

# Novas librerías para o control estatístico da calidade (qcr) e estudos interlaboratorio (ILS) no contorno da Industria 4.0

**Salvador Naya,**

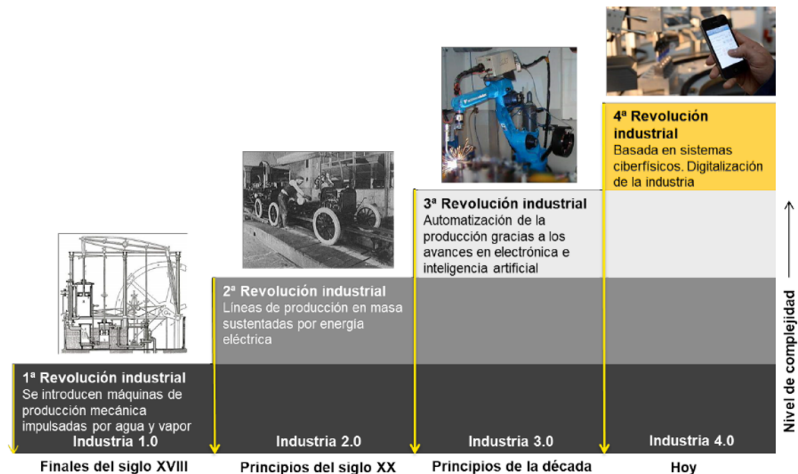
Miguel Flores, Javier Tarrío, Rubén Fdez-Casal

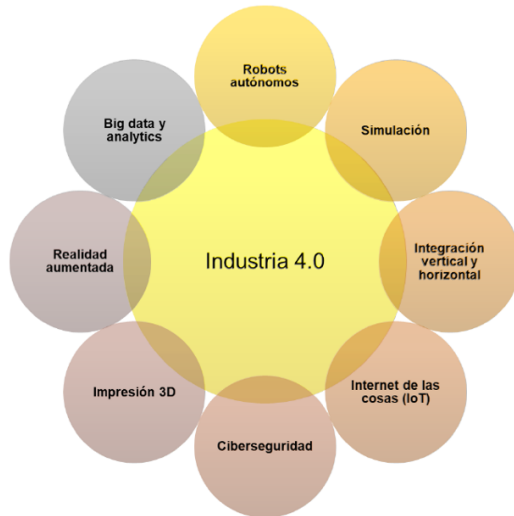
Santiago de Compostela. 25 de Outubro de 2018

# Contenidos

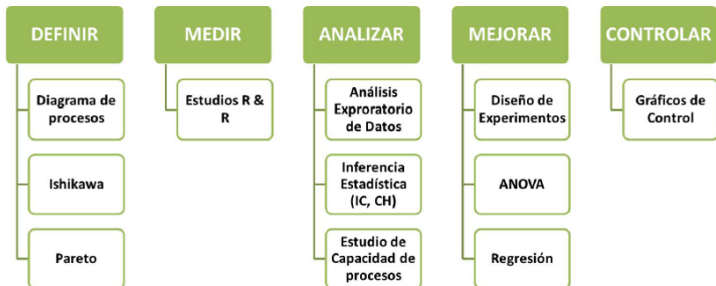
- 1 Retos actuales CEC en la Industria 4.0
- 2 ILS: Estudios Interlaboratorio
  - Nueva metodología para la detección de laboratorios atípicos
  - Estudio de simulación
- 3 Propuesta de gráficos de control para datos funcionales
  - Introducción
  - Fase I
  - Fase II
- 4 Paquetes desarrollados en R. ILS, qcr y qcr.fda
  - Introducción
  - qcr
  - ILS
  - fda.qcr
- 5 Conclusiones
- 6 Bibliografía

# Industria 4.0

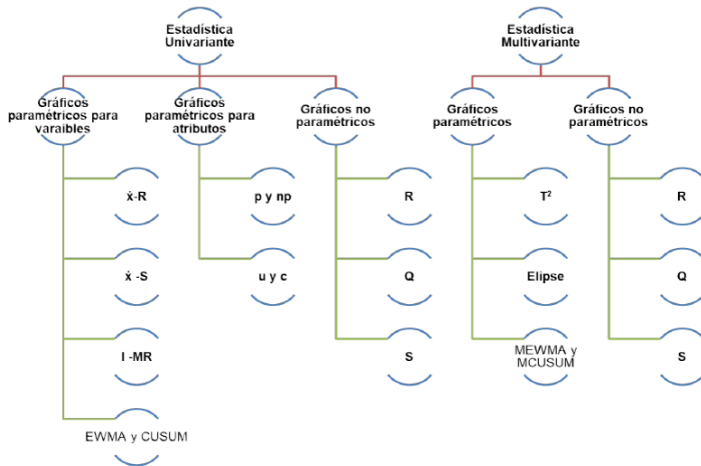




# Ciclo DMAIC según Seis Sigma



# Tipos de gráficos de control



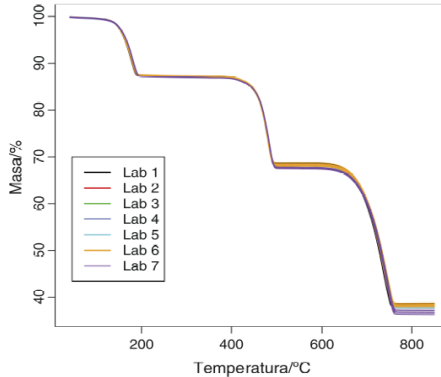
# Nuevo contexto del CEC con datos funcionales

## Diseño del estudio interlaboratorio

Laboratorio 1	Analizador STA con una calibración antigua
Laboratorio 2	Núcleo de laboratorios que proporcionan datos consistentes con un instrumento SDT
Laboratorio 3	
Laboratorio 4	
Laboratorio 5	
Laboratorio 6	Analizador SDT con una calibración antigua
Laboratorio 7	Instrumento con una calibración sesgada 2°C

# Ejemplo de datos funcionales para ILS

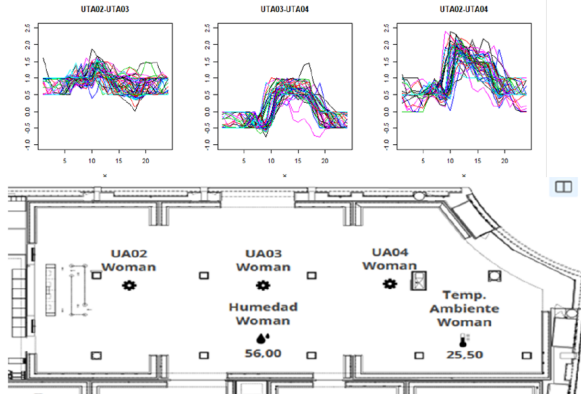
Resultado: Curvas termogravimétricas



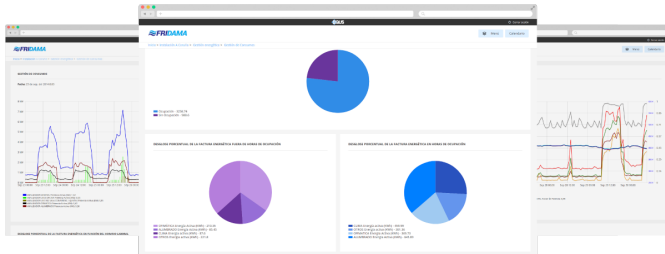


## Ejemplo de datos funcionales para ILS

Consumos energéticos de las tres unidades de refrigeración, cada una con sus sensores de temperatura y contadores de energía consumida.



Gráfica representativa de los valores históricos tanto de las variables a controlar.



# ILS: Interlaboratory Study. Program ILS

# Nuevo enfoque FDA para la detección de atípicos en Estudios Interlaboratorio (ILS)

## Pruebas de consistencia

$$y = m + B + \epsilon$$

Donde  $m$  es la media global,  $B$  es la componente de sesgo del laboratorio bajo condiciones de repetibilidad, y  $\epsilon$  el error aleatorio que ocurre en cada medida bajo condiciones de repetibilidad. La varianza de reproducibilidad  $\sigma_R^2$  esta dada por:

$$\sigma_R^2 = \sigma_r^2 + \sigma_B^2$$

La varianza de repetibilidad  $\sigma_r^2$ , es la variabilidad intralaboratorio, mientras que la varianza interlaboratorio es  $\sigma_B^2$ .

Fuente	Media cuadrática	Estimación
Laboratorio	$MS_B = \frac{\sum_{i=1}^L n_i (\bar{y}_i - \bar{\bar{y}})^2}{(L-1)}$ , $S_B^2 = \frac{MS_B - MS_r}{\bar{n}}$	$\sigma_r^2 + \bar{n} \sigma_B^2$
Residuo (repetibilidad)	$MS_r = \frac{\sum_{i=1}^L \sum_{j=1}^{n_i} (y_{ij} - \bar{y}_i)^2}{(N-L)}$ , d.f. = (N - L)	$\sigma_r^2$

La tabla de análisis de la varianza con  $\bar{n} = \frac{1}{L-1} (\sum_{i=1}^L n_i - \frac{\sum_{i=1}^L n_i^2}{n_i})$ , y  $N = \sum_{i=1}^L n_i$ . Si  $S_B^2 < 0$ , entonces  $S_B^2 = 0$ .

## Estadístico $h$ de Mandel

Sea  $(x_1, x_2, \dots, x_L)$  una muestra de  $L$  observaciones. Los  $x_l, \text{con } l = 1, \dots, L$  son modelados como realizaciones de variables aleatorias  $X_l, \text{con } l = 1, \dots, L$ , independientemente distribuidas según una distribución normal  $N(\mu, \sigma^2)$ . Se define el estadístico  $h$  de Mandel como:

$$H_l = \frac{X_l - \bar{X}}{S}; l = 1, \dots, L$$

que tiene la misma distribución para todo  $l = 1, \dots, L$ .

## Valor crítico

$$h_{I;1-\frac{\alpha}{2}} = \frac{(L-1)t_{L-2;1-\frac{\alpha}{2}}}{\sqrt{L(t_{L-2;1-\frac{\alpha}{2}}^2 + L-2)}}$$

Donde  $t_{L-2;1-\frac{\alpha}{2}}$  es el cuantil  $(1 - \frac{\alpha}{2})$  de la distribución  $t$  con  $\nu = L - 2$  grados de libertad.

## Estadístico $k$ de Mandel

Sea  $(S_1^2, S_2^2, \dots, S_L^2)$  las  $L$  varianzas muestrales cada una basada en  $n$  valores observados. Bajo la hipótesis de que los valores de las observaciones  $x_{ji}; j = 1, 2, \dots, L, i = 1, 2, \dots, n$  son realizaciones de variables aleatorias  $X_{ji}$  las cuales cada  $j$  son idénticamente distribuidas e independientes acorde a una distribución normal  $N(\mu_j, \sigma^2)$ , las varianzas muestrales  $S_j^2; j = 1, \dots, L$  divididas por  $\sigma^2$  siguen una distribución  $\chi^2/\nu$  con  $\nu = n - 1$  grados de libertad. El estadístico  $k$  de Mandel se define como:

$$k_l = \frac{S_l}{\sqrt{\bar{S}^2}}; j = 1, 2, \dots, L$$

con  $\bar{S}^2 = \frac{\sum_{l=1}^L S_l^2}{L}$ , con la misma distribución para todo  $l = 1, \dots, L$ .

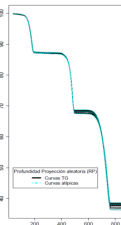
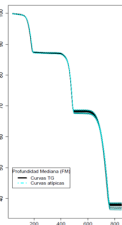
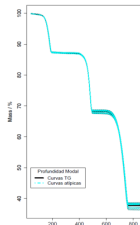
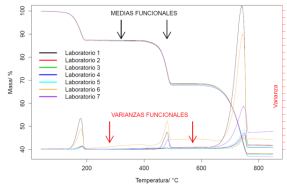
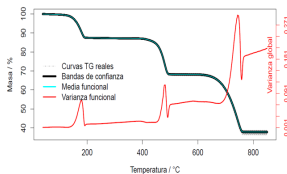


## Valor crítico

$$k_{l,n;1-\alpha} = \sqrt{\frac{L}{\left(1 + \frac{L-1}{F_{v_1, v_2; \alpha}}\right)}} \quad (1)$$

Donde  $F_{v_1, v_2; \alpha}$  es el  $\alpha$ -cuantil de la distribución  $F$  con  $v_1 = (L-1)(n-1)$  y  $v_2 = n-1$  grados de libertad.

# Nuevo enfoque FDA para la detección de atípicos en Estudios Interlaboratorio (ILS)



# Nuevo enfoque FDA para la detección de atípicos en Estudios Interlaboratorio (ILS)

Sea  $\{X_1^l(t), \dots, X_n^l(t)\}$  un conjunto de observaciones que se obtienen para  $L$  laboratorios  $l = 1, \dots, L$ . Se seleccionan  $n$  muestras aleatorias en cada laboratorio. Los estadísticos funcionales  $H_l(t)$  y  $K_l(t)$  se calculan para cada laboratorio y son el punto de partida para contrastar las hipótesis nulas para un estudio R & R.

## Hipótesis de reproducibilidad

- $H_0 : \mu_1(t) = \mu_2(t) = \dots = \mu_L(t)$
- $H_l(t) = \frac{X_i^l(t) - \bar{X}(t)}{S_l(t)}; l = 1, \dots, L$
- $d_l^H = \|H_l(t)\| = \left( \int_a^b H_l(t)^2 dt \right)^{\frac{1}{2}}$

# Nuevo enfoque FDA para la detección de atípicos en Estudios Interlaboratorio (ILS)

## Hipótesis de repetibilidad

- $H_0 : \sigma_1^2(t) = \sigma_2^2(t) = \dots = \sigma_L^2(t)$
- $K_l(t) = \frac{S_l(t)}{\sqrt{\hat{S}^2(t)}}; l = 1, \dots, L$
- $d_l^K = \|K_l(t)\|$

## Nuevo enfoque FDA: Bootstrap

- Eliminar observaciones atípicas (en este caso curvas), agrupando todas las curvas en un sólo conjunto (hipótesis nula).
- Utilizando el bootstrap suavizado se obtienen muestras bootstrap de tamaño  $L \times n$ . Las observaciones bootstrap se asignan aleatoriamente a los laboratorios en cada muestra bootstrap.
- Para cada muestra bootstrap, los estadísticos funcionales  $H_l^*(t)$  y  $K_l^*(t)$ , y los correspondiente estadísticos de prueba,  $d_l^{H*}$  y  $d_l^{K*}$  se calculan para cada laboratorio  $l = 1, \dots, L$ .
- Aproximar los valores críticos  $c_H$  y  $c_K$  de los estadísticos de prueba ( $d_l^{H*}$  y  $d_l^{K*}$ ) del percentil empírico  $100(1 - \alpha)/L$  de la distribución de las replicas  $L \times B$  bootstrap correspondientes.
- Finalmente, se calculan las bandas de confianza para los estadísticos  $H(t)$  y  $K(t)$ . Se rechaza, sí  $d_l^H = \|H(t)\| > c_H$ ,  $d_l^K > c_K$

# Nuevo enfoque FDA: Estudio de simulación basado en curvas termogravimétricas

## Validación del nuevo enfoque FDA

$$Y(t) = \mu(t) + \sigma(t)\epsilon(t), \quad \text{donde } t \in [0, 1]$$

$$\mu(t) = \frac{c}{(1 + \exp(b(t - m)))^{\frac{1}{\tau}}}$$

$$\sigma(t)^2 = c_0(5 + v(1 - (\frac{t}{0.5} - 1)^2)^3)$$

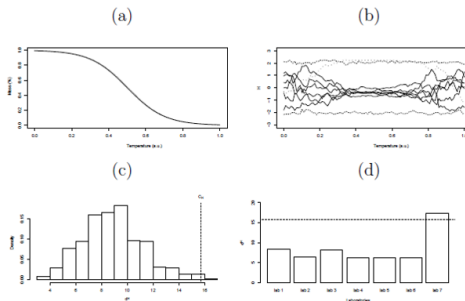
donde  $c_0 = 10^{-6}$ . Adicionalmente,  $\epsilon$  es un proceso estacionario de segundo orden definido con media 0 y matriz de covarianza

$$\Sigma = \exp(-|s - t|/0.3)$$

## Hipótesis de reproducibilidad

$$H_0 : m_0 = 0.5$$

$$H_1 : m_1 = m_0(1 + \delta_H), \text{ donde } -0.005 \leq \delta_H \leq 0.005$$



Medias teóricas para curvas TG simuladas bajo la hipótesis nula  $H_0 : m_0 = 0.5$  y la alternativa

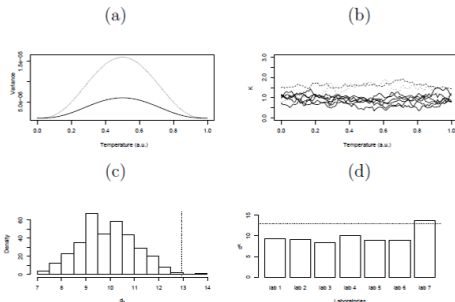
$H_1 : m_1 = m_0(1 + \delta_H)$  ( $\delta_h = 0.005$ ), (b) estadística funcional  $H(t)$  realizaciones para cada uno de los 7

laboratorios simulados, (c)  $d_h$  distribución estadística estimada por el remuestreo bootstrap, y (d) realización

## Hipótesis de repetibilidad

$$H_0 : v_0 = 5$$

$$H_1 : v_1 = v_0(1 + \delta_K), \text{ donde } -0.005 \leq \delta_K \leq 0.005$$



Medias teóricas para curvas TG simuladas bajo la hipótesis nula  $H_0 : v_0 = 5$  y la alternativa,

$H_1 : v_1 = v_0(1 + \delta_K)$  ( $\delta_K = 2$ ), (b)  $H(t)$  realizaciones estadísticas funcionales para cada uno de los 7 laboratorios

simulados, (c)  $d_K$  distribución estadística estimada por remuestreo bootstrap, y (d) realización del estadístico  $d_K$

para cada muestra de laboratorio



# Propuesta de gráficos de control para datos funcionales

# Propuesta de una metodología de gráficos de control basada en datos funcionales

$$H_0 : \mu = \mu_0 \quad \text{versus} \quad H_\alpha : \mu \neq \mu_0$$

$$\text{UCL} = \mu_w + L\sigma_w$$

$$\text{CL} = \mu_w$$

$$\text{LCL} = \mu_w - L\sigma_w$$

## Fase I: Estabilización (Proceso bajo control)

Sea  $X$  una variable aleatoria funcional que toma valores en un espacio funcional  $\mathcal{E} = L^2(T)$ ,  $T \subset \mathbf{R}$ .

$$\{\mathcal{X}_1(t), \mathcal{X}_2(t), \dots, \mathcal{X}_n(t)\}$$

$$\begin{aligned} H_0 : \mathcal{X}_i(t) &\stackrel{d}{=} \mathcal{X}_j(t), \forall i, j \in \{1, \dots, n\} \\ H_a : \mathcal{X}_i(t) &\stackrel{d}{\neq} \mathcal{X}_j(t), \forall i, j \in \{1, \dots, n\} \end{aligned} \quad (2)$$

$$\begin{aligned} H_0 : \mathcal{X}_i(t) &\stackrel{d}{=} \mathcal{X}_j(t) \quad \forall i, j \in \{1, \dots, n\} \\ H_a : \begin{cases} \mathcal{X}_i(t) \stackrel{d}{=} \mathcal{X}_j(t) & \forall i, j \in \{1, \dots, \tau\} \\ \mathcal{X}_i(t) \stackrel{d}{\neq} \mathcal{X}_j(t) & \forall i, j \in \{\tau + 1, \tau + 2, \dots, n\} \end{cases} \end{aligned} \quad (3)$$

En la Fase I, se considera la variable aleatoria funcional  $\mathcal{X}$ , de la cual se selecciona una muestra aleatoria  $\{\mathcal{X}_1(t), \mathcal{X}_2(t), \dots, \mathcal{X}_n(t)\}$ . A partir de esta, los pasos para la fase I son:

- 1 Se obtiene las profundidades del conjunto de datos:  $D(\mathcal{X}_i)_{i=1}^n$  y se realiza un gráfico en función de la profundidad y la temporalidad.
- 2 Se elige  $LCI$  en función del nivel de significación del gráfico de control tal que, las falsas alarmas (ausencia de valores atípicos), es decir, el porcentaje de las observaciones correctas pero mal etiquetadas como valores atípicos son aproximadamente iguales a una proporción pequeña ( $\alpha = 1\%$ ). Se grafica el  $LCI$ . Se tiene lo siguientes procedimientos para estimar el  $LCI$ .
- 3 Si se tienen algunas curvas tales que  $D(\mathcal{X}_i) \leq LCI$  para un  $LCI$  dado, entonces el proceso esta fuera de control.
- 4 Adicionalmente, se realiza un gráfico funcional con base a la envolvente funcional a partir del 99% de las curvas más profundas.

## Fase II: Monitorización

Sea  $X$  una variable aleatoria funcional que toma valores en un espacio funcional  $\mathcal{E} = L^2(T)$ ,  $T \subset \mathbf{R}$ .

$\{\mathcal{X}_1(t), \mathcal{X}_2(t), \dots, \mathcal{X}_n(t)\}$ , y  $\{\mathcal{X}_{n+1}(t), \mathcal{X}_{n+2}(t), \dots, \mathcal{X}_m(t)\}$

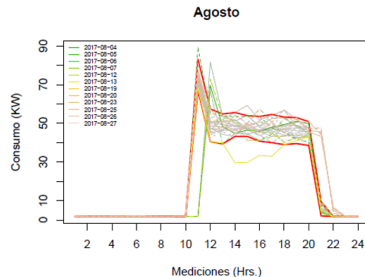
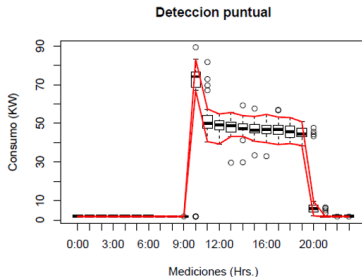
$$H_0 : F = G$$

$$H_0 : F \neq G$$

- 1 A partir de la muestra de referencia  $\{\mathcal{X}_1(t), \mathcal{X}_2(t), \dots, \mathcal{X}_n(t)\}$ , se obtienen las profundidades del conjunto de datos:  $D(\mathcal{X}_i)_{i=1}^n$  y con base a esta muestra se obtienen las profundidades de la muestra de monitorización  $D(\mathcal{X}_j)_{j=n+1}^m$ .
- 2 Calcular los estadísticos Rank:  $r_G(\mathcal{X}_{n+1}), \dots, r_G(\mathcal{X}_m)$  de la muestras de monitorización considerando como muestra de referencia  $\{\mathcal{X}_1(t), \mathcal{X}_2(t), \dots, \mathcal{X}_n(t)\}$ .

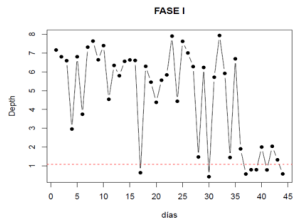
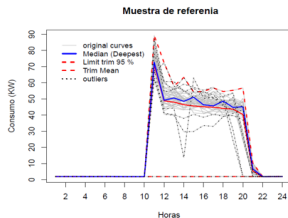
$$r_G(\mathcal{X}) = \frac{\#\{\mathcal{X}_i | D(\mathcal{X}_i) \leq D(\mathcal{X}), i = 1, \dots, n\}}{n}$$

- 3 Gráficar los valores del estadístico rank y los límites inferior  $LCL = \alpha$  y central  $LC = 0.5$ .
- 4 Monitorear el proceso, si se tiene que al menos una curvas tal que  $D(\mathcal{X}_i) \leq LCL$ , entonces el proceso esta fuera de control.
- 5 Se realiza un gráfico funcional con base a la envolvente funcional a partir del 99% de las curvas más profundas de la muestra de referencia y se sobrepone las curvas de monitorización.

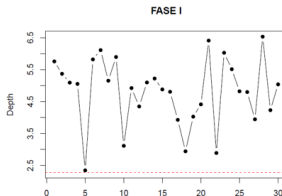
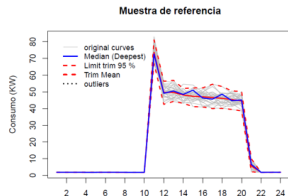


Detección de consumos energéticos en HVAC atípicos mediante la aplicación de boxplot a cada uno de los consumos horarios.

## Fuera de control



## Estabilizado



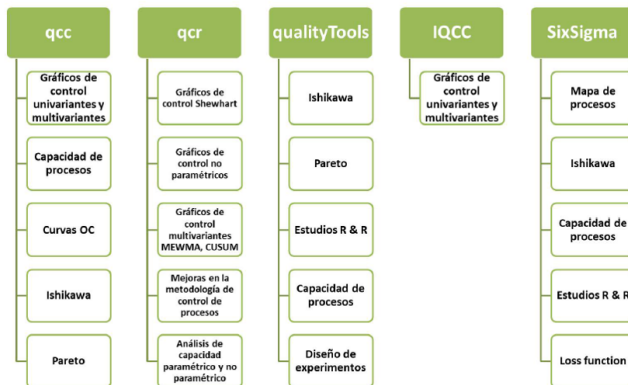


# Descripción

## Desarrollo de 3 nuevos paquetes en R para CEC

Campo	Metodología	Herramientas (Paquetes)
Multivariante	Gráficos de control Índices de capacidad	qcr (Quality Control Review)
FDA	Estudios Interlaboratorio	ILS (Interlaboratory Study)
FDA	Gráficos de control	fda.qcr (Functional Data Analysis – Quality Control Review)

# Retos actuales CEC



# Quality Control Review (qcr)

# Resultados: Quality Control Review (qcr) - Enfoque No paramétrica

## Gráficos de control de calidad

- Paramétricos ( $\bar{x}$ , one, R, S, c, np, p, g, CUSUM, EWMA, MCUSUM, MEWMA, T2)
- No paramétricos (r, Q, S)

## Índices de Capacidad

- Paramétricos (Cp, Cpk, Cpm, Cpmk)
  - Normal
  - Weibull, Exponencial, etc.
- No paramétricos (CNp, CNpk, CNpm, CNpmk)

## Package 'qcr'

June 1, 2016

Type Package

Title Quality Control Review

Version 1.0

Date 2016-06-01

Author Miguel Flores, Salvador Naya, Ruben Fernandez and Javier Tarrío

Maintainer Miguel Flores <ma.flores@outlook.com>

Depends R (>= 2.10), qcc, fda.usc, mvtnorm, qualityTools, MASS

**Description** Allows to generate Shewhart-type charts and to obtain numerical results of interest to the quality control of a process (involving continuous, attribute or count data). This package provides basic functionality for univariable and multivariable quality control analysis, including:  $\bar{x}$ ,  $\bar{x}$ -one, S, R, ewna, cusum, mewna, mcusum and T2 charts. Additionally have nonparametric control charts multivariate. Parametric and nonparametric Process Capability Indices.

License GPL (>= 2)

LazyData yes

RoxygenNote 5.0.1

NeedsCompilation no

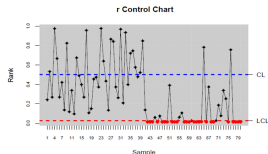
# Gráficos de control de calidad no paramétricos

## Procedimiento: Gráfico r

1. Seleccionar una muestra de tamaño  $m$  de  $Y \sim G$ .
2. Calcular las profundidades asociadas a cada punto del conjunto de datos  $D(y_1), \dots, D(y_m)$ .
3. Calcular los estadísticos Rank:  $r_{G_m}(y_1), \dots, r_{G_m}(y_m)$ .

4. Graficar los estadísticos Rank y los límites inferior ( $LCL = \alpha$ ) y Central ( $LC = 0.5$ ).
5. Monitorear el proceso. Si un estadístico Rank esta por debajo del LCI, se declara al proceso fuera de control

Paquete fda.usc: Funciones que proven las medidas de profundidades: mdepth.SD, mdepth.MhD, mdepth.RP, mdepth.LD, mdepth.TD



```
set.seed(356); mu <- -c(0, 0)
Sigma <- -matrix(c(1, 0, 0, 1), nrow = 2, ncol = 2)
u <- -c(2, 2)
S <- -matrix(c(4, 0, 0, 4), nrow = 2, ncol = 2)
G <- -rmvnorm(540, mean = mu, sigma = Sigma)
x <- -rmvnorm(40, mean = u, sigma = S)
x <- -rbind(G[501 : 540, ], x)
M <- -G[1 : 500, ]
data.npqcd <- -npqcd(x, M)
res.npqcs <- -npqcs.r(data.npqcd, method =
" Liu", alpha = 0.025)
summary(res.npqcs)
plot(res.npqcs, title = "rControlChart")
```

# Índices de capacidad del proceso (paramétrico y no paramétrico)

- Generalización de los índices de capacidad para la distribución normal por Kerstin Vannman (1995).

$$C_p(u, v) = \frac{d - u|\mu - m|}{3\sqrt{\sigma^2 + v(\mu - T)^2}}$$

- Generalización de los índices de capacidad para distribuciones arbitrarias por Pearn y Chen (1997) y Tong y Chen (1998).

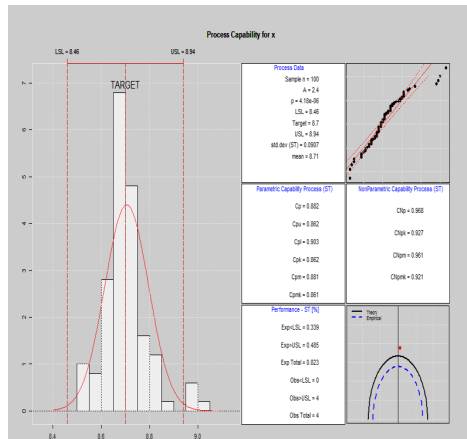
$$C_{Np}(u, v) = \frac{d - u|\mu - m|}{3\sqrt{\left(\frac{F_{99.865} - F_{0.135}}{6}\right)^2 + v(M - T)^2}}$$

- Prueba de hipótesis y gráficos de capacidad del proceso por Kerstin Vannman (2001).

$$H_0 : C_{pm} \leq k_0$$

$$H_1 : C_{pm} > k_0$$

El proceso se considerará capaz si  $\hat{C}_{pm} > c_{\alpha}$



# Resultados: Quality Control Review (qcr) – Enfoque No paramétrica

## Contribuciones

- Integración de los gráficos de control univariantes y multivariante más utilizados de carácter paramétrico en un sólo paquete.
- Implementación de funciones que facilitan las tareas de monitoreo de un proceso.
- Introducción por primera vez en R de las técnicas estadísticas (CEC) no paramétricas más contrastadas.

# Interlaboratory Study (ILS) - FDA



# Resultados: Interlaboratory Study (ILS) - FDA

## Estudios entre laboratorios: univariante

- Análisis de la varianza
- Prueba de Tukey para comparar medias entre laboratorios
- Pruebas de Grubbs y Cochran para detectar outlier
- Estadísticos  $h$  y  $k$  de Mandel

## Estudios Interlaboratorio: Funcional

- Análisis exploratorio
- Estadísticos  $H(t)$  y  $K(t)$
- Gráficos de control funcional
- Estadísticos  $h$  y  $k$  de Mandel

### Package 'ILS'

May 23, 2016

Type: Package

Title: Interlaboratory Study

Version: 0.1.0

Date: 2016-05-22

Depends: R (>= 3.1.0), multcomp, depthTools, fda.usc, MASS

**Description:** It performs interlaboratory studies (ILS) to detect those laboratories that provide non-consistent results when comparing to others.

It permits to work simultaneously with various testing materials, from standard univariate, and functional data analysis (FDA) perspectives.

The univariate approach based on ASTM E691-

08 consist of estimating the Mandel's  $h$  and  $k$  statistics to identify those laboratories that provide more significant different results, testing also the presence of outliers by Cochran and Grubbs tests, Analysis of variance (ANOVA)

techniques are provided (F and Tuckey tests) to test differences in means corresponding to different laboratories per each material.

Taking into account the functional nature of data retrieved in analytical chemistry, applied physics and engineering (spectra, thermograms, etc.)

ILS package provides a FDA approach for finding the Mandel's  $k$  and  $h$  statistics distribution by smoothing bootstrap resampling.

License: GPL (>= 2)

LazyData: yes

Author: Miguel Flores [aut, cre],

Salvador Naya [ctb],

Javier Tarrío-Saavedra [ctb],

Ruben Fernandez [ctb],

Rubi Arias [ctb]

Maintainer: Miguel Flores <ma.flores@outlook.com>

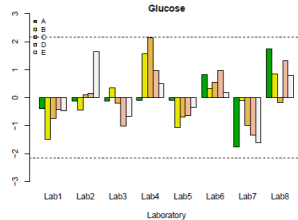
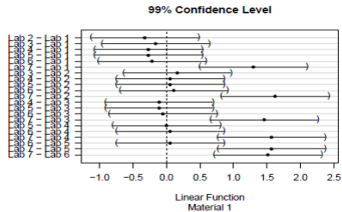
Repository: CRAN

Roxysenote: 5.0.1

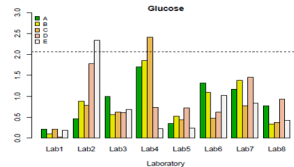
NeedsCompilation: no

## salidas del paquete ILS

### Prueba de Tukey



### Estadístico K

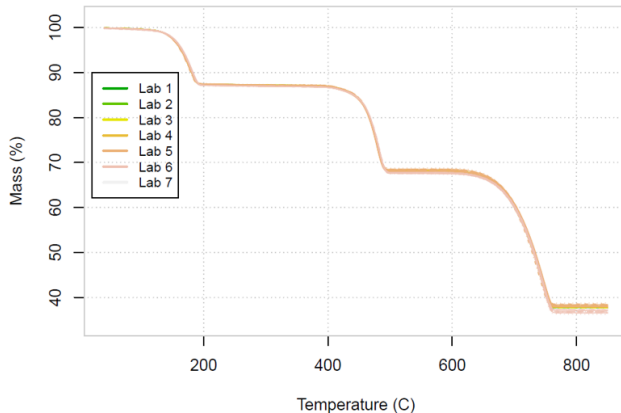


### Estadístico H

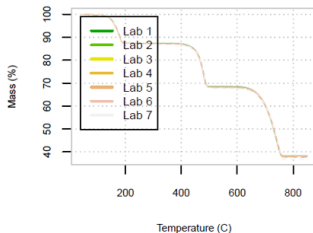
## Salidas del ILS para FDA

### Estadística Descriptiva Funcional

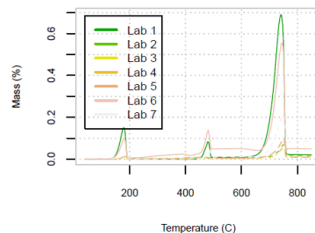
TG curves obtained from calcium oxalate



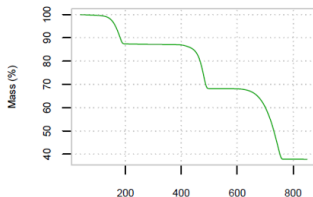
**Functional Mean by Laboratory**



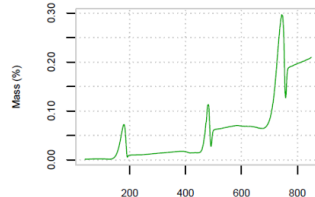
**Functional Variance by Laboratory**

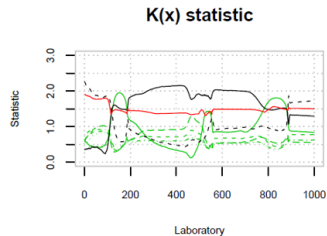
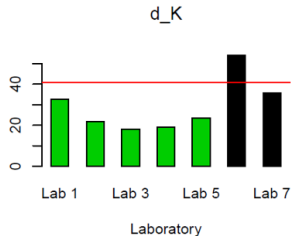
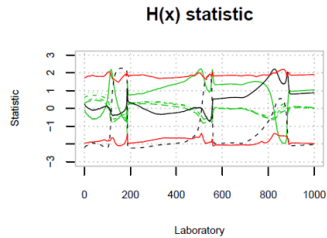
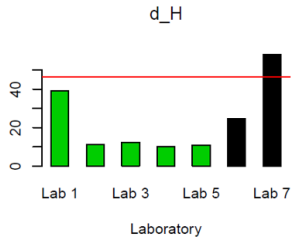


**Global Functional Mean**



**Global Functional Variance**





## Contribuciones

- Introducción por primera vez en R de las técnicas estadísticas utilizadas para estudios interlaboratorio.
- Desarrollo de nuevas metodologías para los estudios interlaboratorio.
- En las pruebas de laboratorio donde la respuesta es funcional, se impide las pérdidas típicas de información asociadas a las clásicas metodologías (ASTM E691).

# Functional Data Analysis – Quality Control Review (fda.qcr)

## Contribuciones

- Desarrollo de nuevas metodologías para el control estadístico de calidad.
- Implementación en R de gráficos de control para monitoreo de procesos cuya variable de calidad es de carácter funcional.
- Aplicación de gráficos de control para datos funcionales para resolver problemas de eficiencia energética en viviendas.



# Conclusiones

- Paquete ILS
  - Propuesta metodológica: Extensión de los estadístico  $h$  y  $k$  Mandel al caso FDA, detección de atípicos, norma, remuestreo bootstrap.
  - Permite simulaciones.
  - Aplicación a datos reales: Incorporar toda la información de las curvas.
- Gráficos de Control (qcr y qcr.fda)
  - Propuesta metodológica: Gráficos de control para la Fase I y Fase II, detección de atípicos, remuestreo bootstrap, gráfico rank.
  - Aplicación a datos reales: Implementación online, detección de las anomalías.

# Artículos básicos

## Journal of chemometrics and intelligent laboratory systems



### Functional extensions of Mandel's $h$ and $k$ statistics for outlier detection in interlaboratory studies

Miguel Flores<sup>a</sup>, Javier Tarrío-Saavedra<sup>b,c</sup>, Rubén Fernández-Casal<sup>a</sup>, Salvador Naya<sup>b</sup>

<sup>a</sup> Escuela Politécnica Superior, Oviedo, España

<sup>b</sup> Grupo MARS, CITIC, IRTA42, Departamento de Matemáticas, Escuela Politécnica Superior, Universidad de Coruña, Ferrol, Spain

<sup>c</sup> Grupo MARS, CITIC, IRTA42, Área de Estadística, Universidad de Coruña, A Coruña, Spain

#### ARTICLE INFO

**Keywords:**  
Interlaboratory studies  
Functional data analysis  
Outlier detection  
Bootstrapping  
Data depth

#### ABSTRACT

Functional data analysis (FDA) alternatives, based on the classical Mandel's  $h$  and  $k$  statistics, are proposed to identify the laboratories that supply inconsistent results in interlaboratory studies (ILS). ILS is the procedure performed by a number of laboratories to test the position of an analytical method, to measure the proficiency of laboratories in implementing an analytical procedure, to verify reference materials, and to evaluate a new experimental standard. The use of outlier tests, such as  $h$  and  $k$  Mandel statistics proposed by the ASTM E1057, is crucial to assess these aims, extending later and later laboratory data positive and correctly from a univariate point of view. Considering that experimental results obtained in analytical systems are often functional, the use of FDA techniques can prevent the loss of important data information. The FDA approaches of  $h$  and  $k$  statistics are presented and later via obtained to deal with functional experimental data. First, functional statistics are estimated for each laboratory, their functional critical limits are obtained by bootstrap resampling, and new FDA versions of  $h$  and  $k$  graphics are presented. Real and synthetic thermogravimetric data are utilized to assess the good performance of the proposed FDA  $h$  and  $k$  statistics and their advantages with respect to the univariate approach.

#### 1. Introduction

Interlaboratory Studies (ILS) can be defined as the statistical quality control procedure implemented to evaluate the performance of an analytical method through collaborative trials, to develop bias tests of a standard measurement method, to measure the proficiency of laboratories that implement a specific analytical procedure, to verify reference materials, and to validate a new international standard [1–4]. In all cases, ILS statistical methods evaluate the precision and consistency of testing

ISO standard regulates the implementation of bias tests and also defines collaborative trials [5]. This work will focus on outlier test applications in these types of ILS studies. In fact, new functional extensions for outlier tests are proposed and described.

Both in collaborative trials and bias tests, outlier detection procedures play a fundamental role [1–4], where the aim is to detect the laboratories that provide results that are significantly different from the others and, thus, to discard the inconsistent data that they provide. Many outlier tests have been applied in ILS studies. All of them are developed from a scalar

# Artículos básicos

## Journal of chemometrics and intelligent laboratory systems



Functional extensions of Mandel's  $h$  and  $k$  statistics for outlier detection in interlaboratory studies

Miguel Flores<sup>a</sup>, Javier Tarrío-Saavedra<sup>b,c</sup>, Rubén Fernández-Casal<sup>a</sup>, Salvador Naya<sup>b</sup>

<sup>a</sup> Escuela Politécnica Nacional, Ecuador

<sup>b</sup> Grupo MARS, CITIC, (2018-1), Departamento de Matemáticas, Escuela Politécnica Superior, Universidad de Coruña, Ferrol, Spain  
<sup>c</sup> Grupo MARS, CITIC, (2018-1), Área de Estadística, Universidad de Coruña, A Coruña, Spain

### ARTICLE INFO

Keywords:  
 Interlaboratory studies  
 Functional data analysis  
 Outlier detection  
 Bootstrapping  
 Data depth

### ABSTRACT

Functional data analysis (FDA) alternatives, based on the classical Mandel  $h$  and  $k$  statistics, are proposed to identify the laboratories that supply inconsistent results in interlaboratory studies (ILS). ILS is the procedure performed by a number of laboratories to test the position of an analytical method, to measure the proficiency of laboratories in implementing an analytical procedure, to verify reference materials, and to evaluate a new experimental standard. The use of outlier tests, such as  $h$  and  $k$  Mandel statistics proposed by the ASTM E691, is crucial to assess these aims, extending later and later laboratory data position and consistency from a univariate point of view. Considering that experimental results obtained in analytical studies are often functional, the use of FDA techniques can prevent the loss of important data information. The FDA approaches of  $h$  and  $k$  statistics are presented and power was obtained to deal with functional experimental data. Then, functional studies are estimated for each laboratory, their functional critical limits are obtained by bootstrap resampling, and new FDA versions of  $h$  and  $k$  statistics are presented. Real and synthetic thermogravimetric data are utilized to assess the good performance of the proposed FDA  $h$  and  $k$  statistics and their advantages with respect to the univariate approach.

### 1. Introduction

Interlaboratory Studies (ILS) can be defined as the statistical quality control procedure implemented to evaluate the performance of an analytical method through collaborative trials, to develop bias tests of a standard measurement method, to measure the proficiency of laboratories that implement a specific analytical procedure, to verify reference materials, and to validate a new international standard [1–4]. In all cases, ILS statistical methods evaluate the precision and consistency of testing

ISO standard regulates the implementation of bias tests and also defines collaborative trials [5]. This work will focus on outlier test applications in these types of ILS studies. In fact, new functional extensions for outlier tests are proposed and described.

Both in collaborative trials and bias tests, outlier detection procedures play a fundamental role [1–4], where the aim is to detect the laboratories that provide results that are significantly different from the others and, thus, to discard the inconsistent data that they provide. Many outlier tests have been applied in ILS studies. All of them are developed from a univariate

## Journal of Statistical Software



Journal of Statistical Software

MMMMM YYYY, Volume 87, Issue 1 <http://www.jstatsoft.org/>

### Statistical Quality Control with qcr Package

Miguel Flores  
 Escuela Politécnica Nacional

Rubén Fernández-Casal  
 Universidade da Coruña

Salvador Naya  
 Universidade da Coruña

Javier Tarrío-Saavedra  
 Universidade da Coruña

Mateo Larco  
 Escuela Politécnica Nacional

### Abstract

In this article the R package **qcr** for Statistical Quality Control (SQC) is introduced and described. The **qcr** package includes a comprehensive set of univariate and multivariate SQC tools that compile and increases the SQC techniques available in R. It combines traditional and new flexible SQC procedures to deal with real quality control problems in industry and consulting. Apart from integrating different R packages devoted to SQC (**qcr**, **MSQC**), **qcr** it provides new nonparametric tools highly useful when Gaussian assumption is not fulfilled. This package provides the most complete set of functions in R to compute attribute and variable control charts, from a parametric and nonparametric point of view, in a univariate or multivariate way. In order to be applied in real industry problems, **qcr** allows to estimate the natural control limits and monitor critical variables in a practical and more automatic way. The proposed package computes standard univariate control charts of individual measurements:  $\bar{x}$ ,  $S$ ,  $R$ ,  $p$ ,  $np$ ,  $c$ ,  $u$ , EWMA and CUSUM. In addition, it includes functions to perform multivariate control charts such as Hotelling  $T^2$ , MEWMA and MCUSUM. Moreover, new nonparametric alternatives based on data depth (Liu 1995) are implemented in this package:  $r$ ,  $Q$  and  $S$  control charts. In this line, robust alternatives of capability indices are now available in R through **qcr** library. The **qcr** library also allows to estimate the most complete set of univariate and multivariate capability indices from

## Bibliografía propia

- Naya, S., Tarrío-Saavedra, J., López-Beceiro, J., Francisco, M., Flores, M. & Artiaga, R. Statistical functional approach for interlaboratory studies with thermal data, *Journal of Thermal Analysis and Calorimetry*, 118 (2014), 2, 1229-1243.
- Flores, M., Naya, S., Tarrío-Saavedra, J., & Fernández-Casal, R. (2017). Functional data analysis approach of Mandel's h and k statistics in Interlaboratory Studies. In *Functional Statistics and Related Fields*. 123-130. Springer.
- Flores, M., Tarrío-Saavedra, J., Fernández-Casal, R., & Naya, S. Functional extensions of Mandel's h and k statistics for outlier detection in Interlaboratory Studies. *Chemometrics and Intelligent Laboratory System*. 176, (2018), 134-148.
- Flores, M., Fernández-Casal, R., Tarrío-Saavedra, J., & Naya, S. Stastistical Quality Control in R with qcr Package enviado a la revista científica *Journal of Statistical Software*. Segunda revisión
- Flores, M., Tarrío-Saavedra, J., Fernández-Casal, R., & Naya, S. Developing Interlaboratory studies with R: ILS Package. *Chemometrics and Intelligent Laboratory System*.
- Flores, M., Tarrío-Saavedra, J., Fernández-Casal, R., & Naya, S. Analysis Data Functional in Stastistical Quality Control with R: fda.qcr Package. En desarrollo.

## Bibliografía general

- ASTM E 691 (1999), Standard practice for conducting an interlaboratory study to determine the precision of a test method. American Society for Testing and Materials. West Conshohocken, PA, USA
- Cuevas A., Febrero-Bande, M. and Fraiman, R. (2006), "On the use of the bootstrap for estimating functions with functional data". Computational Statistics & Data Analysis 51, 2, 1063-1074.
- Cuevas A, Febrero M, Fraiman R. (2004), An anova test for functional data. Comput Stat Data Anal.47:111–22.
- Cuesta-Albertos JA, Febrero-Bande M. (2010), A simple multiway anova for functional data. Test.19:537–57.
- Febrero-Bande, M. and Oviedo, M. (2012), "Statistical computing in functional data analysis: the R package fda.usc". Journal of Statistical Software 51 (4), 1-28. 4
- Febrero-Bande M, Galeano P, González-Manteiga W. (2008) "Outlier detection in functional data by depth measures, with application to identify abnormal NOx levels". Environmetrics. 19:331–45.
- Ferraty F. y Vieu P. (2006) Nonparametric Functional Data Analysis: Theory and Practice, New York: Springer.
- Hyndman, R. J. y Shang, H. L. (2010) Rainbow Plots, Bagplots, and Boxplots for Functional Data. Journal of Computational and Graphical Statistics. Vol. 19, 29-45.
- Kunsch, H. R. (1989) The Jackknife and the Bootstrap for General Stationary Observations. The Annals of Statistics. Vol. 17, 1217-1241.
- Naya, S., Tarrio-Saavedra. J., Lopez- Beceiro, J., Francisco Fernandez, M., Flores, M. and Artiaga, R. (2014), "Statistical functional approach for interlaboratory studies with thermal data". Journal of Thermal Analysis and Calorimetry, 118,1229-1243.

- Liu, R. and Singh, K. (1992) "Moving blocks bootstrap and jackknife capture weak dependence" Exploring the Limits of Bootstrap, R. LePage and L. Billard, Eds., 225-248, John Wiley and Sons.
- Liu, R. and Tang, J. (1996) "Control charts for dependent and independent measurements based on bootstrap methods" Journal of the American Statistical Association, 91, 1694-1700.
- Liu R. (1995). "Control Charts for Multivariate Processes". American Statistical Association. Vol 90(432);1380-138. Ramsay, J. O. y Silverman, B. W. (2005) Functional Data Analysis (2nd ed.). Springer.
- Liu, R. and Tang, J. (1997) "Control charts for dependent and multivariate measurements" The Frontiers of Statistical Quality Control, ed. P. Wilrich and H. Lenz, Springer-Verlag, 5, 102-114.
- Lopez-Pintado, S. and Romo, J. (2009), "On the concept of depth for functional data", Journal of the American Statistical Association, 104, 486-503.
- Politis, D. N. y Romano, J. R. (1994) The Stationary Bootstrap. Journal of American Statistical Association. Vol. 89, 1303-1313.
- Sun, Y. y Genton M. G. (2011) Functional Boxplots. Journal of Computational and Graphical Statistics. Vol. 20, 316-334.
- Walter, S. (2011), Defining Quantiles for Functional Data: with an Application to the Reversal of Stock Price Decreases, Department of Math. and Stat. The Uni. of Melbourne.
- Wilrich Peter-T. (2013), Critical values of mandel's h and k, the grubbs and the cochrane test statistic. Asta-Advances in Statistical Analysis, 97(1):1-10.