

Miljøstyrelsens Referencelaboratorium for Kemiske og Mikrobiologiske Miljømålinger

NOTAT

Til: Følgegruppen for Miljøstyrelsens Referencelaboratorium

cc:

Fra: Lea Mejdahl Lind

Dato: 9. december 2024

QA: Mette Østergaard Filsø

Emne: Tydeliggørende notat – Afrapportering af sumparametre

Problemstilling

På miljøområdet stilles i flere bekendtgørelser /1/ /2/ krav om overholdelse af sumværdier, uden at det er defineret, hvordan sumværdierne skal beregnes eller afrapporteres.

Beregning: Det fremgår ikke, hvor mange betydende cifre, der medtages i beregningsgrundlaget, eller hvordan resultater under detektionsgrænsen medtages.

Afrapportering: Det fremgår ikke, hvordan sumværdiens detektionsgrænse og måleusikkerhed skal angives, eller hvor mange betydende cifre, der skal angives på den beregnede sum i rapporten.

Dette notat søger at komme med anbefalinger til beregning og afrapportering af summer ud fra teoretiske og praktiske overvejelser.

Baggrund

I forbindelse fastsættelse af regler for, hvordan resultatet af en sum skal afrapporteres, er der flere aspekter, der skal vurderes:

Beregning:

1. Hvordan medregnes parametre under detektionsgrænsen?
2. Hvor mange betydende cifre bør medtages ved beregning?

Afrapportering:

3. Hvordan angives detektionsgrænse på en sum?
4. Hvordan angives måleusikkerhed på en sum?
5. Hvor mange betydende cifre bør indgå, når summen afrapporteres?

Disse aspekter gennemgås nedenfor i hver deres respektive afsnit.

1. Hvordan medtages parametre under detektionsgrænsen?

I danske miljødata er der åbnet op for, at detektionsgrænsen kan være den nedre grænse for afrapportering af resultater /13/. Diskussionen i dette afsnit forholder sig derfor til detektionsgrænsen, men overvejelserne gør sig ligeledes gældende i forhold til kvantifikationsgrænsen, såfremt at den er den nedre rapporteringsgrænse i et datasæt.

Medmindre andet er specifikt beskrevet, indgår alle parametre i beregningsgrundlaget for en sum med lige vægtning. Hvis der i beregningsgrundlaget indgår resultater, der er under parameterens detektionsgrænse, er summeringen dog mindre simpel.

Der er flere måder, hvorpå resultater under detektionsgrænsen kan indgå i en sum, som beskrevet i EPAs technical guidance Manual /5/. Manualen angiver følgende fire forskellige tilgange:

a) Resultater under detektionsgrænsen medtages ikke i summen (sættes lig nul)

Ved at udelade resultater under detektionsgrænsen i summen, gives laveste mulige resultat. Dette medfører en risiko for, at summen underestimeres.

b) For resultater under detektionsgrænsen medtages halvdelen af værdien for detektionsgrænsen

Eksempel: Hvis et resultat er under detektionsgrænsen, og detektionsgrænsen er 5 µg, vil værdien 2,5 µg medtages i summen.

Ved at medtage halvdelen af detektionsgrænsen estimeres det, at der er lige stor sandsynlighed for alle udfald mellem 0 og detektionsgrænsen. Denne metode anbefales, hvis det forventes, at der er indhold i prøverne.

c) For resultater under detektionsgrænsen medtages værdien for detektionsgrænsen i summen

Denne tilgang giver et estimat på det maksimale indhold, der potentielt kan findes i prøven.

Ved at benytte denne tilgang er der risiko for, at summen overestimeres.

d) Statistiske metoder

Ved brug af forskellige statistiske modeller, kan der modelleres et mere korrekt resultat for summen. For at anvende statistiske modeller er der dog brug for et statistisk grundlag, dvs. flere målinger over detektionsgrænsen fra samme prøvested.

EPAs Technical Guidance Manual indeholder et beslutningstræ, der kan anvendes til at vælge hvilken metode, der skal bruges. Beslutningstræet kræver dog en vis forventning til prøvens indhold/prøvestedets historik for at være brugbar.

I kommissionens direktiv 2009/0/EF (efterfølgende kvalitetsdirektivet) /9/ står der skrevet, at ved summer, der består af en given gruppe af fysiske-kemiske parametre eller målestørrelser, skal resultater under kvantifikationsgrænsen sættes lig 0. Dette er ordret implementeret for sum-beregninger på overfladevand /11/.

I drikkevandsbekendtgørelsen /2/ er der tilføjet følgende fodnote til beregningen af summen af alle pesticider og deres nedbrydningsprodukter: "Summen af alle individuelle pesticider og nedbrydningsprodukter, der påvises og kvantificeres under kontrolproceduren." For drikkevand afrapporteres resultater på enkelt parametre typisk ned til detektionsgrænsen, og dvs. at her sættes resultater under detektionsgrænsen lig 0. Dette er i overensstemmelse med anbefalingen i Drikkevandsvejledningen /12/.

Beregning af summens måleusikkerhed, hvis én eller flere af de indgående parametre er under detektionsgrænsen, behandles i sektionen om måleusikkerhed.

2. Hvor mange betydende cifre bør medtages ved beregning?

For at undgå afrundingsfejl er den generelle anbefaling fra tekstbøgerne, at man undlader at afrunde beregningsgrundlag. Det vil sige, at der bør medtages så mange betydende cifre som muligt ved beregning, også selvom disse cifre ikke understøttes af den enkelte parameters måleusikkerhed.

3. *Summens detektionsgrænse*

I teorien er der forskellige måder at definere detektionsgrænsen for en sum. Metodernes fordele og ulemper vil afhænge af, hvordan parametre under detektionsgrænsen medtages. Mulighederne gennemgås i nedenstående eksempel:

Eksempel 1:

Fire stoffer skal summeres. For stof 1 er der fundet et indhold over detektionsgrænsen, mens stof 2, 3 og 4 alle har et indhold under de respektive detektionsgrænser. Detektionsgrænser og målt indhold er opsummeret i nedenstående tabel.

	Indhold	Detektionsgrænse
Stof 1	0,1 µg/L	0,05 µg/L
Stof 2	< 0,5 µg/L	0,5 µg/L
Stof 3	< 0,1 µg/L	0,1 µg/L
Stof 4	< 0,1 µg/L	0,1 µg/L

a) Summens detektionsgrænse er lig med den højeste detektionsgrænse for de indgående parametre

I dette eksempel vil summens detektionsgrænse være 0,5 µg/L, som er detektionsgrænsen for stof 2. Hvis denne detektionsgrænse anvendes, vil summen blive afrapporteret som < 0,5 µg/L. Det betyder, at det påviste indhold af Stof 1 vil blive skjult, da indholdet (0,1 µg/L) er lavere end detektionsgrænsen.

b) Summens detektionsgrænse er lig med den laveste detektionsgrænse for de indgående parametre

I dette eksempel vil summens detektionsgrænse være 0,05 µg/L, som er detektionsgrænsen for stof 1. Hvis denne detektionsgrænse anvendes, vil Stof 1 blive korrekt afrapporteret, men man risikerer at afrapportere en falsk for lav værdi, da indholdet af Stof 2 kan være op til 0,5 µg/L og stadig ligge under parameterens detektionsgrænse.

c) Summens detektionsgrænse er lig med summen af detektionsgrænserne for alle indgående parametre

I dette eksempel vil summens detektionsgrænse være:

$$0,05 \mu\text{g/L} + 0,5 \mu\text{g/L} + 0,1 \mu\text{g/L} + 0,1 \mu\text{g/L} = 0,75 \mu\text{g/L}.$$

Hvis denne detektionsgrænse anvendes, vil risikoen for at overse et positivt resultat blive endnu højere end den var i mulighed 1, hvor den højeste detektionsgrænse blev anvendt. Detektionsgrænsen vil også blive meget høj, hvis mange parametre skal summeres, som det f.eks. er tilfældet med summen af pesticider.

d) Summens detektionsgrænse angives ikke

Her vil summen så afrapporteres uden angivelse af detektionsgrænse.

I EU-kommissionens 'Tekniske retningslinjer for analysemetoder til overvågning af per- og polyfluorylalkylstoffer (PFAS) i drikkevand' /10/ behandles detektionsgrænsen for summen af PFAS som følger: "LOQ (eller LOD) kan kun med rimelighed beregnes for enkeltstoffer."

4. *Summens måleusikkerhed*

DS/EN/ISO 17025:2017 /6/ definerer i afsnit 7.8.3, at måleusikkerheden skal angives i samme enhed som målestørrelsen eller i procent.

ISO/IEC Guide 98-3 /7/ beskriver, at usikkerheden for summen af to eller flere uafhængige resultater kan udtrykkes ved:

$$Usikkerhed_{samlet} = \sqrt{\sum Usikkerhed_{stof1}^2 + Usikkerhed_{stof2}^2 + \dots}$$

Usikkerhederne i forbindelse med summer skal beregnes i absolutte værdier, så hvis én eller flere af de indgående parametre er angivet med en relativ usikkerhed, skal disse omregnes til absolutte værdier.

Der er forskellige måder at definere, hvilke usikkerheder, der skal medregnes i det samlede usikkerhedsbidrag, og disse behandles i nedenstående eksempel:

Eksempel 2:

I Analyse kvalitetsbekendtgørelsens bilag 1, afsnit 1.4 Drikkevandskontrol nævnes 23 pesticider og nedbrydningsprodukter med en absolut usikkerhed på 0,03 µg/L. I dette eksempel kigger vi på summeringen af disse 23 parametre.

a) Usikkerhederne for alle indgående parametre medregnes

Ved at anvende ovenstående formel beregnes summens absolutte usikkerhed til:

$$Usikkerhed_{samlet} = \sqrt{23 * (0,03 \mu\text{g/L})^2} = 0,1 \mu\text{g/L}$$

b) Kun stoffer med indhold over detektionsgrænsen bidrager til usikkerheden på summen

Hvis kun 2 ud af de 23 parametre har et indhold over detektionsgrænsen, så vil usikkerheden for disse stoffer alene bestemme usikkerheden på summen. Antager vi, at resultaterne er på lavt niveau, og vi dermed kan bruge parametrenes absolutte usikkerhed, vil summens absolutte usikkerhed blive:

$$Usikkerhed_{samlet} = \sqrt{2 * (0,03 \mu\text{g/L})^2} = 0,04 \mu\text{g/L}$$

Denne metode sikrer, at usikkerheden er sammenholdelig med resultaterne, men den ser bort fra det usikkerhedsbidrag, der stammer fra de parametre, der ligger under detektionsgrænsen.

c) Usikkerheden angives ikke

Det er også en mulighed at undlade at angive en usikkerhed på summen og udelukkende oplyse usikkerheden på de enkelte resultater, som indgår i summen. Fordelen ved dette er, at der ikke oplyses forkerte usikkerheder, men det vanskeliggør fortolkningen af resultaterne, da der ikke kan fortolkes udelukkende på summen.

d) Usikkerheden estimeres

Eurochem Guide 4 /8/ beskriver i bilag E problemstillingen med summering af flere parametre, hvor usikkerhederne varierer alt efter koncentrationsniveau. I guiden angives følgende:

"Hvor en række resultater er rapporteret sammen, kan det være muligt, og er helt acceptabelt, at give et skøn over usikkerhed gældende for alle rapporterede resultater."

5. Antal betydende cifre ved afrapportering af summer

Definitionen af betydende ciffer, taget fra Den Store Danske, er: " Et betydende ciffer er et ciffer, der har betydning for et afrundet tals (fx et måleresultats) værdi. Fx har 300 centimeter og 3,00 meter hver tre betydende cifre, mens 3 meter og 0,003 kilometer har ét." /3/.

Når to tal lægges sammen, skal der tages højde for antallet af betydende cifre og deres placering i beregningsgrundlaget. Antallet af betydende cifre kan rent regneteknisk være højere i en sum end det er i de indgående parametre.

Eksempel 3:

Der skal laves en sum af to stoffer, som har et indhold som angivet i tabellen. Begge resultater i beregningsgrundlaget har 2 betydende cifre.

Parameter	Resultat [$\mu\text{g/L}$]
Stof 1	5,3
Stof 2	98

Hvis resultaterne summeres uden hensyntagen til måleusikkerhed eller betydende cifre, vil summen blive 103,3 $\mu\text{g/L}$. Denne værdi har fire betydende cifre, altså to mere end de to resultater i beregningsgrundlaget.

a) Matematisk afrunding

Den matematiske regel for angivelse af betydende cifre i beregninger er, at det højst placerede af de mindste betydende cifre bestemmer placeringen af summens mindste betydende ciffer /4/.

Parameter	Resultat [$\mu\text{g/L}$]	Placering af det mindste betydende ciffer
Stof 1	5,3	Tiendedele
Stof 2	98	Ener

I dette eksempel er det højst placerede af de mindste betydende cifre i enerne (resultatet for Stof 2). Da der ikke kan siges noget om værdien af tiendedele for dette resultat, kan der heller ikke siges noget om tiendedelene for summen.

Ifølge ovenstående regel, skal summen afrapporteres med sidste betydende ciffer i enerne, hvilket giver en værdi på 103 $\mu\text{g/L}$. Læg mærke til, at der stadig er flere betydende cifre i summen (3 stk.) end i beregningsgrundlaget (2 stk.).

b) Afrunding i forhold til måleusikkerhed

Hvis vi tager hensyn til, at summen har en måleusikkerhed på 20 $\mu\text{g/L}$ (svarende til ca. 20%), får vi følgende regnestykke:

Måleusikkerhed [$\mu\text{g/L}$]	Placering af højeste betydende ciffer
20	Tiere

Usikkerhedens højst placerede betydende ciffer er i tierne. Det betyder, at usikkerheden påvirker summen helt op på tiernes placering (lægger vi f.eks. usikkerheden til summen, får vi 120 $\mu\text{g/L}$). Der skal derfor foretages en yderligere afrunding af summen, da vi ikke kan sige noget om den præcise værdi på enernes placering.

Det matematisk korrekte resultat har i dette tilfælde 2 betydende cifre og kan skrives som enten $10 \cdot 10^1 \mu\text{g/L}$ eller 0,10 mg/L. I praksis afrapporteres dog ikke resultater i potensform eller med ændring af enheden. Summen vil derfor i dette eksempel afrapporteres som 100 $\mu\text{g/L}$.

c) Fast antal decimaler

En bred anvendt matematisk metode er at angive summen med samme antal decimaler, som det tal med færrest decimaler, som indgår i beregningsgrundlaget.

Parameter	Resultat [$\mu\text{g/L}$]	Antal decimaler
Stof 1	5,3	1
Stof 2	98	0

I dette eksempel vil summen afrapporteres med 0 decimaler, altså med værdien 103 $\mu\text{g/L}$.

d) Fast antal betydende cifre

En sidste mulighed er at vælge et fast antal betydende cifre, som summen afrapporteres med. Ligesom i mulighed a og c, hvor det er det indgående resultat med den mindste præcision, der bliver udslagsgivende for summen, kan antal betydende cifre i summen sættes lig det mindste antal betydende cifre for de resultater, der indgår i beregningen.

Parameter	Resultat [$\mu\text{g/L}$]	Antal betydende cifre
Stof 1	5,3	2
Stof 2	98	2

I dette eksempel vil summen afrapporteres med 2 betydende cifre, altså med værdien 0,10 mg/L eller i praksis 100 $\mu\text{g/L}$.

e) Afrunding efter kravværdier

I Analysekvalitetsbekendtgørelsen, Bilag 1 afsnit 1.4 Drikkevandskontrol angives følgende for alle parametre: "Resultatet angives med mindst samme antal betydende cifre som anvendt for kvalitetskravet for parameteren eller for summen, som parameteren indgår i, i bekendtgørelse om vandkvalitet og tilsyn med vandforsyningsanlæg."

Antallet af betydende cifre i kravværdier kan altså også være en rettesnor til angivelse af antallet af betydende cifre i afrapportering af summer.

Kvalitetskravene er i Bekendtgørelse om vandkvalitet og tilsyn med vandforsyningsanlæg angivet med 1-2 betydende cifre.

Opsummering for eksempel 3:

Mulighed for afrunding af sum	Afrapporteret sum
a. Matematisk afrunding	103 $\mu\text{g/L}$
b. Afrunding i forhold til måleusikkerhed	100 $\mu\text{g/L}$
c. Fast antal decimaler	103 $\mu\text{g/L}$
d. Fast antal betydende cifre (lig mindste antal betydende cifre i beregningsgrundlag)	100 $\mu\text{g/L}$
e. Efter kravværdi	
Fx krav på 100 $\mu\text{g/L}$	103 $\mu\text{g/L}$
Fx krav på 50 $\mu\text{g/L}$	100 $\mu\text{g/L}$

Eksempel 4:

Der skal laves en sum af følgende fire stoffer:

Parameter	Resultat [µg/L]	Antal betydende cifre	Placering af det mindste betydende ciffer	Antal decimaler
Stof 1	127	3	Enere	0
Stof 2	1100	2	Hundreder	0
Stof 3	2,7	2	Tiendedele	1
Stof 4	0,1	1	Tiendedele	1

Resultatet for den matematiske sum:

$$127 \mu\text{g/L} + 1100 \mu\text{g/L} + 2,7 \mu\text{g/L} + 0,1 \mu\text{g/L} = 1229,8 \mu\text{g/L}$$

Overblik over den afrapporterede sum efter de 4 muligheder:

Mulighed	Afrapporteret sum
a. Matematisk afrunding	1200 µg/L
b. Afrunding i forhold til måleusikkerhed*	1200 µg/L
c. Fast antal decimaler	1130 µg/L
d. Fast antal betydende cifre (lig mindste antal betydende cifre i beregningsgrundlag)	1000 µg/L
e. Efter kravværdi	
Fx krav på 1000 µg/L	1230 µg/L
Fx krav på 50 µg/L	1200 µg/L

* Usikkerheden sættes til 200 µg/L, hvilket svarer til ca. 20%

Løsning

1. Hvordan medtages parametre under detektionsgrænsen?

Ifølge kvalitetsdirektivet /9/ skal resultater under kvantifikationsgrænsen sættes lig 0 for summer, der består af en given gruppe af fysiske-kemiske parametre eller målestørrelser. Dette er i overensstemmelse med vejledningen fra EPA /5/ for prøver med forventet lavt indhold.

Denne metode kan medføre en underestimering af summen, men i langt de fleste tilfælde hvor vi i dag beregner summer, forventer vi ikke fund af de indgående parametre. I tilfælde af forureningssager er denne metode mindre retvisende, men ifølge DS/EN 17025 /6/ skal laboratorierne være upartiske i forbindelse med resultaterne og kan derfor ikke behandle disse sager forskelligt fra andre.

Det anbefales, at resultater under detektionsgrænsen (LD) eller kvantifikationsgrænsen (LQ) sættes til et indhold på 0 i beregning af summen.

Hvorvidt grænsen skal være LD eller LQ er en beslutning, der skal træffes og meldes ud fra Miljøstyrelsen. Grundet den store usikkerhed på resultater imellem LD og LQ, har Referencelaboratoriet før gjort opmærksom på, at anvendeligheden af resultater under kvantifikationsgrænsen reelt er begrænset //.

2. *Hvor mange betydende cifre bør medtages ved beregning?*

Det er referencelaboratoriets faglige anbefaling, at der medtages så mange betydende cifre som muligt i beregningen, også selvom disse ikke understøttes af den enkelte parameters måleusikkerhed.

Dette kan medføre forskelle i den sumværdi, der kan beregnes og afrapporteres af de forskellige laboratorier og den sumværdi, der kan beregnes på baggrund af de afrapporterede data for enkeltkomponenterne, da laboratorierne mange gange har flere betydende cifre tilgængelige.

3. *Summens detektionsgrænse*

Referencelaboratoriet anser ikke nogen af de tidligere nævnte metoder for angivelse af detektionsgrænsen på summen som optimale, da der enten vil kunne overses resultater, detektionsgrænsen kan være for høj i forhold til de grænseværdier, der er sat, eller der opgives en detektionsgrænse, som er for lav i forhold til de analyseusikkerheder, der er for resultaterne.

Derfor anbefales, at der ikke fastsættes en detektionsgrænse for summen, men at der skal være oplyst detektionsgrænse på alle enkeltkomponenter, som indgår i summen.

Dette er i overensstemmelse med EU-kommissionens 'Tekniske retningslinjer for analysemetoder til overvågning af per- og polyfluorylalkylstoffer (PFAS) i drikkevand' /10/.

I det tilfælde, at alle resultaterne på de indgående parametre er under de respektive detektionsgrænser, markeres dette tydeligt på rapporten.

4. *Summens måleusikkerhed*

De forskellige metoder, hvorpå usikkerheden på en sum kan angives, samt deres fordele og ulemper, er beskrevet tidligere i dette notat.

Medtages alle usikkerheder i beregningen, vil summen få en meget høj usikkerhed, også selvom der måske kun indgår ét positivt resultat.

Hvis usikkerheden i stedet kun medtages for de parametre, der indgår i summen med resultater over detektionsgrænsen, underestimeres den reelle samlede usikkerhed, da usikkerhedsbidraget fra de stoffer, som ikke er detekteret, ikke bliver medtaget.

Ud over dette sætter de to ovenstående metoder store krav til de IT-systemer, som anvendes, da usikkerheden skal beregnes i absolutte værdier og derfor varierer alt efter resultatet på hver indgående parameter. På nuværende tidspunkt er der ikke krav om, at den absolutte usikkerhed skal oplyses på rapporterne, og derfor kan beregningen også være svær at udføre i et IT-system uden for laboratorierne.

Hvis der slet ikke oplyses en måleusikkerhed vil det være sværere at fortolke på resultaterne for summerne. Det vil kræve, at der kigges på de enkelte resultater for de indgående parametre for i hvert tilfælde at vurdere hvilken usikkerhed, der er på summen.

Hvis måleusikkerheden estimeres som angivet i EURACHEM, vil det være op til det enkelte laboratorie at vurdere usikkerheden, hvilket vil lede til forskellige usikkerheder for de samme resultater alt efter, hvilket laboratorie eller system, der laver beregningen. Derfor anbefales dette ikke.

Referencelaboratoriet anbefaler, at der ikke oplyses en usikkerhed på summen, men at der skal være oplyst usikkerheder på alle enkeltkomponenter, som indgår i summen.

5. *Antal betydende cifre for summen*

Hvis der bruges matematisk afrunding eller afrunding i forhold til antal decimaler (metode a og c), er der risiko for afrapportering af summer med et højere antal betydende cifre end det, der kan understøttes af måleusikkerheden.

Afrunding i forhold til antal decimaler kræver desuden meget af laboratoriernes IT-systemer, da resultater typisk afrundes efter antal betydende cifre, og antallet af decimaler derfor ikke er fast. Det samme gør sig gældende for afrunding i forhold til summens usikkerhed (metode b), da usikkerheden vil skulle omregnes til den absolutte værdi. Desuden anbefaler referencelaboratoriet ikke, at der angives en måleusikkerhed for summer.

Afrunding i forhold til antal betydende cifre i beregningsgrundlaget (metode d) er en mere enkel og IT-venlig metode, da antallet af betydende cifre i beregningsgrundlaget ofte allerede er fastlagt af laboratorierne via deres IT-systemer. Dog kan antallet af betydende cifre på summen variere alt efter, hvor mange betydende cifre det enkelte laboratorium vælger at afrapportere beregningsgrundlaget med. Der kan også opstå problemer, hvis der summeres over enkeltkomponenter, der ofte har et indhold under detektionsgrænsen og dermed ikke medtages i summen. Metode d vil i dette tilfælde give anledning til, at antallet af betydende cifre på summen varierer alt efter hvilke enkeltkomponenter, der medtages.

Den mest entydige metode vil være at afrapportere med samme antal betydende cifre, som der indgår i kravværdien (metode e). Det kræver dog, at der findes en kravværdi for de summer, der skal afrapporteres. Hvis der ikke findes en kravværdi, bør summen afrapporteres med et fast antal betydende cifre.

Referencelaboratoriet anbefaler, at summer afrapporteres med samme antal betydende cifre som indgår i deres kravværdier. Hvis en kravværdi ikke er angivet i relevante bekendtgørelser, bør summen afrapporteres med 2 betydende cifre.

Høring

Nærværende notat har været i høring hos Referencelaboratoriets følgegruppe. Efterfølgende har notatet samt høringssvar dannet grundlag for Miljøstyrelsens retningslinjer for samberegninger /14/, som har været i offentlig høring inden udgivelse. Notatet ændres derfor ikke på baggrund af høringssvar, men de tages til referat herunder.

- Der savnes beskrivelse af krav, hvis resultatet ikke er en sum af enkeltparametre, men af en fraktion
- Der bør tages særskilt stilling til, hvad hævdede detektionsgrænser har af betydning for summerne
- Det bør overvejes, om summer ikke længere bør beregnes af laboratorierne selv, men i stedet udelukkende vises i nationale databaser
- Der opfordres til, at Referencelaboratoriets anbefalinger skrives ind i Analyse kvalitetsbekendtgørelsen. Desuden savnes en endelig stillingtagen til anvendelse af enten LD eller LQ.
- Der savnes stillingtagen til, om sumparametre kan/bør akkrediteres, da DANAK i sin tid stoppede akkreditering af samberegninger, hvilket har ledt til, at nogle laboratorier har akkreditering, mens andre ikke kan opnå det.
- Kravene bør forudsætte, at fagportalerne er klar til at håndtere beregninger og parametre ud fra disse anbefalinger.
- Der udtrykkes bekymring for, om disse anbefalinger kan lede til en stigning i overskridelser, da resultaterne danner grundlag for vigtige beslutninger i kommunerne.

Forskel fra i dag

Anbefalinger er opsummeret i nedenstående tabel.

Nærværende notat indgår i Miljøstyrelsens overvejelser for fastsættelse af retningslinjer for beregning af summer.

Emner gennemgået	Referencelaboratoriets anbefalinger
1d	Resultater på enkeltparametre < LD eller LQ sættes lig nul i sumberegningen. Det er Miljøstyrelsen der skal melde ud, om det er LD eller LQ der er den gældende grænse.
2	Der medtages så mange betydende cifre som muligt på resultaterne for de enkeltparametre, der indgår i sumberegningen.
3d	Summens LD eller LQ angives ikke. LD eller LQ skal fremgå for de enkeltkomponenter, der indgår i summen.
4c	Summens usikkerhed angives ikke. Usikkerheden skal fremgå for de enkeltkomponenter, der indgår i summen.
5e	Resultatet af den beregnede sum afrapporteres med samme antal betydende cifre, som der indgår i kravværdien. Hvis en kravværdi ikke er angivet i de relevante bekendtgørelser, bør summen afrapporteres med 2 betydende cifre.

Referencer

- /1/ Bekendtgørelse om anvendelse af affald til jordbrugsformål, BEK nr. 1001 af 27/06/2018
- /2/ Bekendtgørelse om vandkvalitet og tilsyn med vandforsyningsanlæg, BEK nr. 1383 af 03/10/2022
- /3/ Gyldendal Den Store Danske, <http://denstoredanske.dk>
- /4/ Daniel C. Harris, 2010, Quantitative chemical analysis 8th udgave.
- /5/ EPA/903/8-91/001, Chemical concentration data near the detection limit, 1991.
- /6/ DS/EN 17025:2017, Generelle krav til prøvnings- og kalibreringslaboratoriers kompetence
- /7/ ISO/IEC Guide 98-3:2008, Vejledning i at udtrykke måleusikkerhed (GUM)
- /8/ EURACHEM, CITAC gude CG 4, Quantifying Uncertainty in analytical measurement, 2012.
- /9/ KOMMISSIONENS DIREKTIV 2009/90/EF, 2009, om tekniske specifikationer for kemisk analyse og kontrol af vandets tilstand som omhandlet i Europa-Parlamentets og Rådets direktiv 2000/60/EF.
- /10/ Den Europæiske Unions Tidende, C/2024/4910: Tekniske retningslinjer for analysemetoder til overvågning af per- og polyfluorylalkylstoffer (PFAS) i drikkevand, 2024, https://eur-lex.europa.eu/legal-content/DA/TXT/HTML/?uri=OJ%3AC_202404910
- /11/ Bekendtgørelse om overvågning af overfladevandets, grundvandets og beskyttede områders tilstand og om naturovervågning af internationale naturbeskyttelsesområder, BEK nr 792 af 13/06/2023

- /12/ Vejledning om Vandkvalitet og tilsyn med vandforsyningsanlæg, Drikkevandsvejledning, Februar 2022, <https://www2.mst.dk/Udgiv/publikationer/2022/02/978-87-7038-389-9.pdf>
- /13/ <https://mst.dk/erhverv/rent-miljoe-og-sikker-forsyning/drikkevand-og-grundvand/kvalitetskrav-til-miljoemaalinger>
- /14/ Miljøstyrelsens retningslinjer for sumberegninger, Miljø- og Ligestillingsministeriet, 10. december 2025, <https://mst.dk/media/mcwb3gpw/miljoestyrelsens-retningslinjer-for-sumberegninger.pdf>