

Naturstyrelsens Referencelaboratorium for Kemiske og Mikrobiologiske Miljømålinger

NOTAT

Til: Følgegruppen for Naturstyrelsens Referencelaboratorium

cc:

Fra: Anders Svaneborg

Dato: 6. oktober 2014

QA: Stine Kjær Ottsen

Emne: Skal aktionsværdier bibeholdes i kvalitetsbekendtgørelsen?

I forbindelse med revision af bekendtgørelse om kvalitetskrav til miljømålinger (BEK nr. 900 af 17/08/2011) modtog Naturstyrelsen et høringssvar med anbefaling om at lade aktionsværdierne CV_{Tmax} og s_{Tmax} udgå af bekendtgørelsen /1/. Nærværende notat diskuterer fordele, ulemper og konsekvenser ved at lade CV_{Tmax} og s_{Tmax} udgå.

CV_{Tmax} og s_{Tmax} har - sammen med kvalitetsklasserne - udgjort fundamentet for vurderingen af analysekvalitet siden den første udgave af bekendtgørelsen (BEK nr. 637 af 30. juni 1997) til og med BEK nr. 866 af 01/07/2010. I sidstnævnte blev kravene til genfinding dog ændret, idet man indførte en formel til beregning af ekspanderet måleusikkerhed.

I BEK nr. 900 af 17/08/2011 indførte man begreberne U_{abs} og U_{rel} som mål for den ekspanderede usikkerhed på hhv. lavt og højt niveau, og kravene til intern analysekvalitet blev ændret, så de nu var baseret på LD, U_{abs} og U_{rel} i stedet for kvalitetsklasser, som bortfaldt. Status for CV_{Tmax} og s_{Tmax} blev i samme omgang ændret fra at være kravværdier til at være aktionsværdier.

Kravene til ekstern kvalitetskontrol blev også ændret med BEK 900, så de var mere i tråd med international standard, idet de tog udgangspunkt i formler for beregning af Z-score, Z'-score og En-score, i overensstemmelse med f.eks. ISO 13528 /2/. Man bevarede dog her et link til aktionsværdierne CV_{Tmax} og s_{Tmax} , idet disse indgik i formlerne for beregning af Z-score og Z'-score.

I gældende udgave af bekendtgørelsen (BEK nr. 231 af 05/03/2014) er de grundlæggende modeller for vurdering af intern og ekstern kvalitetskontrol de samme som i BEK 900, og CV_{Tmax} og s_{Tmax} har stadig status som aktionsværdier.

Aktionsværdier i intern kvalitetskontrol

I gældende udgave af bekendtgørelsen (BEK 231) har s_{Tmax} og CV_{Tmax} status som aktionsværdier, hvilket betyder følgende (citat fra BEK 231):

De i bilag 1.3 – 1.19 anførte værdier for s_{Tmax} og CV_{Tmax} er aktionsværdier, idet en overskridelse af en af disse værdier er en indikation af, at måleusikkerheden kan være på vej til at øges. Hvis s_T eller CV_T overskrider aktionsværdierne skal laboratoriet tage aktion for at afdække og dokumentere betydningen for måleusikkerheden og sikre, at måleusikkerheden ikke øges uacceptabelt, jf. krav til ekspanderet måleusikkerhed bilag 1.3- 1.19.

Gennemgang af h ringssvar

I ovenn vnte h ringssvar anf res f lgende vedr. CV_{Tmax} og s_{Tmax} (cit t fra h ringssvaret):

Vi vil gerne anbefale at aktionsv rdierne CV_{Tmax} og s_{Tmax} fjernes. De var gode at have i overgangsfasen fra Bek. 866 til bek. 900, men ikke relevante nu og flere er ikke i overensstemmelse med kravv rdierne. To s t gr nser man skal forholde sig til – dette giver meget ekstra arbejde i forb. med at dokumentere at man lever op til BEK. Desuden mener vi at s_{Tmax} / CV_{Tmax} er uegnede som aktionsv rdier i forhold til at afg re om usikkerheden er p  vej mod at stige uacceptabelt, fordi der ikke er nogen direkte sammenh ng mellem CV_{Tmax} og U_{rel} , og ej heller mellem s_{Tmax} og U_{abs} . Hvis man mener at der er brug for aktionsv rdier (hvilket vi er uenig i) kunne man i stedet fasts tte disse som $2/3 \times U_{rel}$ og $2/3 \times U_{abs}$, i tr d med den m de man beregner alarmgr nser i et kontrollkort

H ringssvaret rummer flere aspekter og forslag. Disse vurderes enkeltvis herunder.

To s t gr nser man skal forholde sig til – dette giver meget ekstra arbejde i forb. med at dokumentere at man lever op til BEK.

Referencelaboratoriet har vanskeligt ved at vurdere omfanget af ekstraarbejde, som kan henf res til, at bekendtg relsen rummer b de aktionsv rdier og kravv rdier. Det vurderes dog sandsynligt - alt andet lige - at det vil kunne lette laboratoriets arbejde med dokumentation, hvis s_{Tmax} og CV_{Tmax} udg r, idet man s  kun skal forholde sig til  t s t v rdier.

s_{Tmax} / CV_{Tmax} er uegnede som aktionsv rdier fordi der ikke er nogen direkte sammenh ng mellem CV_{Tmax} og U_{rel} , og ej heller mellem s_{Tmax} og U_{abs} .

Det er rigtigt, at der ikke er nogen direkte, formelbaseret sammenh ng mellem hhv. s_{Tmax} og U_{abs} samt CV_{Tmax} og U_{rel} . Referencelaboratoriet henleder opm rksomheden p , at der ligger en historik bag fasts ttelse og l bende revurdering af s_{Tmax} , CV_{Tmax} , U_{abs} og U_{rel} . Den manglende direkte sammenh ng er derfor ikke n dvendigvis udtryk for, at der ikke er et fornuftigt forhold mellem s_{Tmax} og U_{abs} (hhv. CV_{Tmax} og U_{rel}). Men referencelaboratoriet kan ikke afvise, at der er parametre, hvor s_{Tmax} og U_{abs} (hhv. CV_{Tmax} og U_{rel}) med fordel kan justeres.

Hvis man mener at der er brug for aktionsv rdier (hvilket vi er uenig i) kunne man i stedet fasts tte disse som $2/3 \times U_{rel}$ og $2/3 \times U_{abs}$, i tr d med den m de man beregner alarmgr nser i et kontrollkort

Referencelaboratoriet mener ikke umiddelbart, at det vil v re hensigtsm essigt at kassere eksisterende aktionsv rdier for derefter at indf re nogle nye. N rv rende notat har derfor prim rt til sigte at vurdere om eksisterende aktionsv rdier b r bevares (og evt. revurderes), eller om de b r tages ud af bekendtg relsen.

Konsekvenser for intern kvalitetskontrol ved at lade s_{Tmax} og CV_{Tmax} udg  af bekendtg relsen

Referencelaboratoriet vurderer, at der ikke umiddelbart vil v re nogen konsekvenser i forhold til intern kvalitetskontrol ved at lade s_{Tmax} og CV_{Tmax} udg  af bekendtg relsen. Kravv rdierne vil v re de samme, og det m  derfor forventes at den leverede analysekvalitet vil v re u ndret.

Mht. aktionsv rdier: Bekendtg relsen kr ver, at resultater for kontrolpr ver indf res i kvalitetskontrolprogram med X/R kort for hver pr vetype og koncentrationsniveau. Det ligger implicit i s danne programmer, at der ved evaluering fasts ttes kontrolgr nser og alarmgr nser, og referencelaboratoriet vurderer, at de alarmgr nser, der herved fasts ttes p  de enkelte laboratorier fint vil kunne erstatte aktionsv rdier i bekendtg relsen.

Krav til ekstern kvalitetskontrol

Den eksisterende model

I gældende udgave af bekendtgørelsen (BEK nr. 231 af 05/03/2014) evalueres resultater fra ekstern kvalitetskontrol vha. pointsystemer i overensstemmelse med ISO/IEC 17043 /3/ eller ISO 13528 /2/.

Pointsystemerne i ISO 13528 /2/ ses i tabellen herunder.

Beregningstype	Evaluerings
$Z = (x - X) / \hat{\sigma}$	$ Z \leq 2$: Tilfredsstillende $2 < Z \leq 3$: Tvivlsom $ Z > 3$: Utilfredsstillende
$E_n = \frac{x - X}{\sqrt{U_{lab}^2 + U_{ref}^2}}$	$ E_n \leq 1$: Tilfredsstillende $ E_n > 1$: Utilfredsstillende
$Z' = (x - X) / \sqrt{\hat{\sigma}^2 + u_X^2}$	$ Z' \leq 2$: Tilfredsstillende $2 < Z' \leq 3$: Tvivlsom $ Z' > 3$: Utilfredsstillende
$\text{Zeta} = (x - X) / \sqrt{u_X^2 + u_X^2}$	$ Zeta \leq 2$: Tilfredsstillende $2 < Zeta \leq 3$: tvivlsom $ Zeta > 3$: Utilfredsstillende

Hvor $\hat{\sigma}$ (herefter kaldet zigma hat) er standardafvigelsen for "proficiency assessment", x er laboratoriets resultat, X er den nominelle værdi, U_{lab} er den ekspanderede usikkerhed på laboratoriets resultat, U_{ref} er den ekspanderede usikkerhed på den nominelle værdi, u_X er standardusikkerheden på den nominelle værdi, og u_X er standardusikkerheden på laboratoriets resultat.

Bemærkninger til beregningstyperne:

- Z er den beregningstype, der anvendes af de fleste udbydere af præstationsprøvnings, og zigma hat fastsættes her typisk som den robuste standardafvigelse mellem resultaterne for de deltagende laboratorier.
- Z' kan betragtes som en udvidelse af Z, idet standardusikkerheden på den nominelle værdi nu indgår. Det ses af formlerne for Z og Z', at Z' vil være mindre end eller lig Z, hvis u_X sættes til 0.
- E_n er baseret på laboratoriets estimat for ekspanderet usikkerhed (U_{lab}) samt ekspanderet usikkerhed for den nominelle værdi.
- Zeta baseres på de samme parametre som E_n , og det ses af formlerne, at $E_n = 2 \times \text{Zeta}$, idet $U_{lab} = 2 \times u_X$, og $U_{ref} = 2 \times u_X$.

I BEK 231 indgår kun de tre øverste modeller, idet Zeta-score er valgt fra.

Ved beregning af Z-score eller Z'-score er i kvalitetsbekendtgørelsen valgt at fastsætte zigma hat som $1,3 \times S_{Tmax}$ eller $1,3 \times CV_{Tmax}$ (den af de to der giver det laveste Z eller Z'-score ved

den aktuelle koncentration anvendes). Dette valg begrundes i et notat fra referencelaboratoriet ud fra et ønske om at tilpasse evalueringssystemet til internationale standarder, samt et ønske om at opnå sammenlignelige resultater mellem det gamle system (BEK 866) og det nye system /4/.

Da s_{Tmax} og CV_{Tmax} dermed indgår i beregning af zigma hat, er det en forudsætning for at kunne lade s_{Tmax} og CV_{Tmax} udgå af bekendtgørelsen, at modellen ændres, så s_{Tmax} og CV_{Tmax} ikke længere bruges.

Mulighederne for en sådan ændring af modellen vurderes herunder.

Vurdering af muligheder for at ændre modellen

Da s_{Tmax} og CV_{Tmax} ikke indgår i beregning af E_n , vil det ikke have nogen indflydelse på denne beregning, hvis s_{Tmax} og CV_{Tmax} udgår af bekendtgørelsen. Beregningen af Z og Z' vil imidlertid skulle ændres, da s_{Tmax} og CV_{Tmax} indgår i beregning af zigma hat.

Én mulighed kunne være at bruge udbyderens estimat for zigma hat, som typisk er den robuste standardafvigelse mellem resultaterne for de deltagende laboratorier. Denne model ville imidlertid bryde med den grundliggende idé i kvalitetsbekendtgørelsen om, at resultater fra ekstern kvalitetskontrol skal vurderes op imod gældende kravværdier til intern usikkerhed (Z eller Z') eller laboratoriets eget estimat for usikkerhed (E_n). Idéen er baseret på et ønske om, at et laboratorium med stor intern usikkerhed og et tvivlsomt resultat i en præstationsprøvning ikke skal kunne "gemme sig" (dvs. opnå acceptabel score) i en præstationsprøvning, hvor der er stor spredning mellem de deltagende laboratoriers resultater.

Dette illustreres bedst med et eksempel:

Eks 1: Ét laboratorium har opnået resultatet 27,3 for parameter x, og nominel værdi er af udbyder fastsat til 34,6. For den givne parameter er $CV_{Tmax} = 5\%$ og $U_{rel} = 20\%$. Dette vil resultere i $Z = -4,11$ iflg. beregningsmodellen i BEK 231. Men da der i præstationsprøvningen har været en relativt stor spredning mellem de deltagende laboratorier, er zigma hat = den robuste standardafvigelse mellem deltagende laboratorier beregnet til 11 %. Herved vil udbyders Z-score være -1,92. Laboratoriets resultat er altså OK iflg. udbyderen, men utilfredsstillende iflg. beregningsmodellen i BEK 231.

Ved beregning af Z og Z' anbefaler referencelaboratoriet at fastholde, at zigma hat beregnes på grundlag af krav fra lovgivning i stedet for at anvende udbyderens estimat for zigma hat. I en situation hvor s_{Tmax} og CV_{Tmax} ikke længere kan bruges, er det oplagt at undersøge, om U_{abs} og U_{rel} kan bruges i stedet.

Beregning af Z vha. U_{abs} og U_{rel} i stedet for s_{Tmax} og CV_{Tmax}

Hvis zigma hat sættes lig u_{rel} ($=U_{rel} / 2$) eller u_{abs} ($=U_{abs} / 2$), hvor den laveste af de to bruges, vil man opnå, at der for en given parameter opnås uændret Z-score (sammenlignet med eksisterende model), hvis $U_{rel} = 2,6 \times CV_{Tmax}$, samt tilsvarende hvis $U_{abs} = 2,6 \times s_{Tmax}$.¹ For at undersøge i hvor høj grad denne model (herefter kaldet *ny model*) vil være sammenlignelig med den gældende model (dvs. giver sammenlignelige resultater), har referencelaboratoriet undersøgt forholdet mellem hhv. U_{abs} og s_{Tmax} samt U_{rel} og CV_{Tmax} i BEK 231 for samtlige parametre i 6 matricer, der vurderes tilsammen at være repræsentative for spændet mellem "lette" og "svære" matricer. Resultatet ses i tabellen herunder.

Bilag	U_{abs} / s_{Tmax}			U_{rel} / CV_{Tmax}		
	Min	Max	Middel	Min	Max	Middel
1.3 Grundvand	2,00	5,00	3,27	3,00	7,14	3,87
1.4 Drikkevand	1,67	5,00	3,23	3,00	5,00	3,77
1.6 Perkolat	3,33	5,00	4,60	4,00	5,00	4,12
1.8 Spildevand	2,50	4,00	3,21	3,00	4,00	3,46
1.11 Jord	2,50	6,67	4,34	2,50	5,00	2,74
1.12 Fersk sediment	2,50	6,67	4,33	2,50	5,00	2,75
Alle matricer (gennemsnit)	1,67	6,67	3,83	2,50	7,14	3,45

Det ses, at det gennemsnitlige forhold mellem U_{abs} og s_{Tmax} er 3,83, og at det gennemsnitlige forhold mellem U_{rel} og CV_{Tmax} er 3,45. Da begge disse tal er større end 2,6 vil Z-score iflg. ny model blive mindre end Z-score iflg. eksisterende model.

I denne situation kan der vælges to strategier:

- 1) Zigma hat beregnes som $U_{rel} / 2$ eller $U_{abs} / 2$ (den højeste værdi anvendes). Dette vil være en lempelse af kravene til ekstern kvalitetskontrol i forhold til eksisterende krav.
- 2) Zigma hat beregnes som $U_{rel} \times f$ (hhv. $U_{abs} \times f$), hvor f er en faktor, der skal sikre at kravene til ekstern kvalitetskontrol bliver sammenlignelige med eksisterende krav. Denne faktor kan beregnes til 0,339 for U_{abs} og 0,377 for U_{rel} ² med et gennemsnit på 0,36.

Konsekvenser for ekstern kvalitetskontrol ved at lade s_{Tmax} og CV_{Tmax} udgå af bekendtgørelsen samt referencelaboratoriets anbefaling til ny beregningsmodel

Hvis s_{Tmax} og CV_{Tmax} udgår af bekendtgørelsen, er det nødvendigt at finde en ny model til beregning af zigma hat, da denne indgår i beregning af Z og Z'.

Referencelaboratoriet anbefaler, at zigma hat i denne nye model beregnes ud fra U_{abs} og U_{rel} på følgende måde:

Zigma hat beregnes som $0,36 \times U_{abs}$ eller $0,36 \times U_{rel}$ (den af de to der giver den højeste værdi for zigma hat ved den aktuelle koncentration anvendes).

¹ $1,3 \times CV_{Tmax} = 1,3 \times (U_{rel}/2,6) = 1,3 \times (U_{rel}/1,3) = U_{rel}$

² U_{abs}/s_{Tmax} : $2,6/(3,83 \times 2) = 0,339$. U_{rel} / CV_{Tmax} : $2,6/(3,45 \times 2) = 0,377$. $(0,339 + 0,377)/2 = 0,358 \approx 0,36$

Hvis zigma hat beregnes på denne måde vil man opnå, at kravene til ekstern kvalitetskontrol *i gennemsnit* vil være sammenlignelige med eksisterende krav. Der vil dog være nogen variation, idet parametre hvor U_{abs} og U_{rel} er "store" sammenlignet med CV_{Tmax} og S_{Tmax} , vil få mere lempelige krav end i dag, og tilsvarende vil parametre, hvor U_{abs} og U_{rel} er "små" sammenlignet med CV_{Tmax} og S_{Tmax} , vil kravene til ekstern kvalitetskontrol være strammere end i dag. Referencelaboratoriet ser dog ikke noget problem i dette, men måske snarere en fordel, idet der vil være en tættere sammenhæng mellem kravene til intern kvalitetskontrol, og kravene til ekstern kvalitetskontrol end tilfældet er i dag.

I gældende bekendtgørelse kan der vælges mellem 3 evalueringssystemer; Z-score, Z' - score og En-score. Referencelaboratoriet ser ingen grund til at ændre på dette. Den nye model til beregning af zigma hat vil få betydning for Z og Z', men ikke for En, som vil være uændret.

Z'-score vil som tidligere være mindre end Z-score, hvis usikkerheden på den nominelle værdi (u_{ref}) fastsættes, så den er ikke-negligibel i forhold til zigma hat. Men Z'-score vil med den nye model, ligesom Z-score, være sammenlignelig med de værdier, der er opnået med den eksisterende model baseret på S_{Tmax} og CV_{Tmax} .

Det bemærkes, at den nye model for beregning af Z'-score, bortset fra korrektionsfaktoren, er identisk med formelen i ISO 13528 /2/ til beregning af Zeta-score. Man kunne derfor overveje at omdøbe til Z'-score til Zeta-score. Referencelaboratoriet anbefaler dog at bevare betegnelsen Z'-score.

Anbefalinger

Referencelaboratoriet anbefaler at lade S_{Tmax} og CV_{Tmax} udgå af bekendtgørelsen og ikke indføre nye aktionsværdier i deres sted. Udeladelsen af aktionsværdier i bekendtgørelsen vurderes ikke at have konsekvenser i forhold til intern kvalitetskontrol. Kravværdierne vil være de samme, og det må derfor forventes at den leverede analysekvalitet vil være uændret.

Til evaluering af resultater fra ekstern kvalitetskontrol anbefaler referencelaboratoriet at fastholde, at zigma hat beregnes på grundlag af krav efter lovgivning i stedet for at anvende udbyderens estimat for zigma hat. Referencelaboratoriet anbefaler, at zigma hat beregnes ud fra U_{abs} og U_{rel} på følgende måde: Zigma hat er lig $0,36 \times U_{abs}$ eller $0,36 \times U_{rel}$ (den af de to der giver den højeste værdi for zigma hat ved den aktuelle koncentration anvendes).

Referencer

- /1/ Naturstyrelsen: Høringsnotat vedrørende bekendtgørelse om kvalitetskrav til miljømålinger, 11. februar 2014. (<https://hoeringsportalen.dk/Hearing/Details/17079>)
- /2/ ISO 13528: Statistical Methods for Proficiency Testing by Interlaboratory Comparison (2005).
- /3/ ISO/IEC 17043: Conformity assessment – General requirements for proficiency testing (2010).
- /4/ Notat 8.2 af 29/06-2011; Kriterier for tilfredsstillende præstation i præstationsprøvning sammenligning mellem bkg. 866 og forslag til revideret bekendtgørelse.