

# Erläuterung zum Web Map Service (WMS) „Hintergrundwerte im Grundwasser von Deutschland (HGW)“

Personenkreis Hintergrundwerte Grundwasser<sup>1</sup> der Ad-hoc AG Hydrogeologie der Staatlichen Geologischen Dienste von Deutschland (SGD)

Stand der Dokumentation: 28.01.2020, Stand der Daten: 06.10.2014

## Gliederung

1. Überblick .....	1
2. Zielsetzung und Vorgehen.....	3
3. Methodik: Ermittlung der Hintergrundwerte mit Wahrscheinlichkeitsnetzen	5
4. Datenbereitstellung als Web Map Service .....	10
5. Dargestellte Inhalte.....	11
6. Schlussfolgerungen und Ausblick .....	17
7. Literatur .....	17
Anhang .....	19

## 1. Überblick

Eines der Hauptziele der EG-WRRL ist die Erreichung eines guten qualitativen Zustands der Grundwasserkörper. Für die Bewertung des Grundwasserzustands in Abhängigkeit von der regionalen geologischen Situation ist die Kenntnis der geogenen Hintergrundkonzentration als maßgeblicher Parameter erforderlich. Nur so können signifikante Belastungen erkannt, quantifiziert und entsprechende Maßnahmen eingeleitet werden.

Die Staatlichen Geologischen Dienste in Deutschland (SGD) haben für die Bereitstellung der geowissenschaftlichen Grundlagen zur Erfüllung der Aufgaben aus der EG-Wasserrahmenrichtlinie (EG-WRRL) die Unterarbeitsgruppe EG-WRRL (UAG EG-WRRL) als koordinierendes Gremium gegründet. Wesentliches Produkt der bisherigen Aktivitäten ist die Hydrogeologische Übersichtskarte von Deutschland 1:200.000 (HÜK200), welche im Jahr 2019 zur HÜK250 migriert wurde (<https://www.bgr.bund.de/huek250>).

---

<sup>1</sup> Ansprechpartner des PK Hintergrundwerte Grundwasser (Stand 2014):

**Antje Beer**, Landesamt für Geologie und Bergwesen Sachsen-Anhalt (LAGB), Halle; **Frank Bitzer**, Landesamt für Geologie und Bergbau Rheinland-Pfalz (LGB), Mainz; **Dietmar Brose**, Landesamt für Bergbau, Geologie und Rohstoffe (LBGR) Brandenburg, Cottbus; **Lisa Brückner**, Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe (BGR), Hannover; **Dörte Budziak**, Landesamt für Bergbau, Energie und Geologie (LBEG), Hannover; **Patrick Clos**, Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe (BGR), Hannover; **Hans-Gerhard Fritsche**, Hessisches Landesamt für Umwelt und Geologie (HLUG), Wiesbaden; **Ulrike Hörmann**, Senatsverwaltung für Stadtentwicklung Berlin; **Mathias Hübschmann**, Sächsisches Landesamt für Umwelt, Landwirtschaft und Geologie (LfULG), Dresden; **Lothar Moosmann**, Behörde für Stadtentwicklung und Umwelt, Geologisches Landesamt, Hamburg; **Broder Nommensen**, Landesamt für Natur und Umwelt, Kiel; **Björn Panteleit**, Geologischer Dienst für Bremen; **Annett Peters**, Thüringer Landesanstalt für Umwelt und Geologie (TLUG), Weimar; **Rupert Prestel**, Regierungspräsidium Freiburg, Landesamt für Geologie, Rohstoffe und Bergbau (LGRB), Freiburg i. Br. **Hansjörg Schuster**, Geologischer Dienst Nordrhein-Westfalen (GD)- Landesbetrieb -, Krefeld; **Beate Schwerdtfeger**, Landesamt für Umwelt, Naturschutz und Geologie (LUNG), Güstrow; **Bernhard Wagner**, Bayerisches Landesamt für Umwelt (LfU), Hof; **Thomas Walter**, Landesamt für Umwelt- und Arbeitsschutz (LUA), Saarbrücken; **Rüdiger Wolter**, Umweltbundesamt (UBA), Dessau

Mit der Ermittlung von Hintergrundwerten im geowissenschaftlichen Sinn - der Quantifizierung der natürlichen Wechselwirkung zwischen Gesteinsmatrix und Grundwasser - befasste sich seit dem Jahr 2005 der Personenkreis Hintergrundwerte Grundwasser (PK HGW) der UAG EG-WRRL. Wesentliches Ziel des PK HGW war eine auf hydrogeochemische Einheiten bezogene Ermittlung der charakteristischen Hintergrundwerte für zahlreiche anorganische Haupt- und Spurenelemente im Grundwasser und ihrer räumlichen Verteilung. Hierzu wurden die auf die hydrogeochemischen Einheiten (HGC-Einheiten) bezogenen statistischen Kennwerte mit den Geometrien der HÜK200 gekoppelt.

Das Ergebnis dieser Arbeiten wird im Internet unter der URL <https://services.bgr.de/wms/grundwasser/hgw/> als Web Map Service (WMS) bereitgestellt und kann damit von jedem WMS fähigen Programm genutzt werden.

Die Anwendung hat entsprechend der geometrischen Grundlage einen makroskaligen Ansatz und stellt damit einen Überblick im nationalen bis regionalen Maßstab dar. Zu beachten ist, dass sie aufgrund ihres Übersichtscharakters im lokalen Maßstab eine Einzelfallbeurteilung nicht ersetzen kann. Für die Aufgaben aus der EG-WRRL kann sie somit insbesondere dahingehend verwendet werden, dass sie eine Einordnung von vorliegenden Grundwasseranalysen in den regionalen hydrogeochemischen Zusammenhang ermöglicht und damit Hinweise auf mögliche lokale Grundwasserverunreinigungen gibt. Des Weiteren erlaubt sie die Berücksichtigung natürlicher regionaler Überschreitungen von festgelegten Qualitätsnormen im Grundwasser bei Einzelfallbeurteilungen: "Überschreiten die regionalen geogenen Hintergrundwerte im Grundwasser die Geringfügigkeitsschwellenwerte, können von den zuständigen Behörden... ..für den Einzelfall Werte festgelegt werden" (aus: LAWA 2004).

Im Folgenden werden die Methodik und der Ablauf der Arbeiten zur statistischen Auswertung erläutert, mit der die Hintergrundwerte aus dem Gesamtdatensatz ermittelt wurden. Die dargestellten Inhalte des WMS-Dienstes werden beschrieben und Hinweise zu dessen Nutzung gegeben. Im Anhang sind die differenzierten hydrogeochemischen Einheiten von Deutschland aufgelistet.

Die Erstauswertung erfolgte anhand einer bundesweiten Sammlung von Grundwasser-Analysendaten aus dem Jahr 2005, die im März 2009 im Internet bereitgestellt wurde (WAGNER et al., 2011). Da bei der ersten Datensammlung im Jahr 2005 für einige Spurenelemente noch größere Lücken hinsichtlich der flächenhaften Abdeckung vorhanden waren, wurde für die besonders relevanten Spurenelemente mit vorliegenden Geringfügigkeitsschwellenwerten (in LAWA (2004): Arsen, Bor, Barium, Cadmium, Kobalt, Chrom, Kupfer, Fluorid, Quecksilber, Molybdän, Nickel, Blei, Antimon, Selen, Thallium, Vanadium, Zink) sowie den in der TrinkWV neu mit Grenzwert eingeführten Parameter Uran im Jahr 2012 eine erneute Datensammlung durchgeführt. Die statistische Neuauswertung für diese Parameter hat zu einer deutlich höheren Flächenabdeckung geführt, wenngleich auch aktuell noch hydrogeochemische Einheiten existieren, deren mangelhafte Datenlage bisher leider noch keine flächenhafte Auswertung und Darstellung erlaubt.

Die Auswertungsergebnisse der neuen Daten wurden im Jahr 2014 veröffentlicht. Die Veröffentlichung als WMS ermöglicht auch zukünftig eine Aktualisierung der Auswertungen je nach neuer Datenlage.

## 2. Zielsetzung und Vorgehen

Die physikalischen und chemischen Eigenschaften des Grundwassers werden durch die Zusammensetzung des Infiltrationswassers, seine Veränderungen bei der Passage durch die ungesättigte Zone, die Petrografie des Grundwasserleiters sowie die Verweildauer des Wassers im Untergrund bestimmt. Die geogene Grundwasserbeschaffenheit ergibt sich durch die Herausbildung eines dynamischen Gleichgewichtszustands im Kontakt des Fluides mit der Gesteinsoberfläche, wobei hier komplexe chemische, physikalische und biologische Prozesse ablaufen. Älteres und damit meist tieferes Grundwasser ist praktisch ausschließlich geogen geprägt, während bei jüngeren Wässern zunehmend Oberflächeneinflüsse und damit auch anthropogene Faktoren die chemische Beschaffenheit bestimmen. In solchen Grundwasserleitern kann die unbeeinflusste geogen geprägte Grundwasserbeschaffenheit häufig nicht mehr ermittelt werden. Die in diesen Fällen betrachteten Hintergrundwerte setzen sich somit aus dem geogenen Grundgehalt und einer je nach Grundwasservorkommen unterschiedlich bedeutsamen Komponente eines ubiquitären diffusen Eintrags in das Grundwasser zusammen (KUNKEL et al., 2004, WAGNER et al., 2003).

Aufgabe des PK HGW war es, eine flächendeckende Übersicht der Hintergrundkonzentrationen der Grundwässer Deutschlands aus vorliegenden Einzelanalysen zu erarbeiten, die von den für die Grundwasserqualität in den Bundesländern jeweils zuständigen Organisationseinheiten bereitgestellt wurden. Die Datensammlung für die hier vorgestellte Untersuchung erfolgte in den Jahren 2005 (Erstauswertung anhand von etwa 52.700 Messpunkten) und 2012 (Neuauswertung für diejenigen anorganischen Parameter, für die auch Geringfügigkeitsschwellenwerte nach LAWA (2004) festgelegt sind sowie Uran), sodass die ausgewerteten Grundwasseranalysen im Wesentlichen aus den Jahren 1980 bis 2012 stammen. Für die Auswertung wurde jeweils die neueste vollständige Analyse am Messpunkt verwendet.

Bei den verwendeten Grundwasserproben wurde soweit bekannt bei anthropogener Belastung, z. B. bei Überwachungsmessstellen von Deponien, Altstandorten, Altlasten oder auffälligen Analysen im Umfeld von Bergbaugebieten eine Präselektion vorgenommen. Dieses trifft insbesondere auf die Stadtstaaten Berlin, Hamburg und Bremen zu, die in großem Umfang anthropogen überprägte Grundwässer und zudem ein überproportional dichtes Messstellennetz aufweisen. Die Einbeziehung aller Daten aus diesen Gebieten wäre demnach nicht repräsentativ und es wurde daher eine Präselektion nach den Kriterien der Berliner Liste (SenStadt, 2005) vorgenommen. Die Kriterien für Chlorid und Ammonium wurden allerdings nicht auf Hamburg und Bremen angewendet, da dort auch in der Umgebung natürlicherweise höhere Konzentrationen auftreten. Darüber hinaus wurde im Nord- und mitteldeutschen Lockergesteinsgebiet (Großraum 01) aufgrund der geogenen Tiefenzonierung der Grundwassereigenschaften eine Beschränkung auf Analysen aus den oberen 50 m eingeführt. Nach dieser Präselektion bestand das Datenkollektiv deutschlandweit für die Datensammlung 2005 aus etwa 45.000 Datensätzen. Die Datensammlung für Spurenstoffe 2012 ergab für die untersuchten Parameter zwischen 13.000 und 24.000 Messstellen.

Als vorbereitender Schritt für die statistische Auswertung der hydrochemischen Parameter wurden zunächst die ca. 1.100 hydrogeologischen Einheiten der Hydrogeologischen Übersichtskarte von Deutschland (HÜK200) nach geologisch-genetischen und lithologischen Kriterien zu hydrochemisch gleichartigen Hydrogeochemischen Einheiten (HGC-Einheiten) aggregiert. Dabei wurde die Bearbeitung nach den 10 hydrogeologischen Großräumen Deutschlands beibehalten. Im Nord- und mitteldeutschen Lockergesteinsgebiet (GR01)

umfassten die so entstandenen Einheiten sehr große Flächen, die die lateralen und vertikalen hydrogeochemischen Unterschiede der Regionen, die sich z. B. aus Küstenversalzung, Binnenversalzung, Marschen oder Braunkohlevorkommen ergeben, nicht abbilden konnten. Die Bildung der HGC-Einheiten musste daher dort nach einer anderen Systematik erfolgen. Da die hydrogeologischen Räume und Teilräume im GR01 in der Fläche einen höheren Differenzierungsgrad aufweisen und ebenfalls nach hydrogeologischen Kriterien abgegrenzt wurden, erwiesen sie sich als gute Alternative. Die HGC-Einheiten wurden deshalb im GR01 durch die nach hydrogeochemischen Kriterien begründete Aggregation hydrogeologischer Teilräume gebildet. Die Grundwasserproben aus GR01 wurden dann anhand ihrer geographischen Lage in den hydrogeologischen Räumen bzw. Teilräumen den so gebildeten HGC-Einheiten zugeordnet.

Nach Zuweisung der vorliegenden Grundwasserproben zu den differenzierten HGC-Einheiten wurden die Daten den hydrogeologischen Großräumen zugeordnet und gemäß Tab. 1 statistisch ausgewertet. Es ergaben sich insgesamt 186 HGC-Einheiten, von denen für 112 Einheiten Messwerte und statistische Auswertungen vorliegen. Diese Einheiten decken etwa 97,5 % der Fläche Deutschlands ab.

Tab. 1: Auswertung der hydrogeologischen Großräume.

Hydrogeologischer Großraum	Kürzel Hy-Großraum	Auswertender Geologischer Dienst/Bundesland	
		Datensammlung 2005	Datensammlung 2012 (Spurenstoffe)
Nord- und mitteldeutsches Lockergesteinsgebiet	GR01	BGR / Bund, LBEG / Niedersachsen	BGR / Bund, LFULG / Sachsen
Rheinisch-Westfälisches Tiefland	GR02	GD / Nordrhein-Westfalen	GD / Nordrhein-Westfalen
Oberrheingraben, Mainzer Becken und Hessische Senke	GR03	BGR / Bund	HLUG / Hessen
Alpenvorland	GR04	BGR / Bund	LfU / Bayern
Mitteldeutsches Bruchschollenland	GR05	TLUG / Thüringen	TLUG / Thüringen
West- und süddeutsches Schichtstufen- und Bruchschollenland	GR06	BGR / Bund	BGR / Bund
Alpen	GR07	LfU / Bayern	LfU / Bayern
West- und mitteldeutsches Grundgebirge	GR08	LGB / Rheinland-Pfalz	LGB / Rheinland-Pfalz, BGR / Bund
Südostdeutsches Grundgebirge	GR09	LfULG / Sachsen	LfULG / Sachsen
Südwestdeutsches Grundgebirge	GR10	BGR / Bund	BGR / Bund

Die statistische Auswertung der Parameter erfolgte für die Einheiten semiautomatisiert mit Hilfe von Wahrscheinlichkeitsnetzen (WALTER et al., 2012, Erläuterung siehe Kapitel 3). Mit dieser Methode können auf relativ einfache Weise abweichende Teilpopulationen erkannt und vorhandene Anomalien von der Hintergrundpopulation abgetrennt werden. Ursache für derartige Anomalien sind zum Beispiel anthropogene Grundwasserbeeinflussungen durch Punkt- oder diffuse Quellen, aber auch natürliche Phänomene wie Küsten- oder Binnenversalzungen (GRUBE et al., 2000) oder Versauerungsgebiete in Kristallingesteinen (HINDERER & EINSELE, 1998). Die Methode hat allerdings ihre Grenzen, wenn die anthropogene Beeinflussung des Grundwassers durch langjährigen flächenhaften Eintrag über den Luft- bzw. Bodenpfad (z. B. durch Düngung, Bodenmelioration, Straßenverkehr etc.) bereits so weit fortgeschritten ist, dass sie in den Gesamtdatensatz als Normalpopulation eingeht. KUNKEL et al. (2004) haben hierfür den Begriff der natürlichen, ubiquitär überprägten Grundwasserbeschaffenheit eingeführt. Für bestimmte Inhaltsstoffe wie z. B. Sulfat oder Chlorid zeigt die Hintergrundpopulation dann ein ubiquitäres, flächenhaft erhöhtes Konzentrati-

onsniveau an (z. B. Oberrheingraben), welches sich mit angewandten statistischen Verfahren nicht ohne weiteres separieren lässt. In der Info-Abfrage wird auf diese Phänomene speziell hingewiesen.

Aus der Lage der Normalpopulation im Wahrscheinlichkeitsnetz können deren statistische Kenngrößen (Mittelwert und Standardabweichung, Perzentile) ermittelt werden. Die Obergrenze der Hintergrundkonzentration des jeweiligen Parameters wurde als das 90. Perzentil in einer HGC-Einheit festgelegt, also die Konzentration, die von 90 % aller gemessenen Werte unterschritten wird.

Die Auswertungen wurden durch die jeweiligen Bundesländer, die Flächenanteile an den jeweiligen HGC-Einheiten aufweisen, geprüft und die Ergebnisse durch die BGR in eine Datenbank übernommen, um dann schrittweise in den hier vorgestellten Web Map Service überführt zu werden.

### **3. Methodik: Ermittlung der Hintergrundwerte mit Wahrscheinlichkeitsnetzen**

Wenn man unter der Hintergrundzusammensetzung des Grundwassers dessen regionalen und auf natürliche Weise entstandenen Chemismus versteht, ist zunächst anzunehmen, dass sich unter gleichartigen Bedingungen eine einheitliche Normalpopulation einstellt, die einem einheitlichen Verteilungsgesetz folgt. Die chemische Zusammensetzung des Grundwassers insgesamt ist jedoch das Ergebnis einer Vielzahl von chemischen Reaktionen und anderen Einflüssen natürlicher und anthropogener Ursachen auf unterschiedlichen räumlichen und zeitlichen Skalen. Anomalien können sich dabei auf Grund unterschiedlicher Ausgangskonzentrationen, Reaktionsmechanismen, Transmissionspfaden und unterschiedlicher Fremdeinflüsse, z. B. durch Vegetation, Atmosphäre oder anthropogene Beeinflussungen in unterschiedlicher Intensität und auf unterschiedlichen Abschnitten der Konzentrationsverteilung eines Parameters niederschlagen. Daher ist bei wachsender Probenzahl und vor allem bei zunehmender Größe des Untersuchungsraumes davon auszugehen, dass nicht nur die Anomalien sich in der Verteilung eines Messwertes in unterschiedlichen Konzentrationsbereichen niederschlagen, sondern es muss damit gerechnet werden, dass sich auch verschiedene Hintergrundpopulationen überlagern können. Insofern hängt es einerseits vom Ziel der Untersuchung, andererseits aber auch von der Erfahrung des Bearbeiters ab, wie weit die Mehrgipfeligkeit von Histogrammen bzw. Sprünge in der Summenkurve jeweils als Hinweis auf das Vorliegen von Teilpopulationen gewertet werden. Daher sind Verfahren von großem Vorteil, die auf den ersten Blick eine Beurteilung erlauben, ob ein Datensatz einer bestimmten Verteilungsform (meist normal oder lognormal) folgt und ob sich eventuell mehrere Teilpopulationen unterscheiden lassen.

In der geochemischen Prospektion werden zur Identifikation und Abgrenzung von Anomalien, die auf Vererzungen zurückgehen, also natürlichen, geogenen Ursprungs sind, schon seit Jahrzehnten verschiedene statistische Verfahren angewandt. Als Anomalie wird hierbei eine Abweichung von der für eine bestimmte Umgebung charakteristischen Verteilung definiert, wobei sowohl anomal hohe wie auch anomal niedrige Gehalte vorkommen können (VAN DEN BOOM, 1981). Während in der Lagerstättenexploration allerdings eher die Untergrenze der Anomalie gesucht wird, um diese von dem weniger interessierenden Hintergrund abzutrennen, ist bei der Ermittlung von Hintergrundwerten in der Hydrogeologie die Obergrenze der normalen Population von Bedeutung. Trotz dieses etwas unterschiedlichen Ansatzes lassen sich jedoch die in der Lagerstättenkunde verwendeten statistischen Verfahren analog auch auf Grundwasserda-

ten und natürlich auch auf anthropogen verursachte Anomalien anwenden, um großräumige sowie auch lokale bis regionale Hintergrundwerte zu ermitteln.

LEPELTIER (1969) hat ein Verfahren auf der Basis von Wahrscheinlichkeitsnetzen entwickelt, das auf der Darstellung von kumulativen Häufigkeiten beruht und sich in der Lagerstättenkunde als Standard durchgesetzt hat. Da die Zielsetzung dieses Verfahrens mit der Identifikation und Berechnung von Verteilungsparametern für die Anomalien eine etwas andere ist, als die Ermittlung von Hintergrundwerten im Grundwasser, die sich nur auf die Normalpopulation bezieht, musste es etwas angepasst werden.

Das Wahrscheinlichkeitsnetz ist zunächst ein einfaches grafisches Verfahren, um die Verteilung einer Zufallsvariablen zu überprüfen. Es besteht aus einem Koordinatennetz, das auf der Abszisse linear, auf der Ordinate nach der integrierten Normalverteilung berechnet ist:

$$\Phi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^x e^{-\frac{t^2}{2}} dt$$

Normalverteilungen bzw. normalverteilte Abschnitte einer Zufallsvariablen werden dadurch als Geraden dargestellt (vgl. Abb. 1), sodass die oben geforderte einfache optische Überprüfung des Verteilungsgesetzes der betrachteten Population von Werten möglich wird. Der große Vorteil des Wahrscheinlichkeitsnetzes ist jedoch, dass außerdem die Verteilungsparameter für den jeweiligen Geradenabschnitt leicht zu ermitteln sind: der Mittelwert entspricht dem Median, während die Steigung der Geraden die Standardabweichung angibt. Lognormale Verteilungen ergeben ebenfalls eine Gerade, wenn die Messwertachse logarithmisch skaliert ist.

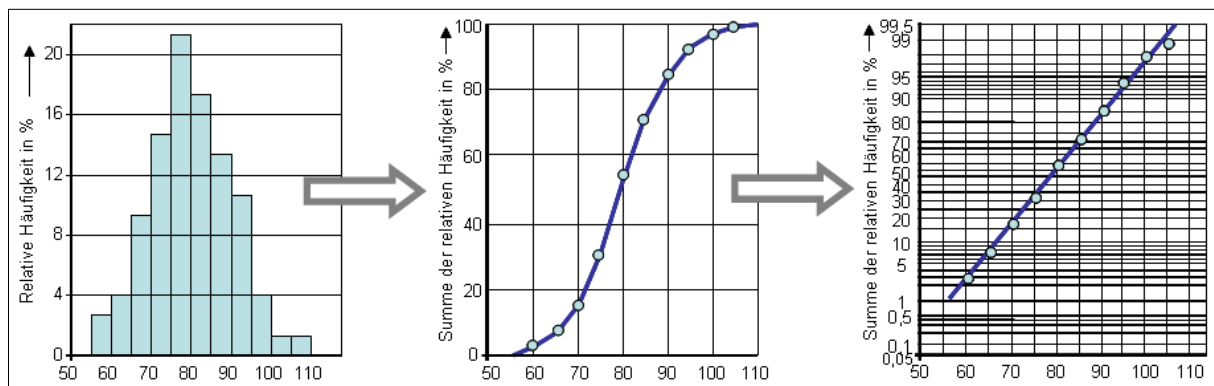


Abb. 1: Vom Histogramm über die Summenkurve zum Wahrscheinlichkeitsnetz (nach DIN 53804-1).

Mischungen unterschiedlicher Populationen werden in einem derartigen Diagramm als Teilgeraden unterschiedlicher Länge und Steigung dargestellt und können so leicht differenziert werden. Dabei muss zwischen den für die jeweilige Population charakteristischen Geradenabschnitten und den Übergangsbereichen unterschieden werden.

Letztere zeichnen sich jedoch durch die für Mischungen unterschiedlicher Populationen charakteristische höhere Standardabweichung aus und sind daher leicht zu identifizieren. SINCLAIR (1979) und VAN DEN BOOM (1981) beschreiben die Ursachen für die häufigsten Kombinationen von Geraden in der Darstellung im Wahrscheinlichkeitsnetz. Damit ist auf den ersten Blick und ohne weitere Auswertung schon eine Abschätzung der Ausgangsheterogenität der Daten möglich. Insofern ist es in jedem Falle sinnvoll, sich einen Datensatz zunächst ohne vorhergehende Präselektion anzusehen.

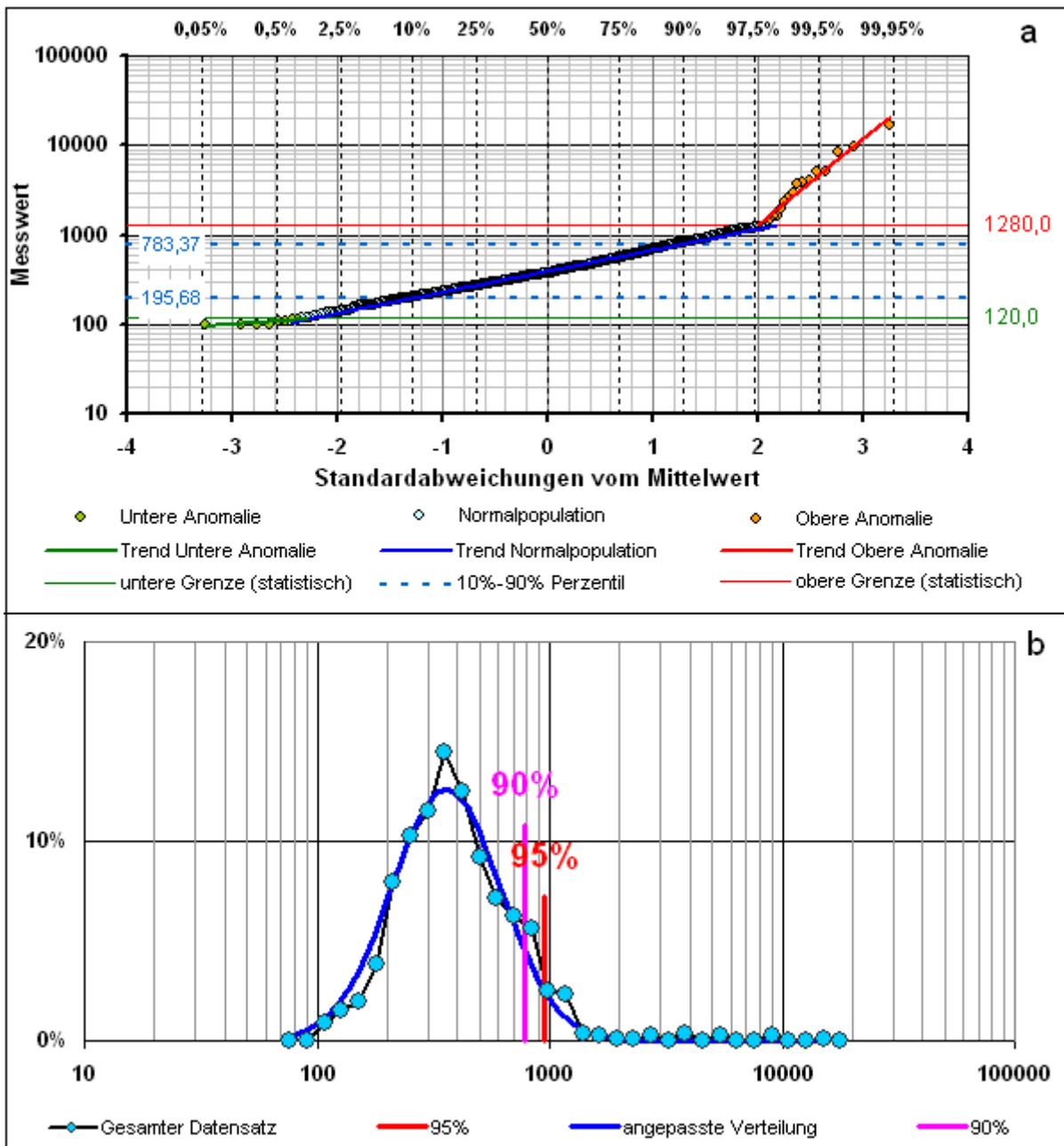


Abb. 2: a: Verteilung der Leitfähigkeit ( $\mu\text{S}/\text{cm}$ ) in der HGC-Einheit 01R14c Brandenburger Jungpleistozän. Deutlich zu erkennen ist der steile Abschnitt der anomalen Werte im oberen Bereich, während die Steigungsparameter der als untere Anomalie ausgeschiedenen Werte sich nicht wesentlich vom Normalbereich unterscheiden. Für die Berechnung des endgültigen Hintergrundwertes (90. Perzentil) wurden die Werte zwischen 100 und 1280  $\mu\text{S}/\text{cm}$  berücksichtigt (siehe Tab.2). X- und Y-Achsen sind gegenüber der üblichen Darstellungsweise (Abb. 1) vertauscht, da die Steigung der Geraden einen direkten Vergleich der zugrundeliegenden Standardabweichung erlaubt (steil = große, flach = kleine Standardabweichung).

b: Darstellung des gesamten Datensatzes als Histogramm überlagert von der berechneten Normalverteilung.

In der vorliegenden Form des Verfahrens wird der für die Hintergrundpopulation charakteristische Geradenabschnitt bestimmt, und danach Mittelwert und Standardabweichung ermittelt, aus denen die zugrundeliegende theoretische Verteilung und die jeweiligen Perzentile berechnet werden können (Abb. 2a).

Als charakteristischer Wert für die Obergrenze der Hintergrundgehalte (= Hintergrundwert) kommen insbesondere die 90. und 95. Perzentile in Betracht. Im hier vorgestellten Projekt wurde der Hintergrundwert auf Basis des 90. Perzentils berechnet. Auch Analysenwerte unterhalb der Bestimmungsgrenze können für die Berechnung der Gesamtverteilung in einem gewissen Umfang verwendet werden. Hierzu genügt es, die Anzahl dieser Werte prozentual in der Summenkurve zu berücksichtigen. Damit wird der Wertebereich in der Grafik nach rechts verschoben und so verkürzt, dass sich für die resultierende Restgerade Steigung und Achsenabschnitt ergeben, als ob über den gesamten Wertebereich Daten vorlägen. Solange die betrachtete Grundgesamtheit als homogen gelten kann und sich durch Abweichungen von der Geradenform oder auch durch Bimodalität chemisch ähnlicher Parameter keine triftigen Anhaltspunkte dafür ergeben, dass unterhalb der Bestimmungsgrenze tatsächlich andere Verteilungsgesetze herrschen, kann die resultierende Gerade mit hinreichender Genauigkeit in den Bereich der nicht dokumentierten Werte extrapoliert werden (Abb. 3) Es ist jedoch zu beachten, dass bei den Neben- und Spurenstoffen mit hoher Probenzahl kleiner Bestimmungsgrenze die ermittelte Normalverteilung der nachgewiesenen Werte den oberen Bereich einer geogenen Anomalie darstellen kann. Dies kann jedoch erst mit Werten hinterlegt werden, wenn die Bestimmungsgrenzen der Analytik deutlich gesunken sind und ausreichend neue Messwerte vorliegen.

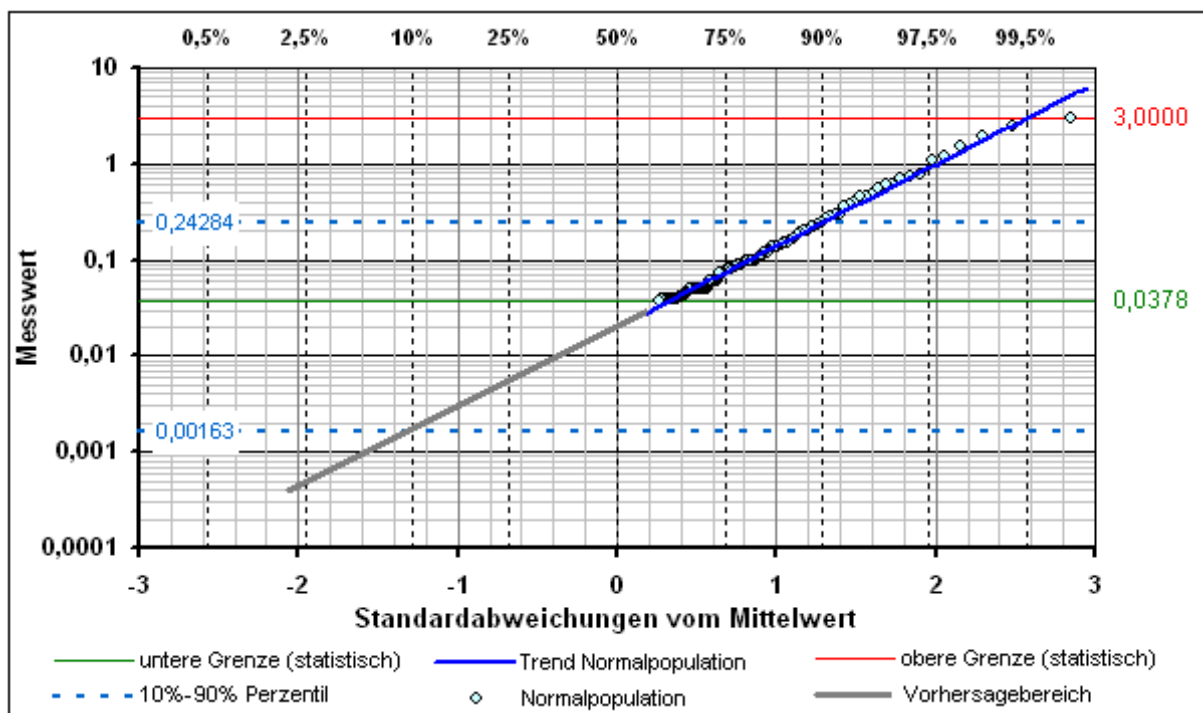


Abb. 3: Datensatz mit 60% aller Werte unter Bestimmungsgrenze (Aluminium (mg/l)) in der HGC-Einheit 01R13b Mitteldeutsche Urstrom- und Nebentäler. Der Mittelwert (Schnittpunkt mit der 50%-Line) und Standardabweichung (Steigung der Geraden) lassen sich durch Verlängern der Geraden eindeutig ermitteln, sodass auch für den Bereich kleiner Bestimmungsgrenze die statistischen Verteilungsparameter bestimmt werden können.

Für eine effiziente und anschauliche Auswertung wurde eine Excel-Anwendung entwickelt, die iterativ den Geradenabschnitt visualisiert, der der Hintergrundpopulation am exaktesten entspricht (Abb. 2a). Durch dieses Verfahren wird in der Regel in wenigen Schritten eine vom Benutzer steuerbare semiautomatische



Annäherung an die Knickpunkte in der Verteilung erreicht. Bei großen Anteilen an anomalen Werten kann das Verfahren durch vorheriges Entfernen von Werten an den Enden der Verteilung beschleunigt werden.

Die Ergebnisse des Verfahrens werden sowohl durch die optische Kontrolle mit einem Histogramm, dem die Kurve mit der sich ergebenden Normalverteilung überlagert wird (Abb. 2b), als auch durch eine Korrelationsanalyse und den d'Agostino-Pearson-Test (SHESKIN, 2007) auf Normalverteilung (Tab. 2) kontrolliert. Damit ist eine einfache Überprüfung der Übereinstimmung der angepassten Geraden mit den untersuchten Daten und für das Vorliegen einer Normal- bzw. Lognormalverteilung gegeben. Das Endergebnis ergibt sich dann aus einer neuen Berechnung der Geraden mit Alpha 0%, wenn die als Anomalien ausgeschlossenen Werte im Datensatz kurzfristig gelöscht werden und nicht mehr in die Verteilung mit eingehen. Zudem wurde die Plausibilität der Ergebnisse anhand des regionalen hydrogeologischen Sachverstandes der Bearbeiter überprüft.

Tab. 2: Begleitende statistische Angaben zur Darstellung in Abbildung 2, nachdem die oberen 16 anomalen Werte (2,77% aller Werte) von der Auswertung ausgeschlossen wurden. Eine Lognormalverteilung kann für die betrachtete Population (rechte Spalte) angenommen werden. Werte kleiner Bestimmungsgrenze waren nicht vorhanden. Zusätzlich ist der Korrelationskoeffizient zwischen den Daten und der angepassten Gerade angegeben („Güte der Anpassung“). Die Signifikanz des errechneten Koeffizienten wird in einer Farbkodierung angegeben (rot = nicht signifikant, grün signifikant, fett grün = hoch signifikant).

<b>Datei:</b>	01R14c.xls				
<b>Datensatz:</b>	01R14c				
<b>Parameter:</b>	Lf (uS/cm)				
<b>Fragestellung:</b>	2 -seitig	<b>Verteilung:</b>	lognormal		
<b>Anzahl Werte &lt; Nachweisgrenze: 0</b>					
<b>Alpha:</b>	0%	<b>Gesamter Datensatz</b>		<b>Normalpopulation</b>	
		<b>normal</b>	<b>lognormal</b>	<b>normal</b>	<b>lognormal</b>
<b>Anzahl Werte</b>		849		849	849
<b>Maximum</b>		1280,0		1280,0	1280,0
<b>Median</b>		372,0		372,0	372,0
<b>Minimum</b>		100,0		100,0	100,0
<b>-Standardabweichung</b>		202,7	230,1	215,2	230,4
<b>Mittelwert</b>		436,3	383,0	436,3	383,0
<b>+Standardabweichung</b>		669,9	637,6	657,4	636,8
<b>d'Agostino-Pearson-K2-Test</b>	<b>K<sup>2</sup> =</b>	168,24	4,29	168,24	4,29
	<b>p =</b>	0,0000	0,1170	0,0000	0,1170
<b>lognormale Verteilung ist</b>		nicht anzunehmen	anzunehmen	nicht anzunehmen	anzunehmen
<b>Güte der Anpassung</b>	<b>r =</b>	0,9462	0,9974	0,9462	0,9974
<b>Quantile</b>	<b>5,0%</b>	52,0	165,6	72,7	166,0
	<b>10,0%</b>	136,9	199,3	153,0	199,6
	<b>25,0%</b>	278,7	271,6	287,2	271,8
	<b>50,0%</b>	436,3	383,0	436,3	383,0
	<b>75,0%</b>	593,9	540,1	585,4	539,7
	<b>90,0%</b>	735,7	736,0	719,6	734,8
	<b>95,0%</b>	820,6	885,7	799,9	883,9
<b>Anomalien</b>	<b>oben</b>				
	<b>unten</b>				
<b>ausgeschlossen (%)</b>					

Um eine Sicherheit hinsichtlich der Statistik der Parameter zu erhalten, wurde für alle Parameter eine Mindestanzahl von 10 Werten in der Normalpopulation (also abzüglich Werten kleiner Bestimmungsgrenze und ausgesonderten Anomalien) festgelegt. Zusätzlich wurden für die Darstellungen bei den Hauptanionen und -kationen (siehe Tab. 3) nur die Ergebnisse verwendet, bei denen mindestens 60% der Gesamtheit der Werte eines Parameters im Bereich der Normalpopulation lagen. Bei den Neben- und Spurenstoffen wurde dieses Kriterium nicht angelegt, da es wegen der hohen Zahl von Werten kleiner Bestimmungsgrenze zu einem übermäßig hohen Ausschluss von Darstellungen geführt hätte. Liegen für ein Spurenelement in einer HGC-Einheit über 90 % der Werte unterhalb der Bestimmungsgrenze, kann das 90. Perzentil nicht anhand gemessener (diskreter) Werte ermittelt werden. In diesem Fall wird im WMS bei der flächenhaften Darstellung für den Parameter die niedrigste Werteklasse angezeigt, ohne dass ein konkreter Wert für das 90. Perzentil vorhanden ist. Ein entsprechender Hinweis wird in der Infoanzeige gegeben.

Das verwendete Verfahren der Abgrenzung von Anomalien im Datensatz ist grundsätzlich vergleichbar mit dem Vorgehen von KUNKEL et al. (2004), wobei letztere eine Abgrenzung von Anomalien auf Grundlage der Histogramme vornahm. Die Verwendung des Wahrscheinlichkeitsnetzes hat den Vorteil der Anwendbarkeit schon bei relativ kleinen Stichprobenanzahlen und dass sich die Anomalien im Wahrscheinlichkeitsnetz durch die Knickpunkte der Geradenverläufe der Teilpopulationen leichter identifizieren lassen.

#### **4. Datenbereitstellung als Web Map Service**

Die im Rahmen des Vorhabens „Hintergrundwerte Grundwasser“ erarbeiteten Daten werden der Öffentlichkeit als WMS bereitgestellt. Durch diese Technologie ist es möglich, die Hintergrundwerte in Form von Kartendarstellungen (Abb. 4) und Info-Abfragen (Abb. 5) abzurufen. Zur Visualisierung wird ein WMS-fähiges Programm bzw. eine Internetanwendung benötigt, z. B.:

- Google Earth, ESRI ArcGIS Explorer etc.,
- Geoinformationssysteme (GIS),
- Internet-Kartenanwendungen mit WMS-Importfunktion.

Auf die Bedienung der verschiedenen WMS-fähigen Programme kann an dieser Stelle nicht ausführlich eingegangen werden. Die folgende Anleitung zeigt jedoch exemplarisch die Verwendung eines WMS:

- [Schritt für Schritt Anleitung zur Verwendung eines WMS in Google Earth und ESRI ArcMap \(PDF, 3.8 MB\)](#)

Der Zugang zum WMS erfolgt über eine Internetadresse (URL des Web Map Service ohne / mit Parameter):

- <https://services.bgr.de/wms/grundwasser/hgw/>
- <https://services.bgr.de/wms/grundwasser/hgw/?REQUEST=GetCapabilities&VERSION=1.3&SERVICE=WMS&>

Diese URL muss im WMS-fähigen Programm eingestellt werden. Meist genügt die Angabe der URL ohne Parameter. Das WMS-fähige Programm ergänzt die Parameter automatisch. Sollte dies nicht zum Erfolg führen, so ist die URL mit Parameter anzugeben. Auf der Seite <https://geoviewer.bgr.de> ist der WMS bereits integriert und kann angesehen werden.

Somit ist jeder Nutzer in der Lage auf die Hintergrundwerte zuzugreifen und diese als Karten darzustellen. Auch die Inhalte der hinterlegten Datenbank sind über die Info-Abfrage zugänglich.

## 5. Dargestellte Inhalte

### Hydrogeochemische Einheiten

Die im WMS dargestellten Informationen sind in thematische Ebenen unterteilt und umfassen die 10 Hydrogeologischen Großräume (GR01 bis GR10) der Bundesrepublik Deutschland. Diese Großräume sind in Hydrogeochemische Einheiten (HGC-Einheiten) unterteilt, deren Begrenzung und ID-Nummer in weiteren Ebenen abgefragt werden können. Eine HGC-Einheit beschreibt eine hydrogeologische Einheit in der die Zusammensetzung des Grundwassers eines oberflächennahen Grundwasserleiters einer charakteristischen Verteilung entspricht. Dabei ist jedoch darauf hinzuweisen, dass im bearbeiteten Übersichtsmaßstab auch innerhalb der Einheiten Heterogenitäten existieren können, z. B. durch kleinräumige lithologische Wechsel, die sich dann typischerweise durch eine höhere Varianz der Werteverteilung bemerkbar machen.

Die ID-Nummer setzt sich aus dem zugeordneten Großraum und einer Kennziffer zur Charakterisierung der Einheit zusammen (z. B. 06M5 → Großraum 06, Mesozoikum, Einheit 5). Eine grafische Darstellung der HGC-Einheiten und eine tabellarische Übersicht der ID-Nummern und ihrer Beschreibung sind im Anhang dieser Erläuterung zusammengestellt.

### Flächenhafte Darstellungen der Hintergrundwerte

Die flächenhaften Darstellungen der Hintergrundwerte für jede HGC-Einheit können wahlweise für das 50. oder das 90. Perzentil ausgegeben werden. Das 50. Perzentil entspricht dem Mittelwert und das 90. Perzentil der oberen Grenze aller repräsentativen Werte, die die Grundwasserzusammensetzung in einer Einheit beschreiben.

Tab. 3: Im WMS dargestellte hydrochemische und physikochemische Parameter.

Hauptanionen und -kationen	Neben- und Spurenstoffe			Physikochemische Parameter
Calcium (Ca) Chlorid (Cl) Hydrogenkarbonat (HCO <sub>3</sub> ) Kalium (K) Magnesium (Mg) Natrium (Na) Sulfat (SO <sub>4</sub> )	Silber (Ag) Aluminium (Al) Bismut (Bi) Brom (Br)	Eisen (Fe) Lithium (Li) Mangan (Mn) Ammonium (NH <sub>4</sub> )	Silikat (SiO <sub>2</sub> ) Zinn (Sn) Strontium (Sr)	Gesamthärte Spez. elektrische Leitfähigkeit (LF) pH-Wert (pH)
	<b>Spurenstoffe (Auswertung 2012)</b>			
	Arsen (As) Bor (B) Barium (Ba) Cadmium (Cd) Kobalt (Co) Chrom (Cr)	Kupfer (Cu) Fluorid (F) Quecksilber (Hg) Molybdän (Mo) Nickel (Ni) Blei (Pb)	Antimon (Sb) Selen (Se) Thallium (Tl) Uran (U) Vanadium (V) Zink (Zn)	

Die genaue Vorgehensweise zur Ermittlung der Hintergrundwerte ist in Kapitel 3 erläutert. Insgesamt wurden 39 Parameter betrachtet und im WMS dargestellt (vgl. Tab. 3). Die in 2012 neu erhobenen und ausgewerteten Parameter werden

dabei separat aufgeführt. Die Datenlage ist bezogen auf die Parameter sehr unterschiedlich. So standen für zahlreiche Spurenstoffe insbesondere in den kleinräumigen HGC-Einheiten zunächst keine oder nicht ausreichend viele Messwerte (Minimum 10 Werte in der Normalpopulation) zur Verfügung. Die Datenlage wurde durch die Neuerhebung vorliegender Analysenwerte im Jahr 2012 für die Spurenstoffe mit Geringfügigkeitsschwellen deutlich verbessert. Auf dieser Grundlage wurden analog zum Vorgehen in LAWA (2004) die Basiswerte für diese Parameter als flächengewichtete Mittel der 90. Perzentilwerte der HGC-Einheiten neu berechnet (Tab. 4).

Tab. 4: Parameter mit Geringfügigkeitsschwellenwerten gemäß Datennacherhebung und Neuauswertung 2012: Gesamtzahl Messstellen, prozentuale Flächenabdeckung ausgewerteter HGC-Einheiten und auf die Gesamtfläche Deutschlands bezogene flächengewichtete Mittel der 90. Perzentilwerte.

<b>Parameter</b>	<b>Gesamtzahl Messstellen</b>	<b>Flächenabdeckung in %</b>	<b>Basiswert (flächengewichtetes Mittel der 90. Perzentile) [<math>\mu\text{g/l}</math>]</b>
Antimon	14192	72%	0,17
Arsen	24136	97%	3,21
Barium	16456	97%	175
Blei	24082	93%	1,05
Bor	22194	96%	116
Cadmium	24272	87%	0,3
Chrom	24067	94%	1,75
Fluorid	16014	89%	269
Kobalt	15073	82%	1,999
Kupfer	20747	96%	5,44
Molybdän	13538	84%	1,34
Nickel	23109	78%	7,14
Quecksilber	13298	53%	0,088
Selen	15810	80%	1,26
Thallium	13944	71%	0,0626
Uran	15606	87%	3,45
Vanadium	14830	88%	1,68
Zink	21077	96%	57,6

Für Nitrat wurden keine Berechnungen durchgeführt, da praktisch alle höheren Nitratkonzentrationen ( $\sim > 10$  mg/l) anthropogen verursacht sind und damit thematisch hier ausscheiden.

Die statistisch ermittelten Hintergrundwerte werden farblich in 6 Klassen unterteilt und innerhalb der geometrischen Grenzen der jeweiligen HGC-Einheit dargestellt. Obwohl als Bezugsebene der Darstellung in der Karte generell die Ausstrichfläche der entsprechenden HGC-Einheit an der Erdoberfläche gilt, sind Sonderfälle zu beachten. So ist aufgrund des dreidimensionalen geologischen Aufbaus häufig davon auszugehen, dass die Ausstrichflächen der Einheiten nicht ihrer maximalen Verbreitung im Untergrund in Horizontalprojektion entsprechen. Dies bedeutet, dass auch außerhalb der Bezugsflächen (Ausstrichflächen) Stützpunkte liegen können, die sich auf die wasserwirtschaftlich vorwiegend genutzte hydrogeologische Einheit beziehen, auch wenn diese am Ort der

Bewertung nicht an der Erdoberfläche ansteht (siehe auch Beschreibung der Punktdaten weiter unten).

Weiterhin sind räumliche Variationen der Parameter innerhalb der Einheiten, die sowohl horizontal in der Fläche als auch vertikal nach der Tiefenlage auftreten können, nicht dargestellt. Beispielsweise führen stark unterschiedliche Redox-Verhältnisse innerhalb der großflächig verbreiteten HGC-Einheit des Quartärs im Oberrheingraben zu „Verzerrungen“, da sich die reduzierenden Verhältnisse im Nordgraben auf die Perzentile der Fe- und Mn-Werte der gesamten HGC-Einheit auswirken.

Von besonderem Interesse für die Ermittlung der Hintergrundwerte sind die 90. Perzentile, es können prinzipiell aber auch andere Perzentile dargestellt werden. Im Zuge der Überarbeitung des WMS im Jahr 2014 werden nun auch die 50. Perzentile (Mediane) im WMS bereitgestellt. Abbildung 4 zeigt die Karte der Hintergrundwerte am Beispiel der 90. Perzentile von Arsen. Die Klassifikation der Flächen erfolgt in 6 Klassen. Die höchste Klasse orientiert sich an dem für den Parameter jeweils gültigen Referenzwert<sup>2</sup>.

Falls ein solcher Referenzwert wie im Beispiel von Hydrogenkarbonat für einen Parameter nicht existiert, wurde ersatzweise das 90. Perzentil aller Hintergrundwerte des betreffenden Parameters zur Festlegung der höchsten Klasse herangezogen. Für die Parameter Eisen (Fe) und Mangan (Mn) treten im Grundwasser zu über 75% Hintergrundwerte oberhalb des Referenzwertes auf. Da die Referenzwerte aus der Trinkwasserverordnung (TrinkwV) für die vorliegende Problematik nur einen ästhetischen Charakter haben, wurde für eine aussagekräftigere Darstellung die höchste Klasse deutlich über dem Referenzwert angesetzt (10 bzw. 1 mg/l). Beim Parameter Ammonium (NH<sub>4</sub>) überschreiten über 40% der Hintergrundwerte primär aufgrund von geogenen Ursachen den Referenzwert. Für eine aussagekräftigere Darstellung wurde hier die höchste Klasse über den Referenzwert auf 4 mg/l angehoben. Flächen für die zu wenige oder keine Daten verfügbar sind, werden mit der Legendeneinheit „keine Daten verfügbar“ in weiß dargestellt.

Einen Sonderfall stellen Einheiten dar, in denen weniger als 10 gemessene Werte eines Parameters über Bestimmungsgrenze vorliegen, also keine Normalverteilung im nachgewiesenen Wertebereich sinnvoll möglich ist und mit denen somit eine theoretische Angabe der Perzentile nicht machbar ist, aber viele Werte <BG vorhanden sind. In diesen Bereichen, in denen ja dann keine berechneten Verteilungen vorliegen, wurden die Einheiten in der niedrigsten Werteklasse dargestellt und beim 90. Perzentil nur „<BG“ angegeben. Bei der Abfrage der Statistik (Abb. 5) werden hier keine Verteilungsfunktionen dargestellt und es wird ein entsprechender textlicher Hinweis gegeben: „Der 90. Perzentil liegt im Bereich kleiner Bestimmungsgrenze. Eine statistische Auswertung der Werteverteilung in der Einheit konnte nicht durchgeführt werden“ (siehe auch Kap. 3).

---

<sup>2</sup> Zur Ermittlung des Referenzwertes eines Parameters werden Richtlinien und Verordnungen nach LAWA (2004), TRINKWV (2013) und WHO (2004) herangezogen.

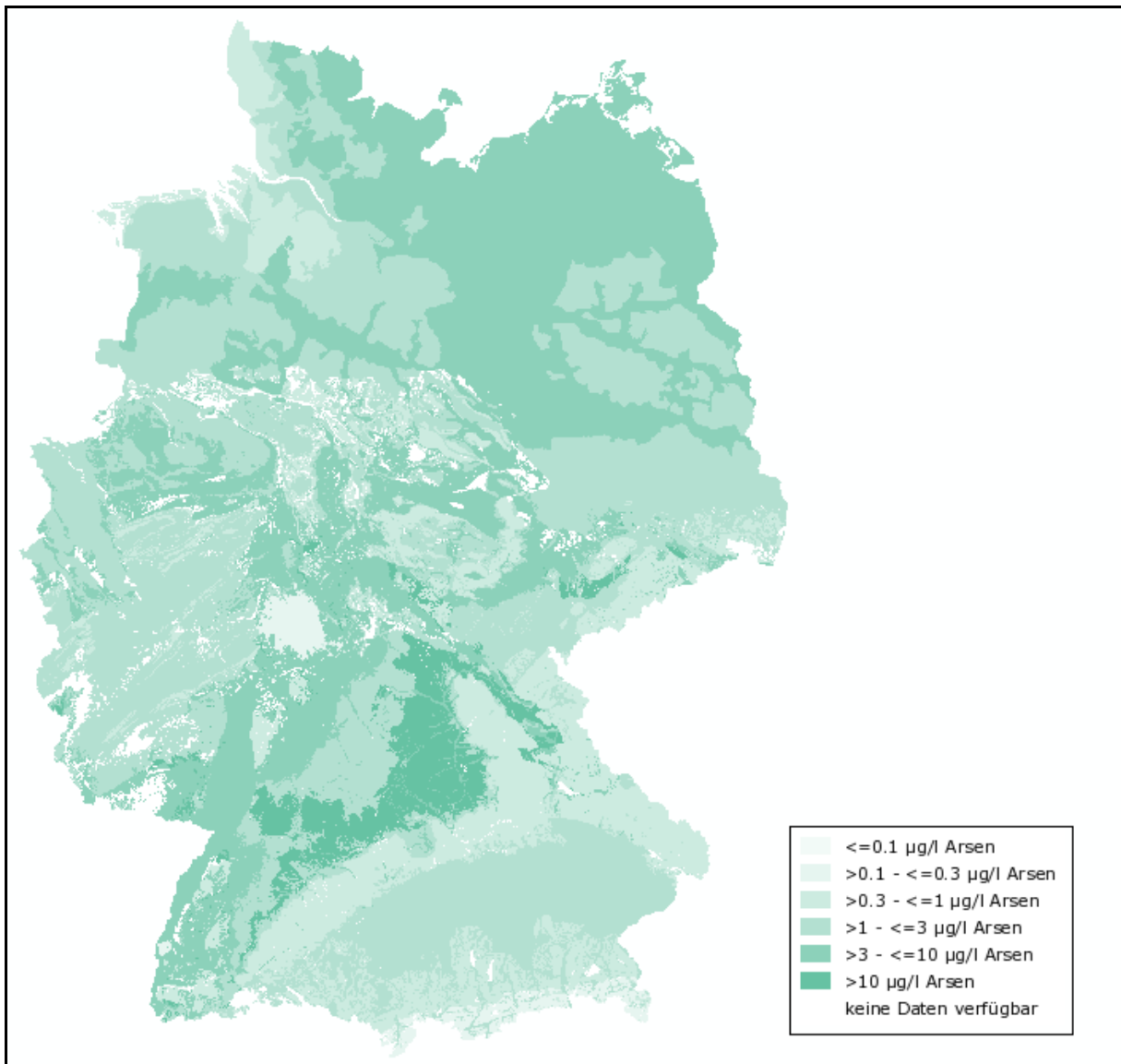


Abb. 4: Karte der Hintergrundwerte (90. Perzentile) am Beispiel von Arsen.

### Datenabruf über Info-Abfrage

Über die flächenhafte Darstellung der Hintergrundwerte hinaus lassen sich sämtliche verfügbaren Daten einer HGC-Einheit auch über die Info-Abfrage aufrufen. Nach Aktivierung dieser Funktion wird ein Fenster mit einer tabellarischen Darstellung aller verfügbaren Daten geöffnet (siehe Abb. 5). Neben einer Übersicht über die Lage der ausgewählten HGC-Fläche (Abb. 5, rechts unten) werden folgende Angaben zur Verfügung gestellt: Name, ID und Flächengröße der ausgewählten HGC-Einheit sowie statistische Angaben (Perzentile), die die Verteilung der geogenen Grundgesamtheit des betreffenden Parameters beschreiben.

Eine grafische Veranschaulichung der Perzentile liefert ein Box-Plot Diagramm (Abb. 5, rechts oben). Der im Abfrageergebnis aufgeführte Punkt 'Messwerte nachgewiesen' gibt die Anzahl der Werte wieder, die in die statistische Berechnung der Perzentile eines Parameters in der ausgewählten HGC-Einheit eingeflossen sind und entspricht damit der Anzahl der Werte in der Normalpopulation. Weiterhin ist die Anzahl der Messpunkte aufgeführt, die aus der Grundgesamtheit wegen nicht überschrittener Bestimmungsgrenzen oder „anormaler“ Werte ausgeschlossen wurden. Außerdem stellt die Info-Abfrage noch Angaben

über verfügbare Referenzwerte aus den Quellen WHO (2004), TRINKWV (2013) und LAWA (2004) bereit.

Um die Datengrundlage für die Hintergrundwerte zu dokumentieren, werden neben den Flächendaten auch die zu Grunde liegenden Messorte als Punktdaten dargestellt. Die Punkte geben durch ihre farbliche Klassifizierung Auskunft darüber, in welchem Wertebereich der Messwert liegt. In Kombination mit den Flächendaten geben die Punktinformationen einen Hinweis auf die Homogenität/Heterogenität und regionalen Unterschiede für den jeweiligen Parameter innerhalb der HGC-Einheit. Sie lassen sich im WMS in einer weiteren Ebene für den betreffenden Parameter aufrufen (Abb. 6). Gezeigt wird jeweils der für die Auswertung verwendete Einzelmesswert. Die Punktdaten sind bundesweit einheitlich in sechs farblichen Klassen (hell- bis dunkelgrün) dargestellt, die der Klassifizierung der Flächendarstellungen entsprechen. Aus Datenschutzgründen werden die Punktdaten so dargestellt, dass sie keiner konkreten Messstelle zugeordnet werden können (kein exakter Lagebezug).

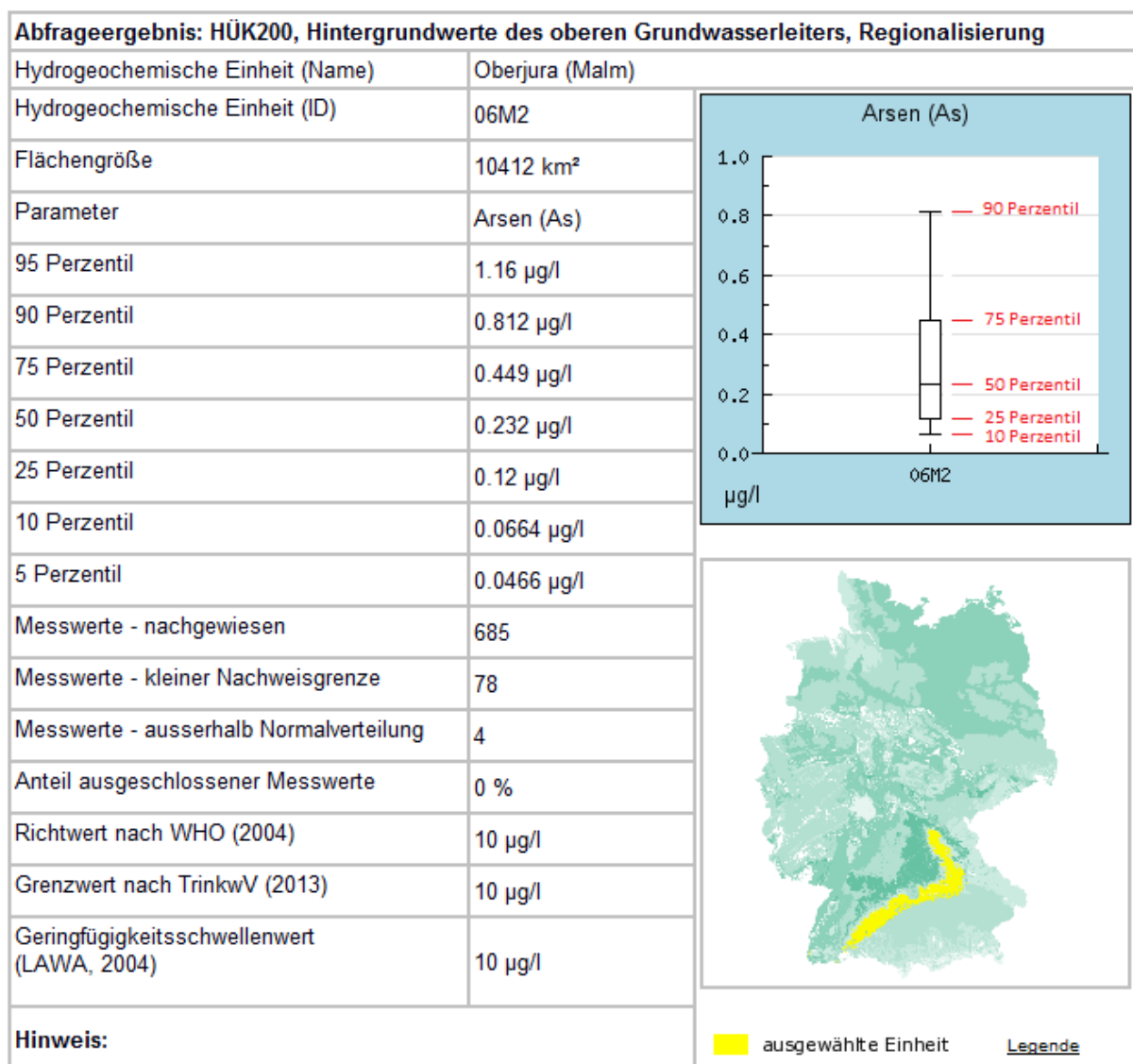


Abb. 5: Ergebnis einer Info-Abfrage am Beispiel des Parameters Arsen in der Hydrogeochemischen Einheit 06M2 Oberjura (Malm) des Großraums 6 (West- und süddeutsches Schichtstufen- und Bruchschollenland).

Nicht selten ist die Filterstrecke einer Grundwassermessstelle (bei Grundwasserstockwerksgliederung) einer anderen (meist tieferen) als der dort dargestellten (oberflächennahen) HGC-Einheit zugeordnet. Diese Punktdaten sind anstelle eines Kreis-Symbols durch ein Dreieck-Symbol gekennzeichnet. Zusätzlich liefert eine Abfrage weitere Informationen (Bezeichnung und ID der Hydrogeochemischen Einheit, Messwert, Unterkante Filter) zur ausgewählten Messstation (Abb. 6).

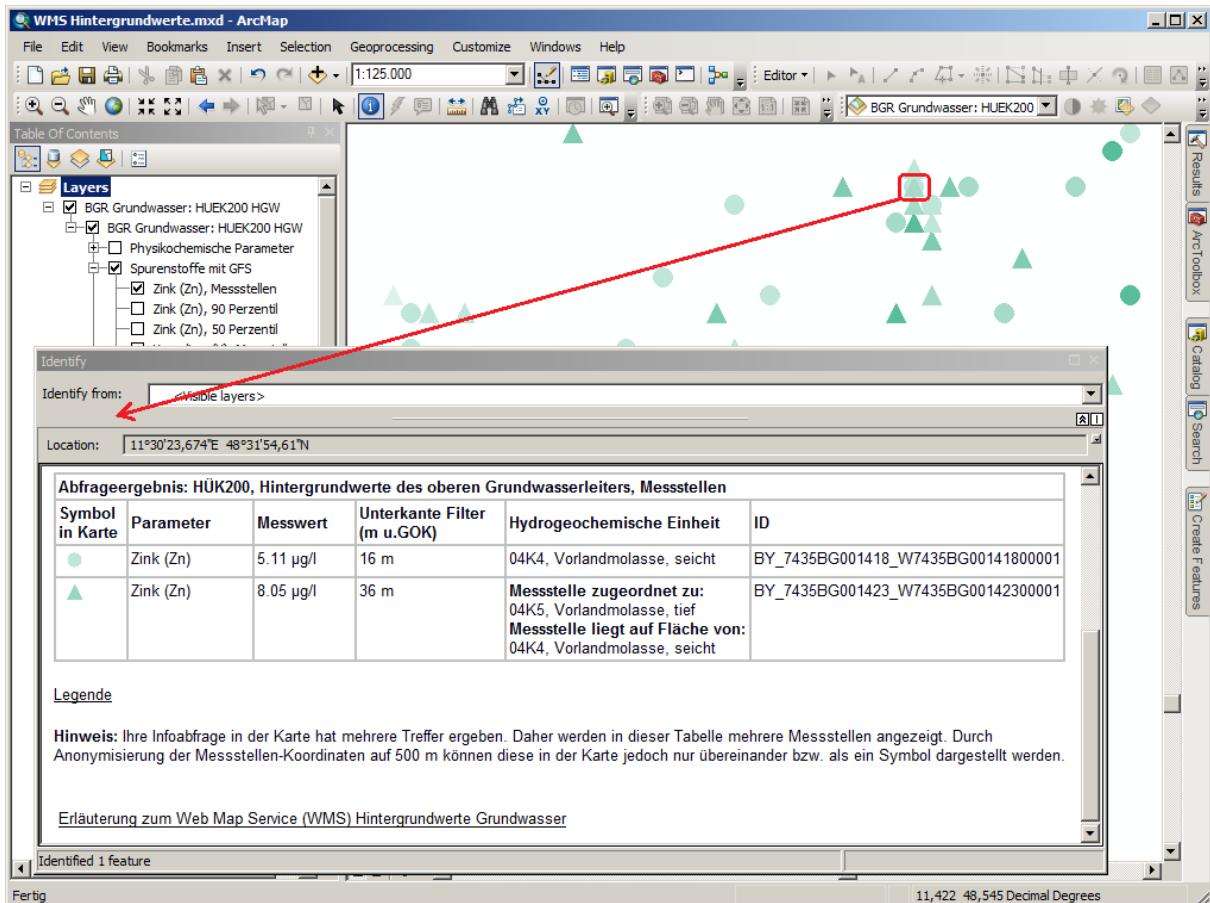


Abb. 6: Ergebnis einer Info-Abfrage zu Punktdaten am Beispiel des Parameters Zink. In dieser Auswahl befindet sich eine flachere Messstelle, die in der oberflächennahen HGC-Einheit verfiltert ist (Kreis-Symbol) und eine tiefere Messstelle, die in einer tieferen HGC-Einheit verfiltert ist (Dreieck-Symbol).

Insgesamt erlaubt die Darstellung der Punktdaten dem Nutzer, lokale Unterschiede in der Datendichte einzelner Hintergrundwerte einzuschätzen und die Messstationen im bundesweiten Kontext zu betrachten. Auch regionale Anomalien lassen sich erkennen, da nicht für die Auswertung der Normalverteilung herangezogene Punktdaten ebenfalls in die Darstellung einfließen (Ausnahme: präselektierte Punkte).



## 6. Schlussfolgerungen und Ausblick

Eine erste flächendeckende Untersuchung der Grundwasserqualität der Grundwasserleiter im damaligen Westdeutschland wurde von SCHLEYER & KERNDORFF (1992) anhand einer relativ geringen Probenzahl von insgesamt 186 Standorten durchgeführt. KUNKEL et al. (2004) ermittelten die Grundwasserbeschaffenheit in Deutschland für die wesentlichen Haupt- und Spurenelemente differenziert nach insgesamt 17 hydrogeologischen Bezugseinheiten anhand von über 40.000 Grundwassermesspunkten. Die hier vorgestellten Arbeiten beruhen auf einer größeren Datenmenge von etwa 45.000 Messpunkten (ohne Aktualisierung Spurenstoffe), wobei die Differenzierung in unterschiedliche hydrogeochemische Einheiten auf Grundlage der hydrogeologischen Einheiten aus der Generallegende der HÜK200 bzw. durch Unterteilung in hydrogeologische Räume erfolgte und damit einen höheren Differenzierungsgrad (186 hydrogeochemische Einheiten) ermöglichte. Durch die Integration der Ergebnistabellen in die Datenbank der HÜK200 können die erhaltenen statistischen Kennwerte auf der Bezugsebene des Ausbisses der oberflächennahen hydrogeologischen Einheiten dargestellt werden. Dies ermöglicht die Visualisierung der Ergebnisse in dem hier beschriebenen WMS. Grundsätzlich führen die Ergebnisse dieser Untersuchungen zu vergleichbaren Werten, jedoch ergeben sich mit höherem Auflösungsgrad immer bessere Anpassungen der statistischen Auswertung an die tatsächliche Vor-Ort-Situation. Als voraussichtlich höchster Auflösungsgrad wäre eine auf hydrogeologische Einheiten der Detailkartierung (z. B. Maßstab 1:50.000, HK50) bezogene Auswertung mit einzugsgebietsbezogener Betrachtung denkbar.

Aufgrund der Bereitstellung als WMS im Internet ist die Anwendung grundsätzlich fortschreibbar. Eine erste Aktualisierung erfolgte anhand neuerer Messwerte für die bisher nur lückenhaft auswertbaren Spurenelemente, wobei sich die Auswertung zunächst auf die für den Vollzug bedeutenden Spurenstoffparameter mit Geringfügigkeitsschwellenwerten nach LAWA (2004) konzentrierte. Für die jüngste Auswertung der Spurenstoffe standen je Parameter zwischen ca. 13.000 und 24.000 Messpunkte zur Verfügung. Je nach Bedarf ist zukünftig eine Ergänzung der Auswertungen anhand neuerer Messdaten oder auch im Hinblick auf entsprechende gesetzliche Anforderungen (z. B. für Bestandsaufnahmen) denkbar.

## 7. Literatur

DIN 53804-1 (2002): Statistische Auswertungen, Teil 1: Kontinuierliche Merkmale. – 19 S., Beuth-Verlag, Berlin.

DIN ISO 5479 (2004): Statistische Auswertung von Daten - Tests auf Abweichung von der Normalverteilung. – Januar 2004, DIN-Norm, 75 S.

GRUBE, A., WICHMANN, K., HAHN, J. & NACHTIGALL, K.H. (2000): Geogene Grundwasserversalzung in den Porengrundwasserleitern Norddeutschlands und ihre Bedeutung für die Wasserwirtschaft. – 203 S., DVGW-Technologiezentrum Wasser, 9.

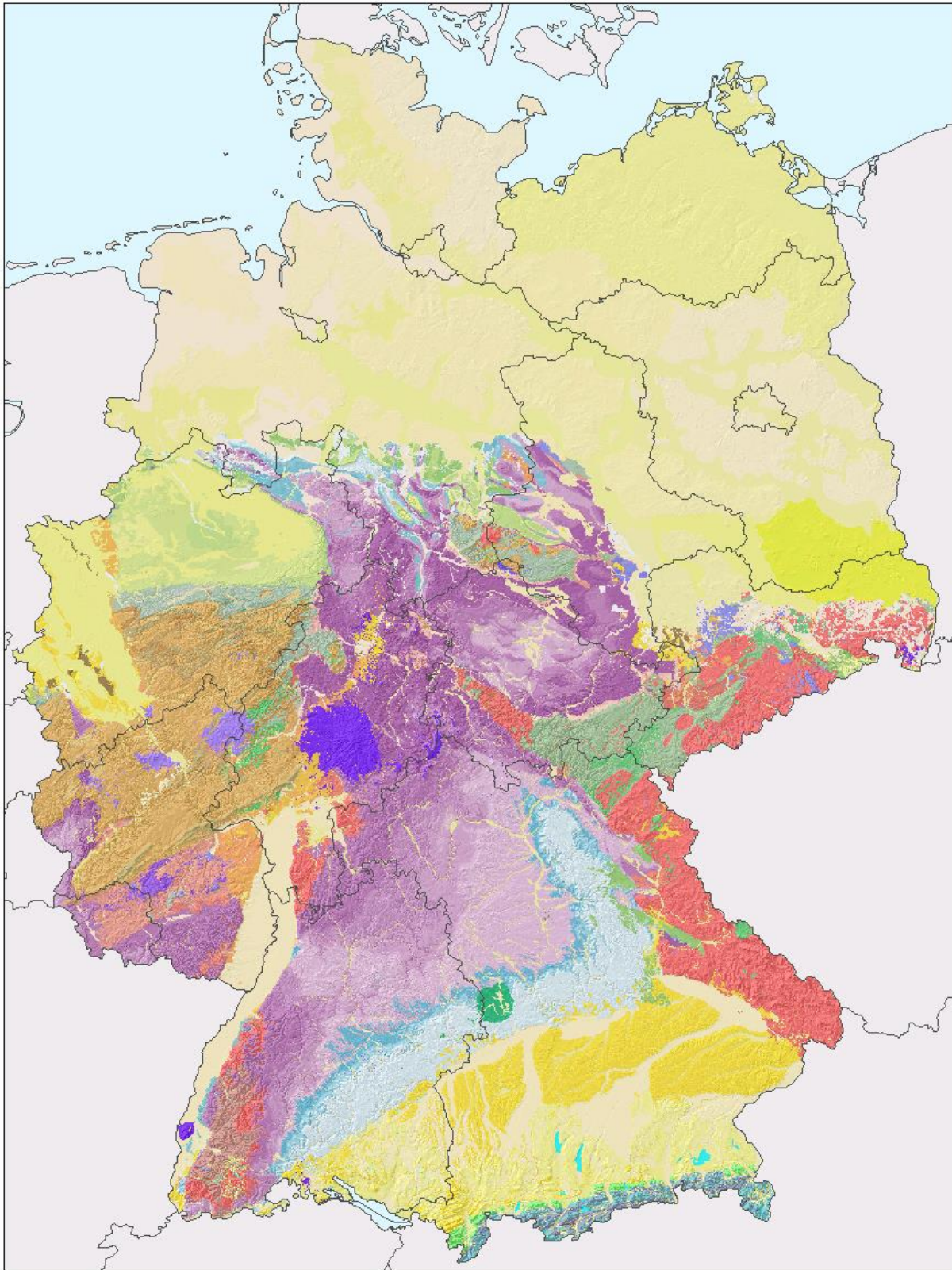
HINDERER, M. & EINSELE, G. (1998): Grundwasserversauerung in Baden-Württemberg. – 210 S., Landesanstalt für Umweltschutz Baden-Württemberg Karlsruhe.

KUNKEL, R., WENDLAND, F., VOIGT, H.-J. & HANNAPPEL, S. (2004): Die natürliche, ubiquitär überprägte Grundwasserbeschaffenheit in Deutschland. – Schriften des Forschungszentrums Jülich, Reihe Umwelt, 47, 204 S., Jülich.

- LAWA (2004): Ableitung von Geringfügigkeitsschwellenwerten für das Grundwasser. – Länderarbeitsgemeinschaft Wasser (Hrsg.), 33 S., Düsseldorf.
- LEPELTIER, C. (1969): A simplified statistical treatment of geochemical data by graphical representation. – *Econ. Geol.*, 64: 538-550, Lancaster, PA.
- SCHLEYER, R. & KERNDORFF, H. (1992): Die Grundwasserqualität westdeutscher Trinkwasserressourcen. – 249 S., VCH, Weinheim, New York, Basel, Cambridge.
- SENATSWERWALTUNG FÜR STADTENTWICKLUNG (SENSTADT) (2005): Bewertungskriterien für die Beurteilung von Grundwasserverunreinigungen in Berlin (Berliner Liste 2005). – Bekanntmachung vom 01.07.2005, 10 S.
- SHESKIN, D.J. (2007): Handbook of parametric and nonparametric statistical procedures. – 1736 S., Chapman & Hall, Boca Raton.
- SINCLAIR, A.J. (1976): Applications of probability graphs in mineral exploration. – *Assoc. Explor. Geochem. Spec.*, 4/9, 5 S.
- TRINKWV (2001): Verordnung zur Novellierung der Trinkwasserverordnung in der Fassung der Bekanntmachung vom 28.05.2001. – *Bundesgesetzblatt I.* 24, S. 959-980.
- TRINKWV (2013): Trinkwasserverordnung in der Fassung der Bekanntmachung vom 2. August 2013 (BGBl. I S. 2977), die durch Artikel 4 Absatz 22 des Gesetzes vom 7. August 2013 (BGBl. I S. 3154) geändert worden ist.
- VAN DEN BOOM, G. (1981): Geochemische Prospektionsmethoden. – in: BENDER, F.: *Angewandte Geowissenschaften*, Band 1, S. 327-357, Stuttgart.
- WAGNER, B., TÖPFNER, C., LISCHIED, G., SCHOLZ, M., KLINGER, R. & KLAAS, P. (2003): Hydrogeochemische Hintergrundwerte der Grundwässer Bayerns. – *GLA-Fachberichte*, 21, 250 S., München (Bayer. Geol. L.-Amt).
- WAGNER, B., WALTER, T., HIMMELSBACH, T., CLOS, P., BEER, A., BUDZIAK, D., DREHER, T., FRITSCHKE, H.-G., HÜBSCHMANN, M., MARCZINEK, S., PETERS, A., POESER, H., SCHUSTER, H., STEINEL, A., WAGNER, F. & WIRSING, G. (2011): Hydrogeochemische Hintergrundwerte der Grundwässer Deutschlands als Web Map Service. – *Grundwasser*, 16(3): 155-162; Springer, Berlin / Heidelberg.  
[www.springerlink.com/content/e88pm153254q4u52](http://www.springerlink.com/content/e88pm153254q4u52)
- WALTER, T., BEER, A., BROSE, D., BUDZIAK, D., CLOS, P., DREHER, T., FRITSCHKE, H.-G., HÜBSCHMANN, M., MARCZINEK, S., PETERS, A., POESER, H., SCHUSTER, H., WAGNER, B., WAGNER, F., WIRSING G. & WOLTER, R. (2012): Determining Natural Background Values with Probability Plots. – *Groundwater Quality Sustainability, IAH Selected Papers on Hydrogeology*, CRC Press, 26: 331-341.
- WHO (2004): Guidelines for Drinking-Water Quality. – Vol. 1, Third Edition, 540 S., Genf.

## Anhang

### Anhang 1: Karte der Hydrogeochemischen Einheiten.



**Anhang 2:** Auflistung der HGC-Einheiten von Deutschland; nach Großräumen sortiert mit Flächengröße, Anzahl verfügbarer Parameter und Anzahl zugeordneter HÜK200 Einheiten.

Erläuterung: Die ID der hydrogeochemischen Einheiten in der ersten Spalte der Tabelle setzt sich wie folgt zusammen: die ersten beiden Zahlen geben die Nummer des zugehörigen hydrogeologischen Großraums an; der anschließende Buchstabe steht für das zugehörige Erdzeitalter bzw. Genese der Einheit (K: Känozoikum, M: Mesozoikum, P: Paläozoikum, V: Vulkanite) und die darauf folgende Ziffernfolge stellt eine Nummerierung nach der Chronostratigraphie vom jüngeren zum älteren dar. Die HGC-ID im Großraum 01 ergibt sich aus der Nummer des zugehörigen hydrogeologischen Raumes (R) und einer fortlaufenden Benennung nach Kleinbuchstaben bei einer Unterteilung von Räumen (Räume 13 bis 15).

ID HGC	Name Hydrogeochemische Einheit (HGC)	Flächen- größe [km <sup>2</sup> ]	Anzahl Parameter (max. 39)	Anzahl HÜK200 Einheiten
01R11	Nordseeinseln und Watten	4103,8	31	*
01R12	Marschen	6577,6	36	*
01R13a	Brandenburgische Urstrom- und Nebentäler	7830,3	22	*
01R13b	Mitteldeutsche Urstrom- und Nebentäler	7913,2	34	*
01R13c	Nordwestdeutsche Flussniederungen	4160,2	31	*
01R13d	Nordwestdeutsche Moorniederungen	4518,1	32	*
01R13e	Oberelbe-Mulde-Niederung	2806,8	31	*
01R14a	Schleswig-Holsteinisches Jungpleistozän	6676,4	29	*
01R14b	Mecklenburg-Vorpommersches Jungpleistozän	22841,0	29	*
01R14c	Brandenburger Jungpleistozän	11636,5	24	*
01R15a	Oldenburgisch-Ostfriesische Geest	2398,2	30	*
01R15b	Bederkesa-Zevener Geest	3643,2	31	*
01R15c	Nordwestdeutsche Geest	16225,0	33	*
01R15d	Nordost- und Mitteldeutsches Mittelpleistozän	13126,6	30	*
01R15e	Mitteldeutsches Mittelpleistozän	3630,4	35	*
01R16	Altmoränengeest	4097,0	30	*
01R17	Lausitzer Känozoikum	5768,0	31	*
02K1.2	quartäre Schluffe (Löss)	48,5		3
02K1.3	quartäre Sande, Kiese, Schluffe und Tone	10633,6	33	23
02K2.1	tertiäre Feinsande, Tone und Schluffe (ohne Brk.), östlicher Niederrhein	430,5	17	6
02K2.2	Braunkohlentertiär	66,0		6
02K2.3	tertiäre Sande, Schluffe und Tone (ohne Brk.), restlicher Niederrhein	959,1	22	27
02K3	Quellkalk	1,4		1
02M1	Unterkreide, silikatisch	321,2	11	14
02M10	Muschelkalk, karbonatisch-klastisch	4,4		4
02M11	Mittlerer Muschelkalk, salinar	0,1		1
02M12	Buntsandstein, tonig-salinar	0,9		2
02M2	Unterkreide, silikatisch-karbonatisch	130,3	11	8
02M3	Oberkreide, silikatisch	483,4	21	3

ID HGC	Name Hydrogeochemische Einheit (HGC)	Flächen- größe [km <sup>2</sup> ]	Anzahl Parameter (max. 39)	Anzahl HÜK200 Einheiten
02M4	Oberkreide, silikatisch-karbonatisch	4533,1	31	26
02M5	Oberkreide, karbonatisch	952,8	20	9
02M6	Jura, ungegliedert	0,3		1
02M7	Malm, vorwiegend sulfatisch	4,9		1
02M8	Dogger	1,3		1
02M9	Lias	0,0		1
03K1	quartäre Kiese und Sande, silikatisch	273,2	3	3
03K2	quartäre Kiese und Sande, silikatisch- karbonatisch	6406,4	35	7
03K3	quartäre Sande und Schluffe, silikatisch	75,0		2
03K4	quartäre Sande und Schluffe, Quellkalke, karbonatisch	58,2		2
03K5	Tertiäre Grabenfüllung (Sande, Kiese, Schluffe)	508,9	18	3
03K6	Mio-Pliozän, limnisch-fluviatil (Mergel-, Ton-, Schluffstein)	926,6	22	5
03K7	tertiäre Karbonate (Kalktertiär)	640,9	18	1
03K8	tertiäre Tone und Mergel (Mergeltertiär)	916,4	15	6
03M1	mesozoische klastische und karbonatische Festgesteine	141,0		3
03V1	tertiäre Vulkanite	2566,5	21	3
04K1.1	quartäre Sande und Schluffe	0,1	17	4
04K1.2	quartäre Karbonate	23,1		1
04K2.1	quartäre Kiese und Sande, vorwiegend karbonatisch	12413,0	38	14
04K2.2	quartäre Kiese und Sande, vorwiegend silikatisch- karbonatisch	671,4	32	2
04K2.3	quartäre Kiese und Sande, vorwiegend silikatisch	66,0		2
04K3	quartäre Becken- und Moränenablagerungen	8923,0	36	9
04K4	Vorlandmolasse, seicht	12311,4	37	18
04K5	Vorlandmolasse, tief	0,0	20	
04V1	känozoische Vulkanite	25,8		1
05K1.2	quartäre Sande und Schluffe	1371,2	27	4
05K1.3	quartäre Kiese und Sande, silikatisch	3155,6	28	11
05K1.5	quartäre Karbonate (Travertin, Kalktuff)	52,5	1	4
05K2.1	Braunkohlentertiär	422,8	25	9
05K2.2	tertiäre Sande und Tone	188,8	25	8
05M3.1	Kreide silikatisch-karbonatisch	850,5	15	9
05M3.2	Kreide, vorwiegend silikatisch	1374,4	17	13
05M3.3	Kreide, vorwiegend karbonatisch	464,3	15	11
05M4.1	Jura undifferenziert	67,0		2
05M4.2	Malm, vorwiegend silikatisch-karbonatisch	519,5	18	8
05M4.3	Malm, vorwiegend sulfatisch	94,1		1
05M4.4	Dogger	420,1	15	7
05M4.5	Lias	1302,2	16	2
05M5.1	Trias	64,6		3
05M5.2	Keuper, klastisch	4822,3	27	11

ID HGC	Name Hydrogeochemische Einheit (HGC)	Flächen- größe [km <sup>2</sup> ]	Anzahl Parameter (max. 39)	Anzahl HÜK200 Einheiten
05M5.3	Keuper, sulfatisch	1088,4	22	4
05M5.4	Muschelkalk, karbonatisch-klastisch	6104,4	31	8
05M5.5	Mittlerer Muschelkalk, salinar	349,0	16	1
05M5.6	Buntsandstein	12407,1	30	8
05M5.7	Buntsandstein, tonig-salinar	2078,5	20	3
05M6.1	Zechstein, ungegliedert (chloridisch, karbonatisch, sulfatisch)	1172,5	27	5
05M6.3	Zechstein, sulfatisch	162,5		4
05M6.4	Zechstein, klastisch	0,2		1
05M6.5	klastische Sedimente des Rotliegend	199,7	14	3
05M7	Mesozoikum (ungegliedert)	98,1		1
05P7.1	karbonische Ton- bis Sandsteine (aus GR 8)	44,4	11	4
05V2.3	tertiäre Vulkanite	229,0		10
06K1.1	quartäre Sande und Schluffe	37,7	30	2
06K2.1	quartäre Kiese und Sande, vorwiegend karbonatisch	231,4	10	4
06K2.2	quartäre Kiese und Sande, vorwiegend silikatisch-karbonatisch	908,6	28	3
06K2.3	quartäre Kiese und Sande, vorwiegend silikatisch	1509,9	35	4
06K3	tertiäre bis quartäre Sande und Kiese	72,7	13	4
06K4	Braunkohlentertiär	539,2	29	2
06K5	Ries-Trümmermassen	483,7	36	3
06K6	Bohnerz-Formation	17,4		1
06M1	Kreide	1030,9	35	4
06M10	unterer Muschelkalk, karbonatisch-klastisch	443,3	13	1
06M11	Buntsandstein, ungegliedert	10291,9	38	15
06M12	oberer Buntsandstein klastisch	827,2	10	1
06M13	Buntsandstein salinar	191,8	6	1
06M14	Trias ungegliedert	74,9	2	1
06M15	Perm, klastisch	776,8	34	8
06M2	Oberjura (Malm)	10461,6	39	12
06M3	Mitteljura (Dogger)	2442,8	38	5
06M4	Unterjura (Lias)	2484,7	35	6
06M5	mittlerer und oberer Keuper, klastisch	13387,5	37	21
06M6	mittlerer Keuper, salinar	368,6	37	4
06M7	unterer Keuper	4516,8	38	5
06M8	mittlerer Muschelkalk, salinar	997,7	33	3
06M9	Muschelkalk ungegliedert, karbonatisch-klastisch	6015,9	38	15
06P1	Metamorphite/Magmatite, sauer	0,7		2
06P2	Paläozoikum	0,5		1
06V1	tertiäre Vulkanite	24,3		3
06V2	Rotliegend-Vulkanite	56,3		1
07K1	Faltenmolasse	449,3	31	3
07M1	Helvetikum, Flysch	548,0	31	14
07M2	Kalkalpen, kalkig	1277,4	37	15

<b>ID HGC</b>	<b>Name Hydrogeochemische Einheit (HGC)</b>	<b>Flächen- größe [km<sup>2</sup>]</b>	<b>Anzahl Parameter (max. 39)</b>	<b>Anzahl HÜK200 Einheiten</b>
07M3	Kalkalpen, dolomitisch	1063,7	38	2
07M4	Kalkalpen, salinar	121,1	36	3
07M5	Alpiner Buntsandstein	6,2		1
07M6	Aroser Zone, Ultrahelvetikum und Feuerstätter Decke	52,6		1
08K1	quartäre Sande und Schluffe, silikatisch	120,0		1
08K2.1	quartäre Klastite	255,4	12	2
08K2.2	quartäre Klastite karbonatisch	2,6		1
08K3.1	quartäre Sande und Kiese	615,1	32	5
08K3.2	quartäre Sande und Kiese, karbonatisch	156,9		2
08K5	tertiäre Tone und Mergel (Mergeltertiär)	37,5		5
08K6	Mio-Pliozän, limnisch-fluviatil	4,0		2
08K7.1	tertiäre Sedimente	54,9		6
08K7.2	tertiäre Sedimente, silikatisch-organisch	15,8		3
08K8	tertiäre Tone	134,4		6
08M1	Oberkreide, karbonatisch	17,0		1
08M2	Oberkreide, silikatisch	45,9		3
08M3	Buntsandstein	223,8		2
08P1	Zechstein, vorwiegend sulfatisch/halitisch	98,4		3
08P10	paläozoische Karbonate	680,1	38	14
08P11	paläozoische Schiefer und Sandsteine	15847,5	30	25
08P12	paläozoische Schiefer, karbonatisch	2147,0	37	7
08P13	paläozoische Sandsteine und Quarzite	2093,2	42	7
08P14	paläozoische saure Ganggesteine	49,6		1
08P15	paläozoische saure Magmatite	180,0		2
08P16	paläozoische basische Magmatite	22,6		1
08P17	paläozoische Metamorphite	278,9		5
08P18	saure Plutonite	0,2		1
08P2	Rotliegend Klastite	3161,5	14	8
08P3	Rotliegend Sandsteine und Konglomerate	16,7		4
08P4	karbonische Sandsteine und Quarzite	193,1		3
08P5	karbonische Ton- bis Sandsteine	3886,7	44	12
08P6	karbonische Schiefer, karbonatisch	201,8		1
08P7	karbonische Karbonate	66,3		5
08P8	Ganggesteine des Karbon	2,6		1
08P9	karbonatische Schiefer	3,1		1
08V1	känozoische Basalte und Tuffe	1104,2	38	13
08V2	Rotliegend Vulkanite, sauer bis intermediär	253,2		3
08V3	Rotliegend Vulkanite, basisch bis intermediär	586,1		4
08V4	Vulkanite und Sedimentite des Rotliegend	22,9		2
08V5	paläozoische saure Vulkanite	108,5		2
08V6	paläozoische basische Vulkanite	55,3		2
08V7	saure Vulkanite	0,5		2
08V8	Metavulkanite	608,1	27	4

<b>ID HGC</b>	<b>Name Hydrogeochemische Einheit (HGC)</b>	<b>Flächen- größe [km<sup>2</sup>]</b>	<b>Anzahl Parameter (max. 39)</b>	<b>Anzahl HÜK200 Einheiten</b>
09K6.2	alttertiäre Kiese, Sande und Schluffe	135,0	8	2
09K6.3	Braunkohlentertiär Mitteldeutschland	105,7		6
09K6.4	jungtertiäre Kiese und Sande	13,7		2
09K6.5	Braunkohlentertiär Lausitz	30,1		1
09K7.1	quartäre Kiese und Sande, silikatisch	2215,6	29	25
09K7.2	quartäre Sande und Schluffe	369,9	28	1
09M2.1	Molasse, sedimentär (Oberkarbon und Rotliegend)	1010,9	28	9
09M3.1	Zechstein, karbonatisch	12,0	12	1
09M4.1	Buntsandstein, ungegliedert	5,8	28	2
09M5.1	Kreide, vorwiegend karbonatisch	284,7	28	9
09M5.2	Kreide, vorwiegend silikatisch	229,1	23	6
09P1.1	Paläozoikum ohne Perm schwach metamorph (Phyllite, Grauwacken, Tonschiefer)	5468,1	32	61
09P1.2	Metamorphite, karbonatisch	26,6	29	3
09P1.3	Metamorphite/Magmatite, sauer (Gneis, Glimmerschiefer, Granulit, Quarzit, Granit)	13894,8	37	72
09P1.4	Metamorphite/Magmatite, basisch (Metabasite, Diabas, Gabbro, Monzonit)	1317,6	34	28
09V2.2	Molasse, effusiv (Oberkarbon und Rotliegend)	801,9	27	30
09V6.1	tertiäre Vulkanite	99,9		5
10K1.1	quartäre Sande und Schluffe, karbonatisch	1,2		1
10K1.2	quartäre Sande, silikatisch	120,9		1
10K1.3	quartäre Kiese und Sande, silikatisch	5,6		1
10K1.4	quartäre Kiese und Sande, karbonatisch	40,8		1
10P1.1	basische und ultrabasische Silikatgesteine des kristallinen Grundgebirges/Kristallin	0,3		1
10P1.2	permische Sedimente	341,2	19	1
10P1.3	permische Vulkanite	15,8		1
10P1.4	sedimentäres Paläozoikum	51,7		1
10P2.1	saure bis intermediäre Silikatgesteine des Kristallinen Grundgebirges	2270,5	23	3
10P2.2	präkambrische bis paläozoische Metamorphite	1857,6	3	1
10P2.3	sedimentäres Paläozoikum	12,4		1
10P2.4	proterozoische bis präkambrische Metakarbonate	0,4		1
10V1.1	tertiäre Vulkanite	1,4		1
11G	Gewässer	322,4		1
11K1	Quartär, anthropogen (Tagebaubereiche)	501,8		2
11kA	nicht bewertet	177,5		47

\* HGC-Flächen in Großraum 1 basieren auf einer Ableitung aus den Hydrogeologischen Teilräumen