

# DQO- PRO 软件在优化环境监测方案中的应用

黄 俊

(清华大学环境科学与工程系, 北京 100084)

**摘 要:** 介绍了美国开发的一个环境监测方案优化辅助软件——DQO- PRO, 阐述了其开发背景、设计思想及具体使用方法。该软件可以从互联网上免费下载, 可以供我国环境监测人员在工作中借鉴。

**关键词:** 环境分析; 质量保证; 数据质量目标

中图分类号: X 830 文献标识码: A 文章编号: 1006- 2009(2001) 05- 0019- 03

## Using DQO- PRO to Optimize Environmental Monitoring Plan

HUANG Jun

(Department of Environmental Science and Technology, Tsinghua University, Beijing 100084, China)

**Abstract:** An American shareware called DQO- PRO, which can be a good assist tool in the optimization of environmental monitoring plans, is introduced. Its developing background, design framework and usage are discussed. This software can be downloaded freely from the website, and can be used for reference by environmental monitoring operators in China.

**Key words:** Environmental analysis; Quality assurance; DQO

### 1 引言

质量保证(QA)是环境监测的重要内容,它是对整个分析过程的全面质量管理,是保证分析数据准确可靠的有效措施。QA根据需求和可能包括制订计划、确定监测指标及数据的质量要求、规定相应的监测分析系统,其中样品采集是最基本的部分<sup>[1]</sup>。采集多少个环境样品才能达到特定的监测目标,需要根据统计学公式和特定的分析要求即数据质量目标(DQO)和测定质量目标(MQO)来确定。尽管这些统计学公式已经问世多年,但是由于它们比较抽象且难以理解,使用起来也非常繁琐,因此人们在实际工作中不经常使用。DQO- PRO软件正是在这种背景下应运而生的。

### 2 DQO- PRO 概述

DQO- PRO 是美国 Radian 国际公司(Radian International, LLC)为美国政府开发的,项目负责人 Keith 博士是世界知名的环境化学家、前美国化学会(ACS)环境化学分会主席。DQO- PRO 属于公益性的共享软件,目前的最新版本为 2.0 版,可以从美国化学会环境化学分会的互联网站(<http://www.acs-envchem.duq.edu/dqopro.htm>)上免费下载<sup>[2]</sup>。此外,一份由 Keith 博士采用 powerpoint 编写的软件详细教程也可以在 <http://www.instantref.com/tutorial.htm> 上订购,它包括 5 个 \* .ppt 文件,其中既有背景、原理,也有不少实际应用例子<sup>[3]</sup>。

2.1 DQO 的确立过程与 DQO- PRO 的作用

DQO 代表了进行决策的需要,它按照下列 7 个步骤来确立:

- (1) 提出要解决的问题;
- (2) 确定需要作出的决策;
- (3) 确定决策所需要的所有参数;
- (4) 缩小研究的范围;
- (5) 制订决策规则;
- (6) 设置不确定性约束条件;
- (7) 优化监测设计。

其中第 6 步就是确定为了达到具体的目标和所要求的置信度所必须采集的样品数,通常这一步

收稿日期:2001- 04- 20; 修订日期:2001- 09- 19

作者简介:黄俊(1976- ),男,江苏江阴人,博士研究生,已发表论文 20 余篇。

需要重复进行几次以得到样品的最佳优化数目, 主要是为了综合考虑 DQO、预算、时间及其他因素的要求<sup>[4]</sup>。

传统的方法需要按照统计公式进行大量的计算, DQO- PRO 可以使这些计算变得容易而方便。

## 2.2 DQO- PRO 的设计思想

DQO- PRO 的设计目的是优化采样设计, 以便得到质量更好的监测数据, 达到 DQO, 同时 DQO- PRO 也能被用于评价现有监测数据的质量是否符合监测要求。它主要回答了下面 3 个问题:

- (1) 各种误差和事件发生的概率有多大;
- (2) 某个可以接受的误差水平的平均估计值为多少;
- (3) 对目标地点即“热点”进行监测时所必需的采样网格方案。

DQO- PRO 通过显示采样数目与 DQO 参数之间的关系来帮助环境分析人员理解 DQO。例如:

- (1) 置信水平与假的阳性和(或)阴性数据数目;
- (2) 可接受的误差与分析浓度、标准偏差等;
- (3) 置信水平与采样区域网格尺寸。

用户只需输入要求, 软件就可给出答案。例如: 如果你给出已经确定或者计划的采样数目, 软件会估算出各种置信水平; 如果你给定了置信水平(作为你的数据目标的一部分), 软件就会估算出为了达到这一置信水平所需要采集的样品数目。

DQO- PRO 以 Microsoft Windows 为操作系统平台, 利用 Microsoft Visual Basic 可视化编程, 将抽象的统计公式在友好的交互式界面上反映到使用者面前, 使得设计采样方案通过 DQO- PRO 变得像按计算器一样方便。

## 3 DQO- PRO 的使用

DQO- PRO 软件分为 3 个子模块:

- (1) “热点”计算;
- (2) 环境计算;
- (3) 成功率计算。

### 3.1 “热点”计算(HotSpot- Calc)

当进行环境污染调查时, 通常要判断目标区域是否有污染物质存在, 这时就需要进行“热点(Hot Spot)”采样, 前提是假设这些污染物质在环境中局限在一个较小的范围内且不会扩散。同一个点由于不同的污染来源可能是多重的热点。热点采样

一般采用系统布点采样法(即网格布点采样法), 在每个网格采一个样, 可以在网格中心点采样, 也可以在网格内随机选点采样。找到热点的概率是热点的大小和形状、网格的形式以及热点与网格边长的大小关系所决定的一个函数。HotSpot- Calc 的目的是确定在可接受的遗漏热点概率水平下为达到特定范围的检测要求所需要采用的网格大小。它的编程思想是根据可能遗漏热点的概率而不是发现热点的概率, 并且基于下列假设:

- (1) 热点的形状是圆形、短椭圆形或者长椭圆形的;
- (2) 样品是按照正方形、矩形或者三角形来采集的;
- (3) “热点”的定义是明确的, 并且得到决策者的同意;
- (4) 没有分类上的错误(即没有假阳性或者假阴性的测定误差)。

热点采样所需的采样点数是指所有网格区域的采样总数, HotSpot 将根据用户设定的可接受遗漏热点水平按照公式进行计算。HotSpot- Calc 的输入变量包括:

- (1) 网格的大小和形状, 如: 三角形、正方形、矩形等;
- (2) 热点的大小和形状, 如: 圆形、椭圆形或长椭圆形;
- (3) 遗漏热点的可接受概率, 如: 10%、20%等;
- (4) 采样区域的大小, 如: 100 m<sup>2</sup>、5 km<sup>2</sup>等。

例如对于矩形网格、圆形热点、10%的可接受遗漏热点概率、采样区域面积为 100 m<sup>2</sup>的情况, 在界面上选择相应的按钮, 并输入相应的值后, 便可以在文本框中得到所需的网格边长为 1.02 m, 采样数为 49。

### 3.2 环境计算(Enviro- Calc)

由于选择的分析方法会直接影响到需要采集的样品数量、采集后样品的保存方法, 而环境采样方案又将直接影响到后面的分析测定, 因此在制定环境监测方案时必须将采样与分析联合起来进行考虑。当分析的目的是目标区域中某污染物质的平均水平时, 一般采用随机布点采样法。Enviro- Calc 的设计依据是由 ACS 所推荐的采样数目的计算公式  $n = (z \sigma_p / e)^2$  改进而来的两组公式:

- (1) 采用标准偏差进行计算。  
第 1 级:  $n = [Z(1 - \alpha/2) s / d]^2$

第 2 级:  $n = [t(1 - \alpha/2) s / d]^2$

(2) 采用相对标准偏差进行计算。

第 1 级:  $n = [Z(1 - \alpha/2) (s/\bar{x}) d_r]^2$

第 2 级:  $n = [t(1 - \alpha/2) (s/\bar{x}) d_r]^2$

式中:

$Z$  ——按  $Z$  分布用  $\alpha$  表示的标准偏差, mg/L;

$s$  ——样本集的标准偏差, mg/L;

$s/\bar{x}$  ——样本集的相对标准偏差, %;

$d$  ——以绝对量表示的平均值估计可接受的误差大小, mg/L;

$d_r$  ——以相对量表示的平均值估计可接受的误差大小, %。

公式中的标准偏差和相对标准偏差反映了由不同的污染物质(如:金属、非金属、挥发性有机物、半挥发性有机物、非挥发性有机物等)、不同的介质(如:饮用水、工业废水、固废、污泥、环境空气、室内空气等)、不同性能的分析方法(如:选择性、敏感性等)所构成的可变性。

根据可变性的值, Enviro Calc 可以计算出所需要的采样数。例如:对于水中 100  $\mu\text{g/L}$  的五氯酚, EPA 1625 方法的相对标准偏差为 21%, 这可以根据方法原文中的标准偏差表计算出来。当可接受误差  $\pm 10\%$ , 而置信水平为 95% 时, 利用 Enviro Calc 马上得到需要采集的样本数为 20。

需要指出的是, 当分析中使用到多个方法而采集的样品需要进一步细分时, 可变性指标标准偏差或相对标准偏差要按最大值进行计算。另外, 当最大可接受误差水平已经等于或者超过标准偏差或相对标准偏差时, 则不能用 Enviro Calc 进行采样数目的估算。

### 3.3 成功率计算(Success Calc)

Success Calc 用于确定分析样本群的特定性质时所需要的采样数目。例如, 它可用于计算环境监测分析中为确保假阳性或者假阴性的概率不超过特定值(如: 5%) 时所需要的 QA/QC 样品数(如空

白样、加标样)。

Success Calc 也可以用于计算为确保测出某区域可能有其他污染物时所需要的采样数目。例如, 某一采样区域受污染的百分比。

另外, Success Calc 还可以计算出假阳性和假阴性结果出现的最大及最小比例。

Success Calc 的输入变量包括:

(1) 对可能含有污染物的样品, 可以接受的最大不检测百分比;

(2) 如果有超过特定的最大百分比的样本, 其中出现要检测的污染物, 希望能够检出的概率;

(3) 可以允许有多少个样品未达到特定限值。

例如, 为了确保 95% 的置信水平, 假阳性率不超过 5%, 采用零决策规则(即如果有 1 个样品未达到指定的限值就认为不合格), 可以利用 Success Calc 来计算出所需要的空白样品数。在对应的空格上填上 5、95 和 0, 按“Samples”按钮, 则可以得到需要的采样数目。

## 4 结束语

环境监测方案设计是得到高质量监测数据的基础和前提, 提高监测方案设计水平, 对于中国的环境保护事业具有重要的意义。DQO- PRO 作为美国在这方面进行计算机辅助优化的一种尝试, 值得借鉴。

### [参考文献]

- [1] 奚旦立, 孙裕生, 刘秀英. 环境监测(修订版)[M]. 北京: 高等教育出版社, 1995.
- [2] KEITH L H, PATTON G L, EDWARDS P G. DQO-PRO[CP/OL]. distributed by the American Chemical Society Division of Environmental Chemistry, 1996.
- [3] <http://www.instantref.com/tutorial.htm> [EB/OL]. 访问时间: 2001-03-27.
- [4] KEITH L H. Principles of Environmental Sampling[M]. 2nd Edition, Washington D C: American Chemical Society, 1996.

• 简讯 •

## 江苏省发布《城市饮用水源地水质旬报》

为保障城市居民的饮水安全, 江苏省各省辖市自 2001 年 5 月发布《城市饮用水源地水质月报》后, 于 7 月上旬又开始向社会发布《城市饮用水源地水质旬报》, 受到了公众的好评。

张宁红