Intervalový odhad parametrů

Intervalový odhad představuje interval, ve kterém se bude se zadanou pravděpodobností či statistickou jistotou $(1 - \alpha)$ nacházet skutečná hodnota ("pravda") daného parametru Θ.

Neznámý parametr Θ odhadujeme dvěma číselnými hodnotami L_1 a L_2, které tvoří **meze** tzv. ***intervalu spolehlivosti*** (čili konfidenčního intervalu).

Interval spolehlivosti pokryje parametr Θ s předem zvolenou, statistickou jistotou čili dostatečně veli-kou pravděpodobností $P = (1 - \alpha)$

$$P(L_1 < \Theta < L_2) = 1 - \alpha$$

nazvanou ***koeficient spolehlivosti*** (čili konfidenční koeficient, statistická jistota). Je obyčejně roven 0.95 nebo 0.99.

Parametr α se nazývá ***hladina významnosti***.

Interval spolehlivosti vyjadřuje tvrzení:

Statistická jistota, s jakou bude "pravda" Θ ležet v náhodných mezích L_1, L_2 je rovna právě $1 - \alpha$.

Konstrukce intervalových odhadů

Postup konstrukce intervalu spolehlivosti střední hodnoty μ normálního rozdělení $N(\mu, \sigma^2)$:

1. Nejlepším bodovým odhadem střední hodnoty μ je výběrový průměr $\bar{x}$ s rozdělením $N(\mu, \sigma^2/n)$, pak v intervalu $\bar{x} \pm 1.96\sigma/\sqrt{n}$ leží přibližně 95% hodnot náhodných veličin výběru o rozsahu n,

$$\boxed{\bar{x} - 1.96\,\frac{\sigma}{\sqrt{n}} \le \mu \le \bar{x} + 1.96\,\frac{\sigma}{\sqrt{n}}}$$

Hodnota 1.96 je totiž 100(1 - 0.05/2) = 97.5%ní kvantil normovaného Gaussova normálního rozdělení $u_{0.975}$.

2. **V praxi neznáme** směrodatnou odchylku σ. Jelikož má $\frac{\bar{x} - \mu}{s}\sqrt{n}$ Studentovo t-rozdělení, platí

$$P(-t_{1-\alpha/2}(\nu) \le \frac{\bar{x} - \mu}{s}\sqrt{n} \le t_{1-\alpha/2}(\nu)) = 1 - \alpha$$

kde $t_{1-\alpha/2}(\nu)$ je 100(1 - α/2)%ní kvantil Studentova rozdělení s $\nu = n - 1$ stupni volnosti.

100(1 - α)%ní int. spolehlivosti střední hodnoty μ

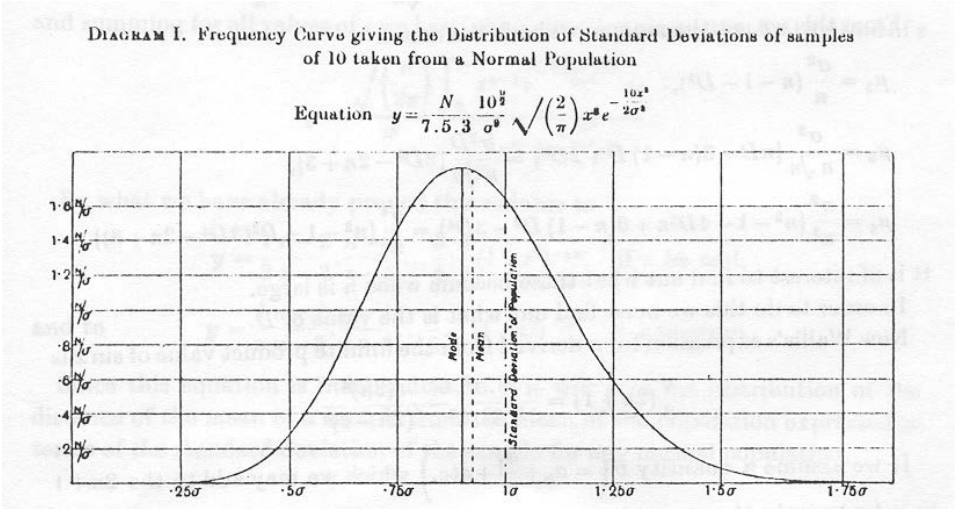
bude $$\boxed{\bar{x} - t_{1-\alpha/2}(\nu)\frac{s}{\sqrt{n}} \le \mu \le \bar{x} + t_{1-\alpha/2}(\nu)\frac{s}{\sqrt{n}}}$$

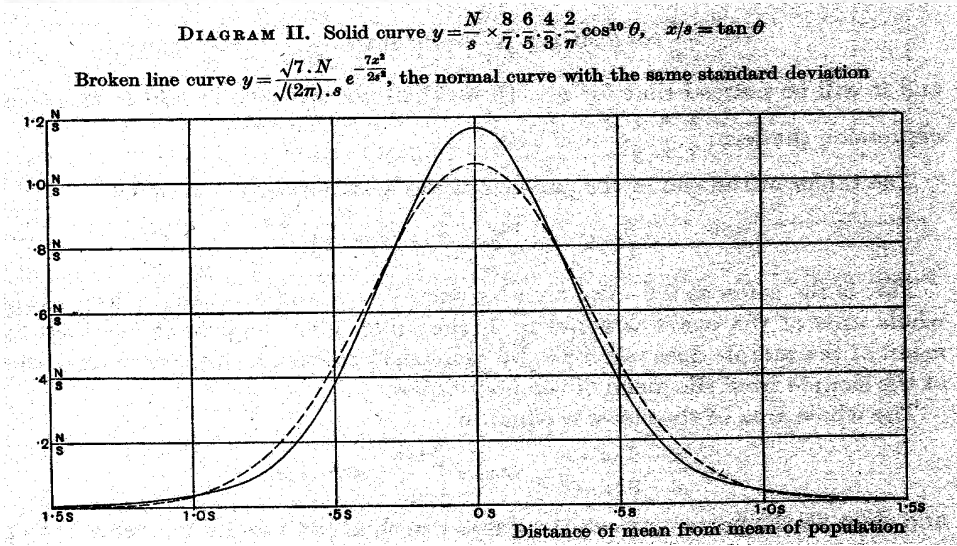
Meze int. spol. závisí vedle chyby s i na rozsahu výběru n. Pro větší rozsahy výběru (n > 30) lze použít místo kvantilu $t_{1-\alpha/2}$ kvantilu normovaného normálního rozdělení $u_{1-\alpha/2}$.

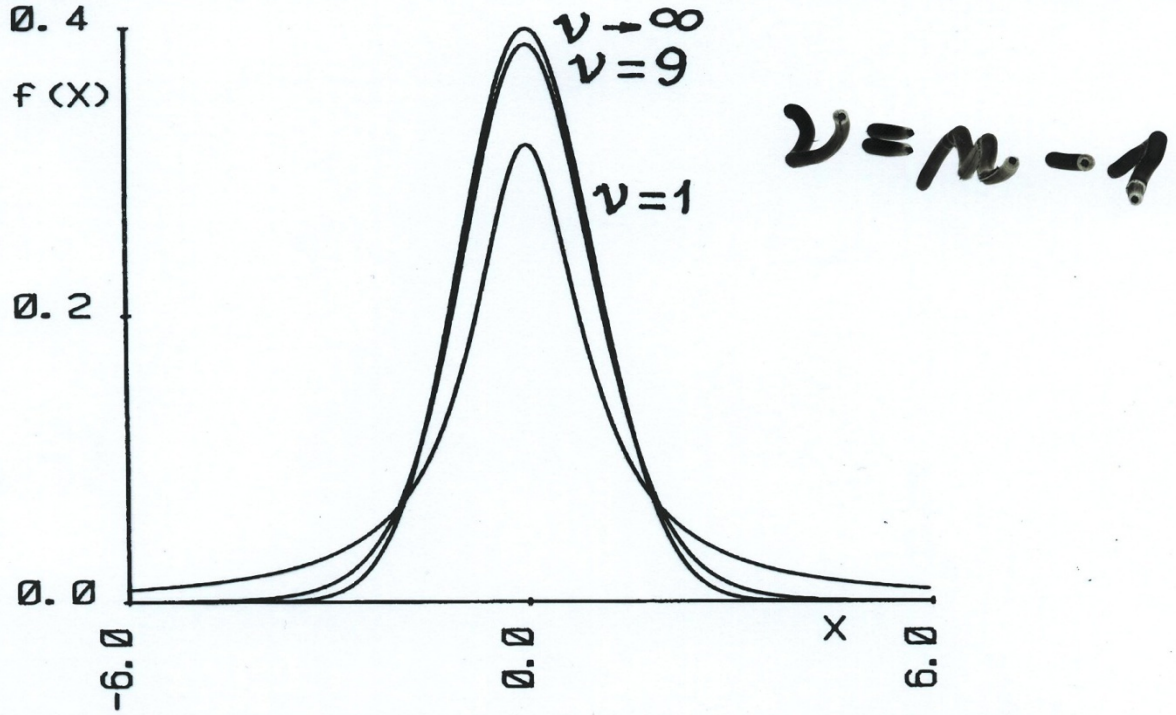
'Student' in 1908

Gosset, William Sealy ("Student"), 1876-1937

The probable error of a mean [Paper on the t-test], *Biometrika* **6** (1908), pp. 1-25







Studentovo rozdělení pro stupně volnosti ν = 1, ν = 9 a normální rozdělení

Pro výběry pocházející z ***normálního rozdělení*** platí, že náhodná veličina

$$t = \frac{\bar{x} - \mu}{s} \sqrt{n}$$

má **Studentovo rozdělení** s (n - 1) stupni volnosti a že náhodná veličina

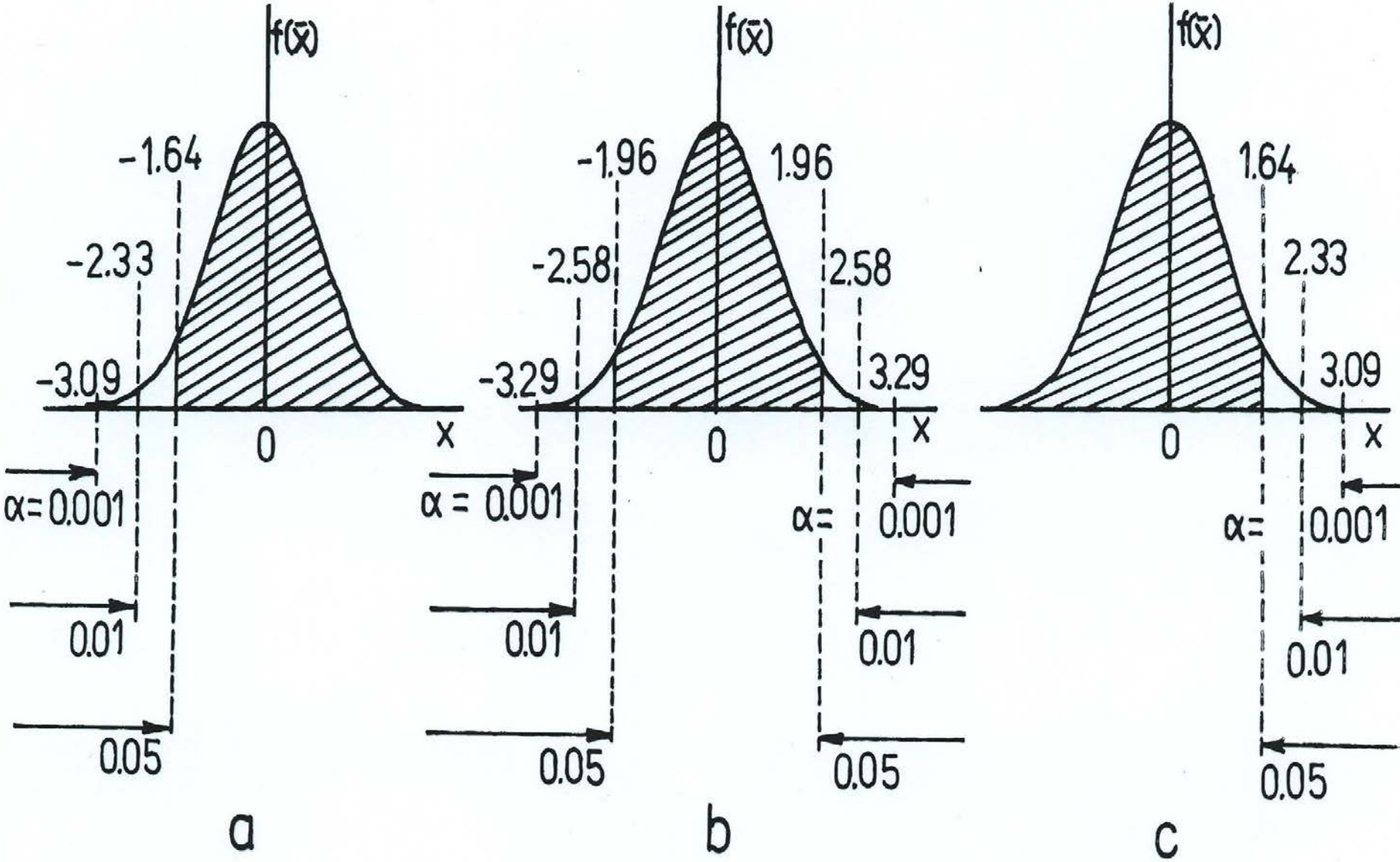
$$\chi^2 = \frac{(n - 1)\, s^2}{\sigma^2}$$

má χ^2 - ***rozdělení*** s (n - 1) stupni volnosti.

Pro dostatečně velký rozsah výběru ($n \geq 40$) lze pro normálně rozdělená původní data $\{x_i\}$, $i = 1, \ldots, n$, a libovolný odhad $\hat{\Theta}$ veličiny Θ považovat veličinu

$$U = \frac{(\hat{\Theta} - \Theta)}{\sqrt{D(\hat{\Theta})}}$$

za přibližně normálně rozdělenou.



Jednostranný ((a) levostranný a (c) pravostranný) a (b) oboustranný interval spolehlivosti průměru rozdělení N(0, 1) pro hodnoty $\alpha = 0.001$, 0.01 a 0.05

Vlastnosti intervalu spolehlivosti:

1. Čím je rozsah výběru n větší, tím je interval spolehlivosti užší.

2. Čím je odhad přesnější a má menší rozptyl, tím je interval spolehlivosti užší,

3. Čím je vyšší statistická jistota (1 - α), tím je interval spolehlivosti širší.

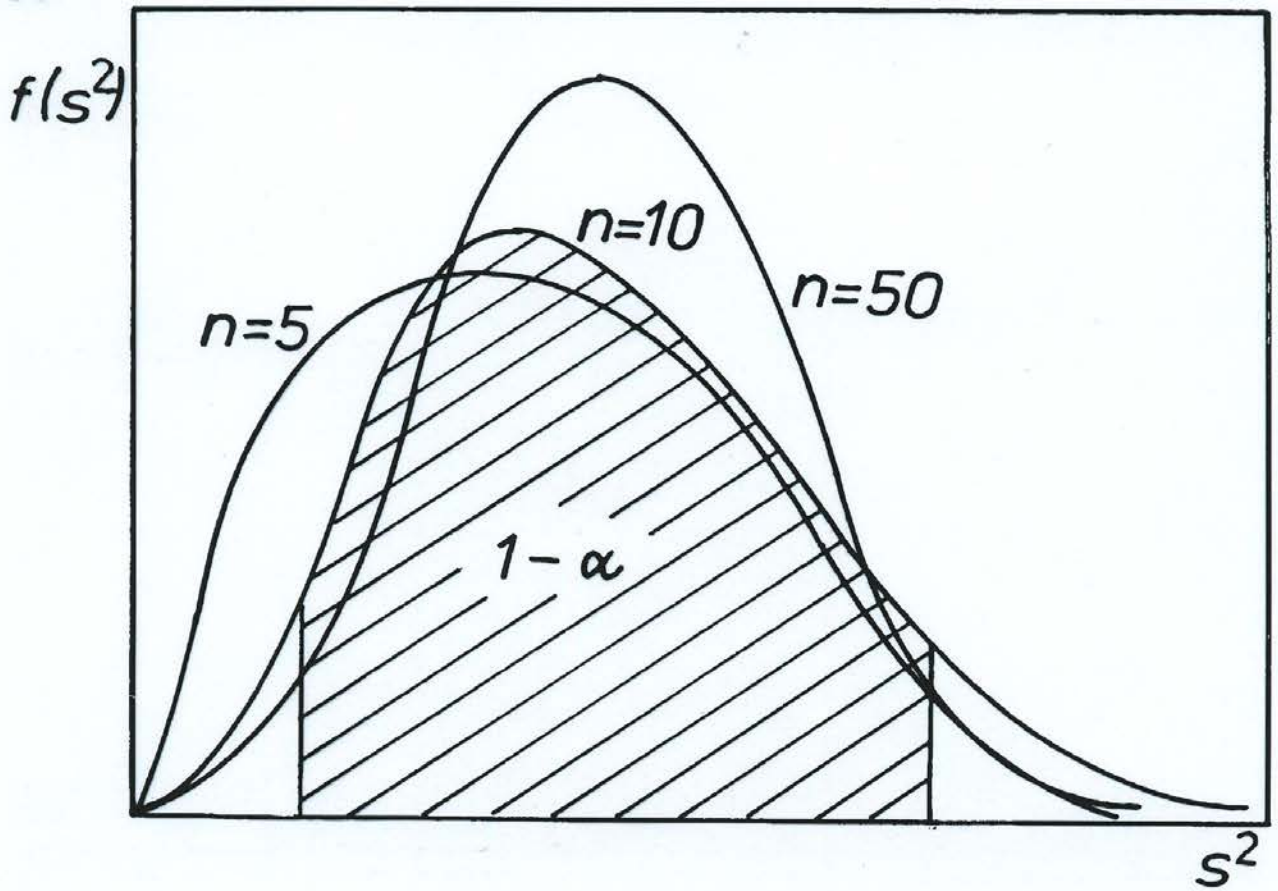
Obecně: **100(1 - α)%ní int. spolehlivosti parametru Θ** se vypočte dle asymptotického vztahu

$$\hat{\Theta} - u_{1-\alpha/2}\sqrt{D(\hat{\Theta})} \leq \Theta \leq \hat{\Theta} + u_{1-\alpha/2}\sqrt{D(\hat{\Theta})}$$

100(1 - α)%ní oboustranný interval spolehlivosti rozptylu σ^2 se vypočte dle

$$\frac{(n-1)\,s^2}{\chi^2_{1-\alpha/2}(n-1)} \leq \sigma^2 \leq \frac{(n-1)\,s^2}{\chi^2_{\alpha/2}(n-1)}$$

kde $\chi^2_{1-\alpha/2}(n-1)$ je horní a $\chi^2_{\alpha/2}(n-1)$ dolní kvantil rozdělení χ^2.



Závislost intervalu spolehlivosti a výběrového rozptylu na velikosti výběru

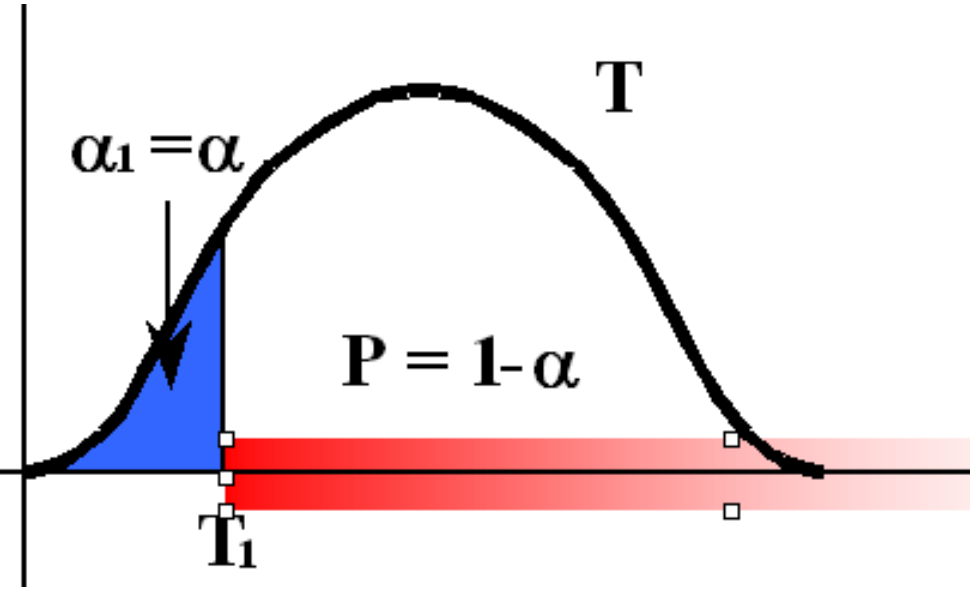
Interval spolehlivosti mediánu se přibližně vyčíslí

$$\tilde{x}_{0.5} - u_{1-\alpha/2}\,\frac{0.707\ s}{\sqrt{n}} \le \text{med} \le \tilde{x}_{0.5} + u_{1-\alpha/2}\,\frac{0.707\ s}{\sqrt{n}}$$

JEDNOSTRANNÉ INTERVALOVÉ ODHADY

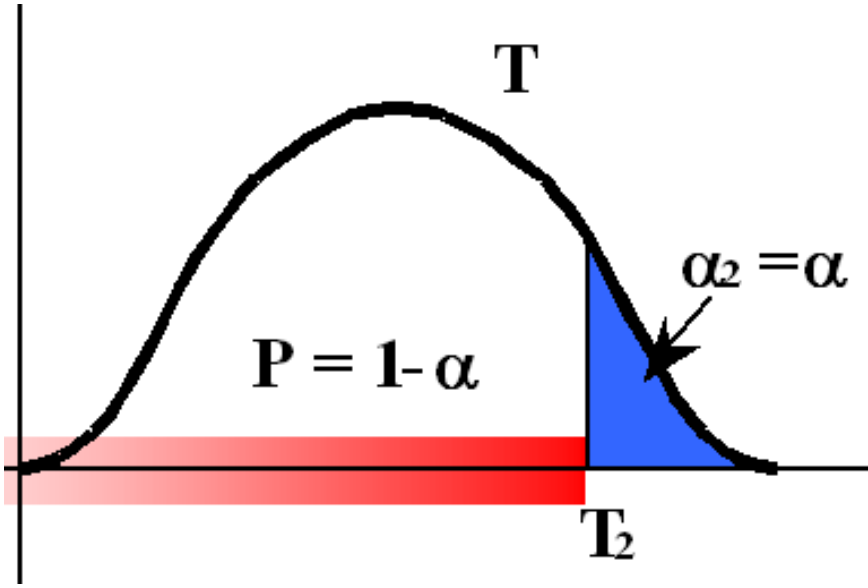
Levostranný odhad

$$P(\tau > T_1) = 1 - \alpha$$

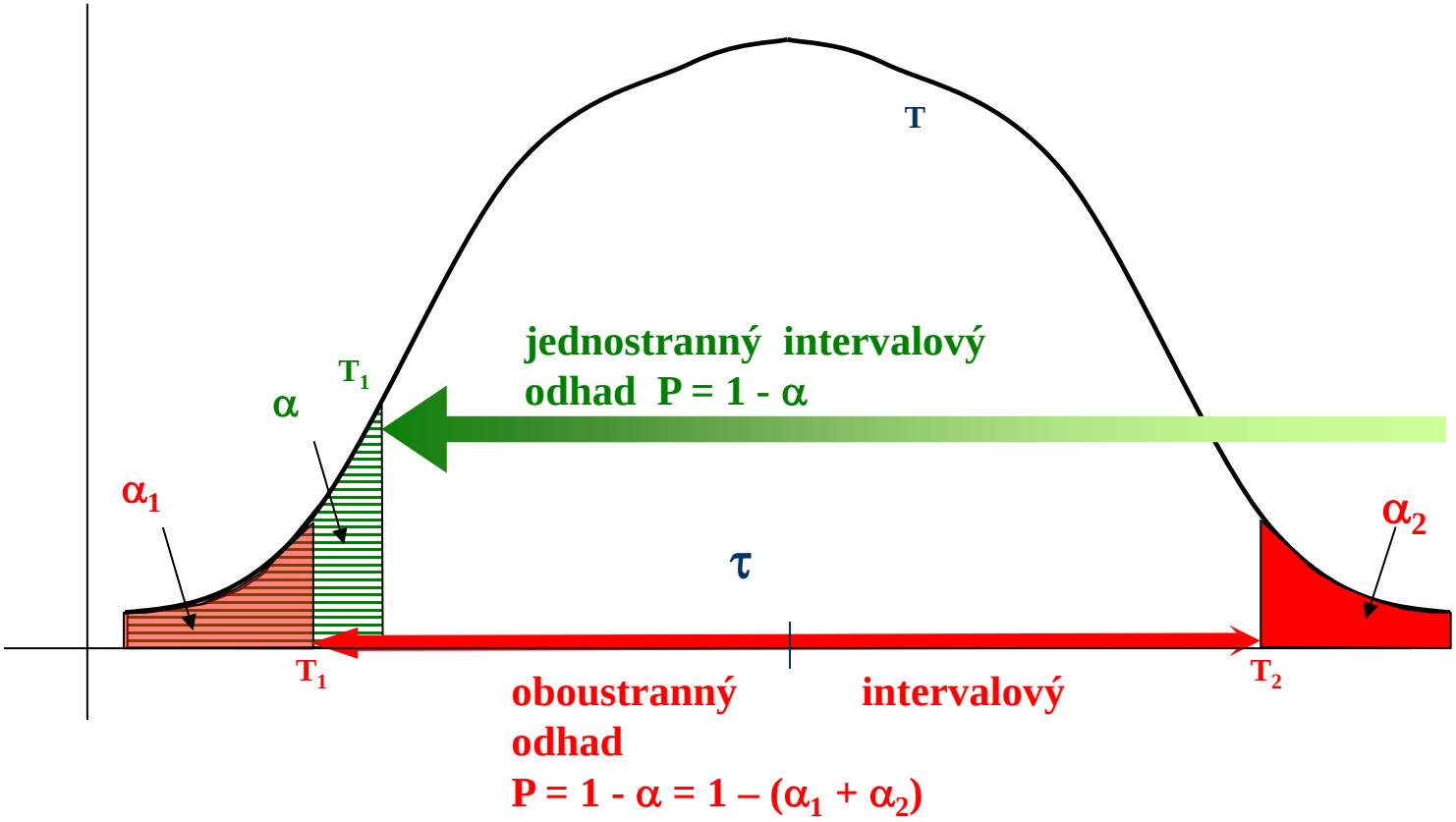


Pravostranný odhad

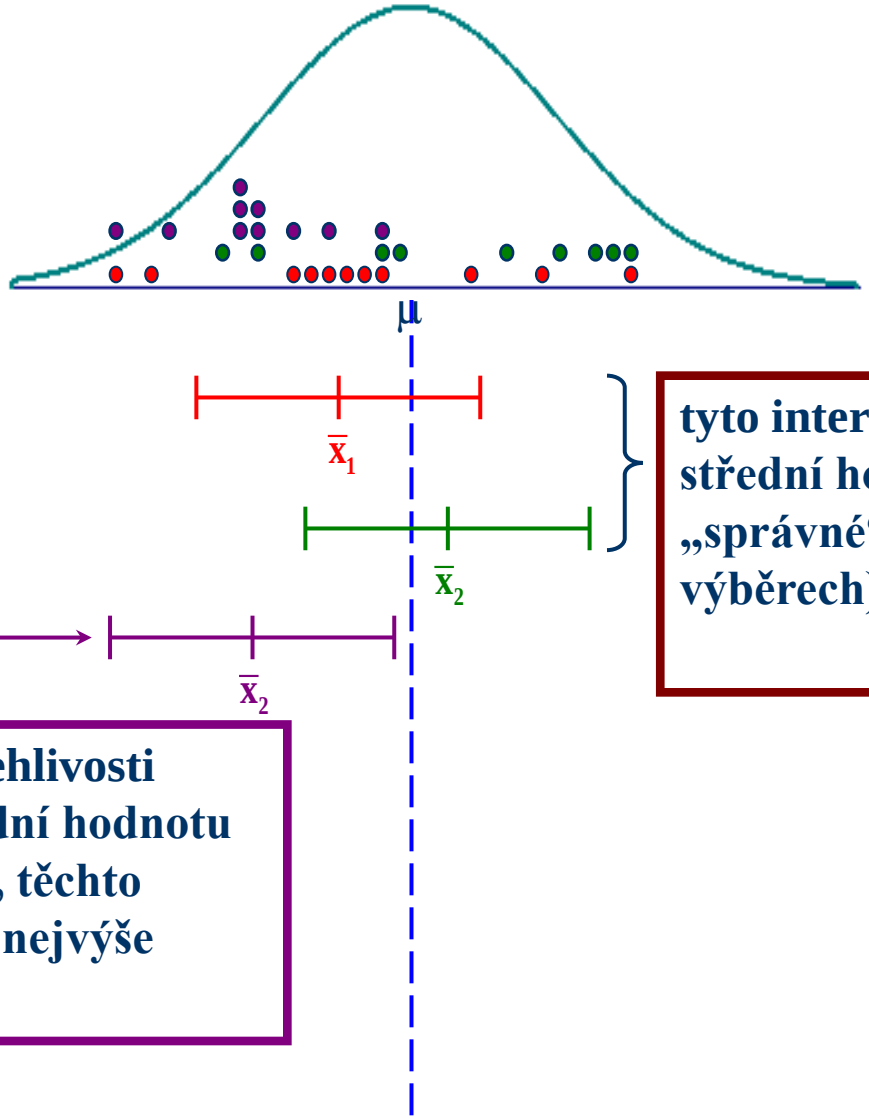
$$P(\tau < T_2) = 1 - \alpha$$



POROVNÁNÍ JEDNOSTRANNÉHO A OBOUSTRANNÉHO ODHADU



HLADINA VÝZNAMNOSTI α V INTERVALOVÝCH ODHADECH



tyto intervaly spolehlivosti „obsahují“ střední hodnotu (jsou tedy „správné“), těch (při opakovaných výběrech) bude nejméně (1- α).100 %

tento interval spolehlivosti „neobsahuje“ střední hodnotu (je tedy „chybný“), těchto intervalů se objeví nejvýše (100α) %

PŘÍKLAD 1. *Určení koncentrace nečistot v surovině*

Koncentrace nečistot v μg/g: **DL, DL, 1.24, 1.49, 1.50, 1.56, 1.61, 1.78,** kde **DL** značí pod limitou detekce $x_D = 1$ μg/g. **Cílem:** odhad střední hodnoty, rozptylu a intervalu spolehlivosti pro normální rozdělení.

Řešení:

1. metoda: Postup s vynecháním hodnot pod mezí detekce (nevhodné, chybné!)

Průměr = 1.53 a výběrová směrodatná odchylka $s = 0.18$. Kvantil t rozdělení $t_{0.975}(5) = 2.571$ a 95% interval spolehlivosti ***UC* = 1.72, *LC* = 1.34.**

2. metoda: Maximalizace věrohodnostní funkce

Parametr h = 0.25, parametr g = 0.11 a tabelovaná hodnota $\lambda = 0.3387$.
Průměr = 1.35 a výběrová směrodatná odchylka $s = 0.36$ a 95% interval spolehlivosti ***UC* = 1.72, *LC* = 0.98.**

3. metoda: Jednokroková aproximace maximalizace věrohodnostní funkce

Průměr = 1.46 a výběrová směr. odchylka $s = 0.20$ a 95% interval spolehlivosti ***UC* = 1.67, *LC* = 1.25.**

4. metoda: Pořádkové statistiky Ze směrnice a úseku určených klasickou MNČ vyšlo: **Průměr = 1.43** a výběrová směrodatná odchylka $s = 0.24$ a 95% interval spolehlivosti ***UC* = 1.68, *LC* = 1.18.**

Úlohy k procvičení testu správnosti

M. Meloun, J. Militký:
Kompendium statistického zpracování dat,
Karolinum Praha 2012

Úloha B3.09 *Test správnosti koncentrace cyclosporinu metodou HPLC (Horn)*
Pro studii biologické dostupnosti cyclosporinu A byl zakoupen roztok této látky v metanolu. Deklarovaná koncentrace cyclosporinu A byla 20 ng/ml. Při HPLC analýzách byly naměřeny následující koncentrace. Test správnosti je třeba provést na hladině významnosti $\alpha = 0.05$. Obsahuje intervalový odhad střední hodnoty číslo 20 ng/ml?
Data: Koncentrace cyclosporinu A [ng/ml]: 19.96, 20.05, 20.00, 19.99, 20.01, 19.98, 20.00, 20.02, 20.01, 19.93.

Úloha B3.12 *Správnost obsahu penicilinu v krvi metodou kapalinové chromatografie (Horn).*
Vysokotlakou kapalinovou chromatografií byl v 7 měřeních stanoven obsah penicilinu v krvi. Vypočtete bodové odhady polohy a intervalové odhady Hornovou metodou pivotů a výsledky porovnejte s klasickými a robustními statistikami polohy a rozptýlení. Pracujte na hladině významnosti $\alpha = 0.05$. Obsahuje intervalový odhad střední hodnoty obsahu penicilinu číslo 2.20 mg. l^{-1}?
Data: Obsah penicilinu v krvi [mg. l^{-1}]: 2.20, 2.30, 2.50, 2.10, 2.30, 2.40, 2.50.

Úloha B3.29 *Test správnosti obsahu trimethoprimu v biseptolu*
Ke stanovení obsahu pomocné látky trimethoprimu v léčivu Biseptol byla užita metoda diferenční pulzní polarografie. K ověření byl analyzován standard se známou koncentrací trimethoprimu 57.66 µg. l^{-1}. Proveďte test správnosti 9 opakovaných měření.
Data: Koncentrace trimethoprimu [µg. l^{-1}] v biseptolu: 57.64, 56.11, 56.60, 56.23, 57.63, 56.31, 57.64, 54.51, 55.00.

Úloha B3.30 *Ověření správnosti stanovení Mg metodou AAS.*
Ověřte správnost stanovení Mg na atomovém absorpčním spektrofotometru, opakovaným měřením vodného standardu Solunorm(Lachema) o koncentraci 0.80 mmol/l. Měření proveďte 20x. Určete, zda je správnost akceptovatelná i z klinického hlediska.
Data: Koncentrace Mg v mmol/l:

0.79	0.78	0.80	0.81	0.81	0.82	0.76	0.79	0.81	0.78
0.77	0.78	0.78	0.76	0.76	0.79	0.79	0.80	0.79	

Úloha C3.06 *Test správnosti nalezené atomové hmotnosti kadmia (Horn)*
Byla získána data pro výpočet atomové hmotnosti kadmia. Vyšetřete předpoklady o výběru dat. Pocházejí data ze souboru, který vykazuje Gaussovo rozdělení? U kolika grafických diagnostik je shoda v indikaci odlehlých bodů? Určete odhad střední hodnoty atomové hmotnosti a parametry rozptýlení. Intervalové odhady vypočtěte na hladině významnosti $\alpha = 0.05$. Aplikujte Hornův postup. Souhlasí nalezený odhad střední hodnoty s hodnotou 112.41? (str. 250 v cit.[17])
Data: Atomová hmotnost kadmia [g]: 112.23, 112.34, 112.30, 112.22, 112.32, 112.34.

Úloha C3.06 *Test správnosti nalezené atomové hmotnosti kadmia (Horn)*
Byla získána data pro výpočet atomové hmotnosti kadmia. Vyšetřete předpoklady o výběru dat. Pocházejí data ze souboru, který vykazuje Gaussovo rozdělení? U kolika grafických diagnostik je shoda v indikaci odlehlých bodů? Určete odhad střední hodnoty atomové hmotnosti a parametry rozptýlení. Intervalové odhady vypočtěte na hladině významnosti $\alpha = 0.05$. Aplikujte Hornův postup. Souhlasí nalezený odhad střední hodnoty s hodnotou 112.41? (str. 250 v cit.[17])
Data: Atomová hmotnost kadmia [g]: 112.23, 112.34, 112.30, 112.22, 112.32, 112.34.

Úloha C3.07 *Test správnosti nalezeného obsahu bizmutu fotometrickou mikrotitrací (Horn)*
Fotometrickou, chelatometrickou mikrotitrací bizmutitých iontů kyselinou ethylendiamintetraoctovou EDTA bylo v kyselém prostředí pH = 1 získáno 14 hodnot obsahu bizmutu v mg. Teoretický obsah je 1.67 mg. Aplikujte Hornův postup. Ovlivňují odlehlé hodnoty významně parametry polohy a rozptýlení? Je titrační stanovení zatíženo soustavnou chybou?
Data: Obsah bizmutu [mg] fotometrickou mikrotitrací: 1.65, 1.65, 1.67, 1.64, 1.67, 1.70, 1.69, 1.67, 1.62, 1.65, 1.70, 1.63, 1.63, 1.66.

Úloha C3.19 *Test správnosti obsahu nitroglycerinu vůči normě (Horn)*

Obsah nitroglycerinu ve 2% nitroglycerinovém roztoku v lihu pro farmaceutické účely má být podle normy 1.8 - 2.2 %. Vyšetřete požadavky kladené na výběr a určete parametry polohy a rozptýlení. Které diagnostiky ukazují, že ve výběru jsou odlehlá měření? Je rozdělení symetrické? Na jaký tvar rozdělení ukazuje koeficient šikmosti a špičatosti? Vyšetřete, zda-li naměřené obsahy odpovídají normě. Využijte mocninnou transformaci. Užijte také Hornův postup.

Data: Obsah nitroglycerinu [%] v lihu pro farmaceutické účely: 2.01, 2.04, 2.03, 2.05, 2.06, 2.04, 2.04, 2.04, 2.05, 2.07.

Úloha C3.20 *Test správnosti obsahu naftolu vůči normě*

Obsah naftolu AS byl v dodávce stanoven spektrofotometricky. Podle normy je vyhovující vzorek takový, který obsahuje minimálně 94% stanovované látky. Vyšetřete předpoklady náhodného výběru. Ověřte, zda tato dodávka vyhovuje normě. Ověření proveďte na hladině významnosti $\alpha = 0.05$.

Data: Obsah naftolu AS [%]: 94.1, 93.4, 94.1, 94.9, 92.6, 94.3, 93.9, 93.3, 94.0, 94.4, 93.6, 93.3, 94.6, 95.0, 94.7, 93.5.

Úloha C3.27 *Test správnosti obsahu chlordiazonu v přípravku* BUREX 80

Stanovení obsahu chlordiazonu v přípravku BUREX 80 bylo provedeno plynovou chromatografií. Správnost výsledku porovnáme s normou státní zkušebny pro 1. jakostní kategorii, $\mu = 80$ mg na hladině významnosti $\alpha = 0.05$. Je stanovení správné? Je rozdělení výběru symetrické a bez odlehlých hodnot?

Data: Obsah chlordiazonu [mg] v přípravku BUREX 80:

79.70	80.80	80.30	80.50	81.00	79.90	80.50	80.90
..	..	..	..	..	..	..	..
80.30	80.10	80.20	81.40	80.70	81.20		

Úloha C3.33 *Test správnosti obsahu dusíku v p-nitroanilinu*

Standard p-nitroanilin obsahující 20.29 % dusíku byl podroben elementární analýze. Bylo získáno 15 výsledků měření. Proveďte test správnosti výsledku vůči obsahu deklarovanému ve standardu využitím intervalového odhadu. Je rozdělení výběru symetrické?

Data: Obsah dusíku v p-nitroanilinu [%]: 20.315, 20.106, 20.268, 20.256, 20.224, 20.217, 20.276, 20.223, 20.122, 20.288, 20.368, 20.330, 20.296, 20.400, 20.261.

Úloha E3.07 *Test správnosti obsahu síranu při analýze vody*

Pro kontrolu 35 vodohospodářských laboratoří v analýze vody byl připraven umělý vzorek s přesným obsahem síranů 94.8 mg. l^{-1}. Testujte, zda intervalový odhad střední hodnoty obsahuje tuto hodnotu. Jsou ve výběru nějaké odlehlé hodnoty?

Data: Obsah síranu SO_4^{2-} [mg. l^{-1}] ve vodě: 96.9, 110.00, 86.00, 101.70, 86.00, 85.00, 85.80, 86.50, 87.30, 103.9, 93.40, 86.90, 99.47, 115.90, 95.00, 92.80, 98.20, 98.00, 88, 97.10, 96.06, 80.20, 105.60, 122.50, 90.00, 68.00, 116.00, 89.4, 89.00, 92.50, 102.00, 83.12, 117.60, 91.35, 100.00.

Úloha E3.16 *Test správnosti obsahu chloru v upravené vodě*

V průběhu jednoho dne byl na úpravně vody sledován po hodinách obsah chlóru v upravené vodě. Jsou ve výběru odlehlé hodnoty? Dáte přednost robustním odhadům nebo mocninné transformaci? Určete parametry polohy a rozptýlení výběru a odpovídající 95%ní intervaly spolehlivosti. Dle normy je doporučená hodnota chloru 0.3 mg. l^{-1}. K testování využijte intervalového odhadu na hladině významnosti $\alpha = 0.05$.

Data: Obsah chlóru [mg. l^{-1}] v upravené vodě: 0.10, 0.15, 0.25, 0.15, 0.30, 0.25, 0.25, 0.30, 0.35, 0.55, 0.70, 0.70, 0.80, 0.65, 0.55, 0.50, 0.30, 0.35, 0.30, 0.25, 0.25, 0.20, 0.15.