

Integration, Analyse und interaktive Visualisierung von Daten für das Risikomanagement großräumig kontaminierter Standorte

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

Vorgelegt der
Naturwissenschaftlichen Fakultät III der
Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg

Von Herrn
Tilman Steinmetz
Geboren am 26.11.1970 in Stuttgart

Gutachter:
1. Prof. Dr. P. Wycisk, Uni Halle
2. Prof. Dr. B. Meißner, TFH Berlin

Halle (Saale), 14. Dezember 2007

Abstract

In order to give sound advice for sustainable future land use in the surroundings of large scale groundwater contamination ecological and human health risk assessment are required. The process according to US EPA is discussed as well as the applicability to German setups. The complexity of such a risk assessment arises from the multitude of parameters and models involved. Underground geology, comprised of a large number of heterogeneous volumetric bodies of differing permeability and the resulting flow regime, land use data, juridical numbers as well as toxicological and exposition parameters have to be included. These data must be available to those working on the assessment in order to give them a comprehensive understanding of the coupled processes involved. Data manipulation comprises statistical analyses and (geostatistical) interpolation, storage in and querying from databases and analysis and visualization in interactive 3-dimensional model presentations. An exemplary risk assessment study in the context of human health and ecological risk assessment at the large scale groundwater contamination site of Bitterfeld-Wolfen is shown that uses the traditionally employed proprietary software tools. A system is presented, which comprises a geo information system (GIS) and spatial databases in a content management system framework with a web-based interface that can be used as a collaborative decision support system. This study forms the basis to demonstrate how an integration of these tools into an application server which runs in a content management system framework can streamline and optimize the workflow for the preparation of decision relevant risk assessment reports.

Kurzzusammenfassung

Um konkrete Handlungsempfehlungen für Entscheidungen zu geben, welche die zukünftige Landnutzung im Umfeld von großräumig kontaminiertem Grundwasser betreffen, ist eine human- und ökotoxikologische Risikoabschätzung erforderlich. Die Verfahrensweise bei einer solchen Risikoabschätzung nach den Verfahren der US-Umweltbehörde EPA wird beschrieben und erklärt. Es wird diskutiert, inwiefern das Verfahren und die Software Anwendung in Deutschland finden können. Die Komplexität einer solchen Risikoabschätzung erwächst aus der Vielzahl der beteiligten Parameter und Modelle, die dafür zu betrachten sind. Angefangen bei der Untergrundgeologie, bestehend aus einer großen Menge heterogen aufgebauter Volumenkörper unterschiedlicher Durchlässigkeit und dem sich darin einstellenden Strömungsregime, über Landnutzungsdaten, gesetzliche Vorgaben zu Qualitätszielen bis hin zu toxikologischen und Expositionsparametern werden unterschiedliche Wissensdomänen berührt. Diese Daten sollen in einer gekoppelten Darstellung dem Bearbeiter zur Verfügung gestellt werden, um ein umfassendes Prozeßverständnis zu gewinnen. Die Bearbeitung der Punkt-Meß-Daten umfasst die statistische Untersuchung und Regionalisierung mittels (geostatistischer) Interpolation, ihre Speicherung in Datenbanken sowie Analyse und Visualisierung in interaktiven, 3-dimensionalen Darstellungen. Am Beispiel der großräumigen Grundwasserkontamination im ehemaligen Chemiedreieck von Bitterfeld-Wolfen wird dargestellt, wie die Vorgehensweise bei der human- und ökotoxikologischen Risikoabschätzung ist und wie die bisher verwendeten separaten Software-Bestandteile diese unterstützen. Es wird ein System vorgestellt, welches die web-gestützte Zusammenarbeit zur Entscheidungsunterstützung bei der risikobasierten Beurteilung kontaminierter Standorte ermöglicht. Es integriert Geoinformationssysteme (GIS), Datenbanken und Anwendungen in ein Content Management Framework, welches als Applikationsserver dient. Schliesslich wird gezeigt, auf welche Weise der Arbeitsablauf durch Integration der Ausgangsdaten, Analysen und Ergebnisse in den Applikationsserver optimiert wird. Das Resultat ist eine vereinfachte und beschleunigte Bearbeitung bei der entscheidungsrelevanten Aufbereitung der komplexen Ausgangsdaten für ein besseres Gesamtverständnis der Risikosituation, die durch den vorgegebenen Workflow qualitätsgesichert ist.

Inhalt

1	EINFÜHRUNG	1
1.1	Vorwort	1
1.2	Aufgabenstellung	2
1.2.1	Entscheidungsunterstützung	3
1.2.2	Regionalisierung	3
1.2.3	Risikoabschätzung	4
1.2.4	Integriertes Informationssystem	5
1.2.5	Einbindung in Geodateninfrastrukturen und Schnittstellen	6
1.2.6	Vorangegangene Untersuchungen	7
1.3	Projekteinbindung	8
1.4	Aufbau der Arbeit	9
1.5	Gebietsbeschreibung	10
1.5.1	Projektgebiet	11
1.5.2	Geologie	12
1.5.3	Hydrogeologie	13
1.5.4	Schadstoffinventar	13
1.6	Methoden der Datenbearbeitung	16
1.6.1	Räumliche Explorative Datenanalyse	16
1.6.2	Regionalisierung durch Geostatistik	17
1.6.3	Methodenintegration zur Entscheidungsunterstützung	18
2	RISIKOABSCHÄTZUNG - „RISK ASSESSEMENT“ – RA	19
2.1	Motivation für RA an industriellen „megasites“	19
2.2	Anwendbarkeit im vorliegenden Projekt	20
2.3	Methoden und Definitionen	23
2.3.1	Ablaufschema	23
2.3.2	Definitionen	25
2.3.3	Risikoberechnung	33
2.3.4	Grenzwerte, Qualitätsziele, Risikomaße	38
2.4	Software	41
2.4.1	RBCA	44
2.4.2	RISC4	44
2.4.3	SADA	45

3	ENTSCHEIDUNGSUNTERSTÜTZUNGSSYSTEME	47
3.1	Anforderungen an DSS und Definition	47
3.2	Geschichte der DSS	49
3.3	DSS im Umweltschutz	49
3.4	Aufgaben von DSS im Umweltschutz	51
3.4.1	Risk Assessment	52
3.4.2	Workflow-Management	53
3.5	DSS System-Anforderungsprofil im vorliegenden Projekt	54
3.5.1	Fähigkeiten des Systems	55
3.5.2	Ausblick	56
4	DATEN, SOFTWARE UND METHODEN	57
4.1	Datenmanagement	57
4.1.1	Datenvorbereitung	58
4.1.2	Datenbanken	59
4.1.3	Formularbasierte Werkzeuge	62
4.1.4	Geo-Informationen-Systeme	63
4.2	Datenbeurteilung	66
4.2.1	Explorative Räumliche Datenanalyse	66
4.2.2	Regionalisierung/Interpolation	68
5	INTEGRIERTES DATENMANAGEMENT	81
5.1	Arbeitsablauf ohne Systemintegration	81
5.2	Integration durch das Content Management System	84
5.2.1	Plone/ZOPE	84
5.2.2	Workflow Management	90
5.2.3	PrimaGIS/Zmapserver	91
5.2.4	RStatServer / R	92
5.2.5	Analysendurchführung	94
6	ERGEBNISSE	96
6.1	Regionalisierung	96
6.1.1	Explorative Datenanalyse	96
6.1.2	Beschreibende Statistik	97
6.1.3	2D-Interpolation	97
6.1.4	Diskussion	98
6.1.5	3D-Interpolation	99
6.1.6	Diskussion	102
6.2	Risk Assessment	103

6.2.1	Expositionspfade	103
6.2.2	Vorgehensweise	105
6.2.3	Diskussion	111
6.2.4	Qualitätsziele	112
6.2.5	SADA	114
6.3	3D-Visualisierung	115
6.3.1	ArcScene	115
6.3.2	Google Earth	116
6.3.3	VRML	119
6.4	Systemintegration	120
6.4.1	Erfolg	120
6.4.2	Diskussion	121
7	SCHLUSSFOLGERUNGEN UND AUSBLICK	122
8	LITERATUR	126
9	ANHANG	141
9.1	Übersicht der verwendeten Daten	142
9.2	Tabellen	143
9.3	Beispiel-Bericht	146
9.4	Interpolationen	147
9.5	Skripte	150
10	BILDUNGSGANG	161
11	EIDESSTATTLICHE ERKLÄRUNG	162

API	Application Programming Interface
ArcMap	GIS-Produkt von ESRI
ATKIS	Amtliches Topographisch-Kartographisches Informations System
CAD	Computer Aided Design
CIR	Color Infra Red
CLARINET	Contaminated Land Rehabilitation Network for Environmental Decision Support
CMF	Content Management Framework
CMS	Content Management System
CORINE	Coordination of Information on the Environment
DSS	Decision Support Systems/ Entscheidungsunterstützungssystem(e)
ESRI	Environmental Spatial Research Institute
FreeBSD	Freies UNIX- ähnliches Betriebssystem
GIS	Geoinformationssystem
GMS	Groundwater Modeling System
GOK	Geländeoberkante
GUI	Graphical User Interface: grafische Benutzeroberfläche für Software
GWL	Grundwasserleiter
IELCR	individual excess lifetime cancer risk
INSPIRE	INfrastructure for SPatial InfoRmation in Europe–EU-Initiative zum Aufbau von Geodateninfrastrukturen
JRC	Joint Research Center
KML	Keyhole Markup Language- XML Dialekt zur Darst. von Geometrien in Google Earth
LAWA	Länderarbeitsgemeinschaft Wasser
LD	Lethale Dosis
LOEL	Lowest observed effect level
MAT	multi attribute analysis
MCA	multi criteria analysis
MCL	Maximum contaminant level
MODFLOW	Grundwassermodellierungssystem
MT3D	Modflow Preprocessor
NICOLE	Network for Industrially Contaminated Land in Europe
NOAEL	No observed adverse effect level
OGC	Open Geospatial Consortium
ORNL	Oak Ridge National Laboratory
PHP	PHP Hypertext Processor
Plone	Content Management System, basiert auf ZOPE
Postgis	Erweiterung für räumliche Daten in PostgreSQL
PostgreSQL	Ein freies Relationales Datenbanksystem (RDBMS)
Python	Freie Programmiersprache, Grundlage für ZOPE
RA	Risk Assessment: Risikoabschätzung
RAGS	Risk Assessment Guidance for Superfund
RAM	Risk Assessment Werkzeug der BP Oil AG
RBCA	Risk Based Corrective Action – Risikobasierte Sanierungsanweisung
RBSL	Risk Based Screening Level – risikobasierter Prüfwert
RDBMS	Relational Database Management System
RfC	Reference Concentration/Ref.-konz. zur Abschätz. Inhalativer n.-kanz. Risiken
RfD	Reference Dose/Referenzdosis zur Abschätzung nicht-kanz. Risiken
SADA	Spatial Analysis and Decision Assistance
SAFIRA	Sanierungsforschung in Regional Kontaminierten Aquiferen
SDE	Spatial Database Engine – ESRI's räuml. Erweiterung kommerzieller RDBMS, Aufgaben etwa entsprechend denen von Postgis
SF	Slope Factor (für kanzerogene Risikoanschätzung)
SOAP	<i>Simple Object Access Protocol</i> Netzprotokoll zum Zugriff auf Objekte und Anwendungen über ein Netzwerk
SRTM	Shuttle Radar Topography Mission
SSTL	Site specific target level (Sanierungszielwert)
UMN Mapserver	University of Minnesota Mapserver – gängigster freier Kartenserver mit OGC-konformer WFS-Server-Fähigkeit
US EPA	United States Environmental Protection Agency
Web Services	stellen ganz allgemein eine Schnittstelle zu Daten dar, die über das Internet zugänglich gemacht werden sollen (→ WMS, WFS, WCS, Metadatenservice)
WHO	World Health Organization (Weltgesundheitsorganisation)
WFS	Web Feature Service
WMS	Web Map Service
XML	Extensible Markup Language - Datenformat
ZOPE	Content Management System-Baukasten, programmiert in Python

1 Einführung

Dieses Kapitel umfasst folgende Punkte:

- Vorwort
- Aufgabenstellung
- Projekteinbindung
- Aufbau der Arbeit
- Gebietsbeschreibung
- Methoden der Datenbearbeitung

1.1 Vorwort

Die risikobasierte Untersuchung und Beurteilung einer regionalen Grundwasserkontamination basiert auf vielfältigen Daten, Modellen und Konzepten unterschiedlicher Wissensdomänen. Nur durch Kopplung dieser Modelle und Konzepte erreicht man ein integratives Untersuchungsschema und gewinnt ein umfassendes Prozeßverständnis. Und nur mit einem solch umfassenden Prozeßverständnis ist eine Handlungsempfehlung für die Landnutzungsplanung machbar. Interdisziplinäre Fragestellungen mit ihrer jeweiligen Problematik führen aber zu einem großen Aufkommen an Ausgangsdaten, Bearbeitungsschritten und Ergebnissen unterschiedlichster Art:

Im Hinblick auf die Planung zukünftiger Landnutzung kontaminierter Standorte ist eine Quantifizierung eventueller bestehender oder prognostizierter Gefährdungen von Mensch und Ökosystem durch die Kontamination notwendig. Die Quantitative Risikoabschätzung (QRA) als Methodik der Quantifizierung von gesundheitlichen Risiken durch Umweltbelastungen hat in den USA eine lange Tradition und erlangt nicht zuletzt durch entsprechende EU-Richtlinien und –Verordnungen auch in Deutschland seit etwa den 90er Jahren eine zunehmende Bedeutung im umweltbezogenen Gesundheitsschutz. Sie stellt damit ein wichtiges gesundheitspolitisches Instrument dar (MEKEL AT AL, 1997).

Die Vorstellungen über den Gebrauch der Quantitativen Risikoabschätzung variieren stark. Gründe dafür sind:

- nicht einheitliche Verwendung des Begriffs „Risiko“ in unterschiedlichen Kontexten (so werden auch z.B. in der Katastrophenforschung und in der Wirtschaft Prinzipien der Risikoabschätzung verwendet).
- mehrere Aufgaben, für die die Risikoabschätzung verwendet wird (z.B. bei der Beurteilung des Schädigungspotenzials neu zuzulassender Substanzen, oder auch bei der Herleitung der Maximalen Arbeitsplatzkonzentration für Stoffe, oder im Rahmen der Sanierungsplanung aufgrund BBodSchG/BBodSchV).

Daher ist es wichtig zu definieren, dass es in der vorliegenden Arbeit um die Gefährdung geht, die von Stoffen im Grundwasser für Mensch und aquatische Biozöten ausgeht. Mit spezieller Software soll diese Gefährdung abgeschätzt werden.

„Risikoabschätzungen sind Verfahren, mit deren Hilfe Schätzwerte für bestehende oder anzunehmende gesundheitliche Risiken auf naturwissenschaftlich-technischer Grundlage bei spezifischer Exposition gegenüber verschiedenen Verunreinigungen abgeleitet werden können.“ (NEUS ET AL., 1995)

Zur Aussage über die flächenhaften Stoffbelastungen bzw. deren Verbleib oder Abbau- und Transportprozesse und Risikoabschätzung werden insbesondere Regionalisierungsmethodik, Expositionsmodelle und (bestehende) Ausbreitungsmodelle eingesetzt. Zur Regionalisierung werden mit geostatistischen Vorhersageverfahren 2- oder 3-dimensionale Interpolationen der Stoffbelastungen innerhalb der unterschiedlichen Aquifere durchgeführt: Für die dreidimensionale Interpolation wird als Variable der geologische Aufbau aus einem dreidimensionalen Modell der Untergrundgeologie benötigt. Durch die Verwendung von Grundwasser-Modellierungsergebnissen (WYCISK, NEUMANN, GOSEL 2005 - Bahnlinien) ist über eine Abschätzung der Schadstoffausbreitung eine prognostische Gefährdungsabschätzung durchführbar. Die Ergebnisse der Regionalisierung und Modellierung werden für die Risikoabschätzung verwendet.

Die vorliegende Arbeit stellt ein Konzept und verschiedene Software vor, mit deren Hilfe die komplexen Bearbeitungsschritte bei der Regionalisierung und der Risikoabschätzung harmonisiert werden. Am Beispiel der Grundwasserkontamination von Bitterfeld-Wolfen werden diese Bearbeitungsschritte durchgeführt. Für die Datenhaltung und Datenabfrage sowie deren Präsentation u.a. durch 3D-Visualisierung werden unterschiedliche Softwaresysteme gezeigt und ein speziell programmiertes Web-Portal vorgestellt. In diesem Portal findet eine Integration der Ausgangsdaten, Analysen und Ergebnisse statt. Nach entsprechender Autorisierung können Nutzer auf bestimmte Bereiche des Portals zugreifen und Ergebnisse einsehen oder Untersuchungen durchführen, Berichte erstellen und Ergebnisse mit anderen Bearbeitern zusammen von verteilten Arbeitsplätzen aus nutzen.

Letztendlich leistet das Portal als Content Management System (CMS) auf diese Weise Entscheidungsunterstützung bei der risikobasierten Bearbeitung eines Standortes mit regionaler Grundwasserkontamination, indem es zur Generierung, Speicherung und Präsentation von Materialien dient, die die Handlungsalternativen beim Risikomanagement verdeutlichen.

1.2 Aufgabenstellung

- Entscheidungsunterstützung
- Regionalisierung
- Risikoabschätzung
- Integriertes Informationssystem
- Einbindung in Geodateninfrastrukturen
- Vorangegangene Untersuchungen

Die vorliegende Arbeit präsentiert ein webgestütztes Content-Management-System mit WebGIS und Datenbanken zur Unterstützung der Zusammenarbeit und Entscheidungsfindung bei der risikobasierten Charakterisierung einer regionalen Chemielast im Grundwasser.

Das System dient einer Vereinheitlichung, Vereinfachung und Beschleunigung der Durchführung von Daten-Analysen, Daten-Regionalisierung und Datenverarbeitung zur Risikoabschätzung sowie der Speicherung, Abfrage und Präsentation der jeweiligen Ergebnisse durch ein Web-Portal mit angeschlossenen Datenbanken und Analyse- sowie Visualisierungssystemen.

Automatisiert erstellte Berichte werden im Content-Management-System gespeichert. Durch die gesammelten Berichte und die Möglichkeit, räumlich bezogene Daten in räumlichen Datenbanken und Bezugssystemen zu speichern und in interaktiven Karten darzustellen, sowie deren Attributdaten abzufragen und zu visualisieren, ergibt das Portal ein Wissensmanagementsystem, das der Entscheidungsunterstützung im Zusammenhang mit der Landnutzungsplanung dient.

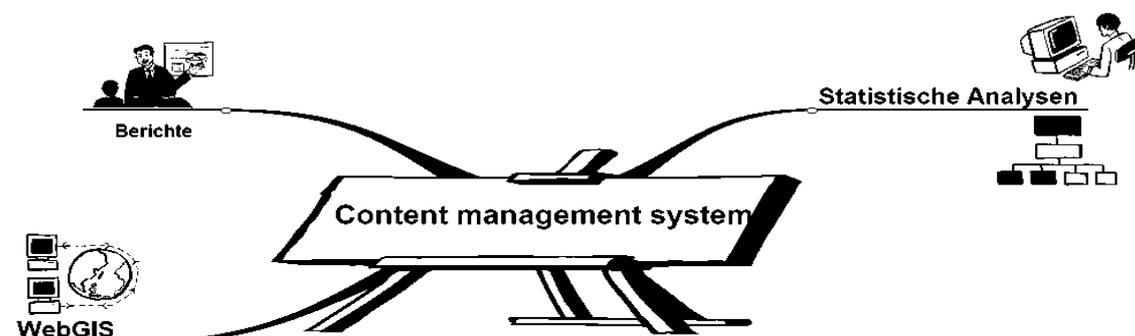


Abb. 1: Skizze Content Management System und WebGIS, Berichte und Analysen

Es wird hier beispielhaft für die Analyse und entscheidungsrelevante Aufbereitung der großräumigen Grundwasserkontamination im Umfeld der ehemaligen Großchemie von Bitterfeld und Wolfen (HARTMANN & GUHRA 1992) verwendet. Zur Darstellung der Vorgehensweise werden die Methoden der Datenvorbereitung, Datenhaltung, flächenhaften Interpolation der Stoffgehalte innerhalb der Aquifere sowie die Gefahrenabschätzung detailliert dargestellt.

Grundlage der Entscheidungsunterstützung sind Aussagen über lokal zu erwartende Gesundheits- oder Umweltrisiken, die auf einer Risikoabschätzung basieren. Für Risikoabschätzung wird häufig die Methode des Biomonitoring eingesetzt, um ein

bestehendes Risiko zu charakterisieren. Im Gegensatz dazu werden in der vorliegenden Arbeit *modellierte Szenarien* dazu verwendet, um Aussagen über die Größe bestehender oder zu erwartender gesundheitlicher oder von Umweltrisiken zu machen.

Zu den dazu durchgeführten Untersuchungen gehört zunächst die Identifikation einer Gefährdung. Die modellierten Szenarien bauen ausser auf die Expositionsabschätzung über Transferpfad, Expositionsdauer und –menge und toxikologische Kenngrößen wie Dosis-Wirkungsabschätzungen, auf einfache Ausbreitungsmodelle für das Grundwasser und die Umgebungsluft auf. Als Eingangsgrößen für die Ausbreitungsmodellierung dienen hier mittels geostatistischen Interpolationsverfahren regionalisierte Schadstoffdarstellungen, die aus punkthaft gewonnenen Grundwassermessungen flächenhaft vorhergesagt werden.

Die folgende kurze Beschreibung dient der Erklärung des Gebrauchs der zentralen Begriffe „Entscheidungsunterstützung“, „Regionalisierung“, „Risikoabschätzung“ und „Integriertes Informationssystem“ in der vorliegenden Arbeit und in welchem Zusammenhang sie stehen. Genauere Definitionen folgen in den Kapiteln 1.6 (Methoden der Datenbearbeitung) und 2 (Risikoabschätzung - „Risk Assessment“ – RA).

1.2.1 Entscheidungsunterstützung

Inhaltlich gehören zur Entscheidungsunterstützung die Möglichkeiten der Gefahrenabschätzung und –bewertung im Hinblick auf verbleibende Grundwasserkontaminationen sowie evtl. zu planende Sanierungs- oder Sicherungsmaßnahmen und die Landnutzung.

Konkret geht es um die Beantwortung der folgenden Fragen:

- Wo und in welcher Höhe liegen Kontaminationen des Grundwassers vor?
- Wo fehlen zur Beantwortung dieser Frage Messungen bzw. Messstellen?
- Welche Folgen sind von dieser Kontamination zu erwarten?
 - Kommen Schutzgüter damit in Kontakt? Wie? Wann?
 - Werden Schutzgüter gefährdet? Über welche Pfade?
 - Welche Landgefährdung geht davon aus?
 - Wie sicher sind diese Prognosen? - Welche Unsicherheiten gibt es?

Flächenscharfe und ortskonkrete Aussagen über Konzentration und Strömungsverhalten von Grundwasserkontaminationen sowie deren allgemeine Eigenschaften wie physiko-chemische Parameter und Toxizitäten ermöglichen durch Verschneidung mit der aktuellen oder prognostizierten Landnutzung, Plausibilitätsprüfungen der Nutzung vorzunehmen und umweltrelevante Planungsoptionen zu untersuchen und darzustellen. Damit verdeutlicht das vorgestellte System dem Planer die möglichen Handlungs- und Planungsoptionen aus umwelt- und ökotoxikologischer Sicht. Dabei müssen Kosten und Nutzen im Sinne gesamtgesellschaftlicher, ökonomischer, ökologischer und sozialer Bilanzierung abgewogen werden (JUNG ET AL. 2000).

1.2.2 Regionalisierung

Den Ausgangspunkt der Arbeit bilden Mess-Daten der Kontaminationshöhen im Grundwasser aus einem über 10 Jahre währenden Monitoringprogramm des ökologischen Großprojektes Bitterfeld-Wolfen und des Landkreises Bitterfeld. Die über diesen Zeitraum gewonnenen Daten organischer und anorganischer Schadstoffe im Wasser sollen mithilfe von Regionalisierungsverfahren (RICHTER 2004) und räumlicher Darstellung in 3D-Informationssystemen (SULLIVAN ET AL. 2000A, SULLIVAN ET AL. 2000B) flächenhaft korrekt und verortet visualisiert werden. Erkenntnisse zur regionalen Verbreitung von

Grundwasserkontamination aus den vorangegangenen, abgeschlossenen Projekten *SAFIRA* (WYCISK ET AL. 2003, THIEKEN 2001) und *SAFIRA II* (WYCISK ET AL., 2005) fließen ein. Zudem werden stoffspezifische Verhaltensweisen wie Mobilität bzw. Persistenz und Bioakkumulierbarkeit mitbetrachtet.

Die Ergebnisse weiterer Projekte sind zusätzlich als Eingangsdaten zu berücksichtigen. Dabei handelt es sich um das detaillierte 3D-Modell der Untergrundgeologie aus vorangegangenen Untersuchungen (FABRITIUS 2002, WOLLMANN 2004, HUBERT 2005). Dieses beinhaltet ca. 40 Einzelschichten, deren Eingangsdaten häufig als Beiprodukte der Grundwassererkundung im oben erwähnten Monitoring entstanden sind, daneben die Oberflächengeologie (HEROLD 2003) und die Grundwasserströmung (WYCISK ET AL. 2004, NEEF 2004, WYCISK, NEUMANN & GOSSEL 2005). Der geologische Untergrund wird bei der regionalisierten Schadstoffinterpolation für die Abgrenzung der Grundwasserleiter verwendet.

Hinzu kommt die Darstellung der Landnutzung mit Orthofotos, CIR- oder ATKIS-Landnutzungsdaten.

Damit erhält man eine regionalisierte, flächendifferenzierte, landnutzungsbezogene Aussage über die Grundwasserbelastung und stoff- oder stoffgruppenspezifische Gefährdung, dargestellt in einem Geoinformationssystem (GIS).

1.2.3 Risikoabschätzung

Mit den Ergebnissen der Regionalisierung erfolgt die Risikoabschätzung. Dabei geht es darum, die möglichen Gesundheits- oder Umweltbeeinträchtigungen für die Schutzgüter Mensch bzw. Umwelt im Untersuchungsraum festzustellen bzw. zu quantifizieren, die von der zusätzlichen Belastung durch die Kontamination ausgehen. Quantitative Risikoabschätzung (QRA) bietet für das gesundheitspolitische Handeln rationale Entscheidungshilfen an, die transparent und überprüfbar sind, und trägt damit zu einer Versachlichung der Umweltdiskussion bei (MEKEL ET AL. 1997B). Dazu wird die tatsächliche bzw. die zu erwartende mögliche Exposition der Rezipienten an den Schadstoffen erfasst bzw. prognostiziert. In Verbindung mit humantoxikologischen Kenngrößen erfolgt durch die Gegenüberstellung mit Vergleichswerten eine Risikocharakterisierung.

Diese Charakterisierung kann bei der Auswahl von Alternativen für die zukünftige Landnutzung oder ggf. für die Priorisierung von Sanierungsprojekten verwendet werden. Durch die Kombination mit Landnutzungsplanung (bzw. tentativ: –prognose) entsteht als Ergebnis ein System, mit dem eine Entscheidungsunterstützung für schutzgutbezogenes Risikomanagement im Hinblick auf die zukünftige Landnutzung im Untersuchungsgebiet möglich ist. Hierfür muss eine Interpolation bzw. Extrapolation auch der zukünftig prognostizierten Datenlage unter Berücksichtigung der Grundwasserströmung versucht werden.

Für die Stoffauswahl werden eine Bewertungsmatrix zur öko- und humantoxikologischen Gefährlichkeit der gemessenen Stoffe, die auf Persistenz, Bioakkumulierbarkeit und Toxizität beruht (WYCISK ET AL. 2004), und für die quantitative Risikoabschätzung dedizierte Risikoabschätzungsmodelle und -software zur Hilfe genommen.

1.2.4 Integriertes Informationssystem

1.2.4.1 Inhalte

Die vorgestellten Daten, Software, Regionalisierungs-Methoden und Resultate in einem integrierten Informationssystem zu vereinigen, bildet das nachgestellte Ziel und das Ergebnis der Arbeit (Abb. 2).

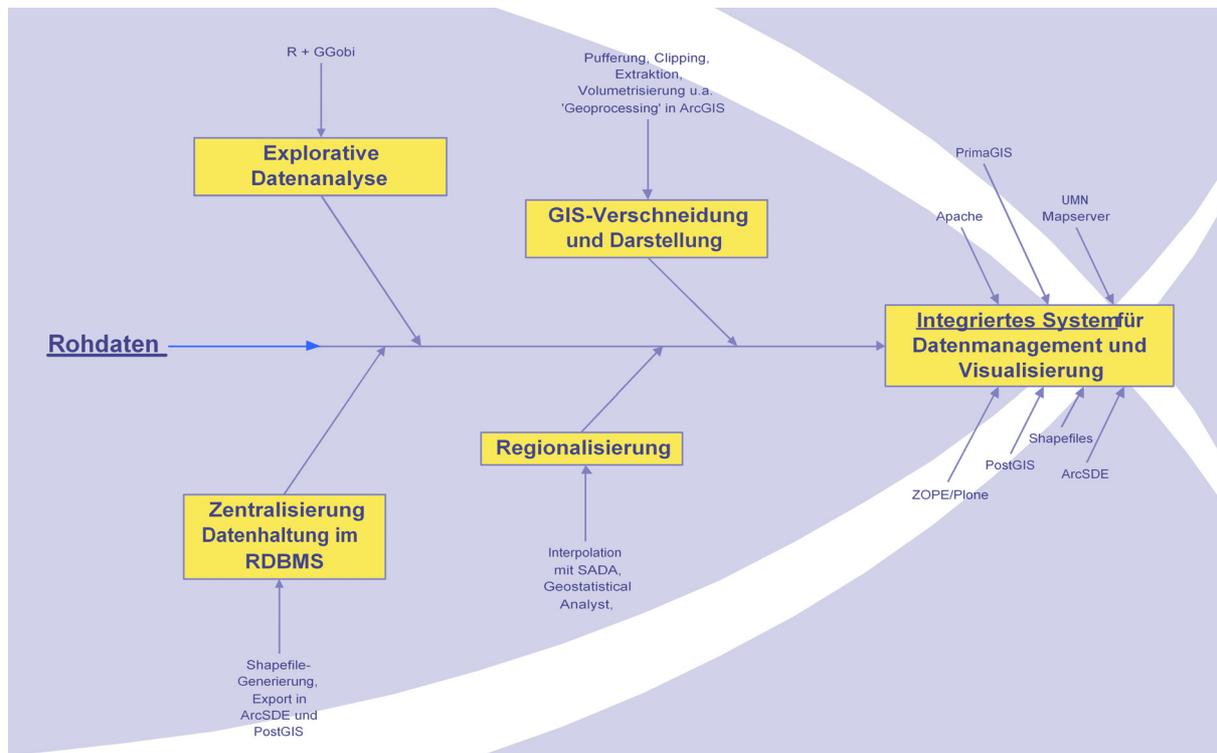


Abb. 2: Flußdiagramm zu verwendeten Daten, Software, Verfahren und Methoden

Neben der Definition der regionalen Grundwasserkontamination mit als prioritär bestimmten Stoffen im Bereich Bitterfeld-Wolfen sowie der strukturierten Analyse ihrer räumlichen Verbreitung mittels geostatistischer Methoden dient dieses System zur Darstellung und Beurteilung umweltrelevanter Daten, sozioökonomischer und ggf. normativ-legislativer Aspekte in Karten. Außerdem gilt es der Unsicherheit gerecht zu werden, indem auf Ungenauigkeiten oder Unsicherheiten der Daten hingewiesen wird, oder (bei den geostatistischen Interpolationen) ein Versuch der Quantifizierung der Unsicherheit vorgenommen wird.

1.2.4.2 Aufbau

Die Ausgangsdaten für statistische Analysen und geostatistische Interpolation sind in einer relationalen Datenbank gespeichert, oder liegen im Dateisystem des Servers vor. Die genannten Analysen und Interpolationen können benutzergesteuert durchgeführt und Berichte erstellt werden. Dabei entstehen neue Daten, die ebenfalls im Informationssystem gespeichert werden und für weitere Analysen zur Verfügung stehen. Gegebenenfalls werden Exportschnittstellen für Austauschdateien bereitgestellt. Die so erzeugten Dateien werden in externe Programme importiert, deren Ausgabe z.B. räumliche Visualisierung als VRML-Datei im Portalsystem gespeichert wird.

Zusammen wird dadurch eine Informationsgrundlage geschaffen, mit deren Hilfe Handlungsalternativen bei der Landnutzungsplanung aufgezeigt werden. Implementiert wird das System als Portallösung für das WWW. Es handelt sich um ein zweiteiliges Konzept: ein dem Nutzer über einen Webbrowser zugängliches „Frontend“ als Benutzerschnittstelle und das Backend aus verteilten GIS, Datenbanken, Applikations- und Webserver. Das Frontend des Systems ist über das Internet zugänglich (<http://umwelt.geologie.uni-halle.de>), die Ausgangsdaten sowie die Auswertungsfunktion sind aus datennutzungsrechtlichen Gründen aber auf die Benutzung in der *Intranet*-Domain der Uni Halle beschränkt.

1.2.4.3 Ziele

Das System ist im Kontext der Bestrebungen zum Aufbau umfassender Netzwerke und Geodateninfrastrukturen zu sehen. Neben den Zielen der Stoffregionalisierung und –bewertung für die Risikoabschätzung hat die vorliegende Arbeit also das zweite Hauptziel der Vermittlung der gewonnenen Erkenntnisse durch die Erstellung eines netzgestützten Entscheidungsunterstützungssystems (DSS / *decision support system*) als Mittel zur Risikobeurteilung und Risikokommunikation.

Es wird der Versuch unternommen, durch Strukturierung und Aufschlüsselung der Informationen bzw. Prozesse die der Systemsoftware zugrundeliegende Komplexität benutzerfreundlich zu gestalten. Eine Vielzahl unterschiedlicher Daten, Modelle und Bewertungsansätze muss einfließen und zugleich nachvollziehbar, reproduzierbar und korrekt bleiben. Dadurch sollen Entscheider und Bearbeiter die Möglichkeit erhalten unter Berücksichtigung der ihnen zugedachten Daten und unter Ausschluss störender Komplexität besser informierte – und daher im Hinblick auf Nutzen und Kosten bessere – Entscheidungen zu treffen. Als webgestütztes System ermöglicht es die effektive Kommunikation der Informationen und Erkenntnisse und mittels netzgestützter Zusammenarbeit die Erfassung, Dokumentation, Diskussion und Analyse sowie Weitergabe neuer Ergebnisse.

1.2.5 Einbindung in Geodateninfrastrukturen und Schnittstellen

Räumlich referenzierte Daten oder *Geodaten* werden heute in vielen Fachbereichen produziert und verwaltet. In auffälligem Kontrast zu ihrem praktisch allgegenwärtigen Auftreten steht die Tatsache, dass viele Einrichtungen wie Gemeinden, Länder, Bund, Universitäten und die Privatwirtschaft etc. ihre Daten separat von den Daten anderer Einrichtungen erzeugen bzw. erwerben, halten und analysieren. Redundante Daten sind jedoch teuer und schwierig miteinander in Einklang zu bringen. Häufig ist es kompliziert oder sogar unmöglich die erforderlichen Daten zeitnah aufzufinden. Dem Wunsch nach mehr verfügbaren Geodaten für mehr Anwendungen muss also die Integration der Daten mittels geeigneter Methoden entsprechen können. Im Wesentlichen ist dies ein Problem der Schnittstellen der verwendeten unterschiedlichen informationstechnischen Systeme (technische Interoperabilität) aber auch ein Problem der „menschlichen“ Schnittstellen, wenn unterschiedliche Wissensdomänen modelliert, verstanden, dokumentiert und integriert werden sollen (semantische Interoperabilität).

Folgerichtig ist daher, das genannte System in ein physisches Netzwerk vorhandener Geodaten einzubinden, bzw. sich solch vorhandene Geodaten zugänglich zu machen, indem man sie in dieses System integriert. Der Arbeitskreis Umweltdatenbanken (GI 2005) im Fachbereich Umweltinformatik der deutschen Gesellschaft für Informatik *GI* schreibt dazu vor dem Hintergrund der INSPIRE-Initiative (EU 2005):

Zur Beantwortung zahlreicher Fragestellungen in behördlichen, betrieblichen und wissenschaftlichen Umweltinformationssystemen sind umfangreiche Datenbestände erforderlich. Diese weisen in der Regel einen räumlichen, zeitlichen und fachlichen Bezug auf. Im einfachsten Fall werden sämtliche zur Beantwortung einer Fragestellung relevanten Daten einheitlich in einem Datenbanksystem verwaltet, häufig sind jedoch Informationen aus mehreren Quellen miteinander zu verknüpfen und mit weiteren Methoden zu bearbeiten. Vor diesem Hintergrund ergeben sich für Umweltdatenbanken und damit zugleich auch für den Arbeitskreis Umweltdatenbanken zwei Themenkomplexe:

Durch welche Techniken und Methoden sind Umweltdaten in einzelnen Datenbanksystemen adäquat zu unterstützen?

Wie ist das Zusammenspiel unterschiedlicher Umweltdatenbanken zur Beantwortung weitergehender Fragestellungen zu organisieren?

Die Verbindung separat vorliegender Geodaten über eine gemeinsame Schnittstelle, z.B. ein Portal wird Geodateninfrastruktur genannt. Eine solche kann z.B. die räumliche Suche in den Geodaten über eine GIS-Schnittstelle bieten oder auch die Suche in den Attribut- oder Metadaten. Eine aktuelle und anerkannte Methodik Geodateninfrastrukturen aufzubauen, liegt in der Verwendung von Web Services (Webdiensten). Webdienste vereinigen heterogene Anwendungen in Portalen durch standardisierte Schnittstellen. Dazu gehören Webkartendienste (Web Map Services), Web Feature Services und Katalogdienste zur Verwaltung der zugehörigen Metadaten (Web Catalogue Service). Das vorgestellte System integriert OGC (*open geospatial consortium*) -konforme Web Map Services, Web Feature Service und den (nicht standardisierten) internetgestützten Anwendungsdienst (web application service) RStatServer (WARNES 2004), in welchem in der Statistiksprache *R* (IHAKA & GENTLEMAN 1996) programmierte Skripte als statistisches Analytik- und Visualisierungswerkzeug browserbasierte Datenanalyse ermöglicht (STEINMETZ 2005, STEINMETZ 2006) mit Datenbanken und Literatursammlungen, Hyperlinks etc. eingebettet in ein Content-Management-System.

Am Beispiel des vorgestellten Systems sollen Möglichkeiten der Integration in eine bestehende Geodateninfrastruktur aufgezeigt werden, und wo nötig, auf ihre Beschränkungen hingewiesen werden. Schwierigkeiten macht die softwaretechnische Harmonisierung der heterogenen Ausgangsdaten, wie überhaupt die Handhabung von Information aus unterschiedlichen Disziplinen. Es kommen GIS und Datenbanken mit geostatistischen Interpolations-Methoden zum Einsatz.

Neben den statistisch-geostatistischen Auswertefunktionen durch *R* und dessen Erweiterung durch Software-Bibliotheken und die OGC-Web Services, die alle letztlich der Erstellung von thematischen Karten dienen, stellt das System Export-Schnittstellen zu den externen Auswerte-Programmen her. Dadurch wird die Weiterverarbeitung mit spezialisierten Funktionen erleichtert und beschleunigt. Das kommt der Konsistenz der Daten zugute, wenn mit Daten gearbeitet werden muss, deren Inhalte sich von Analyse zu Analyse verändern. Daten können in passenden Formaten für SADA, MVS und RBCA exportiert werden.

1.2.6 Vorangegangene Untersuchungen

Die Regionalisierungsaspekt in der vorliegenden Arbeit steht thematisch in der Folge der Arbeit von THIEKEN (2001): „Schadstoffmuster in der regionalen Grundwasserkontamination der mitteldeutschen Industrie- und Bergbauregion Bitterfeld-Wolfen“, in der jedoch die Verwendung geostatistischer Methodik zur Charakterisierung der Verbreitung der Kontamination im Projektgebiet bewusst ausgeklammert und stattdessen nur eine lokale Charakterisierung und ein messpunktbezogenes Ranking (THIEKEN & KÖHNE 2001) durchgeführt worden war. Die mit der geostatistischen Bearbeitung verbundenen Aussageunsicherheiten werden diskutiert und quantifiziert, und es wird versucht, durch eine

vorangestellte ausgiebige Daten-Analyse deren korrekte Anwendung soweit möglich und sinnvoll sicherzustellen (s. z.B. SAITO & GOOVAERTS 2000, SAISANA ET AL. (2004), CLARK 1979, CLARK 1996, BARABAS ET AL. (2001), THAYER ET AL. 2003).

Im Projekt *SAFIRA* gewonnene Erkenntnisse werden integriert und auf ihnen aufbauend weiterführende Untersuchungen durchgeführt. Auch durch den Projektrahmen ist hier die Verwandtschaft gegeben: Während die genannte Arbeit von THIEKEN (2001) im Rahmen des Projektes *SAFIRA Sanierungsforschung in Regional Kontaminierten Aquiferen: Bewertungsansätze zur Raumauswirkung* entstand, fand ein Großteil der Untersuchungen für die vorliegende Arbeit während der Projektlaufzeit von dessen Nachfolgeprojekt *SAFIRA II* (Teilprojekt „Raumauswirkungen“: *„Beurteilung der Langzeitwirkung von verbleibenden Grundwasserbelastungen und ihre Auswirkungen auf die Schutzgüter und die Landnutzung im Raum Bitterfeld-Wolfen“*, WYCISK ET AL. (2005)) statt.

Für den Aspekt „Informations- und Analysesystem zur Gefährdungsbeurteilung der Grundwasserkontamination am Beispiel Bitterfeld-Wolfen“ ist dem Autor keine vorherige Bearbeitung bekannt. In welchem Kontext die Arbeit zu sehen ist, beschreibt der folgende Abschnitt.

1.3 Projekteinbindung

Das im Projekt *SAFIRA* entwickelte detaillierte geologische Raummodell sollte eine Grundlage zur Entwicklung von Bewertungsrahmen für die Implementierung von Sanierungsverfahren schaffen. Das Ergebnis waren neue Kenntnisse über die komplexe Architektur des geologischen Untergrundes bzw. die Zusammensetzung der Grundwasserleiter und die darin vorhandenen Kontaminationsverteilungen. Darauf aufbauend war im *SAFIRA-II*-Projekt das Ziel, für Einzelstoffe oder Stoffgruppen die stoffspezifischen raumbezogenen Wirkungen unter Berücksichtigung der Landnutzung und der sich daraus ergebenden Sensitivitäten in der Region Bitterfeld-Wolfen zu untersuchen.

Die in dieser Arbeit vorgestellten Methoden zur Regionalisierung und Bewertung sind Teil des Vorhabens und beinhalten die beispielhaft durchgeführte integrierte standortabhängige Analyse und Visualisierung der Daten. Das BMBF stellte finanzielle Förderung im Rahmen von *SAFIRA* (Teil-Projekt 1.1: *„Entwicklung modellhafter Bewertungsansätze zur Raumauswirkung von Sanierungsvorhaben“*, Förderkennzeichen: 02WT0023) bzw. *SAFIRA II* (*„Beurteilung der Langzeitwirkungen von verbleibenden Grundwasserbelastungen und ihre Auswirkungen auf die Schutzgüter und die Landnutzung im Raum Bitterfeld-Wolfen“*, Förderkennzeichen: 02WT00412) zur Verfügung. Diese Projekte wurden außerdem durch die Landesanstalt für Altlastenfreistellung *LAF* und das Land Sachsen-Anhalt mit finanziert.

Das Hochwasser an der Elbe im August 2002 und die Folgen für die Überschwemmung im Landkreis Bitterfeld und die vorzeitige Flutung des Tagebaurestlochs Goitsche sowie die daraus resultierende großräumige Änderung des Grundwasserströmungsregimes führten zur Initiierung des *Ad-Hoc Hochwasser Projekts*, als dessen Ergebnis die von der Umweltgeologie an der Uni Halle durchgeführte Modellierung der GW-Strömung (GOSSEL 2005) ins Projekt eingeht, vor deren Hintergrund die Auswirkung der GW-Kontamination betrachtet wird. Daten zum Stoffverhalten und zum Stoffabbau in zwei Referenzräumen, d.h. Teilgebieten des aktuellen Untersuchungsgebiets wurden in einem parallel in der Arbeitsgruppe durchgeführten Teilprojekt gewonnen. Daten und Methoden aller genannten Projekte wurden in der vorliegenden Arbeit verwendet und in das Informationssystem integriert.

1.4 Aufbau der Arbeit

Gemäß der beschriebenen Themen gliedert sich die vorliegende Arbeit wie folgt:

1. Im ersten Kapitel folgt, um den Kontext der Arbeit zu verdeutlichen, einer *Einführung* in die geologisch-hydrogeologischen Gegebenheiten des beispielhaft bearbeiteten Gebiets und des *Schadstoffinventars* eine kurze Übersicht über die *Bearbeitungsansätze* mit räumlicher explorativer Datenanalyse und geostatistischer Methodik und deren wechselseitiger Integration. Die *Regionalisierung* der Eingangsdaten zur Grundwasserbelastungssituation und die notwendigen Vorarbeiten einschließlich der zugrunde liegenden Theorie geostatistischer Vorhersage werden beschrieben.
2. Kapitel 2 beschreibt das Verfahren der Risikoabschätzung und –charakterisierung, die auf die regionalisierten Daten aufbaut, und schließt mit einer Vorstellung der dafür angewendeten Software.
3. Im dritten Teil werden erst allgemein Entscheidungsunterstützungssysteme eingeführt und dann die Erfordernisse im Umweltschutz allgemein und besonders im vorliegenden Projekt erläutert. Durch Verschneidung mit Landnutzung, geologischer Untergrundstruktur und Grundwasserströmungslinien bilden die regionalisierten Daten im vorliegenden Projekt die Grundlage für die Vorstellung der *Konzeption eines integrierten Entscheidungsunterstützungssystems*, dessen allgemeine Voraussetzungen in diesem Kapitel beschrieben werden.
4. Teil 4 stellt detailliert die *vorliegenden Daten* vor und beschreibt die verwendeten methodischen Schritte zu ihrer Bearbeitung
5. Die nächsten Kapitel der Arbeit widmen sich dem konkreten *Aufbau des integrierten Systems* bzw. der Darstellung der *Ergebnisse der Regionalisierung und der Risikoabschätzung und -bewertung*.
6. Die abschließenden Kapitel bieten *Schlussfolgerungen und Ausblick*.

1.5 Gebietsbeschreibung

- Projektgebiet
- Geologie
- Hydrogeologie
- Schadstoffinventar

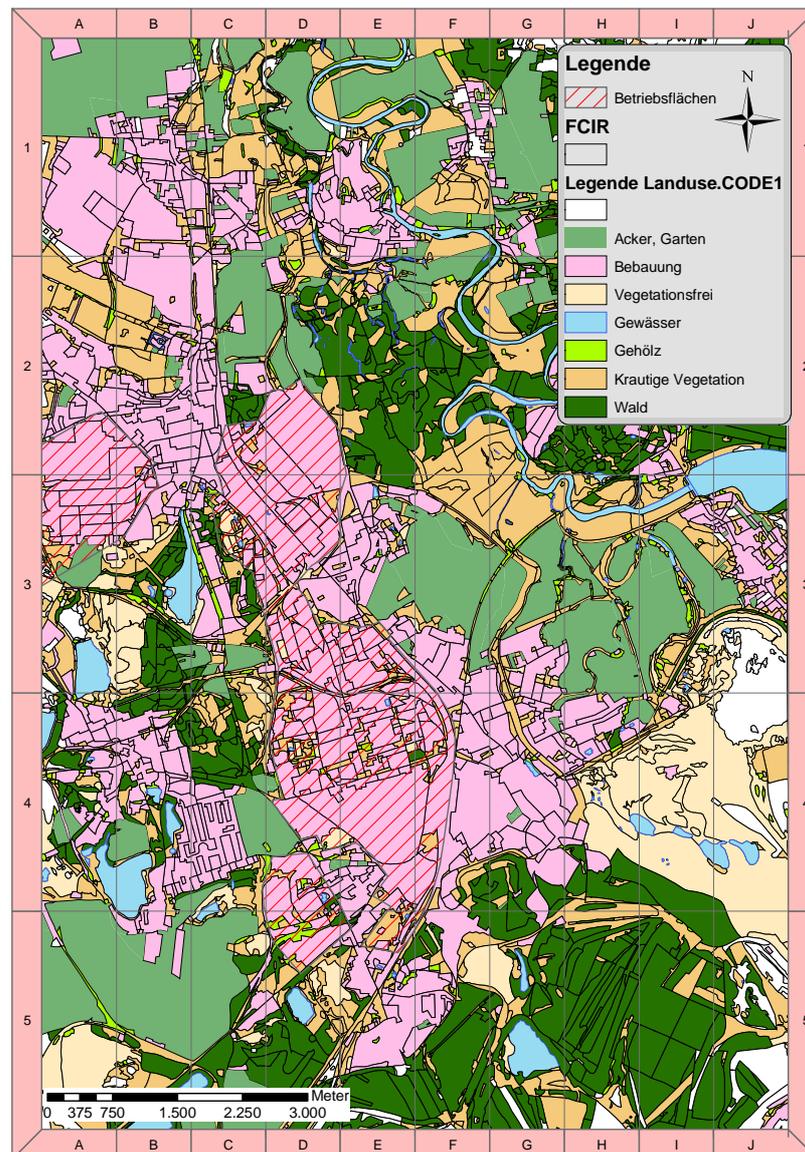


Abb. 3: Das Untersuchungsgebiet und die vorliegende Landnutzung (CIR-Daten). Die Verzahnung der Bebauung mit den Betriebsflächen (Schraffur) ist gut zu erkennen. Rechts in der Mitte der Auslass des Muldestausees in die Mulde, welche die nordöstliche Begrenzung des Untersuchungsgebiets und den Hauptvorfluter darstellt. Der Goitsche-Stausee (südlich davon) ist noch nicht in aktuellem Ausmaß gezeigt. *Quelle: Eigene Darstellung.*

1.5.2 Geologie

KRAPP & RUSKE (1992) beschreiben die Geologie der grundwasserrelevanten Schichten des untersuchten Gebietes sinngemäß wie folgt:

Das Grundgebirge bildet in einer Tiefe ab etwa 80-100 m eine mehrere tausend Meter mächtige Abfolge von *Sand- und Tonsteinen* sowie *Porphyre*, die vor über 100 Mio. Jahren abgelagert wurden. Nur in der Umgebung von Muldenstein bilden sie inselartig herausragende Erhebungen und stehen im Muldetal und bei Zörbig als Porphyre an. Darauf lagern, häufig diskordant, *Lockergesteins-Abfolgen des Tertiärs*, in welche die *Braunkohlenflöze* eingelagert sind, die hier später abgebaut wurden. Das zuunterst liegende Flöz Bruckdorf ist nur stellenweise vorhanden und wird von 15-20 m mächtigen Sanden überlagert, welche ein weiteres Flöz, das Flöz Gröbers, nach oben hin abschließt, über dem der einer Transgression folgende 10-20 cm mächtige *Rupelton* lagert. Dieser ist großflächig in 50-60 m Tiefe vorhanden und bildet als Grundwasserstauer den für die Betrachtung der Grundwasserkontamination wichtigen Abschluß der untersuchten Grundwasserleiter zu den darunterliegenden Schichten. Darüber folgen 20-30 m feinkörnigen *Bitterfelder Glimmersandes*, der relativ homogen im gesamten Landkreis Bitterfeld in 20-40 m angetroffen wird. Abschließend folgen die über Jahrzehnte industriell wichtigsten zwei *Bitterfelder Braunkohlenflöze* im Wechsel mit Tonlagen, die im östlichen Gebietsteil nach oben hin durch den Decktonkomplex komplettiert werden, dessen Abbau die Basis für die Bitterfelder Steinzeug- und Klinkerindustrie bildete (s.Abb. 5: Geologischer Schnitt durch den Nordteil des Untersuchungsgebietes).

Hangend folgen diesen tertiären Ablagerungen die Schichten des *Quartärs*. Sie lassen sich drei großen Bereichen zuordnen: *fluviatil, glazial und äolisch*. Erstere bilden die alt- und jungpleistozänen Schotter der Mulde (sowie der Elster und Saale), die flächendeckend westlich des Muldetals als sogenannte *Hauptterrasse* auftreten und die jüngeren *Flusskiese* der Mulde, die das heutige Muldetal ausfüllen bzw. diese als *Talsande* begleiten. Unter den glazial gebildeten Ablagerungen sind die Geschiebemergel (Elster- und Saaleeiszeit) und Sande wichtig, wobei letztere mit ersteren in Wechsellagerung stehen oder sie überlagern. Des weiteren treten diese Sande in rinnenartigen Strukturen, die zum Teil 50-70 m tief sind und auch die Braunkohlen durchschneiden, auf. Als äolische Bildungen sind jungpleistozäne Geschiebedecksande, Sandlöß und Löß bis zu 3 m Mächtigkeit überall außerhalb der Flusstäler zu finden, die zur Bildung fruchtbarer Böden beitragen.

Die originale Schichtenfolge ist komplett und ungestört nur noch unter der Stadt Bitterfeld, Teilen der Chemie AG und in dünnen Sicherheitspfeilern der Straßen erhalten. In den bergbaulich bearbeiteten Gebieten sind die Schichten oft bis zur Basis des Bitterfelder Flözhorizontes

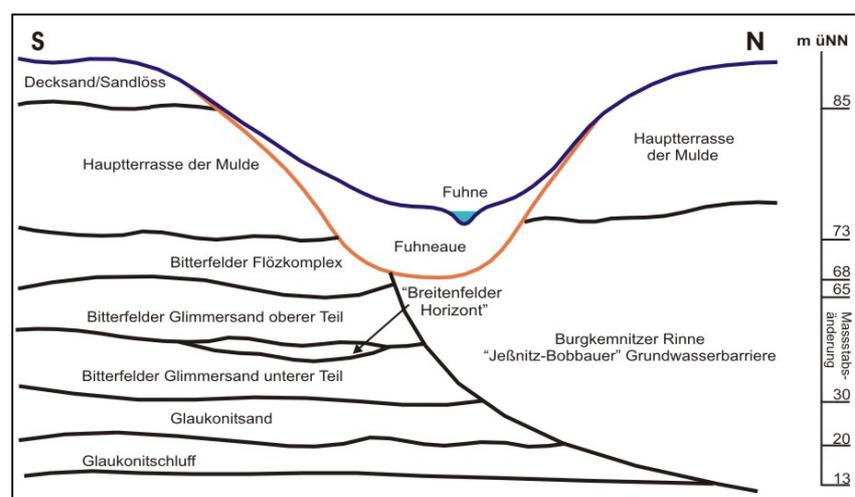


Abb. 5: Geologischer Schnitt durch den Nordteil des Untersuchungsgebietes. (Quelle: SAFIRA II- Abschlussbericht des BMBF-Projektes, FKZ: 02WT0412: WYCISK ET AL., 2005)

abgetragen und anschließend mit Kippsubstraten aufgefüllt worden. Die durch den Abbau entstandenen Fehlmengen zeigen sich als Tagebaurestlöcher („Vergissmeinnicht“, „Deutsche Grube“, „Theodor“, „Freiheit I“ und Tagebau „Goitsche“) (s. Abb. 4: Karte der Deponien, Kippen und Betriebsflächen).

1.5.3 Hydrogeologie

Durch die Abtragung oberflächennaher Grundwasserstauer und das Entfernen des Bitterfelder Decktonkomplexes an vielen Stellen stehen die – ursprünglich voneinander getrennten – Grundwasserstockwerke im Quartär und die im tertiären Glimmersand zirkulierenden Wässer in direktem Kontakt miteinander.

„Eine Betrachtung der oberen Grundwasserleiter ohne Berücksichtigung der Glimmersande ist demzufolge ebenso falsch wie die Bewertung der Glimmersande ohne Beachtung der jüngeren Schichten und ohne die Bewertung der vom Bergbau geschaffenen Kippen. Diese Kippen werden aus einem unregelmäßig verstorzten Gemenge aus Sanden, Tonen und Kiesen aufgebaut, die als schlechter inhomogener Grundwasserleiter zu betrachten sind. In ihnen hat sich, wie zahlreiche Pegel beweisen, ein Grundwasserspiegel eingestellt. Diese Kippenablagerungen liegen den Glimmersanden direkt auf und müssen hydrogeologisch gemeinsam betrachtet werden (...) Untersuchungen zum Wasserpfad bei Kontaminationsverdacht müssen grundsätzlich den Grundwasserleiter der Glimmersande einschließen (...) (KRAPP & RUSKE 1992).

Durch jahrzehntelange Sumpfungsmaßnahmen passte sich das Grundwasserströmungsregime den jeweiligen Bedingungen der Tagebaue an. Dabei handelte es sich im wesentlichen um eine sukzessive ‚Wanderung‘ der tagebaulichen Aktivität im Gegen-Uhrzeigersinn rund um die Stadt Bitterfeld und in ihrer Folge die entgegengerichtete Sumpfung und daraus resultierende Verschleppung der Kontamination (GOSSEL, pers. Mitteilung). Nach der Stilllegung der bergbaulichen Tätigkeit und der allmählichen Verringerung bzw. Stilllegung der Pumpleistung kann sich nun wieder ein natürliches Grundwasserströmungsregime einstellen. War zunächst durch allmähliche Flutung der Tagebaurestlöcher Mulde und Goitsche geplant, diesen Vorgang zu steuern, wurde durch das Hochwasser der Elbe 2002 und den Rückstau über die Mulde und die resultierende Überschwemmung des Untersuchungsgebiets, eine plötzliche Niveaueinstellung erzwungen. Aus dieser resultiert ein Grundwasserspiegel, dessen Hauptströmungsverhalten wie folgt zu charakterisieren ist: Im Süden des Gebietes hat sich der vorher vorwiegend nach Osten gerichtete Teil der Strömung einer inzwischen überwiegend nordöstlichen Strömung angepasst. Im nördlichen Teil des Untersuchungsgebiets fließt ein Hauptteil des Grundwassers nord-nordöstlich auf die Vorfluter Fuhne und Mulde zu.

Bei der Darstellung der Regionalisierung kommt die Situation als Modellierung von Bahnlinien vor dem Hochwasser zur Anwendung, da vorausgesetzt wird, dass diese Abflusssituation aufgrund ihrer langen Wirksamkeit für die Ausbreitung der Schadstoffe in der heutigen Situation die höchste Relevanz hat.

1.5.4 Schadstoffinventar

Eine Vielzahl von Einzelstoffen aus unterschiedlichen Stoffgruppen, darunter BTEX, Chlorbenzene, LHKW, PAK, DDT und HCH sind im Monitoring gemessen worden und neben den physikochemischen Parametern Leitfähigkeit, Temperatur und pH-Wert in der Datenbank enthalten. Daraus ergibt sich ein nahezu unüberschaubarer Parameter- und Messdatenumfang. Nur eine Auswahl dieser Parameter konnte im Projekt untersucht werden. Anorganische Parameter sind zahlreich gemessen worden, davon ging aber nur Chlorid zur Untersuchung. Zur Charakterisierung der Grundwasserkontamination und zur Optimierung des zu untersuchenden Parameterkatalogs für zukünftige Untersuchungen waren die in Tab. 1

gezeigten Kontaminations-Relevanz-Profile erstellt worden (THIEKEN 2001, THIEKEN & NIESSEN 2001).

Tab. 1: Kontaminationsprofile der als prioritär bestimmten Stoffe im GWL100 und GWL500 (Datensatz 9198M, Bewertungsgrundsätze nach KERNDORFF et al. 1993) und die Erwähnung der Stoffe in der EU-Wasserrahmenrichtlinie (WRRL) bzw. in der Liste der Oberflächengewässerqualitätsziele des Landes Sachsen-Anhalt (OGewQZVO) (THIEKEN 2001, ergänzt. *Quelle:* SAFIRA II- Abschlussbericht des BMBF-Projektes, FKZ: 02WT0412, WYCISK ET AL. 2005).

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

X Stoff in WRRL bzw. Liste der Oberflächengewässerqualitätsziele des Landes Sachsen-Anhalt verzeichnet.
 - Stoff nicht in WRRL bzw. Liste der Oberflächengewässerqualitätsziele des Landes Sachsen-Anhalt verzeichnet
 Zusätzliche Stoffe aus den Kontaminationsprofilen der GWL 100 und GWL 500, die nicht im Mittleren Kontaminationsprofil vertreten sind.

Dazu waren prioritäre Kontaminanten zunächst aufgrund ihrer Nachweishäufigkeit und nachgewiesenen Konzentrationen identifiziert worden, wobei auf eine Vorauswahl prioritärer Stoffe aus der Arbeit von THIEKEN (2001) zugegriffen werden konnte. Eine Aufgabe in der genannten Arbeit hatte darin bestanden, durch statistische Faktorenanalyse redundante Information zu eliminieren, bzw. den für die Untersuchung des Gebiets mit repräsentativen Stoffen notwendigen Parameterrumfang zu reduzieren. Stoffspezifische Bewertungszahlen nach KERNDORFF ET AL. (1993) errechnen sich aus den Kontaminationskriterien Emissionsnachweishäufigkeit und mittlere Emissionskonzentration gemäß der grundsätzlichen Überlegung, dass diejenigen Kontaminanten für den Austragspfad Grundwasser am schwerwiegendsten sind, die sowohl häufig als auch in hohen Konzentrationen im Grundwasser vorhanden sind. Diese Stoffe wurden für das SAFIRA II-Projekt zudem hinsichtlich ihrer Persistenz, Bioakkumulierbarkeit und Toxizität einem modifizierten Rankingverfahren unterzogen (WYCISK ET AL. 2005). Zuletzt fand ein Abgleich mit den Oberflächengewässerqualitätszielen des Landes Sachsen-Anhalt statt und es wurde geprüft, ob ein Stoff Erwähnung in der EU-Wasserrahmenrichtlinie findet.

Tab. 2 schließlich enthält die Gesamtliste der für das vorliegende Projekt ausgewählten und bearbeiteten Stoffe, einschließlich der zusätzlichen 8 Parameter, die als für aromatische und aliphatische Chlorkohlenwasserstoffe und Benzole repräsentativ zur Verwendung kommen.

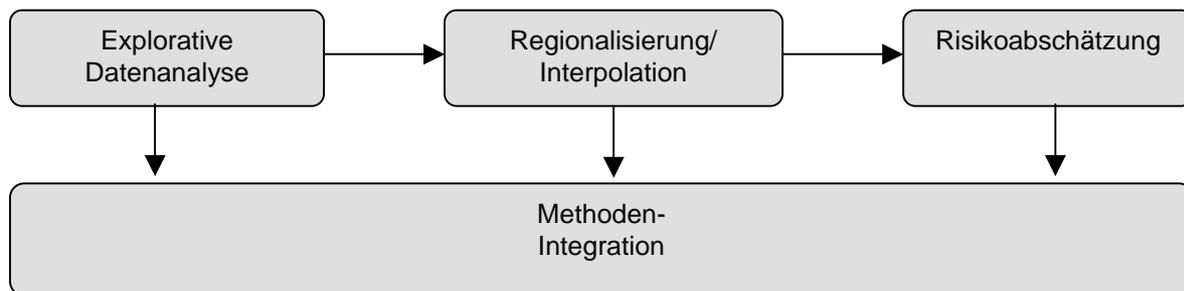
So wurden in der vorliegenden Arbeit neben Pentachlorphenol, Tetra- und Trichlorethen, 1,2-DCA und Vinylchlorid, auch Hexachlorbenzen, Monochlorbenzen und Benzen selbst betrachtet. Des Weiteren wurden die Hexachlorcyclohexan- Isomere alpha-, beta-, gamma-, und delta-HCH und die Summe der HCHs untersucht. Daneben wurden Leitfähigkeit und pH-Wert, Wassertemperatur und die anorganischen Ionen Sulfat und Chlorid in Karten dargestellt. Eine Tabelle mit den in Literatur verfügbaren physikochemischen Eigenschaften und Toxizitätsmaßen der betrachteten Stoffe findet sich im Anhang.

Tab. 2 Gesamtliste der in der vorliegenden Arbeit untersuchten Parameter.

Parameter	Kurzbezeichnung
Wasser-Temperatur	TW
Delta Wasser-Temperatur	DeltaTW
Leitfähigkeit	LF
Alpha-Hexachlorcyclohexan	a-HCH
Beta-Hexachlorcyclohexan	b-HCH
Gamma-Hexachlorcyclohexan	g-HCH
Delta-Hexachlorcyclohexan	d-HCH
HCH-Summe	s-HCH
Pentachlorphenol	PCP
Tetrachlorethen	PCE
Trichlorethen	TCE
1,2-Dichlorethan	1,2-DCA
Benzen	Benzen
Vinylchlorid	VC
Monochlorbenzen	MCB
Hexachlorbenzen	HCB

1.6 Methoden der Datenbearbeitung

Entsprechend der eingangs erwähnten Methodik wird eine Risikoabschätzung durchgeführt, die auf regionalisierten Werten aufbaut. Der Regionalisierung geht ihrerseits eine explorative Datenanalyse voraus. Die Struktur dieses Kapitels folgt daher der Methodik der Datenbearbeitung bis zur Methoden-Integration und erläutert in den folgenden Abschnitten deren Grundlagen, die in Kapitel 3.5 zur Integration aller Methoden in ein Gesamtsystem zur Anwendung kommen:



Eingehende *explorative räumliche Datenanalyse* (ESDA) muss der Interpolation stofflicher Verteilungen vorangehen, um einerseits die Struktur der ausgewerteten Daten zu verstehen und um andererseits die Richtigkeit der Anwendung geostatistischer Interpolationsmethodik sicherzustellen.

Methoden der *Geostatistik* werden verwendet, um eine regionalisierte, flächenhafte Vorhersage der Verteilung gemessener Stoffe im Untersuchungsraum zu ermöglichen. Geostatistik (bzw.: Geo-Stochastik) basiert auf bedingten Wahrscheinlichkeiten, also dem Vorliegen räumlicher Korrelation zwischen Variablen, bzw. Autokorrelation innerhalb der Gesamtheit von Werten einer gemessenen Variable.

Schließlich werden Methoden und Technologien zur möglichst weitgehenden *Integration* der vorgestellten Verfahren in Software und Arbeitsabläufe vorgestellt, die eine Beschleunigung, Vervollständigung und damit insgesamt eine Verbesserung bei der routinemäßigen Untersuchung und Bewertung regionaler Kontamination ermöglicht.

Eine ausführliche Beschreibung der Definitionen, Methoden und Ergebnisgrößen der *Risikoabschätzung oder Gefährdungsabschätzung* (Risk Assessment) folgt in Kapitel 2.

1.6.1 Räumliche Explorative Datenanalyse

Die Schwierigkeit bei der Bewertung von Messwerten kontaminierten Grundwassers ergibt sich aus der Natur solcher Messungen selbst: Ein häufig angetroffenes Phänomen sind Messwerte, die unterhalb der Nachweisgrenze liegen („zensorierte Werte“). Die Tatsache, dass ein Messdetektor ein Signal liefert, gibt in diesem Fall keinen eindeutigen Aufschluss darüber, ob man Signal oder Rauschen misst. Verschiedene Ansätze zur Lösung sind möglich, von denen in der vorliegenden Arbeit unter anderem der folgende angenommen worden ist: Werte unterhalb der Nachweisgrenze werden willkürlich durch den halbierten Wert der Nachweisgrenze ersetzt. Dadurch erhält man für die vorliegenden Parameter viele sehr niedrige Werte, die zu einer stark rechtsschiefen Verteilung führen. Alternativ könnte die Nachweisgrenze selbst als Wert eingesetzt werden, oder man betrachtet zunächst die Verteilung der Messwerte und passt die Verteilung der Werte unterhalb der Nachweisgrenze

daran an (MILLARD 2001). Schliesslich wäre auch das Weglassen dieser Werte eine Möglichkeit.

Wie in der klassischen Statistik, so muss auch bei geostatistischen Untersuchungen der eigentlichen Methodik eine Analyse der zugrundeliegenden Daten hinsichtlich ihrer Eigenschaften vorangehen. Anders als bei der klassischen explorativen Datenanalyse werden hierbei auch die Verteilung der Punkte im Raum und ihre Beziehungen untereinander in Betracht gezogen. Daraus ergeben sich, wie in Kapitel 4.2.2.1 gezeigt, Erkenntnisse über ihre Repräsentativität für die gemessene Größe am Ort der Messung.

1.6.2 Regionalisierung durch Geostatistik

Probleme bei der Erstellung von Karten für Stoffverteilungen aus Messungen ergeben sich aus der Messnetzkonfiguration, also z.B. einer zu geringen Anzahl Messpunkte sowie aus deren räumlicher Verteilung und den Messdaten selbst. Eine glatte bzw. *geglättete* Oberfläche, wie sie von deterministischen Verfahren erzeugt wird, kann nicht vorausgesetzt werden, ebenso wenig kann man großmaßstäbige Trends ausschließen. Zusätzliche Probleme erwachsen aus nicht normalverteilten Messwerten und bevorzugter Messung an Stellen mit vermuteter hoher oder niedriger Konzentration, im Gegensatz zu einer z.B. künstlich generierten Messstellenverteilung.

Die genannten Daten sollen zur Risikoabschätzung und für das Risikomanagement im Projektgebiet verwendet werden. Viele der Daten liegen aber nur lokal („geclustert“) vor und sollen repräsentativ für weitaus größere Räume zur Vorhersage von Kontamination und Risiko verwendet werden. THIEKEN (2001) weist auf die methodischen Schwierigkeiten bei der Anwendung geostatistischer Interpolationsmethoden hin: Insbesondere bei der Darstellung von Stoffverteilungen im Grundwasser besteht eine Schwierigkeit darin die Interpolationsroutine dergestalt anzupassen, dass die Grundwasserströmungsrichtung bei der Variogrammerstellung (im Fall von Kriging) berücksichtigt wird, da andernfalls künstliche Verbreitungs- bzw. Ausbreitungsmuster vorgetäuscht werden können, die der Realität nicht gerecht werden (BURGER & SCHAFMEISTER 2000).

Eine weitere Schwierigkeit bei der statistischen Struktur-Analyse organischer Parameter besteht darin, dass die statistische Verteilung der Gesamtheit der gemessenen Proben dieser Stoffe häufig nicht normal verteilt ist (Gauß-Verteilung), sondern rechtsschief und die Stoffe unterhalb einer Nachweisgrenze zensuriert. Beide Phänomene erschweren die Interpolation mit geostatistischen Methoden. Außerdem wird bei der Interpolation mittels Kriging von Stationarität der Messwerte über das Gesamtgebiet ausgegangen, was bei (mehr oder weniger) erratic verteilt Eintragungspunkten für Chemikalien zumindest nicht der Fall sein *muss*. Daher erscheint es ratsam, die Daten zunächst hinsichtlich ihrer Eignung bzw. Repräsentativität zu untersuchen.

Dies geschieht für die Messdaten der Kontamination aus dem Monitoringprogramm mit Methoden der explorativen Datenanalyse, beschreibenden Statistik sowie der Variographie. Diese ist Voraussetzung für die Interpolation und soll gleichzeitig dem besseren Verständnis bei der Interpretation der aus ihr gewonnenen Interpolationen dienen. Die zur explorativen Datenanalyse verwendeten Methoden bzw. Werkzeuge werden in Kapitel 4.2.1 erläutert.

Interpolation durch geostatistische Methodik hat gegenüber anderen Interpolationsmethoden den Vorteil, dass der Raumbezug der Messpunkte direkt in die Interpolation eingeht und daher zu besseren Ergebnissen führt. Zudem wird für jeden interpolierten Punkt ein Fehlerwert (*Kriging-Standard-Fehler*) errechnet, der z.B. dazu dienen kann, die Standorte für

mögliche neue Punkte im Messpunktnetz zu optimieren. Man erkaufte dies mit einem deutlich erhöhten Rechenaufwand und höheren Anforderungen an den Untersuchenden bezüglich der Parametrisierung. In Kapitel 4.2.2 (Regionalisierung/Interpolation) wird untersucht und dargestellt, inwiefern geostatistische Methodik für den vorliegenden Fall anwendbar ist. Häufig setzt Interpolationssoftware eine kontinuierliche und „glatte“ Oberfläche voraus. Dies mag für topographische Oberflächen und Grundwasserdruckspiegelhöhen adäquat sein, nicht jedoch für Kontaminationshöhen. Trends und nicht normal verteilte Daten können Interpolationsalgorithmen behindern bzw., wenn sie nicht vor der Interpolation untersucht, bemerkt und interpretiert bzw. eliminiert werden, zu falschen Ergebnissen führen. Die Verteilung der Messpunkte und ihre Anzahl spielt eine große Rolle für die Ergebnisse der Interpolation.

1.6.3 Methodenintegration zur Entscheidungsunterstützung

Zentralisierte Datenhaltung, explorative räumliche Datenanalyse, geostatistische Interpolation und landnutzungsbezogene Risikoabschätzung und -bewertung erfordern jeweils aufwändige Datenvorbereitung, häufig unterschiedliche Softwarepakete und immer Expertenwissen. Die einzelnen Ergebnisse müssen vor ihrer Weiterverwendung in unterschiedliche Datenformate transformiert werden.

Aus diesen Schwierigkeiten bei der Durchführung und Zusammenführung der vorgenannten Methoden ergibt sich der Wunsch nach Integration. Im Projekt MELINDA am Forschungszentrum Karlsruhe heißt es dazu:

Die Einzelergebnisse einer Standorterkundung oder die Einzeldaten eines Monitoring-Systems müssen zu einem Gesamtmodell der Altlast zusammengefügt werden, um das Gesamtverhalten zu verstehen, zu beurteilen und die zukünftige Weiterentwicklung prognostizieren zu können. Für dieses „Puzzelspiel“ stehen informationstechnische Werkzeuge zur Verfügung, um die Arbeit zu erleichtern: CAD- und GIS-Systeme, geologische Modellierungssysteme, spezielle Simulationssysteme, Systeme zur Messdaten-Visualisierung, Datenbanken und Standard-Bürosysteme. Zusammen decken sie alle Einzelaspekte der Modellbildung ab, das Gesamtmodell des Standortes existiert dann aber lediglich in den Köpfen der Bearbeiter bzw. als Ordnersammlung mit unterschiedlichsten Unterlagen. [...] Es fehlt ein leicht bedienbares, kostengünstiges, integriertes System zur problemorientierten Bearbeitung, Visualisierung und Dokumentation aller Daten eines Altlasten- oder Deponie-Standortes.

(<http://www.iai.fzk.de/projekte/geoinf/Melinda/StateOfTheArt.htm>, Zugriff am 30.8.06)

In Kapitel 5 (Integriertes Datenmanagement) wird ein System prinzipiell vorgestellt, welches die geforderte Integration –wenigstens in Teilen– im Sinne eines Entscheidungsunterstützungssystems aufzeigt.

Im Kapitel 6 werden die Ergebnisse der Methodik gezeigt und erläutert, inwiefern sie von einer integrierten Bearbeitung profitieren. Des Weiteren wird gezeigt, welche zusätzlichen neuen Möglichkeiten das vorgestellte System bietet und inwiefern diese neue, integrierte Datenhaltung, -analyse und -bewertung die bisher geforderten Arbeitsabläufe erfüllen oder erweitern.

2 Risikoabschätzung - „Risk Assessment“ – RA

Dieses Kapitel umfasst folgende Punkte:

- Motivation für das Risk Assessment an industriellen „megasites“
- Anwendbarkeit im vorliegenden Projekt
- Methoden und Definitionen
- Software

2.1 Motivation für RA an industriellen „megasites“

Verfahren zur Ermittlung des Handlungsbedarfs an Sanierungsfällen, die auf der Bewertung durch einfachen *Vergleich eines Messwertes im Grundwasser mit einem Qualitätsziel* beruhen, versagen bei einer großräumigen Kontamination wie in Bitterfeld/Wolfen. Es ist weder möglich, einzelne Schadstoffquellen eindeutig auszumachen oder zuzuordnen, noch ist es vernünftig oder machbar, die Sanierung bis zur Wiederherstellung eines nicht anthropogen verursachten Hintergrundwertes zu fordern. PETER ET AL. (1995) sprechen in Bitterfeld sogar vom Grundwasser selbst als eigenständigem Schadstoffherd.

Bei Kontaminationen dieser Größenordnung ist daher die Rede von „megasites“ oder auch „industrial megasites“ (WYCISK ET AL. 2003A,E). Im Europäischen Raum werden zum Beispiel die industriell genutzten Häfen von Amsterdam bzw. Rotterdam und die Industrie-Gegend von Tarnowskie Gory in Polen dazu gezählt.

Im Gegensatz zu den oben genannten Verfahren verfolgen *risikobasierte, standortangepasste Verfahren* daher einen anderen Ansatz:

Gerade unter dem Grundsatz der Verhältnismäßigkeit für solche Sanierungsvorhaben spielt der monetäre Ansatz nach Bewertung der Erreichbarkeit vorbestimmter Sanierungszielwerte eine Hauptrolle. Die EU-WRRL fordert das Erreichen eines „guten Zustands“ für Wasserkörper. GABNER ET AL. (2003) erwähnen folgende Ausnahmen von der Sanierungspflicht aus Art. 4 Abs. 1 b (ii) WRRL (EU-Wasserrahmenrichtlinie) und geben zu bedenken, dass alle drei Voraussetzungen für Bitterfeld Gültigkeit haben dürften:

„Die Mitgliedsstaaten können die 15-jährige Frist – (zur Erreichung des guten Zustandes der Gewässer laut EU-WRRL, *Anm. d. Autors*) – verlängern, wenn innerhalb dieses Zeitraums

- die Sanierung technisch nicht durchführbar wäre,
- die Sanierung unverhältnismäßig hohe Kosten verursachen würde oder
- die technischen Gegebenheiten keine rechtzeitige Verbesserung des Wasserkörpers zuließen.

Außerdem können die Mitgliedsstaaten Abstriche bei den Umweltzielen nach Art. 4 Abs. 5 WRRL vornehmen und deshalb weniger strenge Sanierungsziele festlegen, wenn

- das Grundwasser durch menschliche Tätigkeiten so stark beeinträchtigt ist, dass das Erreichen dieser Ziele (d.h. des guten Zustands) in der Praxis nicht möglich oder unverhältnismäßig teuer wäre,
- keine andere „Umweltoption“ zur Verfügung steht, die nicht mit unverhältnismäßig hohen Kosten verbunden ist und mit der die Ziele erreicht werden könnten,
- die geringst möglichen Veränderungen des guten Grundwasserzustands erfolgen

- keine weitere Verschlechterung des Zustands des betreffenden Wasserkörpers eintritt
- und die weniger strengen Umweltziele und die Gründe hierfür in dem Bewirtschaftungsplan im einzelnen dargelegt und die Ziele alle sechs Jahre überprüft werden.

Die Autoren weisen außerdem darauf hin, dass durch diese Anforderungen die Sanierungszielwerte vor allem anderen auch einen präventiven Aspekt bekommen, da – wenn sonst keine Sanierungsoption besteht – das Ziel darin zu sehen sein muss, die Kontamination an einer weiteren Ausbreitung zu hindern.

Insgesamt sehen GABNER ET AL. (2003) den Ansatz der WRRL bei großräumigen GW-Kontaminationen insofern als hilfreich an,

„als das Entscheidungsverfahren eine Grundlage in einer übergreifenden Planung haben soll, in die alle wasserwirtschaftlichen Belange eingeflossen sind. Dies erhöht die Chancen, für den einzelnen Sanierungsfall nachvollziehbare Entscheidungskriterien entwickeln zu können und erleichtert so den Entscheidungsträgern ihre Aufgabe.“

Die risikobasierte Bewertung von Grundwasserschadensfällen stellt insofern eine anders gelagerte Methodik dar. Ziel ist es hier, ausgehend von Annahmen und Planungen zum Zustand und zukünftigen Zustand der Kontamination und der Landnutzung konkrete Voraussetzungen und Empfehlungen zum zu erwartenden Risiko bzw. Handlungsbedarf zu machen.

2.2 Anwendbarkeit im vorliegenden Projekt

Beschreibungen von Risikoabschätzung finden sich in der deutschsprachigen Literatur gehäuft etwa seit den 1990er-Jahren. Eine Auswahl dieser Schriften ist wie folgt: APPEL (1990), WAHRENDORF & BECHER (1990), WICHMANN (1990), WICHMANN & IHME (1991) FÜLGRAFF (1993), KONIETZKA UND DIETER (1994), PROTOSCHILL-KREBS (1994), STUBENRAUCH ET AL. (1994A, B, C), SUCHENWIRTH & PRINZ (1994), DIETER (1995) und SAGUNSKI (1995). Das *Umwelt Mensch Schadstoff-Verfahren (UMS)* von DOETSCH ET AL. (1994) wurde als Prototyp-Software implementiert. Neuere Studien und Betrachtungen zu den Begrifflichkeiten im deutschsprachigen Raum liegen z.B. erst mit MEKEL ET AL. 1997A, MEKEL ET AL. 1997B, JUNG ET AL. 2000, KAHL 2003, KAHL & TIMM 2003, GUNDERT-REMY 2003, HEINEMEYER 2003, JUNG 2003, MEKEL ET AL. 2004, NEUMANN 2006A, NEUMANN 2006B, NEUMANN 2006C vor.

Häufige Verwendung findet Risikoabschätzung bei der Einschätzung von Chemikaliensicherheit, z.B. beim Umgang mit Altstoffen oder der Neuzulassung von Substanzen, auch z.B. Pflanzenschutzmitteln. Im Zusammenhang mit entsprechenden EU-Richtlinien (EU-Rats-Altstoffverordnung 793/93, Richtlinie 93/67/EWG) müssen auch in Deutschland entsprechende Abschätzungen durchgeführt werden. Zu den deutschen Fachgremien und Institutionen, die solche Bewertungen durchführen oder in der Vergangenheit durchgeführt haben, gehören z.B. das Beratergremium für umweltrelevante Altstoffe der Gesellschaft Deutscher Chemiker im Umweltbundesamt, die Deutsche Forschungsgemeinschaft, die Kommission zur „Bewertung wassergefährdender Stoffe“ und die LAGA (Länderarbeitsgemeinschaft Abfall). Hierbei geht es *hauptsächlich* um die *Dosis-Wirkungsabschätzung*.

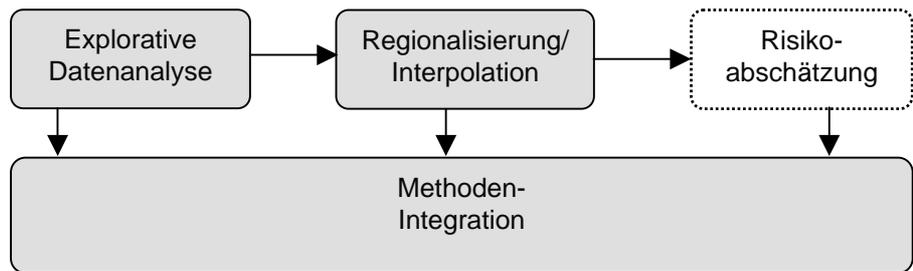
In einer erweiterten Definition, wie sie in der vorliegenden Arbeit angewendet wird, geht es darüber hinaus um die *Expositionsabschätzung an kontaminierten Standorten*, im speziellen Fall um das Grundwasser im Raum Bitterfeld-Wolfen. Im Rahmen des Bundesbodenschutzgesetzes wird Risikoabschätzung angewendet. Das ECORISK-Verfahren (MATHEWS 1998, 1999) verwendet Risikoabschätzung mittels Expositionsabschätzung an

Altlastenstandorten zur Erfüllung der Anforderungen des BBodSchG (1998) und der BBodSchV (1999).

Risk Assessment entspringt einem Thesenpapier des US-amerikanischen *National Research Council* (NRC, 1983). Die Methode der (in der vorliegenden Arbeit angewandten) risikobasierten Sanierung und Planung entstammt Konzepten der US-amerikanischen Umweltbehörde EPA. Im Dokument *Risk Assessment Guidance for Superfund RAGS* (EPA 1989B) wird eine Methode beschrieben, um unter begrenzten Mitteln (Bearbeiter, Finanzen etc.) eine priorisierte Bearbeitung durch Bildung einer *Rangordnung* der Wichtigkeit von *Erkundungs- und Sanierungsprojekten* zu gewährleisten. Die angewendeten Bearbeitungsschritte sind *Risikobestimmung*, *Risikobewertung* und *Risikokommunikation*. Die Methodik dient der Priorisierung von (Sanierungs-) Projekten durch Risikoabschätzung. Anwendungsbeispiele für quantitative Risikoabschätzung in den USA sind bei PAUSTENBACH (1989) gesammelt.

Risikoabschätzung ist unabdingbarer Bestandteil des Risikomanagements bzw. nachhaltigen Landnutzungsmanagements.

Durch Risikoabschätzung wird es möglich, bestehende oder zu erwartende Gesundheits- oder Umweltgefährdungen durch Kontaminationen zu erkennen und gegebenenfalls Prioritäten zur Bearbeitung von Altlastenflächen zu setzen oder bei der Landnutzungsplanung im Rahmen einer Umweltverträglichkeitsprüfung oder Gesundheitsverträglichkeitsprüfung entsprechend zu reagieren. Software zur Risikoabschätzung dient dabei als Werkzeug der *Entscheidungsunterstützung durch Unterstützung bei der risikobezogenen Bewertung* kontaminierter Standorte.



Das Ziel von Risikoabschätzung ist eine objektive, nachvollziehbare und wissenschaftliche Abwägung der Wahrscheinlichkeit für das Auftreten inakzeptabler Beeinträchtigungen auf die menschliche Gesundheit und die Umwelt.

Das Ziel nachhaltigen Wirtschaftens auf kontaminierten Flächen (*sustainable contaminated land management*) ist es, zu entscheiden, welche Risiken inakzeptabel sind und wann und wo sie begrenzt werden müssen („...*process of making informed decisions on the acceptability of risks posed by contaminants at a site, either before or after treatment, and how any needed risk reduction can be achieved efficiently and cost effectively*“) (FERGUSON ET AL. 1998, FERGUSON & KASAMAS 1999). Im Hintergrund bleibt hier grundsätzlich zu beachten, dass die Gefährdungsabschätzung immer mit Unsicherheiten bezüglich der Daten und teils auch mit Unsicherheiten der Methodik verbunden ist.

In der vorliegenden Arbeit werden Risiken, die sich aus den Messungen errechnen lassen, abgeschätzt, und auch Risiken für durch Interpolation erhaltene Werte, die bei der Regionalisierung berechnet wurden. Die Regionalisierung ist also nicht notwendigerweise Voraussetzung, um eine Risikoabschätzung überhaupt durchführen zu können, aber sie schafft die Voraussetzung, um an den Stellen des Untersuchungsgebiets eine Risikoabschätzung durchzuführen, wo keine Daten vorlagen.

Als *Risiko* wird dabei einerseits *die Möglichkeit* bezeichnet, dass umweltschädigende Wirkungen von einer Kontamination ausgehen. Andererseits bezeichnet man im natur- und technikwissenschaftlichen Sprachgebrauch mit Risiko *auch den Schweregrad* eines möglichen Schadens (JUNG ET AL. 2000). Umweltschädlichkeit kann sich ganz allgemein in Form quantitativ bewertbarer Schäden wie Toxizität oder in Form nicht quantifizierbarer Belastungen wie Geruchsbelästigungen äußern. Wenn im Folgenden von Risiko die Rede ist, sind allgemein aber gesundheitsschädigende, sowohl kanzerogene wie nicht-kanzerogene Wirkungen gemeint. Es muss darauf hingewiesen werden, dass damit die Begrifflichkeit der EPA (1992) für *Risiko* erweitert wird. Ursprünglich war mit Risiko nur das kanzerogene Potential von Stoffwirkungen gemeint.

Die Schädlichkeit muss grundsätzlich nach Empfängern (Rezeptoren) bzw. Zielen unterschieden werden. Dabei ist die vordergründigste Unterteilung in *Humantoxizität* und *Ökotoxizität* mit dem Menschen als Rezeptor auf der einen bzw. Pflanze/Tier auf der anderen Seite. Die Fähigkeiten der verwendeten Software müssen sich daran bemessen lassen, inwiefern eine Unterscheidung nach den genannten Empfängern und unterschiedlichen Transferpfaden zu den Rezeptoren durchgeführt werden kann. Entgegen den Prinzipien stringenter toxikologischer Methodik wird im Folgenden allerdings nicht nach Aufnahmeoberflächen durch die verschiedenen Organe innerhalb des Körpers (über Darm, Niere, Leber etc.) differenziert, sondern nur nach oraler, inhalativer bzw. dermalen Aufnahme.

Bewertung ist nach einer Definition des UBA (GIEGRICH ET AL. 1995)

die „Verknüpfung der zugänglichen Information eines Sachverhaltes mit dem persönlichen Wertesystem zu einem Urteil über den entsprechenden Sachverhalt“

Damit sind wesentliche Probleme bei der risikogestützten Bewertung von Grundwasserschäden bereits angesprochen: die ausdrückliche Erwähnung der *zugänglichen* Information impliziert das Vorhandensein *nicht zugänglicher* Informationen, wie es sie bei der Regionalisierung von Grundwassermessdaten zwangsläufig geben muss. Das *persönliche Wertesystem* stellt bei der Bewertung von Grundwasserkontamination die Quantifizierung von Grenz- oder Schwellen-, bzw. Maßnahmewerten dar. Diese unterscheidet sich jeweils nach der Zielsetzung und fällt u.U. in gewissem Maße willkürlich aus.

2.3 Methoden und Definitionen

- Ablaufschema
- Definitionen
- Risikoberechnung
- Grenzwerte, Qualitätsziele, Risikomaße

2.3.1 Ablaufschema

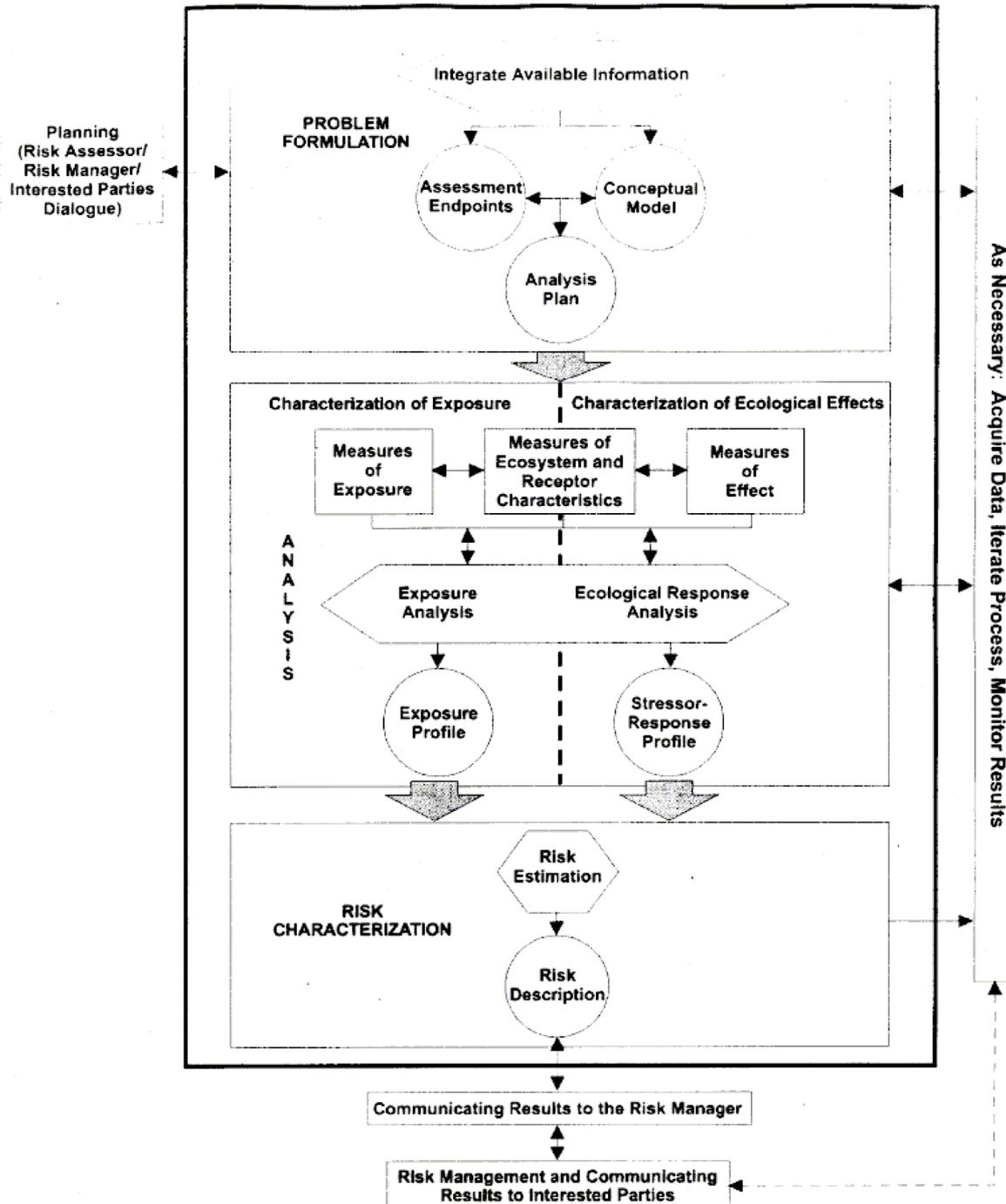


Abb. 6: Schema des ökologischen Risk Assessment, Quelle: (EPA 1998).

Für das Risk Assessment (RA) werden zunächst die Gefahren identifiziert (*hazard identification*), die Größe des potenziellen Schadens abgeschätzt (*Dosis-Wirkungsabschätzung/Dose-Response Assessment*), der Verbleib der Schadstoffe während und nach dem Transport entlang des Wirkungspfades modelliert und dann die Exposition abgeschätzt (*Exposure Assessment*) (MILLARD 2001).

Das Ablaufschema in Abb. 6 zeigt den gesamten schematischen Ablauf bei der ökologischen Risikoabschätzung nach einer Empfehlung der US-EPA (EPA 1998). Sämtliche von der US EPA vorgeschlagenen Methoden haben zum Ziel „*protective and reasonable*“ zu sein- also konservative Schätzungen zu erzielen, die gleichzeitig auch verhältnismäßig sind. Es handelt sich um *konservative* Punktrisikoschätzungen (point estimate of risk), die auch dafür kritisiert werden, weil sie häufig zu hohe Risiken vorspiegeln (MILLARD 2001). Mit probabilistischen Methoden versucht man, dem entgegenzuwirken (BURMASTER & VON STACKELBERG, 1991, FINLEY & PAUSTENBACH, 1994).

Bestandteile der Risikoabschätzung (NRC, 1983) sind in dieser Reihenfolge (s. Abb. 7):

- Gefahrenidentifikation,
- Dosis-Wirkungs-Abschätzung,
- Expositionsabschätzung,
- Risikocharakterisierung.

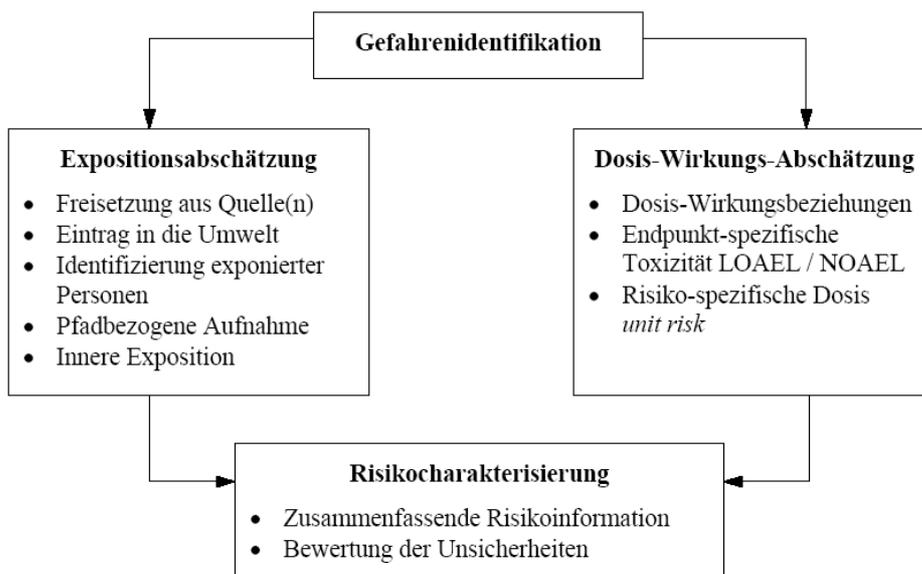


Abb. 7: Ablaufschema zur quantitativen Risikoabschätzung, *Quelle: MEKEL ET AL. 1997.*

Der Risikoabschätzung (RA) folgt durch die Verknüpfung mit einer Sensitivitäts- und Unsicherheitsanalyse idealerweise die Risikocharakterisierung (RC), bevor ein Risikomanagement (RM) durch Sanierungs- oder Eindämmungsmassnahmen, Spundwände etc. eingeleitet wird. Risk Management (RM) muss zum Ziel haben Schadstoffverkettenungen aufzubrechen. Sowohl RA wie RM sollen selbstverständlich zukunftsorientiert ausgeführt werden.

2.3.2 Definitionen

2.3.2.1 Begriffsdefinition

Zur Verwendung quantitativer Risikoabschätzung (QRA) in Deutschland zitieren z.B. MEKEL ET AL. (1997) für das Landesinstitut für den Öffentlichen Gesundheitsdienst NRW, Abteilung Umweltmedizin und Umwelthygiene, eine Entschließung der Gesundheitsministerkonferenz (GMK) vom 17./18. 11.1994, die darunter *alle Verfahren* subsumieren, *welche darauf abzielen, bestehende oder anzunehmende gesundheitliche Risiken quantitativ zu beschreiben*. Weiterhin zitieren sie die Arbeitsgemeinschaft Leitender Medizinalbeamter (AGLMB), die QRA in der Umwelthygiene als eine

„größenmäßige Beschreibung des gesundheitlichen Risikos bei spezifischer Exposition gegenüber verschiedenen Verunreinigungen in der Umwelt spezifizierten“

und weiter als

“Verfahren, die auf naturwissenschaftlich-technischer Grundlage und unter Einbeziehung heuristisch-pragmatischer Annahmen (Konventionen) darauf abzielen, in Abhängigkeit von der Exposition Schätzwerte für die Wahrscheinlichkeit des Auftretens einer gesundheitlich nachteiligen Wirkung abzuleiten (SAGUNSKI ET AL. 1995).“

Zuletzt definieren sie QRA als:

Oberbegriff für alle Verfahren, die auf naturwissenschaftlich-technischer Grundlage und unter Einbeziehung von Konventionen darauf abzielen bestehende oder anzunehmende gesundheitliche Risiken in Abhängigkeit von der Exposition quantitativ zu beschreiben. Diese Definition steht im Einklang mit dem ‚risk assessment‘-Verfahren des US-National Research Council (NRC). (MEKEL ET AL. 1997)

Dort wird auch davor gewarnt, die Quantifizierung des Risikos als alleiniges Ergebnis der Abschätzung zu sehen. Die Datenqualität und Variabilität und daraus entstehende Unsicherheiten stellen einen unverzichtbaren Bestandteil der Risikoabschätzung dar. Aus diesem Grund werde im englischen häufig auf den Bestandteil „quantitativ“ verzichtet.

Der Begriff „Risiko“ hat im Deutschen eine etwas andere Bedeutung als der Begriff „risk“ im angloamerikanischen Gebrauch. Während im Deutschen im allgemeinen Sprachgebrauch mehr der Begriff der „Gefahr“ angewendet wird, wo das Eintreten unerwünschter Ereignisse befürchtet wird, sind mit „Risiko“ zuweilen auch positive Aspekte im Sinne von „Wagnis“ oder „Chance“ gemeint. Dem deutschen Begriff der „Gefahr“ entspricht dagegen das englische „hazard“. Das Englische versteht unter „risk“ eher das Maß für die Größe einer Gefahr oder das *Ausmaß der Gefährdung*.

Diese Gefährdung setzt sich zusammen aus der Wahrscheinlichkeit ihres Auftretens und der Höhe des durch sie verursachten Schadens (JUNG ET AL. 2000).

Trotz des unterschiedlichen Gebrauchs wird im Folgenden der Begriff Risiko in der engeren Bedeutung des englischen „risk“, oder alternativ der Begriff der Gefährdung verwendet, weil dieser dem naturwissenschaftlich-technischen Verständnis entspricht; teilweise bleibt *risk* aus diesem Grund unübersetzt.

Obwohl innerhalb der USA historisch der Gebrauch des Begriffs bzw. der Methode des „risk assessment“ verhältnismässig einheitlich war, besteht auch dort keine übergreifende Einigkeit: Ein 2003 ins Leben gerufener Zusammenschluss mehrerer US-amerikanischer

Institutionen (ITRC – interstate technology and regulatory council¹) hat zum Ziel eine Vereinheitlichung der bisher nicht einheitlich gehandhabten Methodik des Risk assessment innerhalb der Vereinigten Staaten zu bewirken:

The only new project going into 2003 is the Risk Assessment Resources Team, which seeks to expand understanding of the variety of methods, assumptions, and issues surrounding risk assessment and management in corrective actions. Guidance for making risk-based cleanup decisions is unclear and confusing. States use different processes in making risk-based decisions and rely on different screening levels to determine risk. These differences confound the public and impede federal programs dealing with multiple regulatory jurisdictions. Invalid determinations of risk can lead to remedial responses that are either overly conservative or under protective of human health and the environment.

Wesentlich ist, dass die Risikoschätzung standortspezifisch und an den Schutzgütern orientiert erfolgt. Standortuntersuchung, ggf. Auswahl der Sanierungsmethodik und Monitoring werden Hand in Hand durchgeführt, um eine an den vorliegenden Fall angepasste Risikocharakterisierung zu erreichen, um kostengünstige und adäquate Massnahmen ergreifen zu können.

2.3.2.2 Typen der Quantitativen Risikoabschätzung QRA

Eine mögliche Typisierung der QRA ist wie folgt (Landesinstitut für den Öffentlichen Gesundheitsdienst Nordrhein-Westfalen, LÖGD NRW):

1. QRA-Typ I:
Noxenbewertung und Ableitung medialer Beurteilungskriterien
2. QRA-Typ II:
Beurteilung einer vorhandenen Belastungssituation
3. QRA-Typ III:
Beurteilung einer zukünftigen Belastungssituation
4. QRA-Typ IV:
Vergleichende Risikobewertung und Priorisierung

„QRA-Typ I kennzeichnet den Einsatz von QRA zur Bestimmung von z.B. Grenz-, Richt- und Orientierungswerten für Schadstoffkonzentrationen in den einzelnen Umweltmedien Wasser, Boden, Luft und Nahrung, wobei insbesondere Methoden der Dosis-Wirkungsabschätzung zur Anwendung kommen.

Unter QRA-Typ II werden QRA-Anwendungen subsumiert, die Entscheidungshilfen bei der Beurteilung bestehender Umweltbelastungen liefern sollen. Hierbei kommt der Expositionsabschätzung eine besondere Bedeutung zu.

Ein drittes wichtiges Einsatzfeld für QRA stellt die Beurteilung einer zukünftigen Belastungssituation dar (QRA-Typ III), z.B. im Rahmen einer Gesundheitsverträglichkeitsprüfung (GVP) als Bestandteil einer UVP. Auch hier kommt schwerpunktmäßig die Expositionsabschätzung zur Anwendung.

QRA-Typ IV kennzeichnet schließlich die besondere Bedeutung der QRA im Bereich der vergleichenden Beurteilung unterschiedlicher Risiken aus gesundheitlicher Sicht als rationale Basis für eine Priorisierung im gesundheits- und umweltpolitischen Handeln. [...]

QRA als Methode der prognostischen Abschätzung (QRA-Typ II) wurde bis heute wenig beachtet, Anwendungsbeispiele hierfür sind vornehmlich im Bereich der QRA für geplante Müllverbrennungs-Anlagen zu finden. Die Entwicklung der vergleichenden Risikoabschätzung als Instrument für gesundheits- und umweltpolitische Priorisierung (QRA-Typ IV) steht noch in den Anfängen.“ (MEKEL ET AL. 1997)

Nach dieser Typisierung sind die Aufgaben (Beurteilung vorhandener oder zukünftiger Belastungssituationen) in der vorliegenden Untersuchung von QRA-Typ II oder III. Durch

¹ http://www.itrcweb.org/teampublic_Risk.asp

Modellierung der Expositionssituation mit Ausbreitungsmodellen für die Medien Grundwasser und Luft wird die Betrachtung der damit verbundenen oral-inhalativen Aufnahmewege machbar.

Auch für QRA-Typ IV, die Unterscheidung innerhalb des Untersuchungsraumes zwischen Arealen, für die ein höheres Risiko besteht und Arealen, die ein geringeres Risiko betrifft, sind die vorliegenden Daten nutzbar.

2.3.2.3 Ergebnisgrößen bei der QRA

Das Risiko setzt sich einerseits aus der Wahrscheinlichkeit des Auftretens eines (negativen) Ereignisses und andererseits aus dem Schadensausmaß zusammen. Mit vordefinierten, postulierten Szenarien für Landnutzung und Exposition wird eine Abschätzung erkennbarer unerwünschter Risiken für die menschliche Gesundheit oder die Umwelt durch verbleibende vorhandene Kontaminationen im Grundwasser berechnet. Das Ergebnis ist das inkrementelle Risiko einer Erkrankung aufgrund der festgelegten Szenarioparameter. Legt man auf diese Weise das Schadensausmaß fest, wird das Risiko zu einer eindimensionalen Größe, die in einer definierten Population von Exponierten und einem definierten Zeitraum nur noch von der Wahrscheinlichkeit ihres Eintretens bestimmt wird. Diese Definition des Risikos deckt sich mit dem Begriff des *stochastischen Schadens*, wie er im Strahlenschutz Verwendung findet (JUNG ET AL. 2000).

Für kanzerogene Stoffe kann das Risiko als sogenanntes Kollektivrisiko ausgedrückt werden (MEKEL ET AL., 1997), z.B. :

„Bei einer lebenslangen Exposition gegenüber einer Schadstoffkonzentration von $1\mu\text{g}/\text{m}^3$ werden 9 von 1 Million exponierter Personen zusätzlich an Krebs erkranken“.

Die Risikobeschreibung kann auch als ein individuelles Risiko umformuliert werden:

„Bei einer lebenslangen Exposition gegenüber einer Schadstoffkonzentration von $1\mu\text{g}/\text{m}^3$ beträgt das durchschnittliche individuelle Risiko an Krebs zu erkranken $9 \cdot 10^{-6}$ “

Für nicht-kanzerogene Stoffe wird ein Risikoindex oder *hazard index* berechnet, der das Verhältnis der geschätzten Exposition zu der duldbaren Exposition beschreibt (für eine genauere Beschreibung dieser hier nur kurz definierten Größen s. Kap. 2.3.3)

2.3.2.4 Modell-Unsicherheit und deren Quantifizierung

Der Charakterisierung der Unsicherheit beim RA wird besondere Wichtigkeit beigemessen. Nur wenn man die Unsicherheit der gemachten Aussage kennt, lässt sich einschätzen, wie konservativ sie ist. Daraus erwachsen Folgen über die Anwendbarkeit zur Entscheidungsfindung.

Den verwendeten Modellen werden vielerlei Annahmen zugrunde gelegt. Nicht zuletzt stellt auch die Qualität der Eingangsdaten ein Problem dar: Häufig unter pragmatischen Gesichtspunkten gewonnen, charakterisieren sie nicht unbedingt das Gebiet ausreichend. Unsicherheit bei der Risikoabschätzung erwächst vor allem aus unvollständigen Kenntnissen über das Untersuchungsgebiet (den Grundwasserleiter etc.), fehlende oder unvollständige, fehlerhafte Proben oder auch eine Beprobungsstrategie, die dem Gebiet oder dem zu seiner Auswertung zugrundegelegten Modell nicht entspricht. Auch die Annahme, dass Kontaminanten (*CoCs – Contaminants of Concern*) unterhalb der Nachweisgrenzen (nicht) vorhanden sind, muss zu dieser Unsicherheit hinzugerechnet werden.

Zu den der Risikoabschätzung inhärenten Unsicherheiten gehört auch die Abschätzung der Toxizität von Stoffen. Toxikologische Bewertungen werden meist auf empirisches Wissen aus Tierversuchen gegründet. Insbesondere die Interpolation von in Tierversuchen gewonnenen Erkenntnissen über Dosis-Wirkungsbeziehungen in den Bereich sehr niedriger Dosen stellt ein Problem dar. Auch die Verwendung von Szenarien für die Exposition ist eine Vereinfachung der tatsächlichen Situation. Häufig wird mit typischen Szenarien gerechnet. Diesen Szenarien werden zum einen physikalische Größen (Menge der Kontamination, Geschwindigkeit der Ausgasung in die Umgebungsluft, Körpergewicht der Personen etc.) wie auch Parameter für die Länge und Häufigkeit der Exposition und die Menge der Aufnahme eines Stoffes z.B. über die Haut, in einem gewissen Szenario, z.B. beim Duschen, als Rechengrößen eingesetzt.

Grundsätzlich wird die Untersuchung der toxischen Wirkung unter Laborbedingungen durchgeführt. Die Untersuchung von Einzelstoffen (im Gegensatz zur Wirkung von Stoffmischungen in der Realität) führt zu Ergebnissen, die evtl. nicht auf die Bedingungen einer Mischkontamination im Aquifer übertragbar sind. Eine gängige Methodik bei der Bestimmung von Grenz- bzw. Richtwerten besteht darin, wegen der bekannten Unsicherheit über die Wirkung einen Sicherheitsfaktor einzuberechnen. Stellt man bei einem Stoff ab Unterschreiten einer bestimmten Konzentration im Labor keine Schadwirkung am lebenden Organismus fest (no observed adverse effect level – *NOAEL*), wird zusätzlich noch ein Faktor, z.B. die zehnfache Unterschreitung dieses Wertes eingerechnet und damit festgelegt, dass ab dieser Konzentration der Stoff ungefährlich ist. Anders als beim *LOAL* (lowest observed effect level), also der niedrigsten Stufe, bei der noch ein schädigender Effekt auftritt, ist der *NOAEL* nicht messbar, daher ist diese Vorgehensweise mit der Berechnung durch Sicherheitsfaktoren (oder „Gefahrenfaktoren“) empirisch begründet (KONIETZKA, 1994), muss aber z.B. für Stoffmischungen so nicht gültig sein.

Man versucht daher in der Risikoschätzung, den genannten Unsicherheiten mit Hilfe quantitativer Methoden wie probabilistischer Analysen (Monte Carlo Simulationen: BURMASTER 1991, FINLEY & PAUSTENBACH 1994) und Sensitivitätsanalysen zu begegnen (EPA 2001, MEKEL ET AL. 1997B). Die vorgestellten Programme RISC4 und RBCA beherrschen z.T. Monte Carlo-Verfahren. Dazu wird für die Eingangsparameter statt jeweils eines einzelnen Wertes jeweils ein Wertebereich eingesetzt und dann für die Berechnung eine Permutation aller Kombinationen durchlaufen. Als Ergebnis erhält man nicht ein Einzelergebnis sondern eine Verteilung (Häufigkeitskurve) für die möglichen Ergebnisse, die mit den üblichen statistischen Begriffen von Mittelwert und Varianzen beschrieben werden kann. Die Schwierigkeit besteht hierbei in der Verknüpfung der einzelnen Unsicherheiten zu einer Gesamtunsicherheit. Es besteht keine generelle Einigkeit wie hierzu zu verfahren ist.

KASAMAS & VEGTER (2001) empfehlen ausser dem Training der beteiligten *Risk Assessors* und Entscheider eine Netzworkebildung zur verbesserten Kommunikation neuer Herangehensweisen und praktischer Erfahrungen und der Verbindung von Grundlagenforschung und Real-Ereignissen, zudem die Kommunikation von gewonnenen Kenntnissen/ Wissen, um so durch Multiplikationseffekte zu besseren Erkenntnissen gelangen zu können:

The perspectives for dealing effectively with contaminated land are broader if they are based on shared knowledge and do not entirely depend on the experience of an individual assessor. Most countries also need a platform for sharing information, developing case studies, disseminating new approaches and identifying research priorities.

2.3.2.5 Schutzgüter

Zu den schutzwürdigen Gütern zählt zum einen der Mensch selbst. Andererseits werden umweltschädigende Wirkungen untersucht und das von ihnen ausgehende Risiko abgeschätzt.

Dabei geht es um vorwiegend um aquatische Lebensgemeinschaften, aber auch terrestrische Fauna und die Flora oder der Boden selbst.

Zum Schutz des Menschen werden unterschiedliche Szenarien untersucht, die eine Klassifikation nach ihrer Sensitivität darstellen soll. In absteigender Reihenfolge sind dies für gewöhnlich die Nutzung zur:

- Wohnbebauung
- Industrielle Nutzung und die
- Exposition bei Bau- bzw. Aushubmaßnahmen
- Evtl. „Passanten“ (in RISC4)

Je nach Modell werden weitere Szenarien eingeführt. Die obigen werden von der in dieser Arbeit verwendeten Software verwendet.

Beim Menschen wird außerdem nach Lebensalter unterschieden: für die Exposition von Kindern wird ein eigenes Szenario errechnet (für die ersten 6 Lebensjahre), von dem sich die Parameter des darauf folgenden zu modellierenden Lebensabschnitts z.B. bei der Körperoberfläche und dem Körpergewicht unterscheiden. Es wird davon ausgegangen, dass Kinder besonders empfindlich auf Exposition reagieren. Bei RISC4 können, abweichend von RAGS (EPA, 1989B) das Szenario Kind und das Szenario Erwachsener auch kumulativ berechnet werden.

2.3.2.6 Expositionspfade

Schädigungspotenzial geht von Stoffen auf unterschiedlichen Wirkungs-, Expositions- bzw. Transferpfaden aus. Dazu gehören die in der Bundesbodenschutz- und Altlastenverordnung betrachteten Boden →Mensch/ Boden →Nutzpflanze/ Boden →Grundwasser.

Die folgende Abb. 8 zeigt beispielhaft die Darstellung des Pfades Grundwasser → Mensch im Programm RBCA. Die in der verwendeten Software RISC4 verwendbaren Pfade und die zugehörigen Quell, Transfer- und Rezeptormedien zeigt Abb. 9.

RBCA Tool Kit for Chemical Releases, Version 1.3a

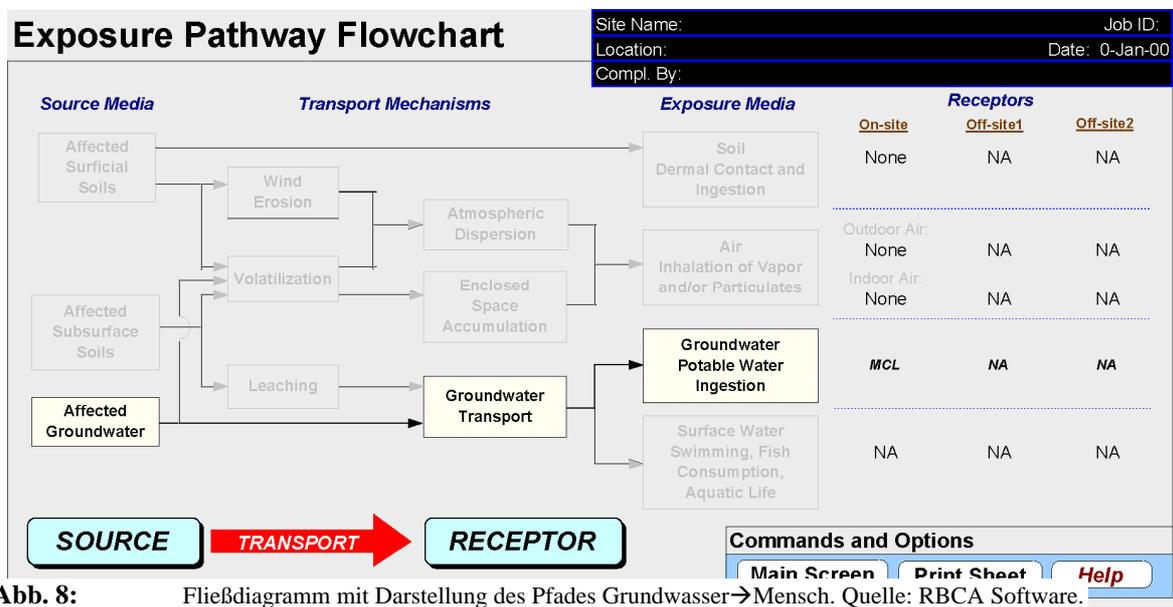


Abb. 8: Fließdiagramm mit Darstellung des Pfades Grundwasser → Mensch. Quelle: RBCA Software.

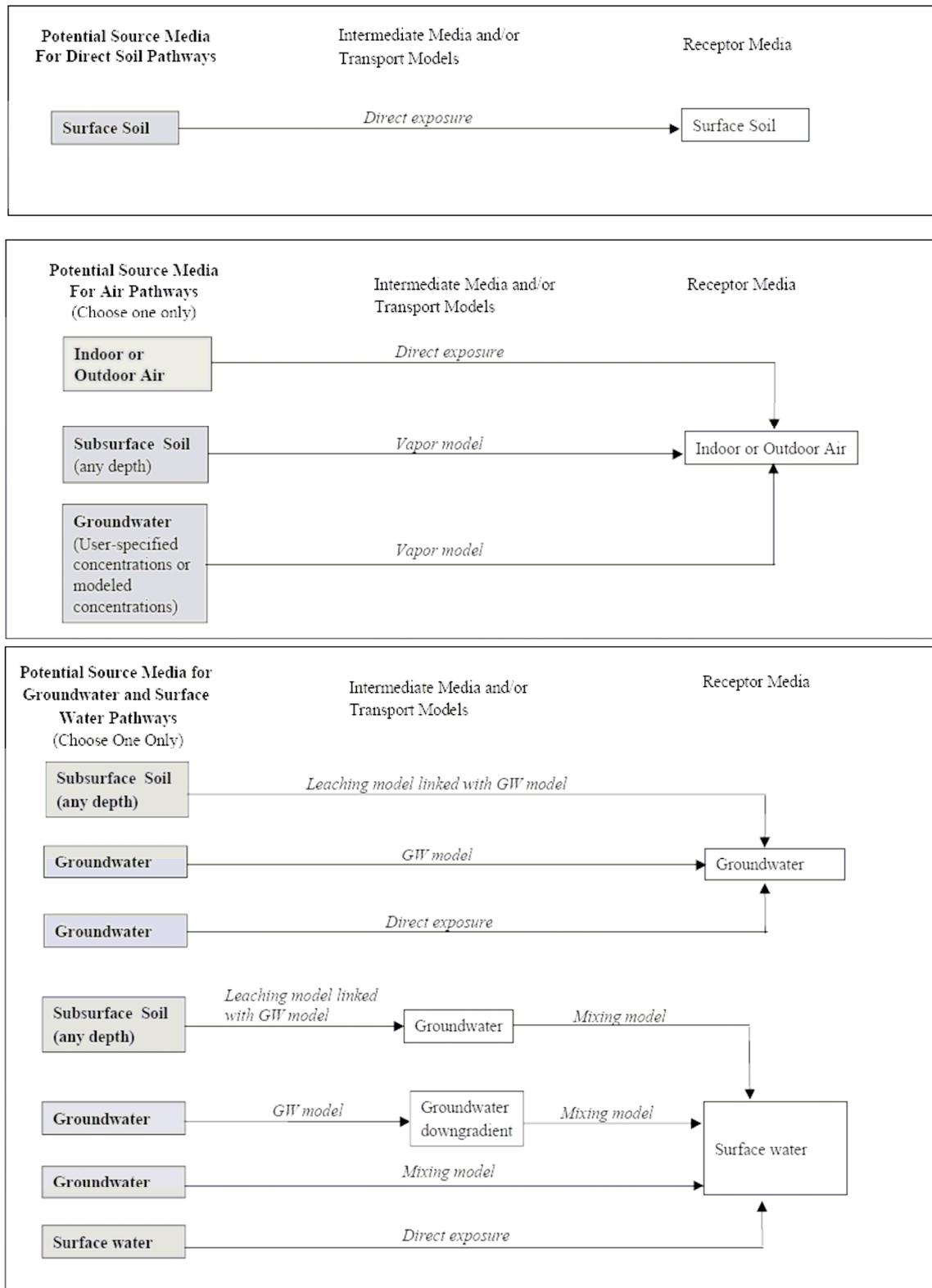


Abb. 9 Quell- und Zielmedien bei der Exposition sowie die zugehörigen Transferpfade. Sämtliche in RISC4 verwendeten Modelle sind gezeigt. (Quelle: Spence et al. 2001)

Als *Rezeptormedium* wird das Medium bezeichnet, mit dem der Rezeptor in Kontakt ist. Für die Humanexposition sind die in Tab. 3 gezeigten Aufnahmewege für die einzelnen Rezeptormedien in RISC4 berechenbar.

Tab. 3: Aufnahmepfade bei der Humanexposition, geordnet nach den jeweiligen Rezeptor-Medien für RISC4 (Quelle: Spence et al. 2001).

Receptor Media	Potential Exposure Pathways
Surface Soil	Ingestion Dermal contact Vegetable ingestion
Groundwater	Water used indoors: Ingestion Dermal contact Inhalation in the shower Water used outdoors: Ingestion Dermal contact Inhalation from spray (such as sprinklers) Vegetable ingestion
Outdoor Air	Inhalation
Indoor Air	Inhalation
Surface Water	Ingestion Dermal contact

Die den Menschen als Schutzgut betreffenden Pfade lassen sich weiter nach indirekter Wirkung aufschlüsseln und wie folgt ergänzen durch vom Grundwasser ausgehende Pfade:

Boden → Umgebungs-Luft → Mensch,
 Boden → Mensch,
 Boden → Grundwasser → Mensch,
 Grundwasser → Aquatische Lebensgemeinschaften,
 Grundwasser → Oberflächenwasser → Mensch,
 Grundwasser → Bewässerung von Nutzpflanzen → Mensch etc.

Bei der Risikoabschätzung gilt in Europa das Paradigma, dass nur dann ein Risiko von einer Kontamination ausgeht, wenn eine Verbindung von der Kontamination zu einem Rezeptor vorhanden ist (*pollutant linkage*). Diese Verbindung wird durch Austragspfade hergestellt (z.B. Boden-Grundwasser, Boden-Luft, Boden-Pflanze, Grundwasser-Mensch, oder auch der direkte Pfad durch Kontakt mit den Stoffen der Kontamination selbst, beispielsweise bei Chemieunfällen). Die Betrachtung des Anteils der verschiedenen Medien auf das Gesamtrisiko wird teilweise auch verwendet, um Grenzwerte abzuleiten.

Gewöhnlich werden bei der Risikoabschätzung nur diejenigen Schaden-Wirkungspotenziale weiter untersucht, bei denen wenigstens ein Expositionspfad vollständig verwirklicht ist („*Schadstoffverkettung*“). Dazu muss irgendeine Art von Transport von der Quelle zum jeweiligen Rezeptor stattfinden. Sanierung kann außer durch Quellensanierung also zum Beispiel auch durch Behinderung bzw. Abschneiden von Transferpfaden vollzogen werden. Beispielsweise kann durch Nutzungsverbote oder Spundwände, zumindest theoretisch, das Risiko einer Exposition durch Oberflächen- oder Grundwasser praktisch vollständig eliminiert werden. In unserem Fall werden zunächst die von den Transfer-Pfaden Grundwasser → Oberflächenwasser, Grundwasser → Luft ausgehenden Risiken für den Menschen und die Ökologie der Schutzgüter Grund- und Oberflächenwasser betrachtet. Da

keine Messwerte für Bodenbelastungen vorliegen, wird in dieser Studie der Boden-Transferpfad nicht betrachtet. In der vorliegenden Studie wird für ökotoxikologische Studien zunächst der Kontakt mit Oberflächenwasser und das Risiko, das von Grundwasser ausgeht, welches an der Oberfläche ausgast, betrachtet.

2.3.2.7 Tiered Risk Assessment

Englisch für: “Stufenweise Risikoabschätzung”. Da das Risk Assessment in erster Linie zur Priorisierung und dann zu standort-spezifischen angepassten Bearbeitung dienen soll, wählt man eine stufenweise Bearbeitung. Folgende Stufen (engl. „*tier*“) gelten für die betrachtete Vorgehensweise bei der stufenweisen Risikoabschätzung. In 3-4 nacheinander durchzuführenden Stufen (je nach Software) wird eine zunehmend bessere, aber auch komplexere und damit aufwendigere Einschätzung der zu erwartenden Risiken vorgenommen. Das dient dazu bei routinemässigen Abschätzungen den Untersuchungsumfang der Größe und Komplexität dem Standort anzupassen.

Tab. 4: Verwendung der einzelnen Stufen beim "tiered risk assessment"

<p>Tier 1 bezeichnet die OnSite Betrachtung/ Bestandsaufnahme Bewertung, als ob Exposition vor Ort (on-site) stattfände, vergleichbar dem Begriff des Prüfwertes der BBSchV für Bodenwerte (Generic Screening Level Corrective Action Goals)</p>
<p>Tier 2 Standort-spezifische Sanierungszielfestsetzung- (Site Specific Corrective Action Goals) Einfluss von z.B. Natural Attenuation kann berücksichtigt werden. Exposition kann ausserhalb der Quellen- Zone stattfinden (muss aber nicht)</p>
<p>Tier 3 ähnlich wie 2, aber umfangreichere, verfeinerte Daten. z.B. ist probabilistische Vorhersage und/oder eine numerische Abbau-/Transportmodellierung hier machbar. Weil so umfangreiche Daten normalerweise teuer sind, wird Tier 3 sehr komplexen, grossen (und kostenintensiven) Standorten vorbehalten sein.</p>
<p>Tier 4 kombinierte Betrachtung verschiedener Wirkungspfade wird von RAM und RISC4 beherrscht, auch kumulativ</p>

Die Abschätzung mit Stufe 1 stellt eine konservative Abschätzung dar. Stufe 2 beinhaltet weitere standortspezifische Eingangsparameter, wie Grundwasserflurabstand, Infiltrationsrate aus dem Boden etc., möglicherweise probabilistische Abschätzungen und/ oder Transport- und Abbaumodelle.

Die Abschätzung kann daher bei der Stufe (*tier*) beendet werden, bei welcher sich herausstellt, dass keine weiteren Untersuchungen notwendig sind, um sicherzustellen, dass die Schutzgutexposition unter die (vorher festgelegte) Gefährdungsschwelle sinkt. Die abgestufte Abschätzung ist also so zu verstehen, dass sich bei jeder Stufe die Unsicherheit über getroffenen Aussagen verringert, und nicht, dass sich mit jeder Stufe der Schutz für das Schutzgut erhöht. Jeder Tier endet mit einer Einschätzung der zu Risikoreduktion und Exposition-Kontrolle (i.S.v. Expositions-Steuerung) erforderlichen Maßnahmen.

2.3.3 Risikoberechnung

- Referenzdosis
- Referenzkonzentration
- Unit Risk (karzinogene Stoffe)
- Berechnungsarten
- Vorwärtsberechnung
- Rückwärtsberechnung

Gibt es, wie im vorliegenden Fall, weder die Möglichkeit, den Urzustand wiederherzustellen, noch einen Hintergrundwert einzustellen, der als „normal“ anzusehen ist, strebt man daher schutzgut- bzw. nutzungsbezogene Umweltziele an. Gewöhnlich wird dabei ein konservativer Ansatz gewählt, der dem empfindlichsten Schutzgut selbst bei der unwahrscheinlichsten Beeinflussungsart größtmöglichen Schutz gewährt. Bei der risikobasierten Schädlichkeitsdefinition wird ein voraussichtlich tolerierbares Risiko, bzw. die zu seinem Auftreten führende Exposition berechnet.

Die allgemeinste anwendbare Formel ist wie folgt:

$$\text{Risiko} = \text{Dosis} \times \text{Wahrscheinlichkeit}_{\text{Effekt/ Dosis-Einheit}} \quad (1a)$$

Das Risiko, und damit die Wahrscheinlichkeit, dass eine Exposition zur Schädigung führt, wird als proportional zum Produkt aus der Dosis und der Wahrscheinlichkeit für das Auftreten eines Effektes pro Dosis-Einheit angesehen.

Die folgenden Maße sind die Maßzahlen, in denen das errechnete Risiko z.B. in RISC4, dargestellt wird.

Die Ermittlung human-toxikologischer Kenngrößen beruht zumeist auf tierexperimentellen Ergebnissen (da für viele Stoffe epidemiologische Studien nicht vorliegen). Für sehr niedrige Dosen ist die Ableitung von Dosis-Wirkungsabschätzung praktisch nicht machbar, weil dazu zu viele Experimente notwendig wären. Daher bedient man sich bei der Ableitung von Kennzahlen im Niedrigdosisbereich der Extrapolation der Werte aus den bei höheren Dosen erhaltenen Messungen.

„Die so erhaltenen Risikoschätzwerte können nicht als wahre Schätzer der tatsächlich auftretenden Krebsrisiken betrachtet werden, sondern dienen als eine obere Abschätzung für die administrative und gesundheitspolitische Regulation von kanzerogenen Substanzen.“ (MEKEL ET AL. 1997).

Der *Lowest Observed Effect Level* (LOEL) beschreibt die Dosis, welche mindestens nötig ist, um einen Effekt zu zeigen. Der *No Observed Adverse Effect Level* (NOAEL) beschreibt die Konzentration, bei deren Erreichen oder Unterschreitung kein schädlicher Effekt zu beobachten ist.

Die von der US EPA errechneten Referenzdosen bzw. Referenzkonzentrationen entsprechen insofern dem NOAEL. Der *Risikoquotient* (Hazard Quotient) beschreibt das Verhältnis der verhergesagten Konzentration eines Stoffes in der Umwelt zur NOAEL-Konzentration. Das heißt, man kennt eine Wirkungsschwelle, unterhalb derer keine Schädigung beobachtet worden ist (meist in Tierversuchen). Eine Überschreitung dieser Schwelle resultiert in einem nicht akzeptablen Risiko. (Risikoquotient >1)

Andererseits ist bei der Betrachtung der Wirkungen aber zusätzlich zu den toxischen Wirkungen die Betrachtung nicht-systemischer (sondern) *karzinogener Stoffe* angebracht. Man geht bei Karzinogenen davon aus, dass keine Dosis-Proportionalität vorhanden ist, sondern von diesen Stoffen ohne Wirkungsschwelle bereits bei der geringsten Exposition ein Schädigungspotenzial ausgeht. Die o.g. Formel gilt strenggenommen nur für *systemische Wirkungen*. Der zweite Term rechts vom Gleichheitszeichen wird, wenn es sich beim ausgelösten Effekt um Krebs handelt, als *Cancer Slope Factor* CSF bezeichnet.

Die amerikanische Umweltbehörde EPA verwendet ein System zur Einteilung von Stoffen in karzinogene bzw. nicht-karzinogene Stoffe, das sich auf Nachweise durch Empirie (häufig Tierversuche stützt). Das System wird auch *weight-of-evidence* Klassifikation genannt. Stoffe werden mit einem Buchstabencode von A-E versehen (s. Tab. 5). Nach dieser Einteilung richtet sich die im folgenden beschriebene unterschiedliche Vorgehensweise bei der Berechnung des Risikos. Grundsätzlich gilt: ein Stoff, der als karzinogen oder möglicherweise karzinogen eingeteilt ist, wird mit der karzinogenen Methodik berechnet. Zusätzlich können systemische Wirkungen betrachtet werden, „Vorrang“ hat aber die karzinogene Wirkung. Nicht karzinogene Stoffe werden nach der Methodik für nicht-karzinogene Stoffe mit einem Referenzwert verglichen (s.u.).

Tab. 5: US-EPAs „weight of evidence“-Klassifikation zur Human-Karzinogenität

Gruppe/ Klassifikation	Beschreibung
A	Humankarzinogen
B1	Wahrscheinlich humankarzinogen, nur begrenzte Humandaten verfügbar
B2	Wahrscheinlich humankarzinogen, inadäquate oder keine Beweise für Humankarzinogenität aber Beweise für Karzinogenität aus Tierversuchen
C	Möglicherweise humankarzinogen
D	Nicht als humankarzinogen klassifizierbar (aber wahrscheinlich gefährlich)
E	Nachweislich nicht humankarzinogen

Toxizitätsmaße sind daher hinsichtlich der Wirkung, vor der sie Schutz bewirken sollen, wie folgt zu unterscheiden:

2.3.3.1 Referenzdosis *RfD / ADI (nicht-karzinogene Stoffe, oral)*

Toxizitätswert zur Bewertung nicht-karzinogener (systemischer) Stoffwirkungen, bis zu dem – bei täglicher Exposition (durch *orale* Aufnahme) über die Gesamt-Lebenszeit – auch bei den empfindlichsten betrachteten Populationen keine schädlichen Effekte auftreten („sichere“ Dosis). Dieser Wert ist gleichbedeutend mit dem ADI-Wert (acceptable daily intake) der Weltgesundheitsorganisation WHO.

RISC4 verwendet die Bezeichnung in einem allgemeineren Sinn: Es werden für orale und inhalative sowie Aufnahme über die Haut Referenzdosen angegeben. Damit umfasst der Begriff der Referenzdosis in RISC4 auch den sonst Referenzkonzentration genannten Wert (s.u.).

2.3.3.2 Referenzkonzentration *RfC (nicht-karzinogene Stoffe, inhalativ)*

Toxizitätswert zur Bewertung nicht-karzinogener (systemische) Stoffwirkungen, bis zu dem – bei täglicher *inhalativer* Exposition über die Gesamt-Lebenszeit – keine schädlichen Effekte auftreten. Dabei wird eine Sicherheitsspanne (ca. eine Größenordnung) für die Unsicherheit eingerechnet.

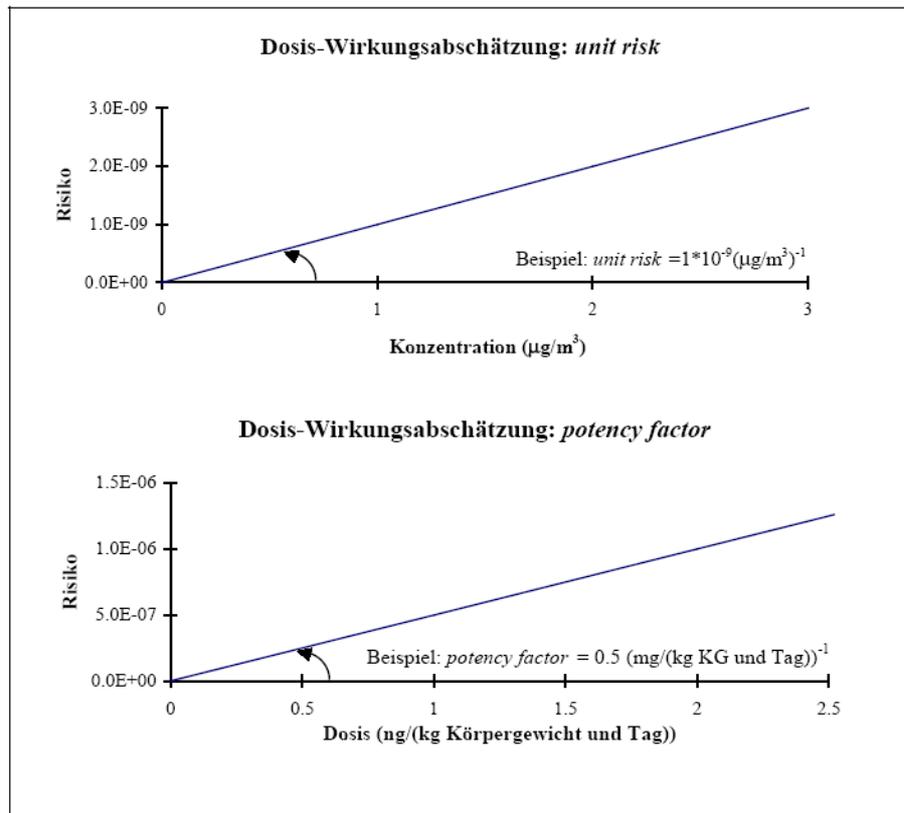


Abb. 10: Dosis-Wirkungs-Abschätzung für kanzerogene Schadstoffe (*unit risk* und *slope/potency factor*), Quelle: Mekel et al. (1997).

2.3.3.3 Unit Risk (karzinogene Schadstoffe, inhalative Aufnahme)

Das Unit Risk beschreibt über eine Niedrigdosis-Extrapolation die Wahrscheinlichkeit, dass ein Individuum aufgrund seiner Exposition an einem Schadstoff einer bestimmten Konzentration an Krebs erkrankt. Es wird für inhalative Aufnahme verwendet.

Ein unit risk stellt das geschätzte *zusätzliche Krebsrisiko* eines Menschen nach konstanter *Exposition über 70 Jahre gegenüber einer Konzentration von 1 µg/m³* dar. Die Definition kann sich grundsätzlich auf verschiedene Erkrankungen beziehen, im allgemeinen werden aber ausschließlich Krebserkrankungen bzw. Krebstodesfälle betrachtet.

Für die Berechnung des Risikos wird *unit risk* mit der Konzentration multipliziert.

$$\text{Risiko} = \text{Unit risk} * \text{Konzentration}$$

2.3.3.4 Slope Factor SF= potency factor (karzinogene Stoffe, oral)

Der Slope Factor beschreibt über eine Niedrigdosis-Extrapolation die Wahrscheinlichkeit, dass ein Individuum aufgrund seiner Exposition an einem Schadstoff einer bestimmten Dosis an Krebs erkrankt.

Er wird für i.A. nur für orale Aufnahme verwendet. RISC4 bildet auch hier eine Ausnahme: SF werden für orale und inhalative sowie Aufnahme über die Haut angegeben.

Für die Berechnung des Risikos ist nach obiger Formel (1a) die Aufnahme oder Dosis für jeden Stoff und jeden Transferpfad zu errechnen (Die Einheit wird in *Milligramm Stoff pro Kg Körpergewicht pro Tag [mg/kg d]* ausgedrückt - *Bezug auf Körperdosis*).

Für Kanzerogene:

$$\text{Risiko} = \text{Slope factor} * \text{Dosisrate}$$

Für systemische (nicht-kanzerogene) Wirkung:

$$\text{Risiko} = \text{Referenz-Dosis} * \text{Dosisrate}$$

2.3.3.5 Nicht-kanzerogenes Gesamtrisiko: Hazard Index

Die EPA empfiehlt (EPA 1989) zur Berechnung langfristiger Expositionen durch nicht-kanzerogene Stoffe die Mittelwertbildung über den Gesamtexpositionszeitraum, wie sie auch von der Software RISC4 verwendet wird. Die maximal in Betracht gezogene Expositionsdauer ist 7 Jahre, daher wird der höchste 7-Jahres-Mittelwert verwendet, auch wenn die tatsächliche Exposition länger währt. Der resultierende Wert wird *chronische gemittelte tägliche Dosis (chronic average daily dose CADD)* genannt und wird zur Berechnung des Risikoquotienten (hazard quotient) durch Vergleich mit einer (als „sicher“ oder ungefährlich angenommenen) Referenzdosis verwendet:

Hazard Quotient

$$HQ_{ij} = CADD_{ij} / RfD_{ij}$$

mit

HQ_{ij} Hazard Quotient für Stoff *i* über Pfad *j* (dimensionslos)

$CADD_{ij}$ chronische durchschnittl. tägliche Aufnahme für Stoff *i* über Pfad *j*

RfD_{ij} Referenzdosis für Stoff *i* über Pfad *j*

Die Gesamtwirkung aller Stoffe über alle Transferpfade wird durch Addition aller Hazard Quotienten dazu verwendet einen *Hazard-Index* (dimensionslos) zu berechnen. Dieser wird als additiv für mehrere Stoffe und Pfade angenommen. Die Berechnung ist demzufolge:

$$HI = \sum \sum HQ_{ij}$$

Der Hazard Index ist kein probabilistischer Wert für die Wahrscheinlichkeit des Auftretens, sondern ein Indikator für die Möglichkeit des Auftretens schädlicher Wirkungen. $HI > 1$ ist ein Indiz für die Möglichkeit, dass schädliche Wirkungen zu erwarten sind. Je größer der Betrag, desto größer die Möglichkeit. Bei Werten über 1 sollten weitere Untersuchungen angestrebt werden.

Die in RISC4 verwendeten Referenzwerte gelten für chronische Exposition. Für kürzer anhaltende (sub-chronische) Exposition müssen sie angepasst werden. Da es in der vorliegenden Studie um konservative Schätzungen für lebenslange Exposition geht, werden die vorhandenen Werte verwendet.

2.3.3.6 Kanzerogenes Gesamt-Risiko: IELCR (inkrementelles R.)

Für kanzerogene Stoffe wird die kumulative Dosis über die Gesamtlebensdauer von angenommenen 70 Jahren gemittelt (wenngleich die Dauer der Exposition kürzer sein kann) und

für einen Tag ausgedrückt. Man erhält die *Lifetime Averaged Daily Dose LADD*. Die zusätzlich hinzukommende Wahrscheinlichkeit an Krebs zu erkranken (*individual excess lifetime cancer risk: IELCR*), lässt sich wie folgt durch Multiplikation mit dem Slope Factor ausdrücken:

$$IELCR_{ij} = SF_{ij} LADD_{ij}$$

(genaugenommen soll der pfadspezifische Slope Factor verwendet werden, aber häufig liegt z.B. nur ein Wert für orale Aufnahme vor. Dann wird z.B. für dermale Aufnahme angenommen, dass der Slope Factor derselbe wie der für die orale Aufnahme ist).

Das karzinogene Gesamtrisiko $IELCR_t$ wird als additiv für mehrere Stoffe und Pfade angenommen. Die Berechnung ist demzufolge:

$$IELCR_t = \sum IELCR_{ij}$$

Mit diesem Wert wird also ausgedrückt, wieviele zusätzliche Erkrankungen aufgrund der Gesamtwirkung aller kanzerogenen Stoffe auf allen Transferpfaden (gegenüber einer normalen Hintergrundbelastung) zu erwarten sind. Dieses Modell gilt, strikt genommen, für niedrige Risiken unter 0,01. Grundsätzlich wird erwartet, dass jede Exposition das Risiko an Krebs zu erkranken erhöht- es gibt also keine „sichere“ Dosis.

2.3.3.7 Berechnungsarten

Die hier verwendete Software RBCA bzw. RISC4 ermöglicht die Berechnung punktförmiger Risiken (am „exposure point“) für einzelne Lokaltäten aus den gemessenen oder durch geostatistische Interpolation erhaltenen Rasterpunkten. Diese Vorgehensweise wird auch „Vorwärtsberechnung“ genannt.

Durch „Rückwärtsberechnung“ lassen sich aus einem gegebenen Nutzungsszenario die zur Gefahrenminimierung erforderlichen Sanierungszielwerte („*risk based cleanup levels*“) an der Quelle der Kontaminationsfahne für Einzelstoffe berechnen.

Unter Gefahrenminimierung ist hier zu verstehen, dass man einen bestimmten Wert für das Risiko annimmt, der als akzeptabel gilt. Grenzwerte werden zur Beschreibung von Schutzniveaus verwendet. Ihre Herleitung ist aber häufig unterschiedlich begründet und daher nicht konsistent. Zum Begriff des akzeptablen Risikos ist zu sagen, dass darunter keineswegs zwangsläufig „kein Risiko“ zu verstehen ist. Die naturwissenschaftlich-technische Herleitung differiert oft von einer als subjektiv empfundenen Herleitung, die sich auf die oben erwähnte, subjektiv empfundene Gefahr gründet. Zur Legitimation und verbesserten Akzeptanz stellen JUNG ET AL. (2000) mehrere Thesen auf, wie durch öffentlichen Diskurs der Beteiligten und ergebnisoffene Diskussion der Alternativen bei der Festlegung des Schutzniveaus, bessere Ergebnisse bei deren Festlegung resultieren. Dieser Forderung entsprechend muss ein Ziel bei der vorgelegten Studie sein, Risikokommunikation zu ermöglichen. Dazu kann die vorgestellte Web-Plattform dienen.

2.3.3.8 Vorwärtsberechnung (risk based screening levels)

Bei der sogenannten Vorwärtsberechnung werden die Risiken errechnet, die am Ort der Exposition von einer Kontamination ausgehen. Die Berechnung kann dazu einen Vergleich von Qualitätszielwert und Schadstoffkontamination am Ort der Messung vornehmen oder zusätzlich die Ausbreitung und evtl. Stoffabbau berücksichtigen, bevor es zur Exposition kommt. Diese Vorgehensweise verfolgen die sogenannten *RBSL* (*risk based screening levels*).

Es handelt sich also um *Screening level* entsprechend dem Begriff der Prüfwerte, die zur schnellen Beurteilung von Priorisierung von Standorten unter Berücksichtigung des zu erwartenden Risikos dienen.

2.3.3.9 Rückwärtsberechnung (site specific target levels)

Zur Rückwärtsberechnung werden für bestimmte Szenarien Zielwerte der Exposition vorgegeben. Es kann sich dabei um die Angabe von Konzentrationen oder Referenzdosen, Referenzfaktoren oder Slope-Faktoren bzw. *IELCR* (individual excess lifetime cancer risk) handeln. Es wird also ein Wert vorgegeben, der als akzeptabel gilt (z.B. ein *IELCR* von 1:1.000.000, was bedeutet, dass die Wahrscheinlichkeit, dass durch die gegebene Exposition ein Individuum zusätzlich zu den durch die Hintergrundbelastung gegebenen, an Krebs erkrankt, bei 1:1.000.000 liegt). Die zum Erreichen dieser Zielwerte notwendige Ausgangskonzentration wird dann berechnet. Dies wird als *SSTL* (site specific target levels) oder auch Sanierungszielwert bezeichnet.

2.3.4 Grenzwerte, Qualitätsziele, Risikomaße

- „Akzeptables Risiko“
- Grenzwerte
- Zielwertlisten

Die Festlegung von Schutzniveaus kann aus unterschiedlichen Perspektiven erfolgen, wie die nachfolgenden Erläuterungen zeigen. Damit sei ein Teil der umfangreichen Diskussionen und wissenschaftlichen Abhandlungen gezeigt.

2.3.4.1 „Akzeptables Risiko“

JUNG ET. AL (2000) führen den Begriff des „akzeptablen Risikos“ ein.

Neben einem „de manifestis“ Risiko, wo im juristischen Sinne mit hinreichender Wahrscheinlichkeit eine Gefahr angenommen werden muss und das damit direkte Schutzmaßnahmen erfordert (Grenzwerte), ist der Bereich einer *de minimis* Exposition zu bestimmen, unterhalb derer auch im Sinne der öffentlichen Wahrnehmung keine realen Gefährdungen für Gesundheit und Umwelt mehr erwartet werden müssen. Aus naturwissenschaftlicher Sicht lässt sich aber auch einer *de minimis* Exposition ein Risiko zuordnen. Das in öffentlichen Diskursen zu ermittelnde akzeptable Risiko wird dann in Abhängigkeit von ökonomischen, ökologischen und sozialen Faktoren einen Wert unterhalb des *de manifestis* und oberhalb des *de minimis* Risikos einnehmen, wobei Werte nahe oder gleich dem *de minimis* Risiko anzustreben sind. ...

Zur Festlegung von *de manifestis* Risikoschwellen reicht es nicht, allein natur- und technikwissenschaftliche Ableitungen zu verwenden. Es müssen auch gesellschaftliche Konventionen berücksichtigt werden, was durch die Begriffe „konservative Abschätzung“, „Vorsorgeprinzip“, „Nachhaltigkeit“ und „hinreichende Wahrscheinlichkeit“ umschrieben werden kann.

2.3.4.2 Grenzwerte

Die folgenden zwei Zitate zu Grenzwerten spiegeln das Spannungsfeld wider, innerhalb dessen sich Grenzwertfestlegungen aller Art bewegen:

„Mengenangaben für Schadstoffe, .. die oft relativ willkürlich festgelegt worden sind und angeblich für Lebewesen noch nicht schädlich sein sollen (STREIT 1992)“.

Es muss jedoch davor gewarnt werden, Grenzwerte schablonenhaft anzuwenden, ohne die jeweils unterschiedlichen Verhältnisse im kontaminierten Boden zu berücksichtigen. Jeder Fall sollte individuell beurteilt werden (KLOKE 1993).

Einerseits sind verbindliche Werte als scharfe Grenzen erforderlich, bei deren Über- oder Unterschreitung verschiedene Handlungsweisen beispielsweise zur Sanierung angeordnet

werden, andererseits ist häufig erst unter Berücksichtigung aller Rahmenbedingungen im Einzelfall zu entscheiden (... ob die Anwendung eines Grenzwertes zulässig bzw. geboten ist).

In SAFIRA II wurden von die von der Länderarbeitsgemeinschaft Wasser (LAWA) erstellten “Empfehlungen für die Erkundung, Bewertung und Behandlung von Grundwasserschäden” und die “Geringfügigkeitsschwellen zur Beurteilung von Grundwasserschäden und ihre Begründung” (Prüfwerte, entsprechend dem Begriff der „screening values“) als Vergleichswerte zur Darstellung skaliertes Karten der Überschreitung von Normen herangezogen.

„Als Sanierungszielwerte eignen sich die Schwellenwerte bei großräumigen, massiven Grundwasserschäden dagegen nur sehr bedingt. ... Es stehen keine technischen Verfahren zur Verfügung, mit denen binnen überschaubarer Zeiträume ein solches Sanierungsziel erreicht werden könnte“. Der zentrale Aspekt (behördlicher) Entscheidungsfindung ist also zwischen den Belangen des Gewässerschutzes und den – insbesondere finanziellen – Belastungen, mit denen eine Sanierung verbunden ist, zu entscheiden ... Es fehlt bisher an einer Methodik und an Kriterien, die den komplexen Entscheidungsprozess steuern können... Die Entwicklung von Entscheidungsmethoden und –kriterien wird damit fast vollständig auf die Behördenebene verlagert. (GABNER 2003)

Grundsätzlich ist ein Zustand anzustreben, wie er vor der anthropogenen Beeinflussung geherrscht hat, oder, falls das nicht möglich oder nicht nötig ist, wie er als Hintergrundbeeinflussung „normalerweise“ vorhanden ist, ohne dass von ihm eine Gefährdung für Mensch und Umwelt ausgeht.

2.3.4.3 Zielwertlisten

Die im folgenden Kapitel vorgestellten Software-Programme enthalten Werte für die Qualitätsziele nach Maßgabe mehrerer Listen, Staaten bzw. Länder sowie Referenzdosen *RfDs*, bzw. –konzentrationen *RfCs* und *Slope Factors SFs*. Zu den verwendeten Qualitätszielen und Referenzdosen sowie *Slope Factors* für Oberflächenwasser und marines Oberflächenwasser zählen z.B. folgende Listen (SPENCE & WALDEN 2001):

- United States Environment Protection Agency Ambient Water Quality Criteria
- United Kingdom Environmental Quality Standards (statutory and proposed)
- Australia and New Zealand Environment and Conservation Council (ANZECC) Guidelines for the Protection of Aquatic Ecosystems
- European Commission Water Quality Objective (EU-WRRL)
- Canadian Council of Ministers for the Environment Freshwater Aquatic Life Guideline
- Für Sediment-Qualitätszielwerte verwendet RISC4 die Sedimentkriterien der National Oceanographic and Atmospheric Administration (NOAA).

Die Schwierigkeit der (nicht) einheitlich hergeleiteten und begründeten Qualitätsziele, *RfDs*, *RfCs* und *SFs* zeigt sich z.B. in der Untersuchung des ITRC (2005), wo die Herleitungsmethodik der unterschiedlichen US-amerikanischen Bundesstaaten für Bodenprüfwerte zur Bodenbewertung („screening levels“, EPA 1996B) verglichen und beschrieben wird. Ein Vergleich der – ursprünglich durch *RAGS* einheitlich regulierten (EPA 1989B) – Risk Assessment Methodik (Details, Erläuterungen, Glossar, Begrifflichkeiten) in den Bundesstaaten findet sich ebenfalls in diesem Bericht. Trotz generell einheitlicher Vorgaben weichen dort Prüfwerte für den gleichen Stoff teils minimal, teils bis zu einer Größenordnung von einander ab (ITRC 2005).

Zu den Datenbanken, aus denen die von der Software RISC, RBCA und SADA verwendeten Werte stammen, gehören *HEAST*, die Health Effects Assessment Summary Tables (<http://epa-heast.ornl.gov/heast/index.html>) - nur für EPA-interne Nutzung), für Angaben zu Risiko-

Abschätzungen der Humantoxizität und *IRIS*, das Integrated Risk Information System der US EPA (<http://www.epa.gov/iris/>, Zugriff 5.7.07) für die allgemeinen Toxizitätswerte sowie die Provisional Peer Reviewed Toxicity Values (PPRTV <http://risk.lsd.ornl.gov/tox/> - nur für EPA-interne Nutzung) und zitierte Quellen für die EPA OSWER Office of Superfund Remediation and Technology Innovation (OSRTI) Programme, wobei IRIS und PPRTV die Präferenz zu geben ist (HEAST wird allmählich durch die PPRTV abgelöst; s. http://risk.lsd.ornl.gov/tox/tox_values.shtml (Zugriff 5.7.07) für die Erläuterung dieser Präferenz-Hierarchie).

Die amerikanische Umweltbehörde EPA empfiehlt außerdem die Verwendung der CalEPA-Toxizitätswerte (<http://www.oehha.ca.gov/risk/chemicalDB/index.asp>, Zugriff 5.7.07), sowie die Tabellen der *Agency for Toxic Substances and Disease Registry* (ATSDR) zu Minimal Risk Levels für inhalative oder orale Aufnahme (MRLs/ nur für nicht-kanzerogene Stoffe) (<http://www.atsdr.cdc.gov/mrls/index.html> Zugriff 5.7.07) für Stoffe, für die in IRIS keine Angaben gemacht werden. ATSDR verwendet „No Observed Adverse Effect Level/ Uncertainty Factor“ NOAEL/UF zur konservativen Ableitung dieser Werte.

Slope Factors und Referenzdosen für chronische oder sub-chronische Effekte von Nicht-Radionukliden sowie deren physikochemische Eigenschaften können, ständig aktualisiert, von der RAIS-Webseite http://risk.lsd.ornl.gov/cgi-bin/tox/TOX_select?select=nrad (Zugriff 5.7.07) bezogen werden. Für die Verwendung im US-amerikanischen Raum ist dies die autoritative Quelle, für die Verwendung in anderen Ländern sind die Voraussetzungen jeweils im Einzelfall zu prüfen. Die Verwendbarkeit dieser Werte wird in der vorliegenden Arbeit durch die Verwendung der vorgestellten Software als gegeben vorausgesetzt.

Sollen Werte nach deutscher Regulation bzw. für den Gebrauch in Deutschland ergänzt oder überarbeitet werden, sind Werte und Herleitungen für praktisch alle Stoffe in EIKMANN ET AL. (1999) zu finden.

2.4 Software

- RBCA
- RISC4
- SADA

Für die Verwendung in der vorliegenden Arbeit kam nur fertig verfügbare Software zur Risikoabschätzung in Frage. Deren Fähigkeiten sollten durch eine Expositionsabschätzung die Risikocharakterisierung ermöglichen. Nach Möglichkeit soll die Software die deutschen Gesetzgebungsaspekte berücksichtigen, indem Modellannahmen, Szenarien und letztlich auch Grenzwerte u.ä. den deutschen Verhältnissen angepasst sind.

Mit UMS liegt theoretisch eine deutsche Software vor- als vereinfachte Umsetzung des UMS-Modells der Arge Fresenius Focon (SIMMLEIT ET AL. 1994) ist sie als Prototyp, jedoch nicht frei, verfügbar. CemoS, die softwaretechnische Implementation der von TRAPP & MATTHIES (1996) beschriebenen Ausbreitungsmodelle und EUSES (European Union System for the Evaluation of Substances) dienen der Bewertung von (neuen oder alten) Chemikalien nach ihrer Freisetzung in die Natur. Die Berechnung der Konzentration in einzelnen Umweltkompartimenten ist möglich, nicht enthalten ist jedoch die (human-)toxikologische Gegenüberstellung dieser Konzentrationen mit Expositionsmaßen zum Zweck der Risikocharakterisierung.

Für das *Network for Industrially Contaminated Land in Europe (NICOLE)* wurde als Auftragsarbeit von ARCADIS GERAGHTY & MILLER INTERNATIONAL INC. (2004) ein Vergleich verschiedener Risk Assessment Software durchgeführt. Schwerpunktmäßig wurden die länderspezifischen Software-Implementationen europäischer Länder und der USA dafür untersucht, um im Rahmen des NICOLE Frameworks eine Hilfestellung bei der Entscheidung für bestimmte RA-Anwendungen zu geben.

Zu den Vergleichs-Kriterien gehörten die betrachteten Pfade und die Ergebnispräsentation sowie die erforderlichen Eingangs- und Modelldaten und die implementierten Algorithmen, bzw. deren Auswirkung auf die Ergebnisse. Dazu wurden 5 Teststandorte untersucht. Grund- und Oberflächenwasser sollten untersuchbar sein. Dazu sollte die Fähigkeit vorhanden sein, Ausgasungseffekte zu untersuchen. Zu den bei NICOLE untersuchten Programmen gehören u.a. RBCA, RISC4 und RAM.

Grundsätzlich werden ähnliche Ergebnisse durch die verschiedenen Software-Pakete erhalten. Lediglich bei den Ergebnissen zur Schadstoff-Konzentration in Innenräumen erzeugt UMS wesentlich höhere Werte als alle anderen untersuchten Programme. UMS erzeugt Ergebnis-Berichte für die einzelnen Aufnahmewege über Verschlucken, Hautkontakt und Einatmen. Im Gegensatz dazu leiten RBCA und RISC Werte für jeden einzelnen Transferpfad ab. RAM enthält weder eine Szenariendatenbank noch Vergleichswertlisten (Ziel-/Grenzwerte) und machte insgesamt einen unausgereiften Eindruck (häufige Abstürze, fehlerhafte Anzeige, Benutzerschnittstelle unbrauchbar).

Risikolevel sind, wie die Studie feststellt, hochgradig abhängig von den in den Ländern geltenden Gesundheitskriterien und damit nicht unbedingt übertragbar. Daher ist davor zu warnen die Ergebnisse der verwendeten Programme ungeprüft als Absolutwerte für Handlungsempfehlungen in Deutschland zu verwenden. Mit Sicherheit können sie aber für eine Priorisierung von zu bearbeiteten (Sanierungs-)Flächen dienen, bzw. sie können dabei helfen Landnutzungssensitivitäten abzuleiten.

Die Wahl für die vorliegende Arbeit fiel auf *RBCA*, eine kommerzielle softwaretechnische Implementation der in US-EPAs „*RAGS Risk Assessment Guidance for Superfund*“ beschriebenen Verfahren, *RISC4*, ein kommerzielles Produkt der BP Oil Great Britain und *SADA spatial assistance and decision analysis*, eine kostenlose Software der University of Tennessee, Knoxville.

Alle drei Produkte sind ausführlich dokumentiert, aber *closed-source*. Letzteres hat zur Folge, dass eine Erweiterung oder Anpassung und sogar die Schaffung von zusätzlichen Schnittstellen zu anderen Programmen im vorliegenden Projekt nicht möglich war. Daher wurde der Weg gewählt, die bestehenden Daten über variable Exportschnittstellen in den für die *risk assessment software* notwendigen Formaten zur Verfügung zu stellen. Das bedeutet in gewisser Weise eine „Einbahnstraße“, denn die einmal exportierten Daten liegen separat von der im integrierten Portal-System verwendeten Datenbank vor. Daher werden Aktualisierungen nicht automatisch übernommen, sondern werden erst bei einem neuerlichen Datenexport wirksam.

Alle drei Produkte sind nicht speziell den deutschen Voraussetzungen angepasst. *RBCA*, *RISC4* und *SADA* verwenden amerikanische (USA/Kanada) oder internationale (nicht deutsche) Zielwertlisten.

Die im folgenden Abschnitt vorgestellten Software-Werkzeuge für die Risikoabschätzung *SADA*, *RBCA* und *RISC4* integrieren verschiedene Referenz-Datenbanken von Grenzwerten, Referenzdosen und –konzentrationen für nicht kanzerogene Stoffe wie auch die Slope Faktoren für karzinogene Stoffe, sowie Modelle zur Exposition. Durch Modellierung werden Szenarien erstellt, um für bestimmte Expositionsarten und Rezeptoren ein quantifiziertes Risiko zu berechnen. Das berechnete Risiko ist also nur so gut quantifiziert wie das ihm zugrunde liegende Modell die Wirklichkeit abbildet. *SADA* enthält zudem Module zur 3-dimensionalen Regionalisierung durch Interpolation und 3D-Darstellung. Zur Quantifizierung der geostatistischen Unsicherheit dienen Variographie und die Darstellung der Krigingvarianz.

Ein älteres weiteres umfangreiches Software-Paket zur Abschätzung von Unsicherheit bei der Grundwasserströmungs- und Transportmodellierung ist *UNCERT* (WINGLE ET AL. 1997). Es erlaubt die Modellierung des Untergrundes durch Gridding und die Generierung von Eingangsdaten für *Modflow* und *MT3D*. Es enthält Module für beschreibende Statistik, Variographie und Regression, Gridding, Konturierung (m. *IDW* o. *Kriging*) und stochastische Simulation. *UNCERT* ist Open Source und damit kostenlos und erweiterbar, wird aber nach Mitteilung des Autors (WINGLE pers. Mitteilung, 2004) nicht mehr weiterentwickelt und wurde daher außer zu einem Test nicht eingesetzt.

Einfache Ausbreitungsmodelle im Grundwasser und in der Luft beschreiben bei *RBCA* und *RAM* in den höheren Stufen (*tiers*) der Risikoabschätzung Schadstoffausbreitung und ggf. Schadstoffabbau. *RISC 4* enthält zusätzlich ein Excel-Arbeitsblatt zur *Tier1*- Abschätzung, in dem einfache Modelle für den Schadstoffabbau integriert sind.

Durch Interpolationsverfahren werden bei *SADA* diskrete Punktrisiken auf Flächen regionalisiert. Hingegen ist die Anzahl möglicher Expositionsmodelle bei *RISC*, *RAM* und *RBCA* größer, wird aber immer nur für punktförmige Rezeptoren (bzw. z.B. auf die Grundfläche eines einzelnen Hauses bezogen) berechnet. Bei *RBCA* und *RISC4* bezieht sich die Aussage auf eine, höchstens zwei Dimensionen- für die Regionalisierung in den Untergrund hinein werden keine Aussagen getroffen. *SADA* beherrscht die Darstellung und

Betrachtung einzelner Scheiben oder einer dreidimensionalen Darstellung der Kontamination. Tab. 6 enthält die wichtigsten Eigenschaften und Unterscheidungsmerkmale für RISC4, RBCA und RAM.

Tab. 6: Liste der Programmeigenschaften und Vergleich von RISC4, RBCA und RAM.

Fähigkeiten	RISC4	RBCA	SADA
Interne Stoffdatenbank	Ja	Ja	Ja
Monte Carlo Unsicherheitsanalyse	Ja	mit Crystal Ball	Nein
Tier 1 „Lookup“-Werte	Ja	Nein	Nein
Rückwärtsberechnung (SSTL) für Sanierungszielwerte	Ja	Ja	Nein
Modelle:			
Aussenluft	Ja	Ja	-
Raumluft	Ja	Ja	-
Ungesättigte Zone → Grundwasser	Ja	Nein	-
Boden → Grundwasser	Ja	Ja	-
Grundwasser: gelöste Phase	Ja	Ja	-
Grundwasser → Oberflächenwasser	Ja	Ja	-
Boden → Oberfläche	Ja	Ja	-
Boden → Untergrund	Ja	Ja	-
Aufnahmepfade:			
Boden durch Verschlucken	Ja		Ja
Boden Teilchen-Inhalation (Staub)	Nein	Ja	
Hautkontakt mit Boden	Ja	Ja	Ja
Grundwasser durch Verschlucken („Trinkwasser“)	Ja	Ja	Ja
Hautkontakt und Einatmen beim Duschen	Ja	Nein	-
Einatmen von Innenraum- oder Außenluft	Ja	Ja	-
Oberflächenwasser durch Verschlucken	Ja	Ja	Ja
Oberflächenwasser durch Hautkontakt	Ja	Ja	Ja
Fisch aus kont. Oberflächenwasser: Essen	Ja	Nein	Ja (Nahrung)
Gemüse aus Garten: Essen	Ja	Nein	Ja (Nahrung)
Bewässerungswasser (aus Grundwasser): Verschlucken	Ja	Nein	-
Bewässerungswasser (aus Grundwasser): Hautkontakt	Ja	Nein	-
Bewässerungswasser (aus Grundwasser): Einatmen (spray)	Ja	Nein	-

2.4.1 RBCA

“*Risk Based Corrective Action*”, (gw software inc.)

Die RBCA Software implementiert risk assessment gemäß RAGS, ASTM PS-104 Dokument (ASTM 1995): “Standard Provisional Guide for Risk Based Corrective Action“. Es werden Stufen 1-3 des tiered RA durchgeführt. RBCA funktioniert als Microsoft Excel-Plugin und ist damit an das Betriebssystem Windows gebunden. Die Software-Quellen liegen nicht offen und ermöglichen daher keine Anpassungen.

In RBCA werden die Wirkungspfade GW, Oberflächenwasser, Luft für eine chemisch-toxikologische Datenbank für ca. 115 Stoffe, die zudem erweiterbar ist, betrachtet. RBCA verfügt über ein einfaches Transport- und Abbaumodell im Grundwasser, für das Stationarität ohne (natürlichen) Abbau entlang der Wirkungspfade zu Berechnung angenommen wird. RBCA ist verhältnismäßig einfach zu bedienen und wird von sehr vielen Benutzern verwendet. RBCA stellt, zumindest innerhalb der USA und für die im Rahmen einer dortigen bundesweiten Kampagne zur Prioritätensetzung festgelegten „superfund-sites“ also Altlastenstandorte für die eine bestimmte Finanzierung festgelegt wurde, eine Art Standardsoftware für das Risk Assessment dar.

2.4.2 RISC4

“*Risk Integrated Software for Cleanups*”, BP Oil.

RISC4 ist ein eigenständiges Windows Programm mit einer erweiterten Berechnung für Tier 1 in Microsoft Excel. Als kommerzielles Programm legt auch RISC4 die Software-Quellen nicht offen.

Auch RISC 4 entspricht den Maßgaben der „risk based corrective action“ RBCA (ASTM 1995). Es umfasst eine umfangreiche (und vom Benutzer erweiterbare) Toxen-Datenbank mit chemisch-physikalischen Eigenschaften wie Dampfdruck, Löslichkeit, Henry’s Law Koeffizient, Oktanol-Wasser-Koeffizient, org. Kohlenstoff-Partitionierungs-Koeffizient K_{oc} , Anorganischer Partitionierungskoeffizient K_D , Diffusionskoeffizienten in Luft bzw. Wasser, Abbauraten, Boden-zu-Pflanze Konzentrationen (Aufnahmeraten in Gemüse), und diverse Modelle für deren Ausbreitung in Grund- oder Oberflächenwasser und Innen- bzw. Aussenluft. RISC4 nimmt für sich in Anspruch mindestens ebenso umfangreiche Funktionalität zu bedienen wie RBCA, zudem aber mit überschaubarer Benutzerführung und mehreren zusätzlichen Pfadbetrachtungen. (s. Tab. 6).

RISC integriert Monte Carlo Methoden zur probabilistischen Risikoabschätzung (in Tier 3).

Folgende Pfade sind, zusätzlich zu den in RBCA gängigen, integriert:

- Exposition des Schutzgutes Mensch durch Inhalation bzw. Hautkontakt beim Duschen mit kontaminiertem GW
- Exposition durch Bewässerung bzw. Verzehr von Gemüse, das mit kontaminiertem GW bewässert worden ist.

Die integrierten Ausbreitungs- bzw. Abbau-Modelle gehen von jährlichen Mittelwerten aus und modellieren den Schadstofffluss eindimensional, die Dispersion im Grundwasser dagegen dreidimensional. Daher stellen sie keine im ingenieurgeologischen Sinne brauchbaren

Modelle dar, um z.B. die Sanierungs-Förderleistung zu berechnen, aber können z.B. zur Beantwortung folgender Fragen dienen (SPENCE ET AL. 2001):

- Wie hoch ist die zu erwartende maximale zukünftige Konzentration am Ort des Rezeptors?
- Wie weit abstromig stabilisiert sich die Konzentration eines Schadstoffes bei einer gegebenen Abbaurrate?
- Ist ein komplexeres Rechenmodell notwendig?
- Wie lang braucht Stoff X um das Grundwasser zu erreichen? Mit welcher Rate?
- Wann ist die Quelle verbraucht?

RISC enthält Modelle für

- Übergang von der vadosen Bodenzone ins Grundwasser
- Dispersion, Advektion, Retardation und Degradation von Schadstoffen in GW
- Übergang von einer gesättigten Quelle im Boden an der Grundwasseroberfläche
- Emissionen vom Boden in die Außen- oder Raumluft (beinhaltet auch Modelle für den biologischen Abbau)
- Emissionen vom Grundwasser in die Raumluft
- Sedimentpartitionierungs- und Oberflächenwasser-Mischmodelle, die mit dem Grundwassermodell gekoppelt werden können.
- Alle Modelle können miteinander gekoppelt berechnet werden (z.B. ges. Bodenquelle → Übertritt ins GW → Entgasung in die Innenraumluft)

Die Berechnungen können für bis zu zwei verschiedene Expositionsszenarien gleichzeitig (z.B. Wohn/Arbeitsszenario) mit jeweils bis zu 14 unterschiedlichen Expositionspfaden, durchgeführt werden. Die kumulative Wirkung mehrerer Pfade und Stoffe kann additiv abgeschätzt werden. Das gilt sowohl für die Vorwärts- wie die Rückwärtsberechnung.

Ausserdem ist ein Microsoft EXCEL Rechenblatt enthalten, mit dessen Hilfe Tier 1-Abschätzungen (getrennt vom eigentlichen RISC4-Programm) durchgeführt werden können. Hiermit ist es sogar möglich Tier 1 mit einfachen Ausbreitungsmodellen für das Grundwasser, die Luft oder in der vadosen Zone durchzuführen (DOMENICO bzw. JOHNSON & ETTINGER 1991 bzw. GREEN-AMPT 1911). Das Rechenblatt kann angepasst werden, z.B. um verschiedene Bodentypen zu repräsentieren. Das Rechenblatt ist zur Verwendung vor der eigentlichen Risikoabschätzung mit RISC 4 gedacht (zum Screening): für die Werte, die nicht die Qualitätsziele überschreiten, ist zunächst keine weitere Untersuchung notwendig. Die Annahmen, die dem Tier 1 Arbeitsblatt zugrunde liegen müssen für den Einzelfall überprüft werden. Stoff- oder pfad-additive Berechnungen sind mit diesem Arbeitsblatt nicht möglich.

2.4.3 SADA

Spatial Analysis and Decision Assistance, University of Tennessee Research Corporation, Support by US EPA & Dept. of Energy.

Die bisher vorgestellten Programme RBCA und RISC4 dienen der punktförmigen Risikoanalyse. Zur Ermittlung flächenhafter Risiken sind Regionalisierungsverfahren notwendig. Diese werden von SADA in Form deterministischer und geostatistischer Interpolationen zur Verfügung gestellt. Zu den Verfahren gehören Kriging, IDW und Nearest Neighbour-Verfahren. In einer 3D-Viewer-Darstellung ermöglichen sie die 3D-Darstellung regionalisierter Kontaminationshöhen. Mit Hilfe spezieller Risk Assessment Module wird die

räumliche Abschätzung der Gefährdung für Mensch und Umwelt vorgenommen. SADA enthält dagegen aber keine Modelle zur Schadstoffausbreitung oder zum -abbau.

Die enthaltene Datenbank führt folgende *Screening-Listen* für die *Ökosystemare Gefahrenabschätzung* (Umweltrisiko/ „eco risk“) auf:

- Canadian WQG,
- EC20 Daphnien,
- EC20 Fisch,
- EC25 Bass Population,
- EC20 Sensitive Species,
- EPA Region 4- Acute,
- EPA Region 4-Chronisch,
- EPA Region 5 ESLs –Oberflächenwasser,
- LCV Aquatische Pflanzen,
- LCV Daphnien,
- LCV Fisch,
- LCV Nicht-Daphnien-Invertebraten,
- NAWQC – Acute,
- NAWQC –Chronisch,
- Tier II SAV,
- Tier II SCV,
- EPA Region 6 Süßwasser,
- EPA Region 6 Marin.

Wenngleich keine der genannten Listen direkte Anwendung für Deutschland findet, können die Werte als Richtwerte verwendet werden. SADA erlaubt die Verwendung mehrerer Listen in einer vorzugebenden Rangordnung. Die Anzahl und die entsprechenden Lokalitäten von Zielwertüberschreitungen werden angezeigt.

Bei der *Gesundheitsrisikoabschätzung* (human health risk assessment) gibt es Szenarien für „*residential*“: Bewohner, *industrial*, *agricultural*, *recreational* und *excavation*, die sich in der Art und Anzahl der betrachteten Aufnahmewege unterscheiden. Die möglichen Aufnahmewege sind:

- Verschlucken,
- Einatmen,
- Hautkontakt,
- Extern,
- Verzehr von Fisch, Gemüse, Fleisch, Milchprodukten
- (und deren Gesamtsumme).

Auf diese Weise können die Ausgangswerte einem Screening unterzogen und die Überschreitungslokalitäten (für einen Gefahrenindex) angezeigt werden, oder eine Interpolation der Werte, auch auf ausgewählten Teildaten (Umriss-Polygon oder Ellipse und Datums- und Tiefenbasierte Auswahl), durchgeführt und die Überschreitungen in 2D-Karten oder Tabellen dargestellt werden.

3 Entscheidungsunterstützungssysteme

Dieses Kapitel umfasst folgende Punkte:

- Anforderungen an DSS und Definition
- Geschichte der DSS
- DSS im Umweltschutz
- Aufgaben von DSS im Umweltschutz
- DSS System-Anforderungsprofil im vorliegenden Projekt

3.1 Anforderungen an DSS und Definition

Entscheidungsunterstützungssysteme (engl. Decision Support Systems, *DSS*) unterscheiden sich in ihrer Funktionalität entsprechend der an sie gestellten Anforderungen bzw. der zu bearbeitenden Problemstellung ebenso sehr wie aufgrund der avisierten Benutzergruppe.

SPRAGUE (1986) gibt folgende allgemeine Definition eines DSS:

“interactive computer based systems, which help decision makers utilize data and models to solve unstructured problems”,

d.h. man konnte darunter jede Art von Systemen verstehen, die durch Verbesserung der Nutzung von Daten und Modellen bei unstrukturierten Problemen irgendeine Art von Beitrag bei der Entscheidungsfindung leisteten. Der selbe Autor macht verschiedene Rollen bei der Konstruktion eines DSS aus, vom Manager oder Nutzer über einen Vermittler (intermediary) zum DSS-Ingenieur (DSS-builder), der die von einem Programmierer (Toolsmith) erzeugten Werkzeuge mit den vom *technical supporter* erstellten Daten und Modellen zum DSS verknüpft.

Entsprechend den an es gestellten Aufgaben soll ein DSS möglichst anpassungsfähig reagieren können (Erweiterung, Skalierung) und Unterstützung in allen Schritten der Entscheidungsfindung (Problemdefinition – *intelligence*, Problemuntersuchung – *design*, Auswahl – *choice*, sowie bei der *Implementation*) liefern. Naheliegenderweise soll es umfassend und leicht zu bedienen sein.

Wie PEREIRA & QUINTANA (2002) schreiben, ist bei der Erstellung verschiedenster Entscheidungsunterstützungssysteme im Bereich Umwelt- und Risikomanagement offenbar geworden, dass man bei der formalen Analyse von Umweltmanagementproblemen, die schon von ihrer Definition her komplex und mit hohem Risiko/ hohen Ansprüchen behaftet („*involving high stakes*“) sind, nicht erwarten kann, dass sie dem Entscheider Lösungen liefern. Sie sollen also keineswegs den Entscheider ersetzbar machen. Vielmehr werden sie entwickelt und verwendet, um fundierte und qualitätsgesicherte, also reproduzierbare und dokumentierte, Entscheidungen treffen zu können. Eines der wichtigsten Unterscheidungskriterien stellt für diese Autoren die Fähigkeit des Systems dar Entscheidungsunterstützung nach einem einzelnen oder nach mehreren Kriterien zu liefern.

Im Zusammenhang mit der Beteiligung verschiedener Personen bei der Entscheidungsfindung ist die Möglichkeit wichtig, das DSS allgemein zugänglich zu machen, möglichst nach einem je nach Wissen und Anforderungen der Nutzer abgestuften System, in dem die Darstellung

und Rechte bei der Veränderung der dargestellten Inhalte sich je nach der Rolle des Nutzers verändern.

PEREIRA & QUINTANA (2002) zeigen zweistufige Entwicklungen, die auf der einen Seite ein Informationssystem darstellen, dem auf der anderen Seite ein Entscheidungsunterstützungssystem gegenübersteht. Ein solches verteiltes Umwelt-DSS enthielt bereits den Zugang zu Daten in Form von Katalogen, Berichten, Relationalen Datenbanken und GIS wie auch Werkzeuge zur Modellierung und Datenanalyse einschließlich multikriterieller Evaluierungsmethoden. Bei einem ähnlichen System des *Joint Research Centers* der EU (JRC) fand man heraus, dass die Anforderung eher nach einem Informations- denn nach einem Entscheidungssystem war. Ein solches System ermöglicht dem Nutzer in strukturierter Weise Daten zu „browsen“ und mehrdimensionale Optionen unter Einbezug der zueinander in Konflikt stehenden möglichen Interessen zu evaluieren. Der Vorteil dieser Betrachtungsweise liegt darin, dass das System nicht nur verwendet wird, um von einem bzw. einzelnen Entscheidern gewählte Optionen zu rechtfertigen oder legitimieren, sondern tatsächlich bereits im Vorfeld die Auswahl möglicher Entscheidungen zu verbreitern und bekannt zu machen, um damit einen breiteren Konsens unter den Betroffenen zu schaffen (oder jedenfalls die rechtlich geforderte Diskussion unter Beteiligung zu initiieren). „*GOUVERNE*“ (*Guidelines for the Organisation, Use and Validation of information systems for Evaluating aquifer Resources and Needs- Tools to Inform Debates, Dialogues & Deliberations TIDDD*) (CORRAL QUINTANA ET AL. 2002) stellt ein solches System des JRC für die Grundwasserplanung dar.

Bei den beschriebenen Systemen handelt es sich oft um DSS, die für einzelne kleinere Standorte eine einfache und routinierte Bestandsaufnahme durch Behörden bzw. andere Verantwortliche ermöglichen bzw. Sanierungsalternativen sichtbar machen können. Oft ist auch eine Möglichkeit zur Kosten- und Risikoabschätzung enthalten. Die verwendeten Methoden führen dabei von einer einfachen Optimierung möglicher Beprobungspläne bis hin zur Integration von Transport- und Abbaumodellen, wofür geostatistische Methoden und externe hydrogeologische Modelle wie *MODFLOW* oder *MT3D* zum Einsatz kommen.

Im Abschlussbericht des CLARINET-Netzwerks der Europäischen Kommission zu Umwelt und Klimaforschung (1998-2001) werden Entscheidungsunterstützungssysteme formal untersucht und definiert, um einen (europäischen) Vergleich der verwendeten Systeme zu ermöglichen. BARDOS ET AL. (2001) beschreiben, dass Entscheidungen angesichts von Unsicherheit und multiplen, häufig gegensätzlichen Interessen und Zielen, eine wichtige Rolle und Herausforderung im Umweltmanagement darstellen, und gleichzeitig für signifikante wirtschaftliche Aktivität verantwortlich sind. Dem Bericht zufolge sollen

DSS die Identifikation realistischer Alternativen bei der Entscheidungsfindung, die Informationsintegration in einen kohärenten Rahmen zur Analyse und Entscheidungsauswahl sowie die Unterscheidung zwischen Schlüsselinformationen und Nebeninformationen unterstützen. Sie sollen außerdem eine reproduzierbare und transparente Entscheidungsfindung sowie eine konsistente Methodik beim Vergleich der Kontamination verschiedener Standorte erleichtern.

An dieser Vorgabe orientiert sich die vorliegende Arbeit.

Der Studie zufolge können sowohl Software Systeme wie auch einfach geschriebene Anweisungen oder z.B. Anweisungen in Form von Flow-Charts (Ablaufdiagrammen) als Entscheidungsunterstützungssysteme gewertet werden. Die folgenden Abschnitte beschreiben in aller Kürze allgemein die

Aufgaben von DSS im Umweltschutz (Kap. 3.4), die Aufgaben und Möglichkeiten von DSS beim Risk Assessment (Kap. 3.4.1) sowie bei der Steuerung der betrieblichen Arbeitsabläufe (Workflow Management, Kapitel 3.4.2). Daraus ergeben sich die Anforderungen an das DSS in der vorliegenden Arbeit, wie es in Kapitel 3.5 vorgestellt wird.

3.2 Geschichte der DSS

Power beschreibt die Geschichte der Entscheidungsunterstützungssysteme wie folgt (POWER 2002):

Frühe Entwicklungen umfassen Systeme, die in den späten 1960er Jahren unter den Namen Management Information Systems (MIS) oder Management Decision Systems (MDS) firmierten und auf Mainframe Computern wie dem IBM System 360 liefen. Sie werden von SCOTT MORTON (1971) beschrieben. Großen Einfluß hatte ein von Gordon Davis (DAVIS 1974), erschienener Text über *MIS*. Er definierte ein Management Information System als

„an integrated man/machine system for providing information to support the operations, management, and decision-making functions in an organization“.

Mit den Kapiteln 12 *“Information System Support for Decision Making”* und Kapitel 13 *“Information System Support for Planning and Control“* bereitete er die Grundlagen der Entwicklung von DSS in Forschung und Praxis vor. Eine wichtige Definition von Kriterien für den Entwurf von Modellen und Systemen zur Unterstützung von „management decision-making“ stammt von J.D.C. LITTLE (1970): Die vier Kriterien umfassen *Robustheit, Einfachheit der Bedienung, Simplität und Komplettheit der relevanten Details*. Diese Kriterien haben bis heute Gültigkeit beim Entwurf solcher Systeme. Unterschiedlichste Aufgaben sollten von DSS unterstützt werden, gerade auch im Bereich des Finanz- und Portfolio Management, aber auch Aufgaben der Betriebsplanung und strategischen Entscheidung sowie bei der Stadt- und Infrastrukturplanung.

1980 erscheint von STEVEN ALTER als Ergebnis seiner Doktorarbeit am MIT (ALTER, 1975) das Buch *„Decision Support Systems: Current Practice and Continuing Challenge“* (ALTER, 1980). Mehr und mehr mischen sich der Entwurf wissensbasierter Systeme und Expertensysteme, also der sogenannten „künstlichen Intelligenz“ (*artificial intelligence Ai*) mit dem von DSS. Im Jahr 1981 erstellen BONCZEK, HOLSAPPLE UND WHINSTON einen theoretischen Rahmen zum Verständnis davon wie Künstliche Intelligenz und Expertensysteme für die Entwicklung von Entscheidungsunterstützungssystemen relevant sind. 1982 veröffentlichen SPRAGUE und CARLSON *„Building Effective Decision Support Systems“* als Überblick wie Organisationen DSS erstellen können und sollen.

In den frühen 1990er Jahren vollzieht sich durch die Weiterentwicklung vor allem auch der Hardware ein Wechsel von auf Mainframe-Computern basierten Systemen zu verteilten Systemen und PC basierten Systemen. Dabei finden die DSS Platz auf verteilten Rechnern, die einzelne Aufgaben (Datenbankenserver, Applikationsserver) erfüllen und über schnelle Netzwerke, nicht zuletzt das Internet, miteinander kommunizieren.

3.3 DSS im Umweltschutz

KERSTEN ET AL. (1999) geben neben einer Einführung in die Thematik und einem Glossar auch einen umfangreichen Überblick über eine Reihe von Anwendungsbeispielen von DSS in der nachhaltigen Entwicklung, vor allem im Umweltschutzbereich. Zu den genannten Gebieten gehören: *Environmental decision making* (Entscheidungsunterstützung im

Umweltschutz), *Environmental impact assessment* (Umweltverträglichkeitsprüfung, UVP), *Water resource management* (Reservoirmanagement), *Infrastructure* (Infrastrukturfragen).

Gemeinsamer Nenner der all diesen Systemen zugrundeliegenden Aufgaben dürfte ihre Unstrukturiertheit sein. Die Aufgabe von DSS liegt also in der Strukturierung unstrukturierter oder semistrukturierter Daten und Informationen zur Bearbeitung umweltspezifischer Fragestellungen. Durch den Einbezug großer Datenbanken in DSS spielen Data Warehousing und Data Mining (z.B. bei ESTER & SANDER 2000) in neuester Zeit eine Rolle.

Für die Erfahrungen in ihrer Arbeitsgruppe "TA-Technology Assessment/ DESIA-Decision Support and Integrated Assessment/ KAM-Knowledge Assessment Methodologies" am Joint Research Center der Europäischen Kommission beschreiben PEREIRA & QUINTANA (2002) in ihrem Bericht „*From Technocratic to Participatory Decision Support Systems: Responding to the New Governance Initiatives*“ die Entwicklung von umweltbezogenen DSS unter dem Aspekt der berücksichtigten Nutzer: Sie stellen dar wie anfangs Expertensysteme in DSS nicht nur Systeme von Experten sondern auch für Experten waren, die ohne besondere Kenntnisse, nicht zuletzt auch im Bereich Informationstechnologie nicht nutzbar waren. Sie zeigen, wie mit der Verbesserung von Benutzerschnittstellen (*user interfaces*) und der größeren *computer literacy* in weiten Teilen der Bevölkerung die Beteiligung betroffener oder interessierter Personen (*stakeholders*) erst ermöglicht wird, wie es in den letzten Jahren für Planungsprozesse, wie beispielsweise auch in der Europäischen Wasserrahmenrichtlinie EUWRR (EU 2000), gefordert wird. Der Unterschied liegt nach ihrer Darstellung darin, das DSS in einen sozialen Prozess einzubetten anstelle den sozialen Prozess in das DSS verankern zu wollen.

Verschiedene Beispiele können zur Veranschaulichung der angestrebten Fähigkeiten und Unterschiede dienen:

Eine prototypische Anwendung aus Deutschland zur risikobasierten Entscheidungsunterstützung war das UMS-Modell (HEMPFLING ET AL. 1997). Das „Multimediale Leit- und Informationssystem für Deponien und Altlasten“ MELINDA (BENNER ET AL. 1999, BENNER ET AL. 2001, LEINEMANN ET AL. 2001) des Instituts für Angewandte Informatik am Forschungszentrum Karlsruhe hat die Zielsetzung:

„...Altlast/Deponie-Standorte umfassend dreidimensional zu visualisieren, um Interessenten und Verantwortlichen die Beurteilung des Standort-Zustandes zu erleichtern. Ein dazu erforderliches integriertes Datenmodell soll darüber hinaus die Basis für eine problemgerechte plattformunabhängige Dokumentation bilden, die auch die langfristige Nutzbarkeit der Daten und ihren leichten Austausch zwischen unterschiedlichsten Anwendungssystemen garantiert.“ (www.iai.fzk.de/projekte/geoinf/Melinda/ziel.htm), Zugriff am 30.8.2006)

BRAUNER & MAY (2005) (s.a. BORCHERT 2004, MÖLTGEN & MAY 2004, MÖLTGEN & STREIT 2004) stellen mit FLUMAGIS ein DSS mit Wissensbasis zum Flusseinzugsgebietsmanagement vor. Während FLUMAGIS wie MELINDA große Projekte sind, bei denen in jahrelanger Arbeit u.a. mit semantischer Modellierung ein DSS für ein Flusseinzugsgebiet massgeschneidert, bzw. mit *siteXML* ein eigenes Datenaustauschformat für die Zusammenarbeit unterschiedlicher Anwendungen definiert wurde, geht es bei vielen kleineren Systemen darum, möglichst variabel und in vielerlei unterschiedlichen Umgebungen einsetzbar zu sein. Umfangreiche Überblicksdarstellungen über im Bereich Altlasten-Erkundung und -Sanierung bzw. Risikoabschätzung verwendete, gängige „kleine“, DSS finden sich bei SULLIVAN ET AL. (1997) (hier mit besonderer Berücksichtigung des US-amerikanischen Raums) bzw. BARDOS ET AL. (2001) mit einem Vergleich der in verschiedenen europäischen Staaten verwendeten Systeme. SULLIVAN ET AL. (1997)

unterscheiden zwischen „Site Characterization Packages“ und „Remedial Action DSS Packages“. Das in der vorliegenden Studie zur Risikoabschätzung verwendete DSS-Software-Paket *SADA* (s. Kapitel: 1.5.1 Methoden und Definitionen) findet als *Remedial Action DSS* dort ebenfalls Erwähnung.

3.4 Aufgaben von DSS im Umweltschutz

Die Autoren des CLARINET-Berichtes (BARDOS ET AL. 2001) halten es nach den Erfahrungen bei der Altlastenbearbeitung für unwahrscheinlich, dass ein einzelner (Entscheider) das Wissen haben kann, um ohne Hilfe alle zum Management kontaminierter Gebiete entscheidungsrelevanten Analysen durchzuführen.

Zu den typischen Aufgaben von Entscheidungsunterstützungssystemen im Umweltmanagement gehören daher die typisierte Bestandsaufnahme und Definition kontaminierter Bereiche (*Site Investigation and Definition of Contaminated areas*), die Risikoabschätzung (*Risk Assessment*) und das Risikomanagement sowie die Überwachung der erfolgreichen Durchführung (*Remediation Implementation Monitoring*). Auch die Abschätzung von Unsicherheit bei der Bearbeitung, vor allem auch mit der Sanierung oder Wiederinbetriebnahme verseuchter Bereiche verbundener finanzieller Risiken, wird wegen Umfang und Komplexität der zugrundeliegenden Daten mit DSS unterstützt.

Dabei ist häufig die Regionalisierung der nur punktweise gemessenen Kontamination durch Interpolation oder Extrapolation eine wichtige Aufgabe, welcher ggf. die Abschätzung der Anzahl und Verteilung evtl. erforderlicher zusätzlicher Proben direkt folgt. Auch die Priorisierung der Flächen unmittelbar erforderlicher Dekontamination oder Sanierung ist einer der Aufgabenbereiche in einem frühen Stadium der Bestandsaufnahme. Da solche Aufgaben trotz großer Unterschiede verschiedener Sanierungsfälle bei streng definierten Ergebnis-Anforderungen strikten Regeln folgen, lassen sie sich mit Entscheidungsunterstützungssystemen erfolgreich beschleunigen. Auch die Beantwortung der Frage nach der technischen oder finanziellen Machbarkeit wird durch DSS gestützt.

Generell helfen DSS bei der Kommunikation von Ergebnissen durch strukturierte Übersetzung von Spezialwissen in eine Form, die deren Verständnis für andere an Entscheidungen beteiligte Personen mit davon verschiedenem Spezialwissen möglich machen soll. BARDOS ET AL. (2001) weisen darauf hin, dass es zunehmend die Aufgabe von DSS sein dürfte, die Beteiligung, vor allem auch von Laien (z.B. Gemeinderäten o.ä.), bei der Bearbeitung von sie betreffenden Entscheidungen im Umweltmanagement, zu vereinfachen.

Hence, decision support methods codify expert knowledge and know-how into a „stored“ method or process. The „stored“ process could be written guidance on how to address a problem or software that helps to analyse the problem.

Gleichzeitig wird hier vor der natürlich inhärenten Subjektivität solch kodifizierten Wissens gewarnt (jeder Übersetzung muss ein Satz Annahmen zugrunde liegen, z.B. durch landestypisch gängige Gesetzgebung, wie die Frage: „Ist Grundwasser an sich ein Schutzgut, oder nicht?“). Daher ist die Validierung von Entscheidungsunterstützungssystemen unerlässlich. Eine nationale Studie der USA, die sich dieser Aufgabe angenommen hat, ist das Environmental Technology Verification Program der US Environmental Protection Agency (US EPA) (SULLIVAN ET AL. 1997, SULLIVAN ET AL. 2000A, SULLIVAN ET AL. 2000B, SULLIVAN ET AL. 2000C, SULLIVAN ET AL. 2000D). Die Autoren zitieren weiterhin eine Studie (NATO/CCMS), in der die Befürchtung geäußert wird, dass Entscheidungsunterstützungsmethoden die „Einstiegshürde“ für solche Prozesse herabsetzen und dadurch zur Annahme verführen könnten, dass es einfach sei, solcherlei Probleme zu lösen und Personen ohne ausreichendes Wissen versucht sein könnten, sich zu beteiligen. Daher wird dazu

geraten, dass die Entwickler von DSS nicht nur die Funktionalität ihrer Produkte, sondern auch deren Beschränkungen und die zu ihrer Verwendung erforderlichen Qualifikationen ausreichend dokumentieren.

3.4.1 Risk Assessment

Das Risk Assessment (Risikoabschätzung) gehört zu den Bereichen im Umweltschutz, die für die Verwendung von Entscheidungsunterstützungssystemen prädestiniert zu sein scheinen. Es werden dabei Modelle als Antwort auf die Frage erstellt, inwiefern von Kontaminationen gesundheitliche oder ökotoxikologische Risiken ausgehen. Dabei kann es unter anderem darum gehen, begründbare Antworten darauf zu finden, ob verbleibende Restkontaminationen ein akzeptables Risiko (JUNG ET AL. 2000) darstellen, oder ob saniert werden muss.

Jung et al. (2000) schreiben:

Die quantitative Risikoabschätzung ist ein gewichtiges biomedizinisches und ökologisches Instrument zur Bewertung von Gesundheits- und Umweltgefährdungen. Basis dafür sind bestätigte natur- und technikwissenschaftliche Daten, Erkenntnisse und Modelle. Es ist nicht perfekt, wird innerhalb der Wissenschaften zum Teil heftig diskutiert, ist aber allemal besser als eine rein auf subjektiven Kriterien beruhende qualitative Gefährdungsbeurteilung. Die quantitative Risikoabschätzung ist das beste Instrument, das aus den Natur- und Technikwissenschaften derzeit den politischen Entscheidungsträgern zur Verfügung gestellt werden kann, um das Ausmaß und die Eintrittswahrscheinlichkeit von Gesundheits- und Umweltgefährdungen bewerten zu können. Wird die quantitative Risikoabschätzung jedoch als Entschuldigung dazu verwendet, nicht auf die öffentliche Wahrnehmung von Gefahren einzugehen und bei der Bewertung von Risiken ausführlich zu würdigen, führt dies zu einer Diskreditierung dieses wertvollen Entscheidungsinstruments und entwertet damit dessen Gebrauch.

MEKEL ET AL. (2004) beschreiben die Aufgaben der vergleichenden Risikoabschätzung wie folgt:

Vergleichende Risikoabschätzung ist ein vielschichtiges Instrument, das für Prioritätensetzung im Bereich des umweltbezogenen Gesundheitsschutzes sinnvoll eingesetzt werden kann. Sie kann dazu dienen, Problembereiche zu identifizieren, die mehr Aufmerksamkeit verdienen, Budgets oder andere Ressourcen umzustrukturieren oder das staatliche Handeln zu unterstützen bzw. zu legitimieren. Sie wird bereits in verschiedenen Ländern, vor allem in den USA, erfolgreich hierfür eingesetzt.

An gleicher Stelle wird aber auch darauf hingewiesen, dass in Deutschland damit bisher wenig Erfahrungen gewonnen worden sind, obwohl u. a. von Gesundheitsministerkonferenz und dem Aktionsprogramm Umwelt und Gesundheit ihr Einsatz gefordert wird. Bei MEKEL ET AL. (1997A) wird erwähnt, dass jeder Teilschritt der vergleichenden RA eine spezielle Datenbasis benötigt und die Gefahr fehlerhafter Durchführung birgt. „Nicht zuletzt durch unkritische und unsachgemäße Anwendung steht QRA (quantitative Risikoabschätzung) auch international unter Kritik.“ Es ist also darauf zu achten, dass RA nach Vorschriften (vorgegebener Arbeitsablauf; vollständig) durchzuführen ist. Die geforderte Transparenz und Reproduzierbarkeit muss zudem gewährleistet sein.

3.4.1.1 Ökosystemare Risikoabschätzung - Eco Risk Assessment

Abschätzungen der Risiken, die sich nicht auf die humantoxikologische Wirkung beziehen, werden insgesamt als Eco Risk Assessment (ökologische Risikoabschätzung) zusammengefasst. Dabei geht es um die Abschätzung schädlicher Effekte sowohl für die Flora wie für die Fauna (s. Ablaufschema in Abb. 6 auf Seite 23). Ein Überblick über Methoden und Software für die ökologische Risikoabschätzung findet sich in den Konferenzproceedings von CLARINET (BARDOS ET AL. 2001).

3.4.1.2 Human Health Risk Assessment

Software zur Abschätzung von Risiken, die von kontaminiertem Boden oder Grundwasser für Menschen ausgehen, sind in vielen verschiedenen Ländern entwickelt worden. Ein Überblick findet sich in den CLARINET Studien von FERGUSON ET AL. (1998) und FERGUSON & KASAMAS (1999). War zunächst das *human health risk assessment* primäres Ziel, so werden heutzutage immer häufiger darauf aufbauend auch *eco risk assessments* durchgeführt.

3.4.2 Workflow-Management

Entscheidungsunterstützungssysteme tragen durch Steuerung der Arbeitsabläufe in vorgegebenen Workflows zur Strukturierung der Prozesse und zum Qualitätsmanagement bei. Ebenso wie im betrieblichen Prozessmanagement müssen vorgeschriebene Arbeitsabläufe vollständig und in der richtigen Reihenfolge durchgeführt werden. Die einzuhaltende Reihenfolge und Durchführung obligatorischer Schritte gewährleistet, dass der Datenfluss von Eingangsparametern bis zum Ergebnis korrekt stattfindet. Durch Dokumentation der Arbeitsabläufe wird sichergestellt, dass bei der Analyse korrekt vorgegangen wird. Insgesamt resultiert aus dieser Standardisierung, dass Ergebnisse reproduzierbar sind, was von besonderer Wichtigkeit ist, wo verschiedene Beteiligte an einem Entscheidungsprozess ihre Auswahl aus alternativen Lösungen vermitteln und verteidigen sollen. Rechte steuern den Zugang zu Daten im System. Dadurch ist sichergestellt, dass autorisierte Benutzer die in ihrem Kontext zugänglichen Daten erhalten, nicht autorisierte Benutzer aber nur den Minimalsatz „öffentlich“ zugänglicher Daten sehen können. Kapitel 6.4 (Ergebnisse: Systemintegration) beschreibt den integrierten Workflow und welche Veränderungen dieser gegenüber dem ursprünglichen bringt.

3.5 DSS System-Anforderungsprofil im vorliegenden Projekt

Gemäß den oben beschriebenen Fähigkeiten als Entscheidungsunterstützungssystem sind als Hauptaufgaben des vorliegenden Systems folgende Punkte zu nennen:

- soll ein umfassendes Systemverständnis durch vollständige Darstellung der relevanten Parameter des Untersuchungsgebiets ermöglichen
- soll Auswertefunktionen bereitstellen
- soll die Zusammenarbeit und Dokumentation der Arbeiten verbessern, indem es Daten, Materialien und Methoden bereitstellt.
- Vorhandene, fertige Bestandteile und Software sollen, sofern das nötig und möglich ist, integriert werden.
- Wo Software nicht direkt integrierbar ist, soll das System den Zugriff auf Daten ermöglichen und evtl. notwendige Datentransformationen erfüllen.
- soll eine Webgestützte Thin-Client-Architektur unterstützen: Das System wird auf Nutzerseite entweder über Frontend oder Backend bedient.
- Das Frontend stellt sozusagen die Ergebnisseite dar, während die Analysen vorwiegend über das Backend bedient werden. Das Frontend wird über einen beliebigen Internetbrowser bedient, der auf jedem Rechner zu finden sein dürfte, der mit einem Netz verbunden ist. Weil sonst keine weitere Bediensoftware notwendig ist, spricht man von einem „thin client“, was sich auch auf die Erfordernisse hinsichtlich der Leistungsfähigkeit bezieht. Im Hintergrund arbeitet also sozusagen ein „fat server“, der die Hauptleistung zu erbringen hat, während der Client nur die Visualisierung der über das Netz übertragenen Ergebnisse zu übernehmen hat. Die genannte Schwierigkeit mit der Datenhaltung wird durch Datenbanken mit Mehrbenutzerfähigkeit gelöst. Auswertefunktionen übernimmt die Skriptsprache R.

Es muss darauf hingewiesen werden, dass der Server keineswegs ein einzelner Server sein muss, sondern dass z.B. unterschiedliche Datenbanken, Dateisysteme und Anwendungen auf unterschiedlichen Rechnern liegen können. Sie werden aber alle für den Client „transparent“ zusammengeführt. Ein Webserver dient dazu ankommende Anfragen über das Internet zu „beantworten“. Dabei werden dem Webserver die Daten in einer für ihn tauglichen Form zugeführt. Die meisten „Fäden“ laufen dabei im Content Management System ZOPE zusammen. Beim Backend handelt es sich um eine teilweise integrierte Lösung. Abb. 11 auf S. 55 zeigt ein Anwendungsfalldiagramm für das Portal.

Tab. 7: Systemanforderungen: dargestellt ist der optimale Umfang.

Methodische Anforderung	Daten, SW
Datenintegration	räumliches Datenmaterial/ Karten, Messwerte, Toxikologie, Untergrund-Geologie, Modelle (hydraulisch/geologisch)
Auswertefunktionen	Regionalisierung der punktwisen Kontamination, Priorisierung von Flächen, Expositionsanalyse, Darstellung alternativer Szenarien (4D-GIS)
Plattform zur Zusammenarbeit, zur Diskussion und Dokumentation, Wissensbasis	Groupware-Funktionalität (Weblog, WIKI), Datenbank vorheriger Untersuchungsergebnisse, Workflows für das Prozessmanagement
Integration fertiger Bestandteile	Visualisierungsmodule, Datenbanken zur Beprobung, Toxikologische Katalogwerke und entsprechende Gesetzesvorgaben, Ausgabeformate für Risk Assessment Software, Modellierungs-Software
Eingebunden in eine Netz-Geodateninfrastruktur; „mehr als die Summe seiner Teile“	OGC/ISO konforme Geodateninfrastruktur und Datenaustausch
Zugangsteuerung	Rechtevergabe, rechtegebundenes Workflowmanagement

3.5.1 Fähigkeiten des Systems

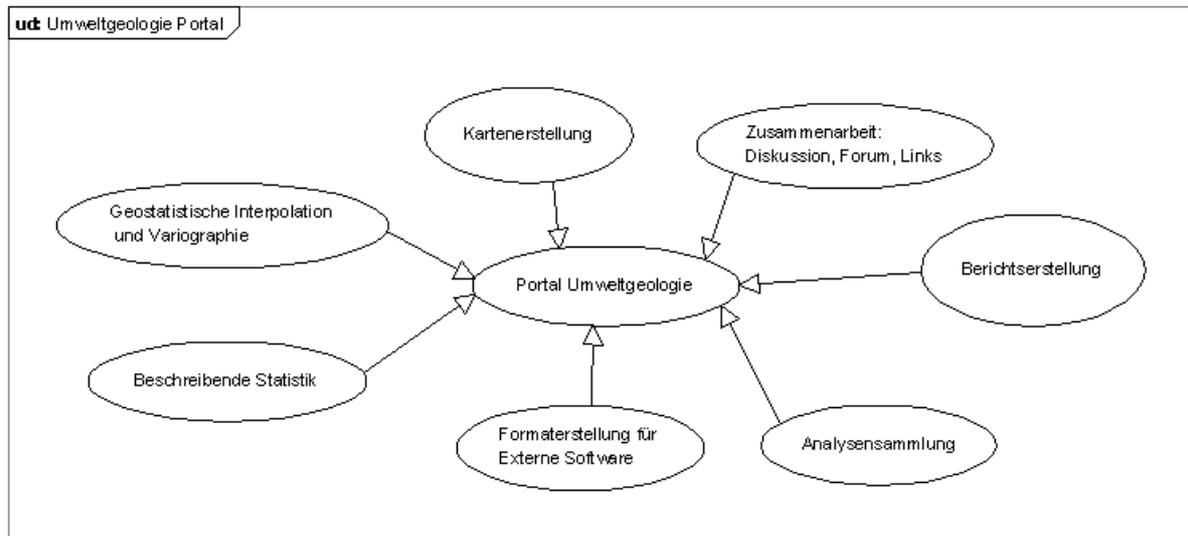


Abb. 11: Anwendungsfalldiagramm für das Umweltgeologieportal

3.5.1.1 Frontend

Die georeferenzierten Ausgangsdaten und Ergebniskarten werden mit einem WebGIS visualisiert. Der Nutzer braucht auch hierfür lediglich einen Browser als Bedienelement. Nicht raumbezogene Daten werden Nutzern und Administratoren browserbasiert zugänglich gemacht, während der Hauptteil der Datenaufbereitung und räumlichen (explorativen) Datenanalyse im Hintergrund durch GIS, die Statistiksprache *R* als Rechenengine und Datenbanken und SQL-Abfragen durchgeführt wird. Die Initiierung von Analysen ist auch über das Browser-Frontend möglich.

Für Analysen und Darstellungen, die mit externer Software durchgeführt werden sollen, werden die Daten in passenden Formaten, nach Maßgabe des Benutzers über das Frontend exportiert. Zu den exportierten Formaten gehören Dateien für SADA und MVS als CSV (comma separated values) und Microsoft Excel für RBCA.

Berichte aus SADA werden als HTML-Seiten importiert und eingebunden. Dadurch sind SADA-Analysen visuell dokumentiert und nachvollziehbar. Zusätzlich sind 3D-Visualisierungen über 3D-Browser-Plugins möglich. Dazu werden MVS-Modelle oder ArcScene 3D-GIS-Szenen als VRML Szenengraphen exportiert und in HTML-Seiten eingebunden (Kapitel 6.3).

3.5.1.2 Backend

Am Aufbau der Daten bzw. Analysen beteiligte Nutzer („Analysten“) bearbeiten ihre Daten im Desktop GIS (ArcGIS9/ArcMap von ESRI oder GRASS, Quantum GIS) und stellen die Ergebnisse in die Datenbank (Postgresql/PostGIS). Von dort sind sie der Kombination Webserver-Content-Management-System (Apache-ZOPE-Plone) zugänglich und können als Karten in Kombination mit beliebigen Raster- oder Vektor- (auch: WMS/WFS-) Daten im UMN Mapserver über das Plone-„Kartenmodul“ Primagis dargestellt werden. Der UMN Mapserver kann im übrigen selbst auch als WMS-Server-Dienst fungieren und bildet dadurch einen Teil der Geodaten-Infrastruktur. Zugangsberechtigungen werden auf Seiten des Servers für den Zugang über das Plone/ZOPE-Browser-Frontend (MCKAY, 2005) gesteuert, während datenbankseitig die dort gültigen Berechtigungen bzw. Rollen gelten.

Spezielle Risk Assessment Software (s. Kapitel 2.4) erzeugt Modelle und Berichte, die im Content Management System gespeichert und rechtebasiert zugänglich gemacht werden. Die erforderlichen Eingangsdaten können in ZOPE/Plone durch Abfragen aus den Datenbanken erzeugt werden. Dennoch müssen die Risk Assessment Werkzeuge nach wie vor als Stand-Alone Werkzeuge verwendet werden.

3.5.2 Ausblick

Vorgestellt wird ein browsergestütztes GIS und Content Management System (*CMS*) zur Zusammenarbeit bei der Bearbeitung räumlich basierter Datensätze von verteilten Arbeitsplätzen. Dieses dient nicht nur zur Speicherung und Abfrage sowie Visualisierung räumlicher Datensätze und damit ihrem leichteren Auffinden und ihrer Dokumentation, sondern übernimmt auch teilautomatisierte Analysefunktionen der Attributdaten und ermöglicht das Preprocessing der Datensätze zur Weiterverwendung in Software zur Risiko-Analyse und Interpolation (Details s. Kapitel 5, Integriertes Datenmanagement).

Mit den fertiggestellten Ergebnissen können serverseitig Berichte, z.B. im Adobe *pdf* (portable document format)–Austauschformat erzeugt und ebenfalls dort anderen Benutzern bzw. Entscheidern zur Verfügung gestellt werden.

Auf diese Weise soll einerseits eine beschleunigte Bearbeitung von Raumdaten ermöglicht werden, deren Vorbereitung zur Analyse und grundsätzliche Kontrolle mittels explorativer Datenanalyse sonst einen großen Teil der Zeit im Arbeitsablauf in Anspruch nimmt. Andererseits sollen Bearbeiter, die mit Datenvorbereitung und statistischen Methoden nicht vertraut sind, in Art eines Expertensystems von der Last der Datenvorbereitung entlastet und sie bei der Bearbeitung und Analyse mit statistisch-analytischen Methoden unterstützt werden. Zudem dient das System durch fortgeschrittene Visualisierung räumlicher Modelle und übersichtliche Präsentation aller vorhandenen Daten als Informationssystem.

Letztendlich leistet das CMS auf diese Weise Entscheidungsunterstützung bei der risikobasierten Bearbeitung eines Standortes mit regionaler Grundwasserkontamination, indem es zur Generierung von Materialien dient, die die Handlungsalternativen beim Risikomanagement verdeutlichen.

4 Daten, Software und Methoden

Das folgende Kapitel umfaßt folgende Punkte:

- Datenmanagement
- Datenbeurteilung

4.1 Datenmanagement

- Datenvorbereitung
- Datenbanken
- Formularbasierte Werkzeuge
- Geoinformationssysteme

Aufgrund der komplexen Arbeiten an den Ausgangsdaten ist eine Beschreibung der notwendigen und durchgeführten Schritte des Datenmanagements und der weiteren Datenverwendung nötig. Manche der verwendeten Methoden und Werkzeuge führten nicht zum erwünschten Ziel, (d.h. sie waren nicht integrierbar), werden hier aber der Vollständigkeit halber erwähnt. Gleichzeitig kann dieses Kapitel als Einführung in die Problematik der Datenbearbeitung dienen.

Daten sollten anfänglich in eine ArcSDE-Datenbank überführt werden, um für die Verwendung in ArcGIS zentral und einheitlich zur Verfügung zu stehen. Zusätzlich wurden später die Attribut-Daten in eine PostgreSQL-Datenbank mit Postgis-Aufsatz eingebracht, von wo sie für das Content Management System zugänglich sein sollten.

Diese Doppelung war nicht unbedingt notwendig, sondern dadurch bedingt, dass zunächst nur eine Testversion der ArcSDE vorhanden war, deren Funktionalität geprüft werden sollte. Die ArcSDE ist in erster Linie mit ESRI-ArcGIS kompatibel. Der UMN-Mapserver kann zwar so kompiliert werden, dass er auf ArcSDE zugreifen kann und *R* kann über RODBC Daten unter anderem auch Daten aus Oracle abfragen (auf dem die ArcSDE im vorliegenden Fall läuft). Da die Daten aber später im Content Management System einem integrierten Zugang folgen sollten, wurde auf die PostgreSQL-Datenbank umgestellt. Diese ist sowohl für ArcGIS wie auch z.B. GRASS, UMN Mapserver, Quantum GIS, Zope etc. zugänglich.

Die Beschreibung der Software dient der Unterscheidung ihrer Funktionalität und beinhaltet dadurch auch eine Evaluierung ihrer Tauglichkeit für die eingangs definierte Aufgabe.

4.1.1 Datenvorbereitung

Die ursprünglich vorhandenen Daten lagen in sehr verschiedener Form vor. Für die Nutzung im Projekt waren sie zuerst vorzubereiten. Mit dem Ziel der Vereinheitlichung und Zentralisierung dieser Daten wird auch die Möglichkeit verbunden, die erhaltenen Daten einer vereinfachten zukünftigen gemeinsamen Nutzung zuzuführen.

Zu den „Rohdaten“ gehörten Attributdaten des Messstellenausbaus, ihrer Lage und der Geländedaten in tabellierter, gedruckter Form genauso wie Messwerttabellen in Microsoft Excel-Tabellen oder mehreren getrennten Microsoft Access-Datenbank-Dateien. Teils lagen Messwerte, Untersuchungsgebietsumrisse etc. auch als ESRI Shapes oder CAD-Austauschformate vor. Für die Betrachtung der Landnutzung wurden CIR-Daten und ATKIS-Exporte erworben. Ortho-Luftbilder, Textbasierte (ASCII) -Dateien für die geologische 3D-Untergrundmodellierung oder hydrogeologische Modellierung vervollständigen das Bild.

Die zugrundeliegenden Daten werden zur Regionalisierung durchgehend zunächst darauf untersucht, ob notwendige Attribute fehlen. So werden diejenigen Datensätze, bei denen die zugehörige Messtelle nicht vermerkt ist, ebenso wie solche ohne sichere Kenntnis von zugehörigem Rechts- und Hochwert aussen vor gelassen.

Auch Datensätze ohne Probennahmedatum wurden gestrichen, da Abfragen auch z.B. in

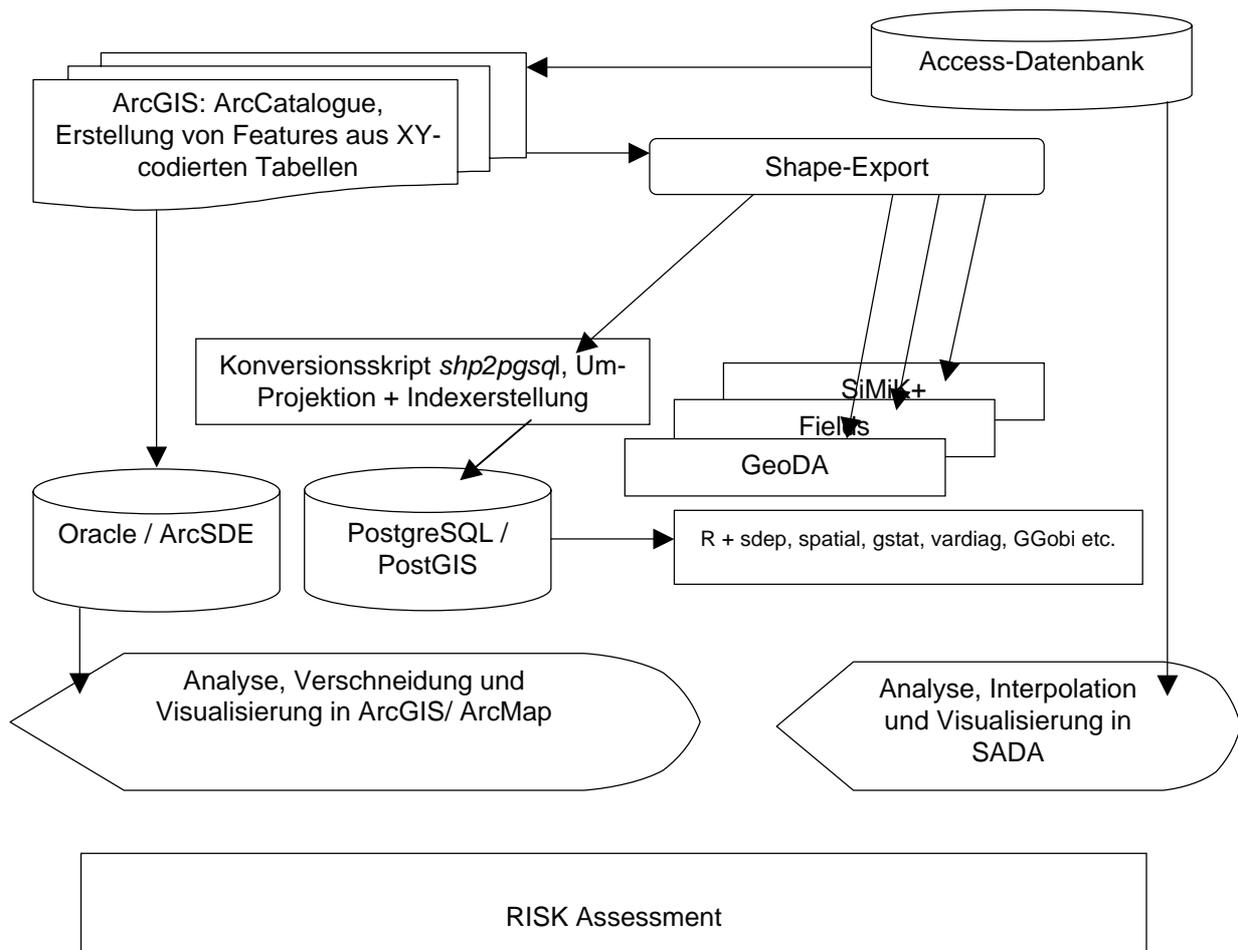


Abb. 12: Arbeitsablauf (Workflow) bei der Datenvorbereitung und Datenhaltung. Zur Vereinfachung wird als Ausgangslage von einer MS Access Datenbank ausgegangen.

Jahresschritten nach Probenahmedatum abfragbar sein sollten.

Danach wurden CAS (chemical abstract service) –Nummern und ein Vermerk für das Probenahmemedium *Grundwasser* hinzugefügt. Negative Werte wurden per Konvention in positive Werte umgerechnet, wobei negativ verzeichnete Werte in den Ausgangsdaten so interpretiert wurden, dass die Messung unterhalb der Nachweisgrenze gelegen hatte und der Wert mit 0,5x NWG abgespeichert worden war.

Die z-Koordinate (Tiefenwert) wurde für jede Messstelle auf die Tiefe festgelegt, die sich in der Mitte der vertikalen Filterstrecke befindet. Durch Zuordnung der Messstellen gemäß dem geologischem Raummodell wurde festgelegt, welchem Grundwasserleiter (100 / Quartär, oder 500 / Tertiär) die Probe entnommen wurde. Bei vielen Messstellen liegen aufgrund der zeitlich aufeinanderfolgenden Messungen mehrere Messungen vor, die für die Regionalisierung gemittelt werden.

Zur explorativen Datenanalyse wurden Histogramme für die gemittelten Werte angefertigt und bei offensichtlich rechtsschiefen Verteilungen die Daten logarithmiert und wiederum mit einem Histogramm die Verteilung geprüft. Eine beschreibende Statistik wurde beigefügt (Anzahl der [gemittelten] Messwerte, Minimum, Maximum, Mittelwert, Median, Varianz, Standardabweichung, Schiefe, Kurtosis). Die Stoffe, die offensichtlich näherungsweise lognormal verteilt waren, wurden für die Interpolation als lognormal behandelt.

4.1.2 Datenbanken

Die – theoretisch wünschenswerte – ausschließliche Speicherung aller Daten an einer einzelnen zentralen Stelle in einem einzelnen Datenbankmanagementsystem (DBMS) ließ sich im Verlauf der Analysen leider nicht durchhalten, da die unten beschriebenen Softwarepakete häufig bestimmte Datenformate voraussetzen, die zumindest den vorübergehenden Einsatz von z.B. Shapefiles erforderlich machten. Redundanz ließ sich daher nicht verhindern. Allerdings ist die Umformung in die erforderlichen Formate *aus den DBMS ORACLE®* bzw. *PostgreSQL* möglich, wie auch die Synchronisierung dieser DBMS miteinander, so dass diese als Ausgangsformate geeignet sind.

Der „Simplizität“ dateibasierter Speicherung von Daten steht die technisch aufwendigere Speicherung in Datenbankmanagementsystemen (DBMS) gegenüber. Die Vereinheitlichung und Umformung der Daten zur gemeinsamen Haltung in einem DBMS hat zahlreiche Vorteile. Genannt seien die bei *relationalen* DBMS immer angestrebte redundanzfreie Datenhaltung, die ihrerseits der besseren Wartbarkeit der Daten dient. Bei den Serverdatenbanken (ausser MS Access) kommen neben Mehrbenutzerfähigkeiten als Sicherungsmaßnahmen noch Rollback- und Backupmechanismen hinzu, durch die unbeabsichtigte Änderungen rückwirkend auf einen beliebigen zwischengespeicherten Stand zurückgespielt werden können. Dennoch muss gelegentlich auf DBF- und Shapedatei als Austauschformate zurückgegriffen werden. Sie sind einfach auf Austauschdatenträger wie USB-Stick oder CD zu speichern, können als temporäre Datei gespeichert, bearbeitet und wieder ins DBMS zurückgeschrieben werden. Wegen der genannten Vorteile werden die verwendeten Datenbanken im folgenden Abschnitt beschrieben. Auf erklärungsbedürftige Besonderheiten wird kurz eingegangen, wo es notwendig erscheint.

Erwähnung finden hier auch die „GIS“-Erweiterungen der relationalen Datenbanken. Ein Überblick und Vergleich der Eigenschaften findet sich in Tab. 8. Dort werden sowohl die eigentlichen DBMS wie auch ihre Erweiterungen zu räumlichen Abfragen gezeigt. Diese sind

teils an ein jeweiliges „Mutter-Datenbanksystem“ gebunden (PostGIS → PostgreSQL, Oracle Spatial → Oracle), bei der Arc Spatial Database Engine ist die Speicherung in Oracle, MS SQL Server, Informix etc. möglich. Die Vermischung von Datenbankmanagementsystemen und verwendeten Datenbankschemata als „Datenbanken“ wird für diese Darstellung hier bewusst in Kauf genommen, da die Systeme teils auf die eine, teils auf die andere Weise Verwendung finden und eine solche Übersicht erklärend wirkt.

Tab. 8: Eigenschaften und Unterschiede bei den verwendeten Datenbankmanagementsystemen.

	MS Access	ORACLE	EarthSoft Equis	PostgreSQL	PostGIS	ESRI ArcSDE
Stand-alone	Ja	Ja	Nein, Speicherung in Access oder Oracle	Ja	Nein, Aufsatz zu PostgreSQL	Nein, Aufsatz zu Oracle oder MS SQL Server
Räumliche Abfragen		Bedingt (Oracle Locator)			Ja	Ja
Mehrbenutzer-Fähigkeit	Bedingt	Ja	Ja	Ja	Ja	Ja
Rollback	Nein	Ja		Ja	Ja	Ja
Lange Transaktionen	Nein	Ja	Nein	Ja	Ja	Ja
Relationale Integrität	Ja	Ja	Ja	Ja	Ja	Ja
Grafische Bedienoberfläche (gui)	Ja	Nein (web-basiertes Interface vorh.)	Ja	Nein (Zusatzprodukt, OpenSource, frei)	Nein	Ja (Benutzung aus ArcGIS)
Betriebssystem	MS Windows	Alle gängigen	Windows	Alle gängigen	Alle gängigen	Alle, für welche das unterlagernde DBMS unterstützt wird

Microsoft Access® ist ein vollständiges, dateibasiertes, relationales Datenbankmanagementsystem mit GUI. Aufgrund der einfachen Handhabbarkeit in einer einzelnen Datei ist es für vorübergehende Projekte und Daten, die weitergegeben werden sollen, geeignet. Es ist auf eine Dateigröße von 2 Gigabyte beschränkt. Mit seiner graphischen Oberfläche ist es relativ einfach, SQL-Abfragen visuell ohne Programmierung zusammenzustellen.

Equis® von EarthSoft ist eine kommerzielle Datenbank speziell für die Speicherung, Auswertung und Visualisierung von Umweltdaten. Unter Datenbank sind hier die Datenbankschemata (DB-Tabellen-Strukturen) zu verstehen, in denen die Daten gehalten werden. Die eigentliche Speicherung findet in MS Access® oder Oracle® statt. Equis bietet Integrationsmöglichkeiten mit anderer Software: mittels Erweiterungen ist die direkte Datenübergabe zu Surfer®, Rockworks®, LogPlot®, GMS®, MVS® und ArcView/ArcMap® möglich.

Dazu gehört z.B. die Interpolation von Oberflächen der Kontaminationshöhen in Surfer, die automatische Erstellung von Bohrprofilen oder die Ausgabe des für MVS erforderlichen Datenformates zur Interpolation. Funktionen zur Qualitätskontrolle stellen richtiges Eingabeformat und Vollständigkeit der Daten sicher und beinhalten zusätzliche Plausibilitätskontrollen. Equis beinhaltet mehrere unterschiedliche Produkte (Chemistry, Geology, Limnology), von denen nur das Produkt „Chemistry“ getestet werden konnte.

Aufgrund des umfangreichen und komplexen Datenschemas ist der primäre Daten-Import nicht unkompliziert. Die Zusammenarbeit mit den oben erwähnten Programmen erfordert zusätzliche Programmmodule. Mitgelieferte Importschemata können für den vorliegenden Fall angepasst werden. Equis ist vor allem dort vorteilhaft, wo weitergehende Verarbeitung in den o.g. Programmen stattfinden soll. Im Programm selbst können vor allem tabellarische Berichte erstellt werden. Equis wurde getestet, aber nicht weiterverwendet.

Räumliche Datenbanken

Einfache GIS-Funktionalitäten können in Datenbanken mit räumlicher Erweiterung ohne zusätzliche Verwendung einer eigenständigen GIS-Software erfüllt werden. So können z.B. räumliche Abfragen wie „liegt ein Messpunkt innerhalb einer Fläche?“ oder „welche Punkte aus einem bestimmten Messzeitraum sind mindestens x Meter von den Vorflutern entfernt?“ direkt von der Datenbank, also serverseitig vorgenommen werden. Das entlastet das Desktop GIS und das Netzwerk durch Voraus-Reduktion der zu betrachtenden Daten. Zu den räumlichen Datenbanken gehören die verwendete ArcSDE und Postgis. Auch Oracle Spatial (Locator) gehört zu dieser Gruppe.

ArcSDE[®] (Arc Spatial Database Engine): ESRI's ArcGIS9 bietet neben dem Lesen und Schreiben des bei Geoinformationssystemen ‚traditionellen‘ (*de-facto* Standards) Shapefile-Formats und Verbindungen zu relationalen Datenbanken über ODBC als hauseigenes Format die Erstellung einer (Personal) Geodatabase im Accessformat, wobei ArcGIS die Steuerung und Erstellung der Metadaten und die Verknüpfung der Tabellen übernimmt. Diese Dateien lassen sich einfach weitergeben, bieten aber keine Mehrbenutzer-Möglichkeit im Netzwerk oder fortgeschrittene Funktionen wie Langzeittransaktionen, Rollbacks, gespeicherte Prozeduren etc. und sind mit sehr großen Daten überfordert.

All diese Fähigkeiten besitzt die Arc Spatial Database Engine ArcSDE, die als räumlicher GIS-Datenbankaufsatz mit unterschiedlichen relationalen Datenbanksystemen verwendet werden kann. Für die vorliegende Arbeit wurde für die Verwendung mit ArcGIS eine *Oracle* 10g- Datenbank auf einer SUN Workstation installiert und die ArcSDE damit verbunden. Hier wurden vorhandene Daten wie Bahnlinien aus der Grundwassermodellierung, Flächenumrisse, Messpunkte etc. aus Shapefiles importiert oder durch Darstellung der Messwerte an den Messlokalitäten als XY-Features erzeugt. Des weiteren wurden Orthofotos und die Topographische Karte importiert. Auch zur Speicherung von Rasterdaten (z.B. den geostatistischen Interpolationen) wurde ArcSDE verwendet.

Neben den oben beschriebenen Vorteilen bietet dieser zentrale Zugang über eine einheitliche Datenbank schnelle räumliche Abfragen (z.B. werden von Orthofotos Pyramiden erzeugt und nur die jeweils sichtbaren Bereiche geladen), so dass trotz der Übertragung über das Netzwerk die Darstellung schneller ist, als wenn die Daten lokal im Dateisystem des Desktoprechners, auf dem das GIS ausgeführt wird, vorliegen. ArcSDE ist für Arbeitsgruppen die von ESRI bevorzugte und empfohlene Lösung. Theoretisch lassen sich Verbindungen von ArcGIS zu DBMS herstellen, die nicht über ein räumliches Datenformat verfügen. Allerdings ist in solchen DBMS nur die Speicherung von Attributdaten möglich. Die Erstellung von Features ist dagegen an die Verortung in einer räumlichen Datenbank gebunden.

PostgreSQL ist wie *ORACLE* ein relationales Datenbankmanagementsystem mit den oben erwähnten Vor- und Nachteilen. *PostgreSQL* mit seiner räumlichen Erweiterung *PostGIS* stellt ein im Open-Source-Umfeld gängiges relationales DBMS zur Speicherung und Abfrage von Daten mit oder ohne Raumbezug dar. *PostGIS* ermöglicht einfache GIS-Funktionalität

direkt in der Datenbank. Bei der Verwendung von PostGIS mit dem Mapserver braucht man daher für einfache Abfragen gar kein GIS mehr – räumliche Auswahl und Überlagerung der Daten wird direkt von Datenbank und Mapserver vorgenommen. Räumliche Indexierung beschleunigt die SQL-Abfragen.

4.1.3 Formularbasierte Werkzeuge

Zum Export der Daten wurden Formulare in Access erzeugt, über die sich komfortabel Verbindungen zu den anderen DBMS herstellen lassen. Dabei dient Access als Bedienelement für die anderen Datenbanken. Hauptsächlich kommen hier SQL-Datenabfragen zum Einsatz.

Mit C# (C Sharp aus dem Microsoft dotNet Framework) wurde ein formularbasiertes eigenständiges Werkzeug erstellt, mit dessen Hilfe die Abfrage der Daten für die Verwendung in SADA oder ArcGIS durchgeführt werden kann. Im Hintergrund laufen dabei immer SQL-Abfragen (Abb. 13). Zu den durchführbaren Abfragen gehören die Umformung des internen Datenformats, Verknüpfung mehrerer Tabellen über Schlüsselfelder und Erzeugung neuer Tabellen.

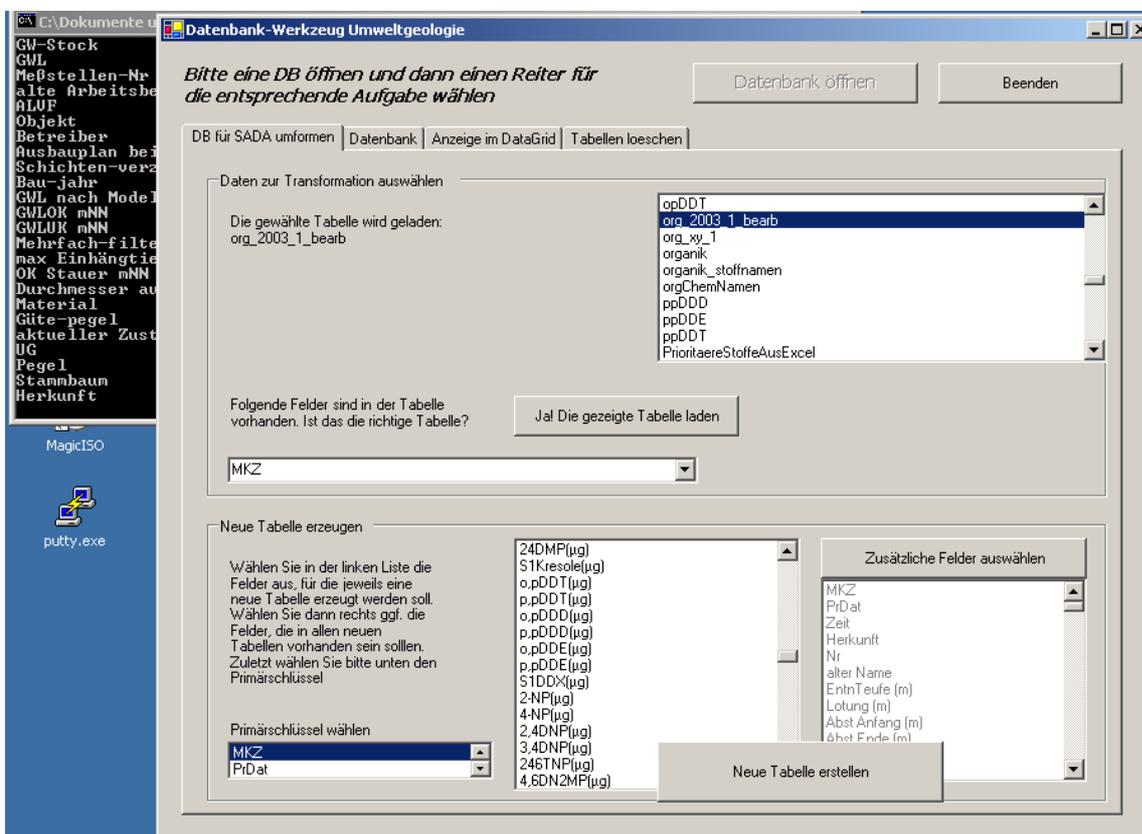


Abb. 13: Formularbasiertes Werkzeug zur Datendefinition.

Nebenbei findet eine Überprüfung fehlender Messwerte oder Messstellen-Ausbaudaten statt, Messungen unterhalb der Nachweisgrenzen, die bei der ursprünglichen Datenerfassung in der Form „- [Nachweisgrenze]“ abgelegt abgelegt worden waren, werden wieder in positivierte zweifache Werte umgerechnet (ohne alle anderen Werte anzutasten) und eine einfache Logik überprüft das Vorhandensein aller erforderlichen Daten.

Die so vorverarbeiteten Daten werden in der PostgreSQL-Datenbank zur weiteren Analyse und Darstellung gespeichert und verwendet.

4.1.4 Geo-Informations-Systeme

Das Management räumlich bezogener Daten hängt direkt auch von den Fähigkeiten des verwendeten Geoinformationssystems (GIS) ab. Daher ist eine sehr kurze Übersicht der verwendeten GIS-Software und ihrer Datenmanagementfähigkeiten angebracht:

GRASS

Sehr umfangreiches GIS mit (2D-/3D-)Raster- und Vektorspeicherfähigkeit. Ältere Versionen speichern Geometrien und Attributdaten ausschließlich in der internen „Datenbank“. Neue Versionen bieten direkten Schreib-Lese-Zugriff zu PostgreSQL/PostGIS als externem Datenformat. Das kommt natürlich der Austauschbarkeit der Daten zwischen unterschiedlichen Produkten zu gute.

Als Open Source Software unter freier Lizenz (GPL) ist es kostenlos und erweiterbar (<http://grass.itc.it>). GRASS ist sozusagen die Referenz unter der Open Source Software und wahrscheinlich das größte Open Source Projekt überhaupt. Nutzern und Programmierern stehen eine Vielzahl von Diskussions- und Supportforen zur Verfügung. Zur Programmierung neuer Module kommt die Programmiersprache C zum Einsatz. Neuerdings ist auch eine Programmierung mit Python möglich. GRASS läuft unter vielen Betriebssystemen darunter Windows, Mac und Unix-ähnliche.

GRASS eignet sich mit Shellskripten hervorragend für die Stapelverarbeitung. Solche Skripte enthalten einfach eine Abfolge der nacheinander auszuführenden Programmmodule und Anweisungen dazu, wie die Daten zwischen diesen weiterzuverarbeiten sind. Diese skriptgesteuerte Anwendung kann daher ohne Benutzerinteraktion stattfinden. GRASS-Daten lassen sich für die 3D-Darstellung exportieren und in Anwendungen wie ParaView darstellen.

Sollen nicht interaktive GRASS-Funktionalitäten wie Aggregation von Rasterdaten, Pufferung etc- durchgeführt werden, lässt sich GRASS auf diese Weise in ein integriertes System einbinden. Projekte, die GRASS für das Webmapping verwenden sind z.B. pyWPS/Embrio, eine beispielhaften GRASS-GIS-Anwendung als Webservice (<http://pywps.wald.intevation.org/>, http://pywps.ominiverdi.org/demo/embrio/ka-map/htdocs/index_wps_qgis.html). Die GIS-Funktionalität wird als „echter“ OGC-Webservice über ein XML-Dokument annonciert. Es gibt Beispiel für „shortest path routing“ und „line of sight“-Berechnung.

GRASS und die Statistiksprache R können mit Hilfe der Bibliotheken GDAL und OGR Daten austauschen. R kann daher verwendet werden, wenn statistische Auswertungen von in GRASS-GIS gespeicherten Geodaten durchgeführt werden sollen. Umgekehrt kann GRASS verwendet werden, um räumliche Daten aus R zu speichern und in Karten zu visualisieren.

Im vorliegenden Projekt wurde gefunden, dass die Fähigkeiten von GRASS weit über die für die Integration des Systems benötigten GIS-Funktionalitäten hinausgehen, während R für die Analyse in diesem Fall überlegene Fähigkeiten mitbringt. Daher wurde nach anfänglichen Versuchen GRASS im vorliegenden Projekt doch nicht mit eingebunden. Es ist aber, wie erwähnt, möglich. Dabei werden Python-Skripte als externe Methoden in Zope verwendet, um GRASS (ggf. mit R) aufzurufen.

ArcGIS9

Umfangreiches (Standard)-GIS für Windows (<http://www.esri.com>). Komfortable aber kaum anpassbare Bedienung mit vielen Methoden der Datenabfrage, Kartenberechnung etc. in der „Toolbox“. Speicherung räumlicher Daten in Shape-Dateien (nicht mehr empfohlen), Geodatabase Format, oder ArcSDE. Modular aufgebaut als Katalog für das Datenmanagement, den Viewer und ArcScene als Anwendung für die 3D-Darstellung. In ArcScene lassen sich GIS-Daten in 2,5D- oder ggf. auch echter 3D-Darstellung visualisieren und als VRML exportieren.

ArcGIS ist erweiterbar mit Zusatzmodulen wie Spatial Analyst und Geostatistical Analyst. Letzterer baut intern auf dem Spatial Analyst auf und stellt formulargesteuert geostatistische Analyse- und Interpolationsmethoden zur Verfügung. Die Programmierung von ArcGIS erfolgt u.a. über VBA (Visual Basic for Applications). Damit steht zwar eine einfache Programmiersprache zur Verfügung, die Programmierung wird aber dadurch erschwert, dass dem GIS ein sehr großes Objektmodell zugrundeliegt. Daher sind auch kleine Veränderungen oder Anpassungen mit einem eher hohen Programmierungsaufwand verbunden (genannt sei hier z.B. die programmatische Zuweisung einer abgestuften Legende).

Die Elemente der Toolbox sind über Pythonskripte zugänglich. Zusätzlich verfügt ArcGIS hier über die Fähigkeit visuelle Programmierung dazu zu verwenden ein Grundgerüst solcher Skripte aufzubauen. Der Aufbau solcher „*geoprocessing scripts*“ (TUCKER, 2004) beschleunigt die automatisierte Geodatenverarbeitung insbesondere für Aufgaben, die vielfach wiederholt werden sollen (z.B. wurden solche Skripte erstellt, um aus XY-Koordinaten der Access-Datenbank geolozierte Features in ArcCatalog/ArcViewGIS zu erstellen und diese in die ArcSDE zu speichern).

UMN Mapserver

Kein eigentliches GIS, sondern ein Karten- oder „Featureserver“: erzeugt aus Geodaten auf eine Anfrage hin dynamisch ein Kartenbild, z.B. als GIF-Datei, welche in einem Browser dargestellt wird. Dieses Bild ist nur eine auf eine einzelne Ebene reduzierte graphische Repräsentation und enthält keine einzelnen Layer oder Attributdaten mehr. Alternativ liefert der Mapserver „Features“ als XML/GML-Datei auf eine entsprechende Anfrage hin aus. Mapserver-Literatur z.B. (MITCHELL, 2005) oder (<http://www.umn-mapserver.de>).

Wird in Verbindung mit einem Server und Webserver verwendet, um Geodaten webgestützt darstellbar zu machen. Die Fähigkeit als WFS (Web Feature Server) zu fungieren hebt ihn über einfachere Web-Mapping-Applikationen hinaus, da Features (also z.B. einzelne Bohrpunkte) mit ihren Attributen dargestellt werden können. In Verbindung mit den *gdal*- und *ogr*-Bibliotheken ist der Zugriff auf unzählige Geodatenformate möglich (darunter z.B. Shapefiles, VMAP0-Vektoren, GML, KML, OGDH-Höhenmodelle, GeoTiff, ArcSDE, PostGIS, PostgreSQL, um nur eine kleine Auswahl zu nennen).

Postgis

Postgis ist, wie bereits bei den Datenbanken unter 4.1.2 erwähnt, kein eigentliches GIS, sondern eine räumliche Erweiterung für die Datenbank PostgreSQL. Da es aber die GIS-Funktionalitäten der räumlichen Abfrage, Verschneidung und Pufferung in der Datenbank durchführt, wird es hier nochmals aufgeführt.

Weitergehende Funktionen, insbesondere die Darstellung der Daten im Kartenbild, kann Postgis selbst nicht ausführen.

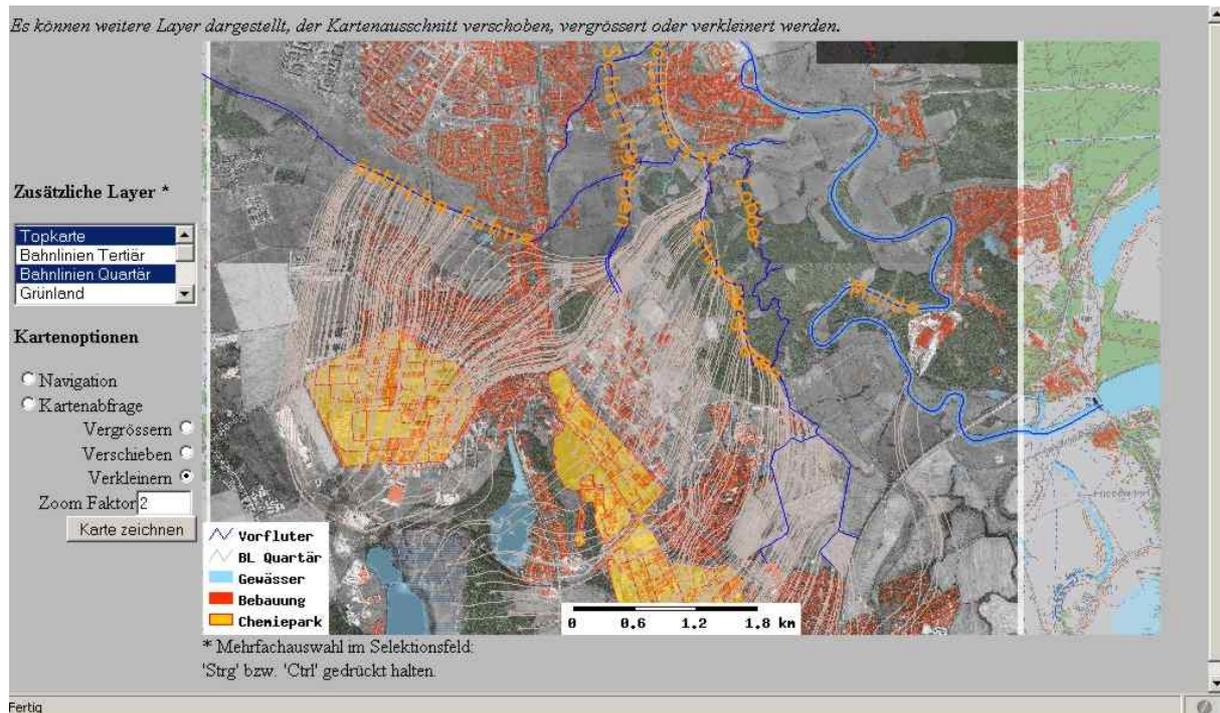


Abb. 14: Übersichtskarte von Bitterfeld-Nord und Wolfen, Industriegebiet, Vorflutern, Bebauung und Grundwasserströmung in einer formularbasierten Mapserver-Darstellung mit unterliegender topografischer Karte, halbtransparentem Orthofoto und ATKIS-Abfrage für Bebauung. Zusätzlich ist eine Layerauswahl für die Anzeige anderer ausgesuchter ATKIS-Flächen und Messpunkte verschiedener Stoffe vorhanden. Die Gehalte der Messungen sind durch Klick in die Karte an der entsprechenden Lokalität abfragbar (Eigene Darstellung).

Die *proj4*-Bibliothek (<http://proj.maptools.org/>) übernimmt in Verbindung mit dem UMN Mapserver die dynamische Projektion mittels Koordinatentransformation und Datuminformationen. Dadurch ist der UMN Mapserver in der Lage, variabel praktisch alle denkbaren Eingangsdaten zu verarbeiten und, ebenso variabel projizierte Daten für andere Software zu erzeugen. Diese Bibliothek ist im übrigen auch zuständig für die Projektion von Raumdaten in *R*. PostGIS greift auf *proj4* zu, um Projektionsinformationen zu lesen und zu schreiben

PrimaGIS

Quelle: www.primagis.fi „Wrapper Interface“ zur Integration in Plone als GUI. Die Kartendarstellung basiert auf UMN Mapserver. PrimaGIS verwendet die Python Cartographic Library (PCL) zur Programmierung des UMN Mapservers mit der Sprache Python.

Durch vollständige Integration ins Content-Management-System ZOPE ist der Zugriff auf Elemente der ZOPE-Datenbank möglich. Dazu greift PrimaGIS auf die ZOPE Cartographic Objects (ZCO) zu. Im Content Management System vorhandene Inhalte lassen sich georeferenziert abbilden. PrimaGIS kennt einen eigenen Datentyp: PrimaGIS Datalayer, die ohne, dass ein „richtiges“ Geodatenformat zugrunde liegt, Inhaltstypen georeferenziert darstellen. Dazu dient die sogenannte IGeoAware-Schnittstelle. PrimaGIS dient im vorgestellten Portal als Darstellungskomponente für Karten und damit auch für die räumliche Auswahl des Untersuchungsraums bzw. der zu untersuchenden Messdaten.

4.2 Datenbeurteilung

- Explorative Datenanalyse
- Regionalisierung/Interpolation

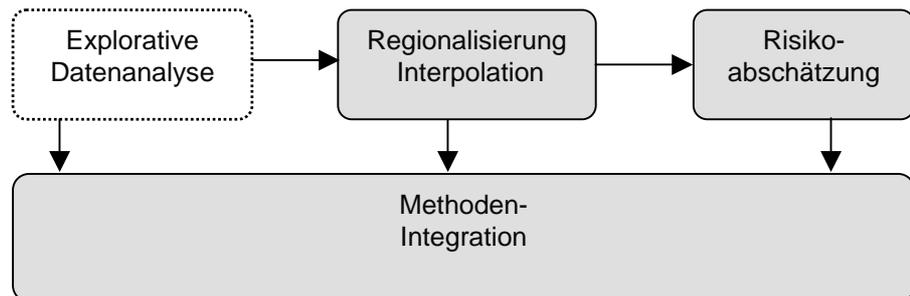
Die in Kapitel 1.6 beschriebene methodische Struktur der Datenbeurteilung mit Daten-Analyse und Interpolation wird in diesem Kapitel vertieft.

4.2.1 Explorative Räumliche Datenanalyse

- LISA
- R
- ArcGIS

John W. Tukey (TUKEY 1977) wird die „Erfindung“ der Explorativen Datenanalyse (EDA) zugeschrieben. Die klassische Statistik stellt Hypothesen auf und testet diese auf ihren Wahrheitsgehalt hin (schließende Statistik). Dahingegen untersucht die EDA die Daten ohne *a-priori* Hypothese und versucht Muster oder Regelmäßigkeiten darin zu entdecken. Modernes Data Mining baut auf diesem Ansatz auf.

Räumliche Explorative Datenanalyse (ESDA) beschäftigt sich ebenfalls mit diesem Thema, aber unter Hinzunahme der räumlichen Dimension.



Ursprünglich sah man die beiden Ansatzweisen als gegensätzlich an, bevor man erkannte, dass sie sich gegenseitig ergänzen und dementsprechend eingesetzt werden müssen. Typische Darstellungen, die im Zuge der Explorativen Datenanalyse eingesetzt werden, sind z.B. Histogramme, Stem-and Leaf-Plots, Box-Plots, Pareto-Diagramme, 2D- u. 3D-Scatterplots, Parallel-Koordinaten-Plots u.a. (MILLARD & NEERCHAL 2001). Bei EDA bzw. ESDA handelt es sich nicht um eine streng definierte Abfolge von Vorschriften oder Untersuchungen, sondern um kombinierbare Verfahren, bei denen erst die gemeinsame Anwendung zum Ziel führt (KRIVORUCHKO ET AL. 2002, KRIVORUCHKO & GOTWAY 2002, SYMANIK ET AL.).

Nach einer Einführung in die Analyse der Lokalen Indikatoren räumlicher Assoziation (LISA), welche einen Spezialbereich der ESDA darstellt, werden die verwendeten Software-Werkzeuge vorgestellt. Für gewöhnlich übernimmt ein GIS die Speicherung und Darstellung der Messlokaltäten und ihrer Attribute, hinzu kommen idealerweise dreidimensionale multivariate Visualisierung und Software zur statistischen Analyse und Berechnung räumlicher Modelle, z.B. Autokorrelation. Einige der vorgestellten Werkzeuge funktionieren integriert in ein GIS (z.B. ArcToolbox), andere sind selbständige SW-Werkzeuge ohne ein GIS (z.B. Ggobi, GeoDA) oder funktionieren als Ergänzung zu einem GIS oder der Statistiksprache R (gstat, geoR).

Interaktivität mit dem Benutzer und dynamisch verlinkte Plots spielen bei der Datenanalyse eine große Rolle und gehören für die betreffende Software wohl zu den eindrucklichsten

Entwicklungen der letzten Jahre. Der Bearbeiter kann dabei selektiv Beobachtungen markieren und erhält gleichzeitig eine Markierung dieser Punkte in allen anderen geöffneten Darstellungsweisen. Durch die Identifikation auffälliger Merkmale in einem Plot wird so die Identifikation auch in anderen Darstellungen möglich. Bei interaktiver 3D-Darstellung (ANSELIN ET AL. 2002, BUJA ET AL. 2004) ergeben sich oft erst durch Änderungen der Perspektive überhaupt Möglichkeiten auf Extremwerte bzw. Ausreisser aufmerksam zu werden.

LISA: Lokale Indikatoren räumlicher Assoziation

LISA-Verfahren beschäftigen sich mit Nachbarschaftsverhältnissen zwischen gemessenen Punkten. Sie dienen der Identifikation von Clustern und dem Auffinden auffälliger Werte. Durch sie können z.B. Bereiche allgemein niedriger Werte von den Bereichen allgemein hoher Werte räumlich abgegrenzt werden. Finden sich andersartige Werte innerhalb dieser homogenen Bereiche kann es sich um Ausreisser handeln. Der Moran's Index (ANSELIN, 1995, ANSELIN 2006) quantifiziert diese Verhältnisse und zeigt statistisch signifikante Unterschiede auf. Moran's lokaler I -Index dient dazu, lokale Clusterung zu identifizieren, also lokale Messfelder aufzuzeigen, die von ihrer Umgebung unterschiedlich sind. So werden lokal erhöhte von lokal niedrigen Umgebungen statistisch unterschieden und z.B. farbig in Karten dargestellt. Die zugehörigen Werte werden in Moran's Scatterplots dargestellt und ermöglichen eine Quantifizierung dieser Untersuchungsmethodik gegenüber der qualitativen Darstellung in Karten. LISA-Verfahren werden z.B. mit SADA durchgeführt.

Wie bei der Variogrammanalyse werden nach Definition einer Nachbarschaft die beobachteten Größen zueinander in Beziehung gesetzt. Denkbar sind Nachbarschaften, die rein über die Entfernung definiert werden oder Nachbarschaften, die sich dadurch definieren, dass Punkte (oder Flächen) miteinander verbunden sind (*contiguity matrix*). Bei Voronoi-polygonen können z.B. langschenkliche Dreiecke an ihren Enden noch Zusammenhängigkeiten aufweisen, die bei einer reinen entfernungs-basierten Nachbarschaft bereits nicht mehr beachtet würden.

R

Mit der Statistiksprache *R* (IHAKA & GENTLEMAN, 1996), einem Klon des kommerziellen Produktes S-Plus® werden Algorithmen zur beschreibenden Statistik und explorativen räumlichen Datenanalyse (ESDA) implementiert. Dazu gehören z.B. Summenstatistik, Histogramme, Box- und Whisker-Plots und QQ-Plots, und Punktmusteranalysen wie der Moran's I Index.

R ist ein nahezu beliebig erweiterbares Statistikpaket und eine Programmiersprache mit der Möglichkeit mit anderen Softwarepaketen zusammen zu arbeiten. Die Erweiterbarkeit ist durch zahllose ladbare Module zu den Gebieten mathematischer Statistik, Interpolationsmethoden u.v.m. sichergestellt. *R* ist freie Software unter der GPL-Lizenz und kann von <http://www.r-project.org/> heruntergeladen werden. *R* ist Open Source, läuft unter allen gängigen Betriebssystemen und es gibt ausführliche interne und externe Dokumentation (z.B. VENABLES & SMITH 2006, SAWITZKI 2005, DALGAARD 2002).

Zu den Modulen zur Bearbeitung räumlicher Methoden gehören z.B. *spatstat* (BADDELY & TURNER 2005), das in der vorliegenden Arbeit verwendete *geoR* (RIBEIRO & DIGGLE 2003), *geoRglm* (RIBEIRO ET AL. 2003), *splancs*, *spatial*, *spweights* etc. (BIVAND 2001). Der Problemkreis räumlicher Statistik wird in einer eigenen neuen Internetdomain behandelt (BIVAND 1996, RIPLEY 2001, BIVAND 2002).

R bietet die graphische Ausgabe am Bildschirm oder als *Bitmap*, *PostScript* oder *PDF*-Datei. Es hat ursprünglich keine graphische Oberfläche. Unter Windows wird *Rgui* mitgeliefert und es gibt verschiedene andere GUI Möglichkeiten, u.a. es im bekannten Editor Emacs als Hauptmodus zu verwenden (*ESS*, Emacs speaks Statistics). Emacs kann dann –ähnlich wie bei der Programmierung von Visual Basic, o.ä. bei der Ergänzung von Befehlen dienen, Befehle können innerhalb des Editors ausgeführt und getestet werden etc. Die Bedienung von *R* ist anfangs dadurch erschwert, dass Analyse-Methoden programmiert werden müssen, ohne dass eine grafische Oberfläche bei der Erstellung hilft. *R* wird als Standalone-Tool verwendet, kann jedoch für die Interprozeß-Kommunikation so erweitert werden, dass z.B. Windows- Programme darauf zugreifen können (z.B. *RExcel*, *RArcInfo*) oder, wie im vorliegenden Fall, als Server-Erweiterung per SOAP Daten empfangen und zurückgeben. Dabei zeichnet sich die kommandozeilenbasierte Bedienung als Vorteil aus, indem Kommandos in Skripten kombiniert und als Batch ohne Benutzerinteraktion ausgeführt werden können.

ArcGIS

ESRIs ArcGIS 9 enthält in seiner *Spatial Statistics Toolbox* verschiedene Möglichkeiten für Punkt- und Flächennachbarschaftsstatistiken, u.a. für LISA-Karten (*local indicators of spatial association*, s. o.). Dynamisch verlinkte Plots ermöglichen wie in *GeoDa* oder *GGobi* die Auswahl und Markierung von Punkten in einer Darstellung, z.B. dem Histogramm, während diese Punkte gleichzeitig in allen anderen Darstellungen, z.B. in Voronoi-Polygondarstellungen oder in einer Scatterplot-Wolke ebenfalls markiert angezeigt bzw. deren Markierung aktualisiert werden.

Die Erweiterung *Geostatistical Analyst* enthält die Möglichkeit Histogramme, einfache deskriptive Statistiken anzufertigen. Der Vorteil komfortabler Bedienung wird durch Starrheit behindert: die enthaltenen Prozeduren sind nicht erweiterbar und die Dokumentation der zugrundeliegenden Algorithmen ist lückenhaft oder nicht vorhanden.

4.2.2 Regionalisierung/Interpolation

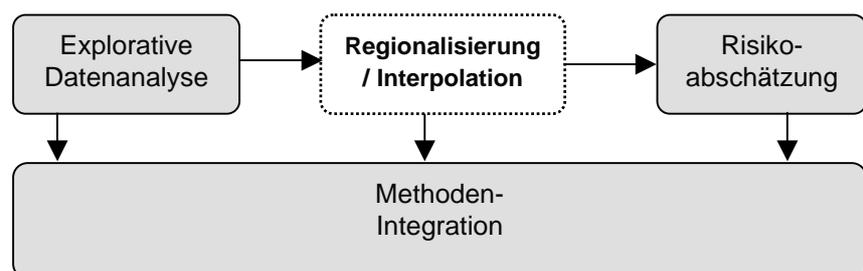
- Interpolationsverfahren
- Interpolationssoftware

4.2.2.1 Interpolationsverfahren

Geostatistische und deterministische Interpolationen wurden verwendet, um ausgehend von den punktwise gemessenen Werten flächenhafte Schätzungen der Kontaminationshöhen zu erhalten. Die diesen beiden Verfahren zugrundeliegende „Philosophie“ unterscheidet sich grundsätzlich, so dass eine getrennte Betrachtung notwendig erscheint:

Geostatistische Methodik beruht auf der Annahme, dass gemessenen Werten ein gemeinsamer genetischer Ursprung zugrunde liegt, sofern man in einem homogenen Bereich misst (s.u.:

Abschnitte *Kriging*, geostatistische *Simulation*). Ihre Herkunft liegt in der Lagerstättenkunde.



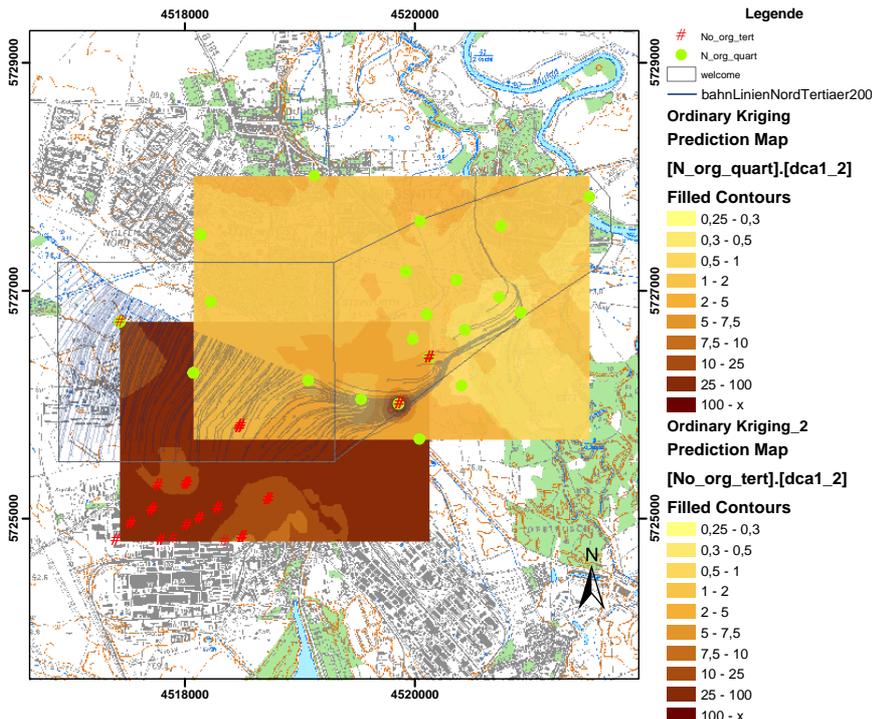


Abb. 15: Beispielhafte ArcGIS Darstellung einer Interpolation mit Ordinary Kriging. Dargestellt sind interpoliert die Beprobungen des quartären GWL (rechts oben) bzw. des tertiären GWL (links unten). Die zugrundeliegenden Probenahmepunkte sind in rot bzw. grün gezeigt.

KRIGE (1952) verwendet den Begriff Geostatistik in der Quantifizierung mittlerer Erzgehalte in homogenen Abbaubereichen von Minen.

Das Grundproblem ist ähnlich wie in der Umweltanalytik: aus (wenigen) Werten an Messlokalitäten in der Mine und vor dem Hintergrund, dass es teuer und aufwendig oder unmöglich ist, mehr Messwerte zu gewinnen, soll auf den Stoffgehalt in allen Bereichen der Lagerstätte geschlossen werden. Unter der Annahme von Homogenität für ein stationäres Feld kann man voraussetzen, dass dem Stoff über kurze Entfernungen aufgrund der *Erhaltungsneigung* ähnliche Entstehungsvoraussetzungen und damit ähnliche Gehalte zugrunde liegen, während die Erhaltungsneigung zwischen Messpunkten zurückgeht, woraus immer unähnlichere Konzentrationen resultieren, je weiter zwei Messpunkte auseinanderliegen.

Während beim Kriging nicht nur deren Entfernung, sondern auch die räumliche Konstellation, also z.B. Dichteverteilung bzw. Clustering und die Richtungen zwischen den Messpunkten in die Berechnung eingehen und ein Suchraum vordefinierbar ist, gehen bei den deterministischen Verfahren nur die Punktabstände in die Berechnung ein (s. Abb. 15). Geostatistische Methodik wird durchaus kontrovers diskutiert (CLARK, „Does Geostatistics Work?“; GENTON & FURRER (1998): „Is Spatial Statistics Worth the Trouble?“), auch wenn ihr praktischer Nutzen unumstritten ist. Zu den Kritikpunkten gehört die aufwendige Berechnung und schwierig zu durchschauende Methodik, die dazu führen kann, dass Grundvoraussetzungen durch die Daten (z.B. (log-)Normalverteilung) nicht erfüllt sind (Abb. 15).

Die folgenden zwei Algorithmen zählen zu den deterministischen Verfahren (s.u.: Abschnitte *IDW*, *Nearest Neighbour*):

- Die Methode der Interpolation über die inversen Distanzen (IDW) bezieht lediglich die Entfernung der Messpunkte voneinander in die Berechnung ein (es werden gewöhnlich sämtliche verfügbaren Messwerte in einer definierten „Nachbarschaft“ verwendet).

- Ein weiterer sehr einfacher Interpolationsalgorithmus besteht darin, den ungemessenen Punkten den Wert des jeweils nächstgelegenen gemessenen Punktes zuzuweisen („*nearest neighbour interpolation*“). Diese Methode findet hier keine Verwendung.

Folgende Vorteile geostatistischer Verfahren gegenüber deterministischer Methodik sind zu nennen (THAYER ET AL. 2003):

- sie ziehen nicht nur die *geometrische Distanz*, sondern durch die Varianz eine *statistische Distanz* in Betracht und werden dadurch dem gewöhnlich nichtlinearen Modell räumlicher Autokorrelation besser gerecht.
- Geostatistik wird Redundanz gerecht, indem sie die Kovarianz von Daten aufgrund ihrer geometrischen Anordnung einbezieht.
- Die Fehler der Schätzung lassen sich quantifizieren. Dadurch ist es möglich, die Unsicherheit bei der Abschätzung von Kontaminationshöhen zu quantifizieren.
- Sekundäre Information wie z.B. andere Kontaminanten, Bodentypen etc. lässt sich in die Berechnung einbeziehen.

Als Nachteile stehen diesen entgegen, dass das gesamte Verfahren aufwändiger ist und die Berechnung an und für sich höhere Anforderungen an den Bearbeiter stellt und länger dauert. Außerdem besteht die Gefahr, dass die Modell-Voraussetzungen (Stationariät) außer acht gelassen und so falsch interpretiert werden (GAU 2005).

IDW

Die Berechnung des Wertes für einen Punkt erfolgt durch Gewichtung aller umliegenden Punkte proportional zu ihrer Entfernung d vom zu berechnenden Punkt, wobei das Gewicht w eines Punktes als $w = 1/d^n$ mit n als einem beliebigen Exponenten ≥ 1 errechnet wird. Kurze Distanz resultiert in größerem Gewicht und umgekehrt (daher *inverse Distanzen Gewichtung*). Für große n nähert sich die Interpolation einer Nearest Neighbour Interpolation an. Manche Software ermöglicht die Definition der maximalen Anzahl Punkte, die in die Gewichtung und Berechnung eingehen sollen, so dass sich der Einfluss (voraussichtlich) unähnlicherer Punkte einschränken lässt, wenn man viele Messpunkte zur Verfügung hat und diese sowohl nah als auch weit entfernt vom Interpolationsort liegen.

Kriging

Kriging ist die wohl üblichste geostatistische Methodik und wird vielfach angewandt, u.a. zur Interpolation von Gelände- oder Grundwasseroberflächen aber eben auch zur Schätzung anderer physikalischer Größen wie Kontaminationshöhen. Kriging liegen einige Modellannahmen zugrunde, die zur korrekten Anwendung und Interpretation der Ergebnisse beachtet und verstanden werden müssen.

Wesentlich ist die Annahme, dass den gemessenen Werten, die zur Interpolation verwendet werden, ein gemeinsamer Entstehungsprozess zugrunde liegt. Sie stellen also das Resultat aus einem Vorgang dar, dessen Ursache oder Ablauf man nicht unbedingt kennt, dem aber eine gewisse Gesetzmäßigkeit unterstellt wird. Die Werte der Messungen werden daher als um einen gewissen *Erwartungswert* schwankende, mehr oder weniger zufällige Realisierung dieses Prozesses gesehen. Man spricht von *Zufallsvariablen*, deren jeweilige Realisierung in einem *Zufallsfeld* resultiert. Ziel des Kriging ist es, ohne Kenntnis des zugrundeliegenden Prozesses, die Gesetzmäßigkeit der *gemessenen* Realisierung insoweit zu charakterisieren, dass eine Interpolation auf nicht gemessene Lokalitäten möglich ist und diese Interpolation sowohl den gemessenen wie den nicht gemessenen Lokalitäten gerecht wird. Insofern gehört Kriging zu den modellbasierten Schätzern. Im Gegensatz zur klassischen Stochastik, – in der

gezogene Werte als voneinander unabhängig gelten, – steht hierbei die Annahme, dass die Punkte durch *Autokorrelation* voneinander abhängig sind.

Die bekannte Gleichung für lineare Regression

$$Y = \beta_0 + \beta_1 X_1 + \beta_2 X_2 + \varepsilon \quad (1)$$

mit dem Achsenabschnitt β_0 und Modellparametern β_1, β_2 sowie den zu interpolierenden Variablen X wird für das Kriging so angepasst, dass die Lokalitäten der Messwerte in die Gleichung für einen zu schätzenden Punkt eingehen:

$$Y_{0(u_0, v_0)} = \beta_0 + \beta_1 X_{I(u_1, v_1)} + \beta_2 X_{2(u_2, v_2)} + \dots + \beta_N X_{N(u_N, v_N)} + \varepsilon_{(u_0, v_0)} \quad (2)$$

mit u und v als kartesische Koordinaten. β_0 ist entweder wiederum ein Achsenabschnittswert oder ein Trendterm. Hauptunterschied zwischen Kriging und linearer Regression ist, dass die zu interpolierende, abhängige, Größe Y_0 den zur Interpolation verwendeten, unabhängigen, Variablen entspricht. Gleichung (2) lässt sich also wie folgt umschreiben als gewichtete Linearkombination der gemessenen Werte:

$$Y_{0(u_0, v_0)} = \beta_0 + \beta_1 Y_{I(u_1, v_1)} + \beta_2 Y_{2(u_2, v_2)} + \dots + \beta_N Y_{N(u_N, v_N)} + \varepsilon_{(u_0, v_0)} \quad (3)$$

$Y_{I(u_1, v_1)}, Y_{2(u_2, v_2)}, \dots, Y_{N(u_N, v_N)}$ sind die Vorhersagevariablen, $\beta_1, \beta_2, \dots, \beta_N$ bilden die Gewichte bei der Interpolation entsprechend dem Maß der räumlichen Autokorrelation an den gemessenen Lokalitäten und der zu interpolierenden Lokalität. Gewöhnlich wird zur Schätzung der Term β_0 für den Trend von Anfang an ausgelassen:

$$Y_{0(u_0, v_0)} = \beta_1 Y_{I(u_1, v_1)} + \beta_2 Y_{2(u_2, v_2)} + \dots + \beta_N Y_{N(u_N, v_N)} + \varepsilon_{(u_0, v_0)} \quad (4)$$

Die Gewichte β werden durch Minimierung der Vorhersagefehler (Krigingfehler) errechnet. Die Gewichte ergeben in der Summe 1. An den gemessenen Lokalitäten muss der Fehler genau 0 sein. Bei der klassischen linearen Regression sind es im Unterschied dazu die Summen der quadrierten Fehler, die minimiert werden (Methode der kleinsten Quadrate, *least squares method*). Durch die Erfordernis einer Gewichtssumme von 1 erhält man einen unbeeinflussten (*unbiased*) Schätzer. Durch die Minimierung der Fehler erhält man den *best linear unbiased estimator* „blue“.

Die Krigingvarianz σ_{OK}^2 wird wie folgt berechnet::

$$\sigma_{OK}^2 = \sigma_w^2 + \sum \sum \beta_i \beta_j C_{ij} - 2 \sum \beta_i \sum C_{i0} \quad (5)$$

σ_w^2 ist die gewichtete Probenvarianz, $\beta_i \beta_j$ sind die Gewichte für die gemessenen Werte an Lokalitäten i, j und C_{ij} die Kovarianz zwischen den Beobachtungen an den Lokalitäten i, j . C_{i0} ist die Kovarianz zwischen der i -ten Beobachtung und dem zu schätzenden Punkt. Die Krigingvarianz ist also eine Funktion der Gewichte und der Kovarianzen zwischen jedem in der Kriging-Gleichung verwendeten Probenpaar C_{ij} und der Kovarianz zwischen jeder Beobachtung und dem zu schätzenden Punkt C_{i0} .

Man geht bei der Kriginginterpolation in drei Schritten wie folgt vor: Die Realisierung des Prozesses durch die Messwerte wird untersucht, indem zuerst ein Scatter-Plot der Varianz (6) der Messwerte in Abhängigkeit von ihren gegenseitigen Abständen angefertigt wird. Dazu

wird für jeden gemessenen Punkt seine Varianz zu jedem anderen gemessenen Punkt auf der Y-Achse und auf der X-Achse die zugehörige Distanz eines solchen Punktpaares (quadrierte Differenzen der Punkte) aufgetragen

$$\gamma(h) = (1/2N(h)) \sum (\gamma_i - \gamma_j)^2 \quad (6)$$

mit N der Summe der Beobachtungspaare, die Abstand h voneinander haben und γ_i, γ_j den an den Lokalisationen i und j gemessenen Konzentrationen. Für ein einfacheres Vorgehen bei der späteren Interpolation werden Abstandsklassen gebildet und die Hälfte des Mittelwertes errechnet. Dieser ($1/2 \gamma(h)$) wird aufgetragen, daher der korrekte Name *Semivariogramm*. Der Einfachheit halber spricht man für gewöhnlich aber nur von *Variogramm*- gemeint ist dasselbe.

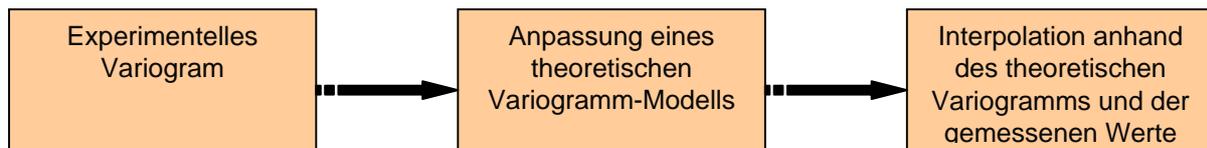


Abb. 16: Vorgehensweise beim Kriging

Diesem sogenannten *experimentellen Variogramm* wird im zweiten Schritt ein Modell angepasst, mit dem danach interpoliert wird. Die Anpassung eines *theoretischen Variogramm-Modells* ist deswegen notwendig, weil für eine gegebene endliche Anzahl Messpunkte auch nur für eine endliche Anzahl Entfernungen h die Varianz $\gamma(h)$ bekannt ist – da man aber für unendlich viele Entfernungen interpolieren will, um flächenhafte Werte zu erhalten, muss der Interpolation statt des experimentellen Variogramms ein theoretisches Modell zugrundegelegt werden. Die Werte für die Varianzen für jede beliebige Entfernung gehen später in die Berechnung der Gewichte zur Interpolation ein. Zuletzt wird für jeden zu interpolierenden Punkt eine Matrix der Gewichte für alle gemessenen Punkte aufgestellt und mit ihrer Hilfe aus den gemessenen Werten der neue Wert errechnet. Die Anpassung der

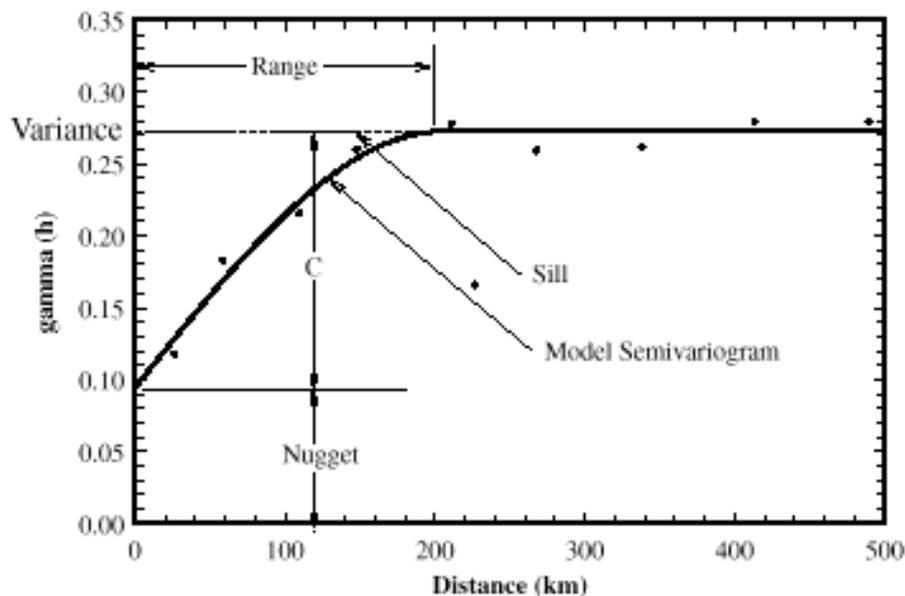


Abb. 17: Komponenten eines Semivariogramms. Quelle: www.uncert.com/tutor

Gewichte erfolgt iterativ nach der „Methode der Kleinsten Quadrate“, wobei eine Minimierung der quadrierten Abweichungen vorgenommen wird. Es handelt sich also beim Kriging um ein Verfahren der multiplen linearen Regression.

Der Variogrammanpassung kommt eine besonders wichtige Rolle zu, da die errechneten Werte direkt vom angepassten Variogramm Modell abhängig sind. Der Berechnung und Anpassung des theoretischen Variogramms soll daher besondere Aufmerksamkeit geschenkt werden. Wie GRINGARTEN & DEUTSCH (2001) zeigen, wird dieser Schritt aber, insbesondere, da er recht komplex ist, häufig vernachlässigt. Es kommen unterschiedliche Variogrammformen in Frage, wobei lineare, exponentielle oder sphärische Kurven Verwendung finden. Für die Ausformung eines Variogramms sind drei Eigenschaften wesentlich: Nugget, Sill und Range (s. Abb. 17). Dabei handelt es sich beim Nugget um den Achsenabschnitt auf der Y-Achse, beim Sill um die theoretisch erreichbare Varianz (keine weitere Änderung der Varianz bei steigender Reichweite, Varianz konstant) und bei der Range um die Reichweite bzw. um die Entfernung bei welcher der Sill erreicht wird. Zur Anpassung eines theoretischen Modells können diese ineinander geschachtelt werden. Ein Nuggeteffekt ist theoretisch dort möglich, wo durch kleinräumige Variabilität der beobachteten Größe Messwerte innerhalb kurzer Abstände stärker variieren, als sie dies aufgrund ihrer räumlichen Autokorrelation dürften. Er tritt z.B. in Lagerstätten auf, wo ein (Gold)-Nugget direkt neben goldfreier Matrix gefunden wird.

Der vielleicht größte Vorteil beim Kriging liegt darin, dass für jeden interpolierten Punkt gleichzeitig ein Wert für den Interpolationsfehler (und damit die Verlässlichkeit der Interpolation) errechnet wird. Dieser sogenannte „Kriging Standard Fehler“ wird im Allgemeinen als die Standardabweichung des Schätzfehlers interpretiert. (Die Krigingvarianz an jedem interpolierten Punkt wird mitberechnet- der Kriging Standard Fehler ergibt sich aus der Quadratwurzel dieser Varianz). Letztlich wird beim Kriging also nicht nur interpoliert, sondern gleichzeitig ein Modell der räumlichen Variabilität aufgestellt. Sozusagen als Nebeneffekt erhält man ein Maß für die Unsicherheit der Modell-Aussage für jeden Punkt einer Interpolation. Die Unsicherheit ergibt sich in diesem Fall aus der begrenzten Anzahl von Messpunkten und der Variation in den Stoffgehalten.

Durch seine Fähigkeit ein Modell der unbekanntten Lokalitäten in die Interpolation mit einzubeziehen verbessert Kriging die Schätzung, wenn eine bevorzugte Beprobung z.B. an Hotspots und ungleichmässige Verteilung der Messstellen vorliegt (THAYER ET. AL, 2003)

Es existieren vielerlei Variationen von Kriging. *Universal Kriging* trägt einem evtl. vorhandenen Trend Rechnung. Die Messwerte werden dann als aus einer deterministischen Trendoberfläche plus einem stochastischen Residuum zusammengesetzt berechnet. Für die Trendoberfläche können lineare Gleichungen verschiedener Ordnung eingesetzt werden, um ebene oder verschiedenartig gekrümmte Oberflächen modellieren zu können. *Ordinary Kriging* setzt voraus, dass kein Trend vorhanden ist- andernfalls muss der Trend vorher aus den Messwerten herausgerechnet werden. Berechnet werden Werte mit einem zwar unbekanntem aber konstanten Mittelwert (*Stationaritäts-Voraussetzung*). *Simple Kriging* wird dagegen verwendet, wenn man den Mittelwert kennt, dieser aber über das Untersuchungsgebiet nicht konstant ist. Beim *Co-Kriging* werden mehrere Variablen an identischen Messpunkten simultan in die Kriging-Gleichungen eingesetzt, so dass man als Ergebnis die Interpolation des gegenseitigen Einflusses mehrerer Variablen erhält. Ähnlich funktioniert Kriging mit externer Drift. *Indikator Kriging* wird verwendet, um durch Interpolation bekannter Werte in Bezug auf einen oder mehrere Schwellenwerte ein binäres bzw. logisches Ergebnis-Raster zu erhalten, aus welchem hervorgeht, ob und mit welcher

Wahrscheinlichkeit an einem Rasterpunkt ein Schwellenwert über- oder unterschritten wird. Dies lässt sich z.B. nutzen, um Werte unterhalb der Nachweisgrenze von vorneherein in der Variogramm-Berechnung unterzugewichten. Es resultiert dann eine rechtsschiefe Verteilung und eine Kriging-Schätzung mit einem Übergewicht der hohen Messwerte. Für konservative Interpolationsfragen kann dies wünschenswert sein. Andererseits können die Ergebnisse übermäßig alarmierend wirken.

Beim Vergleich unterschiedlicher Software zur Bearbeitung geostatistischer Probleme ist zu beachten, dass neben abweichender Nomenklatur unterschiedliche Algorithmen eingesetzt werden (MUELLER 2004):

Exponentielles Modell

1. Semivariogramm = $c[1-\exp(-h/a)]$ (a = theoretische Reichweite)

Verwendung bei: SAS, Surfer, GSLIB(1992), GSTAT, ARCGIS 8.x version von ARCGRID + Practical Geostatistics 2000 software.

2. Semivariogramm = $c[1-\exp(-3h/a)]$ (a = praktische Reichweite: Entfernung, bei der 95% des Sills erreicht sind)

Verwendung bei: GS+, Variowin, GSLIB(1998), S+, GEO-EAS, ARCGIS Geostatistical Analyst

- was zur Folge hat, dass man a aus (z.B.) dem Geostatistical Analyst durch 3 teilen muss, um unter Verwendung dieses Variogramms mit Surfer ein Kriging durchzuführen.

Gauss'sches Modell

1. Semivariogramm = $c[1-\exp(-(h/a)^2)]$ (a = theoretische Reichweite)

Verwendung bei: SAS, Surfer, GSLIB (1992), S+, GSTAT, ARCGIS 8.X version of ARCGRID and Practical Geostatistics 2000 software

2. Semivariogramm = $c[1-\exp(-3(h/a)^2)]$ (a = praktische Reichweite: Entfernung, bei der 95% des Sills erreicht sind)

Verwendung bei: Variowin, GS+, GEO-EAS, ARCGIS Geostatistical Analyst

3. Semivariogramm = $c[1-\exp(-(3h/a)^2)]$ (a = praktische Reichweite: Entfernung, bei der 99,9% des Sills erreicht sind)

Verwendung bei: GSLIB (1998)

Wenn man also Variowin oder den Geostatistical Analyst zur Variogrammanpassung verwendet, muss man a durch die Quadrat-Wurzel von 3 teilen, um mit Surfer zu kriggen, oder mit Wurzel 3 multiplizieren, um mit GSLIB (1998) zu kriggen. Desweiteren ist dort die praktische Reichweite a als 99.99% des Sills definiert.

Exponentielle und Gauss'sche Modelle

h = Abstandsvektor

a = Reichweite, praktische Reichweite, effektive Reichweite oder Reichweitenparameter

Es gilt zwischen unterschiedlicher Parameterauswahl bei den exponentiellen und gauss'schen Modellen gegenüber dem sphärischen Modell zu unterscheiden:

Da bei ersteren im Gegensatz zum letzteren ein wirklicher Sill, also Konstanz der Varianz nie erreicht wird, errechnet man die praktische Reichweite wie oben angegeben.

Richtungen

Surfer, Variowin, und GEO-EAS geben Osten als 0 Grad an. Die Richtung steigender positiver Gradzahl ist gegen den Uhrzeigersinn. Dagegen geben GS+, GSLIB (1992, 1998), SAS, S+, GSTAT, ARCGIS Geostatistical Analyst und Practical Geostatistics 2000 Software (CLARK 2000) die Nordrichtung als 0 Grad an und positive steigende Gradzahl läuft im Uhrzeigersinn. Die ARCGIS 8.x version von ARCGRID verwendet nur isotrope Modelle.

Des weiteren ist zu beachten, ob Z-Werte als Höhen über Normal Null oder als Tiefe unter GOK anzugeben sind. SADA verwendet Tiefen, daher wurde ein künstlicher, ebener Horizont oberhalb der GOK errechnet, unter den die Filterstrecken-Mitten als Z-Wert „eingehängt“ wurden.

Geostatistische/Stochastische Simulation

Diese Art der Simulation stellt eine Erweiterung der Krigingmethode dar. Interpolation durch Kriging resultiert meist in einer geglätteten Oberfläche durch die gemessenen Punkte. Während also der Algorithmus als exakter Interpolator darauf ausgelegt ist, an gemessenen Punkten den Messwert wiederzuspiegeln, (sofern nicht eine Abweichung durch den Nuggeteffekt erlaubt ist), wird für die Gesamtoberfläche die Gesamt-Fehler-Varianz minimiert, wodurch die Glättung hervorgerufen wird. Durch die Glättung werden wenigen sehr großen Beobachtungen niedrige Werte zugewiesen und vielen sehr kleinen Beobachtungen ebenfalls geringe Werte. Insgesamt entspricht die entstehende Oberfläche unter Schutzgutaspekten nicht der beabsichtigten Interpolation.

Nimmt man nun verschiedene unterschiedliche Realisierungen solcher Oberflächen an, die jeweils an den interpolierten Punkten kleinere oder größere Abweichungen zulassen, so erhält man ein Spektrum möglicher Oberflächen, die insgesamt die wirkliche Oberfläche besser darstellen können (GOOVAERTS, 1997). Für all diese Oberflächen ist die Realisierungswahrscheinlichkeit gleich hoch. (Sequentielle) Simulation kann die Varianz tatsächlicher Oberflächen daher besser ausschöpfen als es bei der immer geglätteten Kriging-Interpolation der Fall ist. Konditionale Simulation konditioniert die Interpolation auf die gemessenen Punkte.

Die praktische Vorgehensweise ist wie folgt: Zunächst wird eine Abfolge (Sequenz) festgelegt, in der die zu schätzenden Punkte durchlaufen werden sollen, und wie beim Kriging wird eine Schätzung für einen (ersten) Einzelpunkt vorgenommen. Für diesen Punkt liegt damit dann auch eine Quantifizierung der Unsicherheit der Schätzung vor, die dazu genutzt werden kann, einen Wertebereich zu errechnen, in dem sich der geschätzte Wert befinden muss. Aus diesem Wertebereich wird über eine Zufallsfunktion ein Wert ausgewählt, der damit die Realisierung an dieser Stelle darstellt. Unter Einbezug der gemessenen Beobachtungen und des neu geschätzten Wertes wird dann die Schätzung für den nächsten Punkt durchgeführt und so weiter, bis alle unbekanntes Werte geschätzt worden sind. Um die Unsicherheit bei der Schätzung zu quantifizieren, werden mehrere (~100-1000) solcher Läufe durchgeführt.

Die meisten gängigen Softwarepakete können keine Simulationen durchführen. *R* bietet Zusatzpakete für die geostatistische Simulation.

Räumliche Gewichtung und Raumrepräsentativität

Kriging wird dem unterschiedlichen Einfluss räumlich gedrängt vorkommender (geclusterter) Werte insofern gerecht, als deren Autokorrelation in die Berechnung der Gewichte für die

Interpolation eingeht. Bei der Verwendung eines Interpolations-Verfahrens, bei dem das normalerweise nicht zur Anwendung kommt, (z.B. *nearest neighbour*, *IDW*), können zusätzlich berechnete raumabhängige Gewichte eingeführt werden.

Die Verwendung von Voronoi-Polygonen ist ein Beispiel dafür (z.B. BURGER & BIRKENHAKE 2002). Die Konstruktion ist wie folgt: In jedem Polygon liegt ein Messpunkt, jeder Punkt der Fläche eines Polygons ist genau dem einen Messpunkt dieses Polygons am nächsten gelegen. Auf diese Weise repräsentiert jedes Polygon genau die Lokalität eines Messwertes und die Einflussosphäre eines Polygons kann durch ihre Fläche als Größe für die Berechnung eines Gewichtes für den Messwert herangezogen werden. Praktisch wirkt sich das so aus, dass an den Stellen, wo auf die Fläche bezogen viele Messpunkte liegen, der Einfluss der Messpunkte relativ verringert wird, während an den Lokalitäten, wo eine einzelne Beobachtung eine große Fläche zu repräsentieren hat, der Einfluss dieses Einzelwertes proportional angehoben wird. In der SADA-Software (s.u.) wird die Natural Neighbour Interpolation eingeführt, die diese Vorgehensweise algorithmisch umsetzt.

Der ArcView Geostatistical Analyst enthält die Möglichkeit zur Darstellung von Voronoi-Kachelungen. Er kombiniert diese Darstellung mit einer farbigen Hervorhebung der Werte, die von den Werten der benachbarten Polygone signifikant verschieden sind. Die Darstellung dient so zum Auffinden von Ausreißern oder Extremwerten.

Ein Index zur Raumrepräsentativität ermöglicht die Bewertung der Validität einer Beobachtung für die von ihm bezeichnete Fläche. Der *Coefficient of Representativity* (DUBOIS 2000) zeigt hiermit Flächen an, die überbeprobte oder unterbeprobte sind. Auf ähnliche Weise kann man sich die beim Kriging erhaltenen Werte über die Unsicherheit zunutze machen, um Beprobungspläne zu optimieren.

4.2.2.2 Interpolationssoftware

Die zur Interpolation vorgesehenen Programme sind weitgehend bekannt und zum Teil seit über 10 Jahren vielfach im Einsatz. Eine Vorstellung der verwendeten Programme erfolgt nur im Hinblick auf die für die vorliegende Studie relevanten Eigenschaften². Ebenso werden die ursprünglich zur Verwendung vorgesehenen Programme vorgestellt und Gründe genannt, wo sich die Software erst im Verlauf der Arbeiten als unzureichend herausgestellt hat.

GeoEAS

Räumliche Korrelationsanalyse, Variogrammodellierung, Geostatistische Interpolation und Kreuzvalidierung lassen sich unter einer DOS-Oberfläche durchführen. Die Anzahl der verwendbaren Punkte ist stark beschränkt. Duplikate werden nicht eingelesen, daher müssen die Datensätze vorher um die Duplikate reduziert werden. Keine Interaktivität bei der Variogrammodellierung. Grafische Ausgabe mangelhaft. Diese Eigenschaften machen es für die praktische Anwendung mit vielen Datensätzen, insbesondere zeitgemittelten Probenahmekampagnen und für deren Darstellung ungeeignet.

Variowin

Variowin ist praktisch nur zur interaktiven Variogrammodellierung geeignet. Es hat eine gute grafische Oberfläche weist aber im übrigen ähnliche Mängel wie bei GeoEAS beschrieben auf. Insbesondere die fehlende interne Behandlung von Duplikaten macht es schwierig zu handhaben.

² s. auch *Geostatistical Software Suggestions* von G.Dubois auf www.ai-geostats.org

Surfer

Fehlende Interaktivität bei der Variogrammodellierung lässt sich durch Verwendung externer Programme für diesen Zweck wettmachen. Surfer liest viele GIS-Formate und hat eine hervorragende zwei- oder dreidimensionale (allerdings statische) Darstellung der Daten. Zusätzlich können Oberflächen überlagert und Differenzen berechnet werden. Damit dient es zur Objektivierung und Quantifizierung von Interpolationsergebnissen.

SADA

SADAs eigentliche Aufgabe ist die räumliche Risiko-Analyse unter Aspekten der Stofftoxizität und Expositionsmodellierung. Die dafür erforderlichen Schritte der Variogrammodellierung und räumliche Analyse (z.B. Local Moran) werden durch Assistenten gestützt interaktiv in vorgefertigten logisch strukturierten Arbeitsabläufen durchgeführt. Damit erfüllt es viele der Erfordernisse bei der Durchführung der Risikoabschätzung.

Zur Interpolation stehen Nearest Neighbour, IDW und Kriging als Ordinary oder Indikator Kriging mit bis zu drei unterschiedlichen Grenzwerten zur Verfügung. Die graphische Ausgabe umfasst eine 2- oder 3-dimensionale Interpolation der Ergebnisse und die Darstellung der Flächen, an denen für vom Nutzer gewählte Szenarien ein in einer mitgelieferten Datenbank gespeichertes Qualitätsziel überschritten wird.

Die entstehenden 3D-Modelle sind vollständig interaktiv untersuchbar. Nachteilig ist, dass die mitgelieferte Stoffdatenbank hauptsächlich die US-amerikanischen Bestimmungen berücksichtigt. Die Untersuchungsdaten werden in einer internen Datenbank abgelegt, auch wenn sie aus einer Access-Datenbank oder Excel-Tabellen stammen. Damit werden die

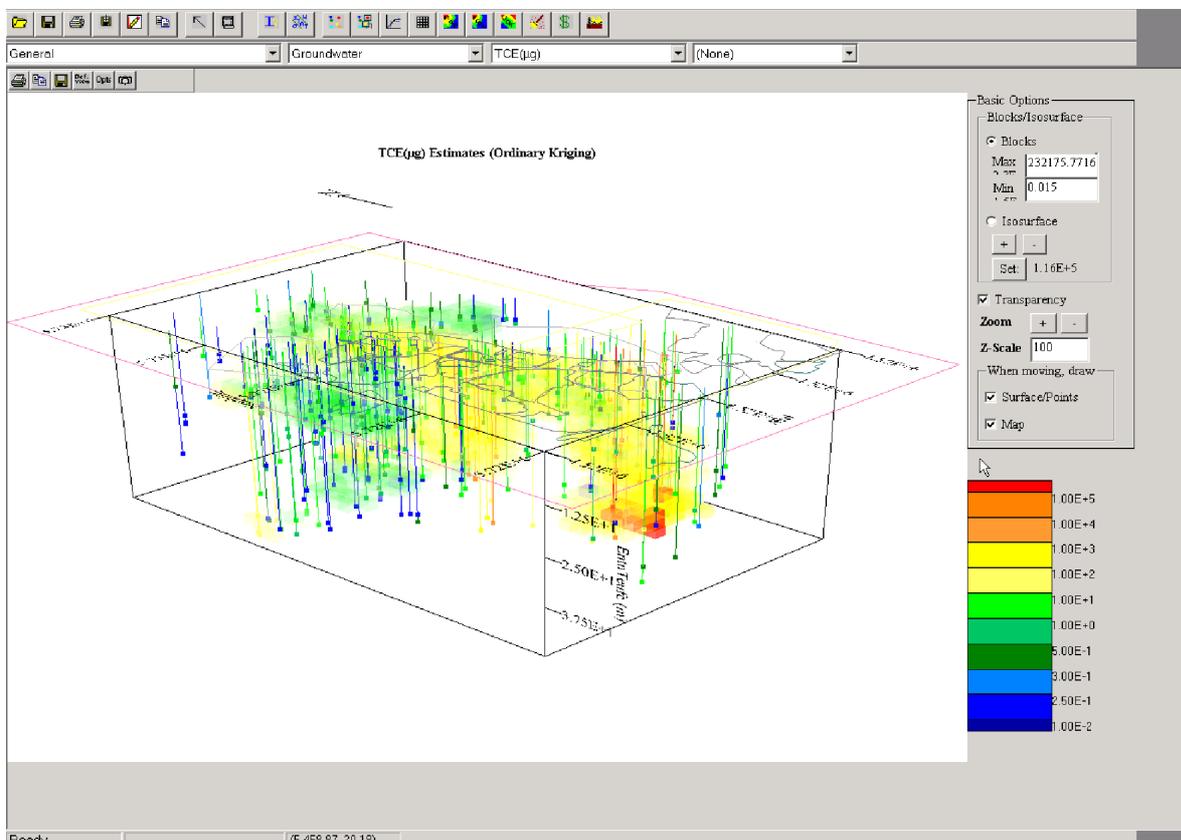


Abb. 18: SADA 3D-Interpolation mit Ordinary Kriging im interaktiven 3D-Viewer dargestellt als “Wolke” mit Bohrungen und Probenahme Punkten.

Ausgangsdaten auf dem eingelesenen Stand „eingefroren“- die Integration neu hinzugekommener Daten ist aufwendig.

MVS

Der durch Modellierung der Geologie erhaltene, detaillierte Untergrunderbau (FABRITIUS 2002, WOLLMANN 2004) wurde in EVS/MVS überführt, indem Volumenkörper der Geologie aus Profilschnitten bzw. Bohrprofilen interpoliert wurden (HUBERT 2005). MVS bietet die Möglichkeit die Interpolation von (Schad-)Stoffverteilungen innerhalb diskreter Volumenkörper durchzuführen. Dazu stehen Ordinary Kriging und Indikator-Kriging sowie IDW zu Verfügung. MVS dient vor allem der interaktiven 3D-Darstellung. Der Benutzer kann im fertigen MVS-Modell Profilschnitte durch das Modell legen und verschieben. Beim Verschieben werden z.B. die Stoffgehalte oder auch die Krigingvarianz im Modellschnitt dargestellt. Auf diese Weise sind die Gehalte auf ganz neue Weise interaktiv „erfahrbar“ (Abb. 19).

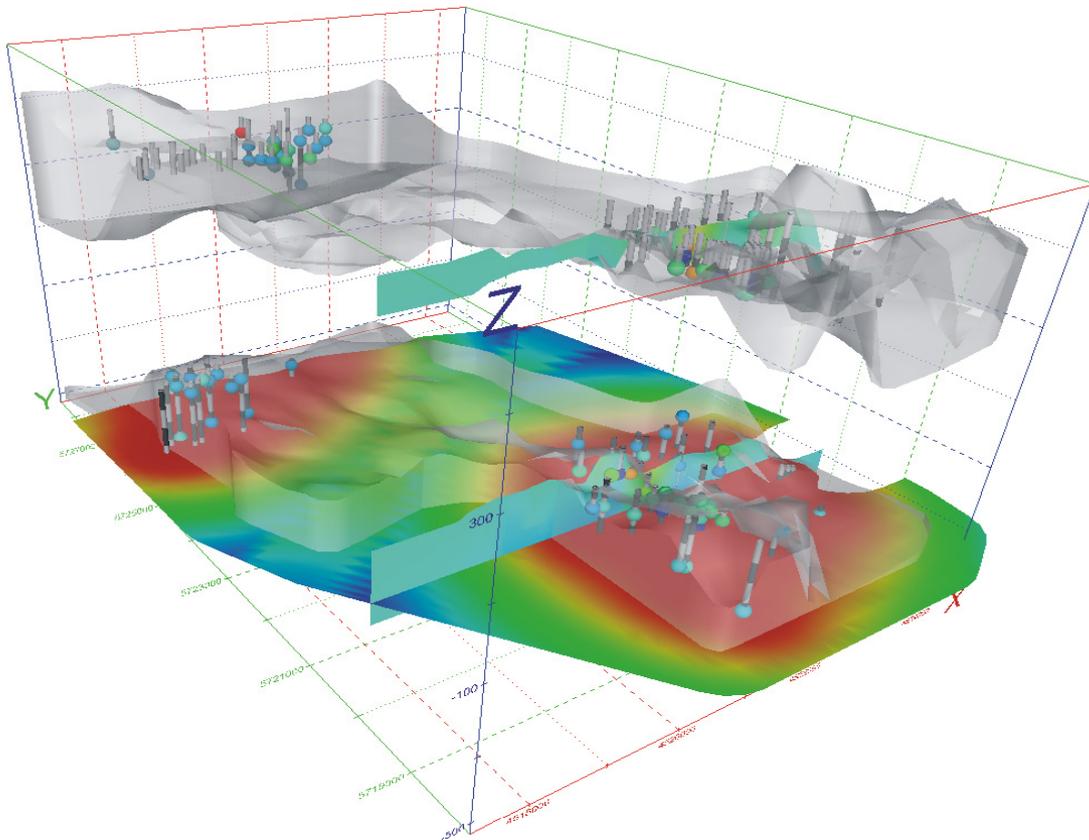


Abb. 19: Ordinary Kriging Interpolation mit MVS, getrennt für quartären bzw. tertiären GWL. Darstellung des Standardfehlers auf der unteren Ebene. Kontaminationshöhen in Vertikalschnitten.

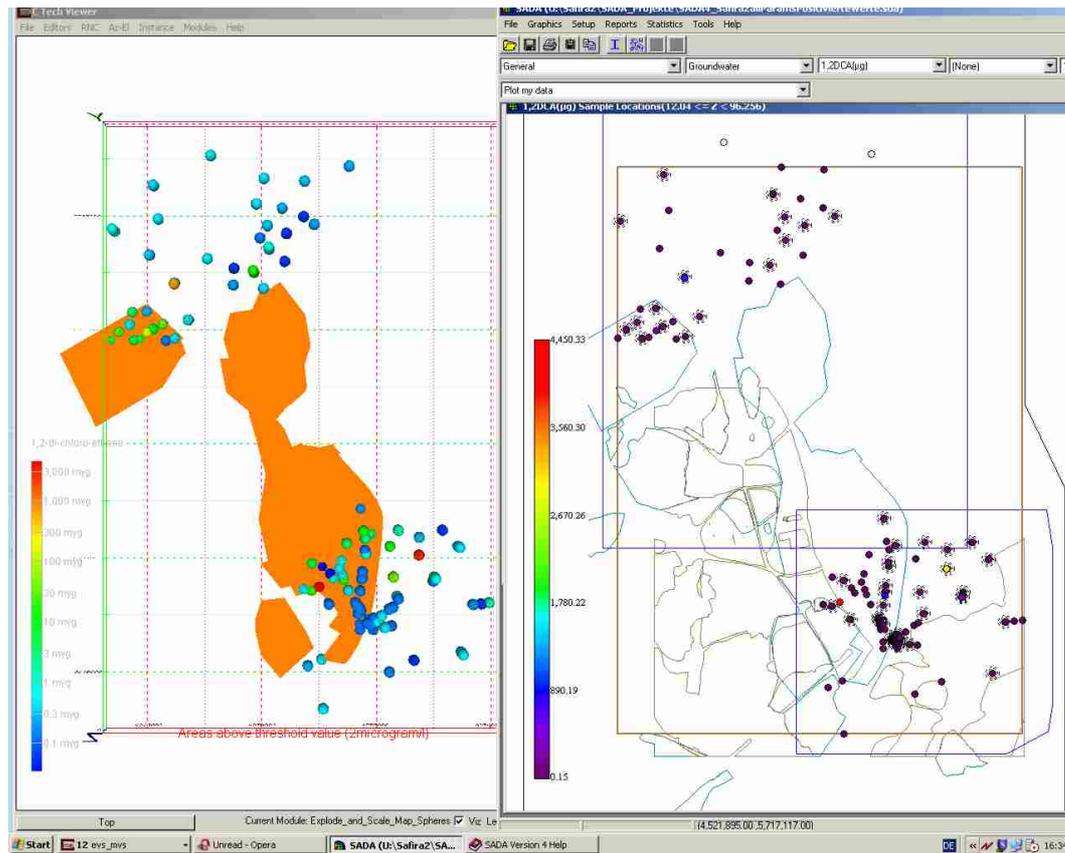


Abb. 20: Vergleichende 2D-Darstellung für Stoffgehalte (cis-DCE) in den Untersuchungsgebieten (Skalierung unterschiedlich) - links: MVS („2D-Projektion“= Überhöhung 0), rechts: SADA (2D-Ansicht). SADA stellt Überschreitungen vorgegebener Qualitätsziele der internen Datenbank durch Stricheln der Punkte dar, diese Möglichkeit bietet MVS nicht.

Bohrpunkte und Entnahmetiefen werden als Bohrprofile in allen 3 Raumrichtungen korrekt verortet dargestellt. Im vorliegenden Fall wurden sie als Vertikalbohrungen angenommen, auch wenn kleinere Abweichungen von der Vertikalen wohl vorkommen dürften. Schnitte lassen sich durch die geologischen Volumenkörper ebenso wie durch die innerhalb von diesen durchgeführten Interpolationskörper der Grundwasserkontamination in beliebiger Richtung darstellen. Für durch Kriging erhaltene Interpolationen lassen sich 3-dimensionale Darstellungen des Standardfehlers ebenso wie Varianzenkarten erstellen. MVS beinhaltet ein Modul, mit dem eine Optimierung potenzieller zusätzlicher Beprobungspunkte vorgenommen werden kann. Es bestimmt deren Lage durch die Varianzen, die sich durch fiktiv hinzugefügte Beprobungspunkte ergeben- die optimale Lage ist dort, wo der zusätzliche fiktive Messwert den Schätzfehler am meisten verringert. Iterativ können so mehr und mehr zusätzliche Punkte eingefügt werden.

Die erhaltenen Modelle sind vollständig interaktiv in allen Raumrichtungen vom Betrachter untersuchbar. Abb. 20 zeigt einen Vergleich der Darstellung für einen Stoff (cis-DCE) in MVS (links) und SADA (rechts). Farbige Kreise stellen die Messpunkte und ihre Stoffgehalte dar. Überschreitungen eines in der internen Datenbank vorgegebenen Qualitätsziels stellt SADA mit einer Stricheln dieser Messpunktmarkierungen dar.

Isatis

Geovariances Isatis gehört zu den umfangreichsten Werkzeugen für die geostatistische Untersuchung und Interpolation. Wegen seines hohen Anschaffungspreises wurde es nur für einen kurzen Testzeitraum evaluiert. Es bietet vielfache unterschiedlichste Interpolations- und Simulationsmethoden und mit einem Zusatzmodul die 3-dimensionale Darstellung. Insbesondere von den Simulationsmethoden dürfte eine Verbesserung der Interpolationen zu erwarten sein. Auf der anderen Seite ist es wohl überhaupt nicht als „Screening Tool“ für eine erste Übersicht geeignet.

ArcGIS (ESRI Redlands)

Mit der Erweiterung Geostatistical Analyst (GA) können ‚Wizard‘/Assistenten-gestützt auf einfache und schnelle Weise die im GIS gezeigten Daten räumlich analysiert und interpoliert werden. Die Methoden des GA bauen auf Methoden der Erweiterung „Spatial Analyst“ auf und fassen sie sozusagen zusammen, so dass sie einfacher verwendbar werden.

Der Geostatistical Analyst wurde für das „screening“ der Daten bei der manuellen Bearbeitung der Daten grundsätzlich eingesetzt: mit Hilfe des Wizards wurden Histogramme und beschreibende Statistik erstellt und darauf aufbauend Interpolationen mit Ordinary Kriging durchgeführt. Der Assistent erstellt mit Hilfe einer „eingebauten Logik“ Standardparameter, die der Benutzer interaktiv verändern und anpassen kann. Das macht den GA zum am einfachsten zu benutzenden Werkzeug, zumal man innerhalb der gewohnten GIS-Umgebung arbeiten kann.

Die Ergebnisse lassen sich leider nicht sehr einfach interpretieren, da die interne Logik nicht offengelegt ist. Die Dokumentation der Details ist sehr lückenhaft, auch wenn die Software eine gute Einführung in die Gesamthematik der Interpolation enthält.

Gstat (www.gstat.org)

Bietet räumliche Interpolations- und Simulationsmethoden. Lässt sich mit Grass und R (Kapitel 5.2.4) verbinden oder als Stand-Alone Programm betreiben. Insbesondere in der Verbindung mit R wird es als Interpolationswerkzeug verwendet und bietet sich daher für die Verwendung mit RStatServer und Plone-CMS an. Es wird in den Beispielen der vorliegenden Arbeit nicht verwendet. Empfohlen ist es wenn zusätzlich GRASS-GIS verwendet werden soll.

geoR (www.est.ufpr.br/geoR)

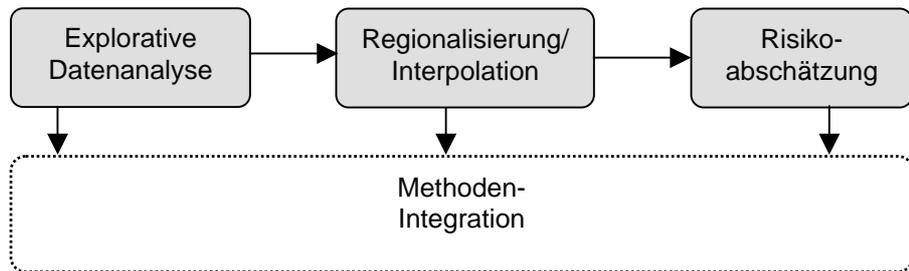
Bietet räumliche Interpolations- und Simulationsmethoden. Liegt als Bibliothek zur Erweiterung von R vor (Kapitel 5.2.4). Es wird als Interpolationswerkzeug für das Kriging verwendet und bietet sich daher für die Verwendung mit *RStatServer* und *Plone-ContentManagementSystem* an (s. Skripte im Anhang). Verwendet wird es für das Ordinary Kriging und die Variographie.

5 Integriertes Datenmanagement

Dieses Kapitel umfasst folgende Punkte:

- Arbeitsablauf ohne Systemintegration
- Integration durch das Content Management System

Die in Teil 4.1 (Datenmanagement) und 4.2 (Datenbeurteilung) vorgestellten Methoden werden vom Bearbeiter miteinander verknüpft, um aus den Ausgangsdaten Ergebnisse zum Risikomanagement im Untersuchungsraum beizutragen. Häufig angetroffene Probleme ergeben sich aus der Unmöglichkeit, die von einer Software erzeugten Zwischenergebnisse im nächsten Schritt in der vorliegenden Form für andere Software weiterzuverwenden.



Datenumbau wegen Dateninkompatibilität verschlingt in der Geodatenbearbeitung viel Zeit. Zwischenergebnisse bleiben undokumentiert und sind häufig nicht reproduzierbar. Die Reihenfolge und Anzahl der vorgenommenen Untersuchungen wechselt. Daher ist es im Sinne einer konsequenten und nachvollziehbaren Bearbeitung wünschenswert, die Methoden und Ergebnisse in einen vorgeschriebenen Workflow zu integrieren.

Das im folgenden Abschnitt (5.2) vorgestellte Content Management System versucht die Integrationsmöglichkeiten aufzuzeigen. Gleichzeitig soll es ermöglicht werden, die Ergebnisse anderer Studien zu integrieren. Dazu gehören Grundwasserströmungsmodellierung, Landnutzung, rechtliche Bestimmungen und Toxikologie. Letztendlich trägt das System zur Entscheidungsunterstützung bei der risikobasierten Bearbeitung eines Standortes mit regionaler Grundwasserkontamination bei.

Das Ende dieses Kapitels bildet ein Abschnitt zu den Limitationen des vorgestellten Systems, in dem es darum geht, welche Abläufe nicht integriert werden konnten und aus welchen Gründen das so ist.

5.1 Arbeitsablauf ohne Systemintegration

Einen schematischer Ablauf der Regionalisierung bzw. Interpolation, wie er mit den Daten durchgeführt wurde, stellt Abb. 21 auf Seite 82 dar. Der normale Arbeitsablauf bzw. die beteiligte Software wurde bereits im vorangegangenen Kapitel 4: *Daten, Software und Methoden* angedeutet. Die Abb. 12 auf Seite 58 verdeutlicht, wie ohne eine Integration der Systeme die Datenhaltung bei der Analysendurchführung mit unterschiedlicher Software wieder und wieder verändert, Daten auf neue Softwarebedürfnisse angepasst und doch wieder häufig „Dateninseln“ geschaffen werden. Zwar passen nach jeder Anpassung die Datenformate perfekt für die jeweilige Anwendung, nur können wiederum deren Ergebnisse ohne eine weitere Umformung nicht verwendet werden, bzw. können diese Ergebnisse für geänderte Datensätze nicht ohne neuerliche Anpassung erzeugt werden, etc. Dieses Problem fehlender Schnittstellen ist häufig anzutreffen.

Ausgangspunkt waren zunächst die in einer Microsoft Access Datenbank gehaltenen Daten. Diese liest ArcGIS über den ArcCatalogue ein, um daraus XY-codierte Features zu erstellen. Über den ArcCatalogue können dann ESRI Shapefiles erzeugt werden. Über diesen Umweg können Geometrien nach PostGIS konvertiert werden.

Dabei ist dringend dazu zu raten, Projektionsparameter bzw. Koordinatensysteme zuzuweisen, da diese in PostGIS zwingend vorgeschrieben sind. Darauf war bei den vorliegenden Daten ursprünglich verzichtet worden – es ist aber zudem essentielle Voraussetzung zur späteren Verwendung der Daten im WebGIS. Shapefiles können auch direkt in R/GGobi sowie GeoDA eingelesen werden.

Die Projektionsaufgabe übernimmt die Software-Bibliothek PROJ4. Gängiges Format für die Beschreibung von Projektionsparametern sind EPSG-Codes. Für die verwendete Gauss-Krüger-Zone 4 gilt der EPSG-Code 31468.

SADA wiederum geht einen eigenen Weg: ein bestimmtes Tabellen-Format in MS Access ist erforderlich, damit SADA darauf zugreifen kann. Mit einer solchen sogenannten EDD-

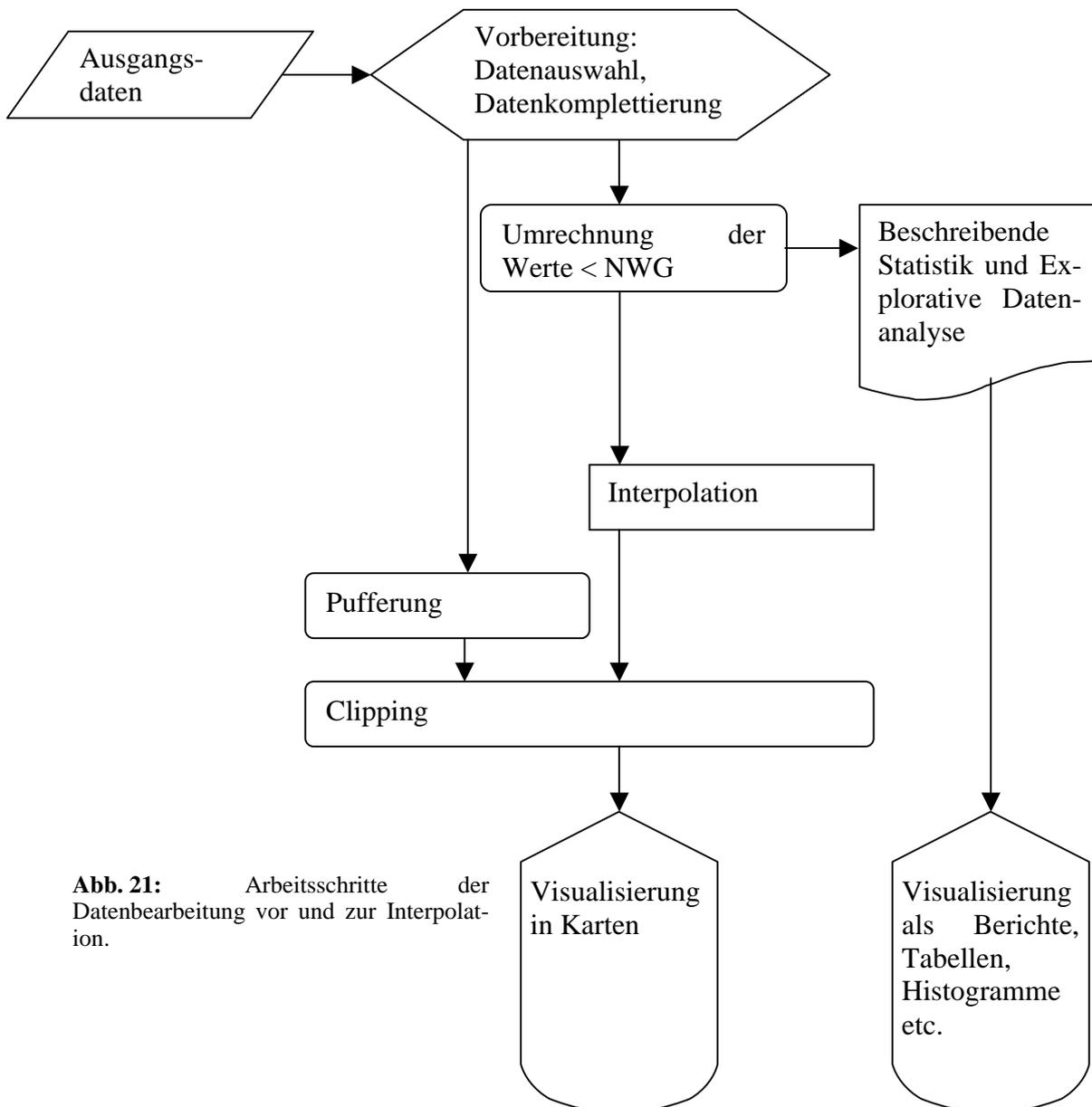


Abb. 21: Arbeitsschritte der Datenbearbeitung vor und zur Interpolation.

(*electronic data deliverable*) wird die SADA Datenbank projektweise erzeugt. Daher ist die Datenbank in SADA mehr oder weniger statisch- in ein Projekt können später zwar per Hand Daten eingefügt werden, bei mehr als einigen Datensätzen dürfte dies aber als nicht machbar gelten. Die Ergebnisse der einzelnen Analysen, Verschneidungen und Visualisierungen des GIS bzw. von SADA werden zuletzt zur Risikoabschätzung verwendet.

Die folgende Tabelle (Tab. 9) zeigt eine Gegenüberstellung der bisher verwendeten Software, d.h. Programme oder Datenhaltungsform und des jeweiligen Ersatzes im vorgestellten System.

Tab. 9 Gegenüberstellung der bisher verwendeten Software und ihres jeweiligen Ersatzes im Entscheidungsunterstützungssystem.

Aufgabe/ Arbeitsschritt	Software	Integrationsmöglichkeit
Datenhaltung	Shapefiles ArcSDE	Shapefiles ArcSDE PostGIS MapServer (über CMS-Web-Schnittstelle)
Datenaufbereitung	Eigenes Werkzeug/DB	SQL-Abfragen (über CMS Webschnittstelle)
Explorative Datenanalyse	Geostatistical Surfer, R, GGobi	Analyst, R, Ggobi, Grass
Interpolation	Geostatistical Surfer, R	Analyst, R aus CMS, R, Ggobi, Grass
Kartendarstellung	ArcMap	R (aus CMS)
3D- Visualisierung	MVS, ArcScene	VRML aus MVS oder ArcScene (über CMS)
Workflow-Management	-	CMS

Der Konflikt besteht darin, entweder eine „maßgeschneiderte“ monolithische (oder modulare) Architektur zu verwenden, die ein angepasstes Datenformat verwendet, oder aber universell geeignete Standardsoftware zu verwenden, die jeweils - mehr oder weniger - gängige Formate liest und schreibt und jeweils eine Anpassung verlangt. Moderne, dienstgestützte Softwarearchitekturen (service oriented architecture SOA), verwenden einen anderen Weg: statt die Datenformate anzupassen, werden Dienste über Netze angeboten, die über standardisierte Schnittstellen die Daten bzw. Bearbeitungs-Methoden übernehmen, zur Verfügung stellen.

5.2 Integration durch das Content Management System

- Plone/ZOPE
- Workflow Management
- PrimaGIS/Zmapserver
- R

Im vorgestellten Content-Management-System CMS *Plone* werden die unterschiedlichen Softwaremodule unter einer einheitlichen Oberfläche verbunden. Für den Benutzer transparent wird die Fülle der bisher isoliert gehaltenen Daten übersichtlicher präsentiert. Für den auswertenden Bearbeiter wird durch verbesserte Übersichtlichkeit und schnelleren Zugang die Beurteilung vereinfacht, indem er sich eher auf die Durchführung von Analysen und deren Ergebnisse als auf die Ausgangsdaten konzentrieren kann. Eine interaktive Karte (PrimaGIS) dient der räumlichen Auswahl eines Untersuchungsgebiets. Die Mehrzahl der Analysen erfolgt durch die Statistik- und Programmiersprache R und die Auswertung der Ergebnisse im Browser.

5.2.1 Plone/ZOPE

www.plone.org, www.zope.org

Zur Speicherung der Inhalte kommt das System Plone zum Einsatz, dem ZOPE zum Aufbau von Content Management Systemen (CMS) zugrunde liegt. Es basiert auf der Programmiersprache Python und ist mit sogenannten *Produkten* modular sehr leicht erweiterbar. Plone ist ein reifes Open Source Projekt, das in vielen – auch großen – Produktionsumgebungen eingesetzt wird.



Abb. 22: Plone-Objekt innerhalb der Zope-Management-Oberfläche.

Plone arbeitet nach dem Model View Controller (MVC) -Konzept, das eine strikte Trennung von Inhalten und Präsentations- bzw. Applikationslogik vorsieht und gehorcht allen W3C-Standards für Normenkonformität und Barrierefreiheit im Netz.

Funktionell lässt sich der Aufbau des Systems als klassische 3-Schicht-Architektur darstellen (Abb. 23) . Die Benutzungsschicht (GUI) bildet der Webbrowser oder das GUI der lokalen Anwendung, diese greifen in der Anwendungsschicht auf die Anwendungen zu, die ihrerseits die zugrundeliegenden Daten aus der Datenhaltungsschicht beziehen, bzw. sie dorthin speichern

Der Zusammenhang zwischen Plone und ZOPE ist folgender: ZOPE ist der Applikationsserver und bildet das Framework zur Entwicklung eigener Anwendungen. Plone verwendet eine Untermenge von ZOPE, um ein Content Management System aufzubauen. Plone stellt dazu Objekte und Workflow zur Verfügung. Abb. 22 zeigt das Plone-Objekt (die Seite der Umweltgeologie-Analyse mit Namen „*intra*“) innerhalb des Zope-Management-Interfaces (ZMI).

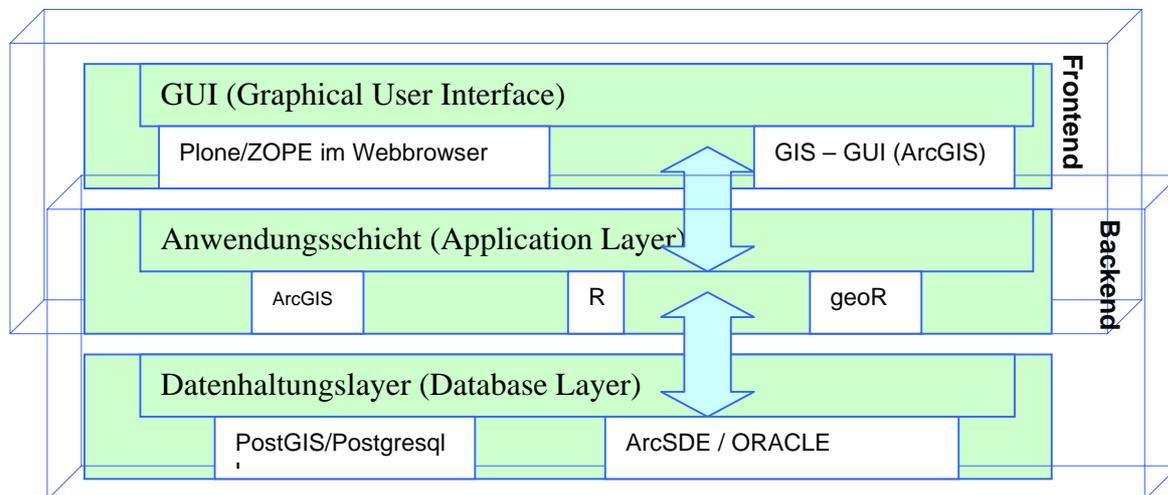


Abb. 23: Drei-Schichtarchitektur der Anwendung: Zentraler Bestandteil des Systems ist das CMS, welches mit R und geoR webgestützt Funktionalität zur statistischen Analyse bzw. geostatistischen Interpolation, deren Darstellung im WebGIS und die Erstellung von Berichten ermöglicht. Die zugehörigen Daten kommen aus dem Datenhaltungsschicht (PostGIS bzw. ArcSDE). Das GUI bildet das Frontend und Anwendungsschicht und der Datenhaltungsschicht das Backend (Eigene Darstellung).

Für interne Konfigurationen, Ergänzungen Plones oder Zopes durch Produkte etc., wie auch für die Erstellung eigener Skripte in R (s. Abschnitt 5.2.4) muss der Bearbeiter das Zope-Management-Interface aufsuchen (z.B. indem er an die zu bearbeitende URL im Browser */manage* anhängt) und sich einloggen.

Für die Trennung von Inhalten und Logik verwendet Plone ein System von Seiten-Vorlagen und Makros, die für jede angezeigte Seite zusammengefügt werden, wenn eine Anfrage stattfindet. Es würde den Rahmen dieser Arbeit sprengen, diese Funktionalität hier im Einzelnen auszuführen, daher soll es genügen, die verwendeten Techniken zu erwähnen. Ursprünglich wurde die Auszeichnungssprache DTML (dynamic template markup language) verwendet, um Inhalte in HTML (hypertext markup language)-Vorlagen einzufügen. DTML wurde großteils von ZPT, den Zope Page Templates abgelöst. Das sind die eigentlichen Seitenvorlagen, die bestimmen, wie eine Seite aussieht. Diese Seitenvorlagen wiederum werden mit TAL, der template attribute language und herkömmlichen HTML-Tags aufgebaut. METAL (macro expansion template attribute language), eine Makrosprache, dient dazu, diese *tags* zu einer ganzen Seite zusammenzufügen. Das Resultat ist ein relativ kompliziertes Gerüst verschachtelter Makros, mit deren Hilfe dynamisch Inhalte aus Zope in Plone dargestellt werden. Benutzereingaben in Formularen können auf Vollständigkeit überprüft werden und abhängig davon unterschiedlichen Aktionen zugeordnet werden. Vorlagen namens Controller Page Templates (*cpt*) erweitern dazu die herkömmlichen Seitenvorlagen.

Plone ist durch Benutzer auf relativ einfache Weise erweiterbar, indem die vorhandenen Objekte durch einen „Archetypes“ genannten Mechanismus erweitert werden. Dazu vererben z.B. Textfelder oder Bildfelder (sogenannte *Widgets*) bestimmte Eigenschaften an die vom Benutzer erstellten Objekte. Die auf diese Weise erstellten eigenen Objekte und Templates (und ggf. Workflow-Anpassungen) können zu Plone-Produkten gebündelt werden.

Intern besitzt ZOPE ein integriertes, nichtrelationales, objektorientiertes Datenbanksystem, das indiziert u.a. eine schnelle Volltextsuche ermöglicht. Dazu legt es automatisch einen Katalog der Wörter und Silben aller lesbaren Inhalte an (dazu wird das Produkt TextIndexNG3 verwendet, welches über einen eigenen „stemmer“ für mehrere Sprachen verfügt). Diese Indexierung findet bereits während des Anlegens der Inhalte statt. Lädt ein Benutzer z.B. eine Microsoft-Office-Dokument ins CMS, so sorgt TextIndexNG dafür, dass der Wortindex für alle im Dokument vorhandenen lesbaren Inhalte angelegt wird, bevor das Dokument in der ZOPE-Datenbank (*zopedb*) gespeichert wird.

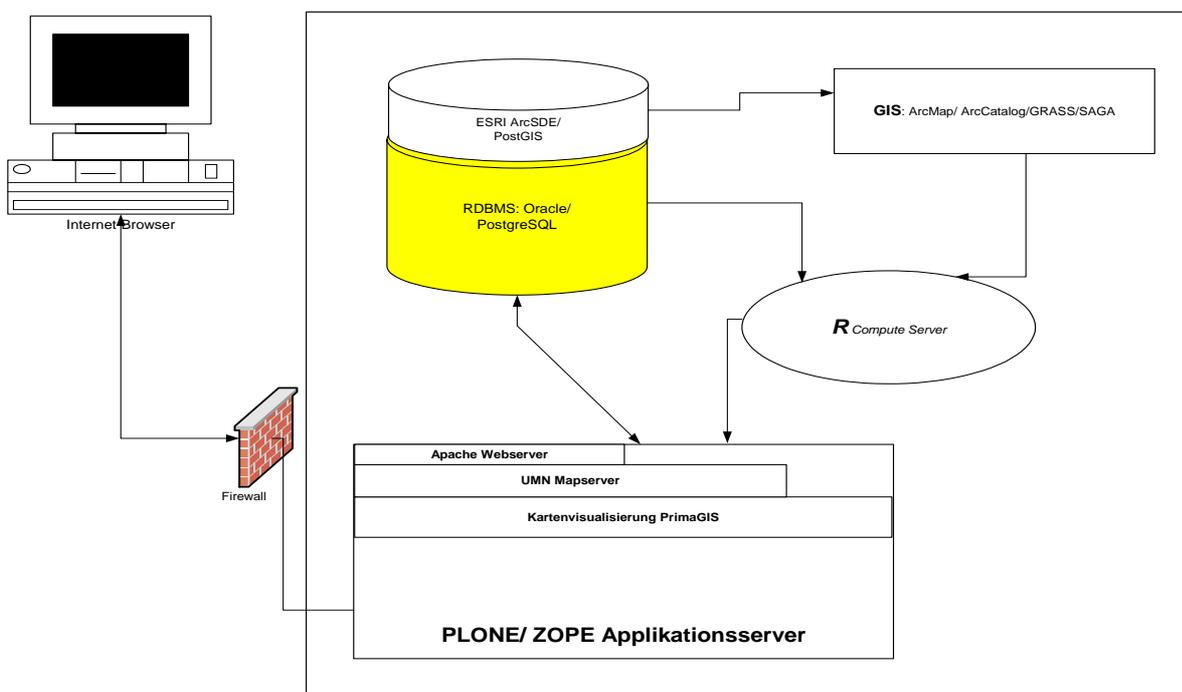


Abb. 24: Systemarchitekturschema Plone/ZOPE/Primagis.

Zur Speicherung externer Inhalte, z.B. bei Vorliegen großer Mengen Dokumentation in *pdf*-Form, lassen sich Inhalte aus dem Dateisystem oder aus relationalen Datenbanksystemen einbinden (Abb. 24). Auch für die Speicherung der räumlichen Daten wird das Dateisystem bzw. die PostGIS-Datenbanken gewählt, die jeweils als Objekte der ZOPE Datenbank bekannt gemacht werden. Über PrimaGIS und die Python Cartographic Objects lassen sich externe Web-Map-Services im Projekt einbinden.

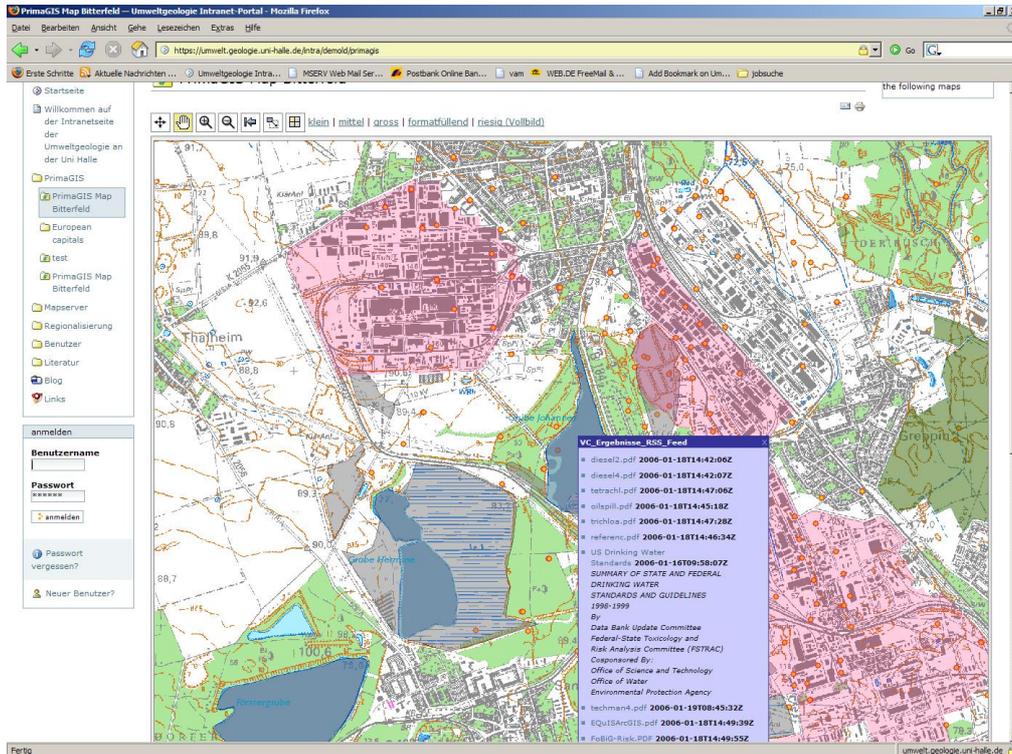


Abb. 25: Beispiel für die Volltextsuche in der ZODB: Ein RSS-Feed (Real Simple Syndication), der aus einer Live-Abfrage erzeugt wird, welche die CMS-Inhalte im Volltext auf gegebene Stichworte oder Wortbestandteile durchsucht, zeigt hier georeferenziert Ergebnisse zum Stoff Vinylchlorid/VC.

Bei den zu verarbeitenden Daten handelt es sich um Daten mit oder ohne Raumbezug. Für Daten wie z. B. Bohrdaten oder Grundwasser-Messdaten liegt aufgrund ihres Raumbezugs die Speicherung, Abfrage und Analyse in einem Geoinformationssystem nahe, während für die nicht raumbezogenen Daten eine Speicherung im Dateisystem oder einer relationalen Datenbank gewählt wird. Zur Verbesserung der Datenintegration ist die Vereinigung beider Datenarten „unter dem Dach“ eines Content-Management-Systems wünschenswert.

Im vorliegenden Fall handelt es sich bei den implizit raumbezogenen Daten um *Messdaten* der Grundwasserkontamination aus einem über 10 Jahre währenden Monitoringprogramm, sowie die daraus erzeugten *Interpolationsdaten* für ihre flächendeckende räumliche Verteilung in Form unterschiedlicher Rasterformate.

Die beim Anlegen der Messpunkte gewonnenen geologischen Bohrdaten waren ursprünglich in Bohrprotokollen und –profilen zunächst in Papierform, dann digital und schließlich in spezieller Software zu einem detaillierten 3D - *Untergrundmodell* (FABRITIUS 2002, WOLLMANN 2004, HUBERT 2005) verarbeitet worden. Mit hydrogeologischer Standardsoftware waren Grundwasserströmungsmodelle erstellt worden, als deren Ergebnis *Bahnliniendarstellungen* in ESRI-Shapefiles vorliegen (WYCISK & GOSSEL 2005).

Zur Vereinheitlichung des Zugangs sind letztere in einer PostgreSQL-Datenbank mit Postgis-Aufsatz abgelegt worden. Aus Interoperabilitätsgründen wird diese mit einer ArcSDE (Spatial Database Engine) basierend auf einer Oracle-Datenbank synchron gehalten. Formulare in ZOPE ermöglichen intuitiven Zugriff auf die Datenbankobjekte über die ZSQL-Schnittstelle. Das Schema in Abb. 24 auf S. 86 illustriert die Datenhaltung in der Datenbank, die von GIS und R für die Berechnung und Darstellung verwendet wird. Plone und Applikationsserver Zope instruieren PrimaGIS für die Kartendarstellung, die intern ein durch Python-Mapscript gesteuerter UMN Mapserver übernimmt. Apache liefert die HTML-Seite an den Browser durch den Firewall aus.

Als großer Vorteil dieser Kombination von Systemen im Content Management System ist zu sehen, dass das Contentmanagementsystem über Formulare eine einfach bedienbare Schnittstelle sowohl zu den Werkzeugen für die Analyse wie zur Datenbank darstellt und zusätzlich die Visualisierungswerkzeuge integriert. Damit werden Analyse und Visualisierung auch Nutzern zugänglich, die bisher aufgrund der damit verbundenen technischen Hürden nicht beteiligt werden konnten.

Abb. 26 zeigt den mit UML modellierten Ablauf einer Datenanalyse/-Interpolation im integrierten System als Aktivitätsdiagramm:

- Der Bearbeiter muss sich zuerst am System anmelden, andernfalls kann er keine Analyse durchführen.
- Wählt er „Neue Analyse anlegen“, wird ein neuer Ordner dafür angelegt, in dem sämtliche zugehörigen Ergebnisse abgelegt werden.
- Aus der Übersichtskarte wählt er einen Untersuchungsraum, innerhalb dessen Grenzen die Analysen stattfinden. Eine Email wird zur Benachrichtigung an eine anzugebende Email-Adresse geschickt, um anzuzeigen, dass die Bearbeitung gestartet wurde.
- Gleichzeitig mit dem Anlegen des Untersuchungsraums als PrimaGIS-View wird in der PostGIS-Datenbank eine neue Grenze als Polygon angelegt.
- Nach Auswahl des Stoffes für die Untersuchung wird in PostgreSQL eine neue Sicht angelegt. Das ist eine dynamische Auswahl aus bestehenden Relationen (Tabellen). Das heisst, aus der Stofftabelle wird, durch Kombination mit der oben angelegten Grenze, eine räumliche Auswahl der Messungen getroffen, die innerhalb des Untersuchungsraumes liegen. Der dazu verwendete SQL-Ausdruck lautet wie folgt (das Page Template sorgt automatisch dafür, dass für die dtml-Variablen sinnvolle Werte eingesetzt werden):
- ```
CREATE OR REPLACE VIEW "<dtml-var analysen_name>--<dtml-var t_name>" AS
 SELECT a.the_geom, a.nwgrresults, a.rw, a.hw from grenzen g, <dtml-var
t_name> a
WHERE g.analysen_name='<dtml-var analysen_name>' AND g.the_geom &&
a.the_geom;
```
- Hierbei kommen die räumlichen Fähigkeiten von PostGIS ins Spiel: Der Ausdruck „&&“ bedeutet bei der räumlichen Auswahl „Suche die Geometrien, deren Bounding Boxen sich schneiden“, bei Punkten innerhalb eines Rechtecks also die Punkte innerhalb der Grenzen des Rechtecks (oder anderen Polygons).
- Die hier angelegte Sicht wird verwendet, um daraus durch Logarithmierung, Mittelwertbildung etc. die Werte zu errechnen, die schließlich in die Analysen eingehen werden. Diese Berechnungen werden *on-the-fly* inklusive Abfragen aus der Datenbank, bei jeder Analyse neu durchgeführt. Dadurch sind die Analysen immer aktuell, falls sich die Inhalte der Datenbank zwischendurch ändern.



## 5.2.2 Workflow Management

Plone verfügt über einen eingebauten Workflow, der sich für die oben beschriebenen Abläufe anpassen lässt. In jedem Status des Workflows stehen dem mit der jeweiligen Rolle im System angemeldeten Nutzer nur die für ihn freigegebenen Daten zur Ansicht oder Bearbeitung zur Verfügung.

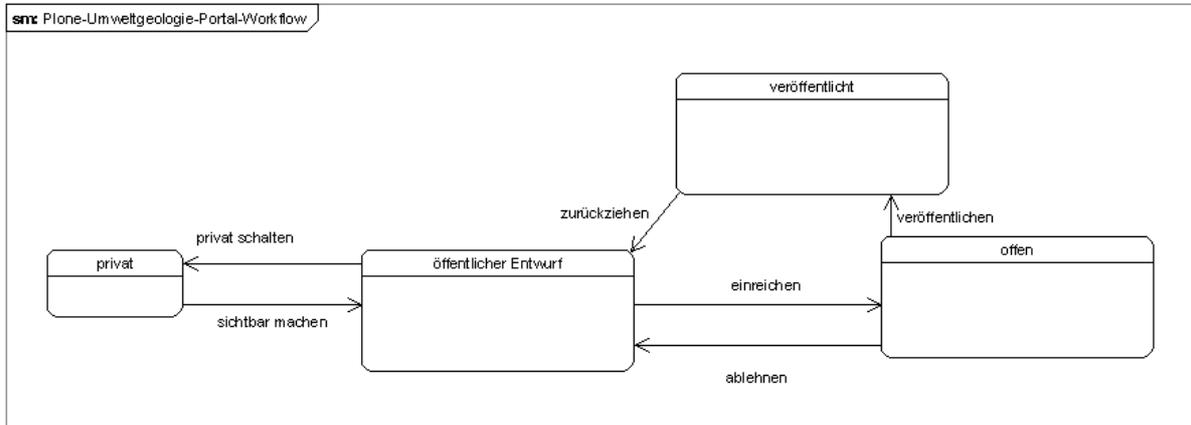


Abb. 27: Plone Portal-Workflow im UML-Zustandsdiagramm (veränderte Abbildung nach FRIEDRICH, 2006).

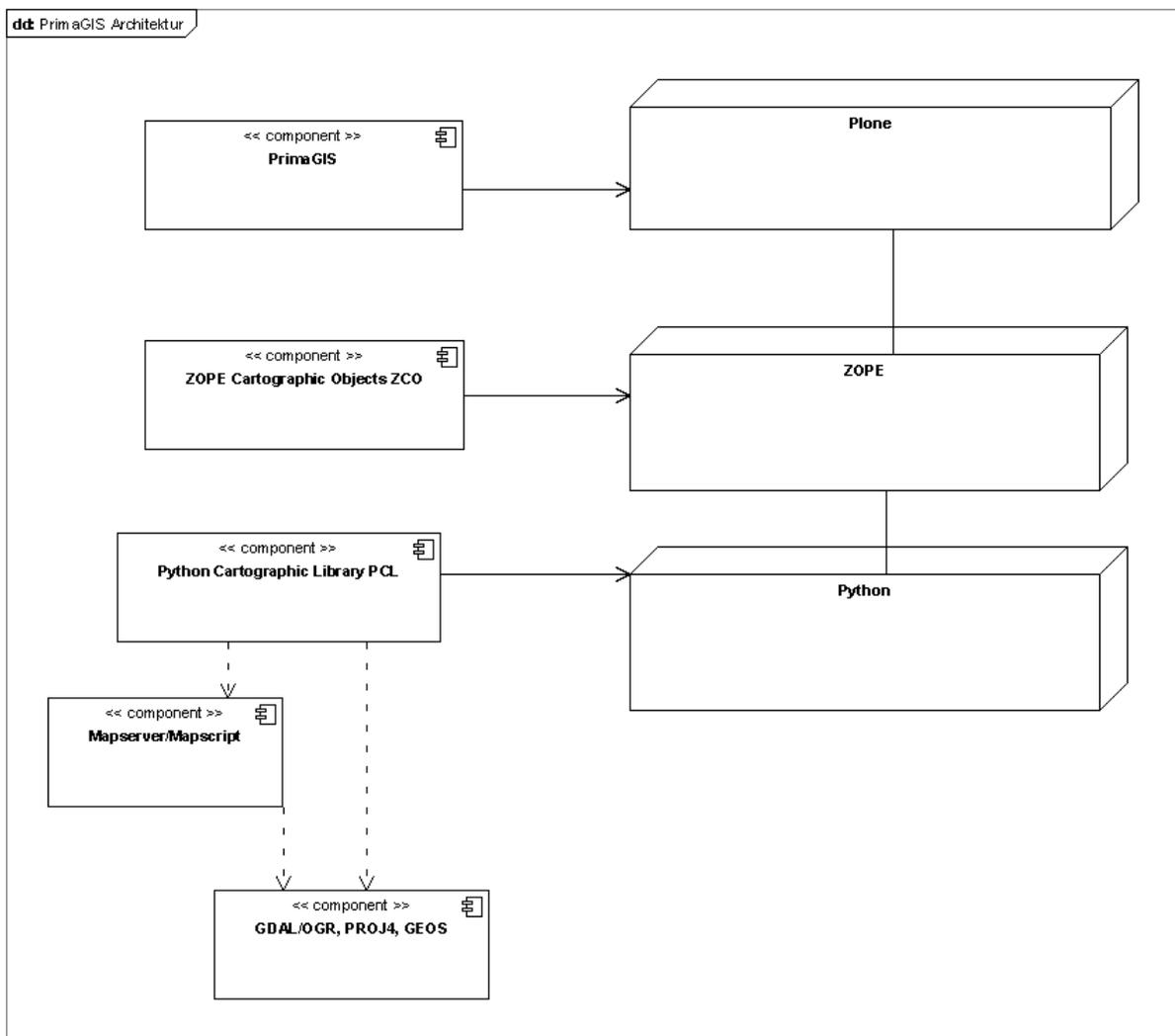
Nichtangemeldete Benutzer sehen nur freigegebene Daten (Status: *veröffentlicht*) und können keinerlei Veränderungen vornehmen. Angemeldete Benutzer können die von ihnen bearbeiteten Daten an den jeweils nächsten Bearbeitungs-Schritt im Workflow weiterreichen oder zurückziehen (Abb. 27). Die beschriebenen und im Content Management System anzulegenden Rollen der Nutzer lassen sich wie folgt beschreiben:

- *Administratoren* legen die erforderlichen Rohdaten im System an, machen sie also für die Bedienung per Weboberfläche/Content Management System zugänglich. Der Standardzustand ist „öffentlicher Entwurf“.
- *Analysten* erzeugen daraus Kartendarstellungen in Form der Rohdaten, bestehender Interpolationsdaten und kontextrelevanter Informationen wie toxikologischer Daten und normativer Vorgaben. Auch diese Daten haben den Zustand „öffentlicher Entwurf“
- In einem *Review-Prozess* werden diese Karten zur Analyse eingereicht und dort statistisch untersucht. Hierbei kommen Punkt- und Flächenstatistik zum Einsatz. Hinweise auf möglicherweise zu erwartende Probleme bei der Interpolation bzw. Regionalisierung können hierbei aufkommen und vermerkt werden. Sind die Voraussetzungen erfüllt, wird interpoliert und die Daten wiederum abgelegt, um später vom Administrator ins System eingepflegt werden zu können. Fertige Regionalisierungsdarstellungen werden – beispielsweise – mit den Ergebnissen der Grundwassermodelle und Landnutzung kombiniert und hinsichtlich bestehender oder zu erwartender Risiken interpretiert und die Ergebnisse gegebenenfalls *anderen Nutzern* zur Begutachtung freigegeben (Status: *veröffentlicht*).
- Zwischendurch oder nach vollständiger Durchführung dieses Reviewprozesses können Berichte in *pdf* – Form erstellt werden und in definierten Bereichen des CMS abgelegt, oder im integrierten Weblog oder Forum diskutiert werden, die abgestuft mit oder ohne Passwort zugänglich sind. Diese Form der Kommunikation während der Review wird durch einfaches Verschicken von Links auf zu berücksichtigende oder zu bearbeitende Seiten oder Inhalte mit dem integrierten Mailserver vereinfacht. Ein Gruppenkalender kann die Terminplanung der Mitglieder vereinfachen. Das Ablegen bzw. die Veröffentlichung/Sichtbarmachung von Favoriten bzw. Bookmarks, als Links auf Seiten innerhalb oder außerhalb der Plattform ist ebenso in diesen Workflow integriert.

### 5.2.3 PrimaGIS/Zmapserver

Als GIS-Komponente zur Visualisierung und Abfrage kommt PrimaGIS zum Einsatz. PrimaGIS stellt über Python eine Schnittstelle zum UMN-Mapserver über Python dar. PrimaGIS ist der Nachfolger des ebenfalls bereits in ZOOPE integrierbaren ZMapServers (LINDENBECK 2003, LINDENBECK 2004, SCHUSTER 2004).

PrimaGIS greift, wie in Abb. 28 dargestellt, auf die in Zope als Produkt ZCO vorliegenden Zope Cartographic Objects zu, die ihrerseits die Zope-Schnittstelle für den Zugriff auf die Python Cartographic Library PCL bilden. Mit PCL steuert ZOOPE auf diese Weise den UMN Mapserver zur kartographischen Darstellung, unter anderem unter Verwendung der Bibliotheken GDAL und OGR, die dem Zugriff auf vielfältige Raster- und Vektorformate dienen, und PROJ4 und GEOS, die der Projektion und Darstellung kartographischer Objekte wie Punkte, Polygon und Linien dienen.



**Abb. 28:** Schematischer Aufbau der Integration der System-Komponenten PrimaGIS, ZCO und PCL in Plone, ZOOPE bzw. Python.

PrimaGIS und die damit dargestellten Inhalte sind vollständig in den Workflow von Plone integriert. Dadurch sind Karten und die darauf gezeigten Layer der Zugriffssteuerung durch die Zope-Datenbank unterworfen. Auf diese Weise lassen sich sehr feingranulierte Zugriffsrechte erteilen oder widerrufen.

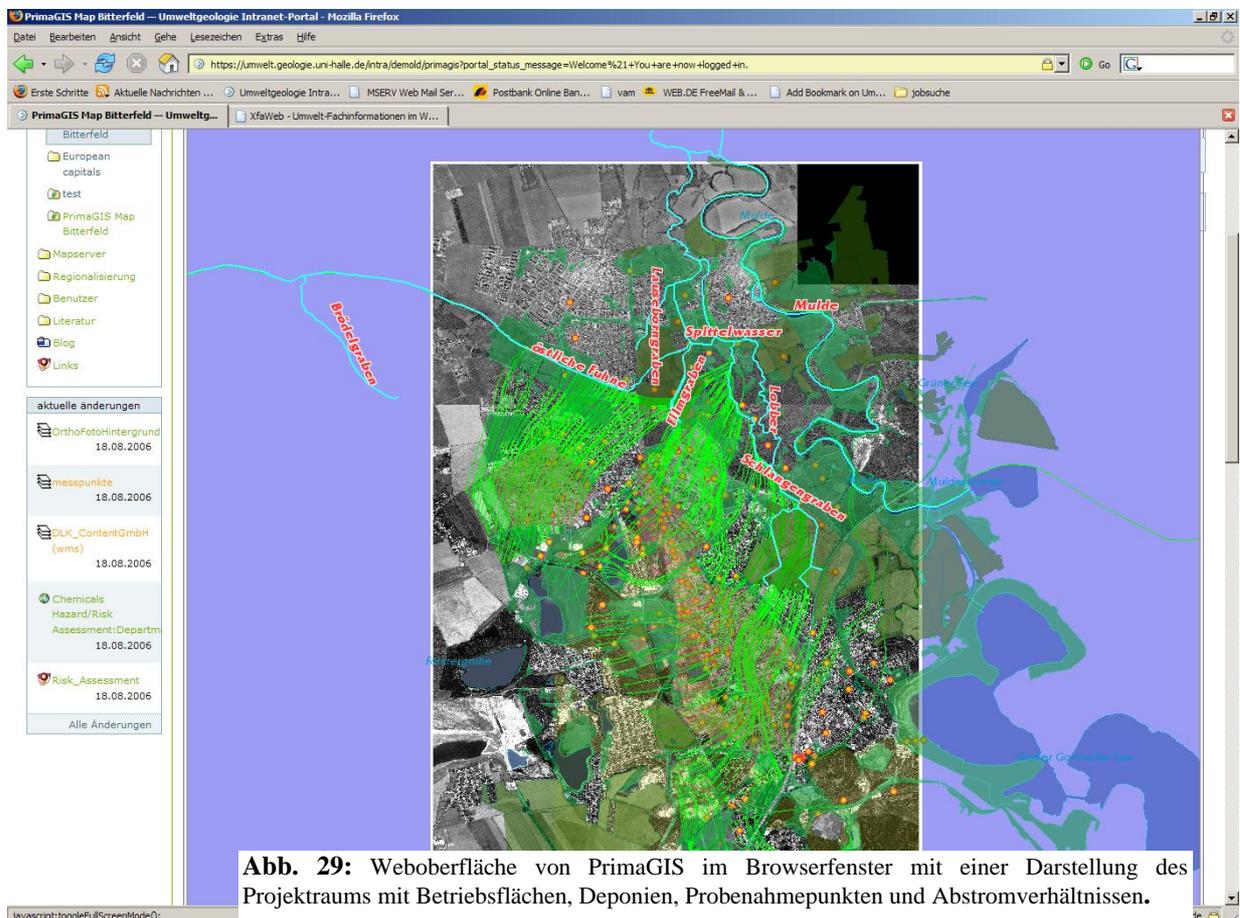
PrimaGIS hat gegenüber anderen Kartendarstellungen im Web den Vorteil, dass es über die sogenannte IGeoAware-Schnittstelle einen Zugriff auf im CMS vorhandene Objekte hat. Auf diese Weise lassen sich alle denkbaren Daten „georeferenzieren“. LINDENBECK (2004) baut mit einem solchen CMS das Bohrdatenportal der Stadt Hamburg auf, SEHER ET AL. (2006) verwenden diese Kombination in einer WebGIS-Umgebung für Großprojekte in Geotechnik und Wasserbau.

### 5.2.4 RStatServer / R

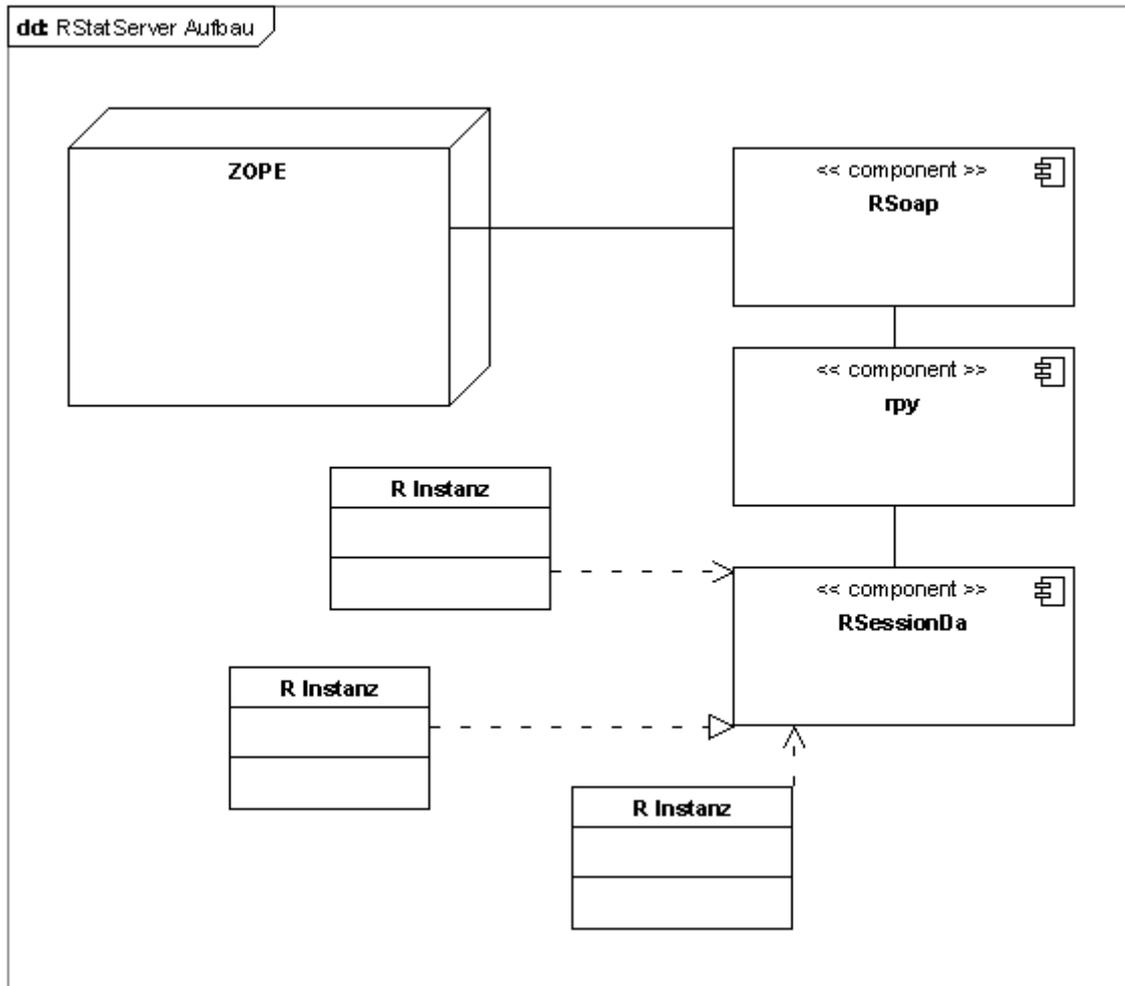
Die im CMS Plone abgelegten Attribut-Daten werden zur statistischen Auswertung und geostatistischen Interpolation an R weitergegeben. Außer den bereits in der Datenbank oder als Raster vorhandenen Interpolationen lassen sich mit in R implementierten Methoden Interpolationen wie *ordinary* oder *simple kriging interpolation* durchführen.

Auf diese Weise lassen sich beispielsweise Zeitscheiben interpolieren. Die vorgesehenen Algorithmen bzw. Verfahren liegen als Content-Objekte (*R methods*) im CMS vor und werden als solche auf die Daten angewandt. Beispielskripte für solche R-Methoden z.B. zur explorativen Datenanalyse und für die Interpolation sind im Anhang (9.3) zu finden.

R stellt sämtliche Funktionalität bereit, indem es den *RSessionDataAdapter* über *SOAP* zur Verfügung stellt. R läuft als Server und lauscht auf einem bestimmten Port. Empfängt es Anforderungen auf Berechnungen, so wird eine R-Instanz gestartet, die Berechnung mit den übergebenen Daten gestartet und das Ergebnis zurückgegeben. Anforderungen erfolgen im vorliegenden Fall aus ZOPE heraus (Abb. 30). Dieses System wurde als *RstatServer* (WARNES, 2002) von Gregory Warnes von Pfizer entwickelt. Plone liegt als Schicht darüber und übergibt Parameter aus Auswahlfeldern in Seitenvorlagen an Zope.



**Abb. 29:** Weboberfläche von PrimaGIS im Browserfenster mit einer Darstellung des Projektraums mit Betriebsflächen, Deponien, Probenahmepunkten und Abstromverhältnissen.



**Abb. 30:** Schematischer Aufbau RStatServer. (Keine tatsächliche Modellierung, sondern lediglich zur Erklärung des Aufbaus).

R-Methoden sind über das ZOOPE-Management-Interface *ZMI* durch Benutzer einfach anzulegen. Die gezeigten Skripte sind daher nur als Beispiele zu sehen- die Möglichkeiten zur statistischen Auswertung und Interpolation und deren graphische Ausgabe, die R zur Verfügung stehen sind nahezu unbegrenzt.

Beim Anlegen der Skripte ist zu beachten, dass, anders als bei der Ausführung im interaktiven Terminal von *R*, keine Kommentare im Quelltext erlaubt sind. Ein Problem bei der Programmierung statistischer Auswerteprogramme oder dem Anlegen von *R* Methoden im *ZMI* ist das mangelnde sofortige Feedback- erst wenn das Programm beendet ist und ein Ergebnis (oder ein Fehler vorliegt), bekommt der Nutzer eine Rückmeldung vom Server. Die Dauer einer Berechnung kann dazu verleiten, zu denken, dass die Anwendung abgestürzt ist.

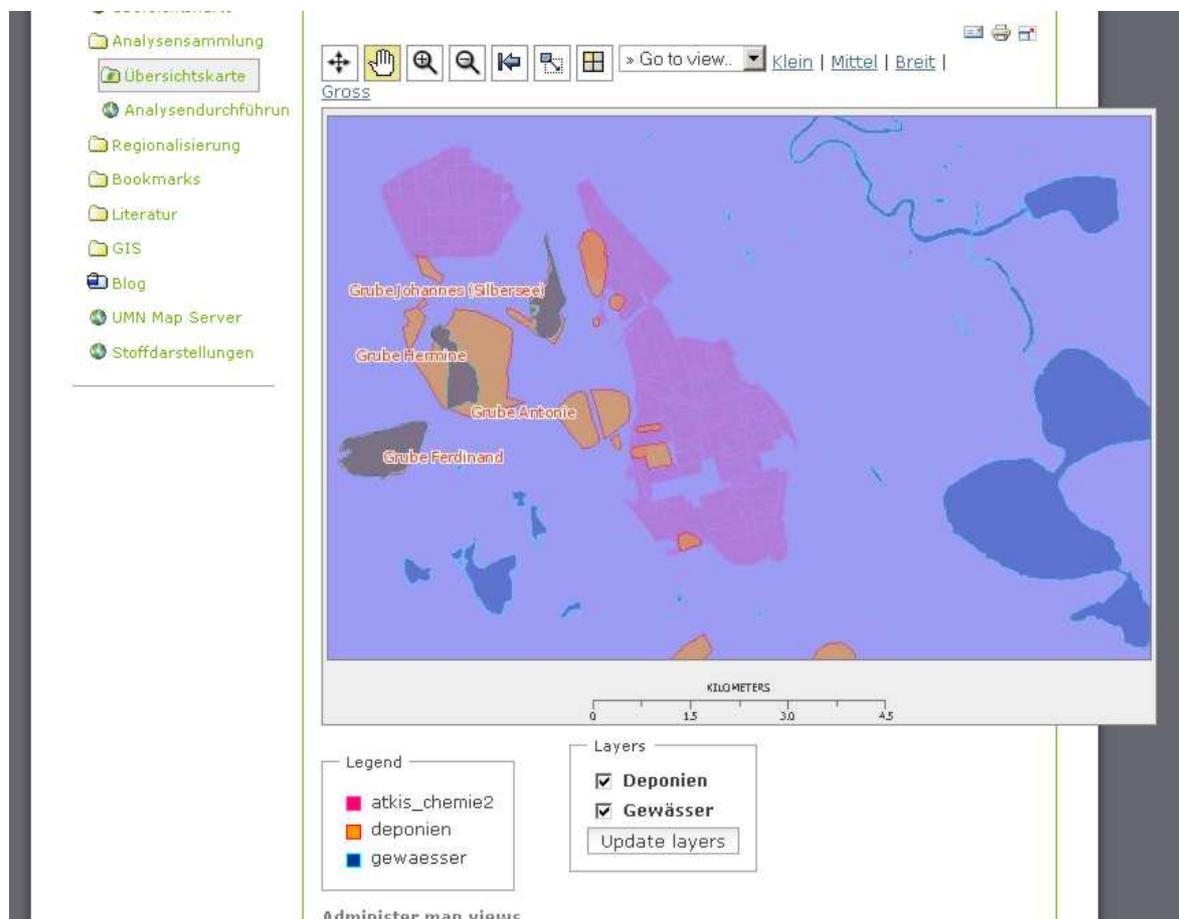
Als interpretierte Sprache ist *R* nicht sehr schnell, hinzu kommt das sehr „gesprächige“ Protokoll SOAP, welches dafür sorgt, dass grosse Mengen Textdaten zwischen dem RStatserver und dem ZOOPE-Applikationsserver hin-und hergeschickt werden. Bei der Interpolation mit Kriging und kann das dazu führen, dass mehrere 10er-Sekunden lang scheinbar „nichts passiert“. Die Anwendung ist nicht auf Geschwindigkeit optimiert, aber selbst mit der anschliessenden Erzeugung einer PDF-Datei als vorformatiertem Bericht, ist der zeitliche Aufwand von vielleicht einer Minute vom Anlegen des Projekttraums bis zum

Vorliegen einer fertigen Analyse geringfügig im Vergleich mit der herkömmlichen manuellen Erstellung eines solchen Berichts in ArcGIS o.ä.

### 5.2.5 Analysendurchführung

Die tatsächliche, in Abb. 26 *schematisch* gezeigte, Analyse wird wie folgt durchgeführt:

Die räumliche Auswahl der zu berücksichtigenden Punkte erfolgt im Kartenbild. Dazu steht eine PrimaGIS-Übersichtskarte zur Verfügung, in welcher der Bearbeiter zuerst den Ausschnitt entsprechend des Gebiets, das er bearbeiten möchte, auswählt (Abb. 31). Damit wird eine neue benannte Ansicht (*named view*) erzeugt. Diese Sicht ist eine PrimaGIS-Sicht, also eine Bounding Box (mit den Aussenkoordinaten) für den darzustellenden Ausschnitt. Beim Anlegen der PrimaGIS-Sicht im Kartenbild wird gleichzeitig per SQL eine neue Datenbanksicht in PostgreSQL angelegt (s. Skript im Anhang: SQL\_Datendefinitionsabfrage, S. 150).



**Abb. 31:** Übersichtskarte des Gebiets zur Auswahl eines Untersuchungsraums in PrimaGIS.

Skript und Transkript im Anhang (R-Skript zur Kriging-Interpolation in R auf S. 150) zeigen, wie in einer „R-Methode“ in Zope eine Interpolation mit Kriging durchgeführt und als Grafik ausgegeben wird. Während der Ausführung durch den R-Statsserver werden die per Formular (Plone Controller Page Template zur Auswahl der Stoffe und Parameter, S.154) vom Benutzer eingegebenen bzw. ausgewählten Werte für den Namen des zu verwendenden Stoffes, Logarithmierung *ja/nein* und Aggregationsparameter wie Mittelwert/Maximum/Minimum der Messwerte an einer Bohrung dazu verwendet, dynamisch einen SQL-Abfragestring zu konstruieren, der für die Rückgabe der gewünschten Daten dient.

Zusätzlich lassen sich z.B. zeitliche Einschränkungen (Jahresauswahl) für die Ausgangsdaten per SQL übergeben, für welche die Daten in Formularfeldern auszuwählen sind.

Die Auswahl der Parameter erfolgt über Drop-Down-Auswahl-Listen, deren Inhalte dynamisch aus Datenbankabfragen bestimmt, oder im Voraus festgelegt werden. Z.B. werden die Namen aller zur Auswahl stehenden Stofftabellen dynamisch in eine Liste eingetragen, aus der der Nutzer pro Analyse genau einen Stoff auswählt. Für eine logische Auswahl wie die, ob die Werte vor der Analyse logarithmiert werden sollen oder nicht, bietet sich die vorherige Festlegung der Auswahlwerte für das Formular-Feld an.

Die Übergabe der Parameter erfolgt über den Request URL-kodiert. Die R-Methode sorgt für deren Entschlüsselung und Weitergabe durch Plone als DTML-Variablen. DTML-Variablen sorgen dafür, dass Inhalte während der serverseitigen Ausführung dynamisch in HTML eingefügt werden können.

Die Formulare zur Benutzersteuerung (sogenannte Controller Page Templates), werden komplett mit Validierung und wählbaren Aktionen versehen, so dass schon beim Abschicken der Formulare überprüft werden kann, ob sie korrekt ausgefüllt wurden (ob z.B. keine Felder fehlen und ggf. ob plausible Werte eingetragen wurden, falls es sich nicht ohnehin um Werte aus Drop-Down-Auswahl-Listen, der bevorzugten Übergabeform, handelt). Ausserdem können auf diese Weise unterschiedliche Aktionen für unterschiedliche Fälle, z.B. korrekt oder falsch ausgefüllte Formulare, spezifiziert werden. Es ist so auch möglich, mehreren Buttons unterschiedliche Aktionen zuzuweisen, so z.B. einmal für die Ausgabe auf den Bildschirm oder als PDF-Datei in die Objektdatenbank von Zope.

Im vorliegenden Skript werden im Anschluss daran die Messwerte für das im Voraus festgelegte Untersuchungsgebiet ausgewählt. Dazu kann der Benutzer aus einer Drop-Down-Liste ein benanntes Umgrenzungspolygon, das in der PostGIS-Datenbank vorliegt, auswählen. Alle folgenden Berechnungen werden für diesen Untersuchungsraum durchgeführt. Danach wird die Art der Darstellung gewählt: Ein Screening der Daten mit Summenstatistik, Histogramm, Quantil-Quantil-Plot und Boxplot ist der erste durchzuführende Schritt. Alternativ kann eine Darstellung der Ordinary-Kriging-Interpolation und der zugehörigen Variographie mit einem omnidirektionalen Variogramm sowie Richtungsvariogrammen für die 4 Hauptrichtungen gewählt werden.

Im Anschluss kann eine Sammlung dieser Darstellungen als Bericht als formatierte PDF-Datei ausgewählt werden.

Durch die formularbasierte Bearbeitung über das Netz resultiert eine große Flexibilität bei der Ausführung. Nutzer verwenden einheitlich die zentral vorliegenden Daten mit einheitlichen Methoden. Die Analysen sind reproduzierbar und dokumentiert.

## 6 Ergebnisse

Dieses Kapitel umfasst folgende Punkte:

- Regionalisierung
- Risk Assessment
- 3D-Visualisierung
- Systemintegration

### 6.1 Regionalisierung

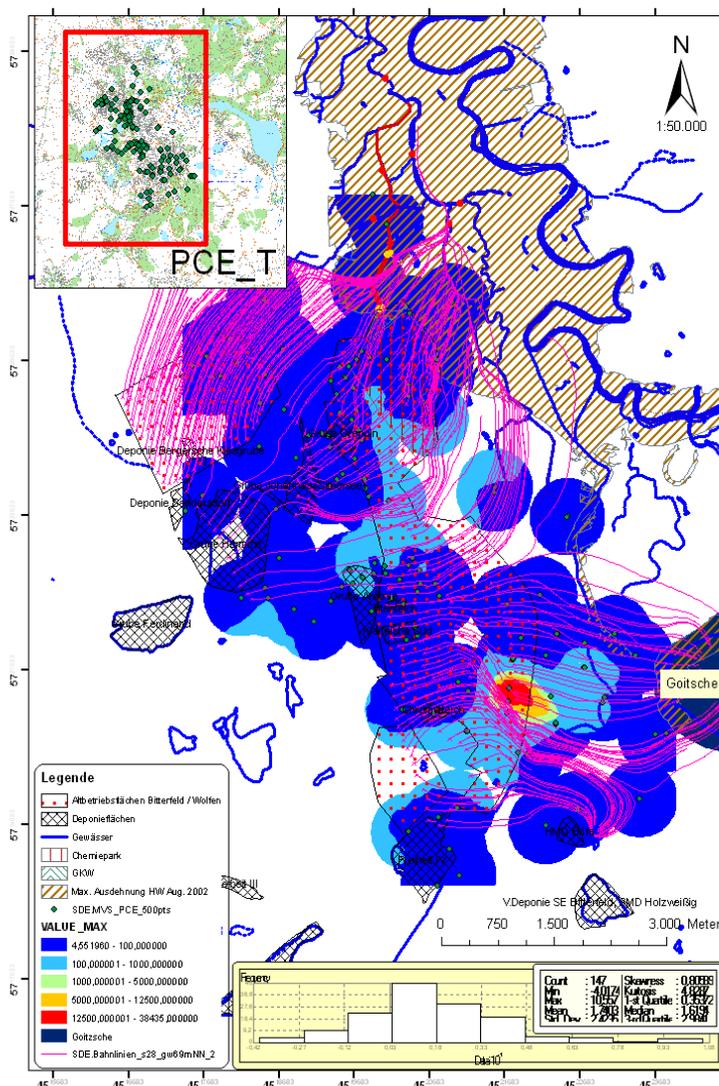
- Explorative Datenanalyse
- 2D-Interpolation
- 3D-Interpolation

#### 6.1.1 Explorative Datenanalyse

Vor der Regionalisierung der Stoffe im Untersuchungsraum sind Summenstatistiken, Boxplots, Histogramme und Quantil-Quantil-Plots, jeweils für den Untersuchungsraum angefertigt worden.

Die Verteilung der Messwerte zeigt, dass keiner der Stoffe normalverteilt ist, sondern, wie häufig bei Schadstoffmessungen, durch Logarithmierung einer Normalverteilung angenähert werden muss.

Häufig folgen auch dann die Messungen noch nicht einer theoretischen Normalverteilung.



**Abb. 32:** Regionalisierung der PCE-Konzentration für den tertiären GWL mit Ordinary Kriging Interpolation. Für weitere Details s. Anhang 9.3 „Interpolationen“

Zusätzlich sind modellierte GW-Strömungslinien des jeweiligen GWL und Überflutungs- sowie die Betriebsflächen und Deponien dargestellt. Im unteren Teil der Abb. sind das Histogramm (Häufigkeitsverteilung) der logarithmierten Messwerte und eine beschreibende Statistik dargestellt. Im Inset links oben die Verteilung der Messstellen vor der topografischen Karte. Originalmaßstab 1:50000 verkleinert.

## 6.1.2 Beschreibende Statistik

Beschreibende Statistiken für die Stoffe in den untersuchten Räumen sind den 2D-Interpolationen mit ArcGIS (z.B. Abb. 32, Abb. 33) jeweils unten beigelegt. Zu den Werten gehören Minimum, Maximum, Median, Standardabweichung, Schiefe und Anzahl der Messwerte.

Für ein Screening von Teilräumen mit dem integrierten Portalsystem werden jeweils auf den Teilraum berechnete beschreibende Statistiken und als Abbildungen Histogramme, Boxplots und Quantil-Quantil-Plots erzeugt (s. 9.3 *Beispiel-Bericht* im Anhang).

### 6.1.2.1 Variographie

ArcGIS verwendet im Geostatistical Analyst eine automatisch optimierte Variogrammanpassung. Für die Interpolation mit Ordinary Kriging wurde diese „Expertensystem“-Anpassung verwendet, jeweils mit Anpassung an ein exponentielles Variogramm (s. Anhang 9.4 Interpolationen).

Bei der Interpolation mit R wird jeweils eine automatische Variogrammanpassung vorgenommen. Dieser werden folgende Annahmen zugrunde gelegt: Als Maximale Distanz wird bei der Variogrammerstellung bis zu einem Drittel der Gebietserstreckung in der längeren Achse verwendet. Es werden exponentielle Modellvariogramme angepasst, die einen Nuggeteffekt zulassen. Omnidirektionale und Richtungsvariogramme für die 4 Hauptrichtungen werden angepasst (s. 9.3 *Beispiel-Bericht* im Anhang). Damit können gute Anpassungen erreicht werden, deren Parameter für weitere Untersuchungen mit Interpolationen, z.B. in SADA oder MVS verwendbar sind.

## 6.1.3 2D-Interpolation

Für ein erstes Screening wurden die Daten zunächst mit dem Geostatistical Analyst in ArcMap mit IDW interpoliert und dann unter Verwendung eines omnidirektionalen Variogramms mit Ordinary Kriging (s. Anhang 9.4 Interpolationen). Theoretisch sollte nur die mit Mess-Punkten besetzte Fläche inkl. eines engen Pufferbereiches um sie herum interpoliert werden, bzw. es steigt die Varianz und sinkt die Autokorrelation mit wachsender Entfernung zu den Messpunkten. Weit ausserhalb der konvexen Hülle um die Messpunkte (mit steigendem *lag*) ist die Aussagekraft so gering, dass es sich nicht empfiehlt, die berechneten Werte dorthin zu extrapolieren (bzw. solchermaßen extrapolierte Werte als verlässliche Werte zu interpretieren).

*ArcGIS' Geostatistical Analyst* bietet jedoch nicht die Möglichkeit mit *Breaklines* zu interpolieren, bzw. die zu interpolierende Fläche anzugeben, sondern interpoliert einen rechteckigen Raum innerhalb der „bounding box“ (maximale Erstreckung in Hoch- bzw. Rechts-Richtung). Darin unterscheidet sich z.B. *SADA* oder *geoR* von *ArcView*, bei denen der Raum für die Interpolation durch solche Umgrenzungslinien festgelegt werden kann.

Da mit steigender Entfernung von den Messstellen die Aussagesicherheit sinkt, wurde, um räumliche Einflussgebiete der Messpunkte zu auszuweisen, eine Pufferzone von 500m Radius um die Messstellen gebildet, und die separaten Pufferflächen vereinigt. Mit der Erstreckung dieser Fläche wird die interpolierte Fläche verschnitten. Die Größe des Puffers wurde ausgehend von einer durchschnittlichen mittleren Punktdichte gewählt. Auf diese Art wird

sichergestellt, dass die Randbereiche nicht extrapoliert werden, obwohl keine Messwerte „in der Nähe sind“.

Die Pufferung hat auch zur Folge, dass auch innerhalb der konvexen Hülle die interpolierten Flächen dort ausgeschnitten werden, wo der Mess-Punktabstand größer als 1000m ( $2R$ ) ist. Insgesamt verringert die Pufferung die Anzahl und Größe der Artefakte bei der Interpolation.

Ausgehend von dieser ersten Untersuchung wurde in ArcGIS auf vorhandene Trends untersucht, ggf. der Versuch gemacht diese Trends vor der Interpolation zu entfernen, Richtungsvariogramme anzupassen, kleinere oder größere Reichweiten und kleinere, (gar keine) oder größere Werte für den Nuggeteffekt zuzulassen. Die regionalisierten Daten wurden für Kartendarstellungen mit den Ergebnissen der Strömungsmodellierung (WYCISK & GOSSEL 2006) und der Lage der Deponien, Kippen und Hochwasser-Überflutungsgebiete überlagert.

Eine sinnvolle gemeinsame Skalierung der Stoffe wurde angestrebt, konnte jedoch meist nur innerhalb der Gruppen eingehalten werden, oder sogar nur für die Abbildungen eines Stoffes in den getrennten Grundwasserleitern. Daher ist die Farbgebung nicht einheitlich. Sämtliche der folgenden Regionalisierungen wurden, wenn nicht anders vermerkt, nach Logarithmieren der Messwerte durchgeführt.

#### 6.1.4 Diskussion

Abb. 32 und Abb. 33 zeigen die Konzentrationen für die Metaboliten PCE und TCE aus der LHKW-Abbaureihe der sequentiellen Dechlorierung von PCE  $\rightarrow$  TCE  $\rightarrow$  VC getrennt für die Grundwasserleiter im Quartär und im Tertiär (Darstellung für VC s. Anhang 9.4).

Auch bei diesen Karten ist die unterschiedliche Skalierung zu beachten. Die Darstellungen sind alle mit Ordinary Kriging für logarithmierte Werte erstellt und mit den Bahnlinien (GOSSEL 2005) für den

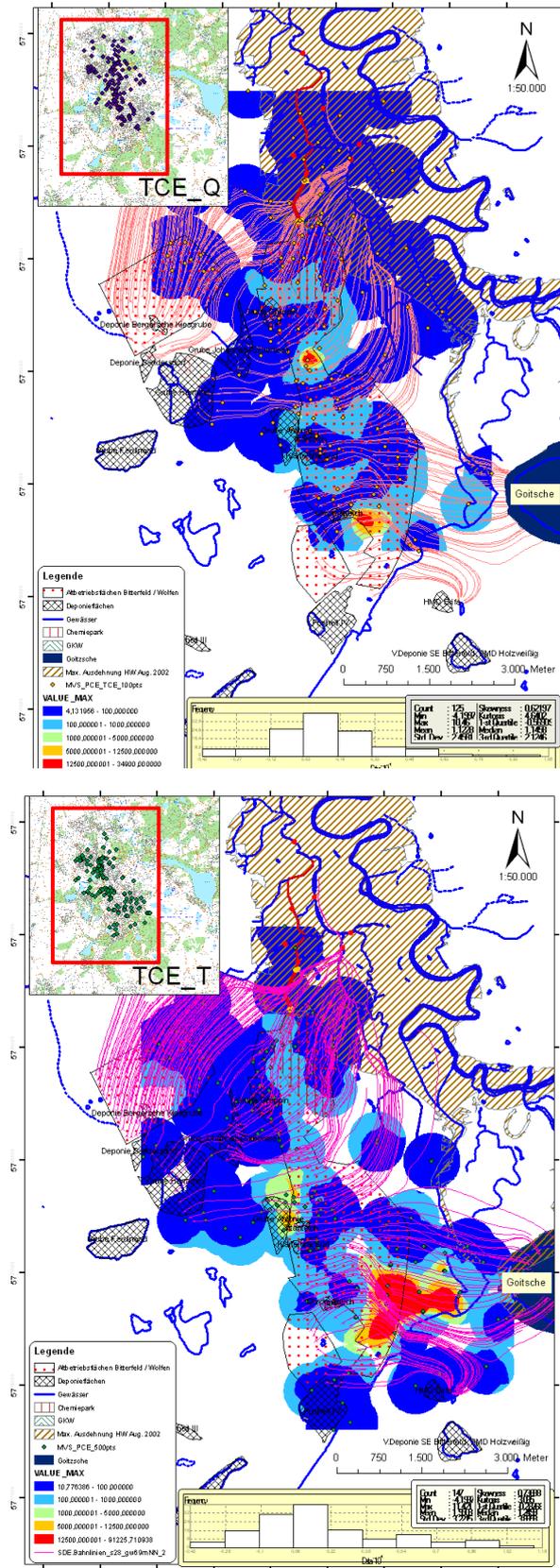


Abb. 33:

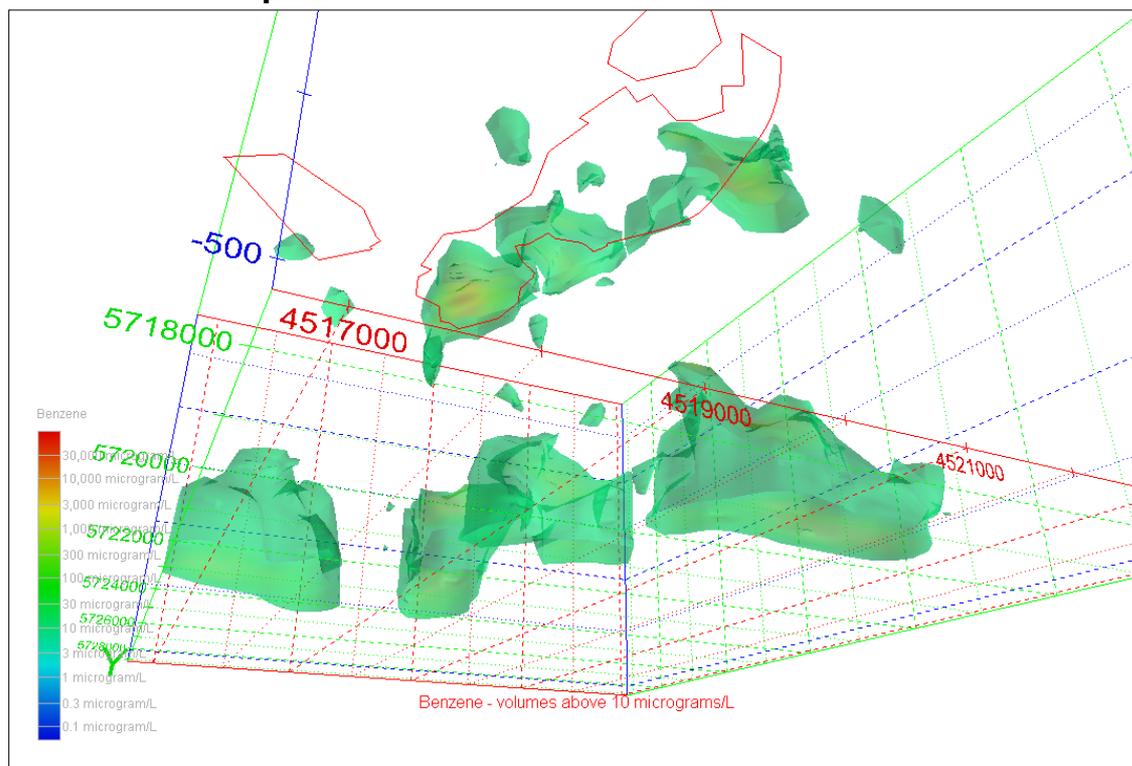
Regionalisierte Darstellung TCE, quartärer GWL (oben), tertiärer GWL (unten). Bahnlinien aus der Modellierung des jeweiligen GWL überlagert. Im Inset links oben die Verteilung der Messstellen.

Strömungs-Zustand vor August 2003 überlagert. (Strömungsregime hatte den längsten Einfluß auf die Ausbreitung der Kontamination). Es zeigt sich ein relativ „kompaktes“ Muster beim Auftreten von PCE, wobei dessen Ausbreitung im tertiären Grundwasserleiter weiter fortgeschritten ist, als im Quartär. Desweiteren lässt sich eine gute Korrelation der Kontaminationsverläufe mit den Bahnlinien erkennen. Die im zentralen Bereich des Betriebsgeländes zu findende punktweise Kontamination mit PCE scheint im Tertiär bereits weitgehend metabolisiert zu sein. Abb. 33 zeigt hierzu einen ähnlichen Verlauf für TCE, das beim natürlichen Abbauprozess aus PCE gebildet wird.

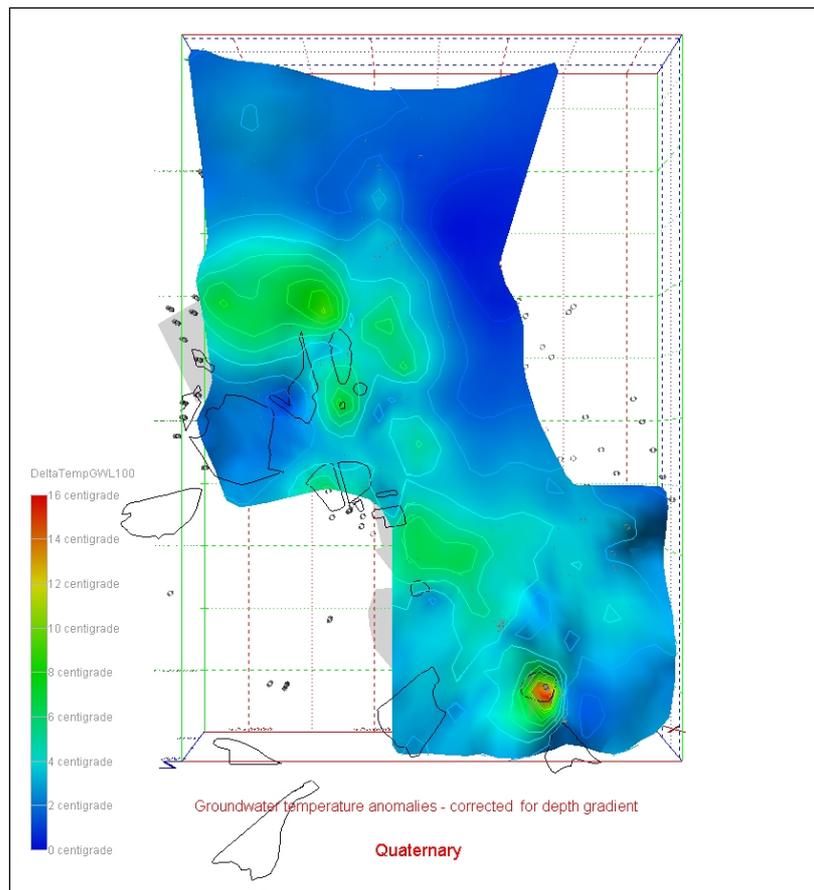
Die Darstellung für VC korreliert ebenfalls mit den gezeigten Phänomenen. Hier scheint der Umbau zu VC weiter fortgeschritten zu sein und der Transport durch das ehemals vorherrschende Strömungsregime hat eine weitere Verbreitung bewirkt. Zu den bei PCE und TCE sichtbaren *hot spots* kommt hier eine Kontamination bei der Grube Antonie.

Diese Abbildungen zeigen den Wert der Integration verschiedener Datendomänen im GIS. Insgesamt lässt sich mit dieser Darstellung gut der theoretisch bekannte Abbau der LHKW-Reihe zeigen. Auch der Effekt der weiteren räumlichen Verbreitung der Schadstoffe im unteren GWL im Vergleich zum oberen GWL ist deutlich zu erkennen. Die Ausprägung des Kontaminationsverlaufes folgt sehr gut der modellierten Strömung und unterstützt damit die These der Ausbreitung der Stoffe entlang der und durch die Strömung. Die Persistenz der höher-chlorierten Stoffe ist nicht so gut wie die der daraus entstehenden Stoffmetabolite, daher sind TCE und besonders VC weiter verbreitet als PCE.

### 6.1.5 3D-Interpolation



**Abb. 34:** Blockbild (Sicht von unten aus SüdWest): Benzen- Darstellung der Volumina über 10 µg/L in MVS zur Darstellung der Möglichkeiten interaktiver 3D-Visualisierung der Kontamination innerhalb der Aquifere. An der Oberfläche ist (durch die transparenten Volumenkörper hindurch) der Umriss der Betriebsgelände gezeigt.



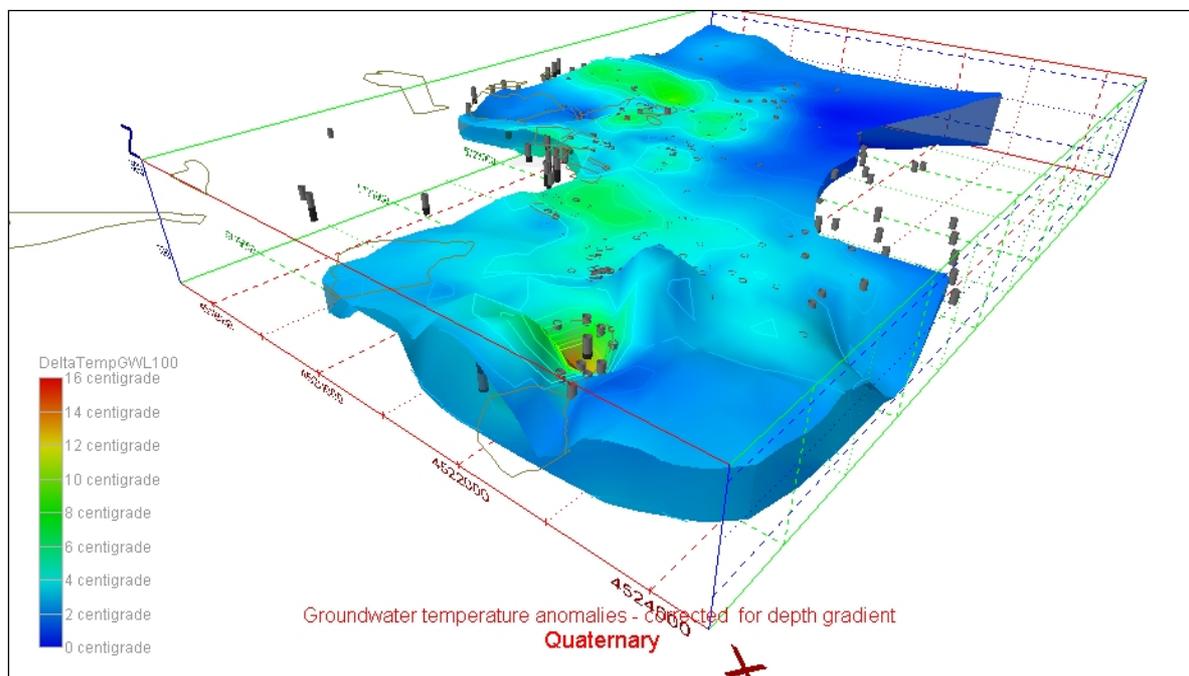
**Abb. 35:** Vertikalsicht der 3D-Interpolation der Grundwasser-Isothermen-Anomalien im quartären GWL 100. Gezeigt wird die Abweichung der Temperatur von einer teufenabhängig erwarteten Referenztemperatur.

Mit SADA und MVS wurde die Stoffverbreitung, bzw. Parameterhöhen wie Temperaturanomalien (Abb. 35, Abb. 36) dreidimensional interpoliert. Dazu stehen die Verfahren IDW, Ordinary Kriging oder Indikator Kriging zur Auswahl. MVS wurde verwendet, um die Stoffverbreitung innerhalb der modellierten Volumenkörper (HUBERT 2005) mit Ordinary Kriging darzustellen. Dazu wurde das detaillierte geologische Modell so weit reduziert, indem die Teilvolumina zu einem quartären bzw. dem darunter liegenden tertiären Grundwasserleiter zusammengefasst wurden, dass die innerhalb des oberen bzw. innerhalb des unteren GWL befindliche Kontamination getrennt dargestellt werden konnte. Hierbei werden diese zwei Volumenkörper durch einen künstlichen Zwischenraum separiert („auseinandergezogen“), um die Kontaminations-Verbreitung an ihrer Trennschicht sichtbar zu machen.

Zusätzlich werden die Volumenkörper halbtransparent eingefärbt, so dass die Konzentrationen der Schadstoffe im Innern als farbige Verteilungen sichtbar gemacht werden können. Die verwendeten Bohrdaten werden als Bohrungen im Inneren der Körper georeferenziert als (vertikale) Stäbe dargestellt. Die Messwerte werden in der Tiefe verortet dargestellt, wobei als z-Koordinate die Mitte der Filterstrecke unter der Geländeoberkante Verwendung findet. Durch farbige Kugeln wird die Höhe des Messwertes, bzw. auch hier der Mittelwert der Messwerte an mehrfach beprobten Messstellen dargestellt (s. auch den Bildschirmausdruck vom VRML-Export einer solchen Darstellung in Abb. 45). Die Darstellung der modellierten Bahnlängen (WYCISK & GOSSEL 2006) erfolgt ggf. an der Geländeoberfläche, ggf. getrennt für die Grundwasserleiter.

Aus Darstellungsgründen wurde für Abb. 35 die 3-dimensionale Interpolation auf die Oberfläche projiziert (Höhe 0). Es wurden Karten erstellt, welche die Überschreitung von

Gewässerqualitätszielen um einen festgelegten Faktor darstellen. (z.B. für Benzen -Abb. 34). Die überragende 3-dimensionale Darstellung im interaktiven Viewer von MVS verliert bei der 2D-Kartendarstellung sehr stark an Überzeugungskraft. Behelfsmäßig können Karten verschiedener Perspektivansichten exportiert werden. Ein externer, kostenloser Player (*4Dim-Player*) ermöglicht hingegen die weitgehend interaktive Betrachtung der fertiggestellten Modelle von allen Seiten (auch „im Innern“) und wird dafür empfohlen. Der Export als VRML kann zur Darstellung der Modelle über das Web im Browser genutzt werden. Ein solcher sogenannter VRML-Szenengraph ist aber dann ein „statischer“ Export, also gewissermaßen ein „Schnappschuß“ der Ansicht, während im Gegensatz dazu im MVS-Modell wirklich navigiert werden kann: beispielsweise kann ein Profilschnitt interaktiv in unterschiedlichen Raumrichtungen durch das Modell „geschoben“ werden, um die jeweilige Kontaminationshöhe anzuzeigen.



**Abb. 36:** 3D-Interpolation der quartären Grundwasser-Isothermen-Anomalien (Blockbild). Gezeigt wird die tiefenabhängige Abweichung von der Referenztemperatur, interpoliert innerhalb des quartären GWL. Der tertiäre GWL wird nicht gezeigt. Messpunkte sind eingeblendet, ebenso wie die oberflächlichen Umrisslinien der Deponien.

Im Unterschied zu MVS erlaubt SADA die Verwendung von Begrenzungslinien (break lines) um die gemessenen Punkte auszuwählen, innerhalb derer die Interpolation stattfindet. SADA verwendet sowohl einen zwei-dimensionalen Darstellungsmodus, wie auch einen voll 3-dimensionalen. Mit Hilfe der integrierten Datenbank kann ein Orientierungs- oder Grenzwert festgelegt werden, bei dessen Überschreitung Messpunkte hervorgehoben werden können. Dazu stehen mehrere unterschiedliche Listen zur Verfügung, eigene Werte können in der Datenbank festgelegt werden. Bei der Festlegung der zu interpolierenden Messwerte können (horizontale) Aufteilungen in Schichten vorgenommen werden. Dabei werden die Messpunkte im Untersuchungsgebiet aufgrund der unterschiedlichen Tiefenlage der Schichtung in unterschiedlichen Bereichen des Gebietes teils unterschiedlich auf die Schichten verteilt, wodurch eine falsche Belegung der Schichten bezüglich homogener Geologie/ Stratigraphie entsteht. Daraus folgt, dass die Interpolation nicht genau mit der im MVS vergleichbar ist.

Orientierungshalber können aber die Messwerte in „flachliegende“ und „tiefe“ aufgeteilt werden, um die Auswirkungen auf die Interpolation zu beobachten.

SADA kann Berichte mit eingebundener Visualisierung und den verwendeten Werten, bzw. Ergebnisdaten in HTML-Form erstellen. Diese können in das Plone-Portal eingebunden werden. Für die mit SADA untersuchten Werte wurden solche Berichte dort integriert. Eine Ausgabe der Werte als PDF-Dateien ist direkt aus dem Portal machbar.

### **6.1.6 Diskussion**

Abb. 36 und Abb. 35 zeigen dreidimensionale Interpolationen der Abweichung der Grundwassertemperatur von einer Referenztemperatur für die entsprechende Tiefe im quartären Grundwasserleiter. Abb. 35 zeigt die Vertikalaufsicht der Interpolation zum Blockbild von Abb. 36. Diese Darstellung erlaubt Rückschlüsse auf Lokalisationen mikrobiellen Abbaus zu ziehen. Exothermer organischer Metabolismus wird dabei im Zusammenhang mit einer erhöhten Grundwassertemperatur gebracht. Hier ist besonders die auffällige Erhöhung an der Hausmülldeponie Brikettfabrik (HMD Brifa) im Süden des Untersuchungsgebiets zu nennen, die jedenfalls nicht mit den übrigen Darstellungen vereinbar zu sein scheint. Temperaturerhöhungen nördlich und östlich der Grube Johannes sind dagegen mit mikrobiellem Abbau im Grundwasserabstrom erklärbar.

Durch die integrierte Darstellung der Messwerte (bzw. der interpolierten Verteilung von Kontaminationshöhen) innerhalb des 3D-Geologie-Modells (HUBERT 2005) erhält der Bearbeiter eine neue Qualität der Visualisierung, die der Interpretierbarkeit sehr dienlich ist. In Kombination mit den Ergebnissen der Ausbreitungsmodellierung in Form der Grundwasser-Strömungslinien (GOSSEL 2005) ermöglicht diese Darstellung ein gekoppeltes Prozessverständnis, wie es ohne das Modell sehr viel schwieriger oder unmöglich ist. Auch wenn nach wie vor hohe Anforderungen bezüglich räumlicher Orientierung und Wissen in verschiedenen Domänen zur Interpretation der Modelle gefordert sind, erleichtert das Modellergebnis die Interpretation von z.B. lokalen Erhöhungen aufgrund erhöhter Durchlässigkeiten innerhalb der quartären Rinnenstrukturen im Modellraum.

## 6.2 Risk Assessment

- Expositionspfade
- Vorgehensweise
- Qualitätsziele
- SADA

Die in Kapitel 2.4 beschriebenen Software-Produkte RBCA, RISC4 und SADA wurden hinsichtlich ihrer Möglichkeiten verglichen. RISC4 und SADA wurden dazu eingesetzt, das Risiko für die bestehenden Schutzgüter anhand verschiedener denkbarer Expositionspfade zu modellieren. Neben einer sogenannten Tier-1-Abschätzung, die in etwa der Sickerwasserprognose nach deutschem Recht entspricht, sind die Programme auch in der Lage weitaus komplexere Szenarien zu berechnen. RISC4 enthält beispielsweise auch Modellalgorithmen zur Berechnung des Abbaus in der vadosen Zone etc.. Szenarien wie Schwimmen in Oberflächenwasser oder die Exposition durch zur Bewässerung gefördertes (Grund-) Wasser beim Duschen, oder auch die Aufnahme von Gemüse, welches mit kontaminiertem Wasser aufgezogen worden ist, können eingearbeitet werden, bzw. sind als Szenarien enthalten. Aufgrund seiner relativ einfachen Verwendbarkeit, wurde RISC 4 für die Berechnung der folgenden Ergebnisse eingesetzt.

Vorsicht ist allerdings bei der Interpretation der gezeigten Berechnungen geboten. Abgesehen davon, dass die Programme, wie bereits erwähnt, nicht speziell auf die deutschen Bestimmungen angepasst sind, wird hier von theoretischen Szenarien ausgegangen, die modellhaft zur Berechnung an tatsächlichen Messpunkten verwendet werden (s. 6.2.3 Diskussion für Hinweise zur Bedeutung der Beispielberechnungen und -Szenarien).

### 6.2.1 Expositionspfade

Pfade, auf denen eine schädigende Wirkung für die Umwelt befürchtet werden kann, müssen von denen unterschieden werden, die eine Schädigung des Menschen bewirken können.

Denkbare Expositionen finden auf folgenden Pfaden statt:

- Inhalativ durch Ausgasung aus dem Boden oder Grundwasser.
- Trinken privat geförderten Grundwassers
- Hautkontakt mit Erde oder Grundwasser
- Verschlucken von Erde (Kleinkindszenario)
- Schwimmen in Oberflächengewässern
- Verwendung von Gemüse aus Kleingartenanlagen im Untersuchungsgebiet

#### 6.2.1.1 Schutzgut Oberflächenwasser und aquatische Biozönosen

Der Schutz der aquatischen Biozönosen gewinnt gerade mit den Forderungen der EU-WRRL an Bedeutung. Wie im vorangegangenen Abschnitt beschrieben, werden für die ökotoxikologische Abschätzung die berechneten Werte lediglich mit Wasserqualitätszielen verglichen. Die gemessenen bzw interpolierten Werte werden auf diese Weise hinsichtlich ihrer ökotoxikologischen Wirkung untersucht.

### **Grundwasser → Oberflächenwasser**

Für die Abschätzung der Risiken für das Oberflächenwasser werden Gewässerqualitätsziele mit den gemessenen (oder durch Interpolation erhaltenen, regionalisierten) Werten verglichen. Wo keine Messungen vorliegen, muss mit RISC4 modelliert werden.

#### **6.2.1.2 Schutzgut Mensch**

Die Humantoxikologische Abschätzung unterscheidet nach mehreren Expositionspfaden, die unten im Einzelnen beschrieben werden. RISC 4 kann in einem Bearbeitungs-Durchgang immer nur entweder eine human- oder ökotoxikologische Abschätzung durchführen.

Bei den 14 *Humantoxikologischen* Aufnahmewegen, die in RISC4 berücksichtigt werden (s. Tab. 6, S. 42), handelt es sich im Einzelnen um folgende:

1. Hautkontakt mit kontaminiertem Boden
2. Verschlucken kontaminierten Bodens (z.B. bei der Gartenarbeit)
3. Verschlucken kontaminierten Grundwassers
4. Hautkontakt mit kontaminiertem Grundwasser beim Duschen
5. Einatmen beim Duschen
6. Einatmen von Raumluft (aus Grundwasser- oder Bodenemissionen)
7. Einatmen von Umgebungsluft (aus Grundwasser- oder Bodenemissionen)
8. Verschlucken von Oberflächenwasser beim Schwimmen
9. Hautkontakt mit Oberflächenwasser
10. Essen von Gartengemüse aus kontaminiertem Boden
11. Essen von Gartengemüse, das mit kontaminiertem Grundwasser gezogen wurde
12. Verschlucken von Bewässerungswasser (Grundwasser)
13. Hautkontakt mit Bewässerungswasser.
14. Einatmen von Aerosolen bei der Bewässerung.

Zu den im vorliegenden Fall wichtigen Pfaden gehören 1, 2, 6-9, 10-14. Die Bewässerung mit Grundwasser und Förderung für den Haushalt findet offiziell im Untersuchungsraum nicht statt, da die Haushalte ihr Trink- und Brauchwasser per Fernwasserversorgung erhalten. Tatsächlich ist aber zumindest theoretisch mit einer solchen Nutzung zu rechnen, da vereinzelt Brunnen auf den Grundstücken zu finden sind, aus denen wohl Grundwasser zu diesem Zweck gefördert wird. Hautkontakt und Verschlucken von Boden können nicht abgeschätzt werden, da keine Messwerte für den Boden vorliegen, ebensowenig wie der Einfluss kontaminierten Bodens auf die Gehalte in Gartengemüse. Die übrig bleibenden Pfade 6, 7, 8 und 9 werden im folgenden untersucht.

### **Grundwasser → Mensch**

Die *Schadstoffverkeftung* über den Pfad Grundwasser → Mensch ist im vorliegenden Fall nicht komplett, da (theoretisch) keine Entnahme des Grundwassers im Untersuchungsgebiet stattfindet. Exposition durch Verschluckung ist daher – theoretisch – ausgeschlossen.

### **Grundwasser → Raumlufte → Mensch**

Die in den Strömungslinien für den aktuellen Grundwasserabstrom z.B. in Abb. 38 erkennbare Richtung zeigt, dass moderat bis höher sensitive Bereiche der Landnutzung (Abb. 37) von Grundwasser unter- bzw. durchströmt werden.

Das bei niedrigen und immer noch steigenden Grundwasserspiegeln unter dem Untersuchungsgebiet vorhandene kontaminierte Grundwasser stellt auch durch Entgasung in die Umgebungs- oder Raumlufte eine Gefahr dar. RISC4 und RBCA enthalten Modelle (JOHNSON & ETTINGER 1991) für den Einfluss der Volatilisierung in die Raumlufte und die dabei entstehenden Belastungen und Risiken.

### **Grundwasser → Oberflächenwasser → Mensch**

Das Grundwasser als Kontaminationsherd selbst stellt über den Ausfluß in die Oberflächengewässer und den indirekten Kontakt mit dem Menschen durch Verschlucken oder Hautkontakt eine Gefährdung des Menschen über dieses dar. Modelle für diesen Pfad sind in RISC, RBCA und RAM vorhanden.

## **6.2.2 Vorgehensweise**

Durch Verschneidung der regionalisierten Karten mit den vorliegenden Karten zur Sensitivitätsklassifikation aus SAFIRA II (Abb. 37) wurden besonders sensitive Bereiche zum Risk Assessment (RA) ausgewählt und Szenarien zu verschiedener Landnutzung und Exposition ausgearbeitet.

In Kapitel 2 wurde die Reihenfolge beschrieben, in der beim RA der Gefahrenidentifikation die Dosis-Wirkungs-Abschätzung und darauf die Expositionsabschätzung folgt. Dieser Ablauf wurde hier wie folgt durchgeführt:

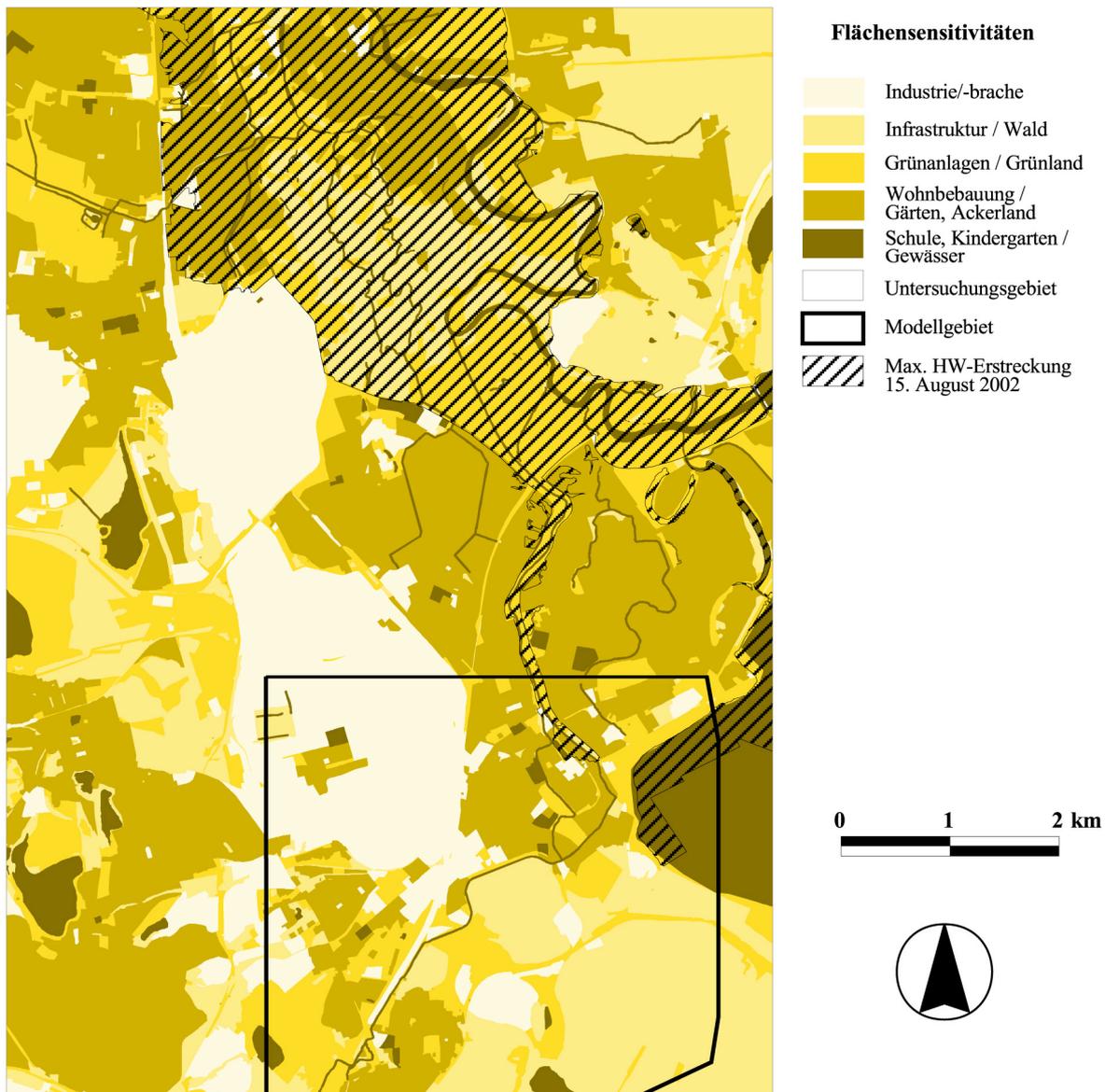
Die Dosis-Wirkungs-Abschätzung mit einer Dosis-Wirkungskurve liegt in den verwendeten Softwarepaketen vor.

Zur Modellierung der Risiken im vorliegenden Untersuchungsgebiet wurden zunächst sensitive Bereiche identifiziert und geprüft, ob die untersuchten Stoffe in den regionalisierten Darstellungen dort auftreten oder aber, ob erwartet werden kann, dass sie aufgrund der herrschenden Grundwasserströmung dort auftreten werden (*hazard identification*).

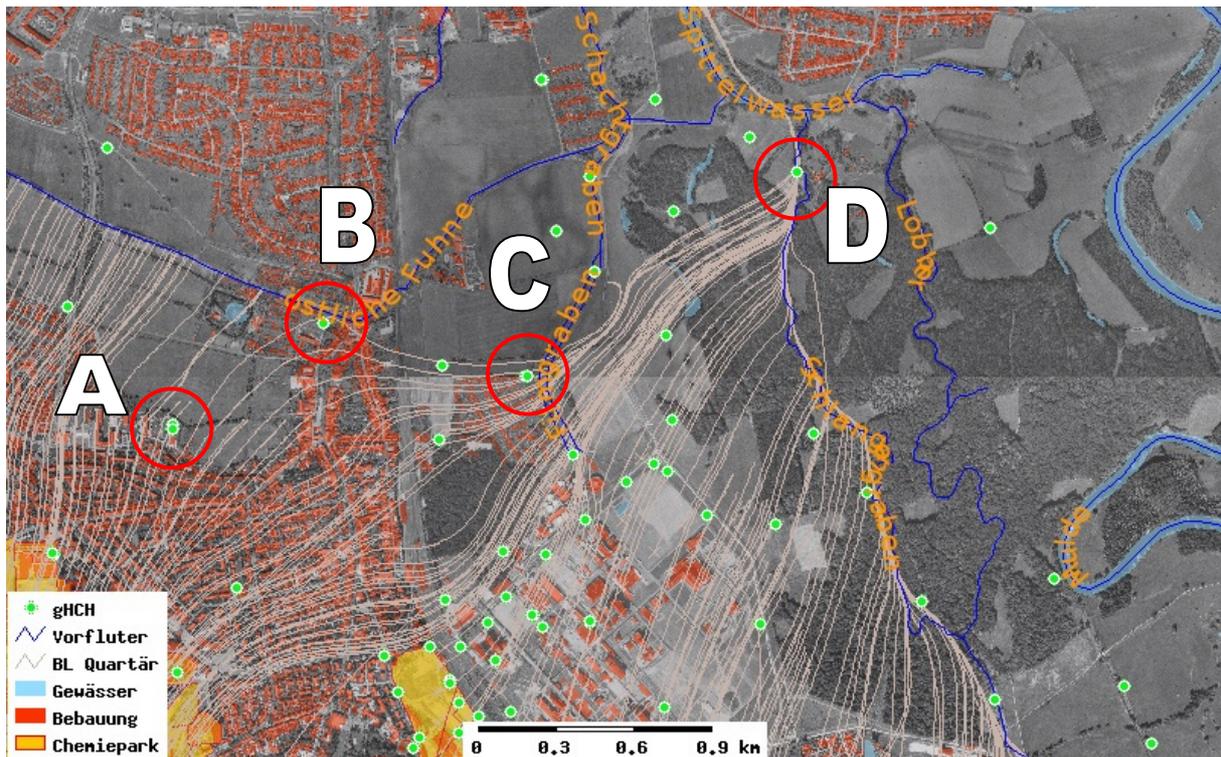
Tab. 2 im Anhang 9.1 enthält eine Liste der physikochemischen und toxikologischen Eigenschaften der untersuchten Stoffe, wie sie von der EPA zur Verwendung empfohlen wird, und den verwendeten Modellen zugrunde liegt.

Mit Hilfe der Software wird mit standardisierten und angepassten Szenarien die Exposition modelliert. In Kombination mit der vorhandenen Dosis-Wirkungs-Abschätzung erhält man als Resultat die Risikocharakterisierung in Form einer Risikokennzahl. Zur detaillierten Bedeutung der Ergebnisse wird auf Kapitel 2.3.3 Risikoberechnung verwiesen.

Wie im Safira II-Abschlussbericht (WYCISK ET AL. 2005a) dargelegt, handelt es sich beim überwiegenden Teil der mittel- bis hochsensitiven Bereiche einerseits um die Gewässer und andererseits um die Wohnbebauung in den Stadtteilen von Holzweißig und Bitterfeld. Aufgrund der aktuellen Strömungssituation, in der Bitterfeld abstromig von den höherkontaminierten Bereichen des südlichen und mittleren Betriebsgeländes liegt, wird beim Risk Assessment ein besonderes Augenmerk auf diese Bereiche gelegt.



**Abb. 37:** Darstellung der entwickelten Flächensensitivitäten auf Basis der ATKIS-Daten. Quelle: WYCISK ET AL., 2005. Die folgende Abb. 38 zeigt den nordwestlichen Ausschnitt dieses Bereichs.



**Abb. 38:** Karte der Probennahmepunkte für das Risk Assessment. A: LK09, WVV089; B: WVV086; C: BVV4680; D: BVV 438. In der Bildmitte unten ist das Nordende des Betriebsgeländes gerade noch zu sehen. Im Osten verläuft die Mulde.

Im Abstromgebiet von Wolfen Nord und auf die Vorfluter hin wurden 3 Punkte für das Risk Assessment ausgewählt: Abb. 38 zeigt eine Karte dieses Untersuchungsgebietes. An den Probennahmepunkten A: LK09 (Entnahmetiefe ca. 20m), WVV089 (ca. 35 m) (zwei Messstellen mit unterschiedlicher Beprobungstiefe); B: WVV086; C: BVV4680 und D: BVV 438 wurde eine Gefährdungsabschätzung durchgeführt.

Die Punkte wurden anhand ihrer Lage im Abstrom des Untersuchungsgebietes ausgesucht. Ausserdem sollten sie für die Expositionsanalyse der bebauten Flächen dienen, daher wurden Messstellen ausgesucht, die nahe bei Gebäuden liegen. Punkt D ist zudem repräsentativ für Frachten aus dem Schlangengraben.

Die untersuchten Pfade sind *Grundwasser* → *Mensch* über die Inhalation oder den Hautkontakt mit Bewässerungswasser (also z.B. Wasser, das in privaten Gärten gefördert und zum Rasensprengen verwendet wird), sowie der Verzehr von Gemüse, das mit kontaminiertem Wasser oder in kontaminiertem Boden aufgezogen wurde. Die Expositionsparameter sind am Ende des Anhangs 9.5 zu finden. Der Parameter für den Gemüseverzehr wurde auf einen Wert von 15 Ereignissen pro Jahr gesetzt. Das ist die einzige Abweichung von den Standardeinstellungen.

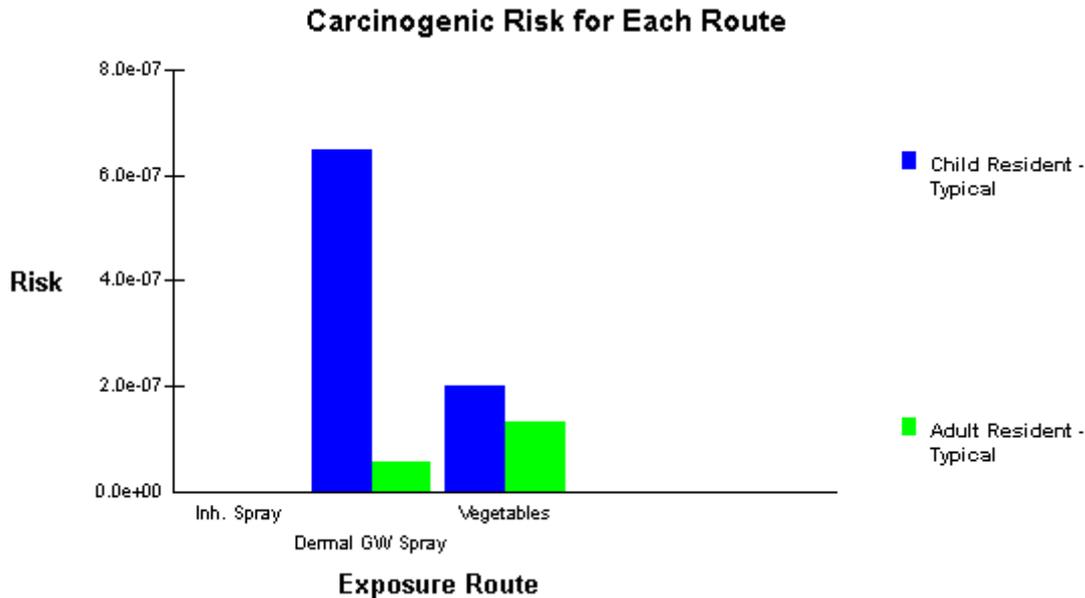
### **Vorwärtsberechnung:**

Die Vorwärtsberechnung hat, wie in Kapitel 2.3.3.7 beschrieben, zum Ziel, das von einer Kontamination auf exponierte Rezeptoren ausgehende Risiko zu berechnen.

Für Vinylchlorid (VC) an Punkt A berechnet RISC4 beispielsweise folgende tabellarische Ergebnisse für das Krebsrisiko bzw. den Gefährdungsindex (für eine Wiedergabe der Eingabeparameter und weitere Ergebnisse siehe Anhang 9.5):

| SUMMARY OF CARCINOGENIC RISK<br>For Groundwater                                         |                                  |                                       |                                   |         |
|-----------------------------------------------------------------------------------------|----------------------------------|---------------------------------------|-----------------------------------|---------|
| CASE 1:<br>Child Resident - Typical                                                     |                                  |                                       |                                   |         |
|                                                                                         | Inhalation<br>of Irrig.<br>Water | Dermal<br>Contact with<br>Irrig.Water | Ingestion<br>withof<br>Vegetables | TOTAL   |
| Vinyl Chloride                                                                          | 3.2E-10                          | 6.5E-07                               | 2.0E-07                           | 8.6E-07 |
| TOTAL                                                                                   | 3.2E-10                          | 6.5E-07                               | 2.0E-07                           | 8.6E-07 |
| CASE 2:<br>Adult Resident - Typical                                                     |                                  |                                       |                                   |         |
|                                                                                         | Inhalation<br>of Irrig.<br>Water | Dermal<br>Contact with<br>Irrig.Water | Ingestion<br>withof<br>Vegetables | TOTAL   |
| Vinyl Chloride                                                                          | 1.0E-10                          | 5.7E-08                               | 1.3E-07                           | 1.9E-07 |
| TOTAL                                                                                   | 1.0E-10                          | 5.7E-08                               | 1.3E-07                           | 1.9E-07 |
| CASE 3:<br>Cases 1 and 2 Added Together                                                 |                                  |                                       |                                   |         |
|                                                                                         | Inhalation<br>of Irrig.<br>Water | Dermal<br>Contact with<br>Irrig.Water | Ingestion<br>withof<br>Vegetables | TOTAL   |
| Vinyl Chloride                                                                          | 4.3E-10                          | 7.1E-07                               | 3.3E-07                           | 1.0E-06 |
| TOTAL                                                                                   | 4.3E-10                          | 7.1E-07                               | 3.3E-07                           | 1.0E-06 |
| =====                                                                                   |                                  |                                       |                                   |         |
| SUMMARY OF HAZARD QUOTIENTS<br>For Groundwater                                          |                                  |                                       |                                   |         |
| CASE 1:<br>Child Resident - Typical                                                     |                                  |                                       |                                   |         |
|                                                                                         | Inhalation<br>of Irrig.<br>Water | Dermal<br>Contact with<br>Irrig.Water | Ingestion<br>withof<br>Vegetables | TOTAL   |
| Vinyl Chloride                                                                          | 4.2E-06                          | 1.7E-03                               | 5.3E-04                           | 2.2E-03 |
| TOTAL                                                                                   | 4.2E-06                          | 1.7E-03                               | 5.3E-04                           | 2.2E-03 |
| CASE 2:<br>Adult Resident - Typical                                                     |                                  |                                       |                                   |         |
|                                                                                         | Inhalation<br>of Irrig.<br>Water | Dermal<br>Contact with<br>Irrig.Water | Ingestion<br>withof<br>Vegetables | TOTAL   |
| Vinyl Chloride                                                                          | 9.0E-07                          | 9.8E-05                               | 2.3E-04                           | 3.2E-04 |
| TOTAL                                                                                   | 9.0E-07                          | 9.8E-05                               | 2.3E-04                           | 3.2E-04 |
| NOTE: A zero hazard index may indicate that a RfD<br>was not entered for that chemical. |                                  |                                       |                                   |         |

Die folgende Abb. 39 zeigt eine Darstellung des Krebsrisikos nach Routen, jeweils für den entsprechenden Rezeptor (Kind/Erwachsener Anwohner).

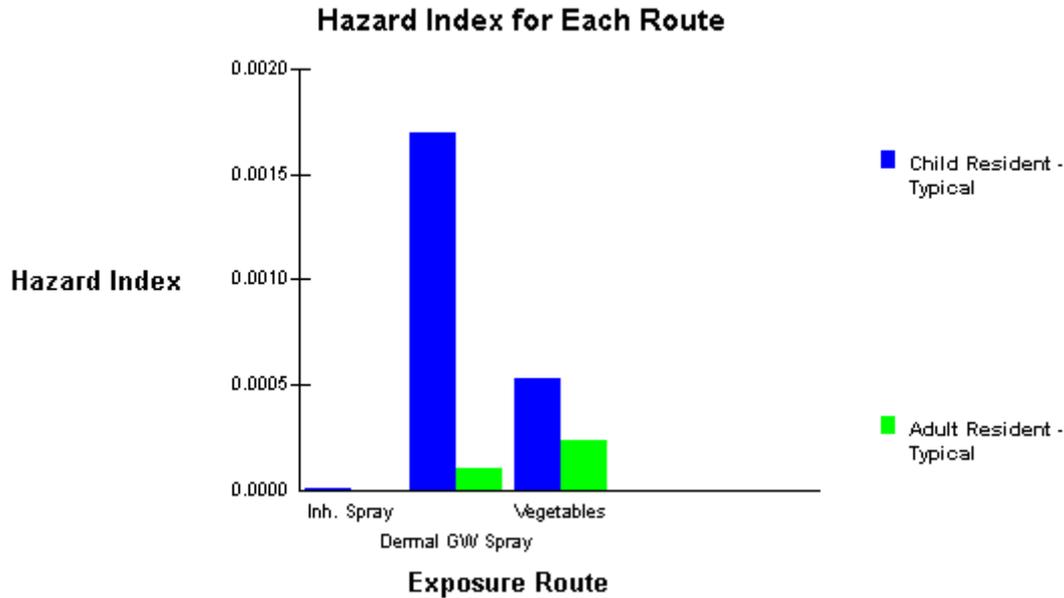


**Abb. 39:** Karzinogenitätsrisiko nach Expositionsrouten für die Szenarien Anwohner: *Kind* bzw. Anwohner: *Erwachsener*; Messstellen *WV089, LK09* (RISC4).

Diese Darstellung erlaubt den Vergleich der Höhe des Risikos, das durch mehrere Expositionsarten entsteht. Hier zeigt sich z.B., dass – für die genannten Annahmen – das Risiko einer Krebserkrankung bei der Exposition durch Gartengemüse niedriger ist, als das theoretische Risiko, das durch die Exposition mit Bewässerungswasser im Hautkontakt verursacht wird. Durch das Einatmen von Tröpfchen aus dem Bewässerungswasser entsteht nach dieser Berechnung kein erkennbar erhöhtes Risiko (Wert s. Tabellenausgabe oben:  $4.3E-10$ ).

Der Empfänger „*Kind*“ weist in diesem Modell ein höheres Risiko auf. Insgesamt ist das berechnete, additive Karzinogenitäts-Risiko aus der Exposition an Vinylchlorid mit den genannten Parametern unter dem angenommenen Szenario an dieser Messstelle in der Größenordnung von  $< 1.0E-06$  (s. oben). Wie oben beschrieben, liegt das an der für dieses Szenario erhöhten, auf das Körpergewicht bezogenen, Dosis.

Die folgende Darstellung (Abb. 40) zeigt die Höhe des Gefahrenindex für die unterschiedlichen Szenarien, jeweils nach Routen differenziert, also die Gefährdung, die durch nicht-kanzerogene Stoffe unter den Annahmen des Modells in diesem Szenario berechnet wird: Ähnlich wie vorher zeigt sich, dass für den Empfänger „*Child Resident*“ die Werte höher als für den erwachsenen Empfänger sind. Anders als bei der vorherigen Berechnung ist auch für die Aufnahme über das Einatmen von Tröpfchen aus dem Bewässerungswasser der Wert hier leicht erhöht, die Gewichtung der Einflüsse der unterschiedlichen Expositionspfade bleibt gleich.



**Abb. 40:** Gefährdungsindex (für systemische Schädigung) nach Routen, Messstellen *WV089, LK09* (RISC4)

### ***Rückwärtsberechnung:***

Bei der Rückwärtsberechnung oder Berechnung von Sanierungszielwerten werden die Eingangsparmeter für gegebene Expositionsszenarien durch das Programm RISC4 solange verändert bzw. Konzentrationen reduziert, bis als Ergebnis das vorgegebene Szenario (also ein theoretisch „akzeptabler“ Wert des von der verbleibenden Kontamination ausgehenden Risikos) erreicht wird. Bei der Betrachtung von Transport und Abbau werden bei kumulativer Berechnung für mehrere Stoffe und Pfade die Konzentrationen vom Programm in dem Verhältnis zueinander verringert, wie sie vorgegeben werden. Das gilt es zu beachten, wenn man Mischungen betrachtet, die sehr unterschiedlichen Sanierungsbedingungen, z.B. durch *natural attenuation* gehorchen.

Eine weitere wichtige Randbedingung ist bei der Rückwärtsberechnung direkter Exposition (ohne Transport und Abbau) über mehrere Rezeptormedien zu beachten: Die Reduktion wird so berechnet, dass für die Exposition über ein Rezeptormedium die Konzentration des Stoffes das vorgegebene Risiko nicht überschreitet. Findet allerdings Exposition über mehrere Rezeptormedien statt, also z.B. durch Inhalation der Gase aus dem Wasser *und* Hautkontakt, ist das Gesamtrisiko zu addieren.

In der Rückwärtsberechnung erzielt RISC4 für das obige Beispiel folgendes Ergebnis für den Sanierungszielwert (site specific target level SSTL)-hier nur für einen Einzelstoff (VC), für additive Rezeptoren Kind + Erwachsener, für die Exposition auf den beschriebenen drei Pfaden:

| SUMMARY OF CLEAN-UP LEVELS       |         |            |
|----------------------------------|---------|------------|
| -----                            |         |            |
| Clean-up Levels in Groundwater   | SSTLs   | Solubility |
| Receptor: Additive Receptor Case | [mg/l]  | [mg/l]     |
| Vinyl Chloride                   | 5.4E-01 | 2.8E+03    |

The exposure routes that depend on this source are:

- Inhalation of irrigation water spray
- Dermal contact with irrigation water
- Ingestion of vegetables

Dieser Wert bedeutet, dass für ein vorgegebenes akzeptables Risiko (hier:  $1.0E-05$  für das Krebsrisiko „*inkrementelles Risiko*“ –s. Kap. 2.3.3.6 Kanzerogenes Gesamt-Risiko: IELCR (inkrementelles R.)- bzw. 1.0 für den *Gefährdungsindex* s. Kap. 2.3.3.5 Nicht-kanzerogenes Gesamtrisiko: Hazard Index) für die exponierten Rezeptoren (mindestens) bis zum Erreichen des so errechneten Zielwertes saniert werden soll.

Oder anders ausgedrückt: Durch Reduktion der Konzentrationen der Einzelstoffe mittels Sanierung wird ein Gesamtrisiko für eine Exposition durch alle Stoffe erreicht, das *per definitionem* akzeptabel ist. Dies ist die umgekehrte Herangehensweise zur Vorwärtsberechnung, bei der ein vorgegebener akzeptabler Wert für das Risiko fehlt.

### 6.2.3 Diskussion

Das Ergebnis aus der Berechnung des karzinogenen Risikos wird für die Einzel-Rezeptoren Kind bzw. Erwachsener und ausserdem für die Summe der beiden Szenarien gezeigt. Der Sinn der getrennten Berechnung für die Rezeptoren Anwohner Kind bzw. Erwachsener liegt darin, dass verschiedene Körpergewichte, Expositionsdauern, und Aufnahmearten angegeben werden können. Weitere mögliche Rezeptoren sind Arbeiter oder nur gelegentliche Besucher mit sehr geringer Exposition.

Wie in Kapitel 2.3.3 zur Risikoberechnung dargestellt, wird die Dosis im Verhältnis zum Körpergewicht errechnet. Daher ergibt sich für Kinder, unter Annahme eines geringeren Körpergewichts, bei gleicher Konzentration dennoch eine höhere Dosisbelastung als für Erwachsene. Da der Berechnung nicht-kanzergener Wirkungen der höchste Wert aus der zeitlichen Mittelung über jeweils 7 Jahre zugrunde gelegt wird, errechnet sich für das Szenario, wo ein Anwohner auch als Kind eine Exposition erfährt, eine höhere chronische Exposition, als für einen Anwohner, für den eine Berechnung nur mit dem Körpergewicht eines Erwachsenen durchgeführt wird. Im kumulativen Szenario, wo ein Anwohner bereits als Kind und dann weiter als Erwachsener einer Exposition unterworfen ist, ergibt sich auch eine höhere Lebensdauer-gemittelte Tages-Exposition (für Kanzerogene).

Hier soll noch einmal darauf hingewiesen werden, dass die Berechnung lediglich zur Verdeutlichung der Vorgehensweise bei der Interpretation der erhaltenen Werte dienen soll. Wie bereits erwähnt, werden hier spekulative Szenarien und Expositionsrouten verwendet, deren Verwirklichung nicht nachgewiesen ist, da nicht bekannt ist, ob im Untersuchungsgebiet an den betrachteten Messstellen eine Förderung von Grundwasser überhaupt stattfindet. Auch der Verzehr von Gartengemüse, das mit diesem Grundwasser bewirtschaftet wurde, ist nur ein theoretisches Szenario, umso mehr die dafür angenommene Häufigkeit. Dennoch kann eine solch quantitative Fassung eines, wenn auch potenziellen, Risikos natürlich bei der Gestaltung einer Handlungsempfehlung im Hinblick auf die zukünftige Landnutzungsplanung vor dem Hintergrund verbleibender Kontaminationen verwendet werden.

Ein Bearbeiter muss aber die Bedeutung der erhaltenen Zahlenwerte (respektive Diagramme) kennen. Zur Erklärung der Interpretationsfähigkeit sollen diese konkreten Berechnungsbeispiele dienen.

### 6.2.4 Qualitätsziele

Eine Zusammenstellung der in den Datenbanken der Software RISC4 enthaltenen Oberflächenwasserqualitätsziele zeigt Tab. 10 für die bearbeiteten Stoffe. Die Europäische Kommission (hervorgehoben für Süßwasser) gibt nur für 1,2-Dichlorethan, Tri- und Tetrachlorethen Zielwerte vor. Daher ist ein Einbezug der übrigen Länderwerte wichtig. Es fällt auf, dass große Differenzen zwischen den Angaben bestehen (bis zu zwei Größenordnungen für 1,2-DCA bei ANZECC gegenüber den Werten der EC WQO). Diese Qualitätsziele werden in RISC4 zur ökotoxikologischen Risikoabschätzung verwendet, indem die für die einzelnen Ausbreitungs-Szenarien berechneten Werte mit den Oberflächenwasserqualitätszielen verglichen werden.

Für die Risikobetrachtung bei der Wirkung auf den Menschen enthält die Software duldbare Referenzdosen, um die Höhe einer Kontamination (oder: Mischkontamination) abzuschätzen, bei denen voraussichtlich noch keine (oder eine akzeptable) systemische (also: nicht-karzinogene) Schädigung auftritt, bzw. Slope-Faktoren, mit denen die inkrementelle Erhöhung der Gefahr an Krebs zu erkranken, errechnet wird.

**Tab. 10:** Tabelle der Oberflächenwasser-Qualitätsziele in RISC für die relevanten Stoffe, jeweils getrennt für Süßwasser- bzw. die marinen Gehalte in µg/l. Gezeigt sind die britischen Werte sowie für Neuseeland/Australien, Europa (hervorgehoben) und Kanada. Für die gezeigten Stoffe enthält die Datenbank keine US-amerikanischen Werte. (Gekürzt aus: SPENCE ET AL. 2001B)

| Stoff                           | UK UKEQS <sup>1</sup> |          |         |          | NZ/Australien ANZECC <sup>2</sup> |        | EC WQO <sup>3</sup> |        | Canada CCREM <sup>4</sup> |             |
|---------------------------------|-----------------------|----------|---------|----------|-----------------------------------|--------|---------------------|--------|---------------------------|-------------|
|                                 | Freshwater            |          | Marine  |          | Freshwater                        | Marine | Freshwater          | Marine | Freshwater                | Marine      |
|                                 | AA µg/l               | MAC µg/l | AA µg/l | ACM µg/l | µg/l                              | µg/l   | µg/l                | µg/l   | µg/l                      | µg/l        |
| <b>Benzen</b>                   | 30                    | 300      | 30      | 300      | 230                               | 170    |                     |        | 370                       | 110         |
| <b>(Mono)chlorbenzen</b>        |                       |          |         |          | 32                                | 32     |                     |        | 1.3 <i>i</i>              | 25 <i>i</i> |
| <b>(1,2)-Dichlorethan (EDC)</b> | 10                    |          | 10      |          | 1100                              | 1100   | 10                  | 10     | 100 <i>i</i>              |             |
| <b>Tetrachlorethylen (PCE)</b>  | 10                    |          | 10      |          | 82                                | 82     | 10                  | 10     | 111 <i>i</i>              |             |
| <b>Trichlorethylen (TCE)</b>    | 10                    |          | 10      |          |                                   |        | 10                  | 10     |                           |             |
| <b>VC</b>                       |                       |          |         |          | 100                               | 100    |                     |        |                           |             |

AA – annual average

MAC – maximum allowable concentration

*i* – interim guideline

<sup>1</sup> – United Kingdom Environmental Quality Standards (statutory and proposed)

<sup>2</sup> – Australia and New Zealand Env. And Conservation Council, Guidelines for Fresh and Marine Water Quality (Draft, July 1999)

<sup>3</sup> – European Commission Water Quality Objective

<sup>4</sup> – Canadian Council of Ministers for the Environment Freshwater Aquatic Life Guideline

Die folgende Tab. 11 zeigt die EPA-IRIS Einteilung der untersuchten Stoffe gemäß ihrer Karzinogenität und die verbale Beschreibung der Untersuchungsgrundlagen (s. „weight-of-evidence“ Klassifizierung der US-EPA s. Tab. 5)

**Tab. 11:** Karzinogenitätsklassifikation der untersuchten Stoffe. Quellen: EPA-IRIS (Quickview), und RAIS toxicity metadata (<http://risk.lsd.ornl.gov/cgi-bin/tox/metadata>) und EPA 2001.

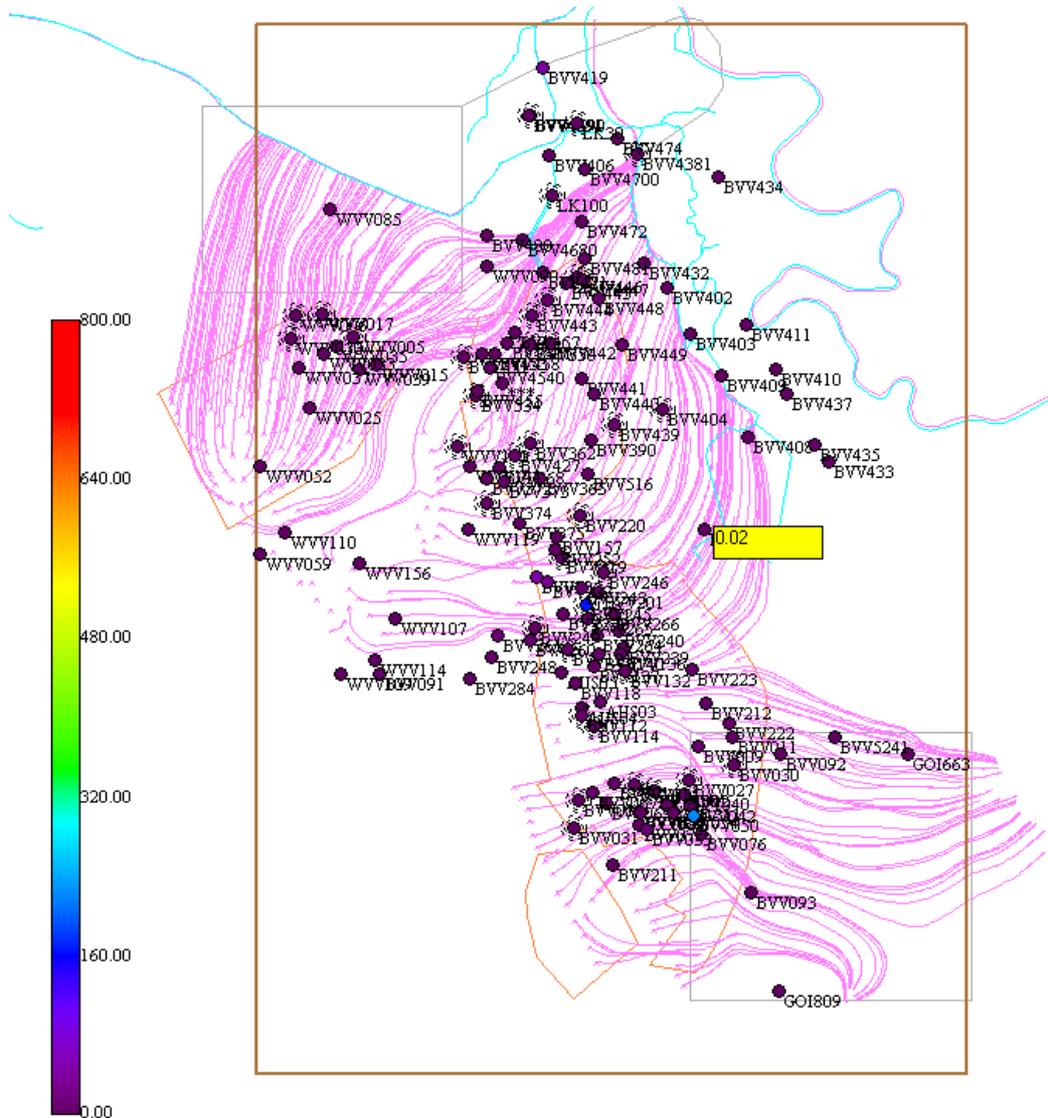
| Stoff       | Klassifikation                                                                              | Verbale Beschreibung (Originaltext)                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                 |
|-------------|---------------------------------------------------------------------------------------------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| a-HCH       | B2 (Probable human carcinogen - based on sufficient evidence of carcinogenicity in animals) | Dietary alpha-HCH has been shown to cause increased incidence of liver tumors in five mouse strains and in Wistar rats.                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                             |
| b-HCH       | k.A./ (C <sup>R</sup> )                                                                     | -                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                   |
| g-HCH       | k.A./ (B2-C <sup>R</sup> )                                                                  | -                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                   |
| d-HCH       | D (Not classifiable as to human carcinogenicity)                                            | Based on no human data and inadequate data from animal bioassays.                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                   |
| cis-1,2-DCA | B2 (Probable human carcinogen - based on sufficient evidence of carcinogenicity in animals) | Based on the induction of several tumor types in rats and mice treated by gavage and lung papillomas in mice after topical application                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                              |
| PCE         | k.A.                                                                                        | -                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                   |
| TCE         | k.A./highly likely carcinogenic in humans (EPA2001)                                         | -                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                   |
| VC          | A (Human carcinogen)                                                                        | Under the Proposed Guidelines for Carcinogen Risk Assessment (U.S. EPA, 1996), it is concluded that VC is a known human carcinogen by the inhalation route of exposure, based on human epidemiological data, and by analogy the oral route because of positive animal bioassay data as well as pharmacokinetic data allowing dose extrapolation across routes. VC is also considered highly likely to be carcinogenic by the dermal route because it is well absorbed and acts systemically.                                                                                                                                                                                                                                                                        |
| PCP         | B2 (Probable human carcinogen - based on sufficient evidence of carcinogenicity in animals) | The classification is based on inadequate human data and sufficient evidence of carcinogenicity in animals: statistically significant increases in the incidences of multiple biologically significant tumor types (hepatocellular adenomas and carcinomas, adrenal medulla pheochromocytomas and malignant pheochromocytomas, and/or hemangiosarcomas and hemangiomas) in one or both sexes of B6C3F1 mice using two different preparations of pentachlorophenol (PeCP). In addition, a high incidence of two uncommon tumors (adrenal medulla pheochromocytomas and hemangiomas/hemangiosarcomas) was observed with both preparations. This classification is supported by mutagenicity data, which provides some indication that PeCP has clastogenic potential. |
| Benzen      | A (Human carcinogen)                                                                        | Under the proposed revised Carcinogen Risk Assessment Guidelines (U.S. EPA, 1996), benzene is characterized as a known human carcinogen for all routes of exposure based upon convincing human evidence as well as supporting evidence from animal studies. (U.S. EPA, 1979, 1985, 1998; ATSDR, 1997).                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                              |
| MCB         | D (Not classifiable as to human carcinogenicity)                                            | No human data, inadequate animal data and predominantly negative genetic toxicity data in bacterial, yeast, and mouse lymphoma cells.                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                               |
| HCB         | k.A.                                                                                        | -                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                   |

<sup>R</sup>: Quelle RAIS

EPA2001: Quelle (EPA 2001), S. 3-49

## 6.2.5 SADA

SADA wird für das Screening gemessener und interpolierter Werte eingesetzt (Abb. 41). Die Ergebnisse werden als Berichte zur Visualisierung ins Portal als HTML-Seiten importiert..



**Abb. 41:** Darstellung der Messstellen und Messwerte für a-HCH sowie Bahnlinien (Quartär, Stand Goitsche 69mNN) und Vorfluter in SADA. Mit diesen Daten werden eco- bzw. Human Health Risk für vorgegebene Zielwerte durch Markierungen oder Tabellen dargestellt. Beim Überfahren mit dem Mauszeiger erscheint ein Label-Wert (hier: Messwert).

Interpoliert wird mit Ordinary Kriging oder IDW. Zur Darstellung der Überschreitung von Zielwerten kann in Karten die Fläche oder im integrierten 3D-Viewer eine „Wolke“ als Umhüllende der Untergrundvolumina gezeigt werden. Ausserdem ist die Darstellung von Blöcken möglich, für die die Überschreitung prognostiziert wird. Auch hier wird die Darstellung mit den Bahnlinien und den Umrissen der Betriebsgelände, Deponien oder Kippen und Vorfluter kombiniert. Eine echte Anknüpfung der Messpunkte an die Untergrundgeologie ist nicht möglich. Hinsichtlich der Interpretation der Verbreitung aufgrund der Durchlässigkeiten ist SADA hier MVS unterlegen. Die enthaltenen Datenbanken für Screening-Zielwerte beim Risk Assessment sind nicht ohne weiteres für Deutschland nutzbar.

### 6.3 3D-Visualisierung

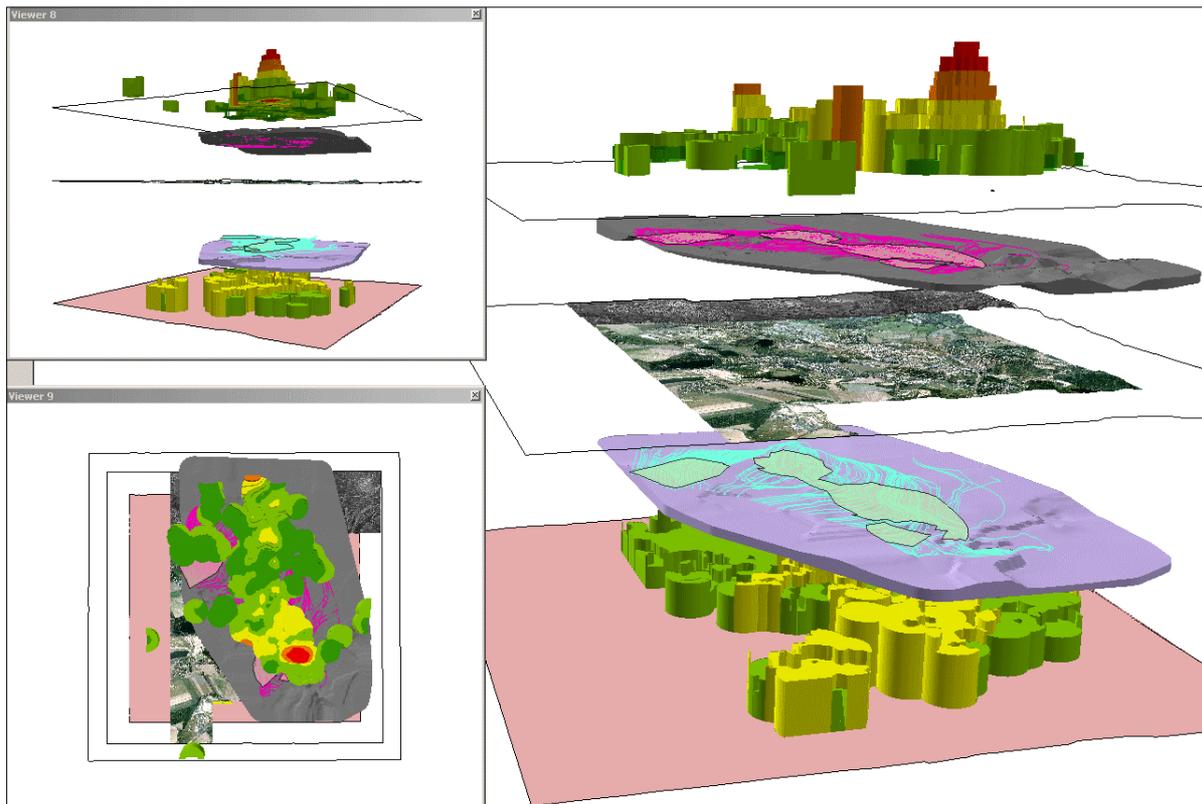
Sowohl beim geologischen Raummodell wie bei den Interpolationsverfahren und den ihnen vorausgehenden Methoden der explorativen Datenanalyse spielt die 3-dimensionale Visualisierung eine wichtige Rolle zum übergreifenden Systemverständnis. Die Abbildung in 2-dimensionalen Karten verliert, wie erwähnt, stark an Verständlichkeit.

Daher ist zur webgestützten Replikation der Funktionalität, die die Desktopsoftware beim nicht integrierten Arbeiten mit den Einzelprogrammen bietet, der Versuch wichtig, 3D-Abbildungen im Internet darzustellen. Der Darstellung der Ergebnisse dieses Versuchs dient dieser Abschnitt.

- ArcScene
- Google Earth
- VRML

#### 6.3.1 ArcScene

ArcScene ist das ESRI-Werkzeug zur dreidimensionalen Darstellung von GIS-Inhalten. Es handelt sich hierbei mehr um ein 3D-GIS als nur ein Visualisierungswerkzeug, da mit dem 3D-Analyst auch Oberflächen interpoliert oder TINs erzeugt werden können. ArcScene kann



**Abb. 42:** ArcScene – 2,5-D- Darstellung der regionalisierten g-HCH Gehalte im oberen bzw. unteren Grundwasserleiter (als 3D-Shapefiles) mit zugehörigen Bahnlinien, dazwischen die Geländeoberfläche. Es wurden dieselben gepufferten und ausgeschnittenen Polygone aus der 2D-Interpolation verwendet. Die Höhe der Zylinder ergibt sich durch Extrusion der Pufferfläche proportional zur Kontaminationshöhe. Orthofotos und die Umrisse der Betriebsflächen sind auf das digitale Geländemodell projiziert.

die meisten GIS-Daten, die in ArcMap darstellbar sind, auch darstellen (Abb. 42). Datenbanken wie die ArcSDE oder Shapedateien können verwendet werden.

Digitale Geländemodelle, Orthofotos, Bahnlinien etc. können korrekt georeferenziert dargestellt werden. Einzig ArcScene bietet diese exakte Darstellung, die am ehesten der eines GIS entspricht. Die einzelnen Layer werden übereinandergestapelt dargestellt, wobei Extrusionshöhen für Attribute, Explosions-Distanzen, Überhöhungen und vieles mehr gewählt werden können.

Die Darstellung 3-dimensionaler Volumenkörper (aus MVS) ist mit 3D-Shapefiles möglich. Mit Hilfe eines speziellen Datenmodells für die Erfassung von Bohr- und Grundwasserdaten („ArcHydro“/ Groundwater, STRASSBERG 2005) ist die Darstellung und Berechnung von Volumenkörpern möglich. Diese werden in Software-Werkzeugen wie *GMS* interpoliert und als Textdatei exportiert. Mit ArcHydro und einer speziell dafür entwickelten Werkzeugleiste (bzw. den dahinter stehenden Algorithmen, wird das exportierte Modell als XML-Datei importiert und der Volumenkörper mit Hilfe von „Multipatch“-Geometrien dargestellt. Eine Erweiterung dient dazu Parametrisierung und Modellierung für Modflow durchzuführen. Auf ähnliche Weise lassen sich auch Bohrungen darstellen und den durch die Volumenkörper umrissenen Grundwasserleitern zuordnen. Hier wurden nur 3D-Shapefiles verwendet, da die Erweiterung, die zum Einlesen der XML-Dateien dient, reproduzierbar bei wenigen Tausend Punkten mit einem Überlaufer abstürzte, so dass nur Teilkörper in der Auflösung von 10x10 aus dem geologischen Raummodell eingelesen werden konnten. Vermutlich ist dies ein korrigierbarer Fehler in der Visual Basic Programmierung, die aufgrund der viel höheren Anzahl darzustellender Dreiecke bei der durchzuführenden Triangulation an ihre Grenzen stößt.

Sollen Ergebnisse aus ArcScene im Webportal dargestellt werden, müssen sie als VRML-Szenengraph exportiert werden.

### 6.3.2 Google Earth

#### 6.3.2.1 Google Earth und ArcGIS

Google Earth ist ein freier Viewer für einen „digitalisierten Globus“. Insbesondere Luft- und Satellitenbilder des gesamten Globus, in neuerer Zeit auch zunehmend Vektordaten wie Straßen und Sehenswürdigkeiten werden allen Nutzern serverbasiert zur Verfügung gestellt.

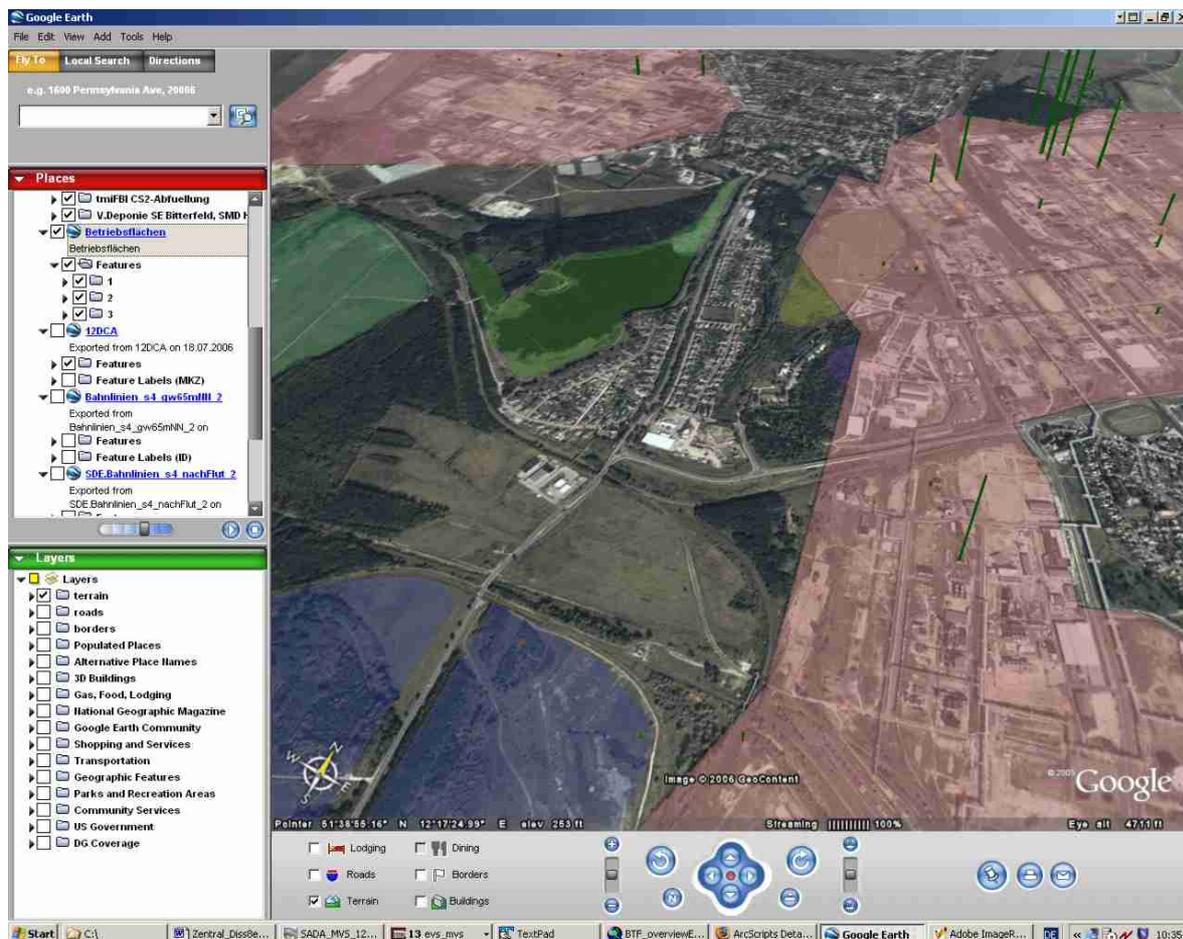
Georeferenzierte Daten lassen sich zusätzlich aus ArcMap oder ArcView mit Hilfe spezieller Werkzeuge (*shape2Earth*, *shape2kml*) in das KML-Format (*keyhole markup language*) von Google Earth exportieren und dann als nutzerdefinierte Orte darstellen. Die Schwierigkeit beim Export der Daten im Untersuchungsgebiet lag darin eine Transformation zu finden, die die Daten in deckungsgleicher Projektion in Google Earth abbildet. Dazu wurde den Daten in ArcCatalogue DHDN4 (Deutsches Hauptdreiecksnetz, Zone 4, Potsdam Datum) zugewiesen und ein angepasstes „falsches“ *False Northing* (-550m) / *False Easting* (+4500120m) eingestellt.

Das Problem der Deckungsgleichheit ist wohl bei Google Earth selbst zu suchen- eine Ungenauigkeit der Projektion durch weltweite Verwendung von WGS 84 ist die mögliche Ursache. Google Earth bietet eine überzeugende Darstellung, die aber über die Unzulänglichkeiten bei der Georeferenzierung hinwegtäuscht. Auch wenn die importierten Daten in sich kohärent sind (durch Verwendung einheitlicher Transformationsparameter) muss die Darstellung des digitalen Geländemodells und der fotografischen

Geländedarstellung nicht korrekt sein. Häufig sind die Google Earth Satellitenbilder nicht aktuell (wie man am Stand der Goitsche erkennen kann), und das digitale Geländemodell (vielfach aus SRTM-Daten errechnet) lässt an manchen Orten große Fehler erkennen.

Beim Export kann man ein Attribut einstellen, das als Label-Attribut von Google Earth verwendet werden soll. Ausserdem ist es möglich ein Attribut, beispielsweise den mittleren Stoffgehalt, als Extrusionswert anzugeben. Der entsprechende Wert wird dann bei Punktdaten als „Stab“ an der Gelände-Oberfläche angezeigt, oder bei Polygonen als Höhe der Polygone verwendet (Abb. 43). Erzeugt man aus Punktdaten von Messungen zuerst die zugehörigen Voronoi-Polygone, so kann man ein „Pflaster“ auf der Geländeoberfläche (auch halbtransparent) darstellen, dessen Höhen, ähnlich wie bei der Darstellung in ArcScene (Abb. 42) den Kontaminationshöhen entsprechen.

Die Exportdatei kann einfach per Mail weitergegeben oder auf einem Webportal zum Download angeboten werden. Insgesamt eignet sich Google Earth daher wohl als einfache Lösung, wo es darum geht räumliche Gegebenheiten wie die Lage einer Messstelle oder einer Deponie zu kommunizieren. Allerdings darf es wohl nicht den Anspruch „kataster“-genauer Vermessungsdaten zu liefern. Für den Gebrauch von Google Earth spricht seine weite Verbreitung, einfacher und intuitiver Gebrauch und die Tatsache, dass es kostenlos erhältlich ist. Die Bildqualität hat sich immer wieder verbessert und reicht für die oben genannten Nutzungen häufig aus. Dafür erspart es zusätzlich die Anschaffung von Luft-Bildmaterial und dessen Handling in Datenbanken und/oder Geoinformationssystemen.

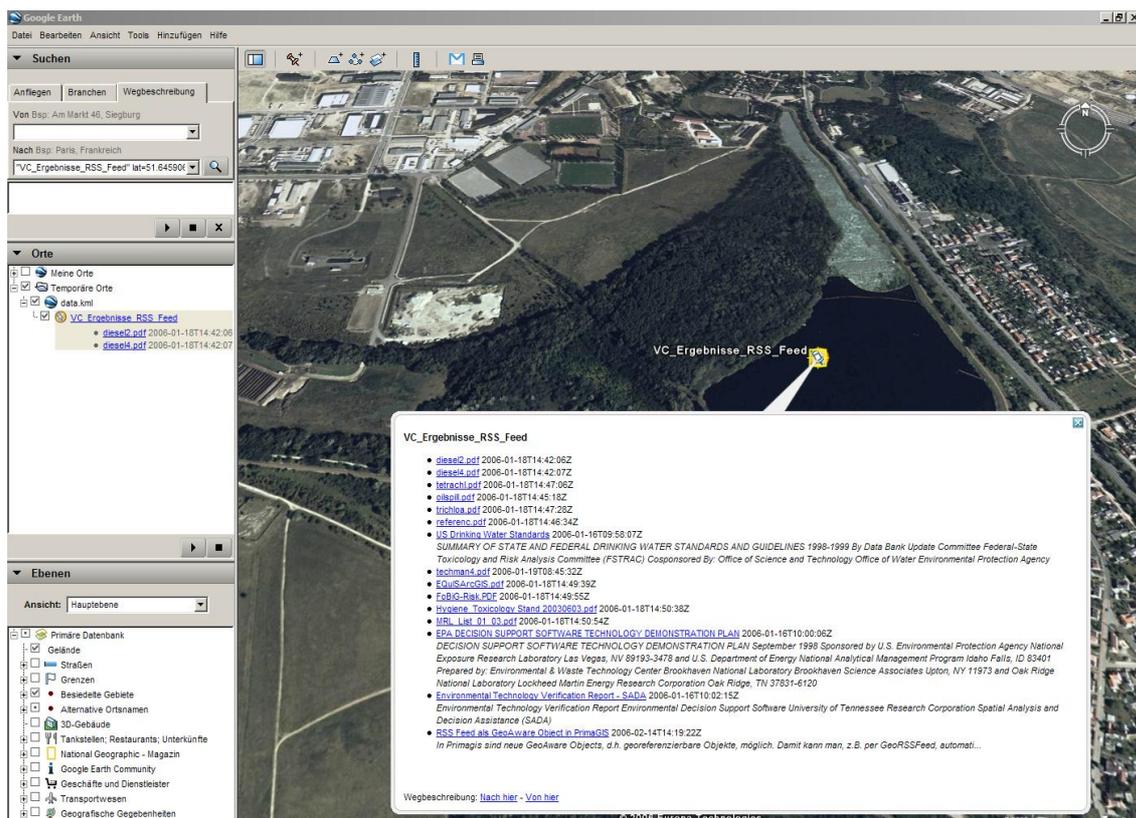


**Abb. 43:** Google Earth mit Darstellung der aus ArcGIS exportierten Betriebsflächen, Kippen und Messdaten (als "Stäbe"), transparent überlagert.

### 6.3.2.2 Google Earth und PrimaGIS

Abb. 44 zeigt Google Earth als „3D-Browser“ mit einem benutzerdefinierten Wegpunkt als Export aus PrimaGIS. In PrimaGIS wird eine Lokalität interaktiv von einem berechtigten Benutzer festgelegt und dieser ein vorher definierter RSS-Feed<sup>3</sup> als Inhalt für das hier anzuzeigende Popup-Fenster zugewiesen. In Plone können RSS-Feeds ihren Inhalt z.B. aus einer Plone-Datenbank-internen Volltextsuche beziehen. Beispielsweise könnte man für den SAFIRA-Standort, oder für jede der Messstellen, einen RSS Feed definieren, der als Inhalt die Suche nach „SAFIRA“ bzw. „MKZ\_XYZ123“ enthält (natürlich sind auch Wildcards/Jokerzeichen/Reguläre Ausdrücke möglich), oder man kann den Inhalt eines der Attributfelder eines Shapefiles als Suchbegriff definieren (z.B. das Feld „Schadstoffinhalt“ des Layers „Deponien“). Inhalte, die in Plone mit einem Namen, Vermerk oder Inhalt abgelegt werden, der diesem Suchbegriff entspricht, werden von der Volltextsuche automatisch gefunden und angezeigt, wenn man mit dem Mauszeiger über die festgelegte Lokalität zeigt. Die gefundenen Inhalte werden als klickbare Hyperlinks angezeigt, so dass man direkt zu den für eine Messstelle gefundenen Inhalten im Content-Management-System springen kann. Alle neu hinzugefügten passenden Inhalte werden automatisch auch gefunden. Diese dynamische Suche lässt sich als (statischer) Layer nach Google Earth exportieren und dort anzeigen.

Diese Funktionalität entsteht durch die PrimaGIS Möglichkeit die sogenannten *GeoAware-*



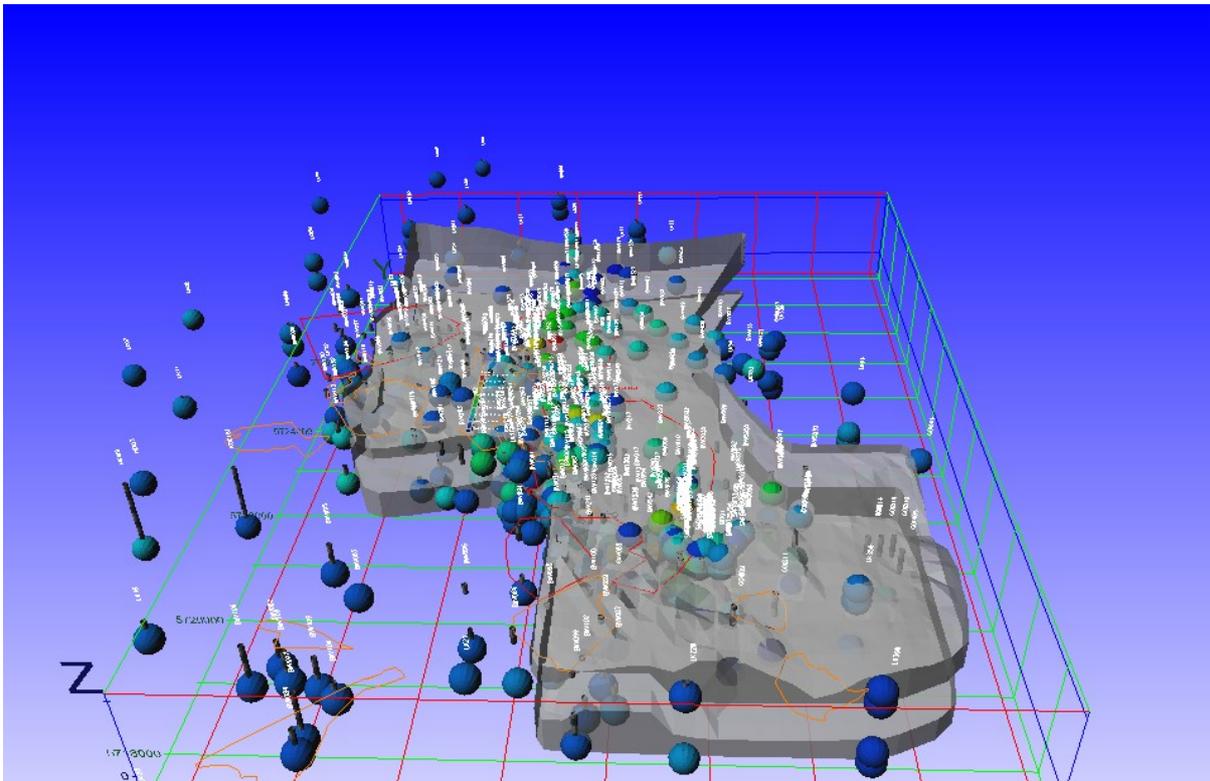
**Abb. 44:** Google Earth mit einem aus dem CMS exportierten benutzerdefinierten Punkt (Grube Johannes/Silbersee), an dem wie in Abb. 20 ein RSS-Feed eingebunden ist. Die angezeigten Hyperlinks sind Fundstellen für einen vordefinierten Suchbegriff, nach dem das CMS durchsucht wurde. Beim Anklicken wird das zugehörige Dokument im CMS aufgerufen. So lassen sich – „halb dynamisch“ kontextsensitive, georeferenzierte Suchen durchführen und die Ergebnisse in Google Earth darstellen.

*Objects* als KML (keyhole markup language) - Dateien zu exportieren, die wiederum in Google Earth dargestellt werden. Die Voraussetzung dafür ist, dass den Daten die korrekte Projektion zugewiesen ist, in der sie vorliegen (in PrimaGIS für die Daten im Untersuchungsgebiet: EPSG Code 31468- entsprechend DHDN4, Deutsches Hauptdreiecksnetz, Zone 4, Potsdam Datum), damit sie in Google Earth, das das WGS84 System (EPSG 4326, World Geodetic System 1984 als Datum und Ellipsoid-Einstellungen) verwendet, korrekt darstellbar sind. Nur PrimaGIS Layer lassen sich auf diese Weise exportieren, aber – und das macht den Vorteil bei der Verwendung von PrimaGIS gegenüber UMN Mapserver allein aus – jeder Art von Content in Plone kann als PrimaGIS-Layer georeferenziert dargestellt werden.

### 6.3.3 VRML

VRML (Virtual Reality Modelling Language), eine Auszeichnungssprache zur Darstellung von 3D Objekten und sein Nachfolgeformat X3D werden zur Darstellung von 3D-Szenengraphen über das Internet seit Jahren verwendet. Lange fehlende Standardisierung und die Notwendigkeit für ein Plugin im Browser zur Darstellung haben VRML zur Nischenanwendung gemacht. Im vorliegenden Fall scheint es dennoch geeignet zu sein, da nur innerhalb eines definierten Benutzerkreise gearbeitet werden soll.

MVS und ArcScene exportieren VRML (s. Abb. 45), so dass die modellierten Szenen interaktiv über das Web zugänglich sind. Allerdings sind die Modelle unveränderlich, es geht also viel von der Interaktivität von MVS oder ArcScene verloren, übrig bleiben Rotationen und unterschiedliche Beleuchtungsoptionen. Die Modelle können ins Portal integriert werden.



**Abb. 45:** Screenshot eines VRML Szenengraphen aus MVS-Export. Die Meßstellen (weiße Beschriftung eingeblendet) und Entnahmetiefen sind in das Gelände „eingehängt“. Der Betrachter kann das Modell drehen und untersuchen, aber keine Daten hinzufügen oder weglassen etc. Die Navigationselemente sind nicht gezeigt.

<sup>3</sup> Real Simple Syndication- eine Methode, um Nachrichten - oder allgemein: Inhalte - zu sammeln und über das Web zur Verfügung zu stellen

## 6.4 Systemintegration

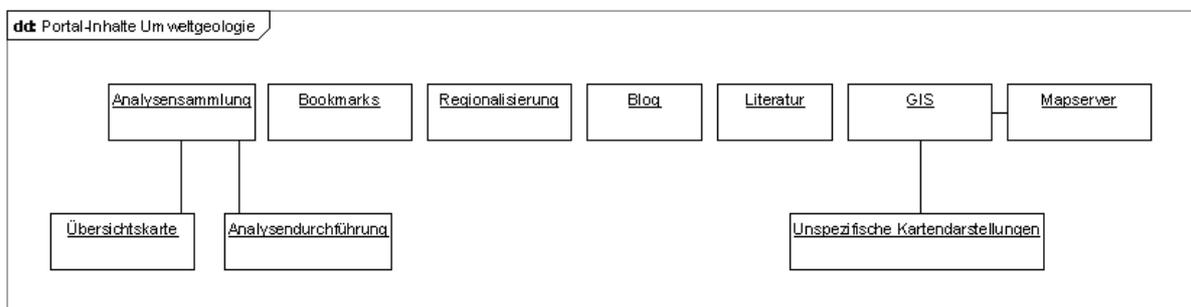
Die Integration der bisher separat voneinander vorliegenden Ausgangsdatenhaltung und – Bearbeitung mit der Erstellung und Präsentation von Ergebnissen für das Risk Assessment wurde wie folgt durchgeführt:

- Integrierte Datenhaltung
- Integrierte Methodenhaltung durch Skripte im RStatServer → Interpolationen, explorative Datenanalyse, Dienstorientierte Architektur
- Workflow-Management, Rollenverteilung, Sicherheitsmechanismen
- Mapping-Komponenten
- Abfragefunktionalitäten

### 6.4.1 Erfolg

Mit den in Kapitel 5.2 „Integration durch das Content Management System“ vorgestellten Komponenten wurde ein Internet- bzw. Intranet-Portal aufgebaut. Die Inhalte umfassen die folgenden Punkte (Abb. 46):

- Analysensammlung
- Regionalisierung
- GIS
- Mapserver
- Bookmarks
- Literatur
- Blog



**Abb. 46:** Portal-Inhalte Umweltgeologie (als Schema der obersten Ordner-Hierarchie)

Dabei dienen die Verzeichnisse *Analysensammlung* und *Regionalisierung* der Sammlung der stoff- und raumspezifischen Analysen. *GIS* und *Mapserver* sind für die Darstellung interaktiver Karten zuständig, *Bookmarks*, *Blog* und *Literatur* dienen der Speicherung anderer allgemeiner kontextrelevanter Dokumente.

Die Struktur ist sehr variabel- durch das Hinzufügen eines neuen Ordners auf der obersten Ebene in der Plone-Portal-Instanz wird der Ordner automatisch in die Struktur aufgenommen.

Im Ordner *Analysensammlung* findet die eigentliche, im vorangegangenen Kapitel 5 beschriebene Auswertung der Daten beim beschriebenen Screening statt. Dazu dient der Link zur *Übersichtskarte*, mit deren Hilfe das Untersuchungsgebiet festgelegt wird, und die Formulare zur *Analysendurchführung*.

Ergebnisse der Regionalisierung mit verschiedenen Werkzeugen werden in „Regionalisierung“ gespeichert, die Ergebnisse des Risk Assessment können in der Analysensammlung hochgeladen werden.

### 6.4.2 Diskussion

Es wurde bereits erwähnt, dass die Berechnung mit *R* und deren Übertragung mit Hilfe von *SOAP* nicht auf Geschwindigkeit optimiert sind. Dennoch resultiert aus der Automatisierung ein beträchtlicher Geschwindigkeitsgewinn bei der Bearbeitung.

Die Ausgabe von Datensätzen in der Form, wie sie für die verwendete Risk Assessment Software verwendet wird, erspart deren Auswahl und Bearbeitung per Hand bzw. mit anderen Werkzeugen und dient damit auch einer Beschleunigung des gesamten Auswertungs- und Berichtserstellungsprozesses..

Die Nachvollziehbarkeit der durchgeführten Untersuchungen durch die zentrale Speicherung der Daten und logischer Sichten auf Teildatensätze, die untersucht werden, sowie die formalisierte Durchführung der Analysen und deren Speicherung und Ausgabe als vorformatierte Berichte bewirken Vorteile im Hinblick auf die Nachvollziehbarkeit und Qualitätskontrolle. Wo der Export von Datensätzen bzw. deren Umformung in ein anderes Dateiformat, entfällt, ist sichergestellt, dass auf aktuelle Daten zugegriffen wird. Logische Datensichten in der Datenbank können zeitliche „Schnappschüsse“ auf einen Datenzustand abbilden oder jede andere beliebige Auswahl eine Untermenge von Messwerten.

Das Portal dient der gemeinsamen Bearbeitung raumbezogener Phänomene und stellt dafür Werkzeuge zur Verfügung, die in einem herkömmlichen GIS oder überhaupt den separaten Software-Bestandteilen nicht enthalten sind und macht damit neue, innovative Bearbeitungen überhaupt erst möglich.

Die Rechtevergabe an Objekte, die in der ZOPE-Datenbank gespeichert sind, durch den integrierten Workflow sichert Vertraulichkeit bei sensiblen Daten und Übersichtlichkeit, wo nur eine Auswahl an Daten präsentiert werden soll. Damit ist das Portal neben der Verwendung für die Bearbeitung bei der Risikoabschätzung auch für die Risikokommunikation ideal geeignet.

## 7 Schlussfolgerungen und Ausblick

Beispielhaft wurde eine Gefährdungsabschätzung für das Gebiet einer regionalen Grundwasserkontamination durchgeführt. Die Daten, Modelle und Ergebnisarten bei der risikobasierten Bearbeitung von Standorten mit regional kontaminiertem Grundwasser sind aufgrund ihrer Unterschiedlichkeit und Menge nur miteinander verschnitten und unter Zuhilfenahme neuer Methoden insgesamt zu beurteilen.

Die Verschneidung des geologischen Raummodells mit den Modellierungen der Grundwasserströmung und den regionalisierten Stoffdarstellungen ermöglichen es erst durch die Koppelung der Strukturen und Modelle, ein Gesamtprozessverständnis zu gewinnen.

Für die Integration der Modelle ist eine Vielzahl von Bearbeitungsschritten notwendig, die meist mit unterschiedlicher Software ausgeführt wird. Häufig sind GIS und Datenbanken beteiligt, wobei diese oft lediglich zur Datenspeicherung und räumlichen Auswahl der Proben dienen. Diese Aufgaben sind web-gestützt und unter Zuhilfenahme des Content-Management-Systems mit einem Web-GIS-Modul zur räumlichen Darstellung und Auswahl vereinfacht durchführbar. Das Ergebnis sind Untermengen der ursprünglich zur Verfügung stehenden Gesamtdatenmenge, die durch räumliche oder attributive Auswahl gewonnen werden. Diese können automatisiert in den Formaten ausgegeben werden, wie sie ggf. für die Weiterbearbeitung in Spezialsoftware benötigt werden.

Außer dieser Generierung von Eingangsdaten zur Bearbeitung mit externer Software lassen sich aber viele der ursprünglich separaten Datenhaltungs- und -analyseaufgaben auch in den Applikationsserver integrieren. Gerade die zentrale Datenhaltung auf einem Server und die weitgehende Integration in relationalen Datenbanksystemen mit räumlichem Aufsatz ersetzt zumindest teilweise das GIS. Mit Hilfe des vorgestellten *RStatServers* und dessen Integration in das Plone-Webportal lassen sich zahlreiche Aufgaben zur explorativen Datenanalyse und Regionalisierung z.B. durch geostatistische Interpolation automatisieren. Die gezeigten Analysen- und Interpolationsmethoden sind mit dem neuen System auch z.B. für die stochastische Simulation oder andere Interpolationsmethoden erweiterbar. Durch das Wegfallen von Daten-Umformungsaufgaben bei der Untersuchung und Interpolation wird Bearbeitungszeit eingespart und Fehlerquellen fallen weg. Ergebnisse können als Datei zum Download angeboten werden, z.B. druckfertig formatierte Karten als PDF, oder über den Browser als Bild angezeigt werden.

Die Bearbeitung mit externer Software zur Risikoabschätzung ist aufgrund der darin enthaltenen Modelle und Annahmen (und der nicht offengelegten Schnittstellen) weiterhin notwendig und empfehlenswert. Eine Integration in den Applikationsserver scheint schon deshalb nicht sinnvoll, weil die durchgeführte Methodik ausdrücklich „allgemein zugänglich und akzeptiert“ sein soll und weil die Modelle *peer-reviewed* und evaluiert sein müssen. Dies ist für die getesteten Programme RBCA und RISC4 der Fall. Auch SADA gehört zu den von der US-EPA selbst verwendeten Programmen. Eine Anpassung der enthaltenen Datenbanken zu Stoffdaten und Toxizitätszielwerten sowie den Szenarien der Exposition an die deutschen Verhältnisse bzw. speziellen Projektvorgaben ist möglich und sicherlich sinnvoll.

Die Bearbeitung lässt sich trotz Verwendung externer Programme beschleunigen, indem das Eingangsformat durch den Applikationsserver generiert wird. Damit fallen langwierige manuelle Eingaben in diese Programme weg. Die Ergebnisse werden in tabellarischer Form inklusive Kurvendarstellungen in Diagrammen für Abbaumodelle als Bericht gedruckt

(RBCA, RISC) oder als HTML-Seiten exportiert (SADA) und lassen sich in der Datenbank des Content Management Systems speichern und der Volltextsuche zugänglich machen.

Die Darstellung von Bohrpunkten, Bahnlinien, Betriebsflächen, Schichtdaten, geologischen Volumenkörpern etc. lässt sich durch unterschiedliche Software optimieren. Traditionelle Geo-Informationssysteme arbeiten meist mit einer 2D-Darstellung. Diese wird vielen Ansprüchen nicht gerecht. Software wie GRASS und ArcScene arbeiten mit 2,5D-Szenen oder 3D-Volumenkörpern, wobei die Visualisierung unterschiedlich durchgeführt wird. Aufgrund seiner Integration in die Arc-Produktpalette ist vor allem für einfache Darstellungen, die nicht mit z.B. Grundwassermodellierung gekoppelt werden müssen, ArcScene geeignet. Die Anbindung echter Modellierung ist hier schwieriger.

Die Modellierung bzw. Interpolation von Grundwasserkontaminationshöhen innerhalb der Grundwasser-Körper lässt sich dreidimensional in MVS durchführen. Anwendungsgebiete für MVS sind insbesondere die fortgeschrittene 3D-Visualisierung, Profilschnittdarstellung mit Stoffverbreitungen, Karten für die Überschreitungshöhen- oder Wahrscheinlichkeit für das Auftreten eines Zielwertes. Gerade bei der geforderten Fähigkeit Unsicherheit zu quantifizieren, sind die Krigingmethoden von MVS geeignet, darzustellen, wie gut die Schätzung der Stoffverbreitung ist, bzw. wo eine Optimierung der Messpunktverteilung angeraten ist. Diese Ergebnisse lassen sich mit Darstellungen der Geländeoberfläche, Betriebsflächen, Bohransatzpunkte und Grundwasser-Probennahmetiefen kombinieren. Interaktivität mit diesen Modellen spielt für das Verständnis des Aufbaus eine wichtige Rolle. Ein kostenloser Betrachter (*Moyager*), den sich Benutzer installieren können, reproduziert diese Interaktivität teilweise (es ist in *Moyager* nicht möglich Datenlayer an- oder auszuschalten oder Parameter zu verändern) – zur kompletten Interaktion ist MVS selbst notwendig. Volumenberechnungen, z.B. der Untergrundkörper, in denen eine Überschreitung festzulegender Zielwerte berechnet wird, sind mit MVS möglich. Damit kann z.B. eine Volumenabschätzung des kontaminierten Grundwasserkörpers erfolgen.

Sowohl ArcScene- wie auch MVS-Visualisierungen können als VRML (virtual reality modelling language) exportiert werden. Damit ist ihre Darstellung über das Web in einem herkömmlichen Browser möglich. Somit lässt sich auch die 3D-Darstellung in das vorgestellte System integrieren.

Das GIS-Modul PrimaGIS im Zope-Applikationsserver übernimmt die Visualisierung nicht-statischer Karten. Damit stellt es ein wichtiges Instrument zur Interaktion des Benutzers mit den zentral gehaltenen räumlichen Daten dar. Layer können wahlweise zu- oder abgeschaltet werden. Autorisierte Benutzer können die Darstellungsweise verändern und neue Daten hinzufügen. Neue Daten können im Dateisystem hinzugefügt werden, oder z.B. aus WebServices von anderen Anbietern. PrimaGIS ist in der Lage als Client WMS (web map services) einzubinden und darzustellen. Damit eröffnen sich ganz neue Möglichkeiten zur integrierten Darstellung von über das Netz zugänglichen Daten. Auf der anderen Seite können die im Dateisystem vorhandenen Geodaten über die WMS-Server-Schnittstelle des UMN Mapservers so auch anderen Anwendern zur Verfügung gestellt werden. Damit öffnet sich das vorgestellte System der Integration in eine GDI (Geodateninfrastruktur).

Benutzer legen im Kartenbild Ausschnitte zur Untersuchung fest, die im Folgenden den Projektrahmen bilden. Karten-Projektionen sind möglich und werden nötigenfalls *on-the-fly* durchgeführt. Eine kontextsensitive Abfrage der Attributdaten im Kartenbild wird mit der Volltextsuche des Content-Management-Systems verknüpft, um für festgelegte Lokalitäten sämtliche im System erfassten semantisch verwandten Daten im Kartenbild darzustellen. Die

dazu verwendeten Softwareklassen sind über die GeoAware-Schnittstelle von PrimaGIS als RSS-Feed (nicht mit GeoRSS zu verwechseln) zugänglich. Diese Art der Wissens-Visualisierung stellt ein Novum dar, das mit herkömmlichen GIS nur äußerst schwierig zu reproduzieren sein dürfte.

Weiterhin neu sind die vorgestellten Möglichkeiten zum direkten Export der Geodaten-Layer aus PrimaGIS im XML-Dialekt KML für Google Earth. Damit lässt sich nicht nur der oben erwähnte Kontext-RSS-Feed darstellen, sondern alle Arten von Inhalten, die sich in ZOPE/Plone speichern lassen (da sich alle Inhalte über die IGeoAware-Schnittstelle für Primagis räumlich visualisieren lassen).

Da es für diese Inhalte praktisch keine Einschränkung gibt, und ein IGeoAware-Interface für praktisch jede Art von Inhalt, ob Text, Präsentation, Film oder Audio-Datei etc. vergeben werden kann, sind völlig neue Arten der Visualisierung im „Earth Browser“ Google Earth möglich. Außerdem ist die Möglichkeit interessant, räumliche Daten wie Punkt-, Linien-, oder Polygonshapes zur Anzeige für Google Earth aus einem herkömmlichen GIS zu exportieren und in Kombination mit den Daten aus PrimaGIS zu visualisieren.

Das vorgestellte browsergestützte System ist von praktisch jedem Arbeitsplatz zugänglich, der einen Netzzugang hat und autorisiert ist. Die Bearbeitung von verteilten Arbeitsplätzen aus über das Netz ist damit möglich. Neben der Benutzersteuerung durch Rechtevergabe und eingebaute Workflows hat das viele Vorteile: Benutzer müssen sich weder um die Datenhaltung noch um Software-Installation oder –Wartung kümmern. Sie erlernen nur noch die (verhältnismäßig einfache, weil begrenzte) Bedienung des Portalsystems.

Das Content-Management-System bietet eine rechte- und workflow-gesteuerte Benutzeroberfläche für Sach- und Raumdaten aus dem Dateisystem und relationalen Datenbanken sowie alle Inhalte der integrierten Datenbank. Eine Volltextsuche ermöglicht z.B. die Suche nach einem bestimmten Wort oder Wortbruchstück in Attributdaten der PrimaGIS-GeoDataLayer, PowerPoint-Präsentationen, Hyperlinks, Metadaten oder wissenschaftlichen Artikeln, die als Adobe-PDF-Dateien abgelegt sind. Autorisierte Benutzer können so nicht nur schnell und effektiv Datensätze mit oder ohne Raumbezug auffinden, sondern auch bearbeiten, analysieren oder hinzufügen. Die Integration der internen Datenbank ermöglicht die Vergabe von Metadaten für alle Datensätze. Außerdem besitzt sie die bekannten Vorteile der Mehrbenutzerfähigkeit und des Rollback (fortgeschrittene „Undo“-Funktion, also die Wiederherstellung auf einen bestimmten Systemzeitpunkt nach Benutzerfehlern oder Systemausfällen).

Insgesamt stellt das System eine Möglichkeit dar, viele der ursprünglich separaten Anwendungen „unter einem Dach“ zu vereinigen. Zusätzlich hält es viele neue Möglichkeiten bereit, die in aktuellen Geodateninfrastrukturen und der zunehmenden Vernetzung wichtig sind. Einige davon sind in herkömmlichen GIS nicht vorhanden.

Die beispielhafte Durchführung einer Risikoabschätzung zeigt auf, welche Schritte dafür notwendig sind. Dabei wird auch klar, dass die vollständige Integration der Software für die vorgestellte Aufgabe weder möglich, noch nötig ist. Die Bearbeitung der gestellten Aufgabe mit einem integrierten System ermöglicht die Beschleunigung des Arbeitsablaufs und eliminiert Fehlerquellen. Ergebnisse sind besser nachvollziehbar, da sie alle aus dokumentierten Datenquellen mit nachvollziehbaren Methoden gewonnen werden. Alle Ergebnisse können online in der integrierten Datenbank des Content-Management-Systems oder den angeschlossenen relationalen Datenbanken gespeichert und über die

Benutzeroberfläche auch wieder abgefragt werden. Groupware-Funktionalität wie WebLog und E-mail ergänzen diesen Aspekt für die arbeitsgruppeninterne Verwendung.

Das System ist durch vorhandene Plone-Produkte und die Verwendung der Python-Skript-Sprache für sehr viele Zwecke erweiterbar. Die durchzuführende Statistik kann mit kurzen Skripten in der interpretierten Sprache *R* durch die Bearbeiter selbst ergänzt werden. Dadurch gewinnt die Auswertefunktion an Interaktivität, was dem Verständnis der durchgeführten Analysen zugute kommt.

Der web-gestützte Zugang hat somit den Vorteil des „one-stop-shopping“ für viele Anwendungen und ermöglicht gleichzeitig, da für die meisten Aufgaben außer einem Browser keine weitere Software notwendig ist, die orts-, zeit- und plattform unabhängige Zusammenarbeit vieler Benutzer an einem Projekt der vorgestellten Größe. Eine Qualitätsverbesserung und Beschleunigung bei der Bearbeitung von Aufgaben beim Risikomanagement großer kontaminierter Standorte sollen daraus resultieren.

Gerade in der Erweiterbarkeit ist eine große Chance für das System zu sehen- das vorgestellte Konzept kann für viele Anwendungsbereiche im wissenschaftlichen Bereich, des E-Learning oder als Wissensmanagementsystem dienen.

## 8 Literatur

- ALTER, S. (1975): "A Study of Computer Aided Decision Making in Organizations," Ph.D. dissertation, M.I.T. (*unveröff.*).
- ALTER, S.L. (1980): *Decision Support Systems: Current Practice and Continuing Challenge*. Reading, MA: Addison-Wesley.
- ANON (2001): *Proceedings of the CLARINET Workshop on Ecological Risk Assessment*, April 17-19, 2001, Nunspeet, the Netherlands, von: [www.clarinet.at](http://www.clarinet.at).- S-TEC 2001 .
- ANSELIN, L. (2003): *An Introduction to Spatial Regression Analysis in R*. pp.1-25. online: <http://sal.agecon.uiuc.edu>, *Zugriff* 23.06.06
- ANSELIN, L. (1996): *The Moran Scatterplot as an ESDA Tool to Assess Local Instability in Spatial Association.- In: Fischer, M., Scholten, H., Unwin D. (eds.), Spatial Analytical Perspectives on GIS in Environmental and Socio-Economic Sciences*, Taylor and Francis, London: pp. 111-125.
- ANSELIN, L. (1995): *Local Indicators of spatial association – LISA*, *Geographical Analysis*, 27: 93-116.
- ANSELIN, L. (2003): *GeoDA 0.9 User's guide*. Spatial Analysis Laboratory (SAL). Department of Agricultural and Consumer Economics, University of Illinois, Urbana-Champaign, IL.
- ANSELIN, L. (2004): *GeoDA 0.95i Release Notes*. Spatial Analysis Laboratory (SAL). Department of Agricultural and Consumer Economics, University of Illinois, Urbana-Champaign, IL.
- ANSELIN, L., SYABRI, I., SMIRNOV, O. (2002): *Visualizing Multivariate Spatial Correlation with Dynamically Linked Windows. In: Proc. SCISS Specialist Meeting "New Tools for Spatial Data Analysis"*. Santa Barbara, California, USA. May 10-11, 2002. online: <http://www.dpi.inpe.br/gilberto/csiss/papers/anselin.pdf>, *Zugriff*: 30.08.2006
- ANSELIN, L., SYABRI, I., KHO, Y.. (2004): *GeoDa: An Introduction to Spatial Data Analysis*.
- APPEL, K.E. (1990): "Risk Assessment" in *der Toxikologie*. *Bundesgesundhbl.* 33: 240-247.
- ARCADIS GERAGHTY & MILLER INTERNATIONAL INC. (2004): *Executive Summary Report Risk Assessment Comparison Study*. Prepared for Network for Industrially Contaminated Land in Europe (NICOLE) Industrial Sub Group (ISG), 36 S.
- ASTM (1995): *Standard Guide to Risk-Based Corrective Action Applied at Petroleum Release Sites*, ASTM E1739-95, Philadelphia, PA.
- BADDELY, A., TURNER, R. (2005): *spatstat: An R Package for Analyzing Spatial Point Patterns*, *J. Statistical Software* 12(6), 1-42.
- BARABAS, GOOVAERTS P, ADRIAENS (2001): *Geostatistical Assessment and Validation of Uncertainty for Three-Dimensional Dioxin Data from Sediments in an Estuarine River.- Environ. Sci. Technol.* v35. 3294-3301.
- BARDOS, P., LEWIS, A., NORTHCLIFF, S., MARIOTTI, C., MAROT, F., SULLIVAN, T.. (2002): *Review of Decision Support Tools and their use in Europe: A Report from the Contaminated Land Rehabilitation Network for Environmental Technologies, CLARINET Working Group 2.- 192 S..*
- BARDOSSY, A., HABERLAND, U. & GRIMM-STRELE, J. (1997): *Interpolation of ground water quality parameters using additional information.- in: geoENV I: Geostatistics for*

- Environmental Applications. (ed. Soares, A.). – Dordrecht: Kluwer Academic Publishers, pp. 189-200.
- BARDOSSY, A., GIESE, H. & GRIMM-STRELE, J. (1998): Interpolation of ground water quality parameters using geological and land use classification.- *in*: geoENV II: Geostatistics for Environmental Applications. (ed. Soares, A.). – Dordrecht: Kluwer Academic Publishers, pp. 247-258.
- BBODSCHG (1998): Gesetz zum Schutz vor schädlichen Bodenveränderungen und zur Sanierung von Altlasten (Bundes-Bodenschutzgesetz – BBodSchG) vom 17. März 1998. In: BGBl.I Nr. 16/1998, S. 502-510.
- BBODSCHV (1999): Bundes-Bodenschutz- und Altlastenverordnung vom 12. Juli 1999. In: BGBl.I Nr. 36/1999, S. 1554-1582.
- BENNER, J. LEINEMANN, K., LUDWIG A. & A. WEBER (2001): MELINDA – Interaktives Altlasten Monitoring- und Bewertungssystem. *In*: Strobl/Blaschke/Griesebner (Hrsg.): Angewandte Geographische Informationsverarbeitung XIII. Wichmann, Heidelberg, 2001.
- BENNER, J. LEINEMANN, K., LUDWIG A. & A. WEBER (1999): MELINDA – Ein multimediales Leit- und Informationssystem für Deponien und Altlasten. *In*: Rautenstrauch, C. (Hrsg.) Umweltinformatik ,99: Umweltinformatik zwischen Theorie und Industrieanwendung; 13. Internat. Symp. Informatik für den Umweltschutz der Gesellschaft für Informatik, Magdeburg. 30.August-1.September 1999 Marburg: Metropolis, 1999 S. 206-219 (Umwelt-Informatik aktuell; 23).
- BIVAND, R. (2001): More on Spatial Data Analysis.- R-News, 3: 13-17.
- BIVAND, R. (2002): Implementing spatial data analysis software tools in R.-pp. 1-14.
- BIVAND, R. (2005): Interfacing GRASS 6 and R.- GRASS News, 11-28.
- BIVAND, R.S. (1996): Spatial analytical perspectives on gis in the environmental and socio-economic sciences.- *In* M. M. Fischer, H. J. Scholten, and D. Unwin, editors, *Scripting and toolbox approaches to spatial analysis in a GIS context*, pp 39-52. Taylor & Francis, 1996
- BONCZEK, R. H., C. W. HOLSAPPLE, AND A. WHINSTON (1981): Foundations of Decision Support Systems. Academic Press.
- BORCHERT, R. (2004): Das Kausalnetz als Kern eines DSS – Aufbau einer auf Kausalbeziehungen beruhenden Inferenzmaschine zur Entscheidungs- und Planungsunterstützung. *In*: Möltgen, J. und D. Petry (Hrsg.): Tagungsband „Interdisziplinäre Methoden des Flussgebietsmanagements“ März 2004, IfGIprints 21, Institut für Geoinformatik, Universität Münster.
- BRAUNER, J. & MAY, M.. (2005): Einbindung einer Wissensbasis in GIS.- *in*: Schrenk, M. (Hrsg.) Tagungsband „Reale Modelle – irreale Welt. Der professionelle Umgang mit dem Unvorhersehbaren“ Februar 2005, CORP 2005, Wien.
- Brüggemann, R. & C. Steinberg (1998): Partielle Ordnung. Ein Hilfsmittel zur ökotoxikologischen Beurteilung von Chemikalien. – UWSF 10(6): pp. 376-378.
- BUJA, A., COOK, D., SWAYNE, D., LANG, DT. (2004): Using the R - Ggobi Link.- pp.1-11.
- BURGER, H. & F. BIRKENHAKE (2002): Geostatistics and the Polygonal-Method: a Re-Examination. <http://userpage.fu-berlin.de/~hburger/MT/>, Zugriff 30.08.06
- BURGER, H., SCHAFMEISTER, M.T. (2000): Gerichtete Interpolation zur verbesserten Darstellung strömungsabhängiger Grundwasserbeschaffenheitsmerkmale.- gw, 79-85.

- BURMASTER, D.E., VON STACKELBERG, K. (1991): Using Monte Carlo simulations in public health risk assessments: estimating and presenting full distributions of risk. *J. Expos. Anal. Env. Epidemiology* 1: 491-512.
- CLARINET (2000): CLARINET Problem-Catalogue Draft (October 2000), Federal Environment Agency, Vienna, Austria. Online: <http://www.clarinet.at/library/problem-catalogue-draft-october-2000.pdf> , *Zugriff 30.06.06*
- CLARK, I. (1979): Practical Geostatistics, 151 S., online: [http://eos.who.edu/12.747/resources/pract\\_geostat/pg1979\\_latex.pdf](http://eos.who.edu/12.747/resources/pract_geostat/pg1979_latex.pdf) , *Zugriff 30.08.06*
- CLARK, I. (): Does Geostatistics Work? *in: Proc 16<sup>th</sup> International APCOM Symposium*, T.J. O'Neil (Ed.). McGraw-Hill, New-York, pp.213-225.
- CLARK, I. (1996): The Art of Cross Validation in Geostatistical Applications, *in: 19th Application of Computers and Operations Research in the Mineral Industry*, R.V. Ramani (ed.). Society of Mining Engineers, Inc. Littleton, Colorado 1996 .
- CLIFF, A.D. AND ORD, J.K. (1981): *Spatial Processes: Models and Applications*, Pion Limited, London.
- Cook, D. (2003): Cook, D., Caragea, D. and Honavar, V. (2004). Visualization For Classification Problems, With Examples Using Support Vector Machines, Technical Report 04-04: online: <http://www.stat.iastate.edu/preprint/articles/2004-04.pdf>, Department of Statistics, Iowa State University, *Zugriff 5.7.07*.
- COOK, D., SWAYNE, D.F., BUJA, A., HOFMANN, H. (2004): Interactive and Dynamic Graphics for Data Analysis with examples using R and Ggobi. 145 S.
- CORRAL QUINTANA, S., FUNTOWITCZ, S., GUIMARAES PEREIRA, A. (2002): GOUVERNe: New trends in decision support for groundwater governance issues. *Proceedings of Policies and Tools for Sustainable Water Management in the EU.. Venice, 21-23 November 2002*.
- CRESSIE, N.A. (1991): *Statistics for spatial data*. – Wiley & Sons, New York.
- DALGAARD, P. (2002): *Introductory Statistics with R*. Springer, New York, 267 S.
- DAVIS, G. (1974) *Management Information Systems: Conceptual Foundations, Structure, and Development*, New York: McGraw-Hill,.
- DIETER, HH., KAISER, KERNDORFF (1990): Kontaminanten aus Altlasten - Vorschlag zur standardisierten toxikologischen Bewertung.- *Z.Umw.-ch.Ök.*, 2: 26-32.
- DIETRICH, J. (2000): Grundwassermodellierung als Entscheidungshilfe beim Flächenmanagement in einem nitratbelasteten Trinkwassereinzugsgebiet Norddeutschlands. Diplomarbeit TU Braunschweig. online-abstract: <http://www.hydroskript.de/html/hykp1204.html> , *Zugriff 30.08.06*
- DIGGLE, P. (2003), *Statistical Analysis of Spatial Point Patterns* (2<sup>nd</sup> ed.), Arnold.
- Doetsch P., Simmleit, N. Hempfling, R, Mathews, T., Stubenrauch, S., Koschmieder, H.J. (1994): Expositionsabschätzung und –beurteilung von Altlastverdachtsflächen mit dem UMS-Verfahren. Sanierung kontaminierter Standorte 1994, 8. Kongreß im Rahmen der UTECH Berlin `94. Fortbildungszentrum Gesundheits- und Umweltschutz Berlin (FGU Berlin).
- DUBOIS, G. (2000): How representative are samples in a sampling network? *J. Geogr. Information and Decision Analysis* 4(1), pp.1-10.
- DUBOIS, G., SAISANA, M. (2002): Optimizing Spatial Declustering Weights – Comparison of Methods, *Proc. Annual Conf. Int. Assoc. Math. Geol.*, Berlin- Germany, Sept. 15-20, 2002, p.479-484.

- EIKMANN, T., HEINRICH, U., HEINZOW, B. & B. KONIETZKA (1999): Gefährdungsabschätzung von Umweltschadstoffen – Ergänzbare Handbuch toxikologischer Basisdaten und ihre Bewertung. Erich Schmidt Verlag, Berlin.
- EL-SWAIFY, S.A. & D.S. YAKOWITZ (eds.): Multiple Objective Decision Making for Land, Water and Environmental Management. Lewis Publishers, Boca Raton, 735 S.
- EPA (1986) Risk Assessment Guidelines of 1986 (EPA/600/8-87/045)
- EPA (1989): Statistical Analysis of Ground-Water Monitoring Data at RCRA Facilities, Interim Final Guidance. EPA/530-SW-89-026. Office of Solid Waste, U.S. Environmental Protection Agency, Washington, D.C.
- EPA (1989b): Risk Assessment Guidance for Superfund, Volume I: Human Health Evaluation Manual (Part A), Interim Final Guidance. EPA/540/1-89/002. Office of Emergency and Remedial Response, U.S. Environmental Protection Agency, Washington, D.C.
- EPA (1991): Risk Assessment Guidance for Superfund, Volume I: Human Health Evaluation Manual, Supplemental Guidance/Standard Default Exposure Factors, Interim Final, OSWER Directive 9285.6-03. Office of Emergency and Remedial Response, U.S. Environmental Protection Agency, Washington, D.C.
- EPA (1995): EPA Risk Characterization Policy and Guidance. Memorandum from Carol M. Browner, Administrator, U.S. Environmental Protection Agency, March 21, 1995.
- EPA (1996A): Characterization of Uncertainties in Risk Assessment with Special Reference to Probabilistic Uncertainty Analysis / US EPA EH-413-068/0496 (April 1996).
- EPA (1996B): Soil Screening Guidance: User's Guide. EPA Document Number: EPA540/R-96/018. July 1996. <http://www.epa.gov/superfund/resources/soil/#user>, Zugriff 30.08.06
- EPA (1998): Guidelines for Ecological Risk Assessment; Notice; Federal Register/ Vol. 63, No. 93 [FRL-6011-2], pp. 26846-26924.
- EPA (2001): Trichloroethylene Health Risk Assessment: Synthesis and Characterization. EPA/600/P-91/002A. External Review Draft. Office of Research and Development, U.S. Environmental Protection Agency, Washington, D.C.
- ESRI (2004): An Overview of the Spatial Statistics Toolbox. ArcGIS 9.0 Online Help System (ArcGIS 9.0 Desktop, Release 9.0, Juni 2004). Environmental Systems Research Institute, Redlands, CA.
- ESTER, M., SANDER, J. (2000): Knowledge Discovery in Databases: Techniken und Anwendungen, Kapitel 2- Grundlagen.- Springer, 281 S. .
- EU (2000) Directive 2000/60/EC des Europäischen Parlaments. („EU-Wasserrahmenrichtlinie“) Veröffentlicht im *Official Journal (OJ L 327)* am 22. Dezember 2000. online : [http://europa.eu.int/comm/environment/water/water-framework/index\\_en.html](http://europa.eu.int/comm/environment/water/water-framework/index_en.html), Zugriff 30.08.06
- EU (2005): INSPIRE (INfrastructure for SPatial InfoRmation in Europe) –EU-Initiative zum Aufbau einer europäischen Geodateninfrastruktur.
- FABRITIUS, H. (2002): Entwicklung eines digitalen geologischen Raummodells im Raum Bitterfeld – Süd, 131 S. Unveröffentlichte Diplomarbeit am Institut für Geologische Wissenschaften und Geiseltalmuseum der Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg.
- FERGUSON, C., DARMENDRAIL, D., FREIER, K., JENSEN, B.K., JENSEN, J., KASAMAS, H., URZELAI, A., VEGTER, J. (1998): Risk Assessment for Contaminated Sites in Europe.

- Volume 1. Scientific Basis. Report of CARACAS Project: Concerted Action on Risk Assessment for Contaminated Sites in the European Union.
- FERGUSON, C.C., KASAMAS, H. (1999): Risk Assessment for Contaminated Sites in Europe. Volume 2. Policy Frameworks. Report of CARACAS Project: Concerted Action on Risk Assessment for Contaminated Sites in the European Union.
- FINLEY, B. PAUSTENBACH, D. (1994): The benefits of probabilistic exposure assessment: three case control studies involving contaminated air, water, and soil. *Risk Analysis* 14: 53-73.
- FÖRSTNER, U., GERTH, J., LINDEMANN, M., WITTMANN, U. (2001): Managing Contaminated Sediments III. In-situ Sediment Treatment (Spittelwaser Case Study).- *J Soils Sed*, 1: 181-187.
- FRIEDRICH, H.-J. (2006): Content Management mit Plone. Gestaltung, Programmierung und Anwendung, 429 S. Springer, Berlin.
- FÜLGRAFF, G. (1993): Die Bedeutung des Risikobegriffs im gesundheitlichen Umweltschutz. *Jahrbuch für kritische Medizin* 20: 114-227.
- GAU, C. (2005): Geostatistische Simulationsverfahren als Werkzeug der Quantifizierung der Unsicherheit geologischer Untergrundmodelle für die Stadtplanung, CORP 2005 & Geomultimedia05 Proceedings, Ed. Manfred Schrenk, ISBN: 3-901673-12-1, online: <http://www.corp.at> , Zugriff 30.08.06
- Gassner, H. & A. Willand (2003): Altlasten-, Flussgebiets- und Grundwassermanagement am Beispiel des Ökologischen Großprojekts Bitterfeld-Wolfen. *Wasser und Boden*, 55(1/2) S. 43-48..
- GI: Gesellschaft für Informatik Deutschland, AK Umweltdatenbanken. Online: <http://www.umwelt.schleswig-holstein.de/?AKUmweltdatenbanken>, Zugriff 30.08.06
- GENTON, M.G., FURRER, R. (1998): Analysis of Rainfall Data by Simple Good Sense: Is Spatial Statistics Worth the Trouble?, *J. Geogr. Inf. Dec. Analysis GIDA*, 2(2), pp.12-17. online: [http://www.geodec.org/gida\\_4.htm](http://www.geodec.org/gida_4.htm), Zugriff 14.06.06
- GIEGRICH, J. ET AL. (1995): Methodik der produktbezogenen Ökobilanzen, Wirkungsbilanz und Bewertung, Umweltbundesamt, UBA Texte 23/95, C.A.U. GmbH -Gesellschaft für Consulting und Analytik im Umweltbereich, ifeu -Institut für Energie- und Umweltforschung Heidelberg GmbH, Berlin.
- GOOVAERTS, P. (1997): Kriging vs Stochastic Simulation for Risk Analysis in Soil Contamination, *in*: A. Soares, J. Gomez-Hernandez, and R. Froidevaux, editors, *geoENV I - Geostatistics for Environmental Applications*, pp. 247-258. Kluwer Academic Publishers.
- GOOVAERTS, P., VAN MEIRVENNE, M. (2002): Accounting for Measurement and Interpolation Errors in Soil Contaminant Mapping and Decision Making. Annual Conference of the International Association for Mathematical Geology, Cancun, Mexico, September, 2001.
- GREEN W.H. & G.A. AMPT (1911): Studies in Soil Physics- I. The Flow of Air and Water through Soils", *Journal of Agricultural Science*, 4: 1-24.
- GUNDERT-REMY, U. (2003): Sicherheitsfaktoren in der Risikobewertung von Chemikalien. *Bundesgesundheitsblatt – Gesundheitsforschung – Gesundheitsschutz*, Vol 46 (5), pp. 378-383.
- HARTMANN, E., GUHRA, C. (1992): Aufbau eines Grundwasserüberwachungsnetzes im Landkreis Bitterfeld - Grundwassermonitoring. *In*: Hille, Ruske, Scholz, Walkow (Hrsg.): *Schadstoffe und Umwelt 10: Bitterfeld Modellhafte ökologische Bestandsaufnahme einer*

- kontaminierten Industrieregion – Beiträge der 1. Bitterfelder Umweltkonferenz - S. 103-111.
- HEMPFLING, R., DOETSCH, P., STUBENRAUCH, S., MAHR, A., BAUER, O., KOSCHMIEDER, H.J. & D. GRÜNHOF (1997): UMS System zur Altlastenbeurteilung – Instrumente für die pfadübergreifende Abschätzung und Beurteilung von altlastenverdächtigen Flächen, Abschlußbericht F+E Vorhaben 109 01 215, Umweltbundesamt /UBA, Berlin.
- HEINEMEYER, G. (2003): Exposition des Verbrauchers. Grundlegende Überlegungen für die Expositionsabschätzung im regulatorischen Bereich. Bundesgesundheitsblatt – Gesundheitsforschung – Gesundheitsschutz, Vol 46 (5), pp. 397-404.
- HEROLD, M. (2002): Kartierung einer stark industrie- und bergbaugeprägten Region am Beispiel Bitterfeld/Wolfen, 100 S. Unveröffentlichte Diplomkartierung am Institut für Geologische Wissenschaften und Geiseltalmuseum der Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg.
- HÖRTZSCH, M. & RAPKO, A. (2003): Content Management und Zope, mitp-V., Bonn, 413 S..
- HUBERT, T. (2005): Vergleichende 3D-Modellierung eines geologischen Strukturmodells am Beispiel einer industrie- und bergbaugeprägten Region – Bitterfeld, 136 S. Unveröffentlichte Diplomarbeit am Institut für Geologische Wissenschaften und Geiseltalmuseum der Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg.
- IHAKA R. & R. GENTLEMAN (1996). R: A language for data analysis and graphics. Journal of Computational and Graphical Statistics, 5(3), 299–314. online <http://www.r-project.org>, Zugriff 30.08.06
- IKSE (1998) : Erster Bericht über die Erfüllung des "Aktionsprogramms Elbe".- Hrsg.: Internationale Kommission zum Schutz der Elbe (IKSE), Magdeburg, 50 S., 17 Anlagen.
- ISAAKS, E.H., SRIVASTAVA, R.M. (1989): Applied Geostatistics. Oxford University Press, New York/Oxford, 561 S..
- ITRC (INTERSTATE TECHNOLOGY & REGULATORY COUNCIL)(2005): Examination of Risk-Based Screening Values and Approaches of Selected States. RISK-1. Washington, DC. White Paper, Interstate Technology & Regulatory Council Risk Assessment Resources Team. <http://www.itrcweb.org>, Zugriff 30.08.06
- JOHNSON, P.C. & R.A. ETTINGER (1991): Heuristic model for predicting the intrusion rate of contaminant vapors into buildings. Environmental Science Technology. 25:1445-1452. Model erhältlich bei : [http://www.epa.gov/oswer/riskassessment/airmodel/johnson\\_ettinger.htm](http://www.epa.gov/oswer/riskassessment/airmodel/johnson_ettinger.htm), Zugriff 30.08.06.
- JOURNEL, A.G. (1989): Fundamentals of Geostatistics in Five Lessons (Short Course in Geology: Volume 8).- , Short Course Presented at the 28<sup>th</sup> International Geological Congress Washington, D.C. American Geophysical Union, 40 S..
- JUNG, T., H. JAHRAUS, W. BURKART (2000): Akzeptables Risiko als Basis für gesetzliche Regelungen im Umweltschutz, Bundesgesundheitsblatt – Gesundheitsforschung – Gesundheitsschutz, Vol 43 (5), pp.328-335.
- JUNG, T. (2003): Der Risikobegriff in Wissenschaft und Gesellschaft, Bundesgesundheitsblatt – Gesundheitsforschung – Gesundheitsschutz, Vol 46 (7), pp.542-548.
- KAHL, R. (2003): Chemikalien – Wie wird das Risiko bewertet? Bundesgesundheitsblatt – Gesundheitsforschung – Gesundheitsschutz, Vol 46 (5), pp. 369-370.

- KAHL, R. & J. TIMM (2003): Risikobewertung - Der Beitrag der Wissenschaft zum Umgang mit den Risiken durch chemische Stoffe, Bundesgesundheitsblatt – Gesundheitsforschung – Gesundheitsschutz, Vol 46 (5), Mai 2003, pp. 371-373.
- KASAMAS, H. & J. VEGTER (2001): CLARINET Report: Scientific and Research Needs for Contaminated Land Management, online: [http://www.clarinet.at/library/epp\\_papers/e.pdf](http://www.clarinet.at/library/epp_papers/e.pdf), Zugriff 30.08.06
- KERNDORFF, H. SCHLEYER, R. & H.H. DIETER (1993): Bewertung der Grundwassergefährdung von Altablagern. WaBoLu-Hefte 1/1993. WaBoLU, Berlin, 145 S.
- KERSTEN, GE., MIKOLAJUK, Z., YEH, AG-O. (1999): Decision Support Systems for Sustainable Development – A Resource Book of Methods and Applications -References & Glossary,- Kluwer Academic, 420 S.
- KLOKE, A.. (1985): Richt- und Grenzwerte zum Schutz des Bodens vor Überlastungen mit Schwermetallen. *In: Bundesanstalt für Landeskunde und Raumordnung (BfLR) (Hrsg.): Boden - das dritte Umweltmedium. Forschungen zur Raumentwicklung 14, Seite 13-24, Bonn.*
- KONIETZKA, R. & H.H. DIETER (1994): Kriterien für die Ermittlung gefahrenverknüpfter chronischer Schadstoffzufuhren per Bodenaufnahme. *Gesundh.-Wes.* 56:21-28.
- KONIETZKA, R. & H.H. DIETER (1998): Ermittlung gefahrenbezogener Schadstoffdosen zur Gefahrenabwehr beim Wirkungspfad Boden-Mensch. *In: Rosenkranz, D., Einsele, G., Bachmann, G. & H.-M. Harreß (Hrsg.): Handbuch Bodenschutz, Kz. 3530. Erich Schmid Verlag, Berlin.*
- KRAPP, L., RUSKE, R. (1992): Geologische Verhältnisse von Bitterfeld und ihre Relevanz zu Kontaminationen des Grundwassers und Bodens. *In: Hille, Ruske, Scholz, Walkow (Hrsg.): Schadstoffe und Umwelt 10: Bitterfeld Modellhafte ökologische Bestandsaufnahme einer kontaminierten Industrieregion – Beiträge der 1. Bitterfelder Umweltkonferenz - S. 85-91.*
- KRIVORUCHKO, K. & GOTWAY, C.A. (2004): Creating Exposure Maps Using Kriging, *Public Health GIS News and Information* January, 2004, online: [http://www.esri.com/software/arcgis/arcgisextensions/geostatistical/research\\_papers.html](http://www.esri.com/software/arcgis/arcgisextensions/geostatistical/research_papers.html)
- KRIVORUCHKO, K., GOTWAY, C.A. (2002): Expanding the „S“ in GIS: Incorporating Spatial Statistics in GIS, presented in CSISS Specialist Meeting on Spatial Data Analysis Software Tools, Santa Barbara, May 2002. online: [http://www.esri.com/software/arcgis/arcgisextensions/geostatistical/research\\_papers.html](http://www.esri.com/software/arcgis/arcgisextensions/geostatistical/research_papers.html)
- KRIVORUCHKO, K., GOTWAY, C.A., ZHIGIMONT, A. (2002): Statistical Tools for Regional Data Analysis Using GIS. Online: [http://training.esri.com/campus/library/ConfProc/GeostatisticsTeam/Krivoruchko\\_2003\\_StatTools.pdf](http://training.esri.com/campus/library/ConfProc/GeostatisticsTeam/Krivoruchko_2003_StatTools.pdf)
- KRIVORUCHKO, K., GRIBOV, A. (2003): Geostatistical Interpolation in the Presence of Barriers. *GeoENV IV – Geostatistics for Environmental Applications*, Kluwer Academic Publishers, 2003.
- LAWA (1997): Zielvorgaben zum Schutz oberirdischer Binnengewässer, Bd. 1 Berlin, 1997.
- LINDENBECK, C. (2003): Verbindung von ZOPE und UMN MapServer – Eine Vision. *In medias res, Gesellschaft für Informationstechnologie mbH Freiburg.* Online: [www.inmediasres.de](http://www.inmediasres.de)

- LINDENBECK, C. (2004): UMN-MapServer Integration in den Web-Applikationsserver ZOPE, Fallbeispiel: Bohrdatenportal Hamburg. PowerPoint-Vortrag AGIT 2004 Salzburg. Online: [www.zopecms.de](http://www.zopecms.de), Zugriff 30.08.06
- LITTLE, J. D. C. (1970): "Models and Managers: The Concept of a Decision Calculus". Management Science, vol. 16, no. 8, pp. 466-485.
- LOCHTER, F. (2004): Austauschformat für Bohrdaten per XML – Abschlussbericht Stammdaten – BIS Steuerungsgruppe PK-XML. LGRB Brandenburg, Kleinmachnow. Online: <http://www.infogeo.de>, Zugriff 30.08.06
- LOCHTER, F. (2004): XML- Exportformat der Staatlichen Geologischen Dienste Deutschlands (SGD) für Bohrdaten. Austauschformat für Bohrdaten per XML-Version 1.0 – Stammdaten – Landesamt für Geowissenschaften und Rohstoffe Brandenburg. 55. Berg- und Hüttenmännischer Tag, GIS – Geoscience Applications and Developments.
- LUIG (2005): Gesetzentwurf der Landesregierung Rheinland-Pfalz für ein Landesumweltinformationsgesetz (LUIG), Stand: 20. Juni 2005. online: [http://www.muf-rlp.de/fileadmin/img/inhalte/ueberuns/LUIG\\_aktuelleFassung\\_v1-pdf](http://www.muf-rlp.de/fileadmin/img/inhalte/ueberuns/LUIG_aktuelleFassung_v1-pdf), Zugriff 30.08.06
- MALCZEWSKI, J. (1999): GIS and Multicriteria Decision Analysis, J. Wiley, New York, 392 S.
- MATHEWS, T., FISCHER, A.N., EXNER, S. & T.EIKMANN (1998): ECORISK-Verfahren zur Expositions- und Risikoabschätzung in der Gefährdungsabschätzung und Sanierungsplanung von Altlasten. Teil I: Allgemeiner Überblick über die Systematik des Verfahrens. In: Umweltmed Forsch Prax, 3, 3, S. 156-167.
- MATHEWS, T., FISCHER, A.N., EXNER, S. & T.EIKMANN (1999): ECORISK-Verfahren zur Expositions- und Risikoabschätzung in der Gefährdungsabschätzung und Sanierungsplanung von Altlasten. Teil II: Ableitung von Sanierungszielwerten mittels probabilistischer Methoden. In: Umweltmed Forsch Prax, 4, 5, S. 289-300.
- MAY, M., MERTEN, S., BRAUNER, J. (2004): OpenSource für Geodateninfrastrukturen – eine echte Alternative?- In: Schrenk, M. (Hrsg.) Tagungsband „IT-Regionen: Innovation und Technologie als Schlüssel für eine nachhaltige Stadt- und Regionalentwicklung“ Februar 2004, CORP 2004, Wien.
- MCKAY, A. (2005): Plone, Leitfaden für Administratoren und Entwickler. Online: <http://www.plone.org>
- MATHERON, G. (1962): *Traité de géostatistique appliquée*. Paris, Vol 1 (1962), Vol. 2 (1963).
- MEKEL, O. NOLTE, E. & R. FEHR (1997A): Quantitative Risikoabschätzung (QRA), Möglichkeiten und Grenzen ihres Einsatzes für umweltbezogenen Gesundheitsschutz in Nordrhein-Westfalen, Materialien „Umwelt und Gesundheit“ Nr. 51, Bericht 1: Sachstand und Entwicklungsperspektiven; Landesinstitut für den Öffentlichen Gesundheitsdienst NRW, Bielefeld/Münster Abt. Umweltmedizin, Umwelthygiene, 58 S. und Anhänge.
- MEKEL, O. NOLTE, E. & R. FEHR (1997B): Quantitative Risikoabschätzung (QRA), Möglichkeiten und Grenzen ihres Einsatzes für umweltbezogenen Gesundheitsschutz in Nordrhein-Westfalen, Materialien „Umwelt und Gesundheit“ Nr. 53, Bericht 3: Anwendung probabilistischer Verfahren in quantitativer Risikoabschätzung (2.Aufl.); Landesinstitut für den Öffentlichen Gesundheitsdienst NRW, Bielefeld/Münster Abt. Umweltmedizin, Umwelthygiene, 30 S. und Anhänge.
- MEKEL, O. NOLTE, E. & R. FEHR (2004): Quantitative Risikoabschätzung (QRA), Möglichkeiten und Grenzen ihres Einsatzes für umweltbezogenen Gesundheitsschutz in Nordrhein-Westfalen, Materialien „Umwelt und Gesundheit“ Nr. 57, Bericht 7:

- Vergleichende Risikoabschätzung und Prioritätensetzung (2.Aufl.); Landesinstitut für den Öffentlichen Gesundheitsdienst NRW, Bielefeld/Münster Abt. Umweltmedizin, Umwelthygiene, 53 S..
- MERKEL, B.J., PLANER-FRIEDRICH, B. (2003): Integrierte Datenauswertung Hydrogeologie.- Freiberg Online Geology FOG, Vol 7 2002, (überarbeitet 03/2003).
- MILLARD, S. & NEERCHAL N.K. (2001): Environmental Statistics with S-Plus. CRC Press, Boca Raton. 830 S.
- MITCHELL, T. (2005): Web Mapping Illustrated, O'Reilly, 349 S.
- MÖLTGEN, J. & M. MAY (2004): Entwicklungskriterien für ein Planungsunterstützungssystem: *In: Möltgen, J. und D. Petry (Hrsg.) Tagungsband „Interdisziplinäre Methoden des Flussgebietsmanagements“ März 2004, IfGIprints 21, Institut für Geoinformatik, Universität Münster.*
- MÖLTGEN, J. & U. STREIT (2004): Interdisziplinäre Methoden und Werkzeuge zur Planung und Kontrolle für das Flusseinzugsgebietsmanagement mit GIS. *In: Möltgen, J. und D. Petry (Hrsg.) Tagungsband „Interdisziplinäre Methoden des Flussgebietsmanagements“ März 2004, IfGIprints 21, Institut für Geoinformatik, Universität Münster.*
- MUELLER, T. (2004): A FAQ on geostatistical software conventions. Geostatistical software sometimes use different models but use same terminology. Here is more information on what the software really do. online: [http://www.ai-geostats.org/Geostats\\_Faq/FAQ\\_software\\_conventions.htm](http://www.ai-geostats.org/Geostats_Faq/FAQ_software_conventions.htm) (Zugriff 10.08.2006)
- NATO/CCMS Pilot Study Evaluation of Demonstrated and Emerging Technologies for the Treatment and Clean Up of Contaminated Land and Groundwater. Phase III
- NEEF, O. (2002): Aspekte numerischer Modellierung in der Hydrogeologie am Beispiel einer industriell beeinflussten Bergbaufolgelandschaft im Mitteldeutschen Braunkohlerevier, 87 S. Unveröffentlichte Diplomarbeit am Institut für Geologische Wissenschaften und Geiseltalmuseum der Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg.
- NEUMANN, H.-G. (2006A): Die Risikobewertung von Kanzerogenen und die Wirkungsschwelle, Teil I, Bundesgesundheitsblatt – Gesundheitsforschung – Gesundheitsschutz, Vol 49 (7), pp.665-674.
- NEUMANN, H.-G. (2006B): Die Risikobewertung von Kanzerogenen und die Wirkungsschwelle, Teil II, Bundesgesundheitsblatt – Gesundheitsforschung – Gesundheitsschutz, Vol 49 (7), pp.818-823
- NEUMANN, H.-G. (2006C): Die Risikobewertung von Kanzerogenen und die Wirkungsschwelle, Teil III, Bundesgesundheitsblatt – Gesundheitsforschung – Gesundheitsschutz, Vol 49 (7), online first (in press) / DOI 10.1007/s00103-006-0028-2
- NEUS, H., SAGUNSKI, H. KAPPOS, A., SCHÜMANN, M. (1995): Zur administrativen Umsetzung von Risikoabschätzungen – Ziele, Rahmenbedingungen und Entwicklungsbedarf. Teil I: Bundesgesundheitsblatt, Vol 38: pp. 258-264, Teil II: Vol 38: 304-10.
- NIEBEN. R. (2000): Estimating of the sampling error caused by large-scale heterogeneity of contaminant distribution in soil. ConSoil Proceedings 2000, 18.-22. September, Leipzig, S. 313-314.
- NRC (NATIONAL RESEARCH COUNCIL) (1983): Risk assessment in the federal government: Managing the process. National Research Council, National Academy Press, Washington, DC.

- PAUSTENBACH, D.J. (1989): A survey of health risk assessment. In: Paustenbach, D.J. (ed.): The risk assessment of environmental and human health hazards: A textbook of case studies. John Wiley & Sons, New York: 27-124.
- PEBESMA, E.J. & WESSELING, C.G. (1998): Gstat, a program for geostatistical modelling, prediction and simulation. Computers & Geosciences, 24 (1), pp. 17-31; online: <http://www.gstat.org> (Zugriff 30.08.2006)
- PEBESMA, E.J. (2003): Gstat: multivariable geostatistics for S. DSC 2003 Working Papers, pp 1-11. Online: <http://www.ci.tuwien.ac.at/Conferences/DSC-2003> (Zugriff 30.08.2006).
- PEREIRA, AG., QUINTANA, SC. (2002): From Technocratic to Participatory Decision Support Systems: Responding to the New Governance Initiative.- GIDA, 6: 95-107.
- PETER, H. GROßMANN, J. & G. SCHULZ-TERFLOTH (1995): Rahmensanierungskonzept des Großprojektes „Bitterfeld/Wolfen“. In: H.-P. Lühr (Hrsg.), Kongress Grundwassersanierung 1995, Erich Schmidt Verlag, Berlin, S. 123-138.
- PILGRIM, M. (2004): Dive into Python, apress, Berkeley, 413 S..
- POPOVICH, V., POTAPICHEV, S., SOROKIN, R., PANKIN, A. (2005): Intelligent GIS for Monitoring Systems Development.
- POWER, D.J., A brief History of Decision Support Systems. online: <http://DSSResources.Com/history/dsshistory.html>, version 2.8, May 31, 2003. (Zugriff 30.08.2006)
- PROTOSCHILL-KREBS, G., SERWE, H.-J., KOBUSCH, A.-B, FEHR, R. (1994): Quantitative Risikoabschätzung als zentrale Methode der Gesundheitsverträglichkeitsprüfung (GVP) – Grundlagen. UVP-report 1: 5-9 und UVP-report 3: 179.
- RIBEIRO JR, P.J., DIGGLE, P.J. (2001): geoR: A Package for Geostatistical Analysis.- R-News, 2: 15-18.
- RIBEIRO JR, P.J., CHRISTENSEN, O.F., DIGGLE, P.J. (2003): Geostatistical Software – geoR and geoRglm. DSC 2003 Working Papers, pp. 1-15. online: <http://www.ci.tuwien.ac.at/Conferences/DSC-2003/> (Zugriff 30.08.2006)
- RICHTER, R. (2004): Auswertung physiko-chemischer Messungen im Grundwasser unter den Aspekten der statistischen Charakterisierung und räumlichen Regionalisierung am Beispiel Bitterfeld-Wolfen, 114 S.. Unveröff. DA Inst Geol Wiss u Geiseltal MLU Halle-Wittenberg.
- RIPLEY, B.D. (2001): Spatial Statistics in R.- R-News, 2: 14-15.
- SAGUNSKI ET AL. (1995) : Standards zur Expositionsabschätzung. Bericht des Ausschusses für Umwelthygiene. Behörde für Arbeit, Gesundheit und Soziales Hamburg (Hrsg.), Hamburg.
- SAISANA M., DUBOIS G., CHALOULAKOU A., SPYRELLIS N.(2004): Classification Criteria and Probability Risk Maps: Limitations and Perspectives.- Environ. Sci. Technol., 38 (5), 1275 –1281.
- SAITO, H. & GOOVAERTS P. (2000): Geostatistical Interpolation of Positively Skewed and Censored Data in a Dioxin-Contaminated Site. Environ Sci Techn. 3, 4228-4235.
- SAWITZKI, G. (2005) Einführung in R, Statlab Heidelberg, 176 S. online: <http://www.statlab.uni-heidelberg.de/projects/r/> (Zugriff 30.08.2006).
- SCHAEBEN, H., LINDNER, S. (2000): Mathematische Geologie II - Statistik regionalisierter Variablen, Geostatistik.- ,TU Bergakademie Freiberg, Vorlesungsskript, 144 S.

- SCHENTZ, H. MIRTIL, M. (2004): CEDEX eine erweiterbare Ontologie für ökologische Daten, Workshop Umweltdatenbanken Darmstadt, 2004, online: <http://www.umweltbundesamt.at/cedex> (Zugriff 30.08.2006)
- SCHUSTER, G. (2004): Entwicklung von Komponenten eines Geoportal-Frameworks. Integration von Internet-Mapserver-Funktionalität in ein Content Management System. Unveröff. Diplomarbeit Hochschule Vechta, Institut für Umweltwissenschaften. Online: [www.zopcms.de](http://www.zopcms.de) (Zugriff 30.08.2006)
- SCOTT MORTON, M. S. (1971): *Management Decision Systems; Computer-based support for decision making*. Boston, Division of Research, Graduate School of Business Administration, Harvard University.
- SEHER, U. & K. Kauppert (2006): Konzeption einer WebGIS-Umgebung bei Großprojekten in Geotechnik und Wasserbau, in: Strobl (Hrsg.), *Angewandte Geoinformatik, Tagungsband AGIT Salzburg 2006*. Wichmann.
- SHEKHAR, S., LU C., ZHANG, P.(2003): A Unified Approach to Detecting Spatial Outliers. *Spatial Data Mining Research by the Spatial database Research Group, Uni of Minnesota.-Geoinformatica 7(2)- 139-166.*
- SIMMLEIT, N., DOETSCH, P. ET AL. (1994): Weiterentwicklung und Erprobung des Bewertungsmodells zur Gefahrenbeurteilung bei Altlasten. UBA-Forschungsbericht 95-026. Umweltbundesamt Berlin.
- SONNENTAG, O. (2003): SIMIK+: Evaluation and conceptual improvement of a GIS-implemented kriging technique. MSc. Thesis, Uni Salzburg, Dept. of Geography and Applied Geomatics, Salzburg. (unveröff.)
- SPENCE, L.R. & T. WALDEN (2001A): RISC4 User's Manual- Spence Engineering, Pleasanton California, BP Oil Int. Sunburg, UK.
- SPENCE, L.R. & T. WALDEN (2001B): RISC4 Appendices- Spence Engineering, Pleasanton California, BP Oil Int. Sunburg, UK.
- SPRAGUE, R. (1986). A Framework for the Development of Decision Support Systems. In: Ralph Sprague and Hugh Watson (Eds.), *Decision Support Systems: Putting Theory into Practice*. pp. 7-32. London, Prentice-Hall.
- SPRAGUE, R. H., JR. AND E. D. CARLSON (1982): *Building Effective Decision Support Systems*. Englewood Cliffs, N.J.: Prentice-Hall, Inc..
- STEINMETZ, T. (2005): Ein wissensbasiertes System zum Risikomanagement für komplexe räumlich und zeitlich orientierte Umweltdaten. In: *Umweltdatenbanken und Netzwerke, UBA Texte 11/06, Umweltbundesamt Dessau, 2006, 215 S.*
- STEINMETZ, T. (2006): WebGIS-basierte Kooperationsplattform zur Datenspeicherung- und Analyse im Umfeld einer regionalen Grundwasserkontamination, in: Strobl (Hrsg.), *Angewandte Geoinformatik, Tagungsband AGIT Salzburg 2006*, Wichmann.
- STREIT, B. (1992): *Umweltlexikon*. Herder, Freiburg im Breisgau, 384 S..
- STUBENRAUCH, S., HEMPFLING, R., SIMMLEIT, N., MATHEWS, T., DOETSCH, P. (1994A): Abschätzung der Schadstoffexposition in Abhängigkeit von Expositionsszenarien und Nutzergruppen. Teil 1: Grundlagen und Vorschläge zur Ableitung von Aufnahme-raten am Beispiel von Trinkwasser. UWSF-Z. Umweltchem. Ökotox. 6: 41-49.
- STUBENRAUCH, S., HEMPFLING, R., SIMMLEIT, N., MATHEWS, T., DOETSCH, P. (1994B): Abschätzung der Schadstoffexposition in Abhängigkeit von Expositionsszenarien und

- Nutzergruppen. Teil 2: Vorschläge für orale Aufnahmeraten von Boden, Badeseewasser und Nahrungsmitteln des Eigenanbaus. UWSF-Z. Umweltchem. Ökotox. 6: 165-174.
- STUBENRAUCH, S., HEMPFLING, R., SIMMLEIT, N., MATHEWS, T., DOETSCH, P. (1994c): Abschätzung der Schadstoffexposition in Abhängigkeit von Expositionsszenarien und Nutzergruppen. Teil 3: Vorschläge für inhalative Aufnahmeraten. UWSF-Z. Umweltchem. Ökotox. 6: 289-296.
- SUCHENWIRTH, R. PRINZ, B. (1994): Risiko-Abschätzung und Risiko-Bewertung bei der Einwirkung von Umweltschadstoffen. In: Landesumweltamt NRW (Hrsg.): Jahresbericht 1994. LUA, Essen: 52-59.
- SULLIVAN, T., ARMSTRONG, A.Q., DINDAL, A.B., JENKINS, R.A., OSLEEB, J., KOGLIN, E.N. (2000A): Environmental Technology Verification Report. Environmental Decision Support Software. DecisionFX, Inc. SamplingFX, EPA/600/R-00/038, Las Vegas, NV: U.S. EPA, 2000.
- SULLIVAN, T., ARMSTRONG, A.Q., DINDAL, A.B., JENKINS, R.A., OSLEEB, J., KOGLIN, E.N. (2000B): Environmental Technology Verification Report. Environmental Decision Support Software. DecisionFX Inc., Groundwater FX, EPA/600/R-00/037, Las Vegas, NV: U.S. EPA, 2000
- SULLIVAN, T., ARMSTRONG, A.Q., DINDAL, A.B., JENKINS, R.A., OSLEEB, J., KOGLIN, E.N.. (2000C): Environmental Technology Verification Report. Environmental Decision Support Software. University of Tennessee Research Corporation. Spatial Analysis and Decision Assistance (SADA), EPA/600/R-00/036, Las Vegas, NV: U.S. EPA, 2000.
- SULLIVAN, T.M., ARMSTRONG, A.Q., DINDAL, A.B., JENKINS, R.A., OSLEEB, J., KOGLIN, E.N. (2000D): Environmental Technology Verification Report. Environmental Decision Support Software. C Tech Development Corporation, Environmental Visualisation System (EVS), EPA/600/R-00/047, Las Vegas, NV.: U.S. EPA, (2000)
- SULLIVAN, T.M., GITTEN, M., MOSKOWITZ, P.D. (1997): Evaluation of Selected Environmental Decision Support Software.-pp. 1-42
- SWAYNE, D., LANG, D.T., BUJA, A., COOK, D. (2001): GGobi: XGobi Redesigned and Extended. Online
- SYMANIK, J., SWAYNE, D., LANG, D.J., COOK, D.(): Software Integration for Multivariate Exploratory Spatial Data Analysis.
- TEMPLE LANG, D. (2001) : Scenarios for Using R within a Relational Database Management System Server. Bell Labs. pp. 1-8.
- TEMPLE LANG, D. & D.F. SWAYNE (2001) : GGobi meets R : an extensible environment for interactive dynamic data visualization. DSC 2001 Proceedings of the 2<sup>nd</sup> International Workshop on Distributed Statistical Computing. pp.1-11.
- THAYER, GRIFFITH, GOODRUM (2003): Applications of Geostatistics to Risk Assessment. Risk Anal. 2003 Oct;23(5):945-60.
- THAYER ET AL., Application of Geostatistics to Risk Assessment, Risk Analysis, 23(5), 2003
- THIEKEN, A. (2001): Schadstoffmuster in der regionalen Grundwasserkontamination der mitteldeutschen Industrie-und Bergbauregion Bitterfeld-Wolfen.- Dissertation, Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg. Online: [http://sundoc.bibliothek.uni-halle.de/diss-online/01/02H175/of\\_index.htm](http://sundoc.bibliothek.uni-halle.de/diss-online/01/02H175/of_index.htm), Zugriff 5.7.07.
- THIEKEN, A. H. & KÖHNE, M. (2001): Ranking of organic pollutants in a regional groundwater contamination: contamination profiles, cluster analysis and Hasse diagram technique.- In:

- Pudenz, S., Brüggemann, R. and Lühr, H.-P.: Order Theoretical Tools in Environmental Science and Decision Systems. Proceedings of the Third workshop November 6th-7th, 2000 in Berlin, Germany, Berichte des IGB, 14, Sonderheft IV, 39-51.
- TRAPP, S., MATTHIES, M. (1996): Dynamik von Schadstoffen, Umweltmodellierung mit CemoS. Springer, Berlin.
- TUCKER, C. (2004): ArcGIS 9, Writing Geoprocessing Scripts with ArcGIS. ESRI, Redlands. 83 S.
- TUKEY, J. (1977): Exploratory Data Analysis. Addison-Wesley, Reading (Mass.)
- UBA (1997): Nachhaltiges Deutschland: Wege zu einer dauerhaft-umweltgerechten Entwicklung. – Verlag Erich Schmidt, Berlin.
- UIG (2004): Umweltinformationsgesetz, Bundesgesetzblatt Jahrgang 2004, Teil I Nr. 73, Bonn, S. 3704-3710.
- USLÄNDER, T., GRIMM-STRELE, J., SONNTAG, O. (2004): Regionalisierte Darstellung der Grundwasserbeschaffenheit mit Hilfe des geostatistischen Interpolationsverfahrens SIMIK.- Workshop Umweltdatenbanken 2004, Gesellschaft für Informatik.
- VEGTER, J. (2001): CLARINET Report:Sustainable Contaminated Land Management: a Risk-based Land Management Approach. Online:[http://www.clarinet.at/library/epp\\_papers/h.pdf](http://www.clarinet.at/library/epp_papers/h.pdf) (Zugriff 30.08.2006)
- VENABLES, W.N. & D.M. SMITH AND THE R DEVELOPMENT CORE TEAM (2006): An Introduction to R, Notes on R: A Programming Environment for Data Analysis and Graphics, Version 2.3.0.
- WAHRENDORF, K., BECHER, H. (1990): Quantitative Risikoabschätzung für ausgewählte Umweltkanzerogene. UBA-Berichte 1/1990, Erich Schmidt Verlag Berlin.
- WANG, K-KK. (2003): GGobi for Dummies under Windows. University of Auckland, Department of statistics. <http://www.mcs.vuw.ac.nz/~ray/R-stuff/windows/ggguide.pdf>, Zugriff 5.7.07.
- WARNES, G. (2005) online: <http://research.warnes.net/projects/RstatServer>
- WARNES G. (2004). ``RSOAP - Using "R" with Python," *PyZine*, Volume 11, Issue 05.
- WARTENBERG, D. (1985): Multivariate spatial correlation: A method for exploratory geographical analysis. *Geographical Analysis*, 17: 263-283.
- WICHMANN, H.-E. (1990): Grundsätze der Ableitung umweltbezogener Grenzwerte aus epidemiologischen und toxikologischen Untersuchungen. In: Giani, G., Megges R. (Hrsg.): Biometrie in der Informatik, Medizinische Informatik und Statistik 71, Springer Verlag, Berlin.
- WCED (1987): World Commission on Environment and Development: Unsere gemeinsame Zukunft. Der Brundtland-Bericht der Weltkommission für Umwelt und Entwicklung. - Greven.
- WINGLE, W.L., POETER, E.P., MCKENNA, S.A. (1997): Uncert User's Guide, Colorado School of Mines. Online: [www.uncert.com](http://www.uncert.com) (Zugriff 30.08.2006)
- WOLLMANN, A. (2004): Geologische Bearbeitung einer ehemaligen Bergbau- und Industriefolgelandschaft Bitterfeld/Wolfen, 132 S. Unveröffentlichte kombinierte Diplomarbeit und Diplomkartierung am Institut für Geologische Wissenschaften und Geiseltalmuseum der Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg.
- WYCISK, P., GRATHWOHL, P., GOSSEL, W., NEUMANN, CH., STEINMETZ, T. & KLEINEIDAM, S. (2005a): Raumauswirkungen - Beurteilung der Langzeitwirkung von verbleibenden

- Grundwasserbelastungen und ihre Auswirkungen auf die Schutzgüter und die Landnutzung im Raum Bitterfeld-Wolfen, SAFIRA II.- Abschlussbericht des BMBF-Projektes, FKZ: 02WT0412, 169 S. u. Anlagen.
- WYCISK, P., NEUMANN, CH. & GOSSEL, W. (2005b): Flooding induced effects from the mining lake Goitzsche on the groundwater situation and sensitivity of land-use units in the Bitterfeld area.- *Acta hydrochemica et hydrobiologica* 33 (5), 507-518.
- WYCISK, P., FABRITIUS, H., GOSSEL, W., NEUMANN, CH., RUSKE, R. & WEISS, H. (2005): 3D Modelling of complex geological structures and its relevance for a risk based management and remediation approach – Case Study: Bitterfeld / Wolfen mega site, Germany.- *Computers & Geosciences* 31 (submitted).
- WYCISK, P., NEUMANN, C., FLECK, G. & GOSSEL, W. (2004): Ermittlung räumlicher Risikobereiche und Auswirkungen auf die Landnutzung als Grundlage einer maßnahmeorientierten Schadensvorsorge im Bereich Bitterfeld / Wolfen – Risikobereiche und Landnutzung.- in: Geller, W., Ockenfeld, K., Böhme, M., Knöchel, A. (Hrsg.) Schadstoffbelastung nach dem Elbe-Hochwasser 2002 – Ad-hoc-Projekt Schadstoffuntersuchungen nach dem Hochwasser vom August 2002 zur Ermittlung der Gefährdungspotenziale an Elbe und Mulde, Abschlußbericht des BMBF-Verbundvorhabens, S. 362-381.
- WYCISK, P., WEISS, H., KASCHL, A., HEIDRICH, S. & SOMMERWERK, K. (2003a): Groundwater pollution and remediation options for multi-source contaminated aquifers (Bitterfeld/Wolfen, Germany).- *Toxicology Letters*, 140-141, 343-351.
- WYCISK, P., FABRITIUS, H., FRANKE, B., RUSKE, R. & WEIß, H. (2003b): 3-D modeling of complex geological structures and its relevance for a risk based management and remediation approach – Examples from the Bitterfeld / Wolfen megasite, Germany.- *Consoil Proceedings*, CD-Rom, 2003, 12.-16.05.2003, Gent, p. 557-563.
- WYCISK, P., NEUMANN, C., FLECK, G. & GOSSEL, W. (2003c): Ermittlung räumlicher Risikobereiche und Auswirkungen auf die Landnutzung.- in: UFZ Leipzig-Halle (Hrsg.) Schadstoffbelastung im Mulde- und Elbe Einzugsgebiet nach dem Augusthochwasser 2002 – Ergebnisse und Forschungsbedarf, Tagungsband zum Statusseminar des BMBF-Ad-hoc-Verbundprojektes, Freiberg, 27.-29.August 2003, S. 179-181.
- WYCISK, P. & FABRITIUS, H. (2003d): Mehr als nur ein Bild – Digitale 3-D-Raummodelle des geologischen Untergrundes.- *GeoBIT* 11/2003, 8-10.
- WYCISK, P., SCHNABEL, S., SOMMERWERK, K. (2003E): Regional groundwater pollution – Steps of a spatial impact assessment.- *EUROTOX-Workshop, Risk Assessment of Contaminated Megasites*, Halle. S. 25.
- WYCISK, P., FABRITIUS, H., THIEKEN, A., NEEF, O., SOMMERWERK, K. & SCHNABEL, S. (2004): Analyse der Raumauswirkung mittels digitaler Raummodelle in der Sanierungsforschung – SAFIRA I Bitterfeld.- *UFZ-Bericht* 13/2004, S. 317-347.

## **Resourcen online:**

*Nachhaltigkeit, Öffentlichkeitsbeteiligung*

<http://www.aarhus-konvention.de>, (Zugriff 30.08.2006)

<http://www.nachhaltigkeit.info>, (Zugriff 30.08.2006)

<http://www.bmu.de/buergerbeteiligungsrechte/aktuell/aktuell/1183.php> Bundesministerium für Umwelt, Reaktorsicherheit und Naturschutz, (Zugriff 30.08.2006)

*Entscheidungsunterstützungssysteme, IT, GIS*

<http://www.flumagis.de/veroeffentlichungen.htm>, (Zugriff 30.08.2006)

<http://www.infogeo.de>, (Zugriff 30.08.2006) Schemadefinition zum Bohrdatenaustauschformat XML des LGR Brandenburg

<http://www.imagi.de/>, (Zugriff 30.08.2006) Interministerieller Ausschuss für Geoinformation

<http://research.warnes.net/projects/RStatServer>

<http://www.primagis.fi>, (Zugriff 30.08.2006)

*Geostatistik*

<http://www.kriging.com/>, (Zugriff 30.08.2006)

<http://www.hydroskript.de>, (Zugriff 30.08.2006)

<http://www.uncert.com/tutor>, (Zugriff 30.08.2006) Geostatistical Analysis Tutor, Wingle & Poeter (1999)

<http://www.ai-geostats.org/papers/>, (Zugriff 30.08.2006)

<http://www.geostatistik.de/>, (Zugriff 30.08.2006)

<http://ifgivor.uni-muenster.de/vorlesungen/Geostatistik>, (Zugriff 30.08.2006)

*Risk Assessment*

<http://risk.lsd.ornl.gov/homepage/glossary.shtml>, (Zugriff 30.08.2006) Risk Assessment Information System (RAIS): Glossar für das Risk Assessment und verwandte Begriffe

## 9 Anhang

- Tabellen

- Statistik
- Physikochemische Stoffeigenschaften
- RISC: Risiko

- Beispiel-Bericht

- 2D-Interpolationen (ArcGIS)

- Skripte

- SQL
- Python
- (Plone Controller) Page Templates

## 9.1 Übersicht der verwendeten Daten

### **3D-Geologie-Modell:**

Vereinfachtes 2-Schicht-Modell (Quartär, Tertiär) zusammengefasst aus dem Modell von HUBERT (2005) m. über 40 Einzelschichten, mit einer Datengrundlage von 425 Einzelbohrungen.

**Hydrogeologische Modellierung (FEFLOW):** WYCISK, NEUMANN, GOSEL (2005b), Darstellung in Form von Bahnlinien.

### **Landnutzung:**

ATKIS (2000), CIR (2000), Kartierung der Deponien und Kippen (HEROLD 2002)

### **Kontaminationsdaten:**

Daten aus dem Monitoring der Stadt und des Landkreises Bitterfeld und der LAF Sachsen-Anhalt.

173 organische und anorganische Stoff- sowie physikochemische Parameter, Messzeitraum 1992-2004.

737 einzeln verfilterte Messpunkte.

### **Toxikologie:**

Datenbanken, aus denen die von der Software RISC, RBCA und SADA verwendeten Werte stammen: HEAST (<http://epa-heast.ornl.gov/heast/index.html> - nur für EPA-interne Nutzung), für Angaben zu Risiko-Abschätzungen der Humantoxizität; IRIS, das Integrated Risk Information System der US EPA (<http://www.epa.gov/iris/>, Zugriff 5.7.07) für die allgemeinen Toxizitätswerte; Provisional Peer Reviewed Toxicity Values (PPRTV <http://risk.lsd.ornl.gov/tox/> - nur für EPA-interne Nutzung) und zitierte Quellen für die EPA OSWER Office of Superfund Remediation and Technology Innovation (OSRTI) Programme, wobei IRIS und PPRTV die Präferenz zu geben ist (HEAST wird allmählich durch die PPRTV abgelöst; s. [http://risk.lsd.ornl.gov/tox/tox\\_values.shtml](http://risk.lsd.ornl.gov/tox/tox_values.shtml) (Zugriff 5.7.07) für die Erläuterung dieser Präferenz-Hierarchie).

Die US Umweltbehörde EPA empfiehlt außerdem die Verwendung der CalEPA-Toxizitätswerte (<http://www.oehha.ca.gov/risk/chemicalDB/index.asp>, Zugriff 5.7.07), sowie die Tabellen der *Agency for Toxic Substances and Disease Registry* (ATSDR) zu Minimal Risk Levels für inhalative oder orale Aufnahme (MRLs/ nur für nicht-kanzerogene Stoffe) (<http://www.atsdr.cdc.gov/mrls/index.html> Zugriff 5.7.07) für Stoffe, für die in IRIS keine Angaben gemacht werden. ATSDR verwendet „No Observed Adverse Effect Level/ Uncertainty Factor“ NOAEL/UF .

Slope Factors und Referenzdosen für chronische oder sub-chronische Effekte von Nicht-Radionukliden sowie physikochemische Eigenschaften RAIS-Webseite [http://risk.lsd.ornl.gov/cgi-bin/tox/TOX\\_select?select=nrad](http://risk.lsd.ornl.gov/cgi-bin/tox/TOX_select?select=nrad) (Zugriff 5.7.07). Für die Verwendung im US-amerikanischen Raum ist dies die autoritative Quelle, für die Verwendung in anderen Ländern sind die Voraussetzungen jeweils im Einzelfall zu prüfen. Werte deutscher Regulation bzw. für den Gebrauch in Deutschland EIKMANN ET AL. (1999) zu finden.

## 9.2 Tabellen

**Tab. 1:** Beschreibende Statistik für die als prioritär bestimmten Stoffe

| Summenstatistik für   | TCE( $\mu\text{g}$ ) | PCE( $\mu\text{g}$ ) | 1,2DCA( $\mu\text{g}$ ) | VC( $\mu\text{g}$ ) | HCB( $\mu\text{g}$ ) | Benzen( $\mu\text{g}$ ) | A-HCH( $\mu\text{g}$ ) | B-HCH( $\mu\text{g}$ ) | G-HCH( $\mu\text{g}$ ) |
|-----------------------|----------------------|----------------------|-------------------------|---------------------|----------------------|-------------------------|------------------------|------------------------|------------------------|
| Anzahl Messungen      | 1350                 | 1279                 | 874                     | 921                 | 495                  | 1316                    | 565                    | 478                    | 568                    |
| Minimum               | 0,001                | 0,002                | 0,1                     | 0,005               | 0,001                | 0,001                   | 0,003                  | 0,001                  | 0,001                  |
| Maximum               | 351000               | 230000               | 328000                  | 15000               | 54300                | 89469                   | 800                    | 124                    | 1070                   |
| Mean                  | 1532,75              | 697,83               | 686,75                  | 139,10              | 109,92               | 514,16                  | 10,73                  | 3,03                   | 8,58                   |
| Median                | 1,3                  | 2,8                  | 1,5                     | 1                   | 0,025                | 2,5                     | 0,32                   | 0,0695                 | 0,14                   |
| Standard Abweichung   | 13292,24             | 7252,80              | 11477,90                | 762,55              | 2440,59              | 3270,13                 | 62,82                  | 14,01                  | 71,89                  |
| Varianz               | 176683739            | 52603130             | 131742358               | 581490              | 5956502              | 10693790                | 3946                   | 196                    | 5168                   |
| Variationskoeffizient | 8,67                 | 10,39                | 16,71                   | 5,48                | 22,20                | 6,36                    | 5,85                   | 4,61                   | 8,37                   |
| Schiefe               | 18,17                | 25,81                | 26,91                   | 11,89               | 22,24                | 17,50                   | 8,35                   | 6,18                   | 11,257                 |

**Tab. 2:** Phys.-chem. und toxik. Eigenschaften der untersuchten Stoffe (keine Angaben für g-HCH).  
Quelle: s.u. (EPA/ORNL)

| Chemical      | CAS #    | Water Solubility (mg/L) | Vapor Pressure (mm Hg) | Boiling Point (degree Celcius) | Melting Point (degree Celcius) | Molecular Weight (g/mol) | Diffusivity in Air (cm <sup>2</sup> /s) | Diffusivity in Water (cm <sup>2</sup> /s) | GI Absorption Factor | Unitless Henry's Law Constant | Permeability Constant (cm/hr) | Log of Octanol-Water Partition Coef. |
|---------------|----------|-------------------------|------------------------|--------------------------------|--------------------------------|--------------------------|-----------------------------------------|-------------------------------------------|----------------------|-------------------------------|-------------------------------|--------------------------------------|
| Chloride      | 16887006 |                         |                        |                                |                                | 35,45                    |                                         |                                           | 1                    |                               | 0,001                         |                                      |
| Sulfate       | 14808798 | 1000000                 | 0,0000593              | 336,85                         | 10,31                          | 98,07                    |                                         |                                           | 0,2                  |                               | 0,001                         |                                      |
| Benzene       | 71432    | 1790                    | 94,8                   | 80                             | 5,5                            | 78,11                    | 0,088                                   | 0,0000098                                 | 0,97                 | 0,227                         | 0,0207                        | 2,13                                 |
| Chlorobenzene | 108907   | 498                     |                        | 131,7                          | -45,2                          | 112,56                   | 0,073                                   | 0,0000087                                 | 0,31                 | 0,127                         | 0,0407                        | 2,84                                 |
| HCB           | 118741   | 0,0062                  | 0,000018               | 325                            | 231,8                          | 284,78                   | 0,0542                                  | 0,00000591                                | 0,5                  | 0,0695                        | 0,408                         | 5,73                                 |
| a-HCH         | 319846   | 8                       | 0,0000352              | 288                            | 112,5                          | 290,83                   | 0,0142                                  | 0,00000734                                | 0,97                 | 0,000499                      | 0,0279                        | 4,14                                 |
| b-HCH         | 319857   | 8                       | 0,0000352              | 288                            | 112,5                          | 290,83                   | 0,0142                                  | 0,00000734                                | 0,91                 | 0,000018                      | 0,0279                        | 4,14                                 |
| d-HCH         | 319868   | 8                       | 0,0000352              | 288                            | 112,5                          | 290,83                   |                                         |                                           | 0,5                  | 0,00021                       | 0,0279                        | 4,14                                 |
| PCP           | 87865    | 14                      | 0,00011                | 309,5                          | 174                            | 266,34                   | 0,056                                   | 0,0000061                                 | 1                    | 0,000001                      | 0,195                         | 5,12                                 |
| PCE           | 127184   | 206                     | 18,5                   | 121,3                          | -22,3                          | 165,83                   | 0,072                                   | 0,0000082                                 | 1                    | 0,724                         | 0,0481                        | 3,4                                  |
| TCE           | 79016    | 1280                    | 69                     | 87,2                           | -84,7                          | 131,39                   | 0,079                                   | 0,0000091                                 | 0,15                 | 0,403                         | 0,0157                        | 2,42                                 |
| VC            | 75014    | 8800                    | 2980                   | -13,3                          | -153,7                         | 62,5                     | 0,106                                   | 0,00000123                                | 1                    | 1,14                          | 0,0113                        | 1,62                                 |
| DCA, cis-1,2- | 107062   | 5100                    | 78,9                   | 83,5                           | -35,5                          | 98,96                    | 0,104                                   | 0,0000099                                 | 1                    | 0,0482                        | 0,00534                       | 1,48                                 |

| Chemical      | Absorption Factor, Dermal | Chronic Dermal RfD (mg/kg-day) | Subchronic Dermal RfD (mg/kg-day) | Chronic Dermal Slope Factor [1/(mg/kg-day)] | Chronic Inhalation Slope Factor [1/(mg/kg-day)] | Inhalation Unit Risk [1/(mg/m <sup>3</sup> )] | Chronic Inhalation RfC (mg/m <sup>3</sup> ) | Inhalation Subchronic RfC (mg/m <sup>3</sup> ) | Chronic Inhalation RfD (mg/kg-day) | Inhalation Subchronic RfD (mg/kg-day) | Chronic Oral RfD (mg/kg-day) | Subchronic Oral RfD (mg/kg-day) |
|---------------|---------------------------|--------------------------------|-----------------------------------|---------------------------------------------|-------------------------------------------------|-----------------------------------------------|---------------------------------------------|------------------------------------------------|------------------------------------|---------------------------------------|------------------------------|---------------------------------|
| Chloride      | 0,001                     |                                |                                   |                                             |                                                 |                                               |                                             |                                                |                                    |                                       |                              |                                 |
| Sulfate       | 0,001                     |                                |                                   |                                             |                                                 |                                               |                                             |                                                |                                    |                                       |                              |                                 |
| Benzene       | 0,01                      | 0,00388                        |                                   | 0,0567                                      | 0,0273                                          | 0,0078                                        | 0,03                                        |                                                | 0,00857                            |                                       | 0,004                        |                                 |
| Chlorobenzene | 0,01                      | 0,0062                         | 0,0217                            |                                             |                                                 |                                               | 0,05                                        | 0,5                                            | 0,0143                             | 0,14                                  | 0,02                         | 0,07                            |
| HCB           | 0,01                      | 0,0004                         | 0,00005                           | 3,2                                         | 1,61                                            | 0,46                                          |                                             |                                                |                                    |                                       | 0,0008                       | 0,0001                          |
| a-HCH         | 0,01                      |                                |                                   | 6,49                                        | 6,3                                             | 1,8                                           |                                             |                                                |                                    |                                       |                              |                                 |
| b-HCH         | 0,01                      |                                |                                   | 1,98                                        | 1,86                                            | 0,53                                          |                                             |                                                |                                    |                                       |                              |                                 |
| d-HCH         | 0,04                      | 0,000291                       | 0,00291                           | 1,34                                        |                                                 |                                               |                                             |                                                |                                    |                                       | 0,0003                       | 0,003                           |
| PCP           | 0,25                      | 0,03                           | 0,03                              | 0,12                                        |                                                 |                                               |                                             |                                                |                                    |                                       | 0,03                         | 0,03                            |
| PCE           | 0,01                      | 0,01                           | 0,1                               | 0,54                                        | 0,0207                                          | 0,0059                                        | 0,6                                         |                                                | 0,171                              |                                       | 0,01                         | 0,1                             |
| TCE           | 0,01                      | 0,000045                       |                                   | 2,67                                        | 0,4                                             | 0,11                                          | 0,04                                        |                                                | 0,0114                             |                                       | 0,0003                       |                                 |
| VC            | 0,01                      | 0,003                          |                                   | 1,5                                         | 0,0308                                          | 0,0088                                        | 0,1                                         |                                                | 0,0286                             |                                       | 0,003                        |                                 |
| DCA, cis-1,2- | 0,01                      | 0,02                           |                                   | 0,091                                       | 0,091                                           | 0,026                                         |                                             |                                                |                                    |                                       | 0,02                         |                                 |

Quelle: [http://risk.lsd.ornl.gov/cgi-bin/tox/TOX\\_select?select=nrad](http://risk.lsd.ornl.gov/cgi-bin/tox/TOX_select?select=nrad)

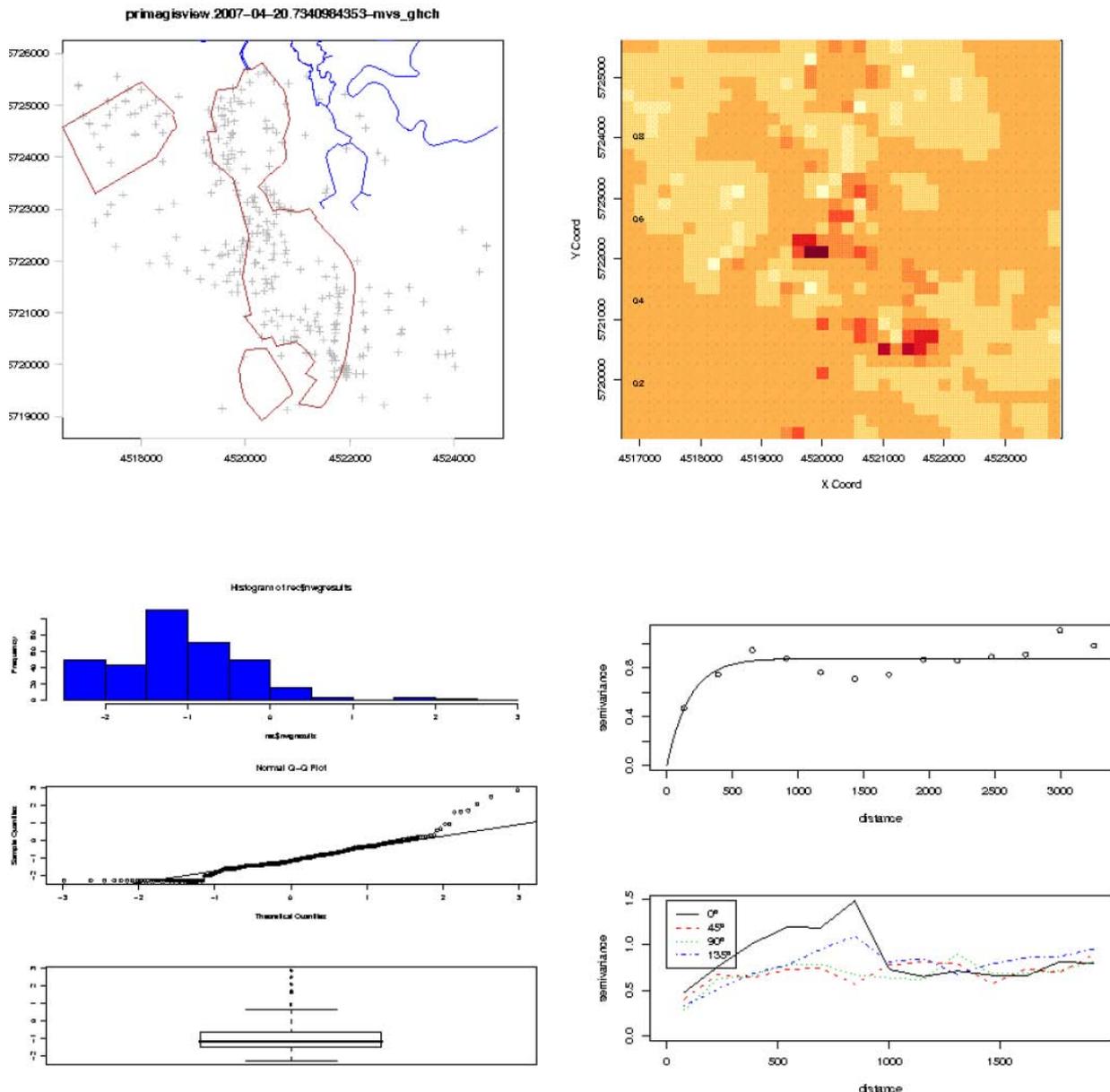
| RBCA SITE ASSESSMENT                             |                                                   |                                           |            |                       |         | Input Parameter Summary                              |                                 |                                                |    |                          |                        |                      |  |         |  |
|--------------------------------------------------|---------------------------------------------------|-------------------------------------------|------------|-----------------------|---------|------------------------------------------------------|---------------------------------|------------------------------------------------|----|--------------------------|------------------------|----------------------|--|---------|--|
| Site Name:<br>Site Location:                     |                                                   | Completed By:<br>Date Completed: 0-Jan-00 |            |                       |         | Job ID:<br><span style="float: right;">1 OF 1</span> |                                 |                                                |    |                          |                        |                      |  |         |  |
| Exposure Parameters                              |                                                   |                                           |            |                       |         | Surface Parameters                                   |                                 |                                                |    |                          |                        |                      |  |         |  |
|                                                  |                                                   |                                           |            |                       |         | General                                              |                                 | Construction                                   |    | (Units)                  |                        |                      |  |         |  |
|                                                  |                                                   | Residential                               |            | Commercial/Industrial |         |                                                      |                                 |                                                |    |                          |                        |                      |  |         |  |
|                                                  |                                                   | Adult                                     | (1-16 yrs) | (1-16 yrs)            | Chronic |                                                      |                                 |                                                |    |                          |                        |                      |  |         |  |
| AT <sub>c</sub>                                  | Averaging time for carcinogens (yr)               | 70                                        |            |                       |         | A                                                    | Source zone area                | NA                                             | NA | (cm <sup>2</sup> )       |                        |                      |  |         |  |
| AT <sub>n</sub>                                  | Averaging time for non-carcinogens (yr)           | 30                                        |            |                       | 25      | 1                                                    | W                               | Length of source-zone area parallel to wind    | NA | NA                       | (cm)                   |                      |  |         |  |
| BW                                               | Body weight (kg)                                  | 70                                        | 15         | 35                    | 70      |                                                      | W <sub>gw</sub>                 | Length of source-zone area parallel to GW flow | NA | NA                       | (cm)                   |                      |  |         |  |
| ED                                               | Exposure duration (yr)                            | 30                                        | 6          | 16                    | 25      | 1                                                    | U <sub>air</sub>                | Ambient air velocity in mixing zone            | NA | NA                       | (cm/s)                 |                      |  |         |  |
| τ                                                | Averaging time for vapor flux (yr)                | 30                                        |            |                       | 25      | 1                                                    | δ <sub>air</sub>                | Air mixing zone height                         | NA | NA                       | (cm)                   |                      |  |         |  |
| EF                                               | Exposure frequency (days/yr)                      | 350                                       |            |                       | 250     | 180                                                  | P <sub>a</sub>                  | Areal particulate emission rate                | NA | NA                       | (g/cm <sup>2</sup> /s) |                      |  |         |  |
| EFD                                              | Exposure frequency for dermal exposure            | 350                                       |            |                       | 250     |                                                      | L <sub>sc</sub>                 | Thickness of affected surface soils            | NA | NA                       | (cm)                   |                      |  |         |  |
| IR <sub>w</sub>                                  | Ingestion rate of water (L/day)                   | 2                                         |            |                       | 1       |                                                      |                                 |                                                |    |                          |                        |                      |  |         |  |
| IR <sub>s</sub>                                  | Ingestion rate of soil (mg/day)                   | 100                                       | 200        |                       | 50      | 100                                                  |                                 |                                                |    |                          |                        |                      |  |         |  |
| SA                                               | Skin surface area (dermat) (cm <sup>2</sup> )     | 5800                                      |            | 2023                  | 5800    | 5800                                                 |                                 |                                                |    |                          |                        |                      |  |         |  |
| M                                                | Soil to skin adherence factor                     | 1                                         |            |                       |         |                                                      |                                 |                                                |    |                          |                        |                      |  |         |  |
| ET <sub>swim</sub>                               | Swimming exposure time (hr/event)                 | 3                                         |            |                       |         |                                                      |                                 |                                                |    |                          |                        |                      |  |         |  |
| EV <sub>swim</sub>                               | Swimming event frequency (events/yr)              | 12                                        | 12         | 12                    |         |                                                      |                                 |                                                |    |                          |                        |                      |  |         |  |
| IR <sub>swim</sub>                               | Water ingestion while swimming (L/hr)             | 0.05                                      | 0.5        |                       |         |                                                      |                                 |                                                |    |                          |                        |                      |  |         |  |
| SA <sub>swim</sub>                               | Skin surface area for swimming (cm <sup>2</sup> ) | 23000                                     |            | 8100                  |         |                                                      |                                 |                                                |    |                          |                        |                      |  |         |  |
| IR <sub>fish</sub>                               | Ingestion rate of fish (kg/yr)                    | 0.025                                     |            |                       |         |                                                      |                                 |                                                |    |                          |                        |                      |  |         |  |
| F <sub>fish</sub>                                | Contaminated fish fraction (unitless)             | 1                                         |            |                       |         |                                                      |                                 |                                                |    |                          |                        |                      |  |         |  |
| Complete Exposure Pathways and Receptors         |                                                   |                                           |            |                       |         | Surface Soil Column Parameters                       |                                 |                                                |    |                          |                        |                      |  |         |  |
|                                                  |                                                   |                                           |            |                       |         | Value                                                |                                 | (Units)                                        |    |                          |                        |                      |  |         |  |
| <b>Groundwater:</b>                              |                                                   |                                           |            |                       |         | h <sub>cap</sub>                                     | Capillary zone thickness        | NA                                             |    |                          |                        | (cm)                 |  |         |  |
| Groundwater Ingestion                            |                                                   |                                           |            |                       |         | h <sub>v</sub>                                       | Vadose zone thickness           | NA                                             |    |                          |                        | (cm)                 |  |         |  |
| Soil Leaching to Groundwater Ingestion           |                                                   |                                           |            |                       |         | ρ <sub>s</sub>                                       | Soil bulk density               | NA                                             |    |                          |                        | (g/cm <sup>3</sup> ) |  |         |  |
| <b>Applicable Surface Water Exposure Routes:</b> |                                                   |                                           |            |                       |         | f <sub>oc</sub>                                      | Fraction organic carbon         | NA                                             |    |                          |                        | (-)                  |  |         |  |
| Swimming                                         |                                                   |                                           |            |                       |         | θ <sub>T</sub>                                       | Soil total porosity             | NA                                             |    |                          |                        | (-)                  |  |         |  |
| Fish Consumption                                 |                                                   |                                           |            |                       |         | K <sub>vs</sub>                                      | Vertical hydraulic conductivity | NA                                             |    |                          |                        | (cm/d)               |  |         |  |
| Aquatic Life Protection                          |                                                   |                                           |            |                       |         | K <sub>v</sub>                                       | Vapor permeability              | NA                                             |    |                          |                        | (cm <sup>2</sup> /d) |  |         |  |
| <b>Soil:</b>                                     |                                                   |                                           |            |                       |         | L <sub>gw</sub>                                      | Depth to groundwater            | NA                                             |    |                          |                        | (cm)                 |  |         |  |
| Direct Ingestion and Dermal Contact              |                                                   |                                           |            |                       |         | L <sub>t</sub>                                       | Depth to top of affected soils  | NA                                             |    |                          |                        | (cm)                 |  |         |  |
| <b>Outdoor Air:</b>                              |                                                   |                                           |            |                       |         | L <sub>base</sub>                                    | Depth to base of affected soils | NA                                             |    |                          |                        | (cm)                 |  |         |  |
| Particulates from Surface Soils                  |                                                   |                                           |            |                       |         | L <sub>subs</sub>                                    | Thickness of affected soils     | NA                                             |    |                          |                        | (cm)                 |  |         |  |
| Volatilization from Soils                        |                                                   |                                           |            |                       |         | pH                                                   | Soil/groundwater pH             | NA                                             |    |                          |                        | (-)                  |  |         |  |
| Volatilization from Groundwater                  |                                                   |                                           |            |                       |         | θ <sub>w</sub>                                       | Volumetric water content        | NA                                             | NA | NA                       | NA                     | (-)                  |  |         |  |
| <b>Indoor Air:</b>                               |                                                   |                                           |            |                       |         | θ <sub>a</sub>                                       | Volumetric air content          | NA                                             | NA | NA                       | NA                     | (-)                  |  |         |  |
| Volatilization from Subsurface Soils             |                                                   |                                           |            |                       |         |                                                      |                                 |                                                |    |                          |                        |                      |  |         |  |
| Volatilization from Groundwater                  |                                                   |                                           |            |                       |         |                                                      |                                 |                                                |    |                          |                        |                      |  |         |  |
| <b>Receptor Distance from Source Media</b>       |                                                   |                                           |            |                       |         | On-site                                              |                                 | Off-site 1                                     |    | Off-site 2               |                        | (Units)              |  |         |  |
| Groundwater receptor                             |                                                   |                                           |            |                       |         | 0                                                    | NA                              | NA                                             | NA |                          |                        | (cm)                 |  |         |  |
| Soil leaching to groundwater receptor            |                                                   |                                           |            |                       |         | NA                                                   | NA                              | NA                                             | NA |                          |                        | (cm)                 |  |         |  |
| Outdoor air inhalation receptor                  |                                                   |                                           |            |                       |         | NA                                                   | NA                              | NA                                             | NA |                          |                        | (cm)                 |  |         |  |
| Target Health Risk Values                        |                                                   |                                           |            |                       |         | Individual                                           |                                 | Cumulative                                     |    |                          |                        |                      |  |         |  |
| TR <sub>20</sub>                                 | Target Risk (class A&B carcinogens)               | 1.0E-6                                    |            | 1.0E-5                |         |                                                      |                                 |                                                |    |                          |                        |                      |  |         |  |
| TR <sub>c</sub>                                  | Target Risk (class C carcinogens)                 | 1.0E-5                                    |            | 1.0E-4                |         |                                                      |                                 |                                                |    |                          |                        |                      |  |         |  |
| THQ                                              | Target Hazard Quotient (non-carcinogenic risk)    | 1.0E+0                                    |            | 1.0E+0                |         |                                                      |                                 |                                                |    |                          |                        |                      |  |         |  |
| Modeling Options                                 |                                                   |                                           |            |                       |         |                                                      |                                 |                                                |    |                          |                        |                      |  |         |  |
| RBCA tier                                        |                                                   |                                           |            |                       |         | Tier 1                                               |                                 |                                                |    |                          |                        |                      |  |         |  |
| Outdoor air volatilization model                 |                                                   |                                           |            |                       |         | NA                                                   |                                 |                                                |    |                          |                        |                      |  |         |  |
| Indoor air volatilization model                  |                                                   |                                           |            |                       |         | NA                                                   |                                 |                                                |    |                          |                        |                      |  |         |  |
| Soil leaching model                              |                                                   |                                           |            |                       |         | NA                                                   |                                 |                                                |    |                          |                        |                      |  |         |  |
| Use soil attenuation model (SAM) for leachate?   |                                                   |                                           |            |                       |         | NA                                                   |                                 |                                                |    |                          |                        |                      |  |         |  |
| Air dilution factor                              |                                                   |                                           |            |                       |         | NA                                                   |                                 |                                                |    |                          |                        |                      |  |         |  |
| Groundwater dilution-attenuation factor          |                                                   |                                           |            |                       |         | NA                                                   |                                 |                                                |    |                          |                        |                      |  |         |  |
| NOTE: NA = Not applicable                        |                                                   |                                           |            |                       |         |                                                      |                                 |                                                |    |                          |                        |                      |  |         |  |
| Transport Parameters                             |                                                   |                                           |            |                       |         | Off-site 1                                           |                                 | Off-site 2                                     |    | Off-site 1               |                        | Off-site 2           |  | (Units) |  |
| Lateral Groundwater Transport                    |                                                   |                                           |            |                       |         | Groundwater Ingestion                                |                                 |                                                |    | Soil Leaching to GW      |                        |                      |  |         |  |
| α <sub>x</sub>                                   | Longitudinal dispersivity                         | NA                                        |            | NA                    |         | NA                                                   |                                 | NA                                             |    | NA                       |                        | NA                   |  | (cm)    |  |
| α <sub>y</sub>                                   | Transverse dispersivity                           | NA                                        |            | NA                    |         | NA                                                   |                                 | NA                                             |    | NA                       |                        | NA                   |  | (cm)    |  |
| α <sub>z</sub>                                   | Vertical dispersivity                             | NA                                        |            | NA                    |         | NA                                                   |                                 | NA                                             |    | NA                       |                        | NA                   |  | (cm)    |  |
| Lateral Outdoor Air Transport                    |                                                   |                                           |            |                       |         | Soil to Outdoor Air Inhal.                           |                                 |                                                |    | GW to Outdoor Air Inhal. |                        |                      |  |         |  |
| C <sub>y</sub>                                   | Transverse dispersion coefficient                 | NA                                        |            | NA                    |         | NA                                                   |                                 | NA                                             |    | NA                       |                        | NA                   |  | (cm)    |  |
| C <sub>z</sub>                                   | Vertical dispersion coefficient                   | NA                                        |            | NA                    |         | NA                                                   |                                 | NA                                             |    | NA                       |                        | NA                   |  | (cm)    |  |
| ADF                                              | Air dispersion factor                             | NA                                        |            | NA                    |         | NA                                                   |                                 | NA                                             |    | NA                       |                        | NA                   |  | (-)     |  |
| Surface Water Parameters                         |                                                   |                                           |            |                       |         | Off-site 2                                           |                                 | (Units)                                        |    |                          |                        |                      |  |         |  |
| Q <sub>sw</sub>                                  | Surface water flowrate                            | NA                                        |            |                       |         | NA                                                   |                                 |                                                |    | (cm <sup>3</sup> /s)     |                        |                      |  |         |  |
| W <sub>d</sub>                                   | Width of GW plume at SW discharge                 | NA                                        |            |                       |         | NA                                                   |                                 |                                                |    | (cm)                     |                        |                      |  |         |  |
| δ <sub>p</sub>                                   | Thickness of GW plume at SW discharge             | NA                                        |            |                       |         | NA                                                   |                                 |                                                |    | (cm)                     |                        |                      |  |         |  |
| U <sub>sw</sub>                                  | Groundwater-to-surface water dilution factor      | NA                                        |            |                       |         | NA                                                   |                                 |                                                |    | (-)                      |                        |                      |  |         |  |

Abb. 1: RBCA Eingangsparameter

### 9.3 Beispiel-Bericht

Dieses Beispiel zeigt die automatische Berichtsausgabe für die Analyse von gHCH. Der verwendete Untersuchungsraum und die Probenahmeempunkte sind in einer Karte (GK, Zone4) mit den Vorflutern und den Umrissen der Betriebsgelände zu sehen. Rechts daneben eine Kriging-Interpolation für den gewählten Ausschnitt. Darunter die der Datenauswahl zugehörigen omnidirektionalen bzw. direktionalen Variogramme. Links unten Histogramm, Quantil-Quantil-Plot und Boxplot.

#### Statistische Analyse



## **9.4 Interpolationen**

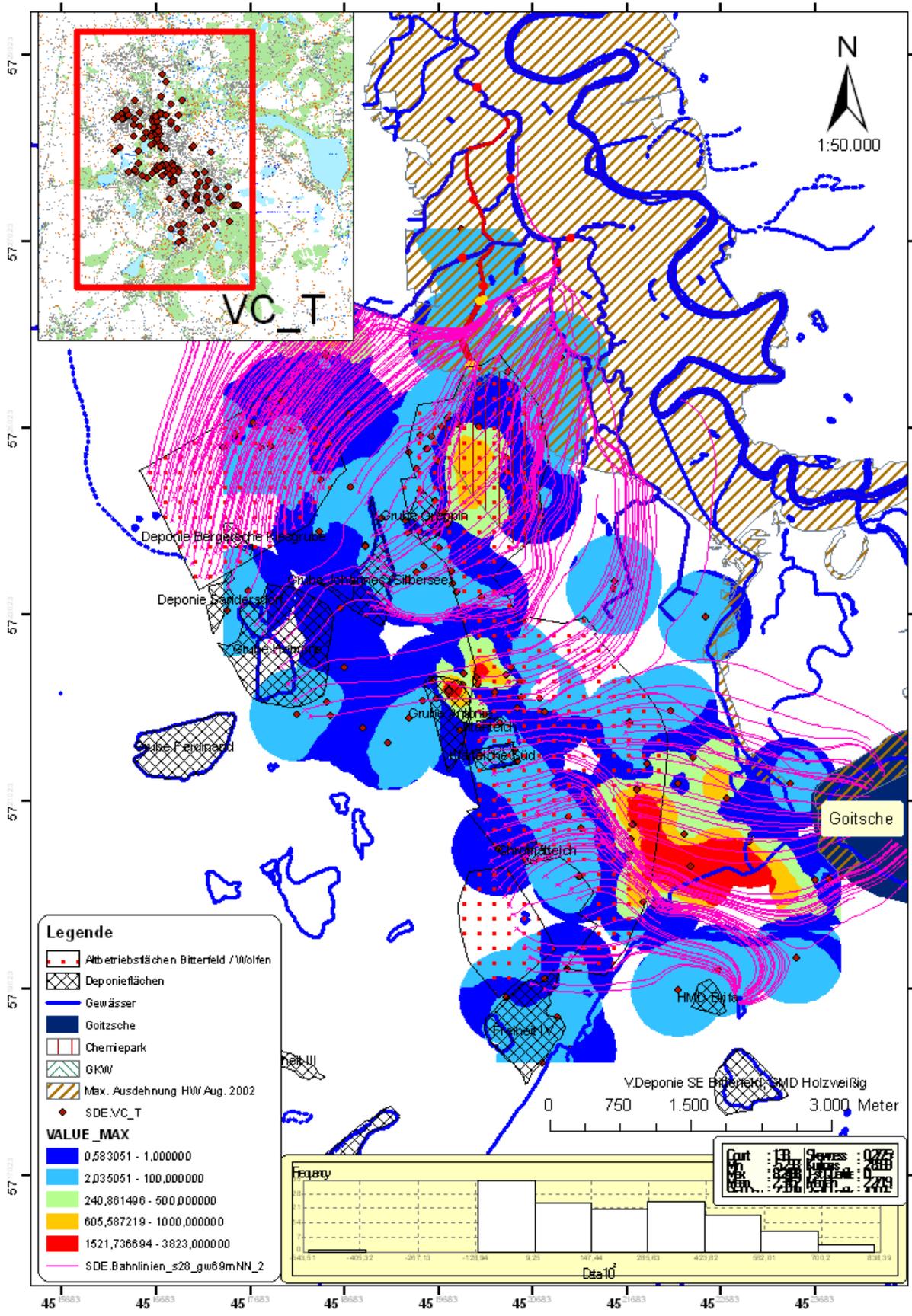
Die auf den folgenden Seiten gezeigten Interpolationen von Vinylchlorid für den tertiären Grundwasserleiter (VC\_T, nächste Seite) bzw. den quartären Grundwasserleiter (VC\_Q, übernächste Seite) sind Prinzipdarstellungen der mit ArcGIS/Geostatistical Analyst erfolgten Regionalisierungen. Im Inset links oben wird jeweils der interpolierte Raum im Zusammenhang gezeigt und die Lage der verwendeten Messstellen dargestellt.

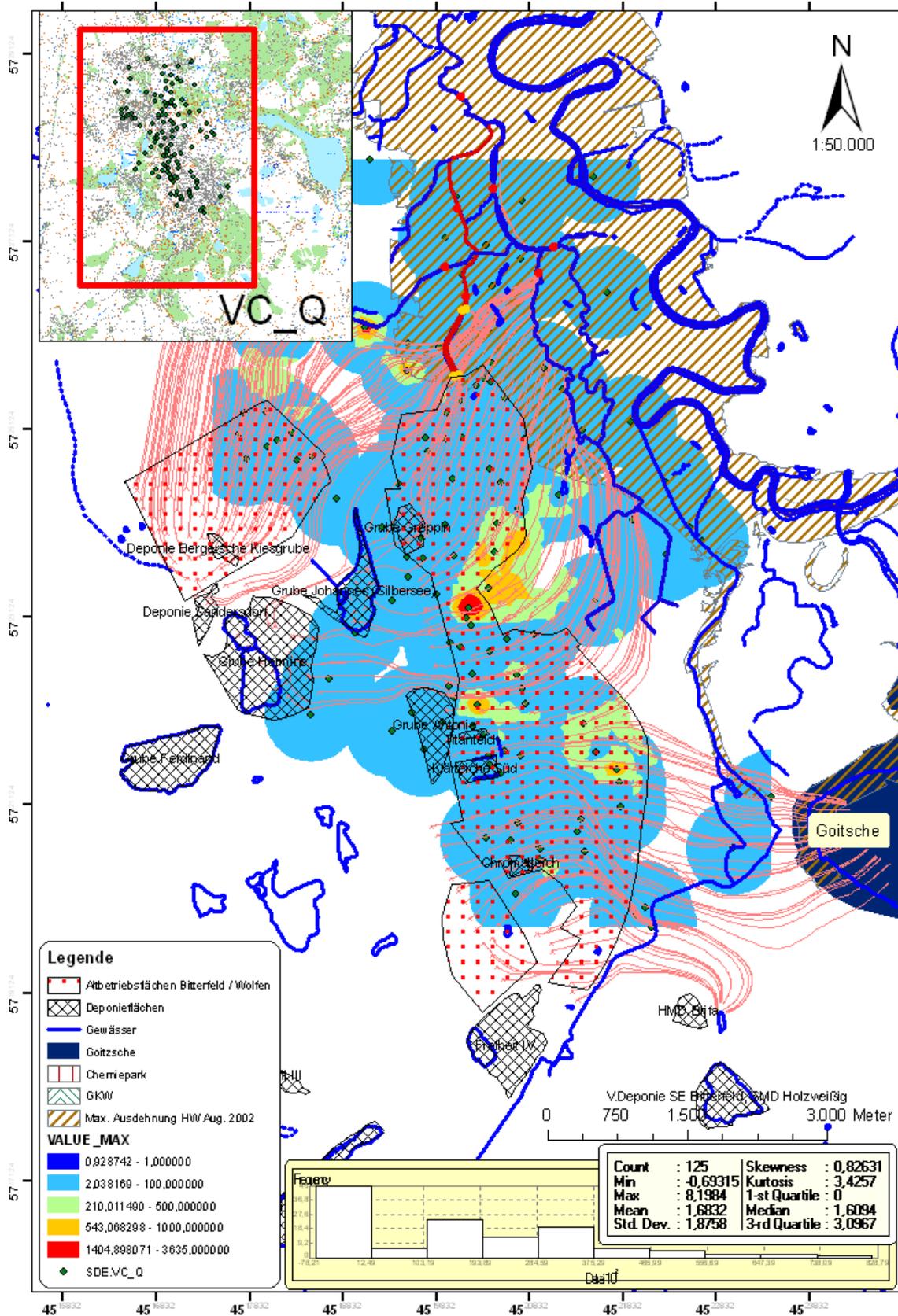
Im unteren Teil der Seiten ist ein Histogramm sowie die Summen-Statistik eingefügt. Die Interpolation erfolgte anhand für die jeweilige Messstelle arithmetisch gemittelter, dann logarithmisch umgeformter Daten. (Gleiches gilt ebenso die Darstellung des Histogramms und der beschreibenden Statistik).

Die interpolierten Flächen wurden mit einer Pufferzone, die mit 500m Radius um die Messpunkte gelegt wurde, verschnitten, um den „Geltungsbereich“ der Interpolation nicht über sehr weit über die gemessenen Flächen hinaus auszudehnen.

Die Skalen wurden per Hand in 5 Klassen eingeteilt, wobei die 4 ersten/niedrigeren Klassen gleich abgestuft sind, während der höchsten Klasse die Werte bis zum höchsten betrachteten Wert zugeschlagen wurden.

Da die Interpolationen im Sinne eines Screenings zur Feststellung einer Belastungsübersichtskarte verwendet werden sollten, wurden die Default-Vorgaben der Parametrisierung durch den Geostatistical Analyst akzeptiert.





**Legende**

- Abtrietflächen Bitterfeld / Wolfen
- Deponieflächen
- Gewässer
- Goitzsche
- Chemiepark
- GKW
- Max. Ausdehnung HW Aug. 2002

**VALUE\_MAX**

- 0,928742 - 1,000000
- 2,038169 - 100,000000
- 210,011490 - 500,000000
- 543,068298 - 1000,000000
- 1404,898071 - 3635,000000

SDE.VC\_Q

|           |            |               |           |
|-----------|------------|---------------|-----------|
| Count     | : 125      | Skewness      | : 0,82631 |
| Min       | : -0,69315 | Kurtosis      | : 3,4257  |
| Max       | : 8,1984   | 1-st Quartile | : 0       |
| Mean      | : 1,6832   | Median        | : 1,6094  |
| Std. Dev. | : 1,8758   | 3-rd Quartile | : 3,0967  |



## 9.5 Skripte

### SQL\_Datendefinitionsabfrage

Eine Umgrenzung räumlichen Referenzsystem EPSG:31468 (GK, Zone4) einfügen:

```
INSERT INTO grenzen VALUES ('<dtml-var name>', GeometryFromText ('<dtml-var new_geom>', 31468));
```

Übergeben wird ausserdem der Name der neuen Grenze und ein Polygon als Well-Known-Text WKT (z.B.):

```
name='test5'
new_geom="POLYGON ((4518000.000000 5720000.000000, 4518000.000000 5728000.000000,
4526000.000000 5728000.000000, 4526000.000000 5720000.000000, 4518000.000000
5720000.000000))"
```

Eine Datensicht erzeugen:

```
CREATE OR REPLACE VIEW "<dtml-var analysen_name>--<dtml-var t_name>" AS
SELECT a.the_geom, a.nwgresults, a.rw, a.hw from grenzen g, <dtml-var t_name> a
WHERE g.analysen_name='<dtml-var analysen_name>'
AND g.the_geom && a.the_geom;
```

### SQL-Abfragen

Auswahl aller Tabellen, die mit 'mvs' beginnen:

```
select * from pg_tables WHERE tablename LIKE 'mvs_%';
```

Auswahl aller Sichten (Views) die mit ,primagisview' beginnen:

```
select viewname from pg_views WHERE viewname LIKE 'primagisview.%';
```

Auswahl aller Umgrenzungspolygone (wie sie durch den Benutzer per PrimaGIS erzeugt werden:

```
select * from grenzen;
```

### R-Skript zur Kriging-Interpolation in R

```
Laden der Bibliotheken für Geostatistik und
für die Verbindung zur PostgreSQL-Datenbank
RcolorBrewer für die Erstellung einer abgestuften Palette Gelb-Orange-Rot

library(geoR)
library(RdbiPgSQL)
library(RColorBrewer)
mypalette<- brewer.pal(10,"YlOrRd")

Konstruktion der SQL-Abfrage aus Formulardaten
qstr="SELECT AVG(rw)AS rw, AVG(hw)as hw, <dtml-var par1>(<dtml-var
pot>(nwgresults)) as nwgresults FROM \"<dtml-var t_name>\" GROUP BY rw,hw<dtml-
unless par1>,nwgresults</dtml-unless> ORDER BY rw,hw"

Verbindungsparameter für die Datenbank
conn <- dbConnect(PgSQL(), host="141.48.168.106", dbname="bsp2", user="pgsql")

Verbindung herstellen, Abfrage durchführen und das Ergebnis als geodata-
Objekt zurückgeben
query <- dbSendQuery(conn,qstr)
rec <- (dbGetResult(query))
ctc <- as.geodata(rec)
```

```

Die maximale Distanz fürs Kriging errechnet sich als 0.3 x Erstreckung in
Rechts- oder Hochrichtung, je nachdem welche grösser ist (für
nichtquadratische Suchräume
xext<- max(rec$rw)-min(rec$rw)
yext<- max(rec$hw)-min(rec$hw)

omnidirektionales Variogramm und Richtungsvariogramme berechnen
ctc.v <- variog(ctc, max.dist= .3*(max(c(xext,yext))))
ctc.v4 <- variog4(ctc, max.dist= .3*(max(c(xext,yext))))

Name des Ausgabebildes, Typ=png8,png256 oder tiff,bmp
bitmap("kriging", type="<dtml-var ausgabe>")

Das Modellvariogramm wird über Least Squares fitting aus einer
Matrix initialer Werte errechnet (exponentielles Modell)
ini.vals <- expand.grid(seq(0,5,l=25), seq(0,200,l=20))
ctc.vf <- variofit(ctc.v, ini=ini.vals, cov.model="exp")

Grid für die Vorhersagelokalitäten in 100m-Schritten über die
Gesamterstreckung des Suchraums konstruieren und ein Umgrenzungspolygon
für den zu berechnenden Raum laden
gr<- expand.grid(x=seq(min(rec$rw), max(rec$rw), by=100),y=seq(min(rec$hw),
max(rec$hw), by=100))
bor<- read.table("/home/ssh/border_bit.dat", head=F)

Grid mit Umgrenzung verschneiden
gi <- polygrid(gr, bor=bor)

Kriging mit den automatisch angepassten Variogrammparametern
auf den eingestellten Vorhersagegrid-Lokalitäten
KC<- krige.control(obj.mo=ctc.vf)
ctc.k<- krige.conv(ctc, loc=gi, krige=KC)

Krigingvorhersage und Umgrenzungspolygon zeichnen
image(ctc.k, col=mypalette)
legend.krige(y.leg=c(min(rec$hw)+10,max(rec$hw)-10),x.leg=c(min(rec$rw)-
((min(rec$rw)-4500000)/10), min(rec$rw)-((min(rec$rw)-4500000)/20)+500),
val=sqrt(ctc.k$pred), vert=TRUE, col=mypalette)
polygon(bor)

Grafikausgabe beenden
dev.off()

```

## ***Transkript einer R-Beispielsitzung zur Kriginginterpolation***

### **R Method at /intra/R\_ex/kriging\_geoR**

---

#### **Parameters used:**

```

putObject('t.name', 'mvs_ahch')
putObject('pot', 'log')

```

```
putObject('ausgabe', 'png256')
putObject('par1', 'AVG')
```

---

## Execution Result:

Transcript:kriging =

```

Analysis of geostatistical data
For an Introduction to geoR go to http://www.leg.ufpr.br/geoR
geoR version 1.6-14 (built on 2007/04/11) is now loaded

variog: computing omnidirectional variogram
variog: computing variogram for direction = 0 degrees (0 radians)
 tolerance angle = 22.5 degrees (0.393 radians)
variog: computing variogram for direction = 45 degrees (0.785 radians)
 tolerance angle = 22.5 degrees (0.393 radians)
variog: computing variogram for direction = 90 degrees (1.571 radians)
 tolerance angle = 22.5 degrees (0.393 radians)
variog: computing variogram for direction = 135 degrees (2.356 radians)
 tolerance angle = 22.5 degrees (0.393 radians)
variog: computing omnidirectional variogram
variofit: weights used: npairs
variofit: minimisation function used: optim
variofit: searching for best initial value ... selected values:
 sigmasq phi tausq kappa
initial.value "0.83" "147.37" "0" "0.5"
status "est" "est" "est" "fix"
loss value: 555.826641430941
krige.conv: model with constant mean
krige.conv: Kriging performed using global neighbourhood
null device
 1
```

---

## Expression used:

```
library(geoR)
library(RdbiPgSQL)

qstr="SELECT AVG(rw)AS rw, AVG(hw)as hw, AVG(log(nwgrresults)) as nwgrresults FROM
\"mvs_ahch\" GROUP BY rw,hw ORDER BY rw,hw"
conn <- dbConnect(PgSQL(), host="141.48.168.106", dbname="bsp2", user="pgsql")
query <- dbSendQuery(conn,qstr)
rec <- (dbGetResult(query))
ctc <- as.geodata(rec)

xext<- max(rec$rw)-min(rec$rw)
yext<- max(rec$hw)-min(rec$hw)

ctc.v <- variog(ctc, max.dist= .3*(max(c(xext,yext))))
ctc.v4 <- variog4(ctc, max.dist= .3*(max(c(xext,yext))))

bitmap("kriging", type="png256")
```

```

ini.vals <- expand.grid(seq(0,5,l=25), seq(0,200,l=20))
ctc.vf <- variofit(ctc.v, ini=ini.vals, cov.model="exp")

gr <- expand.grid(x=seq(min(rec$rw), max(rec$rw), by=100),y=seq(min(rec$hw),
max(rec$hw), by=100))

bor<- read.table("/home/ssh/border_bit.dat", head=F)
gi <- polygrid(gr, bor=bor)

KC<- krige.control(obj.mo=ctc.vf)
ctc.k<- krige.conv(ctc, loc=gi, krige=KC)
image(ctc.k)
polygon(bor)

dev.off()

```

## ***R-Skript für die explorative Datenanalyse***

```

library(RdbiPgSQL)
qstr="SELECT AVG(rw)AS rw, AVG(hw)as hw, <dtml-var par1>(<dtml-var
pot>(nwgresults)) as nwgresults FROM \"<dtml-var t_name>\" GROUP BY rw,hw<dtml-
unless par1>,nwgresults</dtml-unless> ORDER BY rw,hw"
conn <- dbConnect(PgSQL(), host="141.48.168.106", dbname="bsp2", user="pgsql")
query <- dbSendQuery(conn, qstr)
rec <- (dbGetResult(query))
bitmap("eda", type="<dtml-var ausgabe>")
par(mfrow=c(3,1)) # erstellt ein Mehrfach-Diagramm mit 3 Zeilen, 1 Spalte
hist(rec$nwgresults, col="blue") # Histogramm
qqnorm(rec$nwgresults) # Quantil-Quantil-Norm-Plot
qqline(rec$nwgresults) # der theoretische Verlauf (bei Normalverteilung) als Linie
boxplot(rec$nwgresults) # Boxplot
dev.off()

```

## ***R-Skript für die Kartendarstellung***

```

Maptools werden zum Einlesen der Shapedateien gebraucht. Als Abhängigkeit davon
werden die Bibliotheken sp und spatial geladen. Diese werden zur Erstellung
von SpatialDataFrames und SpatialPoints etc. verwendet
library(maptools)
library(RdbiPgSQL)

proj4string=CRS("+init=epsg:31468")
shppath="/usr/local/www/data/workshop/shapes_GermanyZone4/vorfluter"
shppath2="/usr/local/www/data/workshop/shapes/BetriebsFlaechen"

qstr="SELECT AVG(rw)AS rw, AVG(hw)as hw, <dtml-var par1>(<dtml-var
pot>(nwgresults)) as nwgresults FROM \"<dtml-var t_name>\" GROUP BY rw,hw<dtml-
unless par1>,nwgresults</dtml-unless> ORDER BY rw,hw"
conn <- dbConnect(PgSQL(), host="141.48.168.106", dbname="bsp2", user="pgsql")
query <- dbSendQuery(conn, qstr)

```

```

rec <- (dbGetResult(query))

m<- as.matrix(c(recrw, rechw))
dim (m)=c(length(m)/2,2)
g<-SpatialPoints(m,proj4string)

sh <- readShapeLines(shppath, proj4string)
sh2 <- readShapeLines(shppath2, proj4string)
bitmap(file="karte", type="<dtml-var ausgabe>")

plot(g, axes = TRUE, las = 1, col="grey")
title("<dtml-var t_name>")
plot(sh, col="blue", add=TRUE)
plot(sh2, col="brown", add=TRUE)
dev.off()

```

## **Python-Skript zur Erstellung eines neuen PrimagisViews**

*Ausschnitt mit den letzten Zeilen von createViewObject aus dem PrimaGIS-Skin*

```

createViewObject
. . .
We assume that the PrimaGISView object will be created inside
a PrimaGIS instance, so we can just acquire the current map extent.
o.setView(context.getMapView())
if o.getTypeInfo().getActionById('edit', None) is None:
 state.setStatus('success_no_edit')

if script_id:
 state.setId(script_id)

if portal_status_message:
 state.set(portal_status_message=portal_status_message)

hier wird die Geometrie des eingestellten Bereichs in der PrimaGIS-Karte
in Well-Known-Text umgewandelt und an das Python-Skript insert_grenzen
übergeben:
container.Analysensammlung.insert_grenzen(name=new_id,
new_geom=o.getGeometry().toWKT())

return state.set(context=o)

```

## **Plone Controller Page Template zur Auswahl der Stoffe und Parameter**

```

<!--FormEingabe.cpt →
<html xmlns="http://www.w3.org/1999/xhtml" xml:lang="en"
 lang="en"
 metal:use-macro="here/main_template/macros/master"
 i18n:domain="plone">
<body>

<metal:block fill-slot="head_slot" tal:define="dummy
python:request.set('disable_border', 1)" />

```

```

<metal:main fill-slot="main">
 <tal:main-macro metal:define-macro="main">
 <div metal:use-macro="here/document_actions/macros/document_actions">
 Document actions (print, sendto etc)
 </div>
 <h1 tal:content="object_title" class="documentFirstHeading">
 Title or id
 </h1>
<form name="tabellenauswahl" action="#" method="post" tal:attributes="action
template/id"
tal:define="errors options/state/getErrors">
 <div class="field" tal:define="error errors/tab | nothing;
 tab request/tab | nothing;"
 tal:attributes="class python:test(error, 'field error', 'field')">

```

Im ersten Schritt wird für eine Kombination aus dem gewählten Stoff und der räumlichen

Auswahl einer Umgrenzung eine Auswahl der Daten als neue "Sicht" in die Datenbank geschrieben.

Für diese Daten werden im Folgenden die Analysen durchgeführt.

```

<p>
 <label for="tab">Stoff auswählen:</label>
 (Required)
<p>
 <select name="tab" >
 <option tal:repeat="parts container/mvs_tabellen"
tal:content="parts/tablename" />
 </select>
<p>
 <label for="grz">Gebietsumgrenzung auswählen:</label>
<p>
 <select name="grz" >
 <option tal:repeat="parts container/Analysensammlung/grenzen"
tal:content="parts/analysen_name" />
 </select>
<p>
 <input type="hidden" value ="1" name="form.submitted" />
 <input type="submit" name="form.button.button1" value="Datenauswahl erzeugen"
title="Teildatensatz erzeugen" />
</div>
</form>
</tal:main-macro>
</metal:main>
</body>
</html>

```

## Plone Controller Page Template zur Erstellung einer Datensicht

<!-- erstellung.cpt →

Aus Platzgründen wird der Seitenkopf nicht gezeigt

```
<form name="unterauswahl" action='#' method="post" tal:attributes="action
template/id"
tal:define="errors options/state/getErrors">

<div class="field" tal:define="error errors/tab | nothing;
tab request/tab | nothing;"
tal:attributes="class python:test(error, 'field error', 'field')">
 <label for="tab">Stoff auswahl: </label>
 <p tal:define="global tabellenname request/form/tab |
python:string('mvs_ahch')" />
 <p tal:define="global grz request/form/grz| python:string('irgendeine
Grenze')" />
 <p tal:define="global params python:{grz:tabellenname}" />
 <p tal:define="global a_name python:'.join(['%s-%s' % (k,v) for k,v in
params.items()])" />
 <p
tal:content="python:portal.Analysensammlung.innerhalb(t_name=tabellenname,
analysen_name=grz)" />

 <h1 tal:content="a_name" class="documentFirstHeading">
 Title or id
 </h1>
 Eine neue Sicht auf den Datensatz wurde erzeugt.

<select name="t_name">
 <option tal:repeat="parts container/sichten_tabellen"
tal:content="parts/viewname" />
</select>

<select name="pot" >
 <option value=""> - </option>
 <option value="log">Logarithmisch</option>
</select>

<select name="par1" >
 <option value="AVG">Durchschnitt der Werte einer Bohrung</option>
 <option value="MIN">Minimum der Werte einer Bohrung</option>
 <option value="MAX">Maximum der Werte einer Bohrung</option>
</select>

 <input type="hidden" value ="1" name="form.submitted" />
 <input type="submit" name="form.button.button1" value="Datenanalyse"
title="Explorative Datenanalyse und Visualisierung" />
 <input type="submit" name="form.button.button2" value="Kriginginterpolation"
title="Regionalisierung mit Kriging und Summenstatistik" />
```

```

 <input type="submit" name="form.button.button3" value="Kartendarstellung"
title="Messpunktverteilungskarte" />
</div>
</form>
</tal:main-macro>
</metal:main>
</body>
</html>

```

## **Page Template zur Darstellung der Ergebnisse der EDA und des Krigings**

<!--darstellung.pt →

Aus Platzgründen wird der Seitenkopf nicht gezeigt

```

 <p tal:define="global t_name python:request.get('t_name')" />
 <h1 tal:content="t_name" class="documentFirstHeading">
 Title or id
 </h1>
 <p tal:define="global tipo python:string('png256')" />
 <p tal:define="global exp python:request.get('pot')" />
 <p tal:define="global par python:request.get('par1')" />
<table>
<tr>
 <td>Summenstatistik:
 </td> <td tal:content="python:here.summary(t_name=t_name, pot=exp, par1=par)" />
 <td></td>
</tr>
<tr>
 <td>Die zur Analyse verwendeten Parameter sind:
 </td>
 <td>

Exponent:

Aggregationsparameter: <span tal:content="python:string(par)"
/>
 </td>
 <td></td>
</tr>
</table>
<table>
<tr>
 <td tal:content="structure python:here.EDA(t_name=t_name, ausgabe=tipo, pot=exp,
par1=par)" />
 <td></td>
 <td></td>
</tr>
<tr>
 <td tal:content="structure python:here.kriging_geor_big(t_name=t_name,
ausgabe=tipo, pot=exp, par1=par)" />
 <td></td>
 <td></td>
</tr>

```

```
</table>
 </tal:main-macro>
</metal:main>
</body>
</html>
```

## **Ausschnitt aus der map-Datei für den UMN-Mapserver**

*Der folgende Ausschnitt zeigt die Layer-Definition für a-HCH. Datenquelle ist hier die PostGIS-Datenbank.*

```
LAYER
 NAME "aHCH"
 TYPE POINT
 STATUS OFF
 TOLERANCE 30
 TOLERANCEUNITS PIXELS
 CONNECTIONTYPE POSTGIS
 CONNECTION "host=141.48.168.106 port=5432 dbname=bsp2 user=pgsql"
 DATA "the_geom from mvs_ahch USING UNIQUE gid USING SRID=31468"
 EXTENT 4516000 5721050 4525500 5725000
 DUMP TRUE # WFS-Funktionalität
 METADATA
 "wfs_srs" "EPSG:31468"
 "wfs_version" "1.0.0"
 "wfs_grouptitle" "HCH"
 "wfs_title" "alpha-HCH Messungen"
 END
 LABELITEM 'gid'
 CLASS
 TEMPLATE "query.html" # Layer-Attribut abfragbar. Ergebnis in query.html
 NAME 'aHCH'
 STYLE
 COLOR 10 0 25
 OUTLINECOLOR 255 255 100
 SYMBOL "circle"
 SIZE 9
 END
 END
 PROJECTION
 "init=epsg:31468" # EPSG_Projektionsparameter
 END
END
```

## Eingabeparameter und Ergebnis für WV089/LK09 in RISC4 (für Ergebnisse in Kap. 6.2)

Title:

Bitterfeld/Wolfen WV089, LK09  
04/26/07 22:35

Scenarios:

Child Resident - Typical  
Adult Resident - Typical

Routes:

INHALATION OF GW SPRAY  
DERMAL CONTACT WITH IRRIG. WATER  
INGESTION OF VEGETABLES

Chemicals:

Vinyl Chloride

|                                                      | SCENARIO: |           |
|------------------------------------------------------|-----------|-----------|
| SUMMARY OF INPUT PARAMETERS                          | 1         | 2         |
| -----                                                |           |           |
| <b>LIFETIME AND BODY WEIGHT</b>                      |           |           |
| Body Weight (kg)                                     | 15.0      | 70.0      |
| Lifetime (years)                                     | 70.0      | 70.0      |
| <b>INGESTION OF VEGETABLES</b>                       |           |           |
| Root Veg. Ingestion Rate (g/day)                     | 48.5      | 87.5      |
| Above Ground Veg. Ing. Rate(g/day)                   | 55.8      | 127.      |
| Fraction Organic Carbon in Soil g/g                  | 5.000E-02 | 5.000E-02 |
| Exp. Frequency Veg. (events/year)                    | 15.0      | 15.0      |
| Exp. Duration Veg. Intake (years)                    | 6.00      | 9.00      |
| Fraction grown in home garden (-)                    | 0.100     | 0.100     |
| Koc [(mg/l)/(mg/l)] (from chemical database)         |           |           |
| Vinyl Chloride                                       | 19.       | 19.       |
| log Kow (from chemical database)                     |           |           |
| Vinyl Chloride                                       | 1.5       | 1.5       |
| Vegetable Uptake Factor [-] (from chemical database) |           |           |
| Vinyl Chloride                                       | ND        | ND        |
| Kd [(mg/L)/(mg/kg)] (from chemical database)         |           |           |
| Vinyl Chloride                                       | ND        | ND        |
| <b>INHALATION OF GW SPRAY</b>                        |           |           |
| Width of Sprinkler Spray (m)                         | 25.0      | 25.0      |
| Height of Breathing Zone (m)                         | 2.00      | 2.00      |
| Average Windspeed (m/s)                              | 3.50      | 3.50      |
| Temperature of Irrigation Water (C)                  | 20.0      | 20.0      |
| Sprinkler Flow Rate (l/min)                          | 30.0      | 30.0      |
| Droplet Diameter Sprinkler (cm)                      | 0.200     | 0.200     |
| Droplet Droptime for Sprinkler (s)                   | 5.00      | 5.00      |
| Time in Sprinkler (hour/day)                         | 0.500     | 0.500     |
| Inhal. Rate Outdoors (m <sup>3</sup> /hr)            | 0.830     | 0.830     |
| Lung Retention Factor (-)                            | 1.00      | 1.00      |
| Exp. Freq Irrigation (events/year)                   | 20.0      | 20.0      |
| Exp. Duration Groundwater (years)                    | 6.00      | 9.00      |
| Absorption Adjustment Factor for                     |           |           |
| Inhalation (-)                                       |           |           |
| Vinyl Chloride                                       | 1.0       | 1.0       |
| Henry's Law Constant (-)                             |           |           |
| Vinyl Chloride                                       | 1.1       | 1.1       |
| Molecular Weight (g/mole)                            |           |           |
| Vinyl Chloride                                       | 62.       | 62.       |
| <b>DERMAL CONTACT WITH IRRIG. WATER</b>              |           |           |
| Total Skin Surface Area (cm <sup>2</sup> )           | 6.800E+03 | 1.840E+04 |
| Fraction Skin Exposed to Water (-)                   | 1.00      | 0.100     |
| Time in Irrigation Water (hour/day)                  | 0.500     | 0.500     |

|                                                                                    |          |          |
|------------------------------------------------------------------------------------|----------|----------|
| Exp. Freq Irrigation (events/year)                                                 | 20.0     | 20.0     |
| Exp. Duration Groundwater (years)                                                  | 6.00     | 9.00     |
| Dermal Permeability Coefficient (cm/hour)<br>Vinyl Chloride                        | 7.30E-03 | 7.30E-03 |
| Absorption Adjustment Factor for<br>Dermal Exposure to Water (-)<br>Vinyl Chloride | 1.0      | 1.0      |

MEDIA CONCENTRATIONS

-----

|                                              |          |          |
|----------------------------------------------|----------|----------|
| Conc. in Irrigation Water (mg/L)             |          |          |
| - This will be the same as groundwater conc. |          |          |
| - Used to calculate risk and hazard index.   |          |          |
| Vinyl Chloride                               | 5.61E-02 | 5.61E-02 |

SLOPE FACTORS AND REFERENCE DOSES

-----

|                                                           |          |          |
|-----------------------------------------------------------|----------|----------|
| Ingestion Slope Factor [1/(mg/kg-day)]<br>Vinyl Chloride  | 1.5      | 1.5      |
| Ingestion Reference Dose (mg/kg-day)<br>Vinyl Chloride    | 3.00E-03 | 3.00E-03 |
| Inhalation Slope Factor [1/(mg/kg-day)]<br>Vinyl Chloride | 3.10E-02 | 3.10E-02 |
| Inhalation Reference Dose (mg/kg-day)<br>Vinyl Chloride   | 2.90E-02 | 2.90E-02 |
| Dermal Slope Factor [1/(mg/kg-day)]<br>Vinyl Chloride     | 1.5      | 1.5      |
| Dermal Reference Dose (mg/kg-day)<br>Vinyl Chloride       | 3.00E-03 | 3.00E-03 |

SCENARIO:

|                    |   |   |       |
|--------------------|---|---|-------|
| SUMMARY OF RESULTS | 1 | 2 | Added |
|--------------------|---|---|-------|

-----

INHALATION OF GW SPRAY

|                                                              |           |           |           |
|--------------------------------------------------------------|-----------|-----------|-----------|
| Conc. in Outdoor Air from GW Spray(mg/m <sup>3</sup> )       |           |           |           |
| - For carcinogenic risk:                                     |           |           |           |
| Vinyl Chloride                                               | 8.00E-05  | 8.00E-05  |           |
| - For hazard index:                                          |           |           |           |
| Vinyl Chloride                                               | 8.00E-05  | 8.00E-05  |           |
| Fraction Volatilized from Irrig. Water (-)<br>Vinyl Chloride | 0.50      | 0.50      |           |
| Daily Doses and Risk for : Vinyl Chloride                    |           |           |           |
| CADD (mg/kg-day)                                             | 1.21E-07  | 2.60E-08  |           |
| LADD (mg/kg-day)                                             | 1.04E-08  | 3.34E-09  | 1.37E-08  |
| Cancer Risk (-)                                              | 3.224E-10 | 1.036E-10 | 4.261E-10 |
| Hazard Index (-)                                             | 4.184E-06 | 8.966E-07 |           |

DERMAL CONTACT WITH IRRIG. WATER

|                                           |           |           |           |
|-------------------------------------------|-----------|-----------|-----------|
| Daily Doses and Risk for : Vinyl Chloride |           |           |           |
| CADD (mg/kg-day)                          | 5.08E-06  | 2.95E-07  |           |
| LADD (mg/kg-day)                          | 4.36E-07  | 3.79E-08  | 4.74E-07  |
| Cancer Risk (-)                           | 6.534E-07 | 5.683E-08 | 7.103E-07 |
| Hazard Index (-)                          | 1.694E-03 | 9.823E-05 |           |

INGESTION OF VEGETABLES

|                                                                                    |           |           |           |
|------------------------------------------------------------------------------------|-----------|-----------|-----------|
| Water-to-Root Concentration Factor (RCF) (mg/kg)/(mg/l)<br>Vinyl Chloride          | 1.3       | 1.3       |           |
| Water-to-above-ground Concentration Factor (ABCF) (mg/kg)/(mg/l)<br>Vinyl Chloride | 0.75      | 0.75      |           |
| Daily Doses and Risk for : Vinyl Chloride                                          |           |           |           |
| CADD (mg/kg-day)                                                                   | 1.58E-06  | 6.77E-07  |           |
| LADD (mg/kg-day)                                                                   | 1.36E-07  | 8.71E-08  | 2.23E-07  |
| Cancer Risk (-)                                                                    | 2.036E-07 | 1.306E-07 | 3.342E-07 |
| Hazard Index (-)                                                                   | 5.278E-04 | 2.257E-04 |           |

# 10 Bildungsgang

## Adresse

Breitscheidstr. 32, D-70176 Stuttgart

## Zur Person

Dipl. Geol. MSc Tilmann Steinmetz, geb.am 26.11.1970 in Stuttgart

## Berufserfahrung

09/2007 – aktuell DLR **Wissenschaftl. Mitarbeiter** Oberpfaffenhofen

05/ 2002 – 09/ 2006 Martin-Luther-Universität Halle  
**Wissenschaftlicher Mitarbeiter Umweltgeologie**  
Promotionstelle

05/1999 – 07/2000 drei.neun Mediengestaltung GmbH Stuttgart  
**Angestellter Mediengestalter (Internet)**

05/1998 – 12/1998 LOMEX GmbH München  
**Freiberuflicher Geologe in der Altlastensanierung**

## Ausbildung

09/2000 – 03/2002 Fachhochschule, Hochschule Technik Stuttgart

- Internationales Studium „Photogrammetry and Geoinformatics“  
Abschluß **Master of Science MSc** mit Auszeichnung
- -09/2001 – 03/2002- University of Cape Town, Südafrika
- **Auslandsaufenthalt** für Master's thesis über  
*“Permanent Scatterers for ERS-SAR imagery for improved long term high-accuracy subsidence studies at the Katse Dam/Lesotho”* am Dept. Electrical Engineering der UCT

08/1996 – 02/1998 Eberhard-Karls-Universität Tübingen

- Abschluß **Diplom Geologie und Paläontologie**

09/1995 – 07/1996 McMaster University Hamilton, Ontario/Kanada

- **Auslandsstudium/** Austauschprogramm

09/1993 – 08/1995 Eberhard-Karls-Universität Tübingen

- **Studium der Geologie, Paläontologie und Mineralogie.**

09/1990 – 08/1993 Uni Stuttgart Stuttgart

- **Vordiplom Geologie**

1981-1990 Geschwister-Scholl-Gymnasium Stuttgart

## IT-Kenntnisse

- GIS: ArcView 3.x, ArcGIS/ArcInfo 8x/9, Geomedia Professional, GRASS GIS, ArcGIS Modelbuilder/Python
- gamma SAR & interferometric processing software
- Programmierung mit HTML, VB, VBA, VB.NET, C#,
- PostgreSQL, Postgis, Oracle 8i/10g, ArcSDE von ESRI
- OO-Modellierung (UML) DB-Design ArcSDE mit MS Visio

## Sprachen

Englisch, Französisch, Spanisch, Russisch

# 11 Eidesstattliche Erklärung

## ***Danksagung:***

Ich danke Herrn Prof. Wycisk für die Vergabe des Themas für diese Arbeit und fruchtbare Diskussionen bei der Ausarbeitung der Ergebnisse und seine Sorge für die Arbeitsgruppe Umweltgeologie. Für ihre wertvollen Beiträge zur Entstehung der Arbeit danke ich den Mitgliedern bzw. ehemaligen Mitarbeitern der Arbeitsgruppe: Wolfgang Gossel, Tobias Hubert, Christian Neumann, Holger Fabritius, Andreas Wollmann, Dirk Schlesier, Ronny Lähne, Karsten Sommerwerk. Ohne die minutiösen Arbeiten von Herrn Gerd Fleck und Frau Steffi Schnabel wäre die Arbeit nicht zustande gekommen.

Mit ihren kritischen und konstruktiven Anmerkungen haben Andreas Koch und Florentin Moser sowie Rolf Wedemeyer das Manuskript sehr verbessert.

Meiner Freundin Nicole Schotters danke ich nicht nur für fachliche Kritik und Rechtschreibkorrekturen, sondern besonders dafür, dass sie meine jahrelange körperliche wie geistige Abwesenheit ertragen hat.

Eidesstattliche Erklärung:

Hiermit versichere ich, die vorliegende Arbeit selbständig und ohne fremde Hilfe angefertigt zu haben. Quellen und Zitate der verwendeten Literatur sind benannt und im Text kenntlich gemacht. Andere als die gekennzeichneten Quellen und Hilfsmittel sind nicht verwendet worden.

Stuttgart, 8. Juli 2007

(T.Steinmetz)