การทดสอบค่าสุดต่างโดยใช้ Grubbs' test

จันทรัตน์ วรสรรพวิทย์

หากมีข้อมูลชุดหนึ่ง และสงสัยว่าข้อมูลชุดนี้มีค่าสงสัยต่างจากข้อมูลอื่นๆ ในชุดข้อมูลนั้น ซึ่งอาจมีสาเหตุจากความผิดพลาดต่างๆในขณะทำการทดสอบ เช่น การเตรียมตัวอย่าง การปนเปื้อนของสารรบกวน เครื่องมือ/อุปกรณ์มีปัญหา ถ้านำข้อมูลดังกล่าวไปคำนวณค่าสถิติอาจทำให้ค่าที่คำนวณได้เบี่ยงเบน เช่น ค่าส่วนเบี่ยงเบนมาตรฐานมีค่าสูงมาก หรือค่าเฉลี่ยเบ้ไปจากที่ควรจะเป็น โดยทั่วไปหากทราบสาเหตุแน่ชัดและมีเหตุผลชัดเจน เช่น มีการหก ปนเปื้อน การสอบเทียบหรือคำนวณไม่ถูกต้อง หรือวิเคราะห์ตัวอย่างผิด ผิดวิธี เป็นต้น เราสามารถตัดทิ้งได้เลย แต่หากไม่มีสาเหตุชัดเจนก็สามารถตรวจสอบค่าที่สงสัยนั้นว่าต่างจากกลุ่มอย่างมีนัยสำคัญทางสถิติหรือไม่ หากการทดสอบมีนัยสำคัญสรุปได้ว่าค่าที่สงสัยเป็นค่าสุดต่าง (outlier)

Outlier หมายถึง ข้อมูลที่มีค่าแตกต่างทั้งมากกว่าและน้อยกว่าจากข้อมูลในชุดเดียวกันมากผิดปกติ จนกระทั่งทำให้สงสัยว่าเป็นข้อมูลที่ไม่อยู่ในกลุ่มเดียวกัน เป็นสาเหตุให้ผลการวัดที่ใช้เป็นตัวแทนของกลุ่มคลาดเคลื่อนไป

การทดสอบ outlier ทำได้หลายวิธี เช่น นำข้อมูลลงในแผนภูมิควบคุม ใช้วิธีการทางสถิติ และเพื่อให้ได้ผลการวัดที่เป็นตัวแทนของตัวอย่างที่ถูกต้อง ควรพิจารณาตัดข้อมูลที่เป็น outlier ออก ในที่นี้จะกล่าวถึงเฉพาะ Grubbs' test ในการทดสอบ outlier

Grubbs' test เป็นการทดสอบค่าที่สงสัยโดยหาอัตราส่วนค่าความแตกต่างระหว่างค่าที่สงสัยกับค่าเฉลี่ยของตัวอย่างกับค่าส่วนเบี่ยงเบนมาตรฐานที่ยังไม่ตัดค่าที่สงสัยออก นำค่าที่ได้ไปเทียบกับค่าวิกฤตที่กำหนดในตารางสถิติของ Grubb สามารถนำมาใช้ทดสอบค่าที่สงสัยได้ครั้งละ 1 ข้อมูล หรือ 2 ข้อมูล

1. <u>กรณีค่าที่สงสัยมีข้อมูลเดียว</u> มีขั้นตอนการทดสอบดังนี้

   - เรียงข้อมูลจากน้อยไปหามาก
   - ตั้งสมมติฐานของการทดสอบ

     H_0 : ค่าที่สงสัย 1 ข้อมูล (ค่าน้อยที่สุด หรือค่ามากที่สุด) ไม่แตกต่างจากข้อมูลอื่น

     H_1 : ค่าที่สงสัย 1 ข้อมูล (ค่าน้อยที่สุด หรือค่ามากที่สุด) แตกต่างจากข้อมูลอื่น
   - กำหนดระดับนัยสำคัญ (α)

     กำหนด α = 0.01 สำหรับการทดสอบ outlier

     กำหนด α = 0.05 สำหรับการทดสอบ straggle ซึ่งเป็นเกณฑ์การเตือนก่อนข้อมูลเป็น outlier
   - คำนวณค่าเฉลี่ย และค่าส่วนเบี่ยงเบนมาตรฐาน

     ค่าเฉลี่ย $\bar{x} = \frac{1}{p}\sum_{i=1}^{p} x_i$

     ค่าส่วนเบี่ยงเบนมาตรฐาน

     $$s = \sqrt{\frac{1}{p-1}\sum_{i=1}^{p}(x_i - \bar{x})^2}$$

     เมื่อ p คือ จำนวนข้อมูลทั้งหมด
   - คำนวณค่าสถิติทดสอบ (G_{exp}) จากสูตร

- กรณีทดสอบข้อมูลที่มีค่าน้อยที่สุด

$$G_{\exp} = G_1 = \frac{(\bar{x} - x_1)}{s}$$

- กรณีทดสอบข้อมูลที่มีค่ามากที่สุด

$$G_{\exp} = G_p = \frac{(x_p - \bar{x})}{s}$$

- กำหนดค่าวิกฤต (G_{crit}) จากตาราง Grubbs' test two-tailed ในตารางที่ 1 พิจารณาค่าวิกฤตในช่อง one largest or one smallest ที่ upper 1% สำหรับ α = 0.01 และ upper 5% สำหรับ α = 0.05
- สรุปผล ถ้าค่าสถิติจากการคำนวณ (G_{exp}) มากกว่าค่าวิกฤต (G_{crit}) แสดงว่าค่าที่สงสัยเป็น outlier

2. <u>กรณีค่าที่สงสัยมี 2 ข้อมูล</u> มีขั้นตอนการทดสอบดังนี้

- เรียงข้อมูลจากน้อยไปหามาก
- ตั้งสมมติฐานของการทดสอบ

H_0 : ค่าที่สงสัย 2 ข้อมูล (ค่ามากที่ติดกันหรือค่าน้อยที่ติดกัน) ไม่แตกต่างจากข้อมูลอื่น

H_1 : ค่าที่สงสัย 2 ข้อมูล (ค่ามากที่ติดกันหรือค่าน้อยที่ติดกัน) แตกต่างจากข้อมูลอื่น

- กำหนดระดับนัยสำคัญ

กำหนด α = 0.01 สำหรับการทดสอบ outlier

กำหนด α = 0.05 สำหรับการทดสอบ straggle

- คำนวณค่าสถิติทดสอบ จากสูตร

กรณีทดสอบค่าที่สงสัยมีค่ามาก

$$G = \frac{s^2_{p-1,p}}{s^2_0}$$

โดยที่ $$s^2_0 = \sum_{i=1}^{p}(x_i - \bar{x})^2$$

$$\bar{x} = \frac{1}{p}\sum_{i=1}^{p} x_i$$

$$s^2_{p-1,p} = \sum_{i=1}^{p-2}\left(x_i - \bar{x}_{p-1,p}\right)^2$$

$$\bar{x}_{p-1,p} = \frac{1}{p-2}\sum_{i=1}^{p-2} x_i$$

กรณีทดสอบค่าที่สงสัยมีค่าน้อย

$$G = \frac{s^2_{1,2}}{s^2_0}$$

โดยที่ $$s^2_{1,2} = \sum_{i=3}^{p}\left(x_i - \bar{x}_{1,2}\right)^2$$

$$\bar{x}_{1,2} = \frac{1}{p-2}\sum_{i=3}^{p} x_i$$

- กำหนดค่าวิกฤต (G_{crit}) จากตาราง Grubbs' test two-tailed ในตารางที่ 1 พิจารณาค่าวิกฤตในช่อง two largest or two smallest ที่ lower1% สำหรับ α = 0.01 และ lower 5% สำหรับ α = 0.05
- สรุปผล ถ้าค่าสถิติจากการคำนวณ (G_{exp}) น้อยกว่าค่าวิกฤต (G_{crit}) แสดงว่าค่าที่สงสัยเป็น outlier

ตารางที่ 1 แสดงค่าวิกฤตของการทดสอบ Grubb (Grubbs' test two-tailed)

p	one largest or one smallest		two largest or two smallest	
	upper 1%	upper 5%	lower 1%	lower 5%
7	2.139	2.020	0.0308	0.0708
8	2.274	2.126	0.0563	0.1101
9	2.387	2.215	0.0851	0.1492

p คือ จำนวนข้อมูล

<u>ตัวอย่าง</u> การวิเคราะห์หาปริมาณ polycyclic aromatic hydrocarbon (PAHs) ในตัวอย่างดิน ทำการวิเคราะห์ซ้ำ 8 ครั้ง ได้ผลดังนี้ 5.00, 5.00, 5.10, 5.20, 5.10, 6.20, 5.15, 6.10 ข้อมูลชุดนี้มี outlier หรือไม่ (เปรียบเทียบผลการทดสอบข้อมูลเดียว และ 2 ข้อมูล)

วิธีทำ

- นำผลที่ได้เรียงจากน้อยไปหามากได้ ดังนี้

5.00, 5.00, 5.10, 5.10, 5.15, 5.20, 6.10, 6.20

<u>ทดสอบค่าที่สงสัยมีข้อมูลเดียว</u>

ในที่นี้จะพิจารณา 6.20 เป็นค่าที่สงสัย

- ตั้งสมมติฐานของการทดสอบ

H_0 : 6.20 ไม่แตกต่างจากข้อมูลอื่นๆ

H_1 : 6.20 แตกต่างจากข้อมูลอื่นๆ

- กำหนดระดับนัยสำคัญ

กำหนด α = 0.01 สำหรับการทดสอบ outlier

กำหนด α = 0.05 สำหรับการทดสอบ straggle

- คำนวณค่าเฉลี่ย และค่าส่วนเบี่ยงเบนมาตรฐาน

คำนวณค่าเฉลี่ย $\bar{x} = \frac{1}{p}\sum_{i=1}^{p} x_i$

$$= \frac{1}{8}(5.00+5.00+5.10+...+6.20)$$

$$= 5.363$$

คำนวณค่าส่วนเบี่ยงเบนมาตรฐาน

$$s = \sqrt{\frac{1}{p-1}\sum_{i=1}^{p}(x_i-\bar{x})^2}$$

$$= \sqrt{\frac{1}{8-1}(5.00-5.363)^2+...+(6.20-5.363)^2}$$

$$= 0.5062$$

- คำนวณค่าสถิติทดสอบ (G_{exp}) จากสูตร

$$G_{exp} = G_p = \frac{(x_p-\bar{x})}{s} = \frac{6.20-5.363}{0.5062} = 1.65$$

- กำหนดค่าวิกฤต (G_{crit}) จากตารางที่ 1

α = 0.01 n = 8 ได้ค่า G_{crit} = 2.274

α = 0.05 n = 8 ได้ค่า G_{crit} = 2.126

เปรียบเทียบค่าที่คำนวณได้กับค่าวิกฤต พบว่า ค่าที่คำนวณได้ (G_{exp} = 1.65) น้อยกว่าค่าวิกฤต (G_{crit} = 2.274)

<u>สรุปผล</u> การทดสอบไม่มีนัยสำคัญ ยอมรับสมมติฐานหลัก แสดงว่า 6.20 ไม่เป็น outlier

<u>ทดสอบค่าที่สงสัยมี 2 ข้อมูล</u>

ในที่นี้จะพิจารณา 6.20 และ 6.10 เป็นค่าที่สงสัย

- ตั้งสมมติฐานของการทดสอบ

H_0 : 6.20 และ 6.10 ไม่แตกต่างจากข้อมูลอื่นในกลุ่ม

H_1 : 6.20 และ 6.10 แตกต่างจากข้อมูลอื่นในกลุ่ม

- กำหนดระดับนัยสำคัญ

กำหนด α = 0.01 สำหรับการทดสอบ outlier

กำหนด α = 0.05 สำหรับการทดสอบ straggle

- คำนวณค่าสถิติทดสอบ

กรณีทดสอบค่าที่สงสัยมีค่ามาก

$$s_0^2 = \sum_{i=1}^{n}(x_i - \bar{x})^2$$

$$= (5.00-5.363)^2 + \ldots + (6.20-5.363)^2$$

$$\bar{x}_{p-1,p} = \frac{1}{p-2}\sum_{i=1}^{p-2} x_i$$

$$= \frac{1}{8-2}(5.00+5.00+5.10+5.10+5.15+5.20)$$

$$= 5.092$$

$$s_{p-1,p}^2 = \sum_{i=1}^{p-2}(x_i - \bar{x}_{p-1,p})^2$$

$$= (5.00-5.092)^2 + (5.00-5.092)^2 + \ldots + (5.20-5.092)^2$$

$$= 0.032$$

ค่าสถิติทดสอบ

$$G = \frac{s_{p-1,p}^2}{s_0^2} = \frac{0.032}{1.794} = 0.0178$$

- กำหนดค่าวิกฤต (G_{crit}) จากตารางที่ 1

α = 0.01 n = 8 ได้ค่า G_{crit} = 0.0563

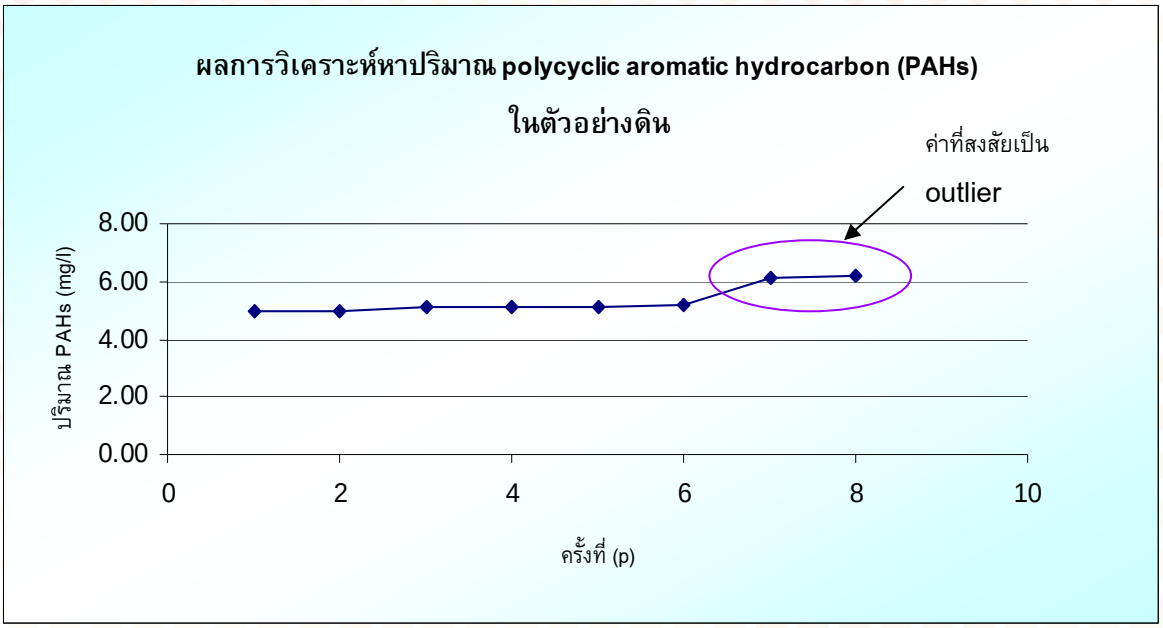
α = 0.05 n = 8 ได้ค่า G_{crit} = 0.1101

เปรียบเทียบค่าที่คำนวณได้กับค่าวิกฤต พบว่า ค่าที่คำนวณได้ (G_{exp} = 0.0178) น้อยกว่าค่าวิกฤต (G_{crit} = 0.0563)

<u>สรุปผล</u> การทดสอบมีนัยสำคัญ ปฏิเสธสมมติฐานหลัก แสดงว่า 6.20 และ 6.10 เป็น outlier

จากตัวอย่างที่กล่าวมา หากทดสอบค่าที่สงสัยครั้งละ 1 ข้อมูล สรุปว่าไม่มี outlier ทั้งนี้เนื่องจากค่า 6.20 ไม่แตกต่างจากค่า 6.10 ทำให้การทดสอบไม่มีนัยสำคัญ 6.20 ไม่เป็น outlier แต่เมื่อทดสอบค่าที่สงสัยพร้อมกัน 2 ค่า พบว่าทั้ง 6.20 และ 6.10 เป็น outlier ดังนั้นในการทดสอบค่าที่สงสัยว่าเป็น outlier หรือไม่นั้น ผู้ทดสอบควรพิจารณาข้อมูลเบื้องต้นก่อน ดังภาพที่ 1 หากเลือกใช้สถิติในการทดสอบไม่เหมาะสม จะทำให้การสรุปผลผิดพลาด

นอกจากนี้การตัดค่าที่เป็น outlier ออกนั้นทำให้จำนวนข้อมูลลดลง ดังนั้นห้องปฏิบัติการต้องพิจารณาว่ายังคงเหลือข้อมูลเพียงพอในการนำไปใช้งานหรือไม่ หากไม่เพียงพอจะต้องทดสอบตัวอย่างเพิ่มให้ครบตามมาตรฐานของวิธีที่อ้างอิงด้วย รวมถึงต้องพิจารณาว่าหากมีข้อมูลที่เป็น outlier มาก โดยมีการทดสอบซ้ำหลายครั้งในข้อมูลชุดเดียวกัน ผู้ทดสอบจะต้องพิจารณาถึงปัญหาของการทดสอบดังกล่าวด้วย



ภาพที่ 1 แสดงผลการวิเคราะห์หาปริมาณ polycyclic aromatic hydrocarbon (PAHs) ในตัวอย่างดิน

เอกสารอ้างอิง

ISO 5725-2 : 1994, Accuracy (trueness and precision) of measurement methods and results- Part 2 : Basic method for the determination of repeatability and reproducibility of a standard measurement method.