Univerzita Palackého v Olomouci

Rozdělení pravděpodobnosti, bodové a intervalové odhady

Chemometrie I (ACH/CHEX1)

1

Univerzita Palackého v Olomouci

Náplň předmětu a doporučená literatura

- **Náplň předmětu – statistická analýza jednorozměrných dat:**
  - bodové a intervalové odhady,
  - průzkumová analýza jednorozměrných dat,
  - testování hypotéz,
  - analýza rozptylu,
  - lineární regrese, kalibrace,
  - korelace.

- **LITERATURA:**

  - Meloun M., Militký J.: Kompendium statistického zpracování dat. Academia, Praha 2002 (+ novější vydání).
  - Studijní materiály na webových stránkách katedry.
  - Meloun M., Militký J.: Statistické zpracování experimentálních dat. Plus, Praha 1994 (+ novější vydání).

2

Univerzita Palackého
v Olomouci

Rozdělení pravděpodobnosti

3

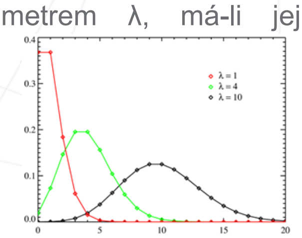
Univerzita Palackého
v Olomouci

Diskrétní rozdělení pravděpodobnosti

- Alternativní rozdělení:
  - máme 1 pokus, kdy zkoumaný jev A nastane nebo nenastane,
  - Př. hod mincí, úspěch či neúspěch u zkoušky.
- Binomické rozdělení:
  - U 1 pokusu může sledovaný jev A nastat s pravděpodobností *P* nebo nenastat s pravděpodobností *Q = 1 – P*.
- Poissonovo rozdělení:
  - Náhodná veličina *x* má Poissonovo rozdělení s parametrem λ, má-li její pravděpodobnostní funkce tvar:

$$P(x) = e^{-\lambda} \times \frac{\lambda^x}{x!}$$

Graf hustoty pravděpodobnosti Poissonova rozdělení



4

Univerzita Palackého v Olomouci

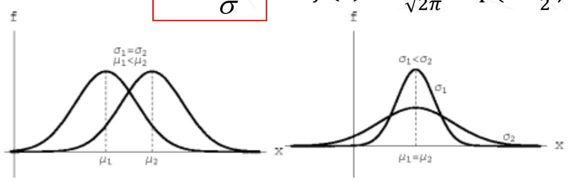
Spojitá rozdělení pravděpodobnosti

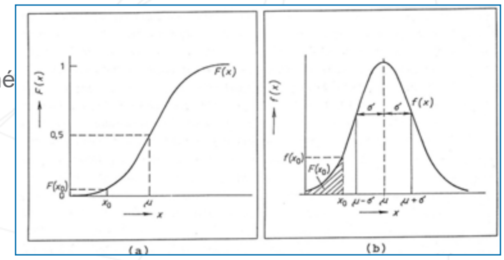
- Normální (Gaussovo) rozdělení:
  - Poprvé popsáno při studiu chování chyb měření. Později se ukázalo, že mnoho náhodných veličin má toto rozdělení, např.: výška a váha živých organismů, rozměry výrobků atp.
  - Náhodná veličina *x* má normální rozdělení s parametry μ a σ^2 – N(μ, σ²), má-li hustotu pravděpodobnosti *f(x)*:

$$f(x)=\frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}}\exp\left(-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}\right) \quad \text{pro} \quad -\infty < x < \infty, \sigma > 0$$

  - Normování – transformace z N(μ, σ²) na N(0, 1), tj. tabelované rozdělení:

$$\boxed{u=\frac{x-\mu}{\sigma}} \qquad f(z) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\exp\left(-\frac{z^2}{2}\right)$$





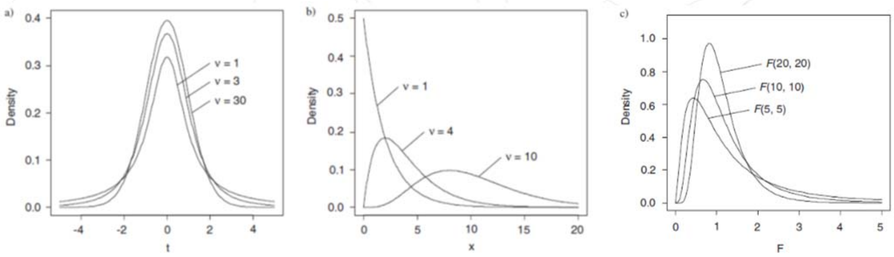
(a) graf distribuční funkce
(b) graf hustoty pravděpodobnosti

5

Univerzita Palackého v Olomouci

Spojitá rozdělení pravděpodobnosti

- Rozdělení odvozená od normálního rozdělení („teoretická“ rozdělení):
  - **Studentovo t rozdělení** – aproximuje normální rozdělení pro malý počet dat, využívá se u výpočtů intervalů spolehlivosti či řady statistických testů. Je to symetrické rozdělení s počtem stupňů volnosti ν = n – 1. Pro n > 100 se limitně blíží normálnímu rozdělení.
  - **Chí-kvadrát rozdělení** (χ^2) – popisuje rozdělní rozptylu, využívá se u některých neparametrických testů. Jde o asymetrické rozdělení s počtem stupňů volnosti ν = n – 1.
  - **F rozdělení** (Fisherovo-Snedecorovo rozdělení) – popisuje rozdělní podílu dvou rozptylů, využívá se v analýze rozptylu. Je asymetrické a popisuje se dvěma stupni volnosti (ν_1, ν_2).



Hustoty pravděpodobnosti pro:
(a) Studentovo t roz.
(b) Chí-kvadrát roz.
(c) F rozdělení

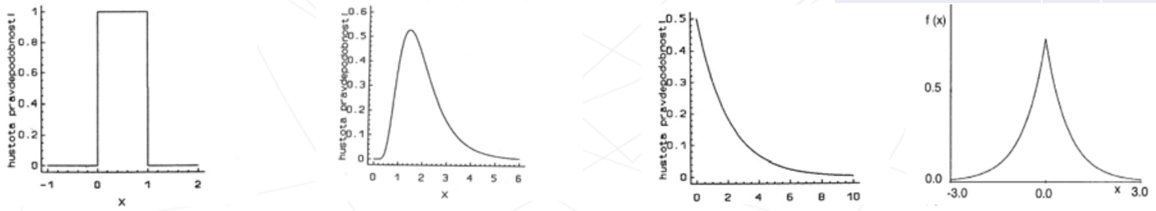
6

Univerzita Palackého v Olomouci

Spojitá rozdělení pravděpodobnosti

- „Experimentální“ rozdělení:
  - **Rovnoměrné rozdělení**
  - **Logaritmicko-normální rozdělení (LN)**
  - **Exponenciální rozdělení**
  - **Laplaceovo rozdělení (dvojitě exponenciální)**

Rozdělení	g_1	g_2
rovnoměrné	0	< 3
log-normální	> 0	> 3
exponenciální	2	9
Laplaceovo	0	6



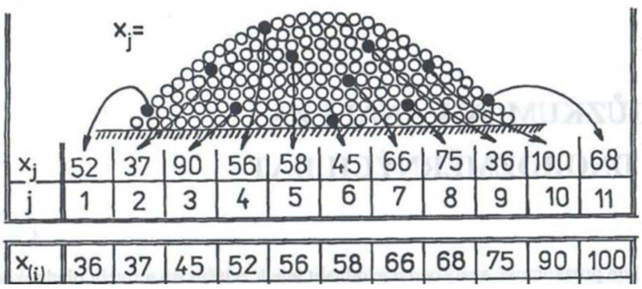
Hustoty pravděpodobnosti pro:
rovnoměrné roz. **logaritmicko-normálné roz.** **exponenciální roz.** **Laplaceovo roz.**

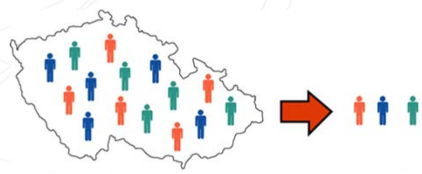
7

Univerzita Palackého v Olomouci

Základní soubor a náhodný výběr

- Ve statistice se předpokládá, že sada zpracovávaných hodnot je tzv. náhodným výběrem z tzv. základního souboru.
  - Základní soubor (aj. population): teoreticky všechny možné výsledky daného pozorování s parametry: střední (pravdivá) hodnota $\boldsymbol{\mu}$ a rozptylem $\boldsymbol{\sigma^2}$.
  - Náhodný výběr (aj. sample): náhodně vybraná data ze základního souboru s určitými vlastnostmi a parametry: výběrový odhad střední hodnoty (obvykle) $\bar{x}$ a výběrový odhad rozptylu $\boldsymbol{s^2}$.





základní soubor **náhodný výběr**

8

Univerzita Palackého v Olomouci

Náhodný výběr, momentové charakteristiky

- Vlastnosti reprezentativního náhodného výběru:
  1. Prvky výběru x_i jsou vzájemně nezávislé.
  2. Výběr je homogenní, tj. všechna x_i jsou ze stejného rozdělení.
  3. Předpokládá se, že jde o normální rozdělení.
  4. Všechny x_i mají stejnou pravděpodobnost, že budou zařazeny do výběru.
- **Momenty** = číselné charakteristiky rozdělení podávající informace o vlastnostech rozdělení:
  - Obecný moment r-tého stupně $M_r = \int x^r\, p(x)\, dx$
  - Centrální moment r-tého stupně $M(\mu)_r = \int (x - \mu)^r\, p(x)\, dx$
  - M_1 – střední hodnota – charakterizuje polohu
  - $M(\mu)_2$ – rozptyl – charakterizuje preciznost
  - $M(\mu)_3$ – koeficient šikmosti – charakterizuje tvar – g_1
  - $M(\mu)_4$ – koeficient špičatosti – charakterizuje tvar – g_2

9

Univerzita Palackého v Olomouci

Bodové odhady

(polohy, rozptýlení a tvaru)

10

Univerzita Palackého
v Olomouci

Vlastnosti a dělení bodových odhadů

- Vlastnosti bodových odhadů:
  - KONZISTENTNOST odhadu – s rostoucí četností *n* se zmenšuje rozdíl mezi odhadem ($\bar{x}$) a skutečnou hodnotou μ.
  - NESTRANOST odhadu – pro n blížící se k nekonečnu $\bar{x} = \mu$
  - VYDATNOST odhadu – rozptyl odhadu okolo skutečné hodnoty μ se s rostoucí četností n zmenšuje. Nestranný odhad ani při malém *n* soustavně nepodhodnocuje ani nenadhodnocuje odhadovaný parametr.
  - ROBUSTNOST odhadu – necitlivost na odchylky od předpokládaného rozdělení.
- Dělení bodových odhadů (zejména polohy):
  - odhady založené na kvantilech (kvantilové charakteristiky, např. medián),
  - odhady založené na momentech (momentové charakteristiky, např. aritmetický průměr),
  - pro diskrétní proměnné se používá modus (x_M), tj. nejčastější prvek v datech:

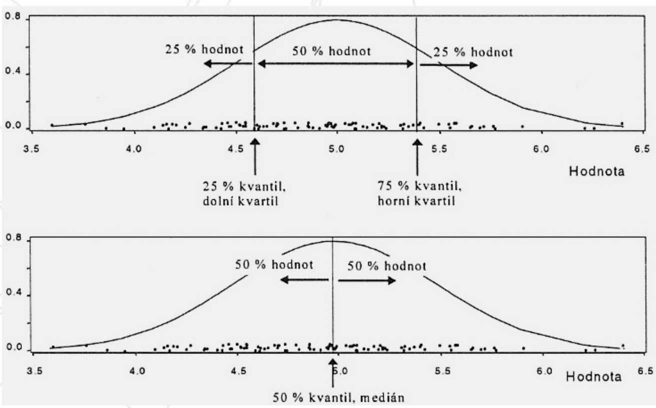
Př.: 1; 3; 3; 3; 3; 4; 5; 5; 6; 8; 9; 9; 9 $\quad x_M = 3$

11

Univerzita Palackého
v Olomouci

Kvantilové odhady polohy

- KVANTILY – hodnoty znaku, které dělí data na určitý počet skupin o stejném počtu prvků.
- Medián je kvantil, který rozděluje data na 2 části o 50 % rozsahu souboru.
- $\tilde{x}_{0,5} = \begin{cases} n \text{ je liché } & x_{(n+1)/2} \\ n \text{ je sudé } & \frac{x_{n/2} + x_{(n+2)/2}}{2} \end{cases}$
- Kvartily – rozdělují uspořádanou řadu hodnot na 4 skupiny se stejnou četností, prostřední kvartil = medián dolní kvartil se značí $\tilde{x}_{0,25}$ a horní $\tilde{x}_{0,75}$.
- Decily – rozdělují uspořádanou řadu hodnot na 10 skupin o stejně velké četnosti.

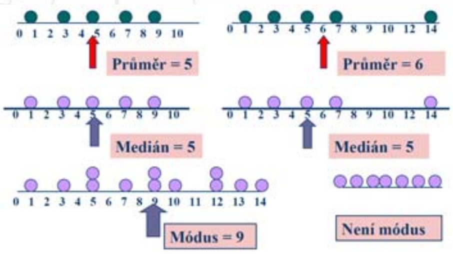


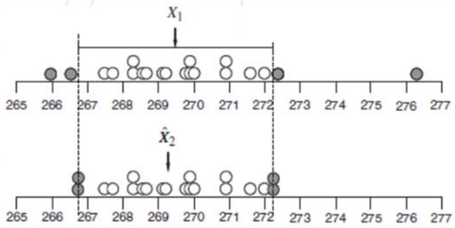
12

Univerzita Palackého
v Olomouci

Momentové odhady polohy

- Aritmetický průměr ($\bar{x}$) $$\boxed{\bar{x} = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} x_i}$$
- Vážený průměr $$\bar{x}_w = \frac{\sum w_i \cdot x_i}{\sum w_i}, \text{ kde } \quad w_i \text{ je statistická váha}$$
- Geometrický (harmonizovaný) průměr $$\bar{x}_g = \sqrt[n]{x_1 \cdot x_2 \cdots x_n}$$
- Uřezaný průměr $$\boxed{\begin{array}{l} \bar{x}(\upsilon) \quad 10\% \text{ uřezání } \bar{x}(10) \\ \bar{x}(\upsilon) = \dfrac{1}{n-2M}\displaystyle\sum_{i=M+1}^{n-M} x_i \qquad M = \operatorname{int}\left(\dfrac{\upsilon \cdot n}{100}\right) \end{array}}$$
- Winsorizovaný průměr: winsorizace = nahrazení odlehlých výsledků sousedními výsledky uspořádaného souboru, které již nejsou odlehlé; nezmenšuje se četnost souboru a zachovává se charakter dat.





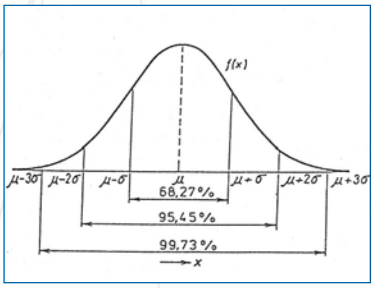
Princip winsorizace

13

Univerzita Palackého
v Olomouci

Bodové odhady rozptýlení

- Rozpětí: rozdíl nevětší a nejmenší hodnoty statistického výběru $R = x_{max} - x_{min}$
- Interkvartilové rozpětí: rozdíl horního ($\tilde{x}_{0,75}$) a dolního ($\tilde{x}_{0,25}$) kvartilu
  - Obsahuje 50 % prostředních hodnot
- Rozptyl σ^2 , směrodatná odchylka σ $$\boxed{\sigma^2 = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(x_i - \mu)^2}$$
- Výběrový odhad rozptylu s^2 , výběrový odhad směrodatné odchylky s $$\boxed{s^2 = \frac{1}{n-1}\sum_{i=1}^{n}(x_i - \bar{x})^2}$$
- Relativní směrodatná odchylka – RSD
  - Totožná s variačním koeficientem – CV $$\boxed{RSD = \frac{s}{\bar{x}} \cdot 100 \quad [\%]}$$
- Směrodatná odchylka průměru $$s(\bar{x}) = \frac{s}{\sqrt{n}}$$



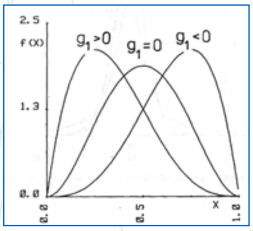
14

Univerzita Palackého v Olomouci

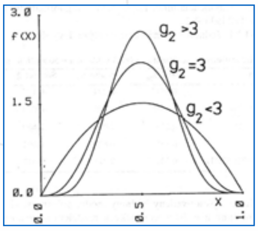
Bodové odhady tvaru

- Koeficient šikmosti g_1 – číslo, které charakterizuje nesouměrnost rozdělení, dává informace o tvaru rozdělení co do zešikmení resp. nesouměrnosti.
  - Pro symetrická rozdělení platí, že $g_1 = 0$
  - Akceptační interval pro g_1 <-0,3; +0,3>
- Koeficient špičatosti g_2 – číslo, charakterizující zkoncentrování (protažení) prvků souboru v blízkosti určité hodnoty znaku.
  - Akceptační interval pro g_2 <2,2; 4,0>
  - Pro normální rozdělení $g_2 = 3$
  - Pozn: některé SW (např. MS Excel) od vzorce pro g_2 odečítají 3

$$g_1 = \frac{\sqrt{n} \cdot \sum (x_i - \bar{x})^3}{\left[\sum (x_i - \bar{x})^3\right]^{3/2}} \qquad g_2 = \frac{n \cdot \sum (x_i - \bar{x})^4}{\left[\sum (x_i - \bar{x})^2\right]^2}$$



$g_1 < 0$ – negativní zešikmení
$g_1 > 0$ – pozitivní zešikmení



15

Univerzita Palackého v Olomouci

Intervalové odhady
(polohy a rozptýlení)

16

Univerzita Palackého
v Olomouci

Intervalové odhady polohy

- Chceme-li vedle bodového odhadu parametru vyjádřit i preciznost odhadu, užijeme intervalový odhad. Parametr pak odhadujeme nikoli jednou hodnotou, nýbrž dvěma číselnými hodnotami L_1 a L_2, které tvoří meze intervalu spolehlivosti (IS). Ten pokrývá neznámý parametr souboru, např. μ s předem zvolenou a dostatečně velkou pravděpodobností 1-α, kterou nazýváme hladinou spolehlivosti $P(L_1 \leq \mu \leq L_2) = 1-\alpha$, kde α je hladina významnosti.
- IS udává rozmezí hodnot střední hodnoty μ, který je v souladu s průměrem náhodného výběru $\bar{x}$ na dané hladině spolehlivosti. Pro základní soubor se střední hodnotou μ a směrodatnou odchylkou σ bude 95 % průměrů z náhodných výběrů ležet v rozmezí dané IS:

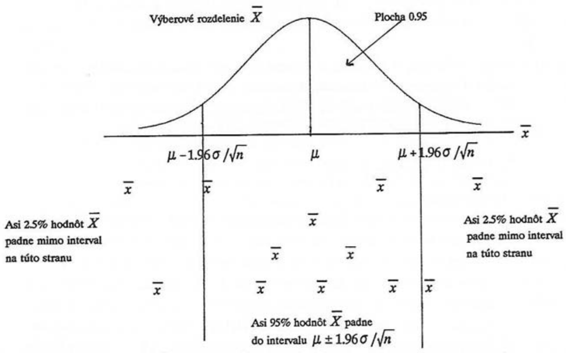
$$\boldsymbol{\mu - 1,96 \cdot \left(\frac{\sigma}{\sqrt{n}}\right) < \bar{x} < \mu + 1,96 \cdot \left(\frac{\sigma}{\sqrt{n}}\right)}$$

  - hodnota 1,96 je hodnota dvoustranného Studentova t pro α = 0,05 a ν = ∞.

17

Univerzita Palackého
v Olomouci

Intervalové odhady polohy



- V praxi budeme mít k dispozici $\bar{x}$ (z experimentálních dat) a potřebujeme znát interval spolehlivosti střední hodnoty základního souboru. Rovnici se upraví:

$$\boldsymbol{\bar{x} - 1,96 \cdot \left(\frac{\sigma}{\sqrt{n}}\right) < \mu < \bar{x} + 1,96 \cdot \left(\frac{\sigma}{\sqrt{n}}\right)}$$

18

Univerzita Palackého v Olomouci

Interval spolehlivosti střední hodnoty

- **Známe směrodatnou odchylku σ, nebo je-li odhad s určen z výběru o n > 30**

$$L_{1,2} = \bar{x} \pm z_{(1-\frac{\alpha}{2})} \frac{\sigma}{\sqrt{n}}$$

  - Ve vzorci $z_{(1-\alpha/2)}$ představuje kvantil normovaného normálního rozdělení, v přírodních vědách se nejčastěji užívá α = 0,05.

- **Neznáme σ, vypočte se její odhad s, používá se pro n < 30**

$$L_{1,2} = \bar{x} \pm t_{(1-\frac{\alpha}{2};n-1)} \frac{s}{\sqrt{n}}$$

  - Ve vzorci použité $t_{(1-\alpha/2,\ n-1)}$ představuje kvantil Studentova t-rozdělení s n-1 stupni volnosti.

19

Univerzita Palackého v Olomouci

Interval spolehlivosti „malých" souborů

- **n = 2:**
  - průměr a rozpětí (směrodatná odchylka není vhodná)
  - dovolená diference D_r

$$D_r(\%) = \frac{x_1 - x_2}{(x_1+x_2)/2} \times 100$$

- **n = 3:**
  - Vhodnější je použít aritmetický průměr ze dvou bližších hodnot ($\overline{x_D}$) než aritmetický průměr ze všech 3 hodnot a interval vypočítat $L_{1,2} = \overline{x_D} \pm 4,30 \frac{s}{\sqrt{3}}$
- **n = 2-3:**
  - starší postup podle Deana a Dixona, ve kterém *R* je rozpětí a K_n je tabelovaný koeficient

$$L_{1,2} = \bar{x} \pm K_n \cdot R$$

K_n:

n	α = 0,05	α = 0,01
2	6,4	31,8
3	1,3	3,0

20

Univerzita Palackého
v Olomouci

Interval spolehlivosti „malých“ souborů

- **Hornův postup analýzy malých výběrů, n = 4 – 20 (pořádkové statistiky)**

1. Pořádkové statistiky (setřídit data podle velikosti),
2. Vyčíslení hloubky pivotu:

$$\boxed{H = \operatorname{int}\frac{(n+1)/2}{2} \quad pro\ n\ lich\acute{e}; \qquad H = \operatorname{int}\frac{\frac{n+1}{2}+1}{2} \quad pro\ n\ sud\acute{e}}$$

3. Určení dolního pivotu $x_{Dol} = x_{(H)}$ a horního pivotu $x_{Hor} = x_{(n+1-H)}$
4. Parametr polohy = **pivotová polosuma P_L**:

$$\boxed{P_L = \frac{x_{Dol} + x_{Hor}}{2}}$$

5. Parametr rozptýlení = **pivotové rozpětí $R_L = x_{Hor} - x_{Dol}$**

$$\mathbf{L_{1,2} = P_L \pm R_L \cdot T_{H(1-\alpha/2;n)}}$$

21

Univerzita Palackého
v Olomouci

Interval spolehlivosti mediánu a rozptylu

- Interval spolehlivosti mediánu:
  - Je možné ho vypočítat několika způsoby, zde uveden neparametrický odhad, který je v QC Expertu a využívá mediánovou směrodatnou odchylku $s_{\tilde{x}}$:

$$L_{1,2} = \tilde{x}_{0,5} \pm s_{\tilde{x}} \cdot t_{(1-\frac{\alpha}{2}, n-1)}$$

$$kde \quad s_{\tilde{x}} = \frac{x_{(n-k+1)} - x_k}{2 \cdot z_{\alpha/2}} \quad a \quad k = \frac{n+1}{2} - (z_{\alpha/2} \cdot \sqrt{\frac{n}{4}})$$

- Interval spolehlivosti rozptylu:
  - Meze oboustranného IS rozptylu σ^2 jsou dány pro dolní mez L_1 a pro horní mez L_2, kde ve jmenovateli vzorců jsou kritické hodnoty rozdělení χ^2 (chí kvadrát):

$$L_1 = \frac{s^2 \cdot (n-1)}{\chi^2_{(1-\frac{\alpha}{2}, n-1)}} \qquad L_2 = \frac{s^2 \cdot (n-1)}{\chi^2_{(\frac{\alpha}{2}, n-1)}}$$

22

Univerzita Palackého v Olomouci

Intervalové odhady

- Intervaly spolehlivosti lze konstruovat jako:
  - oboustranné <L_1,L_2>, kdy se používá kvantil (1 − α/2),
  - jednostranné <L_1, +∞) nebo (−∞ , L_2>, kdy se používá kvantil (1 − α).
- Pravostranný (1 − α)% IS pro μ $-\infty \leq \mu \leq \bar{x} + z_{(1-\alpha)} \cdot \frac{\sigma}{\sqrt{n}}$
- Levostranný (1 − α)% IS pro μ $\bar{x} - z_{(1-\alpha)} \cdot \frac{\sigma}{\sqrt{n}} \leq \mu \leq +\infty$

- **Př.:** výrobní podnik potřebuje s 95% spolehlivostí odhadnout horní hranici průměrné denní produkce. Pro náhodný výběr 36 dnů byl průměrný objem výroby 1150 a σ = 312 kusů.
- **Pozn.:** terminologie použitá v překladu normy ISO 3534: ***confidence interval*** = konfidenční interval (tedy ne interval spolehlivosti).

23

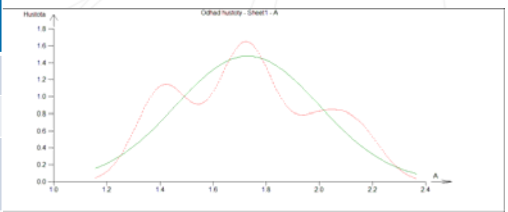
Univerzita Palackého v Olomouci

Příklad: bodové a intervalové odhady polohy

- **DATA** (n = 7):

1,38 1,45 1,66 1,74 1,76 1,98 2,14

Parametr	Bodový odhad	Intervalový odhad (95 %)
průměr	1,73	1,48-1,98
medián	1,74	1,27-2,21
pivotová polosuma (Hornův postup)	1,72	1,33-2,01
10% uřezaný průměr	1,72	1,39-2,05



24