

პრეციზიულობის შეფასებაზე მიმართული ექსპერიმენტის შედეგად მიღებულ მონაცემთა ანალიზის რობასტული მეთოდების გამოყენება

ირაკლი ზედგინიძე, ნინო ბერაია
საქართველოს ტექნიკური უნივერსიტეტი

რეზიუმე

პრეციზიულობის შეფასებაზე მიმართული ექსპერიმენტის შედეგად მიღებული მონაცემების მიმართ კოხრენისა და გრასის კრიტერიუმების გამოყენებისას მონაცემთა ნაწილი, როგორც ამოვარდნები, შეიძლება გამოირიცხოს. შედეგად იცვლება გაზომვის სტანდარტული მეთოდის პრეციზიულობის დამახასიათებელი განმეორებადობისა და აღწარმობადობის სტანდარტული გადახრების მნიშვნელობები. რეკომენდებულია განმეორებადობისა და აღწარმობადობის სტანდარტული გადახრების გამოთვლა რობასტული მეთოდებით, რაც საშუალებას მოგვცემს გამოვითვალოთ ამ გადახრების მნიშვნელობები ისეთნაირად, რომ მათზე არ მოქმედებდეს ამოვარდნილი მონაცემები.

საკვანძო სიტყვები: პრეციზიულობა. შეფასება. ექსპერიმენტი. კოხრენი. გრასი. რობასტული მეთოდები.

1. შესავალი

პრეციზიულობის შეფასებაზე მიმართული ექსპერიმენტის შედეგად მიღებული მონაცემების მიმართ რეკომენდებულია ამოვარდნებზე შემოწმებისათვის ორი რიცხობრივი კრიტერიუმის (კოხრენისა და გრასის კრიტერიუმების) გამოყენება და ნებისმიერი მონაცემი, რომელიც მოგვცემს ამ შემოწმებიდან ერთ-ერთშიც კრიტერიუმის კრიტიკულ მნიშვნელობაზე მეტ სიდიდეს მნიშვნელოვნობის 1%-იან დონეზე, უნდა გამოირიცხოს.

ამ გადაწყვეტილებამ შეიძლება არსებითად იმოქმედოს გაზომვის სტანდარტული მეთოდის პრეციზიულობის დამახასიათებელი განმეორებადობისა და აღწარმობადობის სტანდარტული გადახრების გამოთვლილ მნიშვნელობებზე. პრეციზიულობის შეფასებაზე მიმართული ექსპერიმენტების ანალიზისას ვხვდებით “გაფანტვებისა” და ამოვარდნების საზღვარზე მყოფ მონაცემებს, საჭირო ხდება გადაწყვეტილების მიღება გარკვეულ დონეზე რომელიმე ლაბორატორიის მონაცემების, ან ამ ლაბორატორიის ყველა მონაცემის გა-მორიცხვის, ან ამ ლაბორატორიის ყველა მონაცემის დატოვების შესახებ. ნებისმიერი გადაწყვეტილება იმოქმედებს გამოთვლის შედეგზე, ამდენად ასეთი სიტუაცია დამაკმაყოფილებელი არ არის. ამ სტატიაში განხილული რობასტული მეთოდები საშუალებას გვაძლევს მოვახდინოთ მონაცემების დამუშავება ისეთ-ნაირად, რომ არ დაგვჭირდება გამოთვლის შედეგებზე მოქმედი გადაწყვეტილებების მიღება. ამდენად, თუ მოსალოდნელია, რომ პრეციზიულობის შეფასებაზე მიმართული ექსპერიმენტის შედეგები შეიცავენ ამოვარდნებს, რობასტული მეთოდების გამოყენება მიზანშეწონილი ხდება.

2. ძირითადი ნაწილი

პირველი, რაც უნდა გავაკეთოთ რობასტული ანალიზის ჩატარებისას – მივიღოთ განმეორებადობის სტანდარტული გადახრის რობასტული შეფასება. ამისათვის შეგვიძლია გამოვიყენოთ ალგორითმი Δ .

ალგორითმი Δ გამოიყენება ლაბორატორიის შიგნით სტანდარტული გადახრების მიმართ ცალ-ცალკე ყოველი დონისათვის და გვაძლევს რობასტულ გერთიანებულ მნიშვნელობას სტანდარტული

გადახრებისა. განვალაგოთ გამოსაკვლევი ღონის სტანდარტული გადახრები ზრდადობის მიხედვით s_1, s_2, \dots, s_p (იხი. სვეტი „0” პირველ ცხრილში).

ცხრ.1

იტერაცია	0	1	2	...	q
ψ	–	$\psi^{(1)}$	$\psi^{(2)}$...	$\psi^{(q)}$
s_1^*	s_1	$s_1^{(1)}$	$s_1^{(2)}$...	$s_1^{(q)}$
s_2^*	s_2	$s_2^{(1)}$	$s_2^{(2)}$...	$s_2^{(q)}$
\vdots	\vdots	\vdots	\vdots	...	\vdots
s_p^*	s_p	$s_p^{(1)}$	$s_p^{(2)}$...	$s_p^{(q)}$
W^*	$W^{*(0)}$	$W^{*(1)}$	$W^{*(2)}$...	$W^{*(q)}$

გამოვითვალოთ პირველადი რობასტული გაერთიანებული მნიშვნელობა $W^{*(0)}$ შემდეგნაირად:

$$W^{*(0)} = \text{მედიანა } s_i \quad (i=1, 2, \dots, p). \quad (1)$$

მოვებნოთ პირველი ახალი მნიშვნელობა $W^{*(1)}$ შემდეგნაირად:

ა) გამოვითვალოთ

$$\psi^{(1)} = \eta W^{*(0)}, \quad (2)$$

სადაც η – ზღვრული კოეფიციენტის მნიშვნელობაა, რომელსაც ვირჩევთ მე-2 ცხრილიდან $v = n-1$ (n – შედეგების რაოდენობა, რომელთა მიხედვითაც გაითვალა სტანდარტული გადახრები) თავისუფლების ხარისხის მიხედვით.

ცხრ.2

S ალგორითმის თანახმად რობასტული ანალიზისათვის საჭირო კოეფიციენტები

თავისუფლების ხარისხი v	ზღვრული კოეფიციენტი η	კორექციის კოეფიციენტი ξ
1	1,645	1,097
2	1,517	1,054
3	1,444	1,039
4	1,395	1,032
5	1,359	1,027
6	1,332	1,024
7	1,310	1,021
8	1,292	1,019
9	1,277	1,018
10	1,264	1,017

ბ) ყოველი s_i -სათვის ($i=1, 2, \dots, p$) გამოვითვალოთ

$$s_i^{(1)} = \begin{cases} \psi^{(1)}, & \text{თუ } s_i > \psi^{(1)}; \\ s_i & \text{დანარჩენ შემთხვევებში;} \end{cases} \quad (3)$$

მიღებული ახალი მნიშვნელობები შევიტანოთ პირველი ცხრილის მესამე სვეტში;

გ) გამოვითვალოთ ახალი მნიშვნელობა $W^{*(1)}$

$$W^{*(1)} = \xi \sqrt{\sum_{i=1}^p (s_i^{(1)})^2 / p}. \quad (4)$$

რობასტული შეფასება W^* შეგვიძლია მივიღოთ იტერაციულად, გამოთვლების გამეორების გზით ა), ბ) და გ) პუნქტების მიხედვით რამდენჯერმე. ასე, მაგალითად, მეორე იტერაციაზე:

$$\psi^{(2)} = \eta W^{*(1)};$$

$$s_i^{(2)} = \begin{cases} \psi^{(2)}, & \text{თუ } s_i^{(1)} > \psi^{(2)}; \\ s_i^{(1)} & \text{სხვა შემთხვევებში;} \end{cases}$$

$$W^{*(2)} = \xi \sqrt{\sum_{i=1}^p (s_i^{(2)})^2 / p} \quad \text{და ა.შ.}$$

გამოთვლები უნდა გაკავრდეთ მანამ, სანამ W^* -ის შეფასების ცვლილება ერთი ეტაპიდან მეორეზე გადასვლისას არ გახდება საკმარისად მცირე. ეს ამოცანა მარტივად წყდება კომპიუტერის გამოყენებით.

მაშინ განმეორებადობის სტანდარტული გადახრის რობასტული შეფასება იქნება

$$s_i = W^*.$$

შესასწავლი ღონისათვის უჯრედების საშუალო მნიშვნელობების სტანდარტული s_d გადახრის რობასტული შეფასება შეგვიძლია მივიღოთ მოცემული ღონის უჯრედების საშუალო მნიშვნელობების მიმართ A ალგორითმის გამოყენებით.

A ალგორითმის თანახმად უჯრედების საშუალო მნიშვნელობები უნდა განვალაგოთ ზრდადობის მიხედვით $\bar{y}_1, \bar{y}_2, \dots, \bar{y}_p$ (იხილეთ სვეტი "0" მე-3 ცხრილში).

ცხრ.3

იტერაცია	0	1	2	...	q
φ	–	$\varphi^{(1)}$	$\varphi^{(2)}$...	$\varphi^{(q)}$
\bar{y}_1^*	\bar{y}_1	$\bar{y}_1^{(1)}$	$\bar{y}_1^{(2)}$...	$\bar{y}_1^{(q)}$
\bar{y}_2^*	\bar{y}_2	$\bar{y}_2^{(1)}$	$\bar{y}_2^{(2)}$...	$\bar{y}_2^{(q)}$
\vdots	\vdots	\vdots	\vdots	...	\vdots
\bar{y}_p^*	\bar{y}_p	$\bar{y}_p^{(1)}$	$\bar{y}_p^{(2)}$...	$\bar{y}_p^{(q)}$
რობასტული საშუალო x^*	$x^{*(0)}$	$x^{*(1)}$	$x^{*(2)}$...	$x^{*(q)}$
რობასტული სტანდარტული გადახრა s	$s^{*(0)}$	$s^{*(1)}$	$s^{*(2)}$...	$s^{*(q)}$

გამოვითვალოთ ამ მონაცემების საწყისი რობასტული საშუალო მნიშვნელობა $x^{*(0)}$ და რობასტული სტანდარტული გადახრა $s^{*(0)}$ შემდეგნაირად:

$$x^{*(0)} = \text{მედიანა } \bar{y}_i \quad (i=1, 2, \dots, p); \tag{5}$$

$$s^{*(0)} = 1,483 \times |\bar{y}_i - x^{*(0)}| \text{ მნიშვნელობათა მედიანა } (i=1, 2, \dots, p). \tag{6}$$

მოვებნოთ პირველი ახალი მნიშვნელობები $x^{*(1)}$ და $s^{*(1)}$ შემდეგნაირად:

ა) გამოვითვალოთ

$$\varphi^{(1)} = 1,5 \times s^{*(0)}; \tag{7}$$

ბ) ყოველი \bar{y}_i -ის სანაცვლოდ ($i=1, 2, \dots, p$) მე-3 ცხრილის შესაბამე სვეტში ჩავწეროთ

$$\bar{y}_i^{(1)} = \begin{cases} x^{*(0)} - \varphi^{(1)} & \text{თუ } \bar{y}_i < x^{*(0)} - \varphi^{(1)}; \\ x^{*(0)} + \varphi^{(1)} & \text{თუ } \bar{y}_i > x^{*(0)} + \varphi^{(1)}; \\ \bar{y}_i & \text{სხვა შემთხვევებში;} \end{cases} \tag{8}$$

გ) გამოვითვალოთ $x^{*(1)}$ და $s^{*(1)}$ -ის ახალი მნიშვნელობები:

$$x^{*(1)} = \sum_{i=1}^p \bar{y}_i^{(1)} / p ; \quad (9)$$

$$s^{*(1)} = 1,134 \sqrt{\sum_{i=1}^p (\bar{y}_i^{(1)} - x^{*(1)})^2 / (p-1)} . \quad (10)$$

x^* და s^* -ის რობასტული შეფასებები შეგვიძლია მივიღოთ იტერაციული გათვლებით, ე.ი. გათვლების გამორებით ა), ბ) და გ) პუნქტების მიხედვით რამდენჯერმე. ასე, მაგალითად, მეორე იტერაციაზე

$$\varphi^{(2)} = 1,5 \times s^{*(1)} ;$$

$$\bar{y}_i^{(2)} = \begin{cases} x^{*(1)} - \varphi^{(2)} & \text{თუ } \bar{y}_i^{(1)} < x^{*(1)} - \varphi^{(2)} ; \\ x^{*(1)} + \varphi^{(2)} & \text{თუ } \bar{y}_i^{(1)} > x^{*(1)} + \varphi^{(2)} ; \\ \bar{y}_i^{(1)} & \text{სხვა შემთხვევებში;} \end{cases}$$

$$x^{*(2)} = \sum_{i=1}^p \bar{y}_i^{(2)} / p ;$$

$$s^{*(2)} = 1,134 \sqrt{\sum_{i=1}^p (\bar{y}_i^{(2)} - x^{*(2)})^2 / (p-1)} \quad \text{და ა.შ.}$$

გათვლები უნდა გავაგრძელოთ მანამ, სანამ ცვლილებები x^* და s^* -ის შეფასებებში გამოთვლის ერთი ეტა-პიდან მეორეზე გადასვლისას არ გახდება მცირე. ეს ამოცანა მარტივად წყდება კომპიუტერის გამოყენებით.

საბოლოო რობასტული მნიშვნელობების მოძებნის შემდეგ შეგვიძლია ჩავთვალოთ

$$s_d = s^* . \quad (11)$$

შემდეგ ლაბორატორიათაშორისი სტანდარტული გადახრა s_L შეგვიძლია დავადგინოთ შემდეგნაირად

$$s_L = \sqrt{s_d^2 - (s_r^2/n)} , \quad (12)$$

სადაც n – უჯრედში დაკვირვებათა შედეგების რაოდენობაა. თუ გამოსახულებას კვადრატული ფესვის ქვეშ აქვს უარყოფითი მნიშვნელობა, მაშინ უნდა ჩავთვალოთ, რომ $s_L=0$.

აღწარმოებადობის სტანდარტული გადახრა განხილული დონისათვის განისაზღვრება შემდეგნაირად

$$s_R = \sqrt{s_L^2 + s_r^2} . \quad (13)$$

3. დასკვნა

პრეციზიულობის შეფასებაზე მიმართული ექსპერიმენტის მონაცემების ანალიზის რობასტული მეთოდების გამოყენების მიზანია – გამოვითვალოთ განმეორებადობისა და აღწარმოებადობის სტანდარტული გადახრების მნიშვნელობები ისეთნაირად, რომ მათზე არ მოქმედებდეს ამოვარდნილი მონაცემები. თუ ექს-პერიმენტის მონაწილეებს დავყოფთ ისეთნაირად, რომ ერთნი წარმოადგენდნენ მაღალი ხარისხის მონაცემებს, ხოლო მეორენი კი – დაბალი ხარისხის მონაცემებს (მაგალითად, ამოვარდნების დიდი რაოდენობით) რობასტული მეთოდები უნდა გვაძლევდნენ განმეორებადობისა და აღწარმოებადობის სტანდარტული გადახრების მნიშვნელობებს, რომლებიც სამართლიანი იქნება მაღალი ხარისხის მონაცემებისათვის და არ დაექვემდებარება დაბალი ხარისხის მონაცემების ზეგავლენას (იგულისხმება, რომ დაბალი ხარისხის მიმწოდებელი მონაწილეების რაოდენობა არაა დიდი).

ლიტერატურა

1. Analytical Methods Committee. Robust statistics – How not to reject outliers. Part 1: Basic concepts. Part 2: Intra-laboratory trials. The Analyst, 114, 1989, pp. 1653-1697 (part 1), pp. 1699-1702 (part 2). Royal Society of Chemistry, London.
2. ISO 5725-5: 1998 Accuracy (trueness and precision) of measurement methods and results – Part 5: Alternative methods for the determination of the precision of a standard measurement method.
3. ISO 5725-6: 1994 Accuracy (trueness and precision) of measurement methods and results – Part 6: Use in practice of accuracy values.

APPLICATION ROBUST METHODS OF THE DATA, ANALYSIS OBTAINED IN A PRECISION EXPERIMENT

Zedginidze Irakli., Beraya Nino
Georgian Technical University

Summary

Proficiency testing by interlaboratory comparisons is used to determine the performance of individual laboratories for specific tests or measurements, and to monitor the continuing performance of laboratories. At application to the data received as a result of experiment by an estimation precision of criteria Cochren and Grubbs, some data can be excluded. This decision essentially influences such characteristics of a standard method of measurements as value of standard deviations of repeatability and reproducibility. Stated robust methods allow to analyze the data in such a manner that it is not required to accept the decisions on exception of any data. The robust methods given by values of standard deviations of repeatability and to reproducibility, which are valid for data of high quality and are not exposed to influence of the data poor quality. The program ensuring in an automatic mode data processing of supervision by robust method according to algorithm, stated in clause is received.

ПРИМЕНЕНИЕ РОБАСТНЫХ МЕТОДОВ АНАЛИЗА ДАННЫХ, ПОЛУЧЕННЫХ В РЕЗУЛЬТАТЕ ЭКСПЕРИМЕНТА ПО ОЦЕНКЕ ПРЕЦИЗИОННОСТИ

Зедгинидзе И.Г., Берая Н.О.
Грузинский технический университет

Резюме

Проверки на качество проведения испытаний посредством межлабораторных сличений применяются для определения качества выполнения отдельными лабораториями определенных испытаний или измерений, и для мониторинга дальнейшей деятельности лабораторий. При применении к данным, полученным в результате эксперимента по оценке прецизионности критериев Кохрена и Граббса, некоторые данные могут быть исключены. Это решение существенно влияет на такие характеристики стандартного метода измерений как значения стандартных отклонений повторяемости и воспроизводимости. Изложенные робастные методы позволяют анализировать данные таким образом, что не требуется принимать решения об исключении каких-либо данных. Робастные методы дают значения стандартных отклонений повторяемости и воспроизводимости, которые действительны для данных высокого качества и не подвергаются влиянию данных низкого качества. Получена программа, обеспечивающая в автоматическом режиме обработку данных наблюдений робастным методом согласно изложенному в статье алгоритму.