Липецкий государственный технический университет

Кафедра прикладной математики

КОМПЬЮТЕРНЫЕ ТЕХНОЛОГИИ МАТЕМАТИЧЕСКИХ ИССЛЕДОВАНИЙ

Лекция 7

7. Анализ мощности и статистическое оценивание выборочных характеристик

Составитель - Сысоев А.С., к.т.н., доц.

Липецк – 2021

Outline

7.1. Проверка статистических гипотез

Анализ мощности позволяет определить *размер выборки*, необходимый для выявления *эффекта заданной величины* с заданной *долей уверенности*.

Гипотезы: H_0 - нулевая, H_1 - альтернативная.

Допуская, что нулевая гипотеза справедлива, вычисляют вероятность получения для *генеральной совокупности* наблюдаемого в выборке или большего значения статистики.

Пример: влияние разговоров по мобильному телефону на время реакции водителя.

H_0 : $\boldsymbol{\mu_1 - \mu_2} = 0$ при H_1: $\boldsymbol{\mu 1 - \mu 2 \neq} 0$.

Статистика

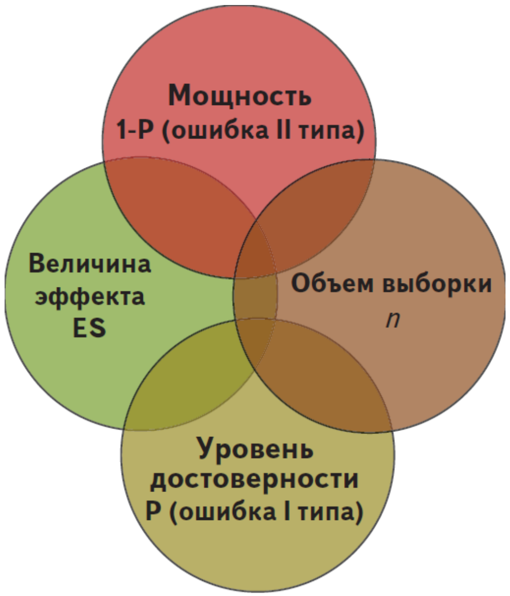
$$\left(\overline{X}_1 - \overline{X}_2\right) / \left(\frac{S}{\sqrt{n}}\right)$$

где $\overline{X}_1$ и $\overline{X}_2$ – это средние для каждой выборки значения времени реакции, **S** – это стандартное отклонение для объединенной выбор ки, **n** – число участников в каждой группе.

7.1. Проверка статистических гипотез

Если вероятность не достигает некоторого принятого критического значения (например, $p < 0.05$), то отвергают нулевую гипотезу в пользу альтернативной. Заранее определенное критическое значение (0.05) называется ***уровнем значимости теста***.

	Отвергаем H_0	**Не смогли отвергнуть H_0**
H_0 справедлива	Ошибка I типа	Верно
H_0 ложна	Верно	Ошибка II типа



размер выборки – число наблюдений при каждом типе воздействия или в каждой группе

уровень значимости (альфа) – вероятность совершения статистической ошибки первого типа. Уровень значимости можно также трактовать как вероятность нахождения несуществующей закономерности

мощность теста (вероятность совершения статистической ошибки второго типа). Мощность можно также понимать как вероятность обнаружения существующей закономерности

размер эффекта – величина эффекта, который является предметом альтернативной гипотезы

7.1. Проверка статистических гипотез

Задача при исследовании – повысить мощность статистических тестов, сохранив приемлемый уровень значимости и работая с минимально возможной выборкой.

Четыре величины (размер выборки, уровень значимости, мощность и величина эффекта) тесно взаимосвязаны. *Зная значения любых трех, можно определить четвертую*.

Функция	Вычисляет мощность для
`pwr.2p.test()`	Двух пропорций (равные объемы выборок)
`pwr.2p2n.test()`	Двух пропорций (неодинаковые объемы выборок)
`pwr.anova.test()`	Сбалансированного однофакторного дисперсионного анализа
`pwr.chisq.test()`	Теста хи-квадрат
`pwr.f2.test()`	Общей линейной модели
`pwr.p.test()`	Пропорции (одна выборка)
`pwr.r.test()`	Корреляции
`pwr.t.test()`	Тестов Стьюдента (одна выборка, две выборки, для зависимых переменных)
`pwr.t2n.test()`	Тестов Стьюдента (две выборки разного объема)

7.2. Процедура анализа мощности

7.2.1. Тесты Стьюдента

Пример сравнить среднее время реакции для водителей с мобильным телефоном и для водителей без отвлекающих факторов.

```
pwr.t.test(n=, d=, sig.level=, power=, type=, alternative=),
```

- `n` – размер выборки;
- `d` – величина эффекта, выраженная в стандартизованной разнице средних значений, которая рассчитывается по формуле
  $$d = \frac{(\mu_1 - \mu_2)}{\sigma},$$
  где μ_1 – среднее значение для первой группы, μ_2 – среднее значение для второй группы, σ – дисперсия общей ошибки;
- `sig.level` – уровень значимости (по умолчанию 0.05);
- `power` – уровень мощности;
- `type` – тип теста: для двух выборок ("`two.sample`", по умолчанию), для одной выборки ("`one.sample`"), для зависимых выборок ("`paired`");
- `alternative` – двухсторонний ("`two.sided`", по умолчанию) или односторонний ("`less`" или "`greater`").

7.2. Процедура анализа мощности

7.2.1. Тесты Стьюдента

```
> library(pwr)
> pwr.t.test(d=.8, sig.level=.05, power=.9, type="two.sample",
alternative="two.sided")
     Two-sample t test power calculation
              n = 34
              d = 0.8
      sig.level = 0.05
          power = 0.9
    alternative = two.sided
 NOTE: n is number in *each* group
```

Замечание: сравнивая две группы, установим обнаружение различие между выборочными средними в 0.5 стандартного отклонения. Можем исследовать только по 20 человек.

```
> pwr.t.test(n=20, d=.5, sig.level=.01, type="two.sample",
  alternative="two.sided")
     Two-sample t test power calculation
              n = 20
              d = 0.5
      sig.level = 0.01
          power = 0.14
    alternative = two.sided
 NOTE: n is number in *each* group
```

```
pwr.t2n.test(n1=, n2=, d=, sig.level=, power=, alternative=)
```

7.2. Процедура анализа мощности

7.2.2. Дисперсионный анализ

Пример: для однофакторного дисперсионного анализа, включающего пять групп, нужно найти размер групп, при котором мощность составляет 0.8, размер эффекта – 0.25 и уровень значимости – 0.05.

```
pwr.anova.test(k=, n=, f=, sig.level=, power=)
```

где **k** – число групп, а **n** – размер выборки в каждой группе.

Для однофакторного дисперсионного анализа величина эффекта отражена в параметре `f`, который рассчитывается по формуле

$$f = \sqrt{\frac{\sum_{i-1}^{k} p_i \times (\mu_i - \mu)^2}{\sigma^2}},$$

где $p_i = n_i / N_i$,
n_i – число наблюдений в группе i,
N – общее число наблюдений,
μ_i – среднее значение для группы i,
μ – общее среднее,
σ^2 – дисперсия ошибок внутри групп.

```
> pwr.anova.test(k=5, f=.25, sig.level=.05, power=.8)
     Balanced one-way analysis of variance power calculation
              k = 5
              n = 39
              f = 0.25
      sig.level = 0.05
          power = 0.8
 NOTE: n is number in each group
```

Пример: связь между депрессией и одиночеством.

$$H_0: \rho \leq 0.25 \text{ и } H_1: \rho > 0.25$$

```
> pwr.r.test(r=.25, sig.level=.05, power=.90, alternative="greater")
     approximate correlation power calculation (arctangh transformation)

              n = 134
              r = 0.25
      sig.level = 0.05
          power = 0.9
    alternative = greater
```

Нужно установить степень депрессии и одиночества у 134 человек, чтобы быть на 90% уверенными в том, что будет отвергнута нулевую гипотезу, если она действительно окажется ложной.

7.2. Процедура анализа мощности

7.2.4. Линейные модели

Пример: влияет ли стиль руководства на удовлетворенность сотрудников своей работой наряду с уровнем зарплаты и чаевыми. Стиль руководства описан четырьмя переменными, а размер заплаты и чаевых – тремя. На основании имеющегося опыта можно сказать, что удовлетворение от работы примерно на 30% определяется доходом. С практической точки зрения интересно, добавит ли стиль руководства хотя бы 5% к этому значению. Сколько людей нужно опросить, чтобы выявить такой размер эффекта с 90% уверенности при равном 0.05 уровне значимости?

```
pwr.f2.test(u=, v=, f2=, sig.level=, power=)
```

где **u** и **v** – это числитель и знаменатель степеней свободы, а **f2** – размер эффекта, который вычисляется по формуле

$$f^2 = \frac{R^2}{(1-R^2)},$$

где R^2 – это квадрат множественного коэффициента корреляции для генеральной совокупности, или по формуле

$$f^2 = \frac{(R_{AB}^2 - R_A^2)}{(1 - R_{AB}^2)},$$

где R_A^2 – дисперсия в генеральной совокупности, учтенная набором переменных A, R_{AB}^2 – дисперсия в генеральной совокупности, учтенная переменными из наборов A и B.

```
> pwr.f2.test(u=3, f2=0.0769, sig.level=0.05, power=0.90)
     Multiple regression power calculation
              u = 3
              v = 184.2426
             f2 = 0.0769
      sig.level = 0.05
          power = 0.9
```

В случае множественной регрессии знаменатель степеней свободы равен **N** – **k** – 1, где **N** – это число наблюдений, а **k** – число независимых переменных.

7.2.5. Тесты пропорций

Пример: обычное лекарство облегчает симптомы болезни у 60% пациентов. Новое (и более дорогое) средство будет иметь успех на рынке, если оно улучшит состояние 65% больных. Сколько испытуемых нужно исследовать, чтобы можно было обнаружить указанное выше различие между лекарствами по эффективности?

```
pwr.2p.test(h=, n=, sig.level=, power=),
```

где **h** – величина эффекта, **n** – общий объем выборки для двух групп.

```
pwr.2p2n.test(h =, n1 =, n2 =, sig.level=, power=)
```

$$h = 2\arcsin\left(\sqrt{p_1}\right) - 2\arcsin\left(\sqrt{p_2}\right)$$

```
> pwr.2p.test(h=ES.h(.65, .6), sig.level=.05, power=.9,
              alternative="greater")
     Difference of proportion power calculation for binomial
     distribution (arcsine transformation)
              h = 0.1033347
              n = 1604.007
      sig.level = 0.05
          power = 0.9
    alternative = greater
 NOTE: same sample sizes
```

Тесты хи-квадрат часто используются для оценки связи между двумя категориальными переменными. *Нулевая гипотеза обычно подразумевает, что переменные независимы, а альтернативная гипотеза – что они зависимы*.

```
pwr.chisq.test(w= , N= , df= , sig.level= , power= )
```

где **w** – размер эффекта, **N** – общий объем выборки, а **df** – число степеней свободы.

$$w = \sqrt{\sum_{i-1}^{m} \frac{(p0_i - p2_i)^2}{p0_i}},$$

где $p0_i$ – вероятность в ячейке таблицы сопряженности при справедливой H_0, $p1_i$ – вероятность в ячейке таблицы сопряженности при справедливой H_1.

Пример: связь между этнической принадлежностью и продвижением по службе.

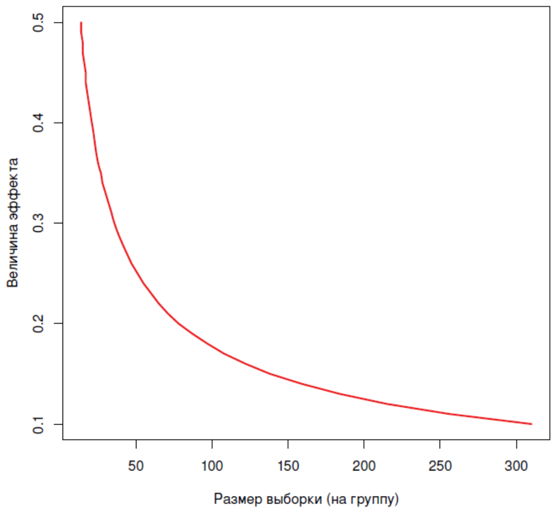
Этническая принадлежность	Продвинулись по службе	Не продвинулись
Белые	0.42	0.28
Афроамериканцы	0.03	0.07
Латиноамериканцы	0.10	0.10

```
> prob <- matrix(c(.42, .28, .03, .07, .10, .10), byrow=TRUE, nrow=3)
> ES.w2(prob)
[1] 0.1853198

> pwr.chisq.test(w=.1853, df=2, sig.level=.05, power=.9)
     Chi squared power calculation
              w = 0.1853
              N = 368.5317
             df = 2
      sig.level = 0.05
          power = 0.9
 NOTE: N is the number of observations
```

Статистический метод	Мера размера эффекта	Предлагаемые ориентировочные значения для разных размеров эффектов		
		Малый	Средний	Большой
Тест Стьюдента	d	0.20	0.50	0.80
Дисперсионный анализ	f	0.10	0.25	0.40
Линейные модели	f2	0.02	0.15	0.35
Тест пропорций	h	0.20	0.50	0.80
Тест хи-квадрат	w	0.10	0.30	0.50

Пример: сравнить пять групп при помощи однофакторного дисперсионного анализа с уровнем значимости 0.05.

```
library(pwr)
es <- seq(.1, .5, .01)
nes <- length(es)
samsize <- NULL
for (i in 1:nes){
    result <- pwr.anova.test(k=5, f=es[i], sig.level=.05, power=.9)
    samsize[i] <- ceiling(result$n)
}
```



8.1 Непараметрические методы статистики и ресамплинг

Непараметрическими называют такие методы статистики, которые не зависят от какого-нибудь распределения из теоретического семейства и не используют его свойства.

В том случае, когда нет возможности получить истинные повторности наблюдений, разработаны методы, которые формируют большое количество *"псевдовыборок"*, и на их основе можно получить необходимые характеристики искомого параметра.

рандомизация, или перестановочный тест (permutation),

бутстреп (bootstrap),

метод "складного ножа" (jackknife),

кросс-проверка (cross-validation).

8.2 Складной нож и бутстреп - механизмы генерации случайных псевдовыборок

Традиционные параметрические методы позволяют оценить ошибку среднего как

$$s_m = s/\sqrt{n} = \left[\frac{1}{n(n-1)}\sum_{i=1}^{n}(x_i - \bar{x})^2\right]^{1/2}$$

Оценка для ошибки среднего, вычисленная методом складного ножа

$$\hat{\sigma}_{JACK} = \left[\frac{n-1}{n}\sum_{i=1}^{n}(\tilde{x}_{(i)} - \bar{x}_{(\bullet)})^2\right]^{1/2}$$

Популярность метода "складного ножа" с его недостаточно интенсивным вычислительным подходом при анализе выборочных оценок параметров существенно снизилась в ходе развития идей **бутстрепа**, когда появилась возможность гибкой настройки и использование алгоритмов самоорганизации.

Бутстреп-процедура (bootstrap) была предложена как некоторое обобщение алгоритма "складного ножа", чтобы не уменьшать каждый раз число элементов по сравнению с исходной совокупностью.

8.2 Складной нож и бутстреп - механизмы генерации случайных псевдовыборок

Основная идея бутстрепа состоит в том, чтобы методом статистических испытаний Монте-Карло многократно извлекать повторные выборки из эмпирического распределения.

Берется конечная совокупность из n членов исходной выборки $x_1, x_2, \ldots, x_{n-1}, x_n$, откуда на каждом шаге из n последовательных итераций с помощью датчика случайных чисел, равномерно распределенных на интервале [1, n], "вытягивается" произвольный элемент x_k, который снова "возвращается" в исходную выборку (т.е. может быть извлечен повторно). Можно сформировать любое, сколь угодно большое число бутстреп-выборок (обычно 5000-10000). На основе разброса значений анализируемого показателя, полученного в процессе имитации, можно построить, например, доверительные интервалы оцениваемого параметра.

Бутстреп, как и иные методы генерации повторных выборок, полезны, когда статистические выводы нельзя получить с использованием теоретических предположений (например, какие-либо предположения сделать трудно из-за недостаточного объема выборок).

В зависимости от имеющейся информации относительно статистической модели генеральной совокупности различают *непараметрический* и *параметрический бутстреп*.

НЕПАРАМЕТРИЧЕСКАЯ БУТСТРЕП-ПРОЦЕДУРА

Шаг 1: Получение большого количества повторностей – случайных наборов данных из изучаемой совокупности. При этом используется алгоритм "случайного выбора с возвращением" (random sampling with replacement), т.е. извлеченное число снова помещается в "перемешиваемую колоду" прежде чем вытягивается следующее наблюдение.

Шаг 2: Построение бутстреп-распределения оцениваемой величины.

Если простой *непараметрический бутстреп* выполняет перевыборку с учетом равной вероятности появления каждого элемента, то *стратифицированный бутстреп* учитывает соотношение частот между относительно гомогенными группами (стратами), на которые может быть разделены выборочные объекты.

ПАРАМЕТРИЧЕСКАЯ БУТСТРЕП-ПРОЦЕДУРА

Шаг 1: По выборочным данным $\{x_1, x_2, \ldots, , x_n\}$ осуществляется построение вероятностной модели и оцениваются ее параметры.

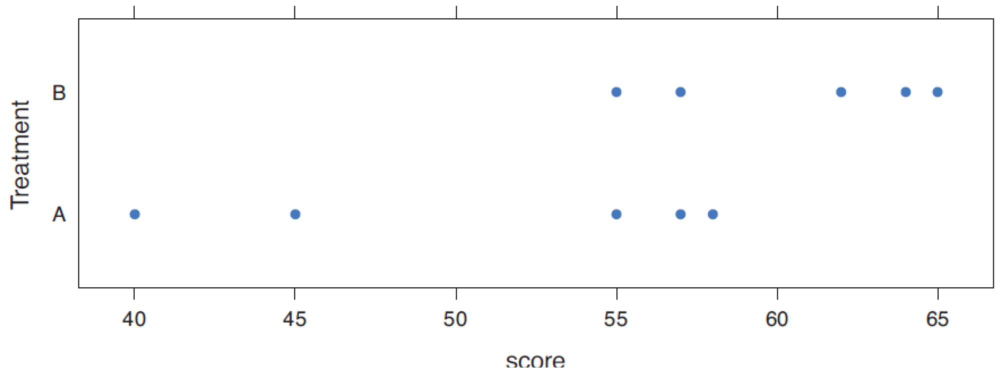
Шаг 2: Случайным образом из подобранного распределения генерируются n элементов $\{x^*_1, x^*_2, \ldots, x^*_n\}$ и бутстреп-повторность, полученная такой имитацией, используется для расчета значения статистики $t^* = T(x^*)$.

Шаг 3: Шаг 2 выполняется B раз и формируется бутстреп-распределение анализируемой статистики $\{t^*_1, t^*_2, \ldots, t^*_j, \ldots, t^*_B\}$.

8.3 Перестановочные тесты

Задача: Десять объектов были случайно подвергнуты одному из двух воздействий (A или B), а затем были зарегистрированы значения результирующей переменной (`score`). Достаточны ли эти данные для того, чтобы заключить, что подобные воздействия приводят к разным результатам?

Воздействие A	Воздействие B
40	57
57	64
45	55
55	62
58	65



1. Вычислить выборочную t-статистику как при параметрическом подходе, t_0.
2. Поместить все 10 значений в одну группу.
3. Случайно поместить пять значений в группу A и пять – в группу B.
4. Вычислить новую t-статистику.
5. Повторить шаги 3–4 для всех возможных способов размещения пяти значений в группу A и пяти – в группу B. Всего существует 252 способа.
6. Расположить 252 значения t-статистики в порядке возрастания. Это эмпирическое распределение, основанное на выборках.
7. Если t_0 не входит в центральные 95% значений эмпирического распределения, то следует с вероятностью 95% отвергнуть нулевую гипотезу о равенстве средних значений в двух группах.

8.3 Перестановочные тесты

Тест	Функция пакета `coin` *
Перестановочный тест для двух и *k* выборок	`oneway_test(y ~ A)`
Перестановочный тест для двух и *k* выборок с группирующим фактором	`oneway_test(y ~ A | C)`
Тест ранговых сумм Вилкоксона-Манна-Уитни	`wilcox_test(y ~ A)`
Тест Краскела-Уоллиса	`kruskal_test(y ~ A)`
Хи-квадрат тест Пирсона	`chisq_test(A ~ B)`
Тест Кохрана-Мантеля-Гензеля	`cmh_test(A ~ B | C)`
Критерий линейной зависимости (Linear-by-linear association test)	`lbl_test(D ~ E)`
Тест Спирмена	`spearman_test(y ~ x)`
Тест Фридмана	`friedman_test(y ~ A | C)`
Ранговый тест Вилкоксона	`wilcoxsign_test(y1 ~ y2)`

* `y` и `x` – числовые переменные, `A` и `B` – категориальные переменные, `C` – категориальная группирующая переменная, `D` и `E` – упорядоченные факторы, `y1` и `y2` – парные числовые переменные.

```
название_функции (formula, data= , distribution= ),
```

• `formula` описывает взаимосвязь между переменными, которую нужно проверить;

• `data` задает таблицу с данными;

• `distribution` указывает, как должно быть создано эмпирическое распределение для нулевой гипотезы. Возможные значения: `exact`, `asymptotic` и `approximate`.

Тесты на независимость для двух и k выборок

Независимость в таблицах сопряженности

Независимость между числовыми переменными

Тесты для двух и k зависимых выборок

8.4 Бутстреп-анализ при помощи пакета boot в R

В общем случае бутстреп-анализ состоит из трех этапов:

1. Написать функцию, которая вычисляет нужную статистику или нужные статистики. Если имеется одна статистика (например, медиана), функция должна возвращать число. Если есть набор статистик (например, набор регрессионных коэффициентов), функция должна возвращать вектор.

2. Применить функцию `boot()` к функции, чтобы создать бутстреп-повторности статистики или статистик.

3. Использовать функцию `boot.ci()`, чтобы вычислить доверительные интервалы для статистики или статистик, созданных на этапе 2.

Основная функция для бустреп-анализа `boot()`

```
bootobject <- boot(data=, statistic=, R=, ...)
```

Параметр	Описание
`data`	Вектор, матрица или таблица данных
`statistic`	Функция, которая создает k статистик, которые будут подвергнуты бутстреп-анализу (k=1, если есть только одна статистика)
`R`	Число бутстреп-выборок
`...`	Дополнительные параметры функции, которая создает нужную статистику или нужные статистики

8.4 Бутстреп-анализ при помощи пакета boot в R

```
boot.ci(bootobject, conf=, type= )
```

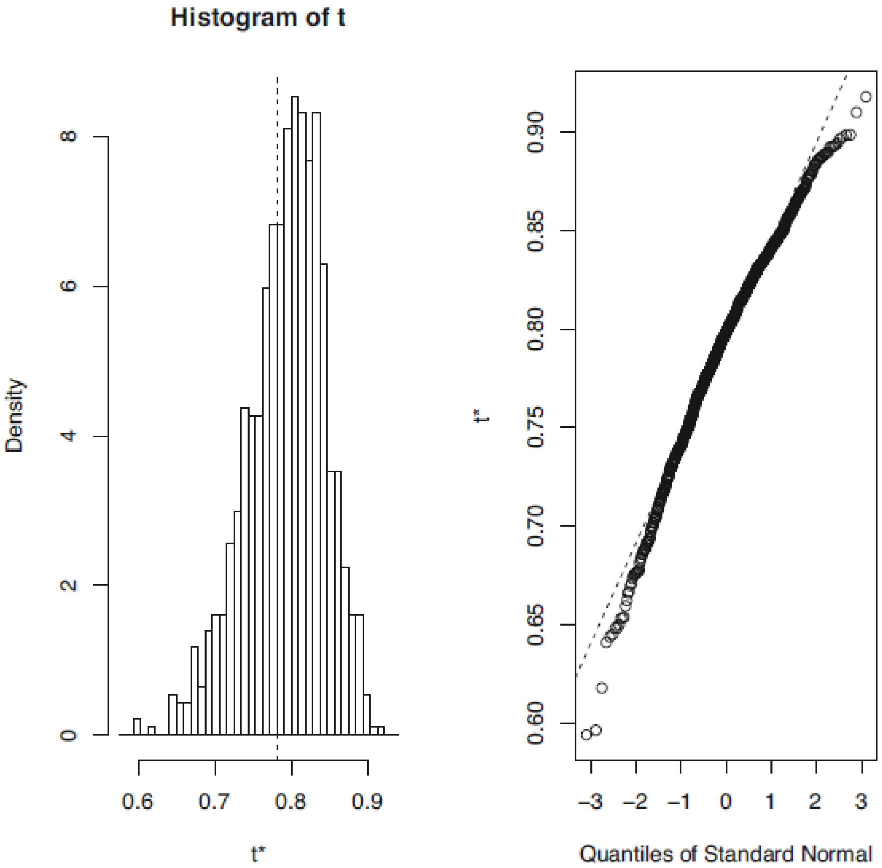
Параметр	Описание
bootobject	Объект, создаваемый функцией `boot()`
`conf`	Требуемый доверительный интервал (по умолчанию `conf=0.95`)
`type`	Тип вычисляемого доверительного интервала. Возможны следующие значения: `"norm"`, `"basic"`, `"stud"`, `"perc"`, `"bca"` и `"all"` (по умолчанию `type="all"`)

БУТСТРЕП-АНАЛИЗ ДЛЯ ОДНОЙ СТАТИСТИКИ

Используется множественная регрессия для предсказания расхода топлива по весу машины и по рабочему объему цилиндров двигателя.

```
rsq <- function(formula, data, indices) {
         d <- data[indices,]
         fit <- lm(formula, data=d)
         return(summary(fit)$r.square)
}

library(boot)
set.seed(1234)
results <- boot(data=mtcars, statistic=rsq,
                R=1000, formula=mpg~wt+disp)
```

БУТСТРЕП-АНАЛИЗ ДЛЯ ОДНОЙ СТАТИСТИКИ (ПРОДОЛЖЕНИЕ)



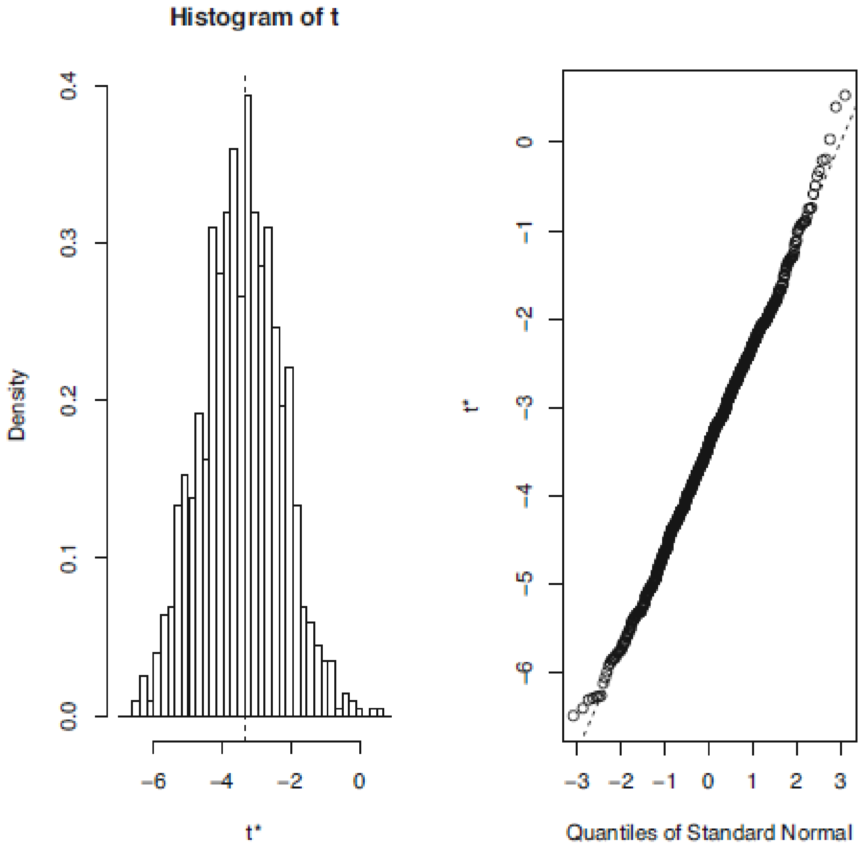

```
> boot.ci(results, type=c("perc", "bca"))
BOOTSTRAP CONFIDENCE INTERVAL CALCULATIONS
Based on 1000 bootstrap replicates
CALL :
boot.ci(boot.out = results, type = c("perc", "bca"))
Intervals :
Level     Percentile            BCa

  95%    ( 0.6838,   0.8833 )    ( 0.6344,   0.8549 )
  Calculations and Intervals on Original Scale
  Some BCa intervals may be unstable
```

БУТСТРЕП-АНАЛИЗ ДЛЯ НЕСКОЛЬКИХ СТАТИСТИК

Расчет доверительных интервалов для трех коэффициентов регрессионной модели (свободный член, вес автомобиля и объем цилиндров).

```
bs <- function(formula, data, indices) {
        d <- data[indices,]
        fit <- lm(formula, data=d)
        return(coef(fit))
}
library(boot)
set.seed(1234)
results <- boot(data=mtcars, statistic=bs,
                R=1000, formula=mpg~wt+disp)
print(results)
ORDINARY NONPARAMETRIC BOOTSTRAP
Call:
boot(data = mtcars, statistic = bs, R = 1000, formula = mpg ~
    wt + disp)
Bootstrap Statistics :
    original   bias    std. error
t1*  34.9606  0.137873     2.48576
t2*  -3.3508 -0.053904     1.17043
t3*  -0.0177 -0.000121     0.00879
```

БУТСТРЕП-АНАЛИЗ ДЛЯ НЕСКОЛЬКИХ СТАТИСТИК (ПРОДОЛЖЕНИЕ)




```
> boot.ci(results, type="bca", index=2)
BOOTSTRAP CONFIDENCE INTERVAL CALCULATIONS
Based on 1000 bootstrap replicates

CALL :
boot.ci(boot.out = results, type = "bca", index = 2)

Intervals :
Level       BCa
95%   (-5.66, -1.19 )
Calculations and Intervals on Original Scale

> boot.ci(results, type="bca", index=3)
BOOTSTRAP CONFIDENCE INTERVAL CALCULATIONS
Based on 1000 bootstrap replicates

CALL :
boot.ci(boot.out = results, type = "bca", index = 3)

Intervals :
Level       BCa
95%   (-0.0331,  0.0010 )
Calculations and Intervals on Original Scale
```

Библиографический список

Кабаков Р. К. (2014) R в действии. Анализ и визуализация данных на языке R Издательство: ДМК Пресс, 580 с.

Шипунов А. Б., Балдин Е. М., Волкова П. А., Коробейников А. И., Назарова С. А., Петров С. В., Суфиянов В. Г. (2012) Наглядная статистика. Используем R! - М.: ДМК Пресс, 298 с.

Шитиков В. К., Розенберг Г. С. (2012) Рандомизация, бутстреп и методы Монте-Карло. Примеры статистического анализа данных по биологии и экологии. Тольятти: Ин-т экологии Волжского бассейна.