

A mérési bizonytalanság vegyész szemmel (+ 1 kiáltvány)

A Műszeroldal hírlevelének 2006. évi 8. számában, a metrológia rovatban, egy – a Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem Természettudományi Kara Fizikai Intézetének címén elérhető – metrológiával foglalkozó, feltehetően egyetemi jegyzetre mutató hivatkozás jelent meg. A jegyzet, a weblapon található adatok alapján, 2005. évben került jelen helyén publikálásra, és részletesen bemutatja a hagyományos metrológiai alapfogalmakat, valamint a mérési bizonytalanság értékelésének statisztikai alapjait. Ennek apropóján szeretnék felidézni néhány jól ismert tant, valamint megosztani egy-két személyesebb gondolatot a tisztelt olvasóközönséggel. (Aki járatos a mérési bizonytalanság témakörében, az első fejezetet rögtön át is ugorhatja.)

1. A mérési bizonytalanság

A „tudomány jelenlegi állása” szerint, a mérési bizonytalanság hagyományos elméletében található néhány nem eléggé egyértelmű fogalom, melynek következtében a XX. század második felében ezen elmélet logikája megkérdőjeleződött:

- A hagyományos elmélet alapvetően épít a *valódi érték* fogalmára, és ebből vezeti le a mérés bizonytalanságát jellemző hibákat, a *véletlen hibát* és a *rendszeres hibát*. A *valódi érték* azonban egy mérési eljárás során nem ismert, mivel a mérés célja éppen a mérendő jellemző értékének meghatározása. Amennyiben a *valódi érték* nem ismert, úgy a *rendszeres hiba*, mint a *valódi érték* és a mérési eredmények átlagának különbsége sem állapítható meg.
- A mérési eredmények megadása során, a bizonytalanság jellemzésére a konfidencia intervallumot használtuk (használjuk). Ennek számítása során feltételezzük, hogy a mérési eredményeink (vagy a belőlük képzett átlagok) közelítőleg a normális eloszlást követik. A normalitás gyakorlati bizonyítása az elterjedten alkalmazott konfidenciaszintekre (95-99%) meglehetősen munkaigényes lehet egy-egy mérési eljárás jellemzése során. (Továbbá magában hordozza annak kockázatát, hogy kiderül, nem is normális eloszlást követnek a mérési eredményeink...)
- A konfidencia intervallummal jellemzett bizonytalanság további számításokhoz történő felhasználása problémás lehet. Ha például két különálló mérés eredményének (tömegmérés, koncentráció mérése) szorzataként kapjuk meg a végeredményt (a mért komponens mennyisége az anyagban), a szorzat bizonytalansága nehezen értelmezhető csupán a bemenő mennyiségek konfidencia intervallumainak ismerete esetében. A legelterjedtebben alkalmazott statisztikai próbák elvégzéséhez is a szórás ismerete szükséges, azaz a konfidencia intervallumokkal megadott eredmények bizonytalansága nehezen összemérhető, amíg a számítás során alkalmazott paramétereket (konfidenciaszint, szabadsági fokok száma) nem közöljük a mérési eredmények mellé.
- Egy adott mérés pontosságát (bizonytalanságát) a mérőműszeren kívül még rengeteg tényező befolyásolhatja, a mérési eljárás pontatlan definíciójától a környezeti paraméterekig.

Többek között a fenti felismerések vezettek arra, hogy a méréssel foglalkozó legfajszúlyosabb nemzetközi szervezetek közös munkacsoportot alakítottak a mérési bizonytalanság kérdéskörének vizsgálatára. A munka eredménye az 1993-ban kiadott „Guide to the Expression of Uncertainty in Measurements” („Útmutató a mérési bizonytalanság kifejezéséhez”) című karcsú egyoldalas ajánlás, és a hozzá kapcsolódó jóval terjedelmesebb értelmezés. Az Útmutatót jegyző szervezetek a következők:

- BIPM (International Bureau of Weights and Measures)
- IEC (International Electrotechnical Commission)
- IFCC (International Federation of Clinical Chemistry)
- ISO (International Organization for Standardization)
- IUPAC (International Union of Pure and Applied Chemistry)
- IUPAP (International Union of Pure and Applied Physics)
- OIML (International Organization of Legal Metrology)

Az útmutató ajánlása alapján:

- A *rendszeres hiba* vagy *rendszeres bizonytalanság* kifejezés kerülendő (a mérési módszerek ismert torzításait ki kell küszöbölni, vagy korrekcióba kell venni).
- A mérési bizonytalanság statisztikai módszerekkel becsülhető összetevőit („A” kategória) becslt varianciákkal, vagy korrigált tapasztalati szórással kell jellemezni. A statisztikai módszerekkel nem becsülhető („B” kategória) összetevőket is olyan mennyiségekkel kell jellemezni, amelyek a későbbiekben varianciaként kezelhetők.
- A bizonytalanság összetevőit a szokásos módszer szerint kombinálva kapjuk meg a mérés eredő bizonytalanságát. A bizonytalanságot korrigált empirikus szórások (**standard bizonytalanság**) formájában kell kifejezni.
- Amennyiben minden mérés illetve paraméter bizonytalanságát szórás jellegű értékkel jellemezzük, akkor a mérési eredmények könnyen összehasonlíthatók, egy mérés eredménye további matematikai megfontolások nélkül alkalmazható további mérések vagy számítások bemeneti paramétereként.
- A mérési eredmények megadásakor vagy a standard bizonytalanságot, vagy szükség esetén annak egy alkalmasan megválasztott **kiterjesztési tényező**vel megszorított értékét, a **kiterjesztett mérési bizonytalanságot** kell közölni (utóbbi esetben az alkalmazott kiterjesztési tényező értékét is közölni kell).

Észre kell vennünk, hogy a bizonytalanság egy „műveleti” definíciót kapott, amely minden esetben értelmezhető, függetlenül a mérési módszertől, a bemenő paraméterek minőségétől, valamint az eredmények (feltételezett, várható, vagy mért) eloszlásától. Az Útmutató a bizonytalanságot minden esetben a saját természetes matematikai skáláján, varianciaként illetve szórásként értelmezi.

2. Vegyész szemmel

Gyakorló vegyészként az Útmutató mindennapi alkalmazásával kapcsolatosan meglehetősen vegyes érzelmeim alakultak ki.

Mindenekelőtt nagyon nagy jelentőségűnek tartom, hogy, a mérési tudományok nemzetközi szerveinek egyetértésében egy igencsak logikus és egyszerű szemléletű

irányelv került megfogalmazásra. Ugyancsak fontos, hogy a laboratóriumok akkreditációjáról szóló ISO/IEC 17025 szabvány kötelezi a laboratóriumokat a mérési bizonytalanság értékelésére, amelyhez metodikai hivatkozásként az Útmutatót jelöli meg. Kis hazánkat érintő fejlemény, hogy az OMH kollektívája 1995-ben magyar nyelven is elérhetővé tette az Útmutatót. Az Útmutató elveinek analitikai kémiai mérésekben történő alkalmazásában komoly segítséget jelenthet a EURACHEM / CITAC Guide CG 4.

A laboratóriumok akkreditálása során, a gyakorló szakembereknek szembesülniük kell a bizonytalanság értékelésének „új” szemléletével. Az ebben foglalt elvek elsajátítása úgy vélem nem jelenthet nagy gondot, mivel a mérési módszerek validálása során amúgy is számbavételre kerülnek az eredményt befolyásoló tényezők, illetve elemzésre kerül ezek nagysága. A hagyományos szemléletben alkalmazott hibaterjedési szabályok matematikai formalizmusa is alapjaiban azonos az „új” szemléletével.

A metrológiában „kezdő” vegyész számára a nehézségek az összetettebb mérési eljárások elemzése során kezdődhetnek. A EURACHEM / CITAC Guide által részletesen bemutatott viszonylag egyszerű titrálási eljárások bizonytalanságának elemzése első ránézésre meglehetősen bonyolultnak, sőt ijesztőnek tűnik. Persze – komoly elszántságot tanúsítva – a példák végigolvashatók, sőt meg is érthetők. Elgondolkodtató viszont, amikor egy a mintavételt és minta-előkészítést is magába foglaló kromatográfiás eljárás bizonytalansági tényezőinek elemzése fordul meg a gyanútlan kezdő fejében... Nem is beszélve arról, amikor a minőségi azonosítás bizonytalansági tényezőire terelődik ugyanezen gyanútlan kezdő gondolata...

De hát nincs új a nap alatt, a szakemberek ugyanezen kérdésekre már rég keresik, vagy már rég meg is találták a választ.

Itt vetődik fel az oktatás kérdése. Tapasztalataim alapján, neves egyetemeink nagy részén a vegyészképzés során, még az analitikai irányba orientálódó hallgatók esetében is elég szórványosan jelenik meg a mérési bizonytalanság kérdésköre. Jómagam már az Útmutató megjelenését követően, de még a magyar nyelvű kiadás előtt estem át az általános egyetemi analitikai oktatáson, így nem lep meg, hogy akkor még egyáltalán nem hallottam a benne foglaltakról. Az már inkább meglepő, hogy az általam megkérdezett néhány, az utóbbi években végzett, szakterületének az analitikát választó kémikus is csak a hagyományos elmélettel találkozott tanulmányai során. Ennél még érdekesebb, hogy egy – a világhálón elérhető, élelmiszeranalitikával foglalkozó – vélhetően felsőoktatási előadásvázlat, a mérések validálása témakörben, az ISO 17025 zászlaja alatt a *valódi érték*, és *rendszeres hiba* fogalmakat hirdeti a hallgatóknak.

(+1 kiáltvány)

Ezúton hívom hadba a kémiát oktatókat, hogy főiskoláinkon, egyetemeinken vértessék fel az analitikai szakirányokban tanuló hallgatókat a mérési bizonytalanság kezelésének korszerű tudományával, hogy az oktatásból kikerülve hatékonyan segíthessenek az olyan – e téren kissé elmaradott – emberek munkájában, mint jómagam!

Budapest, 2006. november 27.

Csesztregi Tamás
vegyész