

「初心者のための統計学」追加テキスト

精度管理に用いる用語・基本知識

2008年6月



社団法人 におい・かおり環境協会

1. はじめに

臭気に関連する諸データを統計学的に取り扱うための基礎知識の解説書として、「初心者のための統計学」が当協会から刊行されている。この本は、統計学の基礎的な知識を網羅するとともに、臭気データを統計学的に取り扱うための考え方や事例を解説したもので、臭気データに限らず、環境問題やその他の社会的な問題に必要な統計学の知識を身につけるのに好適な教科書として、好評をいただいている。

一方、近年の環境問題への社会的関心の高まりに対応して、多くの環境モニタリング（環境測定）が行われるようになってきたことから、測定値の信頼性を確保すること、すなわち精度管理の重要性が広く認識されるようになってきた。この精度管理のベースとなっているのは、統計学に基づいたデータ処理方法であることから、統計学は精度管理技術の基盤としての意味も持っていることになる。

しかし上記の「初心者のための統計学」では、臭気データの処理とそれに必要な統計学の基礎知識に内容を絞ってあることから、この精度管理に直接関連する内容は含まれていない。そこでこの追加テキストでは、精度管理に関する基本的な用語と、それに関連する統計学的な考え方について、その概要を解説することを目的としている。

2. 測定値の品質と誤差

2. 1 測定値の品質の考え方

環境測定を行う目的は、対象地域または対象地点における環境の状況を知ることである。しかし測定を行えば必ず正しく状況を把握できるかという点、決してそうではない。そこにはさまざまな変動要因が存在し、それによって正しく状況を把握することが妨げられている。測定値の品質を保つということは、そういう妨害要因を十分に理解した上で、その影響を最小にしようとする点である。

2. 2 測定値に影響する要因

測定値に影響する主要な変動要因としては、次のようなものがある。

(1) 実現象の空間的変動

環境の状況は、地点によって異なるのが一般的である。極端な場合には、わずか1 m離れただけで状況が大きく異なる場合さえある。それに対して、環境測定のためのサンプリング（試料採取）はある1点で行われるため、地点によって異なる状況を精密に把握するためには、非常に多数の地点でサンプリングを行わなければならない。

(2) 実現象の時間的変動

環境の状況は、一般に時々刻々変動している。それに対して、環境測定のためのサンプリングはある限定された時間内に行われるため、時間的な変動を精密に把握するためには、非常に多くの回数のサンプリングを行う必要が生じる。

(3) サンプリング誤差

実現象の空間的あるいは時間的な変動が仮にわかっていたとしても、サンプリングを行う際に目的とした試料が正しく採取されているかどうかという問題がある。位置や時間のずれが生じれば、正しい状況を把握できなくなる可能性がある。

なお、上記(1)と(2)の要因も含めてサンプリング誤差と総称する場合もある。

(4) 分析誤差

環境測定においては、サンプリングされた試料に対して、機器分析、化学分析(滴定等)、官能検査(嗅覚測定法等)の方法により分析を行うのが一般的である。この際、機器の性能、測定者の技術的な問題等によって、測定値が真の値からずれる場合がある。というよりもむしろ、必ずずれると言ったほうが正しい。特に嗅覚測定法のように、人間(パネル)の感覚に基づいた測定を行う場合には、さらに個人差、パネルの体調、周囲の環境等の変動要因が加わるため、さらに問題が複雑となる。

このように真の値からのずれの存在は肯定した上で、ずれをいかに小さくするかが、測定値の品質管理の目的である。

2. 3 測定値の品質に関する用語の定義

測定値（J I Sでは分析値という用語を用いる）の品質については、J I Sで次のように用語が定められている。なお下記の説明の中で、[備考]はJ I Sの中に記載されている注記であり、[注]は筆者が加筆した注記である。

(1) 採択された参照値(Accepted reference value)

次のようにして得られた、比較のために容認された標準として役立つ値

- a) 科学的原理に基づく理論値又は確定値
- b) ある国家、又は国際機関の実験研究に基づく付与値、又は認証値
- c) 科学又は技術集団の主催する共同実験研究に基づく合意値、又は認証値
- d) a),b),c)のいずれにも拠ることができないときは、その量の期待値、すなわちその測定値の母集団の平均値

[注] 一般には真の値は未知であるため、真の値に代わる比較の対象として定められた概念である。

(2) 精確さ(Accuracy)

個々の測定結果と採択された参照値との一致の程度

[備考] 一連の測定結果について考える場合には、精確さは、ばらつきの成分と各測定結果に共通する系統誤差、すなわちかたよりの成分との両方の成分で構成される。

(3) 真度、正確さ(Trueness)

十分多数の測定結果から得られた平均値と、採択された参照値との一致の程度

[備考] ・ふつう真度はかたよりによって表される。

・"Trueness"はこれまで"Accuracy of mean"と表現されていた。この表現は推奨しない。

[注] ある測定法で同一試料を無限回測定したときのデータの平均値と真の値の差をいう。

(4) かたより(Bias)

測定結果の期待値と、採択された参照値との差

[備考] かたよりは、偶然誤差と対照される系統誤差の全体である。かたよりに寄与する系統誤差は、一つ以上あることもある。大きなかたよりは、採択された参照値からの大きな系統的な誤差をもたらす。

(5) 精度(Precision)

定められた条件の下で繰り返された独立な測定結果の間の一致の程度

[備考] ・精度は偶然誤差の分布のみに依存し、真の値や特定の値には関係しない。

・ふつう精度はその悪さ(imprecision)によって表現され、測定結果の標準偏差として計算される。標準偏差が大きいと、精度が低いという。

- ・「独立な測定結果」とは、同一もしくは類似した測定対象物の過去の結果の影響を受けない測定結果のことをいう。精度の大きさは繰返しに関して定められた条件に依存する。併行条件、再現条件は繰返しに関する両極の条件である。

[注] ある測定法で同一試料を無限回測定したときのデータのばらつきの程度をいう。

(6) 併行条件(Repeatability condition)

同一とみなせるような測定試料について、同じ方法を用い、同じ試験室で、同じオペレータが、同じ装置を用いて、短時間のうちに独立な測定結果を得る測定の条件。

(7) 併行精度、繰返し精度(Repeatability)

併行条件による測定結果の精度

(8) (室間)再現条件(Reproducibility condition)

同一とみなせるような測定試料について、同じ方法を用い、異なる試験室で、異なるオペレータが、異なる装置を用いて、独立な測定結果を得る測定の条件。

(9) (室間)再現精度(Reproducibility)

再現条件による測定結果の精度

(10) 中間条件(Intermediate condition)

同一とみなせるような測定試料について、同じ方法を用い、同じ試験室で、時間、オペレータ、装置のうち、一つ以上の因子について異なるものを用いて独立な測定結果を得る測定の条件。

(11) 中間精度(Intermediate precision)

中間条件による測定結果の精度

(12) 外れ値、異常値(Outlier)

一組の値のうち、他の値と不整合な値

(13) 共同評価実験(Collaborative assessment experiment)

同一試料、同じ標準測定方法による、各試験室の測定能力を評価するための多施設共同実験。

なお、これらの J I S の定義と別の概念として、「不確かさ(Uncertainty)」がある。これについては I S O で次のように定義されている。

(1) (測定)の不確かさ(Uncertainty of measurement)

測定の結果に付随した、合理的に測定量に結び付けられ得る値のばらつきを特徴づけるパラメータ。

[備考] ・このパラメータは、例えば標準偏差(又はそのある倍数)であっても、あるいは信頼水準を明示した区間の半分であってもよい。

- ・測定の不確かさは一般に多くの成分を含む。これらの成分の一部は一連の測定の結果の統計分布から推定することができ、また実験標準偏差によって特徴づけられる。その他の成分は、それもまた標準偏差によって特徴づけられるが、経験又は他の情報に基づいて確率分布を想定して評価される。
- ・測定の結果は測定量の値の最良推定値であること、及び、補正や参照標準に付随する成分のような系統効果によって生ずる成分も含めた、すべての不確かさの成分はばらつきに寄与することが理解される。

(2) 標準不確かさ(Standard uncertainty)

標準偏差で表される、測定の結果の不確かさ

(3) Aタイプの不確かさ(Type A uncertainty)

一連の測定値の統計的解析によって評価される不確かさ

[注] JISにおける精度(ばらつき)に対応した概念である。

(4) Bタイプの不確かさ(Type B uncertainty)

一連の測定値の統計的解析以外の手段によって評価される不確かさ

[注] JISにおける真度(かたより)に対応した概念である。

(5) 合成標準不確かさ(Combined standard uncertainty)

測定の結果が幾つかの他の量の値から求められるときの、測定の結果の標準不確かさ。これは、これらの各量の変化に応じて測定結果がどれだけ変わるかによって重み付けした、分散または他の量との共分散の和の正の平方根に等しい。

(6) 拡張不確かさ(Expanded uncertainty)

測定の結果について、合理的に測定量に結び付けられ得る値の分布の大部分を含むと期待される区間を定める量

[備考]・この部分の比率は包含確率又は区間の信頼の水準と考えてもよい。

2. 4 精確さの分類

J I S の定義では、精確さは精度と真度を合わせた概念である。その関係は、次のように整理することができる。

(1) ばらつきが小さく、かたよりも小さい

精度、真度ともに高いので、精確さとしては最も高い。

(2) ばらつきが小さいが、かたよりが大きい

精度は高いが真度が低いので、精確さは高いとは言えない。機器分析の普及により、精度は全般に向上しているが、真度には問題がある場合が多いので、注意が必要である。

(3) かたよりは小さいが、ばらつきが大きい

真度は高いが精度が低いので、精確さは高いとは言えない。

(4) ばらつきが大きく、かたよりも大きい

精度、真度ともに低いので、精確さとしては最も低い。

これらのいずれが望ましいかは、一概には定義できない。環境測定の場合、得られた値によって環境保全のための規制が行われるかどうかの判断が行われることになるので、真度の重要性は高い。精度(ばらつき)については、測定データを数多く得ることが可能であれば、統計学的手法によって処理が可能となる。いずれにしても、精確さに対する配慮は、常に必要な課題であるといえる。

3. 信頼性の管理

3. 1 信頼性管理の考え方

測定値の信頼性は、測定方法が適切に標準化されているか、標準化された方法のとおりに行われているか、装置や試薬の管理が適切に行われているかといった要因に左右される。信頼性が損なわれるケースとしては、次のような場合がある。

(1) 操作ミス

試料の取り違い、試料の変質、試薬の取り違い、試薬の変質、標準溶液の作成ミス、検量線の作成ミス、計算ミス、転記ミス、機器の操作ミス等

(2) 装置の欠陥

(3) 機器の管理不良

分析機器の整備不良、機器の汚染等

これらの要因による分析値の精確さの低下は、適切な管理によって防ぐことが可能であり、いわゆる機器固有の測定誤差とは別の問題である。管理のための手法としては、管理図等のQC7つ道具が主に使われるほか、標準作業手順書（SOP）のように、とるべき手順と留意点を記載した書類を順守することが基本となる。

一方、嗅覚測定法のような官能検査の場合は、人間の感覚を利用することから、信頼性を損なう要因がもう少し多くなる。逆にそれだけ適切な管理の重要性が高いといえる。そのため、精度管理の際に求められる内容も、多岐にわたることになる。

3. 2 精確さの向上方法

測定値の精確さを向上させるための手段は、“技術的な手段”と“統計的な手段”の2つに分けられる。技術的な手段は、分析技術者自身の技術レベルを向上させることであり、経験の蓄積のほか、適切な研修の実施等によって達成される。統計的な手段としては、次のような方法がある。

(1) 実験計画法の適用

最適な分析条件を決定するために、実験計画法の適用が有効である場合が多い。

(2) 測定方法の改善

機器分析の場合には、校正のための標準物質が必要となる。現状では標準物質の供給は十分とはいえない状況であり、改善が必要な点である。

(3) 繰返し測定

併行測定条件をとることによって、精度を向上させることができる。また中間条件をとることによって、真度を向上させることができる。(室間)再現条件をとることが可能であれば、さらに精確さを向上させることが可能となるが、一般には実施が容易でないので、中間条件による繰返し測定の採用が推奨されている。

(4) 測定結果のスクリーニング

既に得られたデータの中の異常値を棄却することによって、精確さを向上させることができる場合がある。ただし3. 4に記すような注意が必要である。

3. 3 内部精度管理と外部精度管理

精確さを向上させるための管理については、内部精度管理と外部精度管理という用語が多く用いられる。内部精度管理とは測定機関内部における精度管理をいい、外部精度管理とは複数の測定機関が同時に参加する精度管理をいう。内部精度管理では、標準試料（既知濃度）を用いた繰り返し測定によって測定値が許容範囲に含まれているかどうかを確認した上で、外れていれば原因を検討した上で作業の改善を行う。標準物質を用いた測定を行うことから、J I S の用語では併行条件の測定を行っていることになる。これに対して外部精度管理は、他の測定機関との比較が主な目的であることから、複数の測定機関が参加して同一の標準試料（未知濃度）を同一の方法で測定し、その結果の評価は第三者機関が行うことが原則となる。これは J I S の(室間)再現条件での測定に相当する。ただし外部精度管理を少数の測定機関が独自に行うことは容易でないため、中間条件での測定によって内部精度管理をより深めることも行われる。

3. 4 異常値の判定とデータの棄却

多数の測定データの中にごく少数の特異的な(飛び離れた)値が含まれる場合に、異常値とよぶ。ただしこの異常値には、実現象が特異的である場合と、測定上の問題によって特異的になってしまった場合とが含まれるため、その取り扱いには慎重を要する。このいずれであるかを判定することは容易ではなく、経験的な判断を要する場合が多いが、統計的に異常値を判定するための検定方法が考案されており、Dixon の検定や Grubbs の検定が主なものである。

特異的なデータを異常値として棄却するためには、少なくとも何らかの統計的な手段を用いなければならない。さらに、統計的に異常値であると判定されたとしても、原因が明確でなければ、単純に棄却してしまうのは適切とは言えない。特に環境測定においては、実現象として特異的に高い値が生じる可能性は十分にあるので、統計的な異常値検定だけに頼るのは危険である。

(1) Dixon の検定

n 個のデータがあるとき、それを大きさの順に並べる。

$$x_1 \leq x_2 \leq x_3 \leq \dots \leq x_{n-1} \leq x_n$$

このとき、 x_n が異常値であるかどうかを判定するには、 $(x_n - x_{n-1}) / (x_n - x_1)$ を計算し、この値が表に示された棄却限界値以上であれば異常値と判定する。

(2) Grubbs の検定

Dixon の方法と同様に n 個のデータを大きさの順に並べる。

x_n が異常値であるかどうかを判定するには、 $(x_n - \bar{X}) / s$ を計算し、この値が表に示された棄却限界値以上であれば異常値と判定する。ここで \bar{X} は n 個のデータの平均値、s は標準偏差である。

4. おわりに

嗅覚測定法をはじめとする環境測定は、環境行政や企業の環境管理を遂行する上で極めて重要な作業である。それが適切に行われ、環境の現状が正しく把握されることが、有効な環境保全対策を策定・実施するための必要条件といえる。

環境測定データが有効に機能するための条件として、統計学的なデータの取り扱いがある。ただしそこで必要となるのは、統計学のほんの一部分の知識に限られる。その最小限の統計学的知識と、データに「精確さ」を保とうとする意識が常にあれば、環境測定は適切に行われることになる。この追加テキストが何らかの形で諸兄に役立てば幸いである。