

Statistické testování parametrů polohy a rozptýlení

Milan Meloun a Jiří Militký,

Katedra analytické chemie, Univerzita Pardubice, 532 10 Pardubice

a

Katedra textilních materiálů, Technická univerzita Liberec,
461 17 Liberec

Souhrn: Statistický test prověřuje nulovou hypotézu, která je buď přijata nebo zamítnuta. Test správnosti ověřuje shodu střední hodnoty s požadovanou hodnotou, obvykle s normou. Testy shodnosti ověřují shodnost středních hodnot dvou výběrů. Párový test ověřuje shodu hodnot dvojic u párových dat. Testy jsou demonstrovány na vzorových příkladech za užití software ADSTAT a NCSS2000.

V průmyslové praxi jsou řešeny často otázky, zda změna suroviny, technologie, pracovního režimu ovlivní významně střední hodnotu znaku jakosti resp. jeho kolísání. Bývají porovnávány i dvě zkušební metody, dvě analytické metody, dvě kontrolní laboratoře, dvě laborantky. K řešení takových problémů se užívá jistá forma statistického induktivního usuzování, tj. *ověřování statistických hypotéz*.

Statistická hypotéza je předpoklad o rozdělení pravděpodobností jedné nebo více náhodných veličin, kdy za předpoklad se berou především charakteristiky polohy, rozptýlení a tvaru rozdělení veličiny v základním souboru. Statistickou (či nulovou) hypotézu H_0 mohou představovat např. výroky: *Náhodný výběr pochází ze základního souboru s normálním rozdělením* nebo *Rozptyly daných rozdělení ve dvou porovnávaných souborech jsou stejné*. K nulové hypotéze se formuluje ještě *alternativní hypotéza* H_A , která vyjadřuje opak nulové hypotézy. Statistický test má rozhodnout, zda se nulová hypotéza H_0 zamítne či nikoli. Alternativní hypotéza H_A je hypotéza, která se přijme, když nulová hypotéza je zamítnuta.

1. Postup testování statistické hypotézy

1. Formulace nulové H_0 a alternativní hypotézy H_A .
2. Volba hladiny významnosti α .
3. Volba testační statistiky, např. t .
4. Určení kritického oboru testové charakteristiky.
5. Vyčíslení testační statistiky a jejích kvantilů.
6. Rozhodnutí, zda
 - a) Zamítnout hypotézu H_0 a přijmout H_A , jestliže testační statistika padne do kritického oboru,
 - b) Nezamítnout hypotézu H_0 , jestliže testační statistika nepadne do kritického oboru.

Výsledek testování:

- a) Zamítnutí hypotézy H_0 neznamená, že testovaná nulová hypotéza *neplatí*, ale

znamená, že její platnosti nevěříme, protože výsledek testu poskytl objektivní důvod. V dalším pak budeme uvažovat, že H_0 neplatí a H_A platí.

- b) Nezamítneme-li hypotézu H_0 , neznamená to její přijetí. Výsledek testu neukázal tak velkou neshodu mezi zjištěnou skutečností a testovanou hypotézou, která by dala dostatečný důvod k zamítnutí hypotézy.

Dva případy chybného rozhodnutí při testování:

- a) Testační statistika padne mimo obor přijetí nulové H_0 hypotézy O_p , tj. mimo interval

$$u_{\alpha/2} \leq u_s \leq u_{1-\alpha/2}$$

a hypotéza H_0 přitom platí. Platí-li H_0 , je pravděpodobnost padnutí u_s mimo obor O_p rovna právě hladině významnosti α . Velikost α určuje velikost chyby I. druhu, tj. nesprávného zamítnutí správné nulové hypotézy H_0 .

- b) Testační statistika padne do oboru, O_p , tj. mimo interval

$$u_s < u_{\alpha/2} \text{ resp. } u_s > u_{1-\alpha/2}.$$

a přitom platí alternativní hypotéza H_A . Pravděpodobnost, že u_s padne do oboru přijetí O_p , i když H_0 neplatí, představuje velikost chyby II. druhu, β .

2. Přehled odhadů polohy, rozptýlení a tvaru

A. Momentové míry polohy, rozptýlení a tvaru zahrnují:

Míry polohy:

- aritmetický průměr \bar{x} ,
- vážený aritmetický průměr \bar{x}_w ,
- uřezaný průměr $\bar{x}(\vartheta)$,
- nesymetrický uřezaný průměr $\bar{x}(\vartheta_1, \vartheta_2)$,
- M-odhady: střední hodnota $\hat{\mu}_M$,

Míry rozptýlení (variability):

- odhad výběrového rozptylu s^2 ,
- směrodatnou odchylku s ,
- winsorizovaný rozptyl $s_w(\vartheta)$,
- rozptyl $D(\hat{\mu}_M)$,
- variační koeficient δ ,

Míry tvaru:

- koeficient šikmosti \hat{g}_1 ,
- koeficient špičatosti \hat{g}_2

B. Kvantilové a robustní míry polohy, rozptýlení a tvaru jsou méně citlivé na vybočující hodnoty než momentové:

- medián $\bar{x}_{0.5}$ s odhadem rozptylu s_M^2 ,
- M-odhady: střední hodnota $\hat{\mu}_M$, rozptyl $D(\hat{\mu}_M)$ pro robustní funkce,
- interkvartilové rozpětí R_F ,
- pro malé výběry: pivotová polosuma P_L , pivotové rozpětí R_L ,

1. úloha: Analýza velkého výběru

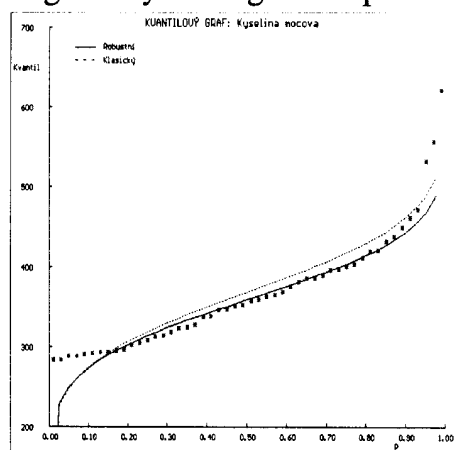
Na vzorové úloze *Koncentrace kyseliny močové v krvi dárců* ukážeme postup analýzy velkého výběru s odlehlými prvky pro určení typu rozdělení koncentrace kyseliny močové u 50 dárců krve. Jaká je míra polohy a rozptýlení uvedeného výběru?

Data: Koncentrace kyseliny močové [$\mu\text{mol/l}$]:

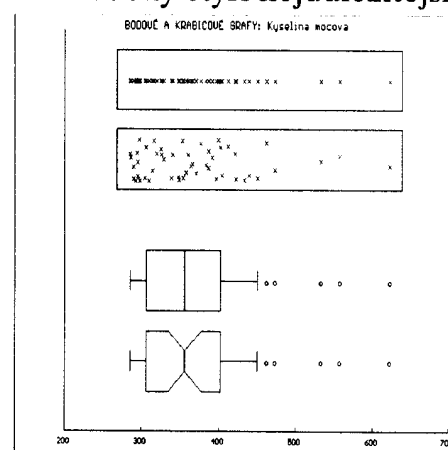
295	325	320	316	314	310	306	304	298	297
462	294	292	290	286	285	622	557	532	473
397	450	439	433	422	421	412	404	402	399
358	391	387	387	383	377	370	366	364	360
295	354	353	349	348	340	339	329	326	290

1. PRŮZKUMOVÁ (EXPLORATORNÍ) ANALÝZA DAT

Z grafických diagnostik průzkumové analýzy dat jsou uvedeny čtyři nejdůležitější.

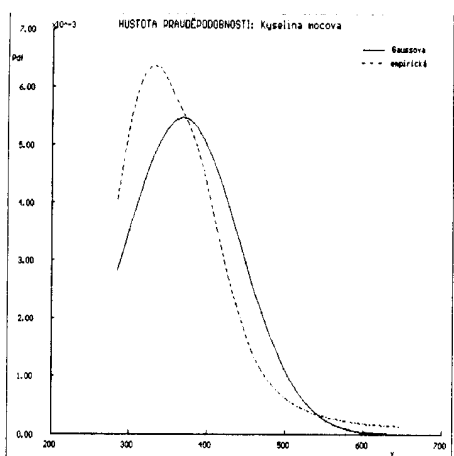


Kvantilový graf

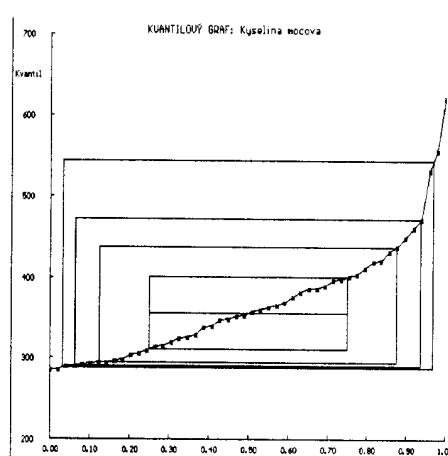


Diagramy rozptýlení a krabicové grafy

Grafy ukazují, že výběrové rozdělení je asymetrické a silně sešikmené. V horní části pořádkových statistik lze indikovat 3 až 5 podezřelých bodů, z nich se 3 jeví jako vysloveně odlehlé. Nelze proto použít klasických odhadů polohy a rozptýlení.



Graf hustoty pravděpodobnosti



Graf rozptýlení s kvantily

2. OVĚŘENÍ ZÁKLADNÍCH PŘEDPOKLADŮ O VÝBĚRU:

Předpoklad o normalitě rozdělení je zamítnut, protože hodnota testovacího kritéria χ^2 je vyšší než tabulkový kvantil. Předpoklad nezávislosti je přijat, protože hodnota testovacího kritéria je nižší než tabulkový kvantil. Data nejsou homogenní, mimo modifikované vnitřní hradby $B_D = 109.62 \mu\text{mol/l}$, $B_H = 602.38 \mu\text{mol/l}$ leží hodnota č. 17, a to $622.0 \mu\text{mol/l}$. Po odstranění této odlehlé hodnoty by byl aritmetický průměr $\bar{x} = 363.29 \mu\text{mol/l}$ a směrodatná odchylka $s = 63.875 \mu\text{mol/l}$. Odlehlou hodnotu nelze vyloučit, znamenalo by to totiž ztrátu informace.

Ověření základních předpokladů (výstup programu ADSTAT)

(a) TEST NORMALITY:

Tabulkový kvantil $\chi^2(1-\alpha,2)$: 5.992
χ^2 statistika	: 29.199
Závěr: Předpoklad normality zamítnut	
Vypočtená hladina významnosti	: 4.5661E-07

(b) TEST NEZÁVISLOSTI:

Tabulkový kvantil $t(1-\alpha/2, n+1)$: 2.008
Test autokorelace	: 1.027
Závěr: Předpoklad nezávislosti přijat	
Vypočtená hladina významnosti	: 0.1547

(c) DETEKCE ODLEHLÝCH BODŮ: modifikované vnitřní hradby:

Dolní vnitřní hradba	: 109.62
Horní vnitřní hradba	: 602.38
Bod číslo 17 (horní)	: 622.00

Parametry s vynechanými odlehlými hodnotami:

Průměr	: 363.29
Směrodatná odchylka	: 63.88
Šikmost	: 0.97
Špičatost	: 3.81

3. MOCNINNÁ TRANSFORMACE:

Při pokusu o transformaci dat poskytuje prostá mocninná transformace hodnotu opraveného průměru $\bar{x}_R = 350.91 \mu\text{mol/l}$, zatímco Box - Coxova transformace $\bar{x}_R = 362.17 \mu\text{mol/l}$, s odhadem šikmosti $g_1 = 0.81$ a špičatosti $g_2 = 3.38$, což je bližší parametrům normálního rozdělení. Věrohodnější se zde proto jeví odhad, získaný metodou Boxovy-Coxovy transformace.

Transformace dat (výstup programu ADSTAT)

(a) PROSTÁ MOCNINNÁ TRANSFORMACE:

Zvolená mocnina	: -2.13
Průměr	: 3.7174E-06
Směrodatná odchylka	: 4.5175E-04
Opravený průměr	: 350.91

(b) BOX-COXOVA TRANSFORMACE:

Zvolená mocnina	: -0.00
Průměr	: 5.8921E+00

Směrodatná odchylka	:	1.8301E-01
Opravený průměr	:	362.17

4. ODHADY POLOHY, ROZPTYLU A TVARU:

Rozdělení souboru vykazuje mírné sešikmení. Soubor obsahuje jeden výrazně odlehlý bod. Mocninná transformace selhává, Box-Coxova transformace je robustní vůči odlehlé hodnotě. Dobrým odhadem střední hodnoty se jeví uřezané aritmetické průměry ale především retransformovaný průměr metodou dle Boxe a Coxe. Výpočet aritmetického průměru při vynechání odlehlého bodu podstatně zlepšuje variabilitu souboru a potvrzuje především robustnost retransformovaného průměru vůči odlehlé hodnotě.

Odhady polohy, rozptýlení a tvaru (výstup programu ADSTAT)

(a) PARAMETRY TVARU:

Šikmost	:	1.33
Špičatost	:	5.00

(b) KLASICKÉ ODHADY PARAMETRŮ :

Průměr	:	368.46
Směr. odchylka	:	73.04
95.0% spolehlivost: Spodní mez:	347.70	Horní mez: 389.22

(c) OSTATNÍ ODHADY POLOHY:

Odhad modu	:	293.00
Odhad polosumy	:	453.50

(d) ROBUSTNÍ ODHADY PARAMETRŮ :

Medián	:	356.00
Směr. odchylka mediánu	:	85.47
Směr. odchylka mediánu	:	14.92
Rozptyl (Marritz)	:	148.44
Směr. odchylka mediánu	:	12.18
95.0% spolehlivost: Spodní mez:	331.52	Horní mez: 380.48

Uřezání 5% (pro P=0.05):

Průměr	:	361.38
Směr. odchylka	:	68.64
Průměr, winsor.	:	366.34
Směr. odchylka winsor.	:	68.11
95.0% spolehlivost: Spodní mez:	340.94	Horní mez: 318.20

Uřezání 10% (pro P=0.10):

Průměr	:	358.35
Směr. odchylka	:	67.34
Průměr, winsor.	:	361.08
Směr. odchylka winsor.	:	59.48
95.0% spolehlivost: Spodní mez:	339.10	Horní mez: 377.60

Uřezání 40% (pro P=0.40):

Průměr	:	356.20
Směr. odchylka	:	73.69

Průměr, winsor. : 355.24
 Směr. odchylka winsor. : 31.26
 95.0% spolehlivost: Spodní mez: 332.98 Horní mez: 379.42

Biweight:

Průměr : 358.17
 Směr. odchylka : 63.09
 Váhy sqrt(w) : 6.71
 95.0% spolehlivost: Spodní mez: 339.29 Horní mez: 377.05

(e) ADAPTIVNÍ ODHADY PARAMETRŮ:

Hoggovy odhady:

Relativní délka konců : 2.754
 Průměr : 356.46
 Směr. odchylka : 72.72
 95.0% spolehlivost: Spodní mez: 335.79 Horní mez: 377.13

2. úloha: Analýza malých výběrů

Na vzorové úloze *Kontrola obsahu amoniakálního dusíku v odpadní vodě* ukážeme vyčíslení střední hodnoty a 95%ní interval spolehlivosti analýzou malého výběru. Na hladině významnosti $\alpha = 0.05$ testujeme, zda je splněn požadovaný obsah amoniakálního dusíku v odpadní vodě 2.45 mg/l.

Data: Obsah amoniakálního dusíku [mg/l]: 2.45, 2.46, 2.46, 2.47, 2.48, 2.48, 2.49.

Řešení: Užijeme Hornův postup pivotů pro malé výběry ($4 < n < 20$):

1. Pořádkové statistiky:

i	1	2	3	4	5	6	7
$x_{(i)}$	2.45	2.46	2.46	2.47	2.48	2.48	2.49

2. Hloubka pivotu:

$n = 7$, liché

$$H = \text{int} \frac{\frac{n+1}{2}}{2}$$

$\text{int}(2) \approx 2$

3. Pivoty: Dolní pivot $x_D = x_{(H)}$

$x_{(2)} = 2.46$

Horní pivot $x_H = x_{(n+1-H)}$

$x_{(7)} = 2.48$

4. Pivotová polosuma $P_L = \frac{x_D + x_H}{2}$

$= 2.47$

5. Pivotové rozpětí $R_L = x_H - x_D$

$2.48 - 2.46 = 0.02$

6. 95%ní interval spolehlivosti střední hodnoty μ :

$t_{L, 1-\alpha/2} = 0.72$

$$2.47 - 0.02 \times 0.72 \leq \mu \leq 2.47 + 0.02 \times 0.72$$

$$2.46 \leq \mu \leq 2.48$$

7. Závěr: Bodový odhad míry polohy je 2.47, míry rozptýlení 0.02 a intervalový odhad míry polohy je $2.46 \leq \mu \leq 2.48$.

3. Testy střední hodnoty ("testy správnosti")

100(1 - α)%ní interval spolehlivosti:

Jelikož bodový odhad parametrů polohy a rozptýlení neříká nic o vzdálenosti od skutečné hodnoty Θ , kterou odhadujeme pomocí bodového odhadu, je třeba konstruovat *intervalový odhad parametru*. Intervalový odhad představuje interval, ve kterém se bude se zadanou pravděpodobností či statistickou jistotou $(1 - \alpha)$ nacházet skutečná hodnota daného parametru Θ . Interval parametru Θ odhadujeme dvěma číselnými hodnotami L_D a L_H , které tvoří *meze intervalu spolehlivosti*. Platí-li, že $P(L_1 < \Theta < L_2) = 1 - \alpha$, interval spolehlivosti pokryje parametr Θ s předem zvolenou pravděpodobností či statistickou jistotou $P = (1 - \alpha)$ nazvanou také *koeficient spolehlivosti*. Jeho hodnota je obvykle rovna 0.95 nebo 0.99. Zde parametr α se nazývá *hladina významnosti*.

Studentův t-test správnosti analytického výsledku je možné obejít využitím intervalu spolehlivosti. Nachází-li se totiž hodnota μ_0 (tj. správná hodnota, norma, standard) v intervalu spolehlivosti $[L_D; L_H]$, je stanovení správné. Pro intervalový odhad platí:

1. Čím je rozsah výběru n větší, tím je interval spolehlivosti užší.
2. Čím je odhad přesnější (tj. čím má menší rozptyl), tím je interval spolehlivosti užší,
3. Čím je vyšší statistická jistota $(1 - \alpha)$, tím je interval spolehlivosti širší.

Míry polohy: Postup konstrukce intervalu spolehlivosti střední hodnoty μ pro výběry, pocházející z normálního rozdělení $N(\mu, \sigma^2)$ se pak rozlišuje dle velikosti výběru:

1. *Velký výběr, $n \geq 30$:* bodovým odhadem střední hodnoty μ je výběrový průměr \bar{x} s rozdělením $N(\mu, \sigma^2/n)$. V intervalu $\bar{x} \pm 1.96\sigma/\sqrt{n}$ leží 95% hodnot náhodných veličin výběru o rozsahu n . Potom 95%ní *oboustranný interval spolehlivosti střední hodnoty* je vyjádřen nerovností

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

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

2. *Střední výběr, $n \leq 30$:* v praxi neznáme směrodatnou odchylku σ . Jelikož má $\sqrt{n}(\bar{x} - \mu)/s$ Studentovo t -rozdělení, bude $100(1 - \alpha)\%$ ní *oboustranný interval spolehlivosti střední hodnoty* vyjádřen nerovností

$$\bar{x} - t_{1-\alpha/2}(v) \frac{s}{\sqrt{n}} \leq \mu \leq \bar{x} + t_{1-\alpha/2}(v) \frac{s}{\sqrt{n}}.$$

Zde symbol $t_{1-\alpha/2}(v)$ označuje $100(1 - \alpha/2)\%$ ní kvantil Studentova rozdělení s $v = n - 1$ stupni volnosti. Meze intervalu spolehlivosti závisí vedle směrodatné odchylky s i na rozsahu výběru n .

Interval spolehlivosti mediánu se vyčíslí podle přibližného vztahu

$$\bar{x}_{0.5} - u_{1-\alpha/2} \frac{0.707 s}{\sqrt{n}} \leq med \leq \bar{x}_{0.5} + u_{1-\alpha/2} \frac{0.707 s}{\sqrt{n}}$$

Míry rozptýlení: $100(1 - \alpha)\%$ ní oboustranný interval spolehlivosti rozptylu σ^2 se vypočte dle

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

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

Studentův t-test střední hodnoty: ze základního souboru s rozdělením $N(\mu, \sigma^2)$ provedeme náhodný výběr rozsahu n a vypočteme výběrový průměr \bar{x} a směrodatnou odchylku s . Jako testovou statistiku zvolíme náhodnou veličinu

$$t = \frac{\bar{x} - \mu_0}{s} \sqrt{n}$$

Kritické obory testů polohy hypotézy $H_0: \mu = \mu_0$ proti různým alternativám H_A pro hladinu významnosti α jsou uvedeny v tabulce. Hraniční body kritického oboru představují $100\alpha\%$ ní kvantily známých rozdělení. Místo formálního testování, zda jsou tyto kvantily větší než testové statistiky, je možné přímo vyčíslit velikost pravděpodobnosti $(1 - \alpha)$ (u oboustranného testu $(1 - \alpha/2)$).

Nulová hypotéza H_0	Alternativní hypotéza H_A	Testační charakteristika	Kritický obor
$\mu = \mu_0$	$\mu > \mu_0$	$t = (x - \mu_0)\sqrt{n} / s$	$t \geq t_{(1-\alpha)}(n-1)$
	$\mu < \mu_0$		$t < t_{\alpha}(n-1)$
	$\mu \neq \mu_0$		$ t \geq t_{(1-\alpha/2)}(n-1)$

3. vzorová úloha: Test správnosti

Na vzorové úloze *Test správnosti koncentrace vápníku* ukážeme užití testu správnosti. Výrobce kontrolního komerčního materiálu uvádí koncentraci vápníku 2.20 mmol/l. Jsou naměřené výsledky správné ?

Data: Koncentrace vápníku [mmol/l]

2.26	2.16	2.18	2.15	2.23	2.25	2.19	2.18	2.16	2.20	2.19	2.22	2.19	2.21	2.25	2.29	2.26	2.15	2.18
------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------

Řešení: Z exploratorní analýzy dat byla zjištěna mírná asymetrie, posun k nižším hodnotám, v horní části řady pořádkových statistik 3 podezřelé body. Ze základních předpokladů vyplývá, že data jsou homogenní, soubor neobsahuje odlehlé hodnoty. Data mají normální rozložení a jsou nezávislá.

Analýza jednorozměrných dat na počítači (výstup programu ADSTAT)

(a) PROSTÁ MOCNINNÁ TRANSFORMACE:

Zvolená mocnina	: -4.00
Průměr	: 4.2422E-02
Směrodatná odchylka	: 3.1258E-03
Opravený průměr	: 2.204

(b) BOX-COXOVA TRANSFORMACE:

Zvolená mocnina : -4.00
Průměr : 2.3939E-01
Směrodatná odchylka : 7.8145E-04
Opravený průměr : 2.204

(c) PARAMETRY TVARU:

Šikmost : 0.44
Špičatost : 2.12

(d) KLASICKÉ ODHADY PARAMETRŮ:

Průměr : 2.205
Směr. odchylka : 0.041
95.0% spolehlivost: Spodní mez: 2.185 Horní mez: 2.225

(e) OSTATNÍ ODHADY POLOHY:

Odhad modu : 2.185
Odhad polosumy : 2.220

(f) ROBUSTNÍ ODHADY PARAMETRŮ:

Medián : 2.190
Směr. odchylka mediánu : 0.557
95.0% spolehlivost: Spodní mez: 2.161 Horní mez: 2.219

Uřezání 5% (pro P=0.05):

Průměr : 2.204
Směr. odchylka : 0.430
Průměr, winsor. : 2.204
Směr. odchylka winsor. : 0.3965
95.0% spolehlivost: Spodní mez: 2.183 Horní mez: 2.225

Uřezání 10% (pro P=0.10):

Průměr : 2.203
Směr. odchylka : 0.467
Průměr, winsor. : 2.204
St.odch. winsor. : 0.3965
95.0% spolehlivost: Spodní mez: 2.183 Horní mez: 2.224

Uřezání 40% (pro P=0.40):

Průměr : 2.195
Směr. odchylka : 0.397
Průměr, winsor. : 2.199
St.odch. winsor. : 0.0188
95.0% spolehlivost: Spodní mez: 2.170 Horní mez: 2.219

Biweight:

Průměr : 2.203
Směr. odchylka : 0.407
Rozptyl : 1.6579E-03
Váhy sqrt(w) : 4.170
95.0% spolehlivost: Spodní mez: 2.183 Horní mez: 2.224

(g) ADAPTIVNÍ ODHADY PARAMETRŮ:

Hoggovy odhady:			
Relativní délka konců	:	2.111	
Průměr	:	2.205	
Směr. odchylka	:	0.0414	
95.0% spolehlivost:	Spodní mez:	2.185	Horní mez: 2.225

Závěr: Pro 95%ní statistickou jistotu byly nalezeny následující intervalové odhady: pro aritmetický průměr \bar{x} je interval $2.19 < \mu < 2.23$, pro medián $\bar{x}_{0.5}$ pak $2.16 < \mu < 2.22$. Z uvedených intervalových odhadů vyplývá, že obsah vápníku 2.20 mmol/l leží v rozmezí zadané normy a naměřené výsledky jsou proto správné.

4. Testy shody středních hodnot ("testy shodnosti")

Porovnání dvou výběrů $\{x_i\}, i = 1, \dots, n_1$, a $\{y_j\}, j = 1, \dots, n_2$, patří k častým úlohám v přírodních i technických vědách, a to při

- porovnání výsledků z různých instrumentálních metod nebo laboratoře,
- ověřování nutnosti dělení heterogenních výběrů do homogenních podskupin,
- hodnocení rozdílu mezi rozličnými materiály a přístroji.

Někdy lze tuto úlohu převést na testování jednoho výběru. To je totiž případ, kdy mezi prvky obou výběrů existuje jistá logická vazba. Představují-li prvky x_i vlastnosti před úpravou materiálu a prvky y_i stejné vlastnosti po úpravě materiálu *těchže* vzorků ($n_1 = n_2$), lze utvořit jednorozměrný výběr, $D_i = x_i - y_i$, pro který lze užít klasickou statistickou analýzu. Pokud se střední hodnota μ_D významně neliší od nuly, znamená to, že $\mu_x = \mu_y$ a efekt zpracování materiálu není pro sledovanou vlastnost statisticky významný (t.zv. *párový test*). V obecnějším případě dvou výběrů lze zjistit, zda pocházejí ze stejného rozdělení pravděpodobnosti a zda se neliší v parametrech polohy a rozptýlení.

Postup testu shodnosti

- 1. Ověření normálního rozdělení obou souborů:** testy a statistické diagnostiky k ověření předpokladů o výběru,
- 2. Shoda rozptylů:**
 - 2.1 Klasický Fisher-Snedecorovým F -test,
 - 2.2 Modifikovaný Fisher-Snedecorův F -test,
 - 2.3 Robustní Jackknife test F_j ,
- 3. Shoda středních hodnot dvou souborů:**
 - 3.1 Klasický Studentův t -test T_1 pro homoskedasticitu,
 - 3.2 Klasický Studentův t -test T_2 pro heteroskedasticitu,
 - 3.3 Modifikovaný Studentův t -test T_3 pro výběry, odchýlené od normálního rozdělení.
 - 3.4 Robustní Jackknife test polohy T_4 pro homoskedasticitu,
 - 3.5 Robustní Jackknife test polohy T_5 pro heteroskedasticitu,

1. krok: Ověření normálního rozdělení obou výběrů

Klasické testy vycházejí z předpokladů:

a) výběry $\{x_i\}$, $i = 1, \dots, n_1$, a $\{y_j\}$, $j = 1, \dots, n_2$ jsou vzájemně nezávislé;

b) rozdělení obou výběrů je normální, $x_i \sim N(\mu_x, \sigma_x^2)$ a $y_j \sim N(\mu_y, \sigma_y^2)$.

Existuje řada různých metod, které jsou použitelné i v případech, kdy jsou tyto dva předpoklady narušeny. Před vlastní statistickou analýzou je výhodné vyšetřit nejprve metodami průzkumové analýzy chování obou výběrů.

2. krok: Testy shody rozptylů

(a) **Klasický F-test:** umožňuje ověření nulové hypotézy $H_0: \sigma_x^2 = \sigma_y^2$ proti alternativní $H_A: \sigma_x^2 \neq \sigma_y^2$. Vychází se z předpokladu, že oba výběry jsou nezávislé a pocházejí z normálního rozdělení. Testovací kritérium má tvar

$$F = \max \left(\frac{s_x^2}{s_y^2}, \frac{s_y^2}{s_x^2} \right).$$

Platí-li hypotéza H_0 a $s_x^2 > s_y^2$, má F kritérium F -rozdělení s $v_1 = (n_1 - 1)$ a $v_2 = (n_2 - 1)$ stupni volnosti. V opačném případě se pořadí stupňů volnosti zamění. Je-li $F > F_{1-\alpha/2}(v_1, v_2)$, je nulová hypotéza H_0 o shodnosti rozptylů zamítnuta.

(b) **Modifikovaný F-test:** předchozí klasický F -test je značně citlivý na předpoklad normality. Mají-li obě výběrová rozdělení jinou špičatost než odpovídá normálnímu, je třeba užít kvantil $F_{1-\alpha/2}(v_1, v_2)$ se stupni volnosti v_1 a v_2 , vyčíslenými podle vztahů

$$v_1 = \frac{n_1 - 1}{1 + \frac{\hat{g}_{2c}}{2}}, \quad v_2 = \frac{n_2 - 1}{1 + \frac{\hat{g}_{2c}}{2}}$$

$$\text{kde } \hat{g}_{2c} = \frac{2(n_1 + n_2) \left[\sum_{i=1}^{n_1} (x_i - \bar{x})^4 + \sum_{i=1}^{n_2} (y_i - \bar{y})^4 \right]}{\left[\sum_{i=1}^{n_1} (x_i - \bar{x})^2 + \sum_{i=1}^{n_2} (y_i - \bar{y})^2 \right]^2} - 3$$

(c) **Robustní Jackknife test:** jsou-li v datech navíc odlehlé hodnoty, jeví se užitečný robustní Jackknife test. Testovací kritérium má tvar

$$F_J = \frac{n_1 (\bar{z}_1 - \bar{z})^2 + n_2 (\bar{z}_2 - \bar{z})^2}{\frac{\sum_{i=1}^{n_1} (z_{1i} - \bar{z}_1)^2 + \sum_{i=1}^{n_2} (z_{2i} - \bar{z}_2)^2}{n_1 + n_2 - 2}}$$

kde
$$\bar{z} = \frac{n_1 \bar{z}_1 + n_2 \bar{z}_2}{n_1 + n_2}, \quad z_j = \frac{\sum_{i=1}^{n_j} z_{ji}}{n_j}, \quad j = 1, 2$$

Veličiny z_{ji} se počítají podle vztahu $z_{1i} = n_1 \ln s_x^2 - (n_1 - 1) \ln s_{1(i)}^2$,

kde
$$s_{1(i)}^2 = \frac{1}{n_1 - 2} \sum_{j \neq i}^{n_1} (x_j - \bar{x}_{(i)})^2.$$

Ve vztahu se vyskytuje průměr s vynechanou i -tou hodnotou, pro který platí

$$\bar{x}_{(i)} = \frac{1}{n_1 - 1} \sum_{j \neq i}^{n_1} x_j.$$

Při výpočtu z_{2i} se ve výše uvedených vztazích dosazují hodnoty $\{y_j\}$, $j = 1, \dots, n_2$, rozptyl s_y^2 a rozsah výběru n_2 .

Platí-li nulová hypotéza H_0 , má testovací kritérium F_j přibližně F rozdělení s $v_1 = 2$, $v_2 = n_1 + n_2 - 2$ stupni volnosti. Vyjde-li, že $F_j > F_{1-\alpha/2}(v_1, v_2)$, je nutné zamítnout hypotézu H_0 o shodnosti obou výběrových rozptylů na hladině významnosti.

3. krok: Shoda středních hodnot dvou souborů

Studentův t -test umožňuje testování hypotézy $H_0: \mu_x = \mu_y$ proti alternativní $H_A: \mu_x \neq \mu_y$ i při splnění obou uvedených předpokladů o výběrech:

(a) **Klasický Studentův t -test T_1 pro shodné rozptyly:** pro $\sigma_x^2 = \sigma_y^2$ a když obě rozdělení vykazují Gaussovo rozdělení, má testovací kritérium tvar

$$T_1 = \frac{|\bar{x} - \bar{y}|}{\sqrt{(n_1 - 1)s_x^2 + (n_2 - 1)s_y^2}} \sqrt{\frac{n_1 n_2 (n_1 + n_2 - 2)}{n_1 + n_2}}$$

Platí-li, že $T_1 > t_{1-\alpha/2}(n_1 + n_2 - 2)$, je hypotéza H_0 o shodě středních hodnot na hladině významnosti α zamítnuta.

(b) **Klasický Studentův t -test T_2 pro různé rozptyly:** pro $\sigma_x^2 \neq \sigma_y^2$ a když obě rozdělení vykazují Gaussovo rozdělení, má testovací kritérium tvar

$$T_2 = \frac{|\bar{x} - \bar{y}|}{\sqrt{\frac{s_x^2}{n_1} + \frac{s_y^2}{n_2}}}$$

Platí-li hypotéza H_0 , má tato testová statistika Studentovo rozdělení s "ekvivalentními" stupni volnosti v

$$v = \frac{\frac{s_x^2}{n_1} + \frac{s_y^2}{n_2}}{\frac{s_x^4}{n_1^2(n_1-1)} + \frac{s_y^4}{n_2^2(n_2-1)}}$$

Platí-li, že $T_2 > t_{1-\alpha/2}(v)$, je hypotéza H_0 o shodě středních hodnot na hladině významnosti α zamítnuta.

Testovací kritérium T_1 není robustní vůči heteroskedasticitě, tj. případu, kdy data jsou ve výběrech měřena s různou přesností. V této situaci je správnější užít testovacího kritéria T_2 , které je vůči heteroskedasticitě robustnější. Na druhé straně však ekvivalentní stupně volnosti v vycházejí menší než $n_1 + n_2 - 2$, takže síla testu T_2 je nižší než síla T_1 a vzrůstá i pravděpodobnost chyby II. druhu, β .

(c) Modifikovaný Studentův t -test T_3 pro výběry, odchýlené od normálního rozdělení: jestliže jedno z rozdělení se odchyluje od normality nebo se významně liší v šikmosti od druhého, je vhodné použít modifikované testovací kritérium T_3

$$T_3 = \frac{|\bar{x} - \bar{y}| + C + D(\bar{x} - \bar{y})^2}{\sqrt{\frac{s_x^2}{n_1} + \frac{s_y^2}{n_2}}}$$

kde

$$C = \frac{1}{6} \frac{\frac{\hat{g}_{1x}}{n_1^2} \frac{s_x^3}{\sqrt{n_1}} - \frac{\hat{g}_{1y}}{n_2^2} \frac{s_y^3}{\sqrt{n_2}}}{\frac{s_x^2}{n_1} + \frac{s_y^2}{n_2}} \quad \text{a} \quad D = \frac{1}{3} \frac{\frac{\hat{g}_{1x}}{n_1^2} \frac{s_x^3}{\sqrt{n_1}} - \frac{\hat{g}_{1y}}{n_2^2} \frac{s_y^3}{\sqrt{n_2}}}{\left[\frac{s_x^2}{n_1} + \frac{s_y^2}{n_2}\right]^2}$$

V těchto vztazích jsou \hat{g}_{1x} a \hat{g}_{1y} výběrové šikmosti. Aby bylo možné užít kvantilů Studentova rozdělení pro předepsanou hladinu významnosti α , je třeba přeformulovat testovací kritérium T_3 do tvaru

$$T_3 = T_2 + B_x - B_y,$$

kde

$$B_x = \frac{\frac{\hat{g}_{1x} s_x^3}{6 n_1^2 \sqrt{n_1} \left[\frac{s_x^2}{n_1} + \frac{s_y^2}{n_2}\right]} + \frac{\hat{g}_{1x} s_x^2 (\bar{x} - \bar{y})^2}{3 n_2^2 \sqrt{n_2} \left[\frac{s_x^2}{n_1} + \frac{s_y^2}{n_2}\right]}}{\sqrt{\frac{s_x^2}{n_1} + \frac{s_y^2}{n_2}}}$$

a B_y se vyčíslí analogicky, pouze šikmost \hat{g}_{1x} se nahradí hodnotou \hat{g}_{1y} , rozptyl σ_x^2 hodnotou σ_y^2 a rozsah n_1 hodnotou n_2 . Za předpokladu platnosti hypotézy H_0 má testovací kritérium T_3 Studentovo rozdělení s počtem stupňů volnosti v . Test založený na kritériu T_3 je robustní vůči sešikmení výběrových rozdělení i vůči heteroskedasticitě a není u něho požadována ani shoda rozptylů, $\sigma_x^2 \neq \sigma_y^2$. Vůči odchylkám rozdělení od normality ve špičatosti jsou uvedené t -testy T_1 , T_2 a T_3 dostatečně robustní. Je možné použít i korekcí na špičatost, které však nepřinášejí výrazné zlepšení.

(d) Robustní Jackknife test polohy T_4 pro homoskedasticitu: jsou-li ve výběrech přítomna vybočující měření, lze pro test hypotézy $H_0: \mu_1 = \mu_2$, a $\sigma_1^2 = \sigma_2^2$ upravit testovací kritérium založené na uřezaném průměru na tvar

$$T_4 = \frac{(\bar{x}(\hat{v}) - \bar{y}(\hat{v}))}{\sqrt{S_{w,x}(\hat{v}) + S_{w,y}(\hat{v})}}$$

kde $S_{w,x}(\hat{v})$ a $S_{w,y}(\hat{v})$ se vyčíslí pro výběry $\{x_i\}$, $i = 1, \dots, n_1$, a $\{y_j\}$, $j = 1, \dots, n_2$. Je-li $n_1 = n_2$, má náhodná veličina T_4 přibližně Studentovo rozdělení s $2(k-1)$ stupni volnosti. Test T_4 lze použít jen pro rozsah $n \geq 7$.

(e) Robustní Jackknife test polohy T_5 pro heteroskedasticitu: pro případ nestejných rozptylů $\sigma_1^2 \neq \sigma_2^2$ a nestejných rozsahů $n_1 \neq n_2$ a s využitím kritéria T_2 lze formulovat robustní kritérium T_5 pro test hypotézy $H_0: \mu_x = \mu_y$

$$T_5 = \frac{\bar{x}(\hat{v}) - \bar{y}(\hat{v})}{\sqrt{\frac{S_{w,x}^2}{h_1} + \frac{S_{w,y}^2}{h_2}}}, \quad \text{kde } s_{w,x}^2 = \frac{S_{w,x}(\hat{v})}{h_1 - 1}, \quad s_{w,y}^2 = \frac{S_{w,y}(\hat{v})}{h_2 - 1}$$

$$h_i = n_i - 2 \operatorname{int} \left(\frac{\hat{v} n_i}{100} \right) \quad \text{pro } i = 1, 2.$$

Testovací kritérium T_5 má přibližně Studentovo rozdělení s v stupni volnosti, pro které platí

$$\frac{1}{v} = \frac{z^2}{h_1 - 1} + \frac{(1 - z)^2}{h_2 - 1}, \quad \text{kde } z = \frac{\frac{S_{w,x}^2}{h_1}}{\frac{S_{w,x}^2}{h_1} + \frac{S_{w,y}^2}{h_2}}.$$

Robustní testy T_4 a T_5 jsou výhodné také pro rozdělení s dlouhými konci, když je špičatost větší než 3. V případě normálního rozdělení však mají menší sílu než testy T_1 a T_2 .

4. úloha: Test shodnosti středních hodnot dvou souborů

(a) Na vzorové úloze *Porovnání práce dvou laborantek* ukážeme aplikaci testu shodnosti. Dvě laborantky prováděly analýzu koncentrace mukoproteinů v kontrolním vzorku. Určete, zda obě dospěly ke stejným výsledkům. Test shodnosti proveďte na hladině významnosti $\alpha = 0.05$.

Data: Stanovení koncentrace mukoproteinů v g/l laborantkou A a laborantkou B:

A: 11.6 12.1 13.2 12.1 10.6 13.3 13.7 14.4 15.2 13.6 13.7 12.4 12.5

B: 12.4 12.8 12.3 12.7 12.4 12.5 11.9 13.1 12.7 12.5 11.8 11.6 12.3

Řešení: Z ověření základních předpokladů pro jednotlivé výběry vyplývá, že data v obou výběrech jsou nezávislá, homogenní bez odlehlých bodů, test normality u obou výběrů prokázal Gaussovo rozdělení.

Porovnání dvou výběrů (výstup programu ADSTAT)

(1) KLASICKÉ ODHADY PARAMETRŮ:

Parametr	Výběr č. 1	Výběr č. 2	Celkově
Velikost výběru	13	13	26
Průměr	12.954	12.385	12.669
Rozptyl	1.516	0.1764	0.8124
Šikmost	-0.070	-0.344	-0.101
Špičatost	2.58	2.50	4.21

(2) TEST HOMOGENITY ROZPTYLU (hypotéza $H_0: s_1^2 = s_2^2$):

Fisher-Snedecor F-test:

Počet stupňů volnosti Df1 : 12

Df2 : 12

Tabulkový kvantil $F(1-\alpha/2, Df1, Df2)$: 3.277

F-statistika : 8.594

Závěr: Rozptyly se považují za rozdílné, H_0 zamítnuta

(3) TEST SHODY PRŮMĚRU (hypotéza $H_0: \mu_1 = \mu_2$):

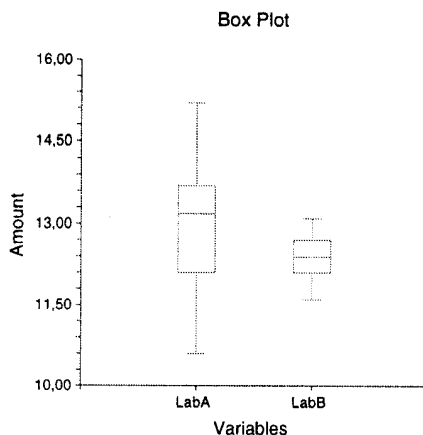
t-test (pro různé rozptyly)

Počet stupňů volnosti Df1 : 16

Tabulkový kvantil $t(1-\alpha/2, Df1)$: 2.120

t-statistika : 1.578

Závěr: Průměry se považují za shodné, H_0 přijata



Krabicový graf porovnání dvou výběrů, NCSS2000

Závěr: Na hladině významnosti $\alpha = 0.05$ potvrzuje oboustranný klasický test shodu středních hodnot obou výběrů i při významné odlišnosti obou rozptylů. Obě laborantky dosáhly stejných výsledků, i když každá s jinou variabilitou.

(b) Na vzorové úloze *Porovnání potenciometrického a jodometrického stanovení kyslíku ve vodě*, tj. potenciometricky pomocí Clarkovy kyslíkové elektrody a jodometricky titrací dle Winklera, aplikujte test shodnosti středních hodnot obou výběrů na hladině významnosti $\alpha = 0.05$. Jsou rozdělení obou výběrů Gaussovská? Jsou rozptyly obou výběrů stejné?

Data: Obsah kyslíku ve vodě [mg/l]:

Pot.	7.0	7.0	6.9	6.9	6.8	6.9	6.9	7.1	7.0	7.0	6.4	6.6	6.7	6.8	6.9
	7.1	7.0	6.9	6.8	7.1	6.9	6.6	6.6	6.6	6.6	6.8	6.8	7.3	6.9	6.7
Jod.	6.9	6.9	6.6	6.7	6.5	6.7	6.6	6.6	6.6	6.6	6.6	6.6	6.6	6.8	6.9
	7.1	7.0	6.7	7.4	7.0	7.1	7.0	6.7	7.1	6.9	6.9	7.1	7.3	7.1	7.2

Řešení: Z ověření základních předpokladů pro jednotlivé výběry vyplývá, že data v obou výběrech jsou nezávislá, homogenní bez odlehlých bodů, test normality u obou výběrů prokázal symetrické rozdělení, u prvního výběru Gaussovo rozdělení a druhého rovnoměrné rozdělení.

Porovnání dvou výběrů (výstup programu ADSTAT)

(1) KLASICKÉ ODHADY PARAMETRŮ:

Parametr	Výběr č. 1	Výběr č. 2	Celkově
Velikost výběru	30	30	60
Průměr	6.853	6.860	6.857
Rozptyl	0.0377	0.0597	0.0479
Šikmost	-0.15	0.37	0.20
Špičatost	2.94	2.09	2.45

(2) TEST HOMOGENITY ROZPTYLU (hypotéza $H_0: s_1^2 = s_2^2$):

Fisher-Snedecor F-test:

Počet stupňů volnosti	Df1	: 29
	Df2	: 29
Tabulkový kvantil $F(1-\alpha/2, Df1, Df2)$: 2.101
F-statistika		: 1.582

Závěr: Rozptyly se považují za shodné, H_0 přijata

(3) TEST SHODY PRŮMĚRU (hypotéza $H_0: \mu_1 = \mu_2$):

t-test(pro shodné rozptyly)

Počet stupňů volnosti	Df1	: 58
Tabulkový kvantil $t(1-\alpha/2, Df1)$: 2.001
t-statistika		: 0.059

Závěr: Průměry se považují za shodné, H_0 přijata

Závěr: Na hladině významnosti $\alpha = 0.05$ potvrzuje oboustranný klasický test shodu středních hodnot obou výběrů i při shodnosti obou rozptylů. Obě analytické metody stanovení kyslíku ve vodě proto vedou ke stejným výsledkům.

5. vzorová úloha: Párový test

Na vzorové úloze *Zkoušení obsahu niklu v drátu a svarovém kovu u párových dat* ukážeme párový test.

Data: Párová data obsahu niklu [%] (a) ve drátu, (b) ve sváru a (c) rozdíl párové hodnoty:

25.49	25.55	-0.06,	25.79	25.23	0.56,	25.32	25.56	-0.24,
11.59	11.34	0.25,	11.43	11.12	0.31,	11.01	10.76	0.25,
11.12	11.15	-0.03,	10.76	10.70	0.06,	10.96	10.51	0.45,
10.88	10.88	0.00,	25.86	25.28	0.58,	25.17	24.31	0.86,
25.79	24.75	1.04,	25.47	25.83	-0.36,	10.12	10.36	-0.24,
9.61	9.92	-0.31,	9.87	9.85	0.02,	9.94	10.04	-0.1,
9.91	9.93	-0.02,	10.38	10.11	0.27,	11.61	10.52	1.09,
11.27	10.96	0.31,	11.00	10.54	0.46,	9.88	10.04	-0.16,
10.09	10.25	-0.16,	9.94	9.81	0.13,	9.61	9.88	-0.27,
13.29	13.45	-0.16,	13.13	13.2	-0.07,	12.83	12.93	-0.1,
13.27	13.5	-0.23,	12.83	13.16	-0.33,	13.02	13.22	-0.2,
12.95	13.48	-0.53,	12.83	12.91	-0.08,	13.53	13.58	-0.05,
13.55	13.76	-0.21,	13.46	13.69	-0.23,	13.27	13.63	-0.36,
13.06	13.31	-0.25,	13.4	13.33	0.07,	13.24	13.69	-0.45,
13.52	13.39	0.13,	13.67	13.45	0.22,	13.27	13.17	0.10,

Řešení: Užijeme t-test (párový) v programu ADSTAT a v programu NCSS2000:
Párový test (výstup programu ADSTAT)

Průměrný rozdíl	:	0.04356
Rozptyl	:	0.03003
Počet stupňů volnosti Df1	:	44
Tabulkový kvantil $t(1-\alpha/2, Df1)$:	2.015
t-statistika	:	9.728

Závěr: Průměry se považují za rozdílné, H_0 zamítnuta

Vypočtená hladina významnosti : 0.000

Závěr: Párový test zamítl hypotézu o shodě obsahu niklu v drátu a svarovém kovu.

Doporučená literatura:

1. M. Meloun, J. Militký: *Statistické zpracování experimentálních dat*, East Publishing Praha 1998, ISBN 80-7219-003-2.
2. M. Meloun, J. Militký: *Statistické zpracování experimentálních dat - Sbíрка úloh*, Univerzita Pardubice 1996. ISBN 80-7194-075-5.
3. M. Meloun, J. Militký, M. Forina: *Chemometrics for Analytical Chemistry, Volume 1. PC-Aided Statistical Data Analysis*, Ellis Horwood Chichester 1992, ISBN 0-13-126376-5.
4. M. Meloun, J. Militký, M. Forina: *Chemometrics for Analytical Chemistry, Volume 2. PC-Aided Regression and Related Methods*, Ellis Horwood Chichester 1994, ISBN 0-13-123788-7.
5. Software *ADSTAT 1.25, 2.0, a verze 3.0 pro Windows 95 (1999)*, TriloByte Statistical Software s. r. o., Pardubice.
6. Software *NCSS2000 (July 1998)*, Number Cruncher Statistical Systems, Dr. Jerry L. Hintze, Kaysville, Utah, USA.