TEXTE
84/2020

Umgang mit der Messunsicherheit bei der Überschreitung von Prüf- und Maßnahmenwerten für den Vollzug der Bundes-Bodenschutz- und Altlastenverordnung

Abschlussbericht

Für Mensch & Umwelt

Umwelt Bundesamt

TEXTE 84/2020

Umweltforschungsplan des
Bundesministeriums für Umwelt,
Naturschutz und nukleare Sicherheit

Forschungskennzahl 3715 74 299 0
FB000052

Umgang mit der Messunsicherheit bei der Überschreitung von Prüf- und Maßnahmenwerten für den Vollzug der Bundes-Bodenschutz- und Altlastenverordnung

von

Priv.-Doz. Dr. habil. Steffen Uhlig, Dipl.-Math Henning Baldauf, Dr. Karina Hettwer, Dipl.-Psych. Kirsten Simon (Master of Business Administration)
QuoData GmbH, Quality & Statistics!, Dresden

Dr. Frank Küchler
Beratung Probenahme, Rehfelde OT Werder

Prof. Dr. mult. Dr. h. c. Konstantin Terytze,
Umweltbundesamt, Fachbeirat für Bodenuntersuchungen, Dessau-Roßlau

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

/umweltbundesamt.de
/umweltbundesamt

Durchführung der Studie:
QuoData GmbH, Quality & Statistics!
01309 Dresden

Im Unterauftrag:
Dr. Frank Küchler (wissenschaftlicher Berater Probenahme)
RA Dr. Achim Willand, RA Dr. Georg Buchholz, RA Malika Meyer-Schwickerath,
RA Moritz Felder (Anwaltskanzlei Gaßner, Groth, Siederer & Coll; Kapitel 6)

Abschlussdatum:
August 2018

Redaktion:
Fachgebiet II 2.6 Maßnahmen des Bodenschutzes
Dr. David Kaiser

Publikationen als pdf:
http://www.umweltbundesamt.de/publikationen

ISSN 1862-4804

Dessau-Roßlau, Juni 2020

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

Kurzbeschreibung

Das Ziel des FuE-Vorhabens war die Erarbeitung eines Konzeptes zur Berücksichtigung der Messunsicherheit im Rahmen des Vollzugs der BBodSchV und darauf basierend die Erarbeitung einer Handlungsanleitung.

Im Rahmen des FuE-Vorhabens wurde ein Konzept zur Berücksichtigung der Messunsicherheit im Rahmen des Vollzugs der BBodSchV erarbeitet, dass die Messunsicherheit mittels statistisch abgesicherter Verfahren ermittelt und bei der Feststellung einer Prüf- oder Maßnahmenwertüberschreitung einbezieht. Das Konzept berücksichtigt folgende Unsicherheitskomponenten: (1) räumliche Heterogenität, (2) systematische Abweichungen des Probenahmeverfahrens, (3) zufällige Abweichungen des Probenahmeverfahrens, (4) Fundamentalvariabilität, (5) Systematische Abweichungen des Analysenverfahrens und (6) Zufällige analytische Abweichungen.

Die Bewertung erfolgt entweder auf Basis des jeweiligen Messunsicherheitsbereiches eines Analysenergebnisses oder auf Basis seiner Indizienkraft. Beide Vorgehensweisen sind gleichwertig; allerdings ermöglicht die Bestimmung der Indizienkraft durch die Angabe eines quantitativen Wertes eine einfachere Einbeziehung anderer Informationen. Die Indizienkraft liegt zwischen 0 und 1 und spiegelt die Wahrscheinlichkeit einer Prüfwert/Maßnahmenwert-Überschreitung wider.

Eine Überschreitung liegt vor, wenn der Messunsicherheitsbereich vollständig oberhalb des Prüfwertes/Maßnahmenwertes liegt. Dies ist gleichbedeutend damit, dass die Indizienkraft oberhalb von 0,95 liegt. Andernfalls ist nicht von einer Überschreitung auszugehen – es sei denn, der Messunsicherheitsbereich überlappt nicht nur mit dem Prüfwert/Maßnahmenwert, sondern auch mit einer vorgegebenen Maximalgrenze. In diesem Fall erlaubt das Analysenresultat keine abgesicherte Bewertung, weil der Messunsicherheitsbereich zu groß ausfällt.

Im letzten Projektabschnitt wurde eine Handlungsanleitung für den Vollzug der BBodSchV erarbeitet, die das Vorgehen bei der Bewertung von Messergebnissen im Hinblick auf eine Überschreitung von Prüf- und Maßnahmenwerten prägnant und präzise erklärt. Zur potentiellen Unterstützung der Vollzugsbehörden wurde neben der Handlungsanleitung ein Konzept für ein Berechnungsprogramm zur Ermittlung der Messunsicherheit und Ausgabe des Bewertungsergebnisses erarbeitet.

Abstract

The aim of the R&D project was the development of a concept for considering the measurement uncertainty in the context of the implementation of the Federal Soil Protection and Contaminated Sites Ordinance (Bundes-Bodenschutz- und Altlastenverordnung – BBodSchV).

Within the framework of the R&D project, a concept was developed, that considers the measurement uncertainty in the assessment of exceedance of test and action thresholds and that is based on a statistically sound method for calculation of measurement uncertainty and its components. The following measurement uncertainty components are taken into consideration: (1) spatial heterogeneity, (2) systematic deviations during sampling, (3) random deviations during sampling, (4) fundamental variability, (5) systematic deviations of the analysis method, and (6) random analytical deviations.

Assessment for the determination of exceedance of a test or action threshold is made either on the basis of the measurement uncertainty range of an analysis result or on the basis of its evidence level. Both approaches are equivalent, but the determination of the evidence level allows an assessment taking into account further information by providing a quantitative measure. The evidence level is between 0 and 1 and reflects the probability of exceeding an examination / action threshold.

An examination / action threshold is exceeded, if the measurement uncertainty range for the analysis result is completely above the examination / action threshold. This is equivalent with an evidence lev-

el above 0,95. Otherwise there is no exceedance, unless the measurement uncertainty range overlaps both, the examination / action threshold and the respective maximum limit. In this case the analysis result does not allow a reliable assessment because the measurement uncertainty range is too large.

Finally, an instruction manual for implementation of the BBodSchV has been developed, which explains and phrases the procedure for the assessment of measurement results with regard to exceedance of test and action thresholds. In addition, a concept for a web tool for the calculation of the measurement uncertainty was developed, with the aim to support the enforcement authorities during the decision process.

Inhaltsverzeichnis

Abbildungsverzeichnis 10
Tabellenverzeichnis 12
Abkürzungsverzeichnis 13
Zusammenfassung 14
Summary 17
1 Aufgabenstellung 20
2 Planung und Ablauf des Vorhabens 21
3 Zusammenstellung und vergleichende Bewertung von Konzepten zur Berücksichtigung der Messunsicherheit 23
3.1 Beschreibende Darstellung des Umgangs mit der Messunsicherheit in anderen Rechtsbereichen 23
3.1.1 Recherche zum Umgang mit der Messunsicherheit in anderen nationalen und internationalen Verordnungen, Normen und Richtlinien 23
3.1.1.1 Vorgehensweisen zur Behandlung der Messunsicherheit in den recherchierten Verordnungen 23
3.1.1.2 Vorgehensweise 1: Messunsicherheit wird ignoriert 25
3.1.1.3 Vorgehensweise 2: Messunsicherheit wird mittels Toleranzen berücksichtigt 26
3.1.1.4 Vorgehensweise 3: Messunsicherheit wird berücksichtigt und mittels statistisch abgesicherter Verfahren ermittelt 26
3.1.1.5 Darstellung der verschiedenen Vorgehensweisen als Baum 26
3.1.2 Exkurs: Ein mathematisch-statistischer Rahmen zur Klassifizierung und Charakterisierung der verschiedenen Grenzwerte 28
3.1.2.1 Einleitung 28
3.1.2.2 Bewertungsregeln und Qualitätsgrenzen 28
3.1.2.3 Wie wird in den Verordnungen zwischen Qualitätsgrenzen und Bewertungsregeln differenziert? 29
3.1.2.4 Zusammenhang zum Messunsicherheitsmodell 30
3.1.2.5 Bewertungsregeln und Qualitätsgrenzen in den recherchierten Verordnungen, Normen und Richtlinien 31
3.1.2.6 Kriterien für die Festlegung der Qualitätsgrenzen QLα und QLβ 31
3.1.3 Beschreibung der Messunsicherheitskomponenten 31
3.1.3.1 Definition der Messunsicherheit 31
3.1.3.2 Beziehung zwischen Standardunsicherheit und erweiterter Messunsicherheit 31
3.1.3.3 Zusammenhang zwischen Messunsicherheit und Präzision 31
3.1.3.4 Zufällige und systematische Messabweichungen 32
3.1.3.5 Von der DAkkS geforderte Messunsicherheitskomponenten 32

3.2 Vergleichende Bewertung der verschiedenen Vorgehensweisen zur Behandlung der Messunsicherheit 33
3.2.1 Vergleich der Risiken einer Fehlbewertung für die verschiedenen Vorgehensweisen 33
3.2.1.1 Vorgehensweise 1 33
3.2.1.2 Vorgehensweise 2 33
3.2.1.3 Vorgehensweise 3 34
3.2.2 Vergleich der verschiedenen Vorgehensweisen in Bezug auf die berücksichtigten Messunsicherheitskomponenten 34
3.2.2.1 Vorgehensweise 1 34
3.2.2.2 Vorgehensweise 2 34
3.2.2.3 Vorgehensweise 3 34
3.2.3 Zusammenfassung der Vor- und Nachteile 34
3.3 Durchführung eines Workshops/Fachgespräch mit dem Fachbeirat für Bodenuntersuchungen (FBU) 35
4 Konzepte zur Berücksichtigung der Messunsicherheit im Rahmen des Vollzugs der BBodSchV 36
4.1 Alternative Optionen für die Berücksichtigung der Messunsicherheit 36
4.1.1 Messunsicherheitskomponenten bei Bodenuntersuchungen 36
4.1.1.1 Gegenüberstellung zu den von der DAkkS geforderten Messunsicherheitskomponenten 36
4.1.1.2 Ermittlung der Gesamtmessunsicherheit 37
4.1.1.3 Räumliche Heterogenität 38
4.1.1.4 Unsicherheit der Probenahme 38
4.1.1.5 Fundamentalvariabilität 38
4.1.1.6 Analytische Unsicherheit 39
4.1.2 Zusammenfassung 39
4.1.3 Integration des funktionellen Messunsicherheitsmodells des FBU für den analytischen Fehler 41
4.1.4 Adaption des Konzeptes der CD 2002/657 EC auf den Bodenschutz 41
4.1.4.1 Vorteile des Ansatzes der CD 2002/657 EC 41
4.1.4.2 Anforderungen der CD 2002/657/EC 42
4.1.4.2.1 Anwendungsbereich 42
4.1.4.2.2 Grenzwertdefinition 42
4.1.4.2.3 Grenzwertüberschreitung 42
4.1.4.2.4 Anforderungen an die Messunsicherheit 42
4.1.4.2.5 Anforderungen an das Analysenverfahren 43
4.1.4.2.6 Anforderungen an die Probenahme 43
4.1.4.2.7 Anforderungen an die Untersuchungsstelle 43

4.1.4.3 Veranschaulichung des Konzeptes der CD 2002/657 43
4.1.4.3.1 Prüfwert in Wohngebieten 43
4.1.4.3.2 Möglicher Ansatz zur Ermittlung der Messunsicherheit 43
4.1.4.3.3 Ermittlung der Bewertungsgrenze 46
4.1.4.3.4 Ermittlung der Qualitätsgrenze 46
4.1.4.3.5 Diskussion 48
4.2 Vergleichende Gegenüberstellung alternativer Optionen zur Ableitung der Messunsicherheit 49
4.3 Durchführung eines Workshops/Fachgespräch mit dem Fachbeirat für Bodenuntersuchungen (FBU) 50
5 Erarbeitung einer Handlungsanleitung für den Vollzug 51
5.1 Spezifizierung der empfohlenen Vorgehensweise 51
5.1.1 Empfohlene Vorgehensweise für den Umgang mit der Messunsicherheit bei der Überschreitung von Prüf- und Maßnahmenwerte für den Vollzug der BBodSchV 51
5.1.1.1 Messunsicherheitskomponenten 51
5.1.1.2 Wann liegt eine Überschreitung von Prüf- oder Maßnahmenwerten vor? 51
5.1.1.2.1 Prüfwertüberschreitung 52
5.1.1.2.2 Maßnahmenwertüberschreitung 56
5.1.2 Berechnungsgrundlagen 59
5.1.3 Konzept für ein Berechnungsprogramm zur Ermittlung der Messunsicherheit im Vollzug der BBodSchV 61
5.2 Erstellung einer Handlungsanleitung für die empfohlene Vorgehensweise 62
5.3 Durchführung eines Workshops/Fachgespräch mit dem Fachbeirat für Bodenuntersuchungen (FBU) und Durchführung eines Abschlussworkshops 63
6 Rechtliche Grundlagen 64
7 Anhang 65
7.1 Anlagen zum Bericht 65
7.2 Ergänzende Ergebnisse und Informationen zu Arbeitspaket A 66
7.2.1 Zusammenfassung der Rechercheergebnisse zum Umgang mit der Messunsicherheit in anderen nationalen und internationalen Verordnungen. Normen und Richtlinien 66
7.2.1.1 Anwendungsbereich und Grenzwertdefinitionen 66
7.2.1.2 Grenzwertüberschreitung, Berücksichtigung der Messunsicherheit und Angabe des Analysenergebnisses 69
7.2.1.3 Anforderungen an das Analysenverfahren, die Probenahme und die Untersuchungsstelle 72
7.2.1.4 Bewertungsregeln und Qualitätsgrenzen 76
7.2.2 Qualitätsgrenzen und Messunsicherheitsmodell 79

7.2.2.1 Zusammenhang zwischen Messunsicherheitsmodell, Grenzwert und Qualitätsgrenzen bei bekannter und fester Messunsicherheit 79
7.2.2.2 Beschreibung der Risiken einer Fehlentscheidung 80
7.2.2.3 Bewertungskonstellationen 80
7.2.2.4 Falsch-Positive-Entscheidung 81
7.2.2.5 Falsch-Negative-Entscheidung 81
7.2.2.6 Quantifizierung des Risikos einer Fehlentscheidung 82
7.2.2.7 Risikolast und Beweispflicht 82
7.3 Ergänzende Informationen zu Arbeitspaket B 83
7.3.1 Unsicherheitsquellen in der Bodenanalytik 83

Abbildungsverzeichnis

Abbildung 1: Darstellung verschiedener Vorgehensweisen bei der Berücksichtigung der Messunsicherheit. 27

Abbildung 2: Zusammenhang zwischen Untersuchungsschritten bei Bodenuntersuchungen und Messunsicherheitskomponenten, die einerseits von der DAkkS und andererseits in diesem FuE-Vorhaben vorgeschlagen werden. 40

Abbildung 3: 95 % - Fehlerschwankungsbereich im Fall der proportionale Fehleranteil des zufälligen Analysenfehlers ist 18 %. 44

Abbildung 4: 95 % - Fehlerschwankungsbereich im Fall der zufällige Probenahmefehler beträgt 10 %. 44

Abbildung 5: 95 % - Fehlerschwankungsbereich für die Fundamentalvariabilität und die räumliche Heterogenität 45

Abbildung 6: 95 % - Gesamtfehlerschwankungsbereich für das skizzierte Beispiel. 46

Abbildung 7: Ableitung der Bewertungsgrenze und Qualitätsgrenze auf Basis des 90 %-Gesamtfehlerschwankungsbereich für das skizzierte Beispiel. 47

Abbildung 8: Powerfunktion für das skizzierte Beispiel. 48

Abbildung 9: Ablaufdiagramm im Fall einer Bewertung des Analysenergebnisses bei orientierenden Untersuchungen auf Basis des Messunsicherheitsbereiches (MU-Bereiches). Ausgangspunkt sind der Probenahmeplan und die Analysenergebnisse aller untersuchten Misch- bzw. Einzelproben. Anschließend wird für das mittlere Analysenergebnis der Messunsicherheitsberiech zum Niveau 90 % bestimmt. Falls der MU-Bereich vollständig oberhalb des Prüfwertes liegt, gilt der Prüfwert als überschritten. Falls nein, wird geprüft, ob der MU-Bereich vollständig unterhalb der Maximalgrenze liegt, in diesem Beispiel der 3-fache Prüfwert. Falls ja, gilt der Prüfwert nicht als überschritten. Falls der MU-Bereich sowohl den Prüfwert als auch den Maximalwert überlappt, ist das Analysenresultat zu unsicher und sollte nicht zur alleinigen Bewertung herangezogen werden. 53

Abbildung 10: Messunsicherheitsbereich des Analysenresultates für die drei relevanten Bewertungs-situationen im Fall der Bewertung bzgl. einer Prüfwertüberschreitung. Die blauen Kurven markieren die untere und obere Grenze des Messunsicherheitsbereiches zum Niveau 90 % für ein Analysenresultat und die schwarze Kurve markiert den wahren Wert. PW – Prüfwert. 54

Abbildung 11: Statistische Verteilung hypothetischer Analysenergebnisse unter der Annahme, dass der wahre Gehalt der Verdachtsfläche beim Prüfwert 100 liegt, Das tatsächliche Analysenergebnis liegt bei 110, und der schraffierte Bereich entspricht der Indizienkraft, d.h. der Wahrscheinlichkeit, dass das Analysenergebnis nicht überschritten wird. Diese Wahrscheinlichkeit liegt bei 0,84, wenn die Messunsicherheit bei 10 % liegt. 55

Abbildung 12: Ablaufdiagramm im Fall einer Bewertung des Analysenergebnisses bei orientierenden Untersuchungen auf Basis der Indizienkraft. Ausgangspunkt ist die Indizienkraft am Analysenergebnis. Falls die Indizienkraft größer als 0,95 ist, gilt der Prüfwert als überschritten. Falls nein, wird geprüft, ob der Messunsicherheitsbereich für das Analysenergebnis vollständig unterhalb des 3-fachen Prüfwertes liegt. Nur wenn letzteres der Fall ist, gilt der Prüfwert nicht als überschritten. Andernfalls ist das Analysenresultat zu unsicher. 56

Abbildung 13: Ablaufdiagramm im Fall einer Bewertung des Analysenergebnisses bei Detailuntersuchungen auf Basis des Messunsicherheitsbereiches (MU-Bereiches). Ausgangspunkt sind der Probennahmeplan und die Analysenergebnisse aller untersuchten Misch- bzw. Einzelproben. Anschließend wird für das mittlere Analysenergebnis der Messunsicherheitsbereich zum Niveau 90 % bestimmt. Falls der MU-Bereich vollständig oberhalb des Maßnahmenwertes liegt, gilt der Maßnahmenwert als überschritten. Falls nein, wird geprüft, ob der Messunsicherheitsbereich vollständig unterhalb des zweifachen Maßnahmenwertes liegt. Falls ja, gilt der Maßnahmenwert nicht als überschritten. Falls der MU-Bereich sowohl den Maßnahmenwert als auch den zweifachen Maßnahmenwert überlappt, ist das Analysenresultat zu unsicher und sollte nicht zur alleinigen Bewertung herangezogen werden. 57

Abbildung 14: Messunsicherheitsbereich des Analysenresultates für die drei relevanten Bewertungs-situationen im Fall der Bewertung bzgl. einer Maßnahmenwertüberschreitung. Die blauen Kurven markieren die untere und obere Grenze des Messunsicherheitsbereiches zum Niveau 90 % für ein Analysenresultat und die schwarze Kurve markiert den wahren Wert. MW – Maßnahmenwert....58

Abbildung 15: Konzept für ein Berechnungsprogramm zur Ermittlung der Messunsicherheit im Vollzug der BBodSchV. 62

Abbildung 16: Zusammenfassung verschiedener Situationen für das Analysenergebnis und daraus resultierende Entscheidungen. 80

Abbildung 17: Risikomatrix bei der Messwertbeurteilung. 81

Abbildung 18: Veranschaulichung der Falsch-Positiv- und Falsch-Negativ-Rate.....82

Abbildung 19: Veranschaulichung der drei Bewertungssituationen. 83

Tabellenverzeichnis

Tabelle 1: Übersicht der recherchierten Verordnungen, Normen und Richtlinien. 24

Tabelle 2: Vorgehensweisen zur Behandlung der Messunsicherheit im Rahmen der Messwertbewertung in den recherchierten Verordnungen. 25

Tabelle 3: Zusammenfassung der Vor- und Nachteile der verschiedenen Vorgehensweisen zur Behandlung der Messunsicherheit. 35

Tabelle 4: Zusammenhang zwischen den DAkkS-Messunsicherheitskomponenten und den empfohlenen Messunsicherheitskomponenten. 37

Abkürzungsverzeichnis

BBodSchV	Bundes-Bodenschutz- und Altlastenverordnung
MW	Maßnahmenwert
MU	Messunsicherheit
PW	Prüfwert

Zusammenfassung

Das Ziel des FuE-Vorhabens war die Erarbeitung eines Konzeptes zur Berücksichtigung der Messunsicherheit im Rahmen des Vollzugs der BBodSchV und darauf basierend die Erarbeitung einer Handlungsanleitung für den Vollzug, die das Vorgehen bei der Bewertung von Messergebnissen im Hinblick auf eine Überschreitung von Prüf- und Maßnahmenwerten erklärt und formuliert.

Im Rahmen des Projektes wurde zunächst eine Recherche durchgeführt, wie in anderen nationalen und internationalen Gesetzen, Verordnungen und Regelwerken die Messunsicherheit bei der Bewertung von Analysenergebnissen berücksichtigt wird. Dabei wurden drei Vorgehensweisen identifiziert: (1) die Messunsicherheit wird ignoriert, (2) die Messunsicherheit wird mittels vorgegebener Toleranzen berücksichtigt oder (3) die Messunsicherheit wird mittels statistisch abgesicherter Verfahren ermittelt und berücksichtigt. Die Risiken einer Fehlentscheidung lassen sich nur bei Vorgehensweise (3) genau quantifizieren, während bei Vorgehensweise (2) die vorgegebene Toleranz von der wahren Gesamt-Messunsicherheit deutlich abweichen kann. Für die Umsetzung im Vollzug bedeutet dies jedoch auch, dass die Ermittlung der Messunsicherheit bei Vorgehensweise (3) notwendig ist, während bei Vorgehensweise (1) und (2) nur der Vergleich mit dem Grenzwert, ggfs. inkl. Toleranz, notwendig ist.

Im nächsten Schritt wurde ein Konzept zur Berücksichtigung der Messunsicherheit im Rahmen des Vollzugs der BBodSchV erarbeitet, das auf Vorgehen (3) basiert, im speziellen wurde das Vorgehen der Kommissionsentscheidung 2002/657 EC zu Grunde gelegt und an die Anforderungen der BBodSchV adaptiert.

Hinsichtlich der Messunsicherheitskomponenten empfehlen wir die Ermittlung von insgesamt sechs Messunsicherheitsbeiträgen: (1) räumliche Heterogenität, (2) systematische Abweichungen des Probennahmeverfahrens, (3) zufällige Abweichungen des Probennahmeverfahrens, (4) Fundamentalvariabilität, (5) systematische Abweichungen des Analysenverfahrens und (6) zufällige analytische Abweichungen. Diese sechs Messunsicherheitsbeiträge erfassen die von der Deutschen Akkreditierungsstelle GmbH (DAkkS) geforderten Beiträge und berücksichtigen deren Gesamteffekt in der Gesamtmessunsicherheit.

Die räumliche Heterogenität spiegelt wider, dass die Schadstoffbelastung nicht über die gesamte Bodenfläche gleich ist. Innerhalb der Bodenfläche gibt es Stellen mit höherer und niedriger Belastung.

Die Unsicherheit der Probenahme berücksichtigt systematisch und zufällig bedingte Schwankungen der Gehalte der Untersuchungsparameter. Der Untersuchungsprozess bis zur Übergabe ans Labor umfasst aufgrund der Probennahmedurchführung, der Probenverpackung, gegebenenfalls der Probenkonservierung und des Probentransportes viele Unsicherheitsquellen, die zu einer Abweichung zwischen dem wahren Gehalt in der untersuchten Grundgesamtheit und dem Analysenergebnis der entnommenen Proben führen können.

Bei wiederholter Durchführung der Probenahme an gleicher Stelle ergibt sich unvermeidlich ein anderer Wert, selbst dann, wenn die analytische Unsicherheit vernachlässigbar ist. Diese Unsicherheit wird als Fundamentalvariabilität bezeichnet. Selbst bei perfekter Durchmischung werden die Gehalte in den Proben nicht identisch sein, wenn die einzelnen Partikel in der Grundgesamtheit nicht völlig identische Konzentrationen haben. Die Fundamentalvariabilität beschreibt jene zusätzliche Variabilität der Analysenergebnisse, die daraus resultiert, dass die Analytkonzentration von Partikel zu Partikel variieren kann. Zu beachten gilt, dass die Fundamentalvariabilität unter Umständen zweimal wirken kann. Zum einen während der Probenahme bei der Entnahme der Einzelproben, und zum anderen bei der Gewinnung der Analysenprobe aus der Laborprobe.

Die Probenvorbereitung und -aufbereitung des Untersuchungsmaterials erfolgt innerhalb des Labors und kann auch als Teil der analytischen Messunsicherheit bestimmt werden.

Für die vorgeschlagenen Messunsicherheitskomponenten wurde weiterhin ein Ansatz zu deren Berechnung erarbeitet. Im Bodenschutz müsste die Messunsicherheit nicht zwingende von In-house Validierungsversuchen abgeleitet werden, wie es die CD 2002/657 vorgibt, sondern von Ringversuchsdaten, theoretischen Berechnungen und der Variabilität der Einzelanalysen. Jedoch besteht auch immer die Möglichkeit Messunsicherheiten aus Validierungsversuchen zu nutzen oder anhand experimenteller Untersuchungen zu bestimmen und in die Bewertung einzubeziehen.

Der analytische Fehler kann aus einem Messunsicherheitsmodell abgeschätzt werden, das eine konzentrationsabhängige Zerlegung der Varianz in einen konstanten und proportionalen Fehleranteil berücksichtigt. Die diesem Ansatz zugrundeliegenden statistischen Grundlagen zur Ermittlung der Messunsicherheit sind in Uhlig et al. (2015)[1] dargestellt. Die Unsicherheit aus der Probennahmedurchführung, Probenverpackung (ggf. Probenkonservierung) und dem Probentransport könnte durch Ringversuche ermittelt werden. Die Fundamentalvariabilität und räumliche Heterogenität könnte zum einen anhand von Modellrechnungen und zum anderen anhand spezifischer Versuchsdesigns ermittelt werden.

Im nächsten Schritt wurden Bewertungsregeln und Vorgehensweisen zur Feststellung einer Prüf- oder Maßnahmenwertüberschreitung erarbeitet. Das vorgeschlagene Vorgehen zur Feststellung einer Prüfwertüberschreitung ist wie folgt:

Für die Feststellung einer Prüfwertüberschreitung werden zwei Vorgehensweisen vorgeschlagen. Die Feststellung erfolgt entweder auf Basis des jeweiligen Messunsicherheitsbereiches eines Analysenergebnisses oder auf Basis seiner Indizienkraft. Beide Vorgehensweisen sind gleichwertig; allerdings ermöglicht die Bestimmung der Indizienkraft eine weitergehende Bewertung auch unter Einbeziehung anderer Informationen.

Bei der Berechnung des Messunsicherheitsbereichs eines Analysenergebnisses werden alle sechs beschriebenen Messunsicherheitskomponenten berücksichtigt. Die resultierende Unsicherheit wird als Ergebnisunsicherheit bezeichnet. Sie bildet die Basis für die Bewertung, ob das Analysenergebnis den Prüfwert überschreitet oder nicht.

Es sei an dieser Stelle angemerkt, dass prinzipiell auch die Möglichkeit besteht, nicht alle sechs Messunsicherheitskomponenten bei der Bewertung einer Prüfwertüberschreitung heranzuziehen. Dies sollte in Abhängigkeit der spezifischen Fragestellung genau abgewägt werden.

Damit die Überschreitung eines Prüfwertes als hinreichend nachgewiesen gelten kann, muss der Messunsicherheitsbereich für das Analysenresultat vollständig oberhalb des Prüfwertes liegen. Wenn der Messunsicherheitsbereich für das Analysenresultat nicht vollständig oberhalb des Prüfwertes liegt, muss zugleich geprüft werden, ob der Messunsicherheitsbereich vollständig unterhalb einer Maximalgrenze liegt. Wenn der Messunsicherheitsbereich sowohl mit dem Prüfwert als auch mit der Maximalgrenze überlappt, erlaubt das Analysenresultat keine abgesicherte Bewertung, weil der Messunsicherheitsbereich größer ausfällt als akzeptabel.

Im Rahmen des FuE-Projektes wurde hinsichtlich der Maximalgrenze folgender Vorschlag erarbeitet: Für Kinderspielflächen und Flächen ab 10 Hektar wird als Maximalgrenze zunächst der dreifache Prüfwert vorgeschlagen, ansonsten der vierfache Prüfwert.

Eine andere Möglichkeit der Bewertung einer Prüfwertüberschreitung basiert auf der Indizienkraft. Die Indizienkraft ergibt sich daraus, wie plausibel das Analysenergebnis unter der Annahme ist, dass der wahre Kontaminationswert der Verdachtsfläche unter dem Prüfwert liegt. Ist das Analysenergebnis weit unterhalb des Prüfwertes, besteht kein Grund für die Annahme, dass der Prüfwert überschrit-

[1] http://www.umweltbundesamt.de/sites/default/files/medien/359/dokumente/messunsicherheit-bbodschv.pdf

ten ist. In diesem Falle liegt die Indizienkraft bei 0. Ist das Analysenergebnis weit oberhalb des Prüfwertes, spricht alles dafür, dass der Prüfwert überschritten ist. In diesem Falle liegt die Indizienkraft bei 1. Eine Indizienkraft von 0,95 bedeutet, dass der Messunsicherheitsbereich für das Analysenresultat vollständig oberhalb des Prüfwertes liegt.

Für die Feststellung einer Maßnahmenwertüberschreitung werden ähnlich wie für den Prüfwert zwei Vorgehensweisen vorgeschlagen. Entweder erfolgt die Feststellung auf Basis des jeweiligen Messunsicherheitsbereiches eines Analysenergebnisses oder auf Basis seiner Indizienkraft.

Auch hier werden bei der Berechnung des Messunsicherheitsbereichs eines Analysenergebnisses alle sechs Messunsicherheitskomponenten berücksichtigt. Die resultierende Ergebnisunsicherheit bildet die Basis für die Bewertung, ob das Analysenergebnis den Maßnahmenwert überschreitet oder nicht. Auch hier besteht prinzipiell die Möglichkeit, nicht alle sechs Messunsicherheitskomponenten bei der Bewertung einer Maßnahmenwertüberschreitung heranzuziehen.

Das Vorgehen zur Feststellung einer Maßnahmenwertüberschreitung erfolgt analog zu dem Vorgehen bei Prüfwerten. Jedoch wurde für Maßnahmenwerte ein Vorschlag erarbeitet, der vorsieht, dass die Maximalgrenze beim zweifachen Maßnahmenwert liegt.

Ebenfalls wie die Bewertung in Hinblick auf eine Prüfwertüberschreitung kann die Bewertung im Hinblick auf eine Maßnahmenwertüberschreitung auch anhand der „Indizienkraft“ erfolgen.

Das erarbeitete Konzept zur Berücksichtigung der Messunsicherheit im Rahmen des Vollzugs der BBodSchV wurde im letzten Projektabschnitt in eine Handlungsanleitung für den Vollzug der BBodSchV umgesetzt. Die Handlungsanleitung erklärt prägnant und präzise das Vorgehen bei der Bewertung von Messergebnissen im Hinblick auf eine Überschreitung von Prüf- und Maßnahmenwerten.

Zur potentiellen Unterstützung der Vollzugsbehörden wurde neben der Handlungsanleitung ein Konzept für ein Berechnungsprogramm zur Ermittlung der Messunsicherheit erarbeitet. Die Messunsicherheit kann somit beispielsweise in Abhängigkeit des Untersuchungsparameters, der Eigenschaften der Bodenproben, dem Probennahmeverfahren, dem Verfahren der Probenvorbehandlung sowie -aufbereitung und dem Analysenverfahren ermittelt werden. Unter Berücksichtigung der Gesamtmessunsicherheit erfolgt die Ausgabe des Bewertungsergebnisses.

Die Ergebnisse des FuE-Vorhabens sowie der Entwurf der Handlungsanleitung werden in einem Abschlussworkshop, der für den 26. September 2017 in Dessau-Roßlau am Umweltbundesamt geplant ist, mit Vertretern des UBA, BMUB, FBU, Bund- Länder Arbeitsgruppen LABO, LAGA sowie Vollzugsbehörden des Bodenschutzes und der Industrie diskutiert. Auf Basis des Abschlussgespräches erfolgt die Finalisierung der Handlungsanleitung.

Summary

The aim of the R&D project was the development of a concept for considering the measurement uncertainty in the context of the implementation of the Federal Soil Protection and Contaminated Sites Ordinance (Bundes-Bodenschutz- und Altlastenverordnung – BBodSchV). Based on that, an instruction for the named implementation was to be developed, which explains and phrases the procedure for the assessment of measurement results with regard to exceedance of test and action thresholds.

The initial step of this project was an inquiry of how measurement uncertainty during assessment of analysis results is taken into account in other national and international laws, decrees and regulations. In this inquiry, three approaches could be identified: (1) Measurement uncertainty is ignored, (2) measurement uncertainty is considered using specified tolerances, or (3) measurement uncertainty is determined and accounted for based on statistically sound methods. With regard to the risk of an incorrect decision (false positive and false negative results), only approach (3) allows for exact quantification, while for approach (2) the given tolerance can differ significantly from the true total measurement uncertainty. However, transferring this approach (3) to actual implementation implies that a determination of measurement uncertainty is necessary, whereas for approach (1) and (2) it is sufficient to compare the measurement results to threshold values, and, if applicable, to tolerances.

In a second step, a concept for considering the measurement uncertainty in the context of the implementation of the BBodSchV was developed which is based on approach (3). In more detail, the approach defined in the Commission Decision 2002/657 EC was taken as a basis and adapted to the requirements of the BBodSchV.

Regarding the measurement uncertainty components, we recommend the determination of six contributions to the measurement uncertainty: (1) spatial heterogeneity, (2) systematic deviations during sampling, (3) random deviations during sampling, (4) fundamental variability, (5) systematic deviations of the analysis method, and (6) random analytical deviations. These six contributions to the measurement uncertainty comprise all contributions demanded by the German Accreditation Body GmbH (DAkkS) and consider their total effect within the total measurement uncertainty.

Spatial heterogeneity reflects that contaminant loads are not distributed equally among a land area. Within a land area one can find spots with higher or lower contaminant load.

Sampling uncertainty considers systematic and random variation of the content of the examination parameters. The investigation procedure including steps until handing over the samples to the analyzing laboratory comprises several sources of measurement uncertainty due to sampling procedures, sample packaging, sample preservation (where applicable), and transport, which can lead to deviations between the true level in the examined population and the analysis results of the drawn samples.

When drawing of samples is repeated at the same position, this unavoidably yields different values, even if analytical uncertainty is negligible. This uncertainty is called fundamental variability. Even in the case of perfect mixing, the contaminant content in the samples will not be identical, as long as the single particles in the population are not present in exactly identical concentrations. Fundamental variability describes this additional variability of analysis results which is caused by the fact that analyte concentrations can vary between particles. It has to be noted that fundamental variability might be effective twice under certain circumstances: Firstly, during the sampling process when drawing the individual samples, and secondly, during preparation of the analysis sample from the initial laboratory sample (mix of individual samples).

Sample preparation and processing of the sample material is carried out within the laboratory and can also be determined as a component of the analytical measurement uncertainty.

Furthermore, an approach for the calculations of the suggested contributions of measurement uncertainty was developed. With regard to soil protection, deduction of measurement uncertainty from in-house validation experiments as specified by CD 2002/657 is not compulsory, but it could be derived from inter-laboratory comparisons, theoretical calculations and the variability during single analyses. However, there is always the opportunity to take advantage of measurement uncertainties found in validation experiments, or to determine measurement uncertainties within experimental investigations, and to integrate these findings into the assessment.

The analytical error can be estimated from a measurement uncertainty model which considers the concentration-dependent decomposition of variance into a constant and a proportional error component. The statistical bases for this approach are described in Uhlig et al. (2015)[2]. The uncertainty arising from sampling, sample packaging (sample preservation, if applicable) and sample transport could be determined by inter-laboratory testing. Fundamental variability and spatial heterogeneity could be determined using numerical modelling on the one hand, and applying specific experimental designs on the other hand.

In a next step, rules for assessment and procedures for the determination of an exceedance of test or action thresholds were developed. We suggest the following two procedures: The determination of exceedance is made either on the basis of the measurement uncertainty range of an analysis result or on the basis of its evidence level. Both approaches are equivalent, but the determination of the evidence level allows an assessment taking into account further information.

When calculating the measurement uncertainty, all six described measurement uncertainty components are taken into account. The resulting uncertainty is called the result uncertainty. It is the basis for the evaluation whether the analysis result exceeds the examination threshold or not.

It should be noted that there is also the possibility of not using all six measurement uncertainty components when evaluating exceedance of test or action thresholds. This should be carefully considered depending on the specific question.

To ensure that an examination threshold is exceeded, the measurement uncertainty range for the analysis result must be completely above the examination threshold. If the measurement uncertainty range for the analysis result is not completely above the examination threshold, it must be checked whether the measurement uncertainty range is completely below a maximum limit. If the measurement uncertainty range overlaps both the examination threshold and the maximum limit, the analysis result does not allow a reliable assessment because the measurement uncertainty range is too large.

Within this R&D project, the following proposal has been developed with regard to the maximum limit: for children's playgrounds and areas over 10 hectares, the three-fold examination threshold is suggested as the maximum limit, otherwise the four-fold examination threshold.

Another possibility of assessment is based on the evidence level. The evidence level reflects how plausible the analysis result is under the assumption that the true contamination value of the suspect area is below the examination threshold. If the analysis result is well below the examination threshold, there is no reason to assume that the examination threshold has been exceeded. In this case, the evidence level is 0.

If the analysis result is far above the evidence level threshold, it indicates that the examination threshold is exceeded. In this case, the evidence level is 1. An evidence level of 0,95 means that the measurement uncertainty range for the analysis result is completely above the examination threshold.

[2] http://www.umweltbundesamt.de/sites/default/files/medien/359/dokumente/messunsicherheit-bbodschv.pdf

In order to determine an exceedance of action thresholds, two approaches are proposed similar to the examination threshold. Either the determination is made on the basis of the respective measurement uncertainty range of an analysis result or on the basis of its evidence level.

Again, all six measurement uncertainty components are taken into account when calculating the measurement uncertainty range of an analysis result. The resulting uncertainty is the basis for the assessment whether the analysis result exceeds the action threshold or not. Again, there is the possibility of not using all six measurement uncertainty components when evaluating an exceedance of the action threshold.

The procedure for determining the exceedance of an action threshold is performed in the same way as the procedure for examination thresholds. The proposal for the maximum limit is the two-fold action threshold.

Similar to examination thresholds, the evaluation of an exceedance can also be done based on the evidence level.

The developed concept for considering the measurement uncertainty in the context of the implementation of the BBodSchV

In the last project phase, the developed concept for considering the measurement uncertainty in the context of the implementation of the BBodSchV was implemented in an instruction manual. The manual explains and phrases the procedure for the assessment of measurement results with regard to exceedance of guidance and intervention values.

In addition to the instruction manual, a concept for a web tool for the calculation of the measurement uncertainty was developed, with the aim to support the enforcement authorities during the decision process. With the web tool, the measurement uncertainty can be determined, for example as a function of the analyte, the properties of the soil samples, the sampling method, the method of sample pretreatment and preparation and the analytical method. Finally, the assessment result is obtained taken into account the total uncertainty.

The results of the R&D project as well as the draft of the instruction manual will be discussed in a final workshop, which is planned for September 26, 2017 in Dessau-Roßlau at the Umweltbundesamt. The results will be discussed with participants from UBA, BMUB, FBU, Bund- Länder Arbeitsgruppen LABO, LAGA as well as enforcement authorities of soil protection and industry. On the basis of the final discussion, the instruction manual will be finalized.

1 Aufgabenstellung

Im Anhang 2 der Bundes-Bodenschutz- und Altlastenverordnung (BBodSchV) sind bundeseinheitlich festgesetzte Prüf- und Maßnahmenwerte angegeben. Die Werte sind spezifisch für den Schadstoff, den Wirkungspfad (Boden-Mensch, Boden-Pflanze und Boden-Grundwasser) und die Nutzung der Fläche festgelegt.

Die Bewertung, ob festgelegte Werte eingehalten werden oder nicht, erfolgt auf Basis chemischer Analysen. Die Analysenergebnisse chemischer Analysen sind mit einer hohen Messunsicherheit behaftet, da z.B. die Untersuchung von Bodenproben meist sehr aufwendige Verfahren zur Probenahme, Probenvorbehandlung, Probenvorbereitung und chemisch-analytischer Bestimmung erfordern und jedes Verfahren mit unvermeidbaren systematischen und zufälligen Fehlern einhergeht.

Wie mit dieser Messunsicherheit umgegangen wird, kann für die Bewertung von Messergebnissen hinsichtlich der Überschreitung von Prüf- oder Maßnahmenwerten von großer Bedeutung sein. In Anhang 1, Abschnitt 4.2 (Qualitätssicherung - Probenvorbehandlung und Analytik) der BBodSchV wird zwar gefordert, dass „für das Analysenergebnis (…) eine Messunsicherheit (…) anzugeben [ist]“. Gleichwohl ist aus Sicht des Vollzugs der BBodSchV zurzeit kein einheitliches Vorgehen geregelt; es ist unklar, wie die Messunsicherheit bei der Bewertung von Messergebnissen zu berücksichtigen ist.

Im Rahmen dieses FuE-Vorhabens sollte – basierend auf einer vergleichenden Bewertung von Konzepten zur Berücksichtigung der Messunsicherheit in anderen Rechtbereichen des BMUB und des BMEL sowie in nationalen und internationalen Regelungen – ein Konzept zur Berücksichtigung der Messunsicherheit im Rahmen des Vollzugs der BBodSchV erarbeitet werden. Weiterhin sollte eine Handlungsanleitung für den Vollzug der BBodSchV erstellt werden, die das Vorgehen bei der Bewertung von Messergebnissen im Hinblick auf eine Überschreitung von Prüf- und Maßnahmenwerte prägnant erklärt und formuliert. Die Vorgehensweise soll sowohl aus naturwissenschaftlicher als auch juristischer Sicht abgesichert sein.

Die Erstellung der Handlungsanleitung erfolgte in Abstimmung mit dem Fachbeirat für Bodenuntersuchungen beim Umweltbundesamt (FBU) und berücksichtigt die vom FBU veröffentlichten Dokumente zur Messunsicherheit.

2 Planung und Ablauf des Vorhabens

Das Vorhaben gliederte sich in folgende drei Arbeitspakete:

Arbeitspaket A: Zusammenstellung und vergleichende Bewertung von Konzepten zur Berücksichtigung der Messunsicherheit in Analytik und Probenahme

A1 Ausarbeitung einer beschreibenden Darstellung des Umgangs mit der Messunsicherheit in anderen Rechtsbereichen des BMUB und des BMEL sowie in internationalen, für die Bundesrepublik Deutschland verbindlichen Entscheidungen und Festlegungen.

A2 Vergleichende Bewertung der in A1 beschriebenen Vorgehensweisen aus statistischem und juristischem Blickwinkel.

A3 Durchführung eines Workshops/Fachgespräch mit dem Fachbeirat für Bodenuntersuchungen.

Arbeitspaket B: Erarbeitung von Konzepten zur Berücksichtigung der Messunsicherheit im Rahmen des Vollzugs der BBodSchV

B1 Ausarbeitung alternativer Optionen für die Berücksichtigung der Messunsicherheit

B2 Vergleichende Gegenüberstellung der in B1 beschriebenen Vorgehensweisen aus statistischem und juristischem Blickwinkel.

B3 Durchführung eines Workshops/Fachgespräch mit dem Fachbeirat für Bodenuntersuchungen

Arbeitspaket C: Erarbeitung einer Handlungsanleitung für den Vollzug

C1 Spezifizierung der im Arbeitspaket B3 empfohlenen 1-2 Vorgehensweisen

C2 Ausarbeitung einer Handlungsanleitung zur Nutzung in nachgeordneten Bodenschutzbehörden für jede der in C1 spezifizierten Vorgehensweisen.

C3 Durchführung eines Workshops/Fachgespräch mit dem Fachbeirat für Bodenuntersuchungen und eines Abschlussworkshops

- Präsentation der Ergebnisse und des Entwurfs der Handlungsanleitung in Rahmen eines Fachgesprächs mit dem Fachbeirat für Bodenuntersuchungen
- Durchführung eines Workshops unter Einbeziehung des UBA, BMUB, FBU, Bund-Länder-Arbeitsgruppen LABO, LAGA, Vollzugsbehörden des Bodenschutzes und Industrie.

Das FuE-Vorhaben wurde durch QuoData als Forschungsnehmer und durch die Unterauftragnehmer

- Dr. Frank Küchler – wissenschaftlicher Berater Probenahme und
- Dr. Achim Willand und Dr. Georg Buchholz – juristische Berater, Anwaltskanzlei Gaßner, Groth, Siederer & Coll bearbeitet.

Die Fachgespräche mit dem Fachbeirat für Bodenuntersuchungen (FBU) werden bzw. wurden wie vorgesehen als Teil der Arbeitspakete durchgeführt. Ergebnisse des FuE-Vorhabens wurden dem Fachbeirat für Bodenuntersuchungen am 17./18.02.2016 und am 24.2.2017 vorgestellt. Die Vortragsfolien sind als Anlage zum Abschlussbericht angefügt (siehe Abschnitt 7.1).

Die rechtliche Bewertung des fachlichen Konzepts, insbesondere die Überprüfung der Übereinstimmung mit den Zielen und Wertungen des Bodenschutzrechts und des Verwaltungsrechts sowie ggf. erforderliche Änderungen in der BBodSchV zur Umsetzung des Konzepts, ist in einem gesonderten Kapitel dargestellt.

Die Konzeption sowie das Programm für den Abschlussworkshop in Dessau-Roßlau am Umweltbundesamt (Arbeitspaket C3) sind vorbereitet. Die Handlungsanleitung wird präsentiert und mit Vertretern des UBA, BMUB, FBU, Bund- Länder Arbeitsgruppen LABO, LAGA sowie Vollzugsbehörden des Bodenschutzes und der Industrie diskutiert und anschließend finalisiert.

3 Zusammenstellung und vergleichende Bewertung von Konzepten zur Berücksichtigung der Messunsicherheit

3.1 Beschreibende Darstellung des Umgangs mit der Messunsicherheit in anderen Rechtsbereichen

Das Projekt startete mit der Recherche, wie in anderen nationalen und internationalen Gesetzen, Verordnungen und Regelwerken die Messunsicherheit bei der Bewertung von Analysenergebnissen berücksichtigt wird. Es wurden Regelungssysteme mit vergleichbaren Schutzgütern und Wirkungspfaden ausgewertet. Die einbezogenen Dokumente und ein systematischer Überblick, ob und in welcher Weise Messunsicherheit explizit oder erkennbar implizit in den einschlägigen Regelungen berücksichtigt wird, ist Kapitel in 3.1.1 zusammengefasst.

Verwendung, Herleitung, Interpretation und Terminologie von Grenzwerten sind in den unterschiedlichen Regelwerken oft nicht vergleichbar. Daher wird in Abschnitt 3.1.2 ein mathematisch-statistischer Rahmen zur Beurteilung von Grenzwerten bereitgestellt.

Das Risiko einer Fehlentscheidung (falsch-negative oder falsch-positive Entscheidung) ist in der Regel aufgrund der Messunsicherheit unvermeidbar. Die Konsequenzen einer Fehlentscheidung sind daher maßgeblich für die Festlegung der Vorgehensweise zum Umgang mit der Messunsicherheit. Hierzu erfolgt in einem separaten Abschnitt im Anhang 7.2.2 eine vergleichende Darstellung der Folgen fehlerhafter Bewertungen.

Jedes Analysenergebnis ist einer Messunsicherheit unterworfen, die von ganz unterschiedlichen Unsicherheitsfaktoren und Abweichungen herrühren kann, sowohl bei der Analytik als auch bei Probenahme und Probenvorbereitung. Im Abschnitt 3.1.3 werden die einzelnen Messunsicherheitskomponenten dargestellt, die im Prozess vom Verdacht einer Bodenverunreinigung bis zur analytischen Untersuchung relevant sein können.

3.1.1 Recherche zum Umgang mit der Messunsicherheit in anderen nationalen und internationalen Verordnungen, Normen und Richtlinien

In etlichen Rechtsbereichen des BMUB und des BMEL basieren Entscheidungen auf den Ergebnissen physikalischer, chemischer oder biologischer Untersuchungsverfahren. Da derartige - quantitative wie qualitative - Verfahren generell fehlerbehaftet sind, stellt sich die Frage, wie in den betreffenden Rechtsbereichen mit der daraus resultierenden Messunsicherheit umgegangen wird. Nur in wenigen Rechtsbereichen wird die Messunsicherheit erwähnt, doch auch wenn dies nicht der Fall ist, wird vielfach den Erfordernissen der Messunsicherheit in der einen oder anderen Weise Rechnung getragen, etwa indem bei grenzwertigen Ergebnissen ein Unsicherheitsbereich berücksichtigt wird, ein mehrstufiges Untersuchungsverfahren zum Einsatz kommt oder ggf. Doppel- oder Mehrfachbestimmungen gefordert werden.

Um den sehr unterschiedlichen Umgangsweisen mit der Messunsicherheit gerecht zu werden, erfolgte eine beschreibende Darstellung des Umgangs mit der Messunsicherheit in Rechtsbereichen des BMUB und des BMEL sowie in internationalen, für die Bundesrepublik Deutschland verbindlichen Entscheidungen und Festlegungen erfolgen.

3.1.1.1 Vorgehensweisen zur Behandlung der Messunsicherheit in den recherchierten Verordnungen

In Tabelle 1 sind alle Verordnungen, Normen und Richtlinien zusammengefasst, die bei der Recherche berücksichtigt wurden.

Tabelle 1: Übersicht der recherchierten Verordnungen, Normen und Richtlinien.

Bereich	Verordnung/Norm/Richtlinie	Status
BMUB	Bundes-Bodenschutz- und Altlastenverordnung (BBodSchV)	x
	Klärschlammverordnung (AbfKlärV)	x
	Bioabfallverordnung (BioAbfV)	x
	Deponieverordnung (DepV)	x
	Altölverordnung (AltölV)	x
	Grundwasserverordnung (GrwV)	x
	Düngemittelverordnung (DüMV)	x
	Abwasserverordnung (AbwV)	x
	Chemikalien-Verbotsverordnung (ChemVerbotsV)	x
	Trinkwasserverordnung (TrinkwV)	x
	ISO 17994 (Gleichwertigkeit mikrobiologischer Verfahren)	x
	LAGA-Methodensammlung Abfalluntersuchung	x
	Oberflächengewässerverordnung (OgewV)	x
	Kreislaufwirtschaftsgesetz	x (k.R.)
	Verordnung über das Europäische Abfallverzeichnis (AVV)	x (k.R.)
	Gewerbeabfallverordnung (GewAbfV)	x (k.R.)
	Verordnung (EG) Nr. 850/2004 über persistente organische Schadstoffe	x (k.R.)
	(EU-POP Verordnung)	x (k.R.)
	Bundes-Immissionsschutzgesetz (BImSchG)	x (k.R.)
	Verordnung (EG) Nr. 1907/2006 (REACH, EU-Chemikalienverordnung)	x (k.R.)
	Gefahrenstoffverordnung (GefStoffV)	x (k.R.)
	Abwasserabgabengesetz (AbwAG)	x (k.R.)
BMEL	Lebensmittel- und Futtermittelgesetzbuch (LFGB) Verordnungen (EG) Nr. 1881/2006, 882/2004, 333/2007, 589/2014, 152/2009	x
	CD 2002/657/EC zur Umsetzung der Richtlinie 96/23/EG	x
	ISO 16140 (Mikrobiologie von Lebensmitteln und Futtermitteln – Verfahrens-validierung)	x
	Rückstands-Höchstmengenverordnung (RHmV) ersetzt durch Verordnung (EU) 396/2005	x
	Verordnung EG Nr. 2073/2005 über mikrobiologische Kriterien für Lebensmit-tel	x
	ISO 3951 (Verfahren für die Stichprobenprüfung)	x
	Codex Alimentarius	x

x = Verordnung / Norm / Richtlinien recherchiert
k.R. = keine relevanten Informationen enthalten in Bezug auf die Bewertung des Analysenergebnisses im Vergleich mit einem „Grenzwert“

Zunächst wurde für jede Verordnung, Norm oder Richtlinie ein Datenblatt erstellt, das alle relevanten Informationen zur Berücksichtigung der Messunsicherheit zusammenträgt. Darauf basierend wurde

das Vorgehen, wie die Messunsicherheit bei der Bewertung des Analysenergebnisses hinsichtlich des Über- oder Unterschreitens der festgelegten Grenzwerte berücksichtigt wird, weiter kategorisiert. Die Messunsicherheit wird

1. entweder ignoriert
2. oder mittels vorgegebener Toleranzwerte berücksichtigt
3. oder mittels statistisch abgesicherter Verfahren ermittelt und berücksichtigt.

Welche Vorgehensweise in welcher Verordnung die Grundlage bildet, ist in Tabelle 2 zusammengefasst.

Tabelle 2: Vorgehensweisen zur Behandlung der Messunsicherheit im Rahmen der Messwertbewertung in den recherchierten Verordnungen.

Vorgehens-weise	Berück-sichtigung der MU?	Verordnungen	Bewertung Bewertungsgrenze Ab welchem Analysenwert liegt eine Grenzwert-überschreitung vor?	Im Ermessen der Behörde?
1	nein	BBodSchV, DüMV, BioAbfV*, DepV*, GrwV, OGewV	> Grenzwert	ja
		VO (EG) Nr. 396/20051), VO (EG) Nr. 2073/20052), ChemVerbotsV*		nein
2	ja, vorgegeben	BioAbfV*, DepV*, AltölV*, ChemVerbotsV*, AbfKlärV	> Grenzwert + vorgegebene Toleranz	nein
		TrinkwV, AbwV	> Grenzwert beinhaltet MU	nein
3	ja, berechnet	CD 2002/657 EC, LFGB mit relevanten EU-Verordnungen, ISO 3951, Codex Alimentarius, AltölV*	> Grenzwert + MU	nein
		ISO 17994, ISO 16140	> Grenzwert - MU	nein
		LAGA Methodensammlung		ja

*) parameterabhängig
1) Höchstgehalte an Pestizidrückständen in oder auf Lebens- und Futtermitteln
2) mikrobiologische Kriterien für Lebensmittel

Wir weisen darauf hin, dass sich diese recherchierten Vorgehensweisen auf die Inhalte und Forderungen der Verordnungen beziehen. Deren Umsetzung im Vollzug kann differieren.

Eine tabellarische Zusammenfassung der Rechercheergebnisse findet sich ergänzend in Anhang 7.2.1.

3.1.1.2 Vorgehensweise 1: Messunsicherheit wird ignoriert

Die Messunsicherheit wird bei der Messwertbewertung nicht berücksichtigt. Das Ergebnis einer Analyse gilt als positiv, wenn der Grenzwert überschritten ist. Jedoch kann im Einzelfall die zuständige Behörde entscheiden (z.B. für BBodSchV, DüMV, GrwV, AbfKlärV), ob und welche weiteren Maßnahmen eingeleitet werden. In diesem Fall stellt die Bewertung des Analysenergebnisses mit dem Grenzwert nur einen von mehreren Faktoren in dem ganzen Entscheidungsprozess dar.

Es soll nochmal betont werden, dass die Bundes-Bodenschutz- und Altlastenverordnung keine expliziten Vorgaben hinsichtlich der Messunsicherheit zur Bewertung des Ergebnisses macht, obgleich sie die Angabe der Messunsicherheit für jedes Analysenergebnis fordert (Anh. 1 Ziff. 4.2 BBodSchV).

3.1.1.3 Vorgehensweise 2: Messunsicherheit wird mittels Toleranzen berücksichtigt

Zusätzlich zur Festlegung des Grenzwertes gibt es eine Festlegung eines Toleranzwertes in Abhängigkeit vom Analyt und der Matrix. Der Gesetzgeber gibt die Toleranzwerte vor. Das Ergebnis einer Analyse gilt als positiv, wenn der Prüfwert plus der Toleranz überschritten ist.

Dieser Vorgehensweise folgen auch Verordnungen, in denen die festgelegten Grenzwerte bereits die relevanten Messunsicherheitsgrößen (z.B. Probenahme, Probenvorbereitung, Analyse) beinhalten.

Die Bundes-Bodenschutz- und Altlastenverordnung könnte auch dieser Vorgehensweise zugeordnet werden. Bei der Ableitung der Prüf- und Maßnahmenwerte (gemäß des vom 28. August 1999 veröffentlichten Bundesanzeigers Nr. 161a) werden Sicherheitsfaktoren eingerechnet, um die Exposition für empfindliche Personengruppe abzuschätzen. Diese Sicherheitsfaktoren können streng genommen als (Mess)unsicherheiten aufgefasst werden, d.h. die Zahlenwerte der Prüfwerte beinhalten bereits (Mess)unsicherheiten. Gleichwohl handelt es sich bei diesen Messunsicherheiten nicht um Unsicherheiten, die aus dem Verfahren der Probenahme, Probenvorbehandlung oder Analytik resultieren. Für detaillierte Ausführungen in Bezug auf Methoden und Maßstäbe zur Ableitung der Prüf- und Maßnahmenwerte der BBodSchV sei auf die im Bundesanzeiger Nr. 161a vorgegebene Verfahrensweise verwiesen.

3.1.1.4 Vorgehensweise 3: Messunsicherheit wird berücksichtigt und mittels statistisch abgesicherter Verfahren ermittelt

Bei 5 von 8 Verordnungen gilt das Ergebnis einer Analyse als positiv, wenn jene Konzentration überschritten ist, über die mit einer hohen statistischen Sicherheit festgestellt werden kann, dass der zulässige Grenzwert tatsächlich überschritten worden ist. Die Bewertungsgrenze ist somit der Grenzwert zuzüglich der Messunsicherheit, wobei die Messunsicherheit alle relevanten Einflussgrößen berücksichtigt. In diesem Fall muss dem Überwachten/Eigentümer/Produzenten die Überschreitung des Grenzwerts mit hoher Sicherheit nachgewiesen werden.

Bei 3 von 8 Verordnungen gilt das Ergebnis einer Analyse als positiv, wenn das Analysenergebnis abzüglich der Messunsicherheit den zulässigen Grenzwert überschreitet. Die Bewertungsgrenze ist somit der Grenzwert minus die Messunsicherheit. In diesem Fall hat der Überwachte/Eigentümer/ Produzent die Beweispflicht, dass sein Eigentum/Produkt die festgelegten Grenzwerte einhält.

3.1.1.5 Darstellung der verschiedenen Vorgehensweisen als Baum

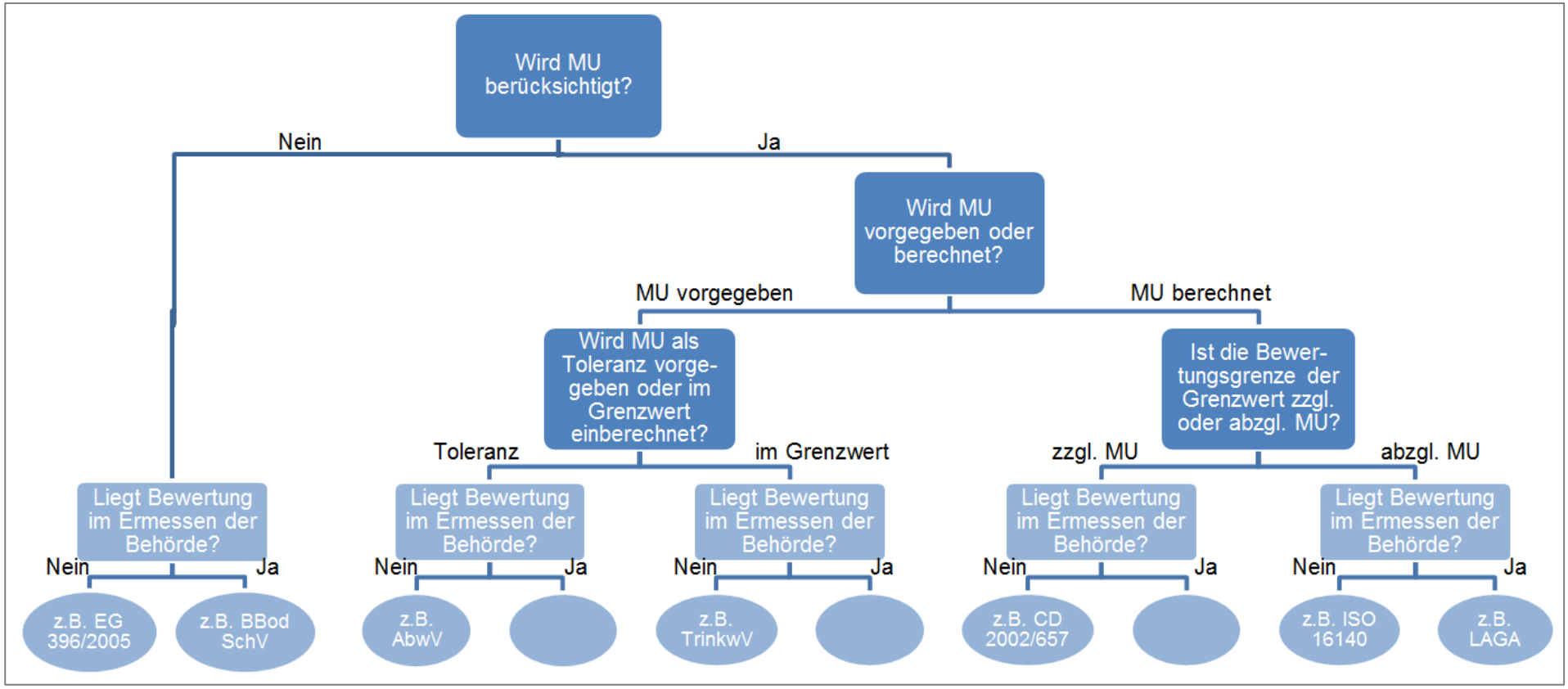
Neben der tabellarischen Übersicht (Tabelle 2) bietet sich auch eine Baumstruktur an, um die verschiedenen Vorgehensweisen abzubilden. Die Struktur kann auch genutzt werden, um andere Verordnungen einordnen zu können. Die Hierarchie ergibt sich dabei aus den Fragen,

- ob die Messunsicherheit berücksichtigt wird,
- falls ja, ob die Messunsicherheit vorgegeben oder berechnet wird und
- wie die Messunsicherheit berücksichtigt wird.

Um zu den Blättern des Baumes zu gelangen, stellt sich in jedem Ast die Frage, ob die Bewertung im Ermessen der Behörde liegt, d.h. ob es einen Ermessensspielraum gibt.

In den Blättern des Baumes sind jeweils, wenn bekannt, Beispiele für Verordnungen aufgeführt, die diese Vorgehensweise anwenden (Abbildung 1).

Abbildung 1: Darstellung verschiedener Vorgehensweisen bei der Berücksichtigung der Messunsicherheit.



3.1.2 Exkurs: Ein mathematisch-statistischer Rahmen zur Klassifizierung und Charakterisierung der verschiedenen Grenzwerte

3.1.2.1 Einleitung

Verwendung, Herleitung, Interpretation und Terminologie von Grenzwerten sind sehr vielgestaltig. Festzuhalten ist zunächst, dass die Kenntnis eines Grenzwerts allein noch keine Möglichkeit bietet, einen Messwert auf Basis einer Laborprobe zu bewerten. Hierzu erforderlich ist die genaue Kenntnis der Regel, mit der die Bewertung – auf Basis des Messergebnisses und des Grenzwertes - letztlich erfolgt. Ergebnis dieser Bewertung ist letztlich ein „Ja“ oder ein „Nein“. Ein „Ja“ bedeutet, dass der Grenzwert überschritten wurde („positives Ergebnis“) und ein „Nein“, dass dies nicht der Fall ist („negatives Ergebnis“).

3.1.2.2 Bewertungsregeln und Qualitätsgrenzen

Institutionalisierte Bewertungsprozesse basieren auf formalisierten Bewertungsregeln mit entsprechenden Grenzwerten.

Diese Bewertungsregeln stellen sich aus dem Blickwinkel der daran beteiligten Parteien bzw. Akteure jeweils unterschiedlich dar. Bei binären, antagonistischen Entscheidungen sind die Interessen von mindestens zwei verschiedenen Akteuren zu berücksichtigen. Handelt es sich um die Nutzung einer Bodenfläche, z.B. Kinderspielfläche oder Parkanlage, ist Akteur 1 der Eigentümer, während Akteur 2 der Nutzer bzw. der Bürger ist. Handelt es sich um eine Warenlieferung oder ein Grundstück, welches den Besitzer wechseln soll, ist Akteur 1 der Verkäufer, Lieferant und/oder Produzent, während Akteur 2 der Käufer, Adressat und/oder Konsument ist. Akteur 1 oder 2 kann auch eine Behörde sein, die im Auftrag der Allgemeinheit handelt und zum Beispiel die Interessen der Gesamtheit der Konsumenten wahrt.

Perspektive und Blickwinkel dieser beiden Akteure ergeben sich aus ihren Handlungsmöglichkeiten. Akteur 1 wird bestrebt sein, den Verkauf ohne Störungen über die Bühne zu bringen, d.h. er wird bestrebt sein, die Grenzwerte einzuhalten. Dies bedeutet, er wird versuchen, im Produktionsprozess ein sehr gutes Qualitätsniveau zu erreichen, mit dem er nahezu sicher sein kann (z.B. mit einer Wahrscheinlichkeit von 95 %), dass der jeweilige Grenzwert eingehalten wird. Dieses Qualitätsniveau wird hier und im Folgenden mit QLα (Qualitätslimit bzw. -grenze α) bezeichnet. Ist Akteur 1 kein Produzent, sondern ein Lieferant, wird es ihm unter Umständen schwer fallen, ein solches Qualitätslimit QLα zu erreichen – es sei denn, er kontrolliert die gesamte Ware und sortiert schlechte Stücke aus. Handelt es sich bei Akteur 1 um einen Grundstücksbesitzer, kann er neue Kontaminationen der Fläche vermeiden; was jedoch Altlasten angeht, geht es ihm ähnlich wie einem Lieferanten. Gleichwohl kann er entsprechende Voruntersuchungen vornehmen, ggf. bekannte Altlasten entsorgen und damit sicherstellen, dass Grenzwerte nach Möglichkeit nicht überschritten werden.

Anzumerken ist an dieser Stelle, dass zwischen einer Warenlieferung und dem Verkauf/Nutzung eines Grundstücks noch weitere Unterschiede bestehen, etwa die, dass sich die formalisierte Bewertungsregel bei einer Lieferung immer auf das gesamte Batch bezieht, während bei der Untersuchung von Verdachtsflächen die Grenzwertbetrachtung zunächst jeweils getrennt für einzelne Proben vorgenommen wird, bevor dann – unter Berücksichtigung weiterer Aspekte – eine Gesamtentscheidung getroffen wird.

Auf der anderen Seite gibt es den Akteur 2, den Nutzer/Konsumenten/Käufer. Dieser Akteur möchte die Ware oder die Fläche nutzen, und er möchte sichergestellt wissen, dass das Kontaminationsniveau noch tolerierbar ist. Er kann nicht davon ausgehen, dass der Grenzwert generell eingehalten wurde – dies wurde ja für nur für eine Stichprobe überprüft. Er kann - aufgrund der Messunsicherheit von Probenahme und Analytik - noch nicht einmal davon ausgehen, dass der Grenzwert an den Probenahmestellen selbst eingehalten ist. Akteur 2 wird also zunächst einmal wissen wollen, wie hoch das tatsäch-

liche mittlere Kontaminationsniveau im „schlimmsten Falle“ ist. Dieses für Akteur 2 relevante Konzentrationsniveau wird im Folgenden mit QLβ (Qualitätslimit bzw. -grenze β) bezeichnet.

3.1.2.3 Wie wird in den Verordnungen zwischen Qualitätsgrenzen und Bewertungsregeln differenziert?

Von grundlegender Bedeutung bei der Analyse der Normen/Richtlinien/Verordnungen ist die Frage, ob darin eine Differenzierung zwischen Bewertungsregeln und Qualitätsgrenzen vorgenommen wird. Falls es eine Differenzierung gibt, ist es von Interesse, wie diese Unterscheidung aussieht.

Fall 1: Es gibt keine Unterscheidung. Es wird nur ein Wert genannt.

Die angegebenen Grenzwerte sind gleichzeitig Bewertungsregel und Aussagen zu Qualitätsgrenzen fehlen.

Beispiel: Bioabfallverordnung

- Für die Schwermetalle Cadmium und Quecksilber liegt eine Grenzwertüberschreitung vor, wenn das Analysenergebnis den entsprechenden Grenzwert übersteigt.

Fall 2: Es gibt eine Unterscheidung. Es ist nur die Bewertungsregel gegeben, jedoch nicht die Qualitätsgrenzen.

Bei den angegebenen Grenzwerten handelt es sich um Bewertungsregeln.

Beispiel: Trinkwasserverordnung

- Bei den festgelegten Werten sind die Messunsicherheiten der Analyse und Probenahmeverfahren berücksichtigt.
- Bewertungsregel: Analysenergebnis übersteigt den Grenzwert

Fall 3: Es gibt eine Unterscheidung. Die Qualitätsgrenze(n) ist/sind gegeben und ebenso die Bewertungsregel.

Beispiele: LFGB mit relevanten EU-Verordnungen

- Bewertungsregel: Falls das Analysenergebnis abzüglich der Messunsicherheit den Grenzwert überschreitet, liegt eine Grenzwertüberschreitung vor.
- Qualitätsgrenze QLα entspricht dem „Höchstgehalt“
- Qualitätsgrenze QLβ ist unbekannt

Klärschlammverordnung

- Bewertungsregel: Falls das Analysenergebnis den um einen vorgegebenen Toleranzwert (abhängig vom Analyt und Matrix) erhöhten Grenzwert überschreitet, liegt eine Grenzwertüberschreitung vor.
- Qualitätsgrenze QLα entspricht näherungsweise dem „Grenzwert“
- Qualitätsgrenze QLβ ist unbekannt

CD 657/2002

- Bewertungsregel: Falls das Analysenergebnis den CCα (Grenzwert zuzüglich der Messunsicherheit) überschreitet, liegt eine Grenzwertüberschreitung vor.
- Qualitätsgrenze QLα entspricht dem „MRL“ (Maximum Residue Limit) bei erlaubten Substanzen und 0 bei verbotenen Substanzen.

- Qualitätsgrenze QLβ darf ein festgelegtes “Minimum required performance limit” (MRPL) bzw. die “recommended concentration” oder das “regulatory limit” nicht überschreiten.

ISO 3951

- Bewertungsregel: Das Prüflos wird zurückgewiesen, wenn die Qualitätszahl

  (Mittelwert – Mindestwert) / Standardabweichung und

  (Höchstwert – Mittelwert) / Standardabweichung)

  kleiner dem tabellierten Annahmefaktor sind.
- Dieser Annahmefaktor ist abgeleitet von den beiden Qualitätsgrenzen QLα, QLβ
- QLα = Annehmbare Qualitätsgrenzlage (AQL, zulässiger Fehleranteil im Los) und
- QLβ = rückzuweisende Qualitätsgrenzlage (LQ)

LAGA Methodensammlung

- Bewertungsregel: Falls das Analysenergebnis zuzüglich Messunsicherheit den Grenzwert überschreitet, liegt eine Grenzwertüberschreitung vor.
- Qualitätsgrenze QLβ entspricht dem Grenzwert
- QLα ist unbekannt

BBodSchV

- Wir sehen die BBodSchV als implizite Version von Fall 3: Es werden keine expliziten Vorgaben gemacht, sondern es scheint, dass der Entscheidungsspielraum im Einzelfall für den jeweiligen Bearbeiter bzw. die Behörde recht groß ist.

3.1.2.4 Zusammenhang zum Messunsicherheitsmodell

Damit aus einer Bewertungsregel die beiden Qualitätsgrenzen QLα und QLβ abgeleitet werden können, wird ein Modell für die Messunsicherheit benötigt. Die beiden Qualitätsgrenzen hängen unmittelbar an diesem Modell der Messunsicherheit und insbesondere an den jeweils berücksichtigten Komponenten der Messunsicherheit. Umgekehrt kann auf Basis einer Qualitätsgrenze (entweder QLα oder QLβ) bei bekannten Messunsicherheiten auch eine Bewertungsregel mathematisch hergeleitet werden.

Ein eher theoretisches Vorgehen besteht darin, bei vorgegebenem Messunsicherheitsmodell und vorgegebenen Qualitätsgrenzen QLα und QLβ eine Bewertungsregel abzuleiten. Diese Bewertungsregel legt einerseits den Grenzwert fest, andererseits die Anzahl voneinander unabhängiger Messungen, welche die Basis der Entscheidung bilden.

Ist das Ergebnis der Bewertung positiv, d.h. der Grenzwert überschritten, ist hinreichend sicher, dass der wahre Gehalt mindestens bei QLα liegt. Ist das Ergebnis der Bewertung negativ, d.h. der Grenzwert unterschritten, ist hinreichend sicher, dass der wahre Gehalt höchstens bei QLβ liegt. Dieser Zusammenhang zwischen Messunsicherheit, Grenzwert und Qualitätsgrenzen wird im Anhang 7.2.2 ausführlicher behandelt.

3.1.2.5 Bewertungsregeln und Qualitätsgrenzen in den recherchierten Verordnungen, Normen und Richtlinien

Im Anhang 7.2.1.4 findet sich eine Übersicht, in welcher für jede recherchierte Verordnung/Norm/Richtlinie angegeben wird, um welchen der 3 betrachteten Fälle es sich handelt und welche konkrete Bewertungsgrenze bzw. Bewertungsregeln und Qualitätsgrenze(n) angegeben sind. Darüber hinaus ist in gleicher Übersicht auch für jede Verordnung/Norm/Richtlinie aufgeführt,

- auf welche Bezugsgröße (z.B. Laborprobe, Prüflos) sich das Analysenergebnis und die Bewertung mit dem Grenzwert bezieht,
- ob es sich um eine einseitige oder zweiseitige Absicherung handelt und
- welche Unsicherheitskomponenten berücksichtigt werden.

3.1.2.6 Kriterien für die Festlegung der Qualitätsgrenzen QLα und QLβ

Festzuhalten ist zunächst, dass die Qualitätsgrenzen QLα und QLβ implizit in jeder Verordnung bereits enthalten sind, zumindest dann, wenn ein Modell der Messunsicherheit vorliegt.

Auch wenn im Prozess der Ausarbeitung einer Verordnung diese Qualitätsgrenzen explizit keine Rolle gespielt haben, so ist dennoch davon auszugehen, dass entsprechende Überlegungen vorgenommen wurden. Die Festlegung von Grenzwerten beruht meistens auf wissenschaftlichen Erkenntnissen über schädigende Wirkungen auf Mensch, nicht-menschliche Organismen und Umwelt, aber auch auf politischen (Prioritäten?), ökonomischen (Kosten vs. Nutzen?) und technischen (Ist die Überwachbarkeit eines festzusetzenden Wertes sichergestellt) Überlegungen.

3.1.3 Beschreibung der Messunsicherheitskomponenten

3.1.3.1 Definition der Messunsicherheit

Der Messwert (= Analysenergebnis) ist das Resultat eines definierten Messprozesses mit dem Ziel den wahren, aber unbekannten, Wert der untersuchten Grundgesamtheit so exakt wie möglich zu ermitteln. Bei Bodenanalysen erstreckt sich dieser Messprozess von der Probennahmeplanung nach dem Verdacht einer Bodenverunreinigung bis zum Ergebnis der analytischen Untersuchung.

Der wahre Wert bezeichnet die Konzentration, die tatsächlich vorliegt und der Messwert bezeichnet die Konzentration, die gemessen wurde. Jede Messung ist mit Unsicherheiten, auch sogenannten Messfehlern oder Messabweichungen, behaftet. Der Messwert wird positiv oder auch negativ vom wahren Wert abweichen. Die Messabweichung ist jedoch im Allgemeinen nicht bekannt, weil der wahre Wert nicht genau bekannt ist.

Da der wahre Wert unbekannt ist, muss ein Bereich errechnet werden, in dem mit einer definierten Wahrscheinlichkeit (üblich sind Bereiche für 95 %) der wahre Wert liegt. Die Messunsicherheit bezeichnet diesen mathematisch-statistisch ermittelten Bereich, der auch als Vertrauensintervall für den wahren Wert angesehen werden kann.

3.1.3.2 Beziehung zwischen Standardunsicherheit und erweiterter Messunsicherheit

Die Unsicherheit des Analysenergebnisses (Standardunsicherheit oder kombinierte Standardunsicherheit) wird oft als Standardabweichung ausgedrückt. Durch Multiplikation der Standardunsicherheit mit einem Erweiterungsfaktor resultiert die erweiterte Messunsicherheit (kurz: Messunsicherheit). Der Erweiterungsfaktor wird üblicherweise so gewählt, dass 95 % der zu erwartenden Werte abgedeckt sind. Bei normalverteilten Messwerten entspricht dies einem Erweiterungsfaktor von 2.

3.1.3.3 Zusammenhang zwischen Messunsicherheit und Präzision

Zur Bestimmung der Messunsicherheit gibt es verschiedene Methoden; die Präzision unter Wiederhol- und Vergleichbedingungen ist eine geeignete Ausgangsgröße.

Messunsicherheit und Präzision stehen in einem engen Zusammenhang, sind aber nicht identisch. Die Präzision bzw. Wiederhol- und Vergleichstandardabweichung beschreibt die Streuung der Messwerte an identischen Proben unter Wiederhol- und Vergleichbedingungen. Die Präzision bezieht sich deshalb immer auf eine feste Konzentration, die sogenannte „wahre Konzentration". Die Messunsicherheit hingegen bezieht sich auf einen Messwert, der mehr oder weniger weit von der „wahren Konzentration" entfernt ist. Nur bei kleineren oder konstanten Messunsicherheiten ist dieser Unterschied irrelevant. Sofern die Untersuchungsmethode als unverzerrt (wiederfindungskorrigiert) angesehen werden kann, kann die Messunsicherheit aus der Präzision mathematisch berechnet werden.

3.1.3.4 Zufällige und systematische Messabweichungen

Die Abweichungen zwischen wahrem Wert und Messwert entstehen aus unterschiedlichen Gründen. Es werden zufällige und systematische Messabweichungen unterschieden. Grobe Messabweichungen, z.B. bei der Durchführung der Analyse oder wenn die Probenahmeverfahren ungeeignet ist, gelten als vermeidbar und werden daher nicht weiter behandelt.

Als **systematische Messabweichungen** werden Abweichungen bezeichnet, die bei wiederholter Messung unter gleichen Bedingungen unverändert in Größe und Vorzeichen auftreten oder sich bei kontrollierter Veränderung der Bedingungen auf entsprechende Weise ändern. Das Messergebnis wird unrichtig. Systematische Messabweichungen setzen sich aus einem bekannten und einem unbekannten Anteil zusammen. Das Messergebnis kann um bekannte systematische Messabweichungen soweit als möglich korrigiert werden.

Zufällige Messabweichungen treten bei Wiederholmessungen – selbst unter genau gleichen Bedingungen – unregelmäßig auf. Die Messergebnisse streuen in Größe und Vorzeichen. Zufällige Messabweichungen sind nicht kontrollierbar und werden hervorgerufen durch, z.B. nicht beeinflussbare unsystematische Änderungen der Versuchs- und Umgebungsbedingungen.

Auch wenn die Auswirkungen durch Wiederholmessungen reduzierbar sind, sind die zufälligen und unbekannten systematischen Messabweichungen nicht zu vermeiden.

3.1.3.5 Von der DAkkS geforderte Messunsicherheitskomponenten

Die Deutsche Akkreditierungsstelle GmbH (DAkkS) fordert im Rahmen der DIN EN ISO/IEC 17025: 2005-08 (Allgemeine Anforderungen an die Kompetenz von Prüf- und Kalibrierlaboratorien) Akkreditierung die getrennte Ermittlung der Messunsicherheitsbeiträge für die folgenden vier Teilbereiche (DAkkS-Dokument 71 SD 1/4 016, Ermittlung und Angabe der Messunsicherheit nach Forderungen der DIN EN ISO/IEC 17025'):

- A Probenahme aus der Gesamtheit des Prüfobjektes zur Herstellung einer Laborprobe,
- B Ggf. Probenvorbehandlung zur Homogenisierung der Laborprobe,
- C Entnahme einer Analysenportion als repräsentative Teilprobe der Laborprobe,
- D Anwendung aller Schritte des Bestimmungsverfahrens, einschließlich Kalibrierung und Berechnung der Probengehalte unter Berücksichtigung von QS-Maßnahmen.

Gemäß BBodSchV (Anhang 1 Nr. 2) beinhaltet die Probenahme die Probenahmeplanung, die Probengewinnung, die Probenkonservierung, -transport und –lagerung.

Zur Ermittlung dieser Messunsicherheitskomponenten bedarf es nach der DAkkS einer systematischen Zusammenstellung aller möglichen Fehlerquellen. Nicht relevante Unsicherheitsbeiträge können vernachlässigt werden.

In dem oben genannten Dokument der DAkkS wird darauf hingewiesen, dass in der Praxis häufig keine Messdaten vorhanden sind, um die Unsicherheit der Probenahme abzuschätzen. Die Unsicherheit A wird folglich in der Gesamtmessunsicherheit ignoriert und die Gesamtmessunsicherheit bezieht sich

auf die Teilbereiche B bis D, d.h. auf die analytische Messunsicherheit in Verbindung mit der Analytverteilung in der Laborprobe. Jedoch weist die DAkkS auch darauf hin, dass nach allgemeiner Laborpraxis die Inhomogenität der Analytverteilung in der Laborprobe nicht getrennt ermittelt wird, sondern Teil der Standardabweichung für Wiederholmessungen unabhängiger Analysenportionen ist.

3.2 Vergleichende Bewertung der verschiedenen Vorgehensweisen zur Behandlung der Messunsicherheit

Die unterschiedlichen Konzepte zur Berücksichtigung der Messunsicherheit bei der Bewertung des Grenzwertvergleichs haben Vor- und Nachteile. Diese wurden im Rahmen des Arbeitspaketes herausgearbeitet, wobei speziell auf die Risiken einer Fehlentscheidung und berücksichtigte Messunsicherheitskomponenten eingegangen wird.

3.2.1 Vergleich der Risiken einer Fehlbewertung für die verschiedenen Vorgehensweisen

3.2.1.1 Vorgehensweise 1

Die Vorgehensweise 1 ignoriert bei der Messwertbeurteilung die Messunsicherheit gänzlich. Ohne Kenntnis der Messunsicherheit ist jedoch die Quantifizierung des Risikos einer Fehlbewertung nicht möglich. Deshalb ist aus statistischer Sicht diese Vorgehensweise kritisch zu betrachten. Obgleich zu berücksichtigen gilt, dass in vielen Verordnungen, z.B. in der Klärschlammverordnung (AbfKlärV), die Messwertbeurteilung nur einen Faktor unter vielen im Bewertungs- und Entscheidungsprozess darstellt (Beurteilung des Gefährdungspotenzials anhand z.B. der Schadstoffbelastung, örtlichen Verhältnisse, Bodenveränderungen, Ausbreitungsmöglichkeiten oder potentiellen Auswirkungen auf Mensch und Umwelt, Wirksamkeit und Verhältnismäßigkeit von Maßnahmen). Doch für diesen einen Faktor ist festzuhalten, dass ohne Berücksichtigung der Messunsicherheit sowohl die Falsch-Positiv-Rate als auch die Falsch-Negativ-Rate 50 % beträgt, vorausgesetzt die Messwertverteilung entspricht einer Glockenkurve.

3.2.1.2 Vorgehensweise 2

Bei der Vorgehensweise 2 findet die Messunsicherheit implizit Berücksichtigung über die Vorgabe von Toleranzen. Ohne die Ermittlung der Gesamtmessunsicherheit mittels statistisch abgesicherter Verfahren ist es jedoch nur eingeschränkt möglich die Risiken einer Fehlbewertung verlässlich zu quantifizieren. Dies gilt sowohl für jene Verordnungen, in welchen die festgelegten Grenzwerte die Messunsicherheiten der Analyse- und Probenahmeverfahren schon beinhalten, als auch für jene, in welchen der Grenzwert um eine vorgegebene Toleranzhöhe überschritten werden darf. Falls die Messunsicherheit für das Analysenergebnis ermittelt und angegeben worden ist, kann unter realistisch getroffenen Annahmen und Erfahrungswissen die Messunsicherheit für den Grenzwert abgeleitet werden und daraus wiederum die Fehlerwahrscheinlichkeiten abgeleitet werden. Jedoch funktioniert dies nur in dem Fall, wenn die Toleranz genau bekannt ist. Im anderen Fall, in welchem der Grenzwert die Messunsicherheit schon berücksichtigt und somit nur die Bewertungsgrenze gegeben ist, kann nur die Wahrscheinlichkeit für den Fehler 2. Art ermittelt werden. Für die Ermittlung der Wahrscheinlichkeit des Fehlers 1. Art fehlt die Information über die wahre, d.h. um die Messunsicherheit bereinigte, Höhe des Grenzwertes.

Die Vorgabe einer Toleranz verlangt, dass die Gesamtmessunsicherheit nicht zu hoch sein darf. Dies ergibt sich daraus, dass bei einer wahren Konzentration in Höhe des tatsächlichen Grenzwertes die Bewertungsgrenze (tatsächlicher Grenzwert plus Toleranz) nicht überschritten werden soll. Die vorgegebene Toleranz sagt allerdings nichts aus über die Machbarkeit. Das zum Analysenzeitpunkt bestmögliche Gesamtverfahren kann eine Gesamtmessunsicherheit aufweisen, die deutlich schlechter oder auch deutlich besser als die vorgegebene Toleranz ist. In ersterem Fall müsste die wahre Konzentration deutlich unterhalb des tatsächlichen Grenzwertes liegen, damit ein positives Ergebnis nur selten auftritt. Eine hohe Messunsicherheit führt darüber hinaus zu einer höheren Fehlerwahrscheinlichkeit.

Im zweiten Fall gibt es häufiger falsch-negative Ergebnisse, was nicht im Sinne des Akteurs 2 ist, dem Nutzer der Fläche.

3.2.1.3 Vorgehensweise 3

Zur statistisch abgesicherten Ermittlung der Fehlerwahrscheinlichkeiten eignet sich nur die Vorgehensweise 3. Dies ist gleichzeitig die Voraussetzung für juristisch sichere Entscheidungen. Zur Beschränkung der Risikowahrscheinlichkeiten ist unbedingt die Forderung notwendig, dass die Gesamtmessunsicherheit nicht zu hoch sein darf um

- die Rate falsch-negativer Ergebnisse bzw. das β-Risiko des Überwachers zu begrenzen, im Fall die Messunsicherheit wird zum Grenzwert hinzugerechnet oder
- die Rate falsch-positiver Ergebnisse bzw. das α-Risiko des Überwachten zu begrenzen, im Fall die Messunsicherheit wird vom Grenzwert abgezogen.

Ersterer Fall wird beispielsweise in der CD 2002/657 EC gefordert.

3.2.2 Vergleich der verschiedenen Vorgehensweisen in Bezug auf die berücksichtigten Messunsicherheitskomponenten

3.2.2.1 Vorgehensweise 1

Vorgehensweise 1 bezieht keine Messunsicherheitskomponenten bei der Messwertbewertung ein; insbesondere werden die von der DAkkS genannten Messunsicherheiten (siehe Abschnitt 3.1.3.5), die aus dem Beitrag der Unsicherheit der Probenahme, der Probenvorbehandlung, der repräsentativen Entnahme einer Analysenprobe und der Analyse resultieren, außer Acht gelassen.

3.2.2.2 Vorgehensweise 2

Bei Anwendung der Vorgehensweise 2 können die DAkkS Messunsicherheitskomponenten einbezogen werden, jedoch nur in pauschaler Form. Der tatsächliche Beitrag der einzelnen Unsicherheitskomponenten (z.B. Probenahme und Analyse) ist unbekannt, so dass auch die tatsächliche Gesamtmessunsicherheit unbekannt ist.

Damit die Risiken einer Fehlentscheidung im vorgesehenen Rahmen bleiben, sollte sich jedoch die vorgegebene Toleranz und die Gesamtmessunsicherheit nicht allzu sehr unterscheiden. Um vertrauenswürdige Bewertungen zu gewährleisten, bedarf es deshalb regelmäßiger Überprüfungen der Toleranzen auf Seiten des Gesetzgebers.

Für diese Vorgehensweise spricht die Umsetzung im Vollzug. Die zuständige Behörde muss keine Messunsicherheit bestimmen. Es erfolgt lediglich ein Vergleich des Probenergebnisses mit der Bewertungsgrenze.

3.2.2.3 Vorgehensweise 3

Vorgehensweise 3 erfordert die separate Ermittlung der einzelnen Unsicherheitsbeiträge (z.B. Probenahme, Probenvorbehandlung, Analyse). Damit kann die Gesamtmessunsicherheit berechnet werden, und die Risiken einer Fehlentscheidung bleiben im vorgesehenen Rahmen. Zudem ermöglicht eine Einzelbetrachtung der einzelnen Unsicherheitskomponenten auch die Identifizierung von Schwachstellen von Probenahme und Analyseverfahren.

3.2.3 Zusammenfassung der Vor- und Nachteile

In Tabelle 3 sind die Vor- und Nachteile der drei verschiedenen Vorgehensweisen zur Behandlung der Messunsicherheit abschließend zusammengefasst.

Tabelle 3: Zusammenfassung der Vor- und Nachteile der verschiedenen Vorgehensweisen zur Behandlung der Messunsicherheit.

	Vorgehensweise 1: Nichtbeachtung der Messunsicherheit	Vorgehensweise 2: Beachtung der Messunsicherheit als Toleranzvorgabe	Vorgehensweise 3: Ermittlung der Messunsicherheit mit statistischen Verfahren
Umsetzung im Vollzug	einfach, nur Vergleich Analysenergebnis mit Grenzwert	einfach, nur Vergleich Analysenergebnis mit Grenzwert oder Bewertungsgrenze	Ermittlung der MU erforderlich
Berücksichtigung des Risikos einer Fehlbewertung	nein	ja	ja
Überschreitung vorgegebener Risiken einer Fehlbeurteilung ausgeschlossen	-	nein	ja

3.3 Durchführung eines Workshops/Fachgespräch mit dem Fachbeirat für Bodenuntersuchungen (FBU)

Die Ergebnisse aus den Arbeitspaketen A1 und A2 wurden auf der FBU-Sitzung am 17./18.02.2016 im Umweltbundesamt in Dessau-Roßlau vorgestellt und diskutiert. Die Vortragsfolien sind als Anhang zum Abschlussbericht verfügbar.

4 Konzepte zur Berücksichtigung der Messunsicherheit im Rahmen des Vollzugs der BBodSchV[3]

Im Rahmen dieses Arbeitspaketes wurde ein Konzept zur Berücksichtigung der Messunsicherheit für den Vollzug der BBodSchV erarbeitet.

Das Arbeitspaket gibt zunächst einen Überblick über Messunsicherheitskomponenten bei Bodenuntersuchungen (4.1.1). Ausgehend von den von der DAkkS geforderten Messunsicherheitsbeiträgen wird ein Alternativvorschlag zur Ermittlung der Messunsicherheitsbeiträge unterbreitet. Dieser basiert auf insgesamt sechs Messunsicherheitsbeiträgen.

Die Gesamtunsicherheit von Bodenuntersuchungsverfahren setzt sich dabei prinzipiell aus der Unsicherheit der chemischen Analyse, der Unsicherheit der Probenvorbehandlung/-vorbereitung und der Unsicherheit der Probenahme (inklusive der Heterogenität der Grundgesamtheit, d.h. räumliche Verteilung der Schadstoffe) zusammen. Die Unsicherheit der Probenahme wird häufig vernachlässigt, obwohl diese den größten Beitrag an der Gesamtmessunsicherheit haben kann.

Die Ermittlung realistischer Messunsicherheiten erfordert die Berücksichtigung der zugrundeliegenden Varianzfunktion, welche die Abhängigkeit der Streuung von der zugrundeliegenden Konzentration beschreibt. Der in der FBU-Veröffentlichung vom Juli 2015 beschriebene allgemeine funktionelle Zusammenhang zwischen mittlerer Schadstoffkonzentration und Messunsicherheit wird in Abschnitt 4.1.3 exemplarisch beschrieben und Erweiterungsmöglichkeiten diskutiert.

Anschließend erfolgt die Vorstellung eines Konzeptes zur Berücksichtigung der Messunsicherheit basierend auf der CD 2002/657 EC (Abschnitt 4.1.4). Dieses Vorgehen bietet sich an, weil die Messunsicherheit bei der Bewertung von Analysenergebnissen berücksichtigt wird und die Messunsicherheit mit statistisch abgesicherten Verfahren ermittelt wird (siehe Vorgehen 3 in Kapitel 3).

Abschließend wird auf verschiedene Optionen zur Ableitung der Messunsicherheit und deren Vor- und Nachteile eingegangen (Abschnitt 4.2).

4.1 Alternative Optionen für die Berücksichtigung der Messunsicherheit

4.1.1 Messunsicherheitskomponenten bei Bodenuntersuchungen

4.1.1.1 Gegenüberstellung zu den von der DAkkS geforderten Messunsicherheitskomponenten

Die DAkkS fordert im Rahmen der DIN EN ISO/IEC 17025: 2005-08 (Allgemeine Anforderungen an die Kompetenz von Prüf- und Kalibrierlaboratorien) Akkreditierung die getrennte Ermittlung der vier in Abschnitt 3.1.3.5 aufgezählten Messunsicherheitsbeiträge.

Anstatt der von der DAkkS geforderten getrennten Ermittlung der vier aufgezählten Messunsicherheitsbeiträge A, B, C und D, empfehlen wir die Ermittlung von insgesamt sechs Messunsicherheitsbeiträgen. Die Gesamtmessunsicherheit bei Bodenuntersuchungen setzt sich zusammen aus:

(1) Räumliche Heterogenität,
(2) Systematische Abweichungen des Probennahmeverfahrens,
(3) Zufällige Abweichungen des Probennahmeverfahrens,
(4) Fundamentalvariabilität bei der Gewinnung der Laborprobe,

[3] Die letztgültige Fassung ist Kapitel 3 („Fachliche Grundlagen“) der „Handlungsanleitung zum Umgang mit der Ergebnisunsicherheit bei der Über- und Unterschreitung von Prüf- und Maßnahmenwerten für den Vollzug der Bundes-Bodenschutz- und Altlastenverordnung“ zu entnehmen.

(5) Systematische Abweichungen des Analysenverfahrens (systematische Abweichungen bei Gewinnung einer Analysenprobe aus der Laborprobe, bei Vorbereitung der Analysenprobe zur Messprobe und bei Bestimmung des Messwertes aus der Messprobe),

(6) Zufällige Abweichungen des Analysenverfahrens (zufällige Abweichungen bei Gewinnung einer Analysenprobe aus der Laborprobe inklusive Fundamentalvariabilität, bei Vorbereitung der Analysenprobe zur Messprobe und bei Bestimmung des Messwertes aus der Messprobe).

Diese sechs Messunsicherheitsbeiträge erfassen die von der DAkkS geforderten Beiträge und berücksichtigen deren Gesamteffekt in der Gesamtmessunsicherheit. Dies verdeutlicht Tabelle 4.

Tabelle 4: Zusammenhang zwischen den DAkkS-Messunsicherheitskomponenten und den empfohlenen Messunsicherheitskomponenten.

empfohlene Messunsicherheits-komponenten	DAkkS Messunsicherheitskomponenten			
	Probenahme bis zur Herstellung der Laborprobe	Probenvor-behandlung und Homo-genisierung	Entnahme Analysen-portion	Bestimmungs-verfahren
Fundamentalvariabilität bei der Gewinnung der Laborprobe	x			
räumliche Heterogenität	x			
Unsicherheit der Probenahme (systematisch und zufällig)	x			
Analytische Unsicherheit (systematisch und zufällig)		x	x	x

Die hier beschriebenen Messunsicherheitskomponenten sind nur summarisch in ihrer Summe identisch mit den DAkkS Messunsicherheitskomponenten. Die Abgrenzung der Einzelkomponenten ist unterschiedlich

Die Unsicherheit, die sich z. B. daraus ergibt, dass die tatsächliche Position der Probennahme vom geplanten Probennahmeraster abweicht, oder dass das Probennahmeraster die tatsächlichen Verhältnisse auf der zu untersuchenden Fläche nur näherungsweise wiederspiegeln und nicht repräsentativ sind, bleibt in der Analyse der Gesamtmessunsicherheit generell unberücksichtigt.

4.1.1.2 Ermittlung der Gesamtmessunsicherheit

Alle Unsicherheitsbeiträge werden in der Regel als Standardabweichungen ausgedrückt. Die Standardabweichungen sind wiederum ein Maß für die Präzision. Die Gesamtpräzision charakterisiert die Streuung der Messwerte unter Berücksichtigung aller Unsicherheitskomponenten. In diesem Fall resultiert die Gesamtabweichung (s_{ges}) aus:

$$s_{ges} = \sqrt{s_h^2 + s_P^2 + s_p^2 + s_L^2 + s_r^2}$$

Daraus kann anschließend die Gesamtmessunsicherheit berechnet werden.

4.1.1.3 Räumliche Heterogenität

Die räumliche Variabilität ist eine inhärente Eigenschaft der Grundgesamtheit. Die Schadstoffbelastung ist nicht über die gesamte Bodenfläche gleich. Innerhalb der Bodenfläche (z.B. tiefenabhängig) gibt es Stellen mit höherer und niedriger Belastung. Die räumlich differenzierte Schadstoffbelastung kann die Folge z. B. unkontrollierter Ablagerungen, Umlagerungen und Aufschüttungen sowie physikochemischer Eigenschaften des Bodens sein.

Es hängt von der jeweiligen Fragestellung ab, ob und inwieweit die räumliche Heterogenität bei der Messunsicherheit zu berücksichtigen ist. Soll die Schadstoffbelastung lokal bestimmt werden, kann die räumliche Heterogenität außer Acht gelassen werden. Soll die mittlere Schadstoffbelastung in der Fläche bestimmt werden, muss die räumliche Heterogenität berücksichtigt werden.

4.1.1.4 Unsicherheit der Probenahme

Diese Messunsicherheit berücksichtigt systematisch und zufällig bedingte Abweichungen.

Der Messprozess bis zur Übergabe ans Labor umfasst aufgrund der Probengewinnung, der Probenkonservierung, -transport und -lagerung viele Unsicherheitsquellen (eine Auswahl gibt Anhang 7.3.1), die zu einer Abweichung zwischen dem wahren Gehalt in der untersuchten Grundgesamtheit und dem Analysenergebnis der entnommenen Proben führen können.

4.1.1.5 Fundamentalvariabilität

Bei wiederholter Durchführung der Probenahme an gleicher Stelle ergibt sich unvermeidlich ein anderer Wert, selbst dann, wenn die analytische Unsicherheit vernachlässigbar ist. Diese Unsicherheit wird als Fundamentalvariabilität bezeichnet. Selbst bei perfekter Durchmischung werden die Gehalte in den Proben nicht identisch sein, wenn die einzelnen Partikel in der Grundgesamtheit nicht völlig identische Konzentrationen haben.

Die Fundamentalvariabilität beschreibt jene zusätzliche Variabilität der Analysenergebnisse, die daraus resultiert, dass die Analytkonzentration von Partikel zu Partikel variieren kann. Würde man in einem Gedankenexperiment das gesamte Material der Grundgesamtheit perfekt durchmischen, nicht aber zerkleinern, und würden anschließend aus dieser Grundgesamtheit z.B. 1000 verschiedene Proben entnommen, so würden sich selbst bei exakter Bestimmung der Analytkonzentrationen in den Proben die Werte von Probe zu Probe mehr oder weniger unterscheiden. Die zugehörige Varianz ist die Fundamentalvarianz. Diese Fundamentalvarianz ist in manchen Fällen völlig vernachlässigbar, etwa dann, wenn die Partikel sehr klein sind oder die Konzentrationsunterschiede von Partikel zu Partikel sehr gering ausfallen. Sie kann aber auch sehr groß sein, wenn sich z.B. der zu bestimmende Stoff nur in sehr wenigen Partikeln befindet.

Zu beachten gilt, dass die Fundamentalvariabilität unter Umständen zweimal wirken kann. Zum einen während der Probenahme bei der Entnahme der Einzelproben, und zum anderen bei der Gewinnung der Analysenproben aus der Laborprobe. Durch die Zerkleinerung des kompletten Materials der Laborprobe lässt sich die Fundamentalvarianz oft erheblich reduzieren.

Die Wirkung der Fundamentalvariabilität soll ein einfaches Beispiel demonstrieren. In einer Urne befinden sich 10 Kugeln, davon sind 8 Kugeln blau und 2 Kugeln rot. Wenn nun 4 Kugeln zufällig entnommen werden, wird die Anzahl gezogener roter Kugeln schwanken. Konkret werden im Mittel keine rote Kugel in 5, eine rote Kugel in 8 und beide roten Kugeln in 2 Stichproben enthalten sein. In diesem Beispiel beträgt die Fundamentalvariabilität 82 %. Wenn dieses Kugelbeispiel auf Bodenuntersuchungen übertragen wird, könnten die roten Kugeln beispielsweise den 100 % kontaminierten Partikeln entsprechen und die blauen Kugeln jenen Partikeln, die frei vom Schadstoff sind.

4.1.1.6 Analytische Unsicherheit

Die Probenvorbehandlung und -extraktion des Untersuchungsmaterials erfolgt innerhalb des Labors und kann auch als Teil der analytischen Messunsicherheit bestimmt werden.

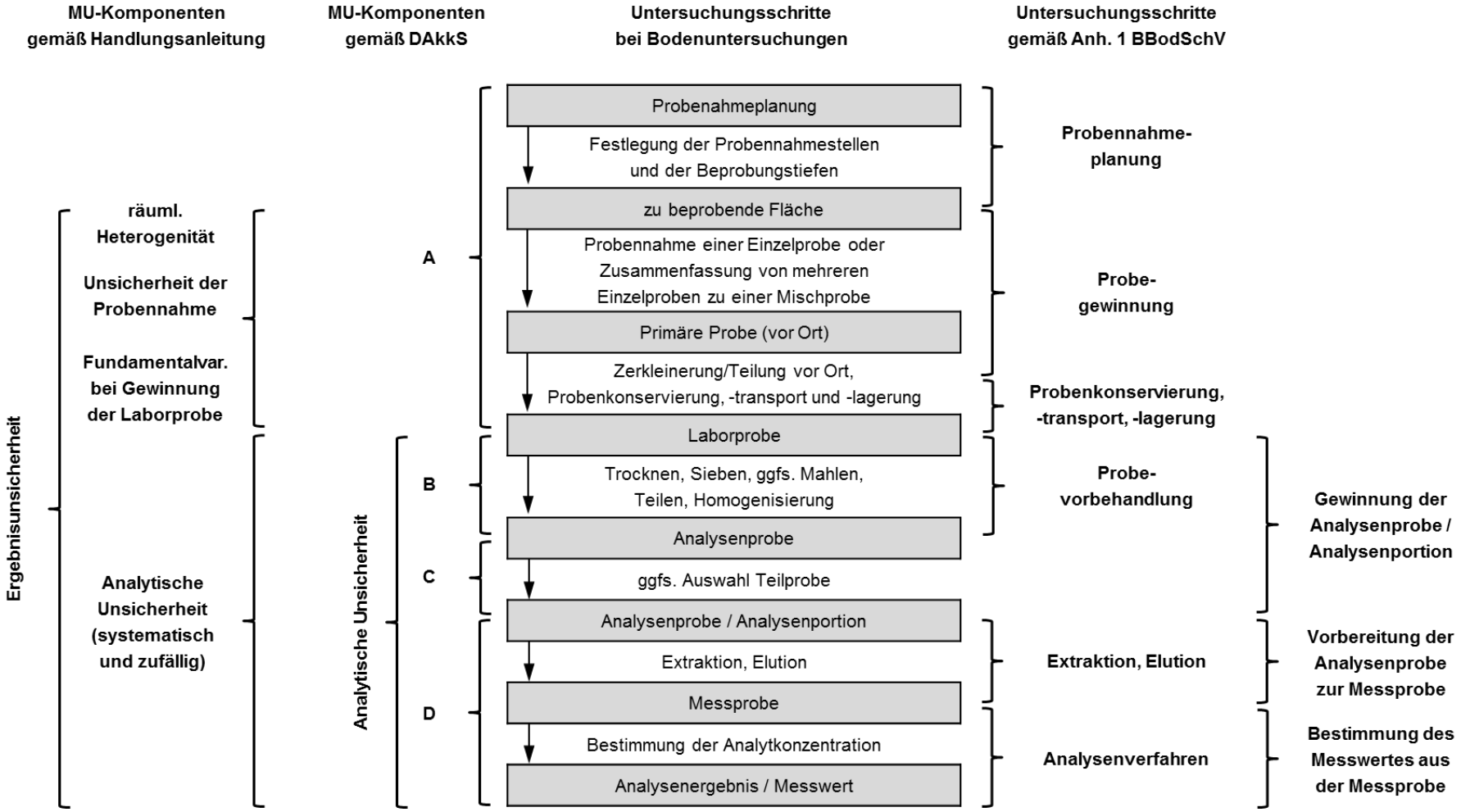
Als Stand der Technik wird von nach DIN EN ISO/IEC 17025: 2005-08 (Allgemeine Anforderungen an die Kompetenz von Prüf- und Kalibrierlaboratorien) akkreditierten Prüflaboratorien diese Messunsicherheit über die Reproduzierbarkeit von der Probenvorbehandlung bis zur Detektion des Stoffes angegeben. Die Reproduzierbarkeit resultiert aus der Mehrfachbestimmung von Bodenproben, die den gesamten Prozess von der Probenvorbehandlung und -extraktion bis hin zur instrumentellen Analyse und der Detektion der Stoffe durchlaufen. Das beinhaltet somit auch die Fundamentalvariabilität, die bei Gewinnung einer Analysenprobe aus der Laborprobe wirksam wird.

Für die analytische Messunsicherheit werden zwei Komponenten berücksichtig. Die Unsicherheit, die durch zufällige, nicht kontrollierbare Störfaktoren herrühren, und systematische Laboreffekte.

4.1.2 Zusammenfassung

Der Zusammenhang zwischen Untersuchungsschritten bei Bodenuntersuchungen und den von der DAkkS sowie in dieser Handlungsanleitung vorgeschlagenen Messunsicherheitskomponenten ist zusammenfassend in Abbildung 2 dargestellt.

Abbildung 2: Zusammenhang zwischen Untersuchungsschritten bei Bodenuntersuchungen und Messunsicherheitskomponenten, die einerseits von der DAkkS und andererseits in diesem FuE-Vorhaben vorgeschlagen werden.



4.1.3 Integration des funktionellen Messunsicherheitsmodells des FBU für den analytischen Fehler

Bei vielen analytischen Verfahren für Böden und Altlasten ist die Reproduzierbarkeit der Ergebnisse nur eingeschränkt gegeben. Oft liegt die Vergleichstandardabweichung, d.h. die Variabilität von Messergebnissen, die von unterschiedlichen Laboren ermittelt wurden, deutlich oberhalb von 30 %. Die Ermittlung der Unsicherheit der Ergebnisse nach GUM (Guide to the Expression of Uncertainty in Measurement) ist für derart hohe Impräzisionen nicht geeignet, so dass die Anwendung des GUM zu oftmals unrealistischen Messunsicherheiten führt.

Die Ermittlung realistischer Messunsicherheiten erfordert die Berücksichtigung der zugrundeliegenden Varianzfunktion, welche die Abhängigkeit der Streuung von der zugrundeliegenden Konzentration beschreibt. Als effektiver Ansatz hat sich die konzentrationsabhängige Zerlegung der Vergleichvarianz in einen konstanten und proportionalen Fehleranteil gezeigt. Die diesem Ansatz zugrundeliegenden statistischen Grundlagen zur Ermittlung der Messunsicherheit sind in Uhlig et al. (2015)[4] dargestellt.

Dieser Ansatz trägt dem Umstand Rechnung, dass über den gesamten zu untersuchenden Konzentrationsbereich in der Regel die relative Impräzision für niedrigere Konzentrationen höher ausfällt. Der Ansatz zur Ermittlung der Präzision in Abhängigkeit von der Konzentration basiert auf der Annahme, dass es

eine konstante Fehlerkomponente und

eine proportionale Fehlerkomponente

gibt. Die Wiederhol- sowie Vergleichstandardabweichung σ für die Probenkonzentration c wird durch" $\sigma = \sqrt{A^2+B^2 \cdot c^2}$ mit beliebigen positiven Parametern A und B modelliert. Mit diesem Modellansatz wird das Grundrauschen des Messsystems berücksichtigt, denn bei einem Konzentrationswert von 0 ergibt sich für die absolute Standardabweichung der Wert A. Bei hohen Konzentrationen sinkt gemäß Modellansatz die relative Standardabweichung ab bis auf den Wert B. Aus der Kenntnis der Präzision kann dann die analytische Messunsicherheit abgeleitet werden. Zu beachten ist dabei, dass sich der gewählte funktionelle Zusammenhang aus dem analytischen Fehler ableitet, nicht jedoch aus der Fundamentalvariabilität. Wenn letztere eine größere Rolle spielt, ist ggf. eine Modifikation des Modellansatzes vorzunehmen.

Sofern keine Informationen zur tatsächlichen Impräzision bekannt sind, kann als Worst Case Ansatz die doppelte Horwitz-Standardabweichung herangezogen werden. Frühere Ringversuche haben gezeigt, dass die tatsächliche Impräzision unter Vergleichbedingungen fast immer unter der doppelten Horwitzstandardabweichung liegt.

4.1.4 Adaption des Konzeptes der CD 2002/657 EC auf den Bodenschutz

4.1.4.1 Vorteile des Ansatzes der CD 2002/657 EC

Nach allgemeinen verwaltungsrechtlichen Grundsätzen muss dem Eigentümer hinreichend sicher die Überschreitung von Prüf- oder Maßnahmenwerten nachgewiesen werden.

Als aussichtsreichste Vorgehensweise stellt sich dann die Vorgehensweise 3 dar, d.h. die Messunsicherheit wird berücksichtigt und wird mit statistisch abgesicherten Verfahren ermittelt (siehe Abschnitt 3.1.1.1). Das Analysenergebnis gilt als positiv, wenn jene Konzentration überschritten ist, über die mit einer hohen statistischen Sicherheit festgestellt werden kann, dass der zulässige Grenzwert tatsächlich überschritten ist. Fünf von acht Verordnungen, in welcher die Vorgehensweise 3 Anwen-

[4] http://www.umweltbundesamt.de/sites/default/files/medien/359/dokumente/messunsicherheit-bbodschv.pdf

dung findet, verwenden diese Bewertungsgrenze: Grenzwert plus Messunsicherheit (siehe Abschnitt 3.1.1.1).

Die Berücksichtigung der Messunsicherheit schützt und begünstigt den Überwachten/Verkäufer/Eigentümer. Die CD 2002/657 EC fordert darüber hinaus, dass die Gesamtmessunsicherheit nicht zu hoch sein darf, um die Rate von falsch-negativen Ergebnissen bzw. das Risiko des Überwachers/Verbrauchers/Konsumenten zu begrenzen. Gemäß CD 2002/657 sind nur Verfahren zugelassen, deren Qualitätsgrenzen festgelegte Werte (sog. Mindestleistungsgrenzen (MRPL) bzw. regulatory limits) unterschreiten.

Aus Sicht des Vollzugs bietet der CD 2002/657 Ansatz den Vorteil, dass bei einem validierten Gesamtverfahren die gemessene Probenkonzentration nur mit der Bewertungsgrenze zu vergleichen ist. Es bedarf nicht für jedes Probenergebnis der Messunsicherheitsermittlung.

Es bietet sich deshalb an die Vorgehensweise 3 anhand der CD 2002/657 EC darzustellen und darzulegen, wie das Konzept dieser Verordnung auf den Bodenschutz übertragen werden kann und insbesondere bei der Beurteilung des Überschreitens von Prüf- und Maßnahmenwerten Anwendung finden kann.

4.1.4.2 Anforderungen der CD 2002/657/EC

Im Folgenden sind die Inhalte der CD 2002/657 EC kurz zusammengefasst, insbesondere in Bezug auf Anforderungen an die Messunsicherheit, das Analysenverfahren, die Probenahme und das Analysenlabor.

4.1.4.2.1 Anwendungsbereich

Die CD 2002/657 EC betrifft die amtliche Probenahme für die Kontrolle von Rückständen in Erzeugnissen tierischen Ursprungs. Das Vorhandensein von Rückständen ist ein Problem des Schutzes der öffentlichen Gesundheit. Diese europäische Verordnung beschreibt Leistungskriterien der Qualitätssicherung, Verfahren zur Validierung von Analysenmethoden und die Interpretation der Analysenergebnisse.

4.1.4.2.2 Grenzwertdefinition

Gemäß CD 2002/657 ist ein zulässiger Grenzwert entweder eine Rückstandshöchstmenge oder eine maximale Konzentration oder eine sonstige maximale Toleranz für einen Stoff, der in gemeinschaftlichen Rechtsvorschriften festgelegt ist.

4.1.4.2.3 Grenzwertüberschreitung

Das Ergebnis einer Analyse gilt als positiv, wenn die Bewertungsgrenze der Bestätigungsmethode für den Analyten überschritten ist. Die Bewertungsgrenze (Entscheidungsgrenze CCα genannt in der CD 2002/657) ist die Konzentration, über die bei einer Methode mit einer statistischen Sicherheit von 1 – α festgestellt werden kann,

- dass der zulässige Grenzwert überschritten worden ist (im Fall eines zulässigen Grenzwertes) bzw.
- ob der betreffende Analyt vorhanden ist (im Fall keines zulässigen Grenzwertes).

4.1.4.2.4 Anforderungen an die Messunsicherheit

Die Messunsicherheit berücksichtigt alle relevanten Einflussgrößen, die das Messergebnis beeinflussen (inkl. Unsicherheit der Wiederfindung). Die Messunsicherheit leitet sich aus der In-house Reproduzierbarkeit ab, die in einer Validierungsstudie ermittelt wurde.

4.1.4.2.5 Anforderungen an das Analysenverfahren

Für die Rückstandskontrolle dürfen nur Analysenverfahren verwendet werden, die nach vorgegebenen Verfahren validiert sind und die geforderte Leistungskriterien (z.B. MRPL) erfüllen.

4.1.4.2.6 Anforderungen an die Probenahme

Amtliche Proben müssen gemäß der Richtlinie 96/23/EG entnommen werden. Wird eine vorschriftswidrige Behandlung festgestellt, wird eine statistisch repräsentative, nach international anerkannten wissenschaftlichen Normen bestimmte Anzahl an Tieren beprobt.

4.1.4.2.7 Anforderungen an die Untersuchungsstelle

Die Analyse der Proben müssen Laboratorien durchführen, die von der zuständigen, nationalen Behörde für amtliche Rückstandskontrolle zugelassen sind, Qualitätssicherungssysteme anwenden, nach ISO 17025 akkreditiert sind und regelmäßig an anerkannten Ringversuchen erfolgreich teilnehmen.

4.1.4.3 Veranschaulichung des Konzeptes der CD 2002/657

4.1.4.3.1 Prüfwert in Wohngebieten

Anhand eines möglichen Beispielszenarios soll dieses Kapitel den Ansatz der CD 2002/657 veranschaulichen.

Angenommen auf einem ehemaligen Ziegeleigelände wurde ein Wohnpark von mehr als 10‘000 m^2 Fläche errichtet. Das Abbruchmaterial soll auf dem Gelände verblieben sein und die Altablagerungen mit Mittelsandboden verfüllt worden sein. Aufgrund eines Verdachtes soll nun das Ziel bestehen, den mittleren Benzo(a)pyren-Gehalt im gesamten Wohngelände zu bestimmen.

Nach Anhang 2, Nr. 1.3 der BBodSchV beträgt der Prüfwert für die direkte Aufnahme von Benzo(a)pyren in Wohngebieten 4 mg/kg TM.

4.1.4.3.2 Möglicher Ansatz zur Ermittlung der Messunsicherheit

Im Bodenschutz müsste die Messunsicherheit nicht abgeleitet werden von In-house Validierungsversuchen, wie es die CD 2002/657 vorgibt, sondern von Ringversuchsdaten, theoretischen Berechnungen und der Variabilität der Einzelanalysen.

Nach Abschnitt 4.1.1 bedarf es der Ermittlung

- des systematischen und zufälligen Abweichungen des Analysenverfahrens,
- des systematischen und zufälligen Abweichungen des Probenahmeverfahrens,
- der Fundamentalvariabilität und
- der räumlichen Heterogenität.

Um diese Messunsicherheitskomponenten abzuschätzen, könnte wie folgt vorgegangen werden.

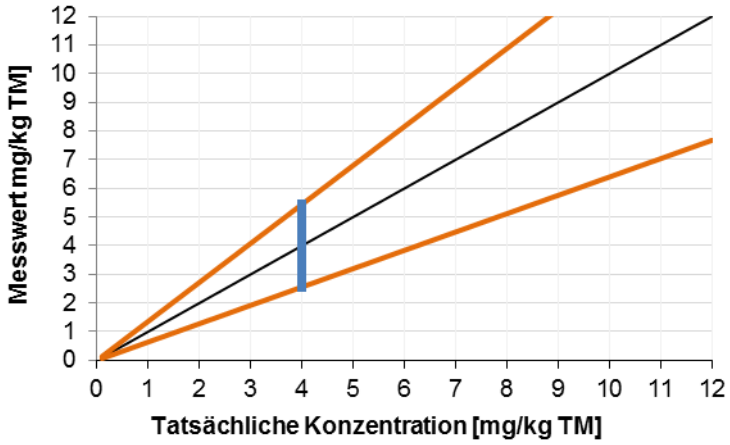
Unsicherheit des Analysenverfahrens

Der analytische Fehler kann aus dem funktionellen Messunsicherheitsmodell des FBU abgeschätzt werden (siehe dazu Abschnitt 4.1.3). Die Wiederholvarianz s_r^2 als Maß für den zufälligen Analysenfehler kann konzentrationsabhängig in einen konstanten und proportionalen Fehleranteil zerlegt werden. Neben der Wiederholvarianz kann auch die Vergleichvarianz s_R^2 konzentrationsabhängig in einen konstanten und proportionalen Fehleranteil zerlegt werden. Daraus ergibt sich dann der systematische Analysenfehler bzw. die Laborvarianz s_L^2 durch $s_L^2 = s_R^2 - s_r^2$.

Im folgenden Beispiel wird angenommen, dass der proportionale Fehleranteil des zufälligen Analysenfehlers 18 % beträgt. Der konstante Fehleranteil sowie der systematische Analysenfehler werden als vernachlässigbar angesehen. Dann liegen bei einer wahren Konzentration von 4 mg/kg TM bei 100

Messungen im Mittel 95 Messungen zwischen 2,6 und 5,4 mg/kg TM, wie Abbildung 3 zu entnehmen ist.

Abbildung 3: 95 % - Fehlerschwankungsbereich im Fall der proportionale Fehleranteil des zufälligen Analysenfehlers ist 18 %.

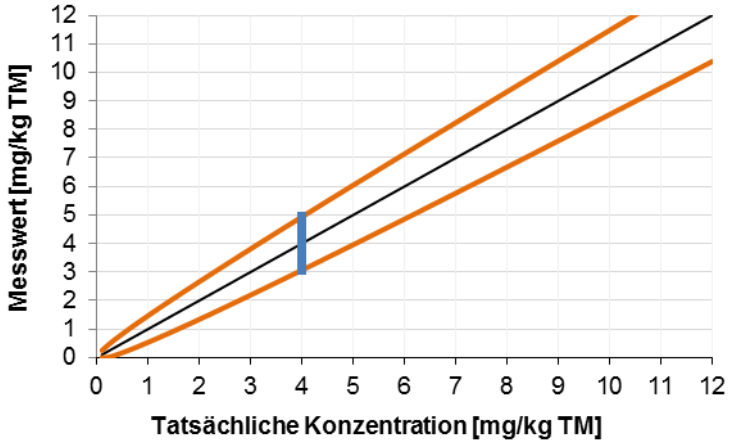


Unsicherheit des Probenahmeverfahrens

Die Unsicherheit aus der Probenahmedurchführung, Probenverpackung (ggf. Probenkonservierung) und dem Probentransport könnte durch Ringversuche ermittelt werden.

Angenommen der systematische Probenahmefehler ist vernachlässigbar und der zufällige Probenahmefehler aufgrund, z.B. der Probenahmetechnik, der Probenhomogenisierung und des Probentransports, beträgt 10 %. Dann liegen – ohne Analysenfehler – bei einer wahren Konzentration von 4 mg/kg TM 95 von 100 Messungen zwischen 3,2 und 4,8 mg/kg TM. Dieser Schwankungsbereich für den Probenahmefehler ist in Abbildung 4 dargestellt.

Abbildung 4: 95 % - Fehlerschwankungsbereich im Fall der zufällige Probenahmefehler beträgt 10 %.



Fundamentalvariabilität und räumliche Heterogenität

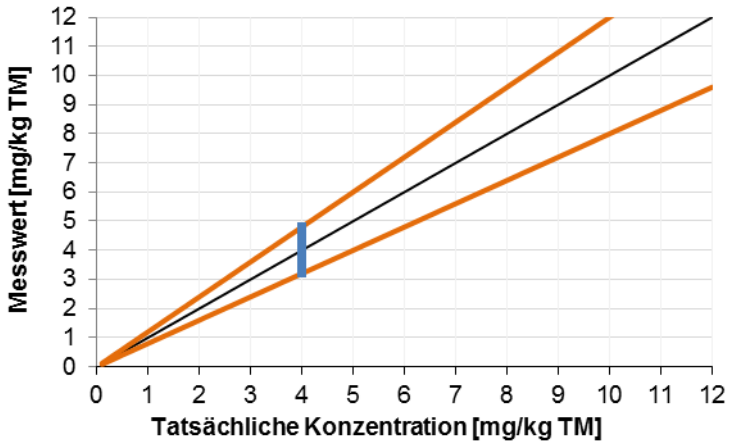
Beide Unsicherheitskomponenten können parallel ermittelt werden. Von der gesamten Probenahmefläche des 10‘000 m² großen Wohngeländes werden n Stellen repräsentativ nach einem geeigneten Probenahmeraster ausgewählt. Aus den Mittelwertunterschieden zwischen den n verschiedenen Probenahmestellen kann die räumliche Variabilität abgeleitet werden. Um die Fundamentalvariabilität auf

Ebene der Probenahme zur Gewinnung der Laborprobe sowie die Fundamentalvariabilität auf Ebene der Probenvorbereitung zur Gewinnung der Analysenprobe zu ermitteln, empfiehlt sich folgendes Vorgehen. Von jeder Stelle wird genügend Bodenmaterial entnommen, um 3 Laborproben pro Stelle zu gewinnen. Diese 3 Laborproben werden im Labor jeweils homogenisiert und anschließend gedrittelt. Danach werden 2 dieser 3 Untersuchungsproben vermahlen. Für jede der 3 Untersuchungsproben erfolgt eine Doppelbestimmung durch die Analyse von 2 Analysenproben je Untersuchungsprobe. Aus diesen 6·n Analysenwerten (n Probenahmestellen x 3 Laborproben x 2 Analysenproben) resultiert die Fundamentalvariabilität und die räumliche Heterogenität.

Angenommen, 48 Analysenproben von 8 verschiedenen Probenahmestellen und theoretische Überlegungen führen zu folgendem Fehlerschwankungsbereich – ohne Berücksichtigung des Analysenfehlers und des Probenahmefehlers.

Abbildung 5 verdeutlicht, dass bei einer wahren Konzentration von 4 mg/kg TM 95 von 100 Messungen zwischen 3,1 und 4,9 mg/kg TM liegen.

Abbildung 5: 95 % - Fehlerschwankungsbereich für die Fundamentalvariabilität und die räumliche Heterogenität

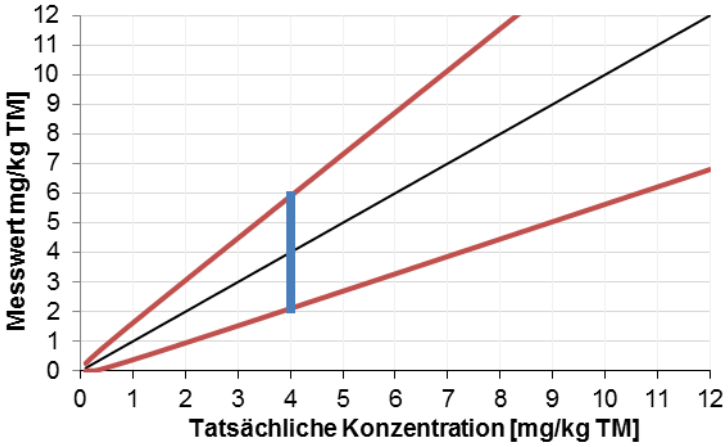


Gesamtfehlerschwankungsbereich

Durch die Berücksichtigung aller Unsicherheitskomponenten resultiert dann der in Abbildung 6 dargestellte 95 % - Gesamtfehlerschwankungsbereich.

Bei einer wahren Konzentration von 4 mg/kg TM liegen 95 von 100 Messergebnissen zwischen 2,1 und 5,9 mg/kg TM, d.h. der zweifache Gesamtfehler beträgt bei 4 mg/kg TM 47 %.

Abbildung 6: 95 % - Gesamtfehlerschwankungsbereich für das skizzierte Beispiel.



4.1.4.3.3 Ermittlung der Bewertungsgrenze

Nach allgemeinen verwaltungsrechtlichen Grundsätzen muss hinreichend sicher die Überschreitung von Prüf- oder Maßnahmenwerten festgestellt werden. Der Prüfwert von 4 mg/kg TM entspricht also der Qualitätsgrenze 1. Notwendig ist daher die Bestimmung der Bewertungsgrenze und Qualitätsgrenze 2, im Folgenden ohne den Zusatz der Zahl 2 bezeichnet.

Sei die Falsch-Positiv-Rate 5 %, dann liegt bei einer tatsächlichen mittleren Benzo(a)pyren-Konzentration in der untersuchten Fläche von 4 mg/kg TM mit 95 % Wahrscheinlichkeit die gemessene mittlere Konzentration unterhalb von 5,6 mg/kg TM.

In diesem Beispiel liegt die Bewertungsgrenze daher bei 5,6 mg/kg TM. Die Bewertungsgrenze ist entscheidend für den Vollzug. Sie gibt an, ab welcher gemessenen Konzentration ein Messergebnis als positiv gilt. Wenn ein Messwert niedriger bzw. höher ausfällt, wird der Messwert mit einer Unterschreitung bzw. Überschreitung des Prüfwertes von 4 mg/kg TM bewertet. Die Bewertungsgrenze definiert sich also über den Prüfwert inklusive der Messunsicherheit. Die Bewertungsgrenze ist bei einer Falsch-Positiv-Rate von 5 % die obere Grenze des 90 % - Gesamtfehlerschwankungsbereiches für den festgelegten Prüf- bzw. Maßnahmenwert.

Die Ableitung der Bewertungsgrenze ist auch in Abbildung 7 illustriert.

4.1.4.3.4 Ermittlung der Qualitätsgrenze

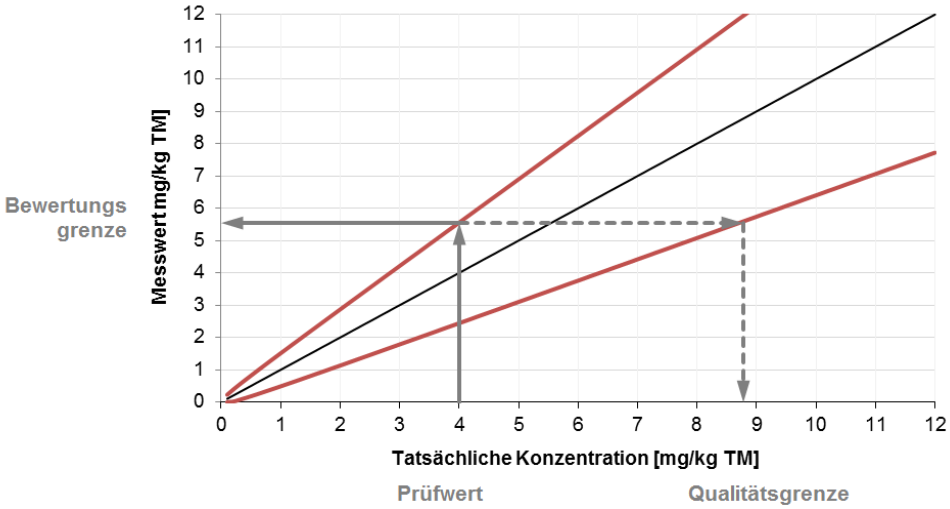
Die Anwohner und Nutzer der Wohnfläche wollen sich eigentlich ganz sicher sein, dass der Prüfwert eingehalten wird. Insofern fordern sie eigentlich, dass die Messunsicherheit vom Prüfwert abgezogen wird. Dies garantiert, dass nur in wenigen Fällen ein belasteter Boden negativ bewertet wird. Aufgrund des Umstands, dass dem Besitzer jedoch die Überschreitung hinreichend nachgewiesen werden muss, fordern sie eine Beschränkung der Messunsicherheit.

Für die Anwohner und Nutzer der Wohnfläche besteht allerdings das Risiko, einen Wert zu akzeptieren, der in Wahrheit höher ist als der Prüfwert bzw. Maßnahmenwert. Bei einer wahren Konzentration von 5,6 mg/kg TM wird in 50 % der Fälle die Probe akzeptiert. Für die Nutzer ist daher die Kenntnis jener Qualitätsgrenze entscheidend, ab welcher wahren Konzentration (1) ein Messwert mit hoher Wahrscheinlichkeit oberhalb der Bewertungsgrenze liegt und somit (2) das Falsch-Negativ-Risiko noch akzeptabel ist.

Angenommen auch die Falsch-Negativ-Rate soll 5 % betragen, dann ist jene wahre Konzentration gesucht, deren untere Grenze des 90 %-Gesamtfehlerschwankungsbereiches der Bewertungsgrenze entspricht oder, wie in Abbildung 7 illustriert, die obere Messunsicherheitsgrenze zum 90 %-Niveau für

die Bewertungsgrenze. Wenn 5,6 mg/kg TM gemessen werden, liegt die untere Messunsicherheitsgrenze genau beim Prüfwert von 4 mg/kg TM und die obere Messunsicherheitsgrenze bei 8,8 mg/kg TM.

Abbildung 7: Ableitung der Bewertungsgrenze und Qualitätsgrenze auf Basis des 90 %-Gesamtfehlerschwankungsbereich für das skizzierte Beispiel.

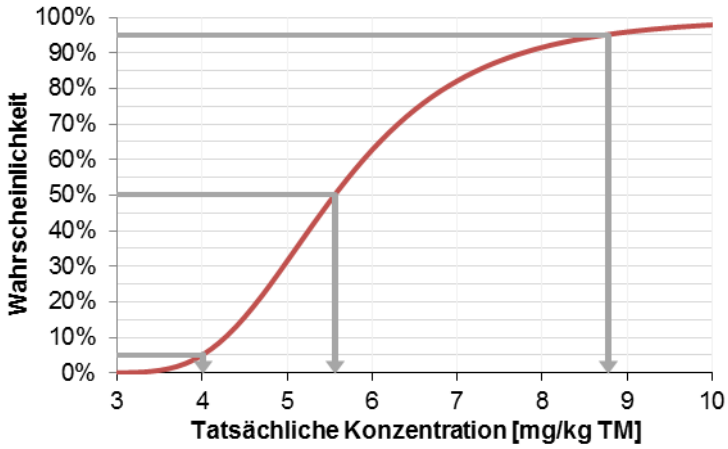


Die Anwohner wissen nun, dass mit diesem Analysen- und Probenahmeverfahren, bei einer tatsächlichen Konzentration von knapp 9 mg/kg TM nur in 5 von 100 Fällen die Probe als negativ bewertet wird. Wenn der 2,2-fache Prüfwert für die Gesundheit bedenklich und somit diese verfahrensspezifische Konzentration nicht akzeptabel ist, muss entweder ein anderes Verfahren der Probenahme oder ein anderes Analysenverfahren eingesetzt werden, wenn verfügbar und validiert. Ansonsten müssten mehr Proben untersucht werden. Um das Risiko der Nutzer zu begrenzen, sollten nur Gesamtverfahren Einsatz finden, welche die festgelegte Qualitätsgrenze erfüllen.

Maßgeblich neben der Ermittlung der verfahrensspezifischen Konzentration K ist der Vergleich mit der bekannten und vorher festgelegten Qualitätsgrenze (QLβ). Diese Qualitätsgrenze ist analytisch begründet als ein Maß der technischen Machbarkeit. Sie kann deshalb jederzeit nach unten korrigiert werden.

Die verfahrensspezifische Konzentration kann auch aus der Powerfunktion abgeleitet werden. Die Powerfunktion trägt die Wahrscheinlichkeit eines positiven Ergebnisses (Überschreitung der Bewertungsgrenze) gegen die wahre Konzentration auf.

Abbildung 8: Powerfunktion für das skizzierte Beispiel.



Aus Abbildung 8 ist ablesbar, dass die Wahrscheinlichkeit eines positiven Ergebnisses

- 5 % beträgt, wenn die tatsächliche Konzentration 4 mg/kg TM ist, was genau dem Prüfwert entspricht,
- 50 % beträgt, wenn die tatsächliche Konzentration 5,6 mg/kg TM ist, was genau der Bewertungsgrenze entspricht und
- 95 % beträgt, wenn die tatsächliche Konzentration 8,8 mg/kg TM ist, was genau der verfahrensspezifischen Konzentration entspricht.

Im Übrigen gilt, dass je steiler die Powerfunktion verläuft, desto besser ist das Gesamtverfahren, denn Grenzwert und Bewertungsgrenze liegen näher beieinander.

4.1.4.3.5 Diskussion

Für das vorgestellte Konzept sind folgende Aspekte zu diskutieren:

- Anforderungen an Qualitätsgrenzen: Es könnte z.B. gefordert werden, dass für Kinderspielflächen und Flächen ab 10 ha die Qualitätsgrenze maximal den dreifachen Prüfwert betragen darf, und ansonsten den vierfachen Prüfwert nicht überschreiten darf. Für den Maßnahmenwert könnte eine Qualitätsgrenze beim zweifachen Maßnahmenwert liegen.
- Es ist auch zu diskutieren, wer die Auswahl von Referenzverfahren und empfohlenen Verfahren festlegt.
- Darüber hinaus, ist zu diskutieren, wie hoch die Fehlerwahrscheinlichkeiten von α und β angesetzt werden. Ist 5 % ausreichend, z.B. für Kinderspielflächen. Andererseits empfiehlt sich für sehr unsichere Verfahren, z.B. Elutionsverfahren, ein Signifikanzniveau von 20 % (zweiseitig, siehe Ampelkonzept im funktionellen Messunsicherheitsmodell des FBU für den analytischen Fehler).

Die im Rahmen der FBU-Sitzung am 24.02.2017 in Berlin erarbeiteten Vorschläge zu Qualitätsgrenzen sind in Abschnitt 4.3 zusammengefasst.

Bewertung auf Basis eines Analysenergebnisses

Die Bewertung auf Basis eines Messwertes ist nur für die orientierende Untersuchung relevant. Die mit einer Prüfwertüberschreitung einhergehenden Detailuntersuchungen basieren auf mehreren Probenahmepunkten.

Hier ist zu diskutieren, inwiefern Informationen zu zufälligen und systematischen Messunsicherheitskomponenten verfügbar sind. Jedoch ist zu beachten, dass die Qualitätsgrenze über das Gesamtverfahren auf Basis eines Messwertes nicht bestimmt werden kann, da die Variabilität über die gesamte Fläche nicht bekannt ist.

Bewertung auf Basis mehrerer Analysenergebnisse

Im Fall von mindestens 6 Laborproben ergeben sich die zufälligen Messunsicherheitskomponenten summarisch aus den Standardabweichungen zwischen den Analysenergebnissen. Auch hier ist zu diskutieren, inwiefern Informationen zu systematischen Messunsicherheitskomponenten verfügbar sind. Wenn die Qualitätsgrenze den vorgegebenen Wert (z.B. 3-fachen oder 4-fachen Prüfwert) überschreitet, müssen ggfs. ergänzende Messungen vorgenommen werden.

Mindestens Doppelbestimmungen (aus einer Laborprobe) sind wegen des Einflusses der Fundamentalvariabilität bei Prüfwerten unterhalb von 1 mg/kg dringend zu empfehlen, unabhängig davon, ob die Bewertung auf Basis eines Analysenergebnisses oder mehrerer Analysenergebnisse erfolgt.

4.2 Vergleichende Gegenüberstellung alternativer Optionen zur Ableitung der Messunsicherheit

Die Bewertung, ob ein Analysenergebnis den Prüf- oder Maßnahmenwert überschreitet, erfolgt auf Basis der Messunsicherheit des Analysenergebnisses. Dabei können die sechs vorgeschlagenen Unsicherheitskomponenten unterschiedlich berücksichtigt werden. Es können entweder

- alle Unsicherheitskomponenten oder
- nur ein Teil der Unsicherheitskomponenten in die Bewertung einfließen.

Die Entscheidung, welche Unsicherheitskomponenten Berücksichtigung finden, sollte in Abhängigkeit der spezifischen Fragestellung sehr genau abgewägt werden.

Neben der Gesamtmessunsicherheit könnte beispielsweise auch die analytische Messunsicherheit von Interesse sein. Diese beinhaltet die systematischen und zufälligen Abweichungen des Analysenverfahrens inkl. der Fundamentalvariabilität bei Gewinnung der Analysenprobe aus der Laborprobe. Vor- und Nachteile beider Möglichkeiten sind nachfolgend zusammengefasst.

Vor- und Nachteile der Berücksichtigung der Gesamtmussunsicherheit

- Da alle Messunsicherheitskomponenten berücksichtigt werden, ist das Risiko falsch-positiver und falsch-negativer Entscheidungen kontrollierbar.
- Für alle Messunsicherheitskomponenten müssen Berechnungsverfahren bzw. Informationen vorhanden sein, aus denen sich die Beiträge ermitteln lassen. In Bezug auf die Fundamentalvariabilität kann dies z.B. bedeuten, dass die Annahmen zur Verteilung der Schadstoffe ein worst-case-Szenario darstellen.

Vor- und Nachteile der Berücksichtigung der analytischen Messunsicherheit

- Wenn Messunsicherheitskomponenten in der Messunsicherheitsbetrachtung unberücksichtigt bleiben, muss dies in der Interpretation der Ergebnisse entsprechend kommuniziert und berücksichtigt werden. Geschieht dies nicht, kann das Risiko falsch-positiver und falsch-negativer Entscheidungen sehr hoch ausfallen und den vorgegebenen Rahmen bei weitem überschreiten.
- Die Ermittlung der einzelnen Unsicherheitsbeiträge gestaltet sich recht einfach, da Informationen aus Ringversuchen sowie aus in-house Validierungen herangezogen bzw. anhand experimenteller Untersuchungen mit überschaubarem Aufwand ermittelt werden können.

Messunsicherheit und Ergebnisunsicherheit

Um Missverständnisse zu vermeiden, wird in der Handlungsanleitung unter dem Begriff Messunsicherheit grundsätzlich die analytische Messunsicherheit verstanden. Im Gegensatz erfasst der Begriff der Ergebnisunsicherheit alle Komponenten der Messunsicherheit, die für das jeweilige Ergebnis in Betracht kommen, also nicht nur die analytische Messunsicherheit, sondern auch alle weiteren Messunsicherheitskomponenten.

4.3 Durchführung eines Workshops/Fachgespräch mit dem Fachbeirat für Bodenuntersuchungen (FBU)

Das erarbeitete Konzept zur Berücksichtigung der Messunsicherheit im Rahmen des Vollzugs der BBodSchV wurde auf der FBU-Sitzung am 24.02.2017 am Deutschen Institut für Normung (DIN e.V) in Berlin vorgestellt und diskutiert.

In der Sitzung wurden folgende Vorschläge für Qualitätsgrenzen erarbeitet:

Feststellung einer Prüfwertüberschreitung: Für Kinderspielflächen und Flächen ab 10 Hektar wird als Qualitätsgrenze zunächst der dreifache Prüfwert vorgeschlagen, ansonsten der vierfache Prüfwert.

Feststellung einer Maßnahmenwertüberschreitung: Als Qualitätsgrenze wird zunächst der zweifache Maßnahmenwert vorgeschlagen.

Eine weiterführende Diskussion wird im Rahmen des geplanten Abschlussworkshops im September 2017 erfolgen (Arbeitspaket C3).

5 Erarbeitung einer Handlungsanleitung für den Vollzug[5]

5.1 Spezifizierung der empfohlenen Vorgehensweise

In den nachfolgenden Kapiteln ist die empfohlene Vorgehensweise für den Umgang mit der Messunsicherheit bei der Überschreitung von Prüf- und Maßnahmenwerte für den Vollzug der BBodSchV beschrieben (Abschnitt 5.1.1).

Ergänzend sind die Berechnungsgrundlagen zur Ermittlung der Messunsicherheitskomponenten sowie die Herleitung der Bewertungs- und Qualitätsgrenzen erläutert (Abschnitt 5.1.2).

Abschließend wird ein Konzept für ein Berechnungsprogramm zur Ermittlung der Messunsicherheit im Vollzug der BBodSchV vorgestellt (Abschnitt 5.1.3).

5.1.1 Empfohlene Vorgehensweise für den Umgang mit der Messunsicherheit bei der Überschreitung von Prüf- und Maßnahmenwerte für den Vollzug der BBodSchV

5.1.1.1 Messunsicherheitskomponenten

Es wird empfohlen, folgende sechs Messunsicherheitskomponenten bei der Ermittlung der Gesamtmessunsicherheit zu berücksichtigen (siehe auch Abschnitt 4.1.1)

(1) Räumliche Heterogenität,
(2) Systematische Abweichungen des Probennahmeverfahrens,
(3) Zufällige Abweichungen des Probennahmeverfahrens,
(4) Fundamentalvariabilität bei der Gewinnung der Laborprobe,
(5) Systematische Abweichungen des Analysenverfahrens (systematische Abweichungen bei Gewinnung einer Analysenprobe aus der Laborprobe, bei Vorbereitung der Analysenprobe zur Messprobe und bei Bestimmung des Messwertes aus der Messprobe),
(6) Zufällige Abweichungen des Analysenverfahrens (zufällige Abweichungen bei Gewinnung einer Analysenprobe aus der Laborprobe inklusive Fundamentalvariabilität, bei Vorbereitung der Analysenprobe zur Messprobe und bei Bestimmung des Messwertes aus der Messprobe).

Diese sechs Messunsicherheitsbeiträge erfassen die von der DAkkS geforderten Beiträge und berücksichtigen deren Gesamteffekt in der Gesamtmessunsicherheit (siehe auch Tabelle 4).

An dieser Stelle wird nochmal angemerkt, dass die Fundamentalvariabilität unter Umständen zweimal wirken kann. Zum einen während der Probenahme bei der Entnahme der Einzelproben, und zum anderen bei der Gewinnung einer Analysenprobe aus der Laborprobe.

5.1.1.2 Wann liegt eine Überschreitung von Prüf- oder Maßnahmenwerten vor?

Nach allgemeinen verwaltungsrechtlichen Grundsätzen muss dem Eigentümer/Besitzer der Verdachtsfläche hinreichend sicher die Überschreitung von Prüf- oder Maßnahmenwerten nachgewiesen werden. Das Ziel besteht darin, diesen Nachweis mit statistisch abgesicherten Methoden zu realisieren. Ein Analysenergebnis gilt nur dann als positiv, wenn der zulässige Prüf-/Maßnahmenwert zuzüglich der statistisch abgesichert ermittelten Messunsicherheit überschritten ist. Diese Berücksichtigung der Messunsicherheit schützt und begünstigt den Überwachten/Eigentümer/Besitzer. Für Prüfwerte ist

[5] Die letztgültige Fassung ist Kapitel 4 („Umgang mit der Ergebnisunsicherheit bei der Bewertung von Messwerten im Rahmen der Untersuchung“) der „Handlungsanleitung zum Umgang mit der Ergebnisunsicherheit bei der Über- und Unterschreitung von Prüf- und Maßnahmenwerten für den Vollzug der Bundes-Bodenschutz- und Altlastenverordnung“ zu entnehmen.

diese Vorgehensweise akzeptabel, bei einer erheblichen Überschreitung von Maßnahmenwerten sind jedoch gesundheitliche Risiken nicht ausgeschlossen, so dass Prüf- und Maßnahmenwerte unterschiedlich behandelt werden. Die folgenden Ausführungen gelten sowohl für Einzelanalysen als auch für Mittelwerte von Einzelanalysen.

5.1.1.2.1 Prüfwertüberschreitung

Für die Feststellung einer Prüfwertüberschreitung werden zwei Vorgehensweisen vorgeschlagen. Die Feststellung erfolgt entweder auf Basis des jeweiligen Messunsicherheitsbereiches eines Analysenergebnisses oder auf Basis seiner Indizienkraft. Die beiden Vorgehensweisen sind gleichwertig; allerdings ermöglicht die Bestimmung der Indizienkraft eine weitergehende Bewertung auch unter Einbeziehung anderer Informationen.

Bei der Berechnung des Messunsicherheitsbereichs eines Analysenergebnisses werden alle in Anschnitt 5.1.1.1 beschriebenen Messunsicherheitskomponenten berücksichtigt. Die resultierende Unsicherheit wird als Ergebnisunsicherheit bezeichnet. Sie bildet die Basis für die Bewertung, ob das Analysenergebnis den Prüfwert überschreitet oder nicht.

Bewertung auf Basis des Messunsicherheitsbereiches

Damit die Überschreitung eines Prüfwertes als hinreichend nachgewiesen gelten kann, muss der Messunsicherheitsbereich für das Analysenresultat vollständig oberhalb des Prüfwertes liegen. Die Messunsicherheit muss bei jeder Untersuchung dokumentiert werden. Wenn der Messunsicherheitsbereich für das Analysenresultat nicht vollständig oberhalb des Prüfwertes liegt, muss zugleich geprüft werden, ob der Messunsicherheitsbereich vollständig unterhalb einer Maximalgrenze (= Qualitätsgrenze) liegt. Wenn der Messunsicherheitsbereich sowohl mit dem Prüfwert als auch mit der Maximalgrenze überlappt, erlaubt das Analysenresultat keine abgesicherte Bewertung.

Der Ablauf bei der Bewertung des Analysenergebnisses bzgl. einer Prüfwertüberschreitung – auf Basis des Messunsicherheitsbereiches – ist in Abbildung 9 dargestellt.

Abbildung 10 soll die drei Situationen bei der Bewertung eines Analysenresultates bezüglich einer Prüfwertüberschreitung auf Basis des Messunsicherheitsbereiches ergänzend veranschaulichen. Als Maximalgrenze wird hier der 3-fache Prüfwert verwendet.

Abbildung 9: Ablaufdiagramm im Fall einer Bewertung des Analysenergebnisses bei orientierenden Untersuchungen auf Basis des Messunsicherheitsbereiches (MU-Bereiches). Ausgangspunkt sind der Probenahmeplan und die Analysenergebnisse aller untersuchten Misch- bzw. Einzelproben. Anschließend wird für das mittlere Analysenergebnis der Messunsicherheitsbereich zum Niveau 90 % bestimmt. Falls der MU-Bereich vollständig oberhalb des Prüfwertes liegt, gilt der Prüfwert als überschritten. Falls nein, wird geprüft, ob der MU-Bereich vollständig unterhalb der Maximalgrenze liegt, in diesem Beispiel der 3-fache Prüfwert. Falls ja, gilt der Prüfwert nicht als überschritten. Falls der MU-Bereich sowohl den Prüfwert als auch den Maximalwert überlappt, ist das Analysenresultat zu unsicher und sollte nicht zur alleinigen Bewertung herangezogen werden.

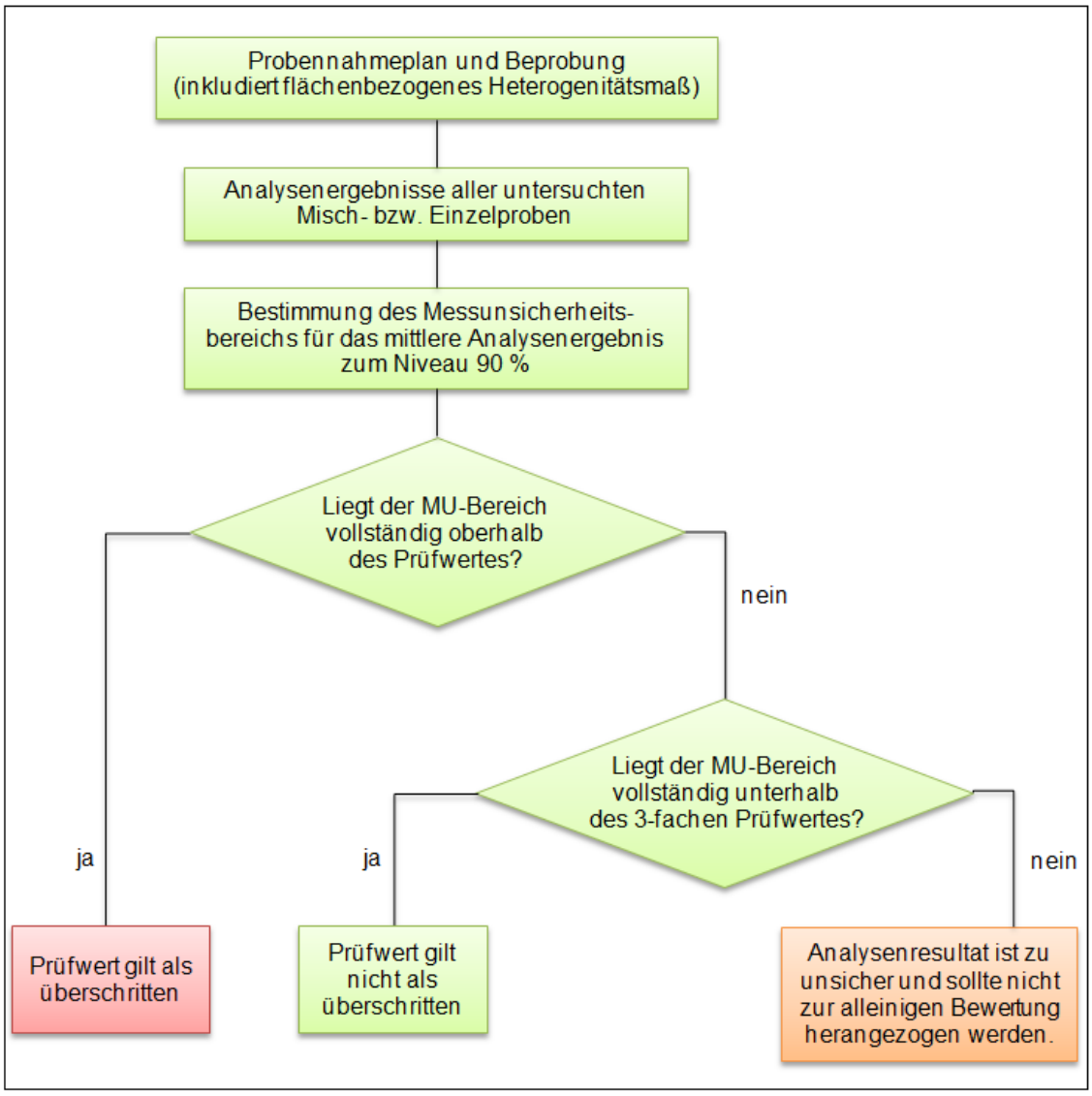
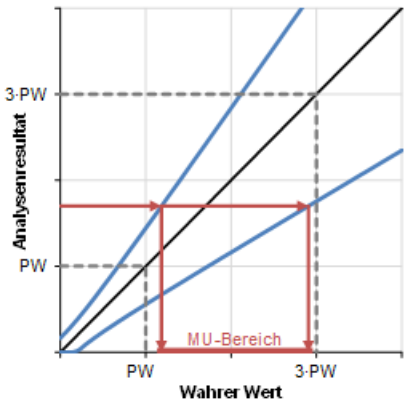
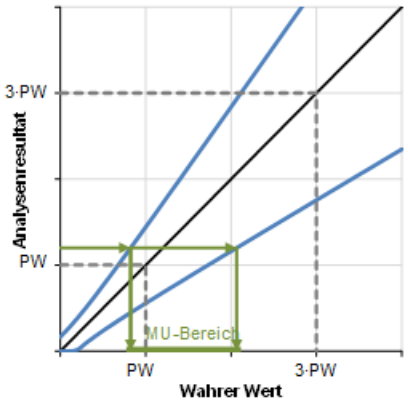
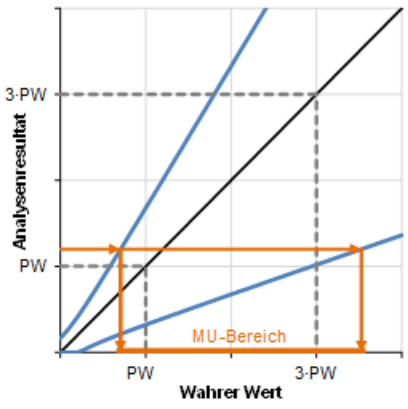


Abbildung 10: Messunsicherheitsbereich des Analysenresultates für die drei relevanten Bewertungssituationen im Fall der Bewertung bzgl. einer Prüfwertüberschreitung. Die blauen Kurven markieren die untere und obere Grenze des Messunsicherheitsbereiches zum Niveau 90 % für ein Analysenresultat und die schwarze Kurve markiert den wahren Wert. PW – Prüfwert.

Der Prüfwert gilt als überschritten, da der Messunsicherheitsbereich des Analysenergebnisses den Prüfwert überschreitet.	
Der Prüfwert gilt als nicht überschritten, da der Messunsicherheitsbereich des Analysenergebnisses den Prüfwert, aber nicht den 3-fachen Prüfwert überlappt.	
Das Analysenresultat ist zu unsicher und sollte nicht zur alleinigen Bewertung herangezogen werden, da der Messunsicherheitsbereich des Analysenresultats den Prüfwert und den 3-fachen Prüfwert überlappt.	

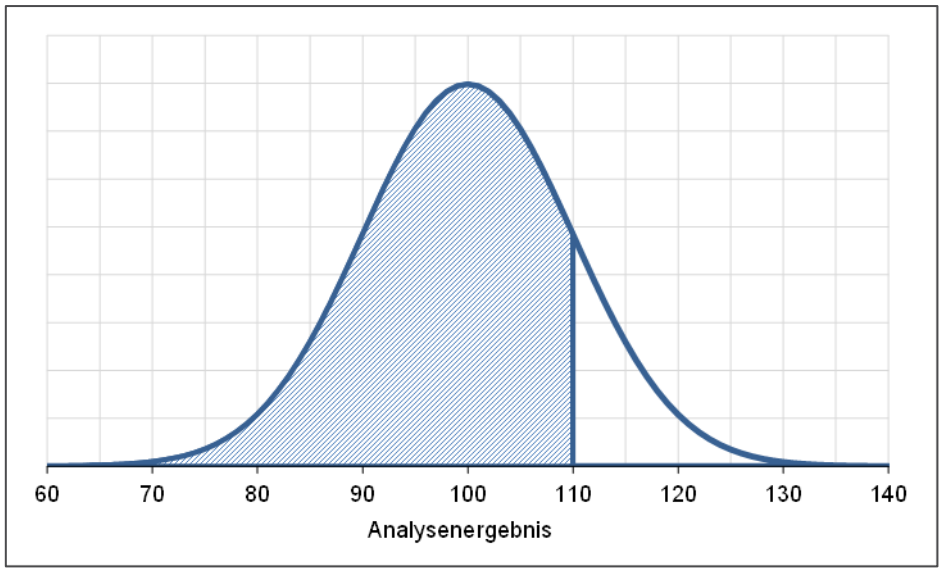
Bewertung auf Basis der Indizienkraft

Weil jede Bewertung im Hinblick auf eine Prüfwertüberschreitung einer Unsicherheit unterliegt, bietet es sich an, diese Unsicherheit anhand der sogenannten „Indizienkraft“ für eine Überschreitung des Prüfwertes zu beschreiben. Diese Indizienkraft ergibt sich daraus, wie plausibel das Analysenergebnis unter der Annahme ist, dass der wahre Kontaminationswert der Verdachtsfläche unter dem Prüfwert liegt:

- Ist das Analysenergebnis weit unterhalb des Prüfwertes, besteht kein Grund für die Annahme, dass der Prüfwert überschritten ist. In diesem Falle liegt die Indizienkraft bei 0.
- Ist das Analysenergebnis weit oberhalb des Prüfwertes, spricht alles dafür, dass der Prüfwert überschritten ist. In diesem Falle liegt die Indizienkraft bei 1.

Bestimmen lässt sich die Indizienkraft wie folgt: Sie entspricht der Wahrscheinlichkeit für das tatsächlich gemessene Analysenergebnis unter der hypothetischen Annahme, dass der Prüfwert auf der Verdachtsfläche in Wirklichkeit nicht überschritten wurde. Grafisch darstellen lässt sich diese Wahrscheinlichkeit – unter der Annahme einer statistischen Unsicherheit von 10 % - wie in Abbildung 11:

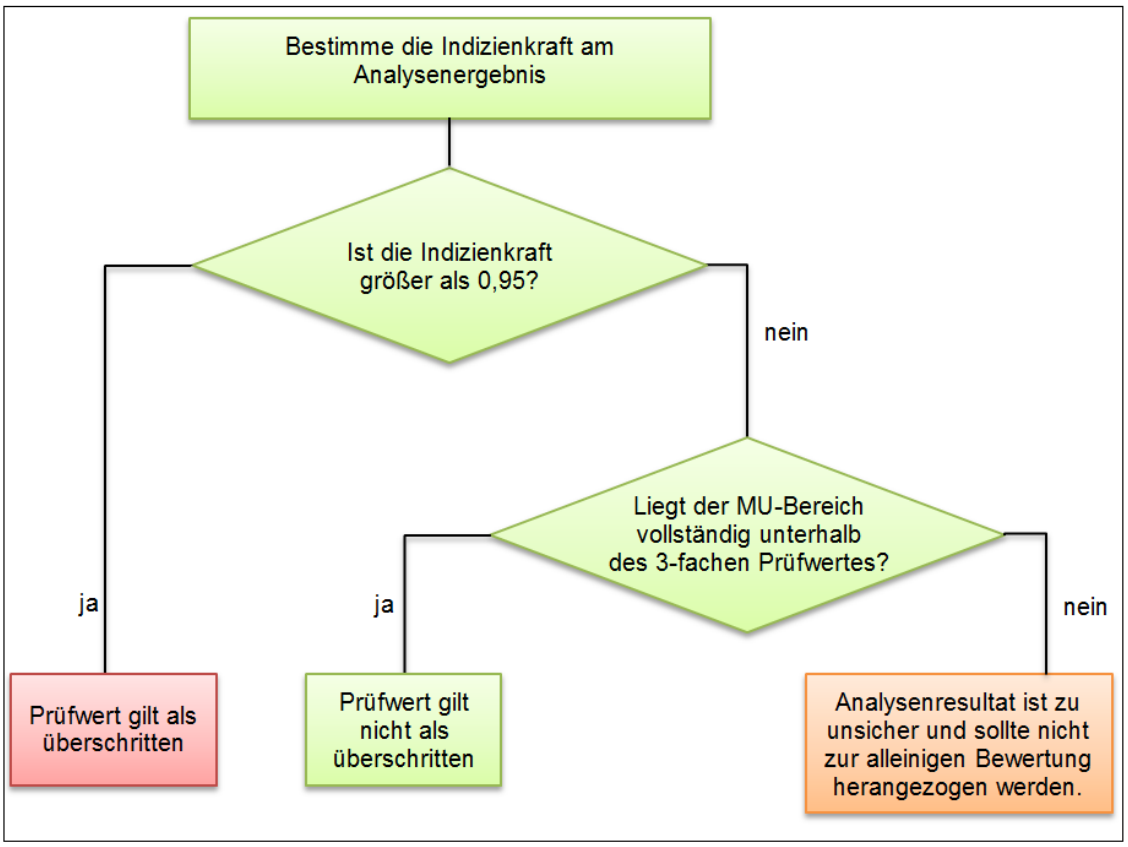
Abbildung 11: Statistische Verteilung hypothetischer Analysenergebnisse unter der Annahme, dass der wahre Gehalt der Verdachtsfläche beim Prüfwert 100 liegt, Das tatsächliche Analysenergebnis liegt bei 110, und der schraffierte Bereich entspricht der Indizienkraft, d.h. der Wahrscheinlichkeit, dass das Analysenergebnis nicht überschritten wird. Diese Wahrscheinlichkeit liegt bei 0,84, wenn die Messunsicherheit bei 10 % liegt.



Eine Indizienkraft in Höhe von 0,84 kann - für sich genommen - noch nicht als zwingend angesehen werden, d. h. bei diesem Wert kann noch nicht gefolgert werden, dass der Prüfwert überschritten ist. Hierzu wäre eine Indizienkraft von 0,95 erforderlich. Eine Indizienkraft von 0,95 bedeutet, dass der Messunsicherheitsbereich für das Analysenresultat vollständig oberhalb des Prüfwertes liegt.

In Abbildung 12 ist der Ablauf bei der Bewertung des Analysenergebnisses bzgl. einer Prüfwertüberschreitung – auf Basis der Indizienkraft – dargestellt.

Abbildung 12: Ablaufdiagramm im Fall einer Bewertung des Analysenergebnisses bei orientierenden Untersuchungen auf Basis der Indizienkraft. Ausgangspunkt ist die Indizienkraft am Analysenergebnis. Falls die Indizienkraft größer als 0,95 ist, gilt der Prüfwert als überschritten. Falls nein, wird geprüft, ob der Messunsicherheitsbereich für das Analysenergebnis vollständig unterhalb des 3-fachen Prüfwertes liegt. Nur wenn letzteres der Fall ist, gilt der Prüfwert nicht als überschritten. Andernfalls ist das Analysenresultat zu unsicher.



5.1.1.2.2 Maßnahmenwertüberschreitung

Auch die Feststellung einer Maßnahmenwert-Überschreitung erfolgt entweder auf Basis des jeweiligen Messunsicherheitsbereiches eines Analysenergebnisses oder auf Basis seiner Indizienkraft. Die beiden Vorgehensweisen sind gleichwertig.

Auch hier werden bei der Berechnung des Messunsicherheitsbereichs eines Analysenergebnisses alle in Abschnitt 4.1.1 beschriebenen Messunsicherheitskomponenten berücksichtigt. Die resultierende Ergebnisunsicherheit bildet die Basis für die Bewertung, ob das Analysenergebnis den Maßnahmenwert überschreitet oder nicht.

Bewertung auf Basis des Messunsicherheitsbereiches

Damit die Überschreitung eines Maßnahmenwertes als hinreichend nachgewiesen gelten kann, muss der Messunsicherheitsbereich für das Analysenresultat vollständig oberhalb des Maßnahmenwertes liegen. Die Messunsicherheit muss bei jeder Untersuchung dokumentiert werden. Wenn der Messunsicherheitsbereich für das Analysenresultat nicht vollständig oberhalb des Maßnahmenwertes liegt, muss zugleich geprüft werden, ob der Messunsicherheitsbereich vollständig unterhalb des zweifachen Maßnahmenwertes liegt. Wenn der Messunsicherheitsbereich sowohl mit dem Maßnahmenwert als auch mit dem zweifachen Maßnahmenwert überlappt, erlaubt das Analysenresultat keine abgesicherte Bewertung.

Der Ablauf bei der Bewertung des Analysenergebnisses bzgl. einer Maßnahmenwertüberschreitung – auf Basis des Messunsicherheitsbereiches – ist in Abbildung 13 dargestellt.

Ferner veranschaulicht Abbildung 14 noch einmal die drei Situationen bei der Bewertung eines Analysenresultates bzgl. einer Maßnahmenwertüberschreitung auf Basis des Messunsicherheitsbereiches.

Abbildung 13: Ablaufdiagramm im Fall einer Bewertung des Analysenergebnisses bei Detailuntersuchungen auf Basis des Messunsicherheitsbereiches (MU-Bereiches). Ausgangspunkt sind der Probennahmeplan und die Analysenergebnisse aller untersuchten Misch- bzw. Einzelproben. Anschließend wird für das mittlere Analysenergebnis der Messunsicherheitsbereich zum Niveau 90 % bestimmt. Falls der MU-Bereich vollständig oberhalb des Maßnahmenwertes liegt, gilt der Maßnahmenwert als überschritten. Falls nein, wird geprüft, ob der Messunsicherheitsbereich vollständig unterhalb des zweifachen Maßnahmenwertes liegt. Falls ja, gilt der Maßnahmenwert nicht als überschritten. Falls der MU-Bereich sowohl den Maßnahmenwert als auch den zweifachen Maßnahmenwert überlappt, ist das Analysenresultat zu unsicher und sollte nicht zur alleinigen Bewertung herangezogen werden.

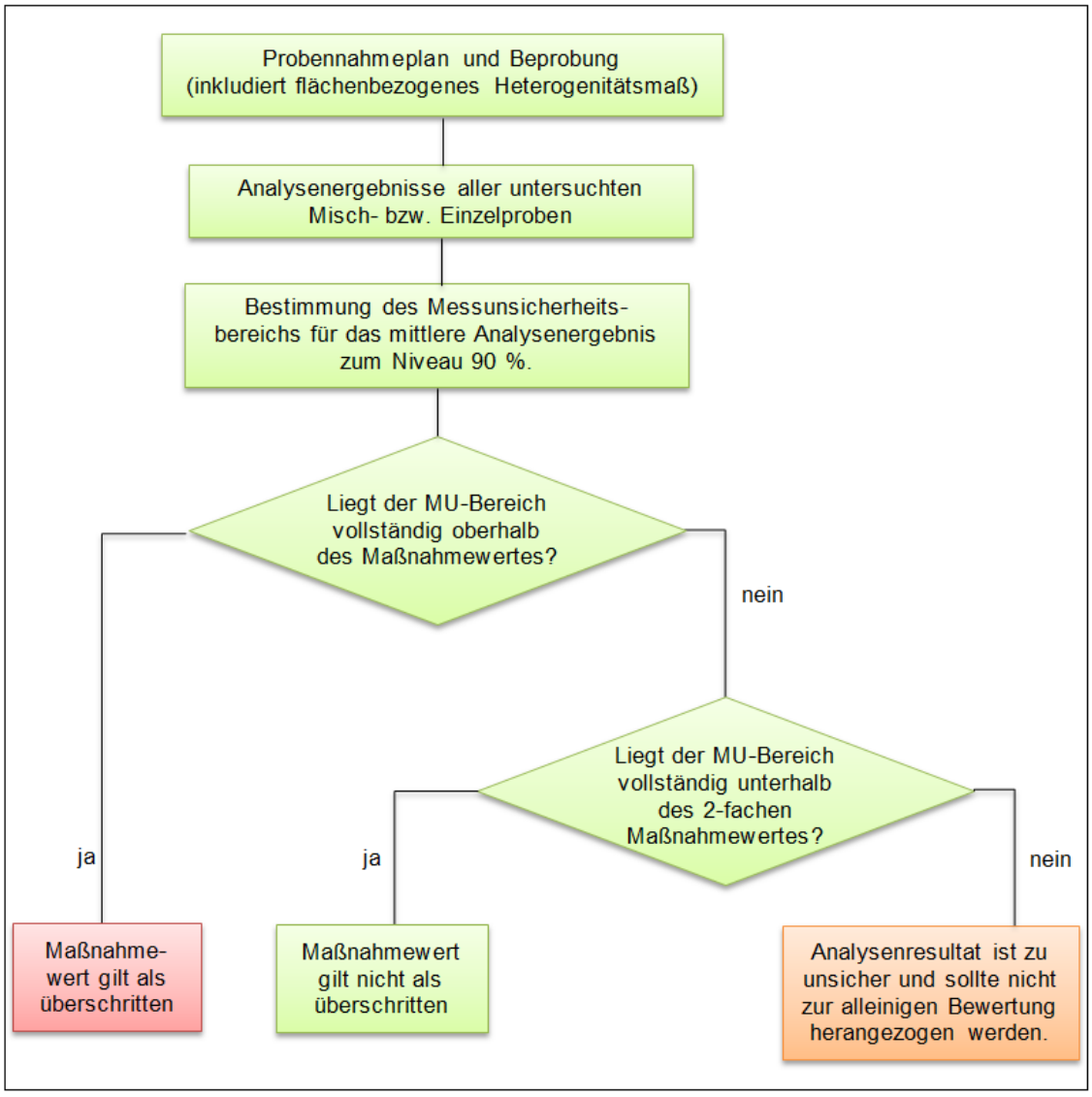
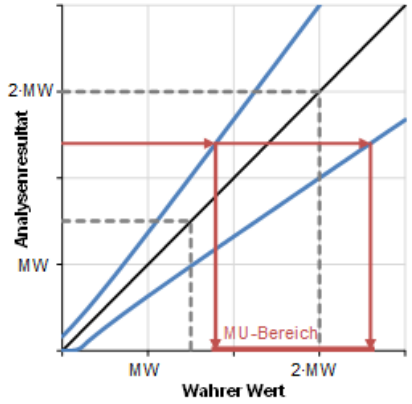
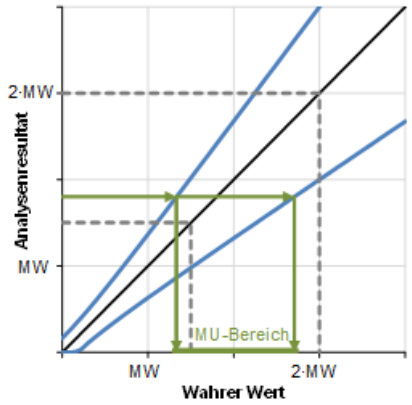
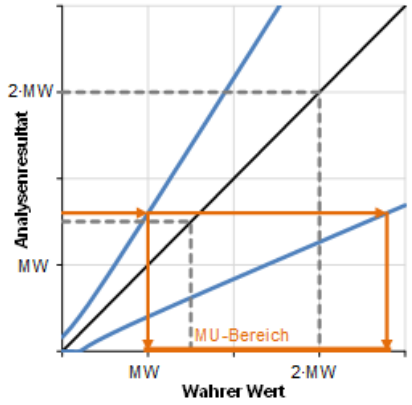


Abbildung 14: Messunsicherheitsbereich des Analysenresultates für die drei relevanten Bewertungssituationen im Fall der Bewertung bzgl. einer Maßnahmenwertüberschreitung. Die blauen Kurven markieren die untere und obere Grenze des Messunsicherheitsbereiches zum Niveau 90 % für ein Analysenresultat und die schwarze Kurve markiert den wahren Wert. MW – Maßnahmenwert

Der Maßnahmenwert gilt als überschritten, da der Messunsicherheitsbereich des Analysenergebnisses den Maßnahmenwert überschreitet.	
Der Maßnahmenwert gilt als nicht überschritten, da der Messunsicherheitsbereich des Analysenergebnisses den Maßnahmenwert, aber nicht den zweifachen Maßnahmenwert überlappt.	
Das Analysenresultat ist zu unsicher und sollte nicht zur alleinigen Bewertung herangezogen werden, da der Messunsicherheitsbereich des Analysenresultats den Maßnahmenwert und den zweifachen Maßnahmenwert überlappt.	

Bewertung auf Basis der Indizienkraft

Ebenfalls wie die Bewertung in Hinblick auf eine Prüfwertüberschreitung kann die Bewertung im Hinblick auf eine Maßnahmenwertüberschreitung anhand der „Indizienkraft“ erfolgen. Diese Indizienkraft drückt dann aus, wie plausibel das Analysenergebnis unter der Annahme ist, dass der wahre Kontaminationswert der Verdachtsfläche unter dem Maßnahmenwert liegt. Sie entspricht der Wahrscheinlichkeit für das tatsächlich gemessene Analysenergebnis unter der hypothetischen Annahme, dass der Maßnahmenwert auf der Verdachtsfläche in Wirklichkeit nicht überschritten wurde. Eine Indizien-

kraft von 0,95 bedeutet, dass der Messunsicherheitsbereich für das Analysenresultat vollständig oberhalb des Maßnahmenwertes liegt und der Maßnahmenwert gilt als überschritten.

5.1.2 Berechnungsgrundlagen

Standardfehler des Mittelwertes und Unsicherheitskomponenten

Die Streuung zwischen den Mittelwerten σ_n an der wahren Konzentration x setzt sich zusammen aus

Zufälligem Analysenfehler (σ_r),

Fundamentalvariabilität (σ_f),

Räumlicher Heterogenität (σ_h),

Laborbias (systematischer Anteils der analytischen Unsicherheit) (σ_L), und

Probennahmebias (systematische Probennahmeunsicherheit) (σ_p)

$$\sigma_n(x) = \sqrt{\frac{\sigma_r^2(x) + \sigma_f^2(x) + \sigma_h^2(x)}{n} + \sigma_L^2(x) + \sigma_p^2(x)}$$

Ermittlung der Bewertungsgrenze

- Die Bewertungsgrenze gibt an, ab welchem gemessenem Mittelwert die Verdachtsfläche als positiv gilt, d.h. ab welchem Mittelwert der Prüfwert signifikant überschritten ist
- Bewertungsgrenze = Prüf- bzw. Maßnahmenwert + $k(\alpha) \cdot s_n$(Prüfwert bzw. Maßnahmenwert)

Ermittlung der Qualitätsgrenze

- Die Qualitätsgrenze ist ein Qualitätskriterium für die Gesamtheit aller Verfahren zur Überprüfung, ob die Messunsicherheit nicht zu groß ist.
- Wenn der Mittelwert die Bewertungsgrenze nicht überschreitet liegt der tatsächliche Mittelwert (mittlere Konzentration der Verdachtsfläche) signifikant unter der Qualitätsgrenze.
- Die Qualitätsgrenze gibt an, ab welcher wahren Konzentration (1) ein Messwert mit hoher Wahrscheinlichkeit oberhalb der Bewertungsgrenze liegt und (2) das Falsch-Negativ-Risiko noch akzeptabel ist.
- Die Qualitätsgrenze ist jene wahre Konzentration, deren untere Grenze des 90%-Vorhersageintervalls die Bewertungsgrenze ist, d.h.
- Qualitätsgrenze - $k(\alpha) \cdot s_n$(Qualitätsgrenze)= Bewertungsgrenze

Ermittlung des zufälligen Analysenfehlers und des Laborbias

Wenn Ringversuchsdaten verfügbar:

- Die Wiederholstdabw. und Vergleichstdabw. (absolut und relativ) werden aus Ringversuchen mit vergleichbaren Matrizes bezogen
- Ableitung auf Basis bestehender Ringversuche, in denen Fundamentalvariabilität keine Rolle gespielt hat oder Einfluss der Fundamentalvariabilität bekannt ist und herausgerechnet werden kann

- Aus Ringversuchsdaten (Mittelwerte und Stdabw.) wird das konzentrationsabhängige Varianzmodell bzw. der konstante und proportionale Fehleranteil geschätzt, separat für die Wiederhol- und Vergleichstdabw.
- Der zufällige Analysenfehler ist die Wiederholstdabw. sr
- Aus Differenz zwischen Vergleich- und Wiederholvarianz kann Laborbias ($\sigma_L^2 = \sigma_R^2 - \sigma_r^2$) ermittelt werden.

Wenn keine Ringversuchsdaten verfügbar:

- Für Parameter ohne Ringversuchsdaten wird auf vergleichbare schwierigere Parameter zurückgegriffen.
- oder Daten aus Laborvergleichsuntersuchungen
    - Zufälliger Analysenfehler wird auf 1/3 oder ½ der Vergleichstdabw. gesetzt
    - Laborbias ist dann $\sqrt{3}/2$ bzw. $\sqrt{8}/3$ der Vergleichstdabw.

Ermittlung des Probennahmebias

Wenn Ringversuchsdaten (Methodenvalidierung oder Laborvergleichsuntersuchung) verfügbar:

- Ableitung auf Basis bestehender Ringversuche, in denen Fundamentalvariabilität keine Rolle gespielt hat
- Aus Ringversuchsdaten (Mittelwerte und Stdabw.) wird ein konzentrationsabhängiges Varianzmodell bzw. der konstante und proportionale Fehleranteil geschätzt.

Wenn keine Ringversuchsdaten verfügbar:

- Aufstellung von Regeln zur Festsetzung des PN-Fehlers

Ermittlung der Fundamentalvariabilität

- Als reasonable worst case wird angenommen, dass die Gehalte der Merkmalsträger lognormalverteilt sind mit $\sigma = 0.5$ (d.h. die Standardabweichung beträgt ungefähr 50 %).
- Aus den Eingaben des Anwenders zur
    - Bodenart bzw. Größe der Störpartikel:
        - Entweder Angabe des Durchmessers der Störpartikel in mm oder
        - Auswahl der Bodenart mit folgenden Annahmen zum Durchmesser der Störpartikel
            - Grobsand: 2 mm
            - Mittelsand: 0,63 mm
            - Feinsand: 0,2 mm
            - Ton/Schluff: 0,1 mm
    - Heterogenität der Fläche, d. h. wie sich die Störpartikel über die Fläche verteilen, wobei 100% einer homogenen Verteilung entspricht.

  - Falls keine Vorgabe durch den Anwender erfolgt, wird anhand der Größe der Fläche und des betrachteten Tiefenbereichs / Horizontbereichs eine Abschätzung vorgenommen.

  leitet sich ein Kontaminationsszenario ab.

- Fundamentalvariabilität wird für 4 Konzentrationen (im Bereich von der niedrigsten bis zur höchsten Probenkonz.) simuliert (pro Konzentration z.B. 100 Runs).
- Zum einen wird die Fundamentalvariabilität bei der Entnahme von Analysenproben aus den Laborproben und zum anderen die Fundamentalvariabilität bei der Entnahme von Einzelproben in der Simulation berücksichtigt.
- Die Simulationsberechnungen sind abhängig von der mittleren Konzentration, der Konzentrationsverteilung in den Merkmalsträgern, dem Volumen und der Anzahl der Einzelproben (Einstiche), dem Volumen der Laborprobe, dem Vermahlungsgrad, dem Volumen der vermahlenen Probe und der Analysenportion.
- Aus den Simulationsergebnissen kann die Streuung bzw. Stdabw. für die Fundamentalvariabilität s_f abgeleitet und das Präzisionsprofil $\sigma_f(x)$ (konzentrationsabängige Fundamentalvariabilität) ermittelt werden.

Räumliche Heterogenität

- Die räumliche Heterogenität ergibt sich aus $s_h = \sqrt{\text{Varianz n Einzelwerte} - \sigma_f^2 - \sigma_r^2}$
- Wenn Varianz der n Einzelwerte größer als $\sigma_f^2 + \sigma_r^2$ ist die räumliche Heterogenität gleich 0

5.1.3 Konzept für ein Berechnungsprogramm zur Ermittlung der Messunsicherheit im Vollzug der BBodSchV

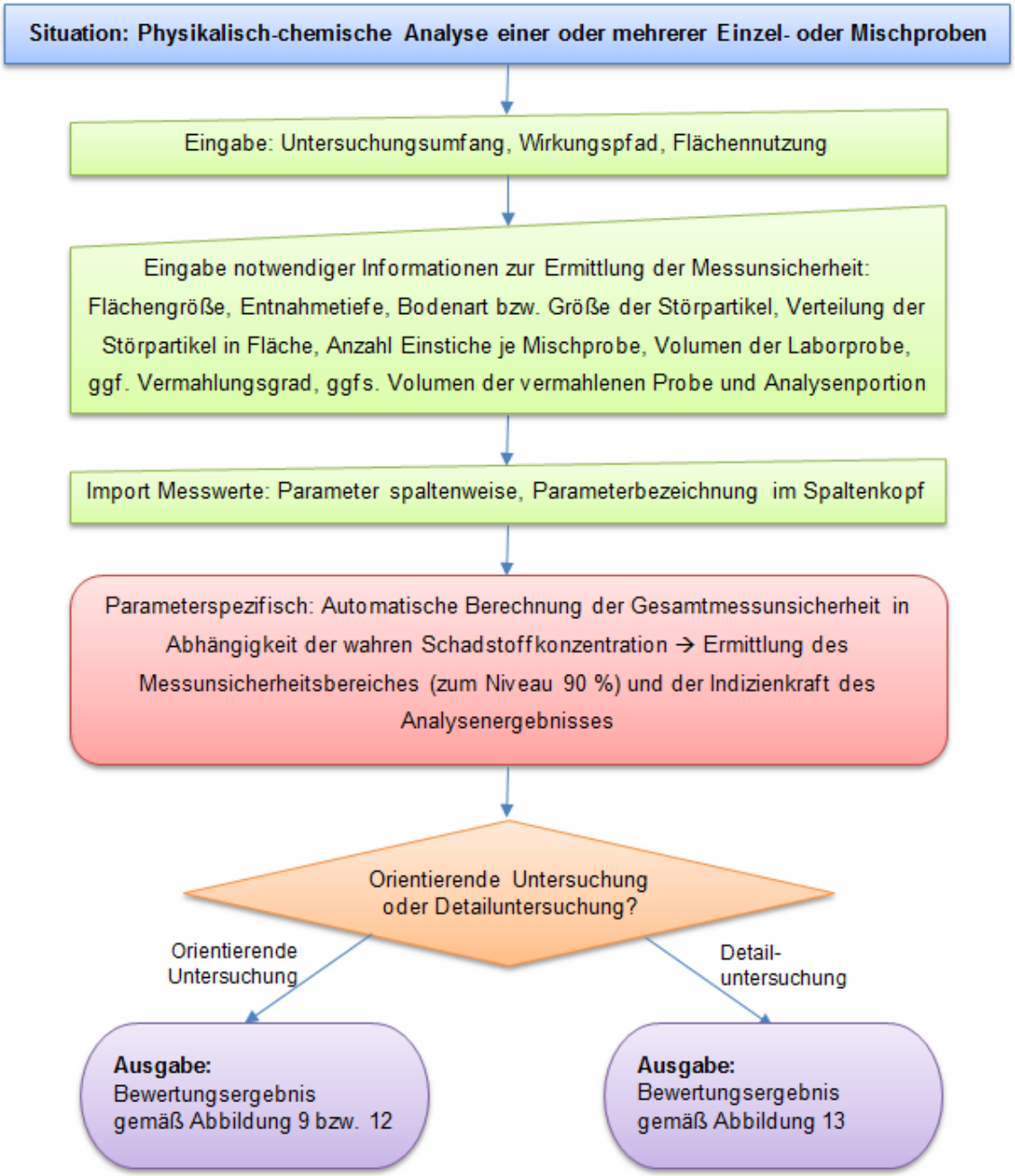
Neben der Erstellung einer Handlungsanleitung bietet es sich an, für die Vollzugsarbeiten ein Berechnungsprogramm (Tool) zur Verfügung zu stellen. Dies kann als Unterstützung für die Bewertung, ob die Prüf- bzw. Maßnahmenwerte gemäß BBodSchV am Ort der Beurteilung überschritten werden oder nicht, angesehen werden.

Die Messunsicherheit kann somit beispielsweise in Abhängigkeit des Untersuchungsparameters, der Eigenschaften der Bodenproben, Informationen zu Verfahren der Probennahme, Probenvorbehandlung und Analytik ermittelt werden. Unter Berücksichtigung der Gesamtmessunsicherheit erfolgt die Ausgabe des Bewertungsergebnisses. In die Gesamtmessunsicherheit fließen alle relevanten Unsicherheitsbeiträge ein.

Ergänzend zur Gesamtmessunsicherheit (= Ergebnisunsicherheit) ist für das Webtool die Ausgabe der analytischen Messunsicherheit vorgesehen. Dies erfolgt als zusätzliche Information, um den Beitrag dieser Komponente an der Gesamtmessunsicherheit darzulegen.

Ein mögliches Konzept für das Berechnungstool ist in Abbildung 15 in Form eines Flussdiagramms gezeigt. Die programmiertechnische Umsetzung war nicht Teil dieses FuE-Vorhabens.

Abbildung 15: Konzept für ein Berechnungsprogramm zur Ermittlung der Messunsicherheit im Vollzug der BBodSchV.



5.2 Erstellung einer Handlungsanleitung für die empfohlene Vorgehensweise

Im Rahmen dieses Arbeitspaketes wurde eine Handlungsanleitung ausgearbeitet. Die Handlungsanleitung beschreibt den Akteuren im Vollzug des Bodenschutzes, wie die Messunsicherheit ermittelt und wie sie bei der Beurteilung der Prüf- und Maßnahmenwerte berücksichtigt wird.

Der aktuelle Entwurf der Handlungsanleitung ist als separate Anlage zum Bericht verfügbar (siehe Abschnitt 7.1).

5.3 Durchführung eines Workshops/Fachgespräch mit dem Fachbeirat für Bodenuntersuchungen (FBU) und Durchführung eines Abschlussworkshops

Den Projektabschluss bildet die Durchführung eines Workshops mit Vertretern des UBA, des BMUB, des FBU, der Bund-Länder-Arbeitsgruppen LABO, der LAGA, den Vollzugsbehörden des Bodenschutzes und der Industrie. Der abschließende Workshop mit ca. 100 Teilnehmern wird am 26.September 2017 in Dessau-Roßlau am Umweltbundesamt stattfinden. Die Ergebnisse des Workshops werden in die Handlungsanleitung eingearbeitet werden.

6 Rechtliche Grundlagen

Die rechtlichen Rahmenbedingungen für die Anwendung von Prüf- und Maßnahmenwerten und für die Berücksichtigung der Ergebnisunsicherheit bzw. Messunsicherheit ergeben sich aus dem Bundes-Bodenschutzgesetz (BBodSchG)[6], aus der Bundes-Bodenschutz- und Altlastenverordnung (BBodSchV)[7] sowie aus allgemeinen verfassungs- und verwaltungsrechtlichen Regeln.[8]

Was die Vorgaben der BBodSchV betrifft sind detaillierte Ausführungen der „Handlungsanleitung zum Umgang mit der Ergebnisunsicherheit bei der Über- und Unterschreitung von Prüf- und Maßnahmenwerten für den Vollzug der Bundes-Bodenschutz- und Altlastenverordnung“ zu entnehmen (Kapitel 2)[9].

6 Gesetz zum Schutz vor schädlichen Bodenveränderungen und zur Sanierung von Altlasten vom 17.03.1998 (BGBl. I, S. 502, zuletzt geändert am 27.09.2017 (BGBl. I, S. 3465).

7 Vom 12.07.1999 (BGBl. I, S. 1554), zuletzt geändert am 27.09.2017 (BGBl. I, S. 3465).

8 Die Anforderungen und Empfehlungen aus technischen Regelwerken – z.B. DIN und/oder ISO-Regeln, auf die in BBodSchV bzw. E-BBodSchV verwiesen wird – werden in diesem Teil nicht aufbereitet und dargestellt.

9 Verfasser des Kapitel „Rechtliche Grundlagen“ in der „Handlungsanleitung zum Umgang mit der Ergebnisunsicherheit bei der Über- und Unterschreitung von Prüf- und Maßnahmenwerten für den Vollzug der Bundes-Bodenschutz- und Altlastenverordnung“ sind: Rechtsanwälte Dr. Achim Willand und Moriz Felder, Anwaltskanzlei [GGSC], 10243 Berlin.

7 Anhang

7.1 Anlagen zum Bericht

Folgende Anlagen zum Abschlussbericht sind verfügbar:

1. 2016-02-17_FBU-Sitzung Projekt MU BBodSchV_QuoData.pdf
   Auf der FBU Sitzung am 17.02.2016 in Dessau-Roßlau vorgestellte Präsentation zum aktuellen Arbeitsstand im FuE-Vorhaben „Umgang mit der Messunsicherheit bei der Überschreitung von Prüf- und Maßnahmenwerten für den Vollzug der Bundes-Bodenschutz- und Altlastenverordnung“.
2. 2017-02-24_FBU-Sitzung Projekt MU BBodSchV_QuoData.pdf
   Auf der FBU Sitzung am 24.02.2017 in Berlin vorgestellte Präsentation zum aktuellen Arbeitsstand im FuE-Vorhaben „Umgang mit der Messunsicherheit bei der Überschreitung von Prüf- und Maßnahmenwerten für den Vollzug der Bundes-Bodenschutz- und Altlastenverordnung“.
3. 2017-06-30_ Handlungsanleitung Messunsicherheit BBodSchV.pdf
   Entwurf der Handlungsanleitung mit Stand zum 30.06.2017

7.2 Ergänzende Ergebnisse und Informationen zu Arbeitspaket A

7.2.1 Zusammenfassung der Rechercheergebnisse zum Umgang mit der Messunsicherheit in anderen nationalen und internationalen Verordnungen. Normen und Richtlinien

7.2.1.1 Anwendungsbereich und Grenzwertdefinitionen

Bereich	Verordnung/Norm	Anwendungsbereich	Grenzwertdefinition(en)
BMUB	Bundes-Bodenschutz- und Altlastenverordnung (BBodSchV)	Untersuchung und Bewertung von Verdachtsflächen, altlastverdächtigen Flächen, schädlichen Bodenveränderungen und Altlasten sowie für die Anforderungen an die Probenahme, Analytik und Qualitätssicherung nach BBodSchG	Maßnahmenwert: Bei Überschreitung ist in der Regel von einer schädlichen Bodenveränderung oder Altlast auszugehen und Maßnahmen zur Gefahrenabwehr erforderlich Prüfwert: Bei Überschreitung besteht Verdacht einer schädlichen Bodenveränderung oder Altlast und einzelfallbezogene Prüfung ist erforderlich Vorsorgewert: Bei Überschreitung besteht Besorgnis des Entstehens einer schädlichen Bodenveränderung oder Altlast
	Düngemittelverordnung (DüMV)	Inverkehrbringen von Düngemitteln (keine als EG-Düngemittel bezeichneten), Bodenhilfsstoffen, Kultursubstraten und Pflanzenhilfsmitteln	Gehaltsangaben der Inhaltsstoffe und Schadstoffe sind ab einem Mindestgehalt (Kennzeichnungsschwellen) vorgeschrieben. Vorgegebene Grenzwerte für Schadstoffe dürfen nicht überschritten werden. Höchstgehalte für Inhaltsstoffe dürfen nicht überschritten werden.
	Bioabfallverordnung (BioAbfV)	Verwertung von Bioabfällen auf landwirtschaftlich, forstwirtschaftlich und gärtnerisch genutzten Böden	Angabe von Gehalten die bei Aufbringung nicht überschritten werden dürfen (für Schwermetalle Blei, Cadmium, Chrom, Kupfer, Nickel, Quecksilber, Zink)
	Deponieverordnung (DepV)	Zuordnung der Abfälle zu unterschiedlich ausgestatteten Deponietypen	Zuordnungskriterien: Bei der Zuordnung von Abfällen und von Deponieersatzbaustoffen zu Deponien oder Deponieabschnitten der Klasse 0, I, II oder III sind Zuordnungswerte einzuhalten.
	Altölverordnung (AltölV)	Regelung der Verwertung und Beseitigung von Altöl in Deutschland	Keine Aufbereitung von Altölen, wenn die Grenzwerte für PCB und Gesamthalogen überschritten sind.
	Grundwasserverordnung (GrwV)	Schutz des Grundwassers gegen Verschmutzung durch bestimmte gefährliche Stoffe	Schwellenwert ist die Konzentration eines Schadstoffes oder Wert eines Verschmutzungsindikators im Grundwasser, die zum Schutz der menschlichen Gesundheit und der Umwelt festgelegt werden.
	Abwasserverordnung (AbwV)	Regelung der Mindestanforderungen, die für Erlaubnisse zum Einleiten von Abwasser in Gewässer festzusetzen sind	Festgesetzter Wert: einzuhaltender Wert oder in der wasserrechtlichen Zulassung festgesetzter Wert

	Chemikalien-Verbotsverordnung (ChemVerbotsV)	Regelung der Beschränkungen beim Inverkehrbringen und Regelung der Verbote von bestimmten Gefahrstoffen für den allgemeinen Gesundheits- und Umweltschutz im Bereich der Bundesrepublik Deutschland	Angaben von Grenzwerten für verschiedene Stoffe, die unterschritten werden müssen, um in Verkehr gebracht werden zu dürfen.
	Klärschlamm-verordnung (AbfKlärV)	Kontrolle der Nährstofffrachten aus Klärschlamm im Sinne guter fachlicher Praxis und Beschränkung des Eintrages von Schadstoffen auf ein pflanzenbaulich und umwelttoxikologisch unbedenkliches Maß	Grenzwert: keine explizite Definition (Grenzwerte für das Aufbringen von Klärschlamm auf landwirtschaftlich oder gärtnerisch genutzte Böden)
	Trinkwasser-verordnung (TrinkwV)	- Verordnung über die Qualität von Wasser für den menschlichen Gebrauch - Schutzvorschriften für Trinkwasser	- Grenzwert: keine explizite Definition (Grenzwerte müssen eingehalten werden um als Trinkwasser zu gelten und damit gesundheitlich unbedenklich zu sein) - technischer Maßnahmenwert (nur für Legionellen): bei Überschreitung Einleitung von Maßnahmen zur hygienisch-technischen Überprüfung der Trinkwasser-Installation im Sinne einer Gefährdungsanalyse
	ISO 17994	Festlegung eines Bewertungsverfahrens, um zwei Verfahren mit etablierten Leistungsmerkmalen zu vergleichen, die für den Nachweis oder die Quantifizierung derselben Zielgruppe oder Spezies von Mikroorganismen in Wasserproben vorgesehen sind	festgesetzte zulässige Differenz: kleinste signifikante mittlere relative Differenz zwischen Ergebnissen aus Verfahren A und B
	LAGA Methoden-sammlung Abfalluntersuchung	Ergebnisse der chemischen Untersuchung von Abfällen bilden in vielen Fällen die Grundlage einer Entscheidung über die Einstufung eines Abfalls als gefährlich/nicht gefährlich im Sinne der AVV (Europäische Abfallverzeichnis) und über die Art der Entsorgung dieses Abfalls (z. B. Zuordnung zu Deponie- und Verwertungsklassen).	- Keine explizite Definition von Grenzwert - Verweis auf Grenzwerte in übergeordneten Regelwerken, z.B. „EU-POP VO oder DepV
	Oberflächengewässerverordnung (OgewV)	Verordnung regelt bundeseinheitlich Anforderungen zum Schutz der Oberflächengewässer	Umweltqualitätsnorm (UQN): Konzentration eines bestimmten Schadstoffs oder einer bestimmten Schadstoffgruppe, die in Wasser, Sedimenten oder Biota aus Gründen des Gesundheits- und Umweltschutzes nicht überschritten werden darf. Die Einhaltung ist zu überprüfen, anhand des Jahresdurchschnittswertes für als JD-UQN gekennzeichnete Umweltqualitätsnormen und anhand der zulässigen Höchstkonzentration für als ZHK-UQN gekennzeichnete Umweltqualitätsnormen.
BMEL	Lebensmittel- und Futtermittelgesetzbuch (LFGB) und relevante EU Verordnungen	Festlegung grundsätzlicher Pflichten und Verbote bei der Herstellung und beim Verkauf von Lebensmitteln, Bedarfsgegenständen und Futtermitteln	zulässiger Grenzwert, Höchstgehalt oder Höchstmenge: keine explizite Definition Auslösewert: Grenzwert für den Gehalt eines gesundheitlich nicht erwünschten Stoffes, bei dessen Überschreitung Ursachen für Kontamination zu identifizieren und Maßnahmen einzuleiten.

	CD 2002/657/EC	Festlegung von Einzelheiten betreffend der Analyse bestimmter Stoffe und ihrer Rückstände in lebenden Tieren und tierischen Erzeugnissen	Ein zulässiger Grenzwert ist eine Rückstandshöchstmenge (MRL oder 0), eine maximale Konzentration oder eine sonstige maximale Toleranz für Stoffe, die an anderer Stelle in gemeinschaftlichen Rechtsvorschriften festgelegt ist
	VO (EU) 396/2005	- Schaffung eines einheitlichen Regelwerkes mit einer vollständigen Harmonisierung der Rückstandshöchstgehalte - Verordnung über Höchstgehalte an Pestizidrückständen in oder auf Lebens- und Futtermitteln pflanzlichen und tierischen Ursprungs	Rückstandshöchstgehalt“: höchste zulässige Menge eines Pestizidrückstands in oder auf Lebens- oder Futtermitteln, um gefährdete Verbraucher zu schützen
	VO EG Nr. 2073/2005	Festlegung mikrobiologischer Kriterien für bestimmte Mikroorganismen und der Durchführungsbestimmungen, die von den Lebensmittelunternehmern bei der Durchführung allgemeiner und spezifischer Hygienemaßnahmen einzuhalten sind	Richtwerte geben Mikroorganismengehalte an, die bei Einhaltung einer guten Hygienepraxis akzeptabel sind. Warnwerte geben Mikroorganismengehalte an, deren Überschreitung einen Hinweis darauf gibt, dass die Prinzipien einer guten Hygiene- und/oder Herstellungspraxis verletzt wurden. Bei einer Warnwertüberschreitung, ist eine Gesundheitsgefährdung des Verbrauchers nicht auszuschließen.
	ISO 3951	Verfahren für die Stichprobenprüfung anhand quantitativer Merkmale	Annehmbare Qualitätsgrenzlage oder Acceptable Quality Level (AQL): maximale Anteil aller fehlerhaften Teile, der bei einer Stichprobe als zulässige Qualität angesehen wird.
	Codex Alimentarius	Der Codex Alimentarius umfasst Standards der Vereinten Nationen für zahlreiche zur Abgabe an den Verbraucher bestimmte Lebensmittel. Die Standards sollen dem Verbraucher ein gesundheitlich unbedenkliches, unverfälschtes und ordnungsgemäß gekennzeichnetes Lebensmittel garantieren.	- Maximum Residue Levels (MRL): Pestizidrückstandsmenge, die höchstens in Lebensmitteln sein darf - Codex Maximum Level (ML): maximale Konzentration für einen Kontaminanten in einem Lebens- oder Futtermittel, die von der CAC in der Handelsware legal erlaubt wird - Codex Guideline Level (GL): maximaler Gehalt einer Substanz in einem Lebens- oder Futtermittel, die im internationalen Handel akzeptiert wird
	ISO 16140	Beschreibung allgemeiner Arbeitsvorschriften für die Validierung mikrobiologischer Untersuchungsverfahren. In ISO 16140-2 Regelung der Validierung eines alternativen Verfahrens im Vergleich mit den Ergebnissen eines Referenzverfahrens	Zulässigkeitsgrenzen AL: zulässige höchste absolute Differenz zwischen Bezugswert einer Probe und Ergebnis mit dem zu validierenden Alternativverfahren

7.2.1.2 Grenzwertüberschreitung, Berücksichtigung der Messunsicherheit und Angabe des Analysenergebnisses

Bereich	Verordnung/Norm	Wann liegt eine Grenzwertüberschreitung vor?	Berücksichtigung der MU bei Beurteilung	Berechnung und Angabe des Analysenergebnisses
BMUB	Bundes-Bodenschutz- und Altlastenverordnung (BBodSchV)	Messwert > Maßnahmenwert, aber im Ermessen der zuständigen Behörden	Nein, aber Angabe der MU für Analysenergebnis erforderlich	k.A.
		Messwert > Prüfwert, aber im Ermessen der zuständigen Behörden		
		Messwert > Vorsorgewert, aber im Ermessen der zuständigen Behörden		
	Düngemittelverordnung (DüMV)	Messwert weicht vom gekennzeichneten Gehalt unter Berücksichtigung vorgegebener Toleranzgrenzen ab	nicht explizit, nur Vorgabe einer Toleranz	k.A.
		Messwert > Grenzwert oder Höchstgehalt	nein	
	Bioabfallverordnung (BioAbfV)	- bei Cu, Zn: Mittelwert aus 2 Messungen > Höchstgehalt + vorgegebene Toleranz, Sonderfall: Durchschnitt der letzten 4 Untersuchungen > Höchstgehalt	nicht explizit, nur Vorgabe einer Toleranz	- Durchführung von 2 parallelen Messungen - 3. Messung im Fall der Überschreitung der methodenüblichen Wiederholbarkeit - Mittelwertbildung
		- sonst: Mittelwert aus 2 Messungen > Höchstgehalt, aber im Ermessen der zuständigen Behörde (außer bei Hg, Cd)	nein	
	Deponieverordnung (DepV)	Analysenergebnis > Zuordnungswert + vorgegebene Toleranz, Entscheidung im Ermessen der zuständigen Behörde	nicht explizit, nur Vorgabe einer Toleranz	k.A.
	Altölverordnung (AltölV)	Analysenergebnis > Grenzwert + vorgegebene Toleranz	- für Gesamthalogen: nicht explizit, nur Vorgabe einer Toleranz - bei PCB-Summe: ja, denn Überschreitung des Grenzwertes ist nach DIN 12766-2 dann mit 95% Sicherheit gegeben	Berechnung der PCB-Summe nach DIN 12766-2
	Grundwasserverordnung (GrwV)	Analysenergebnis > Schwellwert (gleitendes Mittel), Entscheidungen im Ermessen der zuständigen Behörde	- nein, - erweiterte MU darf im Konzentrationsbereich des Schwellwertes höchstens 50% betragen	- arithmetisches Mittel über alle Messwerte eines Jahres - Werte unter Bestimmungsgrenze werden durch halbe Bestimmungsgrenze ersetzt. - Für Summenparameter werden stoffspezifische Messwerte unter Bestimmungsgrenze null gesetzt.

	Abwasser-verordnung (AbwV)	Analysenergebnis > 2 mal festgesetzter Wert oder Mittelwert der letzten 4 Überprüfungen > festgesetzter Wert	Bei festgesetzten Werten sind MU der Analyse und Probenahmeverfahren berücksichtigt	- Angabe der signifikante Stellen gemäß Anlage „Analysen- und Messverfahren“, mindestens jedoch 2 signifikante Stellen
	Chemikalien-Verbotsverordnung (ChemVerbotsV)	k.A., Annahme: Analysenergebnis > Grenzwert	k.A.	k.A.
	Klärschlamm-verordnung (AbfKlärV)	Mittelwert aus mind. 2 separaten Bestimmungen (Extraktionen) > Grenzwert + vorgegebene Toleranz	nicht explizit, nur Vorgabe einer Toleranz	- arithmetisches Mittel aus mindestens zwei parallelen Untersuchungen (ggf. separate Extraktionen) - Gleichwertige Methoden sind zugelassen
	Trinkwasser-verordnung (TrinkwV)	Analysenergebnis > Grenzwert	Bei festgelegten Werten sind MU der Analyse und Probenahmeverfahren berücksichtigt	Angabe des Ergebnisses bis mindestens auf die gleiche Dezimalstelle wie beim Grenzwert
	ISO 17994	Beide Verfahren sind nicht gleichwertig, wenn Betrag der mittleren relativen Abweichung zwischen beiden Verfahren signifikant unter der festgesetzten zulässigen Differenz liegt.	k.A.	- Mindestanzahl an Laboratorien - Untersuchung von einer größeren Anzahl von Proben (typisch: 50) mittels beider Verfahren
	LAGA Methoden-sammlung Abfalluntersuchung	- Der Abschnitt II.11 „Beurteilung von ungleichmäßigen Stoffvereilungen in einem Haufwerk“ beinhaltet einen Ansatz zur Beurteilung von Messwerten. - 20 % aller Laborproben > Grenzwert oder Mittelwert plus die 1,65-fache Standardabweichung des Mittelwertes der Analyse von n Laborproben > Grenzwert	- zufällige probenahmebedingte und materialbedingte Streuungen der Prüfmerkmale und der zufällige analytische Fehler werden berücksichtigt. - Probenahmebias und Laborbias werden nicht berücksichtigt.	- Analysenergebnisse müssen konsistent mit der angegebenen MU sein (i.d.R. 2 signifikante Stellen und k=2 für erweiterte MU) - Werte < Bestimmungsgrenze können durch Null oder Wert der Bestimmungsgrenze ersetzt werden.
	Oberflächengewässerverordnung (OgewV)	- Für ZHK-UQN: Analysenergebnis > ZHK-UQN - Für JD-UQN: arithmetisches Mittel eines Jahres > JD-UQN	nein	- Liegt Messwert einer Probe unter Bestimmungsgrenze, so werden diese durch halbe Bestimmungsgrenze ersetzt. - Für Summenparameter

				werden stoffspezifische Messwerte unter der Bestimmungsgrenze null gesetzt.
BMEL	Lebensmittel- und Futtermittelgesetzbuch (LFGB) und relevante EU Verordnungen	Analysenergebnis inkl. MU > Höchstgehalt bzw. Analysenergebnis > Entscheidungsgrenze (CCα)	- ja - Kenntnis von „Report on the relationship between analytical results, measurement uncertainty, recovery factors and the provisions of EU food and feed legislation“ gefordert	- Angabe mit derselben Anzahl signifikanter Stellen wie die in Verordnung (EU) Nr. 1881/2006 festgelegten Höchstgehalte - Bei Probenextraktion Wiederfindungskorrektur, sonst Nachweis, dass Verfahren unverzerrt ist
	CD 2002/657/EC	Analysenergebnis > Entscheidungsgrenze (CCα)	- MU in Entscheidungsgrenze (=Grenzwert+MU) berücksichtigt - alle relevanten Einflussgrößen in MU berücksichtigt	k.A.
	VO (EU) 396/2005	k.A., Annahme: Analysenergebnis > Rückstandshöchstgehalt	k.A.	k.A.
	VO EG Nr. 2073/2005	Keine Probe darf größer als Warnwert sein	k.A.	k.A.
	ISO 3951	Qualitätszahl (die u.a. aus Mittelwert und Streuung resultiert) < Annahmefaktor	- In ISO 3951-2 vorausgesetzt, dass Messabweichungen vernachlässigbar sind, d.h. MU beträgt nicht mehr als 10 % der Prozessstandardabweichung - Unsicherheit der Probenahme und Unsicherheit der Probenvorbereitung ist implizit berücksichtigt	k.A.
	Codex Alimentarius	Analysenergebnis inklusive der Messunsicherheit > Grenzwert (z.B. MRL, ML)	- Unsicherheit sollte berücksichtigen Probenahme, Probenverpackung, Probentransport, Probenlagerung, Herstellung der Testportionen, Analyse und Unsicherheit einer notwendigen Wiederfindungskorrektur	- Wiederfindungskorrektur abhängig von Matrix und Analyt, z.B. bei Pestiziden keine Wiederfindungskorrektur - In Pestizidrückstandsanalytik Bestätigung einer MRL-Überschreitung durch Analyse mindestens einer weiteren Testportion
	ISO 16140	Beide Verfahren sind nicht gleichwertig, wenn Vorhersagebereich für Differenz zwischen dem Ergebnis des Alternativver-	k.A.	k.A.

		fahrens und Ergebnis des Referenzverfahrens für alle Proben innerhalb der Zulässigkeitsgrenzen liegt		

7.2.1.3 Anforderungen an das Analysenverfahren, die Probenahme und die Untersuchungsstelle

Bereich	Verordnung/Norm	Anforderungen an das Analysenverfahren	Anforderungen an die Probenahme	Anforderungen an die Untersuchungsstelle
BMUB	Bundes-Bodenschutz- und Altlastenverordnung (BBodSchV)	- Bestimmungsgrenze < Vorsorge-, Prüf- o. Maßnahmenwert - Vorgabe zu verwendeter Verfahren - Im Fall Verwendung anderer Verfahren Nachweis der Gleichwertigkeit mit angegebenen Verfahren	Verordnung enthält grundlegende Vorgaben zum Beprobungsplan und Probenahme	- Durchführung interner QS-Maßnahmen (z.B. Dokumentation und Überwachung der Präzision und Richtigkeit) - erfolgreiche Teilnahme an Ringversuchen - Akkreditierung nach ISO 17025
	Düngemittelverordnung (DüMV)	k.A.	k.A.	k.A.
	Bioabfallverordnung (BioAbfV)	Vorgabe zu verwendeter Verfahren (Verweis auf entsprechende Normen)	Ausführliche Vorgaben zur Probenahme und Probenvorbereitung	- Geeignete QS-Maßnahmen - regelmäßige erfolgreiche Teilnahme an Ringversuchen
	Deponieverordnung (DepV)	- Anwendung der in Verordnung vorgeschriebenen Verfahren - Anwendung von anderen Verfahren, sofern gleichwertig und von Behörde zugelassen - hinreichend kleine Bestimmungsgrenze	- Probenahme nach LAGA PN 98 Richtlinie - Abfallerzeuger muss Abfälle stichprobenartig, mindestens jährlich beproben - Deponienetreiber muss Abfall bei Anlieferung beproben	- Durchführung der Probenahme von Personen mit entsprechender Fachkunde - akkreditiert nach ISO 17025
	Altölverordnung (AltölV)	- Einsatz genormter Verfahren für PCB und Gesamthalogen	- Probenahme erfolgt nach DIN 51750-1 - Unternehmen der Altölsammlung müssen bei Übernahme von Altölen beproben	- Geeignete QS-Maßnahmen - regelmäßige erfolgreiche Teilnahme an Ringversuchen
	Grundwasserverordnung (GrwV)	- validiert entsprechend ISO 17025 - erweiterte MU im Konzentrationsbereich des Schwellwertes höchstens 50% - Bestimmungsgrenzen höchstens 30% des Schwellwertes	- Repräsentative Überwachung	- QM System in Einklang mit ISO 17025 - erfolgreiche Teilnahme an Ringversuchen mit repräsentativen Proben
	Abwasserverordnung (AbwV)	Vorgabe spezifischer Normen	Vorgabe spezifischer Normen	k.A.
	Chemikalien-Verbotsverordnung (ChemVerbotsV)	k.A.	k.A.	k.A.

	Klärschlamm-verordnung (AbfKlärV)	- Anwendung der in Verordnung vorgeschriebenen Verfahren	- Probenahme für Böden: Detaillierte Angaben im Anhang - Probenahme für Klärschlamm nach DIN 38414-1 - Detaillierte Angaben zur Gewährleistung der Repräsentativität	- Geeignete QS-Maßnahmen - erfolgreiche Teilnahme an Ringversuchen - für PCBs: hohe und reproduzierbare Wiederfindungsraten
	Trinkwasser-verordnung (TrinkwV)	- Anwendung der in Verordnung vorgeschriebenen Verfahren - Anwendung von anderen Verfahren, wenn UBA Gleichwertigkeit festgestellt hat - Anwendung von Verfahren, die spezifizierte Verfahrenskennwerte einhalten	- repräsentativ für die Qualität eines Jahres - Probenahme für Untersuchungen auf mikrobiologische Parameter nach DIN EN ISO 19458 - Probenahmeverfahren für Pb, Cu und Ni aus UBA-Empfehlung „Beurteilung der Trinkwasserqualität hinsichtlich der Parameter Blei, Kupfer und Nickel"	- nur von der zuständigen obersten Landesbehörde zugelassene Untersuchungsstelle - Einhaltung der Spezifikation für Parameteranalyse - Arbeit nach anerkannten Regeln der Technik - Anwendung eines QS-Systems - erfolgreiche Teilnahme einmal pro Jahr an externen QS-Programm - Qualifiziertes Personal - akkreditiert für Trinkwasseruntersuchungen
	ISO 17994	- Referenzverfahren: international anerkanntes Verfahren oder Verfahren, das im Einverständnis der Beteiligten Anwendung findet. I.d.R.ein genormtes oder allgemein angewandtes Verfahren. - Versuchsverfahren: Jedes Verfahren, das auf Gleichwertigkeit mit einem Referenzverfahren getestet wird	- breite Spanne unterschiedlicher Proben - Proben müssen genügend Zielorganismen enthalten um Wahrscheinlichkeit einer Nullzählung gering zu halten	k.A.
	LAGA Methoden-sammlung Abfalluntersuchung	- Soweit keine gesetzlichen Vorgaben existieren oder gleichwertige Verfahren in den Rechtsgrundlagen zugelassen sind, kann Methodensammlung eine Entscheidungshilfe zur Verfahrensauswahl darstellen. - empfiehlt „leistungsstarke und robuste Verfahren (Referenzverfahren)“ - enthält Hinweise zum Anwendungsbereich oder zur Validität der einzelnen Methoden.	- Probenergebnisse müssen zuverlässiges Abbild der stofflichen Zusammensetzung des Abfalls geben. - listet für die unterschiedlichen Abfallarten relevante Verordnung und Probenahmeverfahren auf. - führt Grenzen der Verfahren auf. - verweist auf LAGA Richtlinie PN 98, welche Vorgaben enthält zu Probenahmeverfahren und –strategien, sowie Anzahl und Größe der zu entnehmenden Proben - verweist auf BBodSchV „Probenahme für	- Akkreditierung nach ISO 17025 - Prüflaboratorien müssen Sach- und Fachkunde gemäß „Verwaltungsvereinbarung über den Kompetenznachweis und die Notifizierung von Prüflaboratorien und Messstellen im gesetzlich geregelten Umwelt-bereich“ nachweisen. - interne und externe QS-Maßnahmen. - Sicherung der internen Laborqualität ist entsprechend den LAWA-AQS-Merkblättern (Teil II, Nr. 1.4) durchzuführen. - Einhaltung dieser Maßnahmen wird durch

			die Durchführung der Untersuchungen von Böden und Bodenmaterial erfolgt analog Anhang 1 der BBodSchV.“	regelmäßige Wiederholaudits überprüft. - Im Notifizierungszeitraum von 5 Jahren ist jeder einzelne Standort einer Untersuchungsstelle mindestens zweimal zu begutachten. - regelmäßige Teilnahme an den von der zuständigen Landesstelle vorgeschriebenen Ringversuchen (i. d. R. für jede Parametergruppe, für die Untersuchungsstelle notifiziert ist). Die Ringversuche werden nach dem LAWA-AQS-Merkblatt A-36 durchgeführt.
	Oberflächengewässerverordnung (OgewV)	- im Einklang mit ISO 17025 validiert, - erweiterte Messunsicherheit (k=2) beträgt höchstens 50% im Konzentrationsbereich der Umweltqualitätsnorm, - Bestimmungsgrenze beträgt höchstens 30% der Umweltqualitätsnorm, - Gibt es für einen Parameter keine Analysenmethode, die die beiden letztgenannten Anforderungen erfüllt, erfolgt Überwachung mithilfe der besten verfügbaren Technik	k.A.	- Anwendung eines QM-System im Einklang mit ISO 17025, - Teilnahme an Laboreignungsprüfung mit Proben, die repräsentativ für untersuchten Konzentrationsbereich sind und die von Organisationen durchgeführt werden, welche Anforderungen der DIN ISO 17043 erfüllen, - Analyse verfügbarer Referenzmaterialien, die bzgl. Konzentration und Matrix repräsentativ für die zu analysierenden Proben sind.
BMEL	Lebensmittel- und Futtermittelgesetzbuch (LFGB) und relevante EU Verordnungen	- Anwendung von auf EU-Ebene vorgeschriebene Verfahren - sonst Anwendung von Verfahren, das die spezifischen Leistungskriterien der Verordnung erfüllt - Anwendung von In-house Verfahren nur wenn vollständig validiert - Empfehlung der Anwendung von in einem Ringversuch validierten Verfahren	Verordnung enthält grundlegende Vorgaben zum Beprobungsplan	- Nachweis der Anwendung interner QS-Verfahren - Akkreditierung nach ISO 17025 - (erfolgreiche) Teilnahme an Ringversuchen - Enge Zusammenarbeiten der Labore, die zur Routinekontrolle Screening-Verfahren verwenden, mit Laboren, die Bestätigungsverfahren anwenden
	CD 2002/657/EC	- Anwendung von Methoden, die nach allgemeinen Verfahren und Leistungskriterien validiert sind. - Analyse amtlicher Proben mit Verfahren, die geforderte Leistungskriterien (z.B. Mindestleistungsgrenze MRPL) der Verordnung erfüllen, nach beschriebenen Verfahren validiert wurden	- Probenahme gemäß Richtlinie 96/23/EG - Bei Feststellung einer vorschriftswidrigen Behandlung, Beprobung einer repräsentativen, nach international anerkannten Normen bestimmte Anzahl an Tieren	- Zulassung von der zuständigen nationalen Behörde für amtliche Rückstandskontrolle - Anwendung von QS-Systemen - Akkreditierung nach ISO 17025 - Teilnahme an einem internationalen anerkannten Programm zur Bewertung der Qualitätskontrolle - regelmäßige erfolgreiche Teilnahme von anerkannten Ringversuchen

	VO (EU) 396/2005	Methoden erfüllen die in den gemeinschaftsrechtlichen Bestimmungen über die amtliche Lebensmittel- und Futtermittelkontrolle festgelegten Kriterien	- Repräsentative Stichproben - Verweis auf Richtlinie 2002/63/EG zur Festlegung gemeinschaftlicher Probenahmemethoden	- Teilnahme an der gemeinschaftlichen Eignungsprüfung für Pestizidrückstände, die von der Kommission durchgeführt wird
	VO EG Nr. 2073/2005	- Verwendung von Referenzverfahren oder - Verwendung eines Alternativverfahrens, wenn nach ISO 16140 oder anderen anerkannten Protokollen validiert und von zuständiger Behörde genehmigt	- Anwendung der vorgegebenen Referenzverfahren für die Prüfplanung - Alternative Probenahmeverfahren möglich, sofern gleichwertig und von zuständiger Behörde Behörde genehmigt	- gut funktionierendes HACCP-System (Hazard Analysis and Critical Control Point)
	ISO 3951	k.A.	k.A.	k.A.
	Codex Alimentarius	- Empfehlung von Verfahren: in "Codex STAN 234-1999 Recommended Methods of Analysis and Sampling" werden auf ISO-Normen, internationale Verordnungen oder Richtlinien verwiesen - Für einige Matrizes und Analyten Festlegung von Anforderungen an Leistungsfähigkeit der Methode - Verwendung, wenn verfügbar, nach Prinzipien der Codex Alimentarius Kommission, validierter Verfahren	- Empfehlung von Verfahren zur Probenahme: in "Codex STAN 234-1999 Recommended Methods of Analysis and Sampling" werden auf ISO-Normen, internationale Verordnungen oder Richtlinien verwiesen - gibt Hinweise geeigneten Probenahmeplan für die Untersuchung auszuwählen	- Einhaltung der allgemeinen Kriterien der ISO 17025 - Teilnahme an geeigneten Eignungsprüfungsprogrammen für Lebensmittelanalyse - Verwendung interner Qualitätskontrollverfahren - Bewertung der Labore durch Gremien, die die allgemeinen Kriterien der Laborakkreditierung einhalten
	ISO 16140	Referenzverfahren: international anerkanntes und in hohem Maße akzeptiertes Verfahren	k.A.	k.A.

7.2.1.4 Bewertungsregeln und Qualitätsgrenzen

Bereich	Verordnung/ Norm	Fall	Zweiseitige Absicherung (ja/nein)	MU Vorgehensweise	Qualitätsgrenze(n) bei einseitiger Absicherung Bezeichnung entsprechend Verordnung			Inklusive Unsicherheit aus		
					Bewertungsgrenze/-regel	QLα	QLβ	Analyse	Probenahme	Probentransp./ Probenlagerung etc.
BMUB	Bundes-Bodenschutz- und Altlasten-verordnung (BBodSchV)	3	nein	1	Prüfwert, aber im Ermessen der zuständigen Behörden?	?	QLβ nahe Prüfwert?	k.A.	k.A.	k.A.
			nein	1	Maßnahmenwert, aber im Ermessen der zuständigen Behörden?	QLα nahe Maßnahmenwert?	?			
	Düngemittel-verordnung (DüMV)	3 (für Inhaltsstoffe)	ja	2	Kennzeichnungsschwelle + Toleranz bzw. Höchstgehalt + Toleranz	< Höchstgehalt?	?	k.A.	k.A.	k.A.
		1 (für Schadstoffe)	nein	1	Grenzwert	< Grenzwert?	> Grenzwert?	k.A.	k.A.	k.A.
	Bioabfall-verordnung (BioAbfV)	3 (für Cu, Cd)	nein	2	Höchstgehalt + vorgegebene Toleranz, Sonderfall: Durchschnitt der letzten 4 Untersuchungen > Höchstgehalt, Entscheidung im Ermessen der zuständigen Behörde (außer bei Hg, Cd)	Höchstgehalt	?	k.A.	k.A.	k.A.
		1 (für Pb, Cr, Ni, Hg, Zn)	nein	1	Höchstgehalt, Entscheidung im Ermessen der zuständigen Behörde	?	?			
	Deponie-verordnung (DepV)	3 (parameterabh.)	nein	2	Zuordnungswert + vorgegebene Toleranz, Entscheidung im Ermessen der zuständigen Behörde	Zuordnungswert	?	k.A.	k.A.	k.A.
		1 (parameterabh.)	nein	1	Zuordnungswert	?	?	k.A.	k.A.	k.A.
	Altöl-verordnung (AltölV)	3 (PCB)	nein	3	Grenzwert + Unsicherheit am Grenzwert	Grenzwert	?	k.A.	k.A.	k.A.
		3 (Gesamthalogen)	nein	2	Grenzwert + vorgegebene Toleranz	Grenzwert	?	k.A.	k.A.	k.A.

Bereich	Verordnung/ Norm	Fall	Zweiseitige Absicherung (ja/nein)	MU Vorgehensweise	Qualitätsgrenze(n) bei einseitiger Absicherung Bezeichnung entsprechend Verordnung			Inklusive Unsicherheit aus		
					Bewertungsgrenze/-regel	QLα	QLβ	Analyse	Probenahme	Probentransp./ Probenlagerung etc.
	Grundwasserverordnung (GrwV)	1	nein	1	Schwellwert (für Einzelwert oder Jahresdurchschnitt), Entscheidungen im Ermessen der zuständigen Behörde	?	?	k.A.	k.A.	k.A.
	Abwasserverordnung (AbwV)	2	nein	2	Festgelegte Werte berücksichtigen die Messunsicherheit der Analysen- und Probenahmeverfahren	?	?	ja	ja	ja
	Chemikalien-Verbotsverordnung (ChemVerbotsV)	1 (Formaldehyd, Asbest)	nein	1	Grenzwert	Grenzwert		k.A.	k.A.	k.A.
		2 (PAK)	nein	2	Grenzwert + vorgegebene Toleranz	Grenzwert	?	k.A.	k.A.	k.A.
	Klärschlammverordnung (AbfKlärV)	3	nein	2	arithmetisches Mittel aus mind. 2 separaten Bestimmungen (Extraktionen) > Grenzwert + vorgegebene Toleranz	Grenzwert	?	nein	k.A.	k.A.
	Trinkwasserverordnung (TrinkwV)	2	nein	2	Grenzwert (festgelegten Werte berücksichtigen MU der Analyse- und Probennahmeverfahren)	?	?	ja	ja	ja
	ISO 17994	3	nein	3	Verfahren A und B sind nicht gleichwertig, wenn untere Konfidenzgrenze des Betrages der mittleren relativen Differenz größer als 0 und obere Konfidenzgrenze kleiner als zulässige Differenz ist	?	zulässige Differenz	nein	nein	nein
	LAGA Methodensammlung Abfalluntersuchung	3	nein	3	< 1,65-fache Standardabweichung des Mittelwertes von n Laborproben	?	Grenzwert	(ja)	(ja)	(ja)
	Oberflächengewässerverordnung (OgewV)	1	nein	1	Umweltqualitätsnorm	?	?	k.A.	k.A.	k.A.

Bereich	Verordnung/ Norm	Fall	Zweiseitige Absicherung (ja/nein)	MU Vorgehensweise	Qualitätsgrenze(n) bei einseitiger Absicherung Bezeichnung entsprechend Verordnung			Inklusive Unsicherheit aus		
					Bewertungsgrenze/-regel	QLα	QLβ	Analyse	Probenahme	Probentransp./ Probenlagerung etc.
BMEL	Lebensmittel- und Futtermittelgesetzbuch (LFGB) und relevante EU Verordnungen	3	nein	3	Höchstgehalt + U(Messwert) bzw. CCα	Höchstgehalt	maximale Messunsicherheit	(ja)	wenn Partie eigentlich ja	k.A.
	CD 2002/657/EC	3	nein	3	Grenzwert + U(Grenzwert) = CCα	MRL	„Recommended Conc." o. "Regulatory Limit" (CCβ)?	ja	nein	ja
						0	MRPL (CCβ)			
	VO (EU) 396/2005	1	nein	1	Rückstandshöchstgehalt	?	?	k.A.	k.A.	k.A.
	VO EG Nr. 2073/2005	1	nein	1	Keine Probe darf größer als Warnwert sein	?	?	(nein)	k.A.	k.A.
	ISO 3951	3	nein	3	Annahmefaktor (abh. von AQL, Stichprobengröße, PN-Varianz)	AQL	LQ (rückzuweisende Qualitätsgrenzlage)	(nein)	ja	ja
	Codex Alimentarius	3	nein	3	Grenzwert + U(Messwert)	MRL, ML, GL	?	ja	ja	ja
	ISO 16140	3	nein	3	Beide Verfahren sind nicht gleichwertig, wenn Vorhersagebereich für Differenz zwischen Ergebnissen des Alternativ- und Referenzverfahrens für alle Proben innerhalb der Zulässigkeitsgrenzen liegt	?	Zulässigkeitsgrenze	nein	nein	nein

7.2.2 Qualitätsgrenzen und Messunsicherheitsmodell

7.2.2.1 Zusammenhang zwischen Messunsicherheitsmodell, Grenzwert und Qualitätsgrenzen bei bekannter und fester Messunsicherheit

Um den im Abschnitt 3.1skizzierten Zusammenhang zwischen Messunsicherheitsmodell, Grenzwert und Qualitätsgrenzen zu verdeutlichen, wird der einfachste Fall bekannter, konzentrationsunabhängiger und symmetrischer Messunsicherheiten betrachtet. In diesem Fall gilt für das Analysenergebnis (X), dass die untere Grenze (Xu) bzw. obere Grenze (Xo) des Messunsicherheitsbereiches gleich

$$Xu = X-U(X) = X-U \quad \text{und} \quad Xo = X+U(X) = X+U,$$

ist, wobei U(X) die erweiterte Messunsicherheit des Analysenwertes X ist.

Der festgelegte Grenzwert gilt dann als überschritten, wenn das Analysenergebnis die Bewertungsgrenze (BG) überschreitet

$$X > BG.$$

Diese Aussage ist äquivalent zu

$$X+U > QL\beta \text{ und } X-U > QL\alpha,$$

denn die beiden Qualitätsgrenzen QLα und QLβ sind verknüpft mit der Bewertungsgrenze und der (konstanten) Messunsicherheit über $QL\alpha = BG - U$ und $QL\beta = BG + U = QL\alpha + 2 \cdot U$.

Der Grenzwert gilt nicht als überschritten, wenn

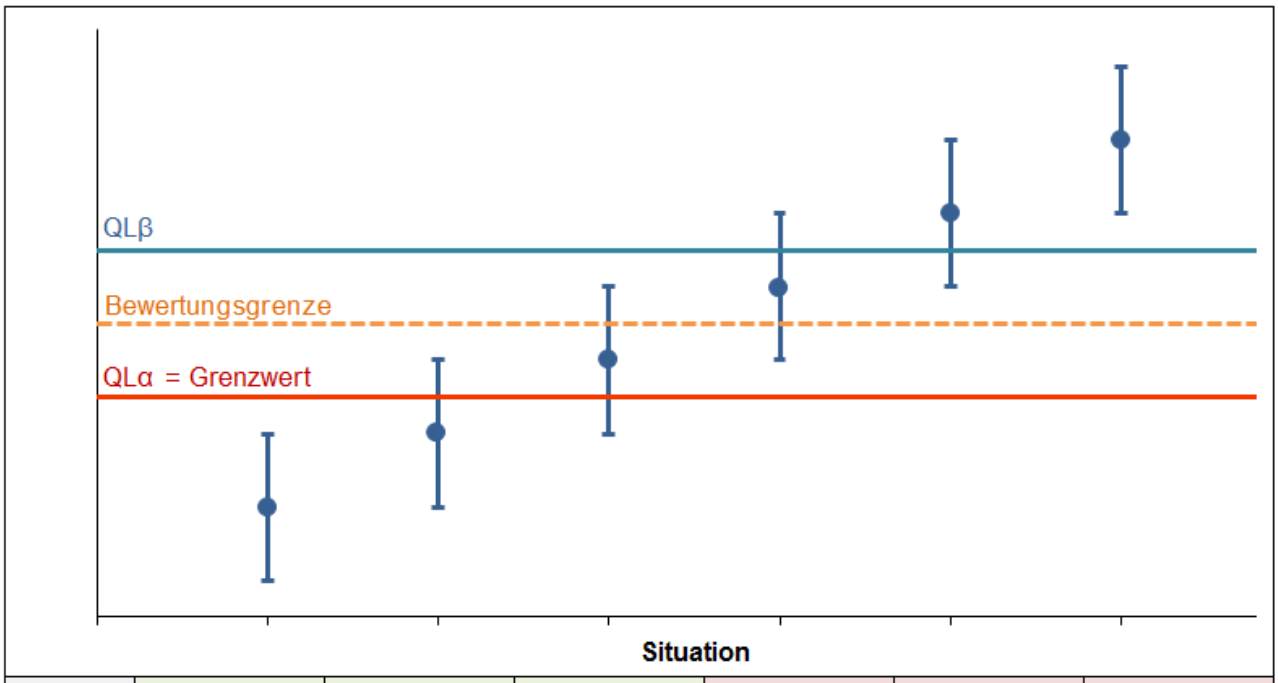
$$X \leq BG,$$

oder äquivalent dazu, wenn

$$X+U \leq QL\beta \text{ und } X-U \leq QL\alpha.$$

Ein und dieselbe Bewertungsregel lässt sich demnach in drei äquivalenten Formen darstellen. Die 6 verschiedenen Situationen, die für das Analysenergebnis in diesem Spezialfall konstanter und bekannter Messunsicherheiten auftreten können und die daraus resultierenden Bewertungsregeln sind Abbildung 16 veranschaulicht.

Abbildung 16: Zusammenfassung verschiedener Situationen für das Analysenergebnis und daraus resultierende Entscheidungen.



	A	B	C	D	E	F
	Entscheidung: keine Überschreitung des Grenzwertes			Entscheidung: Überschreitung des Grenzwertes		
X+U:	X+U ≤ QLα	QLα < X+U ≤ BG	BG< X+U ≤ QLβ	X+U > QLβ	X+U > QLβ	X+U > QLβ
X:	X ≤ QLα	X ≤ QLα	QLα < X ≤ BG	BG < X ≤ QLβ	X > QLβ	X > QLβ
X-U:	X-U ≤ QLα	X-U ≤ QLα	X-U ≤ QLα	QLα < X-U ≤ BG	BG< X-U ≤ QLβ	X-U > QLβ

7.2.2.2 Beschreibung der Risiken einer Fehlentscheidung

Wenn eine Bewertung nicht auf Basis des „wahren Wertes“ d.h. auf Basis einer Grundgesamtheit erfolgen kann, ermöglicht die mathematische Entscheidungstheorie die Realisierung einer Entscheidung auf Basis einer repräsentativen Stichprobe. Aufgrund der Zufälligkeit dieser Stichprobe besteht die Möglichkeit, dass die Stichprobe die Grundgesamtheit bis zu einem gewissen Grad nicht repräsentiert und deswegen falsche Maßnahmen induziert. Das Risiko einer Fehlentscheidung ist unvermeidbar, da eine 100 %-Prüfung zum einen nicht möglich ist und zum anderen jede Messung mit Abweichungen behaftet ist.

7.2.2.3 Bewertungskonstellationen

Insgesamt ergeben sich sechs relevante und zu differenzierende Bewertungskonstellationen, die Konsequenzen nach sich ziehen und deren jeweilige Eintrittswahrscheinlichkeit mathematisch quantifiziert werden kann (Abbildung 17). Die Bewertung ist korrekt, wenn die Bodenfläche mit einem wahren Wert kleiner als QLα akzeptiert und die Bodenfläche mit einem wahren Wert größer als QLβ abgelehnt wird.

Abbildung 17: Risikomatrix bei der Messwertbeurteilung.

Wahrer Sachverhalt	**Bewertung auf Basis einer repräsentativen Stichprobe**	
	Fläche ist positiv (Analysenergebnis überschreitet Bewertungsgrenze)	**Fläche ist negativ** Analysenergebnis überschreitet Bewertungsgrenze nicht
Gehalt unterhalb QLα (in BBodSchV entspricht QLα Prüf- bzw. Maßnahmenwert)	Fehlerwahrscheinlichkeit ≤ α (falsch-positives Ergebnis)	Richtige Bewertung
Gehalt zwischen QLα und QLβ	Zwischen QLα und QLβ liegt ein Graubereich. Eine statistisch abgesicherte Aussage ist hier nicht möglich.	
Gehalt oberhalb QLβ	Richtige Bewertung	Fehlerwahrscheinlichkeit ≤ β (falsch-negatives Ergebnis)

7.2.2.4 Falsch-Positive-Entscheidung

Das Risiko des Eigentümers ist die Wahrscheinlichkeit, die Grundgesamtheit (z.B. Bodenfläche) abzulehnen, wenn der wahre Wert kleiner als QLα ist. Diese Risikowahrscheinlichkeit wird auch als Fehler 1. Art, α-Fehler oder Falsch-Positiv-Rate bezeichnet.

Beispiele:

> Eine Bodenfläche muss saniert werden, obwohl die Nutzung des Bodens (Wohngebiet) nicht bedenklich wäre. Die Sanierung ist für den Eigentümer mit hohen Kosten verbunden und während der Sanierungszeit ist nur eine eingeschränkte Nutzung möglich.
>
> Der Produzent und Lieferant muss eine Produktcharge vom Markt nehmen, obwohl das Lebensmittel unbedenklich war. Diese Rücknahme ist mit hohen wirtschaftlichen Kosten und langfristigem Imageschaden verbunden.

Für den Eigentümer (Überwachter/Produzent/Verkäufer/Kostenträger) ist die Kenntnis wichtig, ab welcher wahren Konzentration (1) ein Messwert mit hoher Wahrscheinlichkeit unterhalb der Bewertungsgrenze liegt und somit (2) das Falsch-Positiv-Risiko noch akzeptabel ist.

7.2.2.5 Falsch-Negative-Entscheidung

Das Risiko des Nutzers ist die Wahrscheinlichkeit, die Grundgesamtheit zu akzeptieren, wenn der wahre Gehalt größer als QLβ ist. Diese Risikowahrscheinlichkeit wird auch als Fehler 2. Art, β-Fehler oder Falsch-Negativ-Rate bezeichnet.

Beispiele:

> Ein kontaminierter Boden auf einem Kinderspielplatz wird ohne notwendige Sanierung weitergenutzt. Insbesondere bei Kindern kann die häufige Nutzung dann zu gesundheitlichen Langzeitschäden führen.
>
> Eine Produktcharge wird konsumiert, obwohl eine Belastung mit Schadstoffen vorliegt. Der Konsum ist womöglich mit gesundheitlichen Folgen verbunden.

Für den Nutzer (Überwacher/Konsument/Käufer/Verbraucher) ist die Kenntnis wichtig, ab welcher wahren Konzentration (1) ein Messwert mit hoher Wahrscheinlichkeit oberhalb der Bewertungsgrenze liegt und somit (2) das Falsch-Negativ-Risiko noch akzeptabel ist.

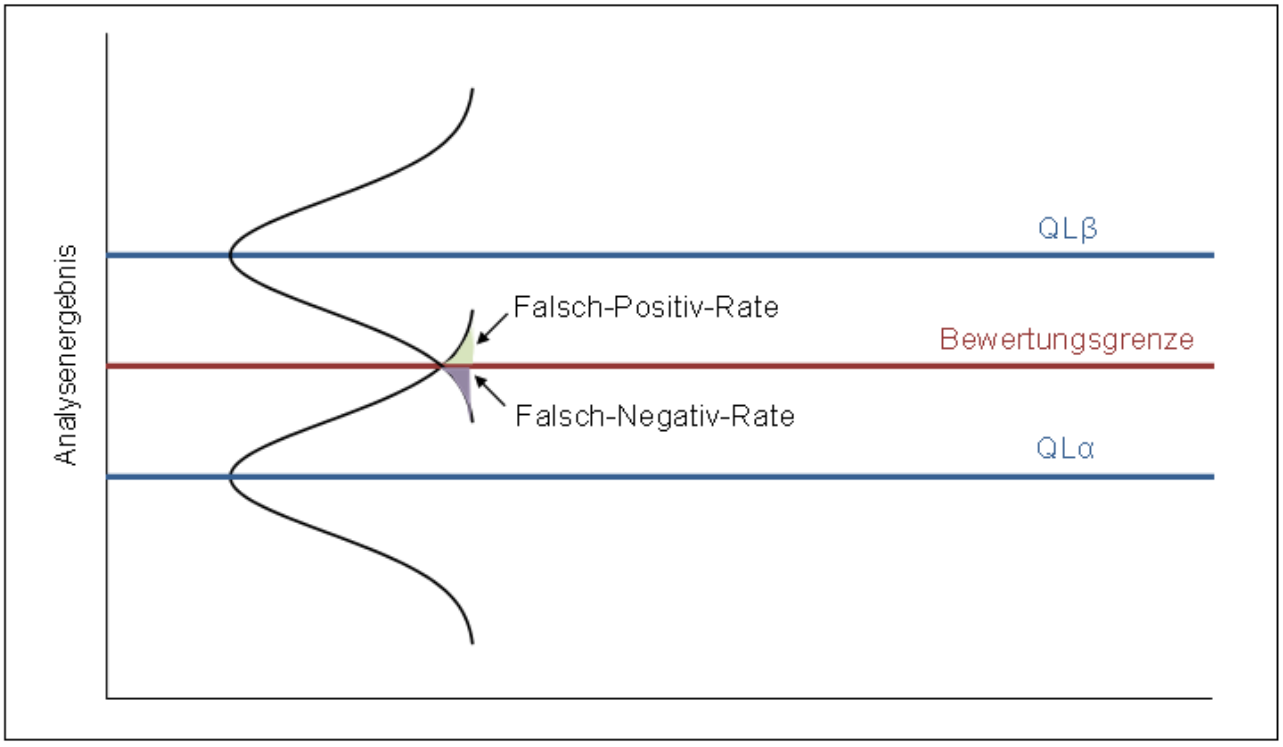
7.2.2.6 Quantifizierung des Risikos einer Fehlentscheidung

Die Messunsicherheit ermöglicht die Quantifizierung des Risikos einer Fehlentscheidung. Um das Risiko genau zu quantifizieren, ist die richtige und realistische Messunsicherheitsabschätzung notwendig. Mittels realistischer Messunsicherheiten kann die Falsch-Positiv-Rate bzw. die Falsch-Negativ-Rate in Abhängigkeit des wahren Wertes ermittelt werden.

Die Festlegung der Risikowahrscheinlichkeiten, ist zum einen davon abhängig, welcher Akteur das Risiko trägt und zum anderen von den Konsequenzen einer Fehlentscheidung. Für beide Akteure gibt es je nach Entscheidung Folgen auf wirtschaftlicher/monetärer, juristischer (haftungsrechtliche Verantwortung), sozialer und gesundheitlicher Ebene. Übliche Risikowahrscheinlichkeiten sind 1 %, 5 % bzw. 10 %.

Abbildung 18 verdeutlicht die Falsch-Positiv-Rate und Falsch-Negativ-Rate, in dem Fall, dass die Messwerte einer Normalverteilung folgen und die Messunsicherheiten konstant sind. Angenommen der wahre Wert liegt bei QLα, dann wird bei einer Falsch-Positiv-Rate von 5 % das Analysenergebnis in 5 von 100 Fällen oberhalb der Bewertungsgrenze liegen. Angenommen der wahre Wert liegt bei QLβ, dann wird bei einer Falsch-Negativ-Rate von 5 % das Analysenergebnis in 5 von 100 Fällen unterhalb der Bewertungsgrenze liegen.

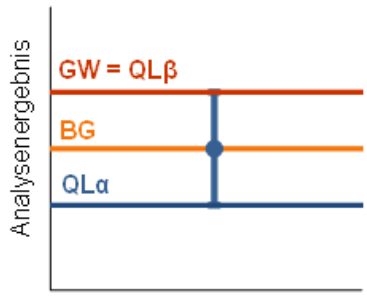
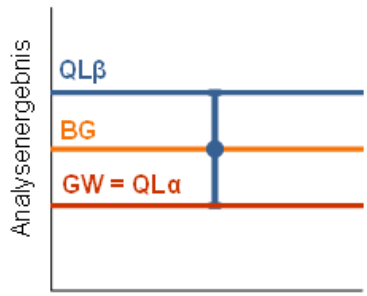
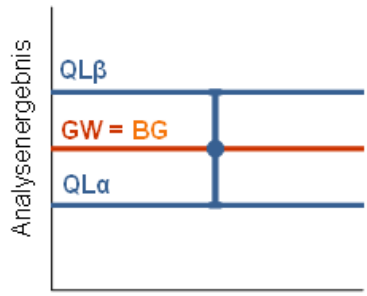
Abbildung 18: Veranschaulichung der Falsch-Positiv- und Falsch-Negativ-Rate.



7.2.2.7 Risikolast und Beweispflicht

Je nachdem, welcher Fehler der schwerwiegendere ist und welcher Akteur die Beweispflicht hat, resultieren drei Fälle (Abbildung 19).

Abbildung 19: Veranschaulichung der drei Bewertungssituationen.

Bewertungsgrenze < Grenzwert	**Bewertungsgrenze > Grenzwert**	**Bewertungsgrenze = Grenzwert**
Vorgehensweise 3, wenn Bewertungsgrenze gleich Grenzwert abzgl. MU	Vorgehensweise 2 und Vorgehensweise 3, wenn Bewertungsgrenze gleich Grenzwert zzgl. MU	Vorgehensweise 1
		
Grenzwertüberschreitung ist dann gegeben, wenn		
- die obere Messunsicherheits-grenze des Analysen-ergebnisses oberhalb des Grenzwertes liegt.	- die untere Messunsicherheits-grenze des Analysen-ergebnisses oberhalb des Grenzwertes liegt.	- das Analysenergebnis über dem Grenzwert liegt.
- Risiko einen Wert als Überschreitung zu werten, der in Wahrheit unter dem Grenzwert liegt.	- Risiko einen Wert zu akzeptieren, der in Wahrheit höher als der Grenzwert ist.	- Risiko der Fehlentscheidung ist geteilt.
- Der Überwachte/ Eigentümer/ Produzent hat die Beweispflicht, dass sein Eigentum/Produkt die Grenzwerte einhält.	- Dem Überwachten/ Eigentümer/ Produzenten muss Überschreitung des Grenzwerts mit großer Wahrscheinlichkeit nachgewiesen werden.	- Nichtbeachtung der Messunsicherheit

7.3 Ergänzende Informationen zu Arbeitspaket B

7.3.1 Unsicherheitsquellen in der Bodenanalytik

Probennahmeplanung für Bodenuntersuchungen – Festlegung der Probennahmestellen und Beprobungstiefen

- Fehler bei Kontaminationshypothese, Nicht-Beachtung von
  - Standortgenese
  - Überlagerungen
  - Ungeordneten räumlichen Verteilungen
  - Gradientenverteilung
  - Hotspots
- Planung einer unrepräsentativen Beprobung
  - zu geringe Probenzahl
  - falsches Probennahmemuster

  - zu geringes Probenvolumen
  - falsche Beprobungstiefe
  - Misch- statt Einzelproben
- Mangelnde Koordination
  - mit dem Labor
  - mit dem Bohrunternehmen

Probengewinnung

- falsche Bodenansprache
- fehlerhafte Ermittlung der Lage relevanter Bodenhorizonte und Probenahmebereiche
- Veränderung der Probe durch Konservierungs-/ Stabilisierungsfehler, Querkontamination
- Kernverluste, Verschleppungen, Stauchungen und Nachfall
- Gerätemängel
  - stumpfe oder beschädigte Sonden
  - Verschmutzungen
  - Abgasbelastung
  - unvollständige Ausrüstung
  - ungeeignetes Reinigungsgerät
- Ungeeignete Probennahmemethoden oder –technik
- Witterungsbedingungen
- Einfluss des Probenehmers
  - individuelle Fähigkeiten und Fertigkeiten

Probenkonservierung, -transport und -lagerung

- Probenverwechslungen
- Verwendung ungereinigter Probengefäße
- Nicht vollständig gefüllte Probengefäße
- Undichte oder geplatzte Probengefäße
- Falsche Konservierung
- Querkontaminationen durch Konservierungsmittel
- Ungekühlte Proben
- UV-Strahlung (kein Braunglas, nicht abgedunkelt verpackt)
- Zeitraum bis zur Analyse zu lang
- Ungeeignete Lagerbedingungen

Probenvorbehandlung

- Veränderung der Probe z. B. durch Verunreinigung
- Veränderung der Probe durch unsaubere/unzureichende Vorbehandlung
- Korngrößenverteilung nach Mischung und Teilung und ggf. Vermahlung
- Trocknung
    - Kontamination,
    - Zeiteffekte,
    - Temperatureffekte,
    - Art der Trocknung,
    - Luftfeuchte,
    - Trockenschrank: Einfluss der Aufheizkurve
- Siebung
    - Zustand des Siebs,
    - Siebgröße/ -art,
    - Stochastische Störeinflüsse,
    - Absaugtechnik der Siebmaschine
    - Siebrückstand
- Teilung
    - Entmischung
    - Gerätereinigung: Querkontamination
- Zerkleinerung
    - Ungeeignete Geräte
    - Gerätereinigung: Querkontamination
    - Temperatur des Gerätes
    - Stochastische Störeinflüsse
- Homogenisierung
    - Zu kurze Mischzeit
    - Gerätereinigung: Querkontamination
    - Ungeeignete Methode
- Wägung
    - Kalibration
    - Geräteeinfluss
    - Stochastische Störeinflüsse

Extraktion, Elution

- Extraktions- / Elutionsverfahren
    - Extraktionsmittel
    - Probeneinwaage
    - Korngröße und Porosität des Extraktguts
    - Konzentrationsunterschied zwischen Extrakt und Extraktionsmittel
    - pH-Wert, Löslichkeit, Temperatur, Eindringverhalten des Extraktionsmittels
    - Extraktionszyklen
    - Ausgasung bei Mikrowellenausschluss
    - Einwirkzeit
- Laborgeräte
- Reinheit der Hilfsmittel (Chemikalien, Gefäße, Filter)
- Kontamination und Dekontamination

Analysenverfahren (Böden, Bodenmaterial und sonstige Materialien; Eluate und Sickerwasser)

- Umwelteinflüsse (Temperatur) während der Analyse
- Verfahrensbedingte Unsicherheiten
    - Empfindlichkeit
    - Präzision, Wiederholbarkeit
    - Richtigkeit, Methodenwiederfindung
    - Abnutzung
- Gerätedrifts
- Reinheit der Hilfsmittel (Chemikalien, Gefäße)
- Unterschiedliche Reaktion des Analysenverfahrens auf Probe und Referenz (Matrixeinflüsse)
- Kalibration
    - Unsicherheit der Werte verwendeter Referenzmaterialien
    - Reinheit der Standards,
    - Reinheit der Referenzmaterialien
- Aufschlusslösung
    - Veränderung, Stabilität
    - Konzentration
- „Faktor Mensch“