СВОБОДНАЯ ТРИБУНА

УДК 556; 543.067; 004.042

DOI: 10.15372/KhUR20150506

Необходимость и сущность нового подхода к оценке состава, свойств веществ и материалов (на примере контроля качества воды)

О. М. РОЗЕНТАЛЬ

Институт водных проблем РАН,
ул. Губкина, 3, Москва 119333 (Россия)

E-mail: omro3@yandex.ru

(Поступила 04.07.15)

Аннотация

Вместо существующего подхода к оценке состава и свойств веществ и материалов на основе концепции "абсолютного доверия" к результатам измерений предложена концепция "приемлемого риска" нарушения границ статистического интервала. На примерах контроля качества воды показано, что, хотя новый подход, как и существующий, не позволяет по результатам выборочных исследований обеспечить полную безошибочность заключений о контролируемых показателях, он гарантирует заданный уровень надежности (риска) оценок, необходимый для принятия корректных научных и управленческих решений. Показано также, что пониженный риск ошибочного признания соответствия контролируемых показателей установленным требованиям при фактическом несоответствии может быть обеспечен путем замены "нестрогого" способа ограничения величин "строгим".

Ключевые слова: абсолютное доверие, приемлемый риск, априорная информация, контролируемый показатель качества, выборочная совокупность, доверительный интервал

ВВЕДЕНИЕ

Важнейшим условием обеспечения безопасности и качества веществ и материалов является выяснение соответствия или несоответствия их состава и свойств установленным требованиям. Для природных и сточных вод это показано в работах [1, 2]. При этом обычно значение каждого исследуемого показателя λ ограничивается максимально допустимым значением $\lambda_{доп}$, т. е. соответствие подтверждается при условии $\lambda \le \lambda_{доп}$ и отвергается при $\lambda > \lambda_{доп}$. Таково правило, основанное на концепции "абсолютного доверия" к результатам измерений. Справедливость установленных неравенств принимается со 100 % уверенностью, что некорректно при исследовании выборочной совокупности данных, среднеарифметическое значение которых соизмеримо со среднеквадратическим отклонением и погрешностью измерений [2, 3]. Возникающие при этом неверные выводы, научные и хозяйственные решения в разных случаях приводят к необоснованному истощению природных ресурсов, браку продукции и арбитражным ситуациям из-за противоположных заключений органов производственного и государственного контроля, как это показано в [1–3] для водных систем. Поэтому необходимо искать новый подход к оценке качества на основе концепции "приемлемого риска": $1 - R_з$, где $R_з$ – заданное предельно допустимое значение вероятности R того, что вышеприведенные неравенства выполняются.

При периодических измерениях нестабильных показателей истинное значение R неизвестно. Но может быть найден доверительный интервал $[R_н R_в]$ между допустимыми верхним $R_в$ и нижним $R_н$ значениями этой величины, в котором она, скорее всего, находится. Оценку доверительного интервала можно выполнить с учетом или без учета количественного значения разности $|\lambda - \lambda_{доп}|$.

1. Без учета значения $|\lambda - \lambda_{доп}|$ необходимо, чтобы число d несоответствующих результатов выборочной совокупности измерений из общего количества n было ограничено уровнем, при котором величина $R = 1 - d/n$ не превышает $R_з$. Для этого по схеме Бернулли достаточно определить значения $R_н$ и $R_в$ таким образом, чтобы отличие случайной величины d от наблюдаемой статистики $\hat{d}$ было малой величиной. Если ввести вероятности P неравенств $P\{d \le \hat{d}\} = 1 - \gamma_2$, $P\{d \ge \hat{d}\} = 1 - \gamma_1$, где $\gamma_1 + \gamma_2 - 1 = \gamma$ – доверительная вероятность попадания R в интервал $[R_н\ R_в]$, то поставленная задача решается с использованием известных уравнений Клоппера – Пирсона для интервальной оценки R:

$$\left.\begin{aligned}&\sum_{r=0}^{\hat{d}} \frac{n!}{r!(n-r)!} R_н^{n-r} (1 - R_н)^r = 1 - \gamma_2\\ &\sum_{r=0}^{\hat{d}-1} \frac{n!}{r!(n-r)!} R_в^{n-r} (1 - R_в)^r = \gamma_1\end{aligned}\right\} \qquad (1)$$

2. С учетом значения разности $|\lambda - \lambda_{доп}|$ упростим определение интервала $[R_н\ R_в]$, допустив предположение о нормальном распределении плотности вероятности контролируемого показателя. Тогда дисперсия

$$D[k] = \frac{1}{n} + \left(\frac{\lambda_{доп} - \bar{\lambda}}{S}\right)^2 \frac{1}{2(n-1)}$$

а математическое ожидание $M[k] = U_R$, где U_R – квантиль стандартного нормального распределения; $k = \frac{\lambda_{доп} - \bar{\lambda}}{S}$ – показатель отличия статистической оценки от нормативного значения показателя; S – оценочное среднеквадратическое отклонение контролируемого показателя. При этом значения U_R находятся в границах

$$\frac{\lambda_{доп} - \bar{\lambda}}{S} - U_{\frac{1-\gamma}{2}} \sqrt{\frac{1}{n} + \left(\frac{\lambda_{доп} - \bar{\lambda}}{S}\right)^2 \frac{1}{2(n-1)}} \le U_R$$

$$\le \frac{\lambda_{доп} - \bar{\lambda}}{S} + U_{\frac{1-\gamma}{2}} \sqrt{\frac{1}{n} + \left(\frac{\lambda_{доп} - \bar{\lambda}}{S}\right)^2 \frac{1}{2(n-1)}} \qquad (2)$$

что позволяет оценить $U_{R_н}$ и $U_{R_в}$ и далее – $R_н$ и $R_в$.

Пример 1. Один из основных показателей доочищенной воды – ее удельная электропроводность λ, типичный верхний предел которой в медицинской, электронной и оптической отраслях промышленности $\lambda_{доп} = 1.6$ мкСм/см. Пусть λ_i – результат i-го измерения, $i = 1, 2...n$, $n = 71$. Пусть также допускается не более $d = 1$ несоответствия, причем среднее значение электропроводности $\bar{\lambda} = \frac{1}{n}\Sigma_{i=1}^{n}\lambda_i = 0.8$ мкСм/см, максимальное $\lambda_{max} = 1.7$ мкСм/см, $S = \sqrt{\frac{1}{n-1}\Sigma_{i=1}^{n}(\lambda_i - \bar{\lambda})^2} = 0.4$ мкСм/см. Необходимо оценить пригодность воды для использования с учетом установленного ограничения.

Решение № 1. Поскольку зафиксирована только одна несоответствующая проба (1.7 мкСм/см), что допускается условиями примера, то при условии "абсолютного доверия" решение о пригодности воды для использования принимается.

Решение № 2. При новом подходе необходимо задать приемлемый риск, например $1 - R_з = 0.05$. Тогда достоверность простейшей точечной оценки вероятности R по частоте удовлетворительна: R = 70/71 = 0.986, что больше вероятности $R_з = 1 - 0.05 = 0.95$. Точность оценки характеризуется интервалом $[R_н R_в]$. В случае биноминального распределения, применение которого здесь вполне допустимо [2, 4], и доверительной вероятности $\gamma = 0.9$ находим из (1): $R_н = 0.934$, $R_в = 0.9993$. Следовательно, риск несоответствия воды $1 - R_н = 0.066$, что больше приемлемого значения 0.05, и решение о пригодности воды отвергается.

Решение № 3. С учетом выражения (2) при условиях задачи имеем $1.66 \le U_R \le 2.34$. Поэтому $R_н = 0.951$, $R_в = 0.99$, риск $1 - R_н = 0.049$, что меньше 0.05, и решение о пригодности воды принимается. Это заключение сходно с решением по варианту № 1 только внешне, так как здесь гарантирован уровень приемлемого риска.

3. Учет априорной информации полезен при новом подходе к оценке контролируемых показателей. Продемонстрируем это на приведенном выше примере, мысленно увеличив объем выборочных испытаний до уровня, достаточного для того, чтобы в первом приближении пренебречь статистическим разбросом оценок $\bar{\lambda}$ и S и считать их истинными среднеарифметическим значением удельной электропроводности и среднеквадратическим отклонением σ_λ соответственно. Предположим также, что по данным исследования искомого закона распределения вероятностей в диапазоне [0.05, 0.95] его можно считать нормальным. Тогда при квантиле $U_{(1-\gamma)/2} = 1.96$, соответствующем $\gamma = 0.95$, выбирается $(\lambda_{доп} - \bar{\lambda})/\sigma_\lambda = 2$, и требование к электропроводности воды выполняется. Это обусловлено тем, что, если вероятность выполнения неравенства $\left|\lambda_{доп} - \bar{\lambda}\right| \le 2\sigma_\lambda$ не превышает $R_з = 0.95$, то $\bar{\lambda} + 2\sigma_\lambda = 0.8 + 2 \cdot 0.4 = 1.6$ мкСм/см, что, в свою очередь, не превышает $\lambda_{доп}$, а при приемлемом риске 0.05 наличие одного несоответствующего результата измерения не влияет на решение о пригодности воды.

При отсутствии полной априорной информации о функции распределения все же может быть полезно выяснить вопрос об уровне ее асимметрии. Так, в примере 1 соответствующий показатель $\beta_1 = \dfrac{m_з}{\sigma_\lambda^3}$ $\left(m_з = \dfrac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(\lambda_i - \bar{\lambda})^3\right.$ – момент случайной величины) близок к нулю, а выборочная медиана примерно равна математическому ожиданию. Поэтому заключаем, что асимметрия рассматриваемой функции, скорее всего, отсутствует. Тогда в соответствии с правилом Гаусса [4] вероятность выполнения неравенства $\left|\lambda_{доп} - \bar{\lambda}\right| \le 3\sigma_\lambda$ приблизительно равна 0.95. Следовательно, $0.8 + 3 \cdot 0.4 = 2$ мкСм/см, что больше λ_{max}. Поэтому решение о пригодности воды отвергается, что также справедливо в случае, если закон распределения не является симметричным.

4. Выбор способа ограничения контролируемых показателей имеет принципиальное значение при новом подходе к оценке качества веществ и материалов. Так, электропроводность воды может ограничиваться "строгим" требованием $\lambda_i < \lambda_{доп}$ и "нестрогим" – $\lambda_i \le \lambda_{доп}$. В последнем случае и нормальном законе распределения вероятностей контролируемого показателя $\lambda \to f(\lambda_i, \sigma_\lambda^2)$ гипотеза о соответствии контролируемых показателей установленным требованиям принимается при выполнении следующего решающего правила: $(\lambda_i - \lambda_{доп})/\sigma_\lambda \le u_{1-\alpha}$, т. е. контрольный допуск смещается на величину $\sigma_\lambda u_{1-\alpha} = \lambda_i - \lambda_{доп}$, где α – уровень значимости (ошибка первого рода). При строгом ограничении $\lambda_i < \lambda_{доп}$ гипотеза о пригодности принимается, если $(\lambda_i - \lambda_{доп})/\sigma_\lambda < u_\alpha$, так что контрольный допуск смещается на величину $\sigma_\lambda u_{1-\alpha} = \lambda_i - \lambda_{доп}$. Внутри же интервала $\pm\sigma_\lambda u_{1-\alpha}$ гипотезы о пригодности или непригодности неразличимы, и корректная оценка качества требует дополнительных исследований.

Пример 2. Свойства грунтовых электротехнических сталей в значительной степени зависят от качества воды, используемой в технологии нанесения грунта на металл. Необходимо выяснить вопрос о пригодности воды, электропроводность которой ограничена уровнем $\lambda_{доп} = 6$ мкСм/см, а при измерениях полу-

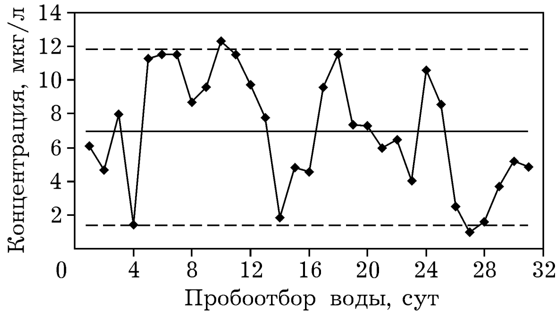

Рис. 1. Временная развертка удельной электропроводности проб воды (цех холодного проката В.-Исетского металлургического завода, ежедневные измерения, август – сентябрь, 2011 г.).

чено (рис. 1): $\sigma_\lambda = 3.45$ мкСм/см, $\bar{\lambda} = 6.95$ мкСм/см (сплошная горизонтальная линия).

Решение. При нестрогом ограничении $\lambda_i \le \lambda_{доп}$ и $\alpha = 0.05$ контрольный допуск увеличивается на $\sigma_\lambda u_{1-\alpha} = 3.45 \cdot 1.64 = 5.66$ мкСм/см (верхняя штриховая линия на рис. 1), при строгом $\lambda_i < \lambda_{доп}$ – уменьшается (нижняя штриховая линия). В первом случае принимается решение о пригодности воды для использования, так как установленным требованиям удовлетворяет 30 проб из 31, во втором – о непригодности, так как только две пробы удовлетворительны. Следовательно, вероятность браковки воды при нестрогом ограничении оценивается как 1/31 (≈0.03), а вероятность приемки при строгом – как 2/31 (≈ 0.06).

Для оценки достоверности искомой информации полезно также оценить среднее значение контролируемого показателя за определенный период времени. Тогда в примере 2 при нестрогом ограничении имеем $(\bar{\lambda} - \lambda_{доп})\sqrt{n} / \sigma_\lambda \le u_{1-\alpha}$, т. е. $(6.95 - 6)\sqrt{31} / 3.45 = 1.53 < 1.64$ и принимается решение о пригодности воды.

ВЫВОДЫ

1. В условиях высокой нестабильности контролируемых показателей целесообразно оценить качество веществ и материалов с использованием подхода на основе концепции “приемлемого риска”, а не “абсолютного доверия”. Эти подходы идентичны, только если приемлемый риск $1 - R_з = 0$, что возможно в ограниченных объемах исследуемого объекта, например в воде, расфасованной в емкости. Тогда оправдано условие “абсолютного доверия” ($\lambda \le \lambda_{доп}$). Но оно сомнительно уже при исследовании партий продукции, а тем более в системах подготовки, обработки и кондиционирования веществ и материалов, где контролируемые показатели непостоянны в пространстве и времени. При этом $1 - R_з > 0$ и необходимо использовать предложенный новый подход к оценке качества.

2. Развитые в работе научные основы методологии “приемлемого риска” позволяют сформировать статистические процедуры контроля качества и безопасности, а также повысить точность заключений о пригодности веществ и материалов для заданного использования путем учета априорной информации.

3. Новый подход, как и существующий, не обеспечивает полной достоверности заключений о качестве, но гарантирует их правильность с приемлемым риском ошибки. При этом вероятность ошибочного признания пригодности вещества или материала для использования в особо ответственных случаях может быть дополнительно снижена путем замены нестрогого способа ограничения контролируемых показателей строгим.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1 Карташева А. В., Чамаев А. В. // Контроль качества продукции. 2015. № 1. С. 15–20.
2 Александровская Л. Н., Розенталь О. М. // Водн. ресурсы. 2011. Т. 38, № 1. С. 108–119.
3 David Walker. Accuracy and Precision in Sampling Water (Тщательность и точность в осуществлении отбора проб воды). ISO Focus. 2006. No. 6. S. 21–24.
4 Королев В. Ю., Бенинг В. Е., Шергин С. Я. Математические основы теории риска. М.: Физматлит, 2011. 620 с.