

Ministerium für Landwirtschaft, Umwelt und Klimaschutz



Plausibilitätsprüfung von Grundwasseranalysen

Fachbeiträge des LfU, Heft Nr. 163



Herausgeber

Ministerium für Landwirtschaft, Umwelt und Klimaschutz (MLUK)

des Landes Brandenburg

Presse- und Öffentlichkeitsarbeit

Henning-von-Tresckow-Str. 2-13, Haus S, 14467 Potsdam

Telefon: +49 (0) 331 866 - 7237

E-Mail: bestellung@mluk.brandenburg.de

Internet: mluk.brandenburg.de oder www.agrar-umwelt.brandenburg.de

Redaktion

Landesamt für Umwelt (LfU) Abteilung W1, Referat W15 – Altlasten, Bodenschutz, Grundwassergüte Seeburger Chaussee 2, 14476 Potsdam

Telefon +49 (0) 33201 442-0

E-Mail: infoline@lfu.brandenburg.de

Internet: Ifu.brandenburg.de

Titelbild

Grundwassermessstelle in der Nähe von Nauen, F. Pohl, 2021

Satz

Satzweiss.com Print Web Software GmbH

Diese Veröffentlichung ist Teil der Öffentlichkeitsarbeit des Ministeriums für Landwirtschaft, Umwelt und Klimaschutz des Landes Brandenburg. Sie wird kostenlos abgegeben und ist nicht zum Verkauf bestimmt. Sie darf nicht für Zwecke der Wahlwerbung verwendet werden. Unabhängig davon, auf welchem Weg und in welcher Anzahl diese Broschüre dem Empfänger zugegangen ist, darf sie, auch ohne zeitlichen Bezug zu einer bevorstehenden Wahl, nicht in einer Weise verwendet werden, die als Parteinahme der Landesregierung zugunsten einzelner Gruppen verstanden werden könnte.

Nachdruck – auch auszugsweise – nur mit schriftlicher Genehmigung des Herausgebers.

Inhalt

	Abbliddingsverzeichnis.	.4
	Tabellenverzeichnis	. 5
	Abkürzungsverzeichnis	. 6
1	Einleitung	.7
2	Beschreibung der Plausibilitätsprüfungen	
2.1	Eingangskontrollen	
2.2	Plausibilitätskontrollen	
2.2.1	Plausibilität der Einzelwerte	
2.2.2	Plausibilität von Parameterpaaren	
2.2.3.	Plausibilität der Analyse	11
3	Technische Umsetzung	13
4	Bewertung der Plausibilität einer Grundwasseranalyse	15
5	Ausblick	20
6	Literaturhinweise	21
	Anhang	22
	Anhang A: Gesamtüberblick der Plausibilitätsprüfungen für Grundwasseranalysen . :	22

Abbildungsverzeichnis

Abb. 1	Schematische Darstellung der Funktionsweisen von PK_1.1 und PK_1.2 10
Abb. 2	Benutzeroberfläche des Tools zur Plausibilitätsprüfung von Grundwasseranalysen
Abb. 3	Beispiel einer Analyse in der Einzelansicht des LfU-Plausibilitäts-Tools mit einem Prüffall (EK_1.12) markiert in gelb
Abb. 4	Beispiel einer Analyse in der Einzelansicht des LfU-Plausibilitäts-Tools mit mehreren Prüffällen (PK_1.1, PK_1.2, PK_1.4 und PK_2.13) markiert in gelb, braun, grün und blau
Abb. 5	Zeitreihe der Kaliumkonzentration einer Beispielanalyse, pink markiert ist der zu importierende neue Messwert

Tabellenverzeichnis

Iab. 1:	Grundwasseranalysen
Tab. 2:	Übersicht der Plausibilitätskontrollen (PK) der Plausibilitätsprüfung für Grundwasseranalysen
Anhang A:	Gesamtüberblick der Plausibilitätsprüfungen für Grundwasseranalysen 22

Abkürzungsverzeichnis

BTEX Benzol, Toluol, Ethylbenzol, Xylol DOC Gelöster organischer Kohlenstoff

EK Eingangskontrolle GW Grundwasser

PK Plausibilitätskontrolle
QS-Klasse Qualitätssicherungsklasse

TOC Gesamter organischer Kohlenstoff

Die Qualität einer Grundwasseranalyse und deren Aussagekraft für spätere Auswertungen beginnt bei der Probennahme. Nur über die höchsten Qualitätsanforderungen bei der Probennahme können verwertbare und belastbare Messwerte entstehen, die repräsentativ für die Grundwasserbeschaffenheit sind.

Auf die Probennahme folgt die Grundwasseranalytik in einem Labor. Auch hier stellt das LfU hohe Anforderungen an die Qualität.

Das beauftragte Labor führt meist beides, die Probennahme und die Analytik, durch und muss folgende Spezifikationen nachweisen:

- Besitz einer gültigen Akkreditierung der Deutschen Akkreditierungsstelle GmbH für die zu untersuchenden Parameter nach DIN EN ISO 17025:2018-03
- Besitz einer aktuellen Notifizierung als staatlich zugelassene Untersuchungsstelle für Gewässeruntersuchungen und Probennahmen in einem Bundesland der Bundesrepublik Deutschland
- Nachweis der Probennehmer über die Teilnahme an einem Fachkundelehrgang Grundwasserprobennahme

Die Ergebnisse der Grundwasserbeprobung werden dem LfU anschließend so übergeben, dass ein direkter Import in das LfU eigene Plausibilitäts-Tool möglich ist, mit dem die Messwerte auf ihre Plausibilität geprüft werden. Erst im Anschluss erfolgt der Import in die Datenbank.

Die einzelnen Prüfkriterien sind der Literatur entnommen oder selbst entwickelt worden. Viele der Prüfungen basieren auf empirisch ermittelten Konzentrationen, die dem Prüfer oder der Prüferin nur einen Hinweis auf einen möglicherweise unplausiblen Messwert geben können. Daher erfordert die Prüfung fachliche Expertise. Das Plausibilitäts-Tool mit den einzelnen Prüfungen markiert Messwerte bis auf wenige Ausnahmen nicht selbstständig als unplausibel. Die Entscheidung über die Plausibilität der Messwerte und der Gesamtanalyse trifft immer der Prüfer oder die Prüferin in enger Abstimmung mit dem beauftragten Labor.

Die einzelnen Prüfkriterien und die Funktionsweise des Plausibilitäts-Tools werden in diesem Bericht erläutert.

2 │ Beschreibung der Plausibilitätsprüfungen

Die Plausibilitätsprüfungen für Grundwasser-analysen gliedern sich in eine Eingangskontrolle mit 14 Prüfungen und eine Plausibilitätskontrolle mit 21 Prüfungen. Eine Gesamtübersicht aller Prüfungen enthält Anhang A.

2.1 Eingangskontrollen

Bei den 14 Eingangskontrollen (EK) handelt es sich zum einen um formale Prüfungen und zum anderen um Prüfungen zur Einhaltung von Vorgaben bei der Probennahme, wie zum Beispiel dem hydraulischen Kriterium (Erreichen des Mindestabpumpvolumens) und dem Beschaffenheitskriterium (Konstanz der Vor-Ort-Parameter). Die 14 Eingangskontrollen zeigt Tabelle 1.

Die Eingangskontrollen EK_1.0 und EK_1.1 beinhalten die grundlegenden Abfragen ob die zu importierende Analyse bereits vorhanden ist und ob die Messstellenkennzahl als eindeutiges Merkmal jeder Grundwassermessstelle, nicht erkannt wurde.

Die Eingangskontrollen EK_1.2 bis EK_1.4 werden für jeden Parameter einer Grundwasseranalyse durchgeführt. Hier werden neben fehlenden Zahlen-, Datums- oder Zeitangaben auch Formatfehler, wie beispielweise eine fehlerhafte Schreibweise gemeldet. Zusätzlich wird der Eintrag einer Null als Zahlenwert für Parameter gemeldet, die nicht Null sein können.

Die Eingangskontrolle EK_1.5 prüft die Differenz zwischen dem Entnahmedatum der Probe und dem Datum des Laboreingangs gemäß AK GWB (2003). Zulässig ist ein Zeitraum von 24 Stunden.

In EK_1.6 wird das geförderte Wasservolumen mit dem vorgegebenen Mindestabpumpvolumen verglichen. Wurde das Mindestabpumpvolumen mindestens gefördert, gilt das hydraulische Kriterium, eine der zwei Grundvoraussetzungen für eine repräsentative Grundwasser-probennahme, als eingehalten.

In EK_1.7 wird die Höhe der Grundwasserabsenkung während des Abpumpvorgangs geprüft (AK GWB 2003). Eine erhöhte Absenkung kann zur Belüftung des Filterbereichs und damit zu einer Beeinflussung der Repräsentativität der Grundwasserprobe führen.

Die Prüfung EK_1.8 wurde im Rahmen der Weiterentwicklung des Plausibilitäts-Tools für nicht notwendig befunden und gestrichen.

Für die Eingangskontrollen EK_1.9 bis EK_1.14 sind die während des Abpumpvorgangs aufgezeichneten Messwerte der Vor-Ort-Parameter erforderlich.

Insbesondere die Eingangskontrollen EK 1.10 bis EK 1.13 dienen der Prüfung der Einhaltung des Beschaffenheitskriteriums. Das Beschaffenheitskriterium ist die zweite Voraussetzung, um eine repräsentative Grundwasserprobe gewinnen zu können. Es beinhaltet das Erreichen einer Parameterkonstanz der elektrischen Leitfähigkeit, des pH-Wertes, des Sauerstoffgehaltes und der Grundwassertemperatur. Die Konstanz wird während des Abpumpens erreicht, wenn die in Tabelle 1 angegebenen Kriterien eingehalten werden. Erst nach dem Erreichen der Parameterkonstanz ist es zulässig, die Grundwassserprobe zu entnehmen.

Die Kriterien der Parameterkonstanz sind unter anderem definiert in der DIN 38402-13:2020. Das Kriterium EK_1.14 entstammt Hölting (2013).

Tab. 1:	Übersicht der Eingangskontrollen (EK) der Plausibilitätsprüfung für Grundwasseranalysen					
Kürzel	Beschreibung					
EK_1.0	Analyse schon vorhanden					
EK_1.1	MKZ (Messstellenkennzahl) falsch oder wurde nicht gefunden					
EK_1.2	Zahlen fehlen oder Formatfehler					
EK_1.3	Datum fehlt oder Formatfehler					
EK_1.4	Zeit fehlt oder Formatfehler					
EK_1.5	Probe nicht innerhalb von 24 Stunden ins Labor gebracht					
EK_1.6	Hydraulisches Kriterium (Mindestabpumpvolumen) nicht erreicht					
EK_1.7	Grundwasserabsenkung überschreitet 1 m über Filteroberkante					
EK_1.8	entfällt					
EK_1.9	Wasserstand nicht konstant (Abweichung zum Messwert vor 5 min >2 %)					
EK_1.10	Wassertemperatur nicht konstant (Abweichung zum Messwert vor 5 min ±0,1 K)					
EK_1.11	pH-Wert nicht konstant (Abweichung zum Messwert vor 5 min ±0,1 pH-Einheiten)					
EK_1.12	elektrische Leitfähigkeit nicht konstant (Abweichung zum Messwert vor 5 min ± 1 %)					
EK_1.13	Sauerstoffgehalt nicht konstant (Abweichung zum Messwert vor 5 min ±0,1 mg/l)					
EK_1.14	Redoxspannung nicht konstant (Abweichung zum Messwert vor 5 min > 1 mV)					

2.2 Plausibilitätskontrollen

Die Plausibilitätskontrollen (PK) lassen sich in drei Gruppen untergliedern und sind zusammengefasst in Tabelle 2 am Ende des Kapitels aufgeführt:

- 1. Plausibilität der Einzelwerte
- 2. Plausibilität von Parameterpaaren
- 3. Plausibilität der Analyse

2.2.1 Plausibilität der Einzelwerte

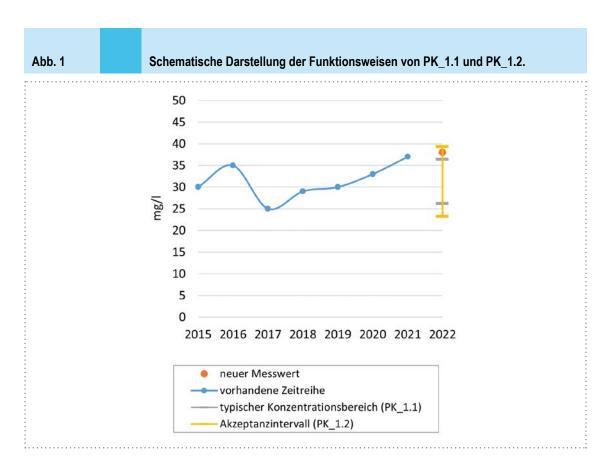
Die erste Gruppe "Plausibilität der Einzelwerte" beinhaltet die Plausibilitätskontrollen PK_1.1 und PK_1.2. Beide beinhalten statistische Prüfungen, die den neuen Messwert eines Parameters mit den bereits vorhandenen Messwerten derselben Messstelle vergleichen. Abbildung 1 erläutert schematisch deren Funktionsweise. Die angewendeten Kriterien sind unter anderem genannt in LAWA (1993) und BUNR (2000).

In PK_1.1 wird eine Abweichung vom typischen Konzentrationsbereich der Messstelle in Form einer Überschreitung des 95-Perzentils oder Unterschreitung des 5-Perzentils der Messreihe ermittelt. Ein Sonderfall ist hier der pH-Wert, für den ein fester Bereich von 4,5 bis 8,5 definiert wurde.

PK_1.2 ermittelt das Akzeptanzintervall des Parameters für eine Messstelle und prüft, ob der Messwert dieses über- oder unterschreitet. Als Akzeptanzintervall wird der Mittelwert plus-minus der 2-fachen Standardabweichung bezeichnet.

Für beide Prüfungen ist eine bereits vorhandene Zeitreihe über mindestens fünf Messwerte erforderlich.

Außerdem in dieser Gruppe enthalten ist die Prüfung PK_1.4, bei der der Messwert mit der vom Labor übermittelten Bestimmungsgrenze verglichen wird. Ist der Messwert kleiner als die Bestimmungsgrenze wird eine Meldung erzeugt.



Diese Prüfungen werden für alle Parameter durchgeführt. Die Prüfung PK_1.3 wurde im Rahmen der Weiterentwicklung des Plausibilitäts-Tools für nicht mehr notwendig befunden und gestrichen.

2.2.2 Plausibilität von Parameterpaaren

Die zweite Gruppe "Plausibilität von Parameterpaaren" enthält hydrochemisch begründete Prüfungen für ausgewählte Parameterpaare.

In PK_2.1 wird die elektrische Leitfähigkeit nach Maier und Grohmann (1977) der Ionenstärke gegenübergestellt (Schmidt, 2013). Über den Vergleich mit dem Lösungsinhalt der Analyse lässt sich einerseits die Plausibilität der elektrischen Leitfähigkeit abschätzen, andererseits lassen sich Rückschlüsse auf die Plausibilität der Ionenkonzentrationen ziehen. Da dieser Vergleich nur empirisch

ist, sind Abweichungen mit einem Puffer von 25 Prozent zulässig.

Die Prüfungen PK_2.3, PK_2.4 und PK_2.5 beinhalten Vergleiche der Gelöst- und Gesamtgehalte für Eisen, Mangan und Phosphor. Dabei werden die Messunsicherheiten der einzelnen Parameter (Eisen: 22 Prozent, Mangan: 20 Prozent, ortho-Phosphat: 15 Prozent und Phosphor gesamt: 10 Prozent) berücksichtigt.

In PK_2.6 erfolgt ein Abgleich zwischen der Säurekapazität KS 4,3 und der Hydrogen-karbonat-Konzentration. Um Rundungsfehler und methodische Unterschiede auszuschließen, wird hier ein Puffer von plus/minus 5 mg/l eingerechnet. Die Prüfung dient damit nur der Ermittlung "grober" Berechnungsfehler.

Die Prüfungen PK_2.7, PK_2.8 sowie PK 2.10 bis PK 2.13 vergleichen die Kon-

zentrationen verschiedener redoxsensitiver Parameter miteinander. Die Werte entstammen der DVWK 128/1992. Die angegebenen Konzentrationen für Sauerstoff, Nitrit, Ammonium, Eisen, Mangan und Nitrat sind ebenfalls empirisch ermittelte Erfahrungswerte und stellen damit kein Ausschlusskriterium für die Messwerte dar, sondern liefern Anhaltspunkte für eine fachliche Einschätzung der Plausibilität des Messwertes.

Die Prüfung PK_2.9 beinhaltet einen Vergleich des pH-Wertes mit der Konzentration der Erdalkalimetalle Calcium und Magnesium (DVWK 128/1992). Eine Summenkonzentration größer 1 mmol/l bei pH-Werten kleiner 5,5 oder größer 8 erzeugt eine Fehlermeldung.

In der Prüfung PK_2.14 wird ebenfalls der pH-Wert verglichen, hier mit der Aluminiumkonzentration. Die Prüfung erzeugt eine Meldung bei pH-Werten über 5,2 oder unter 8,2 und einer Aluminiumkonzentration größer 100 μg/l. In diesen Fällen sind pH-Wert und Aluminiumkonzentration kritisch zu hinterfragen. Die Werte wurden aus der pH-Löslichkeitskurve von Aluminium abgeleitet (Kölle 2017).

In Prüfung PK_2.15 wird der Parameter Gesamthärte in der Einheit Grad deutscher Härte (°dH) dem Produkt aus der Calcium-Magnesium-Summenkonzentration und 5,6 gegenübergestellt. Hier ist ein Puffer von einem Grad deutscher Härte beziehungsweise 0,5 mmol/l eingebaut, um Rundungsfehler auszuschließen.

Die Prüfungen PK_2.16 und PK_2.17 prüfen die Konzentrationen der Säurekapazität KS 4,3 und KS 8,2 mit dem pH-Wert. Eine Meldung erfolgt bei Messwerten größer null für

eine Säurekapazität KS 4,3 bei pH-Werten kleiner 4,3 sowie bei Säurekapazitäten KS 8,2 bei pH-Werten kleiner 8,2.

Die Prüfung PK_2.2 wurde im Rahmen der Weiterentwicklung des Plausibilitäts-Tools für nicht mehr notwendig befunden und gestrichen.

2.2.3. Plausibilität der Analyse

Die dritte Gruppe "Plausibilität der Analyse" enthält zwei Prüfungen: PK_3.1 und PK_3.2. In PK_3.1 wird der Ionenbilanzfehler nach DIN 38402-62:2014-12 berechnet und es erfolgt eine Einordnung der Analyse in eine der fünf Qualitätssicherungsklassen (QS-Klassen):

- 1. QS-Klasse 1: <2 %
- 2. QS-Klasse 2: 2 5 %
- 3. QS-Klasse 3: 5 10 %
- 4. QS-Klasse 4: >10 %
- 5. QS-Klasse 5: unvollständige Analyse

Eine Analyse ist unvollständig, wenn mindestens einer der Hauptinhaltsstoffe Calcium, Magnesium, Natrium, Kalium, Chlorid, Sulfat oder Hydrogenkarbonat fehlt.

Die QS-Klassen wurden am LfU zur Klassifizierung der Qualität von Grundwasseranalysen eingeführt. Eine Einordnung in QS-Klasse 1 ist beispielsweise Voraussetzung für Früherkennungsuntersuchungen von Salzwasserintrusionen (Rechlin 2008).

In PK_3.2 wird der berechnete Ionenbilanzfehler mit dem vom Labor angegebenen Ionenbilanzfehler verglichen und die Differenz ermittelt.

Tab. 2:	Übersicht der Plausibilitätskontrollen (PK) der Plausibilitätsprüfung für Grundwasseranalysen						
Kürzel	Beschreibung						
1. Plausibilitä	it der Einzelwerte						
PK_1.1	Messwert außerhalb des typischen Konzentrationsbereiches der jeweiligen Messstelle, Überschreitung des 95-Perzentils oder Unterschreitung des 5-Perzentils; pH-Wert: plausibler Bereich: 4,5 – 8,5						
PK_1.2	Messwert außerhalb des Akzeptanzintervalls der jeweiligen Messstelle: Mittelwert plus/minus 2-fache Standardabweichung						
PK_1.3	entfällt						
PK_1.4	Messwert kleiner Bestimmungsgrenze						
2. Plausibilitä	t von Parameterpaaren						
PK_2.1	elektrische. Leitfähigkeit (µS/cm) = 30,2 * lonenstärke (mmol/l) mit 25 Prozent Puffer von der gemessenen elektrischen Leitfähigkeit						
PK_2.2	entfällt						
PK_2.3	Fe gelöst > Fe gesamt (Puffer 22 Prozent)						
PK_2.4	Mn gelöst > Mn gesamt (Puffer 20 Prozent)						
PK_2.5	Ortho-Phosphat-P > Phosphor Gesamt (15 Prozent bzw. 10 Prozent)						
PK_2.6	HCO3 – (Säurekapazität KS 4,3 * 61,0168) $<> 0 \pm 5$ mg/l Puffer vom berechneten Wert						
PK_2.7	O_2 >5 mg/l und N O_2 >0,05 mg/l						
PK_2.8	O_2 >5 mg/l und NH ⁴ >0,1 mg/l						
PK_2.9	8,0 < pH < 5,5 und Ca+Mg > 1,0 mmol						
PK_2.10	$O_2 > 5 \text{ und Fe}_2 + > 0.05 \text{ mg/l}$						
PK_2.11	$O_2 > 5 \text{ und Mn}_2 + > 0,05 \text{ mg/l}$						
PK_2.12	Fe ₂ + >0,2 und NO ₃ >2,0 mg/l						
PK_2.13	$Mn_2 + >0.2 \text{ und NO}_3 > 2.0 \text{ mg/l}$						
PK_2.14	5,2 < pH < 8,6 und Al > 100 μg/l						
PK_2.15	Gesamthärte in °dH <> Ca + Mg (mmol/l) * 5,6 (Puffer 1 °dH bzw. 0,5 mmol/l)						
PK_2.16	pH < 4,3 und Säurekapazität KS 4,3 > 0						
PK_2.17	pH < 8,2 und Säurekapazität KS 8,2 > 0						
3. Plausibilitä	t der Analyse						
PK_3.1	Berechnung Ionenbilanzfehler und Zuweisung einer QS-Klasse						
PK_3.2	Ionenbilanzfehler importiert ≠ Ionenbilanzfehler berechnet?						

Technische Umsetzung

Die Grundwassermessstellen und -analysen werden für die Untersuchungen der Grundwasserbeschaffenheit im Datenbanksystem GCI-GMS der Firma GCI GmbH gehalten.

Zur Anwendung der Plausibilitätsprüfungen auf die Grundwasseranalysen hat das LfU die Firma GCI beauftragt, ein Tool zur Plausibilisierung der Grundwasseranalysen zu programmieren. In enger Zusammenarbeit ist das Tool über mehrere Jahre hinweg weiterentwickelt worden.

Abbildung 2 zeigt die Benutzeroberfläche des Plausibilitäts-Tools innerhalb des GCI-GMS ohne importierte Grundwasseranalysen. Es ist möglich, Analysen aus der Datenbank in das Tool einzuladen oder die Analysen von außen über Exceltabellen zu importieren. Für letzteren Fall gibt es strenge Formatvorschriften. Für die Eingangskontrollen zur Parameterkonstanz muss zusätzlich eine weitere Tabelle mit den Vor-Ort-Parametern befüllt werden.

Beim Import von neuen Grundwasseranalysen wird der Prüfer oder die Prüferin über ein Dialogfenster durch verschiedene Voreinstellungen geführt. Nach der Auswahl des Dateipfades werden Meldungen zu den folgenden vier Arten von Basisdaten erzeugt:

- Anzahl Messstellen, die nicht erkannt wurden
- Anzahl Parameter, die nicht erkannt wurden
- Anzahl Maßeinheiten, die von der Standardmaßeinheit abweichen
- 4. Anzahl Summenparameter und anderer Werte, die berechnet werden könnten

Für alle vier Punkte kann jeweils eine Liste der Fehlermeldungen geöffnet und direkt bearbeitet werden. Eine unbekannte Messstelle oder ein unbekannter Parameter führen dazu, dass diese Daten nicht in das PlausibilitätsTool importiert werden können. Abweichende Maßeinheiten werden vom System mit der Standard-Maßeinheit überschrieben. Daher sollten alle gelisteten Fehler vor dem Import in das Plausibilitäts-Tool korrigiert werden.

Der vierte Punkt beinhaltet Standardberechnungen, die den Ionenbilanzfehler, die Summen der Kationen- und Anionenäquivalente und Umrechnungen zwischen Ammonium und Ammonium-N, Nitrat und Nitrat-N sowie Nitrit und Nitrit-N und von der Säurekapazität KS 4,3 in Hydrogenkarbonat enthalten. Außerdem kann hier eine Liste der Summenparameter, die anhand der importierten Parameter gebildet werden können, geöffnet und eine Auswahl getroffen werden. Die ausgewählten Summenparameter (zum Beispiel Summe Pflanzenschutzmittel und relevante Metaboliten oder Summe BTEX) werden dann berechnet und der Analyse als Parameter hinzugefügt.

Im Anschluss erfolgt das Einlesen der Vor-Ort-Parameter-Tabelle mit einer optionalen Fehlermeldung für nicht erkannte Messstellen, zum Beispiel aufgrund von Schreibfehlern.

Nach dem Einladen der Daten in das Plausibilitäts-Tool kann über die Taste "Prüfen" die Prüfung gestartet werden. Hier öffnet sich ein weiteres Dialogfenster mit verschiedenen Auswahlmöglichkeiten. Der Prüfer oder die Prüferin kann für die Berechnung des Ionenbilanzfehlers neben der Standardeinstellung auch händisch die in die Berechnung einzubeziehenden Ionen auswählen. Relevant ist dies beispielsweise für Analysen, bei denen mehrere Eisen-Spezies angegeben sind, das Programm aber nicht gleichzeitig "Eisen gelöst" und "Eisen II" in die Berechnung einbeziehen soll. Hier ist eine händische Auswahl erforderlich. Außerdem kann der Prüfer oder die Prüferin wählen, ob alle Prüfungen durchgeführt werden sollen oder nur ausgewählte. Dies ist zum Beispiel nützlich bei der Nachberechnung

des Ionenbilanzfehlers bereits vorhandener Analysen, wenn sich Messwerte durch bestimmte Umstände nachträglich verändern.

Das Plausibilitäts-Tool ist so konzipiert, dass die Ergebnisse der Prüfungen in Textform in gesonderten Datenbankfeldern sowohl für die jeweils betroffenen Messwerte als auch zusammengefasst für die gesamte Analyse hinterlegt werden. Es trifft jedoch nur im Fall der Prüfungen PK_2.5, PK_2.6 und PK_2.7 automatisiert eine Entscheidung, ob der Messwert als unplausibel bewertet und damit nicht freigegeben wird. Für alle anderen Prüfungen ist es der Fachmann oder die Fach-

frau, der/die einen Messwert als unplausibel deklariert. Prüfungen, die nicht durchgeführt werden konnten, weil die entsprechenden Angaben fehlten, werden mit einem "kD" als Hinweis für "keine Daten" gekennzeichnet.

Am LfU werden die Grundwasseranalysen direkt nach Übergabe des Labors geprüft. Unstimmigkeiten in den Daten und unplausible Messwerte werden daraufhin nachgefragt und im Zweifelsfall, soweit dies möglich ist, Nachmessungen aus den Rückstellproben beauftragt. Im Anschluss erfolgt eine erneute Plausibilitätsprüfung und erst dann der abschließende Import in die Datenbank.

Bewertung der Plausibilität einer Grundwasseranalyse

4

Die Bewertung einer Grundwasseranalyse hinsichtlich der Plausibilität der Einzelwerte und der Gesamtzusammensetzung erfolgt im Plausibilitäts-Tool. Zur Interpretation der Prüfergebnisse hilft die Einzelansicht der Messstelle mit der jeweiligen Analyse sowie die Möglichkeit, von jedem Parameter eine Diagrammansicht der Zeitreihe erzeugen zu können. Im Folgenden werden an einer Beispielanalyse exemplarisch verschiedene Prüffälle dargestellt.

Abbildung 3 zeigt die Einzelansicht der Messstelle im Plausibilitäts-Tool. Im oberen Teil ist der Name und die Messstellenkennzahl der Messstelle sowie der Grundwasserkörper angegeben. Darunter folgen Angaben zu den Analysenstammdaten, die nicht gefüllt sind, da die Analyse noch nicht in die Datenbank importiert wurde. Diese Analysenstammdaten, wie zum Beispiel Abpumpdauer, Abpumpvolumen und Förderrate, werden grundsätzlich erst mit dem Import in die Datenbank in die entsprechenden Felder geschrieben. Im Plausibilitäts-Tool erscheinen diese Daten aus technischen Gründen zusammen mit den Parametern in der darunter stehenden Tabelle. Diese Tabelle führt zusätzlich alle Parameter und deren Messwerte untereinander auf. Im dargestellten Bereich sind dies die einzelnen Vor-Ort-Parameter, die in Abständen von fünf Minuten aufgezeichnet wurden. Der jeweils letzte Messwert der Parameter Leitfähigkeit PN (25°C), pH-Wert, Redoxspannung und Sauerstoff enthält Datum und Uhrzeit. Diese zuletzt erfassten Messwerte werden anschließend in die Datenbank importiert.

Eine Zeile ist gelb markiert. Dort hat die Prüfung EK_1.12 eine Meldung für den Parameter Leitfähigkeit PN (25°C) ausgelöst. Dies wird in der Spalte ganz rechts mit dem entsprechenden Kürzel vermerkt. Die Eingangskontrolle EK_1.12 prüft die Konstanz

der elektrischen Leitfähigkeit im Abpumpvorgang. Neben dem Kürzel sind in Klammern zusätzlich die letzte gemessene und die fünf Minuten vorher gemessene elektrische Leitfähigkeit angegeben. Hier ist eine Abweichung von einem Prozent zum vorherigen Wert zulässig, die knapp überschritten wurde. Das Kriterium wurde in diesem Fall nicht eingehalten und der Abpumpvorgang hätte noch fortgesetzt werden müssen. Die Konstanz der anderen Vor-Ort-Parameter wurde erreicht. Der Prüfer oder die Prüferin muss in diesem Fall entscheiden, ob und in welcher Form die Analyse für weitere Auswertungen Verwendung finden kann.

Abbildung 4 zeigt die gleiche Analyse, nur jetzt die Hauptinhaltsstoffe und Metalle, die weiter unten in der Tabelle stehen. Hier sind vier Prüffälle aufgetreten und die Parameter dementsprechend mit den Kürzeln PK_1.1, PK_1.2, PK_1.4 und PK_2.13 versehen worden.

Gelb markiert ist der Parameter Kalium mit einer Konzentration von 12 mg/l und den Einträgen PK 1.1 (95-P:1,2) und PK 1.2 (0,59 - 1,3). Die Kaliumkonzentration überschreitet also das 95-Perzentil von 1,2 mg/l und liegt auch außerhalb des Akzeptanzintervalls von 0,59 bis 1,3 mg/l. Hier lohnt ein Blick in die Diagrammansicht der Zeitreihe (Abbildung 5), die sich per Mausklick auf den Parameter öffnen lässt. Schnell lässt sich der Messwert so als deutlicher Ausreißer identifizieren. In diesem Fall liegt die Vermutung nahe, dass es sich um einen Schreibfehler handelt und der tatsächliche Messwert bei 1,2 mg/l liegt. Auch der lonenbilanzfehler, der hier durch einen Kationenüberschuss bei 5,3 % liegt (nicht dargestellt), und die daraus folgende Einstufung in die QS-Klasse 3 verstärken diese Vermutung. Im nächsten Schritt wäre dies über eine Rückfrage an das Labor zu klären.

Abb. 3

Beispiel einer Analyse in der Einzelansicht des LfU-Plausibilitäts-Tools mit einem Prüffall (EK_1.12) markiert in gelb

Analy	Ć.							fenheit GG	
Mess GWK_			Messstel		nd GWK könr Stammdaten a	nen nicht geändert wer			
Entnahmestelle:									
Auftraggeber: Probennahmeart:					Anlass:				_
Entnahmedatum:	30.09.202	1	<	> Pro	obenehmer:				_
PN Pumpe:				GW Abpu	mpbeginn:		(GW_Abpumpende:	
GW Abpumpdau	er (min):			GW Abser	nkung (m):		GW	Förderstr. (I/min):	
GW Abpumpvolu	men (I):			GW Sedim	ent:	16	G\	W Stand (m ROK):	
Stand vor PN (GW SI	and bei PN	(m BOK)-	7	GW Stand	nach PN (m ROK):	
	45.00		u # 30						
Entnahmetiefe (Lotung	(m ROK):			Lotung (m HSYS):	
	PN-Zeit:					Proje	ekt: Test		_
nalysennummer:	Test-2022	××-30	Eingang	gsdatum:		Lat	or: Test		
Datum	1	Parameter	+1	Praefix +	Messwert .	- Einheit	- Freigabe -	PLAUSI_PRFG_MW	
00:00:0	0\	or-Ort-Param	eter						
30.09.2021 09:38:0	0 Färbun	g, qualitativ		farblos					
30.09.2021 09:38:0	0 GW-Au	sgasung		schwach	-				
00:05:0	0 Leitfähi	gkeit PN (25°C	()		700	µS/cm	\square		
00:10:0	0 Leitfähi	gkeit PN (25°0	2)		703	µS/cm			
00:15:0	0 Leitfähi	gkeit PN (25°0	2)		705	µS/cm			
00:20:0	0 Leitfähi	gkeit PN (25°0	2)		713	µS/cm	\vee	EK_1,12 (705/713)	
30.09.2021 09:38:0	0 Leitfähi	gkeit PN (25°0	2)		713	μS/cm			
00:05:0	0 pH-We	t			7,4				
00:10:0	0 pH-Wei	t			7,5				
00:15:0	0 pH-Wei	t			7,5				
00:20:0	0 pH-Wei	t			7,6		\square		
30.09.2021 09:38:0	0 pH-Wei	t Labor			7,6				
00:05:0	0 Redoxs	pannung			-10	mV			
00:10:0	0 Redoxs	pannung			-20	mV			
00:15:0	0 Redoxs	pannung			-25	mV			
00:20:0	0 Redoxs	pannung			-26	mV			
30.09.2021 09:38:0	0 Redoxs	pannung			-25	mV			
00:05:0	0 Sauers	toff			0,5	mg/l			
00:10:0	0 Sauers	toff			0,4	mg/l			
00:15:0	0 Sauers	toff			0,3	mg/l			
00:20:0	0 Sauers	toff			0,3	mg/l			
30.09.2021 09:38:0	0 Sauers	toff			0,3	mg/l			
30.09.2021 09:38:0	0 Säurek	apazität KS 4	3		2,61	mmol/I			
itensatz: I4 4 39 v	on 73	F N →	Kein Filt	er Suche	n 4				>
ausi-Prfg. Analyse	E	QS_KI	asse:	3	Bemerkung	en (Prober	nnahme):	☑ Freigabe Ana	dys
(_1,3, EK_1,12 (705, K_1,9,PK_2,9,PK_2,	713), PK_ 14,PK_2,1	1,2, PK_2,6, I 5,PK_2,16,Pk	PK_2,13, k (_2,17),	D	1.				_
0.06.2022)					Bemerkung	jen (Analys	se):		
wender-Feld1:									

Abb. 4

Beispiel einer Analyse in der Einzelansicht des LfU-Plausibilitäts-Tools mit mehreren Prüffällen (PK_1.1, PK_1.2, PK_1.4 und PK_2.13) markiert in gelb, braun, grün und blau

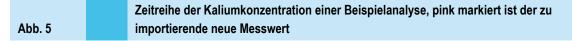
Analyse	n Pla	usibili	tätsprü	fung (SW-Be	schaffen	heit 🪾 🤇	GMS
Gehe zu Suchen Filter Gr	enzwerte DB-ID	s					Hilfe Fenster	<u>Befehle</u>
Messstelle: Te MKZ: 12 GWK_2019:	estmessstelle 1341234		Me	ssstelle, M		WK können ni mdaten anseh	icht geändert v <u>en</u>	werden
Entnahmestelle:								
Auftraggeber:								
Probennahmeart:			Anl	225				
Entrahmedatum: 30.09.2021		< >	Probenehi					
PN Pumpe:		EW A	bpumpbegir	on:		Chr. A	bpumpende:	
•					-	-		
GW Abpumpdauer (min):		GW A	bsenkung (mJ:		GW Forde	erstr. (I/min):	
GW Abpumpvolumen (I):		GW S	ediment:			GW Sta	and (m ROK):	
GW Stand vor PN (m ROK):	GV	/ Stand be	i PN (m RO	K):	GV	Stand nach	PN (m ROK):	
Entnahmetiefe (m ROK):		I n	tung (m RO	KI:			ng (m HSYS):	
PN-Zeit:		-0			Projekt:		J ()	
Analysennummer: Test-2022-	<x-30 ein<="" td=""><td>gangsdatu</td><td>m:</td><td></td><td>Labor:</td><td>Test</td><td></td><td></td></x-30>	gangsdatu	m:		Labor:	Test		
∠ Datum → Pa	arameter 🛶	Praefix -	Messwerl -	Einheit +	Freigabe -	PLAU:	SI_PRFG_MW	¥ A
00:00:00Ha	auptinhaltsstoffe_							
30.09.2021 09:38:00 Ammonia	um		0,099	mg/l				
30.09.2021 09:38:00 Ammonia	um-N		0,077	mg/l				
30.09.2021 09:38:00 Calcium	1.00mm/lp or 2		121	mg/l				
30.09.2021 09:38:00 Chlorid			40,9	mg/l				
30.09.2021 09:38:00 Fluorid			0,09	mg/I	\checkmark			
30 09 2021 09 38 00 Hydrone	nkarhonat		145	mn/l				
30.09.2021 09:38:00 Kalium			12	mg/l	M	PK 1,1(95-P:1	,2), PK 1,2 (0,59	1-1,3)
30.09.2021 09:38:00 Magnesi	ium		7,5	mg/l	M	1		
30.09.2021.09:38:00 Natrium			20.5	mo/l				
30.09.2021 09:38:00 Nitrat			3	ma/l	V	PK 2.13		
30.09.2021 09:38:00 Nitrat-N			0,678	mg/l	M	1		
30.09.2021 09:38:00 Nitrit		<	0,033	mg/l	N			
30 00 2021 00:38:00 Nitrit_N	annhat	<	0.04	mo/l		kd(PK 1.4)		
30.09.2021 09:38:00 ortho-Ph 30.09.2021 09:38:00 ortho-Ph	Charles State Control of the Control		THE RESERVE OF THE PERSON NAMED IN COLUMN 1	ma/l		KOIPK 1.4)		-
30.09.2021 09:38:00 Phospho			0,013	mg/l mg/l	N	1		
30.09.2021 09:38:00 Sulfat	n gesanii		175	mg/l	ğ			
THE RESIDENCE OF THE PROPERTY	etalle		110	inger	Ö			-
30.09.2021 09:38:00 Arsen g		<	0,3	µg/l	V			
30 09 2021 09:38:00 Blei nelh			0.1	uo/l		1		
30.09.2021.09:38:00 Cadmiun		<	0.25	uo/l		(PK 1.1)(95-P	0.025)	
30.09.2021 09:38:00 Eisen ge	1909/07/07/07		0,19	mg/l		-		
30 09 2021 09:38:00 Fisen ne			0.19	mo/l				
30.09.2021 09:38:00 Mangan	qelöst		0,29	mg/l		PK 2,13		
30.09.2021 09:38:00 Mangan			0,28	mg/l		S.		*
Datensatz: If ◀ 72 von 72	H → T _× Keir	r Filter Su	uchen	4				Þ
Plausi-Prfg. Analyse:	QS_Klasse:		3 Bemer	kungen (F	robennah	me):	☑ Freigabe A	Analyse
EK_1,3, EK_1,12 (705/713), PK_1 (EK_1,9,PK_2,9,PK_2,14,PK_2,15								
(10.06.2022)		26.0						
			Beme	rkungen (/	Analyse]:			
Anwender-Feld1:			-					
The state of the s	F 50200 0		1 1	- L		100 B		
Die Analysen sind n	och nicht in der	Datenban	k aespeiche	ert. Sie kö	nnen sie i	n diesem Fens	ter bearbeiten.	ķ

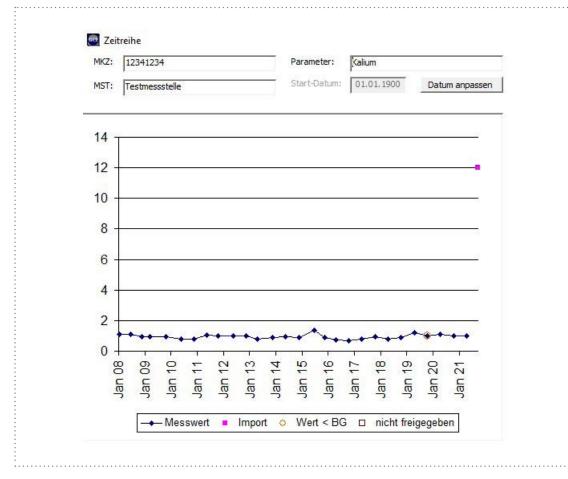
Die in Abbildung 4 braun markierten Zeilen für Nitrat und Mangan gelöst enthalten beide das gleiche Prüfkürzel PK_2.13. Hier handelt es sich um eine Überschreitung der Vorgabe "Mangan gelöst > 0,2 mg/l und Nitrat > 2 mg/l". Die Mangankonzentration beträgt 0,29 mg/l und die Nitratkonzentration 3 mg/l. Wie in Kapitel 2.2 beschrieben, handelt es sich bei dieser Art von Prüfungen um die Gegenüberstellung empirisch ermittelter Werte, die nicht automatisch einen Fehler bedeuten müssen. Für beide Messwerte wurde keine zusätzliche Fehlermeldung der Prüfungen PK 1.1 oder PK 1.2 erzeugt, so dass die Werte keine Ausreißer darstellen. Die Überschreitungen der Vorgaben sind auch verhältnismäßig gering, so dass in diesem Fall keine weiteren Schritte erforderlich wären.

Die grün markierte Zeile in Abbildung 4 enthält den Parameter ortho-Phosphat mit einer Konzentration von 0,04 mg/l. Das Plausibilitätskriterium PK_1.4 steht in Klammern hinter den zwei Buchstaben "kD". Dies steht für die Abkürzung "keine Daten". In diesem Fall konnte die Prüfung, ob der Messwert kleiner der angegebenen Bestimmungsgrenze ist, nicht durchgeführt werden, weil keine Be-

stimmungsgrenze angegeben wurde. Hier ist ein Nachtrag der Bestimmungsgrenze und eine erneute Prüfung erforderlich.

Des Weiteren ist in Abbildung 4 der Parameter Cadmium gelöst (blau umrandet) mit der Prüfmeldung (PK 1.1) (95-P:0,025) versehen. Im Unterschied zu den anderen Meldungen steht hier das Prüfkürzel in Klammern und zeigt so, dass für die Prüfung nicht die erforderlichen fünf Messwerte vorhanden waren (vgl. Kapitel 2.2). Tatsächlich liegt erst ein weiterer Messwert vor. Das Prüfergebnis ist somit nicht aussagekräftig. Es wird aber als Zusatzinformation dennoch angezeigt und gibt hier einen wertvollen Hinweis. Denn ein Blick auf die Diagrammansicht der Zeitreihe zeigt, dass der vorherige Messwert ebenfalls unter der Bestimmungsgrenze lag, nur dass die Bestimmungsgrenze 0,025 mg/l betrug und nicht wie im Fall des zu importierenden Messwertes 0,25 mg/l. An dieser Stelle wäre eine Prüfung der angegebenen Bestimmungsgrenzen sinnvoll, um auch hier einen Schreibfehler auszuschließen. Durch wechselnde Labore ist aber auch eine Änderung der Bestimmungsgrenze nicht ausgeschlossen und durchaus plausibel.





5 Ausblick

Die Plausibilitätsprüfung für Grundwasseranalysen ist einer der wichtigsten Schritte zur Qualitätssicherung, um weiterführende Auswertungen zum Beispiel für die Berichtspflichten nach EG-Wasserrahmenrichtlinie oder nach Düngeverordnung mit belastbaren und repräsentativen Daten durchführen zu können.

Da das Tool jedoch bei den meisten Prüfungen auf empirische Werte zurückgreift und damit nur Anhaltspunkte für mögliche Unstimmigkeiten liefern kann, ist die Benutzung und Bewertung der Plausibilität von Grundwasseranalysen stark an die fachliche Expertise des Prüfers / der Prüferin geknüpft. Das Tool liefert dem Prüfer / der Prüferin dabei wertvolle Hinweise, in dem es aus der Fülle an Messwerten jene herausfiltert, die mög-

licherweise unplausibel sein könnten. Diese Vorauswahl bewirkt eine hohe Zeitersparnis.

Die Entwicklung des Plausibilitäts-Tools ist ein Prozess, der in Zusammenarbeit mit der Firma GCI GmbH laufend fortgeführt wird.

Für 2022 ist unter anderem die Ergänzung folgender weiterer Prüfungen geplant:

- DOC (gelöster organischer Kohlenstoff) größer TOC (gesamter organischer Kohlenstoff)
- Aluminium gelöst größer Aluminium gesamt
- Erweiterung der PK_1.1 und PK_1.2 für die Analysenstammdaten, zum Beispiel den Grundwasserstand, den Förderstrom, die Lotung oder die Entnahmetiefe

Literaturhinweise

- AK GWB (2003). Handbuch Grundwasserbeobachtung Teil 5 Grundwasserprobennahme. Arbeitskreis Grundwasserbeobachtung.
- BUNR (2000). Entwicklung von Erfassungs- und Auswertungsverfahren für Grundwasserzustandsdaten zur Erfüllung internationaler Berichtspflichten des Bundes gegenüber der Europäischen Union. Umweltforschungsplan des Bundesministers für Umwelt, Naturschutz und Reaktorsicherheit; Forschungsbericht 298 23 241.
- DVWK 128/1992. Entnahme und Untersuchungsumfang von Grundwasserproben. Deutscher Verband für Wasserwirtschaft. Verlag Paul Parey, Hamburg Berlin. ISBN 3-490-12897-4 Heft 128/1992.
- DIN EN ISO 17025:2018-03. Allgemeine Anforderungen an die Kompetenz von Prüf- und Kalibrierlaboratorien (ISO/IEC 17025:2017)
- DIN 38402-13:2021-12. Deutsche Einheitsverfahren zur Wasser-, Abwasser- und Schlammuntersuchung – Allgemeine Angaben (Gruppe A) – Teil 13: Planung und Durchführung der Probennahme von Grundwasser (A13).
- DIN 38402-60. Deutsche Einheitsverfahren zur Wasser-, Abwasser- und Schlammuntersuchung Allgemeine Angaben (Gruppe A) Teil 60: Analytische Qualitätssicherung für die chemische und physikalisch-chemische Wasseruntersuchung (A60).
- DIN 38402-62:2014-12. Deutsche Einheitsverfahren zur Wasser-, Abwasser- und Schlammuntersuchung Allgemeine Angaben (Gruppe A) Teil 62: Plausibilitätskontrolle von Analysendaten durch Ionenbilanzierung (A 62).
- Hölting, B. & Coldewey, W.G. (2013). Hydrogeologie. Einführung in die Allgemeine und Angewandte Hydrogeologie. 8. Auflage, Springer-Verlag Berlin-Heidelberg.
- Kölle, W. (2017). Wasseranalysen, richtig beurteilt: Grundlagen, Parameter, Wassertypen, Inhaltsstoffe. Grenzwerte nach Trinkwasserverordnung und EU-Trinkwasserrichtlinie. Wiley-VCH, 4. Auflage. ISBN 10:3527342850.
- LAWA (1993). Grundwasser Richtlinien für Beobachtung und Auswertung, Teil 3 Grundwasserbeschaffenheit. Länderarbeitsgemeinschaft Wasser. ISBN 3-88754-023-9.
- Maier & Grohmann (1977). Bestimmung der Ionenstärke natürlicher Wässer aus deren elektrischer Leitfähigkeit. Zeitschrift für Wasser- und Abwasser-Forschung, 10, 1, 9 12.
- Rechlin (2008). Eine Methode zur konzentrationsunabhängigen Früherkennung von Salzwasserintrusionen in süßwasserführende Grundwasserleiter und Oberflächengewässer. Brandenburger geowissenschaftliche Beiträge 15 (2008), 1/2, S. 57 – 68.
- Schmidt (2013). Vergleich der gemessenen elektrischen Leitfähigkeit von Wasser mit der Berechnung der Leitfähigkeit aus analytischen Ergebnissen. Bachelorarbeit. Technische Universität Bergakademie Freiberg.

Anhang

Anhang A: Gesamtüberblick der Plausibilitätsprüfungen für Grundwasseranalysen

Anhang A:	Gesamtüberblick der Plausibilitätsprüfungen für Grundwasseranalysen

Eingangskontrolle (EK)							
Kürzel	Beschreibung	Grundlage					
EK_1.0	Analyse schon vorhanden						
EK_1.1	MKZ falsch oder wurde nicht gefunden						
EK_1.2	Zahlen fehlen oder Formatfehler						
EK_1.3	Datum fehlt oder Formatfehler						
EK_1.4	Zeit fehlt oder Formatfehler						
EK_1.5	Probe nicht innerhalb von 24 Stunden ins Labor gebracht (Datum Laboreingang)	AK GW-B (2003)					
EK_1.9	Wasserstand nicht konstant (Abweichung zum Messwert vor 5 min > 2 %)						
EK_1.10	Wassertemperatur nicht konstant (Abweichung zum Messwert vor 5 min ±0,1 K)	DIN 38402-13					
EK_1.11	pH nicht konstant (Abweichung zum Messwert vor 5 min ±0,1 pH-Einheiten)	DIN 38402-13					
EK_1.12	elektr. Leitfähigkeit nicht konstant (Abweichung zum Messwert vor 5 min ±1,0 %)	DIN 38402-13					
EK_1.13	Sauerstoffgehalt nicht konstant (Abweichung zum Messwert vor 5 min ±0,1 mg/l)	DIN 38402-13					
EK_1.14	Redoxspannung nicht konstant (Abweichung zum Messwert vor 5 min > 1 mV)	Hölting & Coldewey (2013)					

Plausibilitätskontrolle (PK)								
Kürzel	Beschreibung Grundlage							
1. Plausibilität der Einzelwerte:								
PK_1.1	Messwert außerhalb des typischen Konzentrationsbereiches der jeweiligen Messstelle; Überschreitung des 95-Perzentils oder Unterschreitung des 5-Perzentils pH-Wert: plausibler Bereich: 4,5 – 8,5	DIN 38402-60						
PK_1.2	Messwert außerhalb des Akzeptanzintervalls der jeweiligen Messstelle: Mittelwert Plusminus 2-fache Standardabweichung	LAWA (1993)						
PK_1.4	Messwert kleiner Bestimmungsgrenze							
2. Plausibili	tät von Parameterpaaren:							
PK_2.1	elektrische Leitfähigkeit (µS/cm) <> 30,2 * Summe der Ionenstärken (mmol/l) mit 25 Prozent Puffer von der gemessenen elektrischen Leitfähigkeit	Maier & Grohmann (1977) in Schmidt (2013)						
PK_2.3	Fe gelöst > Fe gesamt							
PK_2.4	Mn gelöst > Mn gesamt							

Plausibilitätskontrolle (PK)							
Kürzel	Beschreibung	Grundlage					
PK_2.5	Phosphat-ortho-P > Phosphor Gesamt	DIN 38402-60					
PK_2.6	HCO_3 – (Säurekapazität KS 4,3 * 61,0168) <> 0 \pm 5 mgl Puffer vom berechneten Wert						
PK_2.7	$O_2 > 5 \text{ mg/l und NO}_2 > 0.05 \text{ mg/l}$	DVWK 128/1992					
PK_2.8	$O_2 > 5 \text{ mg/l und NH}_4 > 0.1 \text{ mg/l}$	DVWK 128/1992					
PK_2.9	8,0 < pH < 5,5 und Ca + Mg > 1,0 mmol	DVWK 128/1992					
PK_2.10	$O_2 > 5$ und $Fe_2 + > 0.05$ mg/l	DVWK 128/1992					
PK_2.11	$O_2 > 5$ und $Mn_2 + > 0.05$ mg/l	DVWK 128/1992					
PK_2.12	$Fe_2 + > 0.2 \text{ und NO}_3 > 2.0 \text{ mg/l}$	DVWK 128/1992					
PK_2.13	$Mn_2 + > 0.2$ und $NO_3 > 2.0$ mg/l	DVWK 128/1992					
PK_2.14	5,2 < pH < 8,6 und Al > 100 μg/l	Kölle (2017)					
PK_2.15	Gesamthärte in °dH <> Ca + Mg (mmol/l) * 5,6 (Puffer 1 °dH bzw. 0,5 mmol/l)						
3. Plausibilität der Analyse:							
PK_3.1	Berechnung Ionenbilanzfehler und Zuweisung einer QS-Klasse	DIN 38402-62					
PK_3.2	Ionenbilanzfehler importiert <> Ionenbilanzfehler berechnet?						

Ministerium für Landwirtschaft, Umwelt und Klimaschutz des Landes Brandenburg

Referat Öffentlichkeitsarbeit

Henning-von-Tresckow-Str. 2 – 13, Haus S, 14467 Potsdam

Telefon: +49 (0) 331 866-7237

E-Mail: bestellung@mluk.brandenburg.de

Internet: mluk.brandenburg.de