▪ СОВРЕМЕННЫЕ МЕТОДЫ АНАЛИЗА ВЕЩЕСТВ И МАТЕРИАЛОВ / MODERN METHODS OF ANALYZING SUBSTANCES AND MATERIALS

DOI: 10.20915/2077-1177-2019-15-4-49-52
УДК 519.254

ОЦЕНКА СОГЛАСОВАННОГО ЗНАЧЕНИЯ РЕЗУЛЬТАТОВ МЕЖЛАБОРАТОРНЫХ ИЗМЕРЕНИЙ С МИНИМАЛЬНЫМ УВЕЛИЧЕНИЕМ ИХ НЕОПРЕДЕЛЁННОСТИ

© П. М. Аронов

ФГУП «Уральский научно-исследовательский институт метрологии» (ФГУП «УНИИМ»),
г. Екатеринбург, Российская Федерация
E-mail: AronovPM@uniim.ru

Поступила в редакцию – 20 июня 2019 г., после доработки – 22 июля 2019 г.
Принята к публикации – 10 сентября 2019 г.

В данной статье автором предложен метод оценивания согласованного значения результатов межлабораторных измерений, позволяющий уменьшить неопределённость оценки по сравнению с известными методами. Метод основан на выделении в несогласованных данных наибольшего согласованного подмножества результатов, неопределённости которых не увеличиваются при вычислении согласованного значения.

Ключевые слова: межлабораторные измерения, несогласованные данные, согласованное значение, неопределённость

DOI: 10.20915/2077-1177-2019-15-4-49-52

ESTIMATION OF CONSENSUS VALUE OF INTERLABORATORY MEASUREMENT RESULTS ACCOMPANIED BY A MINIMUM INCREASE IN ASSOCIATED UNCERTAINTY

© Peter M. Aronov

Ural Scientific Research Institute for Metrology (UNIIM),
Ekaterinburg, Russian Federation
e-mail: AronovPM@uniim.ru

In this article, the author proposed a method for estimating the consensus value of interlaboratory measurement results, which makes it possible to reduce the uncertainty of the consensus value in comparison with the known

Ссылка при цитировании:
Аронов П. М. Оценка согласованного значения результатов межлабораторных измерений с минимальным увеличением их неопределённости // Стандартные образцы. 2019. Т. 15. № 4. С. 49–52. DOI 10.20915/2077-1177-2019-15-4-49-52.
For citation:
Aronov P. M. Estimation of consensus value of interlaboratory measurement results accompanied by a minimum increase in associated uncertainty. Reference materials. 2019; 15(4): 49–52. DOI 10.20915/2077-1177-2019-15-4-49-52 (In Russ.).

* Материалы данной статьи переведены на английский язык и опубликованы в сборнике «Reference Materials in Measurement and Technology», издательство Springer.

methods. The method is based on the selection of the largest consist subset of the results, the uncertainties of which do not increase when calculating the agreed value in the inconsistent data.

Keywords: interlaboratory measurements, inconsistent data, consensus value, uncertainty

Применение межлабораторного эксперимента при характеризации стандартных образцов и другие задачи метрологии приводят к необходимости оценивания значения измеряемой величины μ по данным измерений $\{x_i, u_i\}$, $i=\overline{1,n}$ (результат измерения и его стандартная неопределённость), полученных в n независимых лабораториях. Часто предполагают нормальность распределений погрешностей. В этом случае оценкой максимального правдоподобия значения измеряемой величины является взвешенное среднее

$$\overline{x}_0 = u_0^2 \sum_{i=1}^{n} u_i^{-2} x_i\ , \tag{1}$$

где

$$u_0^2 = \left(\sum_{i=1}^{n} u_i^{-2}\right)^{-1}, \tag{2}$$

есть квадрат стандартной неопределённости (дисперсия) оценки (1). При этом статистика

$$g = \sum_{i=1}^{n} \frac{(x_i - \overline{x}_0)^2}{u_i^2} \tag{3}$$

имеет хи-квадрат распределение и должен выполняться хи-квадрат тест, т. е.

$$g \le \chi^2(P; n-1), \tag{4}$$

где $\chi^2(P; n-1)$ – P – квантиль хи-квадрат распределения с $n-1$ степенями свободы. В этом случае считается, что данные $\{x_i, u_i\}$, $i=\overline{1,n}$ согласованы. Если условие (4) не выполняется, то данные не согласованны. Это говорит о том, что результаты измерений некоторых лабораторий содержат систематические погрешности, не включённые в заявленные неопределённости.

Несогласованность данных, то есть разброс результатов измерений x_i между лабораториями может быть смоделирован с помощью нормального распределения с центром в искомом значении измеряемой величины μ и межлабораторной дисперсией σ^2. В этом случае для согласования данных стандартные неопределённости каждой лаборатории увеличивают с u_i^2 до $u_i^2 + \sigma^2$, $i=\overline{1,n}$ и далее вычисляется взвешенное среднее $\overline{x}_{\sigma^2}$ и его дисперсия $u_{\sigma^2}^2$ по формулам (1) и (2) с новыми весами. Известны методы оценивания параметра σ^2, например метод максимального правдоподобия, Der Simonian-Laird или алгоритм Mandel – Paule [1].

В последнем значение параметра σ^2 находят из уравнения

$$\sum_{i=1}^{n} \frac{(x_i - \overline{x}_{\sigma^2})^2}{u_i^2 + \sigma^2} = n-1 \tag{5}$$

исходя из того, что статистика в левой части (5) при надлежащем выборе значения σ^2 имеет хи- квадрат распределение и, следовательно, математическое ожидание, равное n–1. После увеличения описанным образом неопределённостей результатов измерений лабораторий данные становятся согласованными.

Очевидным недостатком такого подхода является не всегда оправданное увеличение неопределённостей результатов измерений всех лабораторий и, как следствие, увеличение неопределённости искомой оценки значения измеряемой величины. В настоящей работе предлагается более экономный в отношении увеличения неопределённости способ согласования данных с помощью выделения в них максимальной уже согласованной части результатов измерений, неопределённости которых нет нужды увеличивать.

Воспользуемся схемой, предложенной в [2]. Если условие согласованности (4) для n лабораторий не выполняется, упорядочим пары данных $\{x_i, u_i\}$, $i=\overline{1,n}$ так, что

$$\frac{(x_1 - \overline{x}_0)^2}{u_1^2} < \frac{(x_2 - \overline{x}_0)^2}{u_2^2} < \ldots < \frac{(x_n - \overline{x}_0)^2}{u_n^2} \tag{6}$$

Отбросим данные лаборатории с номером n и заново пересчитаем оценки (1), (2) и хи-квадрат статистику (3) для n–1 лабораторий. Будем повторять процесс, пока при некотором k впервые выполнится условие согласованности

$$\begin{gathered}\sum_{i=1}^{k} \frac{(x_i - \overline{x}_k)^2}{u_i^2} \le \chi^2(P; k-1)\\ \overline{x}_k = \left(\sum_{i=1}^{k} u_i^{-2}\right)^{-1} \sum_{i=1}^{k} u_i^{-2} x_i\end{gathered} \tag{7}$$

Таким образом, мы выделили максимальное подмножество согласованных данных возможным размером $k = 2, \ldots, n$. Далее в [2] предлагается считать данные, не входящие в найденное подмножество, статистическими выбросами и отбросить их, полагая оценкой согласованного значения $\overline{x}_k$. Это оправданно если размер согласованного подмножества велик, а число выбросов мало, но для общего случая такой подход представляется слишком расточительным. Мы предлагаем не отбрасывать результаты лабораторий, не попавшие в наибольшее согласованное подмножество, а лишь увеличить их неопределённости до уровня, необходимого для согласования.

Рассмотрим параметрическое семейство статистик

$$\overline{x}_\lambda = u_\lambda^2\Big(\sum_{i=1}^{k} u_i^{-2} x_i + \sum_{i=k+1}^{n}\left(u_i^2+\lambda\right)^{-1} x_i\Big),$$

$$u_\lambda^2 = \left(\sum_{i=1}^{k} u_i^{-2} + \sum_{i=k+1}^{n}\left(u_i^2+\lambda\right)^{-1}\right)^{-1}, \qquad (8)$$

$$g(\lambda) = \sum_{i=1}^{k}\frac{(x_i-\overline{x}_\lambda)^2}{u_i^2} + \sum_{i=k+1}^{n}\frac{(x_i-\overline{x}_\lambda)^2}{u_i^2+\lambda}, \qquad (9)$$

где параметр $\lambda \geq 0$ задаёт увеличение дисперсий у части данных, не входящих в наибольшее согласованное подмножество. При надлежащем выборе значения параметра λ (8) есть оценка измеряемой величины и её дисперсия, (9) – статистика хи-квадрат, построенная с учётом увеличения дисперсий несогласованной части данных. В предположении, что разброс результатов измерений в группе данных, не входящих наибольшее согласованное подмножество описывается нормальным распределением с дисперсией σ^2, статистика (8) при значении параметра $\lambda = \sigma^2$ имеет хи-квадрат распределение с $n–1$ степенями свободы и математическим ожиданием равным $n–1$. Это даёт основание по аналогии с Mandel – Paule алгоритмом (5) выбрать значение параметра λ из уравнения

$$g(\lambda) = n–1 \qquad (10)$$

Трудность заключается в том, что уравнение (10) в отличие от уравнения (5) не всегда имеет решение. Дифференцируя (9), не трудно показать, что

$$\frac{dg(\lambda)}{d\lambda} = -\sum_{i=k+1}^{n}\frac{(x_i-\overline{x}_\lambda)^2}{(u_i^2+\lambda)^2} < 0 \qquad (11)$$

и, следовательно, функция $g(\lambda)$ монотонно убывает с ростом λ, причём

$$\lim_{\lambda\to\infty} g(\lambda) = \sum_{i=1}^{k}\frac{(x_i-\overline{x}_k)^2}{u_i^2} \qquad (12)$$

Отсюда с учётом условия (7) для наибольшего согласованного подмножества следует, что уравнение (10) имеет решение тогда и только тогда, когда

$$\sum_{i=1}^{k}\frac{(x_i-\overline{x}_k)^2}{u_i^2} \leq \chi^2(P;k-1) < n-1 \qquad (13)$$

Выполнение условия (13) зависит только от соотношения числа лабораторий n и размера найденного наибольшего согласованного подмножества k. При достаточно малых k оно выполняется и решение уравнения (10) легко может быть найдено численно. Оно является статистической оценкой межлабораторной дисперсии σ^2. При подстановке его в формулы (8) мы получаем аналог Mandel-Paule оценки согласованного значения и квадрат его стандартной неопределённости.

Если условие (13) не выполняется и уравнение (10) не имеет решения, то необходимое значение λ можно найти из неравенства

$$g(\lambda) \leq \chi^2(P;n-1), \qquad (14)$$

которое непосредственно имеет смысл условия согласованности данных всех n лабораторий. Неравенство (14) всегда имеет решение. Покажем это. Из (12) и условия согласованности (7) вытекает, что для произвольного $\varepsilon > 0$ и достаточно больших λ выполняется неравенство

$$g(\lambda) \leq \chi^2(P;k-1) + \varepsilon \qquad (15)$$

Из свойств хи-квадрат распределения следует, что $\chi^2(P;k-1) < \chi^2(P;n-1)$ если $k < n$. Выберем $\varepsilon = \chi^2(P,n-1) - \chi^2(P;k-1)$ и при подстановке в (15) получим доказываемое неравенство (14).

В случае когда оценка для параметра σ^2 выбирается путём решения неравенства (14), для квадрата неопределённости взвешенного среднего (8) следует использовать корректирующий множитель Бирге

$$u_{cor}^2(\overline{x}_{\sigma^2}) = u_{\sigma^2}^2\,\frac{g(\sigma^2)}{n-1} \leq u_{\sigma^2}^2\,\frac{\chi^2(P;n-1)}{n-1} \qquad (16)$$

Таким образом, предлагаемый алгоритм при согласованных данных ($k = n$) даёт стандартное решение (1), при несогласованных данных ($1 < k < n$) по построению гарантирует меньшую неопределённость, чем рекомендуемые в [1] методы и лишь в случае отсутствия согласованного множества ($k \leq 1$) эквивалентен им (совпадает с Mandel – Paule алгоритмом).

Проиллюстрируем работу предлагаемого алгоритма на примере оценки согласованного значения результатов межлабораторных измерений высшей теплоты сгорания для стандартного образца состава каменного угля 20 лабораториями.

На рис. 1 результаты лабораторий и их расширенные неопределённости выстроены в соответствии с алгоритмом так, что в левой части оказалось выделенное наибольшее согласованное подмножество. В данном случае оно состоит из 10 лабораторий, то есть составляет половину от числа участников эксперимента. Оставшиеся участники в соответствии с алгоритмом расположены в порядке возрастания несогласованности их результатов. Вертикальным пунктиром показано увеличение расширенной неопределённости этих результатов для согласования данных в соответствии с алгоритмом.

В данном случае оценка межлабораторной дисперсии σ^2 была найдена как решение уравнения (10), так как для $P = 0.95$, $k = 10$, $n = 20$ условие (13)

$$\chi^2(0.95;9) = 16.9 < 19$$

выполняется и уравнение (10) имеет решение (рис. 1). Соответствующее согласованное значение на графике изображено в виде сплошной горизонтальной линии, а границы его расширенной неопределённости в виде горизонтальных пунктирных линий.

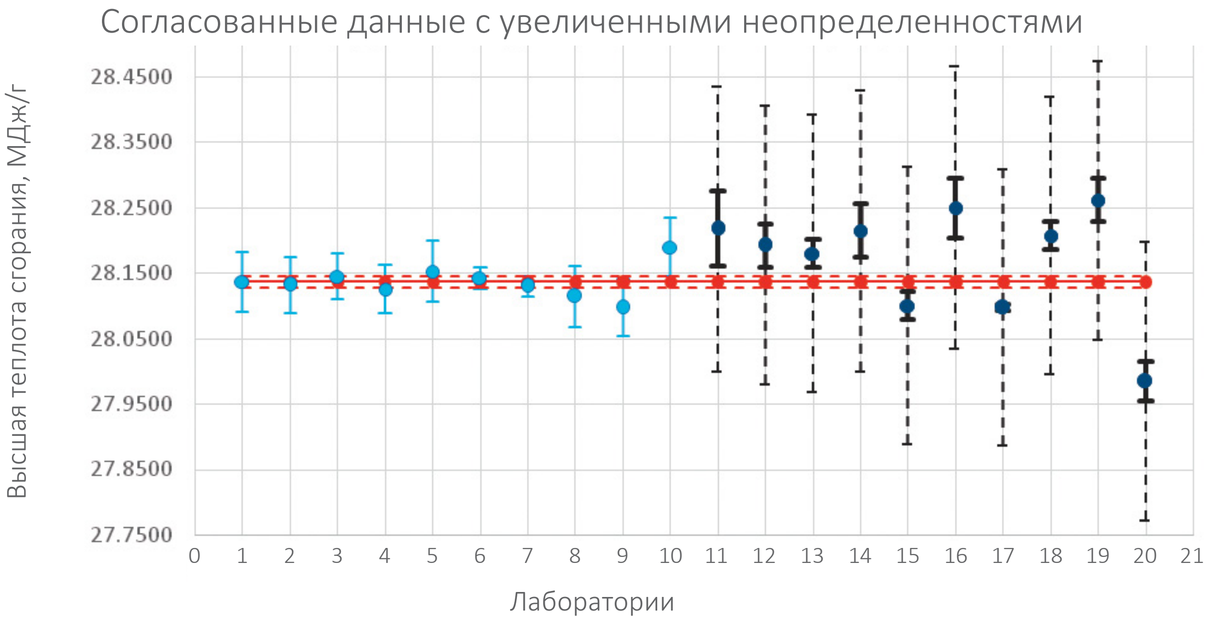

Рис. 1. Стандартный образец состава каменного угля

Fig. 1. Reference material of coal composition

ЛИТЕРАТУРА

1. CCQM Guidance note: Estimation of consensus KCRV and associated Degrees of Equivalence. Version: 10, Date: 2013-04-12

2. Cox M. G. The evaluation of key comparison data: determining the largest consistent subset// Metrologia. 2007.V.44. P. 187–200.

REFERENCES

1. CCQM Guidance note: Estimation of consensus KCRV and associated Degrees of Equivalence. Version: 10, 12 Apr 2013 .

2. Cox M. G. The evaluation of key comparison data: determining the largest consistent subset. Metrologia 2007;44:187–200.

ИНФОРМАЦИЯ ОБ АВТОРАХ

Аронов Петр Михайлович – ведущий научный сотрудник лаборатории математического моделирования измерительных процессов и систем ФГУП «Уральского научно-исследовательского института метрологии».
Российская Федерация, 620075, г. Екатеринбург, ул. Красноармейская, 4
e-mail: AronovPM@uniim.ru

INFORMATION ABOUT THE AUTHORS

Petr M. Aronov – Leading Researcher, Laboratory of Mathematical Modeling of Measurement Processes and Systems, Ural Scientific Research Institute for Metrology (UNIIM).
4 Krasnoarmeyskaya St., Ekaterinburg, 620075, Russian Federation
e-mail: AronovPM@uniim.ru