
iMolch / Nitrat_Molch – Ausweisung und Bewirtschaftung nitratbe- lasteter Grundwasservorkommen in Deutschland

Teilbericht: Flächenhafte Modellierung der Nitratkon- zentrationen im Grundwasser Deutsch- lands mit Random Forest

Auftraggeber: Bundesministerium für Forschung, Technologie und Raumfahrt
(BMFTR)

Auftragnehmerin: HYDOR Consult GmbH
Am Borsigturm 31
13507 Berlin

Bearbeitung: Dipl. Geol. Dr. Stephan Hannappel
M. Sc. Lena Schümann

Berlin, 19.12.2025

Ἀριστον μὲν ὕδωρ – Das Beste aber ist das Wasser

Inhaltsverzeichnis

Anhangsverzeichnis	3
Abbildungsverzeichnis.....	3
Tabellenverzeichnis.....	5
Abkürzungsverzeichnis.....	5
1. Einführung.....	6
2. Methoden zur Übertragung von Messdaten in Flächendaten.....	7
2.1. Deterministische Verfahren.....	7
2.2. Geostatistische Verfahren.....	8
2.3. Verfahren unter Einsatz von Methoden zur künstlichen Intelligenz.....	8
2.4. Schlussfolgerungen zur Auswahl einer Methode.....	9
3. Datengrundlagen.....	10
3.1. Flächenbasierte Eingangsdaten.....	10
3.1.1. Hydrogeologische Informationen.....	10
3.1.2. Landnutzung	10
3.1.3. Hydrologische und klimatische Variablen	11
3.1.4. Stickstoffüberschüsse und Bodeninformationen.....	11
3.1.5. Weitere flächenbasierte Prädiktoren.....	11
3.2. Punktbasierte Eingangsdaten	13
3.2.1. Aufbereitung und Selektion der Messstellen.....	13
4. Entwicklung einer Regionalisierungsmethode.....	17
4.1. Aufbereitung der Daten	17
4.1.1. Aufbereitung allgemeiner Punktdaten und flächenbasierter Prädiktoren.....	17
4.1.2. Regionalisierung chemischer Parameter (Eisen, Sauerstoff und Sulfat).....	18
4.2. Modelltraining und -Bewertung.....	18
4.3. Feature-Selektion.....	19
4.3.1. Vorgehen bei unvollständigen und redundanten Features.....	19
4.3.2. Analyse der Häufigkeitsverteilung und Selektion der Raumgliederung	20
4.3.3. Permutation Feature Importance	21
4.4. Anwendung des Modells auf Rasterdaten.....	22
5. Ergebnisse	23
5.1. Einfluss der Prädiktoren und Modellreduktion	23
5.2. Einfluss der Regionalisierung der chemischen Parameter auf die flächenhafte Nitratvorhersage.....	26
5.3. Räumliche Darstellung der modellierten Nitratkonzentrationen	27
6. Validierung, Diskussion und Bewertung.....	34
6.1. Validierung der Modellergebnisse	34

6.2.	Bewertung der Regionalisierungsverfahren.....	34
6.2.1.	Diskussion der Prädiktor-Relevanz.....	34
6.2.2.	Einfluss der Interpolation auf die Hotspot-Identifikation	35
6.3.	Räumliche Analyse der Vorhersageunsicherheit	36
6.4.	Vergleich mit weiteren, aktuell vorliegenden Modellergebnissen	37
7.	Schlussfolgerung und Ausblick	41
8.	Literatur	42

Anhangsverzeichnis

Anhang 1: Flächenhafte Darstellung der Ausprägungsklassen der in die Modellierung einbezogenen Prädiktoren (s. Tabelle 1).....	44
Anhang 2: Landnutzung	54
Anhang 3: Hydrogeologische Raumgliederung	56
Anhang 4: Regionalisierung der Redox-Parameter	57
Anhang 5: Räumliche Verteilung der modellierten NO₃-Konzentrationen	63

Abbildungsverzeichnis

Abbildung 1: Mittlere Nitratkonzentrationen der 10.023 Messstellen in den hydrogeologischen Großräumen als punktbezogene Datenbasis der Modellierung (Quelle: UBA 2026, dort Abb. 57 im Anhang 4)	13
Abbildung 2: (Beispiel) Nitratmessstellen	15
Abbildung 3: Dendrogramm für numerische Features	20
Abbildung 4: Dendrogramm für kategoriale Features (Hamming-Distanz)	20
Abbildung 5: Häufigkeitsverteilung nach Raumgliederung (aktualisieren)	21
Abbildung 6: Rangfolge der permutierten Feature Importance im Basismodell zur Prognose der Nitratkonzentration.....	23
Abbildung 7: Partial Dependence Plots (PDPs) exemplarisch dargestellter Modellprädiktoren auf die vorhergesagten Nitratkonzentrationen	24
Abbildung 8: Vergleich der Modellgüte für die reduzierten Modelle, links Raum und rechts Großraum 25	25
Abbildung 9: Gegenüberstellung der gemessenen und modellierten Nitratkonzentration. Die rote Linie repräsentiert die ideale Vorhersage.	26
Abbildung 10: Modellierter Reduktion der Stickstofffrachten von der ungesättigten Zone zum Grundwasser in den MoRE-Analysegebieten (Quelle: Knoll et al. 2024).....	28
Abbildung 11: Vorhersage der NO ₃ -Konzentrationen im Grundwasser mit Kriging-RF.....	29
Abbildung 12: Vorhersage der NO ₃ -Konzentrationen im Grundwasser mit IDW-RF	30
Abbildung 13: Differenzen der mittels Random Forest modellierten Nitratkonzentrationen zwischen den beiden Modellen RF-IDW und RF-Kriging.....	31
Abbildung 14: Vergleich IDW-RF und Kriging-RF in Gebieten Norddeutschlands mit hoher Viehbesatzdichte	32
Abbildung 15: Vergleich IDW-RF und Kriging-RF in der nördlichen Oberrheinischen Tiefebene in RP33	
Abbildung 16: Vergleich IDW-RF und Kriging-RF im Bereich der Magdeburger Börde in ST	33
Abbildung 17: Räumliche Verteilung der Vorhersageunsicherheit des IDW-RF-Modells. Dargestellt ist die Spannweite des Ensemble-basierten 90 %-Vorhersageintervalls (Differenz aus 95- und 5-Perzentil der Einzelbaum-Prognosen).....	37

Abbildung 18: Nitratkonzentrationen im oberflächennahen Grundwasser in Deutschland, modelliert mit unterschiedlichen Random Forest-Verfahren.....	40
Abbildung 19: Aggregierte Landnutzungseinheiten auf Basis von Corine Land Cover (gruppiert nach Tabelle 9) und klassierte Nitratkonzentrationen an den EG-WRRL-Messstellen der Bundesländer (Mittelwert 2016 bis 2020).....	44
Abbildung 20: Durchlässigkeitsklassen kf nach HUEK 250 und klassierte Nitratkonzentrationen an den EG-WRRL-Messstellen der Bundesländer (Mittelwert 2016 bis 2020).....	45
Abbildung 21: Hydrogeologische Räume entsprechend hydrogeologischer Raumgliederung von Deutschland (HYRAUM) und klassierte Nitratkonzentrationen an den EG-WRRL-Messstellen der Bundesländer (Mittelwert 2016 bis 2020).....	46
Abbildung 22: Bodenarten in Oberböden Deutschlands 1:1.000.000, Version 2.0 (boart1000) und klassierte Nitratkonzentrationen an den EG-WRRL-Messstellen der Bundesländer (Mittelwert 2016 bis 2020).....	47
Abbildung 23: Gehalte an organischer Substanz in Oberböden Deutschlands 1:1000000 (HUMUS1000OB) und klassierte Nitratkonzentrationen an den EG-WRRL-Messstellen der Bundesländer (Mittelwert 2016 bis 2020).....	48
Abbildung 24: Mittlere jährliche Grundwasserneubildung von Deutschland 1:1.000.000 (GWN1000) und klassierte Nitratkonzentrationen an den EG-WRRL-Messstellen der Bundesländer (Mittelwert 2016 bis 2020).....	49
Abbildung 25: Klimatische Wasserbilanz (mehrjähriges Mittel 1961-1990, DWD) und klassierte Nitratkonzentrationen an den EG-WRRL-Messstellen der Bundesländer (Mittelwert 2016 bis 2020).....	50
Abbildung 26: Schutzpotential der Grundwasserüberdeckung und klassierte Nitratkonzentrationen an den EG-WRRL-Messstellen der Bundesländer (Mittelwert 2016 bis 2020).....	51
Abbildung 27: Mittlere jährliche Sickerwasserrate aus dem Boden in Deutschland (SWR1000_250) und klassierte Nitratkonzentrationen an den EG-WRRL-Messstellen der Bundesländer (Mittelwert 2016 bis 2020).....	52
Abbildung 28: Überschuss der landwirtschaftlichen Stickstoff-Flächenbilanz (Kreisebene, Deutschland) und klassierte Nitratkonzentrationen an den EG-WRRL-Messstellen der Bundesländer (Mittelwert 2016 bis 2020).....	53
Abbildung 29: Häufigkeitsverteilung nach Raumgliederung.....	56
Abbildung 30: Ergebnis der interpolierten Eisenkonzentrationen im Grundwasser mit IDW; zusammenfassend dargestellt mit den im Grundwasser an den jeweiligen Messstellen gemessenen Konzentrationen.....	57
Abbildung 31: Ergebnis der interpolierten Sauerstoffkonzentrationen im Grundwasser mit IDW; zusammenfassend dargestellt mit den im Grundwasser an den jeweiligen Messstellen gemessenen Konzentrationen.....	58
Abbildung 32: Ergebnis der interpolierten Sulfatkonzentrationen im Grundwasser mit IDW; zusammenfassend dargestellt mit den im Grundwasser an den jeweiligen Messstellen gemessenen Konzentrationen.....	59
Abbildung 33: Ergebnis der interpolierten Eisenkonzentrationen im Grundwasser mit Kriging; zusammenfassend dargestellt mit den im Grundwasser an den jeweiligen Messstellen gemessenen Konzentrationen.....	60
Abbildung 34: Ergebnis der interpolierten Sauerstoffkonzentrationen im Grundwasser mit Kriging; zusammenfassend dargestellt mit den im Grundwasser an den jeweiligen Messstellen gemessenen Konzentrationen.....	61
Abbildung 35: Ergebnis der interpolierten Sulfatkonzentrationen im Grundwasser mit Kriging; zusammenfassend dargestellt mit den im Grundwasser an den jeweiligen Messstellen gemessenen Konzentrationen.....	62
Abbildung 36: Ergebnis der modellierten Nitratkonzentrationen im Grundwasser mit IDW-RF; zusammenfassend dargestellt mit den im Grundwasser an den jeweiligen Messstellen gemessenen Konzentrationen.....	63
Abbildung 37: Ergebnis der modellierten Nitratkonzentrationen im Grundwasser mit Kriging-RF zusammenfassend dargestellt mit den im Grundwasser an den jeweiligen Messstellen gemessenen Konzentrationen.....	64

Tabellenverzeichnis

Tabelle 1: Verwendete Prädiktoren auf Basis vorhandener Kartenprodukte bzw. Datensätze	12
Tabelle 2: Anzahl der Messstellen mit verfügbaren chemischen Parametern nach Bundesland	16
Tabelle 3: Vergleich der Vorhersagegüte verschiedener Feature-Sets im Random-Forest-Modell	25
Tabelle 4: Statistische Kenngrößen der NO ₃ -Konzentrationen der Messstellen, Kriging-RF und IDW-RF	27
Tabelle 5: Beschreibung der verwendeten CLC-Klassen in Deutschland nach CORINE Land Cover 2018	54
Tabelle 6: Zuordnung der CLC-2018 Codes zu 3 Landnutzungskategorien.....	54
Tabelle 7: Zuordnung der CLC-Codes zu 5 Landnutzungskategorien.....	55
Tabelle 8: Zuordnung der CLC-Codes zu 6 Landnutzungskategorien.....	55
Tabelle 9: Zuordnung der CLC-Codes zu 7 Landnutzungskategorien.....	55

Abkürzungsverzeichnis

BGR	Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe
DWD	Deutscher Wetterdienst
GR	Hydrogeologischer Großraum
GWN	Grundwasserneubildung
HE	Hydrogeologische Einheit
IDW	Inverse Distanzgewichtung
IDW-RF	Kombination aus Inverser Distanzgewichtung und Random Forest
KI	Künstlich Intelligenz
Kriging-RF	Kombination aus Kriging und Random Forest
kwb	Klimatische Wasserbilanz
MPI	mittlere Vorhersageintervall
PDP	Partial Dependence Plot
PFI	Permutation Feature Importance
R	Hydrogeologischer Raum
RF	Random Forest
SWR	Sickerwasserrate
TR	Hydrogeologischer Teilraum

1. Einführung

Im Projekt „iMolch“ wird durch die Entwicklung und Nutzung innovativer Prozess- und Quellindikatoren sowie reaktiver Stofftransportmodelle eine umfassende Zustandsbeschreibung ausgesuchter Grundwasserkörper im Hinblick auf Wasserqualität, Wassermenge und ökologischem Zustand erstellt.

Im untersetzenden und hier dokumentierten Aufstockungsprojekt „NitratMolch“ wurden die für die Ausweisung kritischen Bestandteile näher betrachtet. Zunächst handelt es sich dabei um die Repräsentativität von Grundwassermessstellen und deren Eignung und Eigenschaften hinsichtlich der Ermittlung eines korrekten Abbilds der Grundwasserbeschaffenheit, einschließlich des Nitratgehalts. Dabei geht es um die Anwendung angepasster Modellierungsverfahren, um punktuell gemessene Daten auf eine größere Fläche zu übertragen. Dabei wurden innovative Verfahren der sog. „künstlichen Intelligenz“ (KI) angewandt, um die in vorhandenen großen Datensätzen vorhandenen Zusammenhänge zu erschließen und für die flächige Darstellung nutzbar zu machen.

Verfahren des maschinellen Lernens wurden zur Modellierung hydrochemischer Konzentrationen im Grundwasser auf einen deutschlandweiten Datensatz als sinnvolle Ergänzung zum vom BMBF geförderten Projekt ArNO angewandt. Die Trainingsdaten beruhen auf bundesweit geltenden fachlichen Anforderungen an geostatistische oder vergleichbare Verfahren nach § 6 (2) GrundwV (2022) zur Regionalisierung hydrochemischer Daten im Grundwasser.

Die Modellierung wurde für etwa 10.000 Messstellen (Grundwassermessstellen, Brunnen und Quellen) in Deutschland, basierend auf einem umfangreichen Datensatz zu Nitratkonzentrationen im Grundwasser aus den Jahren 2016 bis 2020 untersucht. Es handelt es sich bei dem Datensatz um einen umfangreich aufbereiteten und qualifizierten Datensatz zu Nitratkonzentrationen im Grundwasser, der mit aktiver Mithilfe der Wasserwirtschaftsverwaltungen der Bundesländer anhand von Messdaten ihrer jeweiligen Messstellen der EG-Wasserrahmenrichtlinienmessnetze im Auftrag (UBA 2026) und mit Genehmigung des Umweltbundesamtes (Geupel 2024) zur Verwendung im hier dokumentierten Projekt generiert wurde. Er bietet ausreichend Potential, um mit Trainingsdaten die Algorithmen zu verbessern.

Unter Nutzung von KI-Methoden (random forest) wurde der Versuch unternommen, eine bundesweite, flächenhafte Regionalisierung der Nitratwerte mit den Daten zu generieren. Das bezieht sich auch auf die zu verwendenden räumlichen Prädiktoren in einer zu optimierenden Merkmalskombination, z. B. hydrogeologischen Einheiten, Stickstoffüberschüsse und Landnutzungsdaten. Mittels Nutzung der entwickelten und fortzuschreibenden random-forest-Algorithmen wurde eine räumlich hochaufgelöste Regionalisierung der Nitratwerte im Grundwasser des oberen Grundwasserleiters unter Nutzung vorhandener Prädiktoren (z. B. hydrogeologische Einheiten, Landnutzung, N-Überschüsse, Bodenparameter, Mächtigkeit und Durchlässigkeit der ungesättigten Zone) durchgeführt.

Die Ergebnisse sollen zur Identifikation der Vor- und Nachteile von Modellierungsansätzen beitragen (Liesch et al. 2020, Emde et al. 2022, Frank et al. 2025); Brenning (2024) formuliert:

„Kombinierte und hybride Modelle des maschinellen Lernens mit geostatistischen Komponenten machen derzeit einen bedeutenden Schritt nach vorne. Dennoch liegt neben der mangelnden Modelltransparenz eine große Herausforderung darin, die formulierten Anforderungen zu erfüllen. Nach bisherigem Kenntnisstand stehen zusätzlicher Aufwand, Unsicherheiten und mangelnde Interpretierbarkeit derzeit in keinem guten Verhältnis zum möglichen, aber noch nicht gesicherten Gewinn an Vorhersagegüte, weshalb zunächst weitere Forschung an diesen Verfahren empfohlen wird.“

2. Methoden zur Übertragung von Messdaten in Flächendaten

Die fachliche und gesetzliche Bewertung des Schutzgutes Grundwasser erfordert die flächendeckende Darstellung der Nitratkonzentration.

Die bundesdeutsche Grundwasserverordnung in der aktuellen Fassung aus 2022 enthält in Anlage 2 für Nitrat den Schwellenwert von 50 mg/l als Grundwasserqualitätsnorm gemäß Richtlinie 2006/118/EG. Zudem enthält die Anlage 2 den Hinweis:

„Liegen keine denitrifizierenden Verhältnisse¹ vor, so ist der gemessene Nitratgehalt im Grundwasser maßgeblich. Liegen denitrifizierende Verhältnisse vor, so ist der maßgebliche Wert die Summe aus dem gemessenen Nitratgehalt im Grundwasser und dem ermittelten Denitrifikationswert. Der Denitrifikationswert ist der Wert, der angibt, wie viel Nitrat im Grundwasser bereits abgebaut worden ist. Er ist mit der besten verfügbaren Methode spätestens bis zum Ablauf des 22. Dezember 2025 erstmalig zu ermitteln. Die Parameter, die zur Ermittlung des Denitrifikationswertes erforderlich sind, müssen in Proben analysiert werden, die zeitgleich mit den Proben zur Bestimmung des Nitratgehalts dem Grundwasser entnommen worden sind.“

Ein weiterer Ausgangspunkt besteht aktuell dazu durch die in § 5 Absatz 2 der AVV (2022) enthaltene Regelung:

- Die immissionsbasierte Abgrenzung erfolgt in allen Grundwasserkörpern eines Landes einheitlich durch die Anwendung eines geostatistischen Regionalisierungsverfahren nach Anlage 2

die jedoch derzeit durch eine Übergangsregelung in § 15 Absatz 2 der AVV noch keine bzw. nur eine sehr untergeordnete Anwendung in den Ländern findet. Vielmehr werden demnach noch bis 2028 mögliche deterministische bzw. hydrogeologisch bzw. hydraulisch basierte Verfahren zur flächenhaften Berechnung von Nitratkonzentrationen verwendet.

Da Primärdaten zur Nitratkonzentration im Grundwasser in Deutschland jedoch nur in Form von Messergebnissen für diskrete Messstellen (Punktdaten) vorliegen, ist es notwendig, die punktuellen Messwerte in eine flächenbezogene Darstellung zu überführen. Die Übertragung dieser punktuellen Messwerte auf eine größere Fläche wird als Regionalisierung oder Interpolation bezeichnet. Dabei ist die Wahl der Methode entscheidend, da unterschiedliche Verfahren die räumliche Struktur und Unsicherheiten der Messwerte unterschiedlich abbilden. Es lassen sich drei methodische Ansätze unterscheiden: deterministische, geostatistische sowie explorativ-statistische Verfahren mit Methoden der künstlichen Intelligenz.

2.1. Deterministische Verfahren

Deterministische Verfahren stellen die einfachste Gruppe der räumlichen Interpolationsverfahren dar, mit denen punktuelle Messwerte über mathematische oder geometrische Regeln auf räumliche Raster oder Flächen übertragen werden. Dabei wird angenommen, dass Messpunkte in räumlicher Nähe ähnliche Werte aufweisen, sodass sich aus bekannten Messungen Werte für benachbarte Flächen ableiten lassen. Im Gegensatz zu geostatistischen Verfahren werden dabei jedoch keine Unsicherheiten oder statistischen Zusammenhänge der Daten berücksichtigt.

¹ Nach § 1 Ziffer 5 GrwV (2022): „Verhältnisse, bei denen die für den Denitrifikationsprozess im Grundwasser erforderlichen natürlichen Bedingungen gegeben sind; dies sind insbesondere das Vorliegen sauerstoffarmer Verhältnisse und das Vorhandensein von Abbauprodukten von Denitrifikationsprozessen im Grundwasser wie gelöstes Eisen (II) oder Sulfat.“

Ein bekanntes deterministisches Verfahren ist die Inverse Distanzgewichtung (IDW). Bei IDW wird der Wert an einem unbekanntem Ort als gewichtetes Mittel benachbarter Messpunkte an bekannten Orten berechnet. Nahe Punkte werden dabei stärker berücksichtigt als weiter entfernte. Die Gewichtung ist dabei umgekehrt proportional zur Entfernung und kann über einen Parameter gesteuert werden, der bestimmt, wie stark der Einfluss mit der Entfernung abnimmt.

Zu den Vorteilen deterministischer Methoden zählen (a) die einfache Anwendung, (b) der geringe Rechenaufwand und (c) die klare Nachvollziehbarkeit der Ergebnisse. Sie eignen sich besonders zur ersten Visualisierung von Trends, zur Identifikation von Ausreißern und zur Darstellung von Nachbarschaftsbeziehungen zwischen Messstellen. Einschränkungen bestehen darin, dass sie keine Unsicherheiten berücksichtigen und komplexe räumliche Strukturen oft nur unzureichend abbilden können, weshalb die Ergebnisse für detaillierte Analysen weniger realitätsnah ausfallen können (Li & Heap, 2014)

2.2. Geostatistische Verfahren

Geostatistische Verfahren basieren im Gegensatz zu deterministischen Verfahren nicht nur auf festen mathematischen Regeln, sondern berücksichtigen auch die räumliche Abhängigkeit zwischen Messpunkten. Zwei Punkte, die räumlich näher beieinander liegen, weisen tendenziell eine stärkere Korrelation auf als Punkte, die weit voneinander entfernt sind. Die räumliche Abhängigkeit des Merkmals wird dabei mithilfe von Variogrammen beschrieben. Durch diese Annahme lassen sich Werte im umliegenden Bereich eines bekannten Messpunktes schätzen. Anders als deterministische Verfahren erlauben geostatistische Methoden zudem die quantitative Betrachtung der Zuverlässigkeit ihrer Ergebnisse (Schafmeister 1999).

Das bekannteste geostatistische Interpolationsverfahren ist das sog. Kriging-Verfahren. Es existieren verschiedene Kriging-Varianten, darunter Ordinary Kriging, Universal Kriging und Co-Kriging, die sich in den Annahmen über die zugrunde liegende Variabilität unterscheiden.

Zu den Vorteilen geostatistischer Verfahren zählt, dass neben den Schätzwerten auch Unsicherheitsmaße ermittelt und systematisch räumliche Muster der Daten erkannt werden. Nachteilig ist, dass ein höherer Rechenaufwand besteht, eine gute Datendichte vorausgesetzt werden muss und die Methoden auf bestimmten Modellannahmen beruhen. Zudem sind sie komplexer in ihrer Anwendung.

2.3. Verfahren unter Einsatz von Methoden zur künstlichen Intelligenz

Methoden des maschinellen Lernens haben sich in den Umweltwissenschaften in den vergangenen Jahren als leistungsfähige Werkzeuge etabliert. Im Kern ist maschinelles Lernen ein Ansatz der Datenanalyse, bei dem Computermodelle aus existierenden sog. „Trainingsdaten“ lernen, Muster zu erkennen und auf dieser Basis Vorhersagen zu treffen. Anstatt für jede spezifische Aufgabe explizit programmiert zu werden, optimieren diese Modelle ihre internen Parameter schrittweise, um eine gegebene Problemstellung bestmöglich zu lösen.

Random Forest (RF) ist ein weit verbreitetes Verfahren des maschinellen Lernens, das auf einer Vielzahl von Entscheidungsbäumen basiert. Jeder dieser Bäume wird auf einer zufälligen Teilmenge sowie einer zufälligen Auswahl von Merkmalen der Daten trainiert, wodurch ein vielfältiger und möglichst unkorrelierter Wald entsteht. Für eine Vorhersage wird jeder Entscheidungsbaum einzeln ausgewertet und die Ergebnisse aggregiert. Das Endergebnis ist der Durchschnitt der Vorhersagen (bei Regression) oder die von den meisten Bäumen gewählte Klasse (bei Klassifizierung).

Die Stärke von RF liegt in der Fähigkeit, komplexe, nichtlineare Zusammenhänge zwischen einer großen Anzahl von erklärenden Variablen (Prädiktoren) und der Zielgröße flexibel zu

modellieren, ohne starre Annahmen über die statistische Verteilung der Daten treffen zu müssen. Durch die Kombination vieler Entscheidungsbäume werden Ausreißer und Rauschen in den Daten abgefangen, was die Modellvorhersagen stabilisiert (Breiman 2001). Gleichzeitig können Unsicherheiten abgeschätzt und die relative Bedeutung einzelner Prädiktoren analysiert werden, was die Interpretierbarkeit der Ergebnisse unterstützt (Knoll et al., 2020). Studien wie Knoll et al. (2019) unterstreichen das Potenzial solcher Methoden für die räumliche Umweltmodellierung.

Trotz dieser Vorteile ist die eingeschränkte Interpretierbarkeit von Black-Box-Modellen wie z.B. Random Forest nach wie vor ein zentraler Kritikpunkt. Ein wesentlicher Nachteil ist dabei das Risiko von Overfitting, was die Überanpassung eines Modells an die spezifischen Muster und möglicherweise an das Rauschen der Trainingsdaten beschreibt. Im Gegensatz dazu tritt Underfitting auf, wenn das Modell zu einfach ist und die zugrunde liegende Komplexität der Daten nicht ausreichend abbilden kann. Beides führt dazu, dass das Modell auf neue, ungesehene Daten keine zuverlässigen Vorhersagen treffen kann.

2.4. Schlussfolgerungen zur Auswahl einer Methode

Die flächendeckende Regionalisierung von Nitratkonzentrationen im Grundwasser wird durch deren hohe räumliche Variabilität sowie komplexe, nichtlineare Zusammenhänge mit hydrogeologischen Eigenschaften, Landnutzung und Stickstoffeinträgen erschwert. Geostatistische Verfahren, die im Rahmen der AVV GeA (2022) den zukünftig (ab 2029) verbindlichen Standard darstellen, und auch die übergangsweise zulässigen deterministischen Verfahren stoßen bei dieser Komplexität oft an ihre Grenzen. Dies äußert sich in systematischen Verzerrungen und geringer räumlicher Korrelation der geschätzten Werte (Ohlert et al. 2023).

Die Notwendigkeit, KI-Verfahren wie Random Forest zu nutzen, ergibt sich daraus, dass ausschließlich deterministische bzw. geostatistische Verfahren die signifikante Rolle der hydrochemischen Randbedingungen (z.B. Redoxbedingungen) im Grundwasser nicht abbilden können. Diese Randbedingungen steuern jedoch maßgeblich den Nitratabbau. Untersuchungen, wie die von Ohmer et al. (2025) in Niedersachsen, bestätigen, dass die Integration dieser Prozesslogik entscheidend für die Vorhersagegüte ist.

Für die hier durchgeführte Methodik wurde daher ein hybrider Ansatz gewählt, wobei für die Vorhersage der Nitratkonzentrationen ein Random-Forest-Regressionsmodell zur Anwendung kommt. Eine Herausforderung in der flächendeckenden Anwendung des Modells besteht darin, dass einige der ausgewählten Eingangsvariablen (hydrochemische Messwerte) nur diskret an den Messstellen vorliegen. Um diese Variablen für die Modellierung flächendeckend zu erschließen, werden die fehlenden Werte zunächst mit Kriging und IDW flächenhaft interpoliert. Eine alternative Vorgehensweise, bei der die fehlenden Prädiktoren ebenfalls per Random Forest geschätzt wird („Chained Modelling“), würde zu verzerrten Vorhersagen und überschätzter Modellgüte führen (Hengl et al., 2018).

Die Kombination von Kriging/IDW mit anschließendem Random Forest stellt daher einen robusten, nachvollziehbaren Ansatz dar. Die interpolierten Prädiktoren bilden eine solide Grundlage, um die räumliche Verteilung von Nitrat realitätsnah abzubilden, die komplexen nichtlinearen Zusammenhänge zu erfassen und die Ergebnisse für weiterführende Analysen zu nutzen.

3. Datengrundlagen

3.1. Flächenbasierte Eingangsdaten

3.1.1. Hydrogeologische Informationen

Hydrogeologische Daten sind wichtige Prädiktoren für die Modellierung der Nitratkonzentration im Grundwasser, da die geologische Beschaffenheit und die Durchlässigkeit der Grundwasserleiter die Nitratmobilität und -speicherung entscheidend beeinflussen.

Für das Projekt wurden zwei flächenbasierte hydrogeologische Datensätze genutzt:

1. Hydrogeologische Übersichtskarte 1:250.000 (HÜK250)

Die HÜK250-Karte wurde von den Staatlichen Geologischen Diensten (SGD) der Länder gemeinsam mit der Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe (BGR) erstellt und digital bereitgestellt (HÜK250, Version 1.0.3, 2019). Für das Modell wurden folgende Attribute als Prädiktoren getestet:

- Durchlässigkeit (kf-Wert, m/s)
- Gesteinsart
- Hohlraumart
- Geochemischer Gesteinstyp
- Hydrogeologische Einheit

2. Hydrogeologische Raumgliederung Deutschlands (HYRAUM)

Die hydrogeologische Raumgliederung HYRAUM liefert eine hierarchische Abgrenzung von Gebieten mit ähnlichen hydrogeologischen Eigenschaften in drei übergeordneten Ebenen:

- Hydrogeologische Großräume: 10 Einheiten
- Hydrogeologische Räume: 36 Einheiten
- Hydrogeologische Teilräume: 247 Einheiten

Je nach Modellvariante wurde eine Ebene der hydrogeologischen Raumgliederung (s. Anhang 3 – Hydrogeologische Einheit (HE), Großraum (GR), Raum (R) oder Teilraum (TR) – als kategorialer Prädiktor für das Modell genutzt.

3.1.2. Landnutzung

Die Landnutzungsdaten stammen aus dem CORINE Land Cover 5 ha-Datensatz (CLC5, Stand 2018) des Bundesamtes für Kartographie und Geodäsie (BKG, 2022). Sie liefern eine Klassifikation der Landnutzung, z. B. Ackerland, Grünland, Wald oder Siedlungsflächen, auf einer Mindestflächenauflösung von 5 ha.

Zunächst wurde die originale Klassifikation mit 37 Klassen verwendet und anschließend für das Modell in eine gröbere Gruppierung überführt, um die Daten handhabbar zu machen. Die Zuordnung der einzelnen CLC-Klassen zu den Gruppen ist im Anhang 2 in Tabelle 7 bis Tabelle 9 dokumentiert.

Um den Einfluss der Umgebung auf jede Messstelle zu berücksichtigen, wurde ein 1 km-Radius um die Messpunkte definiert. Innerhalb dieses Puffers wurden die Anteile der Landnutzungsklassen als numerische Features übernommen.

Dieser Ansatz ermöglicht es, die Landnutzung als flächendeckende Variable in das Random Forest Regression-Modell einzubringen und den Einfluss der umliegenden Fläche auf die Nitratkonzentration im Grundwasser abzubilden.

3.1.3. Hydrologische und klimatische Variablen

Für die Modellierung der Nitratkonzentrationen im Grundwasser wurden die klimatische Wasserbilanz sowie Niederschlag als Prädiktoren getestet.

Die Daten stammen vom Deutschen Wetterdienst (DWD) und lagen als ASCII-Rasterdatei (asc-Datei) vor. Um langfristige klimatische Bedingungen abzubilden, wurden die Daten nicht als einzelne Jahreswerte, sondern als Mittelwerte über zwei aufeinanderfolgende Referenzperioden aggregiert: 1961 bis 1990 und 1991 bis 2020. Die klimatische Wasserbilanz (kwb) beschreibt das Verhältnis von Niederschlag zu potenzieller Verdunstung.

Klimatische Variablen sind für die Modellierung der Nitratkonzentrationen von großer Relevanz, da Regionen mit hoher Verdunstung oder geringem Niederschlag eine entscheidend andere Nitratmobilität aufweisen als feuchtere Gebiete. Sie helfen somit, die hydrodynamischen Prozesse des Grundwasserleiters zu erklären.

Die Grundwasserneubildung (GWN) lag als Rasterdatei im TIFF-Format vor und basierte auf den Mittelwerten der Referenzperiode von 1991 bis 2020.

Die Sickerwasserrate (SWR) ist ein eng verwandter, jedoch abzugrenzender hydrologischer Wert. Die SWR beschreibt die mittlere jährliche Sickerwasserhöhe, die den durchwurzelten Bodenbereich im langjährigen Mittel abwärts verlässt. Im Gegensatz zur GWN beinhaltet die SWR zusätzlich den Zwischenabfluss (lateraler Abfluss im Oberboden), der das Grundwasser nicht erreicht.

3.1.4. Stickstoffüberschüsse und Bodeninformationen

Die flächenbezogenen Stickstoffüberschüsse der Landwirtschaft wurden als Datenprodukt des Umweltbundesamtes (UBA) übernommen (Häußermann & Bach, UBA 2026). Die Überschüsse wurden als Mittelwerte über zwei verschiedene Zeiträume (2016 bis 2020 und 1991 bis 2022) aggregiert und separat im Modell getestet. Diese Werte repräsentieren das potenzielle Nitratangebot im Boden.

Eng damit verbunden sind die Eigenschaften des Bodens. Die Bodenart (z. B. Sand, Schluff, Ton) ist ein entscheidender Parameter, da sie die Wasserspeicherfähigkeit, die Durchlässigkeit und somit die Nitratmobilität stark beeinflusst. Die Daten zur Bodenart stammen aus dem BGR-Datensatz "Bodenarten in Oberböden Deutschlands 1:1.000.000 (BOART1000)".

Ebenfalls relevant ist der Humusgehalt (Gehalt an organischer Substanz im Boden), der die Bindungskapazität für Nährstoffe und die mikrobielle Aktivität im Boden beeinflusst und damit die Nitratfreisetzung steuert. Diese Informationen wurden aus dem BGR-Datensatz "Gehalte an organischer Substanz in Oberböden Deutschlands 1:1.000.000 (HUMUS1000OB)" abgeleitet. Der Humusgehalt ist ein entscheidender Faktor für die Nitratfreisetzung, da er die Bindungskapazität für Nährstoffe und die mikrobielle Aktivität im Boden beeinflusst.

3.1.5. Weitere flächenbasierte Prädiktoren

Tabelle 1 dokumentiert alle flächenhaft verwendeten Prädiktoren bzw. Prädiktorengruppen sowie Angaben zu deren Kartenprodukten bzw. online verfügbaren Datensätzen.

Anhang 1 beinhaltet – in der Reihenfolge der Tabelle 1 - zu jedem einzelnen Prädiktor flächenhafte Übersichtskarten zur räumlichen Ausdehnung der jeweiligen Ausprägungsklassen, die im Rahmen der Modellierung in dieser Form i.d.R. verwendet wurden. Aus dem Datensatz der HÜK 250 wurde hier der Parameter ausgewählt, da ihm a priori die größte hydrogeologische Bedeutung beigemessen wird.

Tabelle 1: Verwendete Prädiktoren auf Basis vorhandener Kartenprodukte bzw. Datensätze

Nr	Kartenprodukt/Datensatz	Prädiktor	Datenformat	Link
1	CORINE Land Cover 5 ha CLC5 (2018)	Landnutzung	shp	https://www.geoportal.de/Metadata/206F9836-0493-4E76-872A-33F4A723A321
2	Hydrogeologische Übersichtskarte 1:250.000 von Deutschland (HÜK250)	Durchlässigkeit (m/s), Geochemischer Gesteinstyp Gesteinsart, Hohlraumart Hydrogeologische Einheit	shp	https://www.bgr.bund.de/DE/Themen/Grundwasser/Projekte/Flaechen-Rauminformationen/Huek250/huek250.html
3	Hydrogeologische Raumgliederung von Deutschland (HY-RAUM)	Hydrogeologische Großräume, Hydrogeologische Räume, Hydrogeologische Teilräume	shp	https://www.bgr.bund.de/DE/Themen/Grundwasser/Projekte/Flaechen-Rauminformationen/Byraum/hy-raum.html
4	Bodenarten in Oberböden Deutschlands 1:1.000.000, Version 2.0 (boart1000)	Bodenart	shp	https://www.bgr.bund.de/DE/Themen/Boden/Flaechen-Rauminformationen/Bodenkundliche-Flaecheninformationen/Themenkarten/boart1000ob/boart1000ob_node.html
5	Gehalte an organischer Substanz in Oberböden Deutschlands 1:1000000 (HUMUS1000OB)	Humusgehalt	shp	https://www.bgr.bund.de/DE/Themen/Boden/Flaechen-Rauminformationen/Bodenkundliche-Flaecheninformationen/Themenkarten/humus1000ob/humus1000ob_node.html
6	Mittlere jährliche Grundwasserneubildung von Deutschland 1:1.000.000 (GWN1000)	Grundwasserneubildung	tif	https://numis.niedersachsen.de/trefferanzeige?docuuid=91DB02B4-48A2-4BE3-81E8-99F400108491
7	Klimatische Wasserbilanz (mehrjähriges Mittel, DWD)	Klimatische Wasserbilanz	asc	https://opendata.dwd.de/climate_environment/CDC/grids_germany/multi_annual/water_balance/
8	Schutzpotential der Grundwasserüberdeckung			s. Nr. 2
9	Mittlere jährliche Sickerwasserrate aus dem Boden in Deutschland (SWR1000_250)	Sickerwasserrate	tif	https://www.geoportal.de/Metadata/641D1613-5E4B-43B6-A0CB-723371356E62
10	Überschuss der landwirtschaftlichen Stickstoff-Flächenbilanz (Kreisebene, Deutschland)	Stickstoffbilanz	xlsx	https://gis.uba.de/maps/resources/apps/lu_nflaechenbilanzueberschuss/index.html?lang=de

3.2. Punktbasierte Eingangsdaten

3.2.1. Aufbereitung und Selektion der Messstellen

Die Grundlage für die hier verwendeten Daten bildet ein umfassend aufbereiteter Datensatz aus dem UBA-Projekt zur ‚Entwicklung einer nationalen und regional aufgelösten Obergrenze für reaktiven Stickstoff‘. Der Datensatz umfasst 10.023 Messstellen in Deutschland. In Abbildung 1 sind die Messstellen in den hydrogeologischen Großräumen Deutschlands dargestellt.

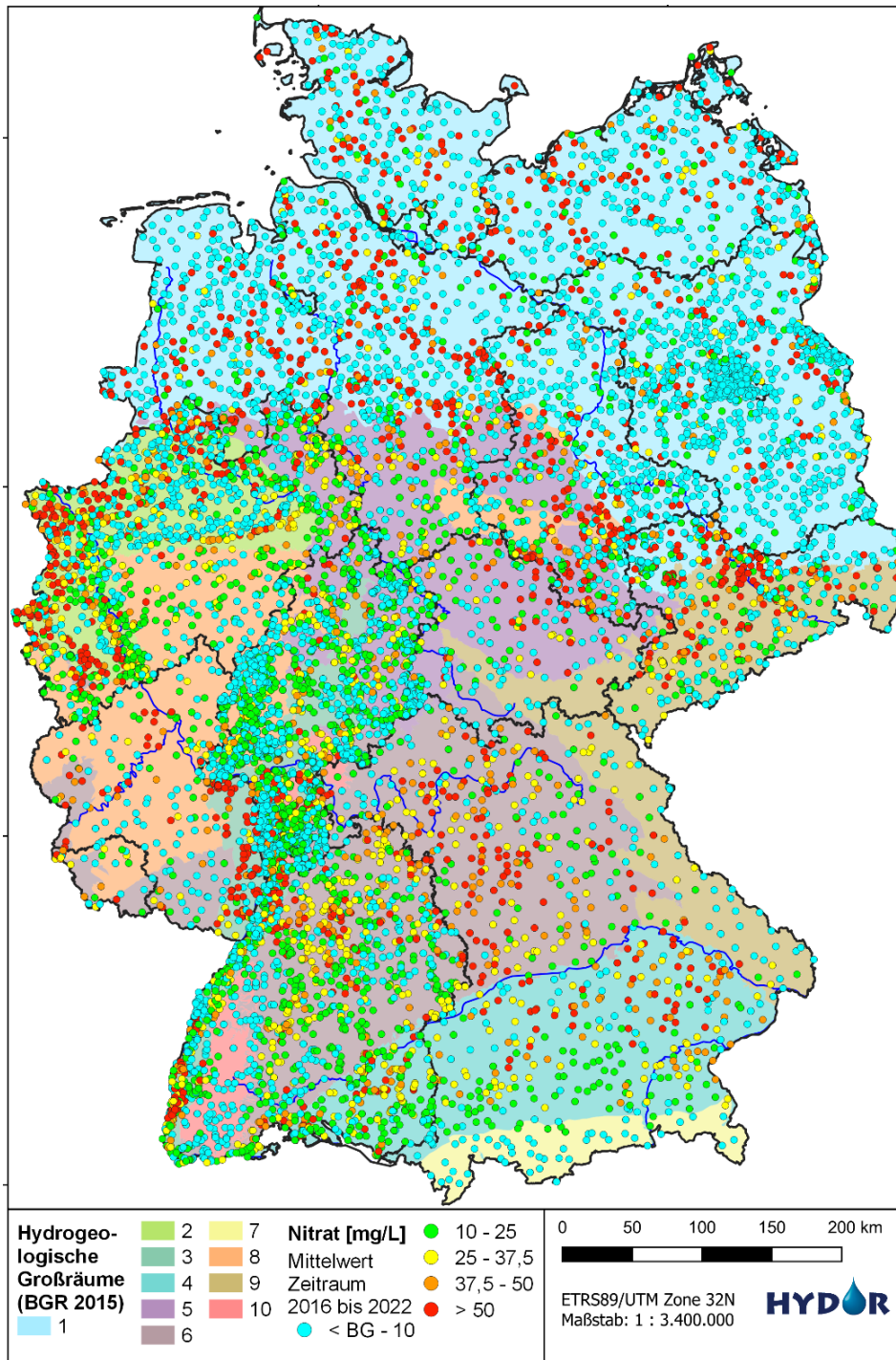


Abbildung 1: Mittlere Nitratkonzentrationen der 10.023 Messstellen in den hydrogeologischen Großräumen als punktbezogene Datenbasis der Modellierung (Quelle: UBA 2026, dort Abb. 57 im Anhang 4)

Sie wurden aus einem ursprünglichen Bestand von rund 13.000 Messstellen ausgewählt. Zu berücksichtigen waren dabei folgende Inhomogenitäten im Ausgangsdatensatz (UBA 2026):

- Stammdaten: Filteroberkante und -unterkante waren zum Teil in m u. GOK und zum Teil in m u. MPH angegeben, dadurch kann Ungenauigkeit in Angabe der Filterlage von einigen Dezimetern entstehen.
- Koordinaten der Messstellen lagen nicht alle in einem einheitlichen Koordinatensystem vor.
- Bei einem Teil der Messstellen waren die Angaben der Koordinaten nur auf 100 m genau (da sensible Daten z. B. von Trinkwasserversorgern).
- Beschaffenheitsdaten: in einige Fällen waren mehrere Konzentrationsangaben (= Messungen?) mit gleichem Datum vorhanden; für die Berechnungen bzw. Auswertungen wurde i.d.R. der höchste Wert übernommen.
- Teilweise fehlten die Angaben zur Bestimmungsgrenze (BG). Dafür wurden die Häufigkeiten der BG der Parameter NO_3 , Sulfat, Eisen (für Daten ab 2016) und Sauerstoff in den anderen Datensätzen wurde ausgewertet, daraus wurden für fehlende Werte zur BG als BG festgelegt: NO_3 und Sulfat $< 1 \text{ mg L}^{-1}$, Eisen $< 0,01 \text{ mg L}^{-1}$, Sauerstoff $< 0,1 \text{ mg L}^{-1}$.
- Heterogenität in Bezug auf Eisen(II) und Eisen, gelöst: in einigen Bundesländern wird unter Fe(gel) im Datensatz Eisen(II) geführt; in anderen Bundesländern Fe(gelöst). Es wurde eine Plausibilitätsprüfung zu Wertepaaren durchgeführt, in denen ein Wert zu Fe(II) mitgeführt wurde ($02 > 5 \text{ mg L}^{-1}$ und $\text{Fe(II)} > 0,05 \text{ mg L}^{-1}$ sowie $\text{Fe(II)} > 0,2 \text{ mg L}^{-1}$ und $\text{NO}_3 > 2,0 \text{ mg L}^{-1}$).
- Berechnete Daten, die im Rahmen der N_2/Ar -Methode erhoben wurden, werden in den Bundesländern sehr unterschiedlich veröffentlicht. Teilweise werden die bereits umgerechneten Werte zur NO_3 -Eintragskonzentration zur Verfügung gestellt. War die NO_3 -Eintragskonzentration noch zu berechnen wurde diese einheitlich bestimmt. Bei Vorhandensein von Werten unterhalb der Bestimmungsgrenze wurden diese zur weiteren Verarbeitung allerdings nicht halbiert.

In wenigen Fällen wurden daher von den Autoren unplausible Einzelwerte gelöscht.

Zur Reduktion und Vereinheitlichung des Datensatzes wurden die Messstellen anschließend nach folgenden Kriterien selektiert.

3. Eindeutige Kennzeichnung Messstellenart: Nur Auswahl von GWM, Brunnen, Quellen/Stollen (keine Schachtbrunnen)
4. Brunnen und GWM: Ausschluss, wenn keine Information zu Filterlage oder Messstellentiefe vorlag
5. Nur Messstellen $< 75 \text{ m}$ Tiefe
6. Nur Messstellen $< 50 \text{ m}$ Filterlänge
7. bei Messstellengruppen wird nur der OP geführt (Identifizierung der Gruppe, wie folgt: Puffer von 10 m um jede Messstelle; wenn mehrere Messstellen innerhalb des Puffers, dann Auswahl der flachsten Messstelle).
8. Mindestens 2 Messwerte pro Messstelle.

Neben den in Abbildung 2 dargestellten Nitratkonzentrationen (NO_3) enthält der Datensatz weitere chemische Parameter wie Sulfat (SO_4), gelösten Sauerstoff (O_2) und Eisen (Fe), die für die Modellierung als erklärende Prädiktoren genutzt werden.

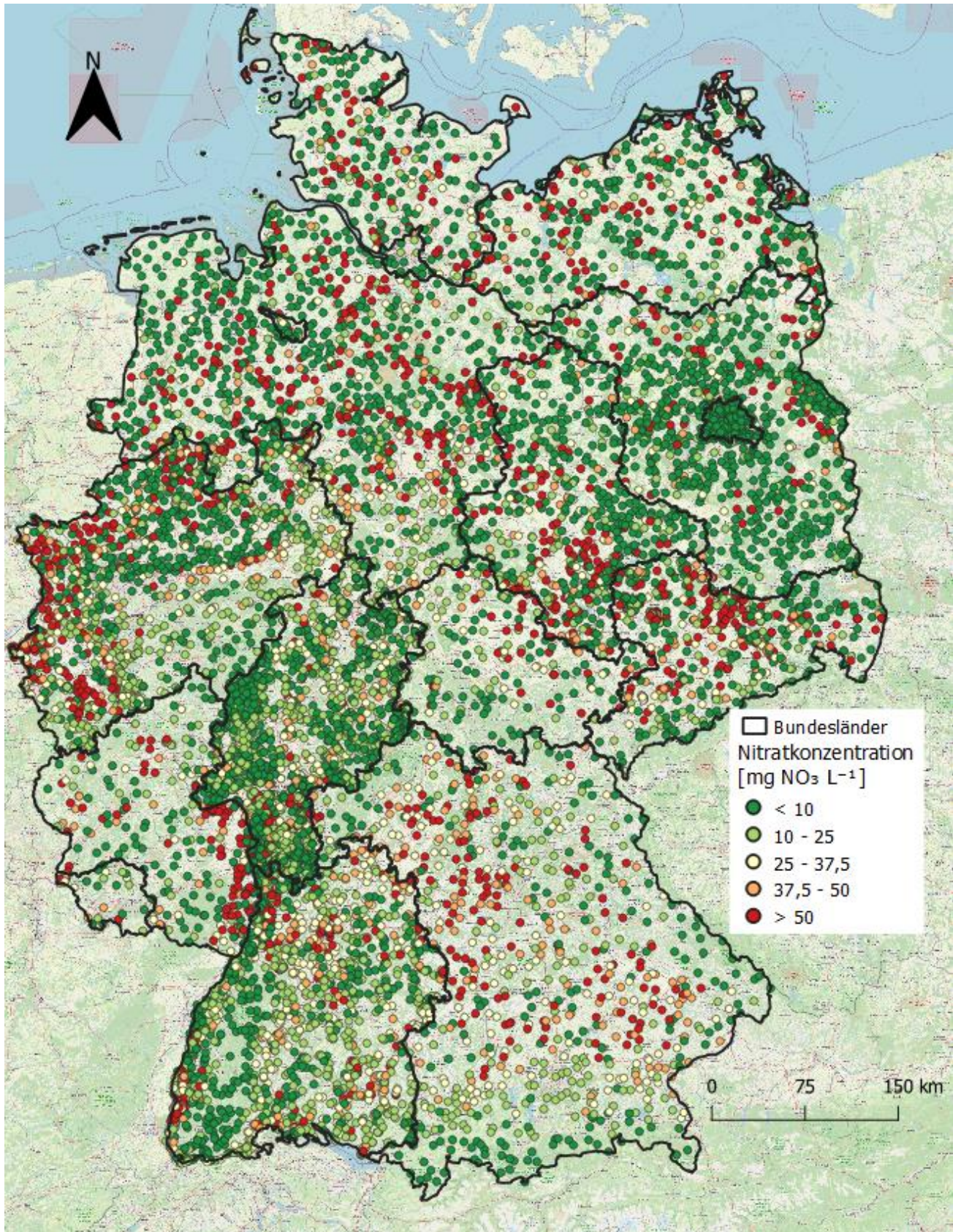


Abbildung 2: (Beispiel) Nitratmessstellen

Sie sollen dem Modell als Proxies für anoxische Bedingungen und das Denitrifikationspotenzial im Grundwasserleiter dienen, welches für den Abbau von Nitrat essentiell ist. Die exakte Lage der Messstellen wird durch Rechts- und Hochwerte im Gauß-Krüger-Koordinatensystem angegeben. Zusätzlich sind Angaben zur Filtertiefe und weitere Standortmerkmale der Messstellen enthalten.

Für dieses Projekt wurden ausschließlich Grundwassermessstellen, Brunnen sowie Quellen berücksichtigt, für die Filtertiefe oder Filterlage bekannt waren. Messstellen mit einer Gesamttiefe von mehr als 75m oder einer Filterlänge über 50m wurden ausgeschlossen. In Bereichen mit mehreren eng benachbarten Messstellen wurde ausschließlich die flachste Messstelle in den Datensatz übernommen. Zudem war Voraussetzung, dass pro Messstelle mindestens zwei NO_3 -Messwerte für den Zeitraum 2016 bis 2020 vorlagen.

Nach dieser Aufbereitung und Selektion standen insgesamt 10.023 Messstellen für dieses Projekt zur Verfügung.

Eine Übersicht über die regionale Verteilung und die Verfügbarkeit der NO_3 -Messstellen zeigt Tabelle 2. Die Messstellendichte variiert deutlich: Große Flächenländer wie Hessen (2.439 Messstellen) und Baden-Württemberg (1.600) weisen besonders viele Messstellen auf, während Stadtstaaten wie Bremen (27) und Hamburg (18) aufgrund ihrer geringen Fläche deutlich weniger Messstellen enthalten.

Auch die Abdeckung der weiteren chemischen Parameter ist unterschiedlich: Sauerstoff wurde an über 9.500 Messstellen bestimmt, Eisen an rund 9.751 und Sulfat an 9.955. Für Schleswig-Holstein wurden die vorhandenen Sauerstoffwerte im Rahmen des Projektes nicht weiter bereitgestellt.

Tabelle 2: Anzahl der Messstellen mit verfügbaren chemischen Parametern nach Bundesland

Bundesland	Nitrat	Sauerstoff	Sulfat	Eisen gesamt
Brandenburg	708	696	696	696
Berlin	148	148	148	148
Baden-Württemberg	1600	1600	1597	1588
Bayern	703	703	703	703
Bremen	27	27	27	27
Hessen	2439	2324	2401	2348
Hamburg	18	18	18	18
Mecklenburg-Vorpommern	373	373	373	373
Niedersachsen	941	941	932	932
Nordrhein-Westfalen	1294	1289	1293	1289
Rheinland-Pfalz	260	260	260	260
Schleswig-Holstein	235	143	234	235
Saarland	32	32	32	32
Sachsen	539	538	538	398
Sachsen-Anhalt	536	536	536	536
Thüringen	170	169	169	168
Gesamt	10023	9628	9957	9751

Die chemischen Parameter liegen ausschließlich als Punktdaten vor. Für das Modelltraining von RF können diese Punktwerte direkt mit den flächenbasierten Prädiktoren verschnitten werden. Für die flächendeckende Anwendung des Modells auf Rasterdaten hingegen müssen die punktuellen chemischen Parameter zuvor regionalisiert werden, da sie in den meisten Rasterzellen nicht vorliegen. Die Vorgehensweise zur Regionalisierung wird in Kapitel 4.1.2 detailliert beschrieben.

4. Entwicklung einer Regionalisierungsmethode

Ziel dieses Kapitels ist die Entwicklung einer Methode zur flächenhaften Regionalisierung der punktuell erhobenen Nitratkonzentrationen im Grundwasser. Aufbauend auf den in Kapitel 3 beschriebenen Datengrundlagen werden im Folgenden die methodischen Schritte zur Erstellung, Optimierung und Anwendung eines prädiktiven Modells beschrieben.

Zunächst wurden die Punktdaten der an Messstellen (Grundwassermessstellen, Quellen und Brunnen) gemessenen hydrochemischen Konzentrationen von Nitrat und der Indikatorparameter Eisen, Sulfat und Sauerstoff aufbereitet und mit den flächenbasierten Prädiktoren verknüpft, um eine konsistente Trainingsgrundlage zu schaffen (Kapitel 4.1). Anschließend wurde eine systematische Auswahl der Prädiktoren durchgeführt, um redundante Variablen zu identifizieren und die Modellkomplexität zu reduzieren (Kapitel 4.2).

Auf Basis der so ausgewählten Prädiktoren wurde das Modelltraining mit dem Random-Forest-Algorithmus durchgeführt (Kapitel 4.3). Das resultierende Modell wurde abschließend auf einen Rasterdatensatz von 1.000 x 1.000 Meter angewendet, um flächenhafte Vorhersagen der NO_3 -Konzentrationen im Grundwasser zu generieren (Kapitel 4.4).

4.1. Aufbereitung der Daten

Um eine verlässliche Grundlage für die nachfolgende Modellierung mittels Random Forest zu schaffen und um sicherzustellen, dass die Modelle flächendeckende und verlässliche Ergebnisse liefern können, war eine sorgfältige Datenaufbereitung von entscheidender Bedeutung. Sie umfasste mehrere Schritte, um die Robustheit der Daten zu sichern und Datenverluste zu minimieren. Die folgenden Arbeitsschritte beschreiben das Vorgehen zur Aufbereitung der Eingangsvariablen und die Regionalisierung der chemischen Messdaten (O_2 , Fe, SO_4).

4.1.1. Aufbereitung allgemeiner Punktdaten und flächenbasierter Prädiktoren

Ein zentraler Punkt der Vorbereitung war der Umgang mit fehlenden Werten in den Eingangsdaten. Ohne eine spezifische Behandlung von Lücken im Datensatz kann das RF-Modell an Stellen, an denen ein einziger Prädiktorwert (Merkmal) fehlt, keine Vorhersage treffen. Dies führt dazu, dass die gesamten Beobachtungen an diesem Ort vom Modelltraining ausgeschlossen werden müssen, was einen signifikanten Informationsverlust zur Folge hat.

Die Behandlung fehlender Werte variierte je nach Datentyp. Fehlende Werte wurden nur ersetzt, wenn der Anteil der Lücken beim jeweiligen Prädiktor unter 5 % lag. Für numerische Variablen wurden die NaN-Werte durch einen Marker (-9999) ersetzt während bei kategorialen Variablen „keine Angabe“ verwendet wurde. Auf diese Weise konnte die Information über das Fehlen des Wertes beibehalten werden, ohne die übrigen Daten für die Modellierung zu entfernen oder das Modelltraining mit synthetischen Werten zu verfälschen. Eine Ausnahme bildeten die chemischen Parameter (Eisen, Sauerstoff, Sulfat). Die Fehlwerte wurden hier im Rahmen der Regionalisierung (vgl. Kapitel 4.1.2) durch Interpolationsverfahren aufgefüllt.

Neben der Behandlung der Fehlwerte war die räumliche Aufbereitung der flächenbasierten Prädiktoren ein weiterer wichtiger Schritt vor dem Modelltraining. Die flächendeckenden Prädiktoren wurden mittels räumlicher Verschneidung (Spatial Join) mit den Messstellen verknüpft, um einen punktbasierten Datensatz für das anschließende Modelltraining zu erzeugen. Um die lokale Heterogenität der Umgebung besser abzubilden, wurde zusätzlich ein 1 km-Puffer um jede Messstelle definiert. Innerhalb dieses Puffers wurden die prozentualen Flächenanteile der Landnutzungsklassen berechnet und den Messpunkten als neue numerische

Features zugeordnet. Auf diese Weise konnte ein Teil der unmittelbaren Umgebung in die Modellierung einbezogen werden.

4.1.2. Regionalisierung chemischer Parameter (Eisen, Sauerstoff und Sulfat)

Zur Vorbereitung einer flächendeckenden Vorhersage der Nitratkonzentrationen wurden die an den Messstellen erfassten hydrochemischen Konzentrationswerte von Eisen, Sauerstoff und Sulfat zunächst räumlich interpoliert. Dieses Vorgehen war notwendig, um einen vollständigen Raster-Datensatz für die anschließende RF-Modellierung zu erhalten.

Die Interpolation wurde mit zwei verschiedenen Verfahren durchgeführt, um deren Einfluss auf die finale Nitrat-Zielkarte später gegenüberzustellen. Hierzu kamen folgende Methoden zur Anwendung:

- Kriging, implementiert im Programmpaket R sowie
- Inverse-Distanz-Gewichtung (IDW), implementiert in Python unter Nutzung von „scipy.spatial.cKDTree“

In beiden Verfahren wurden die Werte unter Berücksichtigung ihrer räumlichen Lage und Entfernung zur nächstgelegenen Messstelle berechnet und konnten so als Eingangsdaten (Prädiktoren) für das Modell dienen. Dem Datensatz wurde anschließend noch ein Indikator-Prädiktor ergänzt, der kennzeichnet, ob ein Wert ursprünglich gemessen oder interpoliert wurde. Dieses Feature soll dem Modell zusätzliche Informationen über die Herkunft der Werte bereitstellen.

4.2. Modelltraining und -Bewertung

Für die Vorhersage der Nitratkonzentration im oberflächennahen Grundwasser wurde ein Random-Forest-Regressionsmodell (RF) verwendet. Die Nitratkonzentrationen dienten als Zielvariable für das Modell, während die Eingangsgrößen (Prädiktoren) aus einer Kombination von punktbasierten chemischen Parametern und extrahierten Werten flächenbasierter Prädiktoren bestanden (sh. Kapitel 0).

Die gesamten Daten wurden im ersten Schritt in 80 % Trainings- und 20 % Testdaten aufgeteilt. Der Datensatz enthielt mehrere kategorische Features, die mit One-Hot-Encoding in numerische Variablen transformiert wurden. Um die Stabilität des Modells gegenüber zufälliger Datenteilung zu bewerten und Overfitting zu vermeiden, wird während des Trainings eine 5-fache Kreuzvalidierung durchgeführt. Dafür wird der Trainingsdatensatz in möglichst gleich große Teilstücke (sogenannte k-Folds) zerlegt, hier $k = 5$.

Während ein Teilstück für die Validierung zurückgehalten wird, wird das Modell mit den restlichen Stücken trainiert und die Modellgüte bestimmt. Dieser Vorgang wird so oft wiederholt, bis alle Teilstücke einmal als Validierungsmenge genutzt wurden. Aus den einzelnen Testergebnissen wird anschließend ein Durchschnittswert gebildet. Dieses Vorgehen stellt sicher, dass das Modell nicht zufällig gut auf einer bestimmten Stichprobe der Daten funktioniert und gibt eine deutlich stabilere Schätzung von der Modelleistung als bei einer einmaligen Trennung der Daten.

Für die weitere Verbesserung der Vorhersagekraft wurden die Hyperparameter des RF-Modells (Anzahl der Bäume, maximale Baumtiefe, minimale Samples pro Blatt und maximale Anzahl betrachtende Features) optimiert. Dazu wurde GridSearchCV verwendet.

Nach dem finalen Modelltraining mit den optimierten Hyperparametern erfolgte anschließend eine erste Vorhersage der Nitratkonzentrationen auf den Testdatensatz. Die vorhergesagten Werte werden den realen Messwerten gegenübergestellt. Für die Beurteilung der

Modelleleistung wurden gängige Metriken, wie der mittlere quadratische Fehler (MSE), der absolute Fehler (MAE) und das Bestimmtheitsmaß (R^2) herangezogen.

4.3. Feature-Selektion

Die Auswahl der Prädiktoren beeinflusst entscheidend, wie zuverlässig ein Modell Zusammenhänge in den Daten erkennt und Vorhersagen trifft. Eine gezielte Auswahl der Features verbessert sowohl die Vorhersagegenauigkeit als auch die Identifikation der wichtigsten Einflussgrößen, da viele Variablen die Interpretation erschweren und den Rechenaufwand erhöhen.

Ziel der Feature-Selektion ist es daher, aus den potenziell relevanten Variablen jene auszuwählen, die am stärksten zur Modelleistung beitragen. Eine vollständige Liste der getesteten Parameter inkl. ihrer Kurzbezeichnungen befindet sich im Anhang 1.

4.3.1. Vorgehen bei unvollständigen und redundanten Features

Zur Vorauswahl der Prädiktoren wurden die Features zunächst einer ersten Analyse unterzogen, um sowohl ihre Verfügbarkeit als auch ihre statistischen Eigenschaften zu prüfen. Dabei wurde die Verfügbarkeit der einzelnen Variablen in Bezug auf die insgesamt 10.023 Messstellen ermittelt, die als Datengrundlage für das Modell dienen. Features mit mehr als 5% fehlender Werten wurden ausgeschlossen, da unvollständige oder stark imputierte Variablen zu instabilen Splits in den Entscheidungsbäumen führen. Die Vorhersagesicherheit insbesondere bei einer späteren Anwendung auf Rasterdaten wird dadurch eingeschränkt.

Die Variablen aHa (Austauschhäufigkeit des Bodenwassers) und NFK (nutzbare Feldkapazität im effektiven Wurzelraum) wurden zunächst als potenziell relevante Prädiktoren betrachtet, da sie wichtige bodenphysikalische Eigenschaften und damit Prozesse des Wasser- und Stofftransports im Untergrund abbilden. Beide Parameter wiesen jedoch in den Punktdaten eine hohe Anzahl fehlender Werte auf (aHa: 45,4 %, NFK: 18,9 %), weshalb sie trotz ihrer inhaltlichen Relevanz nicht in die weitere Modellierung einbezogen wurden.

Nach der Prüfung der Verfügbarkeit wurde als nächster Schritt die Redundanz der Features untersucht. Bei der Verwendung von Random Forest für die Modellierung ist die Minimierung der Multikollinearität weniger entscheidend als bei linearen Modellen. Der Vorteil besteht hier hauptsächlich darin, dass durch die Entfernung der korrelierten Feature die Modellkomplexität und die Recheneffizienz verbessert werden. Zudem liefern Variablen, die stark miteinander korrelieren, dem Modell ähnliche Informationen. Eine hohe Redundanz kann die Effizienz der Baumaufteilung in Random Forest leicht verringern, während die Vorhersageleistung des Modells jedoch robust gegenüber Multikollinearität bleibt (Lindner et al. 2022). Dadurch wird es schwieriger zu erkennen, welchen Beitrag jede einzelne Variable zur Modellvorhersage leistet. Wenn stark korrelierte Variablen vorhanden sind, wird die gesamte Wichtigkeit der redundanten Information zwischen ihnen aufgeteilt, was zu einem verzerrten Bild der tatsächlichen Einflussfaktoren führen kann.

Zur Identifikation redundanter Variablen wurden sowohl numerische als auch kategoriale Features mithilfe von Clusteranalysen untersucht. Für die numerischen Features wurde ein Dendrogramm auf Basis der Korrelationen erstellt. Die paarweisen Korrelationen wurden anschließend in Distanzen überführt ($\text{Distanz} = 1 - |\text{Korrelation}|$), sodass stark korrelierte Variablen ($|r| \approx 1$) durch niedrige Distanzen repräsentiert werden. Auf Basis dieser Distanzmatrix erfolgte das Clustering mithilfe der Ward-Linkage-Methode.

Das resultierende Dendrogramm (Abbildung 3) zeigt, dass vor allem zeitlich gemittelte Größen ähnlicher Prozesse stark miteinander korrelieren.

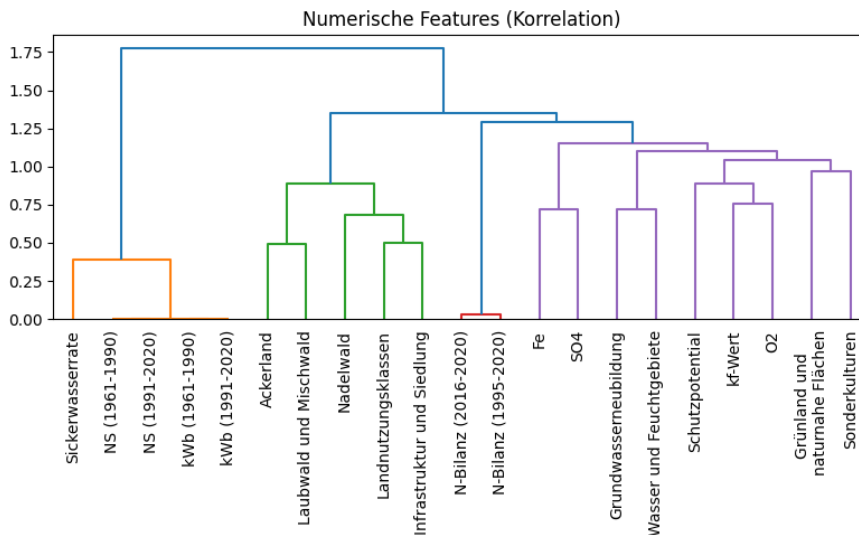


Abbildung 3: Dendrogramm für numerische Features

So weisen beispielsweise die Sickerwasserrate und der Niederschlag sowie die klimatische Wasserbilanz deutliche Gemeinsamkeiten auf, was aufgrund ihres gemeinsamen Bezugs zum Wasserhaushalt zu erwarten war. Auch die N-Bilanz,

gemittelt über verschiedene Zeiträume, weist eine hohe Ähnlichkeit zwischen den einzelnen Zeitreihen auf, da sie denselben Stoffkreislaufprozess abbildet.

Für die kategorialen Features wurde ein Dendrogramm auf Grundlage der Hamming-Distanz erstellt (Abbildung 4), das die Ähnlichkeit der Ausprägungen zwischen den Variablen darstellt.

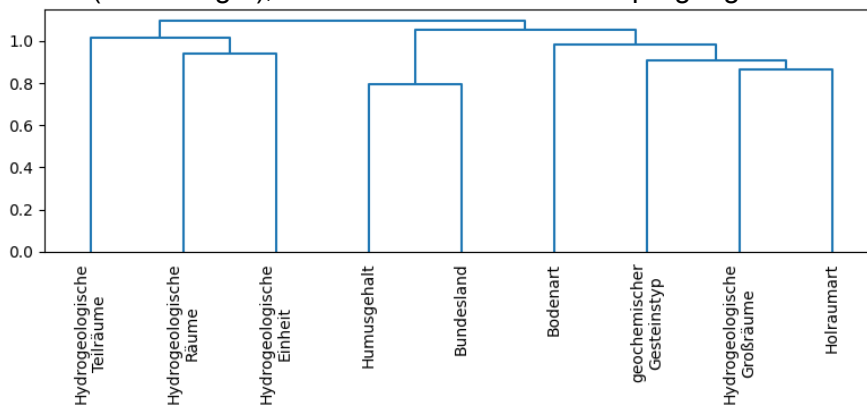


Abbildung 4: Dendrogramm für kategoriale Features (Hamming-Distanz)

Die Hamming-Distanz misst den Anteil der Beobachtungen, in denen sich zwei Variablen unterscheiden: Je kleiner die Distanz,

desto ähnlicher sind die Muster. Die Variablen wurden hierarchisch mit der Ward-Linkage-Methode geclustert. Das Dendrogramm zeigt, dass alle kategorialen Features statistisch eigenständig sind und keine redundanten Informationen enthalten. Eine abschließende Prüfung ihrer Eignung im Hinblick auf die Stabilität der Modellierung (Häufigkeitsverteilung) erfolgte im nächsten Schritt (Kapitel 4.3.2).

Anstatt eine einzelne Variable pro korrelierter Gruppe festzulegen, wurde eine iterative Strategie der Variablenselektion verfolgt. Diese bestand darin, aus jeder hoch korrelierenden Gruppe (z.B. der Wasserhaushalts- oder der N-Bilanz-Gruppe) alternierende Vertreter auszuwählen und das Modell mit unterschiedlichen Feature-Kombinationen neu zu trainieren. Ziel war es zu identifizieren, welche der Variablen innerhalb der Gruppe den größten Beitrag zur Modelleistung beitragen. Die endgültige Auswahl der Features basierte somit auf einer Balance zwischen der Minimierung der Redundanz und der Maximierung der prädiktiven Leistung des Modells.

4.3.2. Analyse der Häufigkeitsverteilung und Selektion der Raumgliederung

Nachdem die Redundanz der Features geprüft und Gruppen korrelierter numerischer Features gebildet wurden, erfolgte die Analyse der Häufigkeitsverteilung der hydrogeologischen Variablen (HE, TR, GR, R). Für das Training des RF-Modells ist dies besonders relevant, da Splits in marginal besetzten Klassen zu instabilen Entscheidungsbäumen und damit zu

inkonsistenten Vorhersagen führen können. Zudem können Klassen, die in den Trainingsdaten gar nicht oder nur extrem selten auftreten, vom Modell nicht zuverlässig abgebildet werden.

Die Verteilung nach der hydrogeologischen Raumgliederung ist in Abbildung 5 dargestellt. Die Grafik veranschaulicht, dass insbesondere die HE-Klassen sehr fein unterteilt sind. Auch der TR weist eine hohe Detailtiefe auf.

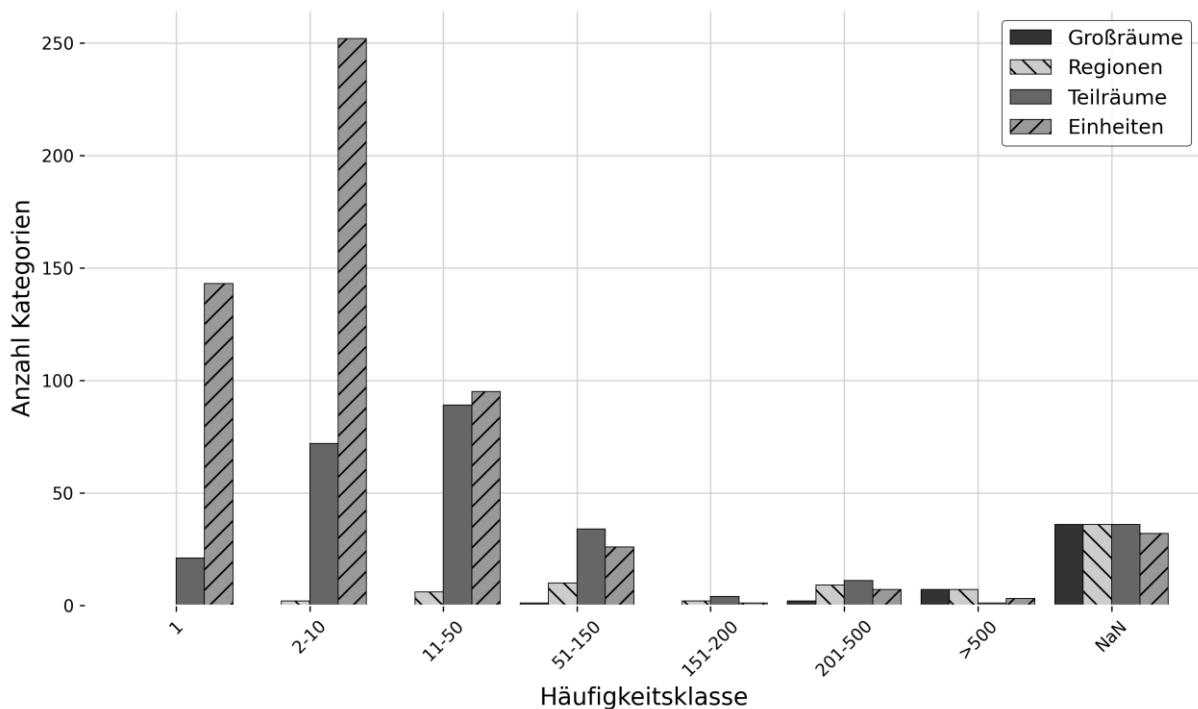


Abbildung 5: Häufigkeitsverteilung nach Raumgliederung (aktualisieren)

Aus hydrogeologischer Sicht wären gerade die feingliedrigeren Ebenen wie die Einheiten (HE) und Teilräume (TR) besonders gut geeignet die Nitratkonzentrationen vorherzusagen. Ihre hohe Detailtiefe ermöglicht es, lokale Unterschiede in der Gesteinszusammensetzung, Permeabilität und damit die Geschwindigkeiten des Wasser- und Stofftransports im Untergrund präziser abzubilden als die gröberen Gliederungen. Die Entscheidung zu ihrem Ausschluss in dieser Arbeit basiert daher ausschließlich auf der mangelnden statistischen Repräsentation (geringe Messwertbelegung aufgrund kleiner Flächengrößen), nicht auf ihrer fehlenden fachlichen Eignung.

Die beiden verbleibenden Variablen, der hydrogeologische Großraum und Raum, die die Raumgliederung des Untergrundes auf unterschiedlichen Ebenen abbilden, wurden im weiteren Modellierungsprozess als gemeinsames Cluster behandelt. Diese Gruppierung erfolgt nicht aufgrund statistischer Nähe, sondern aus fachlicher Sicht: Beide Variablen liefern wichtige Informationen über die räumliche Gliederung des Untergrundes. Durch die gemeinsame Behandlung wird sichergestellt, dass die relevanten hydrogeologischen Informationen vollständig in das Modell einfließen, ohne die Modellkomplexität unnötig zu erhöhen.

4.3.3. Permutation Feature Importance

Im nächsten Schritt wurde analysiert, welche der vorausgewählten Prädiktoren den größten Einfluss auf die Modellvorhersage haben. Zu diesem Zweck wurde ein Basismodell trainiert, das alle für das Training relevanten Features enthielt, die zuvor nicht wegen fehlender Daten oder hoher Redundanz ausgeschlossen wurden. Um die Informationsdichte zu erhalten, wurde zudem aus jedem Cluster zunächst ein repräsentatives Feature ausgewählt. Dieses Modell

diente anschließend als Grundlage, um durch schrittweises Entfernen weniger relevante Features die optimale Modellzusammenstellung zu ermitteln.

Die Relevanz der Prädiktoren wurde mit der Permutation Feature Importance (PFI) bewertet. Dabei wird geprüft, wie stark die Vorhersagegenauigkeit abnimmt, wenn die Werte eines Features zufällig permutiert werden. Ein deutlicher Anstieg des Fehlers nach der Permutation weist darauf hin, dass die Variable einen wichtigen Beitrag zur Vorhersage leistet. Auf Grundlage dieser Analyse wurden anschließend die Prädiktoren mit sehr geringem Einfluss aus dem Datensatz entfernt. Da sich die Bedeutung einzelner Features ändern kann, wenn andere Variablen entfernt werden, wurde die Feature-Selektion iterativ durchgeführt. Nach jeder Eliminierung wurde die Modellgüte (R^2) erneut überprüft. Dieser Prozess wurde so lange fortgeführt, bis sich keine Verbesserung der Modellleistung mehr feststellen ließ.

Während der Iteration wurden die Hyperparameter des Basismodell verwendet, sodass sich die Unterschiede ausschließlich auf die Auswahl der Prädiktoren zurückzuführen lassen. Durch diese Fixierung der Hyperparameter wird die tatsächliche Leistung der Modelle etwas unterschätzt, weshalb abschließend eine erneute Optimierung der Parameter für das beste Feature-Set erfolgte.

4.4. Anwendung des Modells auf Rasterdaten

Die Anwendung des trainierten Random-Forest-Modells auf Rasterdaten dient dazu, die Nitratkonzentration im Grundwasser flächendeckend zu prognostizieren, auch in Regionen, in denen keine Messstellen vorliegen. Dazu werden alle Prädiktoren auf das Deutschland-Grid (GeoGitter) mit 1 km-Zellen übertragen.

Da das RF-Modell ausschließlich auf den realen, gemessenen Punktdaten trainiert wurde, fand die Regionalisierung (Interpolation) der chemischen Redox-Parameter (O_2 , Fe, SO_4) erst im Zuge dieser flächendeckenden Anwendung statt, s. dazu die kartografisch in Form von Übersichtskarten erhaltenen Ergebnisse in Anhang 4.

Rasterzellen, die keine ursprünglichen Messwerte für diese Parameter enthielten, wurden daher mit den in Kapitel 4.1.2 interpolierten Werten (Regionalisierung mittels Kriging oder IDW) aufgefüllt.

Mit vollständigen Prädiktorwerten konnte das Modell anschließend für jede Rasterzelle einen Nitratwert berechnen, wodurch eine kontinuierliche Karte der Nitratkonzentrationen entstand. Die Zusammenführung der Prädiktoren mit dem Rastergrid erfolgte in Python unter Verwendung von GeoPandas für die Vektordaten und Rasterio für Rasterdaten.

Innerhalb jeder Rasterzelle wurden numerische Prädiktoren gemittelt, während für kategoriale Prädiktoren der Modus übernommen wurde. Falls sich mehrerer Messstellen innerhalb derselben 1×1 km²-Rasterzelle befanden, wurden ihre Werte zu einem Mittelwert. Für die Landnutzungsklassen wurde der prozentuale Flächenanteil innerhalb jeder Rasterzelle ermittelt. Fehlende numerische Werte wurden mit einem Marker (-9999) gekennzeichnet, fehlende kategoriale Werte mit „keine Angabe“.

Auf diese Weise enthielt jede Rasterzelle einen vollständigen Satz an Prädiktorwerten, was die flächendeckende Vorhersage mit dem Random-Forest-Modell ermöglichte.

5. Ergebnisse

5.1. Einfluss der Prädiktoren und Modellreduktion

Das Ziel der Feature-Selektion bestand darin, die Modellstruktur zu vereinfachen, die Prognoseleistung zu maximieren und gleichzeitig die Stabilität sowie die fachliche Nachvollziehbarkeit der Ergebnisse zu gewährleisten. Die Analyse der Permutation Feature Importance (PFI) zeigt deutlich, welche Variablen den größten Beitrag zur Modellprognose leisten und bildet die Grundlage für die anschließende Modellreduktion.

Abbildung 6 zeigt, dass nur wenige Prädiktoren einen dominanten Einfluss haben. Insbesondere die chemischen Parameter bilden die stärksten Prädiktoren für die Nitratkonzentrationen im Grundwasser.

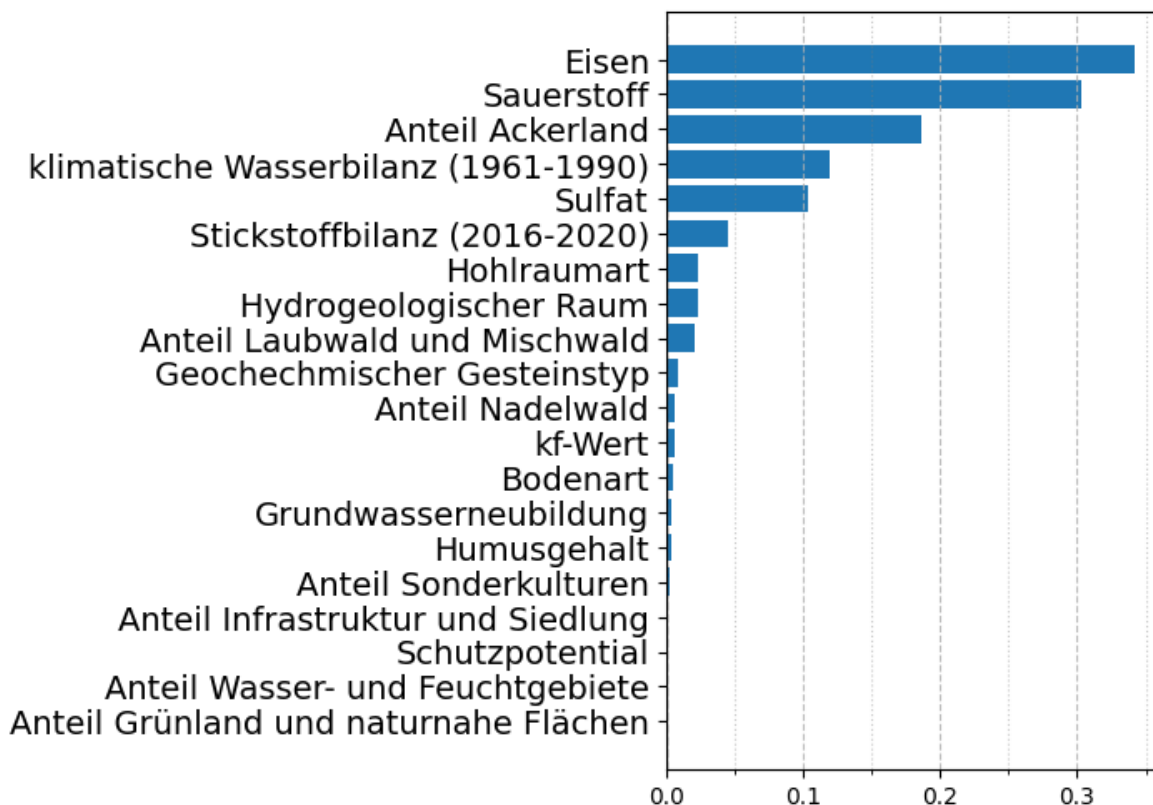


Abbildung 6: Rangfolge der permutierten Feature Importance im Basismodell zur Prognose der Nitratkonzentration

Eisen (0,342) und der Sauerstoff (0,303) dominieren die Modelleistung, gefolgt von der Landnutzungsklasse Ackerland (0,187), der klimatischen Wasserbilanz (0,119) und dem Sulfatgehalt (0,104). Diese Variablen spiegeln sowohl geochemische Redoxprozesse als auch den anthropogenen Eintrag durch landwirtschaftliche Nutzung wider.

Die chemischen Parameter wurden testweise aus dem Feature-Set entfernt, um ihre Bedeutung für das Modell zu verifizieren. Dabei sank die Vorhersagegüte von $R^2 \approx 0,5$ auf $R^2 \approx 0,2$. Dieser starke Abfall der Modelleistung bestätigt, dass die chemischen Parameter notwendig zum Erreichen einer robusten Regionalisierung für die Nitratkonzentration sind.

Eine weitere Möglichkeit, den Einfluss einzelner Prädiktoren auf die Vorhersagen des RF-Modells zu untersuchen, bieten Partial Dependence Plots (PDPs). Hierbei wird eine Variable über ihren Wertebereich variiert, während für die restlichen Variablen der Mittelwert angenommen

wird. So lässt sich erkennen, wie sich Änderungen in dieser Variable auf die Modellvorhersage auswirken. Die Ergebnisse der PDP sind in Abbildung 7 dargestellt und zeigen die funktionalen Zusammenhänge zwischen den wichtigsten Prädiktoren und der vorhergesagten Nitratkonzentration.

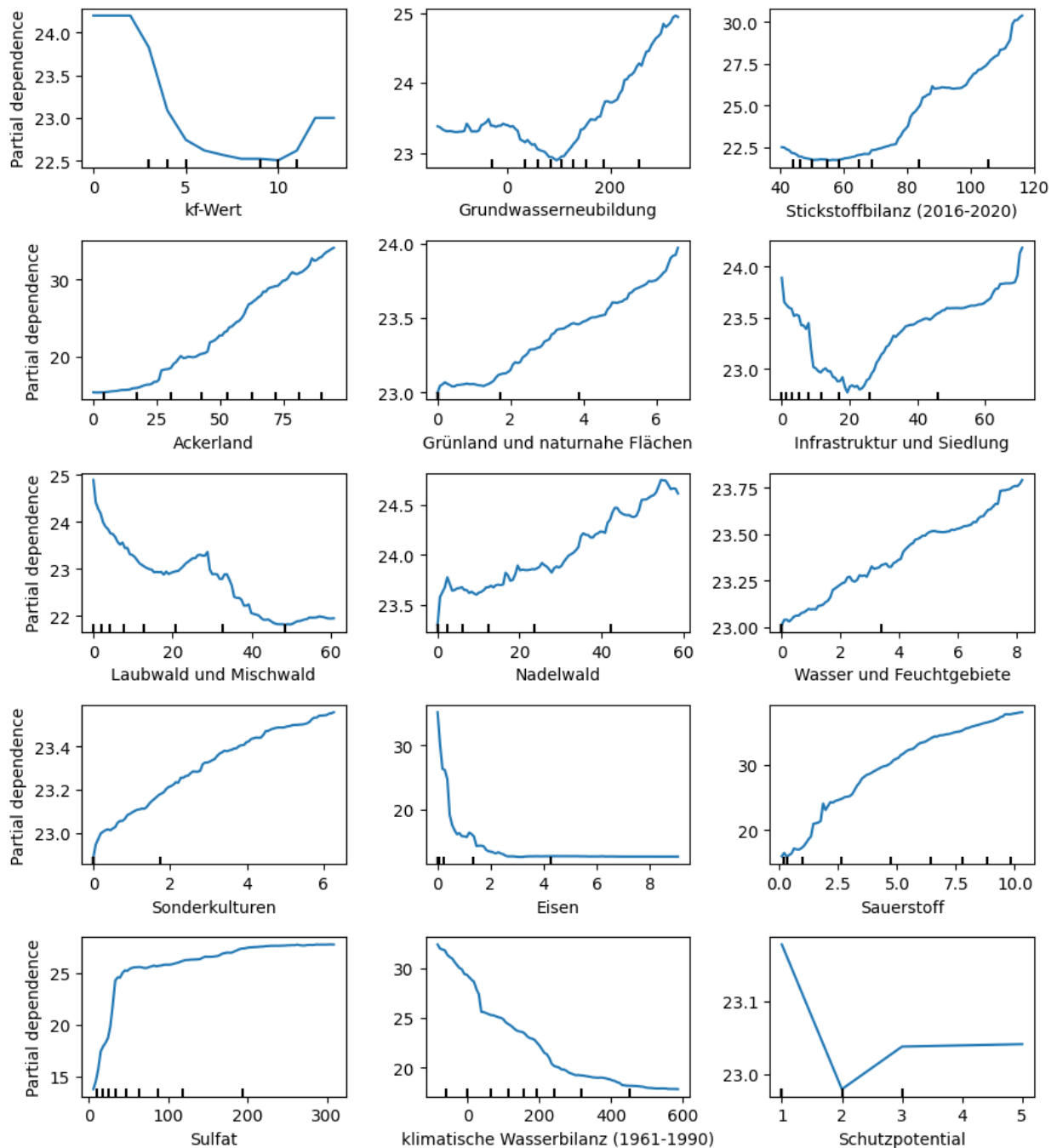


Abbildung 7: Partial Dependence Plots (PDPs) exemplarisch dargestellter Modellprädiktoren auf die vorhergesagten Nitratkonzentrationen

Die durch das RF-Modell vorhergesagten Nitratwerte sinken stark mit einer Zunahme der Eisengehalte im Grundwasser. Im Gegensatz dazu steigt die vorhergesagte Konzentration annähernd linear mit dem Sauerstoffgehalt an. Die Landnutzung spiegelt ebenfalls klare Muster wider: Die Konzentration steigt signifikant mit dem prozentualen Anteil an Ackerland (bis ca. 40 %), wohingegen die Werte mit zunehmendem Anteil an Laub- und Mischwald deutlich sinken.

Auf Basis der PFI-Bewertung und der detaillierten Funktionsanalyse mittels PDPs wurde das Modell reduziert, indem die weniger einflussreichen Prädiktoren schrittweise entfernt wurden. Das Ziel bestand darin, die Modellkomplexität zu verringern, ohne die Vorhersagegenauigkeit zu beeinträchtigen, und somit die Stabilität und Generalisierungsfähigkeit zu erhöhen.

Die Rangfolge der wichtigsten Variablen für die final reduzierten Modellvarianten, einmal für den hydrogeologischen Raum und einmal für den Großraum, ist in Abbildung 8 dargestellt.

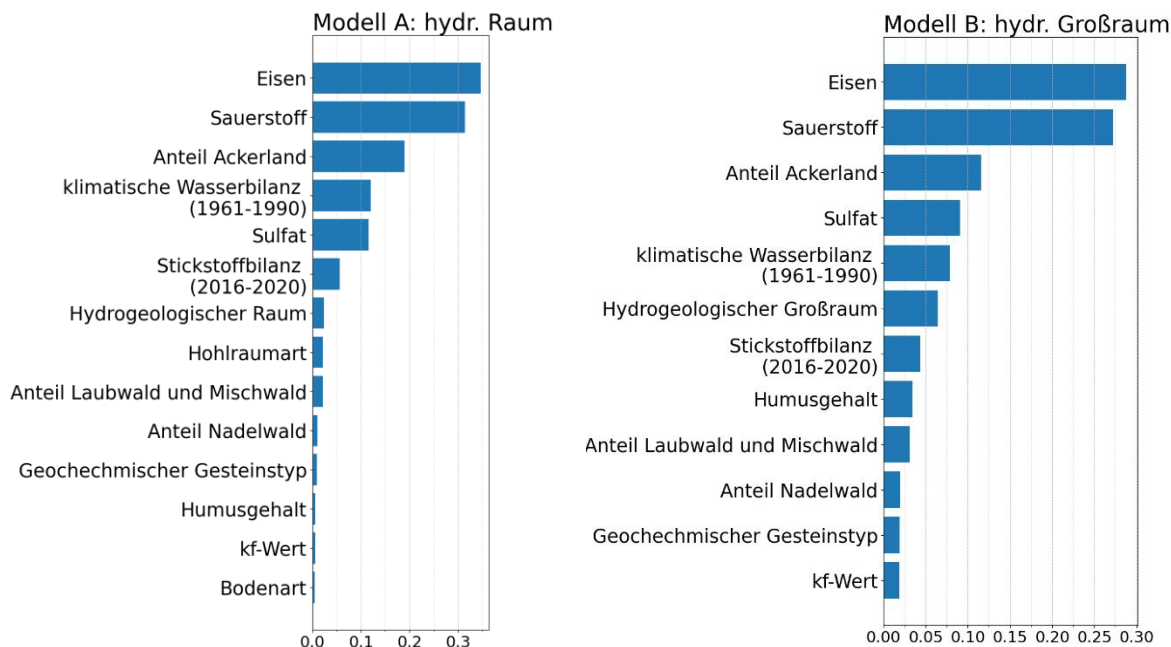


Abbildung 8: Vergleich der Modellgüte für die reduzierten Modelle, links Raum und rechts Großraum

Die Reduktion der Prädiktoren führte zur Auswahl des „Reduzierten Modells mit Raum“, welches die beste Generalisierungsleistung erzielte (vgl. Tabelle 3). Im Vergleich zum Basismodell konnte die Testgüte leicht verbessert werden. Die reduzierte Feature-Anzahl bei gleichzeitiger Leistungssteigerung bestätigt die Eliminierung redundanter Informationen und resultiert in einem robusteren Modell.

Tabelle 3: Vergleich der Vorhersagegüte verschiedener Feature-Sets im Random-Forest-Modell

Modellvariante	Anzahl Features	R ² (Train)	MAE (Train)	RMSE (Train)	cv-R ² (Train)	R ² (Test)	MAE (Test)	RMSE (Test)
Basismodell mit Raum	20	0,877	5,674	11,411	0,496	0,527	12,527	21,822
Reduziertes Modell mit Raum	14	0,856	6,245	12,316	0,505	0,532	12,490	21,690
Basismodell mit Großraum	20	0,877	5,662	11,407	0,498	0,524	12,549	21,887
Reduziertes Modell mit Großraum	12	0,933	4,657	8,409	0,501	0,531	12,792	21,714

Während Tabelle 3 die quantitativen Unterschiede der Modellleistung darstellt, zeigt Abbildung 9 die Gegenüberstellung der gemessenen und modellierten Nitratkonzentrationen für das ausgewählte Modell. Die gestrichelte Linie repräsentiert eine ideale Vorhersage. Das trainierte RF-Modell erklärt etwa 53 % der Varianz der Nitratkonzentrationen. Im Bereich niedriger Konzentrationen zeigt die hohe Punktdichte in den gelben und grünen Farbbereichen eine solide Anpassung. Die durchschnittliche Abweichung zwischen Modellvorhersagen und

Messwerten beträgt etwa 22 mg/L. Auffällig ist, dass viele Datenpunkte unterhalb der 1:1-Linie liegen, was darauf hinweist, dass das Modell insbesondere höhere Nitratkonzentrationen systematisch unterschätzt und in diesem Bereich eine geringe Vorhersageleistung aufweist.

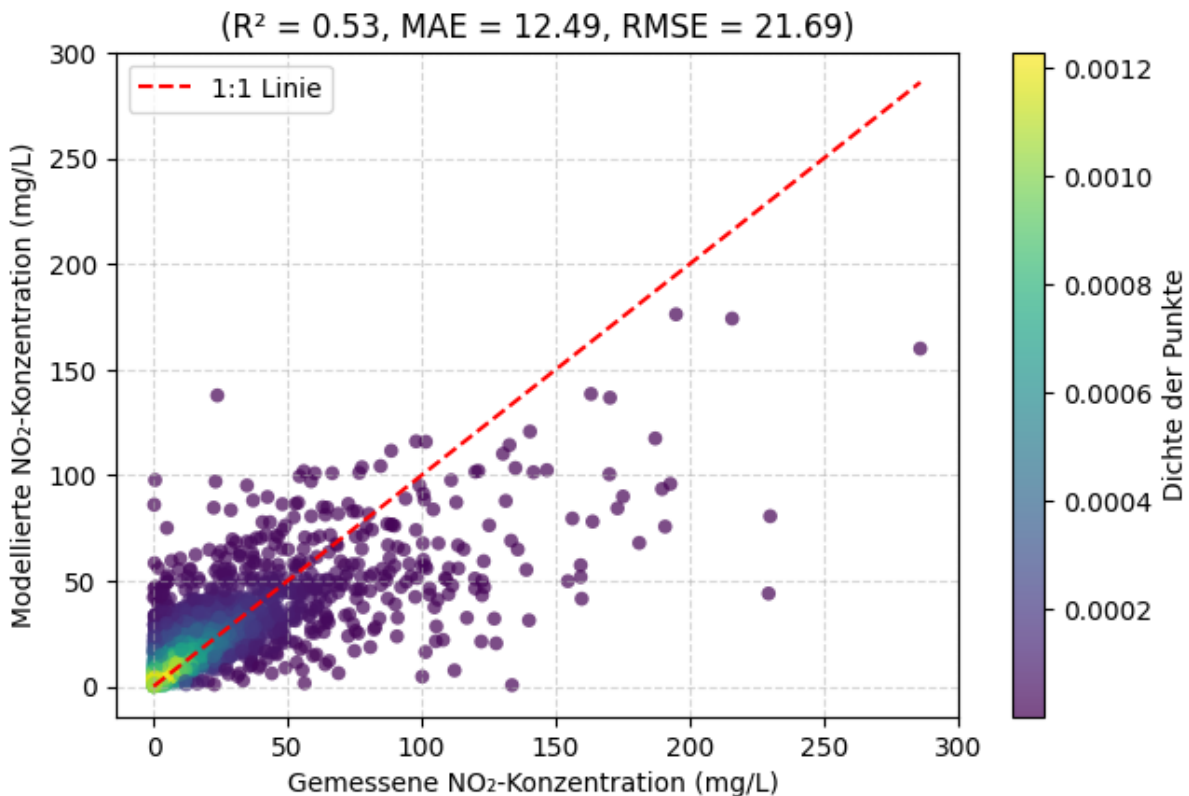


Abbildung 9: Gegenüberstellung der gemessenen und modellierten Nitratkonzentration. Die rote Linie repräsentiert die ideale Vorhersage.

Besonders bei Konzentrationen über 100 mg/L weichen die modellierten Werte deutlich von den Messwerten ab. Dies liegt an der rechtsschiefen Verteilung der Messwerte, da hohe Konzentrationen im Datensatz selten auftreten. Dadurch stehen dem Modell zu wenig Beispiele für diesen Bereich zur Verfügung, um die komplexen Zusammenhänge robust zu erlernen.

5.2. Einfluss der Regionalisierung der chemischen Parameter auf die flächenhafte Nitratvorhersage

Für die flächenhafte Anwendung des Modells auf Rasterdaten standen nicht in allen Zellen alle chemischen Parameter (O_2 , SO_4 , Fe) zur Verfügung. Um diese Lücken zu schließen, wurden die fehlenden Werte vor der Vorhersage durch räumliche Interpolationsverfahren ergänzt.

Wie in Kapitel 4.1.2 beschrieben, kamen dafür Inverse Distance Weighting (IDW) und Kriging zum Einsatz. Die Modellgüte des Random-Forest-Modells ist in beiden Varianten identisch, da das Modell ausschließlich auf den zusammengestellten Punktdatensatz trainiert wurde. Unterschiede zwischen den resultierenden Nitratkarten ergeben sich daher nur aufgrund der Art und Weise, wie die Redox-Parameter (O_2 , Fe, SO_4) für die flächendeckende Anwendung regionalisiert wurden.

Tabelle 4 fasst die deskriptiven statistischen Kenngrößen der vorhergesagten Nitratkonzentrationen für beide verwendeten Methoden (Kriging-RF und IDW-RF) zusammen und stellt sie den ursprünglichen Messwerten gegenüber. Die punktuellen Messwerte dienen in diesem Kontext lediglich als Referenz für die Größenordnung der Nitratkonzentrationen. Sie decken

nur einen sehr kleinen Bruchteil der Gesamtfläche ab (9.526 Punkte vs. 357.219 Rasterzellen) und sind daher nicht flächenrepräsentativ. Mittelwert, Standardabweichung und Anteil der Überschreitungen bei den Messpunkten geben nur eine Orientierung, auf deren Grundlage die Unterschiede zwischen den interpolierten Rasterkarten beurteilt werden können.

Tabelle 4: Statistische Kenngrößen der NO₃-Konzentrationen der Messstellen, Kriging-RF und IDW-RF

Methoden	Grundgesamtheit	Minimum [mg/l]	Maximum [mg/l]	Mittlere NO ₃ -Konzentration [mg/l]	Standardabweichung [mg/l]	Anteil > 50 mg/l [%]
Messwerte	9.526 Punkte	0,01	390,90	22,84	32,35	13,06
Kriging-RF	357.219 Zellen	0,08	215,68	19,09	15,19	4,19
IDW-RF	357.219 Zellen	0,08	220,60	21,83	20,21	8,82

Ein erster Blick auf die statistischen Kenngrößen zeigt bereits Unterschiede in der Verteilung der modellierten Nitratkonzentrationen. Im Vergleich zum Kriging-RF-Modell weist der IDW-RF-Ansatz eine höhere Standardabweichung (20,21 mg/L vs. 15,19 mg/L) und einen höheren Anteil an Hotspots über 50 mg/l (8,82 vs. 4,19 %) auf.

5.3. Räumliche Darstellung der modellierten Nitratkonzentrationen

Die räumliche Darstellung der modellierten Nitratkonzentrationen dient dazu, die flächendifferenzierten Verteilungsmuster mit den dominanten Prädiktoren (hydrogeologische Lagerungsbedingungen und Landnutzung in Beziehung zu setzen. Die resultierenden flächenhaften Verteilungen der Nitratkonzentrationen (Abbildung 11 und Abbildung 12) zeigen eine strukturierte Verteilung, die sich in Gebiete mit geringer und Gebiete mit erhöhter Belastung gliedert.

In beiden Karten wird ein durchgehend geringes Belastungsniveau in großflächigen Wald- und Mittelgebirgslandschaften dargestellt. Beispiele hierfür sind das Alpenvorland, der Schwarzwald oder Mittelgebirgsregionen wie Harz und Bayerischer Wald, die überwiegend niedrige Nitratwerte zeigen. Diese Muster passen zu den dort vorherrschenden hydrogeologischen und landnutzungsseitigen Bedingungen, die insbesondere durch geringere Stickstoffeinträge infolge reduzierter landwirtschaftlicher Nutzung gekennzeichnet sind. Einen deutlichen hydrogeologischen Kontrast, der zu erhöhter Belastung und extremer räumlicher Variabilität führt, zeigen hingegen Gebiete mit Kluft- und Karstaquifere. Karstaquifere besitzen sehr schnelle Fließwege und eine insgesamt geringe Filterwirkung. Diese Eigenschaften führen dazu, dass eingetragene Stoffe sehr rasch und nahezu ungepuffert ins Grundwasser gelangen können und der Untergrund nur wenig zu Abbau der Konzentrationen beiträgt. Dadurch kann Nitrat schnell und teils in hohen Konzentrationen in das Grundwasser gelangen.

Aufgrund der diskontinuierlichen Durchlässigkeitsverbindungen und der komplexen Struktur des Karsts können benachbarte Bereiche allerdings stark kleinteilige und häufig abrupt wechselnde Konzentrationen aufweisen. So können die Werte von lokal hohen bis hin zu Bereichen mit geringen Konzentrationen reichen.

Diese hohe strukturelle Variabilität wird in der IDW-RF-Karte in Form kleinteiliger, fragmentierter Belastungsmuster abgebildet, was dem erwarteten diskontinuierlichen Transport im Karst entspricht. Besonders in den mittel- und süddeutschen Karstgebieten wie der Schwäbischen Alb, der Fränkischen Alb und im Bereich des Thüringer Beckens sowie in Kluftgebieten der Mittelgebirge ist dies deutlich zu beobachten, wobei Kriging-RF in diesen Gebieten tendenziell homogenere Flächenkonzentrationen aufweist.

Im Gegensatz zu diesen Festgesteins- und Karstregionen wird die Hydrogeologie Norddeutschlands von mächtigen Porengrundwasserleitern (Sande und Kiese) dominiert. In weiten Teilen des Norddeutschen Tieflandes herrschen aufgrund des Vorkommens organischer Substanzen und der vorherrschenden hydrogeochemischen Bedingungen reduzierte Verhältnisse. Dies begünstigt eine hohe Denitrifikationsrate (DWA 2015, Wolters et al. 2022, Knoll et al. 2024), was zu einem starken Abbau von Nitrat führt und die Konzentrationsmuster in vielen Bereichen glättet. Die Übersichtskarte in Abbildung 10 dokumentiert dazu die von Knoll et al. (2024) modellierten prozentualen Anteile der Stickstoffreduktion beim Übergang von der ungesättigten 8inkl. Bodenzone) in die gesättigte Grundwasserzone. Sehr deutlich erkennbar sind die Unterschiede zwischen hoher Reduktion in den Lockergesteinsgebieten Norddeutschlands im Vergleich zu den Festgesteinsgebieten in Mittel- und Süddeutschland.

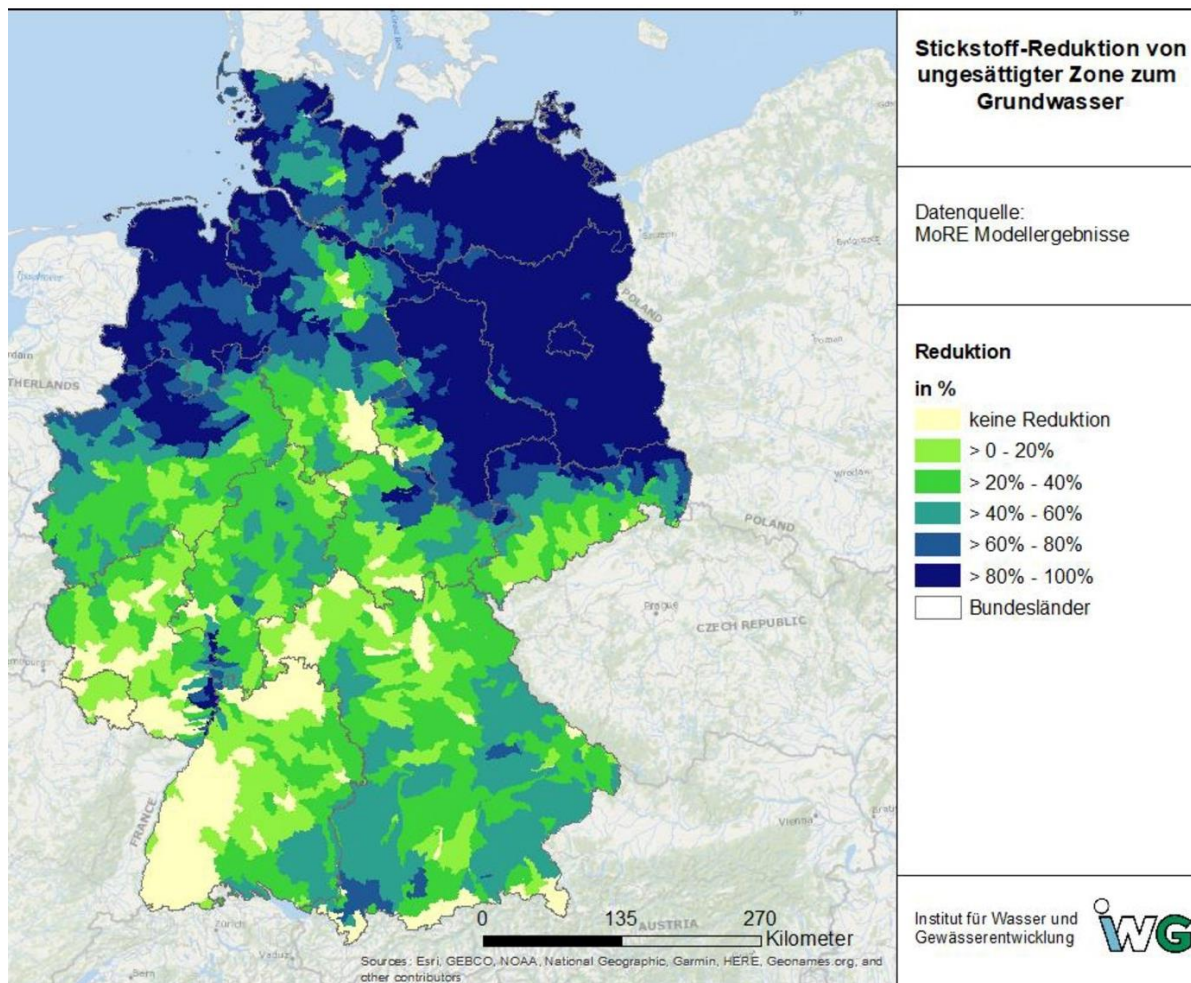


Abbildung 10: Modellerte Reduktion der Stickstofffrachten von der ungesättigten Zone zum Grundwasser in den MoRE-Analysegebieten (Quelle: Knoll et al. 2024)

Diese glättende Wirkung der Denitrifikation ist in großen Teilen des Norddeutschen Tieflandes in beiden Varianten der Darstellung (s. Abbildung 11 und Abbildung 12 und zusammen mit den Messstellen als punktbezogene Plausibilitätskriterien) gut zu erkennen. Abbildung 13 dokumentiert die Differenzen zwischen den beiden Modellen in absoluten Kategorien.

Diese Regionen weisen, obwohl oft landwirtschaftlich stark genutzt, großflächig nur moderate Belastungen auf. Die Modellierung spiegelt hier wider, dass die natürliche, mikrobielle Reduktionskapazität vielerorts im Zeitraum der verwendeten Daten (2016 bis 2020) noch in der Lage war, die Stickstoffeinträge effektiv abzubauen.

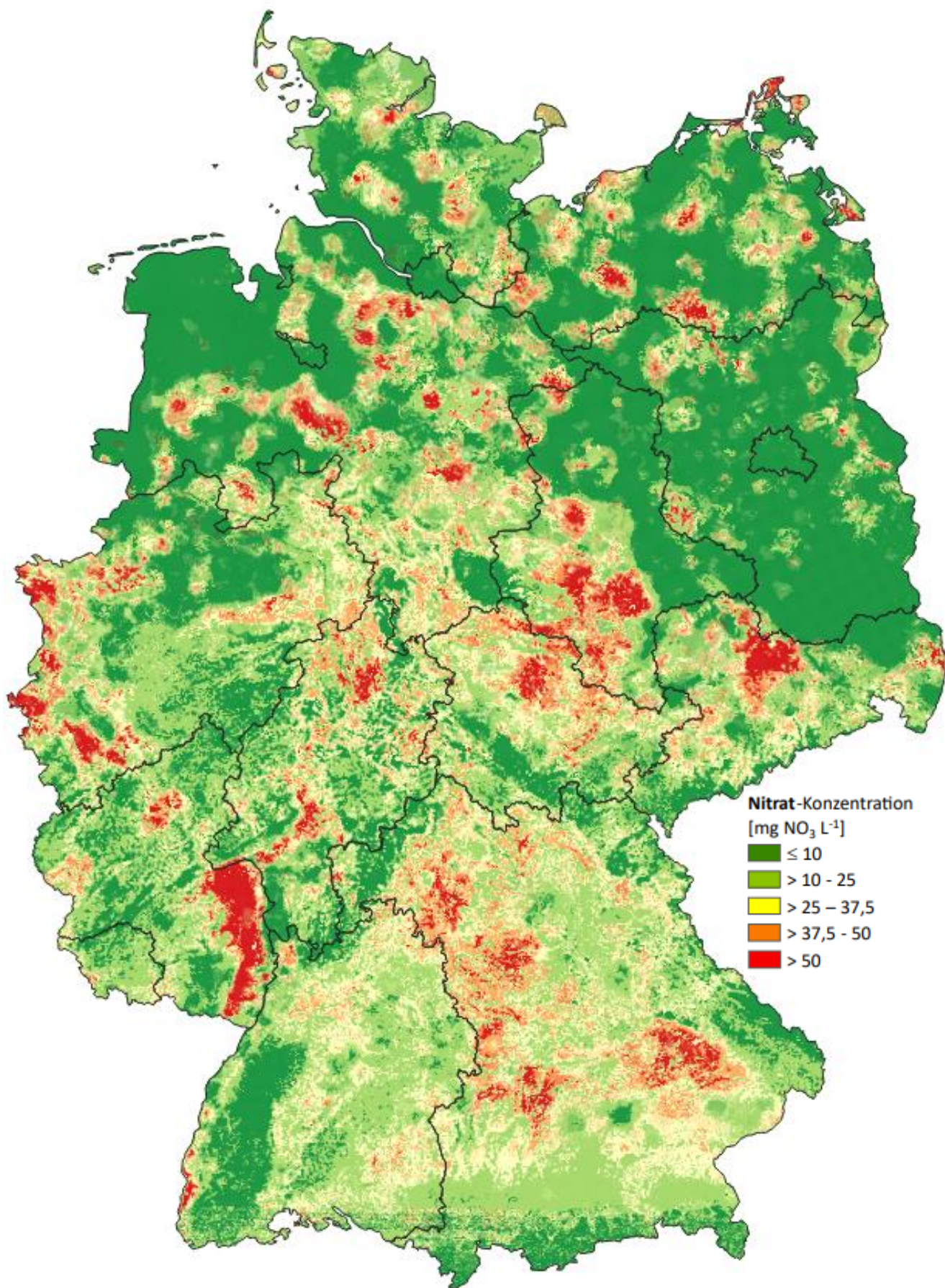


Abbildung 11: Vorhersage der NO₃-Konzentrationen im Grundwasser mit Kriging-RF

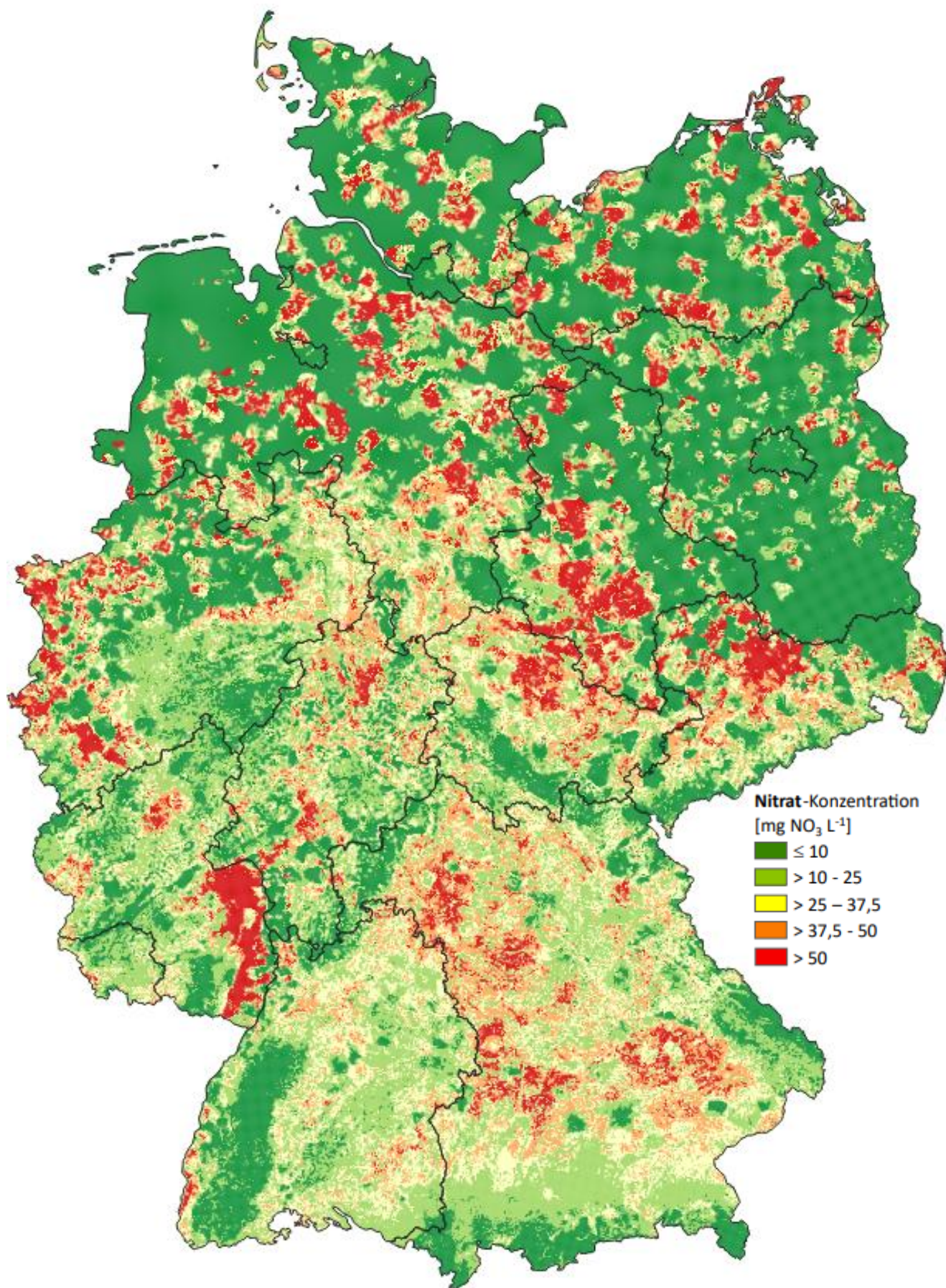


Abbildung 12: Vorhersage der NO₃-Konzentrationen im Grundwasser mit IDW-RF

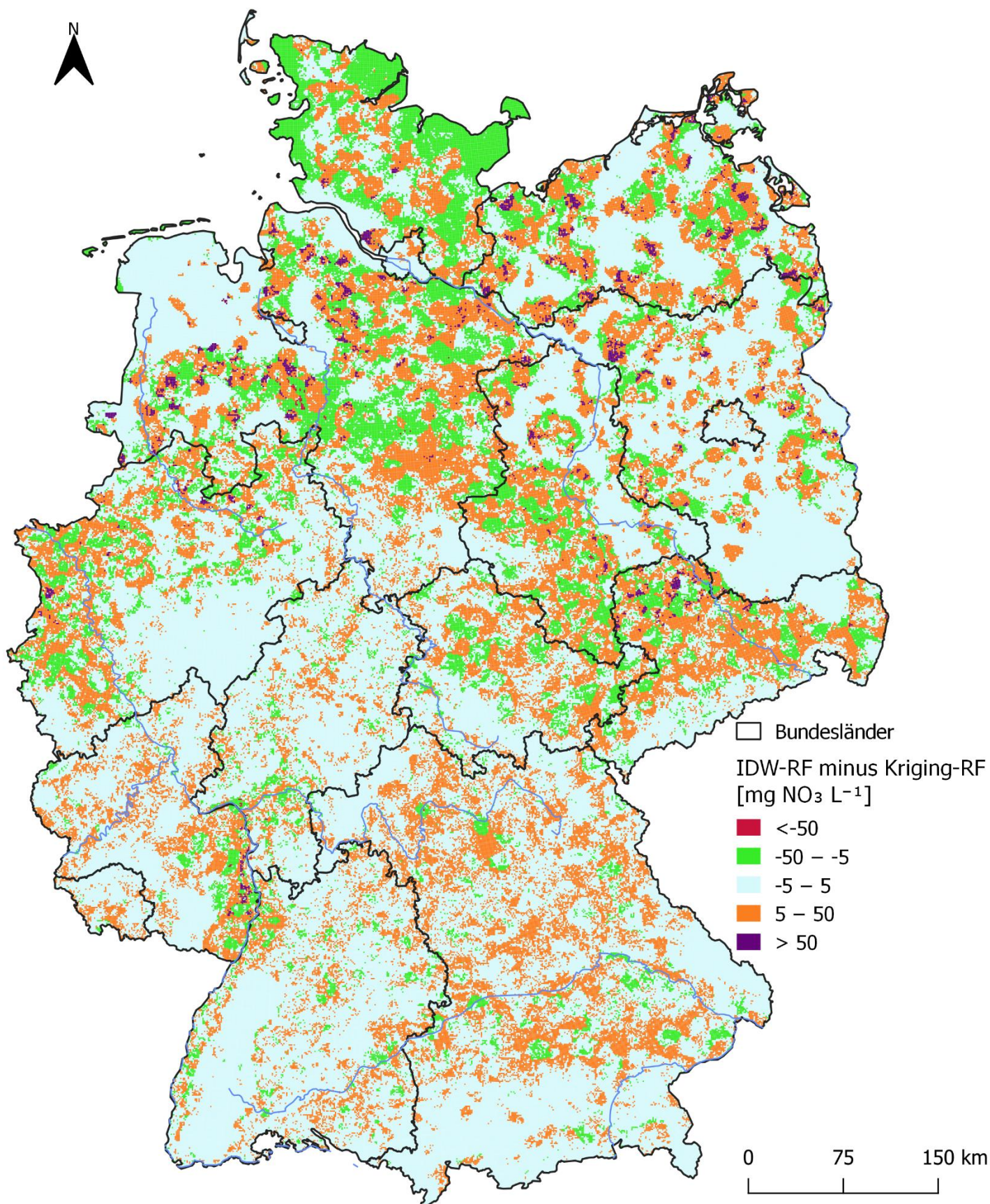


Abbildung 13: Differenzen der mittels Random Forest modellierten Nitratkonzentrationen zwischen den beiden Modellen RF-IDW und RF-Kriging

Dennoch zeigen sich auch in diesen Gebieten kleinteilige, fragmentierte Hotspots, die durch die Modellierung lokal nicht immer optimal reproduziert werden können. Bei einer extrem hohen lokalen Heterogenität der Stickstoffeinträge mit resultierend einer gleichen Heterogenität der natürlichen Reduktionsprozesse, jedoch einer nicht ausreichenden Messstellendichte (und damit zu wenig Trainingsdaten für RF) zur adäquaten Reproduktion dieser Prozesse kann die Modellierung kein lokal repräsentatives Ergebnis erzeugen.

Die extreme Heterogenität ist exemplarisch in den intensiv landwirtschaftlich genutzten Regionen im Oldenburger Münsterland, im Emsland (beides Niedersachsen), und im Münsterland (Nordrhein-Westfalen) sichtbar. Bei diesen Gebieten handelt es sich um Regionen mit einer sehr hohen Tierbesatzdichte, die sich vom nördlichen Westfalen über das westliche Niedersachsen bis nach Schleswig-Holstein erstrecken.

Die beiden Karten in Abbildung 14 dokumentieren diese Situation im Gebiet im Oldenburger Münsterland bis in das südliche angrenzende Münsterland in Nordrhein-Westfalen anhand des Vergleiches der an den Messstellen gemessenen Konzentrationen (Punkte) mit den modellierten Konzentrationen (Flächenfarben). Es zeigt sich deutlich, dass die mittels IDW-RF modellierten Hotspots zumeist stärker mit den Messstellen korrespondieren, während Kriging-RF tendenziell eine geglättete Darstellung liefert und dabei hohe gemessene Konzentrationen (rote Punkte) im Ergebnis der Modellierung unterschätzt.

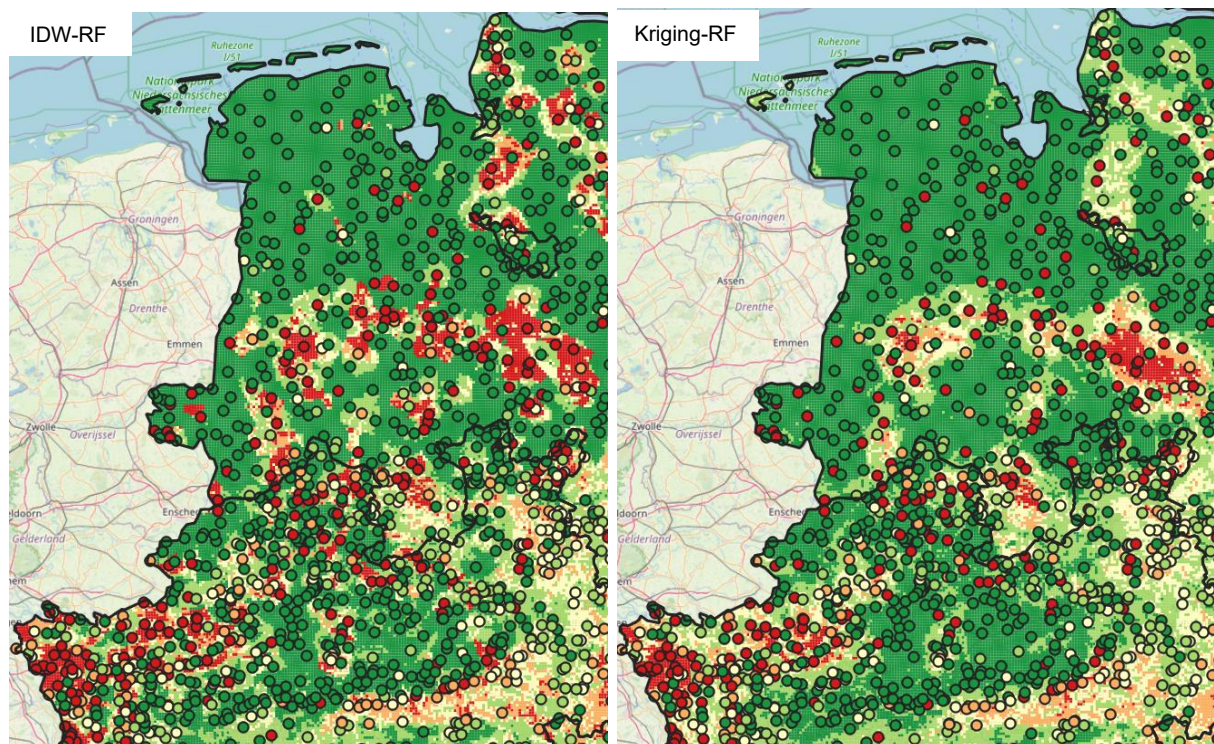


Abbildung 14: Vergleich IDW-RF und Kriging-RF in Gebieten Norddeutschlands mit hoher Viehbesatzdichte. Ein im Vergleich dazu deutlich großräumigeres Muster einer flächenhaft hohen Nitratbelastung zeigt sich am Nordrand der Oberrheinischen Tiefebene in der Vorderpfalz in Rheinland-Pfalz. In beiden berechneten Modellversionen wird dieser bekannte und gut dokumentierte Hotspot der Nitratbelastung in RP (LfUWG RP 2006, FH-DGGV 2026) als eine Region mit hoher (> 50 mg/L) und räumlich flächenhafter Nitratbelastung ausgewiesen (s. Abbildung 15).

Diese hohe Belastung spiegelt die intensive landwirtschaftliche Nutzung des Gebiets in Form von Sonderkulturen wider (Weinbau, Gemüseanbau etc.), die zu hohen Stickstoffeinträgen führt. Anders als in Norddeutschland wird hier die hohe Belastung hier nicht flächendeckend

durch eine starke Denitrifikationskapazität im Boden, in der ungesättigten und auch nicht in der gesättigten Zone der Grundwasserleiter reduziert, da anoxische Verhältnisse in den größeren Schotter-sedimenten des Rheins im Vergleich zu dem feinkörnigeren glazigenen Material in Norddeutschland nur untergeordnet auftreten. Die Kombination aus hohen Einträgen und hoher Durchlässigkeit der Aquifere ohne ausreichende Reduktion führt daher zu einer kontinuierlichen hohen und flächenhaften Belastung des oberflächennahen Grundwassers

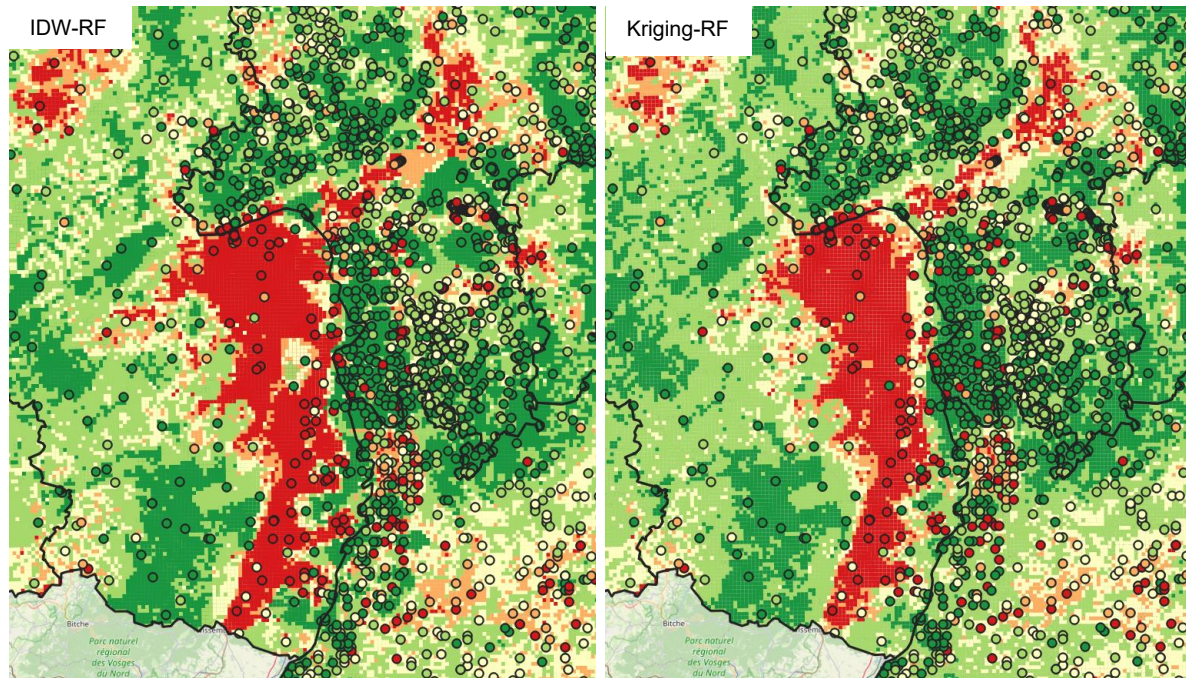


Abbildung 15: Vergleich IDW-RF und Kriging-RF in der nördlichen Oberrheinischen Tiefebene in RP

Neben diesen Extremfällen zeigt sich ein weiterer bedeutender Belastungstyp in den Lössböden Mitteldeutschlands (z. B. Magdeburger Börde, Hellwegbörde). Diese Regionen sind ebenfalls durch äußerst intensive landwirtschaftliche Nutzung auf dort sehr fruchtbaren Lössböden gekennzeichnet. Das Muster in Abbildung 16 weist hierbei oft hohe bis sehr hohe Belastungen aus, was die massiven Stickstoffeinträge widerspiegelt. Die dort vorherrschenden feinkörnigen Deckschichten (Löss) bieten zwar im Vergleich zu Karst- oder Grobsand-Regionen eine potenziell höhere Schutzwirkung und langsamere Fließwege, sind jedoch bei langanhaltenden (Jahrzehnte) hohen Einträgen nicht mehr in der Lage, die Nitratfrachten ausreichend abzubauen oder zurückzuhalten. Beide Varianten der Modellierung zeigen hier vergleichbar plausible Ergebnisse vor dem Hintergrund der dokumentierten Messwerte.

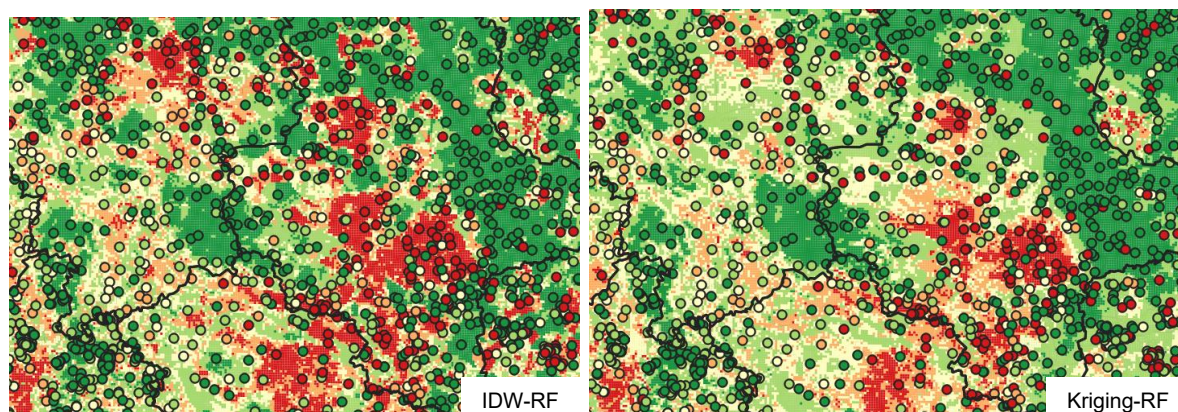


Abbildung 16: Vergleich IDW-RF und Kriging-RF im Bereich der Magdeburger Börde in ST

6. Validierung, Diskussion und Bewertung

6.1. Validierung der Modellergebnisse

Die tatsächliche Vorhersagegüte des Modells auf unabhängigen Daten beträgt $R^2 = 0,532$. Damit wird etwas mehr als die Hälfte der Nitratvariabilität im Grundwasser erklärt. Obwohl dieser Wert für die Regionalisierung solide ist und mit ähnlichen Studien (Knoll et al. 2020; UBA 2026) übereinstimmt, signalisiert der starke Leistungsabfall gegenüber der Trainingsphase ($R^2 = 0,856$) klares Overfitting. Das Modell kann die Muster der Trainingsdaten hervorragend abbilden, ist aber in der Generalisierung auf neue, räumlich unabhängige Daten nur mäßig präzise. Die unerklärte Varianz rührt von Prozessen her, die das Modell nicht erfassen kann, wie lokale Unterschiede in den hydrogeologischen Lagerungsbedingungen, der für den mikrobiellen Nitratabbau bedeutenden Tiefendifferenzierung der verwendeten Grundwasser-messstellen sowie den kurzfristigen zeitliche Schwankungen.

Der Vergleich zwischen $cv\text{-}R^2$ (0,505) und $\text{Test-}R^2$ zeigt, dass die Generalisierungsleistung als stabil angenommen werden kann und somit die Prognose eine verlässliche Darstellung der dominanten Muster liefert. Das Modell kann somit im Großen und Ganzen die räumliche Verteilung der im Grundwasser gemessenen Nitratkonzentrationen widerspiegeln und erfasst die Streuung durch die wichtigen Prädiktoren.

Einschränkungen ergeben sich im Bereich der Extremwerte mit hohen Nitratkonzentrationen. Der deutlich höhere RMSE (21,690 mg/l) im Vergleich zum MAE (12,490 mg/l) weist darauf hin, dass die Gesamtfehlerbilanz stark von einigen wenigen großen Fehlern dominiert wird, was auch im Diagramm in Abbildung 9 deutlich wird. Diese systematische Unterschätzung hoher Konzentrationen lässt sich vor allem durch die rechtsschiefe Verteilung der Nitratmesswerte erklären, da extrem hohe Werte in den Messdaten selten auftreten und dem Modell beim Lernen nur begrenzt zur Verfügung standen. Das Modell prognostiziert vor allem Konzentrationen über 100 mg/l niedriger, sodass räumliche Hotspots dort tendenziell geglättet und damit ggf. unterschätzt werden.

6.2. Bewertung der Regionalisierungsverfahren

6.2.1. Diskussion der Prädiktor-Relevanz

Die PFI-Analyse identifiziert die chemischen Parameter Eisen und Sauerstoff als die wichtigsten Prädiktoren. Das weist darauf hin, dass das Modell stark von geochemischen Bedingungen beeinflusst wird. Ein kurzer Test während des Modelltrainings zeigte ebenfalls, dass Modelle ohne diese Prädiktoren nur eine geringe Vorhersageleistung erreichen, während ihre Einbeziehung die Vorhersage signifikant verbessert.

Deutlich wird die zentrale Rolle der hydrochemischen Parameter auch bei der Analyse der PDPs. Sie zeigen eine deutliche Abnahme der prognostizierten Nitratwerte bei steigenden Eisenkonzentrationen. Eine hohe Konzentration von gelöstem Eisen im Grundwasser weist auf reduzierende Bedingungen hin (Scheytt 1994, DWA 2015), da Eisen (III)-Oxide unter Sauerstoffarmut zum wasserlöslichen Eisen (II) reduziert werden. Unter diesen Bedingungen läuft auch die mikrobielle Denitrifikation ab, bei der Nitrat abgebaut wird. Hohe Eisenwerte sind somit ein sehr guter Indikator für Nitratabbauprozesse, was vom Modell erkannt wird.

Ein umgekehrter Einfluss zeigt sich beim im Grundwasser gelösten Sauerstoffgehalt. Steigende O_2 -Konzentrationen führen nach den Ergebnissen der PDP zu höheren prognostizierten Nitratwerten. Dieser Zusammenhang ist plausibel, da oxidierende Bedingungen die Denitrifikation hemmen und damit das Nitrat stabil im Grundwasser gelöst bleiben kann (Hannappel

et al. 2018). In einem gut durchlüfteten, oxischen Grundwasserleiter wird Nitrat daher kaum abgebaut, wodurch die Belastung bestehen bleibt oder sich verstärken kann.

Auch dem Sulfatgehalt wird im Modell eine große Bedeutung zugeordnet. Sulfat kann im Grundwasser sowohl als Elektronenakzeptor dienen als auch ein Produkt mikrobieller Vorgänge sein. Die PDPs zeigen, dass höhere Sulfatwerte mit moderat erhöhten Nitratkonzentrationen korrespondieren. Mit steigendem Sulfatgehalt flacht die Kurve ab und erreicht ein asymptotisches Verhalten. Dies deutet auf eine Veränderung der dominierenden biogeochemischen Prozesse hin, bei dem die Sulfatkonzentrationen dem RF-Modell keinen Mehrwert für die Nitratprognose liefern.

Die Analyse der Ergebnisse zu Eisen, Sauerstoff und Sulfat zeigt, dass das RF-Modell die geochemischen Prozesse für die Nitratvorhersage korrekt erfasst und diese für die Prognose von zentraler Bedeutung sind. Auch Ohmer et al. (2025) konnten in ihren Untersuchungen zeigen, dass die Einbeziehung hydrochemischer Kovariablen (wie Eisen und Kalium) die Vorhersage in bestimmten Gebieten Deutschlands entscheidend verbessert.

Neben den chemischen Parametern werden im Modell auch anthropogene Einflüsse plausibel erfasst. Die PFI-Analyse zeigt, dass der Flächenanteil von Ackerland im Umkreis der Grundwassermessstellen (als Ersatz für die nicht vorhandenen Zustrom- bzw. Einzugsgebiete zu den Grundwassermessstellen und Quellen) zu den wichtigsten nicht-geochemischen Prädiktoren gehört. Das RF-Modell prognostiziert deutlich erhöhte Nitratkonzentrationen, sobald der Anteil an Ackerland zunimmt. Das stimmt gut mit den hohen Stickstoffeinträgen in stark landwirtschaftlich genutzten Gebieten überein, in denen große Mengen an mineralischem bzw. Wirtschaftsdünger (Gülle) ausgebracht werden. Umgekehrt sinken die Konzentrationen mit zunehmendem Anteil an Laub- und Mischwald deutlich, da diese Gebiete geringere Düngungsintensitäten aufweisen, stärkere Nährstoffbindung ermöglichen und eine Verdünnung durch höhere Infiltrationsraten fördern.

6.2.2. Einfluss der Interpolation auf die Hotspot-Identifikation

In diesem Projekt wurden Random Forest als Hauptalgorithmus sowie Kriging und IDW als ergänzende geostatistische bzw. deterministische Verfahren zur flächendeckenden Interpolation fehlender Redox-Parameter ausgewählt. Die beiden Modellansätze (IDW-RF und Kriging-RF) haben einen unterschiedlichen Einfluss auf die räumliche Genauigkeit der Nitratvorhersage.

Obwohl das geostatistische Kriging-Verfahren eine anerkannte, fundierte Methode zur Regionalisierung von Grundwasserparametern ist und auch in der AVV GeA (2022) als das zukünftige Regelverfahren bestimmt wird, wiesen die mit IDW-RF modellierten Nitratkonzentrationen eine signifikant höhere räumliche Variabilität in der Vorhersage auf. Gerade in hydrogeologisch komplexen Gebieten (z. B. Karstregionen) und intensiv landwirtschaftlich genutzten Räumen, wo kleinskalige Hotspots auftreten, zeigte IDW-RF visuell eine bessere Korrespondenz mit den punktuellen Extremwerten des Messnetzes.

Der Grund hierfür könnte eine doppelte Glättung der lokalen Konzentrationsspitzen sein. Während beide Modelle unter der statistischen Modellglättung des RF leiden, bewahrt die IDW-Interpolation die lokal gemessene Messwertvariabilität besser, da sie die Extremwerte der Eingangsparemeter (Redox-Parameter) weniger dämpft. Kriging reduziert die Maxima durch die räumliche Autokorrelation stärker. Dadurch liefert IDW-RF eine detailreichere Karte, die für die Identifikation kritischer Hotspots räumlich besser geeignet erscheint.

Diese stärkere Abbildung der Variabilität durch IDW spiegelt sich auch im Anteil der Hotspots wider. So weist IDW-RF mehr als doppelt so viele Flächen mit Konzentrationen über 50 mg/l aus als Kriging-RF. Auch die Standardabweichung und der Mittelwert liegen näher an den dokumentierten Messwerten, was die realistischere Abbildung der globalen Belastung unterstreicht.

Für die Identifikation kritischer Grundwasserbereiche im Sinne der Wasserrahmenrichtlinie (EG-WRRL) bzw. der Düngeverordnung (DüV 2020) und der AVV GeA (2022) in nationaler Umsetzung der EG-Nitratrichtlinie, die eine Abgrenzung von Flächen mit hohem Belastungspotenzial erfordert, ist die IDW-basierte Regionalisierung daher die geeignetere Wahl, da sie weniger stark glättet und die lokale Variabilität besser erhält.

6.3. Räumliche Analyse der Vorhersageunsicherheit

Die Unsicherheit einer Vorhersage ist ein entscheidendes Maß für deren Verlässlichkeit. Da die IDW-RF-Methode gegenüber dem Kriging-RF-Ansatz eine präzisere Identifikation kleinräumiger Hotspots ermöglicht, wurde die Abschätzung der Vorhersageunsicherheit ausschließlich für das finale IDW-RF-Modell durchgeführt. Kriging ist darauf ausgelegt, den Fehler an jedem Punkt zu minimieren, um eine harmonisierte Oberfläche zu erzeugen. Als Modellinput würde die statistische Unschärfe dieser Interpolation für RF jedoch unsichtbar bleiben. Dem Modell würde dadurch eine künstliche Stabilität suggeriert werden, woraus eine systematische Unterschätzung der Gesamtunsicherheit resultieren würde. Eine realistischere Abschätzung könnte hierbei nur erzielt werden, wenn die Kriging-Varianz als zusätzlicher Prädiktor im Modell mit aufgenommen wird.

Anstatt die Unsicherheit über Zusatzvariablen zu modellieren, bietet die IDW-RF-Methode eine „transparentere Darstellung der Vorhersagesicherheit. Als deterministisches Verfahren gewichtet IDW die Nachbarn strikt nach ihrer Distanz und bewahrt so lokale Datenkontraste und die natürliche Variabilität der hydrochemischen Eingangsdaten. Treffen diese direkt regionalisierten Signale im Random Forest auf widersprüchliche Informationen anderer Prädiktoren, führt dies im Modell zu einer messbar höheren Uneinigkeit zwischen den Einzelbäumen. Die räumliche Unsicherheit der Eingangsdaten kann somit direkt über die Ensemble-Varianz des Modells abgebildet werden.

Zur Quantifizierung wurde für jede Rasterzelle die Verteilung dieser baumspezifischen Prognosen analysiert und daraus das 90 %-Vorhersageintervall ($Q_{95}-Q_{05}$) abgeleitet. Die in Abbildung 17 dargestellten Klassen beschreiben somit genau jene Spanne der Nitratkonzentration, in der der tatsächliche Wert mit einer Wahrscheinlichkeit von 90 % liegt. Wichtig ist hierbei, dass die Karte die Breite dieses Bereichs visualisiert und keine direkte Aussage über das absolute Konzentrationsniveau trifft. Breite Intervalle (z. B. > 100 mg/l) weisen auf eine sehr hohe Unsicherheit der prognostizierten Werte hin, während schmale Intervalle (z. B. < 20 mg/l) eine stabile und verlässliche Vorhersage kennzeichnen.

Die räumliche Verteilung der Unsicherheit korrespondiert eng mit der im Kapitel 6.1 festgestellten Problematik der Extremwert-Prognose. In Regionen mit hoher Nitratbelastung und hoher lokaler Variabilität, wie etwa in Teilen Niedersachsens und Nordrhein-Westfalens, zeigt die Karte großflächig hohe Unsicherheiten (dunkelblaue Cluster). Dies bestätigt, dass das Modell im Bereich räumlicher Hotspots die geringste statistische Sicherheit aufweist. Weite Teile Süd- und Ostdeutschlands weisen sowohl niedrige modellierte Konzentrationen als auch schmale Unsicherheitsintervalle auf. Hier korrelieren die Umweltprädiktoren durchweg mit den Messdaten der Nitratkonzentrationen, was die Verlässlichkeit der Modellaussagen für diese Naturräume unterstreicht.

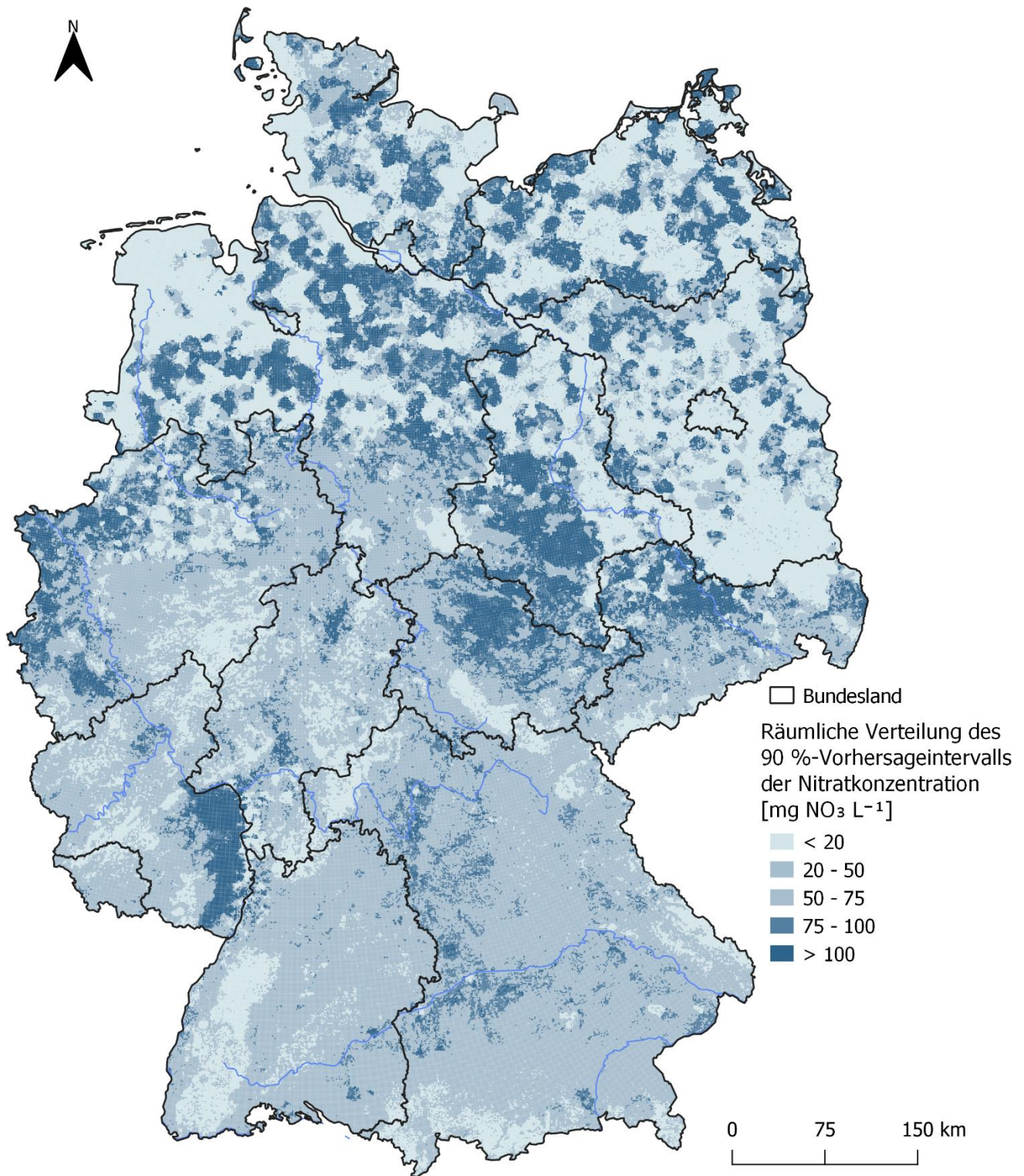


Abbildung 17: Räumliche Verteilung der Vorhersageunsicherheit des IDW-RF-Modells. Dargestellt ist die Spannweite des Ensemble-basierten 90 %-Vorhersageintervalls (Differenz aus 95- und 5-Perzentil der Einzelbaum-Prognosen).

6.4. Vergleich mit weiteren, aktuell vorliegenden Modellergebnissen

Im Rahmen des UBA-Projekts „Entwicklung einer nationalen und regional aufgelösten Obergrenze für reaktiven Stickstoff“ (UBA 2026) wurde die Nitratkonzentration im Grundwasser mithilfe eines Random-Forest-Ansatzes modelliert, der dort als Klassifikationsalgorithmus

bezeichnet wird. Ziel dieser Modellierung war die Erstellung einer bundesweit flächenhaften Übersicht, um Gebiete mit Überschreitungen von 50 mg/l dokumentieren zu können. Das Ergebnis dieses Klassifikationsansatzes ist oben links in Abbildung 18 dargestellt. Um eine direkte Vergleichbarkeit dieser räumlichen Muster zu gewährleisten, wurde in der vorliegenden Arbeit dieselbe, fünffach differenzierte Klasseneinteilung (≤ 10 ; $> 10-25$; $> 25-37,5$; $> 37,5-50$; > 50 mg/l) gewählt.

Trotz der unterschiedlichen Ziele (Regression der Konzentration vs. Klassifikation von Grenzwerten) sind die modelltechnisch erreichten, statistischen Gütemaße der Konzentrationsprognosen vergleichbar. Dies liegt auch daran, dass die Datengrundlage hinsichtlich der räumlichen Punktdichte und des zeitlichen Rahmens weitgehend identisch ist, was zur Stabilität der Modellierungsergebnisse beiträgt. Während das Modell von UBA (2026) auf den Trainingsdaten ein R^2 von 0,56 und einen MAE von 13,3 mg/l erreichte, erzielt die vorliegende Untersuchung auf den unabhängigen Testdaten ein R^2 von ca. 0,53 und einem MAE von 12,5 mg/l. Obwohl für den UBA-Ansatz keine explizite Testgüte vorliegt, deutet der Umstand, dass das hier entwickelte Modell auf unabhängigen Testdaten ein nahezu identisches Güteniveau erreicht wie das Referenzmodell in der Trainingsphase, auf eine hohe Generalisierungsfähigkeit und eine verlässliche Übertragbarkeit des Regressionsansatzes hin. Auch das Modell von Knoll et al. (2020) erreichte mit einem R^2 von 0,51 (MAE von 12,97 mg/l) in den Testdaten ein vergleichbares Leistungsniveau.

Unabhängig vom Modellansatz zeigen alle drei Modellierung, dass bestimmte Prädiktoren einen dominanten Einfluss auf die Nitratvorhersage haben. Dazu gehören vor allem die Redoxbedingungen im Grundwasserleiter (repräsentiert durch Fe, O_2 und SO_4), die hydrogeologische Raumstruktur (nach der Raumgliederung der Staatlichen Geologischen Dienste vom hydrogeologischen Großraum bis zur hydrogeologischen Einheit), die landwirtschaftliche Nutzungsstruktur (hier vor allem der Anteil der Ackerfläche im Umkreis der Messstellen sowie der Stickstoffüberschuss im Ergebnis der flächenhaften Stickstoffbilanzen).

Signifikante Unterschiede zeigen sich erst in der räumlichen Darstellung der Konzentrationen, was maßgeblich auf die Regionalisierung der Redox-Parameter als Eingangsgrößen zurückzuführen ist. Während Knoll et al. (2020) und das UBA-Projekt (2026) hierfür Random-Forest-Modelle verwenden, kommen in den hier verwendeten Ansätzen ergänzend räumliche Interpolationsverfahren zur Regionalisierung der nur punktbezogen vorliegenden Messwerte der hydrochemischen Indikatorparameter Eisen, Sulfat und Sauerstoff, wie IDW oder Kriging zum Einsatz. Die resultierenden vier Karten der modellierten Nitratkonzentrationen sind in Abbildung 18 dargestellt.

Die Karte von Knoll et al. (2020) zeigt deutlich schärfere Kontraste und insgesamt tendenziell höhere Konzentrationsbereiche, vor allem im Bereich des Niederrheins in NRW, in Teilen Bayerns und Sachsens sowie im Thüringer Becken und im Süden von Sachsen-Anhalt. In weiten Bereichen Nordostdeutschlands dagegen (Brandenburg, Altmark in Sachsen-Anhalt) und in Vorpommern sind flächenhaft niedrige bzw. sehr niedrige Werte erkennbar. Hier lokal ebenfalls vorkommende hohe Messwerte werden vermutlich durch das entwickelte Modell in ihrer räumlichen Reichweite unterschätzt. In den Lockergesteinsgebieten Niedersachsens und in Schleswig-Holstein mit oft hohen bis sehr hohen Viehbesatzdichten im Zeitraum der Messwerterhebung (bis zu den 2010er-Jahren) dagegen zeigen sich auch flächenhaft deutlich erkennbar große Areale mit modellierten hohen Konzentrationen, welche die damalige Belastungssituation vermutlich realistisch wiedergeben, allenfalls sie in ihrem räumlichen Ausmaß etwas überschätzen könnten.

Insgesamt liegen bei Knoll et al. (2020) etwa 10 % der Rasterflächen über dem Schwellenwert der EG-Nitratrichtlinie bzw. der nationalen GrwV (2022) von 50 mg/l, was deutlich über den Anteilen des UBA-Projekts (2 %) und etwas über den hier entwickelten Modellansätzen (Kriging-RF: 4,2 %, IDW-RF: 8,8 %) liegt. Allen vier Ansätzen gemein ist jedoch, dass die genannten Anteile einerseits deutlich unter dem Anteil der Messstellen mit Konzentrationen über dem Schwellenwert 50 mg/L im aktuellen, 672 Messstellen umfassenden Nitratmessnetz Deutschlands (25,6 %, BMEL & BMUV 2024) und andererseits auch deutlich unter dem Anteil der Grundwasserkörper im schlechten chemischen Zustand wegen Nitrat nach EG-WRRL liegen. Sehr klar wird hier die Bedeutung eines möglichst flächenrepräsentativen Messnetzes zur Erfassung der kleinräumigen hydrochemischen Heterogenitäten im Grundwasser, was aktuell in Deutschland durch die vollumfängliche und im hier dokumentierten Bericht realisierte Einbeziehung der von den Bundesländern betriebenen Messstellen des EG-Wasserrahmenrichtlinien-Messnetzes in die Modellierung der flächenhaften Belastung des Grundwassers am Besten gelingt. Diesen Messnetzen kommt daher auch weiterhin eine sehr große Bedeutung zur Ermittlung von flächenhaften Auswirkungen der landwirtschaftlichen Tätigkeit im Grundwasser Deutschlands zu. Der finanzielle und kapazitative hohe Aufwand, der bei den Ländern zur Erhaltung und Fortbestandes dieses Messnetzes betrieben wird, erscheint also gerechtfertigt.

Die Unterschiede im Vergleich der Modellierungsansätze verdeutlichen, wie stark die Wahl des Regionalisierungsverfahrens die Identifikation von Belastungsgebieten beeinflusst. Das UBA-Modell erzeugt ein eher zurückhaltendes Belastungsniveau und glättet starke lokale Extremwerte, während der Ansatz von Knoll et al. (2020) diese stärker gewichtet. Im Vergleich dazu weisen die IDW-RF und Kriging-RF-Modelle der hier dokumentierten Modellierung eher moderatere Flächenanteile aus. Dabei bildet IDW-RF lokale Hotspots räumlich repräsentativer ab als das glättende Kriging-Verfahren.

Methodisch kritisch anzumerken bleibt die unzureichende Justierung dieser Ansätze bei der Abbildung von Extremwerten. Wie auch bei Knoll et al. beobachtet, tendieren alle betrachteten Modelle dazu, hohe Konzentrationen (>100 mg/l) systematisch zu unterschätzen. Die von Knoll et al. ausgewiesene hohe Vorhersageunsicherheit (MPI von 53 mg/l) verdeutlicht, dass punktgenaue Modellprognosen in lokal hinsichtlich der im oberflächennahen Grundwasser gemessenen Nitratkonzentrationen stark heterogenen Gebieten weiterhin nur begrenzt zuverlässig sind.

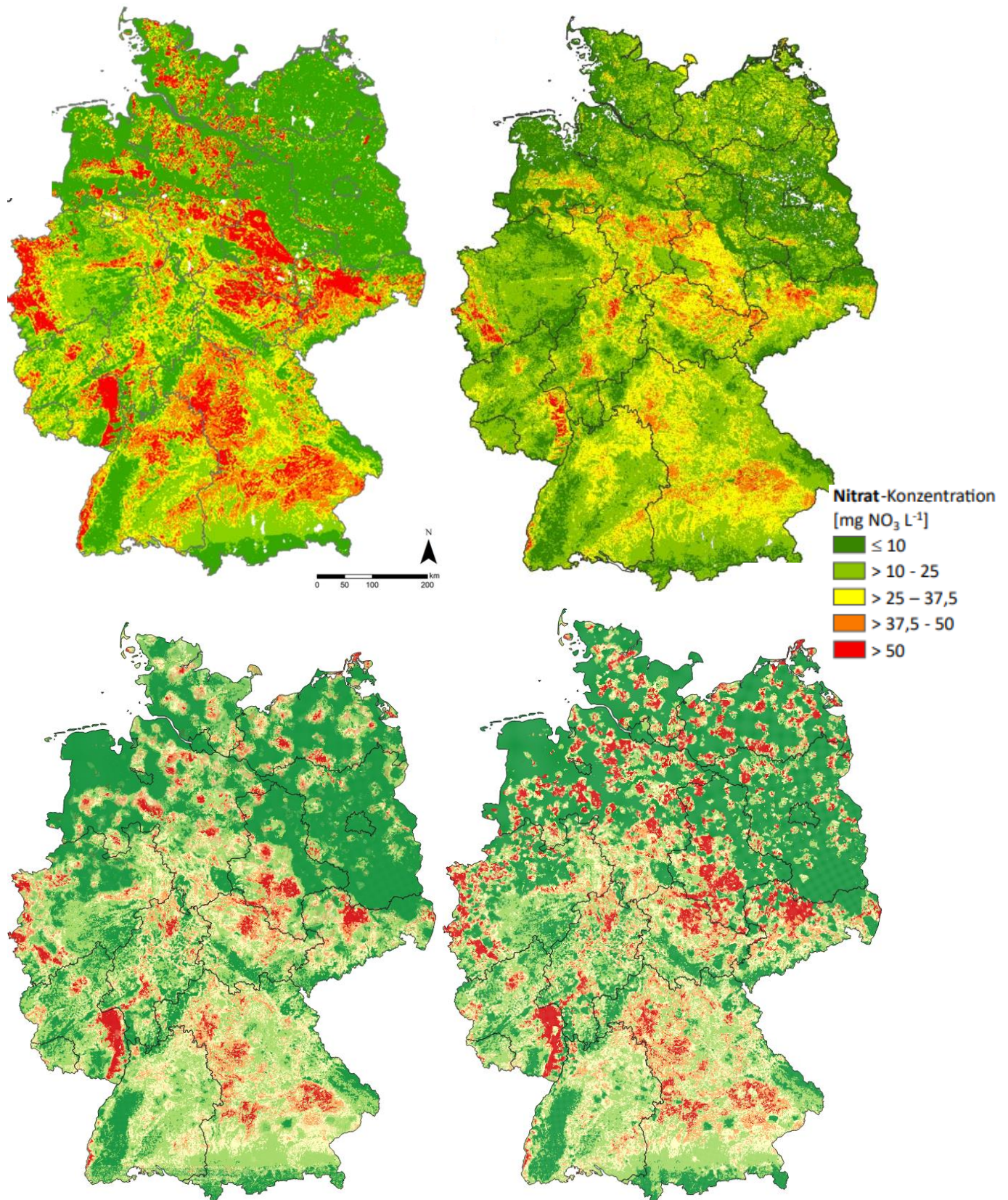


Abbildung 18: Nitratkonzentrationen im oberflächennahen Grundwasser in Deutschland, modelliert mit unterschiedlichen Random Forest-Verfahren.

7. Schlussfolgerung und Ausblick

Ziel der Untersuchungen war die Entwicklung, Validierung und Anwendung eines Random Forest (RF) basierten Modells zur flächendeckenden Regionalisierung der Nitratkonzentrationen im oberflächennahen Grundwasser Deutschlands. Grundlage der Bearbeitung war ein deutschlandweiter Datensatz von mehr als 10.000 Messstellen mit Messwerten aus dem Zeitraum 2016 bis 2020, der bei den Wasserwirtschaftsverwaltungen der Bundesländer im Zusammenhang mit einem vorausgegangenen Projekt des Umweltbundesamtes (UBA 2026) recherchiert worden war. Bei den Messstellen handelt es sich im Wesentlichen um die EG-WRRL-Messstellen der entsprechenden Messnetze der Länder. Für die Modellierung mittels RF und begleitender deterministischer bzw. geostatistischer Verfahren wurden verschiedene räumliche Faktoren (Prädiktoren) wie hydrogeologische Raumeinheiten und Landnutzung mit den hydrochemischen Messwerten unterschiedlicher Parameter der Grundwassermessstellen kombiniert, die dem Modell als Eingangsdaten dienten.

Die Ergebnisse zeigen, dass das hier entwickelte bzw. - im Vergleich zu UBA 2026 - fortgeschriebene RF-Modell mit einer Testgüte von $R^2 = 0,532$ eine robuste Leistungsfähigkeit zur flächendeckenden Abbildung großräumiger Muster der Nitratbelastung im oberflächennahen Grundwasser aufweist. Die Redox-Parameter Eisen und Sauerstoff sowie der jeweils relative Anteil an Ackerland im Umfeld der Grundwassermessstellen waren für die Modellprognose die wichtigsten Treiber. Die Fähigkeit des Modells, die hydrogeochemische Muster der Nitratbelastung korrekt zu erfassen, konnte durch die Analyse der Partial Dependence Plots (PDPs) bestätigt werden. Insbesondere der abrupte Abfall der Nitratkonzentrationen mit steigenden Eisenkonzentrationen fungiert als klarer Indikator dafür, dass das RF-Modell den dominanten Treiber des Prozesses, nämlich die Denitrifikation in reduzierenden, anoxischen Milieus der oberflächennahen Grundwasserleiter erkannt hat. Die vergleichende Analyse der Regionalisierungsverfahren zeigt, dass der entwickelte IDW-RF-Ansatz zur flächenhaften Regionalisierung der punktuell (diskret) vorliegenden hydrochemischen Indikatorparameter (Eisen, Sulfat und Sauerstoff) im Vergleich zu Kriging-RF und externen Referenzmodellen die höchste räumliche Variabilität und Plausibilität im Vergleich mit den tatsächlich gemessenen Konzentrationen an den Grundwassermessstellen aufweist. Dies führte zur Abgrenzung von mehr als doppelt so vielen Hotspots (Konzentrationen > 50 mg/l) als beim Kriging-Verfahren, was die Bedeutung dieser Interpolationsmethode für die Abbildung lokaler Extreme unterstreicht.

Die umfangreiche Validierung des Modells zeigt, dass der angewandte Random Forest-Ansatz eine transparente und fachlich plausible Methode zur Regionalisierung der Nitratbelastung darstellt. Die gezeigte Interpretierbarkeit durch PFI und PDPs entkräftet die oft genannte Kritik der mangelnden Nachvollziehbarkeit von Machine Learning-Verfahren und belegt die Eignung des Modells als zuverlässiges, vergleichbares Verfahren. Aufgrund der konservativen (glättenden) Natur von Regressionsmodellen und der geringen Datendichte für extrem hohe Messwerte (rechtsschiefe Verteilung) unterschätzt das Modell jedoch systematisch hohe und sehr hohe Konzentrationen ($>> 100$ mg/l). Hieraus ergibt sich künftiger Optimierungsbedarf hinsichtlich der Messstellendichte im Layout der WRRL-Messnetze der Bundesländer, aber auch der entwickelten Modellansätze. Dennoch liefert die räumliche Darstellung bereits jetzt eine valide Abgrenzung der großräumigen Belastungsmuster im Grundwasser Deutschlands.

Das resultierende bundesweite Raster der Nitratkonzentrationen bietet eine räumlich hochaufgelöste Grundlage für die Bewertung des chemischen Zustands von Grundwasserkörpern im Rahmen der Berichtspflichten nach EG-WRRL (und ggf. zur Düngeverordnung) und trägt zur Identifikation von Vor- und Nachteilen unterschiedlicher Regionalisierungsmethoden bei.

8. Literatur

- AVV GeA (2022): Allgemeine Verwaltungsvorschrift zur Ausweisung von mit Nitrat belasteten und eutrophierten Gebieten (AVV Gebietsausweisung - AVV GeA 2022).
- BMEL & BMUV (2024): Nitratbericht 2024: Bericht der Bundesrepublik Deutschland gemäß Richtlinie 91/676/EWG zum Schutz der Gewässer vor Verunreinigung durch Nitrat aus landwirtschaftlichen Quellen Hrsg.: Bundesministerium für Ernährung und Landwirtschaft (BMEL) & Bundesministerium für Umwelt, Naturschutz, nukleare Sicherheit und Verbraucherschutz; Berlin & Bonn 2024.
- Brenning, A. (2024): Evaluierung und Weiterentwicklung der Regionalisierungsverfahren zur Ausweisung nitratbelasteter Gebiete nach AVV GeA in Deutschland, Sachverständigen-gutachten von Prof. Dr. Alexander Brenning Im Auftrag des Umweltbundesamtes, Des-sau-Rosslau, April 2024, <https://www.umweltbundesamt.de/publikationen>.
- Breiman, Leo (2001): Random Forests. In *Machine Learning* 45 (1), pp. 5–32. DOI: 10.1023/A:1010933404324.
- DüV (2020): "Düngeverordnung vom 26. Mai 2017 (BGBl. I S. 1305), die durch Artikel 1 der Verordnung vom 28. April 2020 (BGBl. I S. 846) geändert worden ist"
- DWA (2015): Stickstoffumsatz im Grundwasser.- DWA-Themenheft T 2/2015; Herausgabe und Vertrieb: Deutsche Vereinigung für Wasserwirtschaft, Abwasser und Abfall e. V.; März 2015, Hennef.
- Emde, K., Budde, M., Fischer, T., Martin, T. & D. Hilbring (2022): Interaktive Steuerung der Ausführung von KI-Algorithmen in Umweltinformationssystemen über OGC SensorT-hings.- In: D. Demmler, D. Krupka, H. Federrath. (Hrsg.): INFORMATIK 2022, Lecture No-tes in Informatics (LNI), Gesellschaft für Informatik, Bonn 2022 1517.
- FH-DGGV (2026): Nitratabbau im Grundwasser – Prozesse, Auswirkungen und Lebens-dauer Arbeitskreis Nitratabbau der FH-DGGV; Schriftenreihe der FH-DGGV, Heft Xxx; Herausgeber: Fachsektion Hydrogeologie e. V. in der DGGV e. V
- Frank, J.K., Suesse, T. & A. Brenning (2025): An assessment of spatial random forests for environmental mapping: the case of groundwater nitrate concentration; *Environmental Modelling and Software* 193 (2025) 106626
- Geupel, M. (2024): frdl. Mitteilung Markus Geupel an Stephan Hannappel, Fachgebiet II 4.3 „Luftreinhalung und terrestrische Ökosysteme zur Nutzung des Datensatzes aus dem "Regionat"-Projekt (unveröff.).
- GrwV (2022): Grundwasserverordnung vom 9. November 2010 (BGBl. I S. 1513), die zuletzt durch Artikel 1 der Verordnung vom 12. Oktober 2022 (BGBl. I S. 1802) geändert worden ist.
- Hannappel, S., Köpp, C. & T. Bach (2018): Charakterisierung des Nitratabbauvermögens der Grundwasserleiter in Sachsen-Anhalt.- *Grundwasser – Zeitschrift der Fachsektion Hydro-geologie*, Springer Verlag, Heidelberg, 23:311–32, <https://doi.org/10.1007/s00767-018-0402-7>. Hengl et al., 2018
- Knoll L, Bach M, Breuer L (2019): Large scale prediction of groundwater nitrate concentra-tions from spatial data using machine learning. *Sci Total Environ* 668, 1317-1327.

- Knoll, Lukas; Breuer, Lutz; Bach, Martin (2020): Nation-wide estimation of groundwater redox conditions and nitrate concentrations through machine learning. In *Environmental Research Letters* 15 (6), p. 64004. DOI: 10.1088/1748-9326/ab7d5c.
- LfUWG RP (2006): Nitrat im Grundwasser Zeitreihe 2000 - 2004 In: Hydrologischer Atlas Rheinland-Pfalz Herausgeber: Landesamt für Umwelt, Wasserwirtschaft und Gewerbeaufsicht Rheinland-Pfalz
- Li & Heap (2014): Spatial interpolation methods applied in the environmental sciences: A review.- *Environmental Modelling & Software*, Volume 53, March 2014, Pages 173-189 Doi: 10.1016/j.envsoft.2013.12.008)
- Liesch, T et al. (2020): . Nitrat-Monitoring 4.0 – Intelligente Systeme zur nachhaltigen Reduzierung von Nitrat im Grundwasser.- In: Ralf H. Reussner, Anne Koziol, Robert Heinrich (Hrsg.): INFORMATIK 2020, Lecture Notes in Informatics (LNI), Gesellschaft für Informatik, Bonn 2020 1
- Lindner, Thomas; Puck, Jonas; Verbeke, Alain (2022): Beyond addressing multicollinearity: Robust quantitative analysis and machine learning in international business research. In *J Int Bus Stud* 53 (7), pp. 1307–1314. DOI: 10.1057/s41267-022-00549-z.
- Ohlert, Paul L.; Bach, Martin; Breuer, Lutz (2023): Verfahren zur Regionalisierung der Nitratkonzentration im Grundwasser. DOI: 10.5675/HYWA_2023.1_2.
- Ohmer, Marc; Liesch, Tanja; Xanke, Julian (2025): Abschätzung des Denitrifikationspotenzials mit Random-Forest-Modellen unter Verwendung hydrochemischer Kovariablen. In *Grundwasser* 30 (3-4), pp. 227–247. DOI: 10.1007/s00767-025-00595-y.
- Schafmeister, Maria-Theresia (1999): Geostatistik für die hydrogeologische Praxis. Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg.
- Scheytt, T. (1994): Örtliche und zeitliche Veränderungen der Grundwasserbeschaffenheit im Bereich der Bornhöveder Seenkette.- Dissertation Christian-Albrecht-Universität (CAU) Kiel.
- UBA (2026): Entwicklung einer nationalen und regional aufgelösten Obergrenze für reaktiven Stickstoff. With assistance of M. Bach, E. Griese, A. Schlutow, T. Kappauf, S. Hannappel, S. Borrmann et al. Dessau-Roßlau (unveröff.).
- Wolters, T., Bach, T., Eisele, M., Eschenbach, W., Kunkel, R., McNamara, i., Well, R., & F. Wendland (2022): The derivation of denitrification conditions in groundwater: Combined method approach and application for Germany: *Ecological Indicators* 144 (2022) 109564 Available.

Anhang 1: Flächenhafte Darstellung der Ausprägungsklassen der in die Modellierung einbezogenen Prädiktoren (s. Tabelle 1)

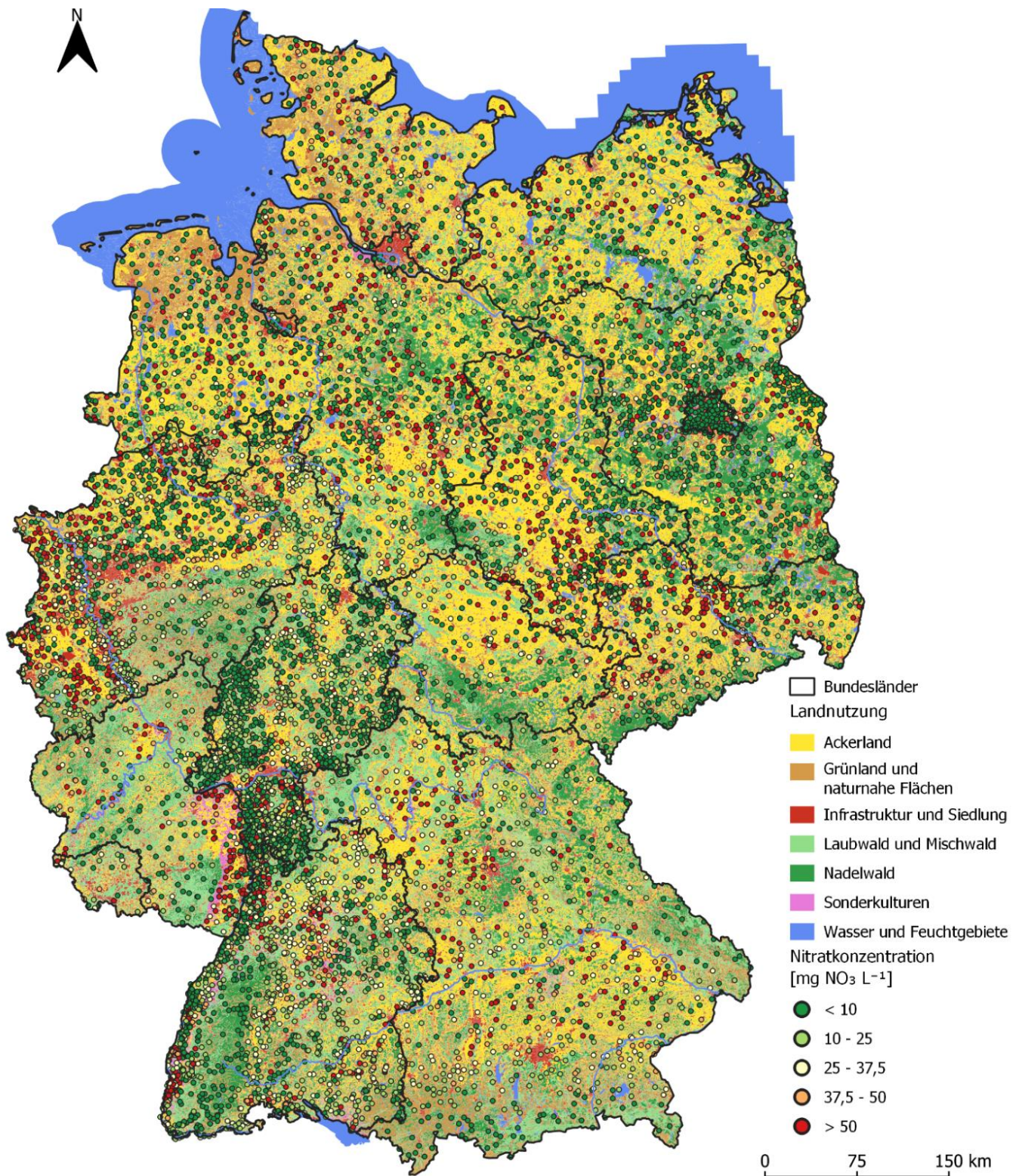


Abbildung 19: Aggregierte Landnutzungseinheiten auf Basis von Corine Land Cover (gruppiert nach Tabelle 9) und klassierte Nitratkonzentrationen an den EG-WRRL-Messstellen der Bundesländer (Mittelwert 2016 bis 2020)

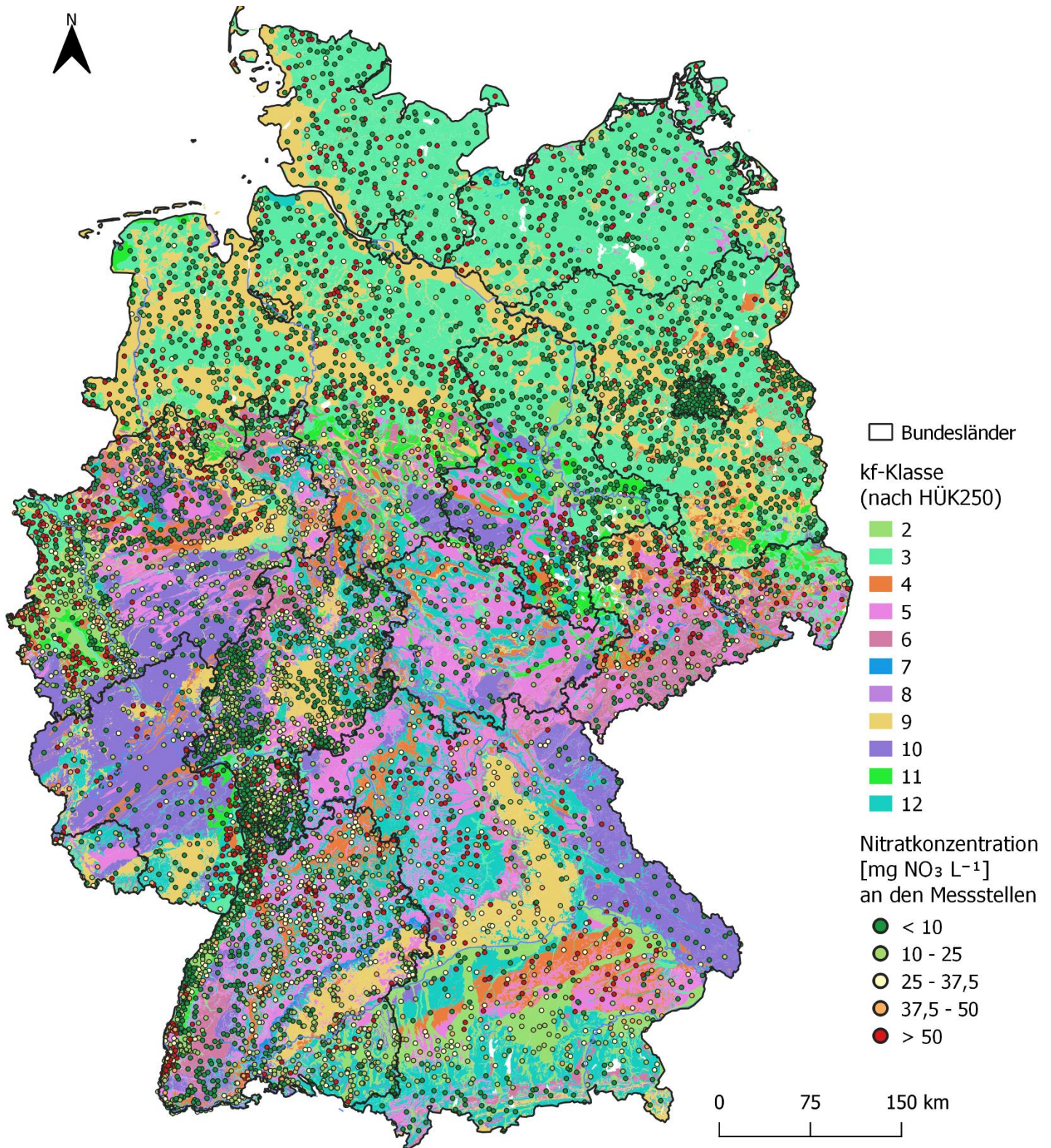


Abbildung 20: Durchlässigkeitsklassen kf nach HUEK 250 und klassierte Nitratkonzentrationen an den EG-WRRL-Messstellen der Bundesländer (Mittelwert 2016 bis 2020)

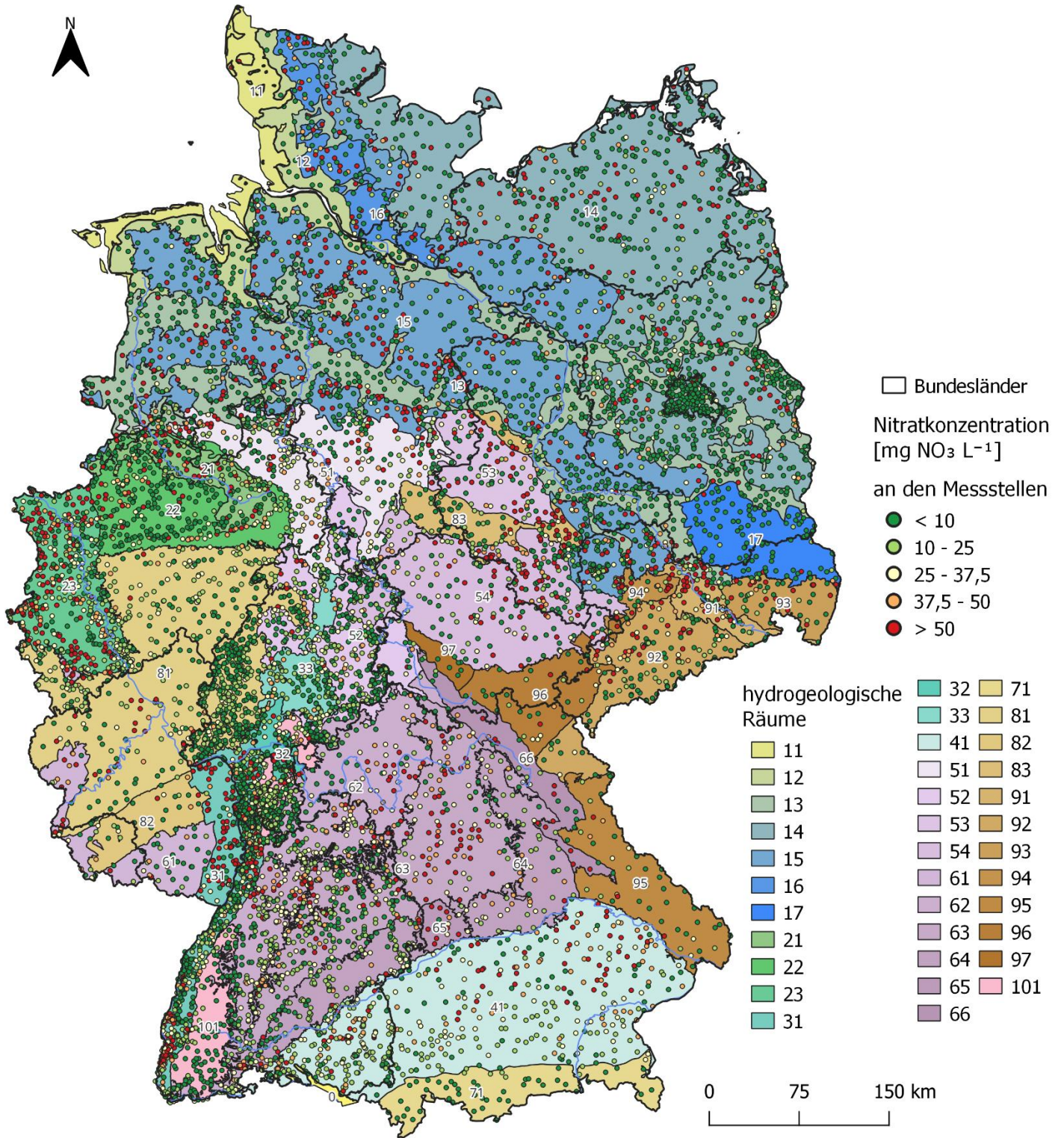


Abbildung 21: Hydrogeologische Räume entsprechend hydrogeologischer Raumgliederung von Deutschland (HYRAUM) und klassierte Nitratkonzentrationen an den EG-WRRRL-Messstellen der Bundesländer (Mittelwert 2016 bis 2020)

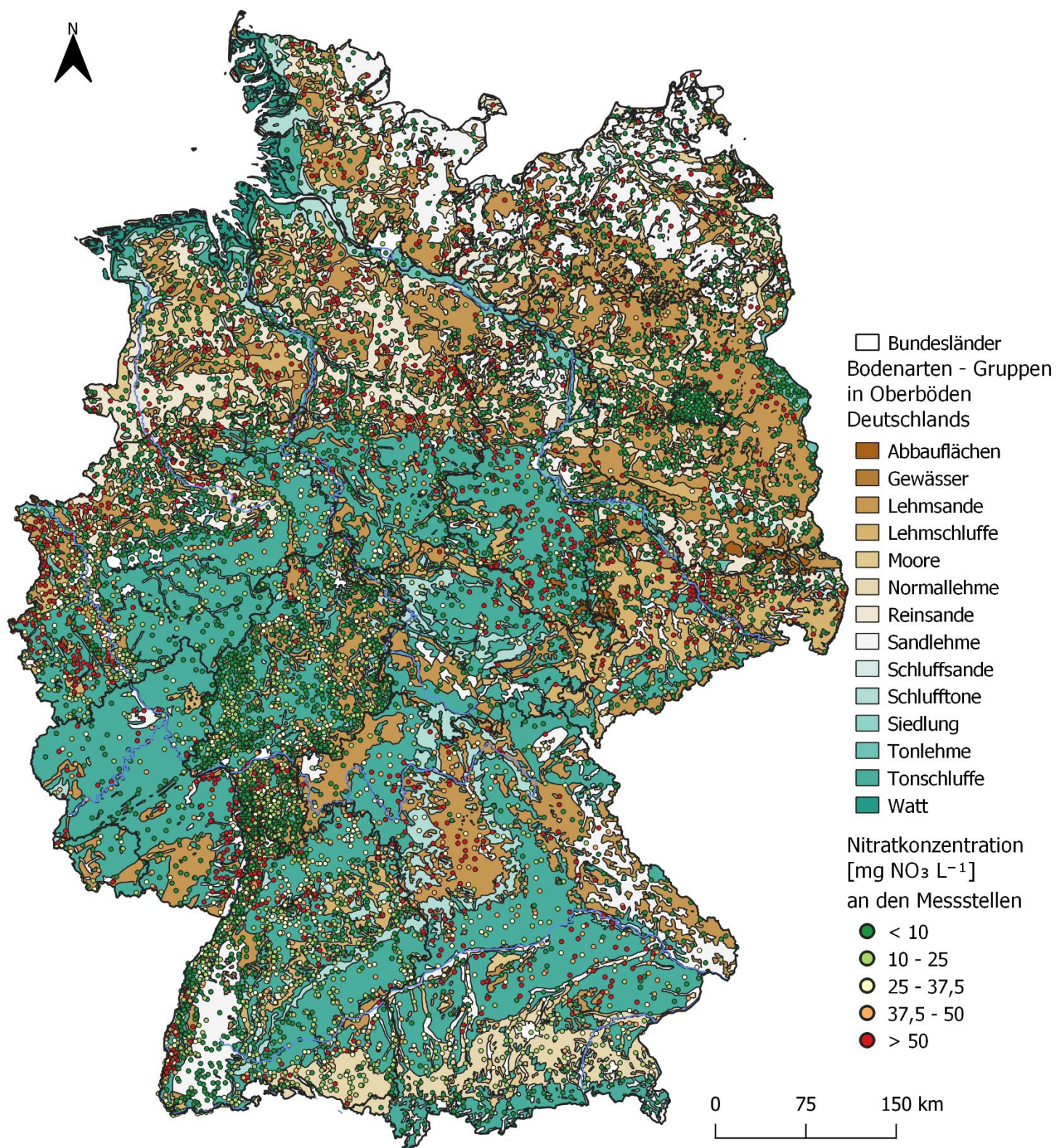


Abbildung 22: Bodenarten in Oberböden Deutschlands 1:1.000.000, Version 2.0 (boart1000) und klassierte Nitratkonzentrationen an den EG-WRRL-Messstellen der Bundesländer (Mittelwert 2016 bis 2020)

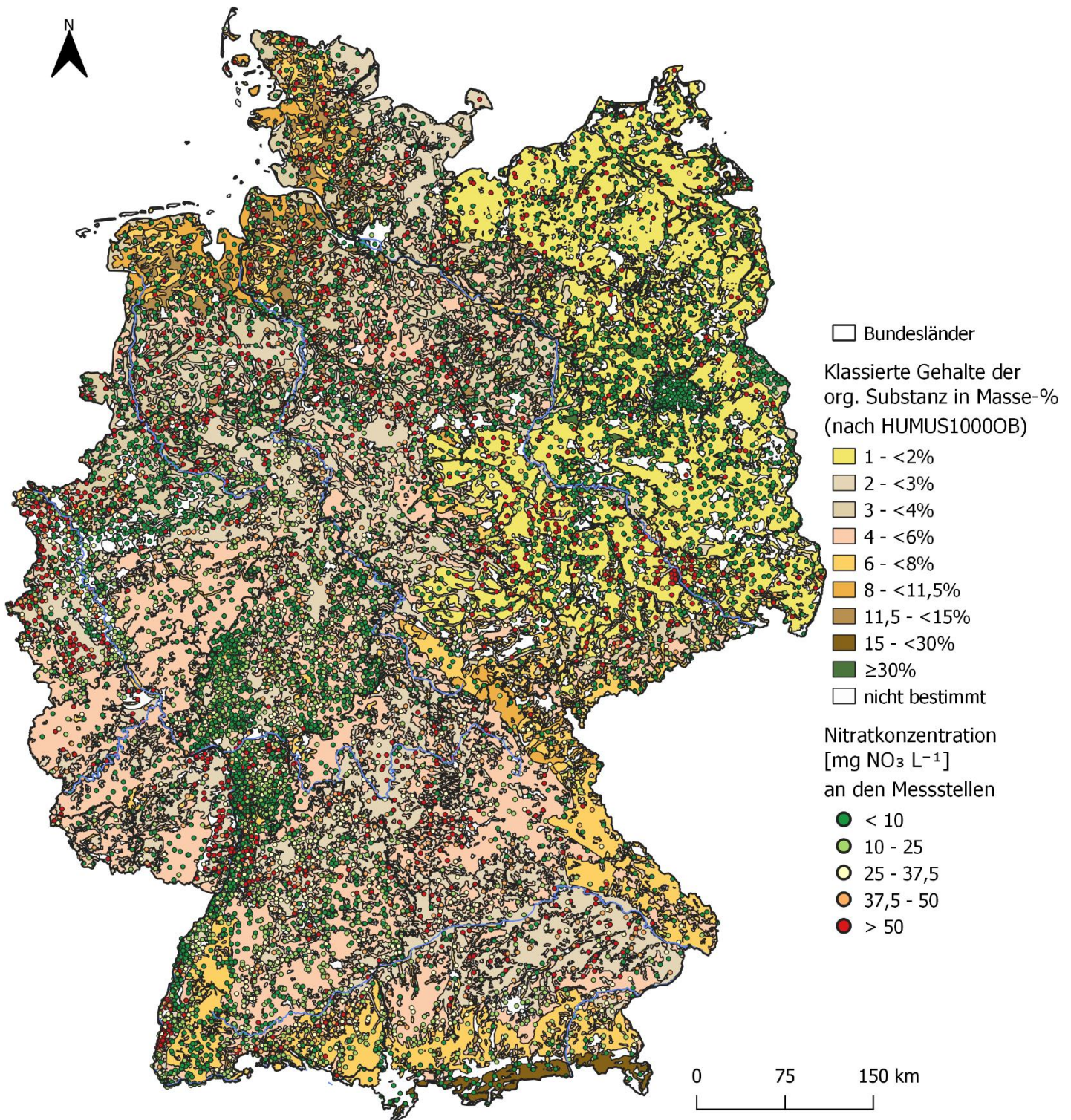


Abbildung 23: Gehalte an organischer Substanz in Oberböden Deutschlands 1:1000000 (HUMUS1000OB) und klassierte Nitratkonzentrationen an den EG-WRRL-Messstellen der Bundesländer (Mittelwert 2016 bis 2020)

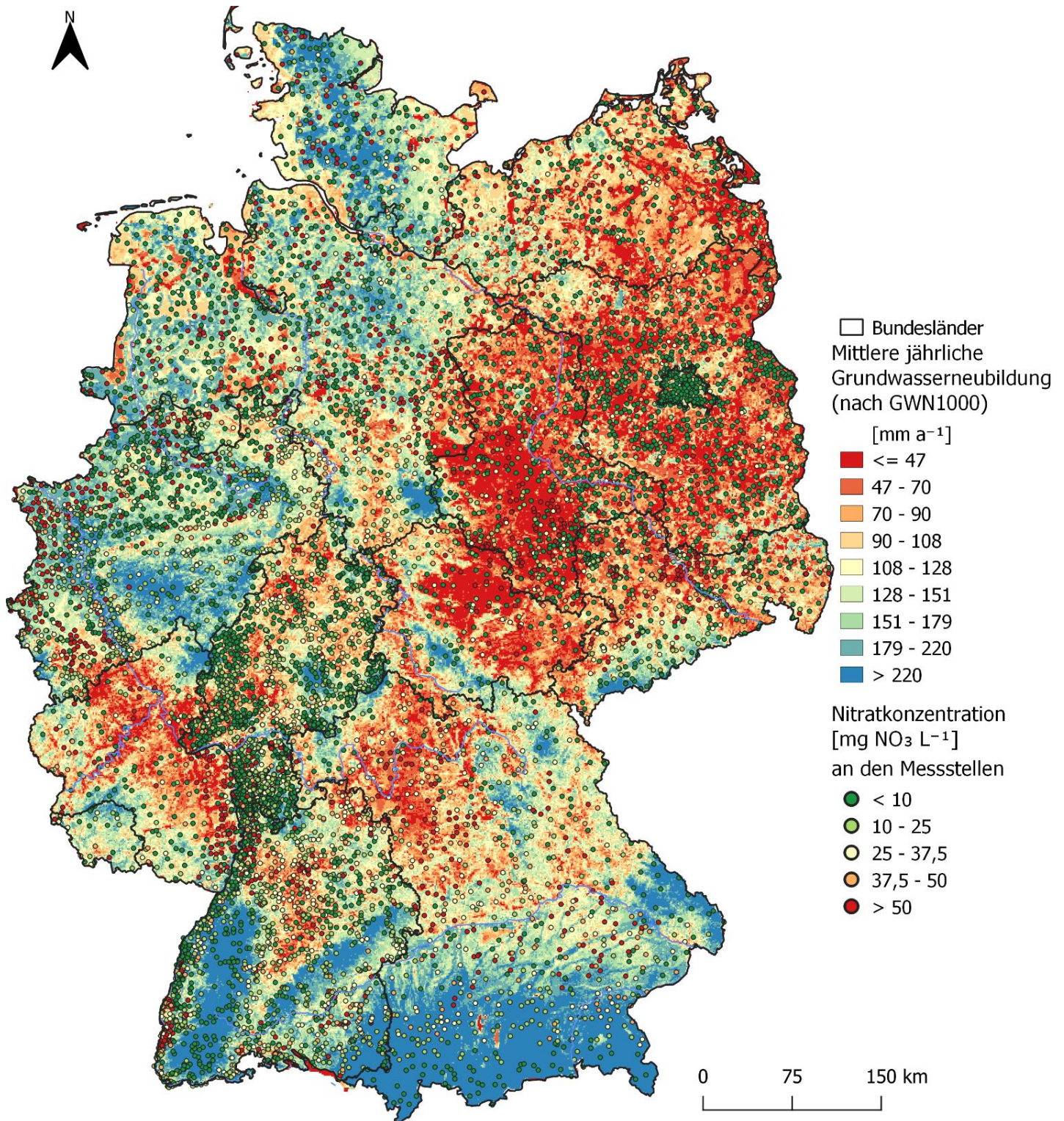


Abbildung 24: Mittlere jährliche Grundwasserneubildung von Deutschland 1:1.000.000 (GWN1000) und klassierte Nitratkonzentrationen an den EG-WRRL-Messstellen der Bundesländer (Mittelwert 2016 bis 2020)

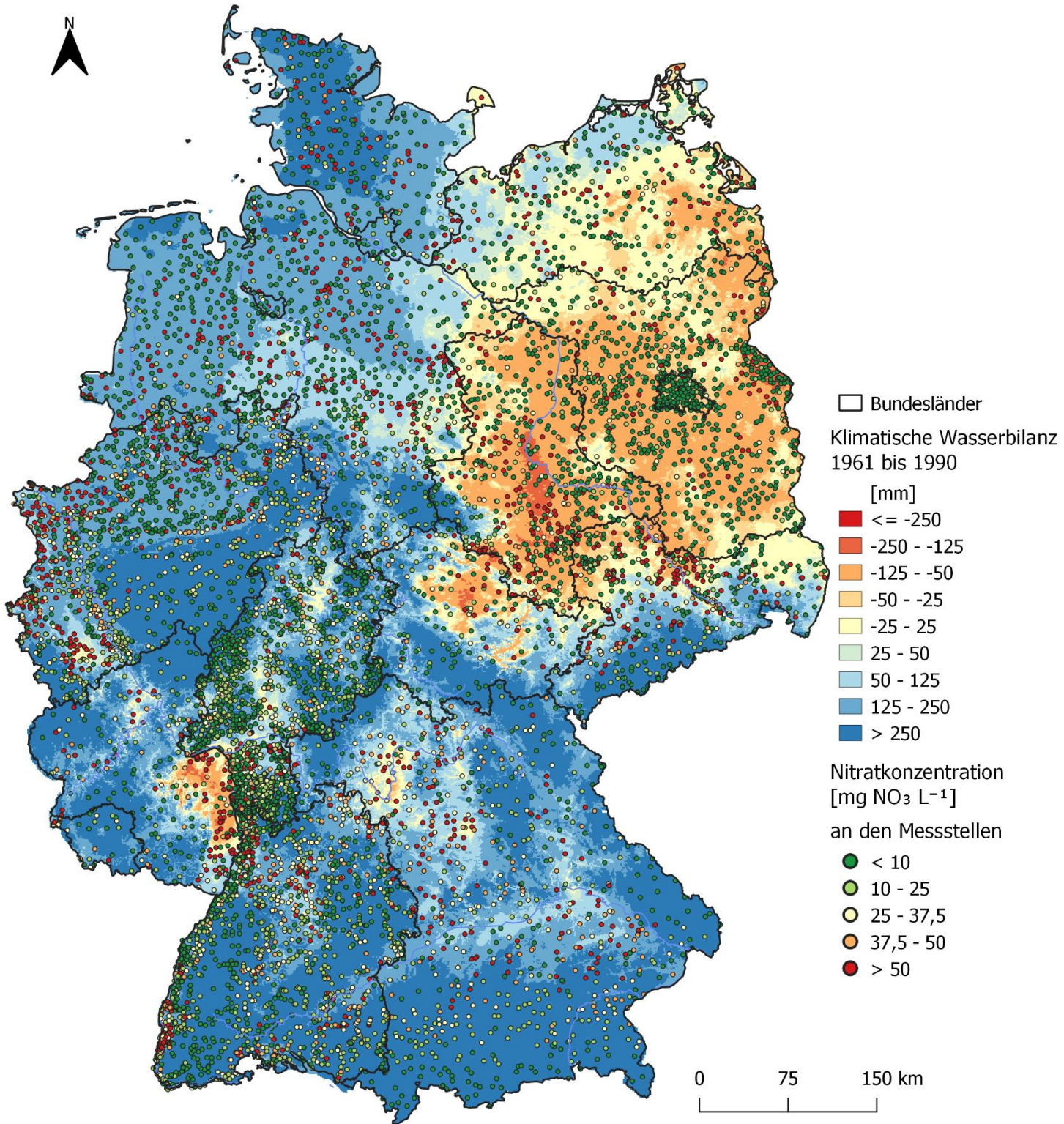


Abbildung 25: Klimatische Wasserbilanz (mehrfähriges Mittel 1961-1990, DWD) und klassierte Nitratkonzentrationen an den EG-WRRL-Messstellen der Bundesländer (Mittelwert 2016 bis 2020)

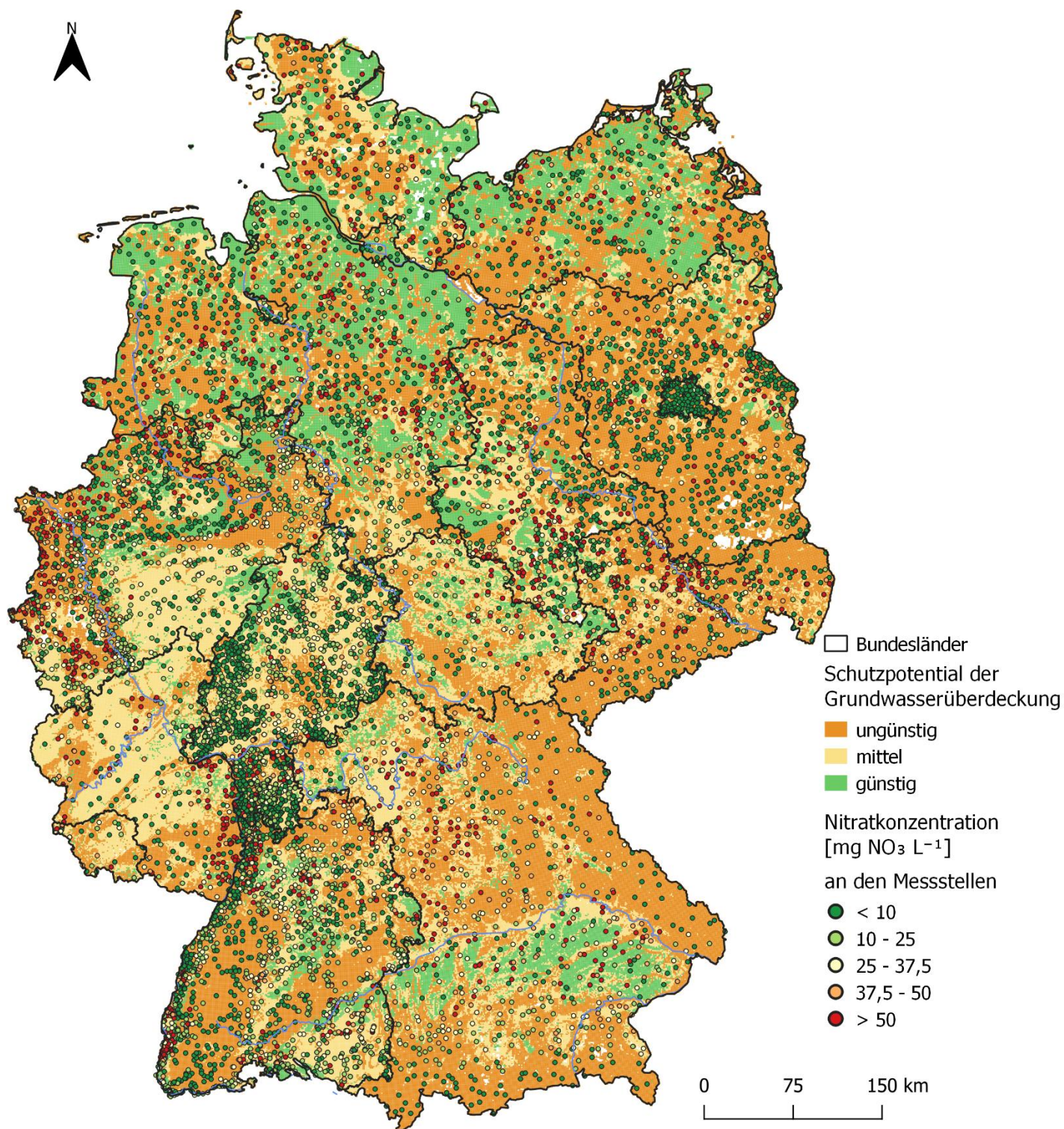


Abbildung 26: Schutzpotential der Grundwasserüberdeckung und klassierte Nitratkonzentrationen an den EG-WRRL-Messstellen der Bundesländer (Mittelwert 2016 bis 2020)

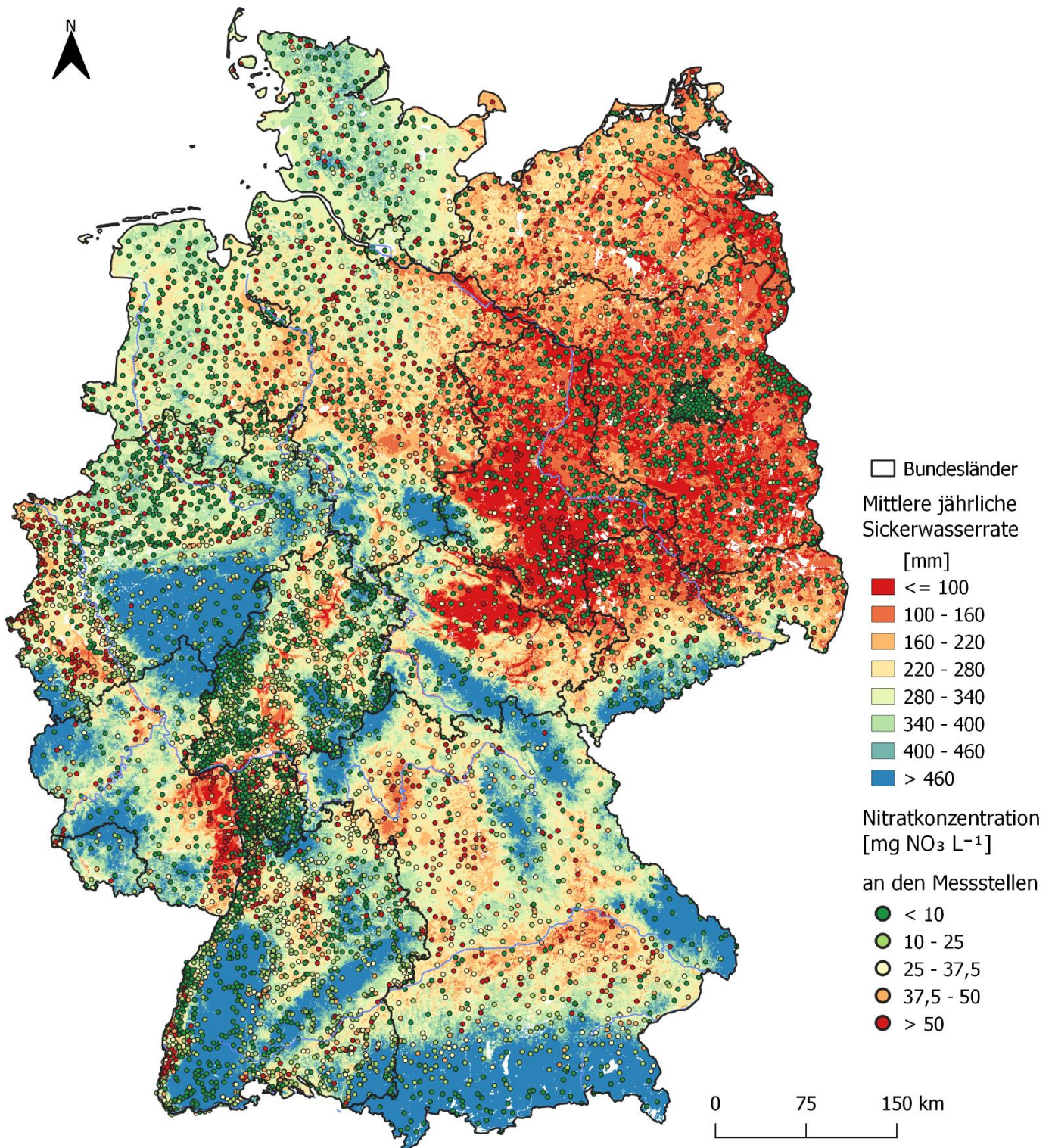


Abbildung 27: Mittlere jährliche Sickerwasserrate aus dem Boden in Deutschland (SWR1000_250) und klassierte Nitratkonzentrationen an den EG-WRRL-Messstellen der Bundesländer (Mittelwert 2016 bis 2020)

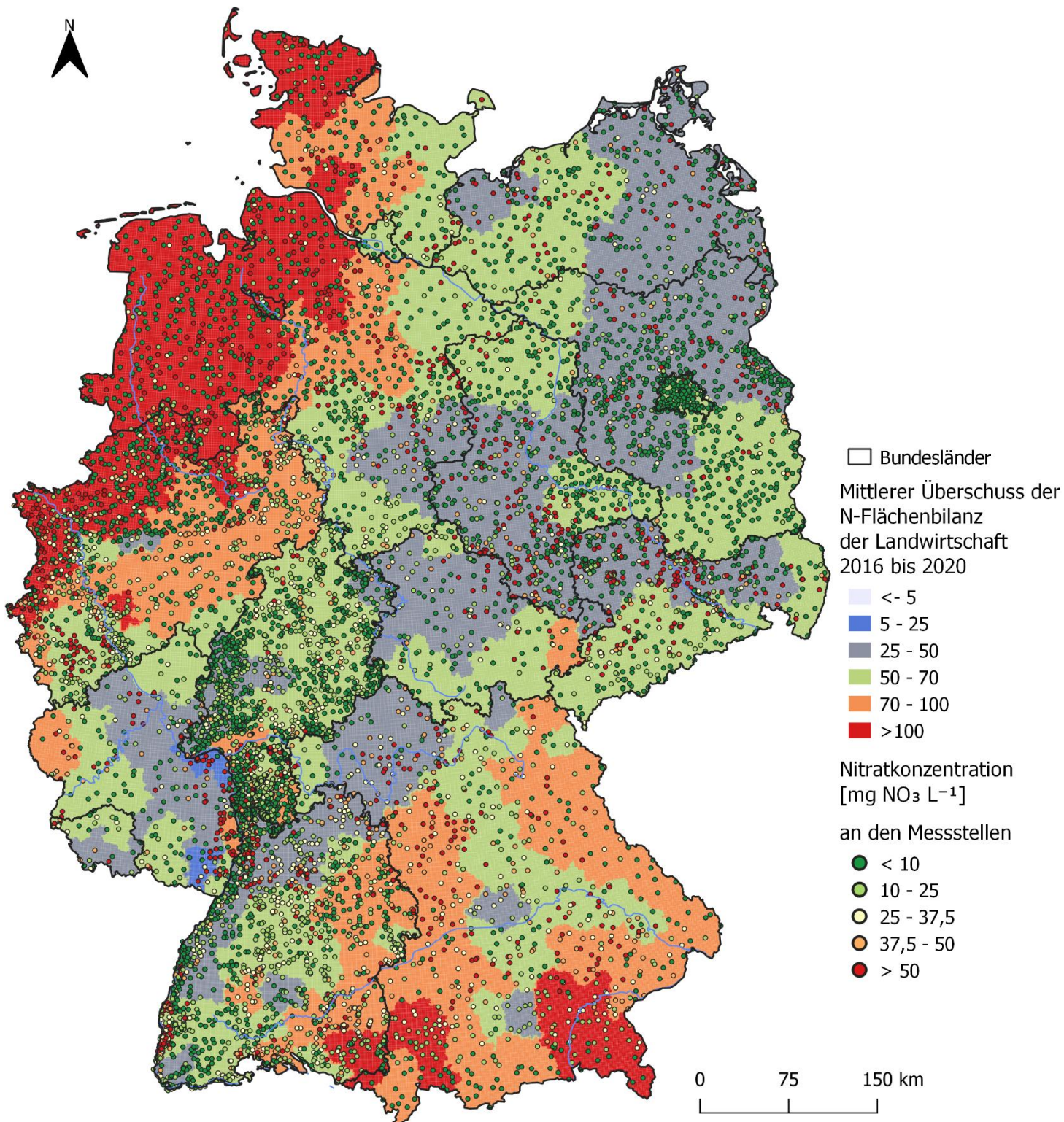


Abbildung 28: Überschuss der landwirtschaftlichen Stickstoff-Flächenbilanz (Kreisebene, Deutschland) und klassierte Nitratkonzentrationen an den EG-WRRL-Messstellen der Bundesländer (Mittelwert 2016 bis 2020)

Anhang 2: Landnutzung

Tabelle 5: Beschreibung der verwendeten CLC-Klassen in Deutschland nach CORINE Land Cover 2018

CLC-Code	CLC-Klassenname (Deutsch)
111	Durchgängig städtische Prägung
112	Nicht durchgängig städtische Prägung
121	Industrie und Gewerbeflächen, öffentliche Einrichtungen
122	Straßen-, Eisenbahnnetze und funktionell zugeordnete Flächen
123	Hafengebiete
124	Flughäfen
131	Abbauflächen
132	Deponien und Abraumhalden
133	Baustellen
141	Städtische Grünflächen
142	Sport- und Freizeitanlagen
211	Nicht bewässertes Ackerland
221	Weinbauflächen
222	Obst- und Beerenobstbestände
231	Wiesen und Weiden
242	Komplexe Parzellenstruktur
243	Landwirtschaftlich genutztes Land mit Flächen natürlicher Bodenbedeckung von signifikanter Größe
311	Laubwälder
312	Nadelwälder
313	Mischwälder
321	Natürliches Grünland
322	Heiden und Moorheiden
324	Wald-Strauch-Übergangsstadien
331	Strände, Dünen und Sandflächen
332	Felsen ohne Vegetation
333	Flächen mit spärlicher Vegetation
334	Brandflächen
335	Gletscher und Dauerschneegebiete
411	Sümpfe
412	Torfmoore
421	Salzwiesen
423	In der Gezeitenzone liegende Flächen
511	Gewässerläufe
512	Wasserflächen
521	Lagunen
522	Mündungsgebiete
523	Meere und Ozeane

Getestete Aggregation der Landnutzung

Tabelle 6: Zuordnung der CLC-2018 Codes zu 3 Landnutzungskategorien

	Kategorie	CLC-Codes	Beschreibung
1	Landwirtschaft	211, 221, 222, 231, 242, 243	Alle agrarisch genutzten Flächen, inkl. Ackerland und Sonderkulturen
2	Forstwirtschaft & Wasser/Feuchtgebiete	311, 312, 313, 321, 322, 324, 331, 332, 333, 334, 335, 411, 412, 421, 423, 511, 512, 521, 522, 523	Waldflächen sowie Gewässer und Feuchtgebiete

3	Infrastruktur & Siedlung	111, 112, 121, 122, 123, 124, 131, 132, 133, 141, 142	Künstliche und urbane Flächen, Infrastruktur
---	--------------------------	---	--

Tabelle 7: Zuordnung der CLC-Codes zu 5 Landnutzungskategorien

	Kategorie	CLC-Codes	Beschreibung
1	Feuchtgebiete und Wasser	411, 412, 421, 423, 511, 512, 521, 522, 523	alle Binnen- und Küstenfeuchtgebiete sowie fließende und stehende Gewässer.
2	Grünland	321, 322, 331, 332, 333, 334, 335	überwiegend natürlich oder nur extensiv genutzte Vegetationsflächen (Gras-, Heide-, Sand-, Fels-, Gletscherflächen)
3	Landwirtschaft	211, 221, 222, 231, 242, 243	Acker- und Dauerkulturen sowie intensiv genutztes Dauergrünland (Wiesen/Weiden)
4	Siedlung	111, 112, 121, 122, 123, 124, 131, 132, 133, 141, 142	sämtliche künstlichen Flächen inkl. Infrastruktur, Industrie/Gewerbe, Abbau-/Deponie-/Baustellen sowie städtische Grün- und Freizeitflächen
5	Wald	311, 312, 313, 324	geschlossene Laub-, Nadel-, Misch- und Übergangswälder/-Gebüsche

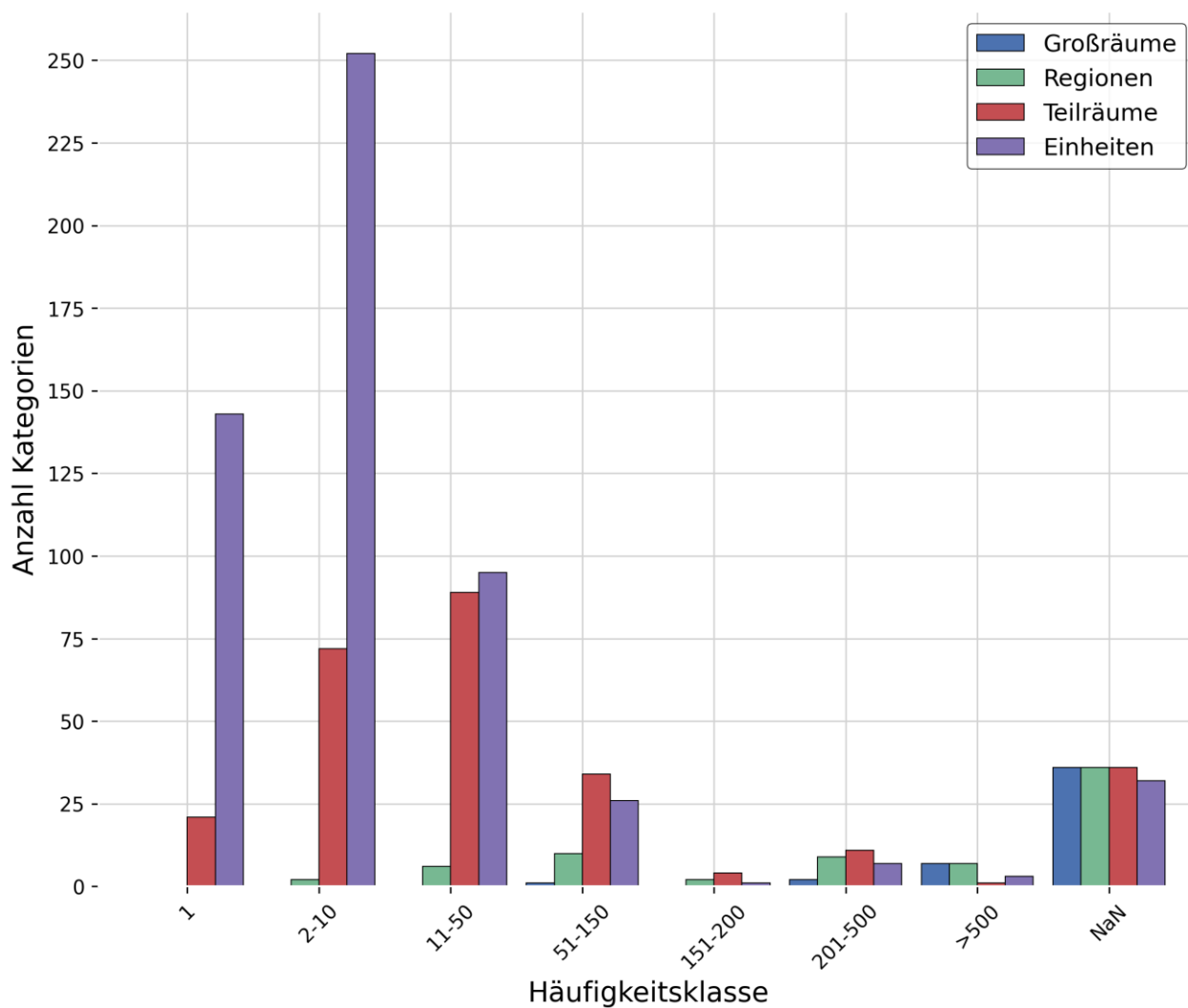
Tabelle 8: Zuordnung der CLC-Codes zu 6 Landnutzungskategorien

	Bezeichnung	CLC-Codes	Begründung
1	Intensiv genutztes Ackerland	211, 231, 243	Klassisches Ackerland, extensiv bis intensiv bewirtschaftet
2	Intensive Sonderkulturen & Mischstrukturen	221, 222, 242	Dauerkulturen (Wein, Obst), komplexe Parzellenmuster mit intensivem Anbau
3	Extensives Dauergrünland & Weiden	321, 322, 231	
4	Nicht landwirtschaftlich beeinflusste Naturräume	311, 312, 313, 324, 331, 332, 333, 334, 335	Waldflächen, spärliche Vegetation
5	Infrastruktur & Siedlung	111, 112, 121, 122, 123, 124, 131, 132, 133, 141, 142	Künstliche Flächen, keine landwirtschaftliche Nutzung
6	Wasser & Feuchtgebiete	411, 412, 421, 423, 511, 512, 521, 522, 523	Gewässer, Feuchtgebiete

Tabelle 9: Zuordnung der CLC-Codes zu 7 Landnutzungskategorien

	Kategorie	CLC-Codes	Beschreibung
1	Ackerland	211, 231, 243	Klassisches Ackerland, extensiv bis intensiv bewirtschaftet
2	Sonderkulturen	221, 222, 242	Dauerkulturen (Wein, Obst), komplexe Parzellenmuster mit intensivem Anbau
3	Laubwald	311, 313	Waldflächen
4	Nadelwald	312	Waldflächen
5	Infrastruktur & Siedlung	111, 112, 121, 122, 123, 124, 131, 132, 133, 141, 142	Künstliche Flächen, keine landwirtschaftliche Nutzung
6	Grünland & offene naturnahe Flächen	321, 322, 324, 331, 332, 333, 334, 335	Natürliches oder extensiv genutztes Grünland, Heiden, Übergänge, spärliche Vegetation
7	Wasser & Feuchtgebiete	411, 412, 421, 423, 511, 512, 521, 522, 523	Gewässer, Feuchtgebiete

Anhang 3: Hydrogeologische Raumgliederung



	1	2-10	11-50	51-150	151-200	201-500	>500	NaN
Großräume	0	0	0	1	0	2	7	36
Regionen	0	2	6	10	2	9	7	36
Teilräume	21	72	89	34	4	11	1	36
Einheiten	143	252	95	26	1	7	3	32

Abbildung 29: Häufigkeitsverteilung nach Raumgliederung

Anhang 4: Regionalisierung der Redox-Parameter

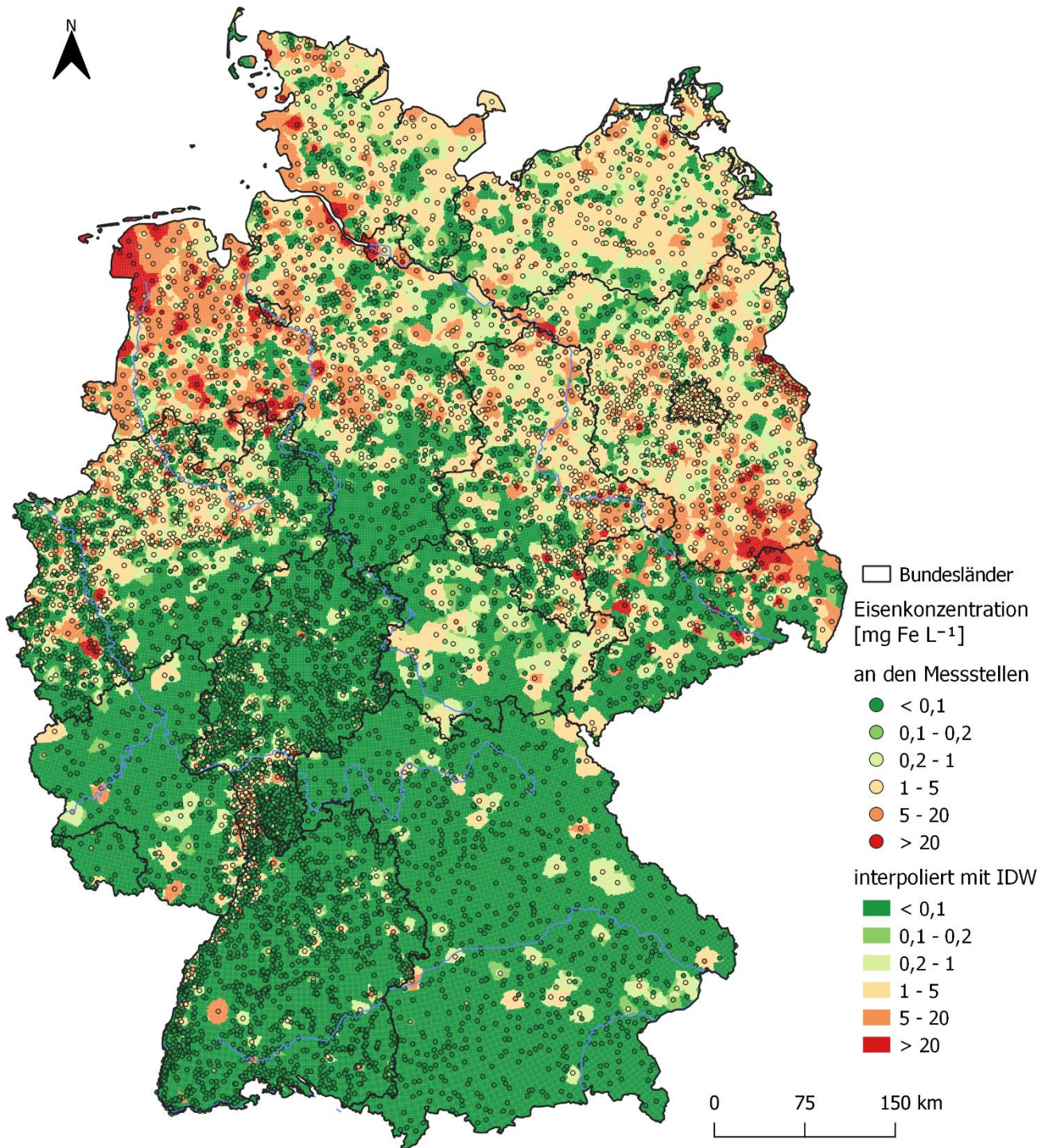


Abbildung 30: Ergebnis der interpolierten Eisenkonzentrationen im Grundwasser mit IDW; zusammenfassend dargestellt mit den im Grundwasser an den jeweiligen Messstellen gemessenen Konzentrationen

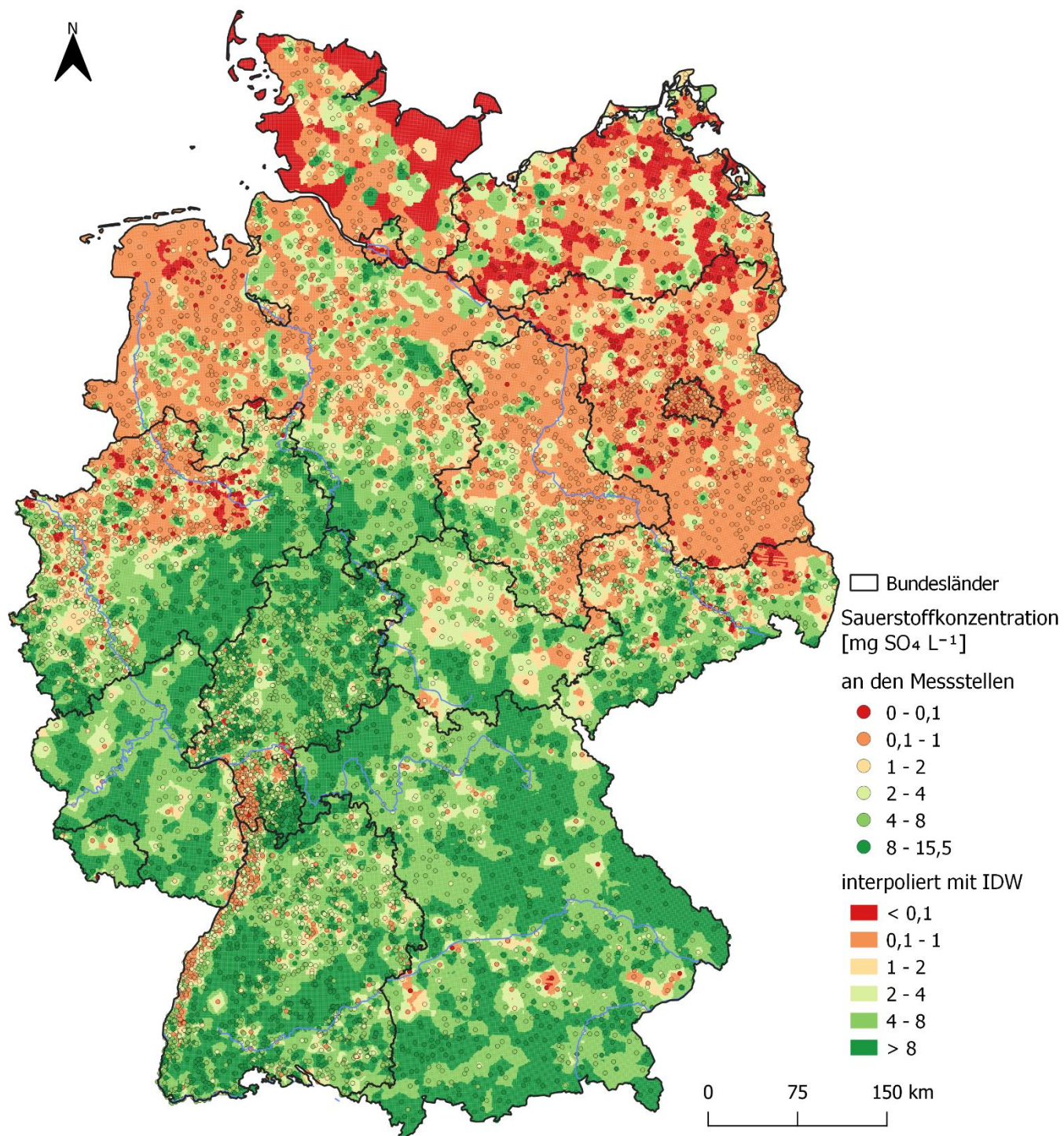


Abbildung 31: Ergebnis der interpolierten Sauerstoffkonzentrationen im Grundwasser mit IDW; zusammenfassend dargestellt mit den im Grundwasser an den jeweiligen Messstellen gemessenen Konzentrationen

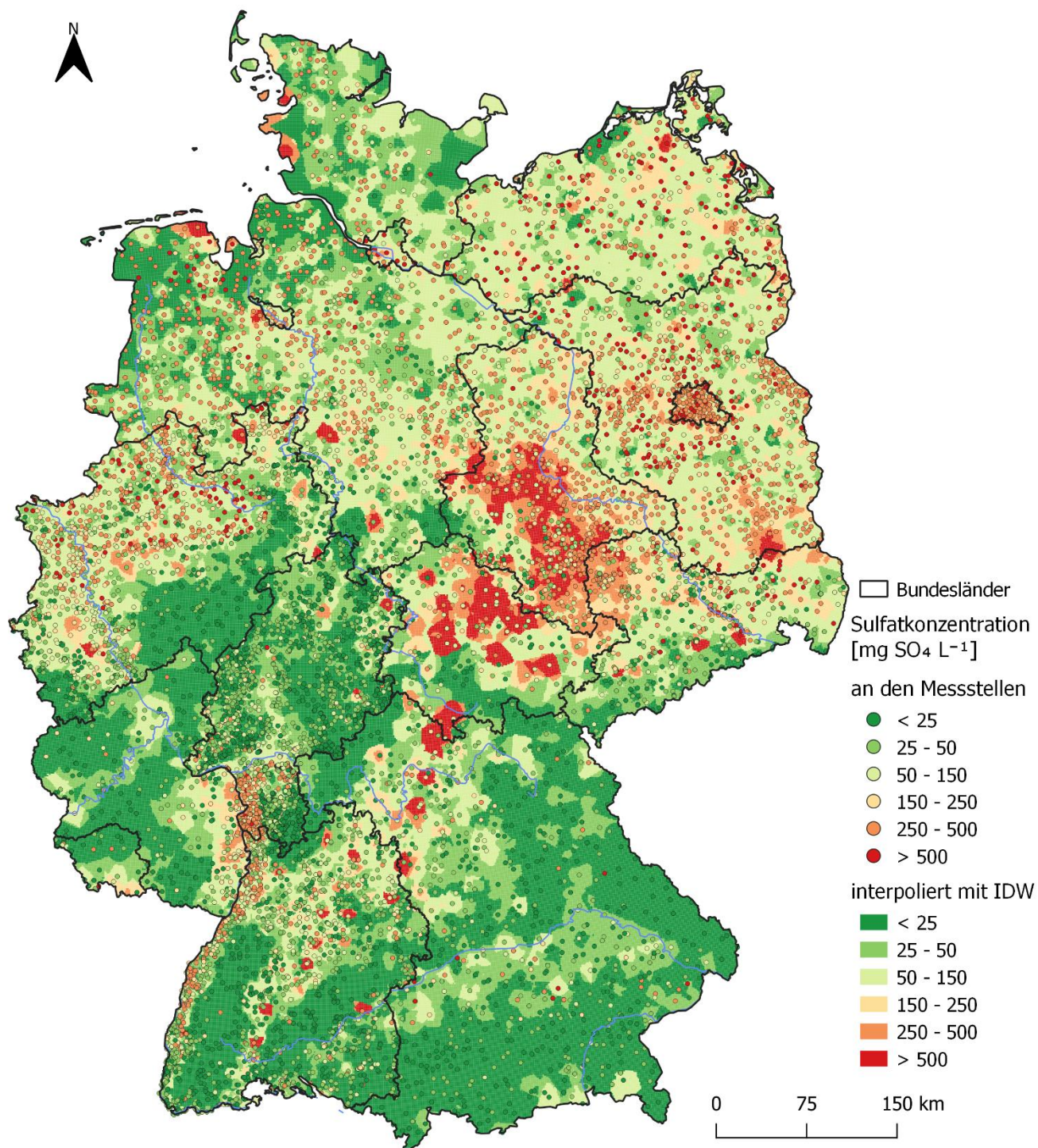


Abbildung 32: Ergebnis der interpolierten Sulfatkonzentrationen im Grundwasser mit IDW; zusammenfassend dargestellt mit den im Grundwasser an den jeweiligen Messstellen gemessenen Konzentrationen

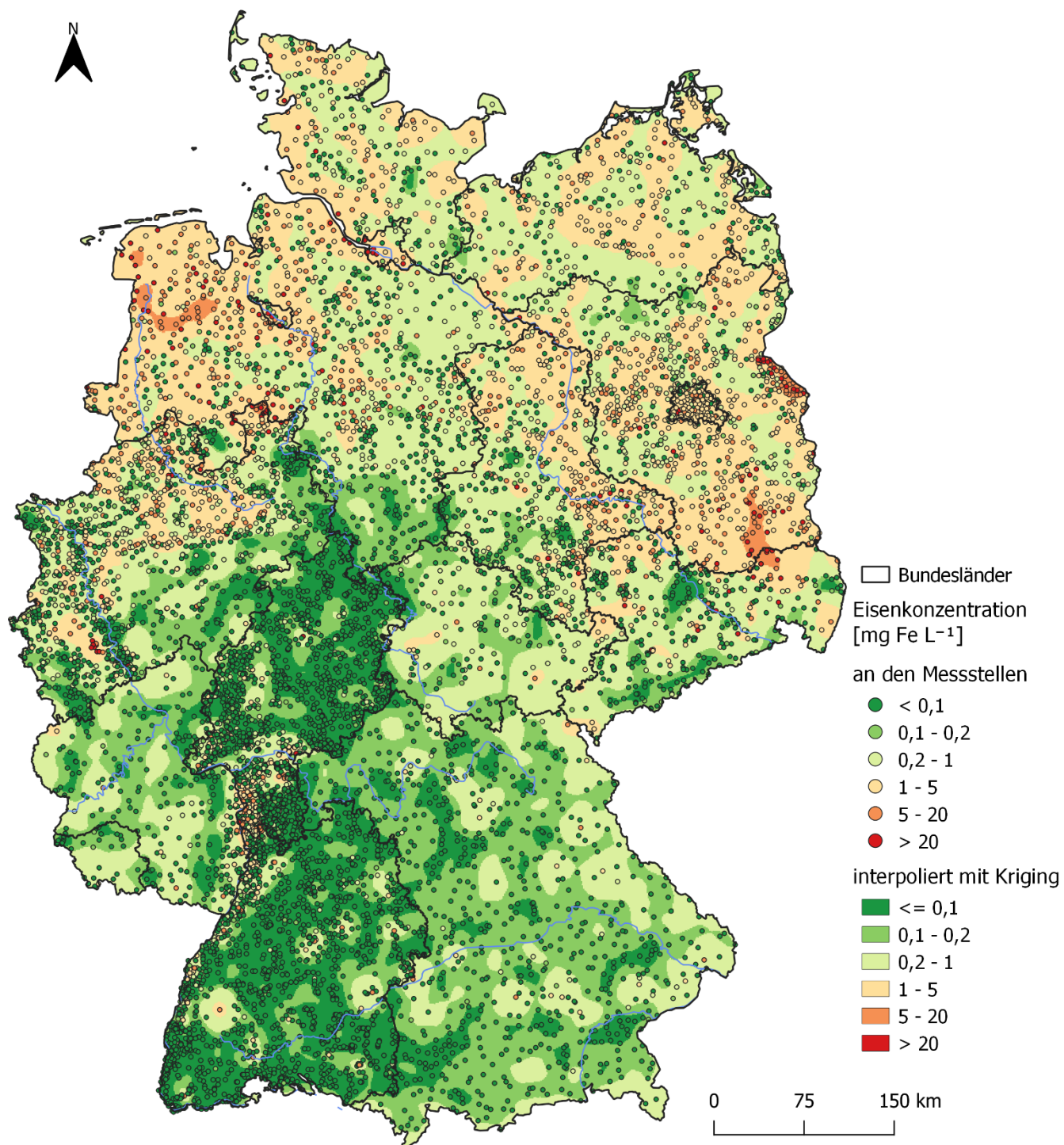


Abbildung 33: Ergebnis der interpolierten Eisenkonzentrationen im Grundwasser mit Kriging; zusammenfassend dargestellt mit den im Grundwasser an den jeweiligen Messstellen gemessenen Konzentrationen

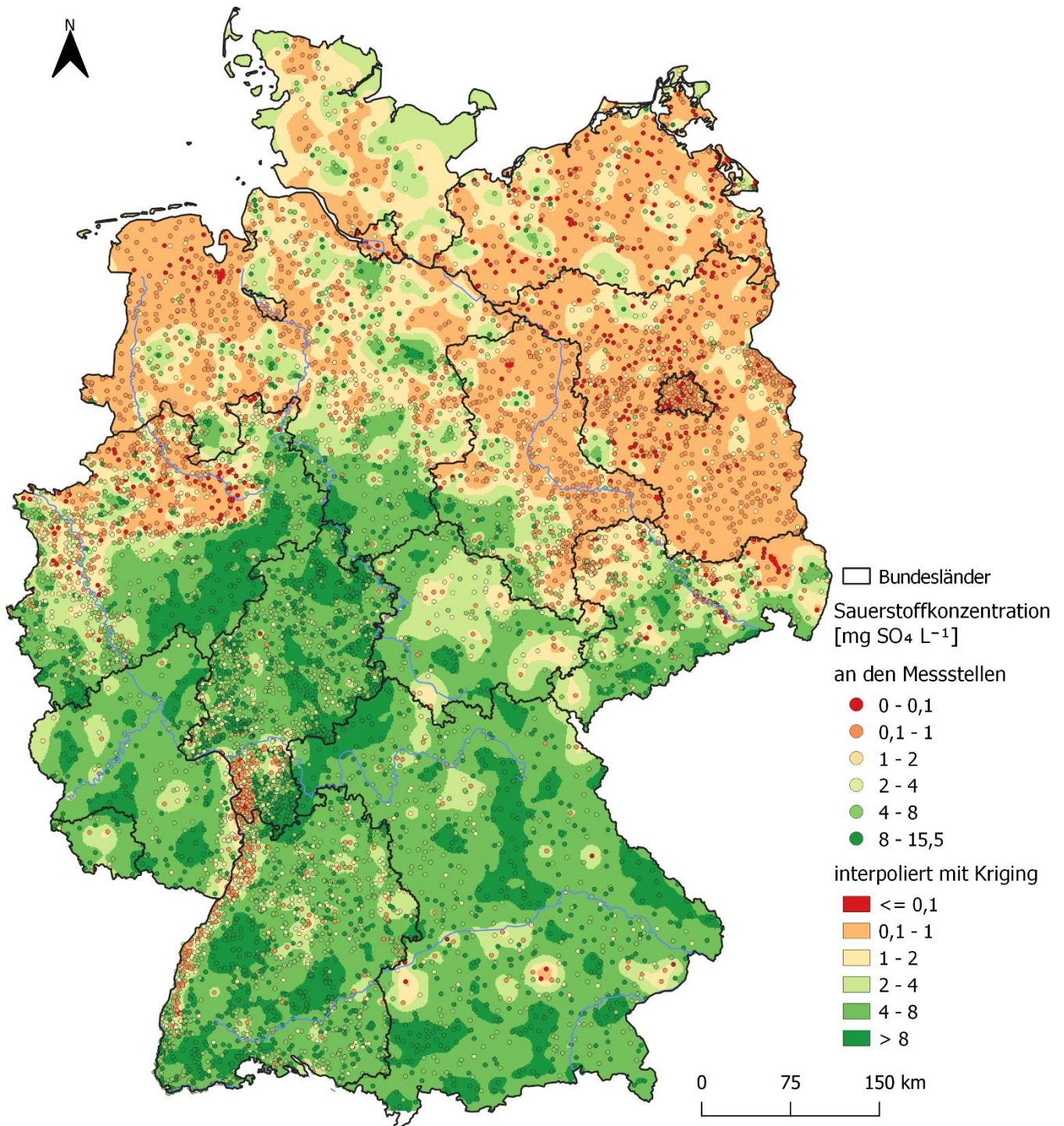


Abbildung 34: Ergebnis der interpolierten Sauerstoffkonzentrationen im Grundwasser mit Kriging; zusammenfassend dargestellt mit den im Grundwasser an den jeweiligen Messstellen gemessenen Konzentrationen

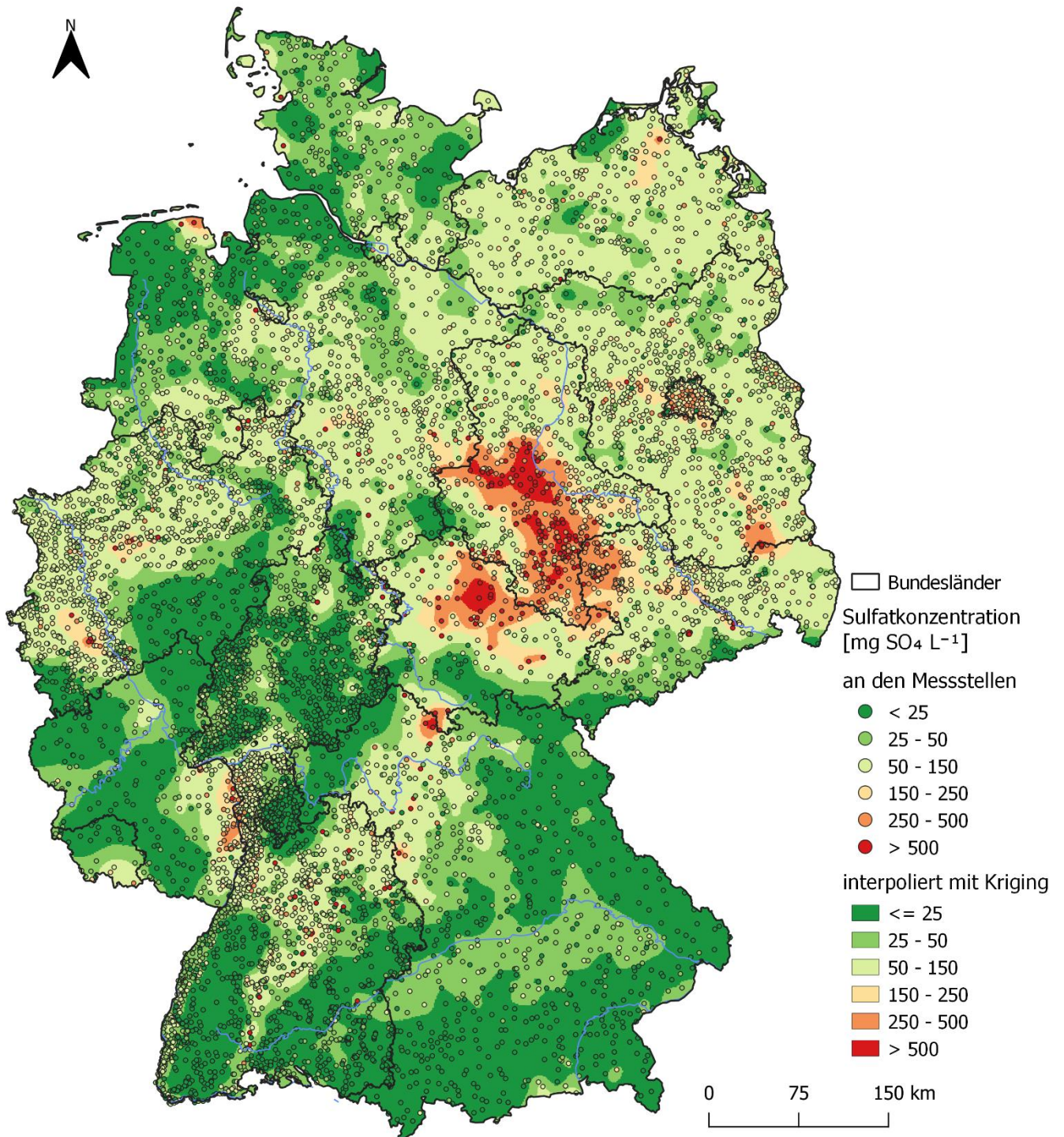


Abbildung 35: Ergebnis der interpolierten Sulfatkonzentrationen im Grundwasser mit Kriging; zusammenfassend dargestellt mit den im Grundwasser an den jeweiligen Messstellen gemessenen Konzentrationen

Anhang 5: Räumliche Verteilung der modellierten NO_3 -Konzentrationen

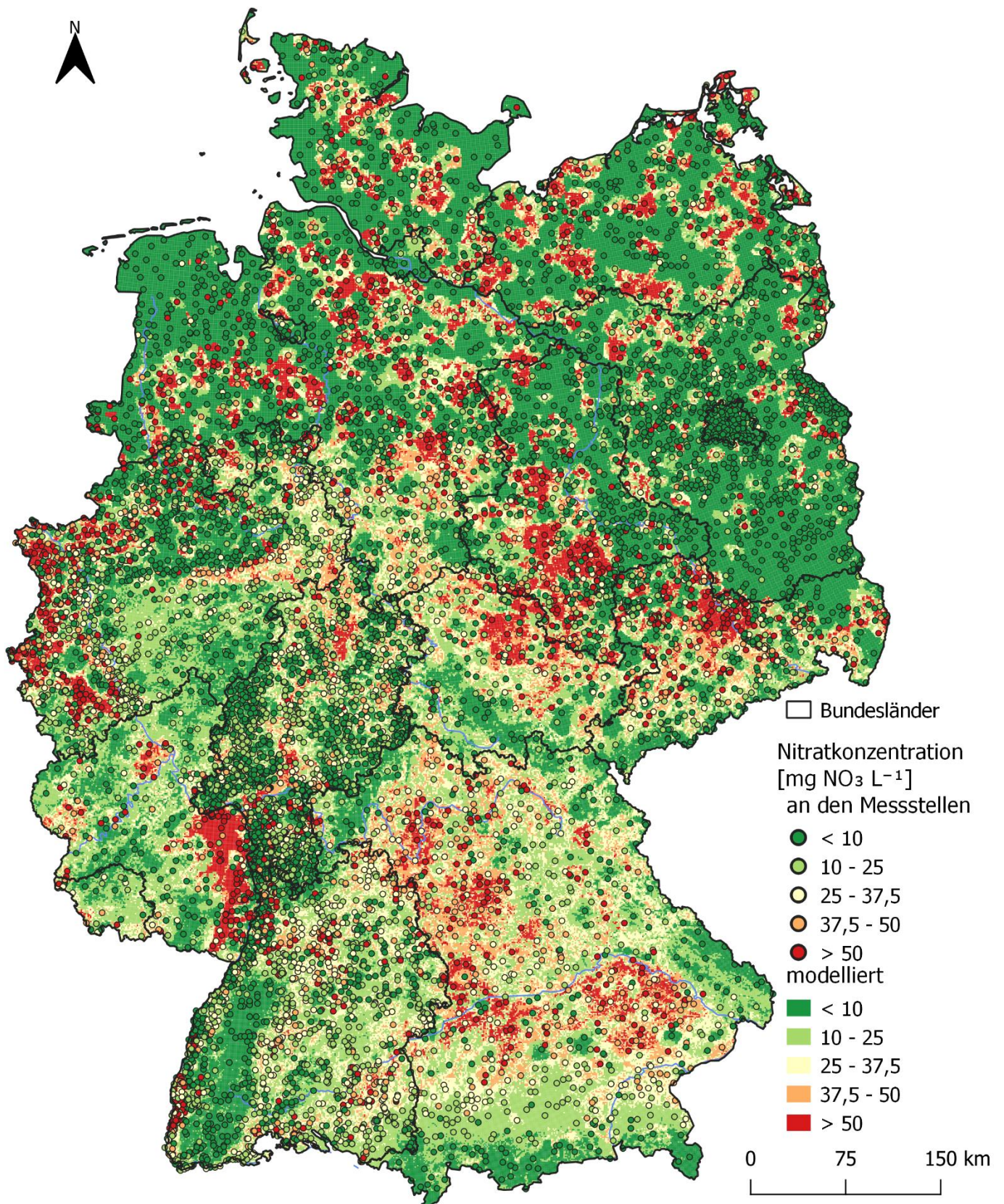


Abbildung 36: Ergebnis der modellierten Nitratkonzentrationen im Grundwasser mit IDW-RF; zusammenfassend dargestellt mit den im Grundwasser an den jeweiligen Messstellen gemessenen Konzentrationen

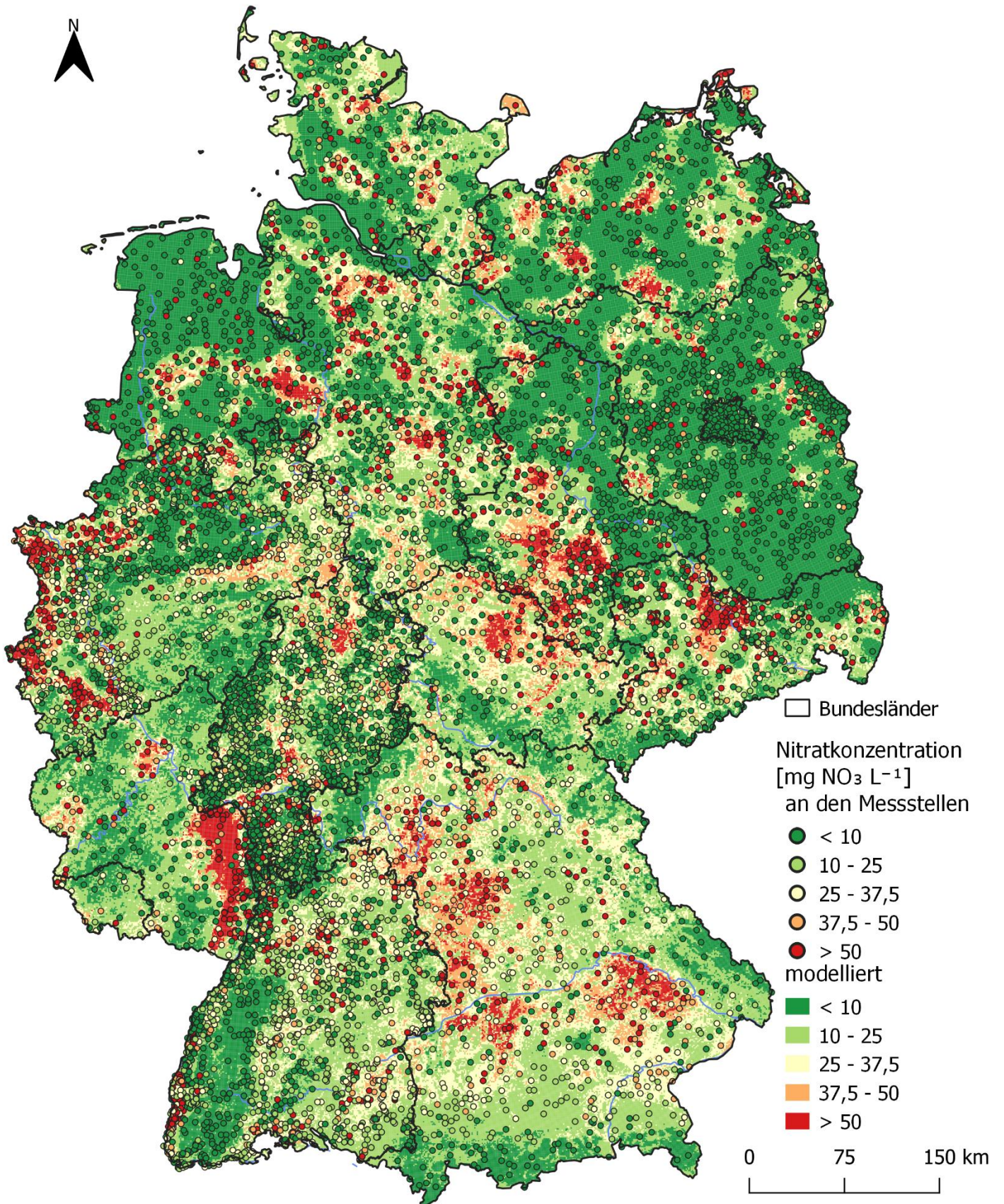


Abbildung 37: Ergebnis der modellierten Nitratkonzentrationen im Grundwasser mit Kriging-RF zusammenfassend dargestellt mit den im Grundwasser an den jeweiligen Messstellen gemessenen Konzentrationen