chemischen Industrie. Die niedrigsten ENH sind im Grundwasser der Agrarlandschaften zu finden, die im Bereich des Grundwasseranstroms liegen (Tabelle 4.8, Anhang A 4.2).

Tabelle 4.8: Emissions-Nachweishäufigkeiten (ENH, Angaben in %) der Stoffgruppen je Landschaftseinheit (Datensatz 9198M, n = Anzahl der Messstellen).

	Muldeau		Bergbaufolge		Siedlungen		Chemie		Landwirtschaft		Gesamt	
	n	ENH	n	ENH	n	ENH	n	ENH	n	ENH	n	ENH
LHKW	51	100	107	100	37	97	155	100	21	76	371	98
BTEX	53	76	100	62	37	65	157	83	21	62	368	73
CB	48	96	92	91	34	100	150	99	19	84	343	96
HCH	28	100	61	95	11	100	133	93	1	---	234	95
DDT/D/E	28	96	50	64	11	91	126	77	0	---	215	77
CP	20	10	34	32	2	---	97	40	0	---	153	35
CA	20	30	35	14	2	---	82	37	0	---	139	30
NCB	20	5	15	13	2	---	46	13	0	---	83	11
NP	20	0	30	0	2	---	80	4	0	---	132	2
NCP	20	0	15	0	2	---	46	0	0	---	83	0
PAK	2	---	17	0	2	---	36	8	0	---	57	5

Tabelle 4.9: Mittlere Emissionskonzentrationen (MEK, Angaben in µg/l) der Stoffgruppen je Landschaftseinheit (Datensatz 9198M, n = Anzahl der Messstellen).

	Muldeaue		Bergbaufolge		Siedlungen		Chemie		Landwirtschaft		Gesamt	
	n>RG	MEK	n>RG	MEK	n>RG	MEK	n>RG	MEK	n>RG	MEK	n>RG	MEK
LHKW	51	16.7	107	22.1	36	66.0	155	89.4	16	5.8	365	42.7
BTEX	40	4.8	62	2.7	24	11.2	130	15.7	13	2.5	269	8.2
CB	46	17.0	84	15.8	34	13.2	149	89.2	16	10.2	329	26.5
HCH	28	1.8	58	2.6	11	2.0	124	2.6	1	---	222	2.5
DDT/D/E	27	0.2	32	0.1	10	0.2	97	0.3	0	---	166	0.2
CP	2	---	11	0.6	1	---	39	1.8	0	---	53	1.5
CA	6	1.6	5	1.5	1	---	30	67.0	---	---	42	17.8
NCB	1	---	2	---	0	---	6	7.2	0	---	9	0.7

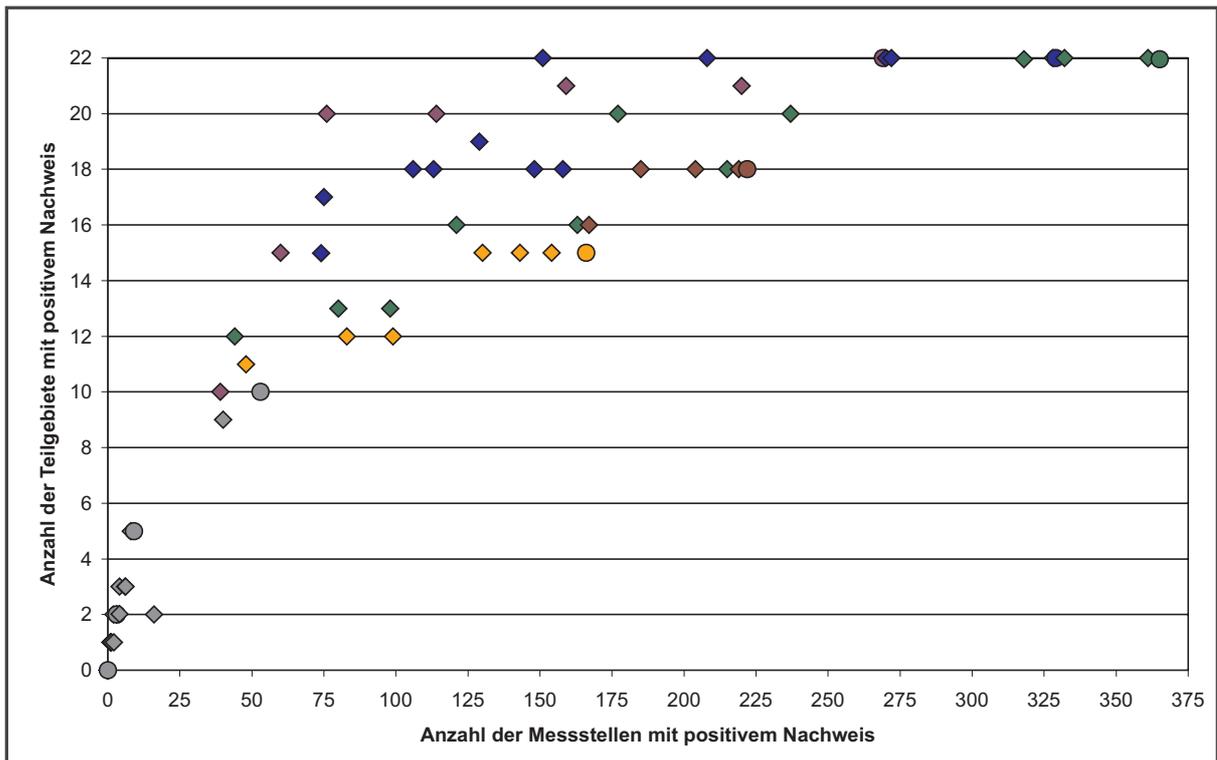
Demgegenüber treten andere Stoffgruppen eher punktuell auf. Allerdings besteht hier eine schlechtere Datenlage, vor allem in den Agrarlandschaften und den Siedlungen (Tabelle 4.8). Chlorphenole (CP) werden zu etwa einem Drittel in den Landschaftseinheiten Chemie und Bergbaufolge sowie vereinzelt in der Muldeaue und den Siedlungen nachgewiesen. Auch Chloraniline (CA) und Nitrochlorbenzene (NCB) treten vereinzelt in den Landschaftseinheiten Chemie, Bergbaufolge und Muldeaue auf, während die Nitrophenole (NP) und PAK auf die Chemieflächen begrenzt sind und die Nitrochlorphenole (NCP) gar nicht nachgewiesen werden (Tabelle 4.8).

Die MEK der Stoffgruppen sind in Tabelle 4.9 zusammengestellt, die Werte der Einzelstoffe im Anhang A.4.2. Auch bei den MEK treten die höchsten Werte fast durchgängig im Grundwasser unterhalb der Betriebsflächen der Chemie auf. Die MEK der LHKW und der BTEX-Aromaten sind hier etwa doppelt so hoch wie im Gesamtdatensatz 9198M, die MEK der Chlorbenzene ist sogar dreimal so hoch (Tabelle 4.9).

Für die insgesamt 22 Teilgebiete aus Tabelle 2.1 wurden die ENH aus dem Datensatz 9198M berechnet, um zu untersuchen, ob sich die Verbreitung bestimmter Stoffe sogar auf Teilgebiete eingrenzen lässt. Die Ergebnisse sind aufgrund der unterschiedlichen und zum Teil geringen Stichprobenumfänge nur vorsichtig zu interpretieren. Eine stoffspezifische Gegenüberstellung der Anzahl von Grundwassermessstellen mit positivem Nachweis und der Anzahl von Teilgebieten, in denen sich mindestens eine Messstelle mit positivem Nachweis befindet, ermöglicht laut Plumb (1991) eine Aussage über die räumliche Ausdehnung von Stoffen.

Abbildung 4.8 zeigt eine solche Gegenüberstellung für den Datensatz 9198M. Alle Einzelstoffe wurden - mit Ausnahme der PAK (acht Teilgebiete) - in mindestens 14 Teilgebieten untersucht. Aus Abbildung 4.8 kann man erkennen, dass Stoffe, die nur an wenigen, d.h. bis zu 16 Messstellen nachgewiesen wurden, auch nur in höchstens fünf Teilgebieten auftreten. Diese Stoffe sind auf das Grundwasser unterhalb der Betriebsflächen der chemischen Industrie beschränkt. Betrachtet man diese Landschaftseinheit genauer, fällt auf, dass die Chlorphenole, Nitrophenole, Nitrochlorbenzene, Chloraniline, PAK und Dimethoat vor allem in Proben von den CAG Werksteilen Wolfen Ost/West auftreten.

Alle anderen Stoffe kommen auch im Grundwasser außerhalb der chemischen Betriebsflächen vor. Trichlormethan, Tetrachlormethan, Trichlorethen, Tetrachlorethen, Monochlorbenzenen, alle drei Dichlorbenzene sowie alpha-, gamma- und delta-HCH werden sogar in allen 22 bzw. 18 (HCH) untersuchten Teilgebieten nachgewiesen und haben daher die größte regionale Relevanz (Abbildung 4.8). Diese Angaben vervollständigen die Auswahl der Leitparameter, die in Kapitel 4.1.5 getroffen wurde.



Färbung erfolgte nach Stoffgruppen: ●: LHKW, ●: BTEX, ●: CB, ●: HCH, ●: DDT/D/E, ●: sonstige.

Abbildung 4.8: Räumliche Verbreitung der Einzelstoffe (als Rauten dargestellt) und Stoffgruppen (Kreise) im Datensatz 9198M.

4.2.2 Nach Grundwasserleitern differenzierte Kontaminationskriterien

Die Kontaminationskriterien wurden aus dem Datensatz 9198M für die beiden Grundwasserleiter GWL100 und GWL500 getrennt abgeleitet und zu einem Kontaminationsprofil verknüpft. Die ersten 15 Substanzen der Kontaminationsprofile des Gesamtdatensatzes sowie der Teildatensätze pro Grundwasserleiter sind in Tabelle 4.10 dargestellt. Die aufgeführten Stoffe werden in allen Fällen mit mehr als 2500 Punkten bewertet. Da die Normierung der Kontaminationskriterien für jeden Datensatz getrennt erfolgt, sind die absoluten Gesamtbewertungszahlen nicht vergleichbar, sondern nur die Reihenfolgen.

Von den 15 ersten Stoffen in den Kontaminationsprofilen stimmen 12 Substanzen in beiden Grundwasserleitern überein: Tetra- und Trichlorethen, Di- und Trichlormethan, 1,1,2,2-Tetrachlorethan, Vinylchlorid, Monochlorbenzen, 1,2- und 1,4-Dichlorbenzen, Benzen, alpha- und delta-HCH. Im GWL100 gehören zusätzlich Tetrachlormethan, cis 1,2-Dichlorethen und 1,3-Dichlorbenzen zu den ersten 15 Substanzen, während dies im GWL500 für gamma- und beta-HCH sowie o-Chloranilin gilt.

Insgesamt erhalten die HCH-Isomere und 1,1,2,2-Tetrachlorethan im GWL500 eine höhere Bedeutung, während Benzen, Mono- und Dichlorbenzene im GWL100 etwas höhere Ränge erreichen (Tabelle 4.10). Der hohe Rangkorrelationskoeffizient für die Gesamtbewertungszahl zeigt aber, dass die Reihenfolge der Substanzen in beiden Grundwasserleitern insgesamt relativ ähnlich ist (Tabelle 4.11).

Tabelle 4.10: Kontaminationsprofil der Stoffe mit mehr als 2500 Bewertungspunkten im GWL100 und GWL500 (Datensatz 9198M).

Mittleres Kontaminationsprofil Datensatz: 9198M	Kontaminationsprofil GWL100 Datensatz: 9198M_GWL100	Kontaminationsprofil GWL500 Datensatz: 9198M_GWL500
Monochlorbenzen	Monochlorbenzen	Tetrachlorethen
Tetrachlorethen	Tetrachlorethen	Monochlorbenzen
Trichlorethen	Trichlorethen	1,1,2,2-Tetrachlorethan
1,2-Dichlorbenzen	1,2-Dichlorbenzen	Trichlorethen
Trichlormethan	Trichlormethan	1,2-Dichlorbenzen
1,1,2,2-Tetrachlorethan	Vinylchlorid	alpha-HCH
Vinylchlorid	Benzen	Vinylchlorid
alpha-HCH	1,1,2,2-Tetrachlorethan	Trichlormethan
delta-HCH	1,4-Dichlorbenzen	delta-HCH
1,4-Dichlorbenzen	alpha-HCH	1,4-Dichlorbenzen
Benzen	delta-HCH	gamma-HCH
Dichlormethan	Dichlormethan	Benzen
Tetrachlormethan	Tetrachlormethan	o-Chloranilin
cis 1,2-Dichlorethen	cis 1,2-Dichlorethen	Dichlormethan
gamma-HCH	1,3-Dichlorbenzen	beta-HCH

Tabelle 4.11: Änderung der absoluten Ränge und Rangkorrelationen für die Kontaminationskriterien ENH und MEK sowie die Gesamtbewertungszahlen zwischen GWL100 und GWL500 (Datensatz 9198M, Anzahl der Stoffe p = 54)

	ENH	MEK	BZ _{ges}
Anzahl identischer (± 3) Ränge in GWL100 und GWL500	36	8	29
Spannweite der Rangabwertungen um > 3 Ränge von GWL100 zu GWL500	-4 ... -10	-4 ... -47	-4 ... -14
Spannweite der Rangaufwertungen um > 3 Ränge von GWL100 zu GWL500	4 ... 8	4 ... 53	4 ... 14
Spearman ρ	0.97	0.39	0.94

Im Folgenden werden die beiden Kontaminationskriterien für die beiden Grundwasserleiter miteinander verglichen (vgl. Anhang A 4.3). Der Tabelle 4.11 sind neben den Rangkorrelationskoeffizienten die absoluten Änderungen der Ränge im Stoffranking nach der ENH und der MEK zu entnehmen. Die Stoffreihung nach der ENH stimmt in beiden Grundwasserleitern wesentlich besser überein als die Stoffreihung nach der MEK.

Die großen Unterschiede in der Stoffreihenfolge nach der MEK (Tabelle 4.11) werden vor allem durch die Stoffe verursacht, die nur vereinzelt, d.h. an weniger als 10 % der Messstellen, und nur in einem Grundwasserleiter nachgewiesen werden. Im GWL500 sind sechs Substanzen nicht nachweisbar, die im GWL100 nur punktuell, aber in recht hohen Konzentrationen vorkommen. Im GWL100 hingegen ist nur eine Substanz, die im GWL500 punktuell gefunden wurde, nicht nachzuweisen. Dies zeigt, dass das Kontaminationskriterium MEK empfindlicher auf Ausreißer und Veränderungen reagiert als die ENH, da die MEK nicht mit dem gesamten statistischen Material ermittelt wird, sondern nur mit den Werten oberhalb der Relevanzgrenzen, womit z.T. eine erhebliche Reduzierung des Stichprobenumfangs einhergeht.

Berücksichtigt man bei der Berechnung der Rangkorrelation nur die 41 Stoffe, die an mehr als 10 % der Messstellen nachgewiesen werden, beträgt der Rangkorrelationskoeffizient für die ENH 0.95, für die MEK 0.97. Für diese Stoffe ist die Reihung mit beiden Kontaminationskriterien in beiden Grundwasserleitern also relativ ähnlich, die absoluten Werte können sich jedoch unterscheiden.

Stoffe, die im GWL500 seltener nachgewiesen werden als im GWL100, also im GWL100 häufiger vorkommen, werden im GWL500 in der Rangordnung bezüglich der ENH abgewertet. Die größten absoluten Unterschiede zwischen den beiden Grundwasserleitern bestehen für 1,1,1,2-Tetrachlorethan, 1,2-Dichlorethan, 1,1,1-Trichlorethan sowie für cis 1,2-Dichlorethen, deren ENH im GWL100 mehr als 10% über der ENH für den GWL500 liegt.

Auch für die BTEX-Aromaten, insbesondere für Benzen, ergibt sich durchgängig eine höhere ENH im GWL100. Dies gilt ebenfalls für die Chlorphenole sowie für 1,3-Dichlorbenzen. Die genannten Stoffe werden im GWL500 im Vergleich zum GWL100 um mindestens fünf Ränge abgewertet. Eine Aufwertung bezüglich der ENH erfolgt hingegen für 1,2,3-Trichlorbenzen, o,p-DDE und o-Chloranilin, d.h. diese Stoffe werden häufiger im GWL500 nachgewiesen. Außerdem werden im GWL500 durchgängig höhere ENH für die HCH-Isomere und die DDT/D/E-Isomere erzielt. Die absoluten Differenzen zwischen den beiden ENH betragen etwa 10 %. Bei den anderen Chlorbenzenen und LHKW unterscheiden sich die ENH um weniger als 10 %.

Höhere MEK treten im GWL500 für cis und trans 1,2-Dichlorethen, Vinylchlorid und 1,1,2,2-Tetrachlorethan auf. Auch für die HCH-Isomere, DDT-Isomere sowie die Chloraniline ergeben sich im GWL500 z.T. doppelt so hohe MEK wie im GWL100. Demgegenüber kann sich die MEK für Monochlorbenzen und die Dichlorbenzene im GWL100 im Vergleich zum GWL500 verdoppeln.

Die insgesamt etwas höhere Bedeutung der HCH-Isomere im Kontaminationsprofil für den GWL500 ist also sowohl auf eine höhere ENH als auch auf eine höhere MEK zurückzuführen. Wie das Kontaminationsprofil in Tabelle 4.10 zeigt, sind die HCH-Isomere aber auch im GWL100 und im Gesamtdatensatz von großer Wichtigkeit.

4.2.3 Zeitlich differenzierte Kontaminationsprofile für 1996 und 1997

Aufgrund der zur Verfügung stehenden Datensätze erfolgte eine Auswertung der zeitlichen Entwicklung der Kontaminationskriterien nur für die Jahre 1996 und 1997 bzw. für die Beprobungskampagnen vom Herbst 1996 und vom Sommer 1997. Allerdings unterscheiden sich auch diese beiden Datensätze hinsichtlich des untersuchten Parameterkatalogs. Während 1996 62 Einzelstoffe erhoben wurden, wurden 1997 maximal 33 Substanzen analysiert. Doch nur 32 Stoffe stimmen in beiden Jahren überein, da 1,1,2,2-Tetrachlorethan nur im Herbst 1996 und trans 1,2-Dichlorethen nur im Sommer 1997 untersucht wurden. Um die Vergleichbarkeit zwischen den beiden Kampagnen zu erhöhen, wurde der Datensatz ausgewertet, der nur die 122 Pegel enthält, die sowohl im Herbst 1996 als auch im Sommer 1997 beprobt wurden ($H96_{(H96 \cap S97)}$ bzw. $S97_{(H96 \cap S97)}$, vgl. Tabelle 3.5).

In Tabelle 4.12 sind die 15 Stoffe mit den höchsten Gesamtbewertungszahlen für die Jahre 1996 und 1997 gegenübergestellt, wobei nicht nur die identischen Stoffe aus beiden Kampagnen, sondern alle Stoffe, die in einer der beiden Kampagnen untersucht wurden, berücksichtigt wurden. 12 der ersten 15 Stoffe des Kontaminationsprofils stimmen 1996 und 1997 überein. Hoch bewertet werden in beiden Jahren Monochlorbenzen und Tetrachlorethen. Auffällige Unterschiede gibt es für Vinylchlorid, das im Herbst 1996 die meisten Bewertungspunkte erzielt, und damit an erster Stelle im Kontaminationsprofil steht, während es im Sommer 1997 erst auf Platz 23 (von 33) zu finden ist. Weiterhin befinden sich 1996 1,1,2,2-Tetrachlorethan, das im Sommer 1997 nicht untersucht wurde, und beta-HCH unter den ersten 15 Substanzen, während dies 1997 stattdessen für 1,3-Dichlorbenzen, gamma-HCH und 1,2-Dichlorethan gilt. Innerhalb der ersten 15 Stoffe erhalten Tri- und Dichlormethan sowie 1,2- und 1,4-Dichlorbenzen 1997 höhere Ränge als 1996, während alpha- und beta-HCH zurückfallen. Eine Gegenüberstellung der vollständigen Datensätze H96 und S97 ergibt nahezu identische Ergebnisse, d.h. im Herbst 1996 stimmen im vollständigen (H96) und reduzierten ($H96_{(H96 \cap S97)}$) Datensatz alle 15 Substanzen überein, im Sommer 1997 14 von 15.

Tabelle 4.12: Die ersten 15 Stoffe im Kontaminationsprofil der Datensätze H96_(H96∩S97), S97_(H96∩S97) und 9198M.

Mittleres Kontaminationsprofil Datensatz: 9198M	Kontaminationsprofil Herbst 1996 Datensatz: H96_(H96∩S97)	Kontaminationsprofil Sommer 1997 Datensatz: S97_(H96∩S97)
Monochlorbenzen	Vinylchlorid	Monochlorbenzen
Tetrachlorethen	Tetrachlorethen	Tetrachlorethen
Trichlorethen	Monochlorbenzen	1,2-Dichlorbenzen
1,2-Dichlorbenzen	Trichlorethen	Trichlormethan
Trichlormethan	alpha-HCH	Trichlorethen
1,1,1,2-Tetrachlorethan	1,1,1,2-Tetrachlorethan	Benzen
Vinylchlorid	1,2-Dichlorbenzen	1,4-Dichlorbenzen
alpha-HCH	Trichlormethan	alpha-HCH
delta-HCH	delta-HCH	delta-HCH
1,4-Dichlorbenzen	Benzen	Dichlormethan
Benzen	cis 1,2-Dichlorethen	cis 1,2-Dichlorethen
Dichlormethan	Tetrachlormethan	Tetrachlormethan
Tetrachlormethan	1,4-Dichlorbenzen	1,3-Dichlorbenzen
cis 1,2-Dichlorethen	beta-HCH	gamma-HCH
gamma-HCH	Dichlormethan	1,2-Dichlorethan

Tabelle 4.13: Absolute Rangänderungen und Spearman'sche Rangkorrelationskoeffizienten zwischen den Datensätzen H96_(H96∩S97) und S97_(H96∩S97) für ENH, MEK und BZ_{ges}. Berücksichtigt wurden 31 Stoffe, die in beiden Datensätzen untersucht und nachgewiesen wurden.

	ENH	MEK	BZ _{ges}
Anzahl identischer (± 3) Ränge zwischen 1996 und 1997	9	15	25
Spannweite der Rangabwertungen > 3 von 1996 nach 1997	-7 ... -20	-4 ... -25	-5 ... -20
Spannweite der Rangaufwertungen > 3 von 1996 nach 1997	4 ... 11	4 ... 11	4 ... 5
Spearman ρ	0.54	0.67	0.88

Die Unterschiede zwischen den Stoffreihenungen werden durch die Angabe der absoluten Rangunterschiede der Stoffe in zwei Stichproben sowie summarisch über den Rangkorrelationskoeffizienten nach Spearman erfasst. Der Rangkorrelationskoeffizient zwischen den Rangfolgen im Herbst 1996 und im Sommer 1997 ist mit 0.88 geringer als der Rangkorrelationskoeffizient zwischen den Rangfolgen in den beiden Grundwasserleitern (vgl. Tabelle 4.13 und Tabelle 4.11). Die zeitlichen Veränderungen der Kontaminationskriterien sind auf Basis der vorliegenden Daten demnach stärker als die räumliche Differenzierung der Kontaminationskriterien.

Werden die Stoffreihenfolgen beider Beprobungskampagnen anhand der beiden Kontaminationskriterien verglichen (vgl. Anhang A 4.4), treten im Sommer 1997 für beide Kontaminationskriterien höhere Abweichungen, vor allem höhere Abwertungen im Vergleich zum Herbst 1996, auf (Tabelle 4.13). In der Tendenz gibt es also im Sommer 1997 mehr Stoffe, die seltener und in geringeren mittleren Konzentrationen nachgewiesen werden als im Herbst 1996. Im Einzelnen ergibt sich folgendes Bild:

In der Stoffreihung nach der ENH ist die stärkste Abwertung um 20 Ränge für Vinylchlorid zu verzeichnen: Im Herbst 1996 wird es in mehr 90 % der Proben nachgewiesen, im Sommer 1997 in weniger als 15 %! Stark ändert sich auch die ENH der DDT-Isomere: Sie sinkt von über 80 % im Herbst 1996 auf etwa 10 % im Sommer 1997. Ebenso beträgt die ENH der DDD- und DDE-Isomere im Sommer 1997 nur 5 bis 10 %. Damit gehen Abwertungen von 7 bis 18 Rängen für die DDT/D/E-Isomere einher, nur o,p-DDE wird lediglich um 3 Ränge abgewertet. Deutliche Unterschiede von 7 Rängen gibt es auch für beta-HCH, während die anderen drei HCH-Isomere nur leicht, d.h. um bis zu 3 Ränge, abgewertet werden. Während die HCH-Isomere im Datensatz H96_(H96∩S97) sehr ähnliche ENH von etwa 90 % aufweisen, unterscheiden sie sich im Datensatz S97_(H96∩S97) stark voneinander. Die ENH von

beta-HCH sinkt auf unter 40 %, die ENH von gamma-HCH auf unter 60 %. Bei alpha- und delta-HCH ändern sich die ENH nur wenig, sind aber im Sommer 1997 insgesamt ebenfalls etwas geringer als im Herbst 1996. Demgegenüber differieren die ENH der Chlorbenzene und BTEX-Aromaten im Sommer 1997 und im Herbst 1996 nur um etwa 5 bis 10 %, wobei Monochlorbenzen und die Dichlorbenzene im Sommer 1997 häufiger als im Herbst 1996 nachgewiesen werden.

Die LHKW sind in beiden Datensätzen von großer Bedeutung: Die höchste ENH wird sowohl im Herbst 1996 als auch im Sommer 1997 für Tetrachlorethen erreicht. Auffällig ist, dass die drei- und vierfach chlorierten LHKW mit Ausnahme von 1,1,1-Trichlorethan im Sommer 1997 durchweg häufiger nachgewiesen werden als im Herbst 1996, während die ein- und zweifach chlorierten, mit Ausnahme von Dichlormethan geringere ENH aufweisen. Am stärksten, d.h. um 11 Ränge wird Trichlormethan aufgewertet, das im Sommer 1997 in mehr als 90 % der Proben nachweisbar war, während es im Herbst 1996 in etwa 70 % der Proben gefunden wurde.

Beim Kontaminationskriterium MEK stimmen die Stoffreihungen 1996 und 1997 generell etwas besser überein als bei der ENH (Tabelle 4.13). Rangabwertungen gibt es für Stoffe, die im Sommer 1997 im Mittel in geringeren Konzentrationen nachgewiesen werden als im Herbst 1996. Die stärkste Abwertung um 25 Ränge erfolgt für das Pestizid Dimethoat. Dies ist darauf zurückzuführen, dass Dimethoat im Herbst 1996 nur punktuell, im Sommer 1997 gar nicht nachweisbar war.

In der Stoffgruppe der LHKW sind die MEK für Dichlormethan, 1,2-Dichlorethan und cis 1,2-Dichlorethen in beiden Datensätzen sehr ähnlich, während die MEK der drei- und vierfach chlorierten LHKW sowie Vinylchlorid im Herbst 1996 höher sind als im Sommer 1997. Daher verlieren Trichlorethen, 1,1,1,2-Tetrachlorethan, Tetrachlormethan und Trichlormethan 7 bis 8 Ränge. Die MEK für alpha-HCH und delta-HCH sind im Sommer 1997 geringer als im Herbst 1996, während für beta- und gamma-HCH im Sommer 1997 höhere MEK erzielt werden. Auch die MEK der BTEX-Aromaten sind mit Ausnahme von Benzen im Sommer 1997 höher als im Herbst 1996. Dies gilt ebenso für die MEK der DDT/D/E-Iso-mere. Für Monochlorbenzen und die Dichlorbenzene sind keine großen Unterschiede in der MEK festzustellen.

Insgesamt unterscheiden sich Stoffrangfolgen nach den Kontaminationskriterien ENH und MEK auf der Basis der Beprobungskampagnen im Herbst 1996 und im Sommer 1997 sehr stark voneinander. In der Gesamtbewertung heben sich die Unterschiede zwischen den beiden Jahren allerdings größtenteils wieder auf. Die Rangkorrelationen sind für die Gesamtbewertungszahlen höher als für die einzelnen Kontaminationskriterien (Tabelle 4.13). Eine sehr starke Abwertung um 20 Ränge erfolgt im Kontaminationsprofil für den Sommer 1997 nur für Vinylchlorid. Beta-HCH und p,p-DDD werden um 5 Ränge abgewertet, Dichlormethan sowie 1,3- und 1,4-Dichlorbenzen hingegen entsprechend aufgewertet. Alle anderen Änderungen übersteigen 3 Ränge nicht.

4.2.4 Zusammenfassende Bewertung der verschiedenen Einflussfaktoren und Ableitung der wichtigsten Stoffgruppen und Einzelstoffe

Um die Änderungen in der Ordnung der Stoffe nach beiden Kontaminationskriterien und nach den Gesamtbewertungszahlen zu quantifizieren, wurden für verschiedene Einflussfaktoren (Relevanzgrenzen, vgl. Kapitel 4.1.2 und 4.1.3, Grundwasserleiter, vgl. Kapitel 4.2.2 und Beprobungskampagnen, vgl. Kapitel 4.2.3) Spearman'sche Rangkorrelationskoeffizien-

ten berechnet. Diese drücken die Differenzen in zwei Rangfolgen summarisch aus (vgl. Kapitel 3.3.4). Bei den Rechnungen blieben die neun Substanzen unberücksichtigt, die gar nicht nachgewiesen wurden. Als Referenzvariante diente jeweils die Stofffreihung aus dem Datensatz 9198M mit den Nachweisgrenzen als Relevanzgrenzen, die in Abbildung 4.1, Abbildung 4.2 und Tabelle 4.6 dargestellt ist.

In der Tabelle 4.14 sind alle Rangkorrelationskoeffizienten zusammengestellt. Die beste Übereinstimmung besteht zwischen den Reihungen im Durchschnittsdatensatz 9198M (RG = NWG) und in der Beprobungskampagne Herbst 1996, die schlechteste zwischen den Reihungen im Durchschnittsdatensatz 9198M mit RG = NWG und RG = 10 µg/l. Bei einer RG von 10 µg/l ist eigentlich keine Korrelation mit der ursprünglichen Ordnung mehr sichtbar. Dies schlägt sich in sehr kleinen Rangkorrelationskoeffizienten nieder.

Tabelle 4.14: Spearman'sche Rangkorrelationskoeffizienten ρ zwischen den Stoffreihungen bezüglich der Emissions-Nachweishäufigkeit (ENH), der mittleren Emissionskonzentration (MEK) und der Gesamtbewertungszahl (BZ_{ges}) in verschiedenen Teildatensätzen (p = Anzahl der untersuchten Stoffe, n_{max} = Anzahl der maximal untersuchten Messstellen).

	Referenzdatensatz: 9198M (RG = NWG)				
	ρ (ENH)	ρ (MEK)	ρ (BZ_{ges})	p	n_{max}
9198M, RG \geq 0.1 µg/l	0.87	0.97	0.94	54	377
9198M, RG \geq 1 µg/l	0.64	0.62	0.83	54	377
9198M, RG = 10 µg/l	0.46	0.13	0.82	54	377
9198M_GWL100	0.99	0.84	0.99	54	236
9198M_GWL500	0.99	0.54	0.97	54	140
H96_(H96∩S97)	0.97	0.98	0.99	53	122
S97_(H96∩S97)	0.76	0.67	0.92	32	122

Insgesamt wirkt sich eine Erhöhung der Relevanzgrenzen auf 1 µg/l und 10 µg/l stärker auf die Stofffreihungen aus als die zeitlich differenzierte Bewertung und noch stärker als die räumlich nach den Grundwasserleitern differenzierte.

Die Rangkorrelationskoeffizienten zwischen GWL100 und Gesamtdatensatz 9198M sind jeweils etwas höher als für den GWL500, da in den Gesamtdatensatz mehr Messstellen aus dem GWL100 eingehen. Für die ENH und die Gesamtbewertungszahlen bestehen sehr gute Korrelationen zwischen den Teildatensätzen und dem Gesamtdatensatz sowie auch zwischen den beiden Grundwasserleiter-Teildatensätzen (Tabelle 4.11, Tabelle 4.14). Für die MEK fallen die Korrelationen durchweg niedriger aus. Der Gesamtdatensatz repräsentiert insgesamt die Bewertung nach GWL100 und GWL500 gut, so dass die Datensätze in den nachfolgenden statistischen Analysen nicht nach Grundwasserleitern unterteilt ausgewertet werden müssen. Einen stärkeren Einfluss auf die Stoffbewertung hat die zeitliche Komponente. Daher werden im folgenden Kapitel nur zeitlich differenzierte Teildatensätze aus den Beprobungskampagnen H96 und S97 betrachtet.

Generell erhält man für die ENH und die Gesamtbewertungszahlen bessere Rangkorrelationskoeffizienten als für die MEK. Wie in den vorangegangenen Kapiteln (insbesondere in den Kapiteln 4.1.3 und 4.2.2) deutlich wurde, beeinflussen punktuell nachgewiesene Stoffe die MEK stark. Sie ist daher ein empfindlicheres und unsichereres Kriterium als die ENH.

Ableitung regional relevanter Stoffgruppen und Einzelstoffe

Wie die Ausführungen zeigen, sind nicht alle Stoffe, die im Monitoring untersucht wurden, für das ganze Untersuchungsgebiet relevant. In die nachfolgenden statistischen Auswertun-

gen sollen daher nur die Stoffe der wichtigsten Stoffgruppe sowie relevante Einzelstoffe aus verschiedenen Stoffgruppen eingehen (vgl. Abbildung 1.2).

Die wichtigste Stoffgruppe wird nach folgenden Kriterien ausgewählt: Die Stoffgruppe sollte insgesamt den höchsten bzw. einen sehr hohen Rang für beide Kontaminationskriterien erreichen. Tabelle 4.8 und Tabelle 4.9 zeigen, dass dies auf die Stoffgruppe der LHKW zutrifft. Weiterhin sollten möglichst viele Einzelverbindungen unter den ersten 15 Substanzen im Kontaminationsprofil zu dieser Stoffgruppe gehören. Dies sollte sowohl für den Gesamtdatensatz 9198M als auch für beide Grundwasserleiter als auch für die Zeitschnitte im Herbst 1996 und Sommer 1997 gelten. Wie Tabelle 4.10 und Tabelle 4.12 zu entnehmen ist, befinden sich stets 6 bis 8 LHKW unter den ersten 15 Substanzen im Kontaminationsprofil, bei den Chlorbenzenen trifft dies auf 3-4 Substanzen zu, für HCH auf 2-4 Isomere und für die BTEX-Aromaten nur auf Benzen. Außerdem haben die LHKW, wie die Chlorbenzene und die BTEX-Aromaten eine hohe räumliche Ausdehnung, d.h. sie werden in allen untersuchten Teilgebieten angetroffen (Abbildung 4.8).

Die LHKW gehören zu den am besten untersuchten Stoffen in der Region Bitterfeld-Wolfen (vgl. Anhang A 3.1). Sechs dieser Substanzen wurden im Zeitraum 1991-1998 in mehr als 700 Grundwasserproben und in 371 verschiedenen Messstellen untersucht. In den Datensätzen H96 und S97 wurden insgesamt 10 der maximal 12 Substanzen an allen Proben untersucht. Für 1996 fehlen die Daten für trans 1,2-Dichlorethen, 1997 wurde 1,1,2,2-Tetrachlorethan nicht berücksichtigt.

Darüber hinaus haben LHKW allgemein eine große Bedeutung bei Grundwasserverunreinigungen durch Altablagerungen. Dies ist u.a. den Untersuchungen von Plumb (1992) und Kerndorff et al. (1993) zu entnehmen (Tabelle 4.2). Damit können die Ergebnisse der statistischen Strukturanalyse auch für andere Standorte und Regionen interessant sein.

Die Auswahl der wichtigsten Einzelverbindungen erfolgt nach ähnlichen Kriterien: hoher Rang im Kontaminationsprofil, Bedeutung für beide GWL und Zeitschnitte, regionale und internationale Bedeutung. Neben den LHKW sollten auch Vertreter anderer Stoffgruppen ausreichend berücksichtigt werden. Folgende Substanzen befinden sich stets unter den ersten 15 Stoffen im Kontaminationsprofil und werden daher für die statistische Strukturanalyse ausgewählt: Benzen, Monochlorbenzen, 1,2- und 1,4-Dichlorbenzen, alpha- und delta-HCH, Tetra-/Trichlorethen sowie Tri-/Dichlormethan. Wie dem Anhang A 3.1 zu entnehmen ist, liegt für diese Stoffe eine gute Datenlage vor.

4.3 Diskussion

Um Stoffe zu identifizieren, die für die Grundwasserkontamination der Region Bitterfeld-Wolfen repräsentativ sind, wurde ein Stoffranking in Anlehnung an das Verfahren zur Ableitung von Hauptkontaminanten nach Kerndorff et al. (1993) modifiziert angewendet, auf Sensitivität geprüft und durch die Methoden der Clusteranalyse und Hasse-Diagramm-Technik ergänzt.

Kontaminationsprofile der Region Bitterfeld-Wolfen im Vergleich

Mit dem Verfahren nach Kerndorff et al. (1993) werden durch die Kontaminationskriterien Emissions-Nachweishäufigkeit (ENH) und mittlere Emissionskonzentration (MEK) Stoffe identifiziert, die sowohl häufig als auch in hohen Mengen im Grundwasser, das durch Sickerwasseremissionen aus Altablagerungen beeinflusst wird, vorkommen. Die Aus-

wertungen von Beispieldatensätzen aus dem Grundwassermonitoring in der Region Bitterfeld-Wolfen zeigen, dass die Methode auch geeignet ist, um ein Kontaminationsprofil einer regionalen Grundwasserkontamination, die durch Emissionen aus Altlastenclustern verursacht wird, zu erstellen. Aus der Reihung nach der Gesamtbewertungszahl, d.h. dem Kontaminationsprofil, kann die Relevanz von Stoffen für den Ausbreitungspfad Grundwasser abgeleitet werden.

Aus den Ergebnissen wird deutlich, dass vor allem chlorierte Methane, Ethane und Ethene (LHKW), Chlorbenzene, BTEX-Aromaten sowie HCH- und DDT/D/E-Isomere für die Grundwasserkontamination der Region Bitterfeld-Wolfen regional relevant sind. Die Vertreter anderer Stoffgruppen sind hingegen nur lokal verbreitet (Abbildung 4.8). Ein Vergleich dieser Ergebnisse mit den Kontaminationsprofilen aus „durchschnittlichen“ Altablagerungen in Westdeutschland (Kerndorff et al., 1993) und den USA (Plumb, 1992) zeigt, dass in allen Untersuchungen LHKW, Monochlorbenzenen, Dichlorbenzene sowie Benzen für den Ausbreitungspfad Altablagerung – Sickerwasser - Grundwasser charakteristisch und relevant sind. Diese Substanzen sind als Lösemittel weit verbreitet und sind darüber hinaus mobil und persistent, so dass schnelle Ausbreitung und geringer Abbau einen weiten Transport im Grundwasser gewährleisten. Das Vorkommen gering chlorierter und hoch flüchtiger LHKW, wie Vinylchlorid oder cis 1,2-Dichlorethen, im Grundwasser wird im Allgemeinen nicht auf einen Primäreintrag zurückgeführt, sondern auf den Abbau höher chlorierter Ethene (vgl. Kapitel 3.2). In einer Industrieregion wie Bitterfeld-Wolfen ist jedoch ein punktueller Eintrag durch Havarien nicht auszuschließen.

Neben den Gemeinsamkeiten gibt es auch gravierende Unterschiede zwischen den drei Datensätzen. In Bitterfeld-Wolfen gibt es standortspezifische Stoffe, wie HCH- und DDT/D/E-Isomere, die in den Untersuchungen von Kerndorff et al. (1993) und Plumb (1992) kaum Bedeutung erreichen, aber in Bitterfeld-Wolfen im Grundwasser flächenhaft auftreten. Demnach sollten auch Altablagerungen nicht nur auf standardisierte Stoffe untersucht werden. Gerade bei Sondermülldeponien darf die Erkundung auf eine historische Recherche der Produktionsmuster und auf ein standortspezifisches Untersuchungsprogramm nicht verzichten. Diese standortspezifischen Verunreinigungen, die aufgrund der physikochemischen Eigenschaften der Stoffe zunächst unwahrscheinlich erscheinen, sind noch zu diskutieren (s.u.).

Die Unterschiede in den Kontaminationsprofilen für das Grundwasser in Bitterfeld-Wolfen einerseits sowie für Altablagerungen in Westdeutschland und den USA andererseits müssen auf die verschiedenen Skalenebenen der Untersuchungen zurückgeführt werden. Trotz einer Vielzahl verschiedener Altablagerungen und Altstandorte sind die Kontaminationen in Bitterfeld-Wolfen insgesamt sicher homogener als die untersuchten Emissionen von Altablagerungen in Westdeutschland und den USA. Dort wurden viele, weit voneinander entfernte, aber eher lokale Standorte mit unterschiedlicher Genese, geologischen Verhältnissen etc. untersucht (Kerndorff et al., 1993).

Die Einordnung der Kontaminationen in Bitterfeld-Wolfen wird durch den Vergleich mit den Werten aus Kerndorff et al. (1993) ermöglicht (vgl. Kapitel 4.1.2 und 4.1.3): Die wesentlich höheren ENH (Tabelle 4.2) bedeuten, dass die Region weiträumig (ubiquitär) kontaminiert ist. Dies ist auf die zahlreichen Eintragsquellen und auf die vermutlich bereits lang anhaltende Eintragsdauer von Schadstoffen zurückzuführen. Dass die MEK im Datensatz 9198M i.a. niedriger ist als im Datensatz WD93 (Tabelle 4.4), kann damit erklärt werden, dass im Datensatz 9198M nicht nur auf Grundwassermessstellen im unmittelbaren Abstrom von Altablagerungen zurückgegriffen wurde. Dadurch wurden Messstellen einbezogen, die

durch Verdünnungseffekte und/oder diffuse Einträge nur gering belastet sind. Durch den bereits lang anhaltenden Stoffeintrag ist es zudem möglich, dass Mikroorganismen im Grundwasser in Bitterfeld-Wolfen so gut adaptiert sind, dass ein hohes biologisches Potenzial zum Abbau der Stoffe vorhanden ist.

Standortspezifische Grundwasserverunreinigungen durch HCH- und DDT-Isomere

Die hohe ENH von HCH- und DDT/D/E-Isomeren im Grundwasser der Region Bitterfeld-Wolfen ist sowohl auf Emissionen dieser Stoffe während der Produktion (z.B. durch Abwässer), als auch auf die umfangreiche Deponierung von Produktionsrückständen und Fehlchargen in Tagebaurestlöchern zurückzuführen. Trotz eines ähnlichen Produktionsumfangs von HCH und DDT werden die HCH-Isomere häufiger und in höheren mittleren Konzentrationen im Grundwasser gefunden als DDT/D/E-Isomere. Dies ist zum einen auf die enorme Menge an Produktionsrückständen bei der Lindanproduktion (vgl. Abbildung 2.6), zum anderen auf die höhere Mobilität der HCH-Isomere zurückzuführen.

Im Vergleich zu den DDT-Isomeren sind die HCH-Isomere wasserlöslicher und flüchtiger (vgl. Anhang A 3.5 und A 3.6), was ihre weltweite Verbreitung in den Umweltkompartimenten Wasser, Luft, Sedimente und Biomasse erklärt (Willett et al., 1998). Außerdem können HCH-Isomere durch gelöste organische Substanz (*dissolved organic matter* = DOM) mobilisiert und z.B. in der Muldeau in große Tiefen verlagert werden (Kalbitz & Knappe, 1997). Weiterhin wurde an der Grube Antonie festgestellt, dass HCH-Isomere durch Chlorbenzene und LHKW, die als Lösemittel für die HCH-Isomere dienen, mobilisiert werden (Krapp et al., 1993).

Die Zusammensetzung des technischen DDT-Gemisches (Tabelle 2.4) spiegelt sich in den ENH im Grundwasser wider: DDT wird häufiger als DDD nachgewiesen und beide häufiger als DDE. Prinzipiell werden die p,p-Isomere häufiger nachgewiesen als die entsprechenden o,p-Isomere (Abbildung 4.1). Die hohen Anteile von DDT im Verhältnis zu DDE, einem Abbauprodukt, könnten darauf hinweisen, dass DDT weiterhin in das Grundwasser eingetragen wird oder der Abbau von DDT zu DDE nur sehr langsam stattfindet. So zeigen Herberer & Dünnebier (1999), dass am DDT-Produktionsstandort Berlin-Chemie DDA das bevorzugte persistente Abbauprodukt von DDT im Wasser ist (Abbildung 3.10). Um einen besseren Einblick in den Abbau von DDT zu bekommen, wären gezielte Untersuchungen notwendig, die die Analyse von DDA einschließen sollten.

Bei den HCH-Isomeren treten im Vergleich zum technischen Gemisch (Tabelle 2.5) deutliche Verschiebungen bei der Häufigkeit der nachgewiesenen Isomere auf. So kommt delta-HCH nur zu durchschnittlich 6 % im technischen Gemisch vor, weist aber im Datensatz 9198M die höchste MEK und eine höhere ENH als gamma- und beta-HCH auf, obwohl letztere mit höheren Anteilen im technischen Gemisch vorhanden sind (14 % bzw. 8 %). Wie Anhang A 3.5 und A 3.6 zu entnehmen ist, sind die Unterschiede der physikochemischen Eigenschaften zwischen den DDT/D/E-Isomere relativ klein, während die HCH-Isomere deutlich im Verhalten differieren. So kann der geringere Nachweis von beta-HCH im Grundwasser durch die bessere Adsorption (das geringere Transferpotenzial) im Vergleich zu den anderen HCH-Isomeren erklärt werden. In den Sedimenten der Muldeau hingegen wird beta-HCH häufiger und in höheren Gehalten als die anderen Isomere nachgewiesen (Kalbitz & Knappe, 1997). Der höhere Anteil von delta-HCH im Grundwasser ist auf sein höheres Transferpotenzial zurückzuführen. Die physikochemischen Eigenschaften gleichen denen des alpha-Isomers, das ebenfalls sehr häufig nachgewiesen wird.

Einfluss der Relevanzgrenzen auf die Kontaminationskriterien

In einer Sensitivitätsanalyse (vgl. Kapitel 4.1.2 und 4.1.3) wurde untersucht, wie sich die systematische Anhebung der Relevanzgrenzen auf die beiden Kontaminationskriterien auswirkt. Beim Kontaminationskriterium ENH fallen durch Anhebung der Relevanzgrenzen Substanzen zurück, die in geringen Konzentrationen im Grundwasser auftreten. Aus dem Wegfall der niedrigen Konzentrationen resultieren dann höhere Werte für das Kontaminationskriterium MEK. In der Gesamtbewertung des Kontaminationsprofils fallen diese Stoffe schließlich deutlich zurück. Das Heraufsetzen der Relevanzgrenzen kann demnach dazu führen, dass persistente Stoffe, die häufig, aber in geringen Konzentrationen im Grundwasser vorkommen (vor allem Stoffe aus den Clustern 2 und 4) nicht mehr erfasst werden. Da diese Stoffe z.T. erhebliche Umweltrelevanz (Toxizität) besitzen, sollte bei Untersuchungen auf eine empfindliche Nachweisgrenze geachtet werden. Eine RG von 1 µg/l ist gegenwärtig nicht mehr akzeptabel, da gängige Bewertungsmaßstäbe z.T. unter diesem Wert liegen: Zum Beispiel betragen die Geringfügigkeitsschwellen für Vinylchlorid 0.5 µg/l, für Pestizide 0.1 µg/l und für PCB oder Benzo(a)pyren sogar nur 0.01 µg/l (Röder et al., 1999, Tabelle 4.3).

Außerdem zeigt die Sensitivitätsanalyse, dass die MEK empfindlicher reagiert als die ENH. Da in die Bestimmung der MEK nur Werte eingehen, die über den Relevanzgrenzen liegen, reicht der Stichprobenumfang oftmals nicht aus, um den Median (MEK) sicher zu bestimmen. Dafür bieten sich folgende Lösungen an:

1. Die MEK wird nur für Stoffe mit einer bestimmten ENH ermittelt (z.B. ENH > 10 %) oder mit einer bestimmten Anzahl von Nachweisen (z.B. > 5 oder 10). Damit werden jedoch Stoffe von der Gesamtbewertung ausgeschlossen.
2. Anstelle der MEK werden ENH mit verschiedenen Relevanzgrenzen betrachtet. Die systematische Anhebung der Relevanzgrenzen von 0.1 µg/l auf 10 µg/l veranschaulicht gut die statistische Verteilung der Stoffe. Deshalb könnte eine Gesamtbewertung von Stoffen auch allein auf Grundlage von ENH erfolgen, die mit unterschiedlichen Relevanzgrenzen (z.B. RG = NWG, RG = 1 µg/l, RG = 10 µg/l) ermittelt werden. In die Wahl der höheren Relevanzgrenzen könnten sanierungsrelevante oder toxikologische Orientierungswerte in Anlehnung an Tabelle 4.3 einfließen. Da eine ENH max. 100 % erreichen kann, könnte die Normierung der Kontaminationskriterien entfallen. Damit wären Ergebnisse unterschiedlicher Standorte oder Regionen besser vergleichbar. Allerdings zeigt z.B. Tabelle 4.3, dass es nur wenige Orientierungswerte für Einzelstoffe gibt. Meistens existieren solche Bewertungsmaßstäbe nur summarisch für Stoffgruppen.
3. Alle Stoffe durchlaufen das Verfahren, aber unsichere MEK werden gekennzeichnet und durch Clusteranalyse oder HDT von den anderen Stoffen separiert. Diese Vorgehensweise wurde in der vorliegenden Arbeit verfolgt und bereichert das Verfahren von Kerndorff et al. (1993).

Ergänzung der Kontaminationsprofile durch Clusteranalysen und Hasse-Diagramm-Technik

Eine Sortierung der Stoffe nach der MEK ergibt eine andere Reihenfolge als eine Sortierung anhand der ENH. Beispielsweise fallen die HCH-Isomere und DDT/D/E-Isomere in der Reihung der MEK stark zurück, während viele Substanzen mit geringen ENH hohe MEK erreichen (vgl. Abbildung 4.1 in Kapitel 4.1.2 und Abbildung 4.2 in Kapitel 4.1.3). Auch bei Stoffen mit hohen ENH sind Veränderungen in der Reihung nach der MEK festzustellen: Bei den Chlorbenzenen nehmen die MEK in etwa mit höherem Chlorierungsgrad ab, während bei den ENH z.B. die Tetrachlorbenzene zu den 15 am häufigsten nachgewiesenen Stoffen

gehören und damit wesentlich häufiger als die Tri- und z.T. die Dichlorbenzene nachgewiesen werden.

Bei den LHKW können ebenfalls sinkende MEK mit steigendem Chlorierungsgrad konstatiert werden: So ergibt sich für die MEK eine Rangfolge Dichlormethan > Trichlormethan > Tetrachlormethan. Ebenso weisen bei den chlorierten Ethenen und Ethanen tendenziell die ein- oder zweifach chlorierten Verbindungen höhere MEK auf als die drei- und vierfach chlorierten. Diese Tendenz ist bei den ENH genau umgekehrt: Hier werden Tri- und Tetrachlorethen sowie Tri- und Tetrachlormethan häufiger nachgewiesen als die entsprechenden di- und monochlorierten Verbindungen (vgl. Abbildung 4.1 und Abbildung 4.2.).

In einem Kontaminationsprofil werden Stoffe, die eine geringe ENH, aber eine hohe MEK haben, genauso bewertet wie Stoffe mit einer hohen ENH und einer geringen MEK. Über Eintragsquellen und das Umweltverhalten der Stoffe sagen diese beiden Konstellationen jedoch unterschiedliche Dinge aus. Um das Zusammenwirken der beiden Kontaminationskriterien zu charakterisieren und um daraus Rückschlüsse auf das Umweltverhalten der Stoffe zu ziehen, ist es sinnvoll, ein Kontaminationsprofil durch andere Rankingmethoden zu ergänzen.

Durch den Einsatz von Clusteranalysen und der Hasse-Diagramm-Technik (HDT) können unterschiedliche Stoffgruppen identifiziert werden (vgl. Kapitel 4.1.5). Stoffe, die sowohl häufig als auch in hohen Konzentrationen im Grundwasser vorkommen, besitzen ein hohes Transfer- und Persistenzpotenzial: Sie sind gut wasserlöslich, adsorbieren gering und werden wenig abgebaut; sie gelangen in großem Umfang ins Grundwasser und tendieren zur weiten Ausbreitung bei kurzen Ausbreitungszeiten (SRU, 1995). Daher erhalten sie für ENH und MEK hohe Bewertungszahlen und befinden sich an der Spitze des Kontaminationsprofils. In der Clusteranalyse mit den Kontaminationskriterien aus dem Datensatz 9198M werden diese Stoffe im Cluster 1 (Tabelle 4.7) zusammengefasst. Dass sich im Cluster 1 auch alpha-HCH und delta-HCH wiederfinden, macht deutlich, dass die physikochemischen Eigenschaften nicht allein das Vorkommen eines Stoffes im Grundwasser erklären.

Auch die Eintragsmuster (diffuse, punktuelle Quellen, Eintragsdauer, Mengen etc.) sind von großer Wichtigkeit. So deuten Substanzen mit hoher ENH nicht nur auf ein hohes Transfer- und Persistenzverhalten hin, sondern auch auf eine lange Produktions- oder Anwendungsdauer. Beispielsweise nennen Müller-Wegener et al. (1993) als standortunabhängige Faktoren für das Vorkommen von Pestiziden im Grundwasser neben der Löslichkeit und einer ausreichenden Persistenz der Substanzen auch die Anwendungsdauer der Wirkstoffe. Auch Dobel et al. (2000) konnten das aus den gemessenen Daten resultierende Ranking über Pestizide in Fließgewässern durch ein Rankingmodell, in das neben Oktanol-Wasser-Verteilungskoeffizienten auch Gebrauchsdaten der Pestizide einfließen, zu 89 % erklären. Übertragen auf die Industrieregion Bitterfeld-Wolfen heißt das, dass die Substanzen mit hoher ENH "alte" Substanzen sind, die seit langem und in vielen Werksbereichen eingesetzt wurden oder die in großen Mengen abgelagert wurden, wodurch ihre Verbreitung in der Umwelt begünstigt wird. Substanzen mit niedriger ENH sind dagegen "neue" Substanzen, d.h. ihre Produktion und Verwendung war zeitlich (oder räumlich) eingeschränkt. Da eine Datengrundlage zum Stoffumgang und zu den Deponieinhalten weitgehend fehlt, können die hier erzielten Rankingergebnisse nicht vollständig erklärt werden.

Um Eintragsmuster zu identifizieren, sind die summarischen Kontaminationskriterien nicht ausreichend, dazu ist eine räumlich differenzierte Betrachtung notwendig. Dennoch kann folgende grobe Einteilung vorgenommen werden:

Die Stoffe in den Clustern 2 bis 5 (Tabelle 4.7) weisen z.T. enorme Diskrepanzen zwischen den Bewertungszahlen für die ENH und die MEK auf. Aufgrund der Zusammensetzung der MEK und ENH sowie der physikochemischen Eigenschaften der Stoffe lassen sich die Cluster folgendermaßen charakterisieren. Die hohen ENH, aber geringen MEK der Stoffe in den Clustern 2 und 4 deuten darauf hin, dass die Stoffe mit Halbwertszeiten von mehr als 100 Jahren (vgl. Abbildung 3.5) zwar sehr persistent sind, aber in geringeren Konzentrationen ins Grundwasser gelangen, da sie nicht so mobil sind. In diese Gruppe gehören beispielsweise DDT, das schlecht wasserlöslich ist, oder beta-HCH, das besser als die anderen HCH-Isomere im Boden und in der ungesättigten Zone adsorbiert wird (vgl. Anhang A 3.5 und A 3.6) und in geringeren Mengen im technischen HCH-Gemisch, also auch in den Abfallstoffen der Deponien vorkommt (Tabelle 2.5). Diese Substanzen haben daher tendenziell ein geringes Transfer-, jedoch ein hohes Persistenzpotenzial. Ihre physikochemischen Eigenschaften unterscheiden sich deutlich von denen anderer Stoffe (Abbildung 4.7). Langfristig ist dennoch mit einer signifikanten Ausbreitung dieser Stoffe zu rechnen (SRU, 1995). Um solche Gefährdungspotenziale zu identifizieren, ist bei diesen Stoffen vor allem auf eine empfindliche analytische Nachweisgrenze zu achten. Wie die Sensitivitätsanalyse in Kapitel 4.1.2 zeigt, fallen insbesondere die HCH- und DDT/D/E-Isomere bei hohen Relevanzgrenzen im Kontaminationsprofil stark zurück (Tabelle 4.2).

Stoffe in den Clustern 3 und 5 gelangen vermutlich in großen Mengen in die Umwelt und erreichen daher hohe Werte für die MEK. Die gleichzeitig geringen ENH weisen jedoch auf punktuelle Einträge hin. Sie können weiterhin ein Indiz dafür sein, dass diese Stoffe relativ gut im Grundwasser abgebaut werden (natural attenuation). Zum Beispiel wird Dichlormethan häufig an Altstandorten und Altablagerungen im Grundwasser festgestellt, aber es verursacht - im Gegensatz zu Tri- und Tetrachlorethen - keine Probleme bei der Trinkwassergewinnung (Roth, 1982). Stoffe mit eher geringem Transfer- und Persistenzpotenzial sind auch in sehr langen Zeiträumen nur im unmittelbaren Deponienahbereich existent (SRU, 1995). Allerdings muss diese pauschale Aussage durch die Untersuchung der Eintragsmuster, vor allem der Eintragsdauer, belegt werden.

Mit der Hasse-Diagramm-Technik können sowohl Einzelstoffe als auch Clusterzentren geordnet werden. Durch Letzteres werden die Ergebnisse aus dem Kontaminationsprofil und der Clusteranalyse zusammengeführt. Stoffe mit hohem Persistenz- und Transferpotenzial sind im Hasse-Diagramm auf einem hohen Level zu finden und haben gleichzeitig viele Nachfolger, d.h. sie sind mit vielen anderen Stoffen vergleichbar und daher besonders repräsentativ für das Untersuchungsgebiet. Eine geringe Repräsentativität eines Stoffes kann man im Hasse-Diagramm durch eine geringe Vernetzung mit anderen Stoffen oder genauer durch den D-Wert (vgl. Kapitel 3.2.2) bestimmen. Diese Stoffe sind nur lokal verbreitet (vgl. Abbildung 4.6 und Abbildung 4.8) und daher bei einer regionalen Betrachtung zu vernachlässigen.

Einfluss der Stichprobenauswahl auf die Kontaminationskriterien

Des Weiteren wurden die Kontaminationskriterien räumlich und zeitlich diskretisiert (vgl. Kapitel 4.2). Dabei sind große Unterschiede zwischen den Beprobungskampagnen im Herbst 1996 und im Sommer 1997 festgestellt worden, die sich in der Gesamtbewertung allerdings größtenteils wieder aufheben. Besonders starke Schwankungen treten für Vinylchlorid sowie für die DDT/D/E-Isomere auf. Aber auch bei vielen anderen Stoffen ist im Sommer 1997 die ENH oder die MEK kleiner als im Herbst 1996. Dies könnte jahreszeitlich bedingt sein oder auf den Abbau der Stoffe hinweisen. Um diese Dynamik besser zu verstehen, ist eine Beprobung einzelner Messstellen in kürzeren Zeitintervallen im Jahresgang notwendig.

Geringere ENH und MEK können zudem durch Fehler bei der Probenahme und der Analytik entstehen. Die hohen Lufttemperaturen im Sommer 1997 könnten ein verstärktes Ausgasen der flüchtigen Substanzen hervorgerufen haben. Insbesondere bei Vinylchlorid kommt es aufgrund der hohen Flüchtigkeit schnell zu gravierenden Verlusten: So verursacht ein einmaliges Umfüllen einer Wasserprobe bis zu 20 % Verlust des Vinylchlorids (Nerger, 1990).

Insgesamt lassen sich aus den Ergebnissen einige Empfehlungen für das Monitoring ableiten: Von den Stoffen, die im Sommer 1997 nicht mehr untersucht wurden, erreicht 1,1,2,2-Tetrachlorethan im Herbst 1996 über 5200 Bewertungspunkte und belegt damit insgesamt den fünften Platz (Tabelle 4.12). Daher sollte dieser Stoff weiterhin im Monitoring berücksichtigt werden. Alle Tri- und Tetrachlorbenzene werden mit mehr als 1000, z.T. sogar mehr als 2000 Punkten bewertet. Diese Substanzen erhalten im Herbst 1996 vor allem für die ENH eine hohe Bewertungszahl, während die MEK relativ gering sind. Wie in Kapitel 3.1.1 erläutert wurde, werden die Einzelstoffanalysen der Chlorbenzene z.T. nicht digital erfasst. Damit geht wertvolle Information über die stoffliche Zusammensetzung der Kontamination verloren. Da diese zu den persistenten Stoffen mit geringem Transferpotenzial, die sich langfristig ausbreiten können, gehören (s.o.), läuft man Gefahr, langfristige Gefahrenpotenziale zu übersehen.

Außerdem existieren Unterschiede zwischen den stofflichen Belastungen im quartären und tertiären Grundwasserleiter. Dominanter im GWL500 sind die HCH- und DDT/D/E-Isomere und die mehrfach chlorierten Chlorbenzene. Dies kann durch direkten Eintrag von Sickerwasser aus den Deponien erklärt werden. Krapp & Ruske (1992) betonen, dass die chemische Belastung des tertiären Grundwasserleiters aufgrund der geringeren Verdünnungseffekte, der niedrigeren Fließgeschwindigkeiten und der stärkeren Adsorption an Tonpartikeln und Kohlefragmenten höher ist als im quartären Grundwasserleiter.

Toxikologische Aspekte

Das Kontaminationsprofil beinhaltet keine toxikologische Stoffbewertung. Eine Gefährdungs- oder Risikoabschätzung für die Region war nicht Ziel dieser Arbeit, könnte aber auf den Ergebnissen dieser Arbeit aufbauen. So können die Gesamtbewertungszahlen aus dem Kontaminationsprofil durch toxikologische Bewertungszahlen ergänzt werden. Solche Bewertungszahlen stellen Dieter et al. (1990) für eine humantoxikologische Gefährdung durch eine Trinkwassernutzung bereit. Dabei erhalten z.B. die humankarzinogenen Stoffe Tetrachlormethan, Benzen, 1,2-Dichlorethan und Vinylchlorid 100 Bewertungspunkte, es folgen Trichlormethan, Fluoranthren, Tetrachlorethen und 1,1,2,2-Tetrachlorethan mit etwa 70 Punkten. Bei den letztgenannten Stoffen besteht aufgrund von Tierversuchen ein begründeter Verdacht auf karzinogene Wirkung. Außerdem wirken diese Substanzen vergleichsweise stark akut und chronisch toxisch. Stoffe, wie Monochlorbenzen und cis 1,2-Dichlorethen konnten aufgrund der unzureichenden Datenlage durch das Verfahren von Dieter et al. (1990) nicht bewertet werden. Auch Balzereit & Wegener (1995) stufen Benzen und Vinylchlorid als sehr gefährliche Stoffe ein, Monochlorbenzen, Trichlorethen, Trichlormethan u.a. als gefährliche Stoffe. Diese verkürzte Auflistung belegt, dass die ersten Stoffe im Kontaminationsprofil der Grundwasserbelastung in Bitterfeld-Wolfen auch hohe toxikologische Relevanz besitzen (vgl. Tabelle 4.6).

In die Verfahren von Dieter et al. (1990) und Balzereit & Wegener (1995) gehen hauptsächlich humantoxikologische Aspekte ein. In der Region Bitterfeld-Wolfen gibt es jedoch nicht nur Trinkwassergewinnungsanlagen, die durch den Schadstoffeintrag gefährdet sind. Auf lange Sicht werden Hauptpunkte bei der Gesamtbewertung der Grundwasserkontamination die

Gefährdung aquatischer Lebensgemeinschaften in den Abstrombereichen sowie die Risiken der Brauchwassergewinnung (Kleingartennutzung, Bewässerung) sein. Für diese Nutzungen fehlen bislang Bewertungsmaßstäbe. Sie müssen jedoch für eine umfassende human- und ökotoxikologische Risikobewertung entwickelt werden.

5 Statistische Strukturanalyse: Ergebnisse und Diskussion

In diesem Kapitel werden den Messdaten zugrunde liegende Kontaminationsfaktoren und räumliche Verbreitungsmuster dargestellt. Dies soll die Zusammensetzung und Ausbreitung der Kontamination verdeutlichen, eventuell Eintragsquellen identifizieren und darüber hinaus Hinweise liefern, welche Parameter messtechnisch durch andere ersetzt werden können.

Drei verschiedene Merkmalsgruppen wurden mit den statistischen Verfahren der Korrelations-, Hauptkomponenten- und Clusteranalyse untersucht (vgl. Abbildung 1.2): Eine summarische Betrachtung beinhaltet Vor-Ort-Parameter, Summenparameter sowie die Summenangaben für die Stoffgruppen LHKW, BTEX-Aromaten, Chlorbenzene und HCH-Isomere. In Kapitel 4.2.1 wurde gezeigt, dass diese Stoffgruppen eine regionale Verbreitung im Untersuchungsgebiet haben. Anschließend werden die stoffgruppenübergreifenden Beziehungen anhand der in Kapitel 4.2.4 ausgewählten Einzelstoffe betrachtet. Schwerpunkt der Untersuchung bildet die Stoffgruppe der LHKW. Diese ist sowohl in Bitterfeld-Wolfen als auch international von herausragender Bedeutung für Grundwasserverunreinigungen.

Kontaminationsfaktoren und räumliche Muster werden zunächst mit dem Datensatz H96 (vgl. Tabelle 3.5) bestimmt. In den nachfolgenden Stabilitätsuntersuchungen wurde (insbesondere für die LHKW) untersucht, wie stabil Kontaminationsfaktoren und räumliche Muster sind, wenn unterschiedliche Teildatensätze ausgewertet werden. Dafür wurden für die Beprobungskampagne Herbst 1996 (Datensatz H96) im Stichprobenumfang reduzierte Datensätze herangezogen. Außerdem wurde die zeitliche Stabilität durch einen Vergleich mit dem Datensatz S97 (vgl. Tabelle 3.5) bestimmt. Darüber hinaus wurde geprüft, ob Kontaminationsfaktoren sich ändern, wenn nur Werte oberhalb der analytischen Nachweisgrenzen betrachtet werden. Wie aus Kapitel 4.1.2 (Abbildung 4.1) hervorgeht, gibt es bei nahezu allen Stoffen Werte unterhalb der analytischen Nachweisgrenze, die in den folgenden Auswertungen durch die Hälfte der Nachweisgrenze ersetzt werden. Durch dieses Censoring (vgl. Tabelle 3.3) kann sich die statistische Verteilung ändern.

Die Parameter werden auf der Verhältnisskala gemessen und sind i.d.R. nicht normalverteilt. Um eine log-Normalverteilung anzunähern und parametrische Verfahren einsetzen zu können, wurden die Messwerte logarithmiert und mit dem Kolmogorov-Smirnov-Test auf Normalverteilung getestet. Da die Werte unterhalb der Nachweisgrenzen z.T. eine erheblich Streuung in den Daten verursachen, wurden die Messwerte außerdem auf ein ordinales und z.T. nominales Messniveau transformiert und mit nicht-parametrischen Verfahren bearbeitet.

5.1 Stoffgruppenübergreifende summarische Betrachtung

In die folgenden Analysen gingen die Vor-Ort-Parameter pH-Wert, Redoxpotenzial (Eh), Wassertemperatur (T), Sauerstoff (O₂), Leitfähigkeit (Lf) und Salinität (Sal) sowie die Summenparameter Leuchtbakterientest (LBT), Adsorbierbare halogenierte Kohlenwasserstoffe (AOX), chemischer Sauerstoffbedarf (CSB), gelöster organischer Kohlenstoff (DOC), gesamter organischer Kohlenstoff (TOC) und Phenolindex (PI) ein. Außerdem wurden die

Summenangaben der Stoffgruppen LHKW, BTEX-Aromaten, Chlorbenzene (CB) und HCH berücksichtigt. Die statistischen Verteilungen dieser Messgrößen sind für den Datensatz H96 im Anhang A 5.1 dargestellt. Nach logarithmischer Transformation wird für die meisten Variablen eine Normalverteilung angenähert. Bei LBT, PI und den Summen der LHKW, BTEX, CB und HCH ist jedoch auch nach Logarithmierung eine Schiefe festzustellen. Die Redoxpotenziale deuten im Datensatz H96 eine bimodale Verteilung an. Aufgrund der negativen Messwerte können diese Daten nicht logarithmiert werden. Auch pH-Werte werden nicht log-transformiert, da sie bereits auf einer logarithmischen Skala erhoben werden.

5.1.1 Korrelationsanalysen

Die Korrelationskoeffizienten nach Pearson (vgl. Kapitel 3.3.4) sind für die genannten Variablen und für den Datensatz H96 in Tabelle 5.1 zusammengefasst. Die höchsten Korrelationen bestehen zwischen den Vor-Ort-Parametern Leitfähigkeit und Salinität sowie zwischen den Summenparametern DOC und TOC. Diese Parameter korrelieren ebenfalls mit dem CSB. Weiterhin erhält man hohe Korrelationskoeffizienten zwischen LBT und CSB. Die Summenangaben für die BTEX-Aromaten korrelieren mit den Summenparametern LBT und AOX, die Summe der LHKW nur mit dem Parameter AOX. Die Summen der Stoffgruppen CB und HCH korrelieren nicht bzw. nur schwach mit den untersuchten Summen- und Vor-Ort-Parametern und auch nicht stark untereinander (Tabelle 5.1).

Da in der obigen Analyse Werte aus unterschiedlichen Skalen verarbeitet werden, wird eine Rangkorrelationsanalyse (vgl. Kapitel 3.3.4) durchgeführt. Die Rangkorrelationen nach Kendall zeigen nur hohe Korrelationen zwischen CSB, DOC und TOC sowie eine starke Korrelation zwischen Leitfähigkeit und Salinität (Tabelle 5.2), während die Rangkorrelationskoeffizienten nach Spearman auch die Korrelationen zwischen Leitfähigkeit und Salinität einerseits und CSB andererseits sowie zwischen AOX und LHKW bzw. BTEX angibt (Tabelle 5.2). Zusätzlich wird zwischen den BTEX-Aromaten und den Chlorbenzenen ein Rangkorrelationskoeffizient von 0.65 angegeben (Tabelle 5.2). Insgesamt sind die Korrelationen nach Pearson und die Rangkorrelationen jedoch sehr ähnlich.

Tabelle 5.1: Korrelationskoeffizienten nach Pearson zwischen Vor-Ort-Parametern, Summenparametern sowie Summenangaben für LHKW, BTEX-Aromaten, Chlorbenzene und HCH-Isomere.

Datensatz H96, log-transformierte Werte (mit Ausnahme von pH und Eh); n = 193 (Vor-Ort-Parameter); n = 198 (Summenparameter, LHKW, BTEX, CB); n = 148 (HCH).

Signifikante ($\alpha = 0.05$) Korrelationen ≥ 0.6 sind hervorgehoben. Abkürzungen siehe Text.

	pH	Eh	Lf	O2	Sal	T	LBT	AOX	CSB	DOC	TOC	PI	LHKW	BTEX	CB
Eh	-0.45														
Lf	-0.08	-0.11													
O2	0.10	0.05	-0.29												
Sal	-0.10	-0.10	0.96	-0.30											
T	-0.15	-0.06	0.42	-0.37	0.42										
LBT	0.16	-0.29	0.33	-0.13	0.33	0.26									
AOX	-0.23	0.17	0.33	-0.01	0.32	0.28	0.48								
CSB	-0.07	-0.10	0.62	-0.18	0.61	0.30	0.62	0.53							
DOC	0.13	-0.22	0.47	-0.20	0.48	0.28	0.53	0.54	0.72						
TOC	0.07	-0.18	0.57	-0.23	0.57	0.33	0.59	0.50	0.83	0.90					
PI	0.03	-0.14	0.41	-0.11	0.40	0.19	0.57	0.29	0.48	0.24	0.42				
LHKW	-0.23	0.29	0.30	-0.13	0.31	0.31	0.42	0.66	0.38	0.27	0.30	0.25			
BTEX	-0.06	-0.06	0.42	-0.13	0.42	0.33	0.67	0.62	0.49	0.44	0.47	0.51	0.55		
CB	-0.09	0.07	0.23	-0.14	0.23	0.24	0.47	0.43	0.29	0.21	0.22	0.35	0.43	0.59	
HCH	-0.34	0.23	0.11	-0.15	0.10	0.24	-0.06	0.13	0.11	-0.02	0.01	-0.10	0.09	0.09	0.32

Tabelle 5.2: Rangkorrelationen zwischen Vor-Ort-Parametern, Summenparametern und den Summenangaben für LHKW, BTEX-Aromaten, Chlorbenzene und HCH-Isomere.

Datensatz H96, Rangordnungen, Stichprobenumfänge wie in Tabelle 5.1.

Signifikante ($\alpha = 0.05$) Korrelationen ≥ 0.6 sind hervorgehoben. Abkürzungen siehe Text.

	pH	Eh	LBT	AOX	CSB	DOC	TOC	PI	Lf	O2	Sal	HCH	LHKW	BTEX	CB
Kendall-τ															
Eh	-0.25														
LBT	0.01	-0.15													
AOX	-0.16	0.08	0.44												
CSB	-0.14	-0.07	0.44	0.37											
DOC	-0.11	-0.07	0.35	0.39	0.59										
TOC	-0.12	-0.07	0.37	0.36	0.62	0.83									
PI	-0.02	-0.11	0.36	0.28	0.27	0.23	0.25								
Lf	-0.10	-0.10	0.22	0.25	0.44	0.38	0.40	0.28							
O2	0.07	-0.02	-0.03	-0.02	-0.12	-0.15	-0.16	-0.11	-0.24						
Sal	-0.11	-0.09	0.24	0.26	0.45	0.38	0.41	0.29	0.95	-0.25					
HCH	-0.16	0.16	0.02	0.10	0.13	0.04	0.08	0.03	0.11	-0.19	0.12				
LHKW	-0.14	0.20	0.33	0.48	0.26	0.22	0.23	0.21	0.23	-0.06	0.24	0.12			
BTEX	-0.08	0.01	0.45	0.45	0.27	0.30	0.30	0.31	0.25	-0.07	0.25	0.07	0.38		
CB	-0.09	0.04	0.40	0.35	0.23	0.20	0.19	0.29	0.17	-0.11	0.19	0.16	0.33	0.49	
T	-0.12	-0.05	0.22	0.23	0.23	0.24	0.27	0.15	0.30	-0.25	0.32	0.18	0.24	0.27	0.22
Spearman-ρ															
Eh	-0.33														
LBT	0.02	-0.19													
AOX	-0.23	0.13	0.56												
CSB	-0.20	-0.09	0.58	0.52											
DOC	-0.15	-0.12	0.47	0.55	0.75										
TOC	-0.16	-0.11	0.49	0.51	0.80	0.93									
PI	-0.03	-0.15	0.45	0.39	0.38	0.33	0.36								
Lf	-0.14	-0.15	0.30	0.35	0.62	0.52	0.56	0.40							
O2	0.12	-0.04	-0.04	-0.04	-0.18	-0.23	-0.24	-0.15	-0.35						
Sal	-0.15	-0.13	0.32	0.36	0.62	0.52	0.56	0.41	0.97	-0.37					
HCH	-0.24	0.25	0.02	0.14	0.19	0.05	0.11	0.05	0.17	-0.27	0.18				
LHKW	-0.21	0.29	0.46	0.65	0.38	0.32	0.34	0.30	0.32	-0.10	0.34	0.18			
BTEX	-0.12	0.00	0.58	0.61	0.38	0.42	0.42	0.42	0.35	-0.10	0.34	0.10	0.53		
CB	-0.14	0.06	0.52	0.50	0.33	0.29	0.29	0.41	0.26	-0.15	0.29	0.23	0.46	0.65	
T	-0.18	-0.08	0.30	0.33	0.33	0.34	0.38	0.21	0.41	-0.35	0.44	0.26	0.34	0.38	0.31

5.1.2 Hauptkomponentenanalysen

Für die in Tabelle 5.1 und Tabelle 5.2 aufgeführten Parameter wurden Hauptkomponentenanalysen mit anschließender Varimax-Rotation durchgeführt (vgl. Kapitel 3.3.5). Dabei wurde die größte gemeinsame Stichprobe von 143 Proben verwendet. Die Ladungen, die die Korrelation der Parameter mit den Hauptkomponenten angeben, sind im Anhang A 5.2 zu finden; in Tabelle 5.3 sind nur die Markiervariablen mit absoluten Faktorladungen > 0.5 aufgeführt.

Bei einer Hauptkomponentenanalyse auf Basis der Korrelationsmatrix nach Pearson wurden nach dem Kaiserkriterium fünf Hauptkomponenten extrahiert, sie erklären zusammen etwa 75 % der Gesamtvarianz (Tabelle 5.3). Außerdem werden mit fünf Komponenten für alle Parameter mit Ausnahme des pH-Wertes, der Wassertemperatur und des Sauerstoffgehaltes Kommunalitäten von 75 % und mehr erreicht (vgl. Anhang A 5.2). Daher sollte die Faktorbildung dieser Parameter hier nicht überinterpretiert werden. Führt man eine Hauptkomponentenanalyse mit der Spearman'schen Rangkorrelationsmatrix durch, müssen nach dem Kaiserkriterium nur vier Komponenten extrahiert werden. Soll ein Varianzanteil von etwa 75 % erklärt werden, sind ebenfalls fünf Faktoren zu berücksichtigen (Tabelle 5.3).

Tabelle 5.3: Eigenwerte, erklärte Gesamtvarianz und Markiervariablen in den rotierten Komponentenmatrizen (Varimax-Rotation) der summarischen Merkmale (Datensatz H96, n = 143).

Merkmale: Vor-Ort-Parameter, Summenparameter und Summe LHKW, BTEX, CB und HCH.

HK aus log-transformierten Werten (außer pH und Eh)	1	2	3	4	5	Summe [%]
Eigenwert	6.09	2.26	1.68	1.18	1.03	76.45
Anteil der erklärten Gesamtvarianz [%]	38.05	14.10	10.48	7.37	6.45	
Markiervariablen	DOC	BTEX	Sal	Eh	HCH	
	TOC	CB	Lf	pH	O2	
	CSB	LBT	PI	LHKW		
	AOX	PI				
		LHKW				
HK aus Rangzahlen	1	2	3	4	5	Summe [%]
Eigenwert	6.16	1.91	1.79	1.19	0.88	74.58
Anteil der erklärten Gesamtvarianz [%]	38.53	11.92	11.21	7.41	5.50	
Markiervariablen	DOC	BTEX	Sal	Eh	HCH	
	TOC	CB	Lf	pH	O2	
	CSB	LBT	PI			
	LBT	PI	T			
		LHKW				
		AOX				

Nach Aruga (1997) sind die Ergebnisse von zwei Hauptkomponentenanalysen gleich, wenn

- die Anzahl der extrahierten Komponenten gleich ist,
- die Zusammensetzung der Faktoren ähnlich ist, d.h. wenn mindestens 75 % der Variablen, die mit einem Faktor korrelieren, in beiden Analysen übereinstimmen und
- die Reihenfolge der Faktoren im Wesentlichen erhalten bleibt, d.h. wenn es höchstens eine Inversion gibt.

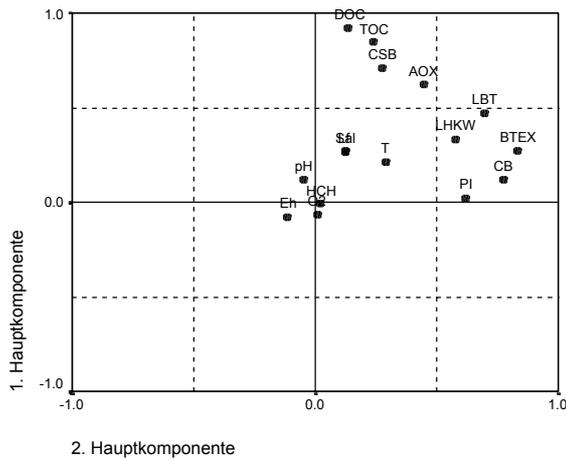
Da die parametrische und die nicht-parametrische Lösung mit jeweils fünf Komponenten einen vergleichbaren Anteil an Gesamtvarianz erklären, die Markiervariablen für alle fünf Komponenten sich in höchstens einer Variable unterscheiden und die Reihenfolge der Faktoren gleich bleibt (Tabelle 5.3), sind alle genannten Bedingungen erfüllt. Somit sind beide Lösungen vergleichbar. Die Faktorladungen und Faktorwerte werden daher im Folgenden nur für die parametrische Analyse dargestellt. Da die zweite Komponente die Belastungen durch die Chlorchemie zusammenfasst (s.u.), sind in Abbildung 5.1 alle anderen Komponenten der zweiten Hauptkomponente gegenübergestellt. Dabei sind die Faktorwerte nach Zugehörigkeit zu Grundwasserleitern und Teilgebieten eingefärbt, um zu untersuchen, welche Faktoren in den Grundwasserleitern bzw. in den Teilgebieten dominieren.

Die erste Hauptkomponente mit den Markiervariablen DOC, TOC, CSB und AOX erklärt mit 38 % den höchsten Anteil an der Gesamtvarianz und charakterisiert die Grundwasserverunreinigung durch organisch gebundenen Kohlenstoff. Die hohe Korrelation zwischen den Parametern TOC und DOC zeigt, dass die Kohlenstoffbelastung vor allem auf gelösten organischen Kohlenstoff zurückzuführen ist. Die zweite Hauptkomponente enthält u.a. hohe Faktorladungen für die BTEX-Aromaten, die Chlorbenzene und die LHKW, die auf (Lösungsmittel-) Verunreinigungen durch die chemische Industrie (Chlorchemie) hinweisen.

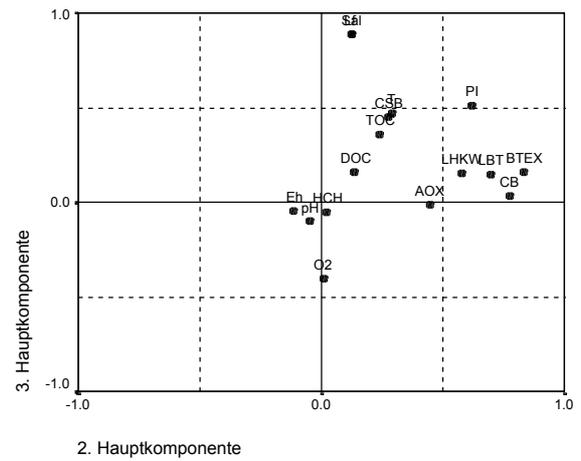
Die Faktorladungen der Vor-Ort-Parameter und HCH-Summe liegen für die beiden ersten Hauptkomponenten sehr nahe am Koordinatenursprung (Abbildung 5.1-A.I); sie tragen also wenig zur Reproduktion dieser Faktoren bei. Hingegen weisen die Variablen LHKW, AOX und LBT bei beiden Faktoren relativ hohe Ladungen auf. Sie lassen sich also nicht eindeutig zuordnen. Dies deutet auf einen hohen Anteil der LHKW an der Gesamtbelastung hin.

A: Faktorladungen:

A.I: 1. und 2. Hauptkomponente

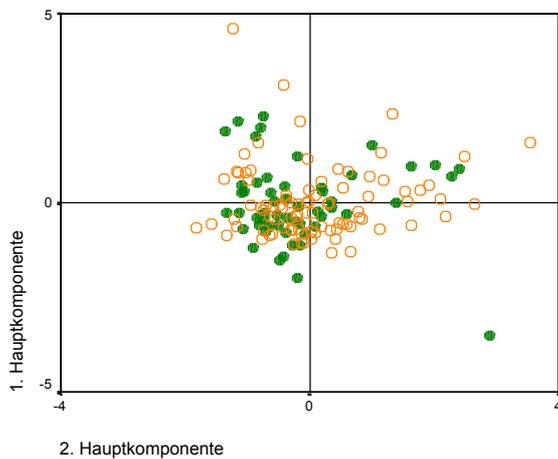


A.II: 3. und 2. Hauptkomponente

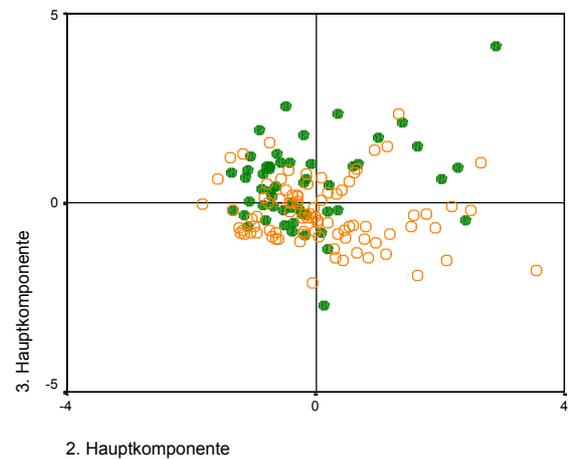


B: Faktorwerte, differenziert nach Grundwasserleiter (GWL100: ○, GWL500: ●):

B.I: 1. und 2. Hauptkomponente

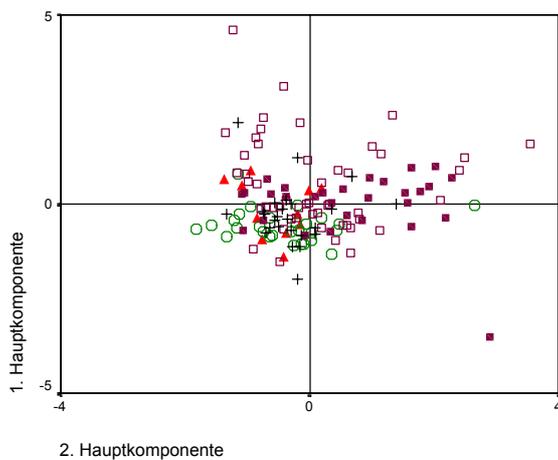


B.II: 3. und 2. Hauptkomponente



C: Faktorwerte, differenziert nach Teilgebieten (Siedlung: ▲, Muldeae: ○, Bergbaufolge: +, Werksteile CAG-Wolfen: ■, Werksteile CAG-Bitterfeld: □):

C.I: 1. und 2. Hauptkomponente



C.II: 3. und 2. Hauptkomponente

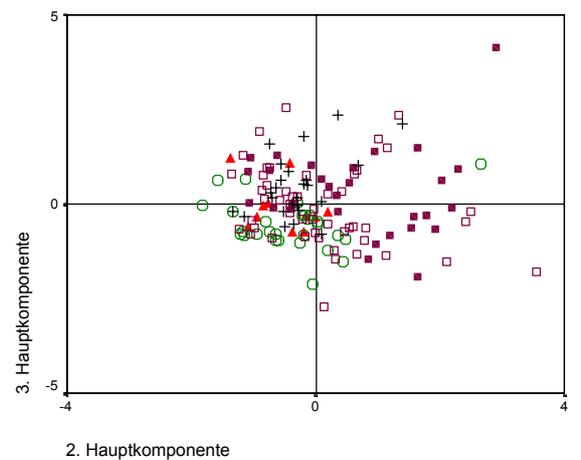
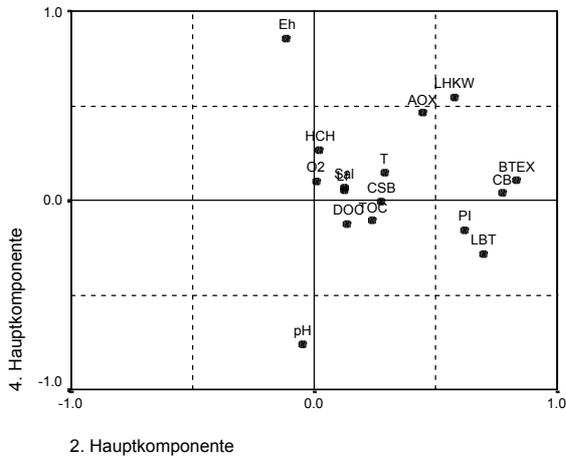


Abbildung 5.1: Faktorladungen und Faktorwerte der 5-Komponentenlösung der summarischen Merkmale im Datensatz H96 (logarithmierte Werte (außer pH, Eh), n = 143, Ausführungen im Text).

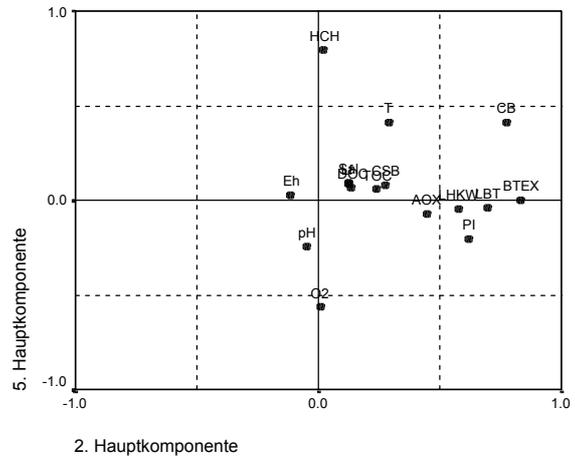
Fortsetzung von Abbildung 5.1:

A: Faktorladungen:

A.III: 4. und 2. Hauptkomponente

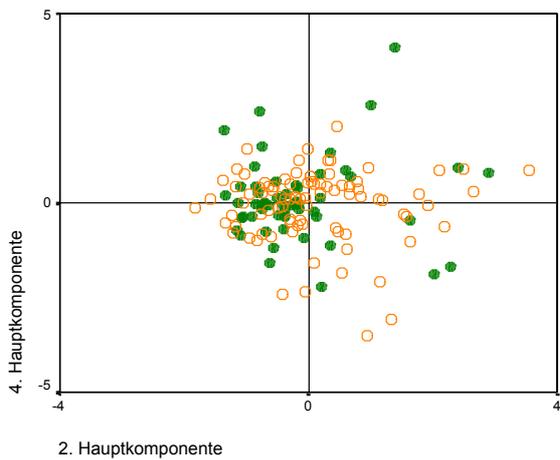


A.IV: 5. und 2. Hauptkomponente

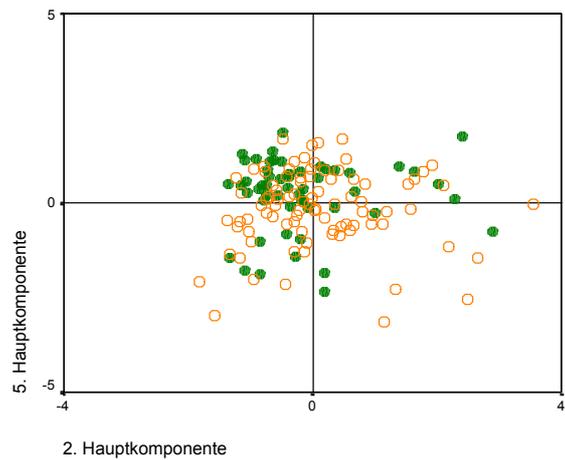


B: Faktorwerte, differenziert nach Grundwasserleiter (GWL100: ○, GWL500: ●):

B.III: 4. und 2. Hauptkomponente

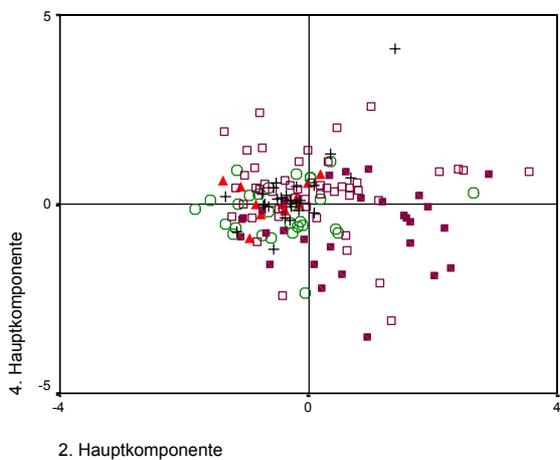


B.IV: 5. und 2. Hauptkomponente

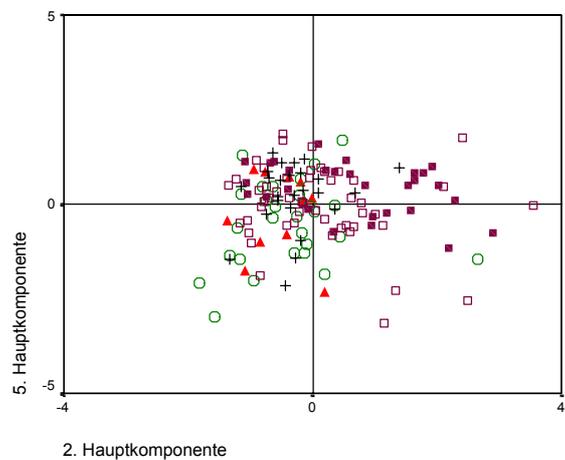


C: Faktorwerte, differenziert nach Teilgebieten (Siedlung: ▲, Mulde: ○, Bergbaufolge: +, Werksteile CAG-Wolfen: ■, Werksteile CAG-Bitterfeld: □):

C.III: 4. und 2. Hauptkomponente



C.IV: 5. und 2. Hauptkomponente



Die Faktorwerte der beiden ersten Hauptkomponenten zeigen keine Differenzierung nach Grundwasserleitern (Abbildung 5.1-B.I). Deutlichere Unterschiede gibt es für die Teilgebiete (Abbildung 5.1-C.I): Die Proben aus der Mulde erhalten für beide Hauptkomponenten negative Faktorwerte, d.h. dieses Gebiet ist vergleichsweise gering belastet. Hohe positive Faktorwerte für die erste Hauptkomponente sind in vielen Messstellen auf den Werksteilen der CAG in Bitterfeld zu finden, während für die Messstellen auf den Werksteilen der CAG in Wolfen höhere Faktorwerte für die zweite Hauptkomponente berechnet werden.

Die dritte Komponente mit hohen Ladungen für Leitfähigkeit und Salinität beschreibt die (anorganische) Salzfracht (Abbildung 5.1-A.II). Positive Faktorwerte für diese Komponente treten bevorzugt in Messstellen aus dem tertiären Grundwasserleiter auf (Abbildung 5.1-B.II) sowie in Proben aus den Bergbaufolgelandschaften (Abbildung 5.1-C.II).

Durch die vierte Komponente wird das Redoxvermögen charakterisiert (Abbildung 5.1-A.III). Positive Faktorwerte deuten auf ein hohes Redoxpotenzial bei niedrigen (sauren) pH-Werten hin, während negative Faktorwerte in Proben mit neutralen bis basischen pH-Werten und niedrigen Eh-Werten zu finden sind. Des Weiteren korrelieren LHKW und AOX mit diesem Faktor. Eine Differenzierung nach Grundwasserleitern ist nicht zu erkennen, auch die Differenzierung nach Teilgebieten ist nicht so deutlich wie bei anderen Komponenten (vgl. Abbildung 5.1-C.III).

Die fünfte Komponente verweist auf Belastungen durch das Organo-Chlorpestizid HCH und seine Isomere (Abbildung 5.1-A.IV). Positive Faktorwerte treten vor allem in Proben aus dem tertiären Grundwasserleiter auf (Abbildung 5.1-B.IV). Eine Gebietsdifferenzierung ist hingegen kaum zu erkennen (Abbildung 5.1-C.IV). Allerdings weisen Proben aus den Bergbaufolgelandschaften und von den Werksteilen der CAG öfter positive Faktorwerte auf als Proben aus der Mulde und den Siedlungsbereichen. Die hohen negativen Faktorwerte treten in Proben auf, in denen kein HCH nachgewiesen werden konnte.

Die Bedeutung der Faktorzusammensetzung wird in Kapitel 5.1.5 zusammen mit den Ergebnissen der Clusteranalyse weitergehend diskutiert.

5.1.3 Stabilität der Kontaminationsfaktoren

Um den Einfluss der ausgewählten Stichprobe auf die Ergebnisse der Hauptkomponentenanalyse zu zeigen, sind die erklärten Varianzanteile und die Markiertvariablen für verschiedene Datensätze in Tabelle 5.4, die vollständigen Ergebnisse im Anhang A 5.2 zusammengestellt. Es werden zwei weitere Stichproben berücksichtigt: der Datensatz H96 ohne Censoring ($H96_{(Werte > NWG)}$) sowie ein Datensatz mit reduziertem Stichprobenumfang ($H96_{(H96 \cap S97)}$). Letzterer wird aus den 122 Messstellen gebildet, die sowohl im Herbst 1996 als auch im Sommer 1997 beprobt wurden. Allerdings wurden nicht überall dieselben Parameter erhoben. So liegen im Herbst 1996 an allen 122 Messstellen Daten für die LHKW, BTEX, CB und Summenparameter vor. Bei den Vor-Ort-Parametern fehlen jedoch 3 Angaben, bei den HCH-Isomeren 20 Angaben, so dass im Datensatz $H96_{(H96 \cap S97)}$ insgesamt 89 Messstellen mit allen summarischen Parametern übrig bleiben.

Eine Auswertung der Beprobungskampagne vom Sommer 1997 ist für den summarischen Parametersatz nicht sinnvoll. Im Sommer 1997 liegen für die Messstellenauswahl $S97_{(H96 \cap S97)}$ nur an 22 Messstellen Angaben für alle hier betrachteten Parameter vor. Diese Messstellen liegen um die Grube Antonie und auf dem Werksgelände der CAG (Bitterfeld-Nord und Mitte). Somit wäre eine Auswertung nicht für das gesamte Untersuchungsgebiet gültig. Auch im vollständigen Datensatz S97, der insgesamt aus 210 Proben besteht,

liegen nur an 46 Proben Angaben für alle hier betrachteten Parameter vor. Daher wurde auf eine Auswertung verzichtet.

Der Datensatz ohne Werte unterhalb der Nachweisgrenze (H96_(Werte > NWG)) besteht aus 87 Proben, an denen im Herbst 1996 alle Vor-Ort-Parameter gemessen, alle Summenparameter bestimmt sowie jeweils mindestens ein Einzelstoff der Stoffgruppen LHKW, BTEX, CB und HCH nachgewiesen wurden. In der Hauptkomponentenanalyse mit diesem Datensatz erklären fünf Komponenten einen gegenüber den Auswertungen mit dem Gesamtdatensatz H96 vergleichbaren Varianzanteil von fast 79 %; nach dem Kaiserkriterium müssen nur vier Komponenten extrahiert werden. Außerdem tritt zwischen den ersten beiden Faktoren eine Inversion auf, und die Zuordnung von HCH ändert sich stark (Tabelle 5.4). Allerdings wird in diesem Modell nur eine sehr niedrige Kommunalität für HCH erreicht, d.h. diese Variable wird insgesamt schlecht erklärt. Die anderen Parameter werden hingegen zu ähnlichen Faktoren wie im Gesamtdatensatz H96 zusammengefasst (Tabelle 5.4).

Die Hauptkomponentenanalyse mit dem auf 89 Proben reduzierten Datensatz H96_(H96∩S97) bringt eine dem Gesamtdatensatz H96 vergleichbare Lösung hervor: Die Reihenfolge der Faktoren ändert sich nicht. Auch die Anzahl und Art der Markiervariablen pro Faktor differiert um höchstens einen Parameter (Tabelle 5.4).

Insgesamt sind die Ergebnisse der Hauptkomponentenanalysen, in denen die Werte unterhalb der Nachweisgrenzen nicht berücksichtigt werden, mit dem Gesamtdatensatz weitgehend vergleichbar, während die Reduktion des Stichprobenumfangs keine Veränderung der Faktorzusammensetzung hervorruft, so dass sich eine gute Stabilität der Hauptkomponenten ergibt.

Tabelle 5.4: Faktorbildung in Abhängigkeit von der Stichprobe (summarische Merkmale).

Merkmale: Vor-Ort-Parameter, Summenparameter, Summe LHKW, BTEX, CB und HCH.
 Datensätze: Erklärungen im Text, log-transformierte Werte (mit Ausnahme von pH und Eh).

HK aus H96, n = 143	1	2	3	4	5	Summe [%]
Eigenwert	6.09	2.26	1.68	1.18	1.03	76.45
Anteil der erklärten Gesamtvarianz [%]	38.05	14.10	10.48	7.37	6.45	
Markiervariablen	DOC	BTEX	Sal	Eh	HCH	
	TOC	CB	Lf	pH	O2	
	CSB	LBT	PI	LHKW		
	AOX	PI				
		LHKW				
HK aus H96_(Werte > NWG), n = 87	2	1	3	4	5	Summe [%]
Eigenwert	2.11	6.69	1.83	1.07	0.94	78.96
Anteil der erklärten Gesamtvarianz [%]	13.16	41.83	11.42	6.69	5.86	
Markiervariablen	TOC	BTEX	Lf	Eh	O2	
	DOC	CB	Sal	pH		
	CSB	PI	T			
	AOX	LBT	HCH			
	LBT	LHKW				
		AOX				
HK aus H96_(H96∩S97), n = 89	1	2	3	4	5	Summe [%]
Eigenwert	6.56	2.09	1.57	1.16	1.00	77.38
Anteil der erklärten Gesamtvarianz [%]	40.99	13.09	9.79	7.27	6.25	
Markiervariablen	DOC	BTEX	Lf	Eh	HCH	
	AOX	CB	Sal	pH		
	TOC	LBT	PI			
	CSB	PI	CSB			
		LHKW				
generelle Faktorbezeichnung	Kohlenstoff	(Chlor-) Chemie	Salzfracht	Redoxmilieu	HCH/O2	

5.1.4 Räumliche Muster der Kontaminationsfaktoren (Clusteranalysen)

In der Hauptkomponentenanalyse werden die 16 summarischen Parameter (Vor-Ort-Parameter, Summenparameter und Summenangaben pro Stoffgruppe) zu fünf Komponenten zusammengefasst. Um die Faktoren besser interpretieren, ggf. Eintragsquellen identifizieren oder Kontaminationsbereiche abgrenzen zu können, müssen die Objekte (Messstellen) anhand der Faktorwerte klassifiziert werden. Dafür wurden hierarchische und partitionierende Clusteranalysen eingesetzt (vgl. Kapitel 3.3.6): Die euklidische Distanz (ED) und die quadrierte euklidische Distanz (QED) wurden mit dem Fusionierungsalgorithmus "Average Linkage between Groups" (AL) kombiniert, die quadrierte euklidische Distanz (QED) mit der Fusionierungsmethode nach Ward (WA). Darüber hinaus wurde eine Clusterzentrenanalyse (k-means-Verfahren (KM)) mit der euklidischen Distanz durchgeführt.

Die genauer zu betrachtende Clusterlösung wird bei den hierarchischen Clusteranalysen aus der Entwicklung des Clusterkriteriums und der Zusammensetzung der Dendrogramme ausgewählt (vgl. Kapitel 3.3.6). Die Entwicklung des Clusterkriteriums ist exemplarisch in Abbildung 5.2 dargestellt. Der größte relative Zuwachs des Clusterkriteriums erfolgt bei der 2-Clusterlösung. Da in dieser Clusterlösung jedoch nur ein Objekt von den anderen separiert wird, ist sie zur Klassifikation nicht geeignet. Weitere große Sprünge des Clusterkriteriums erfolgen bei der 4- und der 6-Cluster-Lösung (Abbildung 5.2). Daher sind diese Lösungen näher zu betrachten. Da das "elbow"-Kriterium in Abbildung 5.2 eine 6-Cluster-Lösung nahe legt, wird diese im Folgenden für alle vier Clusteranalysen ausgewählt.

Da die Dendrogramme sehr groß sind, wird die Klassifizierung der Objekte im Koordinatensystem der ersten beiden Hauptkomponenten visualisiert.

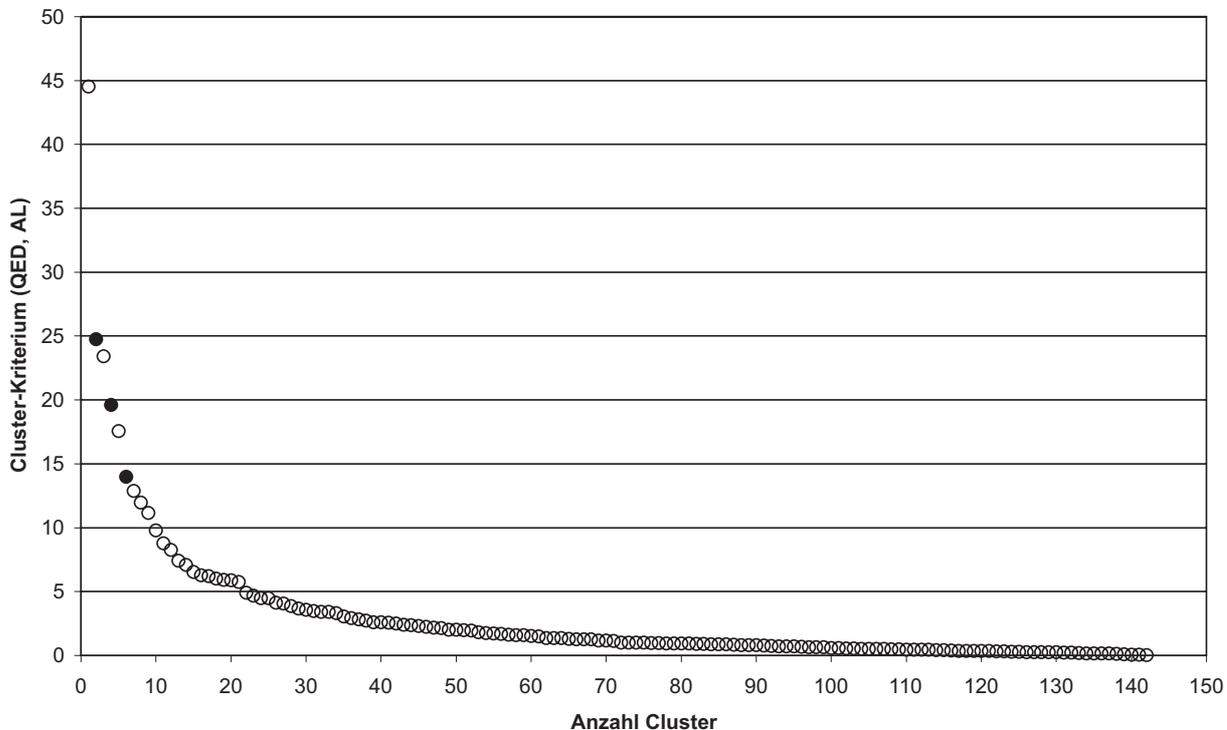


Abbildung 5.2: Entwicklung des Clusterkriteriums der hierarchischen Clusteranalyse mit den Faktorwerten der 5-Komponentenlösung aus Abbildung 5.1 (summarische Merkmale, Datensatz H96, n = 143). Verfahren: quadrierte euklidische Distanz, Average Linkage between Groups. Markiert sind die 2-, 4- und 6-Clusterlösung.

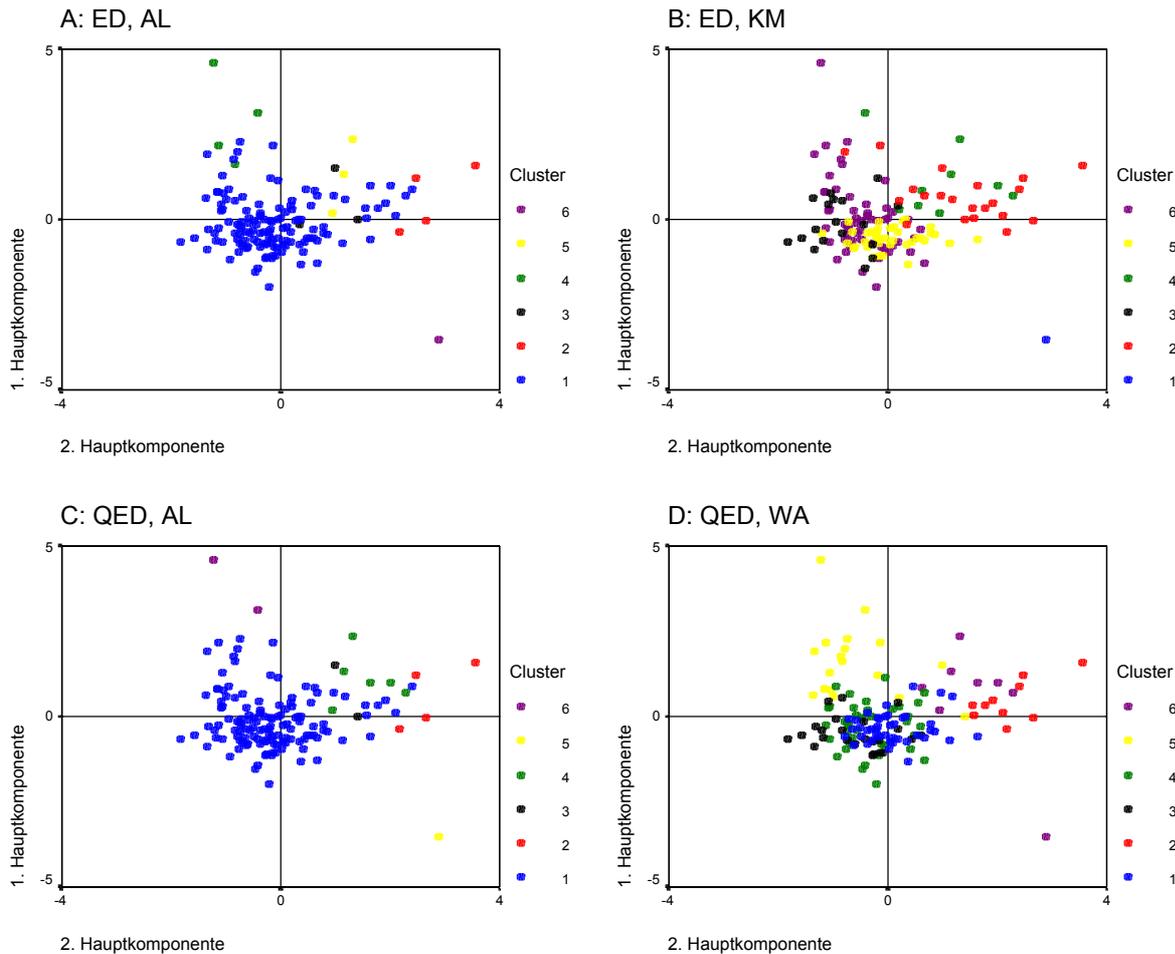


Abbildung 5.3: Verschiedene 6-Clusterlösungen mit den Faktorwerten der 5-Komponentenlösung aus Abbildung 5.1 (summarische Merkmale, Datensatz H96, n = 143). Abkürzungen der Verfahren: ED: euklidische Distanz, QED: quadrierte euklidische Distanz, AL: Average Linkage between Groups, KM: k-means (Clusterzentrenanalyse), WA: Ward-Methode.

Abbildung 5.3 zeigt, dass die 6-Cluster-Lösung je nach verwendetem Clusterverfahren variiert. Hierbei ist vor allem der Fusionierungsalgorithmus ausschlaggebend. So unterscheiden sich die beiden Clusterlösungen mit dem Fusionierungsalgorithmus "Average Linkage between Groups" kaum voneinander, jedoch stark von der Clusterzentrenanalyse und dem Ward-Verfahren. Mit dem AL-Verfahren werden viele kleine Cluster gebildet, die nur wenige Objekte (mit Extremwerten) beinhalten (Abbildung 5.3-A und -C). Die anderen Verfahren liefern hingegen recht gleichmäßig besetzte Cluster (Abbildung 5.3-B und -D). Da das Ward-Verfahren Cluster bildet, die im Koordinatensystem der beiden Hauptkomponenten gut zu interpretieren sind, wird diese Clusterlösung räumlich und stofflich näher charakterisiert.

Um zu erkennen, welche Variablen für die Clusterbildung bedeutsam sind, können Mittelwerte der Variablen für die zu den einzelnen Clustern gehörigen Objekte bestimmt werden (Stoyan et al., 1997). Diese Clusterzentren mit den mittleren Faktorwerten pro Cluster wurden in einem Hasse-Diagramm geordnet, wobei in Abbildung 5.4-B zusätzlich die relative Stärke jeder Hauptkomponente in einem Cluster dargestellt ist.

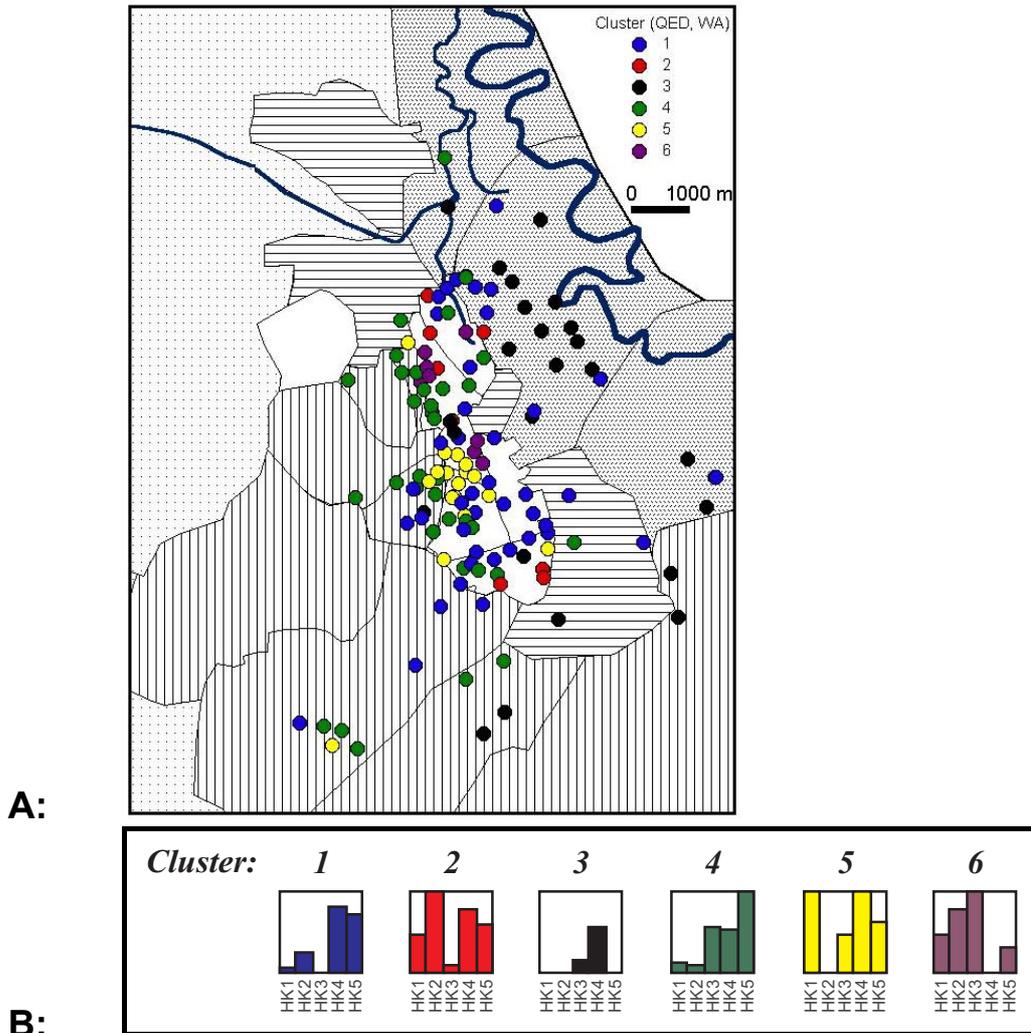


Abbildung 5.4: 6-Clusterlösung (quadierte euklidische Distanz, Ward-Methode) mit den Faktorwerten der 5-Komponentenlösung aus Abbildung 5.1 (summarische Merkmale, Datensatz H96, n = 143). **A:** Verteilung der Cluster im Untersuchungsgebiet; zur Beschreibung der Landschaftseinheiten und Teilgebiete vgl. Abbildung 2.1 und Tabelle 2.1. **B:** Hasse-Diagramm der Clusterzentren.

Zwischen den sechs Clustern besteht keine hierarchische Ordnung (Abbildung 5.4-B). Die Cluster lassen sich wie folgt charakterisieren: **Cluster 1**, der sich vor allem auf dem Werks Gelände der CAG (insbesondere auf den Werksteilen in Bitterfeld sowie in Wolfen in der Umgebung des Schachtgrabens) befindet, ist durch hohe Faktorwerte für die Hauptkomponenten 4 (Redoxvermögen) und 5 (HCH-Belastung) gekennzeichnet. Die höchsten Werte für die HCH-Belastung sind jedoch im **Cluster 4** zu finden. Die Objekte dieses Clusters liegen an der Deponie Freiheit III, in der Umgebung der Deponie Antonie/Marie sowie um die Grube Greppin. Vereinzelt sind sie auf den Werksteilen Bitterfeld-Süd und Wolfen-West sowie am Schachtgraben zu finden (Abbildung 5.4-A).

Die höchsten Werte für die vierte Hauptkomponente (hohes Redoxpotenzial und niedrige pH-Werte) sind im **Cluster 5** anzutreffen (Abbildung 5.4-B). Dieser tritt markant auf den Werksteilen Bitterfeld-Nord und Mitte-West in Angrenzung an die Grube Antonie/Marie hervor (Abbildung 5.4-A). Er ist gleichzeitig durch die höchsten Faktorwerte für die erste Hauptkomponente gekennzeichnet, d.h. dort tritt eine hohe Belastung mit gelöstem, organisch gebundenem Kohlenstoff auf. Für die zweite Hauptkomponente, die die Belastung mit chlorierten organischen Kohlenwasserstoffen beschreibt, entsteht der höchste Mittelwert im

Cluster 2, der sich auf den Werksteilen Bitterfeld-Süd sowie Wolfen-Ost und Wolfen-West befindet. Hohe chlororganische Belastungen, die mit einer hohen Salzfracht und vergleichsweise geringen Redoxpotenzialen sowie hohen pH-Werten, einhergehen, sind schließlich im **Cluster 6** zu finden, der im Werksteil Bitterfeld-Nord und an der Grube Greppin angesiedelt ist. Am geringsten mit organischen Verunreinigungen, Chlororganika und HCH-Isomeren ist der **Cluster 3** belastet, der hauptsächlich in der Muldeau verbreitet ist (Abbildung 5.4).

5.1.5 Interpretation und Diskussion der Kontaminationsfaktoren

Die summarische Betrachtung bringt fünf Kontaminationsfaktoren hervor, die auf verschiedene Prozesse und Eintragsmuster im Untersuchungsgebiet hinweisen (vgl. Abbildung 5.1-A): Belastung durch organisch gebundenen Kohlenstoff, durch Salzfrachten, durch synthetische, z.T. chlorierte Kohlenwasserstoffe (LHKW, BTEX und CB) sowie durch chlororganische Pestizide (HCH). Des Weiteren wird das Redoxvermögen charakterisiert. Diese Faktorbildung bleibt im Datensatz H96 bei unterschiedlichen Stichproben relativ stabil (vgl. Tabelle 5.4).

Die Ergebnisse zeigen, dass es (schwache) Verknüpfungen zwischen den Stoffgruppen einerseits und den Vor-Ort- und Summenparametern andererseits gibt. So werden die Summenparameter Leuchtbakterientest, AOX und Phenolindex mit den Stoffgruppen BTEX, CB und LHKW zusammengefasst. Insgesamt korreliert der Parameter AOX mit den Summenangaben für LHKW, der LBT und PI hingegen stärker mit den Stoffgruppen BTEX und CB. Um LHKW-Belastungen eindeutig zu kennzeichnen, ist der AOX aber nur bedingt geeignet: Wie die hohen Faktorladungen in der ersten Komponente zeigen, wird AOX auch durch andere chlorierte Substanzen beeinflusst. Außerdem können Störungen durch hohe Chloridgehalte auftreten. Die Faktorbildung und gute Korrelation zwischen CSB, DOC und TOC unterstützt die Forderung, den CSB durch den messtechnisch weniger aufwändigen und umweltschonenderen DOC zu ersetzen. Ähnliche Ergebnisse erzielte Rudolph (1999).

An den Faktorladungen in Abbildung 5.1-A.I bis -A.IV erkennt man, dass es Variablen gibt, die sich nicht eindeutig einer Hauptkomponente zuordnen lassen. So wird der Summenparameter AOX zwar als Markiervariable der ersten Hauptkomponente zugeordnet. Er zeigt aber auch recht hohe Ladungen bei der zweiten und vierten Hauptkomponente. Auch die Summe der LHKW wird nicht eindeutig zugeordnet. Dies erschwert die fachliche Interpretation der Hauptkomponenten und Cluster, kann aber auch auf bislang unerkannte Zusammenhänge hinweisen. Die vierte Hauptkomponente korreliert am stärksten mit dem Redoxpotenzial und den pH-Werten. Positive Faktorwerte deuten also auf ein hohes Redoxpotenzial bei niedrigen (sauren) pH-Werten, während negative Faktorwerte in Proben mit neutralen bis basischen pH-Werten und niedrigen Eh-Werten zu finden sind, woraus ein eher reduzierendes Redoxvermögen resultiert. Die korrelierenden LHKW und AOX-Werte können darauf hinweisen, dass in reduzierenden Milieus weniger LHKW zu finden sind, weil sie dort besser abgebaut werden. Dies ist auf Basis der Einzelstoffe näher zu untersuchen.

Die Ergebnisse der Clusteranalyse zeigen, dass einzelne Eintragsquellen aufgrund der räumlichen Nähe und Verflechtung von Altablagerungen und Altstandorten nur schwer abzugrenzen sind. Belastungsschwerpunkte werden jedoch um die Grube Greppin und die Abstromgebiete auf Werksteil Wolfen-West, die Grube Antonie mit den östlichen angrenzenden Werksflächen Bitterfeld-Nord und Mitte-West, auf denen sich Klärteiche mit Spüldeponienutzung bzw. Absetzbecken für Schwebstoffe in der ehemaligen Grube Marie befinden, sowie im Werksteil Bitterfeld-Süd identifiziert.

Die Cluster in Abbildung 5.4 werden stets durch mehrere Hauptkomponenten beeinflusst, so dass eine eindeutige stoffliche Charakterisierung schwierig ist. Es ist anzunehmen, dass im Datensatz H96 die erste und die dritte Hauptkomponente mit Sickerwassereinträgen aus Deponien verbunden sind. Durch den hohen Aschegehalt des Deponats werden viele organische Stoffe zunächst sorbiert, während anorganische Stoffe freigesetzt werden. So bilden Salzfrachten bei ostdeutschen Mülldeponien die wesentlichen Schadstoffausträge in das Grundwasser (SRU, 1995). Auch die positiven Ladungen für Wassertemperatur, Phenolindex und CSB sowie die negative Ladung für Sauerstoff in der dritten Hauptkomponente deuten auf eine Verunreinigung durch leicht abbaubare organische Substanzen hin, wie sie typischerweise in Sickerwasser und Abwasser zu finden sind. Die Ergebnisse der Clusteranalyse in Abbildung 5.4 stützen diese These, da sich die Messstellen mit erhöhten Werten für die dritte Hauptkomponente in den Bergbaufolgelandschaften in der Nähe der Gruben Greppin, Johannes und Antonie sowie in deren Abstrombereichen befinden. Die genannten Deponien stehen aufgrund der fehlenden Basisabdichtung direkt in Kontakt mit dem tertiären Grundwasserleiter (Tabelle 2.8).

Die fünfte Komponente verweist auf Belastungen durch das Organo-Chlorpestizid HCH und seine Isomere (Abbildung 5.1-A.IV). Positive Faktorwerte treten vor allem in Proben aus dem tertiären Grundwasserleiter auf (Abbildung 5.1-B.IV). Die hohe negative Faktorladung des Sauerstoffs ist im Zusammenhang mit der HCH-Belastung schwer zu interpretieren, da HCH prinzipiell auch unter anaeroben Bedingungen abgebaut werden kann (Middeldorp et al., 1996; Willett et al., 1998). Allerdings ist festzuhalten, dass Sauerstoff und die Wassertemperatur in diesem Modell schlecht reproduziert werden, d.h. geringe Kommunalitäten von etwa 50 % haben (vgl. Anhang A 5.2) und daher die Faktorbildung nicht überbewertet werden sollte. Der Sauerstoffgehalt könnte negativ korreliert sein, da die Löslichkeit von Sauerstoff in Wasser bei steigender Temperatur abnimmt (Höiting, 1996).

Obwohl die HCH-Isomere mit Monochlorbenzen und Benzen über Produktion und Abbau verbunden sind und daher eine Korrelation wahrscheinlich wäre, werden die Stoffgruppen LHKW, BTEX und CB in der zweiten Hauptkomponente zusammengefasst, während die HCH-Isomere recht deutlich von diesen Gruppen getrennt werden. Lediglich die Chlorbenzene zeigen etwas erhöhte Faktorladungen in der fünften Hauptkomponente. Im nächsten Kapitel wird untersucht, ob dies auch auf die Einzelstoffe aus den Stoffgruppen zutrifft.

5.2 Stoffgruppenübergreifende Analyse ausgewählter Einzelstoffe

In den Kontaminationsprofilen (vgl. Kapitel 4) befinden sich folgende Stoffe bei Verwendung unterschiedlicher Datensätze stets unter den ersten 15 Substanzen und erhalten hohe Bewertungszahlen für die Kontaminationskriterien Emissions-Nachweishäufigkeit und mittlere Emissionskonzentration: Benzen, Monochlorbenzen (MCB), 1,2- und 1,4-Dichlorbenzen (12DCB, 14DCB), alpha- und delta-HCH (aHCH, dHCH), Tri- und Tetrachlorethen (TCE, PCE) sowie Di- und Trichlormethan (DCM, TCM).

Die Verteilung der ausgewählten Einzelstoffe ist dem Anhang A 5.3 bzw. dem Anhang A 5.6 (LHKW) zu entnehmen. Durch die logarithmische Transformation der Messwerte wird eine log-Normalverteilung erreicht, die mit zunehmendem Censoring jedoch gestört wird.

Im Folgenden soll untersucht werden, welche Zusammenhänge zwischen diesen Stoffen bestehen und ob die oben charakterisierten Faktoren für die Stoffgruppen LHKW, BTEX, CB und HCH durch die ausgewählten Einzelstoffe reproduziert werden.

5.2.1 Korrelationsanalysen

In Tabelle 5.5 ist dargestellt, wie stark die ausgewählten Einzelstoffe mit den Summenangaben pro Stoffgruppe im Datensatz H96 korrelieren. Die Summe der BTEX-Aromaten korreliert am besten mit Benzen, die Korrelationen mit den anderen Stoffen dieser Stoffgruppe liefern Koeffizienten < 0.75 . Die Summe der Chlorbenzene korreliert stark mit Monochlorbenzen sowie mit 1,2-Dichlorbenzen und 1,4-Dichlorbenzen (Tabelle 5.5). Die Korrelationen zwischen den anderen Einzelstoffen dieser Gruppe und der Summenangabe fallen durchweg wesentlich geringer aus (Koeffizienten von 0.19 bis 0.53).

Aus der Stoffgruppe der LHKW gehören vier Einzelstoffe zu den zehn ausgewählten Substanzen, die sowohl untereinander als auch mit der Summenangabe relativ gleich hohe Korrelationen ergeben (Tabelle 5.5). Mit Ausnahme von Tetrachlormethan korrelieren allerdings auch die hier nicht berücksichtigten Einzelstoffe mit der Summenangabe in derselben Spannweite.

Die Summe der HCH-Isomere korreliert signifikant mit allen Isomeren: Es ergeben sich Koeffizienten von 0.96 für alpha-HCH, 0.83 für delta-HCH, 0.82 für gamma-HCH und 0.81 für beta-HCH. Die Summe der DDT/D/E-Isomere korreliert im Datensatz H96 mit den untersuchten Verbindungen wie folgt: Während die Korrelationskoeffizienten zwischen der Gesamtsumme und den DDE-Isomeren mit < 0.5 sehr gering sind, sind sie für p,p-DDT mit 0.93 und o,p-DDT mit 0.90 sehr hoch und betragen für p,p-DDD 0.77 und o,p-DDD 0.73.

Deutliche Korrelationen (> 0.6) zwischen Einzelstoffen aus verschiedenen Stoffgruppen treten nur zwischen Benzen und Monochlorbenzen sowie zwischen Benzen und den Dichlorbenzenen auf (Tabelle 5.5).

Tabelle 5.5: Korrelationsmatrix nach Pearson mit ausgewählten Einzelstoffen und den Summenangaben der LHKW, BTEX-Aromaten, Chlorbenzene und HCH-Isomere.

Datensatz H96, log-transformierte Werte, $n = 198$, für HCH-Isomere: $n = 148$.
 Merkmale: Benzen, Summe BTEX (BTEX), Monochlorbenzen (MCB), 1,2-/1,4-Dichlorbenzen (12DCB, 14DCB), Summe Chlorbenzene (CB), Tri-/Tetrachlorethen (TCE, PCE) sowie Di-/Trichlormethan (DCM, TCM), Summe LHKW (LHKW), alpha-/delta-HCH (aHCH, dHCH), Summe HCH (HCH).
 Signifikante ($\alpha = 0.05$) Korrelationen ≥ 0.6 sind hervorgehoben.

	Benzen	BTEX	MCB	14DCB	12DCB	CB	DCM	TC M	TC E	PCE	LHKW	aHCH	dHCH
BTEX	0.92												
MCB	0.74	0.71											
14DCB	0.65	0.63	0.69										
12DCB	0.62	0.60	0.69	0.86									
CB	0.59	0.59	0.84	0.62	0.71								
DCM	0.42	0.49	0.36	0.46	0.49	0.36							
TCM	0.39	0.44	0.48	0.48	0.49	0.51	0.66						
TCE	0.39	0.48	0.52	0.48	0.46	0.58	0.68	0.80					
PCE	0.28	0.38	0.51	0.46	0.43	0.59	0.53	0.75	0.90				
LHKW	0.48	0.55	0.44	0.41	0.41	0.43	0.77	0.70	0.74	0.61			
aHCH	0.15	0.10	0.19	0.26	0.31	0.28	0.13	0.18	0.15	0.26	0.07		
dHCH	0.13	0.11	0.21	0.21	0.23	0.29	0.09	0.30	0.28	0.36	0.16	0.80	
HCH	0.15	0.09	0.23	0.28	0.34	0.32	0.14	0.23	0.16	0.24	0.09	0.96	0.83

5.2.2 Hauptkomponentenanalysen

Hauptkomponentenanalysen werden für den Datensatz H96 mit den log-transformierten Werten und den Rangzahlen der in Tabelle 5.5 aufgeführten Einzelstoffe durchgeführt. Beide Varianten bringen sehr ähnliche Lösungen hervor (Tabelle 5.6). Nach dem Kaiserkriterium

werden jeweils drei Hauptkomponenten extrahiert, die etwa 80 % der Gesamtvarianz erklären (Tabelle 5.6) und Kommunalitäten der Einzelstoffe von 70 % oder mehr erzeugen (vgl. Anhang A 5.4). Wie bei der summarischen Betrachtung (Tabelle 5.3) fällt die Hauptkomponentenanalyse auf Basis der Rangzahlen/-korrelationen im Hinblick auf die erklärte Gesamtvarianz und auf die Kommunalitäten der Einzelstoffe etwas schlechter aus als die parametrische Analyse.

Beide Lösungen in Tabelle 5.6 sind miteinander vergleichbar, da sich die Zusammensetzung der Faktoren nicht ändert und lediglich eine Inversion zwischen der ersten und zweiten Hauptkomponente auftritt. Im Folgenden wird die Lösung der Hauptkomponentenanalyse mit den log-transformierten Werten betrachtet. In der ersten Hauptkomponente werden Benzen, Monochlorbenzen und beide Dichlorbenzene zusammengefasst. Mit der zweiten Hauptkomponente korrelieren die vier LHKW, mit der dritten die beiden HCH-Isomere. Mit Ausnahme von Benzen und den Chlorbenzenen gibt es also keine stoffgruppenübergreifende Faktorbildung. Allerdings sind sich Benzen und die Chlorbenzene chemisch ähnlicher als die anderen Substanzen.

Alle Faktorladungen und die entsprechenden Faktorwerte an den untersuchten Messstellen, die Grundwasserleitern und Teilgebieten zugeordnet sind, sind in Abbildung 5.5 dargestellt. Man erkennt, dass die Einzelstoffe in den Hauptkomponenten eindeutiger getrennt sind als die Variablen in der summarischen Betrachtung (vgl. Abbildung 5.1-A und Abbildung 5.5-A). Eine räumliche Differenzierung der Faktorwerte ist ansatzweise zu erkennen: Viele Proben vom Werksteil CAG-Wolfen erhalten hohe Faktorwerte für die erste Hauptkomponente, die auf hohe Belastungen durch Benzen und Chlorbenzene verweist, und geringere für die zweite (Abbildung 5.5-C.I). Auf dem Werksgelände der CAG-Bitterfeld ist dies genau umgekehrt, hier sind demnach überdurchschnittliche Belastungen mit LHKW zu finden. Die Proben aus der Muldeau erhalten für beide Komponenten geringe Faktorwerte, während die Proben aus den Bergbaufolgelandschaften und den Siedlungsbereichen größtenteils negative Faktorwerte für die erste Hauptkomponente, aber positive für die zweite (LHKW) bekommen.

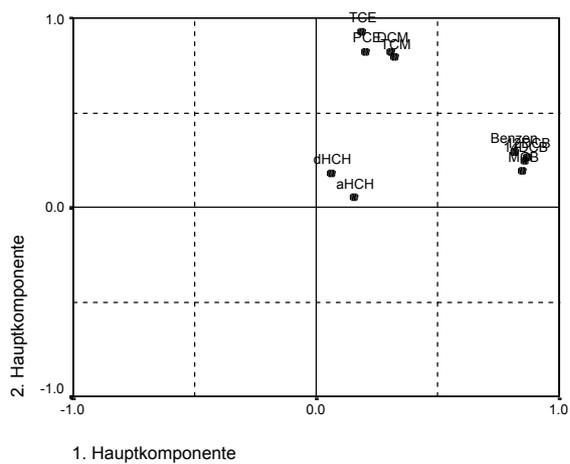
Positive Faktorladungen für die dritte Hauptkomponente, die auf HCH-Belastungen hinweist, findet man sowohl in Proben aus dem quartären als auch in Proben aus dem tertiären Grundwasserleiter (Abbildung 5.5-B.II). Allerdings treten nur selten negative Faktorwerte in Proben aus dem tertiären Grundwasserleiter auf. Nach Teilgebieten werden die untersuchten Messstellen durch diesen Faktor hingegen weniger deutlich getrennt als durch die anderen beiden Komponenten (Abbildung 5.5-C.II).

Tabelle 5.6: Eigenwerte, erklärte Gesamtvarianz und Markiertvariablen für Hauptkomponentenanalysen mit zehn ausgewählten Einzelstoffen (Datensatz H96).

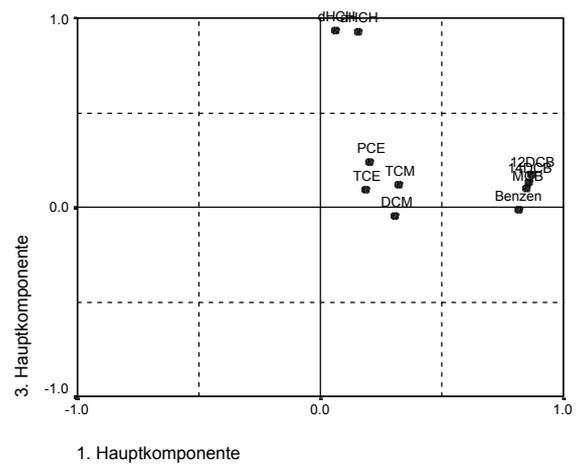
HK aus H96 (log-transformierte Werte), n = 148	1	2	3	Summe [%]
Eigenwert	5.12	1.62	1.45	
Anteil der erklärten Gesamtvarianz [%]	51.16	16.23	14.45	81.84
Markiertvariablen	1,4-Dichlorbenzen 1,2-Dichlorbenzen Monochlorbenzen Benzen	Trichlorethen Tetrachlorethen Dichlormethan Trichlormethan	alpha- HCH delta- HCH	
HK aus H96 (Rangzahlen), n = 148	2	1	3	Summe [%]
Eigenwert	1.69	4.78	1.38	
Anteil der erklärten Gesamtvarianz [%]	16.93	47.77	13.83	78.54
Markiertvariablen	1,4-Dichlorbenzen 1,2-Dichlorbenzen Monochlorbenzen Benzen	Trichlorethen Tetrachlorethen Dichlormethan Trichlormethan	alpha- HCH delta- HCH	

A: Faktorladungen:

A.I: 2. und 1. Hauptkomponente

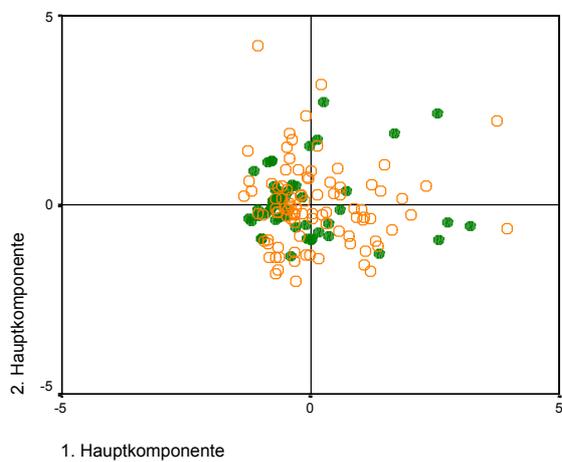


A.II: 3. und 1. Hauptkomponente

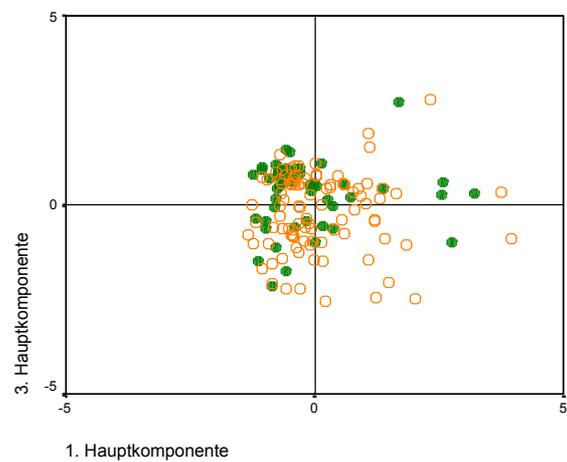


B: Faktorwerte, differenziert nach Grundwasserleiter (GWL100: ○, GWL500: ●):

B.I: 2. und 1. Hauptkomponente

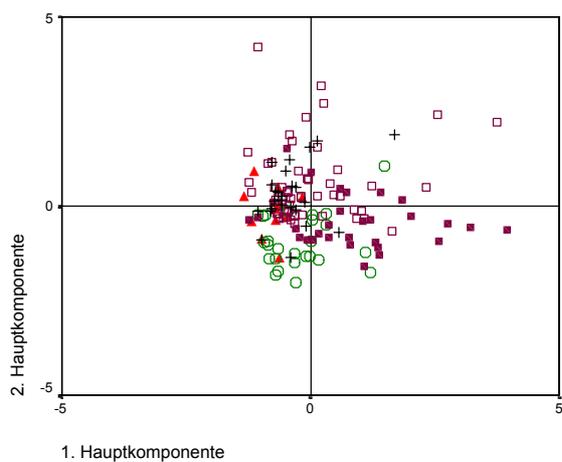


B.II: 3. und 1. Hauptkomponente

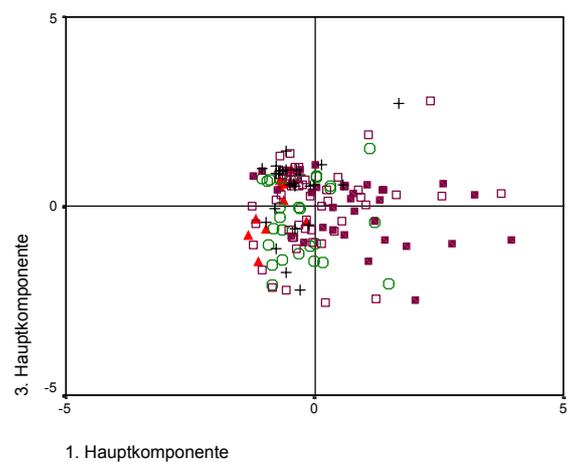


C: Faktorwerte, differenziert nach Teilgebieten (Siedlung: ▲, Mulde: ●, Bergbaufolge: +, Werksteile CAG-Wolfen: ■, Werksteile CAG-Bitterfeld: □):

C.I: 2. und 1. Hauptkomponente



C.II: 3. und 1. Hauptkomponente



Merkmale: Benzen, MCB, 12DCB, 14DCB, aHCH, dHCH, DCM, TCM, TCE, PCE.

Abbildung 5.5: Faktorladungen und Faktorwerte für die 3-Komponentenlösung der Hauptkomponentenanalyse mit zehn ausgewählten Stoffen (Datensatz H96, log-transformierte Werte, n = 148, Ausführungen im Text).

Ausgewählte Einzelstoffe und Vor-Ort- und Summenparameter

Um die Kontaminationsfaktoren aus den Einzelstoffen mit den Faktoren aus den summarischen Größen in Tabelle 5.3 vergleichen zu können, wurden Vor-Ort- und Summenparameter in die Analyse einbezogen. Sechs Hauptkomponenten erklären etwa 80 % der Gesamtvarianz und haben Eigenwerte größer 1, d.h. sollten nach dem Kaiserkriterium extrahiert werden. Ein Vergleich der Faktorladungen in Tabelle 5.7 und Tabelle 5.3 zeigt, dass mit den ausgewählten Einzelstoffen ähnliche Faktoren wie mit den Summenangaben pro Stoffgruppe extrahiert werden. Allerdings ändert sich die Reihenfolge der Faktoren, da der größere Varianzanteil der Daten hier durch die Einzelstoffe und weniger durch die Summenparameter erklärt wird.

Der zweite Faktor in Tabelle 5.3, der die Belastung durch BTEX-Aromaten, Chlorbenzene und LHKW charakterisiert, wird in Tabelle 5.7 in zwei Komponenten gespalten. Die erste Komponente korreliert mit den Dichlorbenzenen, Monochlorbenzen, Benzen sowie dem Leuchtbakterientest und dem Phenolindex, während sich die zweite Komponente aus Tri-/Tetrachlorethen, Di-/Trichlormethan und AOX zusammensetzt. Die drei folgenden Hauptkomponenten in Tabelle 5.7, also die Belastung durch gelösten organischen Kohlenstoff, die Salzfracht und die HCH-Belastung, sind im Vergleich zu Tabelle 5.3 sehr ähnlich zusammengesetzt. In der sechsten Hauptkomponente (Redoxverhältnisse) fehlen in Tabelle 5.7 jedoch die positiven Ladungen der LHKW. Im Gegensatz zur summarischen Betrachtung werden die vier LHKW eindeutig der zweiten Komponente zugeordnet. Die Faktorbildung der ausgewählten Einzelstoffe aus den Stoffgruppen BTEX-Aromaten, Chlorbenzene und HCH-Isomere stimmt hingegen sehr gut mit den Ergebnissen aus der summarischen Betrachtung überein, so dass diese Substanzen gute Vertreter für die Stoffgruppen sind.

Tabelle 5.7: Kommunalitäten und Faktorladungen in der rotierten Komponentenmatrix mit zehn ausgewählten Einzelstoffen, Vor-Ort- und Summenparametern.

Datensatz H96, log-transformierte Werte (außer pH und Eh), n = 143.
Variablen mit absoluten Faktorladungen > 0.5 sind hervorgehoben.

Hauptkomponente	1	2	3	4	5	6	Summe [%]
Anteil der erklärten Varianz [%]	36.28	14.30	9.79	7.57	5.45	4.92	78.32
Eigenwerte	7.98	3.15	2.15	1.67	1.20	1.08	Kommunalitäten
Benzen	0.76	0.22	0.37	0.21	-0.09	0.11	0.82
Monochlorbenzen	0.82	0.17	0.11	0.15	0.07	0.07	0.74
1,4-Dichlorbenzen	0.81	0.29	0.13	-0.03	0.19	-0.09	0.81
1,2-Dichlorbenzen	0.85	0.30	0.07	0.04	0.21	-0.05	0.86
Dichlormethan	0.31	0.78	0.13	0.05	-0.10	0.20	0.78
Trichlormethan	0.32	0.78	0.07	0.13	0.05	0.19	0.77
Trichlorethen	0.16	0.87	0.19	0.24	0.06	0.09	0.89
Tetrachlorethen	0.17	0.83	0.09	0.17	0.23	-0.04	0.80
alpha-HCH	0.15	0.01	0.01	0.11	0.87	0.20	0.83
delta-HCH	0.07	0.16	-0.02	0.18	0.85	0.18	0.82
pH	-0.12	-0.11	0.08	-0.06	-0.20	-0.83	0.77
Eh	-0.24	0.40	-0.11	-0.09	0.21	0.70	0.77
Leitfähigkeit	0.11	0.10	0.34	0.83	0.01	0.09	0.84
Sauerstoff	0.00	-0.10	0.03	-0.58	-0.25	0.17	0.44
Salinität	0.10	0.11	0.33	0.84	0.00	0.10	0.84
Wassertemperatur	0.20	0.38	0.15	0.56	0.21	-0.04	0.57
Leuchtbakterientest	0.54	0.22	0.50	0.16	-0.24	-0.27	0.76
AOX	0.27	0.54	0.59	-0.09	-0.01	0.26	0.78
CSB	0.23	0.07	0.79	0.40	-0.02	0.09	0.85
DOC	0.11	0.14	0.89	0.13	0.05	-0.21	0.89
TOC	0.16	0.12	0.87	0.32	-0.02	-0.10	0.92
Phenolindex	0.50	-0.01	0.19	0.46	-0.41	0.11	0.68

5.2.3 Stabilität der Kontaminationsfaktoren

Die Stabilität der Kontaminationsfaktoren aus Tabelle 5.6 wird mit folgenden Datensätzen untersucht (vgl. Tabelle 5.8): Aus dem Gesamtdatensatz H96, der an 148 Messstellen Angaben für die zehn ausgewählten Einzelstoffe enthält, wurde ein Datensatz ohne die Werte unterhalb der analytischen Nachweisgrenzen erstellt. Die aus diesem Datensatz (H96_(Werte > NWG)) resultierenden Kontaminationsfaktoren sind mit den Ergebnissen auf Basis des Gesamtdatensatzes identisch (Tabelle 5.8). Das vorhandene Censoring wirkt sich also nicht gravierend auf die Faktorbildung aus.

Des Weiteren wurden aus dem Datensatz H96 zwei Teildatensätze mit reduziertem Stichprobenumfang gewonnen. Eigentlich besteht der Datensatz H96∩S97 aus maximal 122 Messstellen (vgl. Tabelle 3.5). Für die Beprobungskampagne vom Herbst 1996 liegen jedoch nur an 92 Messstellen Werte für alle zehn ausgewählten Einzelstoffe vor (H96_(H96∩S97), n = 92), im Sommer 1997 sogar nur an 44 (S97_(H96∩S97), n = 44) (vgl. Tabelle 5.8). Um die Vergleichbarkeit zwischen den Beprobungskampagnen H96 und S97 zu erhöhen, wurde aus dem Datensatz H96 zusätzlich ein Teildatensatz mit diesen 44 Messstellen erstellt (H96_(H96∩S97), n = 44). Darüber hinaus wurde der gesamte Datensatz S97 ausgewertet, in dem an 82 Messstellen Angaben für diese Merkmalsgruppe vorliegen.

Wie der Tabelle 5.8 zu entnehmen ist, bleibt die Zusammensetzung und die Reihenfolge der drei Hauptkomponenten aus den zehn ausgewählten Stoffen bei den unterschiedlichen Stichproben sehr stabil (vgl. Anhang A 5.4). In den Faktoren wird die Trennung nach Stoffgruppen beibehalten, d.h. Benzen und Chlorbenzene, die LHKW sowie die HCH-Isomere bilden jeweils einen Faktor. Mit sinkendem Stichprobenumfang steigt allerdings der Anteil der erklärten Gesamtvarianz (Tabelle 5.8), d.h. die kleineren Stichproben sind homogener.

Tabelle 5.8: Kontaminationsfaktoren der zehn ausgewählten Einzelstoffe (log-transformierte Werte) in Abhängigkeit von der Stichprobe (Ausführungen im Text).

generelle Faktorbezeichnung	Chlorbenzene/Benzen	LHKW	HCH	
Markiervariablen	1,4-Dichlorbenzen 1,2-Dichlorbenzen Monochlorbenzen Benzen	Trichlorethen Tetrachlorethen Dichlormethan Trichlormethan	alpha-HCH delta-HCH	
HK aus H96, n = 148	1	2	3	Summe [%]
Eigenwert	5.12	1.62	1.45	
Anteil der erklärten Gesamtvarianz [%]	51.16	16.23	14.45	81.84
HK aus H96_(Werte > NWG), n = 42	1	2	3	
Eigenwert	5.08	1.70	1.40	
Anteil der erklärten Gesamtvarianz [%]	50.79	16.96	14.01	81.76
HK aus H96_(H96∩S97), n = 92	1	2	3	
Eigenwert	5.41	1.66	1.23	
Anteil der erklärten Gesamtvarianz [%]	54.06	16.57	12.25	82.89
HK aus H96_(H96∩S97), n = 44	1	2	3	
Eigenwert	5.82	1.75	0.98	
Anteil der erklärten Gesamtvarianz [%]	58.23	17.46	9.77	85.46
HK aus S97_(H96∩S97), n = 44	1	2	3	
Eigenwert	5.47	1.78	1.11	
Anteil der erklärten Gesamtvarianz [%]	54.71	17.83	11.12	83.65
HK aus S97, n = 82	1	2	3	
Eigenwert	4.77	1.83	1.38	
Anteil der erklärten Gesamtvarianz [%]	47.66	18.32	13.76	79.74

Bezieht man die Vor-Ort- und Summenparameter in die Analyse ein, ergibt sich ein ähnliches Bild wie bei der summarischen Betrachtung der Stoffgruppen in Tabelle 5.4 (vgl. Anhang A 5.5).

5.2.4 Räumliche Muster der Kontaminationsfaktoren (Clusteranalysen)

Wie in Kapitel 5.1.4 wurden verschiedene Clusteranalysen eingesetzt, um die untersuchten Messstellen zu klassifizieren. Für die Faktorwerte aus der 3-Komponentenlösung mit dem Datensatz H96 (vgl. Abbildung 5.5) wurde hier aufgrund der Entwicklung der Clusterkriterien die 7-Clusterlösung ausgewählt. Mit dem AL-Fusionierungsalgorithmus werden in der 7-Clusterlösung ein großer Cluster sowie sechs kleine Cluster mit jeweils 2 bis 6 Messstellen, die vergleichsweise extreme Faktorwerte aufweisen, gebildet (Abbildung 5.6-A und -C). Damit unterscheidet sich dieses Verfahren wiederum grundlegend von den anderen beiden (KM und WA), die den Datensatz in mehrere größere Cluster einteilen (Abbildung 5.6-B und -D).

Da das Ward-Verfahren recht homogene Cluster bildet, wird diese Clusterlösung wiederum genauer betrachtet. Die räumliche Verbreitung der Cluster und das Hasse-Diagramm der Clusterzentren sind in Abbildung 5.7-A.1 bzw. -B.1 dargestellt.

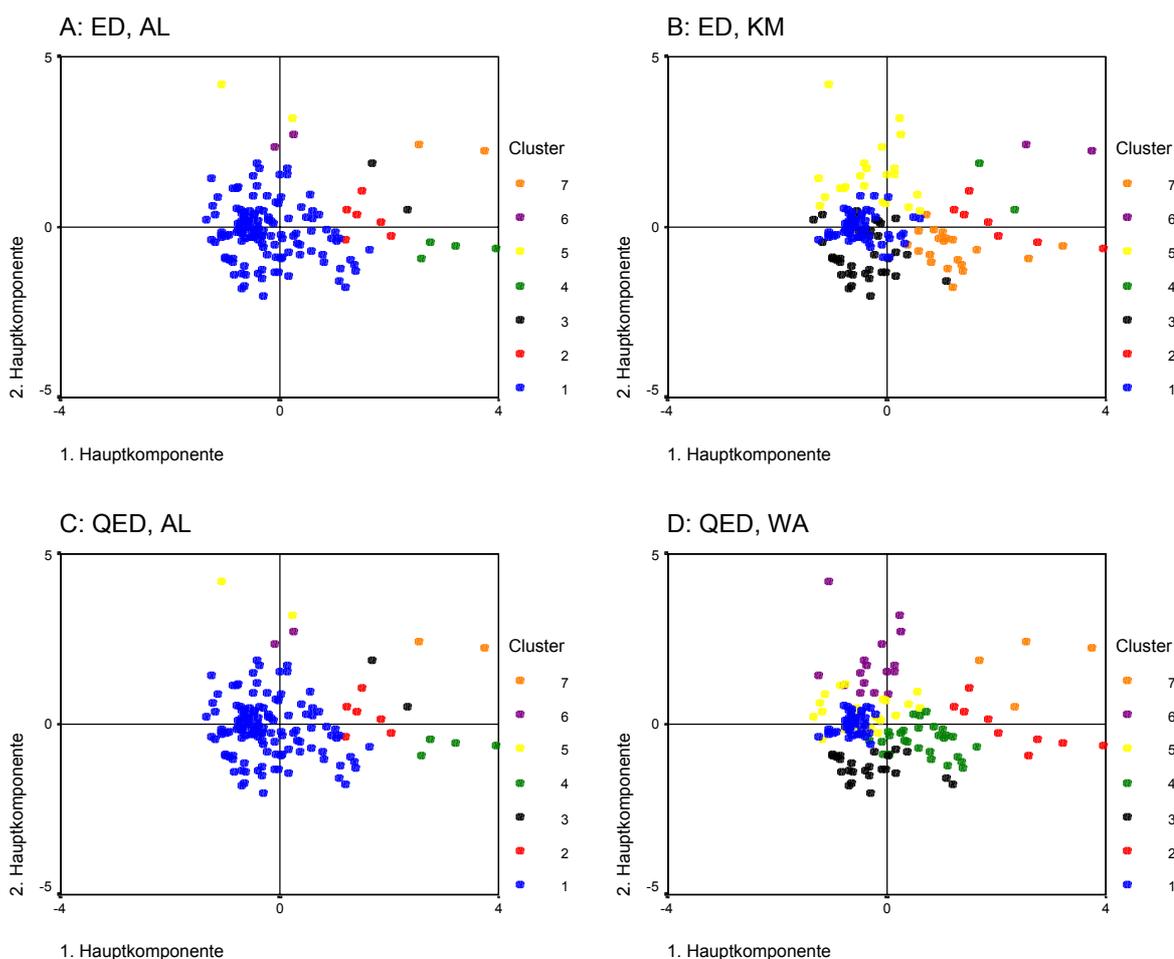
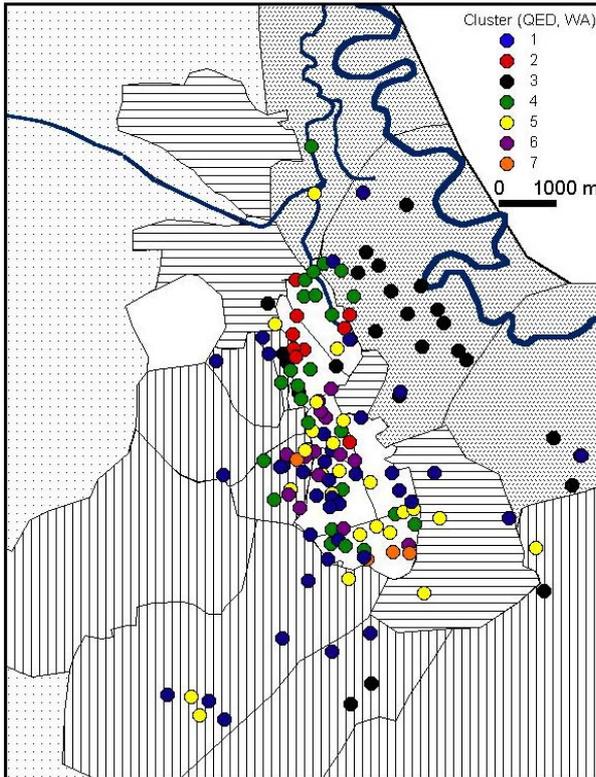
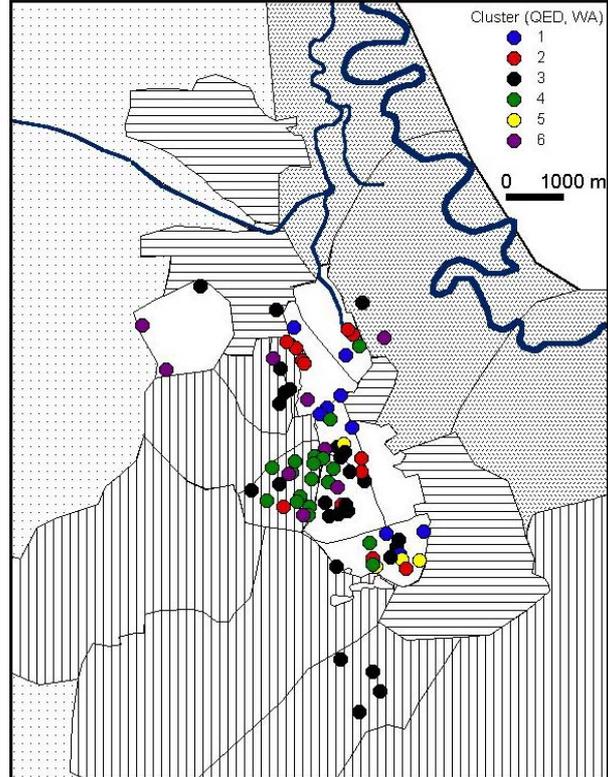


Abbildung 5.6: Verschiedene 7-Clusterlösungen für die Faktorwerte aus Abbildung 5.5 (Datensatz H96, $n = 148$, 10 ausgewählte Einzelstoffe). Verfahren: ED = euklidische Distanz, QED = quadrierte euklidische Distanz, AL = Average Linkage between Groups, KM: k-means (Clusterzentrenanalyse), WA = Ward-Methode.

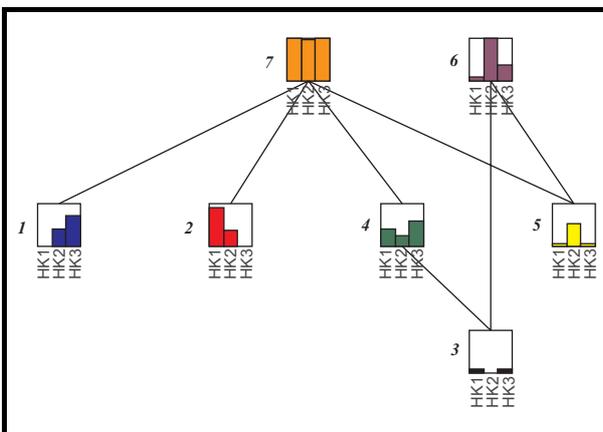
A.I: Datensatz H96 (n = 148), 7-Clusterlösung



A.II: Datensatz S97 (n = 82), 6-Clusterlösung



B.I: Datensatz H96 (n = 148), 7-Clusterlösung



B.II: Datensatz S97 (n = 82), 6-Clusterlösung

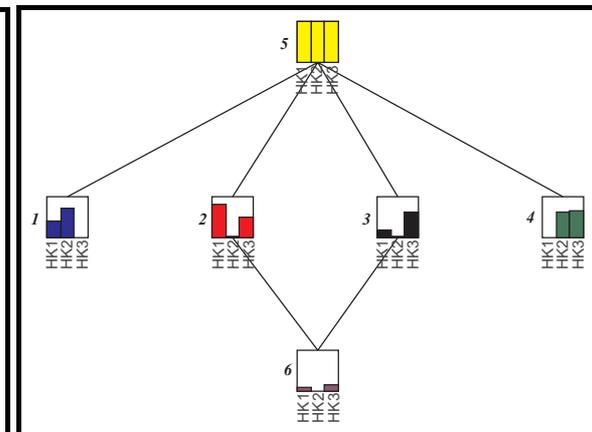


Abbildung 5.7: Räumliche Anordnung der Cluster (A) und Hasse-Diagramme der Clusterzentren (B) für die Faktorwerte der 3-Komponentenlösung mit zehn Einzelstoffen in den Datensätzen H96 und S97 (vgl. Tabelle 5.8); Verfahren: quadrierte euklidische Distanz, Ward-Methode; die Beschreibung der Teilgebiete ist Abbildung 2.1 und Tabelle 2.1 zu entnehmen.

Hohe Faktorwerte für alle drei Hauptkomponenten weisen die vier Messstellen im **Cluster 7** auf. Mit einer Ausnahme liegen diese Messstellen im Werkteil Bitterfeld-Süd (Abbildung 5.7-A.I). Niedriger belastet sind die Messstellen der Cluster 1, 2, 3, 4 und 5; hier treten im Vergleich zum Cluster 7 geringere mittlere Faktorwerte für alle drei Hauptkomponenten auf. Im Cluster 6 sind hingegen höhere mittlere Faktorwerte für die 2. Hauptkomponente (LHKW) zu finden (Abbildung 5.7-B.I).

Die Cluster 1, 2, 4 und 5 befinden sich auf dem zweiten Level im Hasse-Diagramm und bilden daher untereinander keine Ordnung. Der **Cluster 1** ist durch relativ hohe Faktorwerte für die zweite (LHKW) und vor allem die dritte (HCH) Hauptkomponente gekennzeichnet

(Abbildung 5.7-B.I). Die Messstellen aus diesem Cluster sind im ganzen Untersuchungsgebiet verstreut (Abbildung 5.7-A.I). Dasselbe gilt für den **Cluster 4**, der im Vergleich zum Cluster 1 aber höhere mittlere Werte für die erste Hauptkomponente (Benzen und Chlorbenzene) aufweist. Im Gegensatz dazu ist der **Cluster 2** mit einer Ausnahme auf die Werksteile Wolfen-West und Wolfen-Ost beschränkt und zeichnet sich durch hohe Faktorwerte für die erste Komponente (Chlorbenzene und Benzen) aus. Messstellen aus dem **Cluster 5**, der durch hohe mittlere Faktorwerte für die zweite Komponente (LHKW) gekennzeichnet ist, sind hauptsächlich auf den Werksteilen in Bitterfeld zu finden. Der **Cluster 6**, der im Vergleich zum Cluster 5 höher mit LHKW belastet ist, lässt sich auf die Werksteile Bitterfeld-Nord/Mitte-West und die Grube Antonie eingrenzen (Abbildung 5.7-A.I). Im Vergleich zu den Clustern 4, 6 und 7 ist der **Cluster 3** am geringsten belastet. Er ist hauptsächlich in der Muldeau und westlich des Werksteils Wolfen-West zu finden (Abbildung 5.7-A.I).

Cluster im Sommer 1997

Um die Stabilität der Clusterlösung beurteilen zu können, wurden die Faktorwerte aus der 3-Komponentenlösung mit dem Datensatz S97 (vgl. Tabelle 5.8) ebenfalls mit einer hierarchischen Clusteranalyse (QED, WA) klassifiziert. Auf einem der vorangegangenen Clusteranalyse vergleichbaren Ähnlichkeitslevel (Index) entsteht hier eine 6-Clusterlösung. Wie Abbildung 5.7 zu entnehmen ist, erfolgt in beiden Beprobungskampagnen eine ähnliche Einteilung der Objekte. Der hoch belastete **Cluster 5** aus dem Datensatz S97 ist nahezu identisch mit dem Cluster 7 im Herbst 1996 (vgl. Abbildung 5.7-A.I und -A.II). Sehr deutlich tritt bei den Messstellen, die im Sommer 1997 untersucht wurden, der Bereich um die Gruben Antonie und Marie als **Cluster 4** hervor. Er ist durch relativ hohe Werte der zweiten (LHKW) und dritten (HCH) Hauptkomponente charakterisiert. Der angrenzende **Cluster 3** zeigt hingegen geringere Werte für die zweite Hauptkomponente (LHKW).

Cluster aus den ausgewählten Einzelstoffen, Vor-Ort- und Summenparametern

Mit den Faktorwerten aus der Hauptkomponentenanalyse in Tabelle 5.7, in die neben den ausgewählten Einzelstoffen auch Vor-Ort- und Summenparameter einbezogen wurden, ist die 7-Clusterlösung aus der hierarchischen Clusteranalyse (QED, WA) in Abbildung 5.8 dargestellt. Die Clusterbildung erfolgt zum Teil in Analogie zur Clusterlösung in Abbildung 5.4, die auf den Summenangaben pro Stoffgruppe sowie Vor-Ort- und Summenparametern basiert.

Der **Cluster 1** in Abbildung 5.8 ist durch hohe Faktorwerte der zweiten Komponente (LHKW, AOX) gekennzeichnet. Er befindet sich auf den Werksteilen Bitterfeld-Nord und Süd. Er hat keine direkte Entsprechung zu einem Cluster in Abbildung 5.4, da die LHKW-Belastung dort nicht gesondert ausgewiesen wird. Der **Cluster 2** in Abbildung 5.8 mit Schwerpunkten an der Grube Greppin und im Werksteil Bitterfeld-Nord entspricht dem Cluster 6, in Abbildung 5.4. Beide weisen aufgrund der hohen Faktorwerte für die Salzfracht und für gelösten organisch gebundenen Kohlenstoff auf den Einfluss von Deponiesickerwässern hin.

Die **Cluster 3** und **Cluster 4** in Abbildung 5.8 kennzeichnen die HCH-Belastung (durch die hohen Faktorwerte für die fünfte Hauptkomponente). Im Cluster 3 treten außerdem hohe Faktorwerte für die Salzfracht und die LHKW auf. Dies deutet auf eine Verunreinigung durch Deponiesickerwässer hin, da sich die Messstellen dieses Clusters um die Gruben Freiheit III, Antonie und Greppin befinden. Vereinzelt treten sie aber im gesamten Untersuchungsgebiet auf. Messstellen des Clusters 4 weisen hingegen höhere Faktorwerte für die erste Komponente auf (Abbildung 5.8-B). Sie bilden Schwerpunkte auf den Werksteilen

Bitterfeld Mitte-West (Kläranlage) und Süd sowie im Norden des Werksteils Wolfen-Ost (Schachtgraben) und sind somit vermutlich an Abwassereinträge gebunden. Beide Cluster finden ihre Entsprechungen in den Clustern 1 und 4 in Abbildung 5.4.

Der **Cluster 5** ist räumlich eng auf die Grube Antonie/Marie und die östlich angrenzenden Werksteile begrenzt. Es treten hohe Faktorwerte für die letzten vier Hauptkomponenten auf (HCH, gelöster Kohlenstoff, Salzfracht und Redoxverhältnisse). Er entspricht in etwa dem Cluster 5 in Abbildung 5.4. Der **Cluster 6** in Abbildung 5.8 befindet sich einerseits auf den Werksteilen Wolfen im Abstrom der Grube Greppin und am Schachtgraben und andererseits im Werksteil Bitterfeld Süd. Hier treten hohe Werte für die erste und vierte Hauptkomponente auf, die auf eine Verunreinigung durch Chlorbenzene und anorganische Salze (Leitfähigkeit) deuten. Der Cluster entspricht in etwa den Clustern 2 und 6 in Abbildung 5.4. Der **Cluster 7** unterscheidet sich von den anderen Clustern durch die Redoxverhältnisse und ist gering belastet. Er befindet sich vor allem in der Muldeau und entspricht dem Cluster 3 aus Abbildung 5.4.

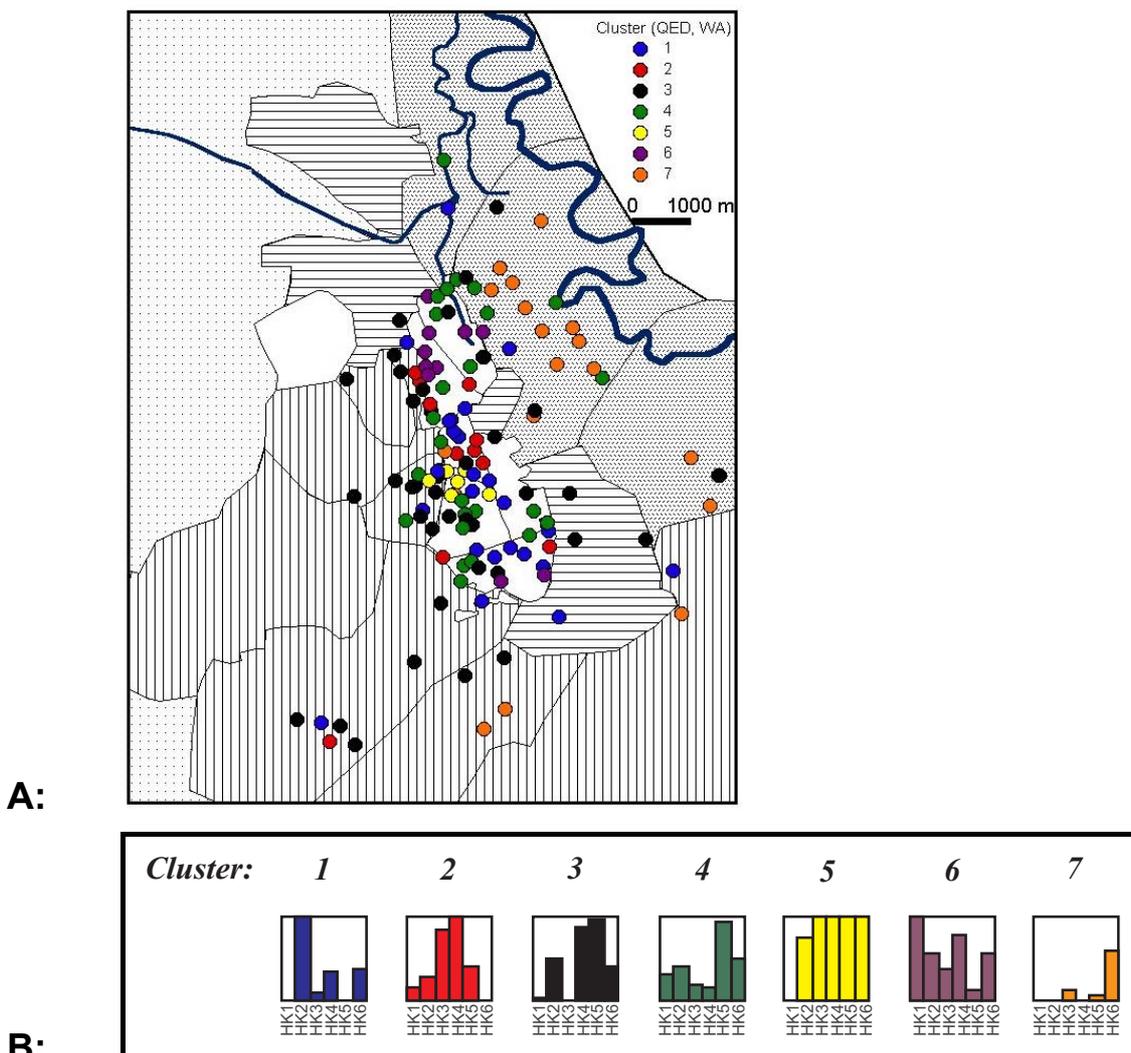


Abbildung 5.8: 7-Clusterlösung der Faktorwerte der 6-Komponentenlösung mit zehn Einzelstoffen sowie Vor-Ort- und Summenparametern (Tabelle 5.7, Datensatz H96, n = 143), Verfahren: quadrierte euklidische Distanz, Ward-Methode. A: räumliche Anordnung der Cluster; die Beschreibung der Teilgebiete ist Abbildung 2.1 und Tabelle 2.1 zu entnehmen. B: Hasse-Diagramm der Clusterzentren.

5.2.5 Interpretation und Diskussion der Kontaminationsfaktoren

Die Zusammensetzung der Faktoren kann bei (organischen) Schadstoffen durch mehrere Prozesse oder Einflüsse erklärt werden. Stoffe können mit einem Faktor korrelieren, da sie über die Produktion (als Ausgangs-, Zwischen-, Neben- oder Endprodukte) miteinander verknüpft sind oder da sie zusammen deponiert wurden und daher auf ähnlichen Wegen ins Grundwasser gelangen. Diese Faktorbildung wird verstärkt, wenn die Stoffe aufgrund ihrer physikochemischen Eigenschaften ein ähnliches Ausbreitungsverhalten im Grundwasser zeigen. Darüber hinaus können Stoffe durch eine Abbaukette miteinander in Beziehung stehen, so dass auch Stoffe, die nicht primär zusammen eingetragen wurden, in einem Faktor zu finden sind. Stoffe einer Abbaukette müssten eine (Rang-)Korrelation aufweisen, wenn kein Stoff in der Kette angereichert oder anderweitig eingetragen wird.

Die ausgewählten Einzelstoffe bilden kaum stoffgruppenübergreifende Faktoren. Eine Ausnahme bilden die Chlorbenzene und Benzen, die durch eine Abbaukette miteinander verbunden sind (vgl. Kapitel 3.2). Demgegenüber korrelieren die HCH-Isomere weder mit Benzen noch mit Monochlorbenzen, obwohl HCH mit beiden Stoffen durch Produktion bzw. Abbau verbunden ist (vgl. Kapitel 2.3.3 und Kapitel 3.2).

Eine Bildung von Monochlorbenzen und Benzen aus HCH wurde von Lampe et al. (1995) im Umfeld der Grube Antonie beobachtet. Die vorliegenden Auswertungen zeigen jedoch, dass eine solche Korrelation auf regionaler Skala nicht vorhanden ist. Sowohl in der summarischen Betrachtung als auch in der Betrachtung auf der Basis von Einzelstoffen wurde HCH von den Chlorbenzenen und Benzen deutlich getrennt. Dies muss zum einen darauf zurückgeführt werden, dass Benzen und Monochlorbenzen an mehreren Produktionen beteiligt sind. Beispielsweise war Benzen ein verbreitetes Lösemittel, und Monochlorbenzen ist u.a. Ausgangsstoff in der Farbenproduktion sowie in der DDT-Produktion (vgl. Anhang A 2.2). Daher ist es wahrscheinlich, dass für die Chlorbenzene und für Benzen mehrere Eintragsquellen existieren, die unabhängig vom HCH-Eintrag sind. Dies wird durch die Ergebnisse der Clusteranalyse bestätigt. So liegt der Schwerpunkt des ersten Kontaminationsfaktors (Chlorbenzene, Benzen) im Werksteil Wolfen (im Abstrom der Grube Greppin) und ist auf die Abfälle aus der Farbenproduktion zurückzuführen. Der dritte Kontaminationsfaktor (HCH) bildet seinen Schwerpunkt hingegen an den Gruben Antonie und Marie sowie am Schachtgraben und ist daher auf die Entsorgung von HCH-Abfällen und durch HCH-belastete Abwassereinleitungen zu erklären.

Darüber hinaus unterscheiden sich die physikochemischen Eigenschaften von Benzen sowie von Mono- und Dichlorbenzenen deutlich von den Eigenschaften der HCH-Isomere (vgl. Abbildung 4.7), so dass sich die erst genannten Stoffe schneller im Grundwasser ausbreiten als HCH. Außerdem steht Monochlorbenzen am Ende der Abbaukette der Chlorbenzene (vgl. Abbildung 3.9). All diese Einflussgrößen werden bei der Betrachtung des gesamten Untersuchungsgebietes aufsummiert, so dass die Korrelation zwischen Monochlorbenzen/Benzen und HCH, die lokal aus der HCH-Abbaukette resultiert, auf regionaler Skala durch dominantere Prozesse überlagert wird.

Im Allgemeinen liefert eine Einzelstoffanalyse genauere bzw. besser interpretierbare Ergebnisse als eine summarische Betrachtung. Wie in Kapitel 4 gezeigt wurde, können die Vertreter einer Stoffgruppe unterschiedliche Relevanz für eine Grundwasserkontamination haben und auf unterschiedliche Ausbreitungs- und Eintragsmuster verweisen. Beispielsweise existieren große Unterschiede zwischen Monochlorbenzen, den Tetrachlorbenzenen und Hexachlorbenzen. In der summarischen Betrachtung überlagern sich verschiedene Effekte, Aggregation geht i.d.R. mit einem Informationsverlust einher. Die recht gute Über-

einstimmung der Ergebnisse der statistischen Strukturanalyse für die summarischen Betrachtung einerseits und die Einzelstoffbetrachtung andererseits zeigt jedoch, dass die durch das Rankingverfahren in Kapitel 4 ausgewählten Stoffe die jeweiligen Stoffgruppen dominieren, also wenig Informationsverlust durch eine summarische Betrachtung eintritt. So dominieren Monochlorbenzen und die Dichlorbenzene die Belastung durch Chlorbenzene, Benzen die Belastung durch BTEX-Aromaten sowie alpha- und delta-HCH die HCH-Belastung. Für detaillierte räumliche (und zeitliche) Analysen sollten diese Stoffe vorrangig ausgewertet werden. Für die ausgewählten LHKW gilt dies allerdings nur eingeschränkt. Die Summe der LHKW konnte in der summarischen Betrachtung nicht eindeutig einem Faktor zugeschrieben werden, während die vier ausgewählten LHKW in der Einzelstoffanalyse im zweiten Kontaminationsfaktor zusammengefasst werden. Offensichtlich wird diese stofflich vergleichsweise heterogene Gruppe durch mehrere Prozesse beeinflusst. Sie wird daher im folgenden Kapitel auf Basis aller verfügbaren Einzelstoffanalysen untersucht.

5.3 Analyse von leichtflüchtigen halogenierten Kohlenwasserstoffen

Die Stoffgruppe der leichtflüchtigen halogenierten Kohlenwasserstoffe (LHKW) wurde in Kapitel 4.2.4 als die wichtigste Stoffgruppe für die Grundwasserkontamination in der Region Bitterfeld-Wolfen identifiziert und hat darüber hinaus internationale Bedeutung für Grundwasserkontaminationen. Jeweils elf LHKW wurden in den Datensätzen H96 und S97 an fast allen Proben untersucht (vgl. Anhang A 3.1). In den folgenden Auswertungen wurde neben den vollständigen Datensätzen H96 (198 Proben) und S97 (207 Proben) deren Schnittmenge ($H96 \cap S97$) aus 122 Messstellen für beide Beprobungskampagnen betrachtet (vgl. Tabelle 3.5). Die Vergleichbarkeit zwischen beiden Beprobungskampagnen wird gewährleistet, indem nur die zehn Substanzen berücksichtigt werden, die in beiden Kampagnen erhoben wurden. Im Herbst 1996 wurde trans 1,2-Dichlorethen, im Sommer 1997 1,1,2,2-Tetrachlorethan nicht untersucht. Bezieht man die beiden Stoffe in die Auswertungen ein, verändern sich die folgenden Resultate jedoch kaum, da 1,1,2,2-Tetrachlorethan gut mit Trichlorethen korreliert und daher stets im selben Kontaminationsfaktor zu finden ist. Dasselbe gilt für trans und cis 1,2-Dichlorethen.

Die Histogramme der zehn LHKW sind für die vollständigen Datensätze H96 und S97 im Anhang A 5.6 dargestellt. Wieder wird mit einer Logarithmierung der Messwerte eine log-Normalverteilung angenähert, die allerdings durch hohe Anteile von Werten unterhalb der NWG gestört wird. Im Gegensatz zu den zehn ausgewählten Einzelstoffen im vorangegangenen Kapitel, die geringes oder moderates Censoring ($ENH > 50\%$) aufweisen, tritt bei einigen LHKW (z.B. 1,1,1-Trichlorethan) schweres Censoring auf ($10\% < ENH < 50\%$). Daher ist hier eine Untersuchung des Einflusses der Werte unterhalb der Nachweisgrenze besonders wichtig.

5.3.1 Korrelationsanalysen

Im Herbst 1996 wurden die zehn LHKW an 198 Messstellen untersucht. Die Korrelationen nach Pearson sind in Tabelle 5.9 zusammengefasst. Während Vinylchlorid (VC) keine starken signifikanten Korrelationen mit anderen Stoffen aufweist, sind für Trichlormethan (TCM) bei sieben anderen Stoffen Korrelationskoeffizienten von mehr als 0.6 zu finden (Tabelle 5.9). Die höchste Korrelation besteht zwischen Trichlorethen (TCE) und Tetrachlorethen (PCE), die geringste zwischen VC und Tetrachlormethan (TeCM) (Tabelle 5.9). Mit den Rangkorrelationskoeffizienten nach Kendall und Spearman fallen die Korrelationen insge-

samt schwächer aus, d.h. die absoluten Werte in Tabelle 5.10 sind geringer als die in Tabelle 5.9. Die relative Korrelation der Stoffe untereinander, die Korrelationsstruktur, bleibt jedoch im Wesentlichen erhalten.

Tabelle 5.9: Korrelationen nach Pearson zwischen den Einzelstoffen der Stoffgruppe LHKW.

Datensatz H96, log-transformierte Werte, n = 198.

Signifikante ($\alpha = 0.05$) Korrelationen mit Koeffizienten ≥ 0.6 sind hervorgehoben.

	DCM	TCM	12DCA	111TCA	TeCM	TCE	PCE	cis12DCE	1112PCA
Dichlormethan (DCM)									
Trichlormethan (TCM)	0.66								
1,2-Dichlorethan (12DCA)	0.59	0.63							
1,1,1-Trichlorethan (111TCA)	0.76	0.75	0.67						
Tetrachlormethan (TeCM)	0.36	0.80	0.34	0.51					
Trichlorethen (TCE)	0.68	0.80	0.50	0.54	0.63				
Tetrachlorethen (PCE)	0.53	0.75	0.43	0.46	0.66	0.90			
cis 1,2-Dichlorethen (cis12DCE)	0.70	0.48	0.47	0.43	0.28	0.69	0.53		
1,1,1,2-Tetrachlorethan (1112PCA)	0.61	0.81	0.48	0.70	0.79	0.69	0.66	0.45	
Vinylchlorid (VC)	0.47	0.20	0.29	0.23	0.02	0.29	0.14	0.50	0.20

Tabelle 5.10: Rangkorrelationen zwischen den Einzelstoffen der Stoffgruppe LHKW.

Datensatz H96, Rangordnungen, n = 198.

Signifikante ($\alpha = 0.05$) Korrelationen mit Koeffizienten ≥ 0.6 sind hervorgehoben.

Die Abkürzungen sind Tabelle 5.9 zu entnehmen.

	DCM	TCM	12DCA	111TCA	TeCM	TCE	PCE	cis12DCE	1112PCA
Kendall-τ									
TCM	0.50								
12DCA	0.46	0.46							
111TCA	0.59	0.59	0.48						
TeCM	0.33	0.68	0.26	0.43					
TCE	0.56	0.67	0.41	0.46	0.51				
PCE	0.41	0.59	0.35	0.37	0.49	0.72			
cis12DCE	0.53	0.39	0.47	0.40	0.27	0.51	0.38		
1112PCA	0.50	0.70	0.37	0.57	0.69	0.57	0.51	0.39	
VC	0.29	0.10	0.24	0.15	0.03	0.15	0.07	0.33	0.13
Spearman-ρ									
TCM	0.63								
12DCA	0.54	0.58							
111TCA	0.67	0.70	0.53						
TeCM	0.43	0.84	0.34	0.53					
TCE	0.69	0.84	0.54	0.57	0.68				
PCE	0.53	0.76	0.45	0.46	0.67	0.89			
cis12DCE	0.61	0.50	0.56	0.47	0.36	0.64	0.50		
1112PCA	0.61	0.84	0.46	0.66	0.82	0.75	0.69	0.49	
VC	0.39	0.15	0.33	0.19	0.03	0.21	0.10	0.44	0.18

5.3.2 Hauptkomponentenanalysen

In den Hauptkomponentenanalysen mit den zehn LHKW aus Tabelle 5.9 sind sowohl mit den log-transformierten Werten als auch mit den Rangzahlen nach dem Kaiserkriterium zwei Hauptkomponenten zu extrahieren. Sie erklären 74 % der Gesamtvarianz und damit einen etwas geringeren Varianzanteil als die Lösungen in der summarischen Betrachtung und der stoffgruppenübergreifenden Einzelstoffbetrachtung. Erst mit drei Hauptkomponenten werden über 80 % der Gesamtvarianz erklärt. Im Screeplot (Abbildung 5.9) ist jedoch an der zweiten Hauptkomponente ein deutlicher Knick zu erkennen. Daher wurde die 2-Komponentenlösung betrachtet. Da die Lösungen der parametrischen und nicht-parametrischen Analyse nach den Kriterien von Aruga (1997) vergleichbar sind, wird nur die para-

metrische Lösung vorgestellt, die nicht-parametrische ist im Anhang A 5.7 zusammengestellt.

In den zwei Hauptkomponenten werden die Stoffe nach ihrem Chlorierungsgrad getrennt: Die erste Hauptkomponente setzt sich aus allen drei- und vierfach chlorierten Stoffen zusammen, während die zweifach chlorierten Substanzen und Vinylchlorid den zweiten Faktor markieren (Tabelle 5.11). Dies deutet auf eine Trennung von Primärkontaminanten und Sekundärkontaminanten hin. Primärkontaminanten sind Stoffe, die direkt in den Deponien abgelagert werden, während Sekundärkontaminanten, wie cis 1,2-Dichlorethen und Vinylchlorid, aus dem Abbau der höher chlorierten Substanzen entstehen (vgl. Kapitel 3.2, Abbildung 3.6 und Abbildung 3.7).

Um die Faktoren besser interpretieren zu können, sind die Faktorwerte aus der 2-Komponentenlösung mit Zuordnung zu Grundwasserleitern und Teilgebieten in Abbildung 5.10 dargestellt. Eine Differenzierung der Faktorwerte nach Grundwasserleitern ist nicht festzustellen (Abbildung 5.10-A); eine Differenzierung nach Teilgebieten ist hingegen zu sehen (Abbildung 5.10-B).

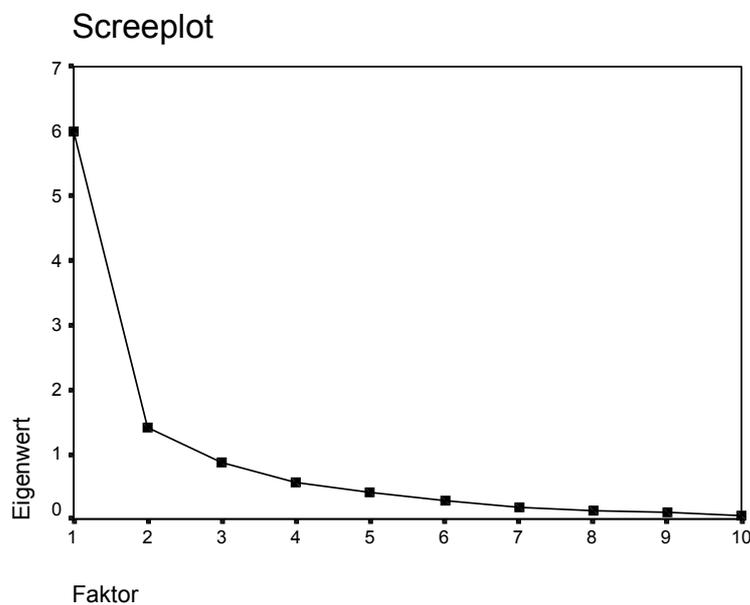


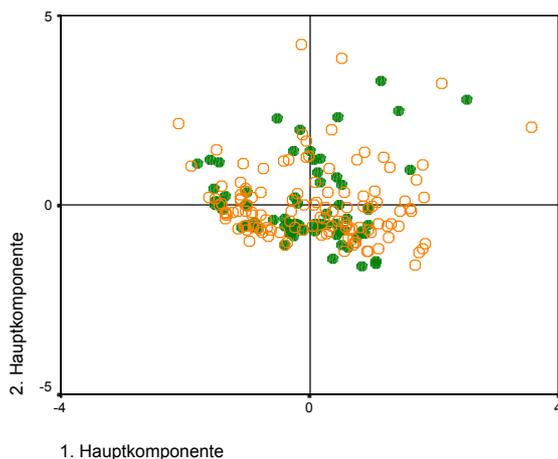
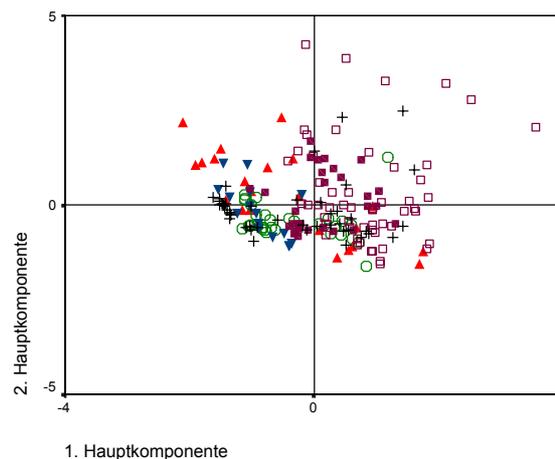
Abbildung 5.9: Screeplot der Eigenwerte aus der Hauptkomponentenanalyse mit zehn LHKW (Datensatz H96, log-transformierte Werte, n = 198).

Tabelle 5.11: Kommunalitäten und Faktorladungen der rotierten Komponentenmatrix (Varimax-Rotation) mit zwei Hauptkomponenten für die Stoffgruppe LHKW.

Datensatz H96, log-transformierte Werte, n = 198.

Variablen mit absoluten Faktorladungen > 0.5 sind hervorgehoben.

Hauptkomponente	1	2	kumulierte erklärte Gesamtvarianz [%]
Anteil der erklärten Gesamtvarianz [%]	59.92	14.16	74.07
Eigenwerte	5.99	1.42	Kommunalitäten
Dichlormethan	0.49	0.75	0.81
Trichlormethan	0.90	0.30	0.90
1,2-Dichlorethan	0.47	0.55	0.53
1,1,1-Trichlorethan	0.65	0.47	0.64
Tetrachlormethan	0.90	-0.05	0.82
Trichlorethen	0.77	0.44	0.79
Tetrachlorethen	0.82	0.24	0.72
cis 1,2-Dichlorethen	0.34	0.77	0.71
1,1,1,2-Tetrachlorethan	0.86	0.24	0.80
Vinylchlorid	-0.09	0.83	0.69

A: Grundwasserleiter

B: Teilgebiete


A: Faktorwerte, eingeteilt nach Grundwasserleitern (GWL100: ○, GWL500: ●).

B: Faktorwerte, differenziert nach Teilgebieten (Siedlung: ▲, Mulde/au: ○, Bergbaufolge: +, Werksteile CAG-Wolfen: ■, Werksteile CAG-Bitterfeld: □, Filmfabrik: ▼).

Datensatz H96, log-transformierte Werte, $n = 198$.

Merkmale: 10 LHKW (DCM, TCM, 12DCA, 111TCA, TeCM, TCE, PCE, cis12DCE, 1112PCA, VC).

Abbildung 5.10: Faktorwerte der 2-Komponentenlösung mit zehn LHKW im Herbst 1996.

Tabelle 5.12: Kommunalitäten und Faktorladungen für LHKW, pH, Eh und AOX (Herbst 1996).

Datensatz H96, log-transformierte Werte (außer Eh und pH), $n = 193$.

Variablen mit absoluten Faktorladungen > 0.5 sind hervorgehoben.

Hauptkomponente	1	2	3	Kumulierte %
Anteil der erklärten Varianz [%]	51.59	12.79	9.60	73.98
Eigenwert	6.71	1.66	1.25	Kommunalitäten
Dichlormethan	0.45	0.76	0.14	0.79
Trichlormethan	0.87	0.34	0.13	0.89
1,2-Dichlorethan	0.43	0.60	-0.04	0.54
1,1,1-Trichlorethan	0.60	0.52	0.01	0.64
Tetrachlormethan	0.88	-0.01	0.26	0.84
Trichlorethen	0.77	0.47	0.05	0.81
Tetrachlorethen	0.83	0.26	0.03	0.75
cis 1,2-Dichlorethen	0.35	0.73	-0.01	0.66
1,1,1,2-Tetrachlorethan	0.83	0.29	0.12	0.78
Vinylchlorid	-0.15	0.79	0.17	0.68
AOX	0.32	0.74	0.09	0.66
PH	0.02	-0.21	-0.88	0.83
EH	0.47	-0.05	0.73	0.76

Einige Proben aus dem Werksteil CAG-Bitterfeld weisen sehr hohe Faktorwerte für beide Hauptkomponenten auf, d.h. die betreffenden Messstellen sind mit Primär- und Sekundärkontaminanten hoch belastet (Abbildung 5.10-B). Ein anderer Teil der Proben vom Werksteil CAG-Bitterfeld weist erhöhte Werte für die erste Komponente auf, aber geringe (negative) für die zweite. Proben vom Werksteil CAG-Wolfen zeigen auch positive Werte für die zweite Hauptkomponente, streuen aber insgesamt um den Koordinatenursprung, d.h. weisen eine durchschnittliche Belastung auf. Unterdurchschnittlich belastet sind Proben aus der Mulde/au. Auffällig ist, dass an einigen Messstellen von den Siedlungsflächen und der Filmfabrik hohe Faktorwerte für die zweite Komponente auftreten (Abbildung 5.10-B).

Zum Schluss dieses Kapitels soll kurz der Zusammenhang zwischen den Einzelstoffen der Gruppe der LHKW und ausgewählten Vor-Ort- und Summenparametern gezeigt werden. Im Kapitel 5.1.2 wurde eine Faktorbildung von LHKW mit pH, Eh sowie mit AOX festge-

stellt. Werden diese drei Parameter in die Hauptkomponentenanalyse der LHKW einbezogen, erhält man mit drei Hauptkomponenten nur eine leichte Korrelation des Eh-Wertes mit den Primärkontaminanten und eine stärkere Korrelation der Sekundärkontaminanten mit den AOX (Tabelle 5.12).

5.3.3 Stabilität der Kontaminationsfaktoren

Um die Stabilität der Faktorenbildung innerhalb der Stoffgruppe LHKW zu untersuchen, wurden parametrische und nicht-parametrische Hauptkomponentenanalysen mit folgenden Datensätzen durchgeführt.

Neben den vollständigen Datensätzen H96 mit 198 Proben und S97 mit 207 Proben wird deren Schnittmenge aus 121 ($S97_{(H96 \cap S97)}$) bzw. 122 ($H96_{(H96 \cap S97)}$) Proben für beide Kampagnen betrachtet. Wenn nur Werte oberhalb der analytischen Nachweisgrenzen berücksichtigt werden, bleiben im Datensatz H96 insgesamt 24 Proben übrig, in denen alle LHKW nachgewiesen wurden, im Datensatz S97 nur 2 Proben. Die 24 Messstellen (aus $H96_{(Werte > NWG)}$) befinden sich jedoch auf den Werksflächen der CAG sowie in der Umgebung der Gruben Antonie und Greppin. Um beurteilen zu können, ob eine Änderung der Faktorenzusammensetzung mit dem Datensatz $H96_{(Werte > NWG)}$ auf das fehlende Censoring oder auf den anderen Raumausschnitt zurückzuführen ist, werden für beide Beprobungskampagnen ebenfalls nur die Messstellen ausgewertet, die sich auf dem Werksgelände der CAG in Wolfen und Bitterfeld befinden (Datensätze: $H96_{(CAG)}$ und $S97_{(CAG)}$). Die vollständigen Ergebnisse sind im Anhang A 5.7 zu finden, hier werden nur die wichtigsten Resultate zusammengefasst.

Nach dem Kaiserkriterium müssen bei allen genannten Teildatensätzen nur zwei Komponenten extrahiert werden. Daher werden diese Lösungen im Folgenden vorrangig betrachtet. Mit drei Komponenten werden allerdings fast 80 % der Gesamtvarianz erklärt (Tabelle 5.13). Die Komponentenlösungen aus dem Datensatz S97 und seinen Teildatensätzen erfassen stets einen geringeren Anteil der Gesamtvarianz als ihre Pendants im Herbst 1996. Um einen Varianzanteil von etwa 80 % erklären zu können, müssen im Datensatz S97 vier Komponenten berücksichtigt werden. Hauptkomponentenanalysen mit den Rangzahlen geben stets einen geringeren Varianzanteil wieder als ihre Entsprechungen mit den log-transformierten Werten, wobei mit dem Datensatz H96 und seinen Teildatensätzen Unterschiede bis zu 5 % auftreten, im Sommer 1997 bis zu 10 % (Tabelle 5.13). Da im Datensatz S97 die Korrelationen zwischen den Einzelstoffen wesentlich geringer ausfallen als im Datensatz H96 (vgl. Tabelle 5.9 und Anhang A 5.7), schneiden auch die Hauptkomponentenanalysen schlechter ab.

Tabelle 5.13: Anteile der erklärten Gesamtvarianz in Hauptkomponentenanalysen mit zehn LHKW und verschiedenen Datensätzen (Angaben in %).

Merkmale 10 LHKW (DCM, TCM, 12DCA, 111TCA, TeCM, TCE, PCE, cis12DCE, 1112PCA, VC).
Datensätze: Ausführungen im Text, vgl. auch Tabelle 3.5.

Datensatz	n	2-Komponentenlösung		3-Komponentenlösung		4-Komponentenlösung	
		log. Werte	Rangzahlen	log. Werte	Rangzahlen	log. Werte	Rangzahlen
H96	198	74.07	73.54	82.77	80.13		
$H96_{(H96 \cap S97)}$	122	75.73	73.66	84.46	80.33		
$H96_{(Werte > NWG)}$	24	76.32	72.00	84.16	79.27		
$H96_{(CAG)}$	84	74.73	69.51	82.66	78.18		
S97	207	66.10	56.81	74.05	66.65	81.00	75.23
$S97_{(H96 \cap S97)}$	121	70.58	59.69	78.00	68.72	83.97	77.02
$S97_{(CAG)}$	82	71.35	59.25	79.34	69.27	84.54	76.60

Wie den Resultaten im Anhang A 5.7 zu entnehmen ist, variiert neben dem Anteil der erklärten Gesamtvarianz auch die Zusammensetzung der Hauptkomponenten. Die Lösungen mit den Datensätzen H96 und S97 sind nach den Kriterien von Aruga (1997) nicht vergleichbar. Das bedeutet, dass in den beiden Beprobungskampagnen unterschiedliche Prozesse zugrunde liegen. Dies trifft auch auf die Resultate zwischen dem Gesamtdatensatz H96 und den Teildatensätzen H96_(Werte > NWG) und H96_(CAG) zu (s.u.).

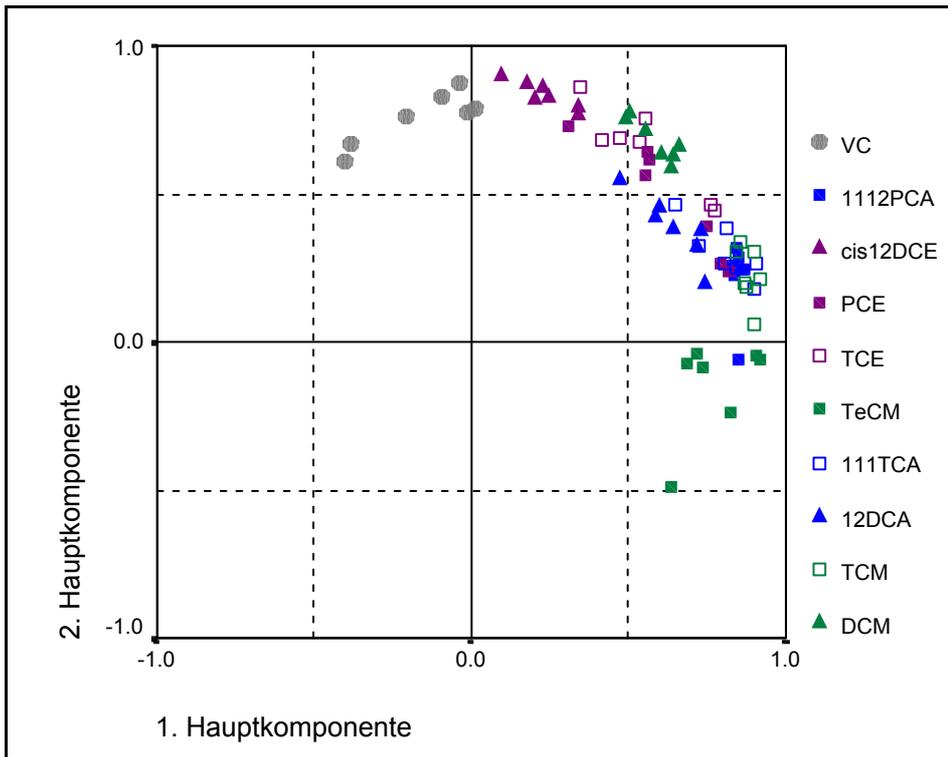
Trotz der Unterschiede sind im Koordinatensystem der 2-Komponentenlösung die Faktorladungen der einzelnen Substanzen auch für die verschiedenen Teildatensätze aus Tabelle 5.13 auf gewisse Bereiche beschränkt (Abbildung 5.11). Die beiden Substanzen mit dem geringsten Korrelationskoeffizienten, TeCM und VC, stehen generell im rechten Winkel zueinander. Alle anderen Substanzen "wandern" im rechten oberen Quadranten des Ladungsdiagramms, wobei cis12DCE, DCM und TCM in allen Datensätzen recht ähnliche Faktorladungen erhalten. TCE und PCE wiesen hingegen mit den verschiedenen Datensätzen die größten Unterschiede in den Faktorladungen auf (Abbildung 5.11-A). Bei den Faktorladungen auf Basis der Rangzahlen sind ähnliche Muster festzustellen, allerdings sind die Spannweiten der Faktorladungen für alle Substanzen größer (Abbildung 5.11-B).

Gerade die Zuordnung von TCE und PCE als Markiervariablen zu den Hauptkomponenten erzeugt eine inhaltliche Veränderung bei der Charakterisierung und Interpretation der Faktoren. Während in den Datensätzen H96 und H96_(H96∩S97) die zehn LHKW nach ihrem Chlorierungsgrad in Primär- und Sekundärkontaminanten getrennt werden, ist dies bei allen anderen Datensätzen nicht der Fall (vgl. Anhang A 5.7). In den Datensätzen, die räumlich auf den Bereich der CAG (H96_(CAG) und S97_(CAG)) beschränkt sind, sowie in den Datensätzen S97 und S97_(H96∩S97) sind die Stoffe PCE, TCE, cis12DCE und VC zusammen in einer Hauptkomponente zu finden. Diese Substanzen bilden eine Abbaukette (vgl. Abbildung 3.7). In den letzt genannten Datensätzen ist demnach eine stärkere Faktorbildung nach Abbauketten zu verzeichnen.

Bei den Auswertungen der Daten aus der Kampagne im Herbst 1996 entsteht also eine veränderte Zusammensetzung der Faktoren, wenn der Untersuchungsraum eingeschränkt wird. Im Datensatz S97 ist etwas Vergleichbares nicht festzustellen. Dieses Phänomen wird in Kapitel 5.1.4 anhand räumlicher Betrachtungen untersucht und in Kapitel 5.1.5 diskutiert.

Die Komponenten aus dem Datensatz H96_(Werte > NWG) sind deutlich anders zusammengesetzt als die Faktoren aus dem Gesamtdatensatz H96 und dem reduzierten Datensatz H96_(H96∩S97). Sie weisen eine größere Ähnlichkeit zu den Faktoren aus den Datensätzen auf, in denen nur Messstellen vom Gelände der CAG berücksichtigt wurden (vgl. Anhang A 5.7). Die veränderte Zusammensetzung der Hauptkomponenten ist daher nicht nur auf das Censoring zurückzuführen, sondern auch auf die räumliche Einschränkung des betrachteten Gebietes. Deshalb ist die räumliche Betrachtung der Hauptkomponenten für die LHKW besonders interessant.

A: Faktorladungen der Hauptkomponentenanalysen mit log-transformierten Werten.



B: Faktorladungen der Hauptkomponentenanalysen mit Rangzahlen.

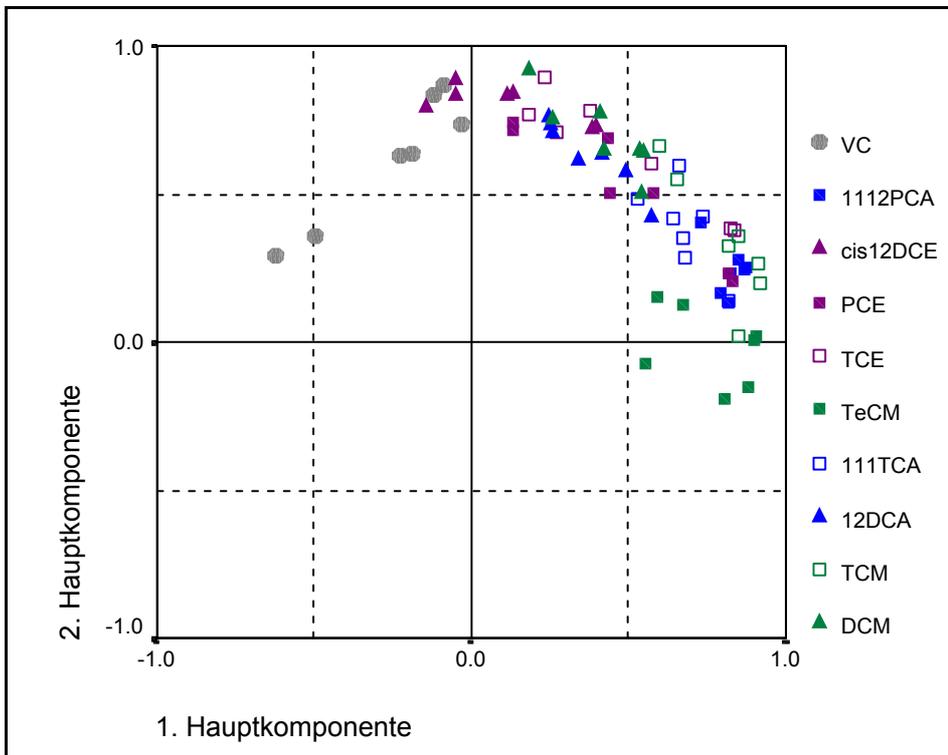


Abbildung 5.11: Faktorladungen für die 2-Komponentenlösung der LHKW unter Verwendung der verschiedenen Datensätze aus Tabelle 5.13 mit log-transformierten Werten (A) und Rangzahlen (B) (Ausführungen im Text).

5.3.4 Räumliche Muster der Kontaminationsfaktoren (Clusteranalysen)

Mit den Faktorwerten der 2-Komponentenlösung in Tabelle 5.11 wurden wiederum vier Clusteranalysen durchgeführt. Die Entwicklung der Clusterkriterien und die Zusammensetzung der Dendrogramme legt für die LHKW eine 6-Clusterlösung nahe. Diese ist für alle vier Clusteranalysen in Abbildung 5.12 im Koordinatensystem der beiden Hauptkomponenten dargestellt. Im Vergleich zu den Clusteranalysen mit den summarischen Merkmalen sowie mit den zehn ausgewählten Einzelstoffe in den vorangegangenen Kapiteln (Abbildung 5.3 und Abbildung 5.6) fallen die Unterschiede zwischen den Clusterverfahren bei den LHKW geringer aus. Dennoch tendiert der AL-Fusionierungsalgorithmus auch hier dazu, relativ viele kleine Cluster mit wenigen Objekten abzutrennen (Abbildung 5.12).

Die Verteilung der sechs Cluster im Untersuchungsgebiet und die Ordnung der Clusterzentren im Hasse-Diagramm sind für die Ward-Methode der Abbildung 5.13 zu entnehmen. **Cluster 1**, der das maximale Element im Hasse-Diagramm bildet, ist durch hohe Faktorwerte für beide Hauptkomponenten gekennzeichnet und ist daher als hoch belastet einzustufen (Abbildung 5.13-B). Von den insgesamt sieben Messstellen, die zu diesem Cluster gehören, befinden sich drei im Werksteil Bitterfeld-Süd, zwei um die Grube Antonie und zwei weitere im Werksteil Bitterfeld-Nord (Abbildung 5.13-A).

Auf dem zweiten Level im Hasse-Diagramm folgen die Cluster 2, 4 und 6. Diese Cluster sind im Wesentlichen auf dem Werksgelände der CAG sowie bei den Gruben Antonie/Marie und Freiheit III zu finden (Abbildung 5.13-A).

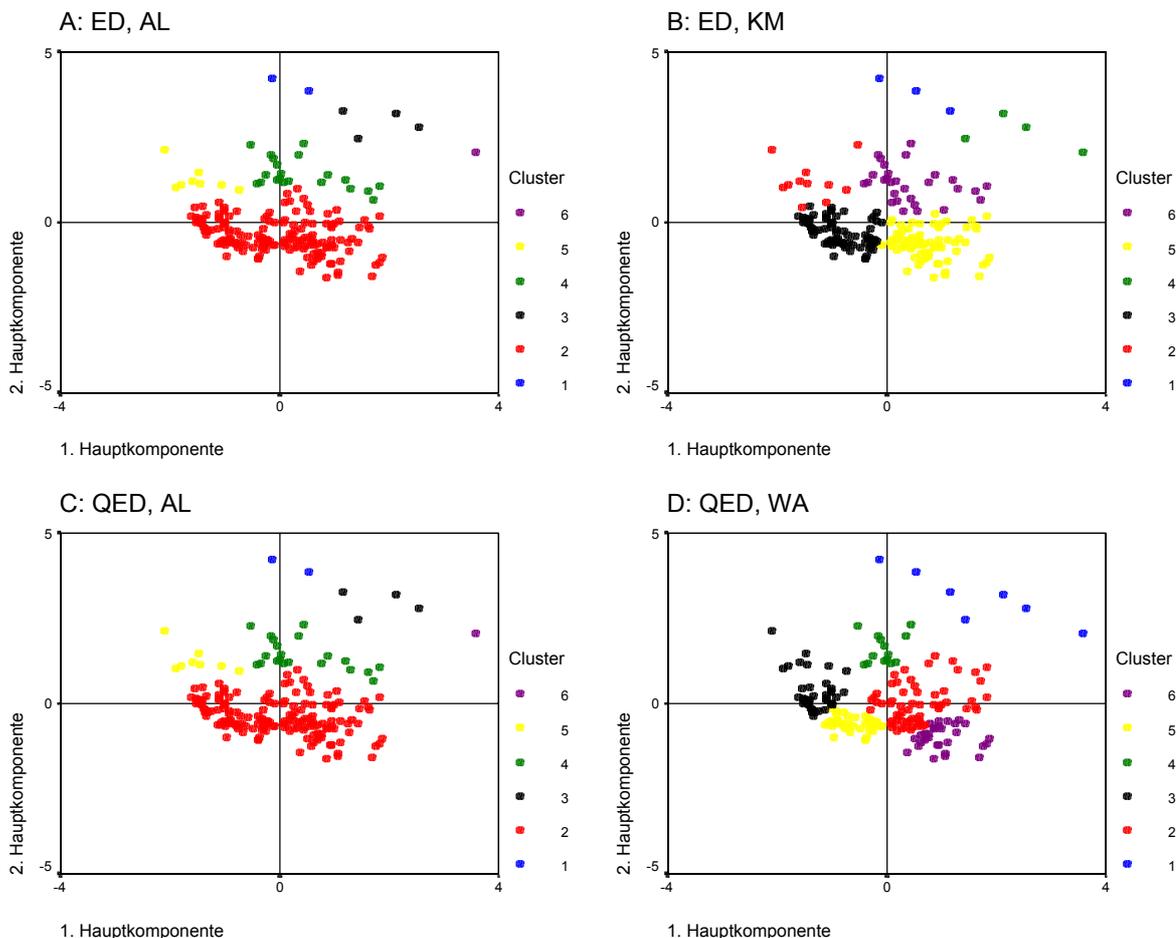


Abbildung 5.12: 6-Clusterlösung für die Faktorwerte der 2-Komponentenlösung der LHKW aus Tabelle 5.11 (Datensatz H96, n = 198).

Cluster 6 und Cluster 4 lassen sich räumlich noch weiter eingrenzen: **Cluster 6** befindet sich schwerpunktmäßig auf den Werksteilen Bitterfeld Mitte-West und Nord (Abbildung 5.13-A). Das Zentrum dieses Clusters weist die geringsten Werte für die zweite Hauptkomponente auf, aber recht hohe für die erste (Abbildung 5.13-B). Demnach wird dieser Cluster stark durch die Primärkontaminanten bestimmt, und es fallen wahrscheinlich wenig Abbauprodukte an. Auch **Cluster 4** befindet sich im Werksteil Bitterfeld Mitte-West (Grube Marie) und Grube Antonie sowie vereinzelt im Werksteil Wolfen (Abbildung 5.13-A). Er ist durch mittlere Faktorwerte für beide Hauptkomponenten gekennzeichnet, wobei die zweite Hauptkomponente höhere Faktorwerte erzielt (Abbildung 5.13-B). Im **Cluster 2**, der die meisten Proben enthält, dominiert hingegen die erste Hauptkomponente.

Die Zentren der Cluster 3 und 5 befinden sich auf dem untersten Level im Hasse-Diagramm (Abbildung 5.13-B), d.h. im Vergleich zu den Clustern 1, 2 und 4 sind sie gering belastet. Im **Cluster 5** sind höhere Werte für die erste Hauptkomponente und relativ geringe für die zweite zu finden. Im **Cluster 3** hingegen kehrt sich das Verhältnis zwischen den beiden Hauptkomponenten um. Es muss vermutet werden, dass an den Messstellen aus dem Cluster 3 die Primärkontaminanten gut abgebaut werden, während sich die sogenannten Sekundärkontaminanten tendenziell anreichern (s.u.).

Cluster im Sommer 1997

Zum Vergleich wurde mit den Faktorwerten der 2-Komponentenlösung aus dem Datensatz S97 ebenfalls eine Clusteranalyse durchgeführt. Mit der 6-Clusterlösung wird ein vergleichbares Ähnlichkeitsniveau der Cluster erreicht wie im Datensatz H96. Die räumliche Verteilung der 6-Clusterlösung unterscheidet sich deutlich von der im Herbst 1996 (vgl. Abbildung 5.13-A und Abbildung 5.14-A). Auch die Clusterzentren sind anders angeordnet. Allerdings sind die Clusterlösungen für die 2-Komponentenlösungen aus H96 und S97 nur bedingt miteinander vergleichbar, da in den Hauptkomponenten vom Sommer 1997 die LHKW nach Abbauketten, nicht nach Primär-/Sekundärkontaminanten getrennt sind (vgl. Kapitel 5.3.3, Anhang A 5.7). Trotzdem werden die hoch belasteten Cluster (Cluster 1 und 4 in Abbildung 5.13-A und Cluster 4 und 5 in Abbildung 5.14-A) in etwa reproduziert. Sie befinden sich in den Werksteilen Bitterfeld-Süd sowie Mitte-West östlich der Grube Antonie.

Die Trennung nach Abbauketten bringt auch eine leichte Zuordnung der Cluster nach Grundwasserleitern hervor. Im Gegensatz zu H96, wo die Cluster recht gleichmäßig in beiden Grundwasserleitern repräsentiert sind, werden im Datensatz S97 die Cluster 1, 3 und 4 durch Proben aus dem GWL100 und die erste Hauptkomponente (mit hohen Faktorladungen für TeCM, TCM, 111TCA und 1112PCA) dominiert. In den Clustern 5 und 6 sind hingegen Messstellen aus dem GWL500 etwas überrepräsentiert (Tabelle 5.14). Letztere zeichnen sich durch hohe mittlere Faktorwerte für die zweite Hauptkomponente aus, die durch die chlorierten Ethene und Dichlormethan charakterisiert ist (vgl. Anhang A 5.7).

Tabelle 5.14: Anzahl der Proben pro Cluster und pro Grundwasserleiter in den 6-Clusterlösungen mit Faktorwerten für die LHKW in den Datensätzen H96 und S97.

Cluster (QED, WA)	H96			S97		
	Messstellen, gesamt	Messstellen, GWL100	Messstellen, GWL500	Messstellen, gesamt	Messstellen, GWL100	Messstellen, GWL500
1	7	4 (57 %)	3 (43 %)	24	23 (96 %)	1 (4 %)
2	64	43 (67 %)	21 (33 %)	114	73 (64 %)	41 (36 %)
3	39	25 (64 %)	14 (36 %)	33	27 (82 %)	6 (18 %)
4	14	7 (50 %)	7 (50 %)	5	4 (80 %)	1 (20%)
5	43	24 (56 %)	19 (44 %)	14	8 (57 %)	6 (43 %)
6	31	21 (68 %)	10 (32 %)	17	7 (41 %)	10 (59 %)
Summe	198	124 (63 %)	74 (37 %)	207	142 (69 %)	65 (31 %)

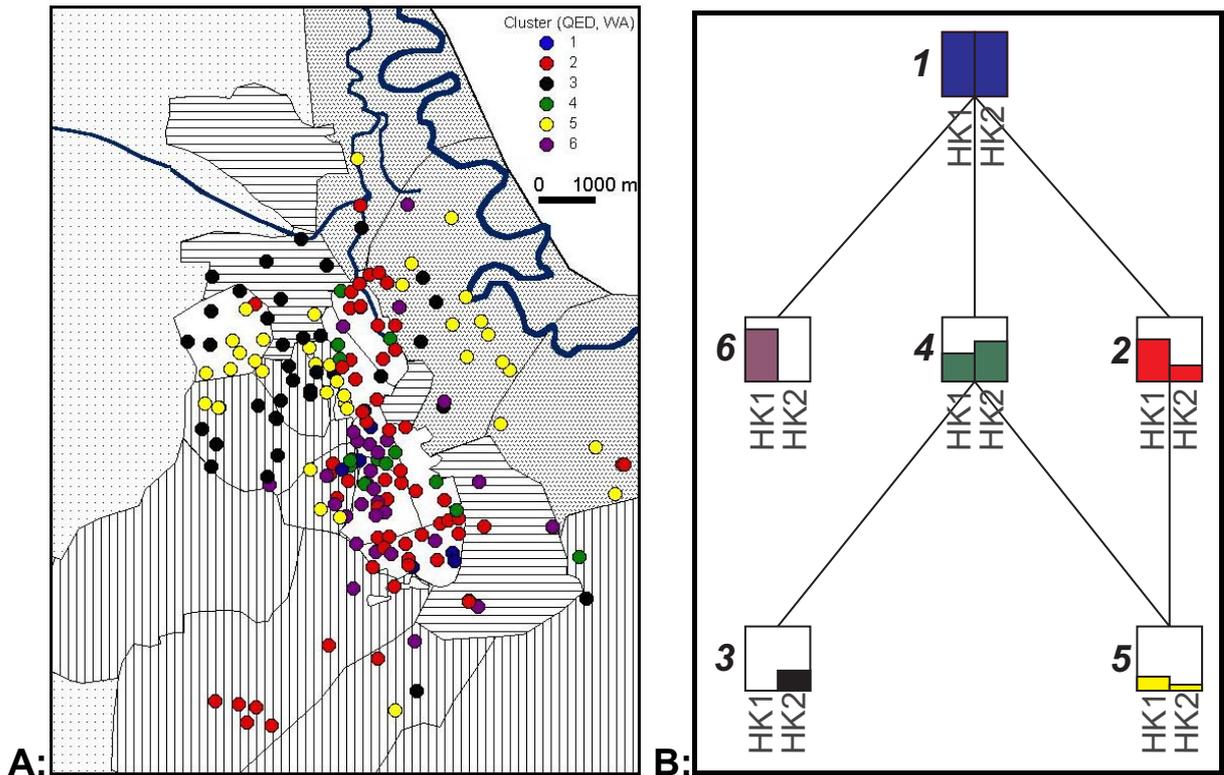


Abbildung 5.13: 6-Clusterlösung (quadierte euklidische Distanz, Ward-Methode) der Faktorwerte der 2-Komponentenlösung mit den LHKW (Datensatz H96, n = 198): A: Räumliche Verteilung der Cluster; zur Beschreibung der Teilgebiete siehe Abbildung 2.1 und Tabelle 2.1. B: Hasse-Diagramm der Clusterzentren.

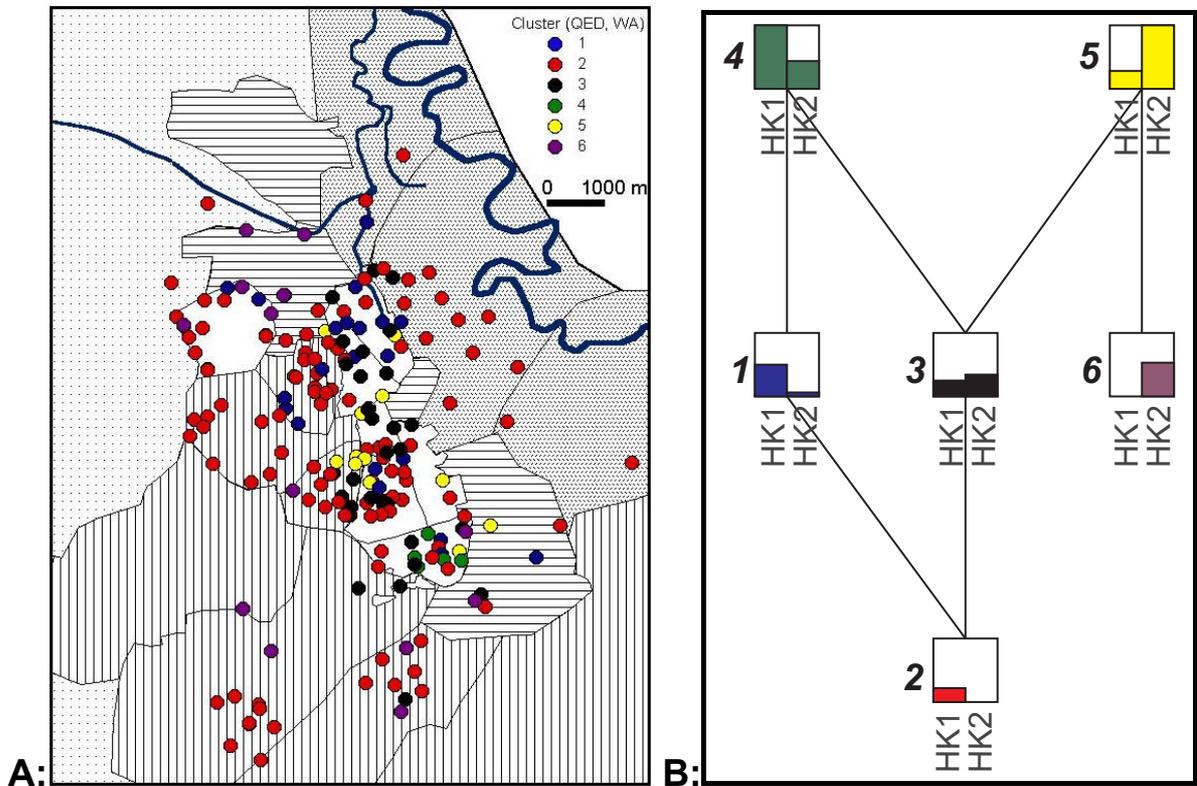


Abbildung 5.14: 6-Clusterlösung (quadierte euklidische Distanz, Ward-Methode) der Faktorwerte der 2-Komponentenlösung mit den LHKW (Datensatz S97, n = 207): A: Räumliche Verteilung der Cluster; zur Beschreibung der Teilgebiete siehe Abbildung 2.1 und Tabelle 2.1. B: Hasse-Diagramm der Clusterzentren.

A: rH-Werte im Herbst 1996 (H96, n = 193)

B: rH-Werte im Sommer 1997 (S97, n = 210)

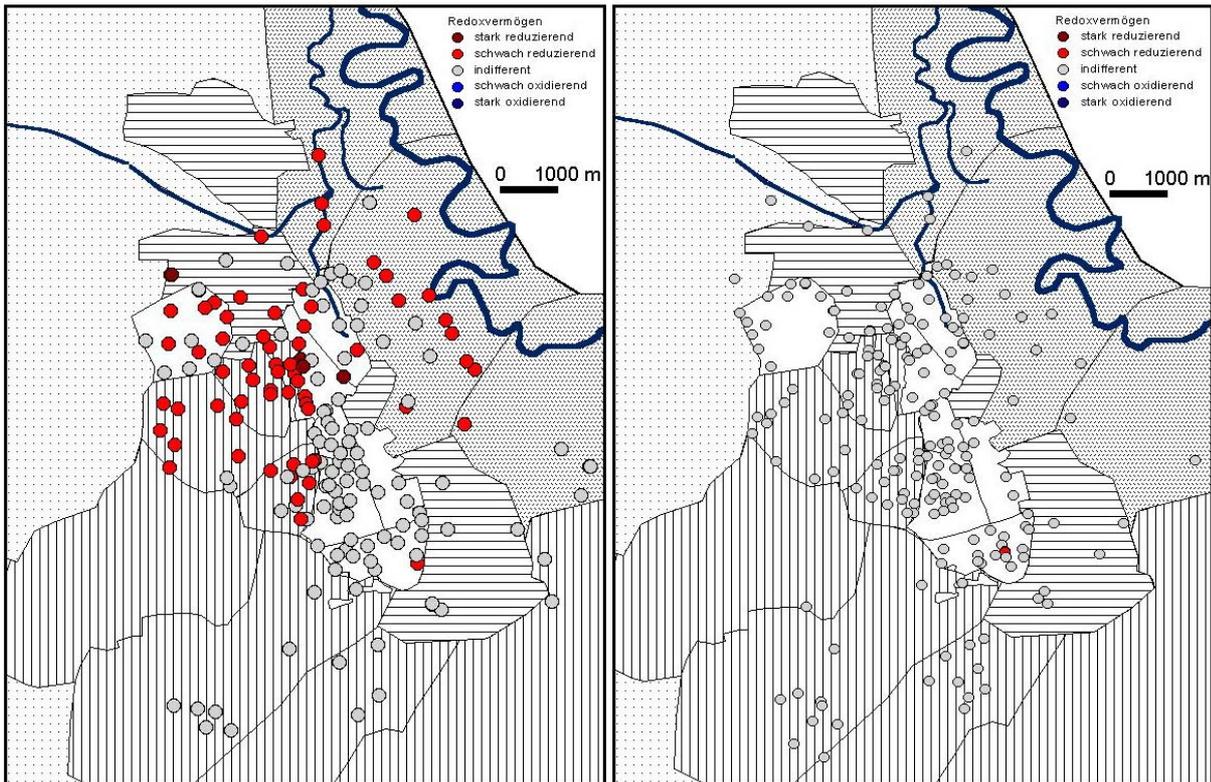


Abbildung 5.15: Redoxvermögen (rH-Werte) in den Datensätzen H96 (A) und S97 (B); zur Beschreibung der Teilgebiete siehe Abbildung 2.1 und Tabelle 2.1.

Redoxvermögen

In der summarischen Betrachtung korreliert die Summe der LHKW mit den Redoxbedingungen (vgl. Abbildung 5.1-A.III in Kapitel 5.1.2). Dies ist auch leicht bei der Einzelstoffbetrachtung festzustellen (vgl. Tabelle 5.12). Darüber hinaus wurde in Kapitel 3.2 darauf hingewiesen, dass Tetrachlorethen und Trichlorethen unter reduzierenden Bedingungen besser abgebaut werden als Vinylchlorid. Da die Hauptkomponentenanalyse für den Datensatz H96 die LHKW nach Primär- und Sekundärkontaminanten trennt (vgl. Tabelle 5.11) und da die Clusteranalyse im Nordwesten des Untersuchungsgebietes (Cluster 3 in Abbildung 5.13-A) Bereiche mit einer Dominanz von Sekundärkontaminanten ausweist, wurde aus den Redoxpotenzialen und den pH-Werten das Redoxvermögen als rH-Wert bestimmt (vgl. Kapitel 3.1.1). Damit ist das Muster aus Primäreinträgen und Abbauprodukten besser zu verstehen. Die rH-Werte in Abbildung 5.15 wurden nach Tabelle 3.4 klassifiziert.

Für den Datensatz H96 erkennt man deutlich, dass die gering belasteten Cluster 3 und 5 in Abbildung 5.13-A sich vorwiegend in Bereichen mit reduzierenden Eigenschaften in Abbildung 5.15-A befinden, während die höher belasteten Cluster in Bereichen mit indifferenten Redoxbedingungen auftreten. Im Datensatz S97 ist eine solche Differenzierung der Redoxbedingungen nicht mehr zu sehen. Wie Abbildung 5.15-B zu entnehmen ist, herrschen hier – mit wenigen Ausnahmen – an allen untersuchten Messstellen indifferente Bedingungen. Diese Änderung der Redoxverhältnisse auf der vorliegenden Datengrundlage zu erklären, ist schwierig. Änderungen der Redoxverhältnisse können in Folge des Grundwasserwiederanstiegs in den Tagebauen auftreten oder im Umfeld der Messstellen durch den Messstellenausbau bedingt sein. Da die Messung der Redoxpotenziale i.d.R. mit großen Streuungen behaftet ist, ist der rH-Wert als unsichere Interpretationshilfe einzustufen.

Räumliche Verteilung von Tetrachlorethen (PCE) und Vinylchlorid (VC)

Zur Verifizierung der unterschiedlichen räumlichen Verteilungsmuster von Primärkontaminanten und Sekundärkontaminanten wurde stellvertretend die räumliche Verbreitung von Tetrachlorethen (PCE) und Vinylchlorid (VC) betrachtet. Beide Stoffe stehen durch eine Abbaukette miteinander in Verbindung (vgl. Abbildung 3.7). Die Ergebnisse sind im Anhang A 5.8 zusammengestellt.

Im Herbst 1996 wurden Tetrachlorethen und Vinylchlorid an fast allen 198 Messstellen nachgewiesen. Besonders die räumliche Verteilung von Tetrachlorethen spiegelt sehr gut die Clustereinteilung in Abbildung 5.13-A und die Redoxverhältnisse in Abbildung 5.15-A wider. In den Bereichen mit reduzierenden Eigenschaften treten die geringsten Konzentration auf, während für Vinylchlorid recht hohe Werte gemessen werden. Im Verhältnis zu Tetrachlorethen ist Vinylchlorid im Nordwesten des Untersuchungsgebietes deutlich überrepräsentiert.

Im Sommer 1997 wurde Tetrachlorethen an allen 210 Messstellen nachgewiesen, Vinylchlorid hingegen nur an 15 % der Messstellen (vgl. Kapitel 4.2.3). Daher muss vermutet werden, dass die geringe Nachweishäufigkeit von Vinylchlorid die Veränderung der Faktorzusammensetzung im Sommer 1997 bewirkt. Die Ursachen dafür sind in Kapitel 0 zu diskutieren. Allerdings ändert sich auch die räumliche Verteilung von Tetrachlorethen. Im Vergleich zum Herbst 1996 tritt es in höheren Konzentrationen auf, und deutliche Abreicherungsbereiche sind nicht zu erkennen (vgl. Anhang A 5.8).

5.3.5 Einfluss des Messniveaus der Originaldaten auf die Ergebnisse der Clusteranalyse

Da die Zusammensetzung der Hauptkomponenten im Herbst 1996 und im Sommer 1997 nicht identisch ist, wurden für beide Beprobungskampagnen zusätzlich Clusteranalysen auf der Basis der Originalwerte durchgeführt. Im Folgenden werden jeweils die Clusterlösungen aus den reduzierten Datensätzen $H96_{(H96 \cap S97)}$ und $S97_{(H96 \cap S97)}$ gegenübergestellt. Gleichzeitig wurde untersucht, wie das Messniveau der Daten die Clusterlösungen beeinflusst, indem binäre Daten, Rangzahlen und log-transformierte Werte analysiert wurden (vgl. Kapitel 3.3.1). Nach der Entwicklung der Clusterkriterien und der Zusammensetzung der Dendrogramme ist in allen Analysen eine 5-Clusterlösung sinnvoll.

Klassifikation der stofflichen Zusammensetzung auf nominalem Messniveau

Auf nominalem Messniveau wurden mit den analytischen Nachweisgrenzen als Relevanzgrenzen (Schwellenwerte) binäre Daten aus den Messwerten abgeleitet. Der Wert 1 indiziert hierbei den Nachweis eines Stoffes, der Wert 0 bedeutet hingegen, dass ein Stoff in der untersuchten Probe nicht nachgewiesen werden konnte. Werden die zehn LHKW derart klassifiziert, treten insgesamt nur 3 bis 5 % der maximal möglichen Stoffkombinationen auf (Tabelle 5.15). Die Anzahl der Kombinationen liegt in den verwendeten Datensätzen in etwa derselben Größenordnung und steigt leicht, wenn die Relevanzgrenzen auf einheitliche $5 \mu\text{g/l}$ angehoben werden (Tabelle 5.15).

Zwar liegt die Anzahl der Klassen mit unterschiedlichen Stoffkombinationen weit unterhalb des möglichen Wertes, sie ist dennoch zu groß, um die Messstellen anschaulich zu klassifizieren. Daher werden hierarchische Clusteranalysen mit der einfachen Übereinstimmung (EÜ) als Distanzmaß durchgeführt. Da die Ward-Methode nur sinnvoll mit der quadrierten euklidischen Distanz einsetzbar ist (vgl. Kapitel 3.3.6), erfolgte die Fusionierung der Cluster mit dem AL-Verfahren. Die räumliche Verteilung der Cluster ist in Abbildung 5.16 dargestellt, die prozentualen Nachweise pro Substanz und Cluster in Tabelle 5.16.

Tabelle 5.15: Anzahl der möglichen und beobachteten Stoffkombinationen von zehn LHKW.

Datensatz	Kombinationen mit RG = NWG	Kombinationen mit RG = 5 µg/l
H96 (n = 198)	48 (5%)	60 (6%)
S97 (n = 207)	54 (5%)	58 (6%)
H96_(H96∩S97) (n = 122)	34 (3%)	45 (4%)
S97_(H96∩S97) (n = 121)	41 (4%)	47 (5%)
maximal mögliche Kombinationen	$2^{10} = 1024$	$2^{10} = 1024$

A: H96_(H96∩S97), n = 122, RG = NWG

B: S97_(H96∩S97), n = 121, RG = NWG

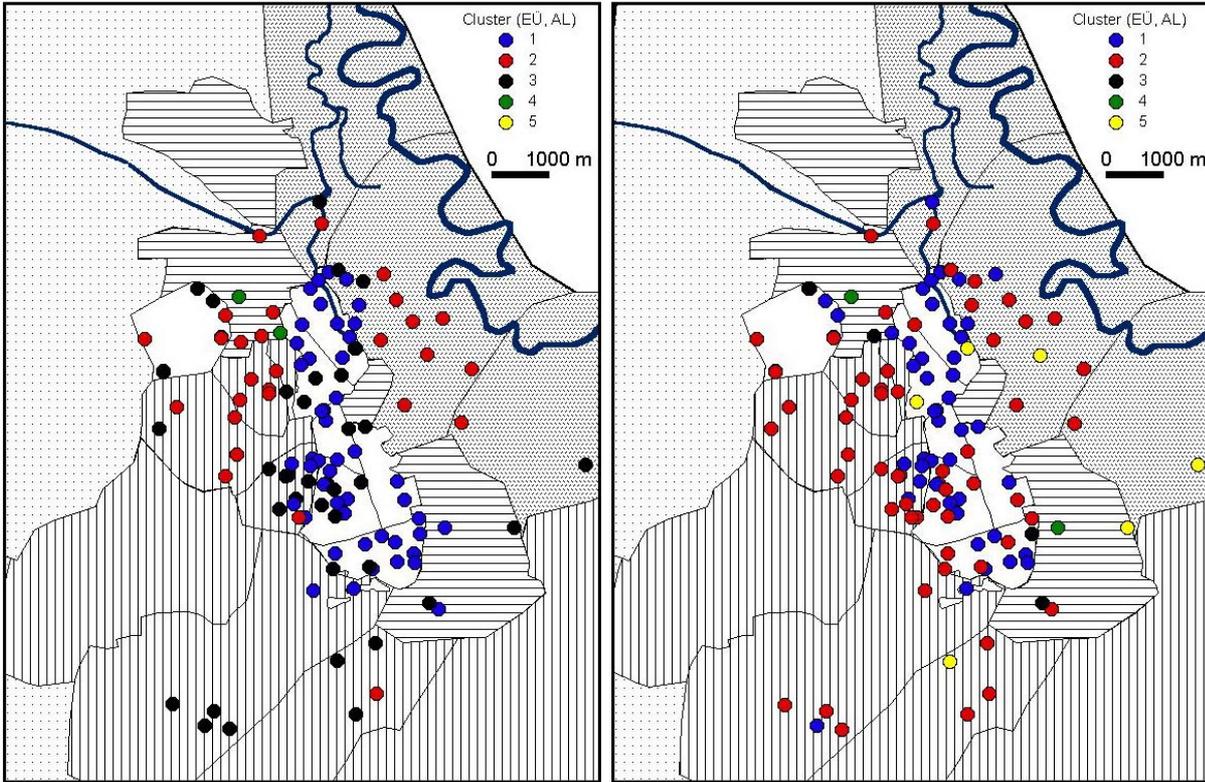


Abbildung 5.16: Räumliches Muster der 5-Clusterlösung mit binären Daten der LHKW (RG = NWG); Verfahren: Einfache Übereinstimmung (EÜ), Average Linkage between Groups (AL); zur Beschreibung der Teilgebiete siehe Abbildung 2.1 und Tabelle 2.1.

Tabelle 5.16: Nachweise der LHKW pro Cluster in Abbildung 5.16 (Angaben in % pro Cluster).

Cluster (EÜ, AL)	DCM	TCM	12DCA	111TCA	TeCM	TCE	PCE	cis12DCE	1112PCA	VC
H96_(H96∩S97)										
1	78	100	86	63	98	58	100	84	100	98
2	3	0	0	0	45	100	90	13	0	97
3	13	97	13	3	100	100	100	32	61	95
4	100	0	0	0	0	100	100	100	33	100
5	0	0	0	100	100	100	100	0	100	100
S97_(H96∩S97)										
1	85	100	72	28	100	96	100	85	87	11
2	27	100	0	8	98	82	100	2	73	8
3	0	50	0	0	25	100	100	75	0	100
4	100	100	33	0	67	100	100	33	0	100
5	0	0	0	0	57	100	100	0	14	0

Das CAG-Betriebsgelände hebt sich sowohl im Herbst 1996 als auch im Sommer 1997 als Cluster 1 in Abbildung 5.16 ab. Diese Cluster sind durch eine große Vielzahl von gefundenen LHKW gekennzeichnet (Tabelle 5.16). Zu ihm gehören auch die Proben, in denen alle untersuchten LHKW nachgewiesen wurden. Im Cluster 2 außerhalb des Werksgeländes der CAG

treten hingegen weniger LHKW auf, viele Stoffe werden dort gar nicht nachgewiesen (Tabelle 5.16). Dies gilt vor allem für die Stoffe, die eine geringe ENH aufweisen (siehe Kapitel 4), also 12DCA, 111TCA und 1112PCA. Sie kommen im Wesentlichen nur auf den Betriebsflächen der CAG vor.

Wie Tabelle 5.17 zu entnehmen ist, sind im Herbst 1996 im Cluster 1 Messstellen aus dem quartären Grundwasserleiter etwas überrepräsentiert, während im Cluster 3 Messstellen aus dem tertiären Grundwasserleiter häufiger vertreten sind. Im Sommer 1997 sind die großen Cluster recht gleichmäßig über beide Grundwasserleiter verteilt (Tabelle 5.17).

Insgesamt weist der Bereich außerhalb des Werksgeländes in beiden Jahren eine höhere Heterogenität in der stofflichen Zusammensetzung auf als das Werksgelände selbst. Im Gegensatz zu den Clusteranalysen mit den Faktorwerten (in Abbildung 5.13-A und Abbildung 5.14-A) wird mit den binären Daten dieser äußere Bereich (Muldeaue, Siedlungsbereiche, Bergbaufolgelandschaften und Filmfabrik) stärker unterteilt, wohingegen der Cluster im Bereich des Chemiegeländes stabil bleibt.

Tabelle 5.17: Anzahl der Proben der 5-Clusterlösung (einfache Übereinstimmung, Average Linkage between Groups) mit binären Daten der LHKW (RG = NWG) pro Grundwasserleiter. In Klammern sind die prozentualen Anteile der Grundwasserleiter pro Cluster angegeben.

Datensatz Cluster (EÜ, AL)	H96_(H96∩S97)			S97_(H96∩S97)		
	gesamt	GWL100	GWL500	gesamt	GWL100	GWL500
1	49	36 (74 %)	13 (26 %)	47	34 (72 %)	13 (28 %)
2	31	22 (71 %)	9 (29 %)	60	41 (68 %)	19 (32 %)
3	38	21 (55 %)	17 (45 %)	4	2 (50 %)	2 (50 %)
4	3	2 (67 %)	1 (33 %)	3	1 (33 %)	2 (67 %)
5	1	1 (100 %)	0 (0 %)	7	3 (43 %)	4 (57 %)
Summe	122	82 (67 %)	40 (33 %)	121	81 (67 %)	40 (31 %)

Klassifizierung der stofflichen Belastung auf ordinalem Messniveau (Clusteranalysen mit Rangzahlen)

Auf dem ordinalen Messniveau gehen die Rangzahlen der Messwerte in die Clusteranalyse ein. Nach Kaufman & Rousseuw (1990) werden ordinal skalierte Daten mit der euklidischen Distanz behandelt (vgl. Kapitel 3.3.6). Auch dieses Distanzmaß wird mit dem AL-Fusionierungsalgorithmus kombiniert. Um die Cluster hinsichtlich ihres Kontaminationsgrades zu beschreiben, wurden die Clusterzentren (mittlere Rangzahl pro Cluster) in Hasse-Diagrammen geordnet.

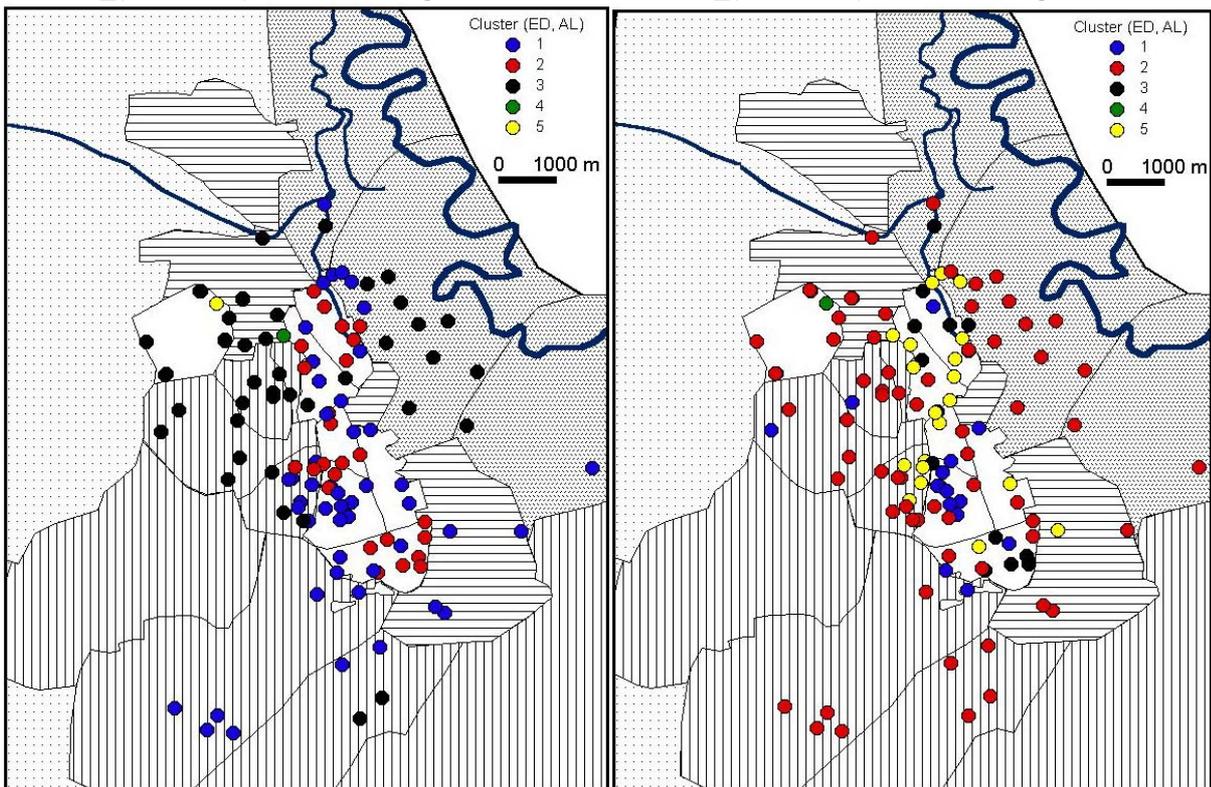
Im Datensatz H96_(H96∩S97) werden drei große und zwei kleine Cluster, im Datensatz S97_(H96∩S97) vier große und ein kleiner Cluster gebildet (Abbildung 5.17-A). Wie bei den binären Daten in Abbildung 5.16-A hebt sich im Datensatz H96_(H96∩S97) das Werksgelände der CAG mit den Clustern 1 und 2 vom Cluster 3 ab, der sich auf die Bergbaufolgelandschaften (Grube Hermine/Johannes), die Filmfabrik Wolfen und die Muldeaue erstreckt (Abbildung 5.17-A.I). Der Cluster 1 ist ebenfalls im südlichen Teil des Untersuchungsgebietes mit der Grube Freiheit III und Abstrom in Richtung der Goitsche zu finden. Im Gegensatz zu den binären Daten ist Cluster 2 auf drei Gebiete auf dem Werksgelände beschränkt: Werksteil Bitterfeld-Süd, Werksteil Bitterfeld-Mitte, Werksteil Wolfen. Das Zentrum dieses Clusters weist sehr hohe Rangzahlen für alle LHKW auf und ist daher als hoch belastet einzustufen, während Cluster 3 wesentlich geringer mit allen Stoffen belastet ist (Abbildung 5.17-B.I). Im Cluster 1 erhalten die höher chlorierten LHKW hohe Rangzahlen.

Auch im Datensatz S97_(H96∩S97) hebt sich das Werksgelände deutlich ab und wird hier in drei Cluster unterteilt (Abbildung 5.17-A.II und -B.II): Cluster 3, der hohe Rangzahlen für fast alle LHKW aufweist und dem Cluster 2 aus dem Datensatz H96 ähnelt, ist zweigeteilt mit Verbreitungsgebieten in den Werksteilen Bitterfeld-Süd und Wolfen (im Abstrom der Grube Greppin). Der Cluster 1, der durch auffallend hohe Rangzahlen für Tetrachlormethan gekennzeichnet ist, tritt bevorzugt im Werksteil Bitterfeld Mitte-West auf, während Cluster 5 um die Grube Antonie/Marie und im Werksteil Wolfen verbreitet ist und durch den Eintrag von PCE, TCE, cis12DCE und VC charakterisiert ist. Die Präferenz vom Messstellen eines Grundwasserleiters in einem Cluster ist nicht deutlich zu erkennen (Tabelle 5.18).

A: Räumliche Verteilung der Cluster im Untersuchungsgebiet.

A.I: H96_(H96∩S97), n = 122, Rangzahlen

A.II: S97_(H96∩S97), n = 121, Rangzahlen



B: Hasse-Diagramm der Clusterzentren.

B.I: H96_(H96∩S97), n = 122, Rangzahlen

B.II: S97_(H96∩S97), n = 121, Rangzahlen

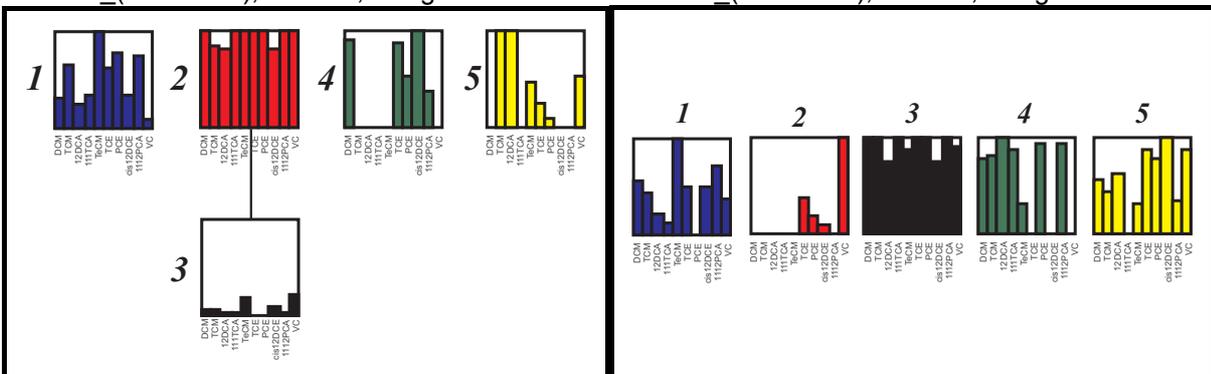


Abbildung 5.17: 5-Clusterlösung mit den Rangzahlen der LHKW im Herbst 1996 und im Sommer 1997 (Verfahren: euklidische Distanz, Average Linkage between Groups), zur Beschreibung der Teilgebiete siehe Abbildung 2.1 und Tabelle 2.1.

Tabelle 5.18: Anzahl der Proben pro Cluster (LHKW, Rangzahlen, euklidische Distanz, Average Linkage between Groups) und ihre Zuordnung zu den Grundwasserleitern.

Datensatz Cluster (ED, AL)	H96_(H96∩S97)			S97_(H96∩S97)		
	gesamt	GWL100	GWL500	gesamt	GWL100	GWL500
1	49	33 (67 %)	16 (33 %)	15	11 (73 %)	4 (27 %)
2	26	16 (62 %)	10 (38 %)	69	42 (61 %)	27 (39 %)
3	45	31 (69 %)	14 (31 %)	14	11 (77 %)	3 (21 %)
4	1	1 (100 %)	-	1	1 (100 %)	-
5	1	1 (100 %)	-	22	16 (73 %)	6 (27 %)
Summe	122	82 (67 %)	40 (33 %)	121	81 (67 %)	40 (33 %)

Tabelle 5.19: Anzahl der Proben pro Cluster (logarithmierte, z-transformierte LHKW, quadrierte euklidische Distanz, Ward-Methode) und ihre Zuordnung zu den Grundwasserleitern.

Datensatz Cluster (QED, WA)	H96_(H96∩S97)			S97_(H96∩S97)		
	gesamt	GWL100	GWL500	gesamt	GWL100	GWL500
1	43	26 (61 %)	17 (39 %)	26	20 (77 %)	6 (23 %)
2	33	24 (73 %)	9 (27 %)	65	40 (62 %)	25 (38 %)
3	41	29 (71 %)	12 (29 %)	9	7 (78 %)	2 (22 %)
4	3	2 (67 %)	1 (33 %)	15	10 (67 %)	5 (33 %)
5	2	1 (50 %)	1 (50 %)	6	4 (67 %)	2 (33 %)
Summe	122	82 (67 %)	40 (33 %)	121	81 (67 %)	40 (33 %)

Clusteranalysen mit Daten der Verhältnisskala (Originaldaten)

Die Originaldaten wurden auf einer Verhältnisskala erhoben und sind rechtsschief verteilt (vgl. Anhang A 5.6). In die Clusteranalyse gehen daher die logarithmierten Werte ein. Um die verschiedenen Merkmale auf einer vergleichbaren Skala analysieren zu können, wurden die logarithmierten Werte zusätzlich z-transformiert. Wie bei den Faktorwerten wurden mit diesen Daten vier unterschiedliche Varianten gerechnet. Da die Unterschiede zwischen den Verfahren prinzipiell dieselben sind, wie sie z.B. in Abbildung 5.12 dargestellt sind, werden im Folgenden nur die Ergebnisse des Ward-Verfahrens vorgestellt.

In Abbildung 5.18-A ist die räumliche Anordnung der 5-Clusterlösung im Untersuchungsgebiet, in Abbildung 5.18-B die Anordnung der Clusterzentren im Hasse-Diagramm dargestellt. Tabelle 5.19 ist die Gesamtzahl der Proben pro Cluster und deren Zuordnung zu den beiden Grundwasserleitern zu entnehmen.

Im Datensatz H96_(H96∩S97) entstehen wie bei der Clusteranalyse mit den Rangzahlen drei große, relativ gleichmäßig besetzte Cluster sowie zwei kleine Cluster (4, 5) mit nur wenigen Objekten (Abbildung 5.18-A.I, Tabelle 5.19). Letztere unterscheiden sich von den "kleinen" Clustern mit den Rangzahlen. Sie befinden sich hauptsächlich im Werksteil Bitterfeld-Süd. In Abbildung 5.18-B.I werden sie auf dem höchsten Level des Hasse-Diagramms angeordnet und zeigen starke Belastungen an. Mit den anderen drei Clustern werden die mittel- (Cluster 2) und gering belasteten (Cluster 1 und 3) Messstellen klassifiziert. Die Cluster 1 und 2 durchmischen sich räumlich auf dem Gebiet der CAG, während der Cluster 3 sich auf dem Gelände der Filmfabrik und im Bereich der Gruben Hermine und Johannes befindet (Abbildung 5.18-A.I). Das Hasse-Diagramm (Abbildung 5.18-B.I) zeigt, dass im Cluster 3 im Vergleich zum Cluster 1 höhere mittlere Werte für Vinylchlorid auftreten. Aus der Tabelle 5.19 wird deutlich, dass die Cluster nicht an einen der beiden GWL gekoppelt sind.

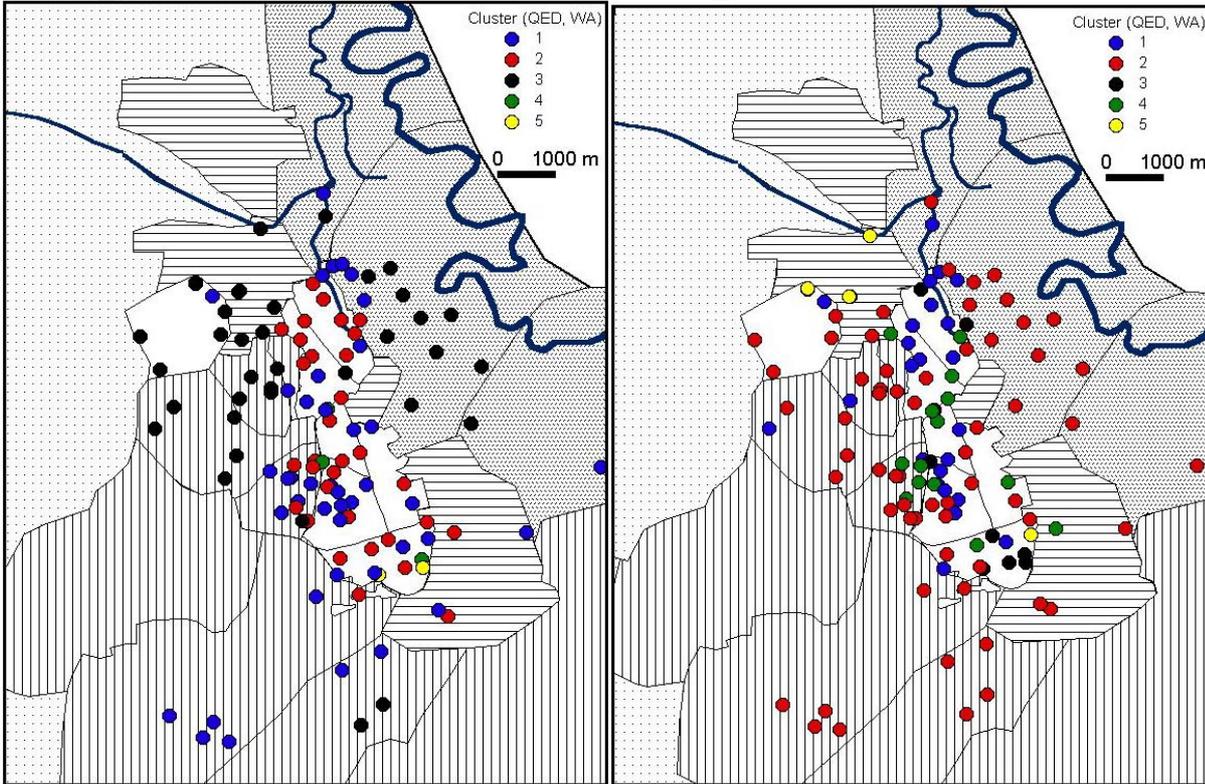
Im Datensatz S97_(H96∩S97) werden die hoch belasteten Messstellen im Cluster 3 zusammengefasst (Abbildung 5.18-B.II). Außerdem befindet sich nördlich von Wolfen ein Cluster 5, der durch hohe Vinylchloridverunreinigungen gekennzeichnet ist (Abbildung 5.18-A.II). Ein ähnlicher Cluster entsteht im Datensatz H96_(H96∩S97) bei der 7-Cluster-

lösung. Die restliche Einteilung des Untersuchungsgebietes differiert deutlich von der Einteilung im Herbst 1996. Der Cluster 1 ist hauptsächlich auf die Werkstelle in Wolfen und Bitterfeld Mitte-West beschränkt und ist durch erhöhte Werte für TCM, TeCM und 1112PCA gekennzeichnet. Demgegenüber dominieren im Cluster 4, der um die Grube Antonie/Marie und bei Greppin zu finden ist, die chlorierten Ethene, also PCE, TCE und cis12DCE (Abbildung 5.18-A.II und -B.II).

A: Räumliche Verteilung der Cluster im Untersuchungsgebiet.

A.I: H96_(H96∩S97), n = 122

A.II: S97_(H96∩S97), n = 121



B: Hasse-Diagramm der Clusterzentren.

B.I: H96_(H96∩S97), n = 122

B.II: S97_(H96∩S97), n = 121

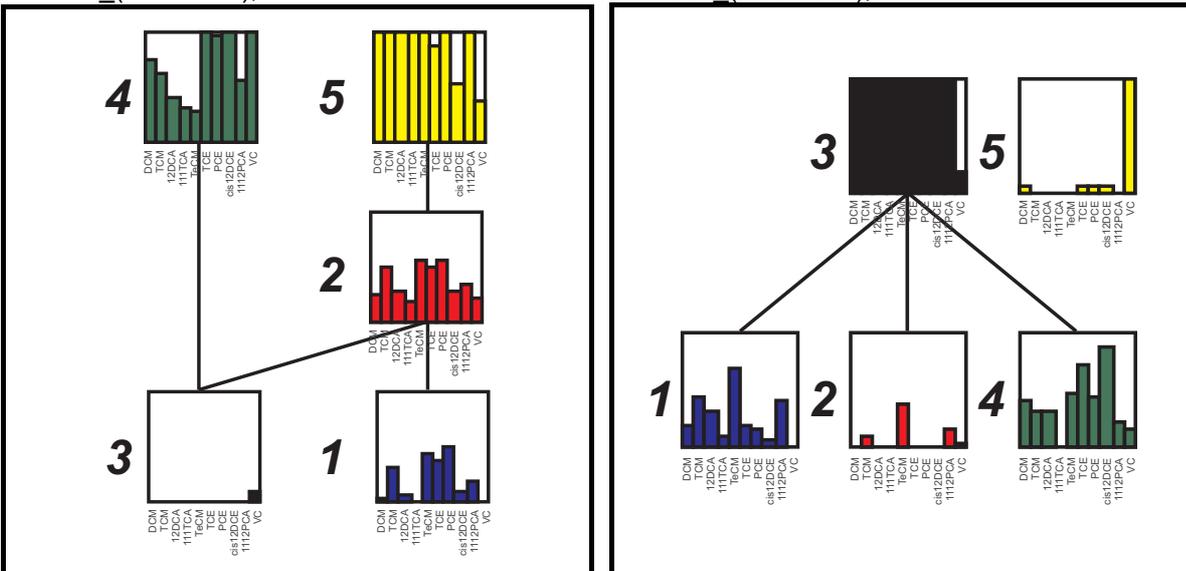


Abbildung 5.18: 5-Clusterlösung der logarithmierten und z-transformierten LHKW im Herbst 1996 und im Sommer 1997. Verfahren: quadrierte euklidische Distanz (QED), Ward-Methode (WA). Zur Beschreibung der Teilgebiete siehe Abbildung 2.1 und Tabelle 2.1.

Clusterlösung mit den Faktorwerten

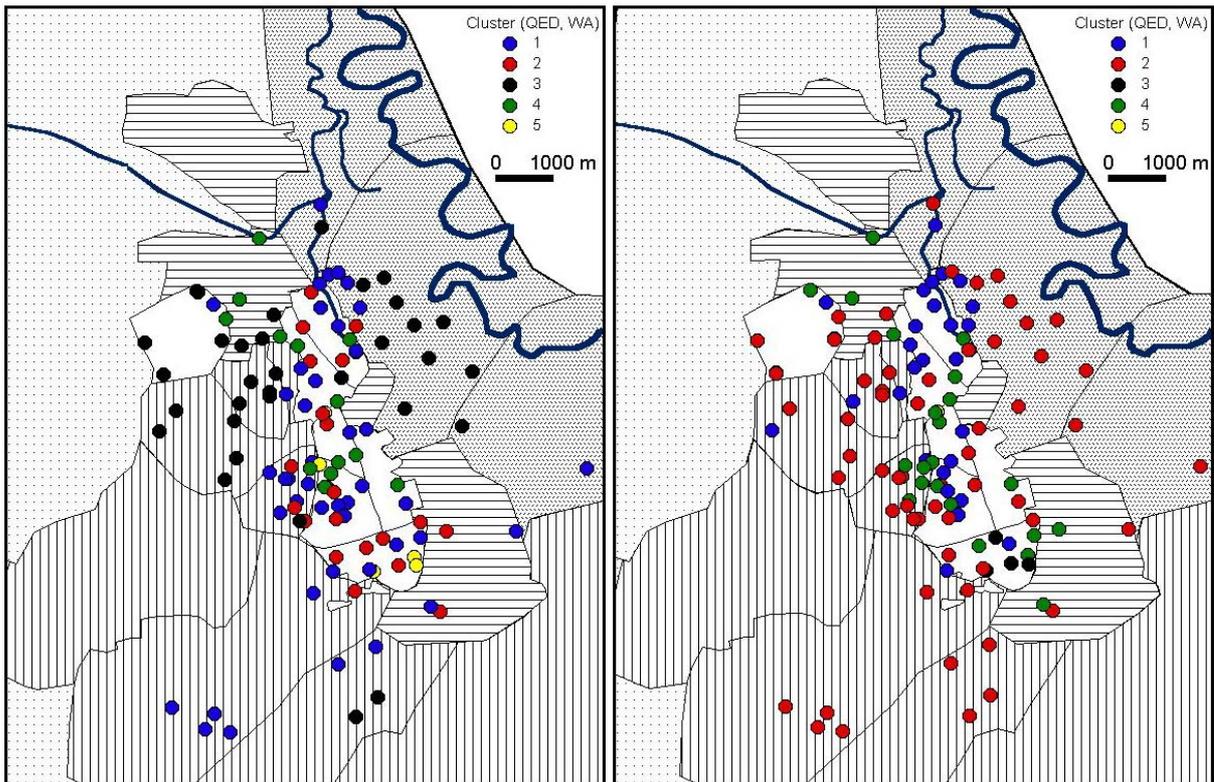
Auch mit den Faktorwerten der 2-Komponentenlösung wurden verschiedene Clusteranalysen durchgeführt, von denen hier nur die Clusterlösung mit dem Ward-Verfahren betrachtet wird, da prinzipiell dieselben Unterschiede zwischen den Verfahren auftreten wie in den vorangegangenen Analysen.

Die 5-Clusterlösungen aus den Faktorwerten (Abbildung 5.19 und Tabelle 5.20) stimmen für beide Beprobungskampagnen weitgehend mit den Clusterlösungen aus den Einzelstoffen (Abbildung 5.18) überein.

A: Räumliche Verteilung der Cluster im Untersuchungsgebiet.

A.I: H96_(H96∩S97), n = 122, Faktorwerte

A.II: S97_(H96∩S97), n = 121, Faktorwerte



B: Hasse-Diagramm der Clusterzentren.

B.I: H96_(H96∩S97), n = 122, Faktorwerte

B.II: S97_(H96∩S97), n = 121, Faktorwerte

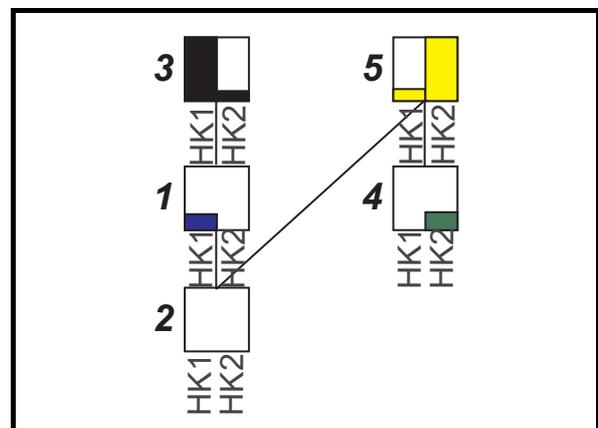
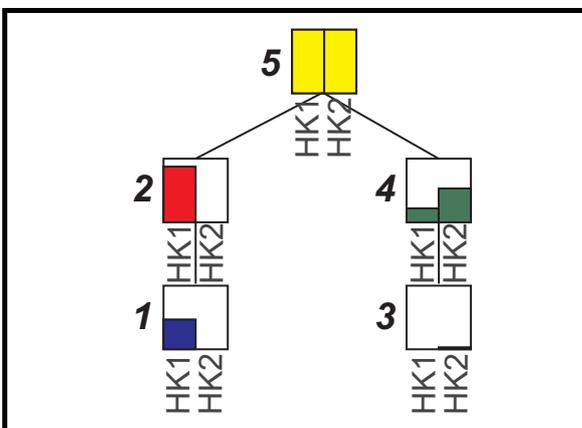


Abbildung 5.19: 5-Clusterlösung (quadrierte euklidische Distanz, Ward-Methode) mit den Faktorwerten der 2-Komponentenlösung der LHKW im Herbst 1996 und im Sommer 1997; zur Beschreibung der Teilgebiete vgl. Abbildung 2.1 und Tabelle 2.1.

Tabelle 5.20: Anzahl der Messstellen pro Cluster (LHKW, Faktorwerte der 2-Komponentenlösung, quadrierte euklidische Distanz, Ward-Verfahren) und ihre Zugehörigkeit zu den Grundwasserleitern.

Datensatz Cluster (QED, WA)	H96 (H96∩S97)			S97 (H96∩S97)		
	gesamt	GWL100	GWL500	gesamt	GWL100	GWL500
1	44	26 (59 %)	18 (41 %)	30	23 (77 %)	7 (23 %)
2	21	17 (81 %)	4 (19 %)	61	38 (62 %)	23 (38 %)
3	37	27 (73 %)	10 (27 %)	4	3 (75 %)	1 (25 %)
4	15	9 (60 %)	6 (40 %)	25	16 (64 %)	9 (36 %)
5	5	3 (60 %)	2 (40 %)	1	1 (100 %)	-
Summe	122	82 (67 %)	40 (33 %)	121	81 (67 %)	40 (33 %)

Mit den reduzierten Datensätzen können im Herbst 1996 und im Sommer 1997 die wesentlichen Muster erzielt werden wie mit den kompletten Datensätzen H96 (n= 198, Abbildung 5.13) und S97 (n= 207, Abbildung 5.14)). Die gezeigten Clusterlösungen werden auf einem vergleichbaren Ähnlichkeitslevel (Fehlerquadratsumme) getrennt. Mit den reduzierten Datensätzen entstehen dabei allerdings jeweils nur fünf Cluster (Abbildung 5.19).

5.3.6 Interpretation und Diskussion der Kontaminationsfaktoren

Eine Hauptkomponentenanalyse innerhalb der Stoffgruppe der LHKW liefert im Datensatz H96 eine Trennung der Stoffe nach dem Chlorierungsgrad (Tabelle 5.11). Die drei- und vierfach chlorierten Stoffe sind als Lösemittel weit verbreitet und wurden auch in Bitterfeld-Wolfen in großen Mengen produziert, verwendet und z.T. deponiert. Das Vorkommen der zweifach chlorierten Stoffe und Vinylchlorid im Grundwasser wird i.d.R. auf den Abbau der anderen Stoffe zurückgeführt, nicht durch einen Primäreintrag in Folge einer Deponierung (z.B. Nerger & Roßkamp, 1991). Daher verweisen die Faktoren im Datensatz H96 auf primäre Grundwasserbelastungen einerseits, die aus der Produktion und Verbreitung abgelagerter Stoffe durch Sickerwasseremission resultieren, und auf sekundäre Grundwasserbelastungen andererseits, die im Allgemeinen auf den Abbau abgelagerter Stoffe zurückzuführen sind.

Stoffe der ersten Hauptkomponente sind z.T. im ganzen Untersuchungsgebiet vorhanden. Hohe Konzentrationen und damit auch hohe Faktorwerte treten jedoch bevorzugt auf dem Werksgelände der CAG auf. Die Stoffe, die mit der zweiten Hauptkomponente korrelieren, sind – mit Ausnahme des Vinylchlorids – nicht flächendeckend vorhanden. Bereiche mit hohen Faktorwerten treten um die Gruben Greppin, Antonie, Johannes und Hermine sowie auf dem Gelände der Filmfabrik und in der Mulde auf (vgl. Abbildung 5.13, Abbildung 5.19). Dies unterstützt die These, dass die Sekundärkontaminanten nicht flächenhaft primär, sondern sekundär durch Deponiesickerwässern, in denen sie durch den Abbau der Primärkontaminanten zu finden sind, eingetragen werden. In einer Industrieregion sind allerdings hohe punktuelle Einträge durch Havarien nicht gänzlich auszuschließen.

Eine Einteilung der LHKW nach dem Chlorierungsgrad wurde ebenfalls im Ranking in Kapitel 4 beobachtet. Dort hatten höher chlorierte LHKW eine sehr hohe ENH, zweifach chlorierte hingegen eine hohe MEK, aber eine geringere ENH. Die Einteilung der Stoffe in der Hauptkomponentenanalyse erfolgt daher z.T. nach der ENH. Im Gegensatz zur stoffgruppenübergreifenden Betrachtung, in der nur leichtes Censoring und im Einzelfall moderates Censoring auftritt, weisen gerade die zweifach chlorierten LHKW (vor allem 12DCA) sowie 111TCA schweres Censoring auf. Daher wurde in Kapitel 5.3.3 untersucht, wie sich das Censoring auf die Hauptkomponentenanalyse auswirkt.

Im Datensatz, in den nur Werte oberhalb der Nachweisgrenzen eingehen, verändert sich die Zusammensetzung der beiden Hauptkomponenten deutlich. Hier werden die Hauptkomponenten durch Stoffe charakterisiert, die durch Abbauketten miteinander in Beziehung stehen (vgl. Abbildung 3.6, Abbildung 3.7, Anhang A 5.7). Die Veränderungen der Faktorzusammensetzung ist aber nicht nur auf das fehlende Censoring zurückzuführen, sondern auch auf die räumliche Einschränkung des Gebietes, in dem die berücksichtigten Messstellen liegen. So werden ebenfalls mit dem Datensatz H96_(CAG) Faktoren abgeleitet, in denen die Abbauketten dominieren. Im Herbst 1996 ist also eine veränderte Faktorenzusammensetzung festzustellen, wenn der Untersuchungsraum eingeschränkt wird. Im Sommer 1997 tritt dieses Phänomen hingegen nicht auf; hier können die Faktoren durchweg mit den Abbauketten der Stoffe interpretiert werden (vgl. Kapitel 5.3.3, Anhang A 5.7).

Ein solcher Wechsel von einer Differenzierung nach Abbauketten (auf dem Chemiegelände) zu einer Unterscheidung in Primär- und Sekundärkontaminanten (im gesamten Untersuchungsgebiet) kann als Skalierungseffekt betrachtet werden, d.h. mit dem Wechsel der Betrachtungsskala erfolgt ein Prozesswechsel. Dies wird durch die Ergebnisse der Clusteranalyse bestätigt. So wird in den Clusteranalysen mit dem Datensatz H96 das CAG-Betriebsgeländes markant hervorgehoben bzw. es werden der nördliche Bereich der Muldeaeue sowie der Bereich der Filmfabrik, der Grube Johannes und der Grube Hermine abgetrennt (Abbildung 5.13-A). Diese räumliche Grobstruktur tritt auch in den Clusteranalysen mit den binären Daten, den Rangzahlen und den logarithmierten Werten hervor und kann als relativ gesichert eingestuft werden. Im Cluster 2 in Abbildung 5.16-A werden TCE, PCE und VC häufig nachgewiesen. Dieser Cluster entspricht dem Cluster 3 in Abbildung 5.17-A.I und Abbildung 5.18-A.I, in dem Vinylchlorid überrepräsentiert ist. Es muss vermutet werden, dass VC in diesem Bereich im Vergleich zu PCE angereichert wird. Dies wird auch aus der räumlichen Verteilung von PCE und VC (Anhang A 5.8) deutlich.

Der Abbau der chlorierten Ethene wird durch die Redoxverhältnisse beeinflusst. Eine Anreicherung von VC kann unter reduzierenden Bedingungen stattfinden (z.B. Haston & McCarty, 1999). Im Datensatz H96 treten im Bereich der Filmfabrik, der Grube Johannes und Hermine sowie in der Muldeaeue reduzierende Bedingungen auf (Abbildung 5.15-A). Dieser Bereich deckt sich in etwa mit dem Cluster 3 in Abbildung 5.18-A.I. Aus der räumlichen Verteilung von PCE und VC kann abgeleitet werden, dass sich die Korrelation zwischen Stoffen einer Abbaukette z.B. durch eine Anreicherung der Abbauprodukte im Raum verändern kann. Diese räumliche Korrelationsstruktur wird in der Hauptkomponentenanalyse nicht berücksichtigt. Sie kann nur durch eine Variation der Betrachtungsskala hervortreten. Etwas Ähnliches wurde bei den ausgewählten Einzelstoffen in Kapitel 5.2.5 diskutiert.

Im Datensatz S97 ist der beschriebene Skalenwechsel nicht zu erkennen. Dies ist wahrscheinlich auf die geringe ENH von VC (15 %, vgl. Kapitel 4.2.3) zurückzuführen. Allerdings haben sich – zumindest im Umfeld der Messstellen – die Redoxbedingungen deutlich geändert (Abbildung 5.15-B) und die Konzentrationen von PCE sind ebenfalls gestiegen (Anhang A 5.8). Um beurteilen zu können, wie die geringen VC-Konzentrationen, die höheren PCE-Konzentrationen und die veränderten Redoxbedingungen miteinander in Zusammenhang stehen und ob sie über einen längeren Zeitraum stabil sind, sind weitere Vergleichsjahre zu analysieren. Außerdem sollte an ausgewählten Messstellen der Jahresgang der Vor-Ort-Parameter und der Stoffkonzentrationen untersucht werden, um einen Einblick in die zeitliche Variabilität zu erhalten.

Um die Dynamik der VC-Verteilung besser beurteilen zu können, sollte in Zukunft auf diese Substanz also besonders geachtet werden. Die Analytik von VC ist aufgrund der hohen

Flüchtigkeit der Substanz sehr aufwändig. Üblicherweise erfolgt der analytische Nachweis gaschromatographisch mit dem Elektroneneinfangdetektor (ECD). Im nicht so aufwändigen Headspace-Verfahren, bei dem gleichzeitig weitere LHKW (cis12DCE, TCE, PCE) nachgewiesen werden können und das auch in den hier ausgewerteten Messkampagnen eingesetzt wurde, liegt die Nachweisgrenze für VC bei 1 bis 2 µg/l (Nerger & Roßkamp, 1991). Auch aufgrund der hohen toxikologischen (humankarzinogenen) Bedeutung von VC sollte in Zukunft ein empfindlicheres Verfahren gewählt werden. So kann eine wesentlich bessere Nachweisgrenze von 0.4 ng/l bei der Einzelstoffbestimmung mit Hilfe der Derivatisierung über 1,2-Dibromchloroethan erreicht werden (Wittsiepe et al., 1990).

5.4 Diskussion der eingesetzten Methoden

Das Ziel von multivariaten Korrelations- und Hauptkomponentenanalysen ist, Zusammenhänge zwischen gemessenen Variablen aufzudecken und die Dimension der Variablen durch übergeordnete Faktoren zu reduzieren. Diese übergeordneten Faktoren (Hauptkomponenten oder Kontaminationsfaktoren) sollen die ursprüngliche Information ohne großen Informationsverlust abbilden. Bei Umweltdaten, insbesondere bei Daten von kontaminierten Gebieten, ist diese Herangehensweise wichtig, um Quellen von Verunreinigungen sowohl stofflich als auch räumlich zu identifizieren.

Drei Merkmalsgruppen wurden mit den Methoden der statistischen Strukturanalyse untersucht: 16 summarische Parameter, zehn Einzelstoffe aus verschiedenen Stoffgruppen, die durch das Rankingverfahren als regional relevant charakterisiert wurden, und zehn Einzelstoffe aus der Stoffgruppe der LHKW, die insgesamt die wichtigste Stoffgruppe für die Grundwasserkontamination darstellt (vgl. Kapitel 4). Die fachliche Interpretation der Kontaminationsfaktoren und der zugehörigen räumlichen Muster erfolgte bereits in den Kapiteln 5.1.5, 5.2.5 und 0. Hier sollen abschließend gemeinsame methodische Aspekte diskutiert werden.

Methodische Schwierigkeiten ergeben sich aus der rechtsschiefen (linkssteilen) Verteilung von Umweltdaten und bei organischen Stoffen aus dem Censoring der Daten (vgl. Kapitel 3.1.1, Tabelle 3.3). Werte unterhalb der Nachweisgrenze liefern jedoch für die Korrelations- und Faktorenanalyse wichtige Informationen darüber, ob Stoffe stets zusammen auftreten oder nicht nachgewiesen werden oder ob sich die Verbreitungsgebiete von Stoffen räumlich abgrenzen oder überlappen. Dies wurde anhand einer Clusteranalyse mit den binären Daten in Kapitel 5.3.5 demonstriert.

In der vorliegenden Arbeit wurden die beiden methodischen Schwierigkeiten ansatzweise behandelt. Zunächst wurden alle Werte unterhalb der analytischen Nachweisgrenzen durch die Hälfte der Nachweisgrenze ersetzt und in der Analyse mitgeführt. Diesen Ergebnissen wurden solche gegenübergestellt, in die nur Werte oberhalb der analytischen Nachweisgrenzen einfließen. Um die rechtsschiefe Verteilung der Daten zu korrigieren bzw. um eine log-Normalverteilung anzunähern, wurden die Werte logarithmiert. Parallel dazu wurden die Rangzahlen der Werte betrachtet. Mit dieser Herangehensweise ist es möglich, parametrische und nicht-parametrische Verfahren anzuwenden und die Ergebnisse zu vergleichen.

In den **Korrelations- und Hauptkomponentenanalysen** ergaben sich im Datensatz H96 für alle untersuchten Merkmalsgruppen nur geringe Unterschiede zwischen der parametrischen und nicht-parametrischen Analyse. Daher muss man annehmen, dass eine log-Transforma-

tion bei den vorliegenden Daten ausreichend ist. Für die Merkmalsgruppe der LHKW fallen die Ergebnisse im Datensatz S97 schlechter aus als im Datensatz H96, was auf den höheren Grad an Censoring und höhere Extremwerte im Sommer 1997 zurückzuführen ist. Im Zweifelsfall sind die Ergebnisse einer nicht-parametrischen Analyse zuverlässiger.

Bei einem leichten Censoring bis zu 25 % sind parametrische statistische Verfahren in der Regel problemlos einsetzbar (Gibbons, 1992). Aruga (1997) stellt sogar fest, dass Hauptkomponentenanalysen selbst bei einem Censoring von 75 % noch akzeptable Ergebnisse liefern. Nach den Kriterien, die Aruga (1997) vorschlug, sind in der vorliegenden Arbeit die Ergebnisse der Hauptkomponentenanalysen mit und ohne Censoring nur bei den ausgewählten Einzelsubstanzen in Kapitel 5.2 vollständig vergleichbar. Sowohl bei der summarischen Betrachtung als auch bei der Analyse innerhalb der Stoffgruppe der LHKW treten Inversionen zwischen den Faktoren und geänderte Zusammensetzungen auf. Besonders stark sind die Abweichungen der Faktorenzusammensetzung bei den LHKW. Das bedeutet, dass Werte $< \text{NWG}$ eine erheblich Streuung in der Korrelationsstruktur erzeugen, die die Güte des Modells, d.h. den erklärten Varianzanteil, schmälern. Tendenziell werden Variablen mit schwerem Censoring in einer Hauptkomponente abgetrennt. So wird z.B. im Datensatz S97 das Vinylchlorid mit einem hohen Grad an Censoring ($\text{ENH} = 15\%$) in der 4-Komponentenlösung in einem Faktor separiert. In der 3-Komponentenlösung mit dem Datensatz H96 werden die Variablen 12DCA und 111TCA, die für diesen Datensatz das höchste Censoring aufweisen, in einem Faktor zusammengefasst.

Allerdings lassen sich bei dieser Frage zwei Effekte methodisch nur schwer voneinander trennen: Zum einen ändert sich die Faktorenzusammensetzung auf der Basis der Datensätze ohne Werte $< \text{NWG}$, weil der starke Einfluss der Werte unterhalb der Nachweisgrenze wegfällt und eine andere Korrelationsstruktur hervortritt. Zum anderen ist die Veränderung der Faktorenbildung teilweise darauf zurückzuführen, dass die Datensätze, in denen nur Werte oberhalb der Nachweisgrenzen berücksichtigt wurden, nicht dasselbe Untersuchungsgebiet abdecken wie der vollständige Datensatz. Gerade in einem heterogenen Untersuchungsgebiet mit diversen Eintragsquellen kann mit einem Skalenwechsel (d.h. wenn nur ein Teil des Untersuchungsgebietes betrachtet wird) ein Prozesswechsel einhergehen. Dies tritt z.B. für die Stoffgruppe der LHKW im Datensatz H96 auf (vgl. Kapitel 0). Um solche Phänomene systematischer zu untersuchen, sollte die räumliche Anordnung der Messstellen in die Auswertung eingehen.

Bolviken et al. (1997) betonen, dass Korrelationen zwischen räumlich gemessenen Variablen auch räumlich differenziert werden müssen, da in einem großen Untersuchungsgebiet räumlich begrenzte Korrelationen nicht sichtbar werden, wenn der Datensatz als einheitliche Stichprobe behandelt wird. Sie schlagen daher „moving correlations“ vor, in denen für jeden Messpunkt die Korrelation zwischen zwei Merkmalen anhand der Daten an den unmittelbar umliegenden Messstellen bestimmt wird. Damit erhält man für jeden Messpunkt einen Korrelationskoeffizienten, dessen Veränderung räumlich dargestellt werden kann (siehe Bolviken et al., 1997). Dieser Ansatz könnte auf Hauptkomponentenanalysen übertragen werden. Allerdings ist die Visualisierung sich verändernder Faktorladungen/Hauptkomponenten schwierig zu lösen. Weiterhin könnte die Variabilität der Faktorbildung durch Monte-Carlo-Simulationen erfasst werden (vgl. Berlekamp et al., 1995).

Hier schließt die Frage an, ob und wie die Faktorwerte räumlich visualisiert werden können. In der vorliegenden Arbeit wurden verschiedene **Clusteranalysen** eingesetzt, um räumliche Verteilungsmuster abzuleiten, da die gegebene Klassifikation der Faktorwerte nach Grundwasserleitern und Teilgebieten keine eindeutigen Strukturen ergab. Da die Ergebnisse der

Clusteranalysen ebenfalls bereits diskutiert wurden, sollen hier wiederum nur die methodischen Aspekte beleuchtet werden.

Wie bei anderen Untersuchungen (z.B. Henrion & Henrion, 1995; Rudolph, 1999) liefert das Ward-Verfahren im Vergleich zum AL-Verfahren „bessere“ Ergebnisse. Bei Daten der Verhältnisskala (d.h. bei den logarithmierten Originalwerten und den Faktorwerten) reagiert das AL-Verfahren mit beiden Distanzmaßen empfindlich auf Ausreißer, d.h. es werden stets viele kleine Cluster mit wenigen Objekten gebildet. In der Clusteranalyse mit den Rangzahlen liefert das AL-Verfahren allerdings eine gleichmäßigere Clusterung. Mit dem Ward-Verfahren werden die Extremwerte tendenziell in einem Cluster zusammengefasst, so dass der übrige Datensatz hinreichend klassifiziert wird. Ebenso geeignet sind Clusterzentrenanalysen, die gegenüber hierarchischen Verfahren den Vorteil haben, dass iterativ eine optimale Clusterung gesucht wird und dabei gebildete Cluster wieder aufgelöst und neu formiert werden können (Kaufman & Rousseeuw, 1990).

Der Einfluss des Messniveaus auf die Ergebnisse der Clusteranalyse wurde anhand der LHKW untersucht. Eine deutlich geänderte Klassifizierung der Messstellen tritt nur auf nominalem Messniveau auf. Auch zwischen den log-transformierten Werten und den Faktorwerten sind wenig Unterschiede festzustellen, d.h. die wesentliche Datenstruktur wird durch die Hauptkomponenten abgebildet. Die Streichung der kleinen Eigenwerte in der Hauptkomponentenanalyse sollte auch zu einer Schärfung der Clusterung führen, da diese Anteile gemäß der Huygenschen Formel keine Streuung der Clusterschwerpunkte erzeugen, sondern nur die Streuung innerhalb der Cluster (das Rauschen) verstärken (Henrion & Henrion, 1995). Problematisch ist die Interpretation der Clusterung auf der Basis von Faktorwerten, wenn verschiedene Beprobungskampagnen verglichen werden sollen, aber – wie bei den LHKW – die Zusammensetzung der Hauptkomponenten nicht vergleichbar ist. In einem solchen Fall muss auf die Originalwerte zurückgegriffen werden.

Denkbar wäre, aus den Faktorwerten (oder den Originaldaten) mit Hilfe von **Interpolationsmethoden** Verteilungskarten herzustellen. Hier wäre mit Methoden der Geostatistik (Variogrammanalyse) zunächst zu prüfen, ob eine räumliche Korrelation der Parameter vorliegt. Eine Autokorrelationsfunktion bildet die Basis für die räumliche Darstellung oder Regionalisierung eines Parameters. In der vorliegenden Kontamination ist eine zweidimensionale geostatistische Auswertung jedoch schwierig, da die Proben über die gesamte Mächtigkeit der Grundwasserleiter von mehreren 10 m entnommen wurden und somit aus sehr unterschiedlichen Tiefen stammen. Untersuchungen am SAFIRA-Standort (Dermietzel & Christoph, 2001) sowie an der Grube Antonie (Lampe et al., 1995) zeigen, dass die Stoffe vertikal sehr unterschiedlich verteilt sind. Beispielsweise werden Schadstoffe an schluffigen Zwischenschichten im tertiären Grundwasserleiter (Bitterfelder Glimmersande) oder an den Resten der Braunkohlenflöze angereichert und im Transport retardiert. Durch diese vertikale und horizontale Differenzierung ist bei einer punktuellen Beprobung eher davon auszugehen, dass die Messwerte stochastisch verteilt und nicht räumlich korreliert sind. Erste eigene Auswertungen, auf die in dieser Arbeit nicht näher eingegangen werden soll, haben dies bestätigt. Für weitergehende Aussagen wäre eine detaillierte geostatistische Auswertung erforderlich.

6 Schlussfolgerungen und Ausblick

Durch die Entwicklung und Umsetzung der folgenden Untersuchungsstrategie ist es gelungen, aus heterogenen, multidimensionalen Datenbeständen Schadstoffstrukturen in einer regionalen Grundwasserkontamination zu extrahieren: In der ersten Stufe wurden Datenbestände aus verschiedenen Grundwasser-Monitoringprogrammen einheitlich formalisiert, auf Qualität geprüft und in einer Datenbank zusammengeführt (Kapitel 3.1). Diese Prozedur ergab u.a. geeignete Teildatensätze für die weiteren Auswertungen. Die ausgewählten Teildatensätze wurden in der zweiten Analysestufe mit Rankingverfahren strukturiert (Kapitel 4), woraus eine Klassifizierung der untersuchten Stoffgruppen und Einzelstoffe abgeleitet werden konnte. Regional relevante Merkmale gingen in die dritte Stufe der Untersuchung, die statistische Strukturanalyse, ein (Kapitel 5), die den Daten zugrunde liegende Kontaminationsfaktoren und räumliche Verteilungsmuster hervorbrachte. Im Folgenden werden Schlussfolgerungen aus den drei Analyseschritten gezogen, und es wird ein Ausblick auf weitere Untersuchungen gegeben.

Zusammenführung heterogener Datenbestände

Die Zusammenführung von zwei Beispieldatensätzen aus unterschiedlichen Grundwasser-Monitoringprogrammen in der Region Bitterfeld-Wolfen zeigte, dass eine geringe Standardisierung der Datenhaltung zu Fehlern, Inkonsistenzen und Redundanzen in Datenbeständen führen kann (vgl. Kapitel 3.1.1). Um solche Qualitätsmängel zu vermeiden, sollte eine Datenaufnahme durch ein gemeinsames Qualitätsmanagement begleitet werden, an dem alle Messnetzbetreiber und zuständigen Behörden beteiligt sind. Neben der Standardisierung der Daten (Bezeichnungen, Einheiten usw.) sollte dabei auf die Dokumentation der Datenerfassung, die Messgenauigkeit und die Form und Vollständigkeit der digitalen Angaben Wert gelegt werden.

Die zur Verfügung stehenden Datensätze lassen bestimmte Untersuchungen nicht zu. Beispielsweise konnten Zeitreihenanalysen aufgrund der geringen Kontinuität bei der Erhebung organischer Stoffe oder aufgrund unvollständiger Angaben nicht durchgeführt werden. Um die räumliche und zeitliche Dynamik der Kontamination genauer betrachten zu können, sollten in Zukunft einige Leitparameter kontinuierlich und flächendeckend erhoben werden. Zur Auswahl solcher Leitparameter leistet die vorliegende Arbeit einen Beitrag.

Regional relevante Stoffgruppen und Einzelstoffe

Mit dem Stoffranking (vgl. Kapitel 4) konnten regional und lokal relevante Einzelstoffe und Stoffgruppen identifiziert werden. Durch die Ergänzung des Kontaminationsprofils durch Clusteranalysen und Hasse-Diagramme war es darüber hinaus möglich, die untersuchten Einzelstoffe grob in Gruppen mit unterschiedlichen Eintragsmustern und/oder unterschiedlichem Umweltverhalten einzuteilen. Zur vollständigen Interpretation dieser Stoffeinteilung müssten allerdings Informationen über die Produktions- und Eintragsmengen der einzelnen Stoffe herangezogen werden. Zur Verifizierung der Einteilung der Stoffe nach ihrem Umweltverhalten, die anhand der Kontaminationskriterien vorgenommen wurde, sind detaillierte räumliche und zeitliche Auswertungen notwendig.

Die Analyse ergab, dass leichtflüchtige halogenierte Kohlenwasserstoffe (LHKW), Chlorbenzene, BTEX-Aromaten sowie HCH- und DDT/D/E-Isomere in der Grundwasserkontamination in Bitterfeld-Wolfen regional verbreitet und relevant sind, wobei die LHKW die **wichtigste Stoffgruppe** sind. Stoffe anderer Gruppen (Chlorphenole, Chloraniline, Nitrophenole, Nitrochlorphenole und Nitrochlorbenzene) treten hingegen nur lokal auf dem Gebiet der Chemie AG Bitterfeld-Wolfen (CAG), insbesondere in den Werksteilen in Wolfen auf. Ein Vergleich mit anderen Studien zeigt, dass die HCH- und DDT-Verunreinigungen als regionalspezifisch einzuordnen sind.

Regional relevante Einzelstoffe sind Tetra-, Tri- und Dichlormethan, Tetra-, Tri- und cis 1,2-Dichlorethen, 1,1,2,2-Tetrachlorethan, Vinylchlorid, Monochlorbenzen, 1,4- und 1,2-Dichlorbenzen, Benzen, alpha-, gamma- und delta-HCH. Die genannten Stoffe belegen die ersten Ränge im Kontaminationsprofil, zeichnen sich im Hasse-Diagramm durch eine hohe Anzahl an Nachfolgern aus und werden in der Clusteranalyse weitgehend zusammengefasst. Sie könnten daher als regionale Leitparameter für die Grundwasserkontamination in Bitterfeld-Wolfen fungieren. Sie sollten kontinuierlich und flächendeckend erhoben und ausgewertet werden.

Diese Auswahl bedeutet jedoch nicht, dass das Monitoring auf diese Stoffe beschränkt bleiben sollte. Für die anderen Einzelstoffe können je nach Eintragsmuster und Ausbreitungsverhalten verschiedene **Beprobungsstrategien** entwickelt werden.

Im Stoffranking weisen Stoffe mit hohen Emissions-Nachweishäufigkeiten (ENH), aber geringen mittleren Emissionskonzentrationen (MEK) tendenziell ein geringes Transfer-, jedoch ein hohes Persistenzpotenzial auf. In diese Klasse fallen z.B. die DDT-Isomere und die höher chlorierten Benzene. Da langfristig ihre Ausbreitung nicht ausgeschlossen werden kann, sollten sie ebenfalls überwacht werden, jedoch in einem zeitlich und räumlich größeren Raster als die oben genannten Leitparameter. Wie die Ergebnisse der Sensitivitätsanalyse in den Kapiteln 4.1.2 und 4.1.3 zeigen, ist bei Stoffen, wie z.B. den DDT/D/E-Isomeren oder den höher chlorierten Benzenen, auf eine empfindliche analytische Nachweisgrenze zu achten, damit solche Gefährdungspotenziale identifiziert werden können. Da diese Stoffe z.T. erhebliche Umweltrelevanz (Toxizität) besitzen, sollten die Analysen einen Vergleich mit gängigen Bewertungsmaßstäben ermöglichen.

Stoffe mit relativ hohen MEK, aber geringen ENH weisen darauf hin, dass sie entweder gut im Grundwasser abgebaut werden (natural attenuation), dass sie punktuell eingetragen werden oder dass der Eintrag als relativ „neu“ einzustufen ist. Stoffe aus punktuellen Eintragsquellen können im Monitoring mit einer zonalen Beprobungsstrategie überwacht werden. Mit zunehmender Entfernung von der Eintragsquelle kann das Beprobungsraster ausgedünnt und es können Mischproben genommen werden.

Stoffstrukturen (Kontaminationsfaktoren und Cluster) in der Grundwasserbelastung

Auf Grundlage der Rankingergebnisse wurden in der statistischen Strukturanalyse drei Merkmalsgruppen untersucht: 16 summarische Parameter, zehn Einzelstoffe aus verschiedenen Stoffgruppen und zehn Einzelstoffe aus der Stoffgruppe der LHKW (vgl. Kapitel 5).

Die Ergebnisse zeigen, dass eine Hauptkomponentenanalyse **verschiedene Prozesse und Eintragsmuster** in einer regionalen Grundwasserkontamination sichtbar machen kann. Einzelne Eintragsquellen sind jedoch aufgrund der räumlichen Nähe und Verflechtung von Altablagerungen und Altstandorten nur schwer abzugrenzen und eindeutig zu identifizieren.

Im Gegensatz zu anderen Untersuchungen ist die Zusammensetzung der Hauptkomponenten nicht nur auf produktionsbedingte Zusammenhänge zwischen den Stoffen (Co-Kontaminanten) zurückzuführen, sondern auch auf ihre Verknüpfung durch Abbauketten. Die vielfältige Vernetzung von Stoffen durch Produktion, Anwendungsmuster, Eintrag durch Deponierung, Ausbreitung im Grundwasser und Abbau kann eine räumliche und zeitliche Instabilität der Faktorenzusammensetzung verursachen. Dies wurde bei der Analyse der LHKW deutlich: Da auf einer regionalen Skala Abbauprozesse räumlich differenziert ablaufen, können einzelne Stoffe unter bestimmten Redoxbedingungen besonders gut abgebaut werden (z.B. Tetrachlorethen) oder angereichert werden (z.B. Vinylchlorid). Daher findet eine Faktorbildung nach Abbauketten innerhalb der Stoffgruppe der LHKW (im Herbst 1996) nur räumlich begrenzt, d.h. auf dem Chemiegelände, statt. Wird der Untersuchungsraum erweitert, erfolgt eine Trennung der LHKW nach dem Chlorierungsgrad (vgl. Kapitel 5.3). Ein solcher Wechsel von einer Differenzierung nach Abbauketten (auf dem Chemiegelände) zu einer Unterscheidung in Primär- und Sekundärkontaminanten (im gesamten Untersuchungsgebiet) kann als **Skalierungseffekt** bezeichnet werden, d.h. mit dem Wechsel des Untersuchungsraumes erfolgt ein Prozesswechsel. Das bedeutet, dass Verfahren der Korrelations- und Hauptkomponentenanalyse räumlich differenziert angewendet werden müssen. Dafür sind in Zukunft weitere Verfahren zu entwickeln.

Ähnlichkeiten und Redundanzen zwischen gemessenen Parametern

Die Korrelations- und Hauptkomponentenanalysen zeigen, welche Parameter redundante Informationen liefern und sich gegenseitig ersetzen können. Daraus ergeben sich Schlussfolgerungen für zukünftige Messprogramme und Auswertungen.

Die Ergebnisse zeigen, dass es relativ schwache Verknüpfungen zwischen den Stoffgruppen einerseits und den Vor-Ort- und Summenparametern andererseits gibt. Insgesamt korreliert der Parameter AOX mit den Summenangaben für LHKW, der Leuchtbakterientest und der Phenolindex hingegen stärker mit den Stoffgruppen BTEX und CB. Allerdings sind die Korrelationen zu schwach, um die Belastungen durch BTEX-Aromaten, Chlorbenzene und LHKW eindeutig durch diese Summenparameter zu identifizieren. Daher kann auf eine Messung der organischen Einzelstoffe nicht verzichtet werden. Die Faktorbildung und gute Korrelation zwischen CSB, DOC und TOC unterstützt hingegen die Forderung, den CSB durch den messtechnisch weniger aufwändigen und umweltschonenderen DOC zu ersetzen. Am besten sind Leitfähigkeit und Salinität durcheinander zu ersetzen.

Die Ergebnisse der summarischen Betrachtung in Kapitel 5.1 und der Einzelstoffbetrachtung in Kapitel 5.2 zeigen, dass die mit dem Ranking ausgewählten Stoffgruppen und Einzelstoffe zwar alle regional relevant und verbreitet sind, jedoch – mit Ausnahme der Chlorbenzene und Benzen - auf unterschiedliche räumliche Eintrags- und Ausbreitungsmuster verweisen. Daher müssen weiterhin alle Stoffgruppen, zumindest LHKW, Chlorbenzene und HCH, überwacht werden.

Die durch das Rankingverfahren zehn ausgewählten Einzelstoffe sind gute Vertreter für die zugehörigen Stoffgruppen. Sie sollten daher bevorzugt gemessen und ausgewertet werden. Für die Stoffgruppe der LHKW gilt dies allerdings nur eingeschränkt, da hier die Ergebnisse aus der summarischen Betrachtung in Kapitel 5.1 und der Einzelstoffbetrachtung in Kapitel 5.2 stärker differieren als bei den Stoffgruppen der Chlorbenzene und HCH-Isomere. Die Analyse der Stoffgruppe der LHKW in Kapitel 5.3 zeigt, dass neben den vier ausgewählten LHKW (PCE/TCE sowie DCM/TCM), Tetrachlormethan und Vinylchlorid nicht miteinander korreliert sind und stets in getrennten Faktoren auftreten. Sie liefern daher unterschiedliche Informationen über den Eintrag und die Ausbreitung von Stoffen und sollten

auch aufgrund ihrer kanzerogenen Wirkung in Zukunft detaillierter betrachtet werden. Um die Abbaukette vom PCE bis hin zu VC besser verfolgen zu können, sollte man 1,2-Dichlorethen nicht vernachlässigen. Dabei ist dem cis-Isomer der Vorzug zu geben, da es im Vergleich zum trans-Isomer bevorzugt gebildet wird und beide Isomere gut korrelieren. Vernachlässigt werden kann eher 1,1,2,2-Tetrachlorethan, da es – wie auch PCE - eine recht gute Korrelation und Faktorbildung mit TCE zeigt.

Die Analyse der LHKW ergab weiterhin, dass zwischen den Beprobungskampagnen vom Herbst 1996 und Sommer 1997 große Unterschiede, insbesondere für Vinylchlorid, auftraten. Die Ursachen dafür konnten jedoch nicht geklärt werden. Um die zeitliche Dynamik der Schadstoffbelastung und -zusammensetzung besser einschätzen und bewerten zu können, sind weitere Vergleichsjahre zu betrachten, und es ist eine Beprobung einzelner Messstellen in kürzeren Zeitintervallen notwendig. Dabei sollte auf die Erfassung der Redoxverhältnisse Wert gelegt werden. Auch aufgrund der hohen toxikologischen Bedeutung von Vinylchlorid sollte in Zukunft auf diese Substanz besonders geachtet werden und ein empfindlicheres Messverfahren eingesetzt werden.

Ausblick

Durch die in dieser Arbeit entwickelte Strategie wurde eine Vorgehensweise bereitgestellt, mit der regionale Grundwasserkontaminationen, die in den neuen Bundesländern häufig auftreten, strukturiert und analysiert werden können. Die methodische Vorgehensweise ist auf ähnliche Schadensfälle übertragbar. Darüber hinaus liefern die Ergebnisse dieser Arbeit eine Grundlage für weitere regionale Betrachtungen der Grundwasserkontaminationen in Bitterfeld-Wolfen. Beispielhaft sind folgende Aspekte zu nennen:

Bei regionalen Grundwasserkontaminationen sind für eine **Gefährdungs- oder Risikoabschätzung** eine räumliche Differenzierung der Nutzungs- und Expositionssituation und eine toxikologische Bewertung der Vulnerabilität verschiedener Nutzungen notwendig. In der Region Bitterfeld-Wolfen gibt es nicht nur Trinkwassergewinnungsanlagen, die durch den Schadstoffeintrag gefährdet sein könnten. Auf lange Sicht werden die Hauptpunkte bei der Gesamtbewertung der Grundwasserkontamination die Gefährdung aquatischer Lebensgemeinschaften sowie die Risiken durch dezentrale Brauchwassernutzung sein. Für diese Nutzungen gibt es bislang jedoch keine Bewertungsmaßstäbe. Prinzipiell wäre es aber möglich, die Gesamtbewertungszahlen aus dem Kontaminationsprofil durch toxikologische Bewertungszahlen zu ergänzen, um für die verschiedenen Nutzungen (Trinkwassergewinnung, Brauchwassergewinnung, Landschaftsschutzgebiete, Naherholungsgebiete) Leitparameter zu identifizieren. Diese müssten danach in ihrer räumlichen und zeitlichen Dynamik beschrieben werden, um die Gefährdung zu quantifizieren. Die Überlagerung von Gefährdungskarten und Vulnerabilitätskarten ergäbe schließlich regionale Risikokarten. Um die Zahl der Leitparameter weiter zu reduzieren und um ihre räumliche Verteilung darzustellen, wären - analog zur Vorgehensweise in dieser Arbeit - Methoden der statistischen Strukturanalyse einzusetzen.

Schließlich sollten weiterführende Untersuchungen zur **Optimierung des Monitorings** nicht nur die Optimierung des Parameterkatalogs beinhalten, sondern auch die Optimierung der räumlichen Messstellendichte oder der zeitlichen Beprobungshäufigkeit. Um den Informationsgehalt eines Parameters, einer Messstelle und letztlich auch einer gesamten Beprobungskampagne beurteilen zu können, sind detaillierte Untersuchungen auf einer umfangreicheren Datengrundlage notwendig.

Zusammenfassung

Viele Altlasten in den neuen Bundesländern sind durch regionale Grundwasserkontaminationen gekennzeichnet, für deren Untersuchung und Sanierung standardisierte Methoden bislang fehlen. Schon beim Monitoring solcher Kontaminationen entstehen umfangreiche Datenbestände, deren Komplexität und Multidimensionalität eine Auswertung erheblich erschweren. Für das Verständnis der Kontamination und für Entscheidungen über das weitere Vorgehen bei einem Grundwassermonitoring ist es jedoch unumgänglich, aus solchen Datenbeständen möglichst viel Information zu extrahieren. In der vorliegenden Arbeit wird exemplarisch für die Grundwasserkontamination in der Industrie- und Bergbauregion Bitterfeld-Wolfen gezeigt, wie aus Grundwassermonitoringdaten neuartige und wichtige Informationen mit Hilfe einer dreistufigen Untersuchungsstrategie gewonnen werden können. Dafür standen Beispieldatenbestände aus verschiedenen Grundwassermonitoringprogrammen mit insgesamt über 900 Proben und etwa 120 Merkmalen aus den Jahren 1991 bis 1999 zur Verfügung.

In der ersten Stufe der Untersuchung wurden die verschiedenen Datenbestände konsolidiert, in einer Datenbank zusammengeführt und auf Qualität geprüft. Dies ergab geeignete Teildatensätze für die nachfolgenden statistischen Auswertungen. Analysiert werden konnten ein Durchschnittsdatensatz für die Jahre 1991 bis 1998 sowie zwei umfangreiche Datensätze aus Beprobungskampagnen im Herbst 1996 und im Sommer 1997.

Um die regionale Kontaminationsrelevanz der über 60 analysierten organischen Verbindungen abzuleiten, wurden stoffspezifische generalisierte Kontaminationskriterien (Emissions-Nachweishäufigkeit und mittlere Emissionskonzentration) ermittelt und mit Rankingverfahren (Kontaminationsprofilen, Hasse-Diagramm-Technik, Clusteranalysen) verarbeitet. Regional relevante Merkmale gingen in die dritte Stufe der Untersuchung, die statistische Strukturanalyse, ein. Korrelations-, Hauptkomponenten- und Clusteranalysen bringen den Daten zugrunde liegende Kontaminationsfaktoren und räumliche Verteilungsmuster hervor.

Mit Hilfe dieser Untersuchungsstrategie ist es gelungen, folgende Strukturen in der regionalen Grundwasserkontamination in Bitterfeld-Wolfen zu identifizieren:

Leichtflüchtige halogenierte Kohlenwasserstoffe (LHKW), Chlorbenzene, BTEX-Aromaten sowie HCH- und DDT-, DDD-, DDE-Isomere sind in der Grundwasserkontamination der Region Bitterfeld-Wolfen regional verbreitet und relevant, wobei die LHKW die wichtigste Stoffgruppe darstellen. Vertreter anderer Stoffgruppen (Chlorphenole, Chloraniline, Nitrophenole, Nitrochlorphenole, Nitrochlorbenzene und polyzyklische aromatische Kohlenwasserstoffe) treten hingegen vergleichsweise lokal vor allem auf dem Gebiet der Chemie AG Bitterfeld-Wolfen (CAG) auf.

Durch den Einsatz von Clusteranalysen und der Hasse-Diagramm-Technik ist es möglich, Einzelstoffe anhand der Kontaminationskriterien zu klassifizieren und dadurch grobe Rückschlüsse auf ihr Transfer- und Persistenzpotenzial sowie ihre Eintragsmuster zu ziehen. Damit können angepasste Beprobungsstrategien entwickelt werden. So wurden folgende Stoffe als regionale Leitparameter für die Grundwasserkontamination in Bitterfeld-Wolfen identifiziert: Tetra-, Tri- und Dichlormethan, Tetra-, Tri- und cis 1,2-Dichlorethen, 1,1,2,2-Tetrachlorethan, Vinylchlorid, Monochlorbenzen, 1,4- und 1,2-Dichlorbenzen, Benzen, alpha-, gamma-

und delta-HCH. Sie sollten kontinuierlich und flächendeckend erhoben und ausgewertet werden.

Auf Grundlage der Rankingergebnisse wurden für die statistische Strukturanalyse drei Merkmalsgruppen ausgewählt: 16 summarische Parameter (Vor-Ort-Parameter, Summenparameter und Summenangaben für die Stoffgruppen LHKW, BTEX, Chlorbenzene und HCH), zehn Einzelstoffe aus den soeben genannten Stoffgruppen und zehn Einzelstoffe aus der Stoffgruppe der LHKW. Die Ergebnisse zeigen, dass Hauptkomponentenanalysen verschiedene Prozesse in einer regionalen Grundwasserkontamination sichtbar machen können.

Die summarischen Parameter lassen sich auf fünf Kontaminationsfaktoren reduzieren: Belastungen durch organisch gebundenen Kohlenstoff, durch Salzfrachten, durch synthetische, z.T. chlorierte Kohlenwasserstoffe sowie durch chlororganische Pestizide. Ein weiterer Faktor charakterisiert das Redoxvermögen. Als markante Eintragsquelle für organisch gebundenen Kohlenstoff und extreme Redoxbedingungen tritt in den Clusteranalysen die Grube Antonie hervor.

Mit den zehn ausgewählten Einzelstoffen aus verschiedenen Stoffgruppen entstehen drei Faktoren: Der Schwerpunkt des ersten Kontaminationsfaktors (mit Monochlorbenzenen, zwei Dichlorbenzenen und Benzen) liegt im CAG-Werksteil Wolfen und ist mit der Farben- und Pestizidproduktion verbunden. Die vier ausgewählten LHKW (Tetra-/Trichlorethen und Tri-/Dichlormethan) werden im zweiten Kontaminationsfaktor zusammengefasst, der seinen Schwerpunkt im CAG-Werksteil Bitterfeld hat. Der dritte Kontaminationsfaktor korreliert mit alpha- und delta-HCH und tritt schwerpunktmäßig an den Gruben Antonie und Marie sowie am Schachtgraben auf. Besonders hoch belastet mit allen drei Faktoren ist der Werksteil Bitterfeld-Süd.

Die zehn LHKW werden in der Hauptkomponentenanalyse in zwei Faktoren getrennt. Im Herbst 1996 verweist der erste Faktor auf primäre Grundwasserbelastungen durch drei- und vierfach chlorierte LHKW, die durch Produktions- und Sickerwasseremissionen in das Grundwasser gelangen. Der zweite Faktor korreliert mit den zweifach chlorierten LHKW und Vinylchlorid, die vor allem durch den Abbau der Primärkontaminanten entstehen und als sekundäre Grundwasserbelastungen einzustufen sind. Aus der räumlichen Verteilung der beiden Faktoren erkennt man großräumige An- und Abreicherungsgebiete der Kontaminanten, die durch die Redoxverhältnisse erklärt werden können. Mit Teildatensätzen, die räumlich auf das CAG-Werksgelände begrenzt sind, sowie im Sommer 1997 korrelieren die Hauptkomponenten hingegen mit Stoffen einer Abbaukette, z.B. mit Tetra-, Tri-, cis 1,2-Dichlorethen und Vinylchlorid.

Die Analyse verdeutlicht, dass die vielfältige Vernetzung der Stoffe durch Produktion, Anwendungsmuster, Einträge aus Deponien, Ausbreitung im Grundwasser und räumlich differenzierte Abbauprozesse eine Instabilität der Faktorenzusammensetzung verursachen kann. Einzelne Eintragsquellen sind aufgrund der räumlichen Nähe und Verflechtung von Altablagern und Altstandorten nur selten abzugrenzen oder eindeutig zu identifizieren. Die Analyse liefert jedoch wichtige Hinweise für die Optimierung des Parameterkataloges der Monitoringprogramme.

Die gute Korrelation zwischen CSB, DOC und TOC unterstützt die Forderung, den CSB durch den messtechnisch weniger aufwendigen DOC zu ersetzen. Redundante Informationen liefern Leitfähigkeit und Salinität, d.h. sie sind problemlos durcheinander zu ersetzen. Der Summenparameter AOX korreliert mit den Summenangaben für LHKW, während der Leuchtbakterientest und der Phenolindex mit den Stoffgruppen BTEX und Chlorbenzene korrelieren. Allerdings sind die Korrelationen zu schwach, um die stofflichen Belastungen

eindeutig durch Summenparameter zu identifizieren. Daher kann auf eine Messung der organischen Einzelstoffe nicht verzichtet werden. Da sowohl in der summarischen Betrachtung als auch in der Einzelstoffanalyse kaum stoffgruppenübergreifende Faktoren gebildet werden, sind weiterhin alle regional relevanten Stoffgruppen, insbesondere die LHKW, Chlorbenzene und HCH-Isomere, zu überwachen. Die ausgewählten Leitparameter (s.o.) sind hierbei gute Vertreter für die Stoffgruppen.

Die dreistufige Untersuchungsstrategie liefert demnach Ansatzpunkte für die Optimierung des Parameterkataloges der Monitoringprogramme in der Region Bitterfeld-Wolfen und trägt zum besseren Verständnis über die Zusammensetzung der Kontamination bei. Darüber hinaus wurden Vorschläge für ein Qualitätsmanagement bei der zukünftigen Datenaufnahme abgeleitet.

Die erzielten Ergebnisse können im Rahmen einer regionalen Gefährdungs- und Risikoabschätzung weiterverwendet werden. Um die zeitliche Dynamik der Schadstoffbelastung besser einschätzen zu können, sind allerdings weitere Versuchsjahre auszuwerten. Die methodische Vorgehensweise ist auf andere regionale Grundwasserkontaminationen übertragbar.

Literaturverzeichnis

- Albrecht, R.; Kretschmer, K. (1993): Chronik der Industriegeschichte der Bitterfelder Region. - Beiträge zur Bitterfelder Industriegeschichte 1: 4-24.
- Altermann, M.; Ruske, R. (1997): Die Region Leipzig-Halle-Bitterfeld: Geologie und Böden. In: Feldmann, R.; Henle, K.; Auge, H.; Flachowsky, J.; Klotz, S.; Krönert, R. (Hrsg.): Regeneration und nachhaltige Landnutzung - Konzepte für belastete Regionen. Springer, Berlin, Heidelberg, S. 8-12.
- Aruga, R. (1997): Treatment of responses below the detection limit: some current techniques compared by factor analysis on environmental data. - *Analytica Chimica Acta* **354**: 255-262.
- Aruga, R.; Negro, G.; Ostacoli, G. (1993): Multivariate data analysis applied to the investigation of river pollution. - *Fresenius Journal of Analytical Chemistry* **346**: 968-975.
- Baltzer, U.; Caspary, W. (1992): Datenqualität in Geoinformationssystemen. In: Günther, O.; Schulz, K.-P.; Seggelke, J. (Hrsg.): Umweltsanierungen geographischer Informationssysteme. Wichmann, Karlsruhe, S. 294-300.
- Balzereit, F.; Wegener, I. (1995): Ermittlung der Stoffgefährlichkeit. In: Lühr, H.-P. (Hrsg.): Kongreß Grundwassersanierung 1995. IWS Schriftenreihe 23, ESV, Berlin, S. 63-72.
- Barkowski, D.; Günther, P.; Hinz, E.; Röchert, R. (1993): Altlasten – Handbuch zur Ermittlung und Abwehr von Gefahren durch kontaminierte Standorte. 4. Auflage, Verlag C.F. Müller, Karlsruhe, 450 S..
- Barkowski, D.; Watzke, R. (1992): Sanierungsuntersuchung Grube Johannes in Wolfen/ Bitterfeld. - *WLB Wasser, Luft und Boden* **7-8**: 81-84.
- Bartelme, N. (1995): Geoinformatik. Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, 414 S..
- Berlekamp, J.; Herpin, U.; Matthies, M.; Lieth, H.; Markert, B.; Zinner, H.-J.; Siewers, U. (1995): Räumliche Klassifikation von Schwermetallgehalten in Moosen und Bachsedimenten der Bundesrepublik Deutschland. In: Kremers, H.; Pillmann, W. (Hrsg.): Raum und Zeit in Umweltinformationssystemen. Metropolis, Marburg, S. 242-250.
- Bitterfelder Bergleute e.V. (Hrsg., 1998): Chronik des Braunkohlenbergbaus im Revier Bitterfeld, Technik und Kulturgeschichte in zwei Jahrhunderten. Bitterfeld, 414 S..
- Bolviken, B.; Nilsen, R.; Ukkelberg, A. (1997): A new method for spatially moving correlation analysis in geomedicine. - *Environmental Geochemistry and Health* **19**: 143-153.
- Braun, M.; Krapp, L. (1992): Chemiealtlasten Bitterfeld - erste Sanierungskonzepte. - *WLB Wasser, Luft und Boden* **5**: 90-93.
- Brüggemann, R.; Bücherl, C.; Pudenz, S.; Steinberg, C.E.W. (1999): Application of the Concept of Partial Order on Comparative Evaluation of Environmental Chemicals. - *Acta hydrochimica et hydrobiologica* **27**: 170-178.
- Brüggemann, R.; Halfon, E. (1995): Theoretical Base of the Programm "Hasse". GSF-Bericht 20/95. Neubiberg, 66 S..

- Brüggemann, R.; Halfon, E. (2000): Introduction to the General Principles of the Partial Order Ranking Theory. In: Sorensen, P.B.; Carlson, L.; Mogensen, B.B.; Brüggemann, R.; Luther, B.; Pudenz, S.; Simon, U.; Halfon, E.; Bittner, T.; Voigt, K.; Welzl, G.; Rediske, F. (Hrsg.): Order Theoretical Tools in Environmental Sciences. Proceedings of the Second Workshop. National Environmental Research Institute, Roskilde, Denmark, S. 7-43.
- Brüggemann, R.; Steinberg, C. (1998): Partielle Ordnung. Ein Hilfsmittel zur ökotoxikologischen Beurteilung von Chemikalien. - UWSF 10(6): 376-378.
- Brüggemann, R.; Steinberg, C. (1999): Ein Ansatz zur Methodik der vergleichenden Bewertung von Bodenbelastungen. - UWSF 11(3): 135-143.
- Burchardt, I.; Strobel, G. (1992): Ingenieurgeologisch-geotechnische Bewertung des Stadtgebietes Bitterfeld als eine Grundlage für die regionale Raumplanung und städtebauliche Entwicklung. In: Hille, J.; Ruske, R.; Scholz, J.; Walkow, F. (Hrsg.): Bitterfeld: Modellhafte ökologische Bestandsaufnahme einer kontaminierten Industrieregion - Beiträge der 1. Bitterfelder Umweltkonferenz. ESV, Berlin, S. 113-119.
- Burger, H.; Schafmeister, M.-Th. (2000): Gerichtete Interpolation zur verbesserten Darstellung strömungsabhängiger Grundwasserbeschaffenheitsmerkmale. - Grundwasser 5(5): 79-85.
- Butler, E.C.; Hayes, K.F. (1999): Kinetics of the Transformation of Trichloroethylene and Tetrachloroethylene by Iron Sulfide. - Environmental Science and Technology 33(12): 2021-2027.
- Caspary, W. (1992): Genauigkeit als Qualitätsmerkmal digitaler Datenbestände. In: Grünreich, D.; Buziek, G. (Hrsg.): Gewinnung von Basisdaten für Geo-Informationssysteme. Wittwer, Stuttgart, S. 157-166.
- Chen, M.-S.; Han, J.; Yu, P.S. (1996): Data Mining: An Overview from a Database Perspective. - IEEE Transactions on Knowledge and Data Engineering 8: 866-883.
- Clarke, J.U. (1998): Evaluation of Censored Data Methods to Allow Statistical Comparisons among Very Small Samples with Below Detection Limit Observations. - Environmental Science and Technology 32: 177-183.
- Dermietzel, J.; Christoph, G. (2001): The impact of a lignite seam on contaminated groundwater in the aquifer system of the Bitterfeld region. - Water, Air and Soil Pollution 125: 157-170.
- Devlin, J.F.; Müller, D. (1999): Field and Laboratory Studies of Carbon Tetrachloride Transformation in a Sandy Aquifer under Sulfate Reducing Conditions. - Environmental Science and Technology 33(7): 1021-1027.
- Dieter, H.H.; Kaiser, U.; Kerndorff, H. (1990): Proposal on a standardized toxicological evaluation of chemicals from contaminated sites. - Chemosphere 20: 75-90.
- Diekkrüger, B.; Flake, M.; Kuhn, M.; Nordmeyer, H.; Rühling, I.; Söndgerath, D. (1996): Räumliche Variabilität. In: Richter, O.; Söndgerath, D.; Diekkrüger, B. (Hrsg.): Sonderforschungsbereich 179 "Wasser- und Stoffhaushalt in Agrarökosystemen". Landschaftsökologie und Umweltforschung 24, Braunschweig, S. 1232-1306.
- Dobel, S.; Mogensen, B.B.; Sorensen, P.B. (2000): Validation of a ranking model in relation to Danish monitoring data. In: Sorensen, P.B.; Carlson, L.; Mogensen, B.B.; Brüggemann, R.; Luther, B.; Pudenz, S.; Simon, U.; Halfon, E.; Bittner, T.; Voigt, K.; Welzl, G.; Rediske, F.

- (Hrsg.): Order Theoretical Tools in Environmental Sciences. Proceedings of the Second Workshop. National Environmental Research Institute, Roskilde, Denmark, S. 145-161.
- Dühr, S. (1999): Die Umstrukturierung von Altindustriestandorten in der Region Bitterfeld/Wolfen, Sachsen-Anhalt - Chance für eine nachhaltige Entwicklung der Region? In: Banzhaf, E. (Hrsg.): Bitterfeld/Wolfen als Beispiel für den Wandel einer Industrieregion in den neuen Bundesländern. UFZ-Bericht 6/1999, Leipzig, S. 59-155.
- Ester, M.; Kriegel, H.-P.; Sander, J.; Xu, X. (1996): A Density-Based Algorithm for Discovering Clusters in Large Spatial Databases with Noise. In: Proceedings of the 2nd Int. Conf. on Knowledge Discovery and Data Mining, AAAI Press, S. 1-6.
- Finger, E. (1996): Wie das Magnetband nach Wolfen kam. - Beiträge zur Bitterfeld-Wolfener Industriegeschichte 5: 96-107.
- Flachowski, J.; Rudolph, M. (1996): Versuche zur Anwendung informationstheoretischer Methoden bei der Beschreibung von Schadstoffverteilungen im Einzugsbereich von Deponien. In: Jessberger, H.L. (Hrsg.): Umweltinformatik im Altlastenbereich. Balkema, Rotterdam, S. 19-36.
- Fowkles, E.B.; Gnanadesikan, R.; Kettenring, J.R. (1988): Variable selection in clustering. - Journal of Classification 5: 205-228.
- Fuchs, M. (1999): Einsatz multivariater Analysemethoden zur Klärung der Herkunft von Schadstoffen in der Bitterfelder Mulde. - Mathematische Geologie 3: 25-32.
- Gibbons, R.D. (1992): An Overview of Statistical Methods for Groundwater Detection Monitoring at Waste Disposal Sites. In: Lesage, S.; Jackson, R.E. (Hrsg.): Groundwater Contamination and Analysis at Hazardous Waste Sites. Marcel Dekker, New York, S. 199-243.
- Glod, G.; Angst, W.; Holliger, C.; Schwarzenbach, R.P. (1997a): Corrinoid-Mediated Reduction of Tetrachloroethene, Trichloroethene, and Trichlorofluoroethene in Homogeneous Aqueous Solution: Reaction Kinetics and Reactions Mechanisms. - Environmental Science and Technology 31(1): 253-260.
- Glod, G.; Brodmann, U.; Angst, W.; Holliger, C.; Schwarzenbach, R.P. (1997b): Cobalamin-Mediated Reduction of cis- and trans-Dichloroethene, 1,1-Dichloroethene, and Vinyl Chloride in Homogeneous Aqueous Solution: Reaction Kinetics and Mechanistic Considerations. - Environmental Science and Technology 31(11): 3154-3160.
- Götz, R.; Steiner, B.; Friesel, P.; Roch, K.; Walkow, F.; Maaß, V.; Reincke, H.; Stachel, B. (1998): Dioxin (PCDD/F) in the River Elbe - Investigations of their origin by multivariate statistical methods. - Chemosphere 37: 1987-2002.
- Großmann, J.; Peter, H.; Müller, H.-G. (2000): Systematische Gefahrenbeurteilung im Rahmen von Altlasten-Großprojekten. - Altlastenspektrum 10: 160-166.
- Hartmann, E.; Guhra, C. (1992): Aufbau eines Grundwasserüberwachungsnetzes im Landkreis Bitterfeld - Grundwassermonitoring. In: Hille, J.; Ruske, R.; Scholz, J.; Walkow, F. (Hrsg.): Bitterfeld: Modellhafte ökologische Bestandsaufnahme einer kontaminierten Industrieregion - Beiträge der 1. Bitterfelder Umweltkonferenz. ESV, Berlin, S. 103-111.
- Hartung, J.; Elpelt, B. (1999): Multivariate Statistik: Lehr- und Handbuch der angewandten Statistik. R. Oldenbourg Verlag, München, Wien, 815 S..
- Hartung, J.; Elpelt, B.; Klöser, K.-H. (1999): Statistik: Lehr- und Handbuch der angewandten Statistik. R. Oldenbourg Verlag, München, Wien, 975 S..

- Haston, Z.C.; McCharty, P.L. (1999): Chlorinated Ethene Half-Velocity Coefficients (Ks) for Reductive Dehalogenation. - *Environmental Science and Technology* **33**(2): 223-226.
- Heinisch, E. (1992): Umweltbelastung in Ostdeutschland, Fallbeispiele: Chlorierte Kohlenwasserstoffe. Wissenschaftliche Buchgesellschaft, Darmstadt, 297 S..
- Held, Th. (1998): Mikrobiologische In Situ-Verfahren. In: Toussaint, B.; Rehner, G.; Held, Th. (Hrsg.): Sanierung von Grundwasserschäden. Expert-Verlag, Renningen-Malmsheim, S. 81-100.
- Helsel, D.R. (1990): Less than obvious: Statistical treatment of data below the detection limit. - *Environmental Science and Technology* **24**: 1756-1774.
- Henrion, R.; Henrion, G. (1995): Multivariate Datenanalyse. Springer, Berlin, 259 S..
- Henschler, D. (1994): Toxikologie chlororganischer Verbindungen. VCH, Weinheim, 60 S..
- Henseling, K.-O. (1992): Chemieindustrie in den neuen Bundesländern: Chancen für einen ökologischen Neubeginn. In: Altner, G. (Hrsg.): Beck'sche Reihe - Jahrbuch Ökologie 1993. Beck, München, S. 63-74.
- Hentzsch, E. (1996): Die Geschichte des Kraftwerkes Süd Bitterfeld. - *Beiträge zur Bitterfeld-Wolfener Industriegeschichte* **4**: 5-63.
- Herberer, T.; Dünnbier, U. (1999): DDT Metabolite Bis(Chlorophenyl)acetic Acid: The Neglected Environmental Contaminant. - *Environmental Science and Technology* **33**(14): 2346-2351.
- Hölting, B. (1996): Hydrogeologie: Einführung in die Allgemeine und Angewandte Hydrogeologie. Enke, Stuttgart, 441 S..
- Ihl, T. (1999): Veränderung der Flächennutzung im Stadt- und Industrieraum Bitterfeld/Wolfen mittels Klassifikation von multisensoralen und multitemporalen Satellitenbildern. In: Banzhaf, E. (Hrsg.): Bitterfeld/Wolfen als Beispiel für den Wandel einer Industrieregion in den neuen Bundesländern. UFZ-Bericht 6/1999, Leipzig, S. 1-55.
- Isaaks, E.H.; Srivastava, R.M. (1989): Applied Geostatistics. Oxford University Press, New York, Oxford, 561 S..
- Jordan, H.; Weder, H.-J. (Hrsg., 1995): Hydrogeologie: Grundlagen und Methoden; Regionale Hydrogeologie: Mecklenburg-Vorpommern, Brandenburg und Berlin, Sachsen-Anhalt, Sachsen, Thüringen. 2. Auflage, Enke Verlag, Stuttgart, S. 388-447.
- Juntto, S.; Paatero, P. (1994): Analysis of daily precipitation data by positive matrix factorization. - *Environmetrics* **5**: 127-144.
- Kähler, W.-M. (1998): SPSS für Windows: Eine Einführung in die Datenanalyse für die aktuelle Version (4. Auflage Version 8). Vieweg, Braunschweig, Wiesbaden, 546 S..
- Kalbitz, K.; Knappe, S. (1997): Schadstoffmobilisierung im Boden in Abhängigkeit von der gelösten organischen Substanz. In: Feldmann, R.; Henle, K.; Auge, H.; Flachowsky, J.; Klotz, S.; Krönert, R. (Hrsg.): Regeneration und nachhaltige Landnutzung - Konzepte für belastete Regionen. Springer, Berlin, Heidelberg, S. 74-78.
- Kaufman, L.; Rousseeuw, P.J. (1990): Finding groups in data: An introduction to cluster analysis. John Wiley & Sons, New York, 342 S..

- Kazumi, J.; Caldwell, M.E.; Suflita, J.M.; Lovley, D.R.; Young, L.Y. (1997): Anaerobic Degradation of Benzene in Diverse Anoxic Environments. - *Environmental Science and Technology* **31**(3): 813-818.
- Kerndorff, H. (1995): Groundwater Contamination Assessment by Problem-Specific Selection of Analytical Parameters. - *Intern. J. Environ. Anal. Chem.* **60**: 239-256.
- Kerndorff, H.; Schleyer, R.; Dieter, H.H. (1993): Bewertung der Grundwassergefährdung von Altablagerungen. Standardisierte Methoden und Maßstäbe. WaBoLu-Hefte 1/1993, Berlin, 145 S..
- Kerndorff, H.; Schleyer, R.; Milde, G.; Plumb Jr, R.H. (1992): Geochemistry of Groundwater Pollutants at German Waste Disposal Sites. In: Lesage, S.; Jackson, R.E. (Hrsg.): Groundwater Contamination and Analysis at Harzadous Waste Sites. Marcel Dekker, New York, S. 245-271.
- Kluge, A.; Murglat, P.; Beuge, P.; Greif, A.; Hoppe, T.; Klemm, W; Starke, R. (1996): Aufbau eines Gewässerinformationssystems und Anwendung der Faktorenanalyse auf die Schwermetallführung der Mulde. In: Hänse, C. (Hrsg.): Gewässer und ihre Einzugsgebiete – Ökologische Ansätze zur Sanierung. Abhandlungen Sächs. Akad. Wiss., Math.-Nat. Klasse 58, Heft 4, S. 51-65.
- Knoth, W.; Schwab, M. (1972): Abgrenzung und Bau der Halle-Wittenberger Scholle. – *Geologie* **21**(10): 1153-1172.
- Knoth, W. (1995): Sachsen-Anhalt. In: Benda, L. (Hrsg.): Das Quartär Deutschlands. Gebrüder Brontraeger, Berlin, Stuttgart, S. 148-170.
- Knoth, W.; Kriebel, U.; Radzinski, K.-H.; Thomae, M. (1998): Die geologischen Verhältnisse von Halle und Umgebung. - *Hallesches Jahrbuch Geowissenschaften, Reihe B, Beiheft 4*: 7-34.
- Köhler, H.J.; Krapp, L.; Braun, M. (1992): Konzepte und Handlungsprioritäten zur Sicherung und Sanierung von Altablagerungen, Deponien und Grundwasser im Großraum Bitterfeld/Wolfen. In: Hille, J.; Ruske, R.; Scholz, J.; Walkow, F. (Hrsg.): Bitterfeld: Modellhafte ökologische Bestandsaufnahme einer kontaminierten Industrieregion – Beiträge der 1. Bitterfelder Umweltkonferenz. ESV, Berlin, S. 203-210.
- Kompa, R.; Maczey, P. (1992): Ökologisches Sanierungs- und Entwicklungskonzept Leipzig/Bitterfeld/Halle/Merseburg. - *WLB Wasser, Luft und Boden* **3**: 70-77
- Koperski, K.; Adhikary, J.; Han, J. (1996): Spatial Data Mining: Progress and Challenges. - *ME* **1996**(2): 1-24.
- Krapp, L. et al. (1993): Umweltgeologie beim Pilotprojekt Bitterfeld - Wolfen. - *Die Geowissenschaften* **11**: 1-9.
- Krapp, L.; Ruske, R. (1992): Geologische Verhältnisse von Bitterfeld und ihre Relevanz zu Kontaminationen des Grundwassers und Bodens. In: Hille, J.; Ruske, R.; Scholz, J.; Walkow, F. (Hrsg.): Bitterfeld: Modellhafte ökologische Bestandsaufnahme einer kontaminierten Industrieregion - Beiträge der 1. Bitterfelder Umweltkonferenz. ESV, Berlin, S. 85-92.
- Kretschmer, K. (1993): 1893 - ein historisches Datum für Bitterfeld "Die Chemie kommt zur Kohle". - *Beiträge zur Bitterfelder Industriegeschichte* **1**: 37-41.

- Krönert, R. (1997): Landschaftsbezogene Leitbilder. In: Ahrens, H.; Meinicke, K.-P.; Wycisk, P. (Hrsg.): Entwicklung von Landnutzung und Umweltqualität in Mitteldeutschland, Sammelband zur Tagung am 21./22.10.1996 in Halle. UZU, Halle, S. 224-233.
- Lampe, V.; Neef, U.; Villwock, G. (1995): Untersuchungen zum Gefährdungspotential einer Schadstoffablagerung der chemischen Industrie in der Region Bitterfeld. – Altlastenspektrum 5: 138-147.
- LAWA Länderarbeitsgemeinschaft Wasser (1993): Empfehlungen für die Erkundung, Bewertung und Behandlung von Grundwasserschäden – mit Verweisen auf die bestehenden Länderregelungen zur Behandlung von Grundwasserschäden.
- Liehm, G. (1993): Der Braunkohlenbergbau im Bitterfelder Revier. - Beiträge zur Bitterfelder Industriegeschichte 1: 25-33.
- Liehm, G. (1996): Braunkohlenrevier Bitterfeld - eine Standortbeschreibung. - Beiträge zur Bitterfeld-Wolfener Industriegeschichte 6: 5-51.
- Liehm, G. (1998): Entstehung und Entwicklung des Bitterfelder Reviers und seine wirtschaftliche Bedeutung. In: Bitterfelder Bergleute e.V. (Hrsg.): Chronik des Braunkohlenbergbaus im Revier Bitterfeld, Technik und Kulturgeschichte in zwei Jahrhunderten. Bitterfeld, S. 7-38.
- Lindemann, M. (2000): Das ökologische Großprojekt Bitterfeld-Wolfen - eine Bilanz aus fachlicher Sicht. - Altlastenspektrum 10: 205-214.
- Luther, B.; Brüggemann, R.; Pudenz, S. (2000): Cluster analysis and its use in Hasse Diagram Technique. In: Sorensen, P.B.; Carlson, L.; Mogensen, B.B.; Brüggemann, R.; Luther, B.; Pudenz, S.; Simon, U.; Halfon, E.; Bittner, T.; Voigt, K.; Welzl, G.; Rediske, F. (Hrsg.): Order Theoretical Tools in Environmental Sciences. Proceedings of the Second Workshop. National Environmental Research Institute, Roskilde, Denmark, S. 53-71.
- Martinetz, D. (1996): Vom Giftpfeil zum Chemiewaffenverbot: zur Geschichte der chemischen Kampfmittel. 1. Auflage, Deutsch-Verlag, Thun, 266 S..
- Meinicke, K.-P.; Ebersbach, W. (1996): Bergbau und Umweltgeschichte in Mitteldeutschland - eine Einführung. In: Meinicke, K.-P.; Ebersbach, W. (Hrsg.): Bergbau und Umweltgeschichte in Mitteldeutschland, Sammelband zum Kolloquium an der MLU Halle-Wittenberg am 7.3.1996. UZU, Halle, S. 7-16.
- Meyer, B.C.; Krönert, R. (1998): Bewertung von Maßnahmennotwendigkeiten des Umwelt- und Ressourcenschutzes im Raum Leipzig-Halle-Bitterfeld. UFZ-Bericht 15/1998, Leipzig, 89 S..
- Middeldorp, P.J.M.; Jaspers, M.; Zehnder, A.J.B.; Schraa, G. (1996): Biotransformation of alpha-, beta-, gamma- and delta-Hexachlorocyclohexane under Methanogenic Conditions. - Environmental Science and Technology 30(7): 2345-2349.
- Mohs, B.; Martin, N. (1997): Bewertungs- und Handlungskonzept zur Beurteilung des grundwasserbezogenen Handlungsbedarfs. In: Lühr, H.-P. (Hrsg.): Kongreß für Grundwassersanierung 1997. ESV, Berlin, S. 105-116.
- Müller-Wegener, U.; Ehrig, C.; Ahlsdorf, B.; Schmidt, R. (1993): Pflanzenschutzmitteleinträge in das Grundwasser - Erfassung, Bewertung, Verhinderung. - Schriftenreihe Verein WaBoLu 90: 105-116.

- MUN Ministerium für Umwelt und Naturschutz des Landes Sachsen-Anhalt (1994): Bitterfeld - Information des Landes Sachsen-Anhalt zum Nationalen Sonderprogramm Bitterfeld - Halle - Merseburg. Magdeburg, 89 S..
- Nerger, M.; Roßkamp, E. (1991): Zum Vorkommen von Vinylchlorid in Grund- und Trinkwasser. In: Aurandt, K.; Lange-Asschenfeldt, H.; Hässelbarth, U.; Steuer, W. (Hrsg.): Die Trinkwasserverordnung – Einführung und Erläuterungen für Wasserversorgungsunternehmen und Überwachungsbehörden. ESV, Berlin, 3. Auflage, S. 298-301.
- Nerger, M. (1990): Leichtflüchtige Chlorkohlenwasserstoffe im Grundwasser pleistozäner Lockersedimente. Gustav-Fischer-Verlag, Stuttgart, 174 S..
- Neumeister, H.; Peklo, P.; Niehus, B. (1997): Immisionsbedingte Stoffeinträge. In: Feldmann, R.; Henle, K.; Auge, H.; Flachowsky, J.; Klotz, S.; Krönert, R. (Hrsg.): Regeneration und nachhaltige Landnutzung - Konzepte für belastete Regionen. Springer, Berlin, Heidelberg, S. 35-41.
- Olmez, I.; Beal, J.W.; Villaume, J.F. (1994): A New Approach to Understanding Multiple-Source Groundwater Contamination: Factor Analysis and Chemical Mass Balances. - *Water Research* **28**: 1095-1101.
- Paatero, P.; Tapper, U. (1994): Positive Matrix Factorization: a non-negative factor model with optimal utilization of error estimates of data values. - *Environmetrics* **5**: 111-126.
- Papatheodorou, G.; Lyberis, E.; Ferentinos, G. (1999): Use of Factor Analysis to Study the Distribution of Metalliferous Bauxitic Tailings in the Seabed of the Gulf of Corinth, Greece. - *Natural Resources Research* **8**: 277-286.
- Parlar, H.; Angerhöfer, D. (1995): Chemische Ökotoxikologie. Springer, Berlin, 364 S..
- Paterson, K.G.; Sagady, J.L.; Hooper, D.L.; Bertman, S.B.; Carroll, M.A.; Shepson, P.B. (1999): Analysis of Air Quality Data Using Positive Matrix Factorization. - *Environmental Science and Technology* **33**: 635-641.
- Peter, H.; Großmann, J.; Schulz-Terfloth, G. (1995): Rahmensanierungskonzept des Großprojektes "Bitterfeld/Wolfen". In: Lühr, H.-P. (Hrsg.): Kongreß Grundwassersanierung 1995. IWS Schriftenreihe 23, ESV, Berlin, S. 123-138.
- Plumb Jr, R.H. (1987): A Comparison of Ground Water Monitoring Data from CERCLA and RCRA Sites. - *Groundwater Monitoring Review* **8**: 94-100.
- Plumb Jr, R.H. (1991): The Occurrence of Appendix IX Organic Constituents in Disposal Site Ground Water. - *Groundwater Monitoring Review* **11**: 157-164.
- Plumb Jr, R.H. (1992): The Importance of Volatile Organic Compounds as a Disposal Site Monitoring Parameter. In: Lesage, S.; Jackson, R.E. (Hrsg.): Groundwater Contamination and Analysis at Harzadous Waste Sites. Marcel Dekker, New York, S. 173-197.
- Plumpe, G. (1990): Die I.G.-Farbenindustrie-AG: Wirtschaft, Technik und Politik 1904-1945. Duncker und Humbolt, Berlin, 784 S..
- Popp, P.; Brüggemann, L.; Keil, P.; Thuß, U.; Weiß, H. (2000): Chlorobenzenes and Hexachlorocyclohexanes (HCHs) in the Atmosphere of Bitterfeld and Leipzig (Germany). - *Chemosphere* **41**: 849-855.

- Razack, M.; Dazy, J. (1990): Hydrochemical Characterization of Groundwater Mixing in Sedimentary and Metamorphic Reservoirs with combined use of Piper's Principle and Factor Analysis. - *Journal of Hydrology* **114**: 371-393.
- Rehner, G. (1998): Überblick über Sanierungsverfahren. In: Toussaint, B.; Rehner, G.; Held, Th. (Hrsg.): Sanierung von Grundwasserschäden. Expert-Verlag, Renningen-Malmsheim, S. 57-80.
- Ribeiro, L.; Macedo, M.E. (1995): Application of multivariate statistics, trend- and cluster analysis to groundwater quality in the Tejo and Sado aquifer. - *Groundwater Quality: Remediation and Protection* **225**: 39-47.
- Rippen, G. (1987-1998): Handbuch Umweltchemikalien: Stoffdaten, Prüfverfahren, Vorschriften. Loseblattsammlung, Ecomed-Verlag, Landsberg/Lech.
- Ritzi, R.W.; Wright, S.L.; Mann, B.; Chen, M. (1993): Analysis of Temporal Variability in Hydrogeochemical Data used for Multivariate Analysis. - *Ground Water* **31**: 221-229.
- Röder, R.; von der Trenck, K.T.; Markard, C.; Kühl, C.; Slama, H. (1999): Ableitungskriterien für Geringfügigkeitsschwellen zur Beurteilung von Grundwasserverunreinigungen. - *UWSF* **11(4)**: 212-218.
- Röhr, M. (1993): Statistische Strukturanalysen. Gustav Fischer Verlag, Stuttgart, New York, 252 S..
- Roth, L. (1982): Wassergefährdende Stoffe. Loseblattsammlung, Ecomed-Verlag, Landsberg/Lech.
- Rudolph, M. (1999): Anwendung von Methoden der Mustererkennung zur Bewertung der Schadstoffverteilung im Einzugsbereich einer Mülldeponie. Dissertation, UFZ-Bericht 22/1999, Leipzig, 194 S..
- Ruske, R.; Böhme, O.; Falke, P. (1999): Ergebnisse der erweiterten geologisch-hydrogeologischen Standorterkundung. In: Weiß, H.; Daus, B.; Teutsch, G. (Hrsg.): SAFIRA (2. Statusbericht). UFZ-Bericht 17/1999, Leipzig, S. 15-22.
- Ruske, R.; Hübner, J.; Böhme, O.; Falke, P. (1997): Ergebnisse der geologisch-hydrogeologisch-geotechnischen Standorterkundung. In: Weiß, H.; Teutsch, G.; Daus, B. (Hrsg.): Sanierungsforschung in regional kontaminierten Aquiferen (SAFIRA). UFZ-Bericht 27/1997, Leipzig, S. 14-17.
- Ruske, R.; Lauer, M. (1995): Modellhafte Untersuchung einer durch industrielle Abwässer kontaminierten Flussaue mit dem Ziel einer ökologisch verträglichen Sanierung. - *Z. geol. Wiss.* **23(1-2)**: 177-188.
- Schafmeister, M.-Th. (1999): Geostatistik für die hydrogeologische Praxis. Springer, Berlin, 172 S..
- Scheringer, M. (1997): Characterization of the Environmental Distribution Behavior of Organic Chemicals by Means of Persistence and Spatial Range. - *Environmental Science and Technology* **31**: 2891-2897.
- Schneckenburger, A. (1988): Die Geschichte des I.G.-Farben-Konzerns. Pahl Rugenstein, Köln.
- Schulz-Terfloth, G.; Walkow, F. (1996): Maßnahmen zur Sanierung des Grundwassers unter Berücksichtigung der wasserwirtschaftlichen und bergbaulichen Situation im Großprojekt

- Bitterfeld-Wolfen. In: Lühr, H.-P. (Hrsg.): Kongreß Grundwassersanierung 1996. IWS Schriftenreihe 27, ESV, Berlin, S. 307-320.
- Siegel, S. (1987): Nichtparametrische statistische Methoden. Fachbuchhandlung für Psychologie Verlagsabteilung, Eschborn, 231 S..
- Soldt, U.; Einax, J.W. (1998): Statistische Aus- und Bewertung immissionsbedingter Bodenbelastungen. - UWSF 10: 23-29.
- SRU Der Rat von Sachverständigen für Umweltfragen (Hrsg., 1995): Altlasten II. Sondergutachten. Metzler-Poeschel, Stuttgart.
- Stoyan, D.; Stoyan, H.; Jansen, U. (1997): Umweltstatistik: Statistische Verarbeitung und Analyse von Umweltdaten. Teubner, Stuttgart, Leipzig, 348 S..
- Subbarao, C.; Subbarao, N.V.; Chandu, S.N. (1996): Characterization of groundwater contamination using factor analysis. - Environmental Geology 28: 175-180.
- Suk, H.; Lee, K.-K. (1999): Characterization of a Ground Water Hydrochemical System through Multivariate Analysis: Clustering into Ground Water Zones. - Ground Water 37: 358-366.
- Tammen, H. (1978): Die I.G. Farbenindustrie Aktiengesellschaft (1925-1933): Ein Chemiekonzern in der Weimarer Republik. Verlag Helmuth Tammen, Berlin, 468 S..
- Tao, S. (1998): Factor score mapping of soil trace element contents for the Shenzhen Area. - Water, Air and Soil Pollution 102: 415-425.
- Thielebeule, U. (1991): Sofortprogramm Bitterfeld. UBA-Texte 41/91, Berlin, 152 S..
- Toussaint, B. (1998): Erkundung von Grundwasserschäden. In: Toussaint, B.; Rehner, G.; Held, Th. (Hrsg.): Sanierung von Grundwasserschäden. Expert-Verlag, Renningen-Malmsheim, S. 1-56.
- Trefflich, A. (1997): Die Region Leipzig-Halle-Bitterfeld: Klimatologische Kennzeichnung. In: Feldmann, R.; Henle, K.; Auge, H.; Flachowsky, J.; Klotz, S.; Krönert, R. (Hrsg.): Regeneration und nachhaltige Landnutzung - Konzepte für belastete Regionen. Springer, Berlin, Heidelberg, S. 13-17.
- TÜV Rheinland (1992): Das Ökologische Sanierungs- und Entwicklungskonzept Leipzig/Bitterfeld/Halle/Merseburg. Band A 2: Teilvorhaben Abfall, Teilvorhaben Altlasten. UBA-Texte 26/92.
- Villwock, G. (1997): Bergbaufolgelandschaften in Sachsen-Anhalt - Konsequenzen für die Raumentwicklung und Umweltqualität. In: Ahrens, H.; Meinicke, K.-P.; Wycisk, P. (Hrsg.): Entwicklung von Landnutzung und Umweltqualität in Mitteldeutschland, Sammelband zur Tagung am 21./22.10.1996 in Halle. UZU, Halle, S. 169-177.
- van Embden, I.C.M. (1991): Thesen zu Chlororganika – Überlegungen aus Sicht der Chemischen Industrie. In: Steger, U. (Hrsg.): Chemie und Umwelt. ESV, Berlin, S. 49-56.
- von Osten, W. (1991): Chlororganika – Überlegungen aus Sicht der Umweltpolitik. In: Steger, U. (Hrsg.): Chemie und Umwelt. ESV, Berlin, S. 57-73.
- VROM Ministerie van Volksgezondheid, Ruimtelijke Ordening en Milieubeheer (1993): Leidraad Bodemsanering. Sdu uitgeverij. s'Gravenhage.
- Walter, R. (1992): Geologie von Mitteleuropa. E. Schweizerbart'sche Verlagsbuchhandlung, Stuttgart, S. 75-102.

- Weiß, H.; Daus, B.; Teutsch, G. (Hrsg., 1999): SAFIRA (2. Statusbericht). UFZ-Bericht 17/1999, Leipzig, 176 S..
- Weiß, H.; Teutsch, G.; Daus, B. (Hrsg., 1997): Sanierungsforschung in regional kontaminierten Aquiferen (SAFIRA). UFZ-Bericht 27/1997, Leipzig, 205 S..
- Willett, K.L.; Ulrich, E.M.; Hites, R.A. (1998): Differential Toxicity and Environmental Fates of Hexachlorocyclohexane Isomers. - *Environmental Science and Technology* **32**(15): 2197-2207.
- Winterstein, M.; Adler, B. (1997): Was ist und was kann Mustererkennung? - *WLB Wasser, Luft und Boden* **1-2**: 48-51.
- Wisotzky, F.; Eckert, P. (1997): Sulfat-dominierter BTEX-Abbau im Grundwasser eines ehemaligen Gaswerkstandortes. - *Grundwasser* **2**(1): 11-20.
- Wittsiepe, J.; Selenka, F.; Jackwerth, E. (1990): Gas-chromatographic determination of trace amounts of vinylchloride in water and air after derivatization to 1,2-Dibromchloroethane. - *Fresenius J. Anal. Chemistry* **336**: 322-327.
- Wittsiepe, J. (1993): Untersuchungen zur Spurenanalytik und zum Umweltverhalten chlorierter Ethene und ihrer mikrobiellen Abbauprodukte. Dissertation, Ruhr-Universität Bochum, 589 S..
- Wold, S. (1978): Cross-Validatory Estimation of the Number of Components in Factor and Principal Components Models. - *Technometrics* **20**: 397-405.
- Wycisk, P.; Thieken, A.; Döring, U.; Nießen, R.; Lachmann, S. (1997): Umwelt- und Raumverträglichkeit der Sanierungsvorhaben von regionalen Grundwasserkontaminationen. In: Weiß, H.; Teutsch, G.; Daus, B. (Hrsg.): Sanierungsforschung in regional kontaminierten Aquiferen (SAFIRA). UFZ-Bericht 27/1997, Leipzig, S. 161-171.

Verwendete Gutachten

- GFE Geologische Forschung und Entwicklung GmbH (1996): Regionaluntersuchung von Altlasten im Landkreis Bitterfeld, Weiterführung und Ergänzung Grundwassermonitoring 1996. Ergebnisbericht im Auftrag des Landratsamts Bitterfeld.
- GFE Geologische Forschung und Entwicklung GmbH (1997): Regionaluntersuchung von Altlasten im Landkreis Bitterfeld, Weiterführung und Ergänzung Grundwassermonitoring 1997. Ergebnisbericht im Auftrag des Landratsamts Bitterfeld.
- GFE Geologische Forschung und Entwicklung GmbH (1998): Regionaluntersuchung von Altlasten im Landkreis Bitterfeld, Weiterführung Grundwassermonitoring im Landkreis Bitterfeld 1998. Ergebnisbericht im Auftrag des Landratsamts Bitterfeld.
- GFE Geologische Forschung und Entwicklung GmbH (1999): Regionaluntersuchung von Altlasten im Landkreis Bitterfeld, Weiterführung Grundwassermonitoring im Landkreis Bitterfeld 1999. Ergebnisbericht im Auftrag des Landratsamts Bitterfeld.
- WUA Wolfener Umweltanalytik GmbH (1996): Labor-Prüfbericht Nr. 549/96.

Anhang - Verzeichnis

- A 2.1: Braunkohlengruben und Tagebaue um Bitterfeld und Wolfen
- A 2.2: Synonyme und Anwendungsbereiche ausgewählter organischer Stoffe

- A 3.1: Parameterumfang der Grundwasseruntersuchungen in den Beispieldatensätzen
- A 3.2: Stoffeigenschaften der leichtflüchtigen halogenierten Kohlenwasserstoffe (LHKW)
- A 3.3: Stoffeigenschaften der BTEX-Aromaten
- A 3.4: Stoffeigenschaften der Chlorbenzene
- A 3.5: Stoffeigenschaften der HCH-Isomere
- A 3.6: Stoffeigenschaften der DDT-, DDD- und DDE-Isomere
- A 3.7: Stoffeigenschaften weiterer Chlor- und Nitroaromaten

- A 4.1: Emissions-Nachweishäufigkeiten und mittlere Emissionskonzentrationen im Datensatz 9198M mit verschiedenen Relevanzgrenzen
- A 4.2: Emissions-Nachweishäufigkeiten und mittlere Emissionskonzentrationen in den Landschaftseinheiten
- A 4.3: Emissions-Nachweishäufigkeiten und mittlere Emissionskonzentrationen in den Grundwasserleitern
- A 4.4: Emissions-Nachweishäufigkeiten und mittlere Emissionskonzentrationen in den Beprobungskampagnen vom Herbst 1996 und Sommer 1997

- A 5.1: Deskriptive Statistik und Histogramme der Vor-Ort-, Summenparameter und Summenangaben pro Stoffgruppe
- A 5.2: Hauptkomponentenanalysen mit Vor-Ort-, Summenparametern und Summenangaben pro Stoffgruppe
- A 5.3: Deskriptive Statistik und Histogramme von ausgewählten Einzelstoffen
- A 5.4: Hauptkomponentenanalysen mit ausgewählten Einzelstoffen
- A 5.5: Hauptkomponentenanalysen mit ausgewählten Einzelstoffen, Vor-Ort- und Summenparametern
- A 5.6: Deskriptive Statistik und Histogramme der leichtflüchtigen halogenierten Kohlenwasserstoffe (LHKW)
- A 5.7: Hauptkomponentenanalysen mit den leichtflüchtigen halogenierten Kohlenwasserstoffen (LHKW)
- A 5.8: Verbreitung von Tetrachlorethen und Vinylchlorid im Untersuchungsgebiet

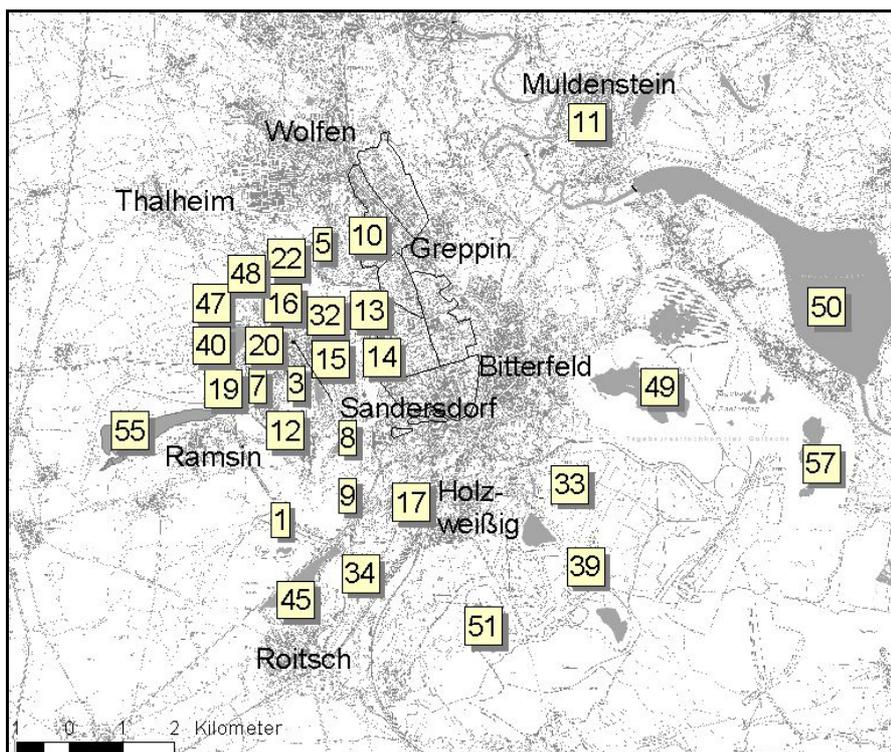
A 2.1: Braunkohlengruben und Tagebaue um Bitterfeld und Wolfen

I. Aufschluss, Ende und Folgenutzung (zusammengestellt aus Liehmann, 1993, 1996 und den Beiträgen in Bitterfelder Bergleute e.V., 1998).

Nr.	Grube/Tagebau	Aufschluss	Ende	Folgenutzung
1	Grube Auguste: Nach dem Stillstand 1930 wurde die Grube mit Kohlenfeldern der Deutschen Grube und Friedrich III vereinigt und ab 1933 als Tagebau Auguste (von 1948-1950 Freiheit III) und Auguste-Südfeld (von 1948-1954 Freiheit IV) mit Großraumförderung weitergeführt.	1839	1950 / 1954	Verfüllung mit Abraum aus dem Tagebau Pistor und der Grube Köckern; von 1957/58 bis 1991 (Sondermüll-)Deponie für Bauschutt und Fabrikationsreste des CKB (im Liegenden der Deponie ist z.T. Ton vorhanden), Grubenwassereinigung; kleine Restseen
3	Grube Richard: Richard I und II (1842 - 1944) südlich von Sandersdorf, Tagebau Richard (1891-1922) westlich von Sandersdorf.	1842	1944	Ursprünglich vier Restlöcher: westlich und östlich der Straße nach Zscherndorf Restseen (Biotope, Angelgewässer); nördlich der B 183 heute verkippt, Nutzung als Kleingartenanlage; im Restloch zwischen Ramsiner Str. und Pflingstanger zeitweise Verspülung von Kohlenrube aus der Brikettfabrik, heute Baumbewuchs.
5	Grube Johannes: bei Wolfen (Nr. 6), ab 1871 Greppiner Werke	1845	1871 / 1931	Feststoff- und Flüssigkeitsdeponie der Filmfabrik, seit 1935 Abwassereinleitungen (Silbersee)
7	Nr. 62: ab 1847 zu Richard	1847	1944	siehe Grube Richard
8	Deutsche Grube: wurde ab 1933 mit Kohlenfeldern der Auguste und Friedrich III vereinigt und im Tagebau mit Großraumförderung weitergeführt.	1847	1934	Verkipfung des Restloches durch Tagebau Pistor, kleiner Restsee
9	Grube Adelheid	1848	1891	siehe Grube Auguste
10	Grube Greppin: Nr. 79, ab 1871 Greppiner Werke.	1850	1859 / 1931	Deponie der Farbenfabrik, Aschedeponie des Kraftwerks der Farbenfabrik (1918-1955)
11	Grube Luthers Linde	1855	1936	keine Angabe
12	Grube Vergissmeinnicht: Tagebau I und II, erst 1860 in Betrieb.	1858	1944	zunächst Restsee mit Binnenfischerei und Naturschutzgebiet; 1984 teilweise Verkipfung durch Tagebau Köckern
13	Grube Antonie: ab 1916 Zusammenschluss mit Marie.	1870	1935	HCH-Deponie des CKB
14	Grube Marie: ab 1916 Zusammenschluss mit Antonie.	1871	1935	Aschverspülung aus dem Kraftwerk Süd, Absetzbecken für wassergetragene Schwebstoffe
15	Grube Louise	1872	1930 / 1944	Ascheverspülung aus dem Kraftwerk Süd; möglicherweise Fabrikationsreste aus der Chemie
	Grube Marie-Neuglück	1899	1901	siehe Grube Louise
16	Grube Hermine	1874 / 1875	1941	Ascheverspülung aus dem Kraftwerk Thalheim und dem Kraftwerk der Filmfabrik Wolfen; Ablagerung von Produktionsrückständen aus der Filmfabrik
17	Grube Friedrich III: später Auguste-Süd, 1930 Markscheidung mit Auguste, ab 1948 Neuaufschluss als Tagebau Freiheit IV (1948-1954) mit Großraumförderung.	1888	1930 / 1954	Aschedeponie des Kraftwerks Süd (1955-1990) über Aschefernleitung; Restseen
19	Grube Erich: 1. Baufeld 1897-1908; 2. Baufeld 1907 – 1935	1897	1935	1. Restloch wurde verkippt; 2. erst Restsee mit Wasserentnahmen durch Chemie und Landwirtschaft; wurde ab 1984 durch Tagebau Köckern verfüllt.
20	Grube Karl Ferdinand West	1898	1914	Verkipfung des Restloches z.T. mit Spülkippen, Neubaugebiet Sandersdorf
22	Grube Elsa	1903	1918	siehe Grube Hermine
32	Grube Karl Ferdinand Ost	1907	1920	Verkipfung des Restloches z.T. mit Spülkippen

33	Grube Leopold: Baufeld I: 1908-1934; Baufeld II: 1917-1927; Verlängerung des Baufeldes I durch Tagebau Holzweißig-Ost: 1931-1962.	1908	1962	siehe Tagebau Goitsche
34	Grube Theodor: ab 1948 Freiheit II.	1907	1951	Verkipfung aus dem Tagebau Pistor & Freiheit IV; Rekultivierung; wild abgelagerte Hausmüllkippe
39	Grube Ludwig	1921	1928	1960 von Holzweißig-West überbaggert.
40	Grube Stakendorf	1923	1943	Restsee von 12 ha; teilweise Verspülung von Abraum aus dem Tagebau Thalheim-West; nach 1945 Asche- und Bauschuttdeponie der deutschen Reichsbahn an der Ostseite; an der Westseite bis 1991 Strandbad
45	Tagebau Pistor: ab 1948 Freiheit I.	1939	1954	bis 1960 Außenkippe für den Tagebau Goitsche; Restsee
47	Grube Thalheim West	1943	1946	Restsee mit Fischzucht nach Flutung
48	Grube Karl Ferdinand Nord: ab 1948 Hermann Fahlke.	1946	1951	bis 1967 Deponie der Deutschen Reichsbahn für Asche und Bauschutt; nach 1970 Garagen des 1. Sandersdorfer Neubaugebietes; nach 1990 Gewerbegebiet; bis 1990 Ascheverspülung im Restloch aus dem Kraftwerk der Filmfabrik Wolfen
49	Tagebau Goitsche	1949	1991	Rekultivierung mit Tagebauen Holzweißig Ost und West zum Erholungs- und Naturschutzgebiet Goitsche; Restsee von 24 km ²
50	Tagebau Muldenstein	1951	1975	Rekultivierung; Muldestausee Flutung durch Mulde nach ihrer Verlegung (6.1 km ² oder 630 ha), LNF und FNF 1195 ha
51	Tagebau Holzweißig-West	1956	1980	siehe Tagebau Goitsche
55	Tagebau Köckern	1984	1992	seit 1994 Restsee von 120 ha; der Endwasserspiegel von 80 m NN wurde 1998 erreicht, eine weiterer Anstieg ist nicht erlaubt, da die Sohle der benachbarten Deponie Heideloh bei 81 m NN liegt; Überschusswasser wird in die östliche Fuhne abgeführt.
57	Tagebau Rösa: Nachfolgebaufeld der Goitsche.	1984	1991 / 1993	siehe Tagebau Goitsche

II. Lage der Gruben und Tagebaue (zur Orientierung ist das Werksgelände der Chemie AG Bitterfeld-Wolfen eingeblendet):



A 2.2: Synonyme und Anwendungsbereiche ausgewählter organischer Stoffe

Kontaminant	Synonyme	anthropogene Quellen und Verwendung ¹
Dichlormethan	Methylenchlorid	LM (Abbeizer/Farbenferner, Klebstoffe, KV); Aerosol-treibmittel, EM, PH
Trichlormethan	Chloroform	LM; PZ; ZP (FCKW)
1,2-Dichlorethan	Ethylendichlorid	ZP (für VC, 111TCA, TCE, PCE, 11DCE, Ethylendi-amin); LM; PZ; ZS; TA
1,1,1-Trichlorethan	Methylchloroform, 1,1,1-Tri	ME; LM; ZP; CR
Tetrachlormethan	Tetrachlorkohlenstoff, Tetra	ZP (FCKW, Nylon)
Trichlorethen	Trichlorethylen, Tri	LM (ME, CR); KV; FA; ZP
Tetrachlorethen	Tetrachlorethylen, Perchlorethylen, Per	LM (CR, ME); KM; KV (PVC)
cis 1,2-Dichlorethen	1,2-Dichlorethylen	LM; EM; KM; ZP (PH, künstl. Perlen)
trans 1,2-Dichlorethen	1,2-Dichlorethylen	LM; EM; KM; ZP (PH, künstl. Perlen)
1,1,1,2-Tetrachlorethan	---	ZP (TCE, PCE)
1,1,2,2-Tetrachlorethan	---	ZP (TCE)
Vinylchlorid	Chlorethen, Chlorethylen, Vinylchlorid-Monomer	KV (PVC); ZP (111TCA, 11DCE, 112TCA)
Benzen	Benzol	TA; LM; ZP; Steinkohlenteer
Toluol	Toluol, Methylbenzol	TA; LM (FA, PZ); ZP (Benzol, Kresol)
Ethylbenzen	Äthylbenzol, Phenylethan	TA; LM; ZP (Styrol, Acetophenon, Celluloseacetat, Diethylbenzol, Ethylanthrachinon, Ethylbenzolsulfon-säuren, Propylenoxid, <i>o</i> -Methylbenzylalkohol); ZS (Emission); Braunkohlenemissionen
<i>o</i> -Xylen	1,2-Dimethylbenzol, 1,2-Xylol	TA; Asphalt, Steinkohlenteer; LM (PZ, FA, Gummi)
<i>m</i> -Xylen	1,3-Dimethylbenzol, 1,3-Xylol	LM (PZ); ZP (Isophthalsäure)
<i>p</i> -Xylen	1,4-Dimethylbenzol, 1,4-Xylol	TA; LM (PZ); ZP (KV (PE), PH, Vitamine)
Monochlorbenzen	Chlorbenzen	ZP (Chlornitrobenzole, FA, Kautschuk, KV, PZ (DDT))
1,3-Dichlorbenzen	<i>m</i> -Dichlorbenzen	ZP (FA (24DCNB), 135TCB)
1,4-Dichlorbenzen	<i>p</i> -Dichlorbenzen	Geruchsübertöner im Sanitärbereich; PZ; ZP (FA, PZ, PH, Dichloranilin)
1,2-Dichlorbenzen	<i>o</i> -Dichlorbenzen	ZP (Dichloranilin); LM (PZ); Entfettungs-/Schmiermittel; PZ
1,2,4-Trichlorbenzen	---	PZ; LM; Zusatz in Ölen und Schmierstoffen; ZP (PZ)
Hexachlorbenzen	Hexachlorbenzol	ZP (Pentachlorthiophenol (Kautschukindustrie), PCP, Pentachlorthiophenol, LHKW, HCH); Weichmacher; PZ; Aluminiumherstellung
gamma-HCH	gamma-Hexachlorcyclohexan, Lindan	PZ
<i>o,p</i> -DDT	---	PZ
<i>p,p</i> -DDT	1,1-Bis-(4-chlorphenyl)-2,2,2-trichlorethan	PZ
2-Chlorphenol	<i>o</i> -Chlorphenol	ZP (höher chlorierte Phenole, Phenolharze, PH, FA); LM; PZ (Desinfektionsmittel); Antiseptikum; ZS (Lignin-schlamm)
4-Chlorphenol	<i>p</i> -Chlorphenol	ZP (höher chlorierte Phenole, PH, FA); LM (Mineralöl-industrie); Vergällungs-/Desinfektionsmittel; ZS (Lignin-schlamm)
2,4-Dichlorphenol	---	ZP (2,4-Dichlorphenoxyessigsäure, Nitrofen, Bifenox, Prothiophos, Dichlorfenthion, PZ); PZ; Stabilisator; ZS (Chlorbleiche)
2,4,6-Trichlorphenol	---	ZP (Chloranilin, FA, PCP, PZ, Konservierungsmittel)
Pentachlorphenol	Penta	PZ; ZS (Schleimbekämpfungsmittel); Desinfektions- und Konservierungsmittel (Textilindustrie, ZS, FA, Kleber, Leime); ZP (PH)
2-Nitrophenol	<i>o</i> -Nitrophenol, 2-	ZP (PZ (Carbofuran und Phosalan); 2-Acetamidophenol

	Hydroxynitrobenzol	(Antioxidans); FA)
4-Nitrophenol	p-Nitrophenol, 4-Hydroxynitrobenzol	ZP (FA, FO, Acetylaminophenol, Methyl-/Ethylparathion, Flurodifen); PZ (Fungizid für Leder)
2,4-Dinitrophenol	2,4-Dinitrohydroxybenzol	PZ; ZP (FA, Explosivstoffe, FO)
4,6-Dinitro-2-methylphenol	2-Methyl-4,6-dinitrophenol	PZ
o-Nitrochlorbenzen	2-Chlornitrobenzen, 2-Nitrochlorbenzen	ZP (FA, PZ, Kautschukchemikalien, PH)
p-Nitrochlorbenzen	4-Chlornitrobenzen, 4-Nitrochlorbenzen	ZP (PH (z.B. Paracetamol), FA, PZ, Kautschukchemikalien)
o-Chloranilin	2-Chloranilin	ZP (FA, PH, PZ)
p-Chloranilin	4-Chloranilin	ZP (FA, PH, PZ)
Dimethoat	---	PZ (BI58)
Parathionmethyl	---	PZ

¹ anthropogene Quellen und Verwendung:

CR:	Chemische Reinigung
EM:	Extraktionsmittel
FA:	Farbenindustrie
FO:	Fotoindustrie, Fotochemikalien
KM:	Kältemittel
KV:	Kunststoffherstellung und -verarbeitung
LM:	Lösemittel
ME:	Metallentfettung und -reinigung
NP:	Nebenprodukt (i.d.R. unerwünscht)
PH:	Pharmazeutische Produkte und Industrie
PZ:	Pestizide (Insektizide, Herbizide, Fungizide, Nematozide)
TA:	Treibstoffadditiv, Kraftstoffzusatz, Bestandteil von Mineralöl und Kraftstoffen
ZP:	Zwischenprodukt oder Ausgangsstoff
ZS:	Zellstoffherstellung und Papierindustrie

Zusammengestellt nach Rippen (1987-1998) und Wittsiepe (1993).

A 3.1:

Anzahl der gemessenen Parameter pro Beprobungskampagne und Gesamtergebnis (max. 905)

Daten	Probenahmekampagne																	Summe
	Frühjahr 97	Herbst 92	Herbst 93	Herbst 95	Herbst 96 I	Herbst 96 II	Herbst 97	Herbst 98	Sommer 91	Sommer 93	Sommer 94	Sommer 96	Sommer 97 I	Sommer 97 II	Sommer 97 III	Winter 92	Winter 96	
Anzahl - Wasser- Temp [°C]	61	37	13	35	193	24	25	1	56	73	25	49	100	111	55	10	868	
Anzahl - pH	61	37	13	35	193	24	25	1	57	73	25	49	100	111	55	10	869	
Anzahl - Leitfähigkeit [µS/cm]	61	37	13	35	193	24	25	1	56	73	25	26	100	111	55	10	845	
Anzahl - O2-Gehalt [mg/l]	61			193								49	100	111			514	
Anzahl - Redoxspannung [mV]		36	13	35	193	24	25	1	57	73	25	49	100	111	54	10	806	
Anzahl - Redoxpotential		12	6	14		19	23		26	33	24				25	8	190	
Anzahl - Salzgehalt [%]	61			193								49	100	111			514	
Anzahl - Leuchtbakterientest	61			198		25	25						100	86			495	
Anzahl - AOX [mg/l]	61	37	13	35	198	24	25	25	1	57	73	25	22	111	47	10	764	
Anzahl - CSB [mg O2/l]	61			35	198	22	25	24				21	22	111	1	9	529	
Anzahl - DOC [mg C/l]	61			198		1	1	1					21	111			394	
Anzahl - TOC [mg C/l]	61			198		23	25	24			1	1	21	111			465	
Anzahl - Phenolindex	61	37	13	198		24	25	25	1	57	71	5	22	109	54	1	703	
Anzahl - Tenside, anionisch (mg/l)									1						54		55	
Anzahl - Tenside, kationisch (mg/l)									1						54		55	
Anzahl - BSB5 (mg O2/l)				35							3					9	47	
Anzahl - KMnO4-Verbrauch (mg O2/l)						1	1	1				23				1	27	
Anzahl - Absorption bei 254 nm				3								8					11	
Anzahl - Häufigkeit H 254 nm				11								8				8	27	
Anzahl - Absorption bei 495 nm												4					4	
Anzahl - Häufigkeit H 495 nm												4					4	
Anzahl - Ammonium (mg/l)		37	13	29					1	57	73	24			55	10	299	
Anzahl - Nitrit (mg/l)									1		1				54		56	
Anzahl - Chlorid (mg/l)		37	13	35	12				1	57	71	24	50		55	10	365	
Anzahl - Sulfat (mg/l)			13		12				1		1				52		79	
Anzahl - Nitrat (mg/l)			13						1		1				54		69	
Anzahl - Phosphat (mg/l)		37	13	23					1	57	73	24			55	10	293	
Anzahl - Phosphor, gesamt (mg P/l)					9												9	
Anzahl - Cyanid, gesamt (mg/l)		37	13						1	57	1				54		163	
Anzahl - Sulfid (mg/l)										1					17		18	
Anzahl - Arsen (µg/l)		37	13	31		24	25	25	1	57	71	13			49	10	356	
Anzahl - Cadmium (µg/l)		37	13	32					1	57	73	12			51	10	286	
Anzahl - Bor (mg/l)									1						55		56	
Anzahl - Chrom (mg/l)			13						1						55		69	
Anzahl - Kupfer (mg/l)									1						55		56	
Anzahl - Eisen, gesamt (mg/l)					27				1		1				55		84	
Anzahl - Quecksilber (µg/l)			13						1						55		69	
Anzahl - Mangan (mg/l)									1		1				55		57	
Anzahl - Nickel (mg/l)			13						1						55		69	
Anzahl - Blei (mg/l)									1						55		56	
Anzahl - Zink (mg/l)			13						1						55	1	70	
Anzahl - Dichlormethan [µg/l]	56	37	13		198	24	25	25	1	57		3	50	100	111	36	736	
Anzahl - Trichlormethan [µg/l]	56	37	13		198	24	25	25	1	57		3	50	100	111	36	736	
Anzahl - 1,2-Dichlorethan [µg/l]	58				198	23	24						50	100	111		564	
Anzahl - 1,1,1-Trichlorethan [µg/l]	58	37	13		198	24	25	25	1	57		3	50	100	111	36	738	
Anzahl - Tetrachlormethan [µg/l]	56	37	13		198	24	25	25	1	57		3	50	100	111	36	736	
Anzahl - Trichlorethen [µg/l]	57	37	13		198	24	25	25	1	56		3	50	100	111	35	735	
Anzahl - Tetrachlorethen [µg/l]	58	37	13		198	24	25	25	1	57		3	50	100	111	36	738	
Anzahl - cis 1,2-Dichlorethen [µg/l]					198	24	1	25		1			46	100	111		506	
Anzahl - trans 1,2-Dichlorethen [µg/l]													46	100	111		257	
Anzahl - 1,1,1,2-Tetrachlorethan [µg/l]	58				198	24	25			1			50	100	111		567	
Anzahl - 1,1,2,2-Tetrachlorethan [µg/l]					198		24										222	
Anzahl - Vinylchlorid [µg/l]	58				198		24	24					49	97	111		561	
Anzahl - LHKW-Summe [µg/l]	58	37	13		198	24	25	25	1	57		3	50	100	111	36	738	
Anzahl - Benzen [µg/l]	59	7	13	35	198	24	25	25		57	70	25	50	100	87	18	10	803
Anzahl - Toluol [µg/l]		7	13	35	198	24	25	25		57	71	25	50	100	87	17	10	744
Anzahl - Ethylbenzen [µg/l]	59	7	13	35	198	24	25	25		57	71	25	50	100	87	16	10	802
Anzahl - o-Xylen [µg/l]	59			1	198	23	23	24			2	1	50	100	87	2	1	571

A 3.1:

Anzahl der gemessenen Parameter pro Beprobungskampagne und Gesamtergebnis (max. 905)

Anzahl - m-Xylen [µg/l]		1	10		198	1	1	1								1	242	
Anzahl - p-Xylen [µg/l]					198						29						198	
Anzahl - m+p-Xylen [µg/l]	59	5	3	35	198	22	23	23		1	41	25	50	100	87	15	9	696
Anzahl - BTEX-Summe [µg/l]	59	7	13	35	198	24	25	25		57	71	25	50	100	87	4	10	790
Anzahl - Monochlorbenzen [µg/l]				35	198	24						23	50	100	67		10	507
Anzahl - 1,3-Dichlorbenzen [µg/l]				34	198	24						2	50	100	67		10	485
Anzahl - 1,4-Dichlorbenzen [µg/l]				35	198	24						2	50	100	67		10	486
Anzahl - 1,2-Dichlorbenzen [µg/l]				35	198	24						2	50	100	67		10	486
Anzahl - 1,3,5-Trichlorbenzen [µg/l]				35	198	24						2					10	269
Anzahl - 1,2,4-Trichlorbenzen [µg/l]				35	198	24						2					10	269
Anzahl - 1,2,3-Trichlorbenzen [µg/l]				35	198	24						2					10	269
Anzahl - 1,2,4,5- und 1,2,3,5-Tetrachlorbenzen [µg/l]				2	198	24												224
Anzahl - 1,2,3,4-Tetrachlorbenzen [µg/l]				33	198	24											10	265
Anzahl - Pentachlorbenzen [µg/l]				35	198	24											10	267
Anzahl - Hexachlorbenzen [µg/l]				35	198	24											10	267
Anzahl - Summe tri-HCB				35	198	24						2	50	100	67		10	486
Anzahl - SHKW Chlorbenzene [µg/l]	50			35	198	24	25	24				23	50	100	67		10	606
Anzahl - Alpha-HCH [µg/l]	43				148	1								23	93			308
Anzahl - Beta-HCH [µg/l]	43				148	1								23	93			308
Anzahl - Gamma-HCH [µg/l]	43				148	1								23	93			308
Anzahl - Delta-HCH [µg/l]	43				148	1								23	93			308
Anzahl - HCH-Summe [µg/l]	43				148	1								23	93			308
Anzahl - o,p-DDE [µg/l]	43				148	1								15	74			281
Anzahl - p,p-DDE [µg/l]	43				148	1								15	74			281
Anzahl - o,p-DDD [µg/l]	43				148	1								15	74			281
Anzahl - p,p-DDD [µg/l]	43				148	1								15	74			281
Anzahl - o,p-DDT [µg/l]	43				148	1								15	74			281
Anzahl - p,p-DDT [µg/l]	43				148	1								15	74			281
Anzahl - DDX-Isomere [µg/l]	43				148	1								15	74			281
Anzahl - 2-Chlorphenol [µg/l]					83	1												84
Anzahl - 4-Chlorphenol [µg/l]					83	1												84
Anzahl - 2,4-Dichlorphenol [µg/l]					83	1												84
Anzahl - 2,4,6-Trichlorphenol [µg/l]					83	1												84
Anzahl - Pentachlorphenol [µg/l]					83	1												84
Anzahl - 4-Chlor-3-Methylphenol [µg/l]					83	1												84
Anzahl - Chlorphenole [µg/l]	45				99	1	1	1						6	39			192
Anzahl - 2-Nitrophenol [µg/l]					83													83
Anzahl - 4-Nitrophenol [µg/l]					83													83
Anzahl - 2,4-Dinitrophenol [µg/l]					83													83
Anzahl - 4,6-Dinitro-2-methylphenol [µg/l]					83													83
Anzahl - Nitrophenole [µg/l]	45				83									3	33			164
Anzahl - o-Nitrochlorbenzen [µg/l]					83													83
Anzahl - p-Nitrochlorbenzen [µg/l]					83													83
Anzahl - 2,3-Dichlornitrobenzen [µg/l]					83													83
Anzahl - 2,4-Dichlornitrobenzen [µg/l]					83													83
Anzahl - 2,5-Dichlornitrobenzen [µg/l]					83													83
Anzahl - 2,3,4-Trichlornitrobenzen [µg/l]					83													83
Anzahl - 2,3,5,6-Tetrachlornitrobenzen [µg/l]					83													83
Anzahl - Nitrochlorbenzene [µg/l]					83													83
Anzahl - 2-Chlor-4-Nitrophenol [µg/l]					83													83
Anzahl - 2-Chlor-6-Nitrophenol [µg/l]					83													83
Anzahl - 4-Chlor-3-Nitrophenol [µg/l]					83													83
Anzahl - Nitrochlorphenole [µg/l]					83													83
Anzahl - o-Chloranilin [µg/l]	45				83									10	42			180
Anzahl - p-Chloranilin [µg/l]	45				83									10	41			179
Anzahl - Dimethoat [µg/l]	45				83									11	34			173
Anzahl - Parathionmethyl [µg/l]	45				83									15	33			176
Anzahl - PAK-Summe [µg/l]														14	43			57

A 3.2: Stoffeigenschaften der leichtflüchtigen, halogenierten Kohlenwasserstoffe (LHKW)

I: Allgemeine Daten:

Stoff	Abkürzung	MM	TM (nach 1)	TM (nach 2)	TB (nach 1)	D (nach 1)
Dichlormethan	DCM	84.93	-95.0	-95.0	40.1	1.33
Trichlormethan	TCM	119.38	-63.3	-63.4	61.4	1.48
1,2-Dichlorethan	12DCA	98.96	-35.5	-35.3	83.6	1.25
1,1,1-Trichlorethan	111TCA	133.41	-31.0	-30.3	73.9	1.34
Tetrachlormethan	TeCM	153.82	-23.0	-22.9	76.7	1.59
Trichlorethen	TCE	131.39	-73.0	-83.3	86.6	1.46
Tetrachlorethen	PCE	165.83	-22.4	-21.4	121.1	1.62
cis 1,2-Dichlorethen	cis12DCE	96.94	-81.0	-80.4	60.0	1.28
trans 1,2-Dichlorethen	trans12DCE	96.94	-50.0	-49.7	48.0	1.26
1,1,1,2-Tetrachlorethan	1112PCA	167.85	---	---	---	---
1,1,2,2-Tetrachlorethan	1122PCA	167.85	-41.0	-43.9	146.3	1.60
Vinylchlorid	VC	62.50	-153.8	-153.6	-13.7	0.91

Quellen: 1: Rippen (1987-1998), 2: Caltox-Datenbank (siehe Scheringer, 1997)

MM: molare Masse [g/mol]

TM: Schmelzpunkt bei 1013 hPa [°C] (melting point)

TB: Siedepunkt bei 1013 hPa [°C] (boiling point)

D: Dichte bei 20°C unter 1013 hPa [g/cm³]

II. Daten zu Mobilität und Persistenz:

Quelle: Rippen (1987-1998)

Stoff	S10	S20	VP	Kow	log Kow
Dichlormethan	15900	16610	466	20	1.31
Trichlormethan	9500	8110	202	89	1.95
1,2-Dichlorethan	---	8480	85	29	1.46
1,1,1-Trichlorethan	---	870	133	306	2.49
Tetrachlormethan	680	828	118	592	2.77
Trichlorethen	1110	1090	78	1080	3.03
Tetrachlorethen	152	140	19	740	2.87
cis 1,2-Dichlorethen	4000	5600	219	52	1.72
trans 1,2-Dichlorethen	---	6300	344	119	2.09
1,1,2,2-Tetrachlorethan	3700	3184	7	522	2.72
Vinylchlorid	60	1610	3330	19	1.27

Quelle: Caltox-Datenbank (siehe Scheringer, 1997)

Stoff	S20	VP	Kow	log Kow	t _{1/2} GW
Dichlormethan	31005	515	18	1.26	35
Trichlormethan	7970	274	90	1.95	1306
1,2-Dichlorethan	8522	107	28	1.45	335
1,1,1-Trichlorethan	1320	165	273	2.44	343
Tetrachlormethan	795	150	527	2.72	4
Trichlorethen	1450	97	322	2.51	801
Tetrachlorethen	287	26	382	2.58	515
cis 1,2-Dichlorethen	5260	237	52	1.72	1453
trans 1,2-Dichlorethen	8890	472	117	2.07	1453
1,1,2,2-Tetrachlorethan	3080	7	245	2.39	23
Vinylchlorid	2463	3671	15	1.18	4349

S10: Wasserlöslichkeit (Solubility) bei 10°C [mg/l]

S20: Wasserlöslichkeit (Solubility) bei 20°C [mg/l]

VP: Dampfdruck (vapor pressure) bei 20 °C [hPa]

Kow: Verteilungskoeffizient (partition coefficient) n-Oktanol/Wasser bei 20°C [-]

log Kow: Logarithmus von Kow zur Basis 10 [-]

t_{1/2} GW: Halbwertszeit im Grundwasser [d]

A 3.3: Stoffeigenschaften der BTEX-Aromaten

I: Allgemeine Daten:

Stoff	Abkürzung	MM	TM (nach 1)	TM (nach 2)	TB (nach 1)	D (nach 1)
Benzen	B	78.12	5.5	5.6	80.0	0.88
Toluen	To	92.15	-95.0	-94.9	110.6	0.87
Ethylbenzen	EB	106.17	-95.0	-94.9	136.2	0.87
o-Xylen	12X	106.17	-25.2	-25.1	144.4	0.88
m-Xylen	13X	106.17	-47.8	---	139.1	0.86
p-Xylen	14X	106.17	13.3	---	138.1	0.86

Quellen: 1: Rippen (1987-1998), 2: Caltox-Datenbank (siehe Scheringer, 1997)

MM: molare Masse [g/mol]

TM: Schmelzpunkt bei 1013 hPa [°C] (melting point)

TB: Siedepunkt bei 1013 hPa [°C] (boiling point)

D: Dichte bei 20°C [g/cm³]

II. Daten zu Mobilität und Persistenz:

Quelle: Rippen (1987-1998)

Stoff	S10	S20	VP	Kow	log Kow
Benzen	---	1751	101	147	2.17
Toluen	470	556	29	562	2.75
Ethylbenzen	173	173	9	1592	3.20
o-Xylen	142	187	7	1460	3.16
m-Xylen	---	161	8	1981	3.30
p-Xylen	---	179	9	1847	3.27

Quelle: Caltox-Datenbank (siehe Scheringer, 1997)

Stoff	S20	VP	Kow	log Kow	t _{1/2} GW
Benzen	1755	127	151	2.18	243
Toluen	573	38	482	2.68	18
Ethylbenzen	174	13	1329	3.12	117
Xylene	189	11	1301	3.11	187

S10: Wasserlöslichkeit (Solubility) bei 10°C [mg/l]

S20: Wasserlöslichkeit (Solubility) bei 20°C [mg/l]

VP: Dampfdruck (vapor pressure) bei 20 °C [hPa]

Kow: Verteilungskoeffizient (partition coefficient) n-Oktanol/Wasser bei 20°C [-]

log Kow: Logarithmus von Kow zur Basis 10 [-]

t_{1/2} GW: Halbwertszeit im Grundwasser [d]

A 3.4: Stoffeigenschaften der Chlorbenzene

I: Allgemeine Daten:

Stoff	Abkürzung	MM	TM (nach 1)	TM (nach 2)	TB (nach 1)	D (nach 1)
Monochlorbenzen	MCB	112.56	-45.2	-45.3	132.0	1.11
1,3-Dichlorbenzen	13DCB	147.01	-24.7	---	173.0	1.29
1,4-Dichlorbenzen	14DCB	147.01	53.1	53.3	174.0	1.25
1,2-Dichlorbenzen	12DCB	147.01	-17.0	-16.9	180.0	1.30
1,3,5-Trichlorbenzen	135TCB	181.45	---	---	---	---
1,2,4-Trichlorbenzen	124TCB	181.45	17.0	17.2	213.5	1.45
1,2,3-Trichlorbenzen	123TCB	181.45	---	---	---	---
1,2,4,5 / 1,2,3,5-Tetrachlorbenzen	1245TeCB	215.89	---	---	---	---
1,2,3,4-Tetrachlorbenzen	1234TeCB	215.89	---	---	---	---
Pentachlorbenzen	PCB	250.34	---	---	---	---
Hexachlorbenzen	HCB	284.78	230.0	228.2	332.0	2.08

Quellen: 1: Rippen (1987-1998), 2: Caltox-Datenbank (siehe Scheringer, 1997)

MM: molare Masse [g/mol]
 TM: Schmelzpunkt bei 1013 hPa [°C] (melting point)
 TB: Siedepunkt bei 1013 hPa [°C] (boiling point)
 D: Dichte bei 20°C [g/cm³]

II. Daten zu Mobilität und Persistenz:

Quelle: Rippen (1987-1998)

Stoff	S10	S20	VP	Kow	log Kow
Monochlorbenzen	327	433	13	600	2.78
1,3-Dichlorbenzen	118	117	2	2980	3.47
1,4-Dichlorbenzen	---	72	1	2880	3.46
1,2-Dichlorbenzen	162	130	2	2520	3.40
1,2,4-Trichlorbenzen	---	34	0.3	13319	4.12
Hexachlorbenzen	0.009	0.007	1.2•10 ⁻⁵	624000	5.80

Quelle: Caltox-Datenbank (siehe Scheringer, 1997)

Stoff	S20	VP	Kow	log Kow	t _{1/2} GW
Monochlorbenzen	428	16	644	2.81	218
1,4-Dichlorbenzen	74	1	3078	3.49	450
1,2-Dichlorbenzen	128	2	2842	3.45	211
1,2,4-Trichlorbenzen	32	0.5	10042	4.00	211
Hexachlorbenzen	0	0.00	350537	5.54	3048

S10: Wasserlöslichkeit (Solubility) bei 10°C [mg/l]
 S20: Wasserlöslichkeit (Solubility) bei 20°C [mg/l]
 VP: Dampfdruck (vapor pressure) bei 20 °C [hPa]
 Kow: Verteilungskoeffizient (partition coefficient) n-Oktanol/Wasser bei 20°C [-]
 log Kow: Logarithmus von Kow zur Basis 10 [-]
 t_{1/2} GW: Halbwertszeit im Grundwasser [d]

A 3.5: Stoffeigenschaften von Hexachlorcyclohexan (HCH)

I: Allgemeine Daten:

Stoff	Abkürzung	MM	TM (nach 1)	TM (nach 2)	TM (nach 3)	TB (nach 1)	D (nach 1)
alpha-HCH	aHCH	290.83	159.0	159.3	159-160	290	---
beta-HCH	bHCH	290.83	312.0	310.2	309-310	---	1.89
gamma-HCH	gHCH	290.83	112.6	112.7	112-113	323	---
delta-HCH	dHCH	290.83	---	---	138-139	---	---

Quellen: 1: Rippen (1987-1998), 2: Caltox-Datenbank (siehe Scheringer, 1997), 3: Willett et al. (1998)

MM: molare Masse [g/mol]
 TM: Schmelzpunkt bei 1013 hPa [°C] (melting point)
 TB: Siedepunkt bei 1013 hPa [°C] (boiling point)
 D: Dichte bei 20°C [g/cm³]

II. Daten zu Mobilität und Persistenz:

Quelle: Rippen (1987-1998)

Stoff	S10	S20	VP	Kow	log Kow
alpha-HCH	---	1.59	$5.3 \cdot 10^{-5}$	5880	3.77
beta-HCH	---	0.32	$4.3 \cdot 10^{-7}$	7060	3.85
gamma-HCH	2.20	6.85	$2.9 \cdot 10^{-5}$	4540	3.66

Quelle: Caltox-Datenbank (siehe Scheringer, 1997)

Stoff	S20	VP [hPa]	Kow	log Kow	t _{1/2} GW
alpha-HCH	3	0	6313	3.80	142
beta-HCH	2	0	6930	3.84	131
gamma-HCH	5	0	5288	3.72	123

Quelle: Willett et al. (1998)

Stoff	VP	log Kow
alpha-HCH	$(1.6 \pm 0.9) \cdot 10^{-4}$	3.9 ± 0.2
beta-HCH	$(4.2 \pm 0.3) \cdot 10^{-7}$	3.9 ± 0.1
gamma-HCH	$(5.3 \pm 1.4) \cdot 10^{-5}$	3.7 ± 0.5
delta-HCH	$2.1 \cdot 10^{-5}$	4.1 ± 0.02

S10: Wasserlöslichkeit (Solubility) bei 10°C [mg/l]
 S20: Wasserlöslichkeit (Solubility) bei 20°C [mg/l]
 VP: Dampfdruck (vapor pressure) bei 20 °C [hPa]
 Kow: Verteilungskoeffizient (partition coefficient) n-Oktanol/Wasser bei 20°C [-]
 log Kow: Logarithmus von Kow zur Basis 10 [-]
 t_{1/2} GW: Halbwertszeit im Grundwasser [d]

A 3.6: Stoffeigenschaften der DDT-, DDD- und DDE-Isomere

I: Allgemeine Daten:

DDE: 1,1-Bis-(4-chlorphenyl)-2,2-dichlorethen

DDD: 1,1-Dichlor-2,2-bis-(4-chlorphenyl)-ethan

DDT: 1,1-Bis-(4-chlorphenyl)-2,2,2-trichlorethan

Stoff	Abkürzung	MM	TM (nach 1)	TM (nach 2)	TB (nach 1)	D (nach 1)
o,p-DDE	opDDE	318.03	---	---	---	---
p,p-DDE	ppDDE	318.03	88	89.2	---	---
o,p-DDD	opDDD	320.05	---	---	---	---
p,p-DDD	ppDDD	320.05	111	109.2	---	1.48
o,p-DDT	opDDT	354.49	---	---	---	---
p,p-DDT	ppDDT	354.49	109	108.7	185	1.55

Quellen: 1: Rippen (1987-1998), 2: Caltox-Datenbank (siehe Scheringer, 1997)

MM: molare Masse [g/mol]

TM: Schmelzpunkt bei 1013 hPa [°C] (melting point)

TB: Siedepunkt bei 1013 hPa [°C] (boiling point)

D: Dichte bei 20°C [g/cm³]

II. Daten zu Mobilität und Persistenz:

Quelle: Rippen (1987-1998)

Stoff	S20	VP	Kow	log Kow
p,p-DDE	$2.4 \cdot 10^{-2}$	$9.9 \cdot 10^{-6}$	569000	5.76
p,p-DDD	$9.0 \cdot 10^{-2}$	---	720000	5.86
p,p-DDT	$3.4 \cdot 10^{-3}$	$2.7 \cdot 10^{-7}$	1582000	6.20

Quelle: Caltox-Datenbank (siehe Scheringer, 1997)

Stoff	S20	VP	Kow	log Kow	t _{1/2} GW
DDE	0	0	3949681	6.60	5702
DDD	0	0	1349412	6.13	5729
DDT	0	0	1383607	6.14	5702

S10: Wasserlöslichkeit (Solubility) bei 10°C [mg/l]

S20: Wasserlöslichkeit (Solubility) bei 20°C [mg/l]

VP: Dampfdruck (vapor pressure) bei 20 °C [hPa]

Kow: Verteilungskoeffizient (partition coefficient) n-Oktanol/Wasser bei 20°C [-]

log Kow: Logarithmus von Kow zur Basis 10 [-]

t_{1/2} GW: Halbwertszeit im Grundwasser [d]

A 3.7: Stoffeigenschaften weiterer Chlor- und Nitro-Aromaten

I: Allgemeine Daten (aus: Rippen, 1987-1998):

Stoff	Abkürzung	MM	TM	TB	D
2-Chlorphenol	2CP	128.56	175	7	1.26
4-Chlorphenol	4CP	128.56	219	43	1.31
2,4-Dichlorphenol	24DCP	163	213	44	1.38
2,4,6-Trichlorphenol	246TCP	197.45	244	69	1.68
Pentachlorphenol	PCP	266.34	310	189	1.98
4-Chlor-3-Methylphenol	MCP	142.58	---	---	---
2-Nitrophenol	2NP	139.11	215	45	1.50
4-Nitrophenol	4NP	139.11	216	114	1.48
2,4-Dinitrophenol	24DNP	184.11	---	114	1.68
4,6-Dinitro-2-methylphenol	MDNP	198.13	312	86.3	1.49
o-Nitrochlorbenzen	2CNB	157.56	245	33	1.37
p-Nitrochlorbenzen	4CNB	157.56	241	83.3	1.52
2,3-Dichlornitrobenzen	23DCNB	192.00	---	---	---
2,4-Dichlornitrobenzen	24DCNB	192.00	---	---	---
2,5-Dichlornitrobenzen	25DCNB	192.00	---	---	---
2,3,4-Trichlornitrobenzen	234TCNB	226.44	---	---	---
2,3,5,6-Tetrachlornitrobenzen	2356TeCNB	260.88	---	---	---
2-Chlor-4-Nitrophenol	4N2CP	209.01	---	---	---
2-Chlor-6-Nitrophenol	6N2CP	209.01	---	---	---
4-Chlor-3-Nitrophenol	3N4CP	209.01	---	---	---
o-Chloranilin	2CA	125.57	---	---	---
p-Chloranilin	4CA	125.57	231	71	1.43
Dimethoat	DIM				
Parathionmethyl	PTM				

MM: molare Masse [g/mol]

TM: Schmelzpunkt bei 1013 hPa [°C] (melting point)

TB: Siedepunkt bei 1013 hPa [°C] (boiling point)

D: Dichte bei 20°C [g/cm³]

II. Daten zu Mobilität und Persistenz (aus: Rippen, 1987-1998)

Stoff	S10	S20	VP	Kow	log Kow
2-Chlorphenol	29000	20250	2.33	154	2.19
4-Chlorphenol	---	27000	0.14	265	2.42
2,4-Dichlorphenol	3	4400	$8.6 \cdot 10^{-2}$	1226	3.09
2,4,6-Trichlorphenol	---	420	$7.1 \cdot 10^{-3}$	4700	3.67
Pentachlorphenol	---	19	$8.4 \cdot 10^{-5}$	175000	5.24
4-Chlor-3-Methylphenol	---	800	---	---	---
2-Nitrophenol	---	1300	0.12	59.8	1.78
4-Nitrophenol	9670	13840	$3.2 \cdot 10^{-5}$	90	1.96
2,4-Dinitrophenol	5600	6000	$5.2 \cdot 10^{-4}$	46.2	1.66
4,6-Dinitro-2-methylphenol	130	203	$8.7 \cdot 10^{-5}$	482	2.68
o-Nitrochlorbenzen	---	510	$3.8 \cdot 10^{-2}$	283	2.45
p-Nitrochlorbenzen	28	20	$1.9 \cdot 10^{-2}$	317	2.5
p-Chloranilin	---	2900	$2.03 \cdot 10^{-2}$	170	2.23
Dimethoat	---	25000	---	---	---
Parathionmethyl	---	---	---	154	2.19

S10: Wasserlöslichkeit (Solubility) bei 10°C [mg/l]

S20: Wasserlöslichkeit (Solubility) bei 20°C [mg/l]

VP: Dampfdruck (vapor pressure) bei 20 °C [hPa]

Kow: Verteilungskoeffizient (partition coefficient) n-Oktan/Wasser bei 20°C [-]

log Kow: Logarithmus von Kow zur Basis 10 [-]

A 4.1: Emissions-Nachweishäufigkeiten und mittlere Emissionskonzentrationen mit verschiedenen Relevanzgrenzen

I: Nachweisgrenzen und Emissions-Nachweishäufigkeiten (ENH) im Datensatz 9198M (sortiert nach ENH, RG = NWG):

Substanz	NWG [$\mu\text{g/l}$]	ENH [%] RG = NWG	ENH [%] RG \geq 0.1 $\mu\text{g/l}$	ENH [%] RG \geq 1 $\mu\text{g/l}$	ENH [%] RG = 10 $\mu\text{g/l}$
Tetrachlorethen	0.008	97.30	94.34	84.10	34.77
Alpha-HCH	0.01	93.59	82.91	47.44	3.85
Trichlormethan	0.08	89.49	82.48	57.41	22.91
Trichlorethen	0.03	88.41	83.56	56.06	20.49
Delta-HCH	0.01	87.18	74.79	41.03	2.56
Tetrachlormethan	0.005	85.71	49.06	24.53	11.86
1,2-Dichlorbenzen	1	84.21	84.21	83.59	17.96
Monochlorbenzen	2	83.59	83.59	83.59	53.87
Gamma-HCH	0.01	79.06	62.39	13.25	1.28
1,1,2,2-Tetrachlorethan	0.2	75.46	75.46	56.02	28.24
p,p-DDT	0.01	71.63	29.77	4.19	0.93
Beta-HCH	0.01	71.37	59.83	13.25	3.85
1,2,4,5- und 1,2,3,5-Tetrachlorbenzen	0.005	68.52	21.30	5.09	1.39
1,2,3,4-Tetrachlorbenzen	0.005	67.81	35.19	18.03	2.15
1,1,1,2-Tetrachlorethan	0.02	66.76	38.59	12.96	3.10
o,p-DDT	0.01	66.51	18.60	4.19	1.86
1,4-Dichlorbenzen	1.5	64.40	64.40	64.40	17.03
Vinylchlorid	2	61.08	61.08	61.08	38.92
p,p-DDD	0.01	60.47	8.84	2.33	0.47
Benzen	1.5	59.78	59.78	58.70	21.20
1,2,4-Trichlorbenzen	0.01	55.36	36.91	10.73	5.58
1,2,3-Trichlorbenzen	0.01	48.50	17.17	5.58	1.29
Dichlormethan	2.4	47.71	47.71	47.71	17.52
1,3-Dichlorbenzen	1	46.75	46.75	40.87	8.98
o,p-DDD	0.01	46.05	6.05	0.93	0.47
Toluen	1.5	45.82	45.82	42.07	6.63
1,3,5-Trichlorbenzen	0.01	45.49	23.61	3.43	0.86
p,p-DDE	0.01	38.60	5.58	1.86	0.00
cis 1,2-Dichlorethen	5	36.45	36.45	36.45	24.10
Hexachlorbenzen	0.002	32.19	6.01	1.72	0.43
Pentachlorbenzen	0.002	31.76	3.00	0.43	0.00
Ethylbenzen	1.5	30.98	30.98	27.72	6.52
o-Chloranilin	0.1	28.78	28.78	25.18	16.55
1,2-Dichlorethan	3	27.68	27.68	27.68	14.41
m-Xylen	1.5	26.67	26.67	26.67	6.22
o,p-DDE	0.01	22.33	3.72	0.47	0.00
o-Xylen	1.5	21.97	21.97	21.68	5.78
1,1,1-Trichlorethan	0.02	21.56	6.47	1.35	0.81
p-Xylen	1.5	19.70	19.70	19.70	5.56
trans 1,2-Dichlorethen	5	17.89	17.89	17.89	13.01
p-Chloranilin	0.1	11.51	11.51	11.51	7.91
o-Nitrochlorbenzen	0.2	9.64	9.64	4.82	2.41
2-Chlorphenol	0.2	7.14	7.14	7.14	1.19
4-Chlor-3-Methylphenol	0.2	7.14	7.14	7.14	5.95
p-Nitrochlorbenzen	0.2	4.82	4.82	3.61	2.41
2,4,6-Trichlorphenol	0.08	4.76	4.76	4.76	1.19
2,4-Dichlorphenol	0.1	3.57	3.57	3.57	1.19
2,3-Dichlornitrobenzen	0.1	2.41	2.41	1.20	1.20
Pentachlorphenol	0.2	2.38	2.38	2.38	1.19
2,3,4-Trichlornitrobenzen	0.1	1.20	1.20	1.20	1.20
2,5-Dichlornitrobenzen	0.1	1.20	1.20	1.20	1.20
2-Nitrophenol	0.5	1.20	1.20	1.20	0.00
4-Nitrophenol	1	1.20	1.20	1.20	1.20
Dimethoat	0.1	0.74	0.74	0.74	0.74

Nicht nachweisbar sind diese neun Substanzen (ENH = 0 %). Sie werden im Weiteren vernachlässigt:

2,3,5,6-Tetrachlornitrobenzen	0.05
2,4-Dichlornitrobenzen	0.1
2,4-Dinitrophenol	1
2-Chlor-4-Nitrophenol	0.5
2-Chlor-6-Nitrophenol	0.2
4,6-Dinitro-2-Methylphenol	0.5
4-Chlor-3-Nitrophenol	1
4-Chlorphenol	0.2
Parathionmethyl	0.1

II: Mittlere Emissionskonzentrationen (MEK) im Datensatz 9198M (sortiert nach MEK, NWG):

Substanz	MEK [$\mu\text{g/l}$] RG = NWG	MEK [$\mu\text{g/l}$] RG \geq 0.1 $\mu\text{g/l}$	MEK [$\mu\text{g/l}$] RG \geq 1 $\mu\text{g/l}$	MEK [$\mu\text{g/l}$] RG = 10 $\mu\text{g/l}$
4-Nitrophenol	190.00	190.00	190.00	190.00
4-Chlor-3-Methylphenol	85.00	85.00	85.00	96.00
p-Chloranilin	41.50	41.50	41.50	70.50
2,5-Dichlornitrobenzen	34.00	34.00	34.00	34.00
2,3,4-Trichlornitrobenzen	24.00	24.00	24.00	24.00
Dimethoat	24.00	24.00	24.00	24.00
cis 1,2-Dichlorethen	19.00	19.00	19.00	46.88
2,3-Dichlornitrobenzen	18.78	18.78	37.00	37.00
Monochlorbenzen	18.47	18.47	18.47	58.38
o-Chloranilin	18.00	18.00	36.00	138.50
Vinylchlorid	17.00	17.00	17.00	30.00
trans 1,2-Dichlorethen	16.80	16.80	16.80	21.75
1,2-Dichlorethan	11.50	11.50	11.50	53.65
Pentachlorphenol	10.35	10.35	10.35	19.00
p-Nitrochlorbenzen	8.85	8.85	14.00	67.00
Dichlormethan	6.25	6.25	6.25	37.00
Tetrachlorethen	5.60	5.90	7.03	28.60
Benzen	5.20	5.20	5.33	58.48
1,1,2,2-Tetrachlorethan	4.20	4.20	10.60	30.00
1,2-Dichlorbenzen	3.85	3.85	3.93	33.97
o-Xylen	3.80	3.80	3.80	18.75
2,4,6-Trichlorphenol	3.55	3.55	3.55	30.00
1,4-Dichlorbenzen	3.43	3.43	3.43	48.00
2,4-Dichlorphenol	3.30	3.30	3.30	25.00
2-Chlorphenol	3.15	3.15	3.15	14.00
p-Xylen	3.10	3.10	3.10	18.00
Trichlorethen	2.92	3.47	6.78	44.00
m-Xylen	2.90	2.90	2.90	29.50
1,3-Dichlorbenzen	2.70	2.70	3.13	50.00
o-Nitrochlorbenzen	2.36	2.36	16.00	956.00
Trichlormethan	2.06	2.50	5.40	88.20
Ethylbenzen	2.03	2.03	2.48	28.42
2-Nitrophenol	2.00	2.00	2.00	10.00
Toluen	1.80	1.80	2.17	67.00
Alpha-HCH	1.10	1.30	2.21	44.00
Delta-HCH	0.82	1.10	1.80	193.67
Gamma-HCH	0.28	0.40	1.50	365.00
Tetrachlormethan	0.27	1.02	7.80	32.50
Beta-HCH	0.23	0.28	3.80	46.00
1,2,4-Trichlorbenzen	0.19	0.32	12.00	55.00
1,1,1,2-Tetrachlorethan	0.15	0.50	2.50	27.90
1,2,3,4-Tetrachlorbenzen	0.13	1.15	4.85	17.00
1,3,5-Trichlorbenzen	0.10	0.21	1.64	59.00
p,p-DDT	0.08	0.16	4.30	102.47
1,2,3-Trichlorbenzen	0.06	0.28	4.10	33.00
o,p-DDT	0.06	0.23	2.50	13.17
1,2,4,5- und 1,2,3,5-Tetrachlorbenzen	0.05	0.25	2.90	26.00
1,1,1-Trichlorethan	0.04	0.33	26.00	73.60
o,p-DDE	0.03	0.24	4.05	10.00
p,p-DDD	0.03	0.22	2.00	407.50
o,p-DDD	0.02	0.44	36.70	71.40
p,p-DDE	0.02	0.67	2.53	10.00
Pentachlorbenzen	0.01	0.12	5.50	10.00
Hexachlorbenzen	0.01	0.42	2.00	27.15

A 4.2: Emissions-Nachweishäufigkeiten und mittlere Emissionskonzentrationen in den Landschaftseinheiten

I: Emissions-Nachweishäufigkeiten (ENH, Angaben in %) im Datensatz 9198M:

Landschaftseinheit:	Muldeau		Bergbaufolge		Siedlung		Chemie		Agrar		Gesamt	
	n	ENH	n	ENH	n	ENH	n	ENH	n	ENH	n	ENH
Dichlormethan	51	17.65	107	42.99	37	40.54	155	65.81	21	23.81	371	47.71
Trichlormethan	51	86.27	107	86.92	37	83.78	155	96.13	21	71.43	371	89.49
1,2-Dichlorethan	45	13.33	104	11.54	34	20.59	154	46.75	17	5.88	354	27.68
1,1,1-Trichlorethan	51	7.84	107	14.95	37	13.51	155	35.48	21	0.00	371	21.56
Tetrachlormethan	51	74.51	107	87.85	37	67.57	155	95.48	21	61.90	371	85.71
Trichlorethen	51	88.24	107	82.24	37	91.89	155	93.55	21	76.19	371	88.41
Tetrachlorethen	51	98.04	107	98.13	37	97.30	155	99.35	21	76.19	371	97.30
cis 1,2-Dichlorethen	43	20.93	100	15.00	35	48.57	141	56.03	13	7.69	332	36.45
trans 1,2-Dichlorethen	30	6.67	83	9.64	21	23.81	102	28.43	10	0.00	246	17.89
1,1,1,2-Tetrachlorethan	45	57.78	105	65.71	34	52.94	154	76.62	17	35.29	355	66.76
1,1,2,2-Tetrachlorethan	34	85.29	52	63.46	26	65.38	99	84.85	5	0.00	216	75.46
Vinylchlorid	45	71.11	102	50.98	35	60.00	154	70.78	16	6.25	352	61.08
Benzen	53	58.49	100	40.00	37	48.65	157	75.16	21	61.90	368	59.78
Toluen	53	47.17	93	38.71	37	43.24	143	51.05	21	42.86	347	45.82
Ethylbenzen	53	33.96	100	19.00	37	29.73	157	38.85	21	23.81	368	30.98
o-Xylen	45	15.56	95	17.89	35	28.57	155	25.16	16	18.75	346	21.97
m-Xylen	39	17.95	49	10.20	27	33.33	99	38.38	11	9.09	225	26.67
p-Xylen	32	12.50	45	0.00	22	18.18	99	31.31	0	---	198	19.70
Monochlorbenzen	48	87.50	86	75.58	34	70.59	136	94.12	19	57.89	323	83.59
1,3-Dichlorbenzen	48	52.08	86	26.74	34	23.53	136	64.71	19	36.84	323	46.75
1,4-Dichlorbenzen	48	58.33	86	52.33	34	52.94	136	83.09	19	21.05	323	64.40
1,2-Dichlorbenzen	48	72.92	86	79.07	34	88.24	136	94.12	19	57.89	323	84.21
1,3,5-Trichlorbenzen	40	37.50	57	33.33	27	51.85	100	57.00	9	11.11	233	45.49
1,2,4-Trichlorbenzen	40	42.50	57	54.39	27	37.04	100	69.00	9	22.22	233	55.36
1,2,3-Trichlorbenzen	40	42.50	57	45.61	27	40.74	100	57.00	9	22.22	233	48.50
1,2,4,5-/1,2,3,5-TeCB	34	73.53	53	58.49	26	65.38	99	74.75	4	25.00	216	68.52
1,2,3,4-TetraCB	40	75.00	57	64.91	27	62.96	100	72.00	9	22.22	233	67.81
Pentachlorbenzen	40	32.50	57	19.30	27	22.22	100	43.00	9	11.11	233	31.76
Hexachlorbenzen	40	32.50	57	19.30	27	18.52	100	46.00	9	0.00	233	32.19
Alpha-HCH	28	100.00	61	93.44	11	100.00	133	91.73	1	100.00	234	93.59
Beta-HCH	28	92.86	61	60.66	11	90.91	133	70.68	1	0.00	234	71.37
Gamma-HCH	28	82.14	61	77.05	11	90.91	133	78.20	1	100.00	234	79.06
Delta-HCH	28	85.71	61	91.80	11	90.91	133	84.96	1	100.00	234	87.18
o,p-DDE	28	35.71	50	12.00	11	36.36	126	22.22	0	---	215	22.33
p,p-DDE	28	50.00	50	20.00	11	18.18	126	45.24	0	---	215	38.60
o,p-DDD	28	46.43	50	30.00	11	63.64	126	50.79	0	---	215	46.05
p,p-DDD	28	85.71	50	54.00	11	72.73	126	56.35	0	---	215	60.47
o,p-DDT	28	89.29	50	54.00	11	81.82	126	65.08	0	---	215	66.51
p,p-DDT	28	96.43	50	56.00	11	90.91	126	70.63	0	---	215	71.63
2-Chlorphenol	20	10.00	16	0.00	2	0.00	46	8.70	0	---	84	7.14
2,4-Dichlorphenol	20	0.00	16	0.00	2	0.00	46	6.52	0	---	84	3.57
2,4,6-Trichlorphenol	20	0.00	16	0.00	2	0.00	46	8.70	0	---	84	4.76
Pentachlorphenol	20	0.00	16	0.00	2	0.00	46	4.35	0	---	84	2.38
4-Chlor-3-Methylphenol	20	5.00	16	0.00	2	0.00	46	10.87	0	---	84	7.14
2-Nitrophenol	20	0.00	15	0.00	2	0.00	46	2.17	0	---	83	1.20
4-Nitrophenol	20	0.00	15	0.00	2	0.00	46	2.17	0	---	83	1.20
o-Nitrochlorbenzen	20	5.00	15	6.67	2	0.00	46	13.04	0	---	83	9.64
p-Nitrochlorbenzen	20	0.00	15	6.67	2	0.00	46	6.52	0	---	83	4.82
2,3-Dichlornitrobenzen	20	0.00	15	0.00	2	0.00	46	4.35	0	---	83	2.41
2,5-Dichlornitrobenzen	20	0.00	15	0.00	2	0.00	46	2.17	0	---	83	1.20
2,3,4-TrichlorNB	20	0.00	15	0.00	2	0.00	46	2.17	0	---	83	1.20
o-Chloranilin	20	30.00	35	14.29	2	50.00	82	34.15	0	---	139	28.78
p-Chloranilin	20	0.00	35	0.00	2	0.00	82	19.51	0	---	139	11.51
Dimethoat	20	0.00	32	0.00	2	0.00	81	1.23	0	---	135	0.74

II: Mittlere Emissionskonzentrationen (MEK, Angaben in µg/l) im Datensatz 9198M:

Landschaftseinheit:	Muldeau		Bergbaufolge		Siedlung		Chemie		Agrar		Gesamt	
	n>RG	MEK	n>RG	MEK	n>RG	MEK	n>RG	MEK	n>RG	MEK	n>RG	MEK
Dichlormethan	9	2.61	46	3.97	15	6.20	102	9.17	5	3.70	177	6.25
Trichlormethan	44	0.70	93	1.85	31	0.98	149	3.36	15	1.17	332	2.06
1,2-Dichlorethan	6	17.75	12	7.73	7	6.85	72	13.18	1	3.00	98	11.50
1,1,1-Trichlorethan	4	0.02	16	0.03	5	0.03	55	0.05	0	---	80	0.04
Tetrachlormethan	38	0.31	94	0.06	25	0.22	148	0.86	13	0.01	318	0.27
Trichlorethen	45	0.84	88	1.22	34	1.34	145	6.65	16	0.14	328	2.92
Tetrachlorethen	50	3.06	105	4.50	36	2.95	154	11.40	16	0.99	361	5.60
cis 1,2-Dichlorethen	9	6.35	15	49.35	17	16.50	79	23.00	1	14.25	121	19.00
trans 1,2-Dichlorethen	2	8.45	8	15.10	5	16.80	29	19.10	0	---	44	16.80
1,1,1,2-Tetrachlorethan	26	0.03	69	0.09	18	0.05	118	0.34	6	0.05	237	0.15
1,1,2,2-Tetrachlorethan	29	1.70	33	13.00	17	2.20	84	5.30	0	---	163	4.20
Vinylchlorid	32	8.10	52	14.25	21	41.00	109	18.00	1	17.00	215	17.00
Benzen	31	3.85	40	2.35	18	8.96	118	9.90	13	1.33	220	5.20
Toluen	25	1.80	36	1.60	16	1.46	73	2.50	9	1.30	159	1.80
Ethylbenzen	18	1.58	19	1.70	11	1.50	61	3.25	5	1.04	114	2.03
o-Xylen	7	3.60	17	3.80	10	1.90	39	4.65	3	3.90	76	3.80
m-Xylen	7	2.60	5	1.60	9	2.50	38	3.70	1	2.31	60	2.90
p-Xylen	4	4.00	0	---	4	3.80	31	3.00	0	---	39	3.10
Monochlorbenzen	42	11.72	65	8.60	24	12.73	128	65.30	11	6.60	270	18.47
1,3-Dichlorbenzen	25	2.10	23	1.80	8	2.25	88	4.11	7	2.80	151	2.70
1,4-Dichlorbenzen	28	3.38	45	2.20	18	2.27	113	4.70	4	4.10	208	3.43
1,2-Dichlorbenzen	35	4.00	68	3.18	30	2.84	128	4.93	11	3.80	272	3.85
1,3,5-Trichlorbenzen	15	0.21	19	0.09	14	0.05	57	0.11	1	0.09	106	0.10
1,2,4-Trichlorbenzen	17	0.15	31	0.11	10	0.12	69	0.28	2	0.61	129	0.19
1,2,3-Trichlorbenzen	17	0.04	26	0.05	11	0.03	57	0.10	2	0.04	113	0.06
1,2,4,5/1,2,3,5-TetraCB	25	0.03	31	0.04	17	0.03	74	0.09	1	0.01	148	0.05
1,2,3,4-TetraCB	30	0.05	37	0.24	17	0.06	72	0.32	2	0.02	158	0.13
Pentachlorbenzen	13	0.01	11	0.01	6	0.01	43	0.01	1	0.01	74	0.01
Hexachlorbenzen	13	0.01	11	0.00	5	0.01	46	0.01	0	---	75	0.01
Alpha-HCH	28	1.45	57	0.89	11	1.10	122	1.13	1	0.20	219	1.10
Beta-HCH	26	0.18	37	0.16	10	0.16	94	0.31	0	---	167	0.23
Gamma-HCH	23	0.05	47	0.39	10	0.18	104	0.30	1	0.06	185	0.28
Delta-HCH	24	0.12	56	1.19	10	0.66	113	0.76	1	0.69	204	0.82
o,p-DDE	10	0.03	6	0.02	4	0.02	28	0.02	0	---	48	0.03
p,p-DDE	14	0.02	10	0.01	2	0.01	57	0.02	0	---	83	0.02
o,p-DDD	13	0.03	15	0.02	7	0.02	64	0.03	0	---	99	0.02
p,p-DDD	24	0.02	27	0.02	8	0.03	71	0.03	0	---	130	0.03
o,p-DDT	25	0.05	27	0.04	9	0.05	82	0.07	0	---	143	0.06
p,p-DDT	27	0.08	28	0.05	10	0.06	89	0.09	0	---	154	0.08
2-Chlorphenol	2	7.75	0	---	0	---	4	3.15	0	---	6	3.15
2,4-Dichlorphenol	0	---	0	---	0	---	3	3.30	0	---	3	3.30
2,4,6-Trichlorphenol	0	---	0	---	0	---	4	3.55	0	---	4	3.55
Pentachlorphenol	0	---	0	---	0	---	2	10.35	0	---	2	10.35
4-Chlor-3-Methylphenol	1	96.00	0	---	0	---	5	74.00	0	---	6	85.00
2-Nitrophenol	0	---	0	---	0	---	1	2.00	0	---	1	2.00
4-Nitrophenol	0	---	0	---	0	---	1	190.00	0	---	1	190.00
o-Nitrochlorbenzen	1	0.16	1	4.10	0	---	6	5.31	0	---	8	2.36
p-Nitrochlorbenzen	0	---	1	0.68	0	---	3	14.00	0	---	4	8.85
2,3-Dichlornitrobenzen	0	---	0	---	0	---	2	18.78	0	---	2	18.78
2,5-Dichlornitrobenzen	0	---	0	---	0	---	1	34.00	0	---	1	34.00
2,3,4-TrichlorNB	0	---	0	---	0	---	1	24.00	0	---	1	24.00
o-Chloranilin	6	1.60	5	1.50	1	0.72	28	67.50	0	---	40	18.00
p-Chloranilin	0	---	0	---	0	---	16	41.50	0	---	16	41.50
Dimethoat	0	---	0	---	0	---	1	24.00	0	---	1	24.00

A 4.3: Emissions-Nachweishäufigkeiten und mittlere Emissionskonzentrationen in den Grundwasserleitern

I: Emissions-Nachweishäufigkeit (ENH, Angaben in %) im Datensatz 9198M:

Grundwasserleiter:	9198M_GWL100		9198M_GWL500		9198M gesamt	
	n	ENH	n	ENH	n	ENH
Dichlormethan	232	49.57	138	44.93	371	47.71
Trichlormethan	232	91.38	138	86.23	371	89.49
1,2-Dichlorethan	220	34.55	134	16.42	354	27.68
1,1,1-Trichlorethan	232	26.29	138	13.77	371	21.56
Tetrachlormethan	232	85.34	138	86.96	371	85.71
Trichlorethen	232	86.21	138	92.03	371	88.41
Tetrachlorethen	232	96.98	138	97.83	371	97.30
cis 1,2-Dichlorethen	208	40.87	123	28.46	332	36.45
trans 1,2-Dichlorethen	162	16.67	84	20.24	246	17.89
1,1,1,2-Tetrachlorethan	221	74.66	134	53.73	355	66.76
1,1,2,2-Tetrachlorethan	134	75.37	82	75.61	216	75.46
Vinylchlorid	219	61.64	132	60.61	352	61.08
Benzen	230	65.22	137	50.36	368	59.78
Toluen	220	46.82	126	43.65	347	45.82
Ethylbenzen	230	31.74	137	29.93	368	30.98
o-Xylen	217	22.12	128	21.88	346	21.97
m-Xylen	143	30.77	82	19.51	225	26.67
p-Xylen	124	23.39	74	13.51	198	19.70
Monochlorbenzen	203	84.24	120	82.50	323	83.59
1,3-Dichlorbenzen	203	51.23	120	39.17	323	46.75
1,4-Dichlorbenzen	203	65.02	120	63.33	323	64.40
1,2-Dichlorbenzen	203	83.74	120	85.00	323	84.21
1,3,5-Trichlorbenzen	143	48.95	90	40.00	233	45.49
1,2,4-Trichlorbenzen	143	53.85	90	57.78	233	55.36
1,2,3-Trichlorbenzen	143	44.76	90	54.44	233	48.50
1,2,4,5- und 1,2,3,5-Tetrachlorbenzen	133	65.41	83	73.49	216	68.52
1,2,3,4-Tetrachlorbenzen	143	67.13	90	68.89	233	67.81
Pentachlorbenzen	143	32.17	90	31.11	233	31.76
Hexachlorbenzen	143	32.17	90	32.22	233	32.19
Alpha-HCH	151	90.73	83	98.80	234	93.59
Beta-HCH	151	67.55	83	78.31	234	71.37
Gamma-HCH	151	75.50	83	85.54	234	79.06
Delta-HCH	151	84.11	83	92.77	234	87.18
o,p-DDE	134	20.90	81	24.69	215	22.33
p,p-DDE	134	42.54	81	32.10	215	38.60
o,p-DDD	134	47.01	81	44.44	215	46.05
p,p-DDD	134	58.96	81	62.96	215	60.47
o,p-DDT	134	66.42	81	66.67	215	66.51
p,p-DDT	134	69.40	81	75.31	215	71.63
2-Chlorphenol	47	10.64	37	2.70	84	7.14
2,4-Dichlorphenol	47	4.26	37	2.70	84	3.57
2,4,6-Trichlorphenol	47	4.26	37	5.41	84	4.76
Pentachlorphenol	47	4.26	37	0.00	84	2.38
4-Chlor-3-Methylphenol	47	8.51	37	5.41	84	7.14
2-Nitrophenol	47	2.13	36	0.00	83	1.20
4-Nitrophenol	47	0.00	36	2.78	83	1.20
o-Nitrochlorbenzen	47	4.26	36	16.67	83	9.64
p-Nitrochlorbenzen	47	4.26	36	5.56	83	4.82
2,3-Dichlornitrobenzen	47	4.26	36	0.00	83	2.41
2,5-Dichlornitrobenzen	47	2.13	36	0.00	83	1.20
2,3,4-Trichlornitrobenzen	47	2.13	36	0.00	83	1.20
o-Chloranilin	83	25.30	56	33.93	139	28.78
p-Chloranilin	83	9.64	56	14.29	139	11.51
Dimethoat	80	1.25	55	0.00	135	0.74

II: Mittlere Emissionskonzentrationen (MEK, Angaben im µg/l) im Datensatz 9198M:

Grundwasserleiter:	9198M_GWL100		9198M_GWL500		9198M gesamt	
	n>RG	MEK	n>RG	MEK	n>RG	MEK
Dichlormethan	115	6.90	62	5.89	177	6.25
Trichlormethan	212	2.18	119	1.98	332	2.06
1,2-Dichlorethan	76	12.33	22	9.56	98	11.50
1,1,1-Trichlorethan	61	0.04	19	0.05	80	0.04
Tetrachlormethan	198	0.42	120	0.07	318	0.27
Trichlorethen	200	3.54	127	2.40	328	2.92
Tetrachlorethen	225	5.60	135	5.80	361	5.60
cis 1,2-Dichlorethen	85	14.25	35	26.00	121	19.00
trans 1,2-Dichlorethen	27	16.60	17	18.20	44	16.80
1,1,1,2-Tetrachlorethan	165	0.17	72	0.11	237	0.15
1,1,2,2-Tetrachlorethan	101	2.30	62	10.80	163	4.20
Vinylchlorid	135	15.00	80	20.25	215	17.00
Benzen	150	5.75	69	4.40	220	5.20
Toluen	103	1.90	55	1.70	159	1.80
Ethylbenzen	73	2.60	41	1.63	114	2.03
o-Xylen	48	3.84	28	3.35	76	3.80
m-Xylen	44	2.60	16	3.10	60	2.90
p-Xylen	29	3.00	10	3.95	39	3.10
Monochlorbenzen	171	25.30	99	13.20	270	18.47
1,3-Dichlorbenzen	104	2.80	47	2.20	151	2.70
1,4-Dichlorbenzen	132	4.30	76	2.60	208	3.43
1,2-Dichlorbenzen	170	4.10	102	3.53	272	3.85
1,3,5-Trichlorbenzen	70	0.10	36	0.09	106	0.10
1,2,4-Trichlorbenzen	77	0.18	52	0.21	129	0.19
1,2,3-Trichlorbenzen	64	0.06	49	0.05	113	0.06
1,2,4,5- und 1,2,3,5-Tetrachlorbenzen	87	0.05	61	0.06	148	0.05
1,2,3,4-Tetrachlorbenzen	96	0.07	62	0.30	158	0.13
Pentachlorbenzen	46	0.01	28	0.01	74	0.01
Hexachlorbenzen	46	0.01	29	0.01	75	0.01
Alpha-HCH	137	0.68	82	1.43	219	1.10
Beta-HCH	102	0.23	65	0.21	167	0.23
Gamma-HCH	114	0.23	71	0.38	185	0.28
Delta-HCH	127	0.54	77	1.30	204	0.82
o,p-DDE	28	0.03	20	0.02	48	0.03
p,p-DDE	57	0.02	26	0.02	83	0.02
o,p-DDD	63	0.02	36	0.03	99	0.02
p,p-DDD	79	0.02	51	0.03	130	0.03
o,p-DDT	89	0.05	54	0.06	143	0.06
p,p-DDT	93	0.07	61	0.11	154	0.08
2-Chlorphenol	5	3.40	1	2.90	6	3.15
2,4-Dichlorphenol	2	14.15	1	1.90	3	3.30
2,4,6-Trichlorphenol	2	3.25	2	15.90	4	3.55
Pentachlorphenol	2	10.35	0	---	2	10.35
4-Chlor-3-Methylphenol	4	59.50	2	172.00	6	85.00
2-Nitrophenol	1	2.00	0	---	1	2.00
4-Nitrophenol	0	---	1	190.00	1	190.00
o-Nitrochlorbenzen	2	956.00	6	0.47	8	2.36
p-Nitrochlorbenzen	2	67.00	2	2.19	4	8.85
2,3-Dichlornitrobenzen	2	18.78	0	---	2	18.78
2,5-Dichlornitrobenzen	1	34.00	0	---	1	34.00
2,3,4-Trichlornitrobenzen	1	24.00	0	---	1	24.00
o-Chloranilin	21	14.00	19	52.00	40	18.00
p-Chloranilin	8	19.50	8	62.75	16	41.50
Dimethoat	1	24.00	0	---	1	24.00

A 4.4: Emissions-Nachweishäufigkeiten und mittlere Emissionskonzentrationen in den Beprobungskampagnen vom Herbst 1996 und Sommer 1997

I: Kontaminationskriterien und Gesamtbewertung im Herbst 1996 (Datensatz H96_(H96∩S97), sortiert nach der Gesamtbewertungszahl BZ_{ges}):

	n	n>RG	ENH [%]	MEK [$\mu\text{g/l}$]	BZ_{ges}
Vinylchlorid	122	118	96.72	31.50	8126
Tetrachlorethen	122	119	97.54	10.00	7041
Monochlorbenzen	122	97	79.51	35.00	6781
Trichlorethen	122	109	89.34	7.60	6203
Alpha-HCH	92	86	93.48	2.20	5292
1,1,2,2-Tetrachlorethan	122	99	81.15	4.20	5143
1,2-Dichlorbenzen	122	87	71.31	5.70	4752
Trichlormethan	122	86	70.49	5.00	4603
Delta-HCH	92	80	86.96	1.04	4251
Benzen	122	69	56.56	10.00	4112
cis 1,2-Dichlorethen	122	60	49.18	27.00	4093
Tetrachlormethan	122	101	82.79	0.64	3638
1,4-Dichlorbenzen	122	69	56.56	3.70	3529
Beta-HCH	92	80	86.96	0.26	3011
Dichlormethan	122	47	38.52	15.00	2987
Gamma-HCH	92	78	84.78	0.28	2986
1,2-Dichlorethan	122	47	38.52	11.00	2862
Toluen	122	57	46.72	2.40	2715
1,2,3,4-Tetrachlorbenzen	122	91	74.59	0.28	2645
1,3-Dichlorbenzen	122	47	38.52	3.40	2389
o-Chloranilin	57	16	28.07	27.50	2376
1,1,1,2-Tetrachlorethan	122	74	60.66	0.30	2201
p,p-DDT	92	81	88.04	0.08	1932
1,2,4-Trichlorbenzen	122	69	56.56	0.22	1872
Ethylbenzen	122	36	29.51	3.10	1815
m-Xylen	122	33	27.05	2.90	1650
o,p-DDT	92	74	80.43	0.05	1419
1,2,4,5- und 1,2,3,5-Tetrachlorbenzen	122	86	70.49	0.06	1397
1,3,5-Trichlorbenzen	122	60	49.18	0.12	1322
1,2,3-Trichlorbenzen	122	64	52.46	0.08	1211
o-Xylen	122	21	17.21	5.20	1179
p-Xylen	122	21	17.21	4.90	1168
4-Chlor-3-Methylphenol	57	4	7.02	183.00	809
p,p-DDD	92	69	75.00	0.03	787
p-Chloranilin	57	4	7.02	107.00	765
1,1,1-Trichlorethan	122	33	27.05	0.08	623
o,p-DDD	92	48	52.17	0.03	572
p-Nitrochlorbenzen	57	3	5.26	14.00	468
2-Chlorphenol	57	4	7.02	2.60	462
o-Nitrochlorbenzen	57	5	8.77	0.63	422
p,p-DDE	92	37	40.22	0.02	410
2,4-Dichlorphenol	57	3	5.26	3.30	376
o,p-DDE	92	29	31.52	0.03	374
2,3-Dichlornitrobenzen	57	2	3.51	18.78	350
Pentachlorphenol	57	2	3.51	10.35	323
4-Nitrophenol	57	1	1.75	190.00	278
2,4,6-Trichlorphenol	57	2	3.51	3.55	274
2,5-Dichlornitrobenzen	57	1	1.75	34.00	230
2,3,4-Trichlornitrobenzen	57	1	1.75	24.00	220
Dimethoat	57	1	1.75	24.00	220
2-Nitrophenol	57	1	1.75	2.00	151
Pentachlorbenzen	122	42	34.43	0.01	131
Hexachlorbenzen	122	40	32.79	0.01	34

II: Kontaminationskriterien und Gesamtbewertung im Sommer 1997 (Datensatz S97_(H96∩S97), sortiert nach der Gesamtbewertungszahl BZ_{ges}):

	n	n>RG	ENH [%]	MEK [$\mu\text{g/l}$]	BZ _{ges}
Monochlorbenzen	105	89	84.76	29.20	7743
Tetrachlorethen	122	122	100.00	4.95	7113
1,2-Dichlorbenzen	105	86	81.90	3.90	5617
Trichlormethan	122	112	91.80	0.87	4724
Trichlorethen	122	109	89.34	0.90	4639
Benzen	112	60	53.57	12.50	4409
1,4-Dichlorbenzen	105	64	60.95	5.25	4404
Alpha-HCH	60	53	88.33	0.60	4181
Delta-HCH	60	47	78.33	0.89	4064
Dichlormethan	122	59	48.36	12.80	4001
cis 1,2-Dichlorethen	122	45	36.89	63.70	3752
Tetrachlormethan	122	113	92.62	0.16	2997
1,3-Dichlorbenzen	105	39	37.14	4.03	2599
Gamma-HCH	60	34	56.67	0.43	2484
1,2-Dichlorethan	122	35	28.69	12.70	2404
trans 1,2-Dichlorethen	122	30	24.59	18.05	2173
o-Chloranilin	30	6	20.00	44.00	1993
1,1,1,2-Tetrachlorethan	122	86	70.49	0.08	1734
Beta-HCH	60	23	38.33	0.44	1705
Toluen	112	22	19.64	9.60	1607
Ethylbenzen	112	19	16.96	14.50	1482
Vinylchlorid	121	17	14.05	15.00	1247
o-Xylen	112	13	11.61	21.40	1095
p,p-DDT	45	6	13.33	1.01	755
p-Chloranilin	29	2	6.90	37.00	735
1,1,1-Trichlorethan	122	18	14.75	0.08	383
o,p-DDT	45	3	6.67	0.61	361
o,p-DDE	45	1	2.22	1.00	170
o,p-DDD	45	1	2.22	1.00	170
p,p-DDE	45	1	2.22	0.74	159
p,p-DDD	45	1	2.22	0.28	124
Dimethoat	27	0	0.00	0.01	1
Parathionmethyl	30	0	0.00	0.01	1

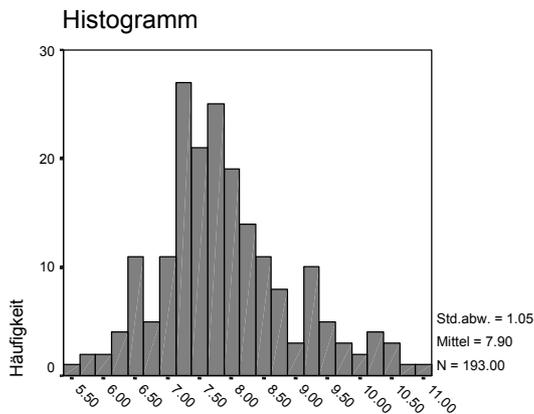
A 5.1: Deskriptive Statistik und Histogramme der Vor-Ort-, Summenparameter und Summenangaben pro Stoff- gruppe

Merkmale: Vor-Ort-Parameter (T, Lf, Sal, pH, Eh, O2), Summenparameter (LBT, AOX, CSB, DOC, TOC, PI), Summenangaben für LHKW, BTEX, CB, HCH;

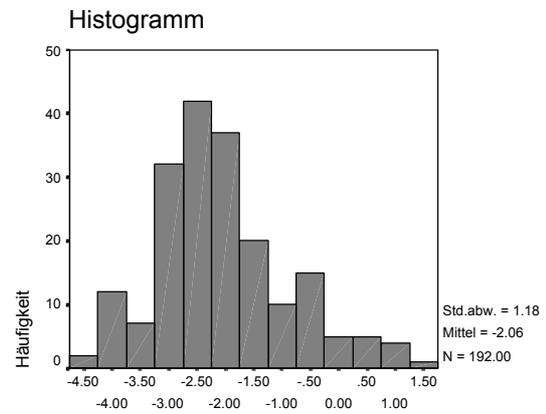
Deskriptive Statistik (Datensatz H96):

	n	Mittelwert	Median	Spannweite	Minimum	Maximum	25-Perzentil	75Perzentil
T [°C]	193	12.66	12.40	13.00	8.40	21.40	11.15	14.20
pH	193	6.09	6.09	10.09	1.61	11.70	5.74	6.43
Lf [µS/cm]	193	5203.13	2280.00	64759.00	241.00	65000.00	1370.00	4595.00
O2 [mg/l]	193	0.50	0.09	6.05	0.00	6.05	0.03	0.39
Eh [mV]	193	-37.20	10.00	733.00	-402.00	331.00	-146.50	54.00
Sal [%]	193	0.29	0.11	4.00	0.00	4.00	0.06	0.23
LBT	198	60.87	2.00	4095.00	1.00	4096.00	1.00	6.00
AOX [mg/l]	198	11.53	0.29	703.60	0.01	703.60	0.08	1.11
CSB [mg O2/l]	198	212.72	44.00	8076.00	4.00	8080.00	21.00	145.25
DOC [mg C/l]	198	46.02	10.90	2734.90	0.10	2735.00	5.93	32.00
TOC [mg C/l]	198	59.98	14.70	3336.50	3.50	3340.00	7.78	39.43
PI [mg/l]	198	3.30	0.04	548.99	0.02	549.00	0.03	0.07
LHKW [µg/l]	198	3480.54	94.67	204301.65	0.02	204301.66	34.76	410.10
BTEX [µg/l]	198	269.96	4.70	22712.20	0.80	22713.00	0.80	20.13
CB [µg/l]	198	1422.95	29.22	74221.20	0.00	74221.20	9.78	168.04
HCH [µg/l]	148	25.33	3.36	1538.00	0.01	1538.00	0.48	6.62

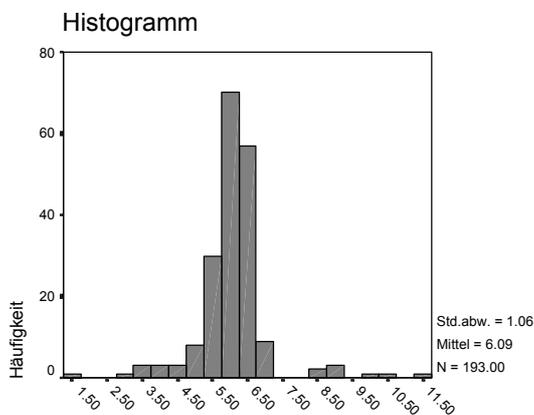
Statistische Verteilung (Datensatz H96):



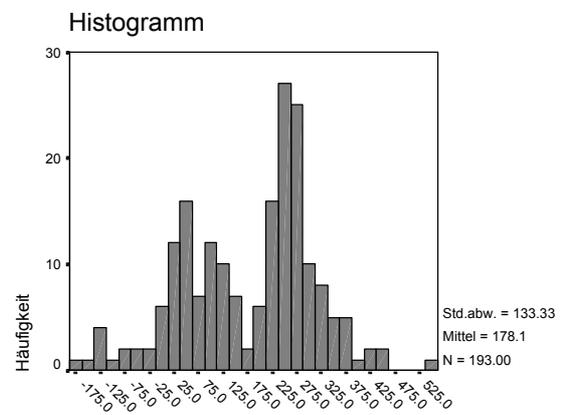
LF (In-transformiert)



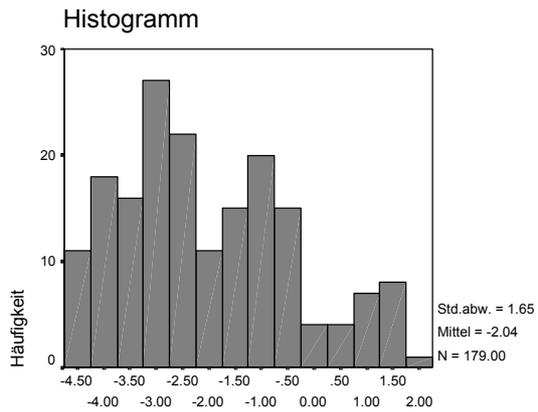
Sal (In-transformiert)



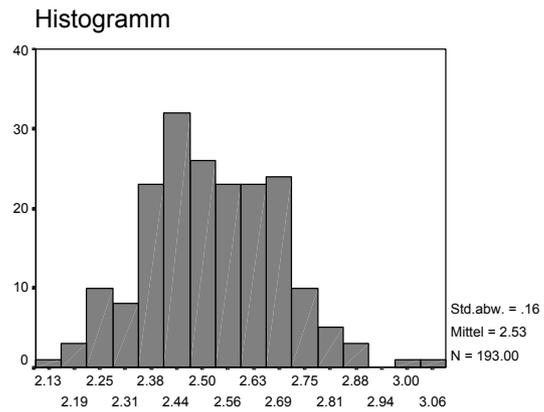
pH



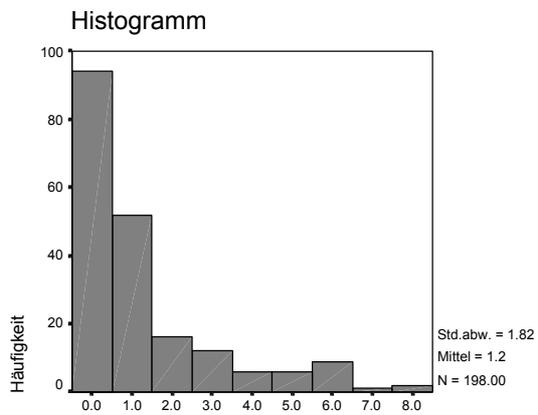
Eh



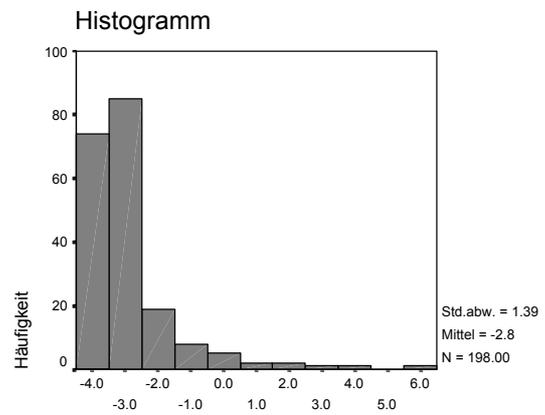
O2 (ln-transformiert)



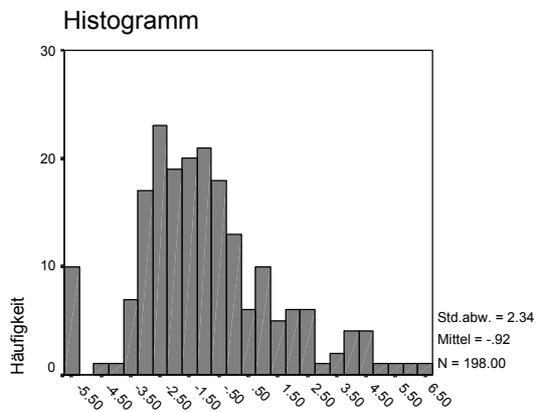
T (ln-transformiert)



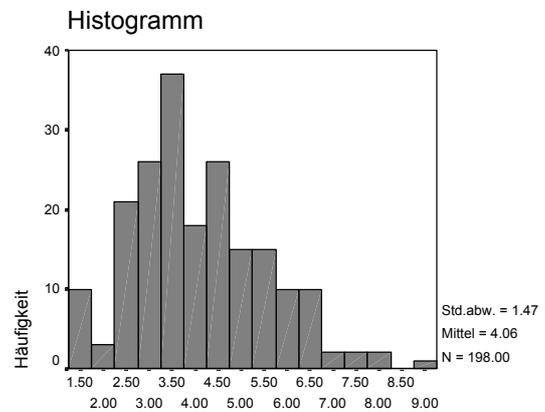
LBT (ln-transformiert)



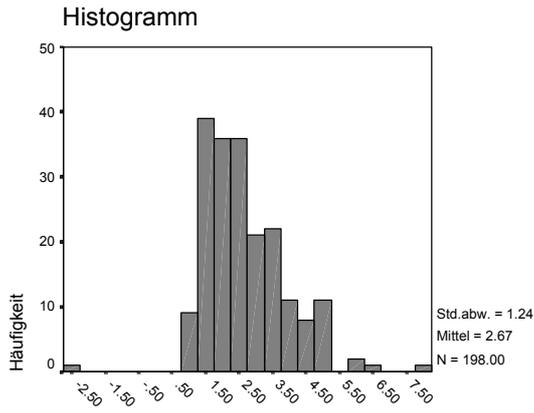
PI (ln-transformiert)



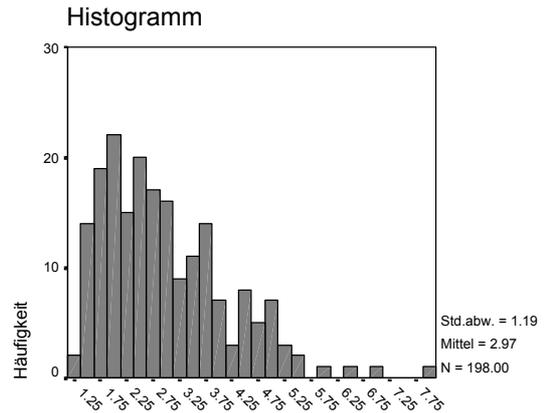
AOX (ln-transformiert)



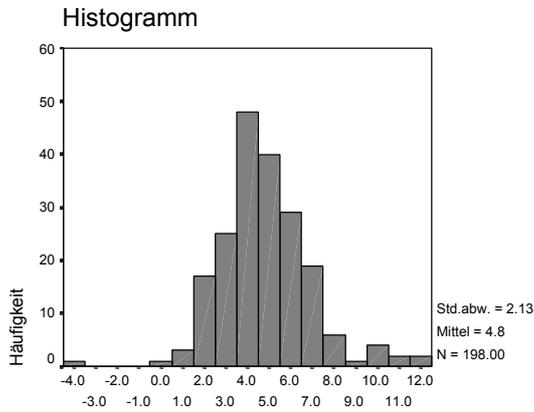
CSB (ln-transformiert)



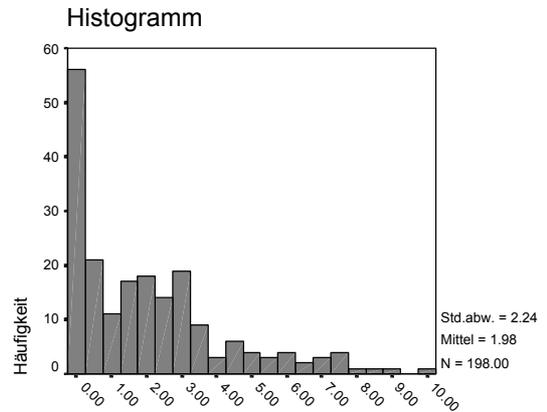
DOC (In-transformiert)



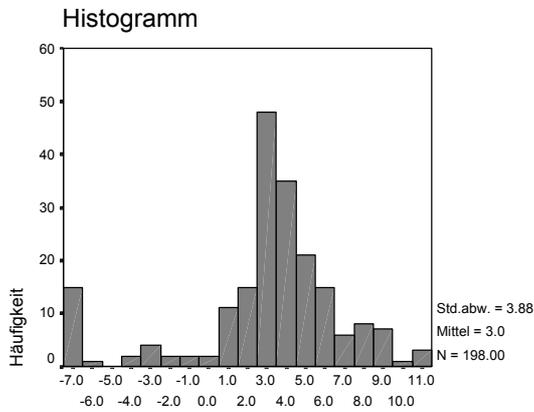
TOC (In-transformiert)



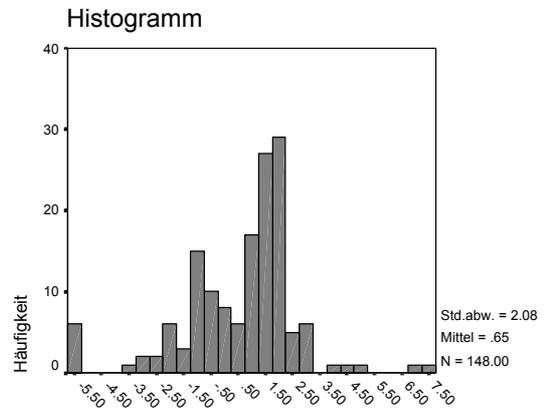
Summe LHKW (In-transformiert)



Summe BTEX (In-transformiert)



Summe CB (In-transformiert)



Summe HCH (In-transformiert)

A 5.2: Hauptkomponentenanalysen mit Vor-Ort-, Summenparametern und Summenangaben pro Stoffgruppe

Methode: Hauptkomponentenanalyse mit Varimax-Rotation

Die folgenden Tabellen zeigen die Anteile der erklärten Gesamtvarianz, die Kommunalitäten und Faktorladungen in der rotierten Komponentenmatrix. Absolute Faktorladungen > 0.5 sind hervorgehoben.

Die Zusammensetzung der Datensätze ist in den Kapiteln 5.1.2 und 5.1.3 erläutert.

I. Datensatz H96, logarithmierte Werte (mit Ausnahme von pH und Eh), n = 143.

Hauptkomponente	1	2	3	4	5	Summe
Anteil erklärter Varianz [%]	38.05	14.10	10.48	7.37	6.45	76.45
Eigenwerte	6.09	2.26	1.68	1.18	1.03	Kommunalitäten
pH	0.12	-0.05	-0.10	-0.76	-0.24	0.66
Eh	-0.08	-0.11	-0.04	0.85	0.03	0.75
Leitfähigkeit	0.27	0.12	0.89	0.05	0.09	0.89
Sauerstoff	-0.06	0.01	-0.40	0.10	-0.57	0.50
Salinität	0.27	0.13	0.89	0.07	0.09	0.89
Wassertemperatur	0.21	0.29	0.47	0.14	0.41	0.54
Leuchtbakterientest	0.47	0.70	0.14	-0.28	-0.04	0.81
AOX	0.62	0.45	-0.01	0.46	-0.07	0.80
CSB	0.71	0.28	0.45	-0.01	0.08	0.79
DOC	0.92	0.14	0.16	-0.13	0.07	0.92
TOC	0.84	0.24	0.36	-0.11	0.06	0.91
Phenolindex	0.02	0.62	0.51	-0.16	-0.20	0.71
Summe LHKW	0.33	0.58	0.15	0.55	-0.05	0.77
Summe BTEX	0.27	0.83	0.16	0.10	0.00	0.80
Summe CB	0.12	0.77	0.03	0.04	0.41	0.79
Summe HCH	-0.01	0.02	-0.06	0.27	0.80	0.71

II. Datensatz H96, Rangzahlen, n = 143.

Hauptkomponente	1	2	3	4	5	Summe [%]
Anteil erklärter Varianz [%]	38.53	11.92	11.21	7.41	5.50	74.58
Eigenwerte	6.16	1.91	1.79	1.19	0.88	Kommunalitäten
pH	-0.11	-0.05	-0.12	-0.75	-0.15	0.61
Eh	-0.06	-0.01	-0.15	0.86	0.14	0.78
Leitfähigkeit	0.31	0.08	0.89	0.01	0.15	0.91
Sauerstoff	-0.13	0.05	-0.36	-0.03	-0.68	0.61
Salinität	0.31	0.10	0.89	0.03	0.15	0.92
Wassertemperatur	0.19	0.39	0.51	0.11	0.33	0.57
Leuchtbakterientest	0.54	0.63	0.01	-0.25	-0.02	0.76
AOX	0.49	0.57	0.10	0.37	-0.19	0.75
CSB	0.82	0.16	0.34	0.05	0.14	0.83
DOC	0.88	0.22	0.23	0.06	0.04	0.88
TOC	0.88	0.23	0.29	0.06	0.09	0.92
Phenolindex	0.13	0.50	0.51	-0.13	-0.12	0.57
Summe LHKW	0.20	0.64	0.25	0.47	-0.07	0.73
Summe BTEX	0.19	0.83	0.11	0.07	0.02	0.74
Summe CB	0.11	0.77	0.06	-0.02	0.33	0.71
Summe HCH	0.01	0.12	-0.01	0.25	0.75	0.64

III. Datensatz H96_(H96∩S97), logarithmierte Werte (mit Ausnahme von pH und Eh), n = 89.

Hauptkomponente	1	2	3	4	5	Summe
Anteil erklärter Varianz [%]	40.99	13.09	9.79	7.27	6.25	77.38
Eigenwerte	6.56	2.09	1.57	1.16	1.00	Kommunalitäten
pH	0.12	-0.08	-0.12	-0.80	-0.23	0.73
Eh	0.01	-0.07	-0.06	0.89	0.02	0.80
Leitfähigkeit	0.23	0.14	0.89	0.05	0.03	0.86
Sauerstoff	-0.17	0.00	-0.43	0.02	-0.45	0.42
Salinität	0.23	0.15	0.88	0.08	0.04	0.86
Wassertemperatur	0.31	0.16	0.44	0.00	0.47	0.54
Leuchtbakterientest	0.46	0.76	0.14	-0.23	-0.02	0.86
AOX	0.76	0.45	0.08	0.21	0.01	0.82
CSB	0.63	0.33	0.50	-0.07	0.10	0.77
DOC	0.91	0.12	0.20	-0.17	0.08	0.91
TOC	0.75	0.28	0.46	-0.14	0.06	0.87
Phenolindex	-0.06	0.62	0.55	-0.10	-0.25	0.76
Summe LHKW	0.48	0.60	0.14	0.40	0.01	0.77
Summe BTEX	0.41	0.80	0.20	0.06	-0.02	0.86
Summe CB	0.12	0.78	0.06	0.06	0.38	0.77
Summe HCH	-0.08	0.04	-0.09	0.25	0.83	0.78

IV. Datensatz H96, ohne Werte unterhalb der Nachweisgrenze, logarithmierte Werte (mit Ausnahme von pH, Eh), n = 87.

Hauptkomponente	1	2	3	4	5	Summe
Anteil erklärter Varianz [%]	41.83	13.16	11.42	6.69	5.86	78.96
Eigenwerte	6.69	2.11	1.83	1.07	0.94	Kommunalitäten
pH	-0.16	0.11	-0.34	-0.70	0.13	0.67
Eh	-0.16	-0.01	-0.06	0.92	-0.01	0.88
Leitfähigkeit	0.12	0.35	0.86	-0.01	-0.16	0.90
Sauerstoff	-0.02	-0.22	-0.13	-0.07	0.89	0.87
Salinität	0.15	0.37	0.84	0.01	-0.16	0.89
Wassertemperatur	0.35	0.09	0.64	0.13	-0.14	0.58
Leuchtbakterientest	0.69	0.53	-0.02	-0.21	0.19	0.84
AOX	0.52	0.53	0.34	0.41	0.13	0.86
CSB	0.26	0.79	0.41	0.08	-0.12	0.88
DOC	0.21	0.90	0.22	-0.04	-0.14	0.93
TOC	0.18	0.92	0.25	-0.05	-0.16	0.96
Phenolindex	0.76	0.19	0.18	-0.10	-0.30	0.74
Summe LHKW	0.53	0.29	0.28	0.48	0.23	0.74
Summe BTEX	0.84	0.26	0.12	0.12	0.04	0.80
Summe CB	0.84	0.04	0.06	0.00	-0.04	0.71
Summe HCH	-0.08	0.11	0.56	0.23	0.16	0.41

A 5.3: Deskriptive Statistik und Histogramme von ausgewählten Einzelstoffen

Stoffe: Benzen, Monochlorbenzen (MCB), 1,2-Dichlorbenzen (12DCB), 1,4-Dichlorbenzen (14DCB), alpha-HCH (aHCH) und delta-HCH (dHCH).

Deskriptive Statistik, Datensatz H96

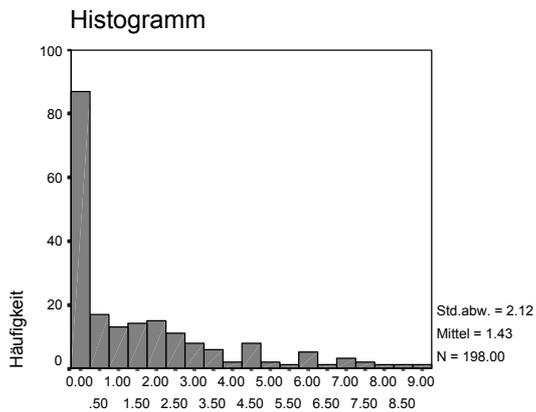
	n	Mittelwert	Median	Spannweite	Minimum	Maximum	25-Perzentil	75Perzentil
DCM [$\mu\text{g/l}$]	198	671.76	1.20	112998.80	1.20	113000.00	1.20	7.15
TCM [$\mu\text{g/l}$]	198	759.74	1.50	83999.96	0.04	84000.00	0.04	8.23
TCE [$\mu\text{g/l}$]	198	369.53	5.25	36799.98	0.02	36800.00	0.42	16.25
PCE [$\mu\text{g/l}$]	198	380.82	6.90	60000.00	0.00	60000.00	0.45	31.50
Benzen [$\mu\text{g/l}$]	198	127.54	1.85	6399.20	0.80	6400.00	0.80	10.25
MCB [$\mu\text{g/l}$]	198	1197.06	18.50	61999.00	1.00	62000.00	4.25	121.50
14DCB [$\mu\text{g/l}$]	198	60.49	2.00	6399.20	0.80	6400.00	0.80	4.63
12DCB [$\mu\text{g/l}$]	198	69.16	3.25	5599.50	0.50	5600.00	0.50	7.13
aHCH [$\mu\text{g/l}$]	148	8.81	1.65	560.00	0.01	560.00	0.19	3.00
dHCH [$\mu\text{g/l}$]	148	8.21	0.46	530.00	0.01	530.00	0.06	1.70

Deskriptive Statistik, Datensatz S97

	n	Mittelwert	Median	Spannweite	Minimum	Maximum	25-Perzentil	75-Perzentil
DCM [$\mu\text{g/l}$]	210	116.21	1.20	7998.80	1.20	8000.00	1.20	7.23
TCM [$\mu\text{g/l}$]	210	509.76	.82	76999.96	0.04	77000.00	0.17	2.75
TCE [$\mu\text{g/l}$]	210	225.69	.68	32999.99	0.01	33000.00	0.21	4.23
PCE [$\mu\text{g/l}$]	210	147.62	4.60	21999.44	0.56	22000.00	2.40	12.18
Benzen [$\mu\text{g/l}$]	186	661.38	1.65	89468.20	0.80	89469.00	0.80	12.15
MCB [$\mu\text{g/l}$]	167	1372.61	24.90	49999.00	1.00	50000.00	3.90	155.01
14DCB [$\mu\text{g/l}$]	167	90.08	2.60	7899.20	0.80	7900.00	0.80	10.80
12DCB [$\mu\text{g/l}$]	167	109.94	3.60	8899.50	0.50	8900.00	2.10	7.50
aHCH [$\mu\text{g/l}$]	116	3.36	0.51	200.00	0.00	200.00	0.10	1.35
dHCH [$\mu\text{g/l}$]	116	2.70	0.63	180.00	0.00	180.00	0.16	1.40

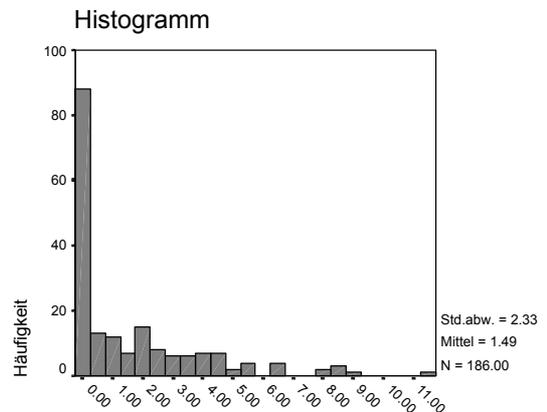
Statistische Verteilung:

Datensatz H96

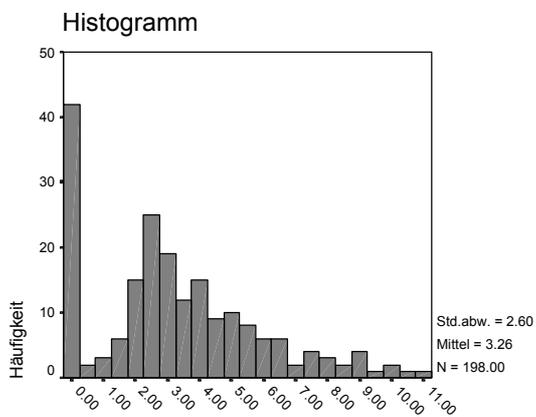


Benzen (ln-transformiert)

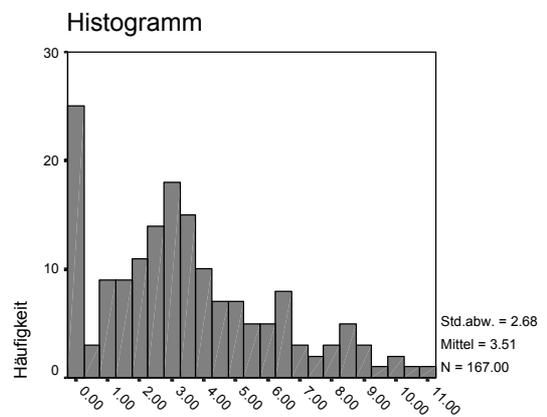
Datensatz S97



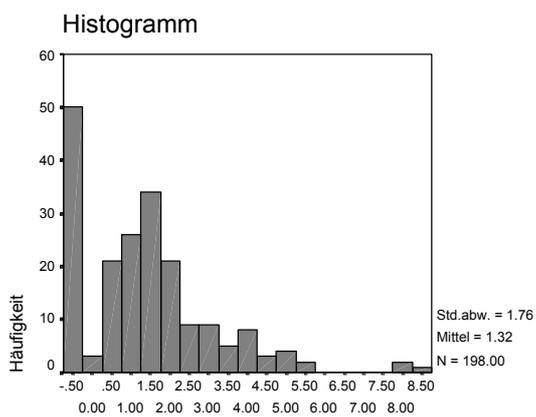
Benzen (ln-transformiert)



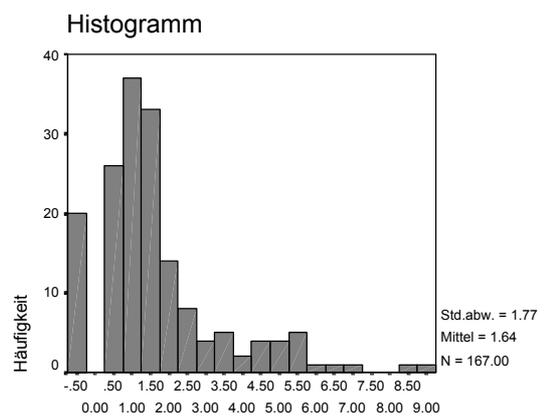
MCB (ln-transformiert)



MCB (ln-transformiert)

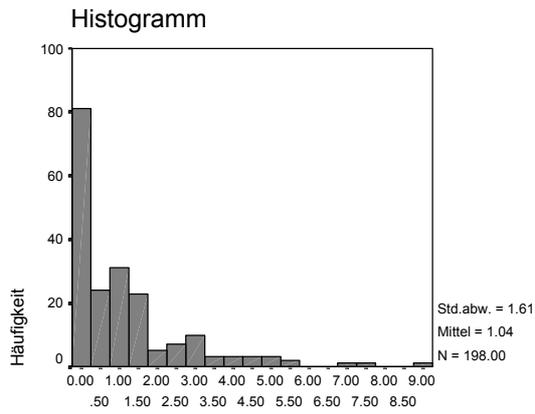


12DCB (ln-transformiert)

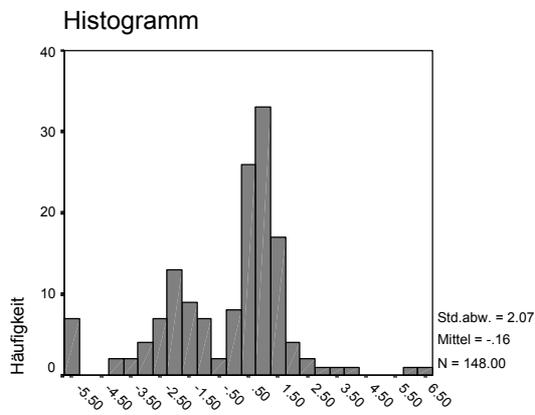


12DCB (ln-transformiert)

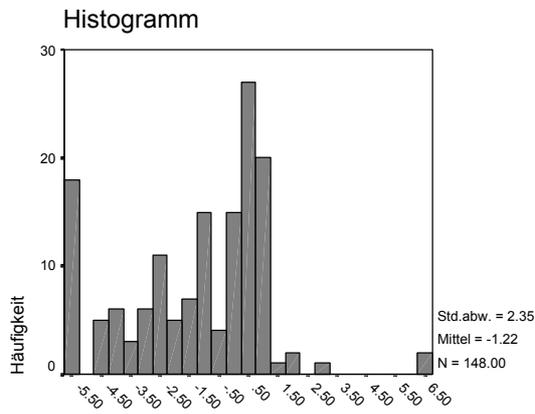
Datensatz H96



14DCB (ln-transformiert)

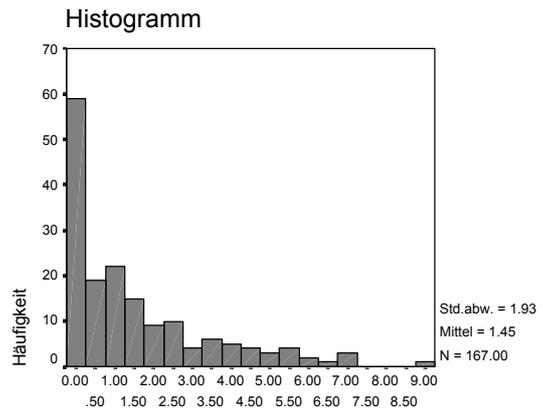


aHCH (ln-transformiert)

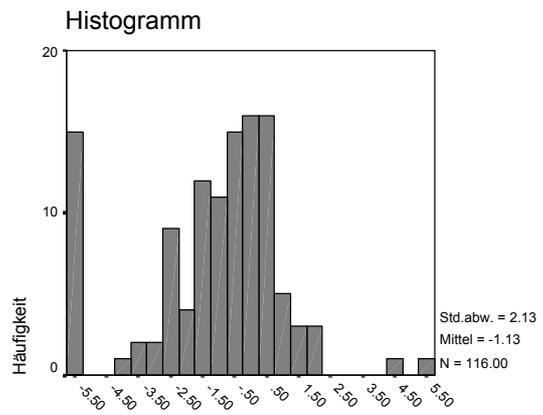


dHCH (ln-transformiert)

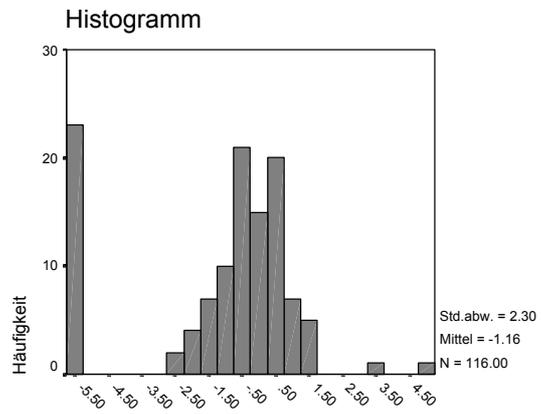
Datensatz S97



14DCB (ln-transformiert)



aHCH (ln-transformiert)



dHCH (ln-transformiert)

A 5.4: Hauptkomponentenanalysen mit ausgewählten Einzelstoffen

Methode: Hauptkomponentenanalyse mit Varimax-Rotation

Merkmale: 10 ausgewählte Stoffe: Benzen, Monochlorbenzen, 1,2- und 1,4-Dichlorbenzen, alpha- und delta-HCH, Tetra- und Trichlorethen sowie Tri- und Dichlormethan.

Die folgenden Tabellen zeigen die Anteile der erklärten Gesamtvarianz, die Kommunalitäten und Faktorladungen in der rotierten Komponentenmatrix. Absolute Faktorladungen > 0.5 sind hervorgehoben.

Die Zusammensetzung der Datensätze ist in den Kapiteln 5.2.2 und 5.2.3 erläutert.

I. Datensatz H96, logarithmierte Werte, n = 148.

Hauptkomponente	1	2	3	Summe
Anteil erklärter Varianz [%]	51.16	16.23	14.45	81.84
Eigenwerte	5.12	1.62	1.45	Kommunalitäten
Benzen	0.82	0.29	-0.01	0.76
Monochlorbenzen	0.85	0.19	0.10	0.77
1,4-Dichlorbenzen	0.86	0.25	0.13	0.81
1,2-Dichlorbenzen	0.87	0.26	0.17	0.86
Dichlormethan	0.31	0.82	-0.05	0.77
Trichlormethan	0.32	0.79	0.12	0.74
Trichlorethen	0.19	0.93	0.10	0.91
Tetrachlorethen	0.20	0.82	0.24	0.77
alpha-HCH	0.16	0.05	0.93	0.89
delta-HCH	0.06	0.18	0.93	0.91

II. Datensatz H96, Rangzahlen, n = 148.

Hauptkomponente	1	2	3	Summe
Anteil erklärter Varianz [%]	47.77	16.93	13.83	78.54
Eigenwerte	4.78	1.69	1.38	Kommunalitäten
Benzen	0.28	0.75	-0.05	0.64
Monochlorbenzen	0.15	0.89	0.04	0.82
1,4-Dichlorbenzen	0.24	0.81	0.13	0.72
1,2-Dichlorbenzen	0.25	0.85	0.20	0.82
Dichlormethan	0.80	0.32	-0.06	0.75
Trichlormethan	0.80	0.26	0.11	0.72
Trichlorethen	0.93	0.19	0.11	0.91
Tetrachlorethen	0.76	0.18	0.32	0.72
alpha-HCH	0.05	0.10	0.93	0.87
delta-HCH	0.20	0.07	0.92	0.88

III. Datensatz H96, ohne Werte unterhalb der Nachweisgrenze, logarithmierte Werte, n = 42.

Hauptkomponente	1	2	3	Summe
Anteil erklärter Varianz [%]	50.79	16.96	14.01	81.76
Eigenwerte	5.08	1.70	1.40	Kommunalitäten
Benzen	0.81	0.28	0.22	0.78
Monochlorbenzen	0.91	0.00	0.07	0.83
1,4-Dichlorbenzen	0.85	0.31	0.19	0.86
1,2-Dichlorbenzen	0.82	0.37	0.18	0.84
Dichlormethan	0.26	0.85	0.16	0.82
Trichlormethan	0.18	0.75	0.04	0.60
Trichlorethen	0.08	0.90	0.13	0.83
Tetrachlorethen	0.25	0.79	0.08	0.69
alpha-HCH	0.19	0.16	0.95	0.97
delta-HCH	0.20	0.10	0.96	0.97

IV. Datensatz H96_(H96∩S97), logarithmierte Werte, n = 92.

Hauptkomponente	1	2	3	Summe
Anteil erklärter Varianz [%]	54.06	16.57	12.25	82.89
Eigenwerte	5.41	1.66	1.23	Kommunalitäten
Benzen	0.82	0.36	-0.02	0.79
Monochlorbenzen	0.85	0.20	0.10	0.77
1,4-Dichlorbenzen	0.85	0.29	0.11	0.83
1,2-Dichlorbenzen	0.88	0.25	0.17	0.87
Dichlormethan	0.41	0.78	0.00	0.78
Trichlormethan	0.42	0.69	0.22	0.70
Trichlorethen	0.20	0.94	0.08	0.94
Tetrachlorethen	0.22	0.83	0.21	0.78
alpha-HCH	0.17	0.05	0.94	0.92
delta-HCH	0.03	0.23	0.93	0.92

V. Datensatz H96_(H96∩S97), logarithmierte Werte, n = 44 (Schnittmenge mit S97_(H96∩S97)).

Hauptkomponente	1	2	3	Summe
Anteil erklärter Varianz [%]	58.23	17.46	9.77	85.46
Eigenwerte	5.82	1.75	0.98	Kommunalitäten
Benzen	0.78	0.45	0.06	0.81
Monochlorbenzen	0.86	0.28	0.10	0.82
1,4-Dichlorbenzen	0.88	0.31	0.19	0.91
1,2-Dichlorbenzen	0.83	0.33	0.28	0.87
Dichlormethan	0.42	0.82	0.05	0.85
Trichlormethan	0.29	0.74	0.37	0.77
Trichlorethen	0.24	0.93	0.02	0.92
Tetrachlorethen	0.38	0.77	0.00	0.74
alpha-HCH	0.19	0.01	0.94	0.93
delta-HCH	0.11	0.13	0.95	0.93

VI. Datensatz S97_(H96∩S97), logarithmierte Werte, n = 44 (Schnittmenge mit H96 (H96∩S97)).

Hauptkomponente	1	2	3	Summe
Anteil erklärter Varianz [%]	54.71	17.83	11.12	83.65
Eigenwerte	5.47	1.78	1.11	Kommunalitäten
Benzen	0.76	0.48	0.15	0.83
Monochlorbenzen	0.86	0.28	-0.02	0.82
1,4-Dichlorbenzen	0.88	0.31	0.12	0.89
1,2-Dichlorbenzen	0.90	0.19	0.15	0.86
Dichlormethan	0.36	0.86	0.07	0.88
Trichlormethan	0.41	0.67	0.34	0.74
Trichlorethen	0.13	0.90	0.01	0.83
Tetrachlorethen	0.46	0.74	-0.13	0.78
alpha-HCH	0.16	0.03	0.91	0.85
delta-HCH	0.01	0.05	0.94	0.89

VII. Datensatz S97, logarithmierte Werte, n = 82.

Hauptkomponente	1	2	3	Summe
Anteil erklärter Varianz [%]	47.66	18.32	13.76	79.74
Eigenwerte	4.77	1.83	1.38	Kommunalitäten
Benzen	0.76	0.41	0.20	0.79
Monochlorbenzen	0.86	0.26	0.02	0.81
1,4-Dichlorbenzen	0.92	0.21	0.08	0.89
1,2-Dichlorbenzen	0.90	0.12	0.06	0.82
Dichlormethan	0.23	0.86	0.09	0.80
Trichlormethan	0.36	0.73	0.19	0.69
Trichlorethen	0.06	0.86	-0.03	0.75
Tetrachlorethen	0.31	0.75	-0.20	0.70
alpha-HCH	0.25	-0.02	0.88	0.84
delta-HCH	-0.04	0.03	0.93	0.87

A 5.5: Hauptkomponentenanalysen mit ausgewählten Einzelstoffen, Vor-Ort- und Summenparametern

Methode: Hauptkomponentenanalyse mit Varimax-Rotation.

Die folgenden Tabellen zeigen die Anteile der erklärten Gesamtvarianz, die Kommunalitäten und Faktorladungen in der rotierten Komponentenmatrix. Absolute Faktorladungen > 0.5 sind hervorgehoben.

Die Zusammensetzung der Datensätze ist in Kapitel 5.2.3 erläutert.

I. Datensatz H96_(HI96+S97), logarithmierte Werte, n = 89.

Hauptkomponente	1	2	3	4	5	6	Summe
Anteil erklärter Varianz [%]	39.07	13.23	9.75	6.50	5.94	4.84	79.34
Eigenwerte	8.60	2.91	2.15	1.43	1.31	1.06	Kommunalitäten
Benzen	0.71	0.31	0.39	0.30	-0.08	0.03	0.86
MCB	0.82	0.16	0.14	0.15	0.04	0.18	0.77
14DCB	0.80	0.31	0.21	-0.05	0.18	-0.14	0.84
12DCB	0.87	0.26	0.12	0.02	0.22	-0.09	0.89
DCM	0.39	0.75	0.16	0.09	-0.02	0.17	0.77
TCM	0.42	0.68	0.05	0.16	0.14	0.18	0.73
TCE	0.17	0.89	0.20	0.22	0.09	0.09	0.92
PCE	0.20	0.81	0.14	0.09	0.21	0.01	0.78
aHCH	0.14	0.06	-0.02	-0.03	0.89	0.19	0.86
dHCH	0.02	0.23	-0.03	0.12	0.86	0.15	0.82
pH	-0.13	-0.01	0.06	-0.08	-0.20	-0.85	0.78
Eh	-0.19	0.29	-0.06	-0.08	0.12	0.83	0.84
Lf	0.04	0.19	0.24	0.88	0.07	-0.02	0.87
O2	-0.09	0.08	-0.29	-0.37	-0.29	-0.10	0.34
Sal	0.05	0.19	0.24	0.88	0.06	0.02	0.87
T	0.10	0.34	0.24	0.46	0.37	-0.14	0.55
LBT	0.59	0.37	0.44	0.19	-0.16	-0.22	0.79
AOX	0.26	0.52	0.67	0.06	-0.03	0.11	0.80
CSB	0.28	0.09	0.74	0.45	0.00	0.04	0.84
DOC	0.13	0.17	0.90	0.13	0.05	-0.17	0.91
TOC	0.22	0.13	0.82	0.41	-0.02	-0.06	0.92
PI	0.47	0.06	0.06	0.60	-0.36	0.04	0.72

II. Datensatz H96, ohne Werte unterhalb der Nachweisgrenze, logarithmierte Werte, n = 34.

Hauptkomponente	1	2	3	4	5	6	Summe
Anteil erklärter Varianz [%]	32.79	17.65	14.45	7.76	5.74	4.35	82.74
Eigenwerte	7.21	3.88	3.18	1.71	1.26	0.96	Kommunalitäten
Benzen	0.77	0.23	0.27	0.22	0.13	0.07	0.80
MCB	0.85	0.03	0.07	-0.08	0.05	-0.01	0.74
14DCB	0.79	0.02	0.27	-0.26	0.33	-0.14	0.89
12DCB	0.81	0.06	0.28	-0.10	0.31	-0.20	0.89
DCM	0.14	0.02	0.83	0.07	0.21	0.15	0.79
TCM	0.25	-0.16	0.64	-0.06	-0.08	0.31	0.61
TCE	0.09	0.05	0.90	0.12	0.14	0.11	0.87
PCE	0.18	0.00	0.81	-0.10	0.07	-0.01	0.70
aHCH	0.19	0.28	0.16	0.13	0.85	0.21	0.91
dHCH	0.20	0.18	0.13	0.20	0.86	0.21	0.92
pH	-0.07	-0.02	-0.19	-0.25	-0.17	-0.85	0.85
Eh	-0.37	-0.10	0.23	0.00	0.21	0.80	0.89
Lf	0.16	0.35	0.09	0.79	0.27	0.18	0.88
O2	0.32	-0.19	0.25	-0.66	0.13	-0.02	0.65
Sal	0.18	0.39	0.07	0.76	0.20	0.24	0.87
T	-0.02	-0.19	0.18	0.58	0.46	-0.03	0.62
LBT	0.43	0.59	0.41	-0.21	-0.07	-0.31	0.85
AOX	0.22	0.56	0.54	0.19	0.13	0.43	0.89
CSB	0.18	0.83	0.04	0.30	0.30	0.15	0.94
DOC	0.05	0.95	-0.10	0.13	0.06	-0.06	0.94
TOC	0.02	0.95	-0.08	0.17	0.08	-0.08	0.95
PI	0.77	0.18	0.06	0.35	-0.14	0.10	0.78

A 5.6: Deskriptive Statistik und Histogramme der leichtflüchtigen halogenierten Kohlenwasserstoffe

LHKW: Dichlormethan (DCM), Trichlormethan (TCM), 1,2-Dichlorethan (12DCA), 1,1,1-Trichlorethan (111TCA), Tetrachlormethan (TeCM), Trichlorethen (TCE), Tetrachlorethen (PCE), cis 1,2-Dichlorethen (cis12DCE), 1,1,1,2-Tetrachlorethan (1112PCA), Vinylchlorid (VC).

Deskriptive Statistik, Datensatz H96.

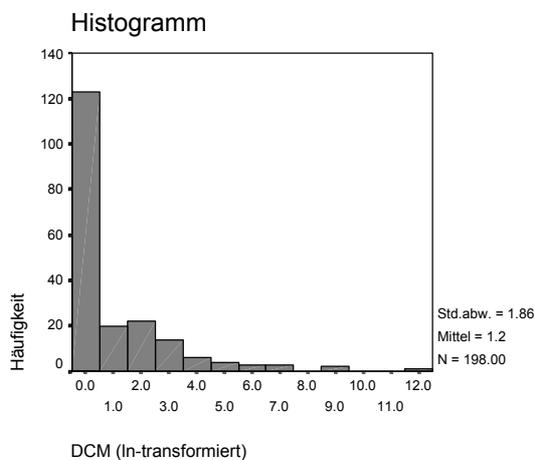
	n	Mittelwert	Median	Spannweite	Minimum	Maximum	25-Perzentil	75Perzentil
DCM [$\mu\text{g/l}$]	198	671.76	1.20	112998.80	1.20	113000.00	1.20	7.15
TCM [$\mu\text{g/l}$]	198	759.74	1.50	83999.96	.04	84000.00	0.04	8.23
12DCA [$\mu\text{g/l}$]	198	53.71	1.50	3898.50	1.50	3900.00	1.50	7.95
111TCA [$\mu\text{g/l}$]	198	0.96	0.01	119.99	.01	120.00	0.01	0.02
TeCM [$\mu\text{g/l}$]	198	120.73	0.31	18400.00	.00	18400.00	0.008	1.83
TCE [$\mu\text{g/l}$]	198	369.53	5.25	36799.98	.02	36800.00	0.42	16.25
PCE [$\mu\text{g/l}$]	198	380.82	6.90	60000.00	.00	60000.00	0.45	31.50
cis12DCE [$\mu\text{g/l}$]	198	450.18	2.50	58997.50	2.50	59000.00	2.50	20.08
1112PCA [$\mu\text{g/l}$]	198	10.04	0.04	1399.99	.01	1400.00	0.01	0.43
1122PCA [$\mu\text{g/l}$]	198	382.62	2.15	53999.90	.10	54000.00	0.39	15.00
VC [$\mu\text{g/l}$]	198	283.65	22.50	14999.00	1.00	15000.00	9.68	67.00
LHKW [$\mu\text{g/l}$]	198	3480.54	94.67	204301.65	.02	204301.66	34.76	410.10

Deskriptive Statistik, Datensatz S97.

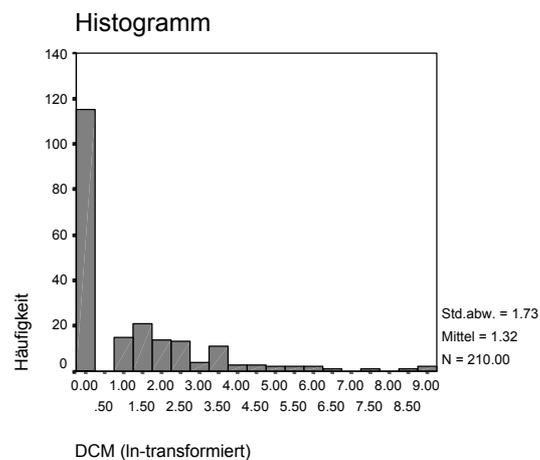
	n	Mittelwert	Median	Spannweite	Minimum	Maximum	25-Perzentil	75-Perzentil
DCM [$\mu\text{g/l}$]	210	116.21	1.20	7998.80	1.20	8000.00	1.20	7.23
TCM [$\mu\text{g/l}$]	210	509.76	.82	76999.96	0.04	77000.00	0.18	2.75
12DCA [$\mu\text{g/l}$]	210	26.75	1.50	3149.50	1.50	3151.00	1.50	1.50
111TCA [$\mu\text{g/l}$]	210	0.33	0.01	44.79	0.01	44.80	0.01	0.01
TeCM [$\mu\text{g/l}$]	210	99.73	0.09	18000.00	0.00	18000.00	0.02	0.84
TCE [$\mu\text{g/l}$]	210	225.69	.68	32999.99	0.01	33000.00	0.21	4.23
PCE [$\mu\text{g/l}$]	210	147.62	4.60	21999.44	0.56	22000.00	2.40	12.18
cis12DCE [$\mu\text{g/l}$]	210	416.60	2.50	68997.50	2.50	69000.00	2.50	8.73
trans12DCE [$\mu\text{g/l}$]	210	37.86	2.50	2464.50	2.50	2467.00	2.50	2.50
1112PCA [$\mu\text{g/l}$]	210	12.89	0.04	2099.99	0.01	2100.00	0.01	0.18
VC [$\mu\text{g/l}$]	207	8.06	1.00	469.00	1.00	470.00	1.00	1.00
LHKW [$\mu\text{g/l}$]	210	1594.89	19.33	130613.90	0.89	130614.78	5.99	97.66

Statistische Verteilung:

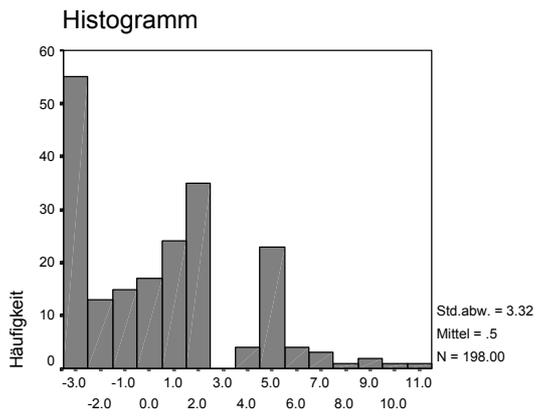
Datensatz H96



Datensatz S97

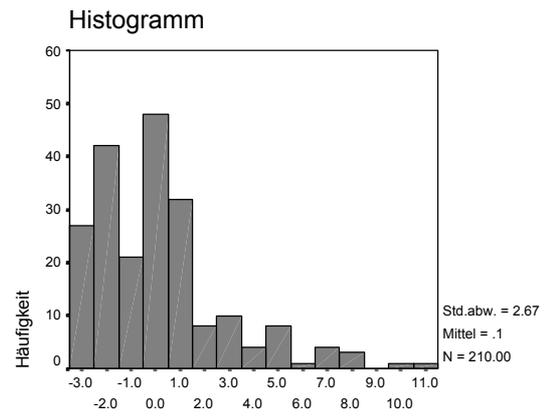


Datensatz H96

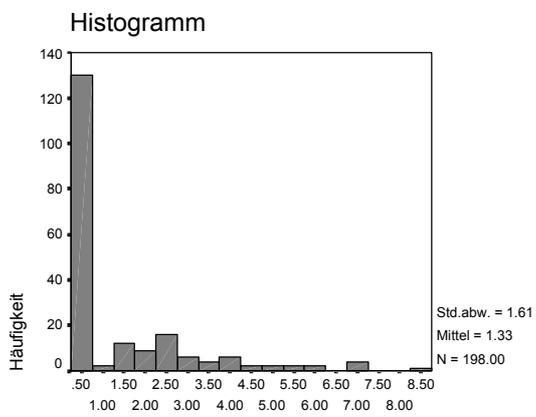


TCM (ln-transformiert)

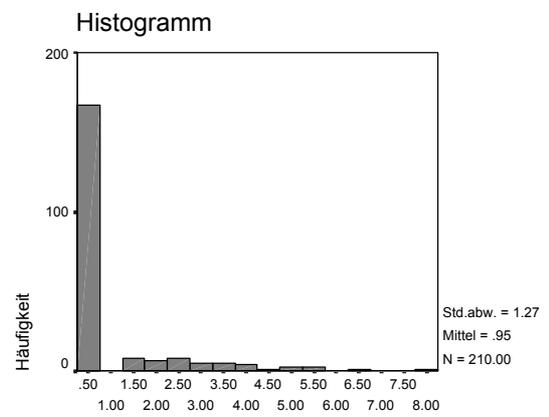
Datensatz S97



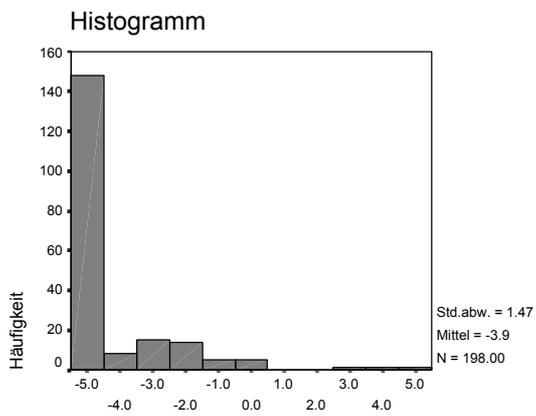
TCM (ln-transformiert)



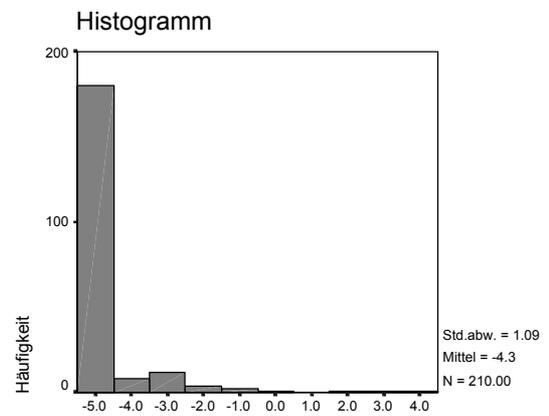
12DCA (ln-transformiert)



12DCA (ln-transformiert)

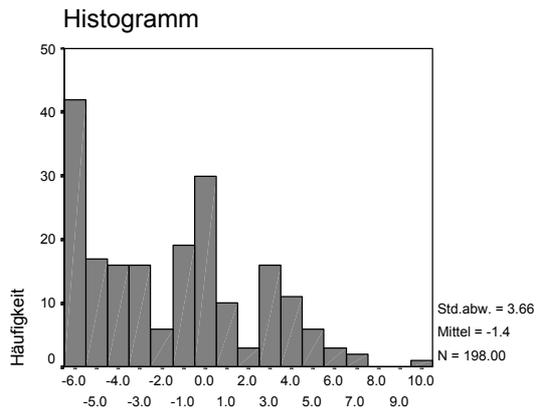


111TCA (ln-transformiert)

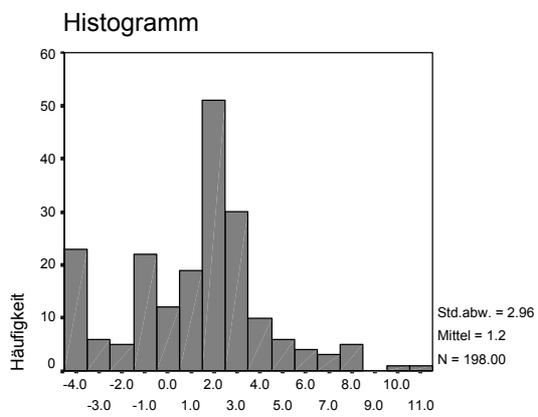


111TCA (ln-transformiert)

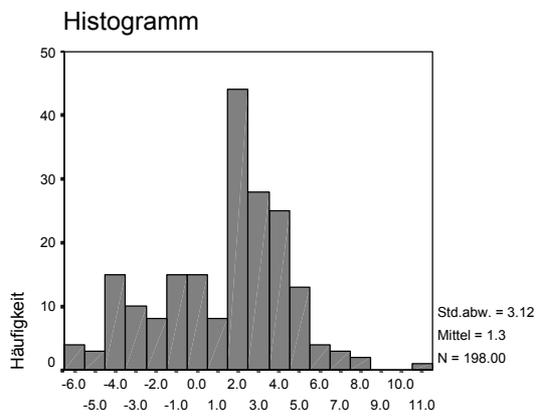
Datensatz H96



TeCM (In-transformiert)

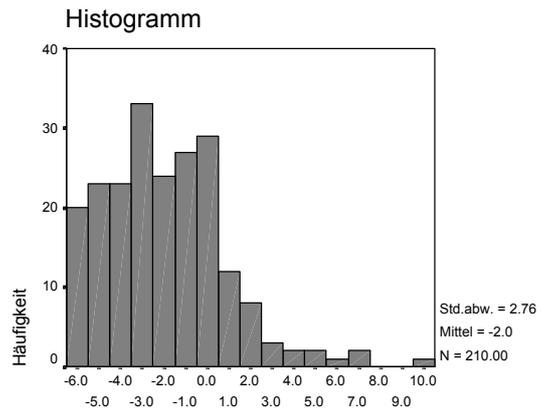


TCE (In-transformiert)

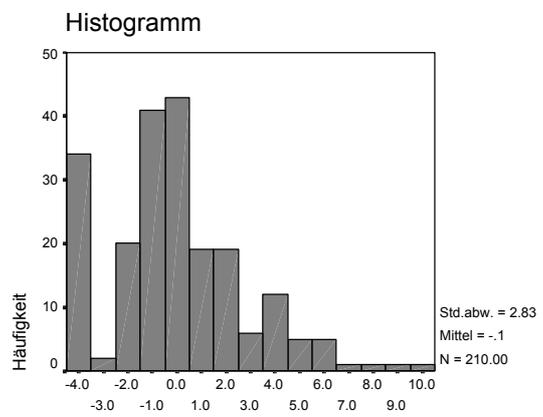


PCE (In-transformiert)

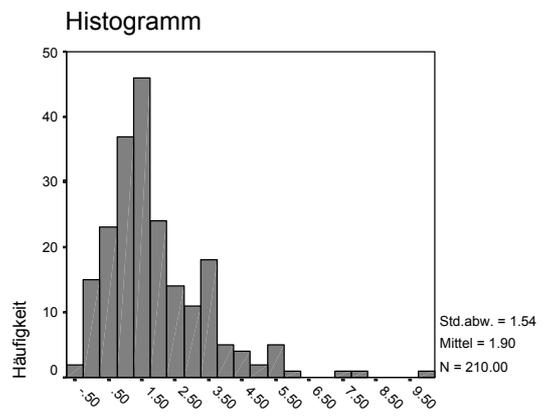
Datensatz S97



TeCM (In-transformiert)

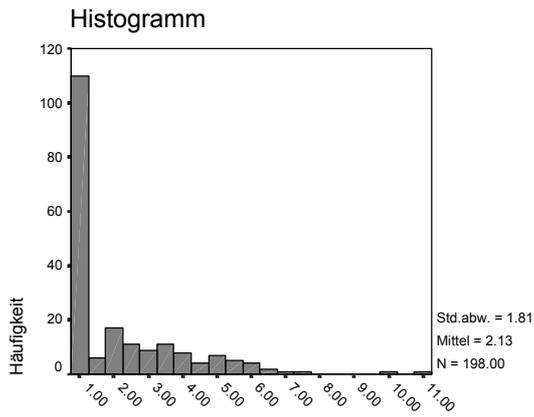


TCE (In-transformiert)

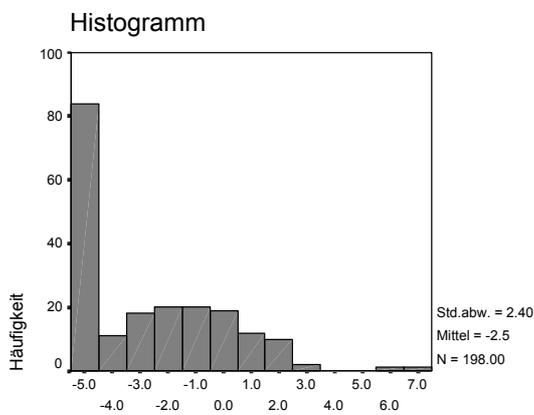


PCE (In-transformiert)

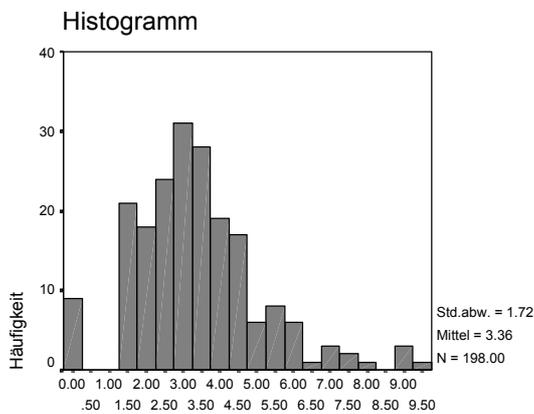
Datensatz H96



cis12DCE (ln-transformiert)

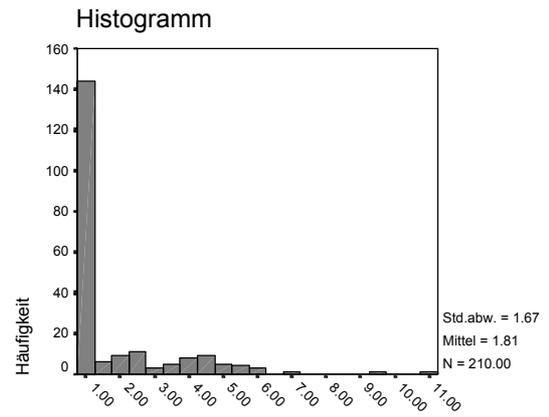


1112PCA (ln-transformiert)

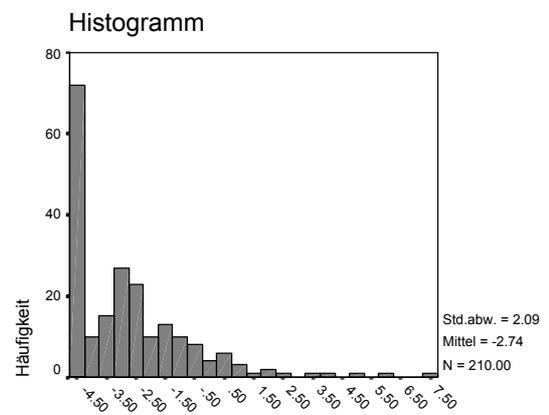


VC (ln-transformiert)

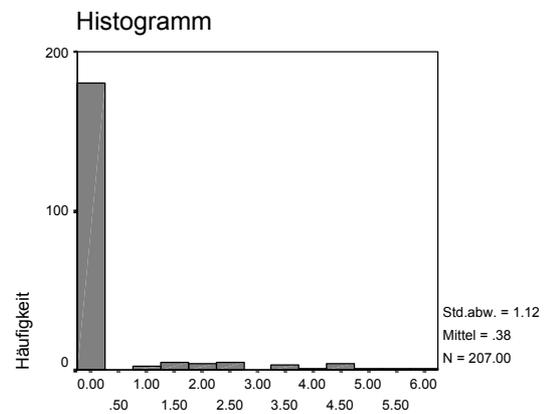
Datensatz S97



cis12DCE (ln-transformiert)



1112PCA (ln-transformiert)



VC (ln-transformiert)

A 5.7: Hauptkomponentenanalysen mit den leichtflüchtigen halogenierten Kohlenwasserstoffen

Methode: Hauptkomponentenanalyse mit Varimax-Rotation.

Merkmale: Dichlormethan (DCM), Trichlormethan (TCM), 1,2-Dichlorethan (12DCA), 1,1,1-Trichlorethan (111TCA), Tetrachlormethan (TeCM), Trichlorethen (TCE), Tetrachlorethen (PCE), cis 1,2-Dichlorethen (cis12DCE), 1,1,1,2-Tetrachlorethan (1112PCA), Vinylchlorid (VC).

Die folgenden Tabellen zeigen die Anteile der erklärten Gesamtvarianz, die Kommunalitäten und Faktorladungen in der rotierten Komponentenmatrix. Absolute Faktorladungen > 0.5 sind hervorgehoben.

Die Zusammensetzung der Datensätze ist in den Kapiteln 5.3.2 und 5.3.3 erläutert.

I. Datensatz H96, n = 198, logarithmierte Werte: siehe Tabelle 5.11.

II. Datensatz H96_(H96∩S97), n = 122, logarithmierte Werte.

Hauptkomponente	1	2	Summe
Anteil erklärter Varianz [%]	61.64	14.08	75.73
Eigenwerte	6.16	1.41	Kommunalitäten
DCM	0.56	0.72	0.82
TCM	0.92	0.21	0.89
12DCA	0.60	0.46	0.57
111TCA	0.72	0.33	0.63
TeCM	0.92	-0.06	0.84
TCE	0.76	0.46	0.80
PCE	0.79	0.26	0.70
cis12DCE	0.34	0.79	0.75
1112PCA	0.87	0.25	0.82
VC	-0.03	0.87	0.76

III. Datensatz H96_(Werte > NWG), n = 24, logarithmierte Werte.

Hauptkomponente	1	2	Summe
Anteil erklärter Varianz [%]	57.33	19.00	76.32
Eigenwerte	5.73	1.90	Kommunalitäten
DCM	0.66	0.66	0.88
TCM	0.84	0.31	0.81
12DCA	0.73	0.38	0.67
111TCA	0.91	0.27	0.90
TeCM	0.63	-0.49	0.65
TCE	0.56	0.75	0.88
PCE	0.75	0.39	0.72
cis12DCE	0.23	0.86	0.80
1112PCA	0.85	-0.06	0.72
VC	0.01	0.79	0.62

IV. Datensatz H96_(CAG), n = 84, logarithmierte Werte.

Hauptkomponente	1	2	Summe
Anteil erklärter Varianz [%]	56.22	18.52	74.73
Eigenwerte	5.62	1.85	Kommunalitäten
DCM	0.77	0.50	0.85
TCM	0.33	0.86	0.85
12DCA	0.43	0.58	0.52
111TCA	0.38	0.81	0.81
TeCM	-0.24	0.82	0.74
TCE	0.86	0.35	0.86
PCE	0.73	0.31	0.63
cis12DCE	0.90	0.09	0.82
1112PCA	0.28	0.85	0.80
VC	0.77	-0.01	0.60

V. Datensatz S97, n = 207, logarithmierte Werte.

Hauptkomponente	1	2	Summe
Anteil erklärter Varianz [%]	51.57	14.53	66.10
Eigenwerte	5.16	1.45	Kommunalitäten
DCM	0.60	0.64	0.77
TCM	0.87	0.19	0.80
12DCA	0.64	0.39	0.56
111TCA	0.80	0.27	0.72
TeCM	0.71	-0.04	0.51
TCE	0.42	0.68	0.64
PCE	0.56	0.56	0.62
cis12DCE	0.20	0.82	0.71
1112PCA	0.83	0.22	0.75
VC	-0.40	0.61	0.53

VI. Datensatz S97_(H96∩S97), n = 121, logarithmierte Werte.

Hauptkomponente	1	2	Summe
Anteil erklärter Varianz [%]	55.18	15.40	70.58
Eigenwerte	5.52	1.54	Kommunalitäten
DCM	0.64	0.63	0.81
TCM	0.87	0.20	0.79
12DCA	0.72	0.32	0.62
111TCA	0.84	0.25	0.77
TeCM	0.73	-0.08	0.55
TCE	0.47	0.69	0.70
PCE	0.56	0.64	0.73
cis12DCE	0.25	0.83	0.74
1112PCA	0.83	0.26	0.75
VC	-0.39	0.67	0.59

VII. Datensatz S97_(CAG), n = 82, logarithmierte Werte.

Hauptkomponente	1	2	Summe
Anteil erklärter Varianz [%]	54.35	17.00	71.35
Eigenwerte	5.44	1.70	Kommunalitäten
DCM	0.64	0.59	0.75
TCM	0.90	0.06	0.81
12DCA	0.74	0.20	0.59
111TCA	0.90	0.18	0.84
TeCM	0.69	-0.07	0.48
TCE	0.54	0.67	0.74
PCE	0.57	0.62	0.70
cis12DCE	0.17	0.87	0.79
1112PCA	0.84	0.31	0.80
VC	-0.21	0.76	0.63

VIII. Datensatz H96, n = 198, Rangzahlen.

Hauptkomponente	1	2	Summe
Anteil erklärter Varianz [%]	59.88	13.66	73.54
Eigenwerte	5.99	1.37	Kommunalitäten
DCM	0.54	0.65	0.71
TCM	0.91	0.26	0.90
12DCA	0.41	0.64	0.58
111TCA	0.64	0.42	0.59
TeCM	0.90	0.01	0.80
TCE	0.84	0.37	0.84
PCE	0.83	0.20	0.73
cis12DCE	0.40	0.73	0.68
1112PCA	0.87	0.24	0.81
VC	-0.12	0.83	0.71

IX. Datensatz H96_(H96∩S97), n = 122, Rangzahlen.

Hauptkomponente	1	2	Summe
Anteil erklärter Varianz [%]	60.37	13.29	73.65
Eigenwerte	6.04	1.33	Kommunalitäten
DCM	0.55	0.65	0.72
TCM	0.92	0.20	0.89
12DCA	0.49	0.57	0.57
111TCA	0.67	0.35	0.57
TeCM	0.91	0.02	0.82
TCE	0.83	0.38	0.83
PCE	0.82	0.23	0.72
cis12DCE	0.38	0.72	0.66
1112PCA	0.87	0.25	0.82
VC	-0.09	0.86	0.75

X. Datensatz H96_(Werte > NWG), n = 24, Rangzahlen.

Hauptkomponente	1	2	Summe
Anteil erklärter Varianz [%]	54.59	17.41	72.00
Eigenwerte	5.46	1.74	Kommunalitäten
DCM	0.92	0.18	0.88
TCM	0.66	0.60	0.79
12DCA	0.76	0.25	0.64
111TCA	0.60	0.66	0.80
TeCM	-0.19	0.81	0.69
TCE	0.90	0.23	0.86
PCE	0.69	0.43	0.66
cis12DCE	0.89	-0.05	0.79
1112PCA	0.16	0.79	0.66
VC	0.63	-0.19	0.44

XI. Datensatz H96_(CAG), n = 84, Rangzahlen.

Hauptkomponente	1	2	Summe
Anteil erklärter Varianz [%]	52.00	17.52	69.52
Eigenwerte	5.20	1.75	Kommunalitäten
DCM	0.77	0.41	0.76
TCM	0.36	0.85	0.85
12DCA	0.62	0.34	0.49
111TCA	0.42	0.73	0.72
TeCM	-0.15	0.88	0.80
TCE	0.78	0.38	0.75
PCE	0.71	0.13	0.52
cis12DCE	0.84	0.11	0.71
1112PCA	0.28	0.85	0.80
VC	0.74	-0.03	0.55

XII. Datensatz S97, n = 207, Rangzahlen.

Hauptkomponente	1	2	Summe
Anteil erklärter Varianz [%]	42.39	14.42	56.81
Eigenwerte	4.24	1.44	Kommunalitäten
DCM	0.42	0.65	0.60
TCM	0.82	0.33	0.78
12DCA	0.26	0.71	0.57
111TCA	0.68	0.29	0.54
TeCM	0.59	0.15	0.37
TCE	0.27	0.71	0.57
PCE	0.44	0.50	0.44
cis12DCE	-0.05	0.83	0.69
1112PCA	0.82	0.23	0.73
VC	-0.50	0.36	0.37

XIII. Datensatz S97_(H96∩S97), n = 121, Rangzahlen.

Hauptkomponente	1	2	Summe
Anteil erklärter Varianz [%]	44.74	14.96	59.69
Eigenwerte	4.47	1.50	Kommunalitäten
DCM	0.75	0.26	0.64
TCM	0.55	0.66	0.74
12DCA	0.73	0.25	0.60
111TCA	0.49	0.53	0.52
TeCM	0.12	0.68	0.47
TCE	0.77	0.18	0.62
PCE	0.74	0.13	0.57
cis12DCE	0.79	-0.14	0.65
1112PCA	0.40	0.73	0.70
VC	0.29	-0.62	0.47

XIV. Datensatz S97_(CAG), n = 82, Rangzahlen.

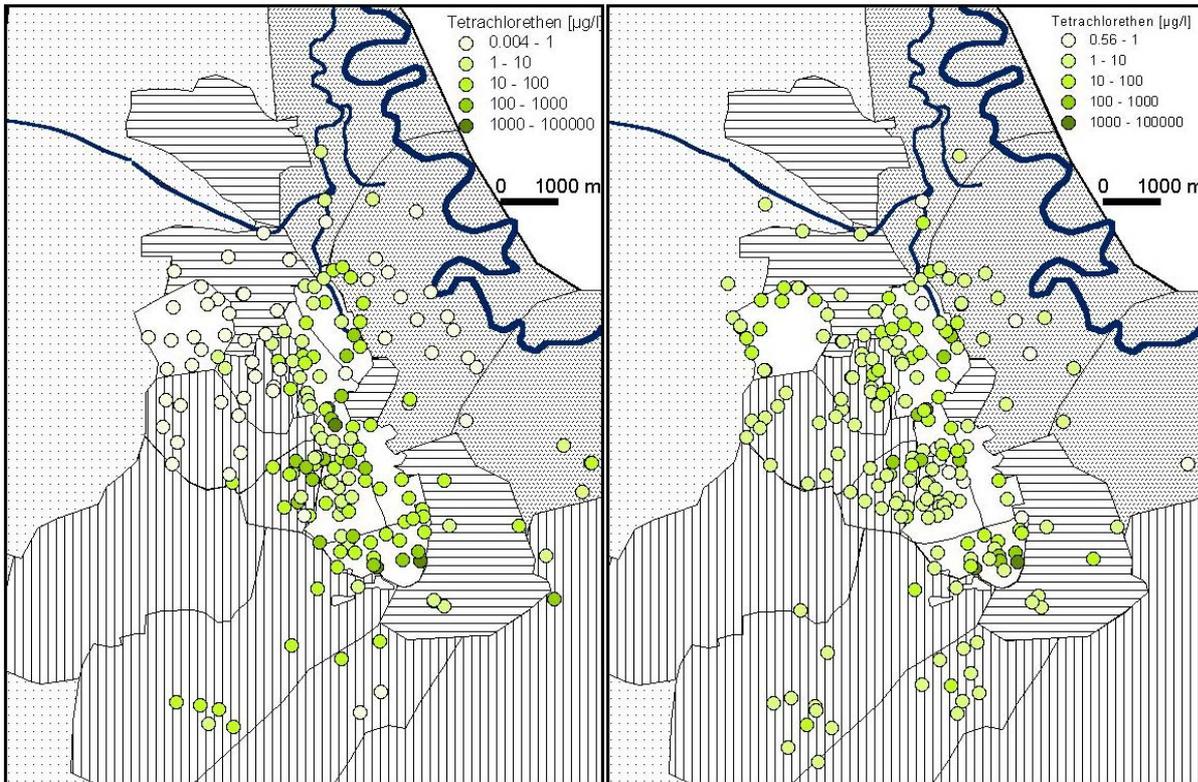
Hauptkomponente	1	2	Summe
Anteil erklärter Varianz [%]	44.89	14.36	59.25
Eigenwerte	4.49	1.44	Kommunalitäten
DCM	0.54	0.50	0.55
TCM	0.85	0.02	0.72
12DCA	0.57	0.42	0.50
111TCA	0.82	0.14	0.69
TeCM	0.56	-0.07	0.31
TCE	0.58	0.60	0.70
PCE	0.58	0.50	0.59
cis12DCE	0.13	0.84	0.73
1112PCA	0.82	0.13	0.69
VC	-0.23	0.63	0.44

XV: Korrelationsmatrix nach Pearson; Datensatz S97, logarithmierte Werte, n = 207; Signifikante Korrelationen > 0.6 sind hervorgehoben.

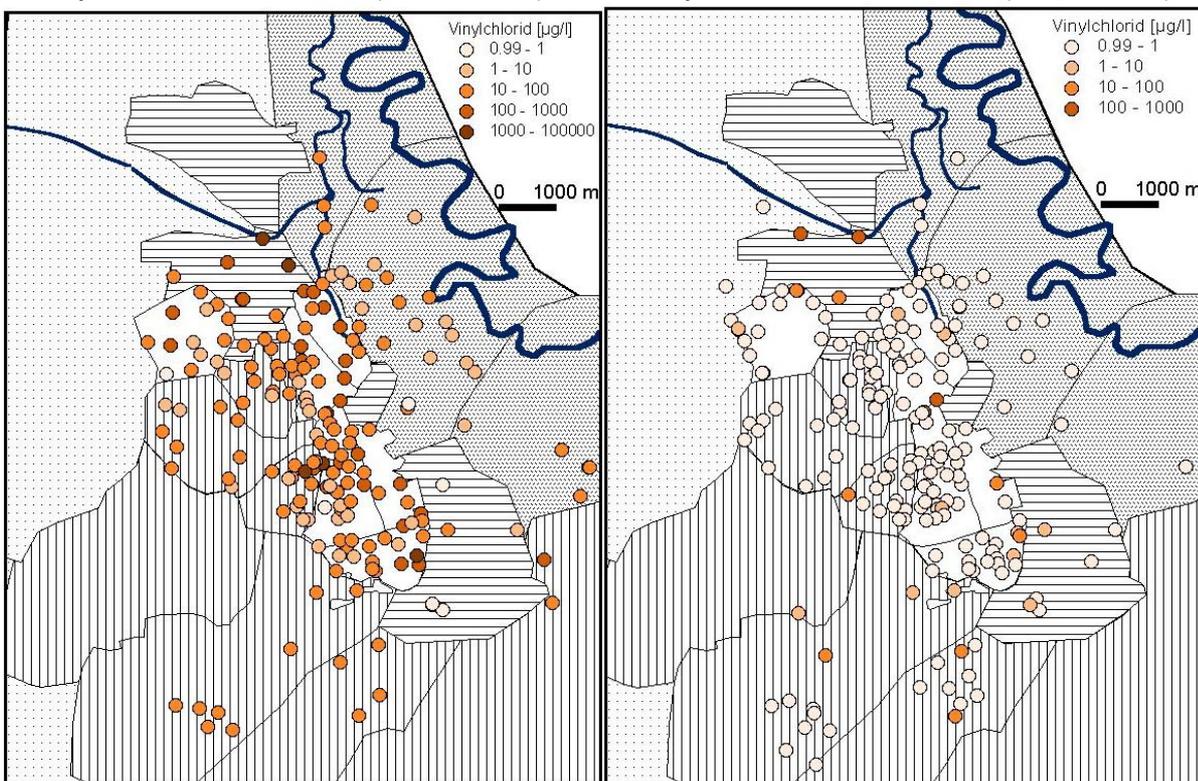
	DCM	TCM	12DCA	111TCA	TeCM	TCE	PCE	cis12DCE	trans12DCE	1112PCA
TCM	0.65									
12DCA	0.61	0.63								
111TCA	0.63	0.71	0.63							
TeCM	0.38	0.53	0.32	0.48						
TCE	0.61	0.48	0.48	0.43	0.29					
PCE	0.60	0.59	0.49	0.58	0.26	0.56				
cis12DCE	0.66	0.30	0.40	0.30	0.21	0.63	0.47			
trans12DCE	0.61	0.29	0.36	0.35	0.14	0.59	0.44	0.82		
1112PCA	0.60	0.73	0.50	0.71	0.60	0.47	0.63	0.31	0.32	
VC	0.07	-0.20	-0.05	-0.04	-0.14	0.07	0.10	0.21	0.27	-0.08

A 5.8: Verbreitung von Tetrachlorethen und Vinylchlorid im Untersuchungsgebiet

I. Tetrachlorethen im Herbst 1996 (H96, n = 198) II. Tetrachlorethen im Sommer 1997 (S97, n = 210)



III. Vinylchlorid im Herbst 1996 (H96, n = 198) IV. Vinylchlorid im Sommer 1997 (S97, n = 210)



Lebenslauf

Persönliche Daten

Name: Annegret Henriette Thieken
Geburtsdatum: 26. Januar 1970
Geburtsort: Cloppenburg
Staatsangehörigkeit: deutsch

Schulbildung

1976 - 1980 Grundschule Galgenmoor, Cloppenburg
1980 - 1982 Don-Bosco-Schule, Orientierungsstufe, Cloppenburg
1982 - 1989 Clemens-August-Gymnasium, Cloppenburg
1989 Abschluss: Allgemeine Hochschulreife

Hochschulausbildung/Studium

10/1989 - 06/1996 Studium der Geoökologie an der Technischen Universität Braunschweig
11/1991 Diplom-Vorprüfung
09/1993 - 07/1994 umweltwissenschaftliches Auslandsstudium an der Universität von Amsterdam, Niederlande, mit einem Stipendium der Niederländischen Regierung und des DAAD
01.07.1996 Abschluss: Diplom-Geoökologin (Dipl.-Geoökol.)

Wissenschaftlicher Werdegang/Berufserfahrung

01.07.1996 - 30.04.2000 Wissenschaftliche Mitarbeiterin am Institut für Geologische Wissenschaften der Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg, Fachgebiet Umweltgeologie
seit 01.05.2000 Wissenschaftliche Mitarbeiterin am GeoForschungsZentrum Potsdam, Projektbereich 5.4 Ingenieurhydrologie, Deutsches Forschungsnetz Naturkatastrophen (DFNK)

Potsdam, 30. Juli 2001