

TEXTE

173/2024

Abschlussbericht

Erweiterung der Datenbank „Biozide in der Umwelt“

von:

Kerstin Schmidt, Jörg Schmidtke, Paul Schmidt
BioMath GmbH, Hamburg/ Rostock

Herausgeber:

Umweltbundesamt

TEXTE 173/2024

IT Rahmenkonzept

Projekt Nr. 180818
FB001589

Abschlussbericht

Erweiterung der Datenbank „Biozide in der Umwelt“

von

Kerstin Schmidt, Jörg Schmidtke, Paul Schmidt
BioMath GmbH, Hamburg/ Rostock

Im Auftrag des Umweltbundesamtes

Impressum

Herausgeber

Umweltbundesamt
Wörlitzer Platz 1
06844 Dessau-Roßlau
Tel: +49 340-2103-0
Fax: +49 340-2103-2285
buergerservice@uba.de
Internet: www.umweltbundesamt.de

Durchführung der Studie:

BioMath GmbH:
Eppendorfer Weg 255
20251 Hamburg

Abschlussdatum:

August 2024

Redaktion:

Fachgebiet IV 1.2 | Section IV 1.2
Christiane Meier, Korinna Ziegler

DOI:

<https://doi.org/10.60810/openumwelt-7537>

ISSN 1862-4804

Dessau-Roßlau, Dezember 2024

Die Verantwortung für den Inhalt dieser Veröffentlichung liegt bei den Autorinnen*Autoren.

Kurzbeschreibung: Erweiterung der Datenbank „Biozide in der Umwelt“

Ziele des Vorhabens war es, geeignete Datenquellen zu identifizieren und die Voraussetzungen für eine automatisierbare Erweiterung der Datenbank „Biozide in der Umwelt“ zu schaffen, damit Biozidmonitoringdaten aus dem deutschsprachigen Raum in Zukunft regelmäßig aus verschiedenen externen Datenquellen in die Datenbank „Biozide in der Umwelt“ integriert werden können.

Im Einzelnen umfasste das Projekt:

- ▶ die Recherche und Identifikation geeigneter Datenquellen, welche Umweltmonitoringdaten von bioziden Wirkstoffen und ausgewählten Transformationsprodukten aus dem deutschsprachigen Raum enthalten, frei zugänglich sind und regelmäßig aktualisiert werden,
- ▶ die Erstellung einer Hilfsdatenbank zur Haltung der identifizierten Umweltmonitoringdaten von bioziden Wirkstoffen bzw. die Erstellung einer aktuellen Datensammlung aus den identifizierten Datenquellen in Form einer csv- oder Exceldatei,
- ▶ die Bereitstellung und Anwendung von Tools (Skripte bzw. Hilfsmittel) zur Automatisierung der Aufbereitung von Monitoringdaten und ihrer Integration in die Hilfsdatenbank. Dies umfasst Tools zum Datenmapping, zur Datenmigration und zum Dublettencheck.

Nach Prüfung der Eignung wurden insgesamt acht Datenquellen identifiziert, die Biozidmonitoringdaten aus dem deutschsprachigen Raum für 125 biozide Substanzen und Transformationsprodukte lieferten. Die Anzahl der insgesamt identifizierten Messwerte beträgt 791.281. 95,5 % der identifizierten Messdaten wurden in Deutschland erhoben, etwa 1,0 % in Österreich und 3,5 % in der Schweiz. Darunter befanden sich auch potenzielle Dubletten, die identifiziert und gekennzeichnet wurden.

Im Ergebnis des Projektes wurden neben den Rohdaten aus den acht identifizierten Datenquellen und den in Form einer Hilfsdatenbank standardisierten Daten auch Datenexport-Anleitungen, Nutzungsbedingungen, eine CAS-Mapping Tabelle und R-Skripte zur Datenfilterung und -standardisierung für eine zukünftige automatisierbare Erweiterung der Datenbank „Biozide in der Umwelt“ (BiU) geliefert.

Abstract: Expansion of the "Biocides in the environment" database

The aim of the project was to identify suitable data sources and to create the prerequisites for an automatable extension of the "Biocides in the Environment" database so that biocide monitoring data from German-speaking countries can be regularly integrated from various external databases into the "Biocides in the Environment" database in future.

In detail, the project comprised

- ▶ Researching and identifying suitable data sources that contain environmental monitoring data on biocidal active substances and selected transformation products from German-speaking countries, that are freely accessible and are regularly updated,
- ▶ the creation of an auxiliary database to store the identified environmental monitoring data of biocidal active substances/ the creation of an up-to-date data collection from the identified data sources in the form of a csv or excel file,
- ▶ the provision and use of tools (scripts or aids) to automate the preparation of monitoring data and its integration into the auxiliary database including tools for data mapping, data migration and duplicate checks.

After checking suitability, a total of eight data sources were identified that provided biocide monitoring data from German-speaking countries for } biocidal substances and transformation products. The total number of identified measured values was 791,281. 95.5 % of the identified measured data was collected in Germany, around 1.0 % in Austria and 3.5 % in Switzerland. This included potential duplicates, which were identified and labelled.

As a result of the project, data export instructions, usage conditions, a CAS mapping table and R-scripts for data filtering and standardisation were delivered (in addition to the raw data from the eight identified data sources and the data standardised in the form of an auxiliary database) for a future automatable extension of the "Biocides in the environment" database.

Inhaltsverzeichnis

Abbildungsverzeichnis.....	8
Tabellenverzeichnis	8
Abkürzungsverzeichnis	9
Zusammenfassung.....	11
Summary	13
1 Einführung	15
2 Ziele des Projektes.....	17
3 Methodik	18
3.1 Recherche nach Institutionen und Datenquellen	18
3.2 Prüfung identifizierter Datenquellen auf Einschlusskriterien.....	18
3.3 Abgleich der Stofflisten identifizierter Datenquellen mit der vom UBA vorgegebenen Liste von bioziden Substanzen und Transformationsprodukten	19
3.4 Export der Biozidmonitoringdaten aus den identifizierten Datenquellen.....	21
3.5 Dokumentation von Auswahl und Export relevanter Biozidmonitoringdaten in den identifizierten Datenquellen	21
3.6 Erstellung von Mapping-Tabellen zur Überführung der Rohdaten aus den identifizierten Datenquellen in die Datenbank „Biozide in der Umwelt“	21
3.7 Standardisierung der exportierten Daten und Zusammenführung in der Hilfsdatenbank ..	22
3.8 Prüfung der standardisierten Daten auf Dubletten und Kennzeichnung	23
4 Ergebnisse	25
4.1 Institutionen des Umweltmonitorings im deutschsprachigen Raum	25
4.2 Veröffentlichung von Biozidmonitoringdaten in Datenquellen.....	28
4.3 Dubletten in den standardisierten Daten	41
5 Quellenverzeichnis	43
A Anhang	45

Abbildungsverzeichnis

Abbildung 1:	Prüfung und Ein-/Ausschluss der identifizierten Datenquellen	29
Abbildung 2:	Heatmap zur Datenverfügbarkeit pro eingeschlossene Datenquelle und CAS-Nummer	38
Abbildung 3:	Heatmap zur Datenverfügbarkeit pro eingeschlossene CAS- Nummer und Land.....	39
Abbildung 4:	Messwerte pro eingeschlossene Datenquelle und Jahr.....	40
Abbildung 5:	Heatmap zur Datenverfügbarkeit pro eingeschlossene CAS- Nummer und Jahr	40
Abbildung 6:	Struktur des R-Projekt Ordners der Hilfsdatenbank.....	45

Tabellenverzeichnis

Tabelle 1:	Mapping Mastertabelle zur Überführung der Felder der identifizierten Datenquellen in die Felder der Datenbank „Biozide in der Umwelt“ (Zieldatei).....	21
Tabelle 2:	Übersicht aller geprüften Institutionen.....	25
Tabelle 3:	Eignung der identifizierten Datenquellen nach Einschlusskriterien.....	29
Tabelle 4:	Messwertdaten je Kompartiment aller identifizierten Datenquellen	33
Tabelle 5:	Anzahl Messdaten je eingeschlossene Datenquelle und Land.....	38
Tabelle 6:	Anzahl Messdaten je eingeschlossene Datenquelle und Kompartiment	41
Tabelle 7:	Häufigkeit von Datenquellenpaaren mit potenziellen Dubletten	41

Abkürzungsverzeichnis

Abkürzung	Erläuterung
AT	Österreich
BAuA	Bundesamt für Arbeitsschutz und Arbeitssicherheit
BB	Brandenburg
BiU	Datenbank „Biozide in der Umwelt“
BW	Baden-Württemberg
BY	Bayern
CAS	Chemical Abstracts Service
CH	Schweiz
ChemInfo	Informations-System Chemikalien des Bundes und der Länder
CZ	Tschechoslowakei
DE	Deutschland
ECHA	European Chemicals Agency
EMPODAT	Database of occurrence/monitoring data on emerging substances
EU	Europäische Union
FGG	Flussgebietsgemeinschaft
FR	Frankreich
HB	Hansestadt Bremen
HE	Hessen
HH	Hansestadt Hamburg
ID	Identifizier
iDA	interdisziplinäre Daten und Auswertungen (Datenportal für Sachsen)
IKSR	Internationale Kommission zum Schutz des Rheins
LAWA	Bund-Länder-Arbeitsgemeinschaft Wasser
LU	Luxemburg
MV	Mecklenburg-Vorpommern
NI	Niedersachsen
NL	Niederlande
NORMAN	Network of reference laboratories, research centres and related organisations for monitoring of emerging environmental substances
NW	Nordrhein-Westfalen
OGewV	Oberflächengewässerverordnung

Abkürzung	Erläuterung
PL	Polen
RP	Rheinland-Pfalz
RÜS	Rheinüberwachungsstation
SH	Schleswig-Holstein
SL	Saarland
SN	Sachsen
ST	Sachsen-Anhalt
TH	Thüringen
UBA	Umweltbundesamt
URL	Uniform Ressource Locator (Adresse einer Website)
WRRL	Wasserrahmenrichtlinie

Zusammenfassung

Obwohl bundesweit verschiedenste Monitoringprogramme existieren, fehlt es an einer zentralen Sammlung und Veröffentlichung von Biozidmonitoringdaten. Dafür und um diese Daten öffentlich zugänglich machen zu können, hat das UBA die Datenbank „Biozide in der Umwelt – BiU“¹ erstellt, welche bei ChemInfo², dem Informationssystem Chemikalien des Bundes und der Länder, angesiedelt ist.

Ziele des Vorhabens war es, geeignete Datenquellen zu identifizieren und die Voraussetzungen für eine automatisierbare Erweiterung der Datenbank „Biozide in der Umwelt“ zu schaffen, damit Biozidmonitoringdaten aus dem deutschsprachigen Raum in Zukunft regelmäßig aus verschiedenen externen Datenquellen in die Datenbank „Biozide in der Umwelt“ integriert werden können.

Es wurde in folgenden Schritten vorgegangen:

1. Recherche nach Institutionen und Datenquellen
2. Prüfung identifizierter Datenquellen auf Einschlusskriterien
3. Abgleich der Stofflisten identifizierter Datenquellen mit der vom UBA vorgegebenen Liste von bioziden Substanzen und Transformationsprodukten
4. Export der Biozidmonitoringdaten aus den identifizierten Datenquellen
5. Dokumentation von Auswahl und Export relevanter Biozidmonitoringdaten in den identifizierten Datenquellen
6. Erstellung von Mapping-Tabellen zur Überführung der Rohdaten aus den identifizierten Datenquellen in die Datenbank „Biozide in der Umwelt“
7. Standardisierung der exportierten Daten und Zusammenführung in der Hilfsdatenbank
8. Prüfung der standardisierten Daten auf Dubletten und Kennzeichnung

Die Recherche nach geeigneten Datenquellen erfolgte über (1) die Identifikation von Institutionen, die potenziell mit dem Umweltmonitoring von Bioziden befasst sind, und (2) die anschließende Recherche nach öffentlich zugänglichen Datenbanken auf den Webseiten dieser Institutionen. Die identifizierten Datenquellen wurden sukzessiv in vier Schritten auf ihre Eignung als Datenlieferanten für die Datenbank „Biozide in der Umwelt“ geprüft. Das Vorhandensein von Umweltmessdaten, insbesondere zu relevanten bioziden Substanzen und Transformationsprodukten wurde je identifizierter Datenquelle und Kompartiment dokumentiert. Für alle identifizierten Datenquellen wurden Umweltmessdaten zu relevanten bioziden Substanzen und Transformationsprodukten identifiziert, exportiert und lokal abgelegt. Dabei wurde die Identifizierung – wenn möglich – auf den Zeitraum 2000 bis 2024 beschränkt. Das Vorgehen zu Auswahl und Export relevanter Biozidmonitoringdaten wurde je Datenquelle und Kompartiment unter Nutzung des KI-Tools Scribe© aufgezeichnet und als Anleitung für den Datenexport im pdf-Format abgelegt. Um die Biozidmonitoringdaten aus den identifizierten Datenquellen in die Datenbank „Biozide in der Umwelt“ überführen zu können, musste eine Zuordnung der Felder der Datenquellen zu den Feldern der Datenbank „Biozide in der Umwelt“ erfolgen. Dies erfolgte über Mapping-Tabellen je Datenquelle. Die Rohdaten jeder identifizierten Datenquelle wurden in ein standardisiertes Format (xlsx, csv) überführt. Anschließend wurden die mit BiU gemappten Felder der standardisierten Daten aller Datenquellen zu einer übergreifenden Tabelle (Hilfsdatenbank) zusammengeführt und als csv-Datei exportiert.

Zur Identifizierung relevanter bioziden Substanzen und Transformationsprodukte, zur Zuordnung der Felder der Datenquellen zu den Feldern der Datenbank „Biozide in der Umwelt“, zur

¹ <https://recherche.chemikalieninfo.de/biu/stoff>

² <https://www.chemikalieninfo.de/>

Überführung der Rohdaten jeder identifizierten Datenquelle in ein standardisiertes Format und zur Identifizierung potenzieller Dubletten in der zusammengeführten Hilfsdatenbank wurde ein R-Skript entwickelt.

Es konnten 63 Institutionen identifiziert werden, von denen jede 0-6 potenzielle Datenquellen bereithielt, was in der Summe 66 identifizierte Datenquellen zum Umweltmonitoring im deutschsprachigen Raum ergab. Nur acht dieser insgesamt 66 identifizierten Datenquellen erfüllten alle vier Einschlusskriterien.

Insgesamt wurden in den acht eingeschlossenen Datenquellen Messdaten zu 125 bioziden Substanzen und Transformationsprodukten identifiziert. Die Anzahl der insgesamt identifizierten Messwerte beträgt 791.281. 95,5 % der identifizierten Messdaten wurden in Deutschland erhoben, etwa 1,0 % in Österreich und 3,5 % in der Schweiz. Von den insgesamt 791.281 identifizierten Messwerten sind für die Kompartimente Oberflächengewässer (73,2 %) und Grundwasser (24,8 %) die meisten Messdaten vorhanden (Tabelle 6). Für Luft und Klärschlamm hingegen waren in den eingeschlossenen Datenquellen zu keiner einzigen der relevanten CAS-Nummern Daten bereitgestellt.

Summary

Although various monitoring programmes exist throughout Germany, there is no central collection and publication of biocide monitoring data. For this purpose and in order to make this data publicly accessible, the German Environment Agency (UBA) has created the database "Biocides in the Environment - BiU", which is part of the information system ChemInfo.

The aim of the project was to identify suitable data sources and to create the prerequisites for an automatable extension of the "Biocides in the Environment" database so that biocide monitoring data from German-speaking countries can be regularly integrated from various external data sources into the "Biocides in the Environment" database in future.

The following steps were taken:

1. search for institutions and data sources
2. checking identified data sources for inclusion criteria
3. comparison of the substance lists of identified data sources with the list of biocidal substances and transformation products specified by the UBA
4. export of biocide monitoring data from the identified data sources
5. documentation of the selection and export of relevant biocide monitoring data in the identified data sources
6. creation of mapping tables to transfer the raw data from the identified data sources to the "Biocides in the environment" database
7. standardisation of the exported data and consolidation in the auxiliary database
8. checking the standardised data for duplicates and labelling.

The search for suitable data sources was conducted by (1) identifying institutions that are potentially involved in the environmental monitoring of biocides and (2) subsequently searching for publicly accessible data sources on the websites of these institutions. The identified data sources were successively checked in four steps for their suitability as data providers for the "Biocides in the environment" database. The availability of environmental measurement data, in particular on relevant biocidal substances and transformation products, was documented for each identified data source and compartment. Environmental measurement data on relevant biocidal substances and transformation products were identified, exported and stored locally for all identified data sources. Where possible, identification was limited to the period 2000 to 2024. The procedure for selecting and exporting relevant biocide monitoring data was recorded for each data source and compartment using the AI tool Scribe© and stored as instructions for data export in pdf format. In order to be able to transfer the biocide monitoring data from the identified data sources to the "Biocides in the environment" database, the fields in the data sources had to be mapped to the fields in the "Biocides in the environment" database. This was done using mapping tables for each data source. The raw data of each identified data source was converted into a standardised format (xlsx, csv). The fields of the standardised data of all data sources mapped with BiU were then merged into a comprehensive table (auxiliary database) and exported as a csv file.

An R script was developed to identify relevant biocidal substances and transformation products, to assign the fields of the data sources to the fields of the "Biocides in the environment" database, to convert the raw data of each identified data sources into a standardised format and to identify potential duplicates in the merged auxiliary database.

63 institutions were identified, each of which had 0-6 potential data sources, resulting in a total of 66 identified data sources for environmental monitoring in German-speaking countries. Only 8 of these 66 identified databases met all four inclusion criteria.

In total, measurement data on 125 biocidal substances and transformation products were identified in the eight included data sources. The total number of identified measured values is 791,281. 95.5 % of the identified measured data were collected in Germany, around 1.0 % in Austria and 3.5 % in Switzerland. Of the total of 791,281 identified measured values, most of the measured data is available for the surface water (73.2 %) and groundwater (24.8 %) compartments (Table 6). For air and sewage sludge, on the other hand, none of the relevant CAS numbers were available in the included data sources.

1 Einführung

„Biozide sind Substanzen oder Produkte, die Schädlinge oder Lästlinge zerstören, abschrecken, unschädlich machen, ihre Wirkung verhindern oder sie auf eine andere Art und Weise bekämpfen sollen.“ (EU 2012). Die breitgefächerte Palette von Anwendungen spiegelt sich in den von der EU definierten vier Hauptgruppen (1) Desinfektionsmittel, (2) Schutzmittel, (3) Schädlingsbekämpfungsmittel und (4) Sonstige Biozid-Produkte wider, welche wiederum in 22 Produktarten unterteilt sind.

Aufgrund des breiten Anwendungsspektrums der Produkte sowie der inhärenten Eigenschaften der Wirkstoffe gelangen Biozide und deren Abbauprodukte über sehr verschiedene Eintragspfade direkt in Umweltkompartimente (UBA, 2017) wie

- ▶ Oberflächengewässer (Ästuar, Brackwasser, See, Teich, Talsperre, Fließgewässer, Meer u.a.),
- ▶ Sedimente,
- ▶ Böden,
- ▶ Grundwasser,
- ▶ Atmosphäre,
- ▶ Biota (aquatische, terrestrische).

Der Eintrag erfolgt auch indirekt über das Abwasser, über Kläranlagen, Regen oder Dung/Gülle.

Dem durch die Verwendung erzielten Nutzen stehen durch diese unerwünschten Einträge in die Umwelt potenzielle Risiken für Mensch und Ökosystem gegenüber, da die biozide Wirkung auch Nicht-Zielorganismen betreffen kann (UBA, 2023, 2024). Zahlreiche Einzelfunde zeigen, dass es Einträge von Bioziden in die Umwelt gibt, wobei auch teilweise besorgniserregende Konzentrationen gefunden werden. Ein Monitoring von Biozid-Vorkommen in der Umwelt ist daher wichtig, um zu beurteilen, wie groß das vorhandene Problem der Belastung der Umwelt mit Bioziden tatsächlich ist, welche Organismen oder Kompartimente besonders betroffen sind und welche zusätzlichen Maßnahmen ergriffen werden müssen, um den Eintrag von Bioziden zu reduzieren.

Entsprechend erfordert ein Biozid-Umweltmonitoring die Beprobung dieser verschiedenen Kompartimente und sollte eine umfassende Biozid-Monitoring-Datenbank Daten aus all diesen Kompartimenten enthalten.

Aktuell erfolgt das Monitoring von Bioziden in Europa insbesondere im Kontext der Umsetzung der Wasserrahmenrichtlinie (WRRL, *Richtlinie 2000/60/EG des Europäischen Parlaments und des Rates vom 23. Oktober 2000 zur Schaffung eines Ordnungsrahmens für Maßnahmen der Gemeinschaft im Bereich der Wasserpolitik*) und der – und hier beim Oberflächengewässermonitoring in Deutschland gemäß Richtlinie über Umweltqualitätsnormen im Bereich der Wasserpolitik (*Richtlinie 2008/105/EG des Europäischen Parlaments und des Rates vom 16. Dezember 2008 über Umweltqualitätsnormen im Bereich der Wasserpolitik und zur Änderung und anschließenden Aufhebung der Richtlinien des Rates 82/176/EWG, 83/513/EWG, 84/156/EWG, 84/491/EWG und 86/280/EWG sowie zur Änderung der Richtlinie 2000/60/EG, 2008*) bzw. Oberflächengewässerverordnung (OGewV, BRD, 2016) - oder der Trinkwasserrichtlinie (*Richtlinie (EU) 2015/1787 der Kommission vom 6. Oktober 2015 zur Änderung der Anhänge II und III der Richtlinie 98/83/EG des Rates über die Qualität von Wasser für den menschlichen Gebrauch, 2015*). In den meisten Fällen wird kein spezifisches Biozidmonitoring durchgeführt, sondern Biozide sind Teil des regelmäßig untersuchten Spektrums. Einige biozide Wirkstoffe sind als prioritäre Stoffe in der

Wasserrahmenrichtlinie oder in nationalen Gesetzen, wie der deutschen Oberflächengewässerverordnung, gelistet (hauptsächlich Stoffe, die auch in Pflanzenschutzmitteln eingesetzt werden).

Weitere Biozidwirkstoffe wurden/werden auch im Grundwasser untersucht. Beim Monitoring von Boden, Sedimenten, Gülle oder Schwebstoffen oder beim Wassermonitoring mit Passivsammlern werden häufig nur einzelne Stoffe unregelmäßig erfasst.

Einzelne Biozide wurden/werden innerhalb von Forschungsprojekten in der Umwelt gemessen.

Entsprechend lassen sich Umweltmonitoringdaten zu Bioziden vorwiegend bei Initiativen und Behörden sowie in Datenbanken zur Überwachung von Chemikalien in der Umwelt allgemein finden. In der Vergangenheit wurden bereits Publikationen zum Eintrag von Bioziden in die Umwelt veröffentlicht, z. B. von Kahle und Nöh (2009), Gartiser, Luskow und Groß (2012), und Fraunhofer IME (2012), UBA (2017).

Das UBA hat im Rahmen eines vorangegangenen Projekts „Integration von Biozidmonitoringdaten aus Literaturquellen in eine Datenbank“ (UBA-FB 172 962) eine Datenbank erarbeiten lassen und verfügbare Umweltkonzentrationen von innerhalb Europas erfassten Bioziden aus Publikationen, Berichten und externen Datenquellen recherchiert und implementiert (Graumnitz, Stoll, Jungmann & Rybicki, 2023). Geprüft wurden Daten aus 25 Berichten (acht davon veröffentlicht durch das Umweltbundesamt), 320 Publikationen und zwei externen Datenbanken (NORMAN EMPODAT Database-Chemical Occurrence Data und Datensatz der Rheinüberwachungsstation). Aus 192 Publikationen und Berichten konnten 32.281 Umweltkonzentrationen von 117 Bioziden entnommen und manuell oder halbautomatisch eingepflegt werden. Zusätzlich wurden 4.000.219 Datensätze mit Umweltkonzentrationen von Bioziden aus den zwei externen Datenbanken für die Integration in die Biozid-Datenbank aufgearbeitet. Der erstellte Datensatz enthält somit insgesamt 4.032.500 Daten von 119 Bioziden und deren Transformationsprodukten, die in 31 Ländern des europäischen Kontinents, vor allem aus Frankreich, den Niederlanden, Deutschland und der Schweiz für verschiedene Umweltmatrizes erhoben wurden. Der Anteil der recherchierten Daten aus Deutschland bzw. dem deutschsprachigen Raum ist jedoch deutlich unterrepräsentiert.

Obwohl bundesweit verschiedenste Monitoringprogramme existieren, fehlt es an einer zentralen Sammlung und Veröffentlichung von Biozidmonitoringdaten. Dafür und um diese Daten zu öffentlich zugänglich machen zu können, hat das UBA die Datenbank „Biozide in der Umwelt – BiU“³ erstellt, welche bei ChemInfo⁴, dem Informationssystem Chemikalien des Bundes und der Länder, angesiedelt ist.

³ <https://recherche.chemikalieninfo.de/biu/stoff>

⁴ <https://www.chemikalieninfo.de/>

2 Ziele des Projektes

Zur Erstellung eines gesamtdeutschen/ den deutschsprachigen Raum umfassenden aktuellen Bildes der Biozidbelastung in der Umwelt war es nötig, Daten zusammenzutragen. Diese sollen in der Datenbank „Biozide in der Umwelt“ der Öffentlichkeit zur Verfügung gestellt werden.

Ziele des Vorhabens war es daher, geeignete Datenquellen zu identifizieren und die Voraussetzungen für eine automatisierbare Erweiterung der Datenbank „Biozide in der Umwelt“ zu schaffen, damit Biozidmonitoringdaten aus dem deutschsprachigen Raum in Zukunft regelmäßig aus verschiedenen externen Datenquellen in die Datenbank „Biozide in der Umwelt“ integriert werden können.

Im Einzelnen umfasste das Projekt:

- ▶ die Recherche und Identifikation geeigneter Datenquellen, welche Umweltmonitoringdaten von bioziden Wirkstoffen und ausgewählten Transformationsprodukten aus dem deutschsprachigen Raum enthalten, frei zugänglich sind und regelmäßig aktualisiert werden,
- ▶ die Erstellung einer Hilfsdatenbank zur Haltung der identifizierten Umweltmonitoringdaten von bioziden Wirkstoffen bzw. die Erstellung einer aktuellen Datensammlung aus den identifizierten Datenquellen in Form einer csv- oder Exceldatei,
- ▶ die Bereitstellung und Anwendung von Tools (Skripte bzw. Hilfsmittel) zur Automatisierung der Aufbereitung von Monitoringdaten und ihrer Integration in die Hilfsdatenbank. Dies umfasst Tools zum Datenmapping, zur Datenmigration und zum Dublettencheck.

3 Methodik

Es wurde in folgenden Schritten vorgegangen:

1. Recherche nach Institutionen und Datenquellen
2. Prüfung identifizierter Datenquellen auf Einschlusskriterien
3. Abgleich der Stofflisten identifizierter Datenquellen mit der vom UBA vorgegebenen Liste von bioziden Substanzen und Transformationsprodukten
4. Export der Biozidmonitoringdaten aus den identifizierten Datenbanken
5. Dokumentation von Auswahl und Export relevanter Biozidmonitoringdaten in den identifizierten Datenquellen
6. Erstellung von Mapping-Tabellen zur Überführung der Rohdaten aus den identifizierten Datenquellen in die Datenbank „Biozide in der Umwelt“
7. Standardisierung der exportierten Daten und Zusammenführung in der Hilfsdatenbank
8. Prüfung der standardisierten Daten auf Dubletten und Kennzeichnung

3.1 Recherche nach Institutionen und Datenquellen

Die Recherche nach geeigneten Datenquellen erfolgte über (1) die Identifikation von Institutionen, die potenziell mit dem Umweltmonitoring von Bioziden befasst sind, und (2) die anschließende Recherche nach öffentlich zugänglichen Datenquellen auf den Webseiten dieser Institutionen.

Die Institutionen wurden über eine Internetrecherche bzw. die Sichtung relevanter Literaturquellen identifiziert. Als Literaturquellen dienten vor allem Berichte vorheriger Projekte, in denen Institutionen des Umweltmonitorings identifiziert und auch befragt wurden:

- ▶ Vorbereitung eines Monitoring-Konzepts für Biozide in der Umwelt. Bericht zu UBA Projekt FKZ 360 04 036 (Fraunhofer IME, 2012)
- ▶ Integration von Biozidmonitoringdaten aus Literaturquellen in eine Datenbank. Bericht zu UBA Projektnummer 172962, UBA-Texte 134 (Graumnitz et al., 2023)
- ▶ Gutachten zur systematischen Auswertung von Monitoring-Messdaten zu Bioziden in Oberflächengewässern und Grundwasser. Bericht zu UBA Projekt (unveröffentlicht. Müller, Kranl & Sundermann, 2021)

Die Institutionen wurden in einer Tabelle gelistet und einer der Kategorien: Landesamt, Bundesbehörde, Europäische Behörde, Forschungseinrichtung, Bund-Länder-Arbeitsgemeinschaft Wasser (LAWA) oder Verband zugeordnet.

Anschließend wurden die Internetseiten der Institutionen nach öffentlich zugänglichen Datenquellen, Daten- und Geoportalen durchsucht.

Die identifizierten Datenquellen wurden in einer Tabelle unter Angabe von Name, Internetadresse, Region, Betreiber und der Angabe der Umweltkompartimente, zu denen die Datenquelle Bioziddaten enthält, gelistet.

3.2 Prüfung identifizierter Datenquellen auf Einschlusskriterien

Die identifizierten Datenquellen wurden sukzessiv (d.h. bei Nichterfüllung eines Kriteriums wurden nachfolgende Kriterien nicht mehr betrachtet) in vier Schritten auf ihre Eignung als Datenlieferanten für die Datenbank „Biozide in der Umwelt“ geprüft:

1. Die Stofflisten der Datenbank enthalten Biozide, d.h. es ist zu erwarten, dass die Datenbank auch Messdaten zu Bioziden in der Umwelt beinhaltet (mindestens eine der 282 relevanten CAS-Nummern wurde in den Stofflisten von mindestens einem Kompartiment gefunden). Dazu wurden die in den Datenquellen hinterlegten Stofflisten exportiert und mit den 282 für das UBA relevanten Stoffen abgeglichen.
2. Der Aufwand zum Export der Messdaten zu Bioziden in der Umwelt ist vertretbar (das ist nicht der Fall, wenn Messdaten z.B. nur für jeweils einzelne Messstationen bzw. Messparameter exportiert werden können). Dazu wurden die Exportmöglichkeiten identifiziert und ihr Handling geprüft.
3. Die Daten sind ohne Einschränkungen oder Bedingungen für die Veröffentlichung in der Datenbank „Biozide in der Umwelt“ nutzbar (ggf. unter Angabe der Quelle). Dazu wurden die veröffentlichten Nutzungsbedingungen geprüft bzw. die Datenbankbetreibenden per E-Mail kontaktiert.
4. Ggf. wurden nachfolgend weitere Sachverhalte festgestellt, die zum Ausschluss der Datenbank führten.

Alle Prüfungen wurden dokumentiert:

1. Durch Ablage der Stofflisten je Datenbank und je Kompartiment.
2. Durch Aufzeichnung der Schritte bis zum Export von Messdaten je Datenbank und je Kompartiment (unter Nutzung des KI-Tools Scribe⁵)
3. Durch Ablage der Nutzungsbedingungen je Datenbank.

3.3 Abgleich der Stofflisten identifizierter Datenquellen mit der vom UBA vorgegebenen Liste von bioziden Substanzen und Transformationsprodukten

Das UBA hat für dieses Projekt eine Liste mit 282 relevanten bioziden Wirkstoffen bereitgestellt, einschließlich 93 Transformationsprodukten. Diese Liste wurde im Vorgängerprojekt unter Berücksichtigung der als Biozid bei der European Chemicals Agency (ECHA, 2023) gelisteten Wirkstoffe und Berücksichtigung weiterer relevanter Transformationsprodukte erstellt.

Die Prüfung jeder Datenbank und jedes Umweltkompartiments konzentrierte sich darauf, festzustellen, welche der vom UBA als relevant klassifizierten Substanzen vorhanden sind, wobei der Abgleich einzig auf der Basis von CAS-Nummern erfolgte. In Situationen, wo CAS-Nummern in den geprüften Datenquellen fehlten, wurde, wo möglich, eine systematische Zuordnung zu den gelisteten Substanznamen vorgenommen, um eine einheitliche Überprüfung sicherzustellen. Dies geschah anhand einer CAS-Mapping-Tabelle, die zusammengestellt wurde aus den folgenden Quellen:

- in Vorgängerprojekten aufgeführte Biozide und deren CAS-Nummern (Fraunhofer IME, 2012; Graumnitz et al., 2023; Müller et al., 2021),
- Behördenlisten
 - BAuA - Genehmigte Wirkstoffe⁶
 - ECHA Liste nach Artikel 95 Biozidverordnung (EU) Nr. 528/2012⁷

⁵ <https://scribehov.com/scribe-ai>

⁶ <https://www.reach-clp-biozid-helpdesk.de/DE/Biozide/Wirkstoffe/Genehmigte-Wirkstoffe>

⁷ <https://echa.europa.eu/de/information-on-chemicals/active-substance-suppliers>

- Wasserrahmenrichtlinie der EU WRRL (*Richtlinie 2008/105/EG des Europäischen Parlaments und des Rates vom 16. Dezember 2008 über Umweltqualitätsnormen im Bereich der Wasserpolitik und zur Änderung und anschließenden Aufhebung der Richtlinien des Rates 82/176/EWG, 83/513/EWG, 84/156/EWG, 84/491/EWG und 86/280/EWG sowie zur Änderung der Richtlinie 2000/60/EG, 2008*)
- Oberflächengewässer-Verordnung OGewV (BRD, 2016)
- NW Stoffliste⁸
- Umweltdatenbanken
 - NORMAN EMPODAT Database⁹
 - iDA¹⁰
 - ChemInfo¹¹.

Die Mapping-Tabelle enthält demnach pro CAS-Nr. alle verschiedenen Namen/Bezeichnungen aus all den zugrundeliegenden Quellen.

Das Vorhandensein von Umweltmessdaten, insbesondere zu relevanten bioziden Substanzen und Transformationsprodukten wurde je identifizierter Datenbank und Kompartiment dokumentiert:

- D(B+): Umweltmessdaten zu relevanten bioziden Substanzen und Transformationsprodukten vorhanden
- D(B-): Umweltmessdaten vorhanden, aber keine relevanten biozide Substanzen und Transformationsprodukte
- S(B+): Statistiken zu relevanten bioziden Substanzen und Transformationsprodukten vorhanden
- S(B-): Statistiken zu Umweltmessdaten vorhanden, aber keine relevanten biozide Substanzen und Transformationsprodukte
- K(B+): Karten zu relevanten bioziden Substanzen und Transformationsprodukten vorhanden
- K(B-): Karten zu Umweltmessdaten vorhanden, aber keine relevanten biozide Substanzen und Transformationsprodukte
- -: keine Umweltmessdaten, Statistiken oder Karten

Aus den Befragungen in den Vorgängerprojekten (s.o.) wurde außerdem abgeleitet, zu wie vielen und welchen der 282 relevanten Substanzen ein Monitoring durch die Institutionen durchgeführt wird/wurde.

⁸ https://www.opengeodata.nrw.de/produkte/umwelt_klima/wasser/stoffliste/

⁹ <https://www.norman-network.com/nds/empodat/>

¹⁰ <https://www.umwelt.sachsen.de/umwelt/infosysteme/ida/login?loginStatus=loggedOut>

¹¹ <https://www.chemikalieninfo.de/>

3.4 Export der Biozidmonitoringdaten aus den identifizierten Datenquellen

Für alle identifizierten Datenquellen wurden Umweltmessdaten zu relevanten bioziden Substanzen und Transformationsprodukten identifiziert, exportiert und lokal abgelegt. Dabei wurde die Identifizierung – wenn möglich – auf den Zeitraum 2000 bis 2024 beschränkt.

Wenn die Datenbank über die Suchmaske keine Selektion von Substanzen zuließ, wurden sämtliche Umweltmessdaten exportiert, um die Daten zu relevanten bioziden Substanzen und Transformationsprodukten später zu identifizieren.

3.5 Dokumentation von Auswahl und Export relevanter Biozidmonitoringdaten in den identifizierten Datenquellen

Das Vorgehen zu Auswahl und Export relevanter Biozidmonitoringdaten wurde je Datenbank und Kompartiment unter Nutzung des KI-Tools Scribe© aufgezeichnet und als Anleitung für den Datenexport im pdf-Format abgelegt.

3.6 Erstellung von Mapping-Tabellen zur Überführung der Rohdaten aus den identifizierten Datenquellen in die Datenbank „Biozide in der Umwelt“

Die Datenbank „Biozide in der Umwelt“ enthält vordefinierte Felder („Parameter“), u.a. zu den Stoffen und zum Umweltverhalten. Um die Biozidmonitoringdaten aus den identifizierten Datenquellen in die Datenbank „Biozide in der Umwelt“ überführen zu können, musste eine Zuordnung der Felder der Datenquellen zu den Feldern der Datenbank „Biozide in der Umwelt“ erfolgen. Dies erfolgte über Mapping-Tabellen je Datenbank.

In den Mapping-Tabellen wurden zwei Arten von Feldern definiert:

- in den identifizierten Datenquellen vorhandene Felder, die in Felder der Datenbank „Biozide in der Umwelt“ überführt werden konnten (insgesamt 21 Felder zzgl. Ergänzungen zum Messwert, siehe Tabelle 1),
- in den identifizierten Datenquellen vorhandene Felder, die nicht in Felder der Datenbank „Biozide in der Umwelt“ überführt werden konnten.

Tabelle 1: Mapping Mastertabelle zur Überführung der Felder der identifizierten Datenquellen in die Felder der Datenbank „Biozide in der Umwelt“ (Zieldatei)

Bezeichnung in BiU	Name in BiU	Beschreibung
CAS-RN	CASRN.CASRN	CAS-Nummer des jeweiligen Stoffes
Name	RNAME.RNAME	Trivialname des jeweiligen Stoffes
Matrix	MONIXXX.KMP*	Kompartiment der Probenahme
Land der Probenahme	MONIXXX.LAND	Land der Probenahme
Region der Probenahme	MONIXXX.REG	Region der Probenahme (Bundesland, Meer)
Ort der Probenahme	MONIXXX.ORT	Ort der Probenahme
Koordinaten der Probenahme	MONIXXX.KOO	Geokoordinaten der Probenahmestelle

Bezeichnung in BiU	Name in BiU	Beschreibung
Zeitraum der Probenahme	MONIXXX.ZP	Jahr(e) der Probenahme
Präfix		Vorzeichen/Anmerkung zu Messwert
Konzentration	MONIXXX.KON	Messwert
Einheit		Einheit des Messwerts
Anzahl der Proben	MONIXXX.ANZ	Anzahl der Proben
Methodenbeschreibung	MONIXXX.BM	Beschreibung der Methoden Probenahme, Analytik
Nachweisgrenze	MONIXXX.LOD	Nachweisgrenze (Limit of Detection)
Bestimmungsgrenze	MONIXXX.LOQ	Bestimmungsgrenze (Limit of Quantification)
Test-ID	MONIXXX.ID	ID der Probe
Organismus/ Spezies	MONIBIO.SPEZIES	Spezies, an der die Probenahme erfolgte
Zitat Titel	ZIT.TI	Name der Quell- Datenbank
Zitat Autoren	ZIT.AU	Betreiber der Quell-Datenbank
Zitat Jahr	ZIT.JAHR	Jahr der letzten Änderung der Quell-Datenbank
Zitat Dokumententyp	ZIT.DT	Dokumententyp der Quell-Datenbank
Zitat URL	ZIT.URL	URL der Quell-Datenbank
Glaubwürdigkeit der Quelle	MONIXXX.CRED	Glaubwürdigkeit der Datenbank

* XXX = WAS/ FES/ BIO je nachdem, ob die Probenahme im wässrigen, festen Milieu oder in biotischen Proben erfolgte
 Quelle: Eigene Daten (BioMath)

3.7 Standardisierung der exportierten Daten und Zusammenführung in der Hilfsdatenbank

Die Rohdaten jeder identifizierten Datenbank wurden in ein standardisiertes Format (xlsx, csv) überführt mit den Feldern in Spalten und den Messdaten in den Zeilen. Die ersten 23 Spalten enthalten die überführbaren Felder in immer identischer Reihenfolge (Tabelle 1).

Dabei wurde angestrebt, die in die Datenbank „Biozide in der Umwelt“ zu überführenden Daten möglichst zu komplettieren, d.h. wenn in einer identifizierten Datenbank Felder nicht vorhanden, die Informationen aber verfügbar waren (wie z.B. zu Land, Bundesland, CAS-Nummer), wurden diese Felder über Hilfsvariablen ergänzt.

Zusätzlich wurde für jede Datenbank generiert

- ▶ ein Feld „Glaubwürdigkeit der Quelle“, in dem eine Bewertung für die in die Datenbank aufgenommenen Datenquellen („Credibility“) in die Kategorien „good“, „questionable“ und „unknown“ nach dem im Vorgängerprojekt entwickelten Entscheidungsbaum (Graumnitz et al., 2023) vorgenommen wurde,
- ▶ ein Feld „datezeitpunkt“, das das Datum und die Uhrzeit der letzten Änderung der Quelldatei enthält, basierend auf ihren Metadaten.

Neben den 23 Spalten mit überführbaren Feldern wurden alle weiteren in den Quelldateien enthaltenen Spalten beibehalten. Diese zusätzlichen Spalten, die als nicht überführbaren Felder betrachtet werden, wurden in ihrer ursprünglichen Reihenfolge an die Spalten mit den überführbaren Feldern angehängt.

Anschließend wurden (nur) die 23 überführbaren Felder der standardisierten Daten aller Quelldatenbanken zu einer übergreifenden Tabelle (Hilfsdatenbank) zusammengeführt und als csv-Datei exportiert.

3.8 Prüfung der standardisierten Daten auf Dubletten und Kennzeichnung

Bei der Zusammenführung der verschiedenen Quelldatenbanken besteht die Möglichkeit von Datenredundanzen. Identische Messwerte könnten in mehreren Quellen vorkommen, was zu potenziellen Dubletten in der konsolidierten Hilfsdatenbank führen kann.

Folgende Überlegungen stellten die Basis für Dublettenprüfungen in den Daten dar:

- ▶ Abgleich Einzugsbereiche der Datenquellen (Theoretisch kann es nur Dubletten in verschiedenen Datenquellen geben, wenn die abgebildeten Regionen sich überschneiden. Mit dieser Vorüberlegung werden Dublettenprüfungen auf ein Mindestmaß reduziert.)
- ▶ Abgleich Stationen zwischen den Datenquellen (Es kann Dubletten geben, wenn Messwerte von der gleichen Messstation in verschiedenen Datenquellen enthalten sind. Ein Abgleich der Messstationen ist nur eingeschränkt möglich, da die Schreibweisen der Namen und die Kennzeichen zwischen den Messstationen abweichen.)
- ▶ Abgleich der GIS-Koordinaten (Messdaten mit den gleichen GIS-Koordinaten können Dubletten sein, auch wenn die Namen der Messstationen abweichen. Ein Abgleich der GIS-Koordinaten ist nur zielführend, wenn GIS-Koordinaten in gleichen Systemen und in allen Datenquellen angegeben sind.)
- ▶ Prüfung Quellenangaben in Datenquellen (Es kann Dubletten geben, wenn Datenquellen andere Quellen zitieren.)

Zur Identifizierung potenzieller Dubletten in der zusammengeführten Hilfsdatenbank (siehe 3.7) wurde ein R-Skript entwickelt. Dieses Skript führt folgende Schritte durch: (i) Import der zusammengeführten Hilfsdatenbank, (ii) Kennzeichnung der identifizierten Dubletten mittels einer neuen Spalte 'dup_id' und (iii) Export der zusammengeführten Hilfsdatenbank samt zusätzlicher Spalte 'dup_id'.

Wurden Datenzeilen als potenzielle Dubletten identifiziert, so erhalten sie eine dup_id > 0. Datenzeilen werden als potenzielle Dubletten identifiziert, wenn alle der folgenden Bedingungen erfüllt sind:

- ▶ Identische CAS-Nummern (Spalte 'cas')
- ▶ Identische Trivialnamen (Spalte 'name')
- ▶ Identisches Messjahr (Spalte 'jahr_wert')
- ▶ Identisches Kompartiment (vereinheitlichte Spalte 'kompartimente')

- ▶ Identischer Stationsname¹² (Spalte 'station', aber konvertiert zu Kleinbuchstaben)
- ▶ Mindestens zwei verschiedene Quelldatenbanken (Spalte 'titel')
- ▶ Keine Fehlwerte in den oben genannten Spalten

Potenzielle Dubletten – ob zwei oder mehr Datenzeilen – erhalten eine gemeinsame dup_id > 0. Alle anderen Datenzeilen werden mit dup_id = 0 gekennzeichnet.

¹² Hinweis: Der Stationsname "vor Mündung" wurde von dieser Prüfung ausgenommen, da er mittels dieses Vorgehens zu potenziellen Dubletten führt, aber nicht als eindeutiger Identifikator für eine spezifische Station betrachtet wird.

4 Ergebnisse

4.1 Institutionen des Umweltmonitorings im deutschsprachigen Raum

Eine Übersicht aller geprüften Institutionen ist in Tabelle 2 dargestellt. Es konnten 63 Institutionen identifiziert werden, von denen jede 0-6 potenzielle Datenquellen bereithielt, was in der Summe 66 einzelne Datenquellen (Tabelle 3) zur Überprüfung ergab.

Tabelle 2: Übersicht aller geprüften Institutionen

ID	Art	Region	Name	Abkürzung	Anzahl Datenquellen
44	Bundesbehörde	DE	Umweltbundesamt	UBA	3
45	Bundesbehörde	DE	Bundesanstalt für Materialforschung und -prüfung	BAM	0
66	Bundesbehörde	DE	Wasserstraßen- und Schifffahrtsverwaltung des Bundes	WSV	1
75	Bundesbehörde	DE	Bundesanstalt für Gewässerkunde	BfG	6
48	Bundesbehörde	AT	Umweltbundesamt GmbH Österreich	UBAAT	0
52	Bundesbehörde	CH	Bundesamt für Umwelt Schweiz	BAFU	1
62	Europäische Behörde	EU	Europäische Umweltagentur	EEA	2
71	Europäische Behörde	EU	Eurostat	Eurostat	0
46	Forschungseinrichtung	DE	Fraunhofer-Institut für Molekularbiologie und Angewandte Ökologie	IME	0
47	Forschungseinrichtung	DE	Helmholtz Zentrum für Umweltforschung	UFZ	0
51	Forschungseinrichtung	DE	RWTH Aachen	RWTH	0
31	Landesamt	BB	Landesamt für Umwelt Brandenburg	LfU BB	3
30	Landesamt	BE	Senatsverwaltung für Mobilität, Verkehr, Klimaschutz und Umwelt	UVK	1
28	Landesamt	BW	Landesanstalt für Umwelt Baden-Württemberg	LUBW	4
29	Landesamt	BY	Bayerisches Landesamt für Umwelt	LfU BY	2
32	Landesamt	HB	Die Senatorin für Umwelt, Klima und Wissenschaft der Freien Hansestadt Bremen	FBU HB	1
34	Landesamt	HE	Hessisches Landesamt für Naturschutz, Umwelt und Geologie	HLNUG	2
33	Landesamt	HH	Institut für Hygiene und Umwelt	HU	2

ID	Art	Region	Name	Abkürzung	Anzahl Datenquellen
35	Landesamt	MV	Landesamt für Umwelt, Naturschutz und Geologie Mecklenburg-Vorpommern	LUNG	1
36	Landesamt	NI	Niedersächsischer Landesbetrieb für Wasserwirtschaft, Küsten- und Naturschutz	NLWKN	3
37	Landesamt	NW	Landesamt für Natur, Umwelt und Verbraucherschutz Nordrhein-Westfalen	LANUV	3
50	Landesamt	NW	Landesbetrieb Information und Technik Nordrhein-Westfalen	IT.NRW	1
38	Landesamt	RP	Landesamt für Umwelt Rheinland-Pfalz	LfU RP	2
42	Landesamt	SH	Landesamt für Umwelt des Landes Schleswig-Holstein	LfU SH	2
39	Landesamt	SL	Landesamt für Umwelt- und Arbeitsschutz	LUA	2
76	Landesamt	SL	Landesamt für Vermessung, Geoinformation und Landentwicklung	LVLG	1
40	Landesamt	SN	Sächsisches Landesamt für Umwelt, Landwirtschaft und Geologie	LfULG	1
68	Landesamt	SN	Staatliche Betriebsgemeinschaft für Umwelt und Landwirtschaft	BfUL	1
41	Landesamt	ST	Landesamt für Umweltschutz Sachsen-Anhalt	LAU	2
69	Landesamt	ST	Landesbetrieb für Hochwasserschutz und Wasserwirtschaft ST	LHW	1
43	Landesamt	TH	Thüringer Landesamt für Umwelt, Bergbau und Naturschutz	TLUBN	3
15	LAWA	BB	Ministerium für Landwirtschaft, Umwelt und Klimaschutz des Landes Brandenburg	MLUK BB	0
12	LAWA	BW	Ministerium für Umwelt, Klima und Energiewirtschaft Baden-Württemberg	UM BW	0
13	LAWA	BY	Bayerisches Staatsministerium für Umwelt und Verbraucherschutz	STMUV BY	0
11	LAWA	DE	Bundesministerium für Umwelt, Naturschutz, Bau und Reaktorsicherheit	BMUV	0
73	LAWA	DE	Bund/Länder-Arbeitsgemeinschaft Wasser	LAWA	0
18	LAWA	HE	Hessisches Ministerium für Umwelt, Klimaschutz, Landwirtschaft und Verbraucherschutz	HMUKLV	0

ID	Art	Region	Name	Abkürzung	Anzahl Datenquellen
17	LAWA	HH	Freie und Hansestadt Hamburg Behörde für Umwelt, Klima, Energie und Agrarwirtschaft	BUKEA HH	1
19	LAWA	MV	Ministerium für Klimaschutz, Landwirtschaft, ländliche Räume und Umwelt Mecklenburg-Vorpommern	MKLU MV	0
20	LAWA	NI	Niedersächsisches Ministerium für Umwelt, Energie und Klimaschutz	MUEK NS	0
21	LAWA	NW	Ministerium für Umwelt, Naturschutz und Verkehr des Landes Nordrhein-Westfalen	MUNV NW	0
22	LAWA	RP	Ministerium für Klimaschutz, Umwelt, Energie und Mobilität Rheinland-Pfalz	MKUEM RP	1
26	LAWA	SH	Ministerium für Energiewende, Klimaschutz, Umwelt und Natur des Landes Schleswig-Holstein	MEKUN SH	0
23	LAWA	SL	Ministerium für Umwelt, Klima, Mobilität, Agrar und Verbraucherschutz des Saarlandes	MUKMAV SL	0
24	LAWA	SN	Sächsisches Staatsministerium für Energie, Klimaschutz, Umwelt und Landwirtschaft	SMEKUL	0
25	LAWA	ST	Ministerium für Wissenschaft, Energie, Klimaschutz und Umwelt des Landes Sachsen-Anhalt	MWU ST	0
27	LAWA	TH	Thüringer Ministerium für Umwelt, Energie und Naturschutz	MUEN TH	0
61	Verband	BB, HB, HH, HE, MV, SL, SN, ST	Metadatenverbund	Metaver	1
49	Verband	BW	Zweckverband Landeswasserversorgung	LW	1
57	Verband	DE	Flussgebietseinheit Ems	FGE Ems	0
58	Verband	DE	Flussgebietsgemeinschaft Weser	FGG Weser	1
67	Verband	DE	Flussgebietsgemeinschaft Elbe	FGG Elbe	1
65	Verband	DE, CH	Flussgebietsgemeinschaft Rhein	FGG Rhein	1
70	Verband	DE	DeBiMo - Deutsches Bienenmonitoring	DeBiMo	0
59	Verband	DE, CH	Rheinüberwachungsstation	RÜW	1

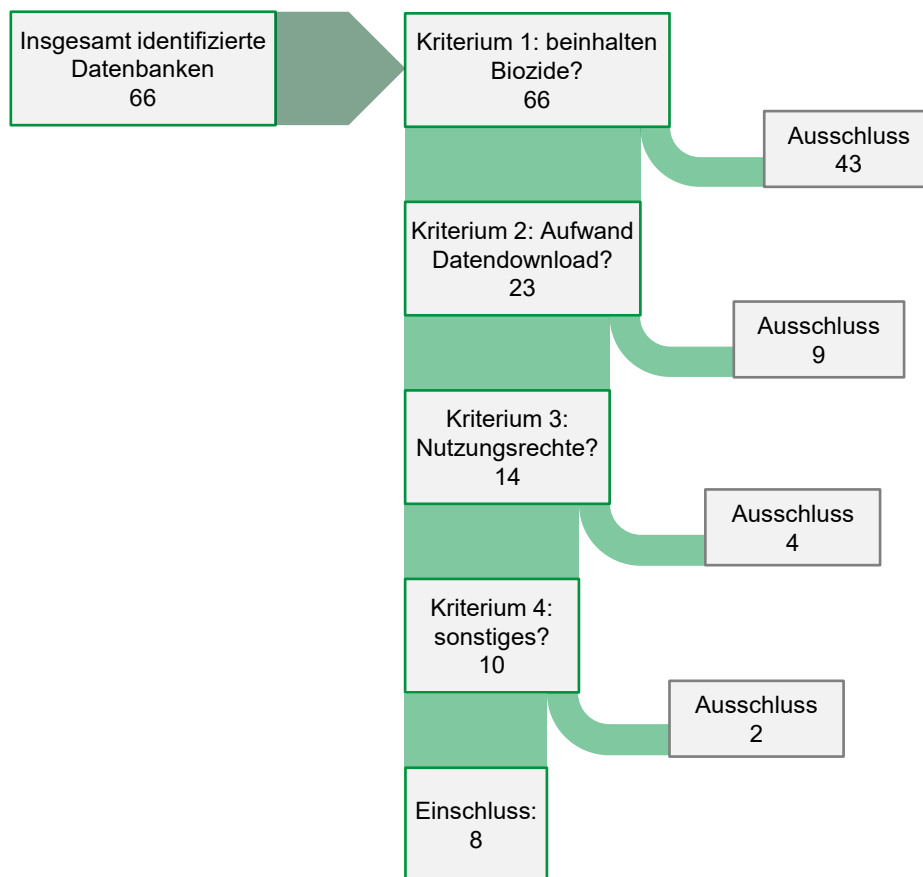
ID	Art	Region	Name	Abkürzung	Anzahl Datenquellen
53	Verband	DE, CH, FR, NL, LU	Internationale Kommission zum Schutz des Rheins	IKSR	1
64	Verband	DE, FR, LU	Internationale Kommission zum Schutz von Mosel und Saar	IKSMS	1
56	Verband	DE, PL, CZ	Internationale Kommission zum Schutz der Oder	IKSO	1
54	Verband	CZ, DE	Internationale Kommission zum Schutz der Elbe	IKSE	1
55	Verband	19 Länder in EU (inkl. DE, AT, CH)	Internationale Kommission zum Schutz der Donau	IKSD	2
60	Verband	EU	NORMAN network	NORMAN	1
72	Verband	EU	European Environment Information and Observation Network	Eionet	0
63	Verband	Welt	UN Environmental Programme	UN EP	1

Quelle: eigene Daten (BioMath)

4.2 Veröffentlichung von Biozidmonitoringdaten in Datenquellen

Die insgesamt 66 identifizierten Datenquellen zum Umweltmonitoring im deutschsprachigen Raum wurden nach den unter Abschnitt 3.2 dargestellten Kriterien auf ihre Eignung als Datenlieferanten für die Datenbank „Biozide in der Umwelt“ geprüft. Nach dem ersten Kriterium wurden 23, nach dem zweiten Kriterium 14 und nach dem dritten Kriterium 10 Datenbanken als konform eingestuft (Abbildung 1). Zwei dieser 10 Datenquellen wurde anschließend noch ausgeschlossen (Kriterium 4: Sonstiges), da in einer Datenbank die Ergebnisse der Analyse von Trinkwasser, welches fast vollständig über Aktivkohlefilter aufbereitet war und deshalb keine Rückschlüsse auf die Rohwasserqualität der Grundwasser- und Oberflächenwasservorkommen zuließ, aufgelistet waren bzw. eine andere Datenbank nach Filterung keine Daten für Deutschland enthielt. Insgesamt wurden 58 Datenquellen als nicht geeignet ausgeschlossen. Eine Übersicht aller 66 identifizierten und geprüften Datenquellen inklusive der Prüfungsergebnisse der vier Kriterien befindet sich in Tabelle 3.

Abbildung 1: Prüfung und Ein-/Ausschluss der identifizierten Datenquellen



Quelle: Eigene Daten (BioMath)

Tabelle 3: Eignung der identifizierten Datenquellen nach Einschlusskriterien

Die Spalten K1, K2, K3 und K4 geben an, ob eine Datenquelle nach den Kriterien 1-4 als konform eingestuft und somit selektiert wurde. Dabei bedeutet ein „+“ Einschluss, während „-“ Ausschluss bedeutet. Ein leerer Eintrag bedeutet, dass das Kriterium gemäß der sukzessiven Prüfung nicht mehr geprüft wurde, da die Datenquelle schon ausgeschlossen war. Abkürzungen der Regionen: siehe Abkürzungsverzeichnis

K1	K2	K3	K4	Einschluss	Datenquelle ID	Datenquelle Name	Datenquelle Region	Institution ID	Datenquelle Webseite
+	+	+	+	ja	102	Rheinüberwachungsstation: Umweltanalyse Wasserphase	DE, CH	59	https://open-data.swiss/de/dataset/?q=Rhein%C3%BCberwachungsstation%3A+Umweltanalyse+Wasserphase&groups=territory&sort=score+desc%2C+metadata_modified+desc
+	+	+	+	ja	103	IKSR Zahlentafeln	DE, CH, FR, NL, LU	53	https://iksr.bafg.de/iksr/
+	+	+	+	ja	107	NORMAN EMPODAT Database	Europa (inkl. DE, AT, CH)	60	https://www.norman-network.com/nds/empodat/
+	+	+	+	ja	109	OpenGeodata.NRW	NW	50	https://www.opengeo-data.nrw.de/produkte/umwelt_klima/wasser/
+	+	+	+	ja	137	Waterbase - Water quality	EU	62	https://www.eea.europa.eu/en/datahub/datahubitem-view/fbf3717c-

K1	K2	K3	K4	Einschluss	Datenquelle ID	Datenquelle Name	Datenquelle Region	Institution ID	Datenquelle Webseite
									cd7b-4785-933a-d0cf510542e1
+	+	+	+	ja	138	Weserdatenbank	DE	58	https://datenbank.fgg-weser.de/weserdatenbank/#/data-groups
+	+	+	+	ja	139	Meeresumweltdatenbank MUDAB	DE	50	https://geoportal.bafg.de/MUDABAnwendung/
+	+	+	+	ja	143	FGG Rhein	DE, CH	65	https://fgg-rhein.bafg.de/dkrr/
+	+	+	-	nein	134	Trinkwasseranalyse Stuttgart	BW	49	https://www.lw-online.de/trinkwasser/qualitaet
+	+	+	-	nein	142	IKSMS Datenexport	DE, FR, LU	64	http://www.iksms.de/servlet/is/20065/
+	+	-	+	nein	101	iDA (interdisziplinäre Daten und Auswertungen)	SN	40	https://luis.sachsen.de/ida.html
+	+	-	+	nein	105	Joint Danube Survey 4 Database	19 Länder in EU (inkl. DE, AT, CH)	55	https://www.icpdr.org/maps-data/databases
+	+	-	+	nein	145	Grundwasser Jahresdatenkatalog	BW	28	http://jdkgw.lubw.baden-wuerttemberg.de/servlet/is/200/
+	+	-	+	nein	156	Datenportal der FGG Elbe	DE	67	https://www.elbe-datenportal.de/FisFggElbe/content/auswertung/UntersuchungsbereichAuswahl_erstStart
+	-			nein	108	ELWAS-WEB	NW	37	https://www.elwas-web.nrw.de/elwas-web/index.xhtml;jsessionid=3875C42549812D5863E6580C35B2635D#
+	-			nein	110	Daten- und Kartendienst der LUBW	BW	28	https://udo.lubw.baden-wuerttemberg.de/public/index.xhtml
+	-			nein	111	Gewässerkundlicher Dienst Bayern	BY	29	https://www.gkd.bayern.de/de/fluesse/chemie/tabellen
+	-			nein	140	GEMStat Data Portal	Welt	63	https://portal.gemstat.org/
+	-			nein	149	Auskunftsplattform Wasser	BB	31	https://apw.brandenburg.de/
+	-			nein	157	Landesdatenbank für wasserwirtschaftliche Daten	NI	36	http://www.wasserdaten.niedersachsen.de/cadenza/
+	-			nein	160	HYGON ALT	NW	37	https://luadb.lids.nrw.de/LUA/hygon/pegel.php
+	-			nein	161	Wasserportal RP - Analysen und Messwerte	RP	38	https://wasserportal.rlp-umwelt.de/servlet/is/1500/
+	-			nein	164	Gewässerkundlicher Landesdienst	ST	69	https://gld.lhw-sachsen-anhalt.de/#

K1	K2	K3	K4	Einschluss	Datenquelle ID	Datenquelle Name	Datenquelle Region	Institution ID	Datenquelle Webseite
-				nein	104	Internationales Messprogramm Elbe	CZ, DE	54	https://www.ikse-mkol.org/themen/gewaesserguete/internationales-messnetz-und-internationales-messprogramm/messprogramme
-				nein	106	IMS-Odra	DE, PL, CZ	56	https://geoportal2.mkoo.pl/client/?applicationId=3690
-				nein	112	Geoportal – Daten und Dienste	BE	30	https://www.berlin.de/sen/sbw/stadtdaten/geoportal/geoportal-daten-und-dienste/
-				nein	113	Landwirtschafts- und Umweltinformationssystem Brandenburg (LUIS-BB)	BB	31	https://www.umweltdaten.brandenburg.de/
-				nein	114	Geoportal der BfG	DE	75	https://geoportal.bafg.de/CSWView/inspire.xhtml
-				nein	115	METAVER Metadatenverbund	BB, HB, HH, HE, MV, SL, SN, ST	61	https://www.metaver.de/startseite
-				nein	116	Webseite Fachbereich Umwelt Bremen	HB	32	https://umwelt.bremen.de/umwelt-1467
-				nein	117	Webseite Umweltuntersuchungen Boden-, Wasser-, Luftqualität	HH	33	https://serviceportal.hamburg.de/HamburgGateway/Service/Entry/WGMN
-				nein	118	Messdatenportal	HE	34	https://www.hlnug.de/messwerte/datenportal
-				nein	119	geoportal.hessen.de	HE	34	https://www.geoportal.hessen.de/
-				nein	120	Informationsplattform Undine	DE	33	https://undine.bafg.de/index.html
-				nein	121	LUNG Webseite	MV	34	https://www.lung.mv-regierung.de/
-				nein	122	NLWKN Webseite	NI	36	https://www.nlwkn.niedersachsen.de/startseite/
-				nein	123	Lfu RP Webseite	RP	38	https://lfu.rlp.de/de/startseite/
-				nein	124	LUA Webseite	SL	39	https://www.saarland.de/muk-mav/DE/home/home_node.html
-				nein	125	LAU Webseite	ST	41	https://lau.sachsen-anhalt.de/landesamt-fuer-umweltschutz-sachsen-anhalt-lau
-				nein	126	Lfu SH Webseite	SH	42	https://www.schleswig-holstein.de/DE/landesregierung/ministerien-behoerden/LFU/LFU_node.html
-				nein	127	TLUBN Webseite	TH	43	https://tlubn.thueringen.de/

K1	K2	K3	K4	Einschluss	Datenquelle ID	Datenquelle Name	Datenquelle Region	Institution ID	Datenquelle Webseite
-				nein	128	Umweltportal Thüringen	TH	43	https://www.umweltportal.thueringen.de/
-				nein	129	Danube River Basin Water Quality Database	19 Länder in EU (inkl. DE, AT, CH)	55	https://wq-db.icpdr.org/
-				nein	130	Auskunftssysteme der Wasserwirtschaft	RP	22	https://mkuem.rlp.de/themen/wasser/wasser-de/digitales-angebot
-				nein	131	UBA Webseite Daten	DE	44	https://www.umweltbundesamt.de/daten
-				nein	132	Umweltprobenbank	DE	44	https://www.umweltprobenbank.de/de
-				nein	133	European Human Bio-monitoring	EU	44	https://www.hbm4eu.eu/
-				nein	135	Open Data Angebot der BfG	DE	75	https://geoportal.bafg.de/CSWView/od.xhtml
-				nein	136	WISE Water Framework Directive	EU	62	https://www.eea.europa.eu/data-and-maps/dashboards/wise-wfd
-				nein	141	GRDC Data Download	Welt	75	https://www.bafg.de/GRDC/EN/02_srvcs/21_tmsrs/210_prtl/prtl_node.html
-				nein	144	Fließgewässerdaten der Online-Messstellen	BW	28	https://www.lubw.baden-wuerttemberg.de/wasser/aktuelle-messwerte#karte
-				nein	146	Grundwasserdatenbank	BW	28	https://www.lubw.baden-wuerttemberg.de/wasser/grundwasserdatenbank
-				nein	147	Hydrologische Daten und Vorhersagen	CH	52	https://www.hydrodaten.admin.ch/de/ueber-das-portal
-				nein	148	LfU Webseite	BB	31	https://lfu.brandenburg.de/lfu/de/aufgaben/wasser/fliessgewaesser-und-seen/gewaesserueberwachung/wasser-guetemessnetz/
-				nein	150	UmweltAtlas Bayern	BY	29	https://www.umweltatlas.bayern.de/mapapps/resources/apps/umweltatlas/index.html?lang=de
-				nein	151	WasserBLiCK Karten WRLl	DE	75	https://geoportal.bafg.de/karten/wfd-maps2022/
-				nein	152	WasserBLiCK WRLl Wasserkörpersteckbriefe	DE	75	https://geoportal.bafg.de/mapapps/resources/apps/WKSB_2021/index.html?lang=de&vm=2D&s=4622333.67897759&r=0&c=563594.9039036152%2C5676998.40659268

K1	K2	K3	K4	Einschluss	Datenquelle ID	Datenquelle Name	Datenquelle Region	Institution ID	Datenquelle Webseite
-				nein	153	Luftüberwachungssystem Sachsen-Anhalt	ST	41	https://www.luesa.sachsen-anhalt.de/luesa-web/
-				nein	154	GeoPortal Hamburg	HH	74	https://geoportal-hamburg.de/geo-online/
-				nein	155	WSV Service Download Zeitreihen	DE	66	https://www.kuestendaten.de/DE/Services/Messreihen_Dateien_Download/Download_Zeitreihen_node.html
-				nein	158	NLWKN Gewässergüte	NI	36	https://www.gewaessergueteonline.nlwkn.niedersachsen.de/Start
-				nein	159	HYGON NEU	NW	37	https://hochwasserportal.nrw/lanuv/webpublic/index.html#/Start
-				nein	162	Umweltportal SH	SH	42	https://umweltportal.schleswig-holstein.de/startseite
-				nein	163	Gewässergüte aktuelle Daten	SN	68	https://www.wasser.sachsen.de/gewaesserguete-messnetz-18251.html
-				nein	165	Kartendienst des LUBN Thüringen	TH	43	https://antares.thueringen.de/cadenza/?jsessionid=F75CEC127090188E68C76E588B84E4EB
-				nein	166	Geoportal Saarland	SL	76	https://geoportal.saarland.de/

Quelle: Eigene Daten (BioMath)

Nur acht der insgesamt 66 identifizierten Datenquellen erfüllten alle vier Einschlusskriterien, wobei doch 23 der 66 Datenquellen Biozidmesswerte enthalten (bzw. relevante Biozide in ihren Stofflisten führen). Allein neun Datenquellen wurden ausgeschlossen, weil der Aufwand zum Export der (Biozid-)Messdaten nicht vertretbar war (da Messdaten nur für jeweils einzelne Messstationen bzw. Messparameter exportiert werden können). Vier Datenbanken mussten ausgeschlossen werden, da die Nutzung der Daten über die Weiterleitung an Dritte untersagt war.

Einen Überblick dazu, für welche Kompartimente Bioziddaten (bzw. Statistiken oder Karten) in den eingeschlossenen, aber auch in den ausgeschlossenen Datenquellen enthalten sind, gibt Tabelle 4.

Tabelle 4: Messwertdaten je Kompartiment aller identifizierten Datenquellen

Abkürzungen: AW = Abwasser, Biota = Bio, Bod = Boden, GW = Grundwasser, KS = Klärschlamm, OW = Oberflächengewässer, Sedi = Sedimente, Schw = Schwebstoffe; "D (B+)" = Daten inkl. Biozide, "S (B+)" = Statistiken inkl. Biozide, "K (B+)" = Karten inkl. Biozide, "D (B-)" = Daten ohne Biozide, "S (B-)" = Statistiken ohne Biozide, "K (B-)" = Karten ohne Biozide, "-" = weder Daten, Statistiken noch Karten

Datenquelle ID	Datenquelle Name	Einschluss	AW	Biota	Bod	GW	KS	Luft	OW	Schw	Sedi
101	iDA SN	nein	-	-	D (B-)	D (B+)	-	-	D (B+)	-	-

Daten- quelle ID	Datenquelle Name	Einschluss	AW	Biota	Bod	GW	KS	Luft	OW	Schw	Sedi
102	Rheinüberwa- chungsstation: Umweltanalyse Wasserphase	ja	-	-	-	-	-	-	D (B+)	D (B+)	-
103	IKSR Zahlenta- feln	ja	-	-	-	-	-	-	D (B+)	D (B-)	-
104	Internationales Messpro- gramm Elbe	nein	-	-	-	-	-	-	-	-	-
105	Joint Danube Survey 4 Data- base	nein	-	D (B-)	-	D (B+)	-	-	D (B+)	-	-
106	IMS-Odra	nein	-	-	-	-	-	-	-	-	-
107	NORMAN EM- PODAT Data- base	ja	D (B+)	D (B+)	D (B+)	D (B+)	-	-	D (B+)	D (B+)	D (B+)
108	ELWAS-WEB NW	nein	-	-	-	D (B+)	-	-	D (B+)	-	-
109	OpenGeo- data.NRW	ja	-	-	-	D (B+)	-	-	D (B+)	-	-
110	Daten- und Kartendienst der LUBW	nein	-	-	-	D (B-)	-	D (B-)	D (B+)	-	-
111	Gewässerkund- licher Dienst Bayern	nein	-	D (B+)	-	D (B+)	-	D (B-)	D (B+)	D (B+)	-
112	Geoportal – Daten und Dienste BE	nein	-	-	-	-	-	D (B-)	-	-	-
113	Landwirt- schafts- und Umweltinfor- mationssystem Brandenburg (LUIS-BB)	nein	-	-	-	-	-	-	D (B-)	-	-
114	Geoportal der BfG	nein	-	-	-	-	-	-	-	-	-
115	METAVER Me- tadatenver- bund	nein	-	-	-	-	-	-	-	-	-
116	Webseite Fach- bereich Um- welt Bremen	nein	-	-	-	S (B+)	-	D (B-)	D (B-)	-	-

Daten- quelle ID	Datenquelle Name	Einschluss	AW	Biota	Bod	GW	KS	Luft	OW	Schw	Sedi
117	Webseite Um- weltuntersu- chungen Bo- den-, Wasser-, Luftqualität HH	nein	-	-	-	D (B-)	-	D (B-)	-	-	-
118	Messdatenpor- tal HE	nein	-	-	-	D (B-)	-	D (B-)	D (B-)	-	-
119	geoportal.hes- sen.de	nein	-	-	K (B-)	K (B-)	-	K (B-)	K (B-)	-	-
120	Informations- plattform Un- dine	nein	-	-	-	-	-	-	D (B-)	-	-
121	LUNG Web- seite MV	nein	-	-	-	S (B+)	-	S (B-)	S (B+)	-	-
122	NLWKN Web- seite NI	nein	-	-	-	S (B+)	-	-	S (B+)	-	-
123	LfU RP Web- seite	nein	-	-	-	S (B+)	-	S (B-)	S (B+)	S (B-)	-
124	LUA Webseite SL	nein	-	-	-	-	-	-	-	-	-
125	LAU Webseite ST	nein	-	-	-	-	-	-	-	-	-
126	LfU SH Web- seite	nein	-	S (B+)	S (B-)	-	-	S (B+)	S (B+)	-	-
127	TLUBN Web- seite TH	nein	-	-	-	-	-	-	-	-	-
128	Umweltportal Thüringen	nein	-	-	-	-	-	D (B-)	D (B-)	-	-
129	TransNational Monitoring Network	nein	-	-	-	-	-	-	S (B+)	-	-
130	Auskunftssys- teme der Was- serwirtschaft RP	nein	-	-	-	S (B+)	-	-	D (B-)	-	-
131	UBA Webseite Daten	nein	-	-	-	S (B+)	-	S (B+)	S (B+)	-	-
132	Umweltpro- benbank	nein	-	S (B+)	-	-	-	-	-	S (B+)	-
133	European Hu- man Biomoni- toring	nein	-	S (B+)	-	-	-	-	-	-	-

Daten- quelle ID	Datenquelle Name	Einschluss	AW	Biota	Bod	GW	KS	Luft	OW	Schw	Sedi
134	Trinkwasser- analyse Stutt- gart	nein	-	-	-	D (B+)	-	-	-	-	-
135	Open Data An- gebot der BfG	nein	-	-	-	-	-	-	-	-	-
136	WISE Statistics	nein	-	-	-	S (B+)	-	-	S (B+)	-	-
137	Waterbase - Water quality	ja	-	-	-	D (B-)	-	-	D (B+)	-	-
138	Weserdaten- bank	ja	-	-	-	-	-	-	D (B+)	D (B-)	D (B-)
139	Meeresum- weltdatenbank MUDAB	ja	-	D (B+)	-	-	-	-	D (B+)	-	D (B+)
140	GEMStat Data Portal	nein	-	-	-	D (B+)	-	-	D (B+)	-	-
141	GRDC Data Download	nein	-	-	-	-	-	-	-	-	-
142	IKSMS Daten- export	nein	-	-	-	-	-	-	D (B+)	-	-
143	FGG Rhein	ja	-	-	-	-	-	-	D (B+)	D (B-)	-
144	Fließgewässer- daten der On- line-Messstel- len BW	nein	-	-	-	-	-	-	D (B-)	-	-
145	Grundwasser Jahresdatenka- talog BW	nein	-	-	-	D (B+)	-	-	-	-	-
146	Grundwasser- datenbank BW	nein	-	-	-	D (B+)	-	-	-	-	-
147	Hydrologische Daten und Vor- hersagen CH	nein	-	-	-	D (B-)	-	-	D (B-)	-	-
148	LfU Webseite BB	nein	-	-	-	D (B+)	-	-	-	-	-
149	Auskunftsplatt- form Wasser	nein	-	-	-	D (B+)	-	-	D (B-)	-	-
150	UmweltAtlas Bayern	nein	-	-	-	K (B-)	-	-	K (B-)	-	-
151	WasserBLick Karten WRLL	nein	-	-	-	-	-	-	K (B+)	-	-

Daten- quelle ID	Datenquelle Name	Einschluss	AW	Biota	Bod	GW	KS	Luft	OW	Schw	Sedi
152	WasserBLick WRLL Wasser- körpersteck- briefe	nein	-	-	-	-	-	-	S (B+)	-	-
153	Luftüberwa- chungssystem Sachsen-Anhalt	nein	-	-	-	-	-	D (B-)	-	-	-
154	GeoPortal Hamburg	nein	-	-	-	K (B-)	-	-	K (B-)	-	-
155	WSV Service Download Zeit- reihen	nein	-	-	-	-	-	-	D (B-)	-	-
156	Datenportal der FGG Elbe	nein	-	D (B-)	-	-	-	-	D (B+)	D (B-)	D (B-)
157	Landesdaten- bank für was- serwirtschaftli- che Daten NI	nein	-	-	-	D (B+)	-	-	D (B-)	-	-
158	NLWKN Ge- wässergüte	nein	-	-	-	-	-	-	D (B-)	-	-
159	HYGON NEU	nein	-	-	-	-	-	-	D (B-)	-	-
160	HYGON ALT	nein	-	-	-	-	-	-	D (B+)	-	-
161	Wasserportal RP - Analysen und Mess- werte	nein	-	-	-	D (B+)	-	-	-	-	-
162	Umweltportal SH	nein	-	-	K (B+)	-	-	-	-	K (B+)	-
163	Gewässergüte aktuelle Daten SN	nein	-	-	-	-	-	-	D (B-)	-	-
164	Gewässerkund- licher Landes- dienst ST	nein	-	-	-	D (B+)	-	-	D (B+)	-	-
165	Kartendienst des LUBN Thü- ringen	nein	-	-	-	D (B-)	-	-	D (B-)	-	-
166	Geoportal Saarland	nein	-	-	-	-	-	-	-	-	-

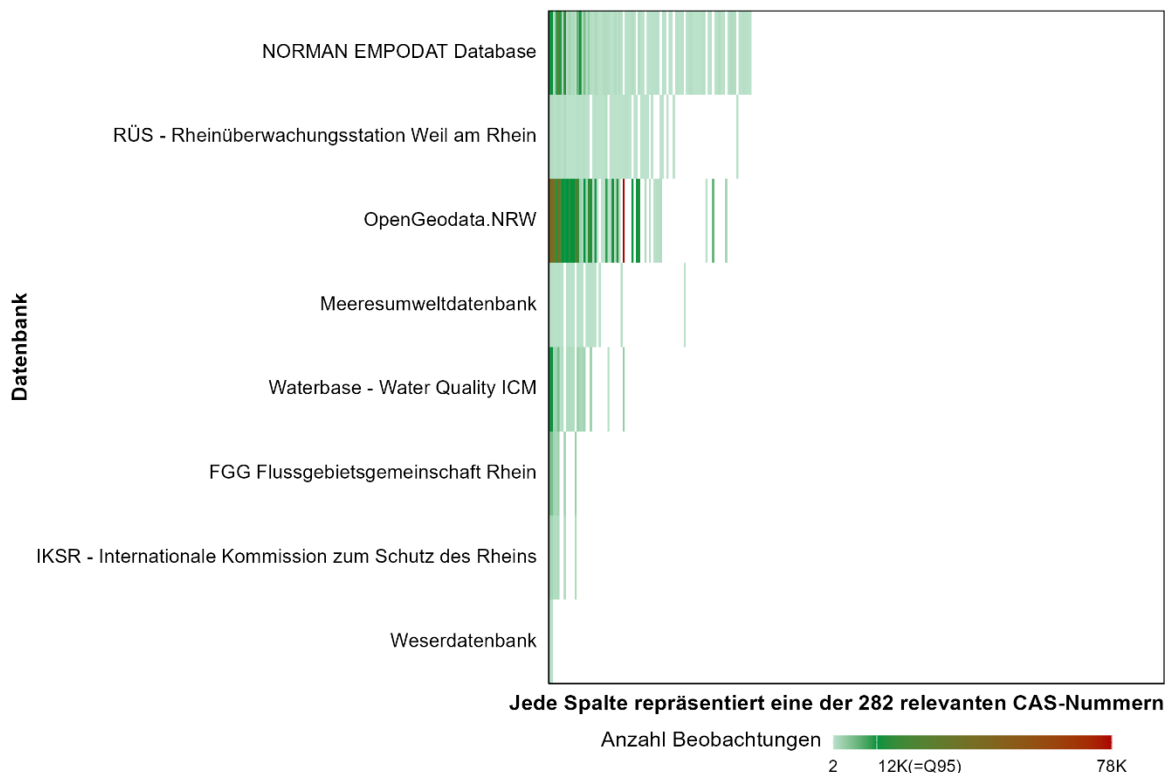
Quelle: Eigene Daten (BioMath)

Insgesamt wurden in den acht eingeschlossenen Datenquellen } Stoffe aus den 282 vom UBA vorgegebenen bioziden Substanzen und Transformationsprodukten identifiziert (Abbildung 2).

Abbildung 2: Heatmap zur Datenverfügbarkeit pro eingeschlossene Datenquelle und CAS-Nummer

Die Y-Achse (Zeilen) zeigt eingeschlossene Datenquellen, absteigend sortiert nach der Anzahl der in ihr vorhandenen CAS-Nummern, während die X-Achse (Spalten) die relevanten CAS-Nummern darstellt, sortiert nach der Anzahl der Datenquellen, die Messwerte/Daten enthalten. Die Färbung jeder Zelle entspricht der Anzahl vorhandener Datenzeilen, wobei die Farbskala von hellgrün (Minimum) über dunkelgrün (95%-Quantil) bis rot (Maximum) verläuft (siehe Legende).

Heatmap CAS-Datenbank



Quelle: Eigene Darstellung (BioMath)

Die Anzahl der insgesamt identifizierten Messwerte beträgt 791.281. 95,5 % der identifizierten Messdaten wurden in Deutschland erhoben, etwa 1,0 % in Österreich und 3,5 % in der Schweiz (der Schwerpunkt der Recherche lag auf Deutschland, für Österreich und die Schweiz wurden lediglich in internationalen Datenquellen vorhandene Messdaten identifiziert, Tabelle 5).

Tabelle 5: Anzahl Messdaten je eingeschlossene Datenquelle und Land

Datenquelle	Deutschland	Österreich	Schweiz	Gesamt
FGG-Flussgebietsgemeinschaft Rhein	20.976			20.976
IKSR - Internationale Kommission zum Schutz des Rheins	8.767			8.767
Meeresumweltdatenbank	4.807			4.807
NORMAN EMPODAT Database	125.450	1.813	18.801	146.064
OpenGeodata.NRW	549.273			549.273
RÜS - Rheinüberwachungsstation Weil am Rhein	9.385			9.385

Datenquelle	Deutschland	Österreich	Schweiz	Gesamt
Waterbase - Water Quality ICM	36.466	6.164	9.069	51.699
Weserdatenbank	310			310
Gesamt	755.434	7.977	27.870	791.281

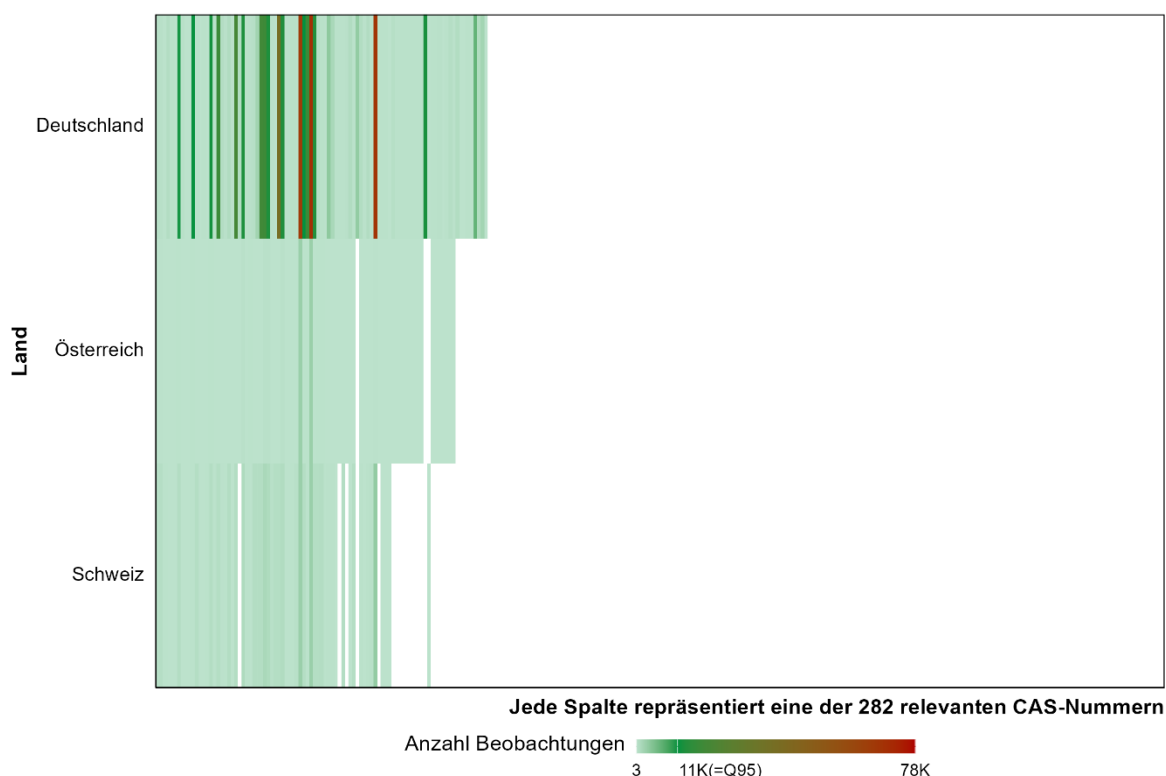
Quelle: Eigene Daten (BioMath)

Entsprechend wurden auch die meisten Messdaten je CAS-Nummer in Deutschland erhoben (Abbildung 3).

Abbildung 3: Heatmap zur Datenverfügbarkeit pro eingeschlossene CAS-Nummer und Land

Die Y-Achse (Zeilen) zeigt die betrachteten Länder, während die X-Achse (Spalten) die relevanten CAS-Nummern darstellt, sortiert nach der Anzahl der Länder, die Messwerte/Daten enthalten. Die Färbung jeder Zelle entspricht der Anzahl vorhandener Datenzeilen, wobei die Farbskala von hellgrün (Minimum) über dunkelgrün (95%-Quantil) bis rot (Maximum) verläuft (siehe Legende).

Heatmap CAS-Land

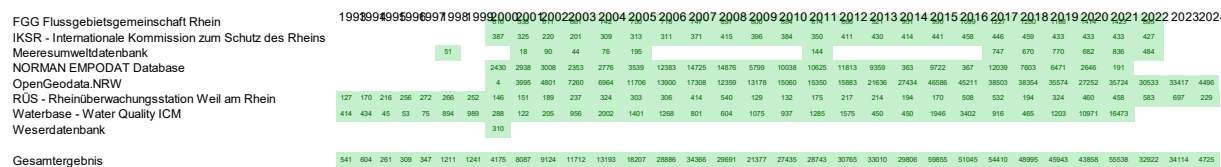


Quelle: Eigene Darstellung (BioMath)

Mit 69,4 % der Messwerte verfügt die Datenbank OpenGeodata.NRW über die meisten Daten. Danach folgt die NORMAN EMPODAT Database mit 18,5 % der Messdaten (Tabelle 5).

Fast alle Datenquellen halten kontinuierliche Messdaten über den betrachteten Zeitraum vor (Abbildung 4).

Abbildung 4: Messwerte pro eingeschlossene Datenquelle und Jahr



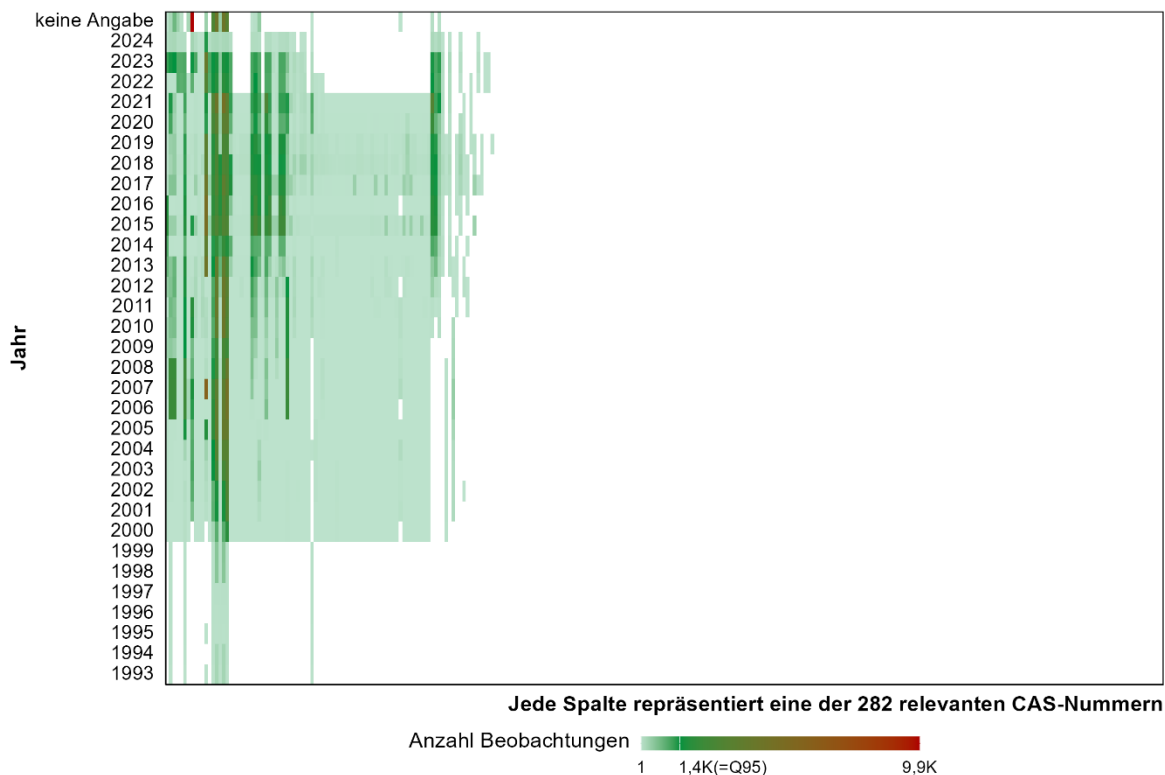
Quelle: Eigene Darstellung (BioMath)

Auch die identifizierten Stoffe wurden i.d.R. kontinuierlich über den betrachteten Zeitraum gemessen (Abbildung 5).

Abbildung 5: Heatmap zur Datenverfügbarkeit pro eingeschlossene CAS-Nummer und Jahr

Die Y-Achse (Zeilen) zeigt das jeweilige Jahr der Messung, während die X-Achse (Spalten) die relevanten CAS-Nummern darstellt, sortiert nach der Anzahl der Jahre, für die Messwerte/Daten identifiziert wurden. Die Färbung jeder Zelle entspricht der Anzahl vorhandener Datenzeilen, wobei die Farbskala von hellgrün (Minimum) über dunkelgrün (95%-Quantil) bis rot (Maximum) verläuft (siehe Legende).

Heatmap CAS-Jahr



Quelle: Eigene Daten (BioMath)

Von den insgesamt 791.281 identifizierten Messwerten sind für die Kompartimente Oberflächengewässer (73,2 %) und Grundwasser (24,8 %) die meisten Messdaten vorhanden (Tabelle 6). Für Luft und Klärschlamm hingegen waren in den eingeschlossenen Datenquellen zu keiner einzigen der relevanten CAS-Nummern Daten bereitgestellt.

Tabelle 6: Anzahl Messdaten je eingeschlossene Datenquelle und Kompartiment

Abkürzungen: AW = Abwasser, Biota = Bio, Bod= Boden, GW = Grundwasser, KS = Klärschlamm, OW = Oberflächengewässer, Sedi = Sedimente, Schw = Schwebstoffe

Datenquelle	AW	GW	OW	Schw	Sedi	Bod	Biota
FGG-Flussgebietsgemeinschaft Rhein			20.976				
IKSR - Internationale Kommission zum Schutz des Rheins			8.767				
Meeresumweltdatenbank			4.807				
NORMAN EMPODAT Database	4.477	492	132.713	24	381	6	7.971
OpenGeodata.NRW		175.961	370.696	1.954	389		
RÜS - Rheinüberwachungsstation Weil am Rhein			9.151		234		
Waterbase - Water Quality ICM		19.856	31.843				
Weserdatenbank			310				
Gesamt	4.477	196.309	579.536	1.978	1.004	6	7.971

Quelle: Eigene Daten (BioMath)

Aus den Befragungen in den Vorgängerprojekten (s.o.) wurde außerdem abgeleitet, dass zu 185 der 282 relevanten Substanzen ein Monitoring durch die teilnehmenden Institutionen durchgeführt wird/wurde. Die Differenz zu den in den acht eingeschlossenen Datenquellen identifizierten 125 Stoffen erklärt sich dadurch, dass (1) nicht alle Messdaten veröffentlicht sind und (2) nicht alle Messdaten mit vertretbarem Aufwand exportiert werden konnten.

4.3 Dubletten in den standardisierten Daten

Insgesamt wurden 291 Dubletten-IDs (dup_id) vergeben. Je nach Dubletten-ID sind mindestens 6 bis maximal 78 Datenzeilen betroffen. Im Mittel wurde eine Dubletten-ID an 37 Datenzeilen vergeben und insgesamt sind 10.649 Datenzeilen betroffen.

Beispielsweise wurde dup_id 1 an insgesamt 24 Datenzeilen vergeben, die alle CAS-Nr „134-62-3“, Trivialname „DEET“, Messjahr 2014, Kompartiment „Oberflächengewässer“ und Stationsnamen „Bimmen“ vorweisen, wobei allerdings 12 Werte aus der Datenbank FGG Flussgebietsgemeinschaft Rhein und ebenfalls 12 Werte aus der Datenbank IKSR - Internationale Kommission zum Schutz des Rheins stammen.

In nahezu allen Fällen handelt es sich um potenzielle Dubletten zwischen den Datenquellen (i) FGG Flussgebietsgemeinschaft Rhein und IKSR - Internationale Kommission zum Schutz des Rheins oder (ii) Joint Danube Survey 4 und NORMAN EMPODAT Database (Tabelle 7).

Tabelle 7: Häufigkeit von Datenquellenpaaren mit potenziellen Dubletten

Datenquellen mit gemeinsamer Dubletten-ID	Anzahl Dubletten-IDs
FGG Flussgebietsgemeinschaft Rhein IKSR - Internationale Kommission zum Schutz des Rheins	233

Datenquellen mit gemeinsamer Dubletten-ID	Anzahl Dubletten-IDs
FGG Flussgebietsgemeinschaft Rhein IKSR - Internationale Kommission zum Schutz des Rheins OpenGeodata.NRW	2
FGG Flussgebietsgemeinschaft Rhein OpenGeodata.NRW	2
Quelle: Eigene Daten (BioMath)	

5 Quellenverzeichnis

- BRD (Hrsg.). (2016). *Verordnung zum Schutz der Oberflächengewässer (Oberflächengewässerverordnung - OGewV)*. Verfügbar unter: https://www.gesetze-im-internet.de/ogewv_2016/BJNR137310016.html
- ECHA (Hrsg.). (2023). *Information on biocides*. Verfügbar unter: <https://echa.europa.eu/information-on-chemicals/biocidal-active-substances>
- Fraunhofer IME (Hrsg.). (2012). *Vorbereitung eines Monitoring-Konzepts für Biozide in der Umwelt. Bericht zu FKZ 360 04 036*. Verfügbar unter: https://www.umweltbundesamt.de/sites/default/files/medien/384/dokumente/dokument_uba-gutachten_-_monitoring_biozide.pdf
- Gartiser, S., Luskow, H. & Groß, R. (2012). *Thematic Strategy on Sustainable Use of Plant Protection Products. Prospects and Requirements for Transferring Proposals for Plant Protection Products to Biocides* (Texte 06/2012). Verfügbar unter: <https://www.umweltbundesamt.de/en/publikationen/thematic-strategy-on-sustainable-use-of-plant>
- Graumnitz, S., Stoll, A., Jungmann, D. & Rybicki, M. (2023). *Integration von Biozidmonitoringdaten aus Literaturquellen in eine Datenbank* (UBA Texte 134). Verfügbar unter: <https://www.umweltbundesamt.de/publikationen/integration-von-biozidmonitoringdaten-aus>
- Kahle, M. & Nöh, I. (2009). *Biozide in Gewässern: Eintragspfade und Informationen zur Belastungssituation und deren Auswirkungen* (Texte 09/2009). Verfügbar unter: <https://www.umweltbundesamt.de/publikationen/biozide-in-gewaessern-eintragspfade-informationen>
- Müller, A., Kranl, J. & Sundermann, A. (2021). *Gutachten zur systematischen Auswertung von Monitoring-Messdaten zu Bioziden in Oberflächengewässern und Grundwasser* (UBA Texte 00/2020). unveröffentlicht.
- Richtlinie (EU) 2015/1787 der Kommission vom 6. Oktober 2015 zur Änderung der Anhänge II und III der Richtlinie 98/83/EG des Rates über die Qualität von Wasser für den menschlichen Gebrauch. *Amtsblatt Nr. 260*, 6–17. Verfügbar unter: <https://eur-lex.europa.eu/eli/dir/2015/1787/oj>
- Richtlinie 2000/60/EG des Europäischen Parlaments und des Rates vom 23. Oktober 2000 zur Schaffung eines Ordnungsrahmens für Maßnahmen der Gemeinschaft im Bereich der Wasserpolitik. *Amtsblatt Nr. L 327*, 1-72. Verfügbar unter: <https://eur-lex.europa.eu/eli/dir/2000/60/oj>
- Richtlinie 2008/105/EG des Europäischen Parlaments und des Rates vom 16. Dezember 2008 über Umweltqualitätsnormen im Bereich der Wasserpolitik und zur Änderung und anschließenden Aufhebung der Richtlinien des Rates 82/176/EWG, 83/513/EWG, 84/156/EWG, 84/491/EWG und 86/280/EWG sowie zur Änderung der Richtlinie 2000/60/EG. *Amtsblatt Nr. 348*, 84-97. Verfügbar unter: <https://eur-lex.europa.eu/eli/dir/2008/105/oj>
- UBA (Hrsg.). (2017). *Sind Biozideinträge in die Umwelt von besorgniserregendem Ausmaß? Empfehlungen des Umweltbundesamtes für eine Vorgehensweise zur Untersuchung der Umweltbelastung durch Biozide*. Verfügbar unter: <https://www.umweltbundesamt.de/publikationen/sind-biozideintraege-in-die-umwelt-von#:~:text=Alle%20Biozide%20wirken%20bestimmungsgem%C3%A4%C3%9F%20auf,in%20Monitoringstudien%20oder%20Routine%20BCberwachungsprogrammen%20ber%20BCcksichtigt>
- UBA (Hrsg.). (2023). *Pflanzenschutzmittel in der Umwelt*. Verfügbar unter: <https://www.umweltbundesamt.de/daten/chemikalien/pflanzenschutzmittel-in-der-umwelt#menge-der-eingesetzten-pflanzenschutzmittel>

UBA (Hrsg.). (2024). *Biozide in der Umwelt*. Verfügbar unter: <https://www.umweltbundesamt.de/daten/chemikalien/biozide-in-der-umwelt>

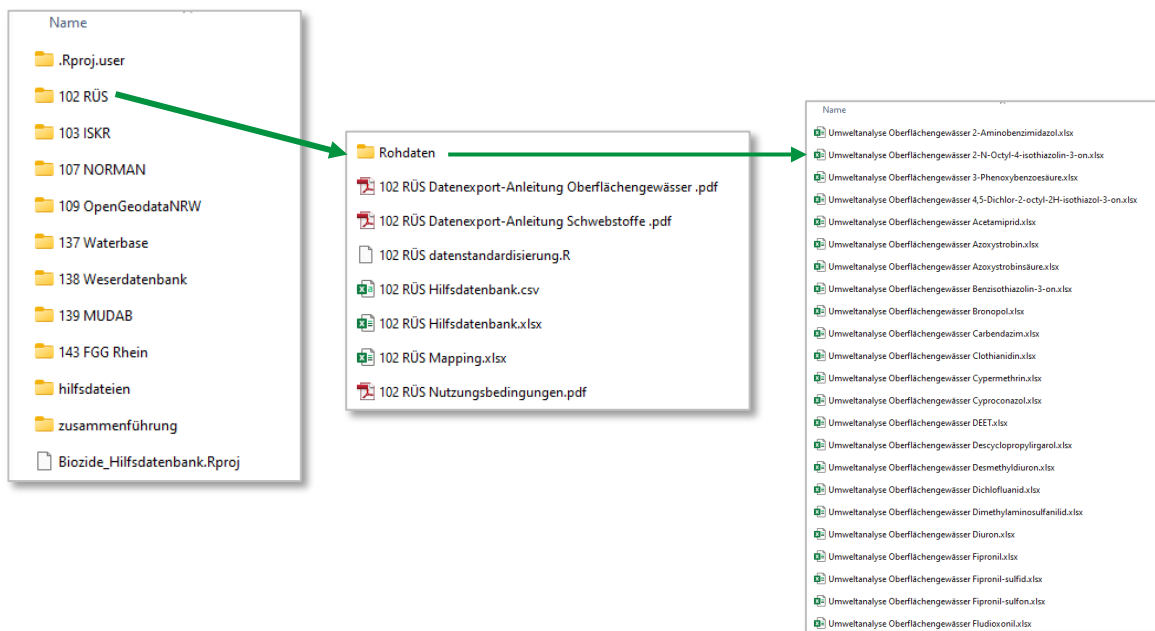
A Anhang

Im Ergebnis des Projektes liegt eine Hilfsdatenbank in einem R-Projekt Order in der in Abbildung 6 dargestellten Struktur vor.

Die Unterordner zu den acht eingeschlossenen Datenquellen beinhalten jeweils:

- ▶ Datenexport-Anleitung (.pdf) zum Herunterladen der Rohdaten
- ▶ Nutzungsbedingungen (.pdf)
- ▶ Rohdaten (i.d.R. eine Excel-Datei oder csv-Datei je Kompartiment und Biozid)
- ▶ Mapping-Tabelle (.xlsx)
- ▶ R-Skript Datenfilterung, -standardisierung (.R)
- ▶ Standardisierte Daten (xlsx & csv-Formate).

Abbildung 6: Struktur des R-Projekt Ordners der Hilfsdatenbank



Quelle: Eigene Daten (BioMath)