



LAWA-AO

Rahmenkonzeption Monitoring

Teil B

Bewertungsgrundlagen und Methodenbeschreibungen

Arbeitspapier IV.2

Empfehlung zur langfristigen Trendermittlung
nach der Verordnung zum Schutz von Oberflächengewässern
vom 20. Juni 2016 (BGBl. I S. 1373)

Stand: 5. Juni 2023

Das Papier wurde durch die 166. LAWA-Vollversammlung am 26./27. September 2023 in Berlin-Spandau beschlossen.

Die UMK hat der Veröffentlichung des Papieres im Umlaufbeschluss 54/2023 zugestimmt.

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	3
2	Datenerhebung	6
2.1	Auswahl der Untersuchungsmatrix / Bestimmungsgrenzen	7
2.2	Biota.....	8
2.2.1	Passives Monitoring	8
2.2.2	Aktives Monitoring.....	8
2.3	Sedimente.....	8
2.4	Schwebstoffe	9
3	Statistische Methoden und Trendanalyse.....	11
3.1	Anforderungen an das Datenkollektiv.....	12
3.1.1	Zeitraum.....	12
3.1.2	Einheiten und Gehaltsangaben	12
3.2	Vorbereitung des Datenkollektivs und Aggregation der Messwerte	12
3.3	Statistische Tests und Trendberechnung	13
3.4	Vortest auf Normalverteilung.....	14
3.5	Haupttests auf Vorliegen eines Trends.....	15
3.5.1	Lineare Regressionsanalyse mittels t-Test.....	15
3.5.2	Mann-Kendall-Trendtest.....	15
3.6	Weitere Hinweise zur Trendanalyse	16
Anlagen.....		17
•	Anlage 1: Bundesweites Messnetz zur langfristigen Trendüberwachung	17
○	Tabelle A1: Trendmessnetz für Schwebstoff-/ Sedimentuntersuchungen	17
○	Tabelle A2: Trendmessnetz für Biota-Untersuchungen	17
•	Anlage 2: Auswertewerkzeuge	17
○	Anlage 2.1 Exceltool	17
○	Anlage 2.2 Exceltool (Version Libreoffice).....	17
○	Anlage 2.3 R-Skript: Beispielprogrammcode	17

1 Einleitung

Nach § 15 Abs. 1 der Verordnung zum Schutz von Oberflächengewässern (Oberflächen-gewässerverordnung – OGewV) vom 20. Juni 2016 (BGBl. I S. 1373) müssen die Mitgliedstaaten langfristige Trendermittlungen bezüglich der prioritären Stoffe durchführen, die dazu neigen, sich in Biota, Sedimenten oder Schwebstoffen anzureichern. Mit § 15 Abs. 1 der OGewV 2016 wird Artikel 3 (6) der Richtlinie 2008/105/EG (UQN-Richtlinie), geändert durch Richtlinie 2013/39/EU, umgesetzt.

Dabei sind die in Anlage 8 (Tabelle 1, Spalte 6) der OGewV 2016 und in der folgenden Tabelle 1 aufgeführten prioritären Stoffe besonders zu berücksichtigen:

Tabelle 1:
Prioritäre Stoffe, die bei der Ermittlung langfristiger Trends zu berücksichtigen sind.

Nr.	LAWA-Nr.	Name des prioritären Stoffes/Stoffgruppe	Hinweise zu Summenparametern
2	2335	Anthracen	
5	4030 (4029, 2153, 2155, 2154, 2157, 2156)	Bromierte Diphenylether ¹	Summe der Kongenere: BDE 28, BDE 47, BDE 99, BDE 100, BDE 153, BDE 154
6	1165	Cadmium und Cadmiumverbindungen ²	
7	2987	C10-C13-Chloralkane ³	Gemisch, ohne Indikatorparameter
12	2679	Bis(2-ethyl-hexyl)phthalat (DEHP)	
15	2300	Fluoranthen	
16	2070	Hexachlorbenzol	
17	2030	Hexachlorbutadien	
18	2956	Hexachlorcyclohexan ¹	Summe der Isomere: α -HCH, β -HCH, γ -HCH, δ -HCH
20	1138	Blei und Bleiverbindungen ²	
21	1166	Quecksilber und Quecksilberverbindungen ²	
26	2069	Pentachlorbenzol	
28	<ul style="list-style-type: none"> • 2320 • 2301 • 2302 • 2310 • 2330 	Polycyclische aromatische Kohlenwasserstoffe ⁴ : <ul style="list-style-type: none"> • Benzo[a]pyren • Benzo[b]fluoranthen • Benzo[k]fluoranthen • Benzo[g,h,i]perylen • Indeno[1,2,3-cd]pyren 	Summe der fünf Einzelverbindungen
30	2768	Tributylzinnverbindungen (Tributylzinn-Kation)	
34	2803	Dicofol	

35	4007	Perfluoroktansulfonsäure und ihre Derivate ⁵ (PFOS)	Summe der PFOS-Isomere (verzweigt und linear)
36	2166	Quinoxifen	
37	4213	Dioxine und dioxinähnliche Verbindungen ¹	Summe der Toxizitätsäquivalente: PCDD, PCDF, dl-PCB
43	4152	Hexabromcyclododecan (HBCDD) ¹	Summe der Isomere: α -HBCDD, β -HBCDD, γ -HBCDD
44	4358 (2120, 2316, 2317 ⁶)	Heptachlor und Heptachlorepoxyd ¹	Summe der Einzelverbindungen: Heptachlor, cis-Heptachlorepoxyd, (trans-Heptachlorepoxyd ⁶)
<p>¹ Summenparameter: Formal nur Trendbetrachtung der Summen erforderlich, zusätzliche Betrachtung der Einzelverbindungen wird empfohlen</p> <p>² Hinweis: Es wird jeweils nur der Elementgehalt (Gesamtgehalt aller Spezies bezogen auf das jeweilige Element) bestimmt.</p> <p>³ Gemischparameter: Die chemische Analyse liefert für ein Stoffgemisch einen integralen Messwert.</p> <p>⁴ PAK: Formal Trendbetrachtung der Einzelverbindungen erforderlich, zusätzliche Summenbetrachtung wird empfohlen</p> <p>⁵ Hinweis: Eine analytische/chromatographische Trennung der PFOS-Isomere ist i. d. R. nicht möglich, und es wird daher meist die Summe (Gesamt-Peak) der linearen und verzweigten Isomere bestimmt und unter der LAWA-Stoffnummer 4007 zusammengefasst (Konvention 36. EK Stoffe, TOP 5.5)</p> <p>⁶ Trendbetrachtung des Isomers trans-Heptachlorepoxyd (LAWA-Stoffnummer 2317) ist optional, da nicht in OGewV 2016 enthalten</p>			

Bei den in der Tabelle 1 genannten Summenparametern (Nrn. 5, 7, 18, 28, 35, 37, 43, 44) handelt es sich um Stoffgruppen, bei denen ggf. mehrere Einzelverbindungen (z. B. verschiedene Stoffe, Isomere¹ oder Kongenere²) zu betrachten sind. Sofern diese Einzelverbindungen analytisch separat quantifiziert werden können, wird aus fachlicher Sicht empfohlen, die Trendberechnung sowohl für die Summe als auch separat für die jeweiligen Einzelverbindungen durchzuführen. Für polycyclische aromatische Kohlenwasserstoffe (PAK) ist eine Einzelstoffbetrachtung zwingend erforderlich, hingegen für C10-C13-Chloralkane (und meist auch für PFOS) nicht möglich.

Nach § 15 der OGewV 2016 sind diese Stoffe im Regelfall mindestens alle drei Jahre in Biota, Sedimenten oder Schwebstoffen zu überwachen, es sei denn, die zuständige Behörde legt aufgrund des aktuellen Wissensstandes ein anderes Intervall fest. Darüber hinaus sind im Rahmen der Aktualisierung des Maßnahmenprogramms Maßnahmen zu ergreifen, mit denen sichergestellt wird, dass Konzentrationen dieser Stoffe in den betreffenden Biota, Sedimenten oder Schwebstoffen nicht signifikant ansteigen.

¹ Isomere: gleiche Summenformel, unterschiedliche Strukturformel

² Kongenere: Verbindungen mit gleicher Grundstruktur, verschiedene Summenformeln möglich

Nach Anlage 13 der OGewV 2016 ist zu gewährleisten, dass die zur Untersuchung eingesetzten Matrices, Methoden und Verfahren (Probenahme, Aufschluss, Analytik) über den gesamten Beobachtungszeitraum konstant oder vergleichbar sind.

2 Datenerhebung

Die Trendermittlungen sind für ausgewählte Überblicksmessstellen durchzuführen, welche die großräumige Überwachung bedeutender Teileinzugsgebiete umfassen. Die Auswahl geeigneter Messstellen wird i. d. R. in den Flussgebieten und nach Möglichkeit auch bundesweit koordiniert, um ein Mindestmaß an Vergleichbarkeit und räumlicher Abdeckung zu gewährleisten. Weitere Hinweise hierzu sind der LAWA-Rahmenkonzeption Teil A (RaKon A) vom 06.08.2021 zur „Aufstellung von Monitoringprogrammen und zur Bewertung des Zustands von Oberflächengewässern“ zu entnehmen. Eine Übersicht der bundesweiten Trendmessstellen befindet sich in Anlage 1.

Von besonderer Wichtigkeit ist die Standardisierung der zur Untersuchung eingesetzten Matrices, Probenvorbereitungsmethoden und Analyseverfahren (u. a. Probenahme, Erstellung von Pool-/Mischproben, Fraktionierung, Aufschluss, chemische Analytik). Um die Untersuchungsmatrix konstant bzw. vergleichbar zu halten, wird empfohlen, von Beginn an den gesamten Prozess in Standardarbeitsanweisungen festzulegen, um sicherzustellen, dass die untersuchte Matrix und die analytischen Verfahren über den gesamten Beobachtungszeitraum vergleichbar sind.

Für die Überwachung der Umweltqualitätsnormen (UQN) im Schwebstoff spielt die Korngrößenfraktion eine Rolle. Vor Inkrafttreten der OGewV 2011 waren einige Metalle und Organika in den Gewässereinstufungsverordnungen der Länder geregelt, jedoch ohne Vorgaben hinsichtlich der Korngrößen. Die OGewV 2011 hat diesen Punkt erstmalig aufgegriffen und in der Fußnote 3 zu Anhang 5 bestimmt, dass sich die UQN für Sedimente auf die Fraktion $< 63 \mu\text{m}$ bezieht. Bei Schwebstoffen wurde zwischen Zentrifuge (Gesamtprobe) und Absetzbecken ($< 63 \mu\text{m}$) unterschieden. Gleichlautend wurden für die Trendermittlung in Anlage 11 für Sediment (Punkt 3) und Schwebstoff (Punkt 4) $< 63 \mu\text{m}$ gefordert.

Die OGewV 2016 schreibt sowohl zur UQN-Überwachung als auch für die Trendermittlung im Absetzbecken für Metalle $< 63 \mu\text{m}$ und für Organika $< 2 \text{ mm}$ vor. Damit widerspricht die Verordnung ihrer eigenen Forderung, die Randbedingungen der Trendermittlung immer möglichst konstant zu halten.

Weitere Aspekte und methodische Details bzgl. der Datenerhebung in Biota, Schwebstoffen und Sedimenten können den nachfolgend genannten LAWA-Rahmenkonzeptionen (RaKon-Papieren) sowie dem AQS-Merkblatt P 15 „Schwebstoff- und Sedimentuntersuchung“ vom Januar 2023 entnommen werden:

- RaKon-B-Arbeitspapier IV.3 vom 14.02.2020: „Konzeption für Biota-Untersuchungen zur Überwachung von Umweltqualitätsnormen nach der Verordnung zum Schutz von Oberflächengewässern vom 20. Juni 2016 (BGBl. I S. 1373)“
- RaKon-B-Arbeitspapier IV.4 vom 20.06.2016: „Empfehlungen für Schwebstoff- und Sedimentuntersuchungen an Überblicksmessstellen nach der Verordnung zum Schutz von Oberflächengewässern vom 20. Juni 2016 (BGBl. I S. 1373)“

In dem hier vorliegenden Arbeitspapier werden lediglich zusätzliche und besonders wichtige, d. h. vor allem für die statistische Trendermittlung relevante Festlegungen beschrieben bzw. ggf. wiederholt.

2.1 Auswahl der Untersuchungsmatrix / Bestimmungsgrenzen

Der CIS-Leitfaden „*Guidance Document No. 25 on Chemical Monitoring of Sediment and Biota under the Water Framework Directive*“ ([Link](#)) enthält für alle prioritären Stoffe (mit Ausnahme der „neuen“ prioritären Stoffe der RL 2013/39/EU sowie nicht für Cadmium und Blei) Angaben zur bevorzugten bzw. optionalen Matrix. Diese Angaben können als weitere Orientierung für die Durchführung des Trendmonitorings dienen. Demgemäß sind zur Trendermittlung der geforderten Stoffe sowohl die Matrix Biota als auch die Matrix Schwebstoff bzw. Sediment durchweg geeignet. Gleiches gilt analog für Cadmium und Blei sowie für die neuen Stoffe der RL 2013/39/EU.

Folglich können grundsätzlich alle Trendparameter in einer beliebigen Matrix, d. h. sowohl in Biota als auch Sedimenten und Schwebstoffen überwacht werden. Es könnten daher auch sämtliche Stoffe in nur einer ausgewählten Matrix untersucht werden, um das Trendmonitoring möglichst kosteneffizient durchführen zu können.

Die Entscheidung, welche Matrix für die langfristige Trendermittlung (Biota oder Sediment/Schwebstoff) verwendet wird, sollte, je nach Parameter, auf Grundlage der folgenden Kriterien getroffen werden:

- (Vergleichbare) Datenreihe bereits vorhanden, dann Beibehaltung der Matrix, andernfalls Prüfung weiterer Kriterien, d. h.
 - Substanz in gewählter Matrix empfindlich messbar
 - Gewinnung gleichartigen Probenmaterials stabil und reproduzierbar möglich
 - Vorzugsweise in der Matrix, in der auch die UQN überwacht werden

Die Bestimmungsgrenzen (BG) der Trendparameter spielen eine entscheidende Rolle bei der Berechnung der langfristigen Trends, weshalb frühzeitig ein Augenmerk darauf gerichtet werden sollte. Zum einen ist die BG einer der Faktoren, die möglichst konstant gehalten werden sollen, wobei Schwankungen in der BG von Einzelproben durch Matrixeffekte innerhalb der gleichen Größenordnung meist unschädlich sind. Die OGeWV 2016 enthält generell keine expliziten Anforderungen hinsichtlich der zu erreichenden BG für die Trendüberwachung. Im CIS-Leitfaden findet sich lediglich der Hinweis, dass die Vorgaben der Richtlinie 2009/90/EG und somit der OGeWV 2016 (Anlage 9, Punkt 1.3) berücksichtigt werden sollten, d. h. die BG höchstens 30 % der jeweiligen UQN betragen soll. Für Stoffe, die in der Matrix Biota geregelt sind, sollte sich an dieser Vorgabe orientiert werden. Da bisher keine UQN für Stoffe der Trendüberwachung in Sedimenten/Schwebstoffen verankert wurden, ist die Ableitung einer analogen Vorgabe für diese jedoch nicht möglich bzw. müssten zunächst seitens der EU konkretisiert werden.

Folglich sind die BG der Analysenverfahren nach dem Stand der Technik bei vertretbaren Kosten so zu wählen, dass zumindest am Anfang der Messreihe in der gewählten Matrix überwiegend Ergebnisse $> BG$ gemessen werden können. Analysenreihen, die von Anfang der Untersuchung überwiegend aus Messwerten $< BG$ bestehen, sind für die nachgelagerte Trendanalyse nicht nutzbar. In diesen Fällen sollte entweder ein Neustart in derselben Matrix mit verbesserter BG oder ein Wechsel der Matrix in Erwägung gezogen werden. Dabei sollte außerdem vorausschauend berücksichtigt werden, dass durch diese und andere Änderungen, z. B. auch bzgl. neuer stofflicher Vorgaben, ggf. immer wieder mit einer neuen Datenreihe begonnen werden müsste.

2.2 Biota

Für Trenduntersuchungen in Biota sind Fische, Weichtiere (z. B. Muscheln) oder weitere Wirbellose (z. B. Krebstiere) zu verwenden (Anlage 13 der OGewV 2016). Dabei können die Organismen entweder direkt dem zu untersuchenden Gewässer entnommen werden (passives Monitoring) oder aktiv eingebracht (insbesondere Muscheln) und über einen definierten Zeitraum exponiert werden (aktives Monitoring).

Für das Trendmonitoring ist sicherzustellen, dass immer eine vergleichbare, homogene Matrix beprobt wird. Insbesondere Art, Alter, Größe, verwendete Gewebeteile und Zeitpunkt innerhalb des Jahres (außerhalb der Laichzeit) der zu untersuchenden Biota sind messstellen- und parameterscharf festzulegen und zu dokumentieren. Die Untersuchung von Poolproben ist zulässig.

Die Analyseergebnisse aus dem Trendmonitoring können prinzipiell auch für die Überwachung der UQN herangezogen werden, sofern die Analytik in der für die UQN-Überwachung festgelegten Matrix erfolgt und die Methoden den Anforderungen gemäß Anlage 9 Absatz 1 der OGewV 2016 genügen.

2.2.1 Passives Monitoring

Das Vorhandensein geeigneter Biota hängt von den jeweiligen Gewässertypen ab, so dass die Auswahl der für das Trendmonitoring geeigneten Spezies auf die jeweils anzutreffenden Begebenheiten abzustimmen ist. Es sind gewässertypische und möglichst standorttreue Organismen auszuwählen, die möglichst häufig (d. h. regelmäßig und in ausreichender Abundanz) in dem zu untersuchenden Gewässer auftreten.

Bei Fischen sind, im Gegensatz zum UQN-Abgleich, je Fischart pro Untersuchungsjahr mindestens zehn Individuen einer definierten Größenklasse, möglichst drei Jahre alt, für Messungen in der Muskulatur und/oder der Leber zu verwenden (Anlage 13 Absatz 2 der OGewV 2016). Bei Verwendung anderer Tierarten (z. B. Muscheln oder Krebstiere) sollten in Anlehnung an die Vorgaben bei Fischen ebenfalls mindestens je zehn gleichartige Individuen genutzt werden, um repräsentative Daten (und gleichzeitig ausreichend Probenmaterial) zu erhalten.

2.2.2 Aktives Monitoring

Der Expositionszeitraum, der Probenahmezeitpunkt, die technische Ausstattung der Expositionseinrichtung und die Größenklasse der verwendeten Art sind zu standardisieren. Der Expositionszeitraum sollte mindestens sechs Wochen betragen. Beim aktiven Monitoring ist besonders darauf zu achten, dass keine Neozoen in Gewässer eingebracht werden, in denen sie sich bisher noch nicht als Population etabliert hatten. Im Einzelfall ist dies vorab zu prüfen.

2.3 Sedimente

Sedimentuntersuchungen bieten sich insbesondere in Stand-, Übergangs- und Küstengewässern sowie in strömungsberuhigten Zonen von Fließgewässern (z. B. oberhalb von Wehren, Buhnen) an. Um möglichst feinkörniges und rezent abgelagertes Sediment erhalten zu können, sollte die Probenahme nur die obere Sedimentschicht (bis ca. 5 cm) erfassen.

Zum Erhalt möglichst repräsentativer und vergleichbarer Untersuchungsergebnisse werden in einem definierten Streckenabschnitt einer Messstelle mindestens jeweils 4 bis 5 Einzelproben aus der Sedimentoberfläche entnommen und zu einer Mischprobe vereinigt. In tieferen Seen sowie Übergangs- und Küstengewässern ist die o.g. Teilprobenmindestanzahl teilweise nicht umsetzbar. Die Sedimentproben werden im Binnenbereich zu Niedrigwasserzeiten entnommen. Im tidebeeinflussten Küstenbereich werden sie bei Tideniedrigwasser entnommen.

Bei nur einem Untersuchungstermin pro Jahr ist darauf zu achten, dass die Probenahme möglichst zur jeweils gleichen Jahreszeit bzw. bei ähnlichen hydrologischen Bedingungen wie in den Vorjahren stattfindet.

Nach Anlage 13 Absatz 3 der OGewV 2016 sind die Sedimentuntersuchungen prinzipiell wie folgt durchzuführen:

- Schwermetalle in der < 63 µm-Fraktion

Hinweis: Liegen langjährige Datenreihen hinsichtlich der < 20 µm-Fraktion (oder anderen Fraktionen) vor, so wird empfohlen, diese an wenigen ausgewählten Messstellen weiter fortzuführen. Diese dürfen nicht für die Trendberechnung genutzt werden, können aber als Warn-Indikator genutzt werden, um frühzeitig Handlungsoptionen zu erarbeiten. Eine Umrechnung auf die Fraktion < 63 µm ist nicht ratsam bzw. nur in gut belegten Einzelfällen möglich.

- Organische Stoffe in der < 2 mm-Fraktion

Die Befunde der < 2 mm-Fraktion können nur dann für Trendergebnisse verwendet werden, wenn der Anteil der < 63 µm-Fraktion bestimmt und dokumentiert wird und dieser bei den einzelnen Proben innerhalb des betrachteten Zeitraums jeweils eine vergleichbare Größenordnung aufweist.

Hinweis: Eine Nutzung/Umrechnung von Bestandsdaten, die in einer anderen Fraktion (z. B. nach OGewV 2011) untersucht wurden, ist nicht zulässig.

2.4 Schwebstoffe

Zur Entnahme von Schwebstoffproben kommen hauptsächlich folgende Techniken zur Anwendung: Durchlaufzentrifugen, stationäre und mobile Absetzbecken bzw. entsprechende Sedimentfallen oder Sammelkästen. Zudem können Schwebstoffproben über Filtration gewonnen werden. Ein Wechsel der Probenahmetechnik ist grundsätzlich zulässig, sollte aber gut begründet und mit Vergleichsuntersuchungen untermauert werden.

Die Probenmenge, die in einem Absetzbecken oder in einer Zentrifuge gesammelt wird, kann in trübstoffarmen Gewässern ggf. nicht ausreichen, um alle Parameter gleichzeitig in einer Probe zu bestimmen. Daher ist es möglich, verschiedene Sammelarten parallel zu betreiben und die Parameter aufzuteilen.

Schwebstoffuntersuchungen zur Trendermittlung sind mindestens zweimal pro Jahr durchzuführen, wobei eine äquidistante Probenahmefrequenz anzustreben ist. Schwebstoffuntersuchungen sind nach Anlage 13 Absatz 4 der OGewV 2016 unter Berücksichtigung folgender Kriterien durchzuführen:

- Bei der Schwebstoffentnahme mittels Durchlaufzentrifuge erfolgt die Untersuchung sowohl der Schwermetalle als auch der organischen Stoffe in der Gesamtprobe

Hinweis: Das auf diese Weise gewonnene Material entspricht erfahrungsgemäß in etwa der Feinkornfraktion < 63 µm.

- Bei der Schwebstoffentnahme mittels Absetzbecken bzw. Sammelkästen erfolgt die Untersuchung wie folgt:

Schwermetalle in der < 63 µm-Fraktion

Hinweis: Liegen langjährige Datenreihen hinsichtlich der < 20 µm-Fraktion (oder anderen Fraktionen) vor, so wird empfohlen, diese an wenigen ausgewählten Messstellen weiter fortzuführen. Diese dürfen nicht für die Trendberechnung genutzt werden, können aber als Warnindikator genutzt werden, um frühzeitig Handlungsoptionen zu erarbeiten. Eine Umrechnung auf die Fraktion <63 µm ist nicht ratsam bzw. nur in gut belegten Einzelfällen möglich.

Organischen Stoffe in der < 2 mm-Fraktion

Hinweis: Da die Korngrößenzusammensetzung bei mittels Absetzbecken bzw. Sammelkästen entnommenen Schwebstoffproben erfahrungsgemäß relativ konstant ist, muss der jeweilige Anteil der < 63 µm-Fraktion nach der OGewV nicht zwingend bestimmt werden.

3 Statistische Methoden und Trendanalyse

Das generelle Vorgehen bei der Datenprüfung und anschließenden statistischen Trendanalyse ist in Abbildung 1 schematisch dargestellt und wird in den folgenden Unterkapiteln beschrieben.

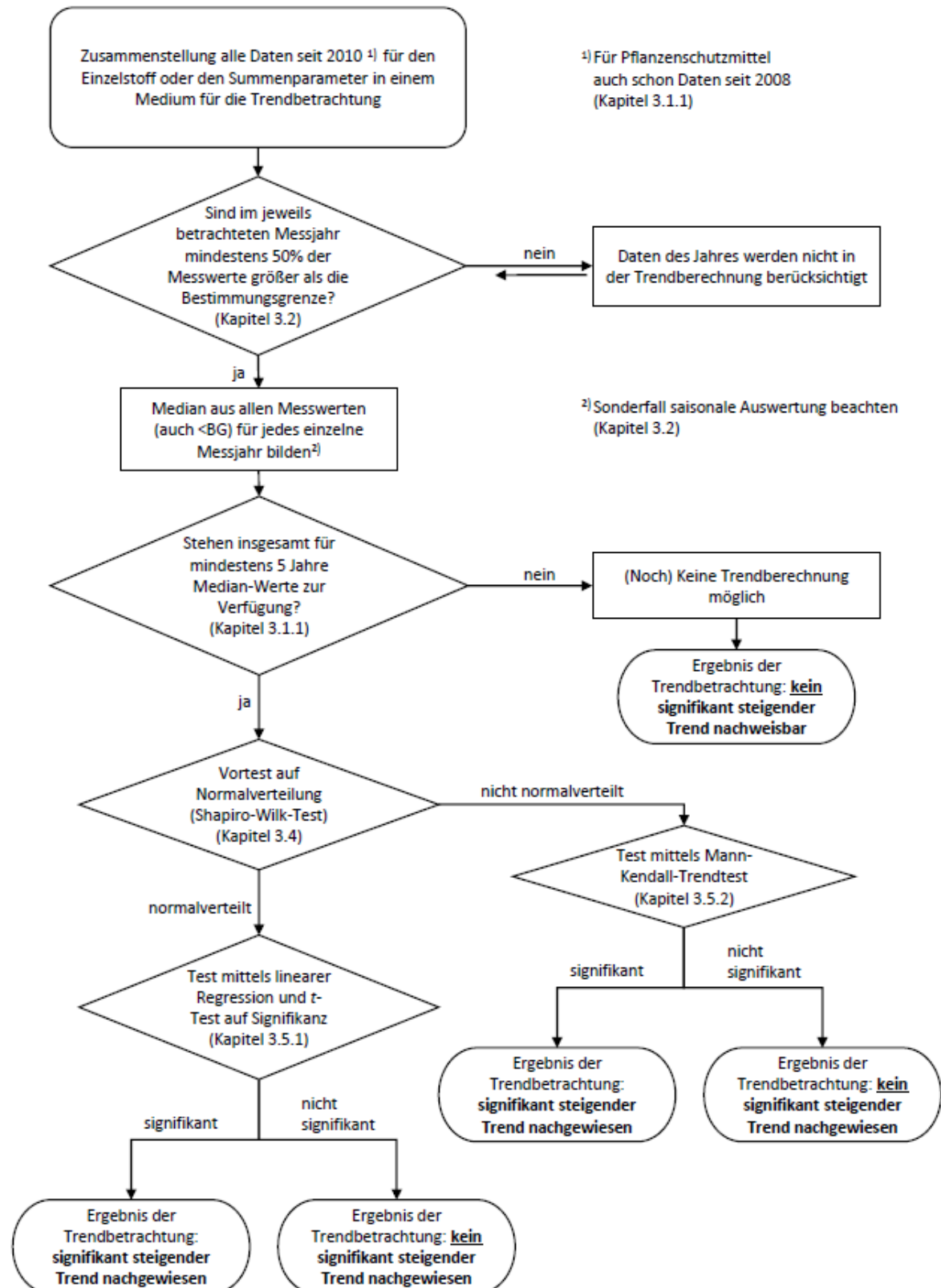


Abbildung 1: Fließschema zur Datenprüfung und Trendanalyse

3.1 Anforderungen an das Datenkollektiv

3.1.1 Zeitraum

Eine statistische Trendanalyse kann nur dann durchgeführt werden, wenn eine ausreichende und robuste Datengrundlage vorliegt. Es wird empfohlen, dass die Daten ab dem Jahr 2010, dem Referenzjahr nach § 4 Abs. 3 OGeV 2011, für die Aufstellung des ersten Bewirtschaftungszeitraums genutzt werden. Für Pflanzenschutzmittel war dies bereits ab 2008 möglich. Gemäß RaKon A können grundsätzlich auch Daten aus der Zeit vor der Aufstellung des ersten Bewirtschaftungszeitraumes genutzt werden. Zur Unterstützung der Auswahl eines geeigneten Zeitraums können, z. B. bei Verdacht von Struktur- bzw. Trendbrüchen in der Datenreihe, ggf. zusätzliche statistische Hilfsmittel genutzt werden.

Unabhängig davon müssen jedoch immer methodisch vergleichbare Werte für mindestens fünf statistisch auswertbare Jahre vorliegen (siehe Kapitel 3.2), um eine Trendberechnung durchführen zu können. Bei dem nach §15 Abs.1 der OGeV 2016) geforderten Maximalintervall von drei Jahren liegen die fünf Datensätze i. d. R. nach zwölf Jahren, also genau nach zwei Bewirtschaftungszyklen, vor. Wurde abweichend von der Mindestanforderung häufiger gemessen, so kann die Trendberechnung formell eher erfolgen, d. h. im Extremfall mit Daten aus fünf aufeinanderfolgenden Jahren. Es empfiehlt sich jedoch, etwaige, sich über solch kurze Zeiträume abzeichnenden, signifikant steigende Trends nur vorläufig in Überlegungen zur Maßnahmenplanung einzubeziehen und die endgültige Trendberechnung mit weiteren Datensätzen zu verifizieren.

3.1.2 Einheiten und Gehaltsangaben

Neben der Sicherstellung der gleichen Einheiten je Parameter (z. B. µg/kg) sollte bei der Prüfung der Datensätze berücksichtigt werden, dass sich die Schadstoffgehalte in Sedimenten und Schwebstoffen auf die Trockensubstanz und für Biota auf das Nass- bzw. Frischgewicht beziehen. Eine zusätzliche Normierung (z. B. auf den Fettgehalt oder den Gehalt an organisch-gebundenem Kohlenstoff) wird für das Trendmonitoring nicht durchgeführt.

3.2 Vorbereitung des Datenkollektivs und Aggregation der Messwerte

Die Trendermittlung erfolgt auf Basis von Messwerten für Einzelstoffe bzw. für Summenparameter aus Beprobungen, die entweder

- einmal pro Jahr stattfinden oder
- mehrmals im Jahr stattfinden

Hinweis: Werte < BG werden bei der mathematischen Summenbildung auf Null gesetzt. Ergibt sich eine Summe kleiner der größten BG eines der Einzelstoffe, so wird auch die Summe < BG (= höchste BG eines Einzelstoffes) gesetzt.

Vor der eigentlichen Trendberechnung werden die Messwerte für jeweils ein Kalenderjahr aggregiert (Mediane, fünfzigste Perzentile), so dass pro Jahr immer nur ein Wert in die Trendbetrachtung einfließt. Aus einer geraden Anzahl von Messwerten (z. B. vier) wird der Median durch Interpolation gebildet, indem das arithmetische Mittel aus den beiden mittleren Messwerten (z. B. Rang 2 und 3) gebildet wird. Durch den Median werden potentielle Ausreißer weitestgehend eliminiert und eine Normalverteilung der Messwerte wahrscheinlicher.

Sonderfall (insbesondere bei Biota; Muscheln): Wenn saisonale Probenahmen durchgeführt werden und aus Voruntersuchungen bekannt ist oder es sich z. B. physiologisch begründen lässt, dass sich die Stoffgehalte zu unterschiedlichen Zeitpunkten (z.B. Frühjahr; Herbst) signifikant unterscheiden und/oder für einige Jahre durch Ausfall der Probenorganismen nur ein Messergebnis vorliegt, kann ersatzweise die getrennte Auswertung der jeweiligen die Zeiträume erfolgen.

Die Prüfung der Bestimmungsgrenzen je Parameter und Messjahr ist ein wichtiger Schritt, bevor mit der eigentlichen Trendanalyse begonnen werden kann. Sind mehr als 50% der Messwerte eines Kalenderjahres < BG, so wird der Datensatz bei der Berechnung nicht weiter betrachtet, d. h. von der Auswertung (statistische Trendanalyse) ausgeschlossen, und es sollte über zukünftige Änderungen der Messhäufigkeit oder der Analytik entschieden werden. Bei allen anderen Datensätzen können verschiedene Konstellationen auftreten, deren Behandlung in Tabelle 2 beschrieben ist. Werden gemäß der Tabelle in Anlage 10 der OGeWV genau zwei Messwerte pro Jahr erhoben, dann wird der Mittelwert (= Median) mit BG/2 gebildet, sofern einer der beiden Messwerte > BG ist.

Tabelle 2:

Umgang mit Messwerten in Abhängigkeit der BG im Betrachtungszeitraum. Jahre, in denen mehr als die Hälfte (> 50%) der Messwerte < BG ist, werden a priori von der statistischen Trendberechnung ausgeschlossen.

Konstellation	Messwerte	Konsequenz
BG konstant über alle Messjahre	Alle Messwerte \geq BG	Daten unmittelbar verwendbar
	Messwerte < BG	Daten verwendbar, Werte < BG gehen mit BG/2 in die Berechnung des Medians ein
BG konstant im Messjahr, veränderlich über alle Messjahre	Alle Messwerte \geq BG	Daten unmittelbar verwendbar
	Messwerte < BG	Daten verwendbar, Werte < BG gehen mit der halben BG in die Berechnung des Medians ein
BG veränderlich im Messjahr und veränderlich über alle Messjahre (z.B. durch Matrixeffekte)	Alle Messwerte \geq BG	Daten unmittelbar verwendbar
	Messwerte < BG	Daten verwendbar, Werte < BG gehen mit BG/2 in die Berechnung des Medians ein

3.3 Statistische Tests und Trendberechnung

Die Feststellung eines signifikant steigenden Trends der Konzentrationen bzw. Gehalte prioritärer Stoffe, die in Sedimenten oder Biota oder Schwebstoffen akkumulieren, erfolgt mit Hilfe von statistischen Verfahren (Statistische Tests, ggf. in Kombination mit linearer Regressionsanalyse). Die Überprüfung, ob eine beobachtete Zunahme der Konzentration signifikant ist - also nicht durch zufällige Schwankungen erklärt werden kann – erfolgt mit Hilfe einer der beiden in der OGeWV 2016, Anlage 13, Punkt 5 genannten statistischen Methoden:

- Trendberechnung mittels linearer Regression und Signifikanzabschätzung mittels t-Test
- Trendermittlung mittels Mann-Kendall-Trendtest

Beide Verfahren unterscheiden sich hinsichtlich Ihrer Teststärke, weshalb die OGeWV 2016 grundsätzlich die Trendberechnung mittels linearer Regression (t -Test) gegenüber dem Mann-Kendall-Trendtest favorisiert. Jedoch ist die Anwendung des t -Tests auf normalverteilte Daten limitiert und die Anwendbarkeit muss mit Hilfe von Vortests nachgewiesen werden. Bei nicht normalverteilten Daten kommt der (rangbasierte und etwas weniger teststarke) Mann-Kendall-Trendtest zur Anwendung.

3.4 Vortest auf Normalverteilung

Um eine Entscheidung hinsichtlich der Auswahl eines der beiden o. g. Trendtests, d. h. zwischen dem t -Test oder dem nicht-parametrischen (verteilungsfreien) Mann-Kendall-Trendtest treffen zu können, ist das Datenkollektiv (d. h. fünf oder mehr Einzelwerte/Mediane) vorab auf Normalverteilung hin zu überprüfen und entsprechend zu dokumentieren.

Es wird empfohlen, die Prüfung auf Normalverteilung mit Hilfe des Shapiro-Wilk-Tests vorzunehmen, da dieser speziell für die Prüfung auf Normalverteilung entwickelt wurde und sich insbesondere für kleine Datenkollektive ($n > 3$) durch eine vergleichsweise hohe statistische Power auszeichnet.

Die Nullhypothese lautet - H_0 : Die Zufallsvariable folgt einer Normalverteilung.

Die Alternativhypothese lautet - H_a : Die Zufallsvariable folgt keiner Normalverteilung

Die Prüfgröße W des Shapiro-Wilk-Test wird anhand des geprüften Datenkollektivs (x_i -Werte) wie folgt berechnet:

$$W = \frac{b^2}{(n-1)s_x^2} = \frac{b^2}{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2}$$

mit dem arithmetischen Mittelwert \bar{x} aus x_i bzw. der korrigierten (empirischen) Stichprobenvarianz:

$$s_x^2 = \frac{1}{n-1} \cdot \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2$$

Für die Berechnung des Zählers ($b^2 =$ erwartete Varianz der Stichprobe bei Normalverteilung) werden die Werte der Stichprobe zunächst in aufsteigender Reihenfolge sortiert und anschließend die (quadrierte) Summe der paarweisen Differenzen von außen nach innen (größter und kleinster Wert, zweitgrößter und zweitkleinster Wert usw.), jeweils multipliziert mit einem testspezifischen Koeffizienten, gebildet:

$$b^2 = \left[\sum_{i=1}^m a_i (x_{n+1-i} - x_i) \right]^2$$

Im Fall einer geraden Stichprobengröße n werden alle Werte berücksichtigt und bei einer ungeraden Anzahl bleibt der mittlere Wert unberücksichtigt.

Nach der Berechnung der Prüfgröße W wird deren Wahrscheinlichkeit p bestimmt. Ist die Wahrscheinlichkeit höher als das Signifikanzniveau α , so wird die Nullhypothese beibehalten, d. h. die Daten sind normalverteilt und es wird der t -Test für die Trendanalyse verwendet. Bei geringerer Wahrscheinlichkeit wird die Nullhypothese abgelehnt, d. h. die Daten sind nicht normalverteilt und der Mann-Kendall-Test muss für die Trendberechnung genutzt werden.

Alle Tests auf Normalverteilung sollten als zweiseitige Tests mit einem Signifikanzniveau von $\alpha = 0,05$ ($p = 0,95$) durchgeführt werden. Eine zusätzliche Prüfung des Datenkollektiv

auf Varianzhomogenität (Homoskedastizität) ist aufgrund des Vorliegens nur einer zu prüfenden Stichprobe für die Trendbetrachtung nicht notwendig

Für die Durchführung des Vortests auf Normalverteilung mittel Shapiro-Wilk-Test steht in der Anlage 2 ein Exceltool zur Verfügung.

3.5 Haupttests auf Vorliegen eines Trends

Je nach Ergebnis der Prüfung auf Normalverteilung (Vortest) wird die Trendanalyse entweder mittels linearer Regression (in Kombination mit dem t -Test) oder dem Mann-Kendall-Test durchgeführt.

Da jeweils nur auf einen steigenden Trend als Nullhypothese getestet wird, handelt es sich jeweils um einseitige Tests. Ein steigender Trend ist dann als signifikant zu bezeichnen, wenn die statistische Wahrscheinlichkeit, dass es sich um einen steigenden Trend handelt, mindestens 95 % ($p = 0,95$) beträgt (d. h. die Irrtumswahrscheinlichkeit kleiner als 5 % ist; dies entspricht einem Signifikanzniveau $\alpha = 0,05$ bei einem einseitigen bzw. $0,1 (= 2\alpha)$ bei der alternativen Nutzung eines zweiseitigen Tests).

3.5.1 Lineare Regressionsanalyse mittels t -Test

Gemäß Anlage 13 der OGewV 2016 gilt:

- Liegt eine Normalverteilung der Messergebnisse vor, wird der Trend mittels linearer Regression ermittelt. Die Signifikanz wird mit Hilfe eines t -Tests ermittelt, mit dem die Nullhypothese, d.h. dass die Steigung der Regressionsgeraden Null ist, getestet wird. Trifft die Nullhypothese zu bzw. ist sie nicht mit der geforderten Sicherheit widerlegbar, liegt kein signifikanter Trend vor.
- Die Testgröße t lautet:

$$t = \left| \frac{r \cdot \sqrt{n-2}}{\sqrt{1-r^2}} \right| \text{ mit } t_{krit.}(n-2; 1-\alpha)$$

r = Korrelationskoeffizient
 n = Anzahl der Messwerte
 α = Signifikanzniveau

Für die Durchführung des t -Tests steht in der Anlage 2 ein Exceltool zur Verfügung.

3.5.2 Mann-Kendall-Trendtest

Gemäß Anlage 13 der OGewV 2016 gilt:

- Nur wenn eine Normalverteilung der Daten nicht gegeben ist, wird der Mann-Kendall-Trendtest angewendet, mit dem die Nullhypothese, d.h. dass kein monotoner Trend vorliegt bzw. die Prüfgröße normalverteilt ist, getestet wird. Trifft die Nullhypothese zu bzw. ist sie nicht mit der geforderten Sicherheit widerlegbar, liegt kein signifikanter Trend vor.

- Die Testgröße S lautet:

$$S = \sum_{i=1}^{n-1} \sum_{j=i+1}^n \operatorname{sgn}(x_j - x_i) \quad \text{mit} \quad \operatorname{sgn}(x_j - x_i) = \begin{cases} 1 & \text{falls } x_j - x_i > 0 \\ 0 & \text{falls } x_j - x_i = 0 \\ -1 & \text{falls } x_j - x_i < 0 \end{cases}$$

- Ein Trend liegt vor, d. h. die Prüfgröße S ist nicht normalverteilt, wenn $z > z_{krit.}$. Der kritische Wert $z_{krit.}$ ergibt sich aus dem Quantil der Standardnormalverteilung für die vorgegebene Wahrscheinlichkeit $p = 1 - \alpha$ ($z = 1,96$ für $p = 0,95$). Der z-Wert kann aus der Prüfgröße S und dessen Varianz berechnet werden:

$$z = \frac{|S|}{\sqrt{\operatorname{Var}(S)}} \quad \text{mit} \quad \operatorname{Var}(S) = n(n-1)(2n+5)/18$$

Für die Durchführung des Mann-Kendall-Tests steht in der Anlage 2 ein Exceltool zur Verfügung.

3.6 Weitere Hinweise zur Trendanalyse

- Erweiterte Messunsicherheit: Analog zum UQN-Abgleich bei der Zustandsbewertung werden etwaige analytische Messunsicherheiten bei der Trendbetrachtung nicht berücksichtigt, da diese i. d. R. normalverteilt sind und folglich gleichmäßig um den „wahren“ Messwert streuen sollten. Damit die Trendentwicklung vom analytischen Fehler separiert werden kann, ist zudem die oben angegebene Mindestzeitspanne bei der Trendbetrachtung zu berücksichtigen.
- Berechnung des Medians: In Programm Microsoft Excel sollte für die Medianberechnung die Funktion MEDIAN, QUANTIL.INKL oder QUARTILE.INKL genutzt werden, da die hier zugrundeliegende Berechnungsmethode auch in anderen Programmiersprachen verbreitet ist (z. B. R, Python).
- Expertise: Bei der Einordnung der Berechnungsergebnisse der Trendtests ist auch immer eine Expertenbeurteilung empfehlenswert.

Anlagen

- ***Anlage 1: Bundesweites Messnetz zur langfristigen Trendüberwachung***
 - **Tabelle A1: Trendmessnetz für Schwebstoff-/ Sedimentuntersuchungen (PDF)**
 - **Tabelle A2: Trendmessnetz für Biota-Untersuchungen (PDF)**

- ***Anlage 2: Auswertewerkzeuge***
 - **Anlage 2.1
Exceltool: Beispieltabelle für Vortest auf Normalverteilung und Trendberechnung (Excel-Datei)**
 - **Anlage 2.2
Exceltool (Version Libreoffice): Beispieltabelle für Vortest auf Normalverteilung und Trendberechnung (Excel-Datei)**
 - **Anlage 2.3
R-Skript: Beispielprogrammcode für Vortest auf Normalverteilung und Trendberechnung (PDF)**