

DOI: 10.59715/pntjimp.2.3.7

Xây dựng phần mềm phân tích thống kê - Phasolpro TK - TNTT áp dụng trong thử nghiệm thành thạo các phòng thí nghiệm

Chung Khang Kiệt¹, Đỗ Quang Dương¹, Nguyễn Thanh Hà², Nguyễn Đức Tùng¹, Nguyễn Trường Lân¹, Tô Ngọc Nữ Như Ý¹, Nguyễn Tiến Nhật¹, Trương Quang Nguyên¹

¹Khoa Dược - Đại học Y Dược TP.HCM

²Viện Kiểm Nghiệm Thuốc TP.HCM

Tóm tắt

Đặt vấn đề: Chương trình thử nghiệm thành thạo (TNTT) được Viện Kiểm nghiệm Thuốc TP.HCM tổ chức để đo lường và nâng cao năng lực phòng thí nghiệm. Tuy nhiên quá trình tính toán kết quả kiểm nghiệm chưa được tối ưu hóa, thực hiện thủ công qua nhiều bước.

Đối tượng - Phương pháp: Đối tượng nghiên cứu là phần mềm thống kê được xây dựng dựa trên quy trình phân tích thống kê kết quả kiểm nghiệm trong TNTT và các trắc nghiệm thống kê được sử dụng: Cochran, Grubbs đơn, Grubbs đôi và Robust. Đề xuất yêu cầu kỹ thuật người dùng (URS); thiết kế giao diện bằng MS - Powerpoint 2016; xây dựng và đánh giá phần mềm căn cứ theo yêu cầu kỹ thuật trên bộ dữ liệu từ báo cáo chương trình thử nghiệm thành thạo liên phòng của Viện Kiểm nghiệm thuốc TP.HCM năm 2012 - 2018.

Kết quả: Nghiên cứu đã khảo sát quy trình thực tế, xây dựng được yêu cầu kỹ thuật và thiết kế giao diện cụ thể phần mềm. Phần mềm Phasolpro TK - TNTT được xây dựng với các chức năng thống kê thường dùng: Cochran, Grubbs đơn, Grubbs đôi và Robust; vẽ biểu đồ. Kết quả đánh giá phần mềm về cài đặt và vận hành đều phù hợp với URS đặt ra; kết quả phân tích Phasolpro TK - TNTT trả về trên 30 bộ dữ liệu thử nghiệm trùng khớp với MS-Excel.

Kết luận: Phần mềm Phasolpro TK - TNTT đã được xây dựng phù hợp với các yêu cầu đề ra, hỗ trợ kiểm nghiệm viên trong quá trình tính toán kết quả chương trình TNTT hiệu quả, tiết kiệm nguồn lực và tối ưu các phép tính.

Từ khóa: Phần mềm thống kê, thử nghiệm thành thạo, tối ưu hóa.

Abstract

Developing statistical analysis software - Phasolpro TK - TNTT in proficiency testing of the laboratories

Introduction: Proficiency testing program (PT Program) is organized by Institute of Drug Quality Control Ho Chi Minh City to measure and enhance the quality of Laboratories. However, the calculation process of labs' results is done manually through multiple steps and requires optimization.

Materials - Methods: The software developed based on PT Program's results analysing procedure and statistical multiple choice are used: Cochran, Single Grubbs, Double Grubbs and Robust. Proposing User Requirements Specification (URS), designing interfaces by MS Powerpoint 2016; developing and validating the software based on the URS with databases collected from Proficiency testing programs of Institute of Drug Quality Control Ho Chi Minh City biannual reports (2012 - 2018).

Ngày nhận bài:

28/02/2023

Ngày phản biện:

20/3/2023

Ngày đăng bài:

20/7/2023

Tác giả liên hệ:

Chung Khang Kiệt

Email: ckkiet@ump.

edu.vn

ĐT: 0909451890

Results: After the survey, we have built URS and design specific interfaces for the software. Phasolpro TK - TNTT software is built with common statistical functions in Cochran, Single Grubbs, Double Grubbs and Robust. The validation on installation and operation of the software have met all the URS requirements; the testing results from Phasolpro TK - TNTT on 30 data sets match the results from MS-Excel.

Conclusion: Phasolpro TK - TNTT software has been built to meet all the predetermined requirements, the software aids operators in the process of calculating PT Program's result effectively, conserves resources and optimizes calculations

Keywords: Statistical software, Proficiency Test, optimization.

1. ĐẶT VẤN ĐỀ

Thuốc là loại hàng hóa ảnh hưởng trực tiếp đến sức khoẻ con người. Để đảm bảo thuốc được sử dụng an toàn, hiệu quả, cần phải giám sát và quản lý chất lượng thuốc trong suốt quá trình từ khi sản xuất đến tay người sử dụng. Công tác giám sát thuốc trong quá trình lưu hành được thực hiện bởi các cơ quan kiểm nghiệm là một công cụ đo lường năng lực các phòng thí nghiệm (PTN) dựa trên so sánh liên phòng gồm các Trung tâm kiểm nghiệm, Viện kiểm nghiệm thuốc. Thử nghiệm thành thạo (TNTT). Để nâng cao năng lực phòng thí nghiệm (PTN) và đáp ứng yêu cầu quản lý chất lượng theo nguyên tắc Thực hành tốt phòng thí nghiệm (GLP) và chuẩn mực ISO/IEC 17025, Viện Kiểm nghiệm (VKN) Thuốc Thành phố Hồ Chí Minh (TP.HCM) và VKN thuốc Trung ương hàng năm đều tổ chức chương trình TNTT. Qua chương trình TNTT, PTN thực hiện các thử nghiệm thực tế và các kết quả thử nghiệm được so sánh với các PTN khác.

Đánh giá các kết quả của mẫu thử nghiệm trong TNTT cần sử dụng các phương pháp thống kê phức tạp và đa dạng như Trắc nghiệm Cochran trong đánh giá độ đồng nhất trong từng mẫu, trắc nghiệm ANOVA 1 yếu tố để đánh giá độ đồng nhất giữa các mẫu; phân tích và xác định các giá trị bất thường bằng trắc nghiệm Cochran, Grubbs đơn hay Grubbs đôi, các phân tích Robust hay tính toán giá trị Z - Score, các loại biểu đồ Histogram, Kernel Density, Youden. Hiện nay tại VKN Thuốc TP.HCM, các phương pháp thống kê trên đang được kiểm nghiệm viên sử dụng MS-Excel để tính toán; quy trình này cần thực hiện thủ công qua nhiều bước, gây mất thời gian và dễ xảy ra sai sót dẫn đến nhu cầu xây dựng phần mềm chuyên dụng & có tính chính xác cao. Để giải quyết vấn đề này, đề tài được thực hiện nhằm

khảo sát lại quy trình TNTT áp dụng tại Viện kiểm nghiệm TP.HCM, xây dựng và đánh giá phần mềm thống kê - Phasolpro TK - TNTT - áp dụng trong thử nghiệm thành thạo.

2. ĐỐI TƯỢNG VÀ PHƯƠNG PHÁP

2.1. Đối tượng nghiên cứu

Là phần mềm thống kê được xây dựng dựa trên quy trình phân tích thống kê kết quả kiểm nghiệm; các trắc nghiệm thống kê sử dụng trong thử nghiệm thành thạo gồm: Cochran, Grubbs đơn, Grubbs đôi, Robust [1, 3, 4] và phù hợp với các yêu cầu đề ra.

2.2. Phương pháp nghiên cứu

- Cơ sở dữ liệu (CSDL) sử dụng trong nghiên cứu: các kết quả Báo cáo của tổng kết chương trình thử nghiệm thành thạo so sánh liên phòng thí nghiệm các năm 2012, 2014, 2016, 2018 của VKN Thuốc TP.HCM [6].

- Khảo sát quy trình TNTT đang áp dụng tại VKN Thuốc TP.HCM và các bước ứng dụng phần mềm máy tính, từ đó phân tích thiết kế hệ thống và thiết kế giao diện phần mềm.

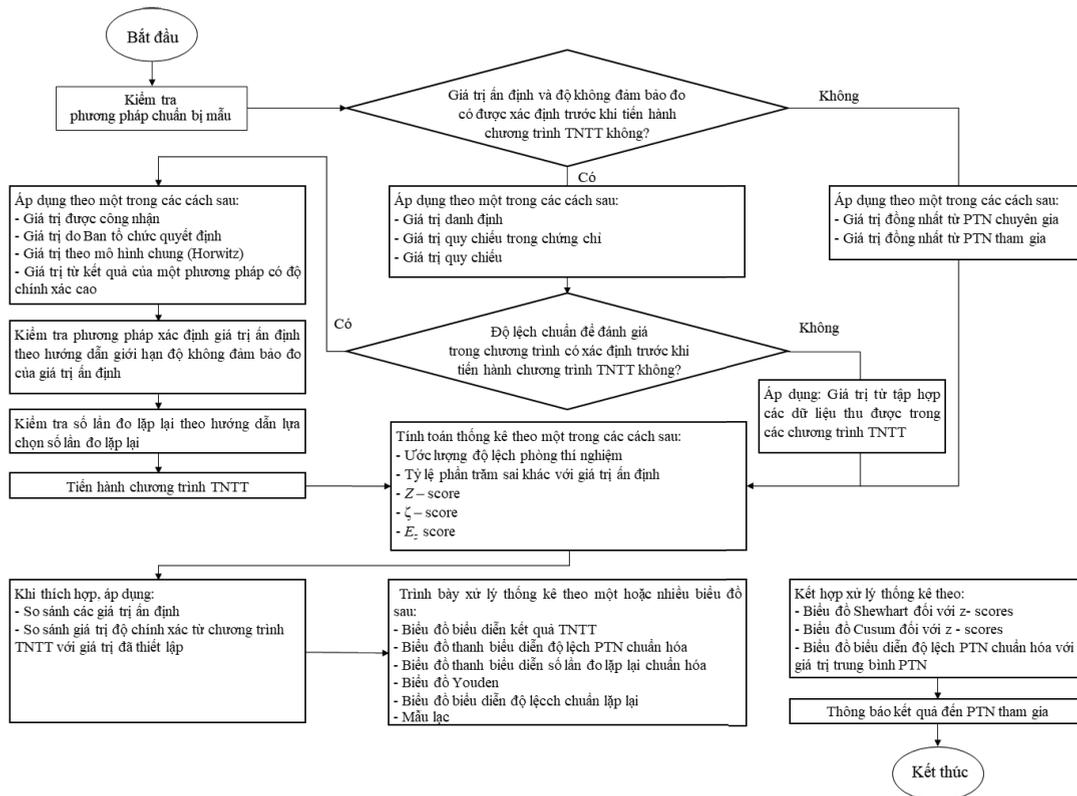
- Phát triển phần mềm Phasolpro TK - TNTT dựa trên các thuật toán thống kê trong các tài liệu TNTT của VKN Thuốc TP.HCM và hướng dẫn ISO 13528:2015.

- Đánh giá phần mềm gồm 2 phần: đánh giá cài đặt và vận hành. Đánh giá cài đặt bằng cách cài đặt phần mềm tại Bộ môn Công nghệ Thông tin dược - Khoa Dược - ĐHYD TP.HCM, sử dụng Phiếu đánh giá về tính tương thích với hệ điều hành, cài đặt và gỡ bỏ phần mềm không phát sinh lỗi hệ thống; đánh giá vận hành bằng cách sử dụng CSDL nghiên cứu để vận hành các chức năng của phần mềm Phasolpro TK - TNTT, so sánh kết quả tính toán từ các PTN tham gia trong Chương trình TNTT, kết quả tính toán thủ công từ Excel và phần mềm Phasolpro TK - TNTT.

3. KẾT QUẢ

3.1. Khảo sát quy trình phân tích thống kê kết quả kiểm nghiệm trong TNTT

Sau khi khảo sát quy trình thực tế tại VKN Thuốc TP.HCM, sơ đồ quy trình phân tích thống kê kết quả kiểm nghiệm thể hiện trên Hình 1.



Hình 1. Sơ đồ mô tả các giai đoạn xử lý thống kê kết quả của chương trình TNTT tại VKN thuốc TP.HCM

Quy trình cho thấy hầu hết các bước thống kê như đánh giá độ đồng nhất mẫu thử, phân tích và xác định các giá trị bất thường, xác định giá trị ấn định áp dụng đánh giá thành thạo, tính toán giá trị Z-Score, phân tích dữ liệu và các loại biểu đồ đều được thực hiện thường xuyên.

3.2. Xây dựng phần mềm Phasolpro TK - TNTT

Các bước xây dựng phần mềm gồm: Đề xuất yêu cầu kỹ thuật người dùng, thiết kế quy trình và giao diện phần mềm, lập trình và đánh giá phần mềm.

Đề xuất Yêu cầu kỹ thuật phần mềm Phasolpro TK - TNTT

Thông tin tổng quát

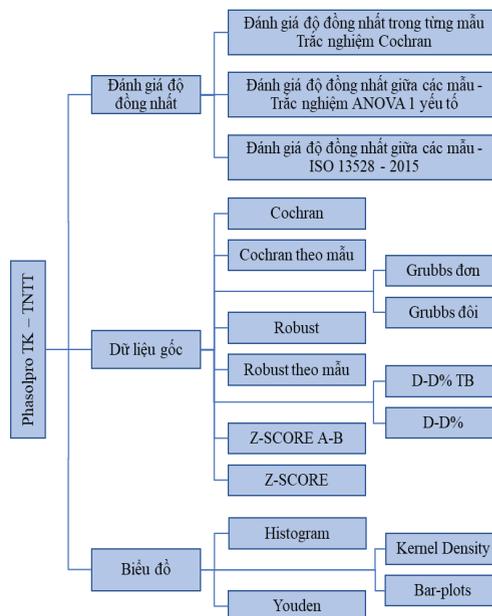
Tên phần mềm: Phasolpro TK - TNTT (Phiên bản: 1.0); Công dụng: Công nghệ hóa việc tính toán kết quả kiểm nghiệm tại trung tâm và lưu trữ các thông tin liên quan; Đơn vị phát triển: Bộ môn Công nghệ thông tin Dược, Khoa Dược, Đại học Y Dược Thành phố Hồ Chí Minh; Thời gian phát triển: 2020. Loại hình: Ngoại tuyến (Offline).

Giao diện phần mềm

- Ngôn ngữ: tiếng Việt, tiếng Anh.
- Giao diện chính: Sau khi khởi động phần mềm sẽ xuất hiện gồm các mục: File, New, Open, Save, Exit, Help. Chọn nút lệnh Open sẽ xuất hiện các chức năng chính của phần mềm: Đánh giá độ đồng nhất, Dữ liệu gốc.
- Các giao diện phụ: Từ màn hình chính khi chọn các chức năng chuyên môn sẽ đi vào các màn hình phụ. Các màn hình phụ được thiết kế có hệ thống.

Yêu cầu phần cứng của phần mềm

Máy tính để bàn, máy tính xách tay; Bộ vi xử lý: 1 GHz, cỡ RAM ít nhất 2GB, CPU Intel Core 2 Duo trở lên; Hệ điều hành: Windows 7 trở lên.



Hình 2. Sơ đồ phân tích thiết kế hệ thống của phần mềm Phasolpro TK - TNTT

Chức năng của phần mềm

Gồm 2 chức năng chính: Đánh giá độ đồng nhất mẫu thử, Phân tích dữ liệu và vẽ biểu đồ.

Đầu vào và đầu ra

Xử lý dữ liệu đầu vào sẽ cho dữ liệu đầu ra tương ứng để phù hợp với từng chức năng của phần mềm dựa trên Yêu cầu kỹ thuật phần mềm.

Thiết kế giao diện phần mềm Phasolpro TK - TNTT

Phân tích thiết kế hệ thống của phần mềm theo Hình 2. Sau đó, giao diện phần mềm Phasolpro TK - TNTT được thiết kế trên MS. Powerpoint 2016 gồm màn hình chính và 16 màn hình phụ.

Giao diện phần mềm Phasolpro TK - TNTT

Phần mềm sau khi xây dựng, có giao diện như sau: từ màn hình chính người dùng có thể đi đến các màn hình phụ khi nhấp các mục trên thanh menu:



Hình 3. Giao diện Màn hình Chính và Màn hình Menu

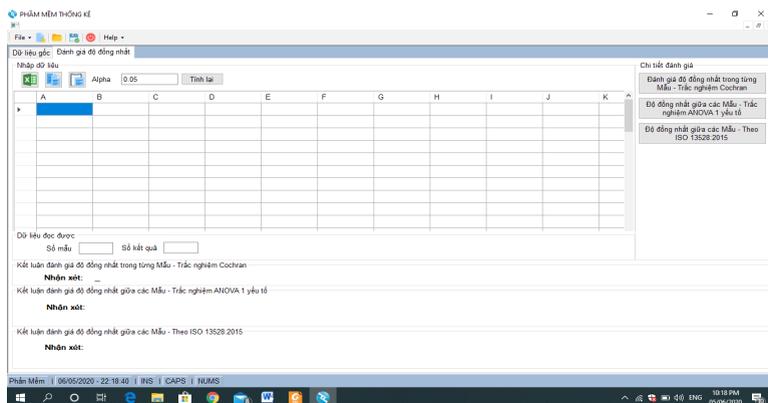
- File: Từ cửa sổ File dẫn người sử dụng sang mục New, Open, Save, Exit.
- New: Trước khi thực hiện cái phép tính, nhập dữ liệu từ Excel.
- Open: Dùng để mở một tệp mới.
- Save: Giúp lưu trữ các nội dung đã tính.
- Exit: Giúp thoát khỏi phần mềm khi không còn sử dụng.
- Help: Có bảng tra cứu như Bảng Test Cochran, Bảng Test Grubbs và có hướng dẫn phần dùng phần mềm

Đánh giá độ đồng nhất

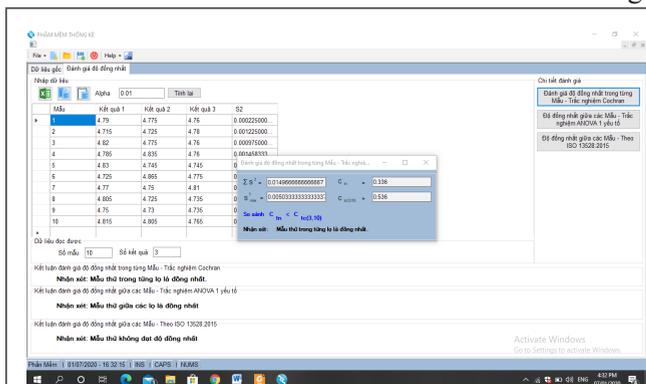
Mẫu thử trong từng lọ hoặc giữa các lọ được chấp nhận là đồng nhất khi khác biệt giữa các kết quả không đáng kể khi so sánh với thành phần độ không đảm bảo. Các giao diện đánh giá độ đồng nhất thể hiện trên Bảng 1 và thể hiện trên Hình 4 - Hình 6.

Bảng 1. Các giao diện đánh giá độ đồng nhất

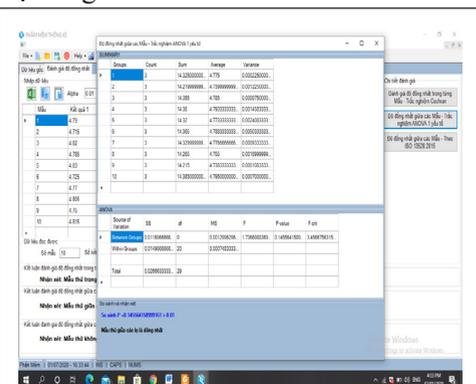
Giao diện	Chức năng	Cách thức
Trắc nghiệm Cochran	Nhận xét Mẫu thử trong từng lọ có đồng nhất không	Tính $\sum S^2, S^2_{max}, C_{tn}, C_{tc}$ So sánh C_{tn} và C_{tc}
ANOVA 1 yếu tố	Nhận xét Mẫu thử giữa các lọ có đồng nhất không.	Tính p - value So sánh p - value với α
ISO 13528:2015 [2,5]		Tính Độ lệch chuẩn giữa các mẫu (ss), Độ lệch chuẩn đích (spt), 0,3(spt), so sánh 0,3 (spt) và ss



Hình 4. Màn hình Đánh giá độ đồng nhất



Hình 5. Màn hình Đánh giá độ đồng nhất trong từng mẫu - Trắc nghiệm Cochran



Hình 6. Màn hình Đánh giá độ đồng nhất giữa các mẫu - ANOVA 1 yếu tố

Phần Dữ liệu gốc

Sử dụng các giao diện thuật toán để loại các giá trị bất thường của các PTN, xác định giá trị ấn định áp dụng trong TNTT và đánh giá độ lệch giữa kết quả của các PNT so với giá trị ấn định. Các giao diện thuộc Dữ liệu gốc được mô tả trên Bảng 2 và giao diện thực tế được thể hiện trên Hình 7 - Hình 12.

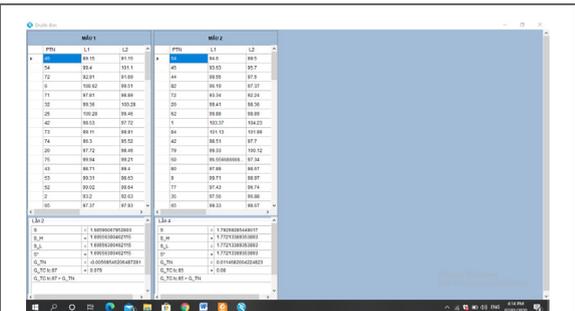
Bảng 2. Mô tả các giao diện thuộc Dữ liệu gốc

Giao diện	Chức năng	Cách thức
Cochran/Cochran theo mẫu	Đánh giá độ đồng nhất của dãy phương sai của cả 2 mẫu/ từng mẫu riêng biệt.	Loại giá trị trung bình có phương sai lớn nhất.
Grubbs đơn	Đánh giá mức độ đồng nhất của dãy trung bình.	Loại bỏ giá trị trung bình lớn nhất/ nhỏ nhất.

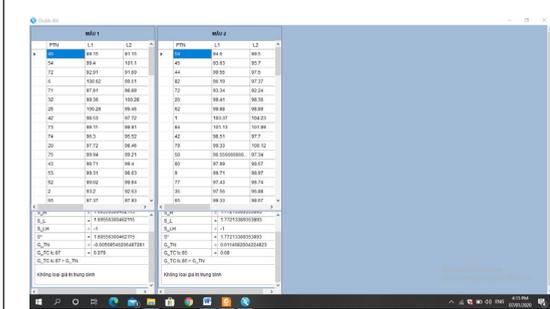
Giao diện	Chức năng	Cách thức
Grubbs đôi	Khẳng định lại mức độ đồng nhất của dãy phương sai bằng Test Grubbs đơn trước đó.	Loại bỏ 2 giá trị trung bình lớn nhất/2 giá trị trung bình nhỏ nhất/1 giá trị trung bình lớn nhất và 1 giá trị trung bình nhỏ nhất.
Robust/Robust theo mẫu	Nhận xét về Độ không đảm bảo đo chuẩn/ Độ lệch chuẩn từng mẫu của giá trị ấn định có đáng kể không.	Giá trị ấn định, Độ lệch chuẩn thực, Độ lệch chuẩn đích.
D - D% (TB)/ D - D% [2]	Ước tính giá trị sai lệch và % sai khác của các PTN so với giá trị ấn định (theo từng mẫu).	
Z-Score A - B/ Z-Score [2]	Nhận xét PTN nào không đạt, phòng thí nghiệm nào cần xem xét lại.	Tính giá trị Z-Score theo Xpt và σ từng mẫu, Z-Score theo Xpt (TB) và σ (TB).



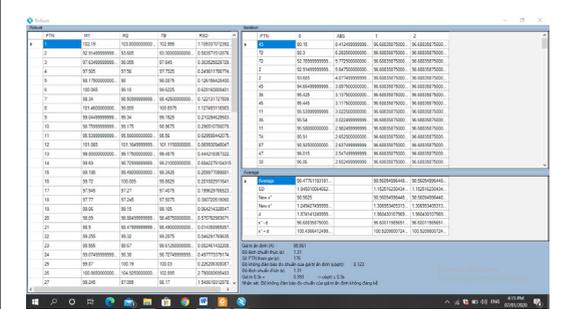
Hình 7. Màn hình Cochran



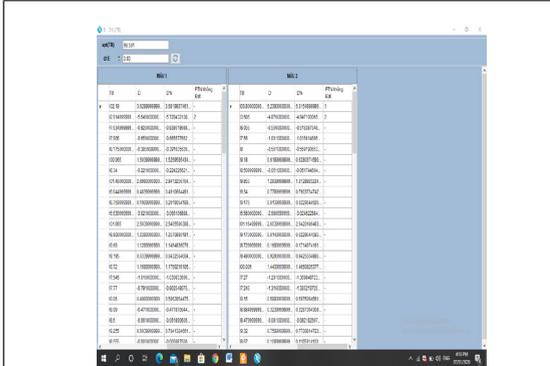
Hình 8. Màn hình Grubbs đơn



Hình 9. Màn hình Grubbs đôi



Hình 10. Màn hình Robust



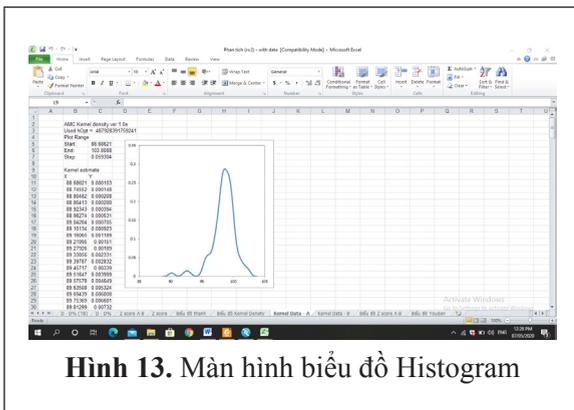
Hình 11. Màn hình D - D% (TB)



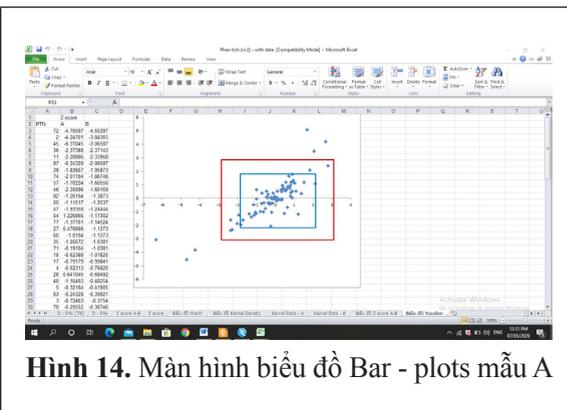
Hình 12. Màn hình Z-Score A - B

Biểu đồ

Là công cụ thống kê hữu ích trong phân tích kết quả chương trình TNTT, nhất là trong giai đoạn phân tích sơ bộ, kiểm tra giả định thống kê hợp lý không và phát hiện bất thường, cho biết đặc điểm chung và mối tương quan giữa các kết quả. Các giao diện Biểu đồ được mô tả trên Bảng 3 và minh họa trên Hình 13, Hình 14.



Hình 13. Màn hình biểu đồ Histogram



Hình 14. Màn hình biểu đồ Bar - plots mẫu A

Bảng 3. Mô tả các giao diện Biểu đồ [2]

Biểu đồ	Chức năng	Dữ liệu
Biểu đồ Histogram (là biểu đồ cột)	Kiểm tra các giả định thống kê là hợp lý hay có bất thường.	Vẽ từ dữ liệu giá trị trung bình từ kết quả các phòng thí nghiệm.
Biểu đồ Kernel Density (là đường cong biểu diễn các giá trị)	Ước tính mỗi điểm dữ liệu được thay thế bằng một phân phối xác định.	Vẽ từ dữ liệu giá trị trung bình từ kết quả các phòng thí nghiệm.
Biểu đồ Bar - plots (là biểu đồ cột)	Trình bày điểm hiệu suất cho một số điểm đặc biệt trong một biểu đồ.	Vẽ từ dữ liệu giá trị Z-score sắp xếp từ nhỏ đến lớn.
Biểu đồ Youden (là đồ thị điểm số Z)	Chứng minh mối tương quan của kết quả trên các mục kiểm tra trình độ khác nhau.	Vẽ từ dữ liệu giá trị Z-score. Độ chệch với trục chính của hình elip thể hiện sự không tuân thủ hoặc không đạt của PTN

Đánh giá phần mềm

Đánh giá cài đặt: Phần mềm được cài đặt và khởi động bình thường trên Windows 7 trở lên, không xung đột với phần mềm khác. Việc gỡ bỏ khỏi Windows cũng được thực hiện dễ dàng trong Control Panel, không sọt thư mục và cũng không ảnh hưởng đến hệ thống chung.

Đánh giá vận hành

- Đánh giá vận hành các CSDL trên Phasolpro TK - TNTT cho kết quả đúng trên tất cả các chức năng thống kê và biểu đồ. Một số chi tiết về CSDL thử nghiệm được thể hiện trên Bảng 4.

- So sánh 3 kết quả: kết quả cho bởi phần mềm Phasolpro TK - TNTT với kết quả từ các Chương trình TNTT và kết quả tính toán bằng MS-Excel, đều cho kết quả hoàn toàn giống nhau. Chứng tỏ kết quả cho bởi Phasolpro TK - TNTT đều chính xác. Ví dụ minh họa về so sánh kết quả Trắc nghiệm Cochran giữa chương trình TNTT thường dùng, MS-Excel và phần mềm Phasolpro TK - TNTT thể hiện trên Bảng 5.

Bảng 4. Mô tả bộ CSDL sử dụng trong đánh giá vận hành phần mềm Phasolpro TK - TNTT

Mục đích	Số bộ dữ liệu	Nội dung	Ghi chú
Đánh giá độ đồng nhất	11	So sánh đánh giá độ đồng nhất trong từng mẫu và giữa các mẫu	Dữ liệu về định lượng, thử độ hòa tan và đo pH bằng các phương pháp. Số lượng mẫu: 10/bộ dữ liệu
Phân tích dữ liệu gốc	19	So sánh kết quả các trắc nghiệm thống kê và biểu đồ	Dữ liệu về các phép thử, định lượng, độ hòa tan... bằng các phương pháp. Số lượng PTN từ 55 - 122 mỗi bộ tùy phép kiểm

Bảng 5. So sánh kết quả 1 bộ CSDL theo báo cáo VKN thuộc TP.HCM năm 2014

Giá trị (n = 10)	Kết quả		
	Chương trình TNTT	MS-Excel	PhasolproTK - TNTT
Trắc nghiệm Cochran			
$\sum S^2$	3,7210	3,721	3,721
S^2_{Max}	1,2482	1,2482	1,2482
C_{tn}	0,335	0,335	0,335
$C_{tc}[2,7]$	0,718	0,718	0,718
Nhận xét	Mẫu thử trong từng lọ là đồng nhất	Mẫu thử trong từng lọ là đồng nhất	Mẫu thử trong từng lọ là đồng nhất

4. BÀN LUẬN

Phần mềm Phasolpro TK - TNTT được xây dựng hỗ trợ chuyên biệt cho chương trình TNTT; các phương pháp thống kê trong TNTT tương đối phức tạp, và không phải Kiểm nghiệm viên nào cũng có thể dùng MS-Excel để thiết lập chính xác các công thức. Với giao diện tiếng Việt, khả năng đồng bộ dữ liệu, dễ dàng sử dụng các phương pháp thống kê nhanh chóng và chính xác, phần mềm có tiềm năng ứng dụng rộng rãi trong đánh giá Chương trình TNTT.

5. KẾT LUẬN

Đề tài đã tiến hành khảo sát quy trình TNTT tại VKN Thuộc TP.HCM, đề xuất yêu cầu kỹ thuật người dùng, thiết kế giao diện, từ đó xây dựng thành công phần mềm Phasolpro TK - TNTT. Kết

quả đánh giá cài đặt đạt các tiêu chí đặt ra, tương tự cho kết quả đánh giá vận hành, kết quả so sánh kết quả của Chương trình TNTT, từ MS-Excel và Phasolpro TK - TNTT đều hoàn toàn giống nhau.

TÀI LIỆU THAM KHẢO

1. Ellison, Stephen LR, Vicki J. Barwick, et al. Practical statistics for the analytical scientist: a bench guide. Royal Society of Chemistry; 2009.
2. IOF, Standardization. Statistical methods for use in proficiency testing by interlaboratory comparison. ISO 13528; 2015.
3. Wilrich, Peter - T. Critical values of Mandel'sh and k, the Grubbs and the Cochran test statistic. AStA Advances in Statistical Analysis 97; 2013: 1-10.

4. Bộ Khoa học và Công nghệ. TCVN 10863: 2015 (ISO/TS 22791:2005), Độ chính xác (độ đúng và độ chụm) của phương pháp đo và kết quả đo - Hướng dẫn sử dụng TCVN 6910:2001 (ISO 5725-2:1994) trong thiết kế, thực hiện và phân tích thống kê các kết quả độ lặp lại và độ tái lập liên phòng thí nghiệm; 2015.
5. Bộ Khoa học và Công nghệ. TCVN 9596:2013, Phương pháp thống kê dùng trong thử nghiệm thành thạo bằng so sánh liên phòng thí nghiệm; 2013.
6. Viện kiểm nghiệm thuốc Thành phố Hồ Chí Minh. Báo cáo tổng kết chương trình thử nghiệm thành thạo so sánh liên phòng thí nghiệm năm 2012, 2014, 2016 và 2018; 2012-2018.
7. Viện kiểm nghiệm thuốc Thành phố Hồ Chí Minh. Chương trình thử nghiệm thành thạo năm 2020. URL: dqg-hcm.gov.vn/tin-tuc/thong-bao/308-chuong-trinh-thu-nghiem-thanh-thao-nam-2020.html. Ngày truy cập: 15/05/2020.