

ПРИМЕНЕНИЕ методов квалиметрии для ИНТЕРПРЕТАЦИИ РЕЗУЛЬТАТОВ ЛАБОРАТОРНОГО АНАЛИЗА

Разброс количественных характеристик качества воды нередко превосходит их среднее значение, при этом погрешность измерения может быть соизмерима с разбросом, а ошибка, обусловленная недостаточным объемом выборки – с погрешностью. В этих условиях интерпретация результатов лабораторного исследования требует использования методов квалиметрии, в числе которых в работе предложены интервальные непараметрическая (по альтернативному признаку) и параметрическая оценки, базирующиеся на математическом аппарате теории толерантных интервалов. Предложен метод определения вероятности выхода за поле допуска контролируемых показателей с оценкой рисков водопотребителя и поставщика. Рассмотрены примеры использования перечисленных методов с целью установления на допустимом уровне указанных рисков и обеспечения отношений доверия на рынке водохозяйственных услуг. Даны рекомендации по ограничению неопределенности результатов оценки качества воды при принятии управленческих решений в сфере водопользования.

Введение

Природные или переработанные воды – важнейший компонент многих промышленных технологий, успешное функционирование и развитие которых требует достоверной научно обоснованной статистической информации о показателях качества этой жидкости. Действующая в настоящее время официальная статистическая водная отчетность, несмотря на длительную историю своего развития, обеспечивает лиц, принимающих водохозяйственные решения, только усредненными во времени детерминированными показателями без оценки уровня их неопределенности, часто недопустимо высокой. Не учитывается изменчивость (вариабельность) характеристик, возникающая под влиянием факторов природного и техногенного происхождения, хотя стандартное отклонение этих величин часто соизмеримо с их абсолютными значениями; не учитывается, что в полный бюд-

О.М. Розенталь*,
доктор технических наук, главный научный сотрудник, ФГБУН Институт водных проблем Российской академии наук

жет неопределенности информации добавляются характеристики рассеяния результатов измерительного контроля, выполненного по аттестованным методикам. Поэтому государственная, территориальная и корпоративная водная статистика применима только в тех случаях, когда не требуется высокая точность и не нужны прогнозные оценки, что не обеспечивает устойчивость водопользования и не отвечает требованиям инновационного развития водохозяйственной инфраструктуры [1]. Данные государственных докладов о качестве пресной воды не позволяют отличить пригодную для использования воду от непригодной, поскольку часто вероятности правильных и ложных заключений о ее соответствии установленным требованиям равны между собой [2]. Поэтому нередко ошибочные водохозяйственные решения, повышающие экологические, социальные и экономические риски.

Глобализация происходящих в стране процессов и курс на водно-сберегающие технологии, заданные Водной стратегией Российской Федерации до 2020 года, программой Генеральной Ассамблеи ООН «Вода для жизни», программой «Вода России – XXI век», создают новые вызовы. Необходима методология высоконадежной водной статистики, обеспечивающая возможность интерпретации данных, полученных в условиях неопределенности, с точностью, приемлемой для каждого конкретного вида водопользования. Поставленные задачи квалиметрии воды – отрасли знаний, позволяющей обеспечить корректную диагностику показателей качества воды и повысить до необходимого уровня надежность управленческих решений, особенно важны:

- ♦ в промышленных регионах с повышенным уровнем водопользования и наиболее высокой изменчивостью показателей качества воды;
- ♦ в электронной, атомной и оптической промышленности, в медицине, в инновационных отраслях экономики, везде, где нечеткая

* Адрес для корреспонденции: orosental@rambler.ru

информация о качестве используемой воды негативно отражается на результатах деятельности;

- при переходе в режим ресурсосберегающего рационального водопользования, при котором поставщик любых вод, питьевых, технологических, сточных, стремится минимизировать затраты путем приближения к предельно допустимым показателям качества, тем самым все более рискуя нарушить установленные требования;

- для урегулирования арбитражных споров водопользователей и органов власти, а также межрегиональных и международных отношений в случае трансграничного переноса вод недостаточно известного качества.

Показатели качества воды только в некоторых случаях, например, в замкнутых объемах, могут рассматриваться как величины постоянные. В открытых техногенных и природных средах, особенно при интенсивном физико-химическом взаимодействии воды с окружающей средой, разброс этих показателей нередко превышает их средние значения [2, 3], вследствие чего результаты периодических измерений не отражают реальную картину [4]. При этом без специальной оценки данных невозможно признать несоответствующей воду, 40 или 30 % проб которой содержат сверхнормативную концентрацию нежелательных посторонних веществ, или признать ее пригодной, если несоответствующих проб только 20 или 10 %. Необходимы вероятностные модели и статистические методы квалиметрии со своими областями применимости, ограничениями и допусками [5]. В данном обзоре рассматриваются преимущественно методы интервальной оценки, распространенной в практике многих видов хозяйственной деятельности [6].

Результаты и их обсуждение

Статистический подход к квалиметрии воды может быть использован корректно при условии, что отсутствуют систематические факторы изменчивости контролируемых показателей, а их среднеквадратические отклонения σ от математического ожидания μ тем менее вероятны, чем они значительнее. Тогда диапазон случайных отклонений этих показателей можно приближенно установить в доверительных границах и использовать так называемый индекс воспроизводимости [6]

$$k_p = \frac{\text{допустимый разброс}}{\text{фактический разброс}}$$

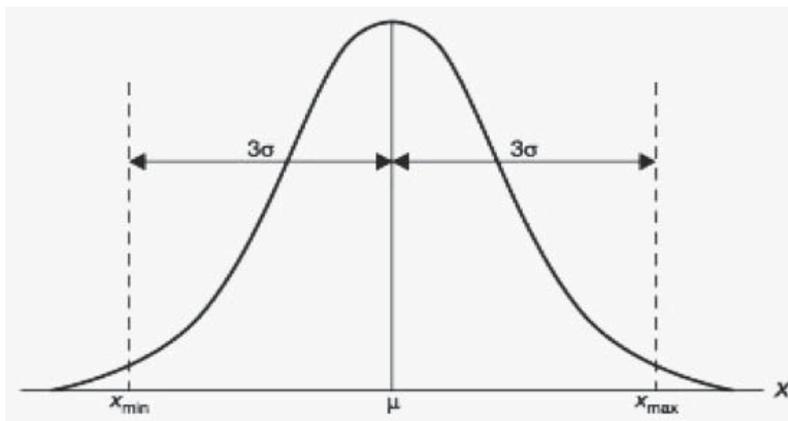


Рис. 1. Случай равенства разбросов.

Здесь возможные границы допуска, x_n и x_b – нормативы, не связанные с вероятностными соотношениями, тогда как границы доверительного интервала – величины случайные, например, равные $\pm 3\sigma$. Поэтому в общем случае

$$k_p = \frac{x_b - x_n}{6\sigma},$$

а для одностороннего поля допуска, ограниченного предельно допустимой концентрацией (ПДК) постороннего компонента в воде¹:

$$k_{PH} = \frac{\text{ПДК} - \mu}{3\sigma},$$

Если $k_p = 1$ (рис. 1), то качество воды следует считать приемлемым. В случае нормального распределения контролируемого показателя здесь вероятность ошибки только 0,27 %².

Общепринята оценка показателей качества в модели Тейлора [7, 8] с помощью функции потери качества, которая скачкообразно меняется от 0 до 1 на границах поля допуска. На рис. 2 а приведен случай двухстороннего ограничения допускового интервала, как это принято для веществ, обеспечивающих физиологическую полноценность питьевой воды [9]. Более общий подход представлен в модели Тагути [8], оперирующей представлением о плавной функции потери качества

$$F = \left[\frac{2}{x_e - x_n} \left(x_i - \frac{x_e + x_n}{2} \right) \right]^2,$$

возрастающей по мере отклонения контролируемого показателя от середины поля

¹ Не снижая общности изложения, рассматриваем далее ПДК как порог, ограничивающий максимально допустимое содержание загрязняющих веществ в любой воде, питьевой, природной, технологической, медицинской, сточной.

² Если учитывать погрешность измерения и недостаточность объема выборки, то следует задавать $k_p > 1$. При $k_p = 1,33$ прогнозируемое число несоответствий будет $8,4 \cdot 10^{-6}$, при $k_p = 1,66 - 6 \cdot 10^{-7}$, при $k_p = 2 - 0,1 \cdot 10^{-7}$ и т.д.

допуска (рис. 2 б). Для воды, содержание посторонних веществ в которой ограничено только верхним пределом, эта функция может иметь вид, представленный на рис. 2 в. Промежуточное положение между подходами Тейлора и Тагути занимает модель «ступенчатого» риска несоответствия, принятая, например, в нормах IBWA (International Bottled Water Association) международной ассоциации производителей бутилированной воды. Национальный стандарт [10], распространяющийся на воду, расфасованную в емкости, также использует схему «двухступенчатого» риска (рис. 3 а). При этом функция F равна нулю для узкого допуска и единице – за пределами широкого допуска (рис. 3 б). Оценка соответствующей функции полезности $U(x)=1-F$ (рис. 3 в) обосновывает категории питьевой воды, содержащей полезные компоненты. Подобным образом регламентируется качество среды обитания и разведения аквакультур, а также воды, используемой при ядерном синтезе, в электронике, при производстве трансформаторных сталей и т.д. Многоступенчатая градация показателей качества предусмотрена

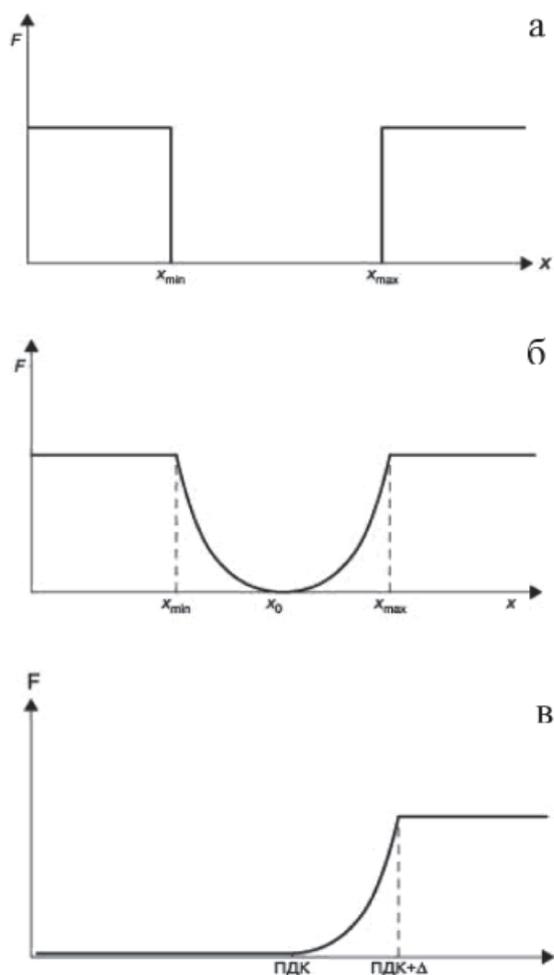
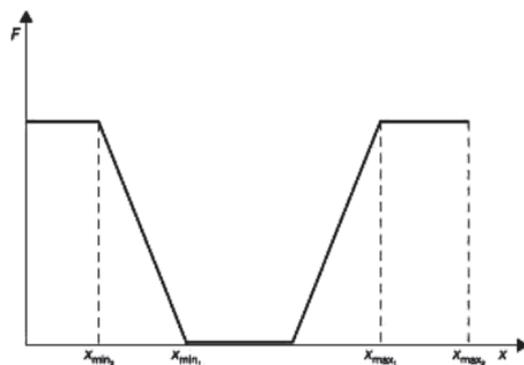
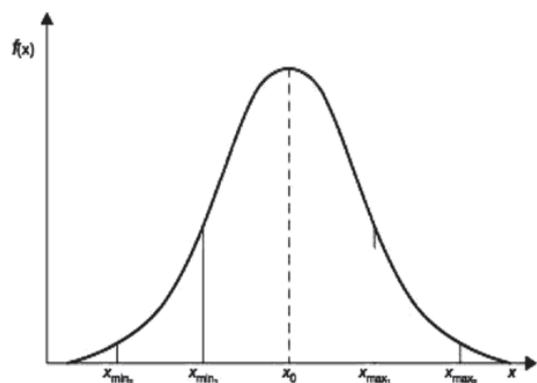


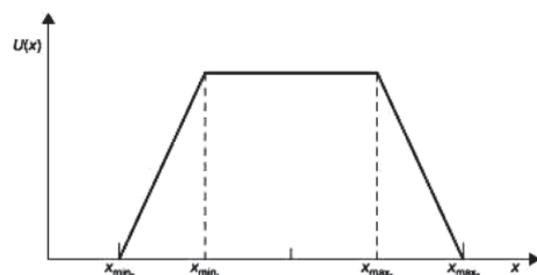
Рис. 2. Функция потери качества.



а



б



в

Рис. 3. Структура двухступенчатого риска (а) и соответствующие функции потерь (б) и полезности.

Руководством [11] «для каждого вредного фактора на основе оценки вероятности и степени тяжести последствий».

Типичной задачей квалиметрии воды является оценка вероятности попадания показателей качества в допусковый интервал по результатам выборочных измерений. При этом оценивается не истинная вероятность R выполнения неравенства типа $C \leq \text{ПДК}$ или их невыполнения $1-R$, а значения измеренных величин

$$\hat{R} = \frac{n-d}{n}, \quad 1-\hat{R} = \frac{d}{n},$$

где n – количество исследованных проб воды, d – число несоответствий. Здесь вероятность ошибочной оценки существенно

зависит от плана проведения эксперимента, как это иллюстрирует следующий пример.

Пример 1. Вероятность выполнения установленных требований ограничена уровнем $R_{\text{зад}} = 0,9$. Эта цифра в выборках (величина $\hat{R} = 0,9$) была получена в следующих сериях исследований:

- 1-я серия: $d=1$ при $n=10$,
- 2-я серия: $d=5$ при $n=50$,
- 3-я серия: $d=10$ при $n=100$.

Результатам какой серии испытаний следует более всего доверять?

Решение. Даже человек, далекий от статистических методов анализа охотнее всего поверит результатам, полученным при $n=100$, и менее всего – при $n=10$. Этот интуитивный вывод справедлив по той причине, что, хотя результат измерений неизбежно отличается от истинного, интервал между верхней и нижней доверительными границами $\Delta R = R_B - R_H$ тем меньше, чем больше n . Это легко подтвердить формально, задавшись доверительной вероятностью $\text{Prob} \{R_H \leq R \leq R_B\} = \gamma$, и используя статистические таблицы, например, для биномиального распределения. Так, при $\gamma=0,9$ значение $R_{\text{зад}}$ находится в интервалах:

- 1-я серия: $d=1, 0,6 \leq R \leq 0,995$,
- 2-я серия: $d=5, 0,8 \leq R \leq 0,959$,
- 3-я серия: $d=10, 0,836 \leq R \leq 0,94$.

Более общий подход предполагает проверку статистических гипотез о соответствии/несоответствии качества воды установленным требованиям. Из рис. 4 видно, что если заданная вероятность $R_{\text{зад}}$ лежит в области 1 $[0, R_H]$, то это означает, что с вероятностью γ выполняется неравенство $R > R_H > R_{\text{зад}}$. Следовательно, принимается гипотеза о том, что, скорее всего, вода соответствует установленным требованиям ($R > R_{\text{зад}}$). Для области 2, где $R < R_B < R_{\text{зад}}$ принимается гипотеза о малой вероятности желаемого результата: $R < R_{\text{зад}}$, а для 3 – гипотеза $R = R_{\text{зад}}$. Для объединенных областей 1+3, т.е. 4 или 2+3, т.е. 5 справедливы гипотезы $R \geq R_{\text{зад}}$, $R \leq R_{\text{зад}}$ соответственно. И хотя человек, неискушенный в статистике, может не обнаружить различий между областями 1 и 4 или 2 и 5 из-за сходства условий $R > R_{\text{зад}}$ и $R \geq R_{\text{зад}}$ в первом случае или $R < R_{\text{зад}}$ и $R \leq R_{\text{зад}}$ во втором, но достоверности решений при этом существенно различаются. Так, для области 1 вероятность выполнения условия $R < R_{\text{зад}}$ мала и при заданной доверительной вероятности составляет

$$\gamma_i = \frac{1 - \gamma}{2} = 0,05,$$

что означает низкий риск водопотребителя, а вероятность условия $R > R_{\text{зад}}$ велика:

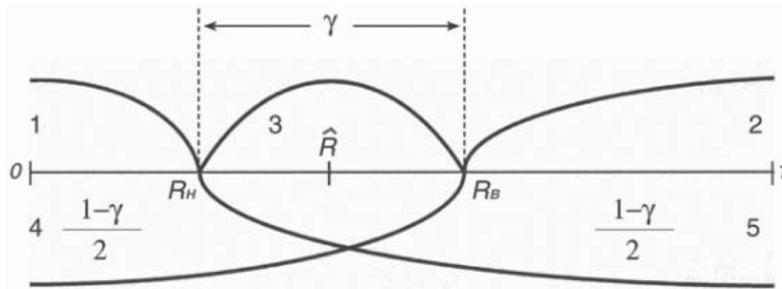


Рис. 4. Области экспериментальной оценки результатов выборочного контроля, допускаемые для различных гипотез.

$\gamma_2 = 1 - \gamma = 0,95$, что означает высокий риск поставщика воды. Для области 3, ограниченной с двух сторон, вероятность выполнения условия $R = R_{\text{зад}}$ есть $1 - (0,05 + 0,05) = 0,9$. Поэтому для области 4, в противовес найденному для области 1, $\gamma_1 = 0,9 + 0,05 = 0,95$, $\gamma_2 = 0,05$.

Итак, даже если истинная величина R значительно больше $R_{\text{зад}}$, все же с вероятностью $1 - \gamma_2 = 0,05$ она может достигать значения верхней доверительной границы R_B . Если это учитывается, то для доказательства того, что установленные требования почти наверняка выполняются, т.е. обеспечивается условие $R_H \geq R_{\text{зад}}$, в вышеприведенном примере потребуется уже большее число измерений, а именно при $R_H = R_{\text{зад}} = 0,9$:

1-й случай – $d=1, n=46$ (вместо 10), $\hat{R}_1 = 0,978$, $R_B = 0,99$,

$$R_{\text{ср}} = \frac{R_H + R_B}{2} = 0,95,$$

2-й случай – $d=5, n=100$ (вместо 50), $\hat{R}_2 = 0,95$, $R_B = 0,98$, $R_{\text{ср}} = 0,94$,

3-й случай – $d=10, n=150$ (вместо 100), $\hat{R}_3 = 0,933$, $R_B = 0,96$, $R_{\text{ср}} = 0,93$.

Как видно, в 1-м случае количество измерений приходится увеличивать почти в 5 раз, во втором – в 2, а в 3-м – только в полтора раза, т.е. чем меньше d , тем заметнее увеличение n (и тем больше \hat{R} вследствие измерительных ошибок).

Планы квалитетрии воды необходимо устанавливать для признания ее соответствия/несоответствия (пригодности/непригодности). Таковы планы:

1. при $R_H \geq R_{\text{зад}}$ принимают гипотезу $R > R_{\text{зад}}$, что означает признание пригодности,
2. при $R_B \leq R_{\text{зад}}$ принимают гипотезу $R < R_{\text{зад}}$, что означает признание непригодности,
3. при $R_H < R_{\text{зад}} < R_B$ принимают гипотезу $R = R_{\text{зад}}$ (если разброс $\Delta R = R_B - R_H$ допустим), либо продолжают измерения.

Для принятия решения «вода пригодна» было бы логично задавать не фиксированное значение $R_{\text{зад}}$, а некоторый допустимый

интервал значений этой величины. Если бы, например, в примере 1 на основании предварительных исследований было установлено не $R_{зад} = 0,9$, а интервал $0,85 \leq R_{зад} \leq 0,95$, то единственным условием признания пригодности был бы факт нахождения доверительного интервала ΔR внутри заданного: $0,85 \leq R_H \leq R_B \leq 0,95$. Для условий примера 1 это неравенство приближенно выполняется при $d=11$ и $n=120$ – значениях, для которых $R_H = 0,852$, $R_B = 0,948$, $\hat{R} = 0,908$, а риски поставщика воды и потребителя равны между собой: $\alpha = \beta = 0,05$.

При установлении только фиксированного значения $R_{зад}$ без указания доверительной вероятности, а также допустимых рисков α и β , как это принято в современной практике водных отношений, для проверки выполнения установленных требований можно рассматривать только гипотезу $R < R_{зад}$. Если она не подтверждается, то нет оснований для браковки, т.е. вода признается пригодной, хотя это заключение может быть ошибочным. Поэтому представляет интерес определение объема измерений в случае браковки непригодной для использования воды (план № 2). В рассмотренном примере 1:

1. если $d=1$, то ни при каких значениях n верхняя ($\gamma=0,9$) величина R_B не может быть меньше 0,9. Например, уже при $n=3$: $R_B = 0,983$, т.е. воду забраковать практически невозможно;
2. если $d=5$, то ситуация меняется. Так, при $n=20$: $R_B = 0,89$, а при $n=21$: $R_B = 0,901$;
3. если $d=10$, то при $n=55$: $R_B = 0,898$, а при $n=60$: $R_B = 0,906$.

Как видно, для признания пригодности воды по плану 1 требуется существенно больший объем измерений, чем для признания непригодности по плану 2. Поэтому процедура признания пригодности требует осторожности. Поставщик заинтересован настаивать на том, что если вода не бракуется, то это означает, что она пригодна, т.к. для него процедура браковки по плану 2 (при сравнительно малом n) наиболее привлекательна. Что же касается водопользователя, то ему следует рассчитать нижние доверительные границы оценки вероятности \hat{R} и приближенные средние значения

$$R_{cp} = R_H + \frac{\Delta R}{2}$$

рассматриваемой вероятности (без учета несимметричности доверительных интервалов):

1. $d = 1$: $R_H = 0,196$, $\hat{R} = 0,66$, $R_{cp} = 0,589$;
2. $d = 5$: $R_H = 0,563$, $\hat{R} = 0,76$, $R_{cp} = 0,732$;
3. $d = 10$: $R_H = 0,734$, $\hat{R} = 0,83$, $R_{cp} = 0,82$.

Здесь средние значения, как и следовало ожидать, примерно совпадают с нижними и верхними доверительными границами при $\gamma = 0,5$ (0,201; 0,734; 0,823), и значительно ниже средних величин, найденных ранее для приемочного контроля. Таким образом, квалиметрия воды по плану 2 вместо плана 1 сопровождается потерей части информации. Соответственно, и кажущееся очевидным правило «если нельзя утверждать, что вода непригодна, то она пригодна для использования» не эквивалентно правилу «если вода пригодна, то она не отвергается», которое более надежно свидетельствует о выполнении установленных требований.

Квалиметрия методом параметрического допускового интервала не требует сравнения каждого отдельного результата измерения с допуском. Вместо этого по совокупности результатов строится закон распределения измеряемого показателя и определяется вероятность выхода за допуск. Для анализа возникающих при этом суммарных ошибок целесообразно принять, что измеряемый показатель x подчиняется нормальному закону распределения вероятности с известными μ и σ^2 . Тогда вероятность R нахождения искомой характеристики в симметричном допуске $[x_B, x_H]$ определяется по разности интегральных функций с нулевым математическим ожиданием и единичной дисперсией:

$$\Phi\left(\frac{x_B - \mu}{\sigma}\right) - \Phi\left(\frac{x_H - \mu}{\sigma}\right) = \frac{1+R}{2} - \frac{1-R}{2} = R.$$

$$\text{При этом } \left| \mu \pm u_{1+R} \frac{\sigma}{2} \right| \leq x_{доп} \quad (1)$$

где $x_{доп}$ – любое допустимое значение x , так что

$$\frac{x_B - \mu}{\sigma} = -\frac{x_H - \mu}{\sigma} = \frac{x_{доп} - \mu}{\sigma}, \quad u_{1+R} -$$

– квантиль распределения.

Поскольку значения μ и σ^2 определяются по результатам x_i измерений, то вместо этих (истинных) характеристик имеем их оценки

$$\bar{\sigma} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x_i, \quad S^2 = \frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2, \quad (\text{рис. 5}),$$

распределение которых при увеличении n стремится к нормальному с параметрами:

$$\begin{aligned} \mu[\bar{x}] &= \mu; \quad \sigma^2[\bar{x}] = \frac{\sigma^2}{n}; \\ \mu[S^2] &= \sigma^2; \quad \sigma^2[S^2] = \frac{2\sigma^4}{n-1}. \end{aligned} \quad (2)$$

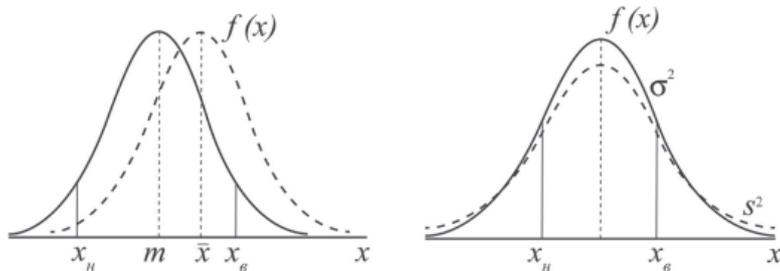


Рис. 5. Влияние на долю распределения R: отклония $(x - \mu)$ (слева) и S^2/σ^2 (справа).

Искомые характеристики с доверительной вероятностью γ лежат в интервалах с границами:

$$\bar{x} - t_{\frac{1+\gamma}{2}} \frac{S}{\sqrt{n}} \leq \mu \leq \bar{x} + t_{\frac{1+\gamma}{2}} \frac{S}{\sqrt{n}}$$

$$\text{и } \frac{S^2(n-1)}{\chi_{\frac{1+\gamma}{2}}^2} \leq \sigma^2 \leq \frac{S^2(n-1)}{\chi_{\frac{1-\gamma}{2}}^2},$$

где t , χ^2 – квантили распределения Стьюдента и Пирсона, соответственно.

Таким образом, с учетом отклония оценок \bar{x} и S^2 от μ и σ^2 , в допуске $[x_H, x_B]$ окажется уже не доля R, а некоторая оценка этой доли, для которой может быть построен собственный доверительный (толерантный³) интервал $\bar{x} \pm kS$. В нем доля распределения R находится с вероятностью γ :

$$P \left\{ \int_{\bar{x}-kS}^{\bar{x}+kS} f(x) dx \geq R \right\} = \gamma \quad (3)$$

где $f(x)$ – плотность распределения вероятности параметра x .

Для оценки k исследуем одну из границ толерантного интервала, например, $z = \bar{x} + kS$, также величины случайной. Из (2) следует, что распределение z асимптотически нормально с математическим ожиданием и дисперсией:

$$\mu[z] = \mu + k\sigma, \quad \sigma^2[z] = \sigma^2 \left[\frac{1}{n} + \frac{k^2}{2(n-1)} \right],$$

(приближение достаточно хорошее уже при $n \geq 5$). Поэтому доверительный интервал можно представить в виде:

$$\mu + \sigma \left[k - u_{\frac{1+\gamma}{2}} \sqrt{\frac{1}{n} + \frac{k^2}{2(n-1)}} \right] \leq$$

$$\leq \bar{x} + kS \leq \mu + \sigma \left[k + u_{\frac{1+\gamma}{2}} \sqrt{\frac{1}{n} + \frac{k^2}{2(n-1)}} \right]$$

³ В границах толерантного интервала, в отличие от интервала доверительного, содержится лишь заданная доля контролируемых показателей, соответствующих установленным требованиям

$$\text{Потребовав } u_{\frac{1+R}{2}} = k - u_{\frac{1+\gamma}{2}} \sqrt{\frac{1}{n} + \frac{k^2}{2(n-1)}}, \quad (4)$$

получим, что с доверительной вероятностью

$$\frac{1+\gamma}{2}$$

случайная величина $\bar{x} + kS \geq \mu + u_{\frac{1+R}{2}}$

отсекает площадь $\geq R$, т.е. выполняется условие (3). Это позволяет с приемлемым приближением рассчитать коэффициент

$$k = \frac{x_{\text{доп}} - \bar{x}}{S},$$

определяющий толерантный интервал и являющийся оценкой соответствующего квантиля стандартного нормального распределения $u_{\frac{1+R}{2}}$.

Здесь точность оценки характеризуется дисперсией

$$\frac{1}{n} + \frac{k^2}{2(n-1)},$$

а выражение (4) представляет собой нижнюю доверительную границу для приведенного квантиля $u_{\left(\frac{1+R}{2}\right)_x}$,

и, соответственно, для R.

Чем больше объем выборки, тем меньше дисперсия оценки и тем ближе k к оцениваемому квантилю. Так, например, при $n=50$, $\gamma=R=0,9$: $k=1,916$, а соответствующее значение квантиля $u_{\frac{1+R}{2}} = 1,645$.

При $n=100$ для тех же значений γ и R уже $k=1,822$, что ближе к значению $u_{\frac{1+R}{2}}$.

Из соотношения (4) легко получить два частных случая: μ известно, σ^2 оценивается или, наоборот, μ оценивается, σ^2 известно. В первом случае (4) сводится к виду

$$u_{\frac{1+R}{2}} = k \left(1 - u_{\frac{1+\gamma}{2}} \sqrt{\frac{1}{2(n-1)}} \right),$$

во втором – к виду

$$u_{\frac{1+R}{2}} = k - u_{\frac{1+\gamma}{2}} \sqrt{\frac{1}{n}}.$$

Как и следовало ожидать, в этих случаях разница между k и $u_{\frac{1+R}{2}}$ меньше.

Так, для тех же значений γ и R при $n = 50$ или 100 : $k = 1,895$ или $1,812$, соответственно, в случае известного μ . Если же известно σ^2 , то тогда в той же последовательности $k = 1,689$ или $1,667$. Таким образом, неизвестность дисперсии оказывает большее влияние на значение коэффициента k .

Метод непараметрического интервала используется, если плотность распределения $f(x)$ не известна. Указанный интервал может быть найден при замене пределов интегрирования на порядковые статистики $x_{(s)}, x_{(r)}$, где упорядоченные по возрастанию значений выборки в ранжированных совокупностях $x_{(min)} = x_{(1)} < x_{(2)} < \dots < x_{(r)} < \dots < x_{(s)} < \dots < x_{(n-1)} < x_{(n)} = x_{(max)}$.

В этом случае интеграл $\int_{x_{(r)}}^{x_{(s)}} f(x) dx$

не зависит от плотности вероятности $f(x)$. Выражение для непараметрического толерантного интервала можно переписать в виде:

$$P\{P(x_{(s)}) - P(x_{(r)}) \geq R\} = 1 - I_R(s-r, n-s+r+1), \quad (5)$$

где $I_R = \frac{n!}{(n-2)!} \int_0^R z^{n-2} (1-z) dz$ –

неполная бета-функция.

В общем случае (5) не выполняется точно. Однако r и s можно выбрать так, чтобы удовлетворить неравенству

$$P\{P(x_{(s)}) - P(x_{(r)}) \geq R\} \geq \gamma.$$

С этой целью для одностороннего толерантного интервала выбирается либо $r=0$, либо $s=n+1$, а для двухстороннего – $s=n-r+1$. Так, при выборе $r=1, s=n$ получим двухсторонний толерантный интервал

$$nR^{n-1} - (n-1)R^n = 1 - \gamma,$$

а при выборе $r=0, s=n$ – односторонний $R^n = 1 - \gamma$, где R – доля распределения, ограниченная в 1-м случае наименьшим и наибольшим, а во втором – наибольшим значением в выборке (ПДК). Нетрудно видеть, что последнее выражение совпадает с выражениями для нижней доверительной границы при оценке вероятности по частоте, полученными из уравнений Клоппера-Пирсона

$$\sum_{r=0}^d \frac{n!}{r!(n-r)!} R^{n-r} (1-R)^r = 1 - \gamma$$

при числе измерений, выходящих за пределы допуска $d=1$ (двусторонний интервал) или $d=0$ (односторонний интервал).

Совмещение порядковых статистик $x_{(s)}, x_{(r)}$ с границами допуска позволяет для расчета

непараметрического толерантного интервала использовать интегральный закон биномиального распределения, зависимость от n и d . Он содержит величину R в качестве параметра, поэтому здесь доверительный и толерантный интервалы совпадают.

В заключение раздела еще раз рассмотрим влияние объема выборки n на величину R . Пусть допуск рассчитан так, что $k=3$, т.е. в допуске при известных μ, σ^2 была бы заключена доля $R=0,997$ (уровень несоответствия $q=1-R=0,003$). Пусть также оценки \bar{x}, S^2 определены по $n=50$ измерениям. Тогда при $\gamma=0,95$:

$$\begin{aligned} u_{\frac{1+R}{2}} &= k - u_{\frac{1+\gamma}{2}} \sqrt{\frac{1}{n} + \frac{k^2}{2(n-1)}} = \\ &= 3 - 1,96 \sqrt{\frac{1}{50} + \frac{9}{2 \cdot 49}} = 2,34. \end{aligned}$$

При этом $R=0,98$. Следовательно, действительный уровень несоответствия составляет уже $q=0,02$, т.е. больше расчетного почти в 7 раз.

Данная ситуация может быть скомпенсирована корректировкой соотношения между значениями σ , обусловленными измерительной неопределенностью и изменчивостью контролируемого показателя. Поэтому σ измерения должно быть снижено в $3/2,34 \approx 1,3$ раза, что позволяет сохранить $R=0,997$ путем повышения точности измерений.

Таким образом, при квалиметрии воды необходимо оценивать односторонние толерантные интервалы:

- параметрический, для которого справедливо выражение

$$u_R = k - u_\gamma \sqrt{\frac{1}{n} + \frac{k^2}{2(n-1)}}$$

- непараметрический, для которого

$$\sum_{r=0}^d \frac{n!}{r!(n-r)!} R^{n-r} (1-R)^r = 1 - \gamma,$$

где R_H – нижняя доверительная граница доли распределения R , находящегося в заданном одностороннем допуске.

Пример 2. На рис. 6 приведены выполненные в 2000-2001 гг. результаты измерения содержания меди в воде системы питьевого водоснабжения госпиталя для инвалидов войн (г. Екатеринбург). Видно, что если бы измерения, результаты которых приведены на рис. 6 а, осуществлялись только в точках 10, 13, 14, 27, 37, 38, то исследователь сделал бы вывод об удовлетворительном качестве явно неудовлетворительной воды. Грубость такой оценки обусловлена недоучетом неточности

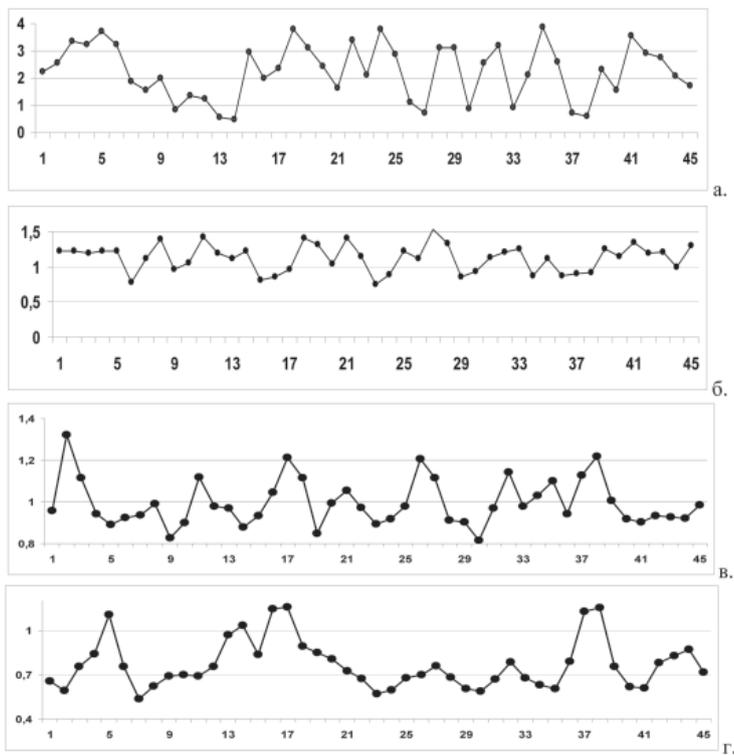


Рис. 6. Концентрация меди (ед. ПДК) в воде исходной (а) и очищенной путем сорбции (б), электрохимической обработки (в) и обратного осмоса (г). Измерения 2001-2002 гг.

ошибки выборки. Поэтому, хотя и можно предположить, что качество воды на рис. 6 а, скорее всего, не удовлетворяет установленным требованиям, а на рис. 6 г – удовлетворяет, в других случаях однозначные выводы делать затруднительно. Требуется, используя предложенные методы квалиметрии и данные рис. 6, а также результаты дополнительной доочистки воды при $n=45$, $d=3$,

Таблица 1

Результаты квалиметрии воды, в том числе с учетом (+n) и без учета (-n) объема выборки

Обозначение на рис. 6	n - d	\hat{R}	\bar{x}	S	k	u_R		R		R_p
						+n	-n	+n	-n	
a	9	0,2	2,476	1,314	$\frac{1-2,476}{1,314} = -1,123$	-1,366	-1,123	0,09	0,13	0,11
б	16	0,35	1,12	0,19	$\frac{1-1,12}{0,19} = -0,63$	-0,83	-0,63	0,21	0,27	0,24
в	31	0,69	0,99	0,11	$\frac{1-0,99}{0,11} = -0,1$	-0,1	0,1	0,46	0,54	0,57
г	39	0,87	0,76	0,29	$\frac{1-0,76}{0,29} = -0,82$	0,6	0,82	0,72	0,79	0,77
д	42	0,93	0,688	0,235	$\frac{1-0,688}{0,235} = -1,37$	1,1 1,37	1,37	0,86	0,91	0,86

$\hat{R}=0,93$, $\bar{x}=0,688$, $S=0,235$, проанализировать качество воды. Принять $\gamma=0,9$.

Решение. Определяем количество положительных результатов измерений n-d (столбец 2 табл. 1). Далее относим их к числу измерений $n=45$, что позволяет получить вероятность \hat{R} обнаружения воды, соответствующей требованиям по содержанию меди (столбец 3). После этого оцениваем выборочные средние и стандартные отклонения (\bar{x} , S), а также коэффициент при $x_{доп}=1$ ($k=1-x/S$) и квантиль u_R . Далее при установленной $\gamma=0,9$ находим величины R и R_H (табл. 1). Как видно из сравнения столбцов «+n» и «-n», отказ от учета измерительных ошибок при оценке параметрического толерантного интервала (R), а также переход к простому определению частоты попаданий в допуск при оценке непараметрического интервала (R_H) снижают гарантию правильного контроля, причем ошибка тем вероятнее, чем ниже качество воды. Видно также, что при учете n: $R \leq R_H$. Это естественно объясняется тем, что непараметрический толерантный интервал учитывает только факт выхода за допуски, параметрический же позволяет установить, как далеко отстоят результаты от допустимой границы.

Рис. 7 иллюстрирует влияние разброса измеряемого параметра на долю распределения R значений, не превышающих ПДК. При $\mu > \text{ПДК}$ (рис. 7, слева, примеры на рис. 6 а, б) уменьшение дисперсии приводит к уменьшению этой доли, поэтому повышение точности измерений не улучшает результат. Таким образом, условие $\mu > \text{ПДК}$ является условием признания непригодности воды. Условие

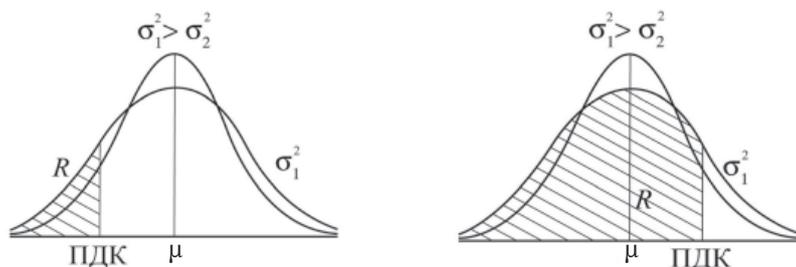


Рис. 7. Влияние дисперсии на величину R.

Таблица 2

Электросопротивление воды, кОм • 10м

Разновидность стали	Не менее:				
	1 класс	2 класс	3 класс	4 класс	5 класс
Грунтовая	32	28	23	18	Не ограничивается
Безгрунтовая	28	25	22	18	Не ограничивается

≈ПДК (пример на рис 6 в) означает приблизительно равные доли распределений параметра, больших и меньших ПДК. И, наконец, условие $\mu < \text{ПДК}$ (рис. 7, справа, пример – на рис. 6 г) не позволяет признать непригодность, причем уменьшение дисперсии приводит к увеличению R. Поэтому если не устраивает риск 1- R, следует повысить точность измерений.

Поскольку по действующим СанПиН [12] любое превышение ПДК является одинаково нежелательным, целесообразно использовать непараметрический толерантный интервал, обеспечивающий в ряде случаев более низкие оценки риска. Такую же рекомендацию можно дать, если основной объем результатов измерений ниже ПДК, однако дисперсия значительна. Это видно в случае 6 д (табл. 1), где оценка вероятности по частоте совпадает с параметрической оценкой, благодаря чему может быть осуществлена относительно просто, без требования об условии нормальности распределения параметра.

Пример 3. Потребительские свойства электротехнической стали зависят от класса деионизированной воды, используемой в составе суспензий для термозащитных покрытий металла. Стандарт организации предусматривает оценку этого класса путем однократного измерения электрического сопротивления воды с погрешностью $\pm 2\%$ во всем диапазоне значений. Требуется:

1. оценить корректность классификации качества воды в стандарте (табл. 2);
2. охарактеризовать достоверность оценки класса качества воды;
3. рекомендовать методику повышения достоверности этой классификации.

Решение.

1. Из рис. 8, иллюстрирующего табл. 2, видно, что качество воды на участках между классами 2 и 3, а также между 3 и 4 с учетом принятой погрешности измерений неопределенны. При этом действующие правила не содержат указание на вероятность нахождения в допуске или на ограничения в нормируемых участках классов качества. Непрерывная аппроксимация снижения электросопротивления, как функции потери качества (нелинейная по Тагути [7] или линейная) позволила бы судить более обоснованно.

2. Делать корректные выводы о достоверности оценки класса качества воды без информации о распределении вероятностей значений контролируемых показателей не представляется возможным. Однако, если результат измерения совпадает с номинальным для данного класса значением, а абсолютная погрешность соответствует 3σ , то вероятность α отнести воду ко 2-му классу, если в действительности она принадлежит 1-му классу (ошибка 1-го рода – риск участка водоподготовки) составляет 0,0015. Такова же вероятность β отнести воду к 1-му классу, если она принадлежит ко 2-му (ошибка 2-го рода – риск цеха подготовки стали). Если же результат измерения близок к границе допуска или совпадает с ней, то риски повышаются до уровня $\alpha = \beta = 0,5$.

3. Достоверность принимаемых решений можно существенно повысить проведением многократных измерений ($n > 1$). Тогда в качестве результата принимается средняя оценка математического ожидания

$$\bar{x} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \mu_i \text{ с дисперсией } \sigma^2/n.$$

Задача классификации в этом случае ставится как задача проверки статистической гипотезы о равенстве математического ожидания μ нормативному значению этой величины (ПДК).

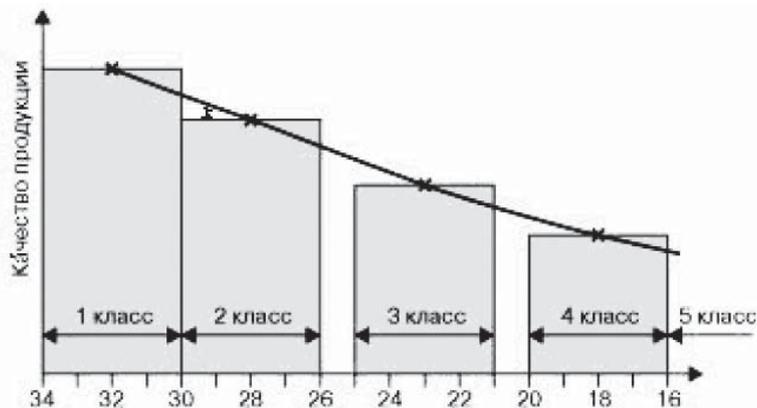


Рис. 8. Классы воды в зависимости от ее электросопротивления.

При этом нулевая гипотеза ($\mu_0 = \text{ПДК}$) принимается в области

$$\bar{x} \geq \text{ПДК} - u_{1-\alpha} \frac{\sigma}{\sqrt{n}}$$

а альтернативная гипотеза $\mu_1 = \text{ПДК} - \Delta$ – в области

$$\bar{x} \leq \text{ПДК} - \Delta + u_{1-\beta} \frac{\sigma}{\sqrt{n}} \quad (\text{рис. 9}),$$

где $u_{1-\alpha}$, $u_{1-\beta}$ – квантили стандартного распределения. Для граничной точки A в случае нулевой гипотезы имеем

$$\frac{\bar{x} - \mu_N}{\sigma / \sqrt{n}} = u_{1-\alpha} = -u_{1-\alpha}$$

а в случае альтернативной гипотезы –

$$\frac{\bar{x} - \text{ПДК} + \Delta}{\sigma / \sqrt{n}} = u_{1-\beta}$$

Отсюда
$$\frac{\Delta}{\sigma} = \frac{u_{1-\alpha} + u_{1-\beta}}{\sqrt{n}}.$$

К сожалению, вероятные характеристики разброса неизвестны и подлежат оцениванию по выборке. Для суммарной дисперсии σ^2_{Σ} в этом случае будет оценка

$$S^2_{\Sigma} = \frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2,$$

а решающее правило классификации несколько усложняется:

$$\frac{\bar{x} - \text{ПДК}}{\sigma_{\Sigma} / \sqrt{n}} = t_{1-\alpha}(n-1); \quad \frac{\bar{x} - \text{ПДК} + \Delta}{S_{\Sigma} / \sqrt{n}} = t^*_{1-\beta}(n-1, \frac{\Delta}{\sigma_{\Sigma}} \sqrt{n}),$$

где $t_{1-\alpha}$ – квантиль распределения Стьюдента с параметром $(n-1)$; $t^*_{1-\beta}$ – квантиль нецентрального t -распределения с параметром нецентральности

$$\frac{\Delta}{\sigma_{\Sigma}} \sqrt{n}.$$

Используя нормальную аппроксимацию нецентрального t -распределения ($n \geq 10$), получим

$$\frac{\Delta}{\sigma_{\Sigma}} = \frac{t_{1-\alpha} + u_{1-\beta} \sqrt{1 + \frac{1}{2} \frac{t_{1-\alpha}^2}{n-1}}}{\sqrt{n}}.$$

Ключевые слова:

квалиметрия воды, функция потерь качества, статистическая гипотеза, толерантный интервал

По оценкам лаборатории $\Delta = 4 \text{ кОм} \cdot 10 \text{ м}$. Если принять эту величину и считать, что σ определяется только неточностью измерений, т.е. если $3\sigma = 2$, $\sigma = 2/3$, $\alpha = \beta$, то тогда $\Delta/\sigma = 6$. В этом случае отличить нулевую гипотезу от альтернативной можно, даже если $n=1$. При этом $\alpha = \beta = 0,0015$ и результат измерения совпадает со средним значением для каждого класса воды.

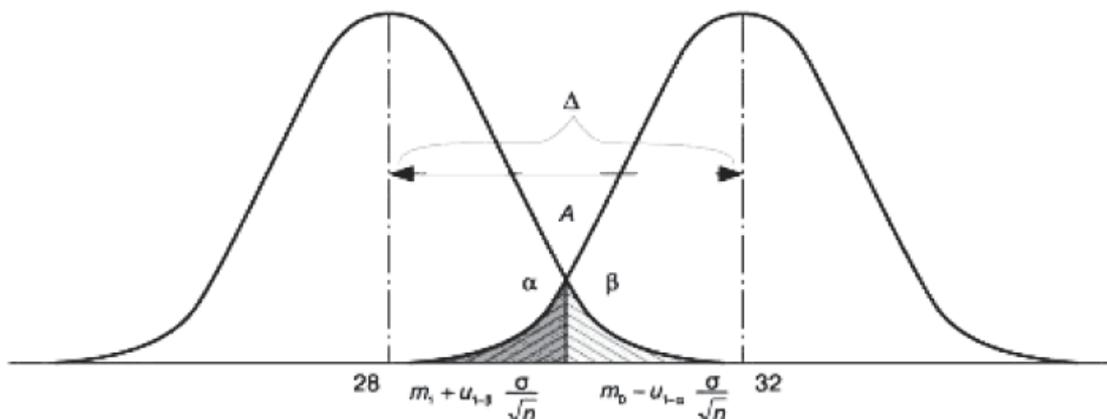
В общем случае суммарная дисперсия должна быть больше, чем дисперсия, связанная с неточностью измеренных значений. Пусть, например, дисперсия разброса в 2 раза больше дисперсии результатов измерений, т.е. $\sigma^2_{\Sigma} = 2\sigma^2 + \sigma^2 = 3\sigma^2$. Тогда при $n=1$ различимое расстояние между классами составит уже $\Delta = 4 \sqrt{3}$ принятых единиц, а для различения $\Delta = 4$ тех же единиц нужно будет провести, по крайней мере, $n=3$ измерения или допустить увеличение ошибок $\alpha = \beta \approx 0,05$. Если же известна не дисперсия, а ее оценка, число измерений возрастает до $n=6$ или ошибки составят $\alpha = \beta \approx 0,1$.

Ниже показано, что удовлетворительным является режим измерений, при котором дисперсия измерительной погрешности на порядок меньше дисперсии разброса контролируемых показателей. В этом случае $\sigma^2_{\Sigma} = 10\sigma^2 + \sigma^2 = 11\sigma^2$ и ошибки возрастут до значения $\alpha = \beta \approx 0,2$, или, с учетом погрешности оценки σ^2_{Σ} , составят уже $\alpha = \beta \approx 0,4$.

Эффективность квалиметрии воды определяется отношением истинного и «кажущегося» (вследствие неточности измерений) соответствия/несоответствия качества воды установленным требованиям, и зависит от вероятностей:

- P_1 – правильного признания выполнения установленных требований,
- P_2 – ложного признания нарушения установленных требований,
- P_3 – ложного признания выполнения установленных требований,

Рис. 9. Области принятия нулевой и альтернативной гипотез.



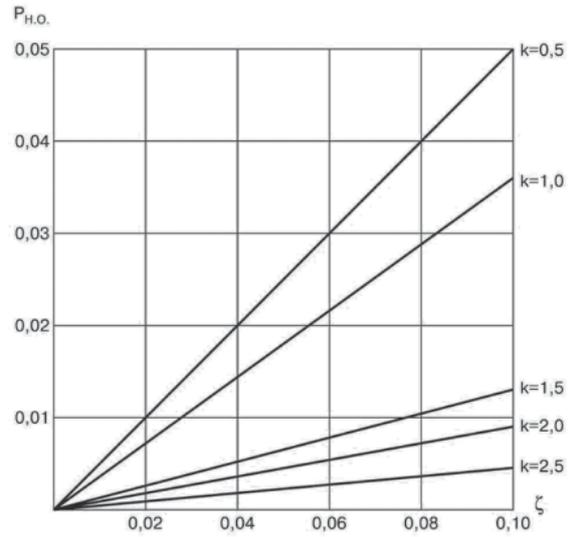
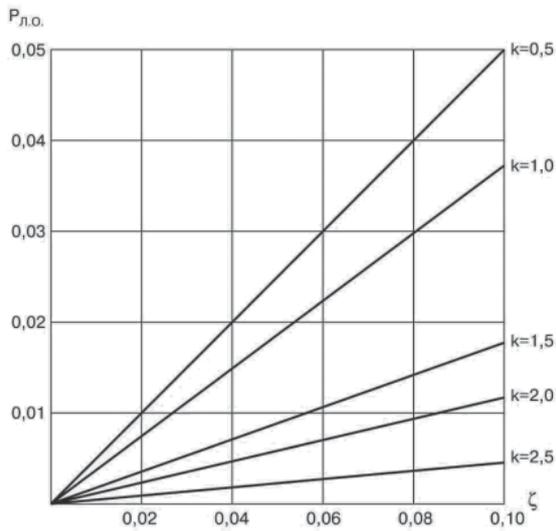


Рис. 10. Зависимости P_2 (слева) и P_3 от k и $\zeta = \sigma_0/\sigma$.

P_4 – правильного признания нарушения требований.

Введенные вероятности функционально связаны между собой через совместную плотность распределения вероятностей фактического и кажущегося рассеяния показателей с дисперсиями σ и S , соответственно. В литературе по допусковому контролю [6] приводятся номограммы, облегчающие расчеты. Пример таких номограмм для нормального распределения случайных величин приведён на рис. 10, где величина $k = (x_B - \mu) / \sigma = (\mu - x_H) / \sigma$ табулирована при заданных значениях риска $P_3 + P_4$ и имеет смысл индекса воспроизводимости.

Эффективность квалиметрии воды оценим из соотношения рисков ошибок, возникающих при использовании или без использования описанных методов квалиметрического оценивания. В первом случае риски зависят от суммарной вероятности неправильных решений, возникающих вследствие ошибок выборки и погрешности измерений и составляют $\Pi_2 \beta (1 - R_0) + \Pi_1 \alpha R_0$, где $R_0 = P_1 + P_2$, Π_1 и Π_2 – характеристики потерь вследствие ложных оценок. Во втором случае потери равны $\Pi_2 (1 - R_0)$, поскольку $\alpha = 0$, $\beta = 1$ (в отсутствие квалиметрии нарушения не обнаруживаются). Таким образом, искомый коэффициент определяется соотношением:

$$E = \frac{\Pi_2 (1 - R_0)}{\Pi_2 \beta (1 - R_0) + \Pi_1 \alpha R_0} = \frac{1}{\beta + \frac{\Pi_1 R_0}{\Pi_2 (1 - R_0)} \alpha}$$

Необходимым условием, без выполнения которого квалиметрия бесполезна, является неравенство $E > 1$. Отсюда вытекает требование

к рациональному соотношению ошибок первого и второго рода:

$$\frac{\Pi_1 R_0}{\Pi_2 (1 - R_0)} < \frac{1 - \beta}{\alpha}$$

При этом достаточным условием, при выполнении которого целесообразность квалиметрии гарантирована, является обеспечение требуемого значения коэффициента эффективности E_{TP} из неравенства

$$\frac{\Pi_1 R_0}{\Pi_2 (1 - R_0)} < \frac{1 - \beta}{E_{TP} \alpha}$$

и полезных частных условий

$$\frac{\Pi_1 R_0}{\Pi_2 (1 - R_0)} < \frac{1}{E_{TP} \alpha}, \quad \beta < \frac{1}{E_{TP}}$$

Когда нет информации о соотношении потерь, они принимаются равными между собой: $\Pi_1 = \Pi_2$. Тогда при $\alpha = \beta$ необходимое и достаточное условия соответственно имеют вид:

$$\alpha < 1 - R_0; \quad \alpha < \frac{1 - R_0}{E_{TP}}$$

Предложенная модель позволяет по заданному значению R_0 сначала оценить величины α , β , P_2 , P_3 , а затем и искомое значение ζ . Например, в предельном случае при $E = 1$ для $R_0 = 0,9$ требуется выполнение неравенства $\alpha \leq 0,1$. Тогда $P_2 = \alpha R_0 \leq 0,09$; $P_3 = \beta (1 - R_0) \leq 0,01$. С учетом $k = 1,64$ из номограммы рис. 10 для P_3 получаем $\zeta \approx 0,1$.

Погрешность квалиметрии воды с учетом неточности измерений зависит от количества исследованных проб n следующим образом:

$$\frac{x_{\max} - x_{\min}}{\sigma_\Sigma} = \frac{u_{1-\alpha/2} - u_\beta}{\sqrt{n}}$$

где $\sigma_\Sigma = \sqrt{\sigma^2 + S^2}$, $u_{1-\alpha/2}$, u_β – как и ранее, квантили нормального распределения. Из этого соотношения можно определить влия-

ние неточности измерений на риски ошибочных заключений. Например, значение $\zeta = S/\sigma = 0,1$, соответствующее увеличению σ_S по сравнению с σ на 0,5 %, эквивалентно увеличению объема выборки n на 0,1 % или уменьшению одностороннего квантиля $u_{1-\alpha}$ с 1,282 до 1,275 при $\alpha = \beta = 0,1$. Это соответствует увеличению ошибок первого и второго рода на 0,2 %.

С другой стороны, варьируя значения ошибок α и β , можно подобрать удовлетворительную точность измерений. Например, если допустимое увеличение ошибок первого и второго рода составляет 1 % против приведенного выше, т.е. $\alpha = \beta = 0,11$, то $\zeta \approx 0,3$. В целом, варьируя значениями ошибок α и β можно подобрать удовлетворительную точность измерения. Так, принимая $\zeta \sim 1$ и используя в этом случае приведенные номограммы с пропорциональным изменением на них масштаба осей абсцисс и ординат, получим повышенные значения P_2 и P_3 . Например, для $k = 2$ это будет уже не 1 %, как выше, а ~ 10 %. Соответственно, P_2 и P_3 образуют в сумме полный объем неверной оценки соответствия, равный 20 %, что согласуется с данными Минприроды России об объемах сверхнормативных сбросов металлургических заводов (на уровне 23 %).

Из номограмм *рис. 6* видно также, что достаточно низкие значения вероятностей P_2 и P_3 , составляющие, например, при равенстве допустимого и доверительного интервалов ($k = 0,5$) ~ 5 % достигаются при $S \approx 0,1\sigma$. Именно это соотношение и следует использовать при установлении периодичности количественного контроля качества воды.

Оценим вероятность арбитражных ситуаций, возникающих при различии результатов измерений, выполненных на идентичных пробах воды разными лабораториями, например, органов производственного и государственного контроля. Сделать это в общем случае без знания функции распределения контролируемых показателей не удастся. Однако для приближенной оценки достаточно ограничиться рассмотрением

нескольких предельных случаев для нормально распределенных величин. Если, например, средняя концентрация равна ПДК (*рис. 11 а*), то вероятность признания воды соответствующей установленному требованию при допустимой погрешности $\pm\Delta = \pm 3\sigma$, есть 0,9985 (заштрихованная площадь), а вероятность несоответствия – только 0,0015. Если же эта концентрация больше ПДК на величину Δ (*рис. 11 б*), то последние вероятности равны и составляют 0,5, а если меньше (*рис. 11 в*) – 1 и 0.

Таким образом, в случае, проиллюстрированном на *рис. 11 в*, соответствие воды установленному требованию будет признано с высокой вероятностью 0,9985. Несоответствие будет признано в случае *рис. 11 б* с той же вероятностью, а в случае *рис. 11 а* – с вероятностью $\sim 0,5$. Следовательно, вероятность арбитражных ситуаций в случаях *11б* и *11в* маловероятна (не превышает $0,9985 \cdot 0,0015$), а в случае *11а* – $0,5 \cdot 0,5 = 0,25$.

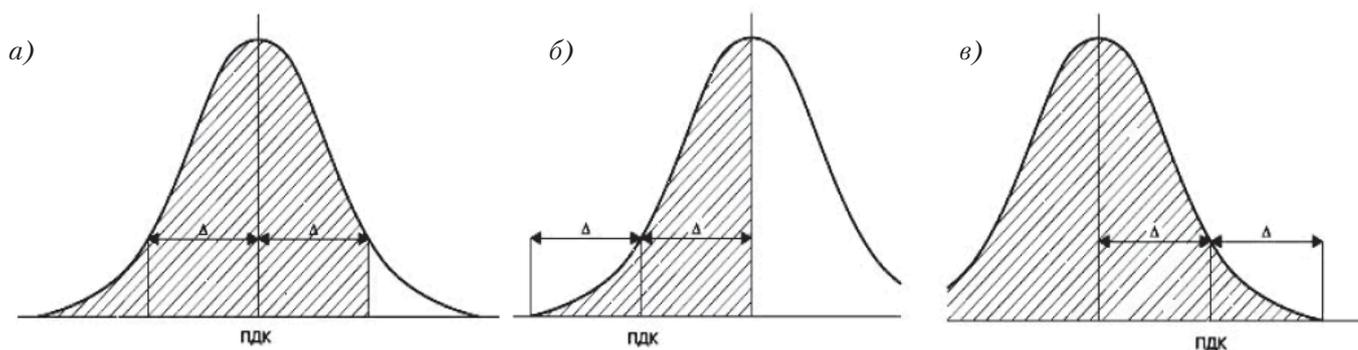
Установить, как часто наступают подобные ситуации, можно путем использования упрощенных методов. Например, заменой непрерывного распределения дискретным, состоящим из трех точек

$$\mu, \mu + \sqrt{\frac{3}{2}} \sigma, \mu - \sqrt{\frac{3}{2}} \sigma \quad [13],$$

где μ – математическое ожидание результата измерений – случайной величины, подчиняющейся нормальному закону распределения с массами, равными 1/3. При этом показатель эксцесса для дискретного распределения 1,5, а для нормального – 3, причем, три первых момента обоих распределений, а также вероятности возникновения каждого из трех рассмотренных случаев (*рис. 11*) совпадают. Поэтому вероятность возникновения спорной ситуации в среднем

$$\frac{0,0015 + 0,0015 + 0,25}{3} \approx 0,08,$$

Рис. 11. Нормальное распределение плотности вероятности переменного показателя и установленное для него одностороннее поле допуска (заштриховано).



т.е. почти 10 %. Это – значимый результат, показывающий минимальную частоту водных споров при встраивании водопользования в корректные рыночные отношения⁴ и важность использования адекватных проблеме методов квалиметрии. Тем более, если в условиях надвигающегося глобального «водного голода» [1] доочистка сырых, сточных и других вод будет наиболее жестко ограничиваться допустимым уровнем (ПДК), при котором вероятность арбитражных ситуаций повысится до 25 % (случай 11 а).

Заключение

Развитие рыночных отношений, необходимость инноваций и переход к новым доступным технологиям при одновременном ужесточении правил водопользования, а также быстрое повышение цены пресной воды принципиально меняют условия производства водоемкой продукции. Увеличивающаяся стоимость водозабора и отведения сточных вод вынуждает предприятия минимизировать эти виды деятельности и максимально полно реализовать полученные разрешения так, чтобы контролируемые показатели пользования природными водными ресурсами сближались с нормативно допустимыми. К сожалению, при этом, как нетрудно показать [2], настолько увеличивается потеря достоверности результатов измерений, что вероятности оценки качества воды по альтернативному признаку (соответствия или несоответствия установленным требованиям) выравниваются, а надежность принимаемых водохозяйственных и арбитражных решений падает. Рассмотренные в данной работе методы позволяют оптимизировать указанные потери по критерию «минимум измерений – максимум достоверности» и обеспечить водопользователей доказательными материалами для конструктивного взаимодействия с поставщиками и органами государственного водного контроля (надзора), а также продемонстрировать собственную водно-экологическую ответственность. Тем самым может быть достигнут режим устойчивого водопользования на основе квалиметрии воды, т.е. системной диагностики ее качества, предполагающей, как показано выше, учет указанных факторов.

1. Бюджет неопределенности информации о качестве воды формируется в целом за счет вариабельности контролируемых показате-

лей, погрешности их измерения и ошибок выборки. Каждая из этих составляющих в разных случаях может быть либо преобладающей, либо малозначительной, либо соизмеримой с остальными, но все они в сумме приводят к определенной потере достоверности результатов лабораторных измерений и риску принятия ошибочных водохозяйственных управленческих решений. Условием снижения этого риска является использование методов квалиметрии воды с оценкой вероятности попадания показателей ее качества в допустимый интервал при приемлемой доверительной вероятности. Выбор метода зависит от поставленной задачи:

- ♦ для установления факта выхода контролируемых показателей за границы допуска, достаточно исследования непараметрического интервала, особенно если любое превышение ПДК одинаково нежелательно,

- ♦ в случаях, когда по условиям водопользования требуется определить, насколько далеко отстоят контролируемые показатели от допустимых границ, необходимы параметрические оценки.

2. Диагностика показателей качества воды эффективна, если периодичность и метрологическая погрешность измерений подобраны таким образом, чтобы разброс результатов исследования, обусловленный их неточностью, был на порядок меньше разброса исследуемых показателей, обусловленного их изменчивостью. Тогда риски водопотребителя и поставщика достаточно малы, и, например, в случае равенства допустимого и доверительного интервалов составляют всего ~0,05. При этом неприемлемо правило «Точность никогда не бывает лишней». Избыточная точность может быть разорительной, однако, неточность губительна для водного фонда в условиях развития водоемких технологий и глобализации водопользования.

3. Минимальная частота водных споров в корректных рыночных отношениях водопользования составляет 10 %. Это указывает на значимость адекватных проблеме методов квалиметрии воды с целью разрешения арбитражных ситуаций, число которых может достигать 25 % по мере встраивания водохозяйственных услуг в рыночные отношения. Актуальность задачи повышается, если:

- ♦ регламентируется содержание наиболее опасных веществ, содержание которых жестко ограничено, а измерительные погрешности, соответственно, повышены,

- ♦ рыночные отношения диктуют поставщику необходимость экономии и ограничения водоподготовки установленным уровнем

⁴ Спорные ситуации могут возникать и чаще, например, вследствие систематических погрешностей измерений

(ПДК), а потребитель требует гарантий выполнения этого требования.

4. Правило «если нельзя утверждать, что вода непригодна, то она пригодна для использования» только на первый взгляд кажется справедливым, и не эквивалентно правилу «если вода пригодна, то она не отвергается». Процедура признания пригодности воды для использования требует осторожности, поскольку:

- поставщик воды заинтересован настаивать на первом правиле, требующем меньшего числа измерений,

- потребитель – на втором правиле, требующем больших усилий, но и более надежно свидетельствующем о выполнении установленных требований.

Литература

1. Данилов-Данильян В.И. Вода – стратегический фактор развития экономики России // Вестник Российской академии наук. 2007. Т. 77. № 2. С. 108-114.

2. Розенталь О.М. Оценка соответствия качества вод установленным требованиям. / О.М. Розенталь, А.И. Авербух // Вода: химия и экология. 2010. № 11. С. 47-52.

3. David Walker, Accuracy and precision in sampling water (Тщательность и точность в осуществлении отбора проб воды) // ISO Focus. 2006. № 6. P. 21-24.

4. Статистическое управление процессами: Оптимизация бизнеса с использованием кон-

трольных карт Шухарта / Д. Уилер, Д. Чамберс. М.: Альпина Бизнес Букс. 2009. 409 с.

5. Azgaldov G.G., Kostin A.V. Applied Quality: Its Origins, Errors and Misconceptions // Benchmarking: An International Journal. 2011. Vol. 18. №3, P. 428–444

6. Теоретические основы испытаний и экспериментальная отработка сложных технических систем / Л.Н. Александровская, В.И. Круглов, А.Г. Кузнецов и др. М.: Логос. 2003. 736 с.

7. Sullivan, L. P. Reducing Variability: A New Approach to Quality. Quality Progress. 1984. 17, pp. 15-21.

8. Taguchi G. Quality engineering in Japan // Commun. Statist. Theor. Mech., 1985. V. 14. № 11. P. 2785-2801.

9. Водоподготовка: Справочник. /Под ред. С.Е. Беликова. М.: Изд. Аква-Терм, 2007. 240 с.

10. СанПиН 2.1.4.1116-02. Питьевая вода. Гигиенические требования к качеству воды, расфасованной в емкости. Контроль качества.

11. Руководство по качеству питьевой воды. 2004. Изд. 3. Т. 1. Рекомендации. ВОЗ: Женева

12. СанПиН 2.1.4.1074-01 «Питьевая вода и водоснабжение населенных мест питьевая вода. Гигиенические требования к качеству воды централизованных систем питьевого водоснабжения. Контроль качества».

13. Ефимов В.В., Исаев Ю.В. Идеи Г. Тагути в системе допусков. В сб. «Все о качестве», вып 14, М.: Изд. НТК «Трек», 2006. с. 2-57.



O. M. Rosenthal

QUALIMETRY METHODS FOR LABORATORY RESULTS ANALYSIS

Spread in quantitative characteristics of water quality often exceeds their average value, with measurement error being comparable with the scatter, and the error caused by insufficient sample size being comparable with accuracy. Under these circumstances, interpretation of the results of laboratory research requires the use of such methods as qualimetry, which include interval nonparametric and parametric estimation based on the mathematical tool of the theory of tolerance intervals. Method for probability estimation of controlled parameters exceedance for water risk assessment has been developed. The method has been tested in order to fix an acceptable level of risk, and to establish trust-based business relations on water service market. Recommendations to limit the uncertainty of the results of water quality assessment management have been made.

Key words: water qualimetry, loss of quality, statistical hypothesis, tolerance interval

