

3 Integriertes System zur Speicherung von Meß- und Ergebnisdaten am Beispiel für Labordaten

3.1 Allgemeines

Für die geowissenschaftliche Beschreibung des Landes sind die Ergebnisse von Gesteins-, Boden- und Wasseranalysen wertvolle Grundlageninformationen, die dauerhaft gespeichert werden müssen (Abb. 5). An eine bedarfsgerechte Archivierung sind verschiedene Anforderungen zu stellen: So müssen die Daten einfach und schnell recherchierbar sein, für eine Auswertung mit DV-Programmen in digitaler Form vorliegen und problemlos austauschbar sein. Um dieses zu gewährleisten, werden seit einigen Jahren am LGRB im Rahmen des BIS zentrale Datenbanken aufgebaut. Ein wesentlicher Baustein ist der Bereich zur Speicherung von Labordaten.

Das Datenmodell für Labordaten ist in ein allgemeines Modell zur Ablage von Meßdaten integriert. Dieses umfaßt u. a. noch die Speicherung von Pump- und Markierungsversuchen, von Gefügemessungen, hydrologischen Messungen und geophysikalischen Bohrlochmessungen (Abb. 6); es soll in Zukunft für Ergebnisdaten (z. B. von Pumpversuchsauswertungen) erweitert werden. Für den Laborbereich beinhaltet das Modell einheitliche Laborstandards und Nomenklatorsysteme, ferner Festlegungen, welche Informationen zu den Begleitumständen einer Probenahme und Messung archiviert werden.

Das Datenmodell, das im folgenden vorgestellt wird, wurde sowohl in internen Arbeitsgruppen als auch in bundesweit tätigen Arbeitskreisen der Staatlichen Geologischen Dienste entwickelt (AG FIS Hydrogeologie 1994).

3.2 Datenmodell für Labordaten

Das integrierte Datenmodell zur Speicherung von geowissenschaftlichen Meß- und Beobachtungsdaten besteht aus 14 Datenbanktabellen (Abb. 6), deren Funktionen sich, soweit sie den Laborbereich betreffen, wie folgt beschreiben lassen:

Untersuchungsprogramm: Ein Untersuchungsprogramm ist eine organisatorische Bearbeitungseinheit. Beispiele dafür sind eine Probenahmekampagne für mineralogische, petrographische, chemische oder isotonenphysikalische Untersuchungen oder ein Markierungsversuch. Angaben dazu werden in der Datenbanktabelle "Untersuchungsprogramm" gespeichert. Übergeordnete Organisationseinheit ist das Projekt, mit dem das Untersuchungsprogramm verknüpft ist.

Meß- und Beobachtungsdaten können entweder vor Ort oder durch Messung im Labor gewonnen wer-

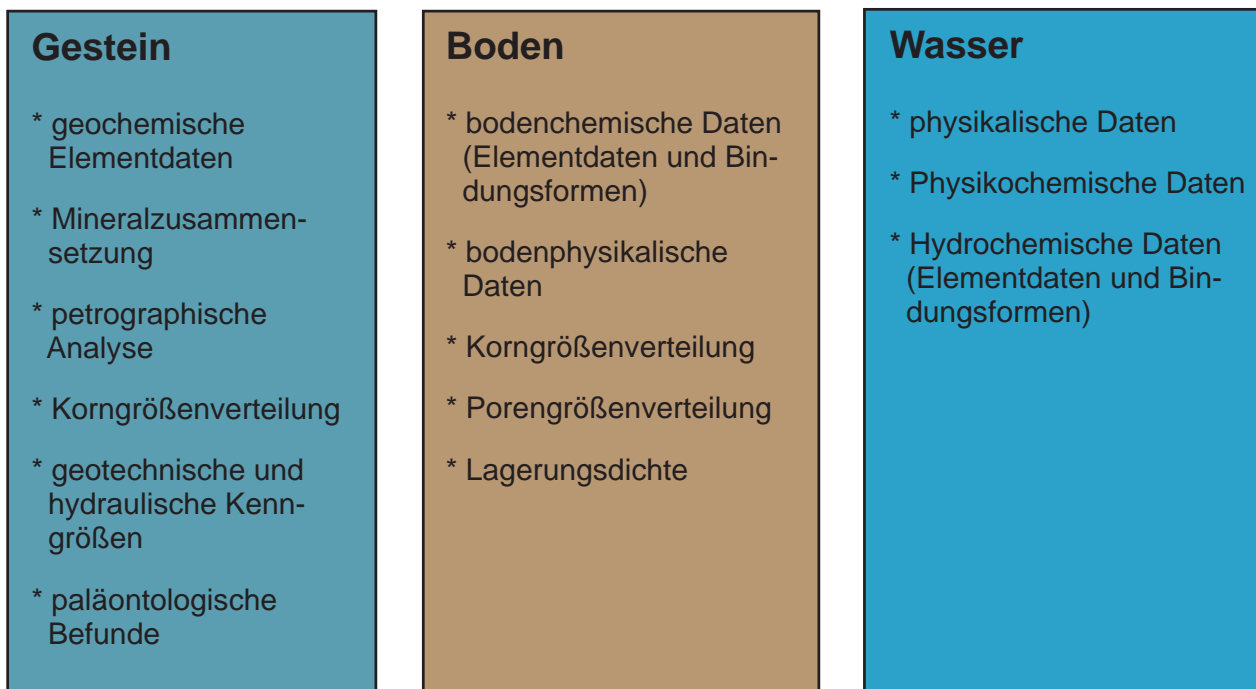


Abb. 5: Übersicht über die Labordaten des LGRB

den. Die Daten zur Beschreibung von Probenahme und Analytik werden in den Datenbanktabellen „Probe“, „Teilprobe“, „Präparat“ und „Analyse“ gespeichert.

Probe: Informationen über die Probenahmebedingungen, die wichtige Hintergrundinformationen für die Beurteilung der Analyseergebnisse darstellen, werden in der Tabelle „Probe“ verwaltet. Werden hydrologische Parameter bei der Probenahme gemessen, werden die Resultate, soweit sie auch unabhängig von der Probenahme von Bedeutung sind (Ruhewasserstand in einer Grundwassermeßstelle, Schüttung einer Quelle usw.), nicht in der Tabelle „Probe“, sondern als eigenständige Meßergebnisse gespeichert. Sie sind jedoch weiterhin mit der Probe verknüpft. In der Tabelle „Probe“ wird außerdem die Probenahmestelle mit den allgemeinen Stammdaten der punktförmigen Aufschlüsse und, falls es sich um ausgebaute Bohrungen handelt, zusätzlich noch mit den Stammdaten der ausgebauten Bohrungen verknüpft. Zu der Probenahmestelle wird weiterhin der Bohr- und Ausbaustatus zum Zeitpunkt der Probenahme vermerkt.

Teilprobe: Eine Probe kann durch Fraktionierung in Teilproben zerlegt werden. Alle damit in Zusammenhang stehenden Daten werden in der Tabelle „Teilprobe“ abgelegt.

Präparat: Aus einer Probe oder Teilprobe können Präparate hergestellt werden. Ist nicht nur die Präparationsart von Interesse, sondern das individuelle Präparat (z. B. bei Dünnschliffen), so können alle erforderlichen Angaben dazu in der Tabelle „Präparat“ gespeichert werden. Die Verknüpfung erfolgt über die Tabelle „Meßbedingungen“ direkt mit dem Parameter (s. u.).

Analyse: Die Tabelle „Analyse“ enthält allgemeine Angaben zur Analyse, u. a. die Labornummer und den Namen des Labors. Analysiert werden können sowohl Proben wie auch Teilproben. Zu einer Probe kann es mehrere Analysen geben, wenn z. B. chemische und isotopephysikalische Untersuchungen in unterschiedlichen Labors durchgeführt wurden.

Für die Ablage der Meß- und Beobachtungswerte sind die Datenbanktabellen „Verknüpfung“, „Para-

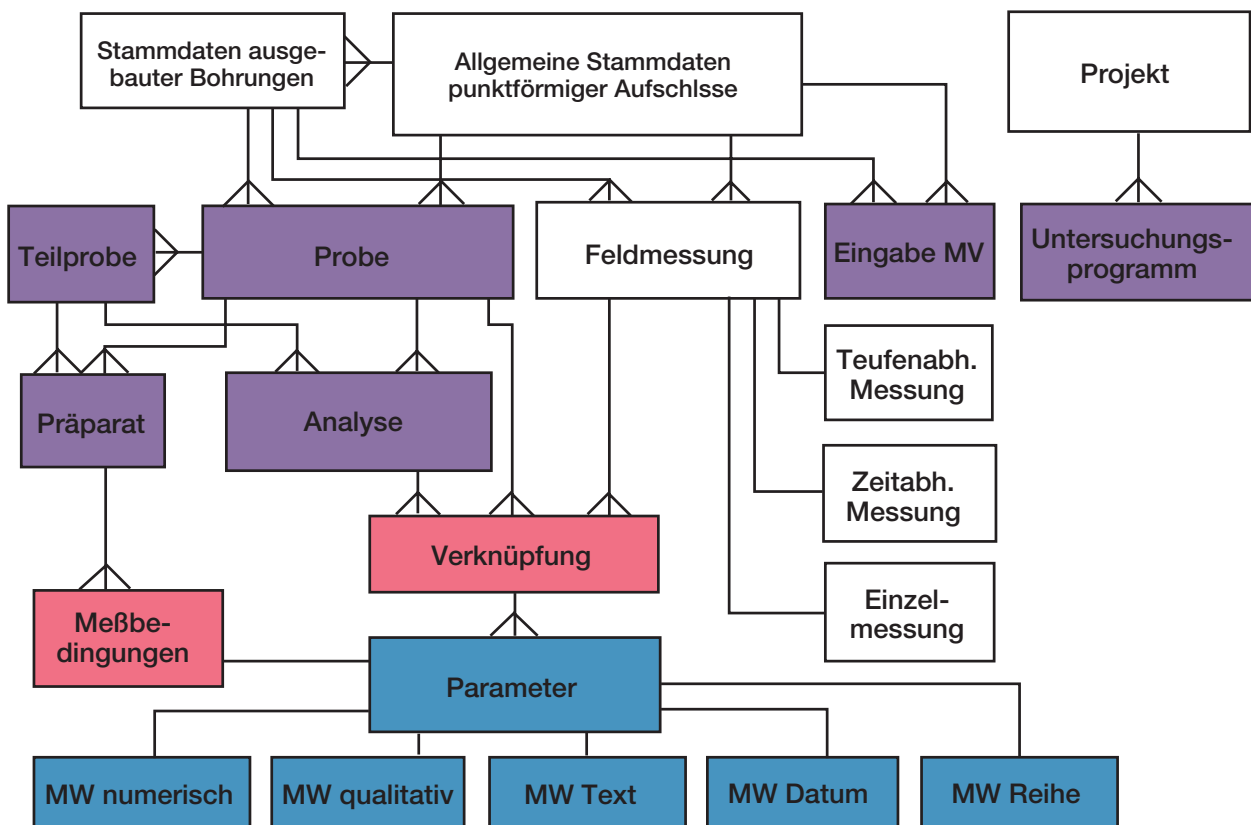


Abb. 6: Datenmodell für Labordaten

Die Datenbanktabellen, die den Laborbereich betreffen, sind farbig dargestellt. Die 1 : n-Verknüpfungen des Untersuchungsprogramms mit Eingabe MV (Markierungsversuche), Feldmessung, Probe, Teilprobe, Präparat und Analyse sind aus Platzgründen nicht gezeichnet.

meter", "MW numerisch", "MW qualitativ", "MW Text", "MW Datum", "MW Reihe" und "Meßbedingungen" vorgesehen.

Verknüpfung: In der Tabelle "Verknüpfung" wird die Zusammengehörigkeit zwischen der Analyse bzw. der Feldmessung einerseits und den Parametern andererseits festgelegt. Außerdem besteht die Möglichkeit, Parameter z. B. einer Analyse zu gruppieren.

Parameter: Parameter werden in der Tabelle "Parameter" durch Verknüpfung mit der allgemeinen Parameterliste über eine Kennung identifiziert. Meßzeiten und Meßsteufen werden ebenfalls als Parameter behandelt. Alle Parameter können in dieser Tabelle zentral recherchiert werden. Über die Tabelle "Verknüpfung" ist es möglich, Parameterkombinationen abzubilden. Des Weiteren gibt es in dieser Tabelle einen Verweis auf die Meßbedingungen bei der Bestimmung des Parameters, und es kann eine hierarchische Beziehung zwischen Parametern abgebildet werden (z. B. pH-Wert und zugehörige Wassertemperatur oder Isotopenmeßwert und zugehörige Standardabweichung).

MW numerisch, MW qualitativ, MW Text, MW Datum, MW Reihe: Bei der Ablage der eigentlichen Beobachtungen und Meßergebnisse wird zwischen numerischen Meßergebnissen (z. B. Konzentrationsangaben), qualitativen Angaben aus einer Begriffsliste (petrographische Begriffe, Farben etc.), Datumsangaben (z. B. Probenahmezeitpunkt) und freiem Text (z. B. Erläuterungen) unterschieden. Sie werden getrennt in Tabellen abgelegt. Schließlich können Meßwerte einer Meßreihe, deren Einzelwerte nicht recherchierbar sein müssen (z. B. Temperaturmeßwerte bei Pumpversuchen, Leitfähigkeitswerte bei Logs), in einem Feld vom Typ LONG (MW Reihe) erfaßt werden. In der Tabelle "Parameter" wird die Meßreihe dann als ein Parameter behandelt, ebenso wie die Datenreihen der zugehörigen Meßzeiten oder Meßsteufen. Für Recherchezwecke wird der erste und letzte sowie der größte und kleinste Wert der Meßreihe archiviert. Soll darüber hinaus ein direkter Zugriff auf einzelne Werte der Meßreihe möglich sein, müssen die Einzelwerte abgespeichert werden.

Meßbedingungen: In dieser Tabelle sind Angaben zu Meßgeräten und Meßverfahren abgespeichert. Sie werden für jeden Parameter individuell abgelegt. Hier kann alternativ auf eine Präparationsart oder ein Präparat verwiesen werden.

Dieses Datenmodell erfüllt verschiedene Anforderungen, die für eine effektive Nutzung der Datenbank notwendig sind:

Beobachtungs- und Meßwerte können sowohl als Einzelwerte als auch in zeitlicher und räumlicher (vertikaler) Auflösung (Zeitreihen, Logs) erfaßt werden.

Alle Parameter sind einheitlich in einer Datenbanktabelle recherchierbar.

Das Datenmodell ist relational. Es baut auf den bereits vorhandenen Datenbankstrukturen auf.

Das Datenmodell ist allgemein und umfassend sowie leicht erweiterbar für die Aufnahme bisher nicht berücksichtigter Meß- und Beobachtungsdaten.

Der Aufwand für die DV-technische Umsetzung des Konzepts in der Datenbank ist gering, für die Programmierung einer komfortablen Benutzeroberfläche jedoch vergleichsweise groß.

3.3 Datenbankmodell

3.3.1 Tabellen für die Datenspeicherung

Bevor das Datenmodell in der Datenbank installiert werden kann, sind weitere Vorgaben zu machen. Ein wesentlicher Punkt ist die Festlegung der Datenfelder der Datenbanktabellen, in die die jeweiligen Informationen abgespeichert werden sollen. Dabei sind sowohl inhaltliche als auch DV-technische Festlegungen zu treffen.

In Abb. 7 ist als Beispiel ein Teil des Feinkonzepts für die Tabelle "Probe" dargestellt. Wichtigste Festlegung aus fachlicher Sicht ist die Definition des Datenfeldinhalts. Für die DV-technische Umsetzung müssen die Feldbezeichnung, der Feldname, der Feldtyp, die Feldlänge und gegebenenfalls die Maßeinheit definiert werden.

3.3.2 Basistabellen

Die Nomenklatur, die bei der qualitativen Beschreibung von Attributen in der Datenbank einheitlich Verwendung finden soll, wird in Schlüssellisten oder

Feldbezeichnung	Feldname	Feldtyp	Feldlänge	Maßeinheit	Verbindlichkeit	Feldinhalt
Probenummer	PNUM	I	7		obligatorisch	Primärschlüssel
DVID Meßstelle	IDMES	I	10		obligatorisch	Schlüssel
Probebezeichnung	PBEZ	C	255		fakultativ	
Probenart	PART	I	1		obligatorisch	Schlüssel
Probematerial	PMAT	I	6		obligatorisch	Schlüssel
Probenehmer (Inst.)	PINSTN	I	6		fakultativ	Schlüssel
Probemenge	PMASSE	R	10	g	fakultativ	
Probenvolumen	PVOLUMEN	R	10	cm ³	fakultativ	
Probenahmebedingungen	PBEDING	C	255		fakultativ	
Entnahmeart	PENTART	I	6		fakultativ	Schlüssel
Entnahmegesetz	PGERÄT	I	6		fakultativ	Schlüssel
Entnahmerate	PRATEWERT	R	10	m ³ /s	fakultativ	
Verbleib der Probe	PREST	C	50		fakultativ	
Bemerkungen	BEMERK	C	255		fakultativ	

Abb. 7: Ausschnitt aus dem Feinkonzept für die Datenbanktabelle "Probe"

Basistabellen hinterlegt. Für den Laborbereich gibt es Basistabellen für die chemischen Parameter, Grenzwertlisten für die Beurteilung von Wasseranalysen, Listen für petrographische Begriffe, Zusammenstellungen von Standardanalyseverfahren u. a. Die Problematik solcher Listen wird am Beispiel der Basistabelle der chemischen Parameter (Abb. 8) näher erläutert. Deren charakteristische Eigenschaften lassen sich wie folgt beschreiben:

Alle chemischen Parameter sind aufgeführt, zu denen in der Datenbank Meßwerte abgespeichert werden sollen. Bei Bedarf können neue Einträge vorgenommen werden.

Jeder einzelne Parameter ist durch eine fortlaufende Nummer eindeutig gekennzeichnet. Weiterhin hat jeder Parameter eine Kurzbezeichnung und einen Namen.

Zu jedem Parameter können Synonymbegriffe vermerkt werden.

Zusätzlich sind die Maßeinheiten, mit denen die Meßwerte archiviert werden sollen, für jeden Parameter, gegebenenfalls getrennt für Wasser, Boden und Gestein, gespeichert.

Für eine Recherche sind übergeordnete, hierarchisch gegliederte Suchbegriffe archiviert, die unterschiedliche Themenbereiche abdecken. So gehört Gamma-Hexachlorcyclohexan (Gamma-HCH)

chemisch den schwerflüchtigen halogenierten Kohlenwasserstoffen, den halogenierten Kohlenwasserstoffen, den organischen Substanzen und den chemischen Parametern an. Weiterhin ist es der Wirkstoffgruppe der Insektizide und der Pflanzenbehandlungs- und Schädlingsbekämpfungsmittel zuzuordnen. Außerdem handelt es sich um einen Einzelparallelparameter (Abb. 8).

In der Parameterbasistabelle gibt es zu jedem Parameter Hinweise auf Grenzwertlisten und Grenzwerte.

3.4 Datenerfassung

Wesentliches Kriterium für eine sinnvolle Nutzung einer Datenbank ist die Qualität der gespeicherten Daten. Nur bei einem hohen Qualitätsstandard ist der erhebliche Aufwand der digitalen Datenerfassung gerechtfertigt.

Um Eingabe- und Übertragungsfehler ausschließen zu können, wird angestrebt, die Meßwerte möglichst "online" von den Meßgeräten in die Datenbank zu übertragen. Dies erfolgt bereits routinemäßig bei den Meßdaten der fluorimetrischen Untersuchungen im Rahmen von Markierungsversuchen. Die Erfassung der übrigen Labordaten erfolgt über Masken, in die mehrere Plausibilitätsprüfungen integriert sind. Einzelne Informationen werden unmittelbar nach ihrer

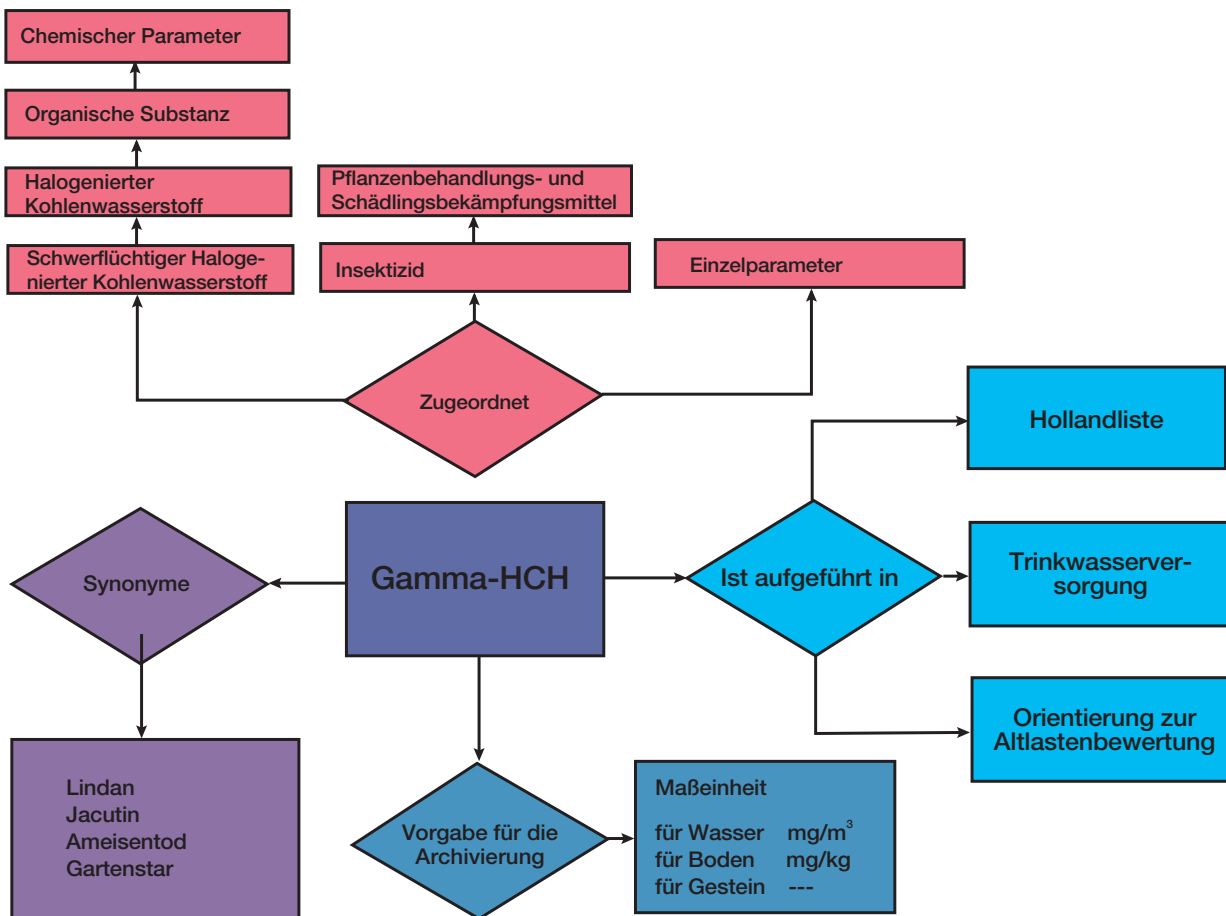


Abb. 8: Aufbau der Basistabelle "Chemische Parameter" am Beispiel von Gamma-HCH. Nach einem Entwurf von F. DAFFNER, Bayerisches Geologisches Landesamt.

Eingabe durch Maskentrigger auf Plausibilität geprüft. Eine Fehlermeldung erfolgt z. B., wenn der eingegebene pH-Wert oder der Sauerstoffgehalt außerhalb des definierten Wertebereichs liegt.

Daneben gibt es andere Plausibilitätstests, die sich auf Parameterkombinationen oder die gesamte Analyse beziehen. Diese werden nach Eingabe der vollständigen Analyse durchgeführt. Geplant ist die Installation eines Programms, das routinemäßig folgende Tests durchführt (FEUERSTEIN & GRIMM-STRELE 1989, DVWK 1994):

- Berechnung des Ionenbilanzfehlers
- Vergleich zwischen Summenparametern und der Summe der Konzentrationen der Einzelsubstanzen
- Vergleich zwischen der gemessenen elektrischen Leitfähigkeit und der aus den Analysewerten berechneten elektrischen Leitfähigkeit
- Vergleich der Meßwerte mit empirisch ermittelten

Stabilitätsbereichen

- Vergleich mit älteren Analysen des gleichen Probenahmepunkts.

Für die Übernahme von Fremddaten steht im Umweltressort das von der Landesanstalt für Umweltschutz Baden-Württemberg entwickelte Format zur Übertragung von Labordaten, LABDÜS, zur Verfügung, das von den meisten kommerziellen Labors des Landes verwendet wird. Um Daten im LABDÜS-Format rationell in die Datenbank des LGRB einlesen zu können, ist eine entsprechende Schnittstelle geplant.

3.5 Datenausgabe und -verarbeitung

Geplant ist zunächst eine Benutzeroberfläche für die Datenausgabe und -verarbeitung. Die folgenden Tä-

tigkeiten sollen unterstützt werden:

- routinemäßige Recherchen
- Standardausgabe von Analysedaten in Tabellen
- standardisierte Darstellungen von Analysedaten in Diagrammen
- Darstellung von Ganglinien und vertikalen Profilen
- Regionalisierung von Analysedaten
- Anwendung von Speicher-Durchflußmodellen
- Anwendung von chemischen Bilanzmodellen.

Die Datenausgabe und -verarbeitung soll im wesentlichen mit kommerzieller Software erfolgen. Voraussetzung für eine einfache Nutzung ist der Datentransfer zwischen Datenbank und den verschiedenen Programmen über komfortable Schnittstellen wie ODBC und JDBC.

Literatur

AG FIS Hydrogeologie (1994): Datenfeldkatalog für Punktdaten. – Ergebnisbericht der FIS Arbeitsgruppe Hydrogeologie der Ad-hoc-AG Hydrogeologie der Geologischen Landesämter: 11 S., 7 Anl.; Wiesbaden (unveröff.).

FEUERSTEIN, W. & GRIMM-STRELE, J. (1989): Plausibilitätstests für eine routinemäßige Erfassung von Grundwasserbeschaffungsdaten. – Vom Wasser, **73**: 375–398, 15 Abb., 8 Tab.; Weinheim (Chemie).

DVWK (1994): Bewertung und Auswertung hydrochemischer Grundwasser-Untersuchungen - Bedeutung von natürlichen Unterschieden und Fehlern für die Beurteilung von Beschaffungsdaten. – DVWK-Materialien, **1/94**: 70 S., 10 Abb.; Bonn.