SEPTIEME PARTIE
TRAITEMENT DES POINTS ABERRANTS

1. Notion de point aberrant

Un point aberrant provient d'une mesure pour laquelle un ou plusieurs paramètres sont hors contrôle. Les valeurs aberrantes présentent des écarts par rapport à la moyenne ou au modèle réellement plus importants que les écarts dus à la variabilité naturelle des mesures.
Une telle définition est nécessairement imprécise parce que tout le problème consiste à définir un seuil à partir duquel les mesures doivent être rejetées.

Les valeurs aberrantes peuvent être soit distribuées **autour d'une moyenne, c'est le cas le plus fréquent, ou autour d'un droite ou de toute autre fonction mathématique**. Pour détecter les valeurs aberrantes on peut utiliser les mesures brutes dans le cas d'une distribution autour d'une moyenne, ou les résidus lorsque les mesures sont distribuées autour d'une droite ou d'un modèle y = f(x).

x_i (mesures brutes) dans le cas d'une moyenne et on pose $R_i = x_i$
$R_i = y_i - f(x_i)$ dans le cas d'un autre modèle

Le test utilisé habituellement est le test de DIXON mais nous verrons que ce test présente beaucoup d'inconvénients si le nombre de mesures est petit. On lui préfère alors le test de GRUBBS.

2. Test de DIXON

a) Principe du test

Le test de DIXON consiste à comparer la distance entre les points les plus éloignés du modèle et les points immédiatement plus voisins à l'étendue totale des résidus.

On commence à classer les résidus par ordre croissant :

Fig. 38 a
Principe du test de Dixon

A la suite de ce classement, les points aberrants se trouvent soit en R_1 soit en R_n. On calcule alors les rapports : (relations suivantes)

Si $3 \leq n \leq 7$ $$\boxed{Q_1 = \frac{R_2 - R_1}{R_n - R_1} \quad \text{et} \quad Q_2 = \frac{R_n - R_{n-1}}{R_n - R_1}} \tag{94}$$

Si $8 \leq n \leq 12$ $$\boxed{Q_1 = \frac{R_2 - R_1}{R_{n-1} - R_1} \quad \text{et} \quad Q_2 = \frac{R_n - R_{n-1}}{R_n - R_2}} \tag{95}$$

Si n > 12 $$\boxed{Q_1 = \frac{R_3 - R_1}{R_{n-2} - R_1} \quad \text{et} \quad Q_2 = \frac{R_n - R_{n-2}}{R_n - R_3}} \tag{96}$$

Les valeurs de Q_1 ou Q_5 sont d'autant plus élevées que les points extrêmes sont plus aberrants. Ces valeurs sont comparées à des valeurs limites QL qui dépendent du seuil de risque considéré (5% et 1 %), voir tables de DIXON. Le test se pratique de la manière suivante :

Q_1 ou Q_2 > QL (1%)	**R_1 ou R_n sont aberrants**
QL (5 %) < Q_1 ou Q_2 < QL (1 %)	**R_1 ou R_n sont douteux**
Q_1 ou Q_2 < QL (5 %)	**R_1 ou R_n ne sont pas aberrants**

b) Inconvénients du test de DIXON

Difficulté de rejeter des points aberrants lorsque le nombre de mesures est faible

Considérons le cas où il existe un seul point aberrant appelé R_1

Fig. 38 b

Exemple de rejet d'un point aberrant

appelons x la distance entre le point aberrant et le premier point "normal" et *a* l'étendue des points non-aberrants.

Le rejet est effectué suivant le critère :

$$Q = \frac{R_2 - R_1}{R_n - R_1} = \frac{x}{a + x} \geq QL$$

où QL représente la valeur limite tirée de la table de DIXON.

On présente dans le tableau ci-dessous le rapport x/a pour n = 6 et n = 4 qui sont des répétitions fréquemment rencontrées dans les laboratoires de contrôle.

x/a	α = 5 %	α = 1 %
n = 6 n = 4	2,5 5	5 12,5

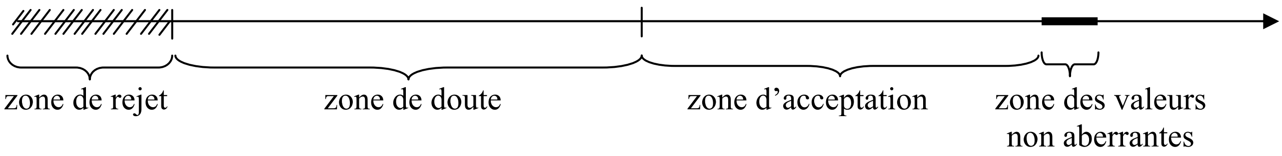

Fig. 38 c

Etendue des zones d'acceptation dans des zones de doute dans le cas d'un faible nombre de mesures

Nous avons indiqué sur la figure 38 les zones de doute et de rejet par rapport à l'étendue des valeurs non-aberrantes. *Pour n = 4 il faut un écart d'un facteur supérieur à 12 pour qu'on puisse considérer le point comme aberrant, ce qui est un écart extrêmement important par conséquent des points situés à x = 3 ou 5 et qui sont de nature à fausser la moyenne ou le modèle mathématique ne peuvent pas être rejetés par ce moyen*.

<u>Impossibilité de rejeter deux points aberrants dont les résidus sont de signe contraire</u>

Pour simplifier les calculs on admet qu'il existe deux points aberrants tels que $R_2 - R_1 = x = R_n - R_{n-1}$ (le raisonnement s'applique très bien si les deux valeurs sont voisines)

$$Q_1 = Q_2 = \frac{x}{a+2x}$$

une simple étude de cette fonction montre que Q_1 et Q_2 restent inférieurs à ½ donc le test de DIXON ne pourra pas rejeter ces points quelle que soit la valeur de x si n est inférieur à 8, ce qui est quasiment toujours le cas en chimie analytique.

<u>Impossibilité de rejeter deux points aberrants dont les résidus sont voisins et de même signe</u>

Fig 38 d
Points aberrants voisins

Dans ce cas le rapport $Q_1 = \dfrac{R_2 - R_1}{R_n - R_1}$ est petit et si l'étude s'arrête à l'analyse de ce rapport, aucun des points ne sera rejeté quelle que soit la distance R_2R_3.

3. Tests de Grubbs

Ce test présente un intérêt considérable parce qu'il permet le rejet de deux points aberrants dans une série de mesures ou le rejet d'une ou de deux moyennes par rapport à la moyenne générale. Comme pour le test de Dixon, les valeurs sont classées par ordre croissant. De plus ce test est beaucoup plus puissant dans le cas des petits échantillons.

a) Elimination d'une observation aberrante

On calcule les deux résidus normalisés et ramenés à des valeurs positives :

$$\boxed{G_1 = \frac{m - x_1}{s} \text{ et } G_n = \frac{x_n - m}{s}} \qquad (97)$$

Ces résidus sont comparés aux valeurs critiques à 5 % et à 1 % comme dans le cas du test de Dixon.

Si	**G_1 ou G_n > $G(\alpha = 1\ \%)$**	**x_1 ou x_n est aberrant**
Si	**$G(\alpha = 5\ \%) < G_1$ ou $G_n < G(\alpha = 1\ \%)$**	**x_1 ou x_n est douteux**
Si	**G_1 ou G_n < $G(\alpha = 5\ \%)$**	**x_1 ou x_n est non aberrant**

b) Elimination d'une moyenne aberrante

Toute la théorie s'applique à une collection de moyennes portant sur le même nombre de mesures (de petites variations de n_j sont acceptables). On remplace x_1 et x_n par m_1 et m_K, m par M et s par s_M.

$$s_M = \sqrt{\frac{(m_j - M)^2}{k - 1}} \qquad (98)$$

c) Elimination de deux observations aberrantes consécutives

Le principe du test consiste à calculer les sommes des carrés des écarts en considérant d'une part toutes les mesures, d'autre part en rejetant les points aberrants.

$$\boxed{G = SCE(n\text{-}2) / SCE(n)} \qquad (99)$$

SCE(n) est la somme des carrés des écarts de toutes les mesures par rapport à la moyenne (numérateur de la variance), SCE(n-2) est la somme des carrés des écarts des données non rejetées par rapport à la moyenne des données non rejetées.

On rejette soit les deux premières, soit les deux dernières observations dans la suite des observations classées par ordre croissant. Aucune norme ne prévoit le rejet des deux points extrêmes x_1 et x_n.
On teste G par rapport à des valeurs critiques données dans les tables de GRUBBS et on attribue le caractère "douteux" ou "aberrant" **simultanément aux deux données prises en considération.**
Attention, dans ce test, le sens des inéquations ci-dessus doit être inversé