Werkzeuge der Empirischen Forschung

Sommersemester 2022

Wolfgang Kössler

7. April 2022

1 Einleitung

Statistik und Wahrscheinlichkeitsrechnung

Stochastik

- befasst sich mit zufälligen Erscheinungen Häufigkeit, Wahrscheinlichkeit und Zufall grch: Kunst des geschickten Vermutens
- Teilgebiete
  - Wahrscheinlichkeitsrechnung
  - Statistik

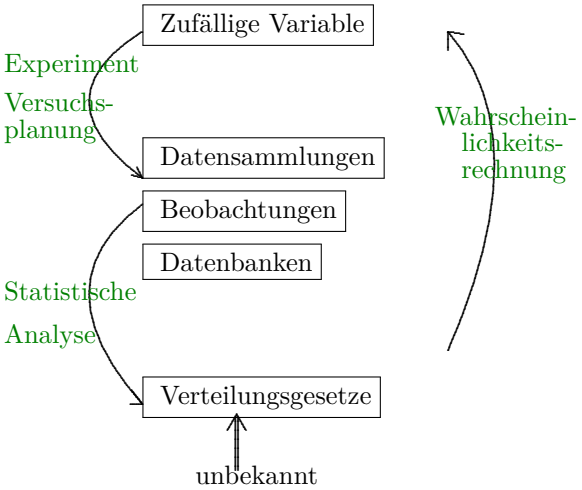
Wahrscheinlichkeitsrechnung

gegebene Grundgesamtheit (Verteilung) → Aussagen über Realisierungen einer Zufallsvariablen treffen.

Statistik

- Gesamtheit aller Methoden zur Analyse zufallsbehafteter Datenmengen
- Gegeben: (Besondere) zufallsbehaftete Datenmengen
- Gesucht: (Allgemeine) Aussagen über die zugrundeliegende Grundgesamtheit
- Teilgebiete:
  - Beschreibende oder Deskriptive Statistik
  - Induktive Statistik
  - Explorative oder Hypothesen-generierende Statistik (data mining)

Überblick: Statistik und Wahrscheinlichkeitsrechnung



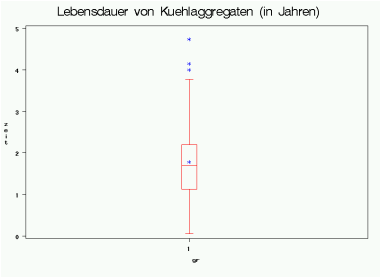
Beschreibene Statistik

- statistische Maßzahlen: Mittelwerte, Streuungen, Quantile, ...
- Box-Plots

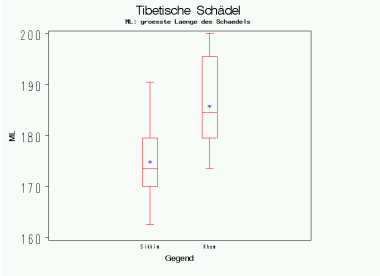
- Q-Q Plots
- Balkendiagramme
- Zusammenhangsmaße
- Punktediagramme (Scatterplots)

Boxplots - Beispiele

Lebensdauern von 100 Kühlaggregaten

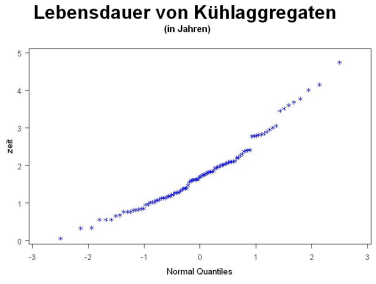


Schädelmaße in zwei Regionen Tibets

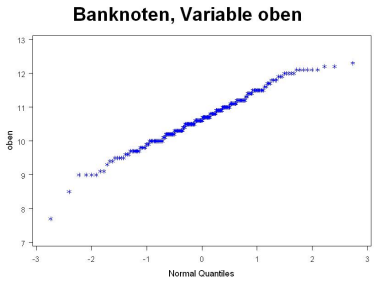


Q-Q Plots - Beispiele (1/2)

Lebensdauern von 100 Kühlaggregaten

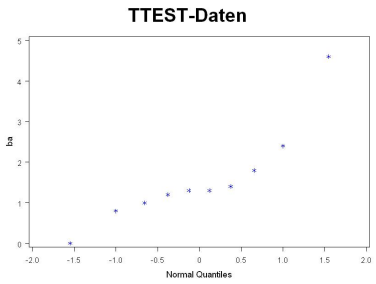


Abmessungen von Banknoten



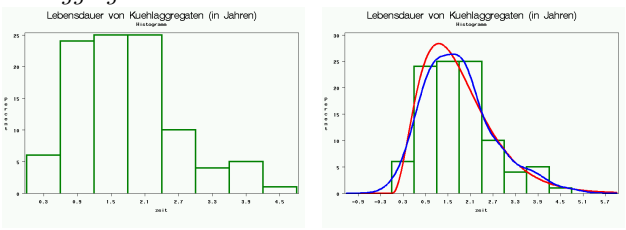
Q-Q Plots - Beispiele (2/2)

Verlängerung der Schlafdauer



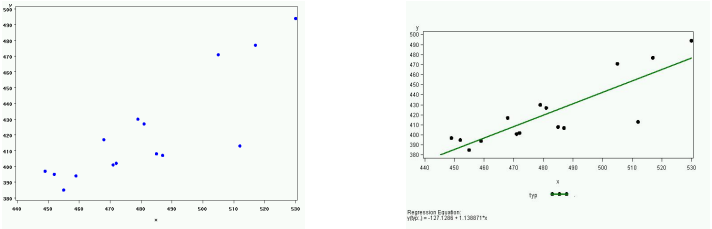
Dichteschätzung, Beispiel

Kühlaggregate



Histogramm Parametrische Dichteschätzung (Gamma) Nichtparametrische Dichteschätzung

Länge und Breite von Venusmuscheln



Schließende Statistik (1)

- Vergleich von Behandlungen, Grundgesamtheiten, Effekten → *t-Test, Wilcoxon-Test, ANOVA, Kruskal-Wallis-Test, Friedman-Test*
- Ursache-Wirkungsanalysen, Vorhersagen, Bestimmen funktionaler Beziehungen, Trendbestimmungen

  → *lineare, nichtlineare Regression* → *Kurvenschätzung* → *logistische Regression* → *Korrelation und Unabhängigkeit*

Schließende Statistik (2)

- Klassifikation → *Clusteranalyse* → *Hauptkomponentenanalyse* → *Faktorenanalyse* → *Diskriminanzanalyse*
- weitere Verfahren → *Lebensdaueranalyse (Zuverlässigkeit)* → *Qualitätskontrolle* → *Zeitreihenanalyse*

Vergleich von Behandlungen, Grundgesamtheiten, Effekten

- Einstichprobenproblem Messungen sollen mit einem vorgegebenen Wert verglichen werden
- Zweistichprobenproblem

  - Vergleich zweier unabhängiger Stichproben
  - Vergleich zweier abhängiger Stichproben
- Vergleich mehrerer unabhängiger Stichproben
- Vergleich mehrerer abhängiger Stichproben

Ein- und Zweistichprobenproblem
Eine Stichprobe

- Banknoten: vorgegebene Länge eingehalten?

→ *Einstichproben t-Test, Signed-Wilcoxon-Test*

Abhängige und Unabhängige Stichproben

- Vergleich zweier unabhängiger Stichproben
  - echte - gefälschte Banknoten
  - Schädel aus verschiedenen Gegenden Tibets

  → *t-Test, Wilcoxon-Test*
- Vergleich zweier abhängiger Stichproben Länge des Scheines oben und unten → *Einstichproben t-Test, Vorzeichen-Wilcoxon-Test*

Mehrstichprobenproblem

Abhängige und Unabhängige Stichproben

- Vergleich mehrerer unabhängiger Stichproben: Ägypt. Schädel: mehrere Grundgesamtheiten, Epochen → *ANOVA, Kruskal-Wallis-Test*
- Vergleich mehrerer abhängiger Stichproben Blutdruck von Patienten an mehreren aufeinanderfolgenden Tagen, (Faktoren: Patient, Tag) Preisrichter beim Synchronschwimmen → *2 fakt. Varianzanalyse, Friedman-Test*

Ursache - Wirkungsanalysen

- Ursache - Wirkungsanalysen
  - Zusammenhangsanalyse
  - Bestimmen funktionaler Beziehungen
  - Trends, Vorhersagen
- Beispiele:
  - Bluthochdruck - Rauchgewohnheiten
  - Blutdruck - Proteinuria
  - Größe - Gewicht
  - Sterblichkeit - Wasserhärte

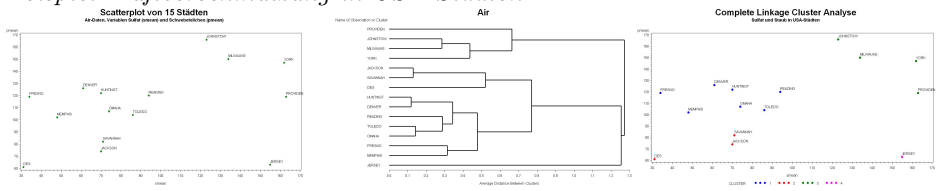
→ *Lineare, Nichtlineare und Nichtparametrische Regression* → *Korrelation*

Klassifikation

- Auffinden von Gruppen in Daten → *Clusteranalyse*
- Individuen sollen einer von vorgegebenen Klassen zugeordnet werden → *Diskriminanzanalyse* → *Logistische Regression*
- Datensatz hat Variablen, die mehr oder weniger voneinander abhängen. Welche Struktur besteht zwischen den Variablen? → *Hauptkomponentenanalyse* → *Faktorenanalyse*

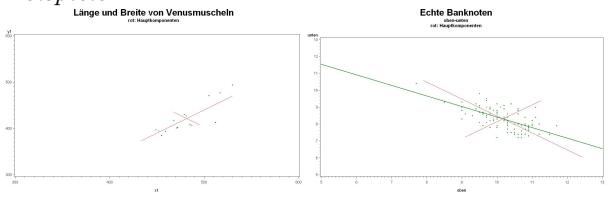
Hierarchische Clusteranalyse

Beispiel: Luftverschmutzung in USA-Städten



Hauptkomponentenanalyse

Beispiele



Frage: Wie kann man diese ausgezeichnete Richtung erfassen?

Literatur (1)

Dufner, Jensen, Schumacher (1992). Statistik mit SAS, Teubner.

Falk, Becker, Marohn (1995). Angewandte Statistik mit SAS, Springer.

Graf, Ortseifen (1995). Statistische und grafische Datenanalyse mit SAS, Spektrum akademischer Verlag Heidelberg.

Krämer, Schoffer, Tschiersch (2004). Datenanalyse mit SAS, Springer.

SAS-Online Dokumentation, SAS-Handbücher

Literatur (2)

Steland A. (2013). Basiswissen Statistik, Springer.

Hartung (1993). Statistik, Lehr- und Handbuch, Oldenbourg.

Sachs (1999). Angewandte Statistik, Springer.

Handl, A. (2002). Multivariate Analysemethoden, Springer.

Schlittgen, R. (2008). Einführung in die Statistik, Oldenbourg.

Backhaus, Erichsen, Plinke, Weiber (2010). Multivariate Analysemethoden, Springer.

Büning, Trenkler (1994). Nichtparametrische Statistische Methoden, DeGruyter Berlin.

Bortz, J. (1999). Statistik für Sozialwissenschaftler, Springer.

Statistik-Software

SAS	-	sehr umfangreich, universell
	-	weit verbreitet
SPSS	-	umfangreich
	-	Anwendung vor allem in Biowiss., Medizin, Sozialwiss.
SYSTAT	-	ähnlich wie SPSS
	-	sehr gut
S, S^+, **R**	-	funktionale Sprachen
	-	R: frei verfügbar

STATA, STATGRAPHICS, XPLORE, MATHEMATICA, MATLAB ..

	SAS	R	R (2020) (?)
Umfang	+	+	
Verfügbarkeit	+	++	
Preis	(-)	++	
Validierung	+	-	+
Dokumentation	+	-	+
Große Datensätze	+	-	+
User Community	+	+	
Graphik		+	
Kontinuität	+	Kern gut,	Zusatzpakete ?
Haftung	?	?	
Erlernbarkeit	+	+	

Mitschriften nach R. Vonk: KSFE 2010.

Starten und Beenden von SAS

- Starten von SAS
  1. beim Terminal-Server orkan oder tornado einloggen
  2. Start von SAS: Icon anklicken oder *Programme > Mathematik > SAS > SAS 9.4 (English)*
- Starten von SAS von außerhalb: hier ist die Anleitung https://www2.informatik.hu-berlin.de/~tmstern/werkzeuge/ts-zugang/ Anleitung-ZugangTS.pdf
- Beenden der Sitzung *Datei beenden > Logoff*

Allgemeine Struktur von SAS (1)

SAS-Fenster

- Nach dem Starten erscheinen 3 Fenster

  - Log-Fenster
  - Editor-Fenster
  - Output-Fenster (verdeckt)
- weitere Fenster:
  - Results: Ergebnisse aus der Sitzung
  - Grafik-Fenster (gegebenfalls)
  - Hilfen

Allgemeine Struktur von SAS (2)

Hilfen

- help > SAS Help and Documentation
- SAS Products
- BASE SAS

  > SAS Language Concepts

  > Data Step Concepts

  > SAS STAT

  > SAS STAT User's Guide

Allgemeine Struktur eines SAS-Programms

Aufbau einer SAS-Datei

- DATA-Schritte:
  - Erstellen der SAS-Dateien
  - Einlesen, Erstellen, Modifikation der Daten
- PROC-Schritte:
  - Auswertung der Dateien

Daten (1)

Ausgangspunkt sind die Daten, die für die Analyse relevant sind. Die Struktur der Daten hat die folgende allgemeine Form:

Objekte	Merkmale						
	1	2	3	..	j	..	p
1							
2							
3							
..							
i					x_{ij}		
..							
N							

x_{ij}: Wert oder Ausprägung des Merkmals j am Objekt i

Daten (2)

p: Anzahl der Merkmale N: Gesamtanzahl der einbezogenen Objekte (Individuen)

Objekte	Merkmale						
	1	2	3	..	j	..	p
1							
2							
3							
..							
i					x_{ij}		
..							
N							

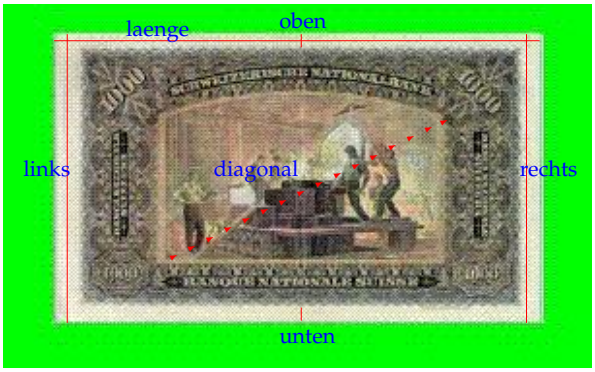
Qualität des Datenmaterials wird im Wesent- lichen durch die Auswahl der Objekte aus einer größeren Grundgesamtheit bestimmt.

Daten, Beispiele

- Objekte: Patienten einer Klinik Merkmale: Alter, Geschlecht, Krankheiten
- Objekte: Bäckereien in einer bestimmten Region Merkmale: Anzahl der Beschäftigten, Geräteausstattung, Umsatz, Produktpalette
- Objekte: Banknoten Merkmale: Längenparameter

Ein 1000-Franken Schein

1



Daten (4), Datenmatrix

- Zeilen: Individuen, Objekte, Beobachtungen
- Spalten: Merkmalsausprägungen, -werte,-realisierungen

Banknote	Merkmale						
	laenge	oben	unten	..	j	..	gr
1							
2							
3							
..							
i					x_{ij}		
..							
N							

Daten (5), Merkmale

- Definition: **Merkmale** sind Zufallsvariablen, die für jedes Individuum (Objekt) eine bestimmte Realisierung (Merkmalsausprägung) haben.
- Stetige Merkmale: laenge, oben
- Diskrete Merkmale: gr (Gruppe)

Banknote	Merkmale						
	laenge	oben	unten	..	j	..	gr
1							
2							
..							

2 Dateneingabe und Transformation

2.1 Allgemeine Syntax

DATA <dateiname <(dateioptionen)»;

...

RUN;

<... > kennzeichnet optionale Parameter

Externes File

INFILE ' ... ' ; INPUT ... ;

SAS-System-File

SET SAS-dateiname;

Tastatur

INPUT ... ; CARDS; Datenmatrix ;

+ zusätzliche Anweisungen Programmbeispiele: Eingabe... .sas

2.2 Eingabe über die Tastatur

Eingabe über die Tastatur

DATA Eingabe1; INPUT a $ x y z; s = x + y + z; CARDS; b 1 2 3 c 4 5 6 d 7 8 9 ; **RUN**; /* Erläuterung dazu: siehe Datei Eingabe.sas. */ **PROC PRINT**; **RUN**; Mit PROC PRINT wird die gesamte erzeugte Datei ausgedruckt ins Output-Fenster.

Aktivierung des Programms

- klicken auf MännchenLogoGrafik oder
- klicken auf 'run' → 'submit' oder
- F3-Taste oder F8-Taste

Die Datei Eingabe1 hat

3 Beobachtungen (Individuen, Wertesätze) 5 Merkmale (Variablen) a, x, y, z und s.

Dateneingabe und Transformation

Wo werden die Daten abgelegt?

	Bibliothek	Dateiname
DATA Eingabe1;	WORK	Eingabe1
DATA sasuser.Eing1;	SASUSER	Eing1
DATA MyBib.Eing1;	MyBib	Eing1
DATA;	WORK	DATA1
		DATA2 ...

Dateien, die sich im Arbeitsverzeichnis WORK befinden,
werden am Ende der Sitzung gelöscht.

Eigene Bibliotheken erstellen

LIBNAME MyBib Pfadname

Dateneingabe und Transformation

Automatisch generierte Variablen

*_N_*
gibt die aktuelle Beobachtungsnummer an.

*_ERROR_*

- Nichtzulässige mathematische Operationen führen zu *_ERROR_* = 1 und das Ergebnis wird auf "." (missing value) gesetzt. (vgl. Beispiel Eingabe2)
- Schlimmere Fehler führen zu höherem *_ERROR_*-Wert.

2.3 Transformationen

Transformationen immer nach der INPUT-Anweisung angeben!

IF THEN ELSE und logische Operationen
vgl. Programm Eingabe2

Funktionen
vgl. Programm Eingabe3

Arithmetische Operationen
+,-,*,/,**

IF(log. Ausdruck)
Es werden nur die Wertesätze eingelesen, die die logische Bedingung erfüllen.

Dateneingabe und Transformation
IF THEN ELSE
jeweils nur eine Anweisung ausführen
IF (log. Ausdruck) THEN Anweisung; ELSE Anweisung;

jeweils mehrere Anweisungen ausführen

- IF (log. Ausdruck) THEN Anweisung; ELSE DO Anweisung1; Anweisung2; ... END;
- IF (log. Ausdruck) THEN DO Anweisung1; ... END; ELSE DO Anweisung1; Anweisung2; ... END;

2.4 Eingabe durch externes File

DATA Eingabe4;	**DATA** Eingabe4url;
INFILE 'Pfadname';	FILENAME fname URL 'http:// ...';
INPUT Variablen;	INFILE fname;
evtl. Transformationen;	INPUT Variablen;
RUN;	**RUN**;

- Diese Eingabe ist formatfrei, d.h. die Variablen sind im Rohdatenfile durch Leerzeichen getrennt.
- Sind die Eingabedaten durch ein anderes Zeichen, z.B. ';', getrennt, dann ist in der INFILE-Anweisung die Option DELIMITER=';' (oder DLM=';') anzugeben.

  Tabulatorzeichen: `DLM='09'X;`
- Bedingungen: fehlende Werte: . (Punkt) alphanumerische Zeichenketten dürfen keine Leerzeichen enthalten.
- Die INPUT-Anweisung kann auch abgekürzt werden, z.B. INPUT V1-V7;

Eingabe durch externes File (EXCEL)
PROC IMPORT datafile="... .xls" dbms=excel out=Dateiname; /*SAS-Datei*/ getnames=no; /*Variablennamen werden nicht übernommen*/ sheet=spreadsheetname; **RUN**;

2.5 Wichtige Varianten der INPUT-Anweisung

- bisher: formatfrei INPUT a $ b $ c d;
- formatiert-spaltenorientiert INPUT a $ 1-10 b $ 11 c 13-14 .1;
- formatiert-über die Zeichenlänge INPUT a $10. b $ 1. c 2. d 5.1;

Eingabeformate	w.	2.	standard numerisch
	w.d	2.1	standard numerisch mit Dezimalstelle
	$w.	$10	Zeichenlänge

Nachgestelltes $-Zeichen steht für Zeichenketten.
Eingabe5.sas Eingabe6.sas (komplexere Formate)

Weitere Formatierungselemente

Spaltenzeiger

@n: Zeige auf Spalte n (z.B. @12)
+n: Setze den Zeiger n Positionen weiter

Zeilenzeiger

n: Zeige auf Spalte 1 der n-ten Zeile

Zeilenhalter

@ (nachgestellt)	Datenzeile wird von mehreren INPUT-Anweisungen gelesen
@@ (nachgestellt)	Aus einer Eingabezeile werden mehrere Beobachtungen gelesen

2.6 Ein- u. Ausgabe von SAS-Files

Abspeichern einer permanenten SAS-Datei

DATA sasuser.banknote; /* Eine Datei mit dem Namen 'banknote' wird im SAS-internen Verzeichnis 'sasuser' gespeichert */ <INFILE ' Pfadname der einzulesenden Datei;> INPUT Formatangaben; <CARDS; Daten (zeilenweise); > **RUN**;

Einlesen einer SAS-Datei

DATA banknote1; SET sasuser.banknote < (Optionen)>; **RUN**;

Ein- u. Ausgabe von SAS- Files

Einige Optionen

DROP = Varname(n);	Weglassen von Variablen
KEEP = Varname(n);	nur diese Variablen werden verwendet
FIRSTOBS=integer;	1. zu verarbeitender Wertesatz
OBS = integer;	letzter zu verarbeitender Wertesatz

RENAME = (alter Varname = neuer Varname);

Ausgabe

Formatierte Ausgabe

DATA; Pi=3.141592; FORMAT Pi 5.3; OUTPUT; STOP; **RUN**;

Standard: 8 Zeichen.

Längere Variablennamen

vor die INPUT-Anweisung:

LENGTH Var.name $länge;

z.B. LENGTH Maxlength $12;

2.7 Zusammenfügen von Files

Files 'untereinander'

SASfile_1 ... SASfile_n

DATA; /* `Eingabe_Banknote13.sas` */ SET SASfile_1 <(options)>... SASfile_n<(options)>; **RUN**;

Files 'nebeneinander'

SASfile_1 ... SASfile_n

DATA; /* `Eingabe_Banknote34.sas` */ SET SASfile_1; SET SASfile_2; ... SET SASfile_n; **RUN**;

Sortieren und Zusammenfügen von Dateien

Sortieren von Dateien

PROC SORT DATA=SASfile; BY nr; **RUN**; nr gibt das Merkmal an, nach dem sortiert werden soll.

Zusammenfügen von Dateien

MERGE SASfile_1 SASfile_2; BY nr; **RUN**; *Die Dateien müssen nach dem Merkmal nr sortiert sein!* Wie bei SET sind auch hier Optionen möglich.

Eingabe_Merge.sas

2.8 Output-Anweisung

- dient der Ausgabe von Dateien
- es können mehrere Dateien gleichzeitig ausgegeben werden
- die Namen der auszugebenden Dateien erscheinen im DATA-Step.

Eingabe12.sas

2.9 DO-Schleifen im DATA-Step

Allgemeine Syntax

- DO Indexvariable = Anfangswert <TO Endwert> <BY Schrittweite>; END;
- DO WHILE (Ausdruck) | UNTIL (Ausdruck);

Eingabe13.sas

Eingabe14.sas

Eingabe15.sas

3 Wahrscheinlichkeitsrechnung

3.1 Grundgesamtheit, Population

Eine Grundgesamtheit (oder Population)
ist eine Menge von Objekten, die gewissen Kriterien genügen. Die einzelnen Objekte heißen Individuen.

Beispiele

- Menge aller Haushalte
- Menge aller Studenten
- Menge aller Studenten der HUB
- Menge aller Einwohner von GB
- Menge aller Heroin-Abhängigen
- Menge aller Bewohner Tibets
- Menge aller verschiedenen Computer
- Menge aller Schweizer Franken
- Menge aller Wettkämpfer

Die gesamte Population zu erfassen und zu untersuchen ist meist zu aufwendig, deshalb beschränkt man sich auf zufällige Stichproben.

Zufällige Stichprobe
Eine zufällige Stichprobe ist eine zufällige Teilmenge der Grundgesamtheit, wobei jede Stichprobe gleichen Umfangs gleichwahrscheinlich ist.
(oder: bei der jedes Element mit 'der gleichen Wahrscheinlichkeit' ausgewählt wird).

Bemerkung: Ein (auszuwertender) Datensatz ist (i.d.R.) eine Stichprobe.

Klassifikation von Merkmalen

Nominale Merkmale
Die Ausprägungen sind lediglich Bezeichnungen für Zustände oder Sachverhalte. Sie können auch durch Zahlen kodiert sein!

Beispiele
Familienstand, Nationalität, Beruf

Dichotome Merkmale
Hat das (nominale) Merkmal nur 2 Ausprägungen, so heißt es auch binär oder dichotom.
gut - schlecht männlich - weiblich wahr - falsch

Ordinale Merkmale (Rangskala)
Die Menge der Merkmalsausprägungen besitzt eine Rangordnung!

Beispiele

- Rangzahlen einer Rangliste (z.B. beim Sport)
- Härtegrade
- Schulzensuren

Metrische Merkmale (kardinale/quantitative M.)
Werte können auf der Zahlengeraden aufgetragen werden (metrische Skala)

Beispiele
Messwerte, Längen, Größen, Gewichte, Alter

Metrische Merkmale werden unterschieden nach:

Diskrete Merkmale
nehmen höchstens abzählbar viele Werte an.

Beispiele
Alter, Länge einer Warteschlange

Stetige Merkmale
können Werte in jedem Punkt eines Intervalls annehmen, z.B. $x \in [a, b]$, $x \in (-\infty, \infty)$.

Metrische Merkmale sind immer auch ordinal.

Der Stichprobenraum Ω eines zufälligen Experiments
ist die Menge aller möglichen Versuchsausgänge Die Elemente ω des Stichprobenraums Ω heißen Elementarereignisse.

Beispiele

- Münzwurf $\Omega = \{Z, B\}$
- Würfel $\Omega = \{1, ..., 6\}$
- Qualitätskontrolle $\Omega = \{$gut, schlecht$\}$
- Lebensdauer einer Glühlampe $\Omega = [0, \infty)$
- 100m - Zeit $\Omega =$[9.81, 20)
- Blutdruck, Herzfrequenz
- Länge einer Warteschlange $\Omega = \{0, 1, 2, ...\}$
- Anzahl der radioaktiven Teilchen beim Zerfall
- Wasserstand eines Flusses $\Omega = [0, \ldots)$

Ein Ereignis ist eine Teilmenge $A, A \subseteq \Omega$

Beispiele
Lebensdauer ≤ 10 min. Augensumme gerade. Warteschlange hat Länge von ≤ 10 Personen.

Realisierungen sind die Ergebnisse des Experiments

(die realisierten Elemente von Ω)

Verknüpfungen von Ereignissen werden durch entsprechende Mengenverknüpfungen beschrieben

$A \cup B$ A oder B tritt ein

$A \cap B$ A und B tritt ein

$\overline{A} = \Omega \setminus A$ A tritt nicht ein.

Forderung (damit die Verknüpfungen auch immer ausgeführt werden können): Die Ereignisse liegen in einem Ereignisfeld (σ-Algebra) $\mathfrak{E}$.

Ereignisfeld

Das Mengensystem $\mathfrak{E} \subseteq \mathfrak{P}(\Omega)$ heißt Ereignisfeld, falls gilt: 1. $\Omega \in \mathfrak{E}$ 2. $A \in \mathfrak{E} \Longrightarrow \overline{A} \in \mathfrak{E}$ 3. $A_i \in \mathfrak{E}, i = 1, 2, \ldots \Longrightarrow \bigcup_{i=1}^{\infty} A_i \in \mathfrak{E}$.

3.2 Wahrscheinlichkeit

Das Axiomsystem von Kolmogorov

Sei $\mathfrak{E}$ ein Ereignisfeld. Die Abbildung

$$P : \mathfrak{E} \longrightarrow \mathbb{R}$$

heißt Wahrscheinlichkeit, falls sie folgende Eigenschaften hat:

1. Für alle $A \in \mathfrak{E}$ gilt: $0 \leq P(A) \leq 1$.

2. $P(\Omega) = 1$.

3. Sei A_i eine Folge von Ereignissen, $A_i \in \mathfrak{E}$,

$$P(\bigcup_{i=1}^{\infty} A_i) = \sum_{i=1}^{\infty} P(A_i),$$

$$\text{falls} \quad A_i \cap A_j = \emptyset \quad \forall i, i \neq j$$

Wahrscheinlichkeit

Eigenschaften (1)

$P(\overline{A}) = 1 - P(A)$**.**

Beweis:

$$\begin{aligned} 1 &= P(\Omega) \qquad \text{Axiom 2} \\ &= P(A \cup \overline{A}) \\ &= P(A) + P(\overline{A}) \quad \text{Axiom 3} \end{aligned}$$

Wahrscheinlichkeit

Eigenschaften (2)

$P(A \cup B) = P(A) + P(B) - P(A \cap B)$**.**

Beweis:

$$\begin{aligned} P(A \cup B) &= P((A \cap B) \cup (A \cap \overline{B}) \cup (B \cap \overline{A})) \\ &= \underbrace{P(A \cap B) + P(A \cap \overline{B})}_{=P(A)} + P(B \cap \overline{A}) \quad \text{Axiom 3} \\ &= P(A) + \underbrace{P(B \cap \overline{A}) + P(A \cap B)}_{=P(B)} - P(A \cap B) \\ &= P(A) + P(B) - P(A \cap B) \end{aligned}$$

3.3 Zufallsvariablen

Eine (messbare) Abbildung heißt Zufallsvariable.

$$\begin{aligned} X: \quad \Omega &\longrightarrow \mathbb{R} \\ \omega &\longmapsto r \end{aligned}$$

Diskrete Zufallsvariable
Die Zufallsvariable X heißt diskret, wenn X nur endlich viele oder abzählbar unendlich viele Werte x_i annehmen kann. Jeder dieser Werte kann mit einer gewissen Wkt. $p_i = P(X = x_i)$ auftreten. $(p_i > 0)$

Beispiele

- geografische Lage (N,O,S,W)
- Länge einer Warteschlange
- Anzahl der erreichten Punkte in der Klausur.

Stetige Zufallsvariable
Die Zufallsvariable X heißt stetig, falls X beliebige Werte in einem Intervall $(a, b), [a, b]$, $(a, b], (a, b]$, $(-\infty, a), (b, \infty)$, $(-\infty, a], [b, \infty)$, $(-\infty, \infty)$ annehmen kann.

Beispiele

- Wassergehalt von Butter
- Messgrößen (z.B. bei der Banknote)
- Lebensdauer von Kühlschränken

Verteilungsfunktion
Diskrete Zufallsvariable

$$F_X(x) := P(X \leq x) = \sum_{i:x_i \leq x} p_i = \sum_{i=0}^{x} p_i$$

heißt Verteilungsfunktion der diskreten zufälligen Variable X
Manchmal wird die Verteilungsfunktion auch durch $P(X < x)$ definiert.

Stetige Zufallsvariable
Die Zufallsvariable X wird mit Hilfe der sogen. Dichtefunktion f beschrieben,

$$F_X(x) = P(X \leq x) = \int_{-\infty}^{x} f(t)\, dt$$

Quantilfunktion

Bei einer stetigen Zufallsvariable ist die Verteilungsfunktion streng monoton wachsend.

Quantilfunktion

Sei die Zufallsvariable X stetig. Die inverse Verteilungsfunktion $F^{-1}(u), u \in (0,1)$, heißt Quantilfunktion.

Die Quantilfunktion wird bei uns vor allem für die Erzeugung von Zufallszahlen und bei der Bestimmung von kritischen Werten beim Testen benötigt.

3.4 Diskrete Zufallsvariablen

$$X \in \{x_1, x_2, x_3, \ldots\}$$

$$X : \begin{pmatrix} x_1 & x_2 & x_3 & \cdots x_n & \cdots \\ p_1 & p_2 & p_3 & \cdots p_n & \cdots \end{pmatrix}$$

$$p_i = P(X = x_i) > 0, \quad i = 1, 2, 3, \ldots$$

$$\sum_{i=1}^{\infty} p_i = 1$$

Zweimaliges Werfen einer Münze

$\Omega = \{ZZ, ZB, BZ, BB\}, \quad X :=$ Anzahl von Blatt

$$X : \begin{pmatrix} 0 & 1 & 2 \\ \frac{1}{4} & \frac{1}{2} & \frac{1}{4} \end{pmatrix}$$

Erfolge bei n Versuchen

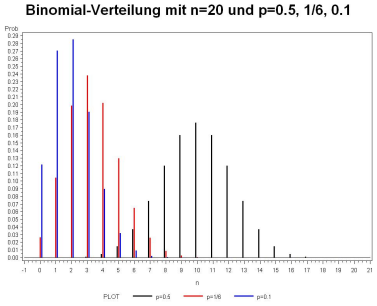
X: Anzahl der "Erfolge" bei n Versuchen, wobei jeder der n Versuche eine Erfolgswahrscheinlichkeit p hat.

$$P(X = k) = \binom{n}{k} p^k (1-p)^{n-k} \quad \text{Binomialwahrscheinlichkeit}$$

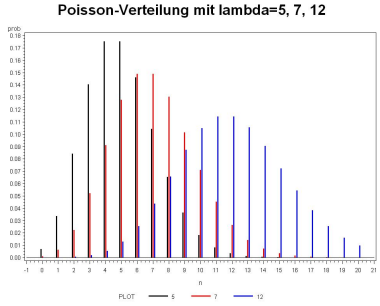
$$F_X(k) = P(X \le k) = \sum_{i=0}^{k} \binom{n}{i} p^i (1-p)^{n-i} \quad \text{Verteilungsfunktion}$$

Wahrscheinlichkeitsfunktionen

Binomial



Poisson



Würfeln 20 mal. Wkt. für mindestens 4 Sechsen?

X: Anzahl der Sechsen.

$$P(X \ge 4) = 1 - P(X \le 3) = 1 - F_X(3) = 1 - \sum_{i=0}^{3} P(X = i)$$

$$= 1 - \left(\frac{5}{6}\right)^{20} - 20\left(\frac{1}{6}\right)\left(\frac{5}{6}\right)^{19} - \frac{20 \cdot 19}{2}\left(\frac{1}{6}\right)^2\left(\frac{5}{6}\right)^{18} -$$

$$- \frac{20 \cdot 19 \cdot 18}{6}\left(\frac{1}{6}\right)^3\left(\frac{5}{6}\right)^{17}$$

= 1 - CDF('Binomial',3,1/6,20) = SDF('Binomial',3,1/6,20) ≈ 0.43.

Poisson (1)

X: Anzahl der Anrufe pro Zeiteinheit

$$X : \begin{pmatrix} 0 & 1 & 2 & 3 & \cdots \\ p_0 & p_1 & p_2 & p_3 & \cdots \end{pmatrix}$$

$$p_i = \frac{\lambda^i}{i!} e^{-\lambda}, \quad \lambda > 0$$

$$\sum_{i=0}^{\infty} p_i = \underbrace{\sum_{i=0}^{\infty} \frac{\lambda^i}{i!}}_{e^\lambda} e^{-\lambda} = 1.$$

Bez.: $X \sim Poi(\lambda)$, wobei λ ein noch unbestimmter Parameter ist. Er kann als mittlere Rate aufgefasst werden.

Poisson (2), Motivation

Sei $\{N_t\}_{t \in T}$ eine Menge von Zufallsvariablen (ein stochastischer Prozess) mit den Eigenschaften:

V1: Zuwächse sind unabhängig, dh. die Zufallsvariablen

$N_{t+h} - N_t$ und $N_t - N_{t-h}$ sind unabhängig

V2: es ist egal wo wir das Zeitintervall betrachten, dh.

$N_{t+h} - N_t$ und $N_t - N_{t-h}$ haben dieselbe Verteilung

V3: Wahrscheinlichkeit, dass mindestens ein Ereignis in der Zeit h

eintritt, z.B. ein Kunde ankommt.

$p(h) = a \cdot h + o(h), \quad a > 0, h \to 0$

V4: Wahrscheinlichkeit für $k \geq 2$ Ereignisse in der Zeit h: $o(h)$

Poisson (3)

Frage: Wahrscheinlichkeit, dass bis zum Zeitpunkt t genau i Ereignisse? (eingetroffene Kunden, zerfallene Teilchen) eintreten?

$$P_k(t) := P(N_t = k), \qquad P_k(t) = 0 \quad \text{für} \quad k < 0$$

$$P_k(t) = \frac{a^k t^k}{k!} e^{-at}, \qquad k \geq 0$$

Poisson-Verteilung mit Parameter $\lambda = at$.

Beweis: Stochastik-Vorlesung.

Poisson (4)

Binomial und Poisson

Seien $X_n \sim Bi(p, n)$ $\quad$ $Y \sim Poi(\lambda)$ Für $n \cdot p = \lambda$ gilt: $\quad$ $P(X_n = k) \longrightarrow_{n \to \infty} P(Y = k)$.

Beweis:

$$\begin{aligned} P(X_n = k) &= \binom{n}{k} p^k (1-p)^{n-k} \\ &= \frac{n(n-1)\cdots(n-k+1)}{k!} (\frac{\lambda}{n})^k (1 - \frac{\lambda}{n})^{n-k} \\ &= \frac{1}{k!} \underbrace{\frac{n(n-1)\cdots(n-k+1)}{(n-\lambda)^k}}_{\to 1} \lambda^k \underbrace{(1 - \frac{\lambda}{n})^n}_{\to e^{-\lambda}} \\ &\longrightarrow \frac{\lambda^k}{k!} e^{-\lambda} \end{aligned}$$

Geometrische Verteilung

Münzwurf solange bis B(Blatt) kommt

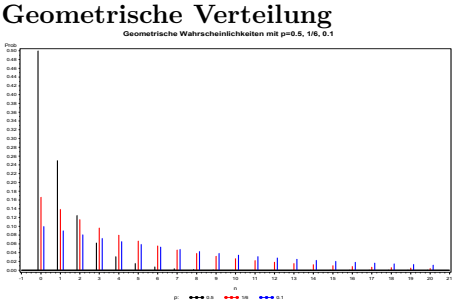
$\Omega = \{\text{B, ZB, ZZB, ...}\}$ $X :=$ Anzahl der Fehl-Würfe (Misserfolge) vor dem ersten Blatt.

$$X = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 2 & 3 & 4 & \cdots & n & \cdots \\ 1/2 & (1/2)^2 & (1/2)^3 & (1/2)^4 & (1/2)^5 & \cdots & (1/2)^{n+1} & \cdots \end{pmatrix}$$

$$\sum_{i=0}^{\infty} p_i = \sum_{i=1}^{\infty} (1/2)^i = \frac{1}{1-\frac{1}{2}} - 1 = 1 \qquad \text{geometrische Reihe}$$

geometrische Verteilung mit p=1/2, $p_i = (1/2)^i$. allgemeiner: $P(X = i) = p_i = p(1-p)^i$.

Geometrische Verteilung



Qualitätskontrolle

Warenlieferung mit N Stücken, davon genau n schlecht. Frage: Wkt., in einer Stichprobe vom Umfang m sind genau k Stück schlecht?

X: Anzahl der schlechten Stücke in der Stichprobe.

$$P(X = k) = \frac{\binom{n}{k} \cdot \binom{N-n}{m-k}}{\binom{N}{m}}$$

	schlecht	gut	total
Stichprobe	k		m
Rest			$N-m$
total	n	$N-n$	N

$\binom{N}{m}$: # möglichen Stichproben

$\binom{n}{k}$: # Möglichkeiten, aus n schlechten Stücken in der Population genau k schlechte Stücke zu ziehen

$\binom{N-n}{m-k}$: # Möglichkeiten, aus $N-n$ guten Stücken in der Population genau $m-k$ gute Stücke zu ziehen.

Hypergeometrische Verteilung (2)

Offenbar: $0 \le x \le \min(n, m), \quad m - x \le N - n.$

Eine Zufallsvariable mit der Verteilungsfunktion

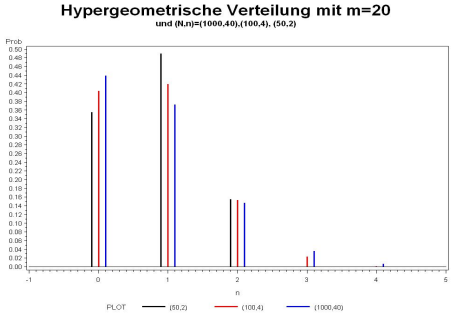
$$F(k|H_{N,n,m}) = \sum_{x=0}^{k} \frac{\binom{n}{x} \cdot \binom{N-n}{m-x}}{\binom{N}{m}}$$

heißt hypergeometrisch verteilt.

Bemerkung: Für $N \to \infty$, $n \to \infty$, $\frac{n}{N} \to p$ gilt:

$$f(x|H_{N,n,m}) \to \binom{m}{x} p^x (1-p)^{m-x} = f(x|Bi(m,p))$$

Hypergeometrische Verteilung



Multinomialverteilung

Wir betrachten ein zufälliges Experiment mit den Ausgängen $A_1, A_2, \ldots, A_l$. Wir setzen $p_i = P(A_i)$, $\sum_{i=1}^{l} p_i = 1$.

Es sei ein Behälter mit k Kugeln in l verschiedenen Farben gegeben, wobei k_i Kugeln die Farbe i ($i = 1, \ldots, l$) besitzen, $\sum_{i=1}^{l} k_i = k$. Wahrscheinlichkeit, mit der eine Kugel einer bestimmten Farbe aus dem Behälter entnommen wird:

$$P(\text{Kugel der Farbe } i) = p_i = \frac{k_i}{k}.$$

Multinomiale Wahrscheinlichkeiten (2)

Das Experiment soll nun n–mal wiederholt werden.

$B_{n_1,n_2,\ldots,n_l}$: das Ereignis, daß die Ereignisse A_1 n_1–mal, A_2 n_2–mal, ..., und A_l n_l–mal eintreten.

$$P(B_{n_1,n_2,\ldots,n_l}) = \frac{n!}{n_1! \cdot n_2! \cdot \ldots \cdot n_l!} \cdot p_1^{n_1} \cdot p_2^{n_2} \cdot \ldots \cdot p_l^{n_l}.$$

Derartige Wahrscheinlichkeiten bezeichnen wir auch als multinomiale Wahrscheinlichkeiten (polynomiale Wktn.)

Potenzen von Summen

Vergleichen Sie:

$$(a_1 + \ldots + a_l)^n = \sum \frac{n!}{n_1! \cdots n_l!} a_1^{n_1} \cdots a_l^{n_l}$$

wobei die Summe über alle Tupel $(n_1, \ldots, n_l)$ gebildet wird mit $\sum_{i=1}^{l} n_i = n$.

Multinomiale Wahrscheinlichkeiten (3)

Fragebogen

Bei einem Fragebogen wird (u.a.) nach dem Alter der befragten Personen gefragt. Das Alter sei in Klassen eingeteilt, 10-20, 21-40, 41-60, über 60 Jahre. Der Bevölkerungsanteil beträgt jeweils p_i für die i-te Altersklasse, $i = 1, \ldots, 4$, $\sum_i p_i = 1$.

Es werden n=1000 Personen befragt.

SAS-Anweisungen

$X \sim Bi(p, n)$	CDF('Binomial',m,p,n)	PDF('Binomial',m,p,n)
$X \sim Poi(\lambda)$	CDF('Poisson',m,λ)	PDF('Poisson',m,λ)
$X \sim Geo(p)$	CDF('Geometric',m-1,p)	PDF('Geometric',m-1,p)
$X \sim H(N, n, m)$	CDF('Hyper',k,N,n,m)	PDF('Hyper',k,N,n,m)

Bem.: Bei SAS weicht bei der geometrischen Verteilung die Parametrisierung von der üblichen Definition ab.

Descr_Binomial_neu.sas Descr_Poisson.sas

Descr_Geometr2015.sas Descr_Hypergeom.sas

In den Wahrscheinlichkeiten können Parameter auftreten, die in der Regel unbekannt sind.

Die Parameter sind anhand der Beobachtungen (der Daten) zu bestimmen/zu schätzen! $\longrightarrow$ Aufgabe der Statistik

3.5 Stetige Zufallsvariablen

Sei X stetig auf (a,b), wobei a, b unendlich sein können, $a \leq x_0 < x_1 \leq b$ $P(X = x_0) = 0$, $P(x_0 < X < x_1) > 0$ (wenn $f > 0$).

Die Funktion f heißt Dichtefunktion (von X) falls:

1. $f(x) \geq 0$, $a < x < b$. 2. $\int_a^b f(x)\,dx = 1$.

Die stetige Zufallsvariable X wird also durch seine Dichtefunktion beschrieben.

$$P(c < X < d) = \int_c^d f(x)\,dx.$$

Die Dichtefunktion hängt i.A. von unbekannten Parametern ab, die geschätzt werden müssen.

Beispiele

Gleich- und Exponentialverteilung

Gleichverteilung auf [a,b], $X \sim R(a,b)$**,** $a < b$

$$f(x) = \begin{cases} \frac{1}{b-a} & \text{falls } a \leq x \leq b\ , \\ 0 & \text{sonst.} \end{cases}$$

- Referenzverteilung - Zufallszahlen

Exponentialverteilung, $X \sim Exp(\lambda)$**,** $(\lambda > 0)$

$$f(x) = \begin{cases} \frac{1}{\lambda} e^{-\frac{x}{\lambda}} & \text{falls } x \geq 0, \\ 0 & \text{sonst.} \end{cases} \qquad F(x) = \begin{cases} 0 & \text{falls } x \leq 0 \\ 1 - e^{-\frac{x}{\lambda}} & \text{falls } x > 0. \end{cases}$$

- Lebensdauer - Zeitdauer zwischen Ankünften

Beispiele

Exponentialverteilung (2)

Gedächtnislosigkeit

Eine Verteilung P (mit Verteilungsfunktion F) heißt gedächtnislos, wenn für alle $s, t \geq 0$, gilt:

$$P(X \geq s + t | X \geq t) = P(X \geq s).$$

Es gilt (Definition der bedingten Wahrscheinlichkeit)

$$\begin{aligned} P(X \geq s + t | X \geq t) &= \frac{P(\{X \geq s + t\} \cap \{X \geq t\})}{P(X \geq t)} \\ &= \frac{P(X \geq s + t)}{P(X \geq t)}. \end{aligned}$$

Gedächtnislosigkeit

Cauchy-Funtionalgleichung

Eine Verteilung ist also gedächtnislos, gdw.

$$\frac{P(X \geq s+t)}{P(X \geq t)} = P(X \geq s) \quad \text{gdw.} \quad \frac{1-F(s+t)}{1-F(t)} = 1 - F(s).$$

Überlebensfunktion (oder Zuverlässigkeitsfunktion)

$$G(t) = 1 - F(t)$$

Die Verteilungsfunktion F (mit der Überlebensfunktion G) ist also gedächtnislos gdw.

$$G(s+t) = G(s) \cdot G(t) \quad \text{für alle} \quad s, t \geq 0$$

Cauchy-Funktionalgleichung

Eine Lösung

Satz: Die Exponentialverteilung ist gedächtnislos.

Beweis: Die Verteilungsfunktion ist (sei $\lambda' := \frac{1}{\lambda}$)

$$F(t) = P(X < t) = \begin{cases} 1 - e^{-\lambda' t} & \text{falls} \quad t \geq 0 \\ 0 & \text{sonst,} \end{cases}$$

und die Überlebensfunktion

$$G(t) = 1 - F(t) = 1 - (1 - e^{-\lambda' t}) = e^{-\lambda' t}.$$

Folglich erhalten wir

$$G(s+t) = e^{-\lambda'(s+t)} = e^{-\lambda' s} e^{-\lambda' t} = G(s) \cdot G(t).$$

Cauchy-Funktionalgleichung

Die einzige Lösung

Satz:

Sei F eine stetige Verteilungsfunktion mit $F(0) = 0$ und $G(t) = 1 - F(t)$.
Es gelte die Cauchy-Funktionalgleichung

$$G(s+t) = G(s) \cdot G(t) \quad \text{für alle} \quad s, t \geq 0.$$

Dann gilt für alle t, $t > 0$,

$$F(t) = 1 - e^{-\lambda t},$$

wobei $\lambda > 0$. D.h. F ist Exponential-Verteilungsfunktion.

Beweis: Stochastik-Vorlesung.

Beispiele

Normalverteilung (NV)

Dichtefunktion und Verteilungsfunktion

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \cdot e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{(x-\mu)^2}{\sigma^2}\right)} \quad (1)$$

$$F(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \int_{-\infty}^{x} e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{t-\mu}{\sigma}\right)^2} dt \quad (2)$$

$(-\infty < x < \infty), \quad -\infty < \mu < \infty, \sigma^2 > 0.$

Bez.: $X \sim \mathcal{N}(\mu, \sigma^2)$, μ: Lageparameter, σ: Skalenparameter
Normalverteilung: wichtigste Verteilung in der Statistik warum? $\longrightarrow$ später.

SAS-Anweisungen

PDF('Exponential',x,λ)	Dichtefunktion
CDF('Exponential',x,λ)	Verteilungsfunktion
PDF('Normal',x,μ, σ)	Dichtefunktion
CDF('Normal',x,μ, σ)	Verteilungsfunktion
PROBNORM(x,μ, σ)	
Quantile('Normal',u,μ,σ)	Quantilfunktion
PROBIT(u,μ,σ)	

Weitere wichtige Verteilungen

Weibull-Verteilung	CDF('Weibull',x,a,λ)
Gamma-Verteilung	CDF('Gamma',x,a,λ)
χ^2-Verteilung	CDF('Chisq',x,ν, λ)
t-Verteilung	CDF('t',x,ν, δ)
F-Verteilung	CDF('F',x,ν_1, ν_2, δ)

Die drei letzten Verteilungen werden vor allem bei statistischen Tests benötigt (später).

Descr_Weibull Descr_Gamma

Wahrscheinlichkeitsverteilungen in SAS (1)

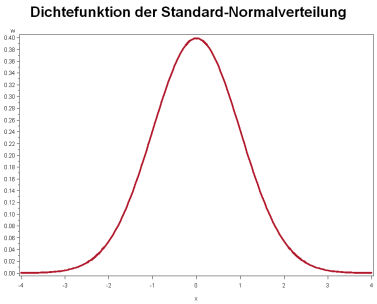
↪ help ↪ SAS Help and Documentation ↪ SAS Products ↪ BASE SAS ↪ SAS Language Dictionary ↪ Dictionary of Language ↪ Functions and Call Routines ↪ CDF ↪ PDF ↪ Quantile

Wahrscheinlichkeitsverteilungen in SAS (2)

CDF('Verteilung',x,Parameterliste)	Verteilungsfunktion
PDF('Verteilung',x,Parameterliste)	Dichtefunktion
	(Wahrscheinlichkeitsfunktion)
SDF ('Verteilung',x,Parameterliste)	= 1-CDF
Überlebensfunktion	$(1 - F(x))$
Quantile('Verteilung',u,Parameterliste)	Quantilfunktion

Verteilung: in der obigen Liste nachsehen (s. letzte Folie)

3.6 Normalverteilung



$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \cdot e^{-\frac{1}{2}(\frac{(x-\mu)^2}{\sigma^2})}$$ Gauß

$X \sim \mathcal{N}(\mu, \sigma^2)$

Eine Zufallsvariable mit dieser Dichte $f(x)$ heißt normalverteilt mit Parametern μ und σ^2.

Normalverteilung (2)

Satz: f auf der letzten Folie ist Dichte.

Beweis: 1. $f(x) \geq 0 \ \forall x \in \mathbf{R}$ und $\sigma > 0$.

2. bleibt z.z.

$$\lim_{x\to\infty} F(x) = \int_{-\infty}^{\infty} f(t)\,dt = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{t-\mu}{\sigma}\right)^2}\,dt = 1.$$

Wir bezeichnen

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{x-\mu}{\sigma}\right)^2}\,dx =: I.$$

Normalverteilung (3)

Wir betrachten zunächst:

$$\begin{aligned} I^2 &= \left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{x-\mu}{\sigma}\right)^2} dx \right)^2 \\ &= \frac{1}{2\pi\sigma^2} \left(\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{x-\mu}{\sigma}\right)^2} dx \right) \left(\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{y-\mu}{\sigma}\right)^2} dy \right) \\ &= \frac{1}{2\pi\sigma^2} \int_{-\infty}^{+\infty} \left(\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{x-\mu}{\sigma}\right)^2} dx \right) e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{y-\mu}{\sigma}\right)^2} dy \\ &= \frac{1}{2\pi\sigma^2} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{x-\mu}{\sigma}\right)^2} e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{y-\mu}{\sigma}\right)^2} dx\, dy \end{aligned}$$

Normalverteilung (4)

Substitution:

$$\begin{aligned} s &:= \frac{x-\mu}{\sigma} \qquad & t &:= \frac{y-\mu}{\sigma}. \\ dx &= \sigma\, ds & dy &= \sigma\, dt. \end{aligned}$$

Wir erhalten damit:

$$\begin{aligned} I^2 &= \frac{1}{2\pi\sigma^2} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{1}{2}s^2} e^{-\frac{1}{2}t^2} \sigma^2\, ds\, dt \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{1}{2}(s^2+t^2)}\, ds\, dt \end{aligned}$$

Weitere Substitution (Polarkoordinaten):

$$s = r\cos\varphi \qquad t = r\sin\varphi.$$

Dann gilt allgemein nach der Substitutionsregel:

$$\int\int g(s,t)\, ds\, dt = \int\int g(r,\varphi) \det J\, dr\, d\varphi,$$

wobei hier:

$$\begin{aligned} \det J = |J| &= \begin{vmatrix} \frac{\partial s}{\partial r} & \frac{\partial s}{\partial \varphi} \\ \frac{\partial t}{\partial r} & \frac{\partial t}{\partial \varphi} \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} \cos\varphi & -r\sin\varphi \\ \sin\varphi & r\cos\varphi \end{vmatrix} \\ &= r\cos^2\varphi + r\sin^2\varphi \\ &= r(\cos^2\varphi + \sin^2\varphi) = r \end{aligned}$$

Normalverteilung (6)

$$
\begin{aligned}
I^2 &= \frac{1}{2\pi}\int_0^{2\pi}\int_0^{\infty} e^{-\frac{1}{2}(r^2\cos^2\varphi + r^2\sin^2\varphi)} r\,dr\,d\varphi \\
&= \frac{1}{2\pi}\int_0^{2\pi}\int_0^{\infty} e^{-\frac{1}{2}r^2} r\,dr\,d\varphi \\
&= \frac{1}{2\pi}\int_0^{2\pi}\left[-e^{-\frac{r^2}{2}}\right]_0^{\infty} d\varphi \\
&= \frac{1}{2\pi}\int_0^{2\pi} d\varphi = \frac{1}{2\pi}2\pi = 1
\end{aligned}
$$

Normalverteilung

Standard-Normalverteilung

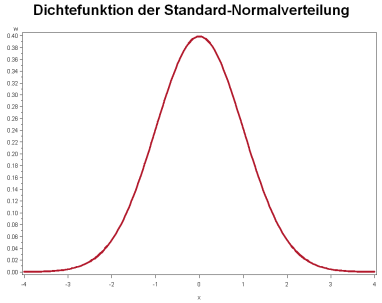
$\mu = 0, \quad \sigma^2 = 1$

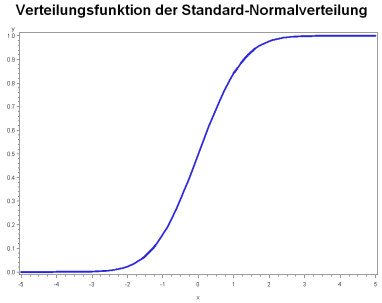
$$
\begin{aligned}
\varphi(x) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \cdot e^{-x^2/2} \qquad \text{Dichte} \\
\Phi(x) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{x} e^{-t^2/2}\,dt \quad \text{Verteilungsfunktion}
\end{aligned}
$$

$\varphi(x), \Phi(x)$ sind tabelliert.

Es geht auch einfacher mit CDF und PDF.

Standardnormalverteilung (1)





$$
\begin{aligned}
\varphi(x) &= \varphi(-x) \qquad \Phi(x) = 1 - \Phi(-x) \\
P(a < X < b) &= \Phi(b) - \Phi(a)
\end{aligned}
$$

Descr_normal.sas

Standardnormalverteilung (2)

Frage: Für welches x gilt: $\Phi(x) = \alpha$?

$x = \Phi^{-1}(\alpha)$ α-Quantil. $\Phi^{-1}(\alpha)$ als Funktion: Quantilfunktion

SAS: QUANTILE('normal',α,0,1)

Normalverteilung

Beziehung zur Standard-Normalverteilung

Sei $X \sim \mathcal{N}(0,1)$**. Dann** $P(a < X < b) = \Phi(b) - \Phi(a)$**.**

Satz. Es gilt:

$$\begin{aligned} X \sim \mathcal{N}(0,1) &\iff \sigma X + \mu \sim \mathcal{N}(\mu, \sigma^2) \\ X \sim \mathcal{N}(\mu, \sigma^2) &\iff \alpha X + \beta \sim \mathcal{N}(\alpha\mu + \beta, \alpha^2\sigma^2) \\ X \sim \mathcal{N}(\mu, \sigma^2) &\iff \frac{X-\mu}{\sigma} \sim \mathcal{N}(0,1) \end{aligned}$$

Beweis: Wir zeigen nur 1. ($\rightarrow$). Sei $X \sim \mathcal{N}(0,1)$.

$$\begin{aligned} P(\sigma X + \mu \le x) &= P(X \le \frac{x-\mu}{\sigma}) = \Phi(\frac{x-\mu}{\sigma}) = \\ = \int_{-\infty}^{\frac{x-\mu}{\sigma}} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-t^2/2}\, dt &= \int_{-\infty}^{x} \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} e^{-(u-\mu)^2/(2\sigma^2)}\, du \end{aligned}$$

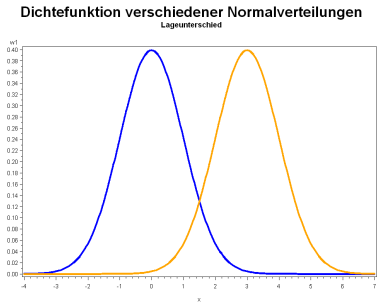
Normalverteilung

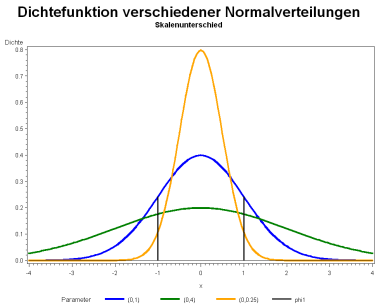
Unterschiedliche Parameter (1)

Vergleichen Sie

a) σ^2 fest, μ verschieden

b) μ fest, σ^2 verschieden





Descr_Normal_1.sas

Normalverteilung

Unterschiedliche Parameter (2)

Satz: Seien $X_1 \sim \mathcal{N}(\mu, \sigma_1^2), X_2 \sim \mathcal{N}(\mu, \sigma_2^2)$**,**
$\sigma_1^2 < \sigma_2^2$ und $a > 0$. Dann gilt:

$$P(\mu - a < X_1 < \mu + a) > P(\mu - a < X_2 < \mu + a).$$

Beweis:

$$\begin{aligned} P(\mu - a < X_1 < \mu + a) &= P(\frac{-a}{\sigma_1} < \frac{X_1 - \mu}{\sigma_1} < \frac{a}{\sigma_1}) \\ &= \Phi(\frac{a}{\sigma_1}) - \Phi(-\frac{a}{\sigma_1}) \\ &> \Phi(\frac{a}{\sigma_2}) - \Phi(-\frac{a}{\sigma_2}) \\ &= P(\mu - a < X_2 < \mu + a). \end{aligned}$$

Normalverteilung

Beispiel: $X_1 \sim \mathcal{N}(10,4), X_2 \sim \mathcal{N}(10,9), a = 1.$

$$\begin{aligned} P(9 < X_1 < 11) &= \Phi(\frac{11-10}{2}) - \Phi(\frac{9-10}{2}) \\ &= \Phi(\frac{1}{2}) - \Phi(-\frac{1}{2}) = 2 \cdot \Phi(\frac{1}{2}) - 1 \\ &= 2 \cdot 0.6915 - 1 = 0.383. \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} P(9 < X_2 < 11) &= \Phi(\frac{11-10}{3}) - \Phi(\frac{9-10}{3}) \\ &= \Phi(\frac{1}{3}) - \Phi(-\frac{1}{3}) = 2 \cdot \Phi(\frac{1}{3}) - 1 \\ &= 2 \cdot 0.6306 - 1 = 0.26112. \end{aligned}$$

Descr_Normal_3.sas

Wahrscheinlichkeitsverteilungen

Zusammenfassung (1)
Diskrete Verteilungen

Binomial $X \sim Bi(n,p)$

X : Anzahl von "Erfolgen", n Versuche, Erfolgswahrscheinlichkeit p.

Poisson $X \sim Poi(\lambda)$

X : Anzahl von "Erfolgen", n Versuche, Erfolgswahrscheinlichkeit p, n groß und p klein, $n \cdot p = \lambda$. X : # Ankünfte in einem Zeitintervall.

Geometrisch, $X \sim Geo(p)$

X : Zahl der Versuche bis zum ersten "Erfolg".

Wahrscheinlichkeitsverteilungen

Zusammenfassung (2)

Stetige Verteilungen

Gleichverteilung $X \sim R(a,b)$

Zufallszahlen

Exponential $X \sim Exp(\lambda)$

"gedächtnislose" stetige Verteilung.

Normal $X \sim \mathcal{N}(\mu, \sigma^2)$

Zentraler Grenzwertsatz Fehlergesetz (viele kleine unabhängige Fehler)

3.7 Erwartungswert

Einleitende Motivation

Eine Münze wird 3 mal geworfen. Wie oft können wir erwarten, daß Blatt oben liegt? Wie oft wird im Mittel Blatt oben liegen?

$$X : \begin{pmatrix} 0 & 1 & 2 & 3 \\ 1/8 & 3/8 & 3/8 & 1/8 \end{pmatrix}$$

Erwartungswert: $0 \cdot \frac{1}{8} + 1 \cdot \frac{3}{8} + 2 \cdot \frac{3}{8} + 3 \cdot \frac{1}{8} = \frac{12}{8} = 1.5$

D.h. bei 10maliger Durchführung des Experiments können wir im Mittel mit 15mal Blatt rechnen!

Erwartungswert

Diskrete Zufallsvariable

Sei X diskrete Zufallsvariable

$$X : \begin{pmatrix} x_1 & ... & x_n & ... \\ p_1 & ... & p_n & ... \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{E}X = \sum_{i=1}^{\infty} p_i x_i = \sum_{i=1}^{\infty} x_i p_i$$

heißt Erwartungswert von X.

Erwartungswert

$X \sim Poisson(\lambda)$

$$X : \begin{pmatrix} 0 & 1 & 2 & 3 & ... \\ p_0 & p_1 & p_2 & p_3 & ... \end{pmatrix} \qquad p_i = \frac{\lambda^i}{i!} e^{-\lambda}$$

$$\begin{aligned} \mathbf{E}X &= \sum_{i=0}^{\infty} p_i i \\ &= \sum_{i=0}^{\infty} \frac{\lambda^i}{i!} e^{-\lambda} \cdot i \\ &= \lambda \underbrace{\sum_{i=1}^{\infty} \frac{\lambda^{i-1}}{(i-1)!}}_{e^{\lambda}} e^{-\lambda} = \lambda. \end{aligned}$$

Interpretation: z.B. mittlere Ankunftsrate.

Erwartungswert

$X \sim Bi(n, p)$

$$\begin{aligned} \mathbf{E}X &= \sum_{k=0}^{n} k \binom{n}{k} p^k \cdot (1-p)^{n-k} \\ &= p \sum_{k=1}^{n} \frac{n!}{(k-1)!(n-k)!} p^{k-1} (1-p)^{n-k} \\ &= p \cdot n \sum_{k=1}^{n} \binom{n-1}{k-1} p^{k-1} (1-p)^{n-k} \\ &= p \cdot n \underbrace{\sum_{i=0}^{n-1} \binom{n-1}{i} p^i (1-p)^{n-1-i}}_{=1}, \qquad k = i+1 \\ &= n \cdot p. \end{aligned}$$

Erwartungswert

Stetige Verteilung

Sei X stetig mit Dichte f. Die Größe

$$\mathbf{E}X = \int_{-\infty}^{\infty} x \cdot f(x)dx$$

heißt Erwartungswert von X.

$X \sim Exp(\lambda), \qquad \lambda > 0$

$$\mathbf{E}X = \int_{0}^{\infty} x \cdot \frac{1}{\lambda} \cdot e^{-\frac{x}{\lambda}} dx = \lambda$$

Erwartungswert

Normalverteilung

$X \sim \mathcal{N}(\mu, \sigma^2)$

$$\begin{aligned}
\mathbf{E}X &= \int_{-\infty}^{\infty} x \cdot f(x)\, dx = \int_{-\infty}^{\infty} x \frac{1}{\sqrt{2\pi} \cdot \sigma} e^{-(\frac{x-\mu}{\sigma})^2/2} dx \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} (\sigma t + \mu) \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{\frac{-t^2}{2}} dt \qquad \frac{x-\mu}{\sigma} = t, \quad dx = \sigma dt \\
&= \mu + \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} \sigma \cdot t \cdot e^{\frac{-t^2}{2}}\, dt}_{=0} = \mu.
\end{aligned}$$

Erwartungswert

Gleichverteilung

$X \sim R(a, b)$**, gleichverteilt auf dem Intervall (a,b)**

$$\begin{aligned}
\mathbf{E}X &= \frac{1}{b-a} \int_{a}^{b} x dx = \frac{1}{b-a} \frac{x^2}{2} \Big|_a^b \\
&= \frac{b^2 - a^2}{2(b-a)} = \frac{a+b}{2}.
\end{aligned}$$

Eigenschaften des Erwartungswertes

E ist Linearer Operator

$$\mathbf{E}(aX + bY) = a\mathbf{E}X + b\mathbf{E}Y.$$

Beweis: folgt aus Eigenschaften von Reihen und Integralen. ∎

Regel des Faulen Statistikers

Sei X Zufallsvariable, g: $\mathbb{R} \longrightarrow \mathbb{R}$ (rechtsseitig) stetig $\Rightarrow$

$$\mathbf{E}(g(X)) = \begin{cases} \sum_{i=0}^{\infty} g(x_i)p_i & \text{, falls X diskret} \\ \int_{-\infty}^{\infty} g(x)f(x)dx & \text{, falls X stetig,} \end{cases}$$

vorausgesetzt die Erwartungswerte existieren.

Beweis: Transformationsformel (s. Stochastik)

3.8 Varianz

Ang., die betrachteten Erwartungswerte existieren.

$$var(X) = \mathbf{E}(X - \mathbf{E}X)^2$$

heißt Varianz der Zufallsvariable X.

$$\sigma = \sqrt{Var(X)}$$

heißt Standardabweichung der Zufallsvariablen X.

Bez.: $var(X), Var(X), varX, \sigma^2, \sigma_X^2, \sigma, \sigma_X$.

Sei $\mu := \mathbf{E}X$.

Die Varianz

Stetige und diskrete Zufallsvariablen

Wenn X diskret, so gilt:

$$var(X) = \sum_{i=0}^{\infty}(x_i - \mu)^2 p_i$$

Wenn X stetig, so gilt:

$$var(X) = \int_{-\infty}^{\infty}(x - \mu)^2 f(x)\, dx,$$

wobei f die Dichte von X ist.

$var(X)$: mittlere quadratische Abweichung von X und $\mathbf{E}X$.

Eigenschaften der Varianz

$$\begin{aligned} var(X) &= \mathbf{E}(X - \mathbf{E}X)^2 = \mathbf{E}(X - \mu)^2 \\ &= \mathbf{E}(X^2 - 2\mu X + \mu^2) \\ &= \mathbf{E}X^2 - \mu^2 \\ var(aX + b) &= a^2 var(X), \quad a, b \in \mathbb{R}. \\ var(X) &= 0 \Longleftrightarrow \exists c : \quad P(X = c) = 1. \end{aligned}$$

Unabhängigkeit

Zwei Zufallsvariablen X und Y heißen unabhängig, falls

$$P(X \leq x, Y \leq y) = P(X \leq x) \cdot P(Y \leq y)$$

für alle $x, y \in \mathbb{R}$.

Zwei Ereignisse A und B heißen unabhängig, falls

$$P(A, B) = P(A) \cdot P(B)$$

X und Y sind also unabhängig gdw. die Ereignisse $X \leq x$ und $Y \leq y$ unabhängig sind für alle $x, y \in \mathbb{R}$.

Erwartungswert und Varianz

Eigenschaften

Seien X und Y stochastisch unabhängig. Dann

$$\mathbf{E}(X \cdot Y) = \mathbf{E}X \cdot \mathbf{E}Y.$$

Beweis: Übung

Seien X und Y unabhängig. Dann gilt

$$var(X+Y) = var(X) + var(Y).$$

Beweis: Übung

Die Varianz

Poisson-Verteilung

Wahrscheinlichkeitsfunktion

$$P(X=i) = \frac{\lambda^i}{i!}e^{-\lambda}, \quad i = 0,1,2,\ldots \qquad \mathbf{E}(X) = \lambda$$

$$\begin{aligned} var(X) &= \mathbf{E}(X - \mathbf{E}X)^2 = \sum_{i=0}^{\infty}(i-\lambda)^2 p_i \\ &= \sum_{i=2}^{\infty} i\cdot(i-1)p_i + \sum_{i=0}^{\infty} i p_i - 2\lambda\sum_{i=0}^{\infty} i p_i + \lambda^2 \sum_{i=0}^{\infty} p_i \\ &= e^{-\lambda}\lambda^2 \sum_{i=2}^{\infty}\frac{\lambda^{i-2}}{(i-2)!} + \lambda - 2\lambda^2 + \lambda^2 = \lambda. \end{aligned}$$

Die Varianz

Binomialverteilung, $X \sim B(n,p)$

Wahrscheinlichkeitsfunktion

$$P(X=k) = \binom{n}{k} p^k \cdot (1-p)^{n-k}$$

$$var(X) = np(1-p).$$

(ohne Beweis, ÜA)

Die Varianz bei Gleichverteilung auf (a,b)

$$f(x) = \begin{cases} \frac{1}{b-a} & x \in (a,b) \\ 0 & \text{sonst.} \end{cases} \qquad \mathbf{E}X = \frac{a+b}{2}.$$

$$\begin{aligned} \mathbf{E}X^2 &= \int_a^b x^2 \frac{1}{b-a}\,dx = \frac{1}{3}x^3\Big|_a^b \cdot \frac{1}{b-a} \\ &= \frac{b^3-a^3}{3(b-a)} = \frac{a^2+ab+b^2}{3}. \\ var(X) &= \mathbf{E}X^2 - (\mathbf{E}X)^2 = \frac{1}{12}(4a^2+4ab+4b^2-3a^2-6ab-3b^2) \\ &= \frac{1}{12}(a^2-2ab+b^2) = \frac{(b-a)^2}{12}. \end{aligned}$$

Die Varianz

Exponentialverteilung

Dichte

$$f(x) = \begin{cases} \frac{1}{\lambda} e^{-\frac{x}{\lambda}} & \text{falls } x \geq 0, \\ 0 & \text{sonst.} \end{cases}$$

$$\begin{aligned} \mathbf{E}X &= \lambda. \\ \mathbf{E}X^2 &= \int_0^\infty x^2 \frac{1}{\lambda} e^{-\frac{x}{\lambda}}\, dx = 2 \cdot \lambda^2 \quad (\text{ÜA}). \\ var(X) &= \lambda^2. \end{aligned}$$

Die Varianz

Normalverteilung: $var(X) = \sigma^2$

$$\begin{aligned} f(x) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} e^{-\frac{1}{2}(\frac{x-\mu}{\sigma})^2}\, dx \\ \mathbf{E}(X-\mu)^2 &= \int_{-\infty}^\infty (x-\mu)^2 \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} e^{-\frac{1}{2}(\frac{x-\mu}{\sigma})^2}\, dx \\ &= \sigma^2 \int_{-\infty}^\infty t^2 \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{t^2}{2}}\, dt = \sigma^2 \int_{-\infty}^\infty (-t)(-t\frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{t^2}{2}})\, dt \\ &= \frac{\sigma^2}{\sqrt{2\pi}} \big(-te^{-t^2/2}\big|_{-\infty}^\infty - \int_{-\infty}^\infty (-1) e^{-\frac{t^2}{2}}\, dt\big) \\ &= \frac{\sigma^2}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^\infty e^{-\frac{t^2}{2}}\, dt = \sigma^2. \end{aligned}$$

Bei Normalverteilung sind also die Parameter μ und σ^2 Erwartungswert und Varianz.

3.9 Formmaße

(Theoretische) Schiefe

$$\beta_1 = \mathbf{E}\left(\frac{X - \mathbf{E}X}{\sqrt{var(X)}}\right)^3$$

β_1	$=$	0	falls f symmetrisch
β_1	$<$	0	falls f linksschief
β_1	$>$	0	falls f rechtsschief

ÜA: Berechnen Sie die (theoretische) Schiefe von

$$X : \begin{pmatrix} \frac{1}{2}(-4-\sqrt{6}) & -1 & \frac{1}{2}(-4+\sqrt{6}) & 2 & 3 \\ 0.2 & 0.2 & 0.2 & 0.2 & 0.2 \end{pmatrix}$$

$$Y : \begin{pmatrix} -9 & -7 & 2 & 4 & 10 \\ 0.2 & 0.2 & 0.2 & 0.2 & 0.2 \end{pmatrix}$$

Formmaße (2)

(Theoretische) Wölbung, Kurtosis

$$\beta_2 = \mathbf{E}\left(\frac{X - \mathbf{E}X}{\sqrt{var(X)}}\right)^4 - 3$$

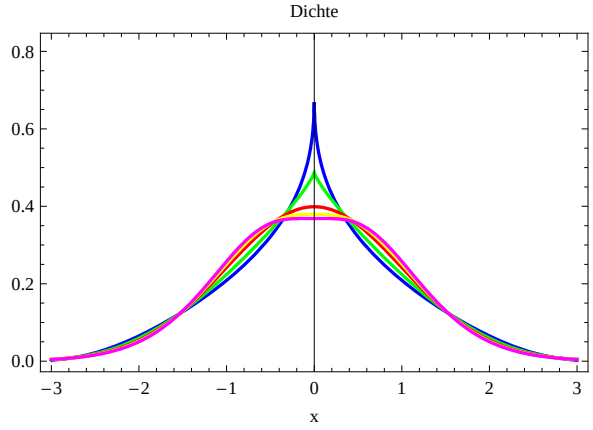
$\beta_2 = 0$	bei Normalverteilung
$\beta_2 > 0$	Tails "dicker, länger, stärker" als bei Normalverteilung (?)
$\beta_2 < 0$	Tails "dünner, kürzer, schwächer" als bei Normalverteilung (?)

$\beta_2 = 0$ heißt nicht notwendig: $F \sim$ Normal.

Formmaße (3)

Kurtosis

Dichten mit $\mathbf{E}(X) = 0, var(X) = 1, \beta_1 = 0, \beta_2 = 0$



Formmaße (4)

Theoretische Schiefe und Kurtosis verschiedener Verteilungen

Verteilung	Schiefe	Kurtosis
normal	0	0
gleich	0	-1.2
Doppelexp	0	3
Exponential	2	6
Bi(n,p)	$\frac{1-2p}{\sqrt{np(1-p)}}$	$-\frac{6}{n} + \frac{1}{np(1-p)}$
Poi(λ)	$\frac{1}{\sqrt{\lambda}}$	$\frac{1}{\lambda}$
Geo(p)	$\frac{2-p}{\sqrt{1-p}}$	$6 + \frac{p^2}{1-p}$

3.10 Besondere Eigenschaften der Normalverteilung

(schwaches) Gesetz der Großen Zahlen

Seien X_i unkorreliert (oder sogar unabhängig), identisch verteilt, $EX_i = \mu$

$$\overline{X}_n = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} X_i \to_p \mathbf{E}X$$

Zentraler Grenzwertsatz

Seien X_i unabhängig, identisch verteilt, $EX_i = \mu, varX_i = \sigma^2$.

$$Z_n := \sqrt{n}\frac{\overline{X}_n - \mu}{\sigma} \to Z, \quad Z \sim \mathcal{N}(0,1).$$

Bem.: Die X_i selbst müssen nicht normalverteilt sein. Descr_Binomial_2.sas Descr_Exp.sas

Normalverteilung

Fehlertheorie

Fehler sind unter folgenden Annahmen (asymptotisch) normalverteilt:

- Jeder Fehler ist Summe einer sehr großen Anzahl sehr kleiner, gleich großer Fehler, die verschiedene Ursachen haben.
- Die verschiedenen Fehlerkomponenten sind unabhängig.
- Jede Fehlerkomponente ist mit Wkt. 0.5 positiv und mit Wkt. 0.5 negativ.

Normalverteilung

Maximale Entropie (zur Information)

gegeben: Erwartungswert μ und Varianz σ^2

gesucht: Wahrscheinlichkeitsdichte f auf $(-\infty, \infty)$ mit

$$\int x f(x)\,dx = \mu, \quad \int (x-\mu)^2 f(x)\,dx = \sigma^2$$

und maximimaler Entropie:

$$H(f) := -\int f(x) \log f(x)\,dx$$

$\Longrightarrow$ f =Normaldichte.

Literatur: Rao: Lineare Statistische Methoden, 3.a.1.

Normalverteilung

Die Summe normalverteilter Zufallsvariablen

Die Summe normalverteilter Zufallsvariablen ist normalverteilt.

Seien $X_1 \sim \mathcal{N}(\mu_1, \sigma_1^2)$, $X_2 \sim \mathcal{N}(\mu_2, \sigma_2^2)$. Dann

$$X_1 + X_2 \sim \mathcal{N}(\mu_1 + \mu_2, \sigma_1^2 + \sigma_2^2 + 2\rho\sigma_1\sigma_2).$$

(ρ: Korrelationskoeffizient zwischen X_1 und X_2, s.u.)

Beweis: über charakteristische Funktionen (Fouriertransformationen der Dichte) oder über die Faltungsformel (Stochastik-Vorlesung) oder über eine Verallgemeinerung des Satzes der Totalen Wahrscheinlichkeit.

4 Zufallszahlen

Zufallszahlen werden nach einem deterministischen Algorithmus erzeugt ⇒ Pseudozufallszahlen

- wirken wie zufällige Zahlen (sollen sie jedenfalls)

Algorithmus:

Startwert x_0, $\quad x_{n+1} = f(x_n)$ $\qquad$ (z.B. Kongruenzen)

Ein Generator von SAS **CALL RANUNI Routine, RANUNI Funktion**

$$x_{n+1} = \underbrace{397204094}_{2\cdot 7\cdot 7\cdot 4053103} x_n \mod(2^{31}-1) \quad u_n = \frac{x_n}{2^{31}-1}$$

liefert gleichverteilte Zufallszahlen $u_n \in (0,1)$.

Zufallszahlen (2)

Ein weiterer Generator von SAS: RAND Funktion

Mersenne Twister hat eine Periode von $2^{19937}-1$ und liefert gleichverteilte Zufallszahlen $u_n \in (0,1)^{623}$.

zufälliger Startwert

seed = -1;

Der interne Startwert wird dann durch x_1 ersetzt, der folgende Aufruf von ranuni/rannor(seed) liefert eine neue Zufallszahl.

auf (0,1) gleichverteilte Zufallszahlen

x=ranuni(seed)

Standardnormalverteilte Zufallszahlen

x=rannor(seed)

Zufallszahlen (3)

vorgegebene stetige Verteilung

wird z.B. aus gleichverteilter Zufallsvariable U_i mittels Quantilfunktion $(F^{-1}(U_i))$ gewonnen.

diskrete Verteilungen

werden erzeugt durch Klasseneinteilung des Intervalls $(0,1)$ entsprechend der vorgegebenen Wahrscheinlichkeiten p_i, also

$$(0,p_1],(p_1,p_1+p_2],(p_1+p_2,p_1+p_2+p_3],\ldots,(p_1+\cdots+p_{k-1},1)$$

Call rantbl(seed,$p_1,\ldots,p_{k-1}$,x)

Zweidimensionale Normalverteilung, $\rho = corr(X,Y)$

probbnrm(x,y,ρ)

Zufallszahlen (4), wünschenswerte Eigenschaften

- Einfacher Algorithmus, wenig Rechenzeit.
- möglichst viele verschiedene Zufallszahlen sollen erzeugbar sein ⇒ lange Periode.
- k-Tupel $(U_1,\ldots,U_k) \sim R(0,1)^k$, $k \leq 10$ ⇒ Test auf Gleichverteilung, siehe Abschnitt Anpassungstest.
- "Unabhängigkeit" Test auf Autokorrelation (z.B. Durbin-Watson Test, vgl. Regression) Plot der Punkte (U_i, U_{i+k}), $k = 1, 2...$ es sollten keine Muster zu erkennen sein.

Zufallszahlen_test.sas Zufallszahlen_Dichte.sas

5 Statistische Maßzahlen für quantitative Merkmale

4. Statistische Maßzahlen für quantitative Merkmale

4.1 Lagemaße

Mittelwert, Quantile, Median, Quartile, Modalwert

4.2 Eigenschaften von Schätzungen

4.3 Schätzmethoden

4.4 Streuungsmaße

Varianz, Standardabweichung, Spannweite, Quartilsabstand, MAD, Variationskoeffizient

4.5 Formmaße

Schiefe, Exzess, Wölbung, Kurtosis

5.1 Lagemaße

Lagemaße (Lokationsparameter)

Das arithmetische Mittel

Die angegebenen Maßzahlen sind empirisch, d.h. sie sind Schätzungen für die wahre (i.A. unbekannte) Lage.

Mittelwert (MEAN)

$$\overline{X} = \overline{X}_n = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} x_i$$

$$\overline{X}_n \to_{n\to\infty} \mathbf{E}X \qquad \text{Gesetz der Großen Zahlen.}$$

Voraussetzungen: a) X_i i.i.d., $\mathbf{E}X_i < \infty$ (Chintchin) oder b) X_i beliebig, $\mathbf{E}X_i^2 < \infty$ (Tschebychev)

Lagemaße (2)

Quantile

Die Beobachtungen $x_1, ..., x_n$ werden der Größe nach geordnet: $x_{(1)} \le ... \le x_{(n)}$. Sei $0 \le \alpha \le 1$, $\alpha \cdot n = \lfloor \alpha \cdot n \rfloor + r =: j + r$, $r \in [0, 1)$

(empirische) Quantile (Perzentile)

$$x_\alpha = \begin{cases} x_{(j+1)} \text{ für } r > 0 \\ 1/2(x_{(j)} + x_{(j+1)}) \text{ für } r = 0 \end{cases}$$

(empirisches) α-Quantil bzw. $\alpha \cdot 100\%$ Perzentil

mindestens $\lfloor \alpha \cdot n \rfloor$ der Werte $(x_1, ..., x_n)$ sind $\le x_\alpha$ mindestens $\lfloor (1-\alpha)n \rfloor$ sind $\ge x_\alpha$ [1mm]

Vereinbarung: $x_0 := x_{(1)}$ $x_1 := x_{(n)}$ [1mm]

Bem.: x_α ist Schätzung von $F^{-1}(\alpha)$

Quantile

Beispiel

$$\begin{array}{ccccccccc} x_{(1)} & < & x_{(2)} & < & x_{(3)} & < & x_{(4)} & < & x_{(5)} \\ 1.5 & < & 2.7 & < & 2.8 & < & 3.0 & < & 3.1 \end{array}$$

$\alpha = 0.25$:
$\alpha \cdot n = 0.25 \cdot 5 = 1.25 = 1 + 0.25 \rightarrow x_\alpha = x_{0.25} = x_{(2)} = 2.7$

$\alpha = 0.75$:
$\alpha \cdot n = 0.75 \cdot 5 = 3.75 = 3 + 0.75 \rightarrow x_\alpha = x_{0.75} = x_{(4)} = 3.0$

$\alpha = 0.5$:
$\alpha \cdot n = 0.5 \cdot 5 = 2.5 = 2 + 0.5 \rightarrow x_\alpha = x_{0.5} = x_{(3)} = 2.8$

Lagemaße (3)

Median
ist das 0.5-Quantil $x_{0.5}$.

Quartile
heißen die 0.25- und 0.75-Quantile $x_{0.25}$ und $x_{0.75}$.

Modalwert
häufigster Wert

theoretischer Modalwert: diskrete Merkmale: der wahrscheinlichste Wert stetige Merkmale: Wert mit der größten Dichte

Lagemaße (4)

• Der Mittelwert ist in vielen Fällen eine 'gute' Lageschätzung, aber nicht robust (gegen Ausreißer).

• Der Median ist robust, aber meist nicht so 'gut'.

getrimmte Mittel, (α-)getrimmtes Mittel

$$\overline{X}_\alpha := \frac{x_{(\lfloor n\cdot\alpha\rfloor+1)} + ... + x_{(n-\lfloor n\cdot\alpha\rfloor)}}{n - 2\lfloor n\cdot\alpha\rfloor}, \qquad \alpha \in [0, \frac{1}{2})$$

Die $\lfloor n\cdot\alpha\rfloor$ kleinsten und $\lfloor n\cdot\alpha\rfloor$ größten Werte werden weggelassen und dann das arithmetische Mittel gebildet.

$\overline{X}_\alpha$ ist robuster als $\overline{X}$ und effizienter als $x_{0.5}$.

Lagemaße (5)

winsorisiertes Mittel, (α-)winsorisiertes Mittel
Sei $\alpha \in [0, \frac{1}{2})$ und jetzt $n_1 := \lfloor n\cdot\alpha\rfloor + 1$.

$$\overline{X}_{\alpha,w} := \frac{n_1 x_{(n_1)} + x_{(n_1+1)} + ... + x_{(n-n_1)} + n_1 x_{(n-n_1+1)}}{n}$$

Die $\lfloor n\cdot\alpha\rfloor$ kleinsten und $\lfloor n\cdot\alpha\rfloor$ größten Werte werden "herangeschoben" und dann das arithmetische Mittel gebildet.

• winsorisiertes Mittel ist robuster als $\overline{X}$ und effizienter als $x_{0.5}$.

Empfehlung für $\overline{X}_\alpha, \overline{X}_{\alpha,w}$: $\alpha : 0.1 \quad ... \quad 0.2$.

Lageschätzungen mit SAS

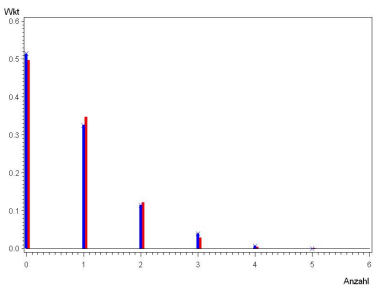
Mittelwert:	PROC MEANS; PROC SUMMARY;
Median:	PROC MEANS MEDIAN;
	PROC UNIVARIATE;
getrimmte Mittel:	PROC UNIVARIATE TRIMMED=Zahl;
winsorisierte Mittel:	PROC UNIVARIATE
WINSORIZED=Zahl;	
Modalwert:	PROC UNIVARIATE;
Quartile:	PROC UNIVARIATE;
Quantile:	PROC UNIVARIATE;
	PROC MEANS p1 p5 p10 p25 p75 p99; (etwa)

Descr1.sas Mean.sas

Beispiel: Tödliche Unfälle durch Pferdetritte

14 Corps, 20 Jahre, insges. 280 Einheiten. Erfasst wurde für jede Einheit die Anzahl der tödlichen Unfälle durch Pferdetritte.

Anzahl	Häufigkeit
0	144
1	91
2	32
3	11
4	2
5	0

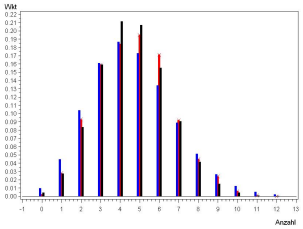


Poisson-Verteilung geeignet (?) Schätzung von λ durch $\overline{X}$.

Beispiel: Anzahl von schwarzen Feldern

Ein Zufallszahlengenerator soll zufällige Bildpunkte erzeugen, weiß mit Wahrscheinlichkeit 0.71 und schwarz mit Wahrscheinlichkeit 0.29.

Dazu wurde ein großes Rechteck in 1000 Teilquadrate mit je 16 Bildpunkten zerlegt. Gezählt wurde jeweils die Anzahl der schwarzen Bildpunkte.



n	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
h	2	28	93	159	184	195	171	92	45	24	6	1	0

Binomial-Verteilung (schwarz) geeignet (?)

Ang. p unbekannt. Schätzung von $np = 16p$ durch $\overline{X}$.

5.2 Eigenschaften von Schätzungen

Eigenschaften von Schätzungen (1)

Sei $\hat{\theta}_n$ eine Schätzung von θ, die auf n Beobachtungen beruht.

Konsistenz (Minimalforderung)

$\hat{\theta}_n \xrightarrow[n\to\infty]{} \theta$

Erwartungstreue, Asymptotische Erwartungstreue
$\mathbf{E}\hat{\theta}_n = \theta$ $\mathbf{E}\hat{\theta}_n \to_{n\to\infty} \theta$

"gute", "effiziente" Schätzung
var $\hat{\theta}_n$ möglichst klein

Eigenschaften von Schätzungen (2)

optimale Schätzung
wenn var $\hat{\theta}_n$ den kleinstmöglichen Wert annimmt für alle erwartungstreuen (e-treuen) Schätzungen.

Mean Square Error (MSE)
$\text{MSE} = \mathbf{E}(\hat{\theta}_n - \theta)^2 = \mathbf{E}(\hat{\theta}_n - \mathbf{E}\hat{\theta}_n + \mathbf{E}\hat{\theta}_n - \theta)^2 \qquad = \text{var } \hat{\theta}_n + (\mathbf{E}\hat{\theta}_n - \theta)^2 = \text{var } \hat{\theta}_n + \text{bias}^2\ \hat{\theta}_n$

soll minimal oder möglichst klein sein.

robuste Schätzung
Eigenschaften sollten "möglichst" auch bei (kleinen) Abweichungen von der (Normal-) Verteilungsannahme gelten

Eigenschaften von Schätzungen (3)
Cramer-Rao Ungleichung
θ: zu schätzender Parameter einer Population (Dichte f). $\hat{\theta} = \hat{\theta}_n$: eine erwartungstreue Schätzung von θ.

Cramer-Rao-Ungleichung

$$var(\hat{\theta}) \geq \frac{1}{n \cdot I(f,\theta)},$$

Fisher-Information

$$I(f,\theta) \quad = \quad \mathbf{E}\Big(\frac{\partial \ln f(X,\theta)}{\partial\theta}\Big)^2 = \int \Big(\frac{\partial \ln f(x,\theta)}{\partial\theta}\Big)^2 f(x,\theta)\,dx$$

Die Varianz einer Schätzung kann, bei gegebenem Stichprobenumfang, nicht beliebig klein werden.

Eigenschaften von Schätzungen (4)
Beispiele

f normal

$$f(x,\mu) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} e^{-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}}$$

$$\begin{aligned} \ln f(x,\mu) &= -\ln(\sqrt{2\pi}\sigma) - \frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2} \\ \frac{\partial \ln f(x,\mu)}{\partial\mu} &= \frac{x-\mu}{\sigma}\cdot\frac{1}{\sigma} \\ I(f,\mu) &= \frac{1}{\sigma^2}\int_{-\infty}^{\infty}\Big(\frac{x-\mu}{\sigma}\Big)^2 \cdot f(x,\mu)\,dx = \frac{1}{\sigma^2}. \end{aligned}$$

Eigenschaften von Schätzungen (5)

Beispiele (2)

Nach der Cramer-Rao-Ungleichung gilt also für jede erwartungstreue Lageschätzung

$$var(\hat{\theta}) \geq \frac{1}{n \cdot I(f,\theta)} = \frac{\sigma^2}{n},$$

insbesondere

$$var(\overline{X}) \geq \frac{\sigma^2}{n}.$$

Vergleichen Sie das mit:

$$var(\overline{X}) = \frac{1}{n^2} \sum_{i=1}^{n} varX_i = \frac{\sigma^2}{n}.$$

Bei Normalverteilung ist also $\overline{X}$ erwartungstreue Lageschätzung mit minimaler Varianz.

Eigenschaften von Schätzungen (6)

Beispiele (3)

f exponential

$$f(x,\lambda) = \begin{cases} \frac{1}{\lambda} e^{-\frac{1}{\lambda}x} & \text{falls} \quad x \geq 0 \\ 0 & \text{sonst.} \end{cases} \qquad I(f,\lambda) = \frac{1}{\lambda^2} \qquad (\text{ÜA})$$

Die Cramer-Rao-Schranke ist also: $\quad \frac{1}{n \cdot I(f,\lambda)} = \frac{\lambda^2}{n}.$

Vergleichen Sie mit: $\quad var(\overline{X}) = \frac{\lambda^2}{n}.$

Bei Exponentialverteilung ist also $\overline{X}$ erwartungstreue Parameterschätzung mit minimaler Varianz.

Eigenschaften von Schätzungen (7)

Beispiele (4)

f Doppelexponential (=Laplace)

$$f(x,\lambda,\mu) = \frac{1}{2} \begin{cases} \frac{1}{\lambda} e^{-\frac{1}{\lambda}(x-\mu)} & \text{falls} \quad x \geq \mu \\ \frac{1}{\lambda} e^{\frac{1}{\lambda}(x-\mu)} & \text{falls} \quad x < \mu \end{cases}$$

Der hier interessierende (Lage-) Paramter ist μ.

$$I(f,\mu) = \frac{1}{\lambda^2}. \quad (\text{ÜA}) \qquad var(\overline{X}) = \frac{2\lambda^2}{n}. \quad (\text{ÜA})$$

Für den Median $x_{0.5}$ gilt:

$$var(x_{0.5}) \sim \frac{\lambda^2}{n}. \quad (\text{ÜA}^*)$$

5.3 Schätzmethoden

Momentenmethode

Man drückt den zu schätzenden Parameter durch die Momente, z.B. $\mathbf{E}(X)$, aus. Dann werden die Momente durch die entsprechenden *empirischen* Momente, z.B. der Erwartungswert durch $\overline{X}$, ersetzt.

Maximum-Likelihood-Schätzung (ML-Schätzung)

Es wird der Schätzwert für den unbekannten Parameter ermittelt, der anhand der vorliegenden Daten, am meisten für diesen Paramter spricht (most likely).

Kleinste-Quadrat-Schätzung (KQS)

Sei θ der zu schätzende Parameter. Man geht aus von einem Modell, z.B.

$$Y_i = g(\theta, X_i) + \epsilon_i$$

Dannn versucht man die Summe der Fehlerquadrate

$$\sum_{i=1}^{n} \epsilon_i^2 = \sum_{i=1}^{n} (Y_i - g(\theta, X_i))^2.$$

zu minimieren (Kleinste Quadrate).

Momentenschätzung

Momentenschätzung bei Normalverteilung

Seien $X_1, \ldots, X_n \sim \mathcal{N}(\mu, \sigma^2)$.

$$\mu = \mathbf{E}X_i \quad \Longrightarrow \quad \hat{\mu} = \overline{X}$$

$$\sigma^2 = \mathbf{E}(X - \mathbf{E}X)^2 \;\Rightarrow\; \hat{\sigma}^2 = \overline{(X_i - \overline{X})^2} = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(X_i - \overline{X})^2$$

Momentenschätzung bei Exponentialverteilung

Seien $X_1, \ldots, X_n \sim Exp(\lambda)$.

$$\lambda = \mathbf{E}X_i \quad \Longrightarrow \quad \hat{\lambda} = \overline{X}$$

Momentenschätzung

Momentenschätzung bei Binomialverteilung

Seien $X_1, \ldots, X_n \sim Bi(p, 1)$.

$$p = \mathbf{E}X_i \quad \Longrightarrow \quad \hat{p} = \overline{X}$$

der relative Anteil der Realisierungen $x_i = 1$.

Maximum-Likelihood-Schätzung

ML-Schätzung bei Binomialverteilung

Beobachten n=1000 Jugendliche. Stichprobe $\mathbf{X} = (X_1, \ldots, X_n)$ $X_i = 1$ falls Übergewicht festgestellt $X_i = 0$ sonst. Die Wahrscheinlichkeit, dass die beobachtete Stichprobe auftritt, wenn der Parameter p vorliegt ist (die Beobachtungen werden als unabhängig angenommen)

$$\begin{aligned} L(\mathbf{X}|p) &= P(X_1 = x_1, \ldots, X_n = x_n) = \prod_{i=1}^{n} p^{x_i}(1-p)^{1-x_i} \\ &= p^k(1-p)^{n-k}, \quad \text{wobei} \quad k = \sum_{i=1}^{n} x_i. \end{aligned}$$

Maximum-Likelihood-Schätzung

Binomialverteilung

Der ML-Schätzer ist der Wert, der diese Funktion, $L_n(p)$, Likelihood-Funktion genannt, bzgl. p maximiert. Maximieren statt $L_n(p)$: $\ln L_n(p)$ (Arg.Max. ist dasselbe).

$$\begin{aligned}\ln L_n(p) &= \ln\bigl(p^k(1-p)^{n-k}\bigr)\\ &= k\ln p + (n-k)\ln(1-p).\end{aligned}$$

Ableiten nach p und Nullsetzen liefert:

$$\frac{k}{p} - \frac{n-k}{1-p} = 0$$

Maximum-Likelihood-Schätzung

Binomialverteilung

Die einzige Lösung ist:

$$\hat{p} = \frac{k}{n} = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} x_i$$

Für ein relatives Extremum in (0,1) kommt nur dieser Wert in Betracht. Müssen aber noch die Likelihood-Funktion an den Rändern betrachten: Für $p = 0$ und $p = 1$ wird $\ln L(p) = -\infty$. Also:

$$\hat{p}_{ML} = \frac{k}{n}.$$

Maximum-Likelihood-Schätzung

Normalverteilung, μ unbekannt, σ^2 bekannt

ML-Schätzung bei Normalverteilung

Likelihood: $f_{X_1,\ldots,X_n}(x_1,\ldots,x_n)$, die gemeinsame Dichtefunktion der X_i.
Seien $X_1,\ldots,X_n$ unabhängig, $X_i \sim \mathcal{N}(\mu,1)$.
Likelihood:

$$\begin{aligned}L_n(\mu) &= \prod_{i=1}^{n} f_{X_i}(x_i) \qquad \text{(Unabhängigkeit)}\\ &= \prod_{i=1}^{n} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-(x_i-\mu)^2/2}\end{aligned}$$

Maximum-Likelihood-Schätzung

Normalverteilung, 2

$$\begin{aligned}\ln L_n(\mu) &= -n\ln(\sqrt{2\pi}) + \sum_{i=1}^{n}(-\frac{(x_i-\mu)^2}{2})\\ \frac{\partial \ln L_n(\mu)}{\partial \mu} &= \sum_{i=1}^{n}(x_i-\mu)\end{aligned}$$

Nullsetzen liefert die Maximum-Likelihood-Schätzung

$$\hat{\mu} = \overline{X}.$$

Maximum-Likelihood-Schätzung

Normalverteilung, μ und σ^2 unbekannt

$X_1, \ldots, X_n \sim \mathcal{N}(\mu, \sigma^2)$, $\quad x_1, \ldots, x_n$: *Beobachtungen*

$$\begin{aligned} L_n(\mu, \sigma) &= \prod_{i=1}^{n} \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \exp\big(-\frac{1}{2\sigma^2}(x_i - \mu)^2\big) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}^n \sigma^n} \exp\big(-\frac{1}{2\sigma^2} \sum_{i=1}^{n} (x_i - \mu)^2\big) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}^n \sigma^n} \exp\big(-\frac{nS^2}{2\sigma^2}\big) \exp\big(-\frac{n(\overline{X} - \mu)^2}{2\sigma^2}\big) \end{aligned}$$

wobei $S^2 = n^{-1} \sum_{i=1}^{n} (X_i - \overline{X})^2$.

Die letzte Gleichung folgt aus: $\sum_{i=1}^{n} (X_i - \mu)^2 = \sum_{i=1}^{n} (X_i - \overline{X} + \overline{X} - \mu)^2 = nS^2 + n(\overline{X} - \mu)^2$

Maximum-Likelihood-Schätzung

Normalverteilung, Fortsetzung

Log-Likelihood:

$$\ln L(\mu, \sigma) = -n \ln \sqrt{2\pi} - n \ln \sigma - \frac{nS^2}{2\sigma^2} - \frac{n(\overline{X} - \mu)^2}{2\sigma^2}$$

Lösen des Gleichungssystems

$$\begin{aligned} 0 &= \frac{\partial \ln L(\mu, \sigma)}{\partial \mu} = \frac{\overline{X} - \mu}{\sigma^2} \\ 0 &= \frac{\partial \ln L(\mu, \sigma)}{\partial \sigma} = -\frac{n}{\sigma} + \frac{nS^2}{\sigma^3} + \frac{n(\overline{X} - \mu)^2}{\sigma^3} \\ & \hat{\mu} = \overline{X}, \qquad \hat{\sigma}^2 = S^2 \end{aligned}$$

Maximum-Likelihood-Schätzung

Gleichverteilung

ML-Schätzung bei Gleichverteilung auf $(0, \theta)$

Likelihood: $f_{X_1, \ldots, X_n}(x_1, \ldots, x_n)$, die gemeinsame Dichtefunktion der X_i. Seien $X_1, \ldots, X_n$ unabhängig, $X_i \sim R(0, \theta)$, d.h.

$$f_{X_i}(x_i) = \begin{cases} \frac{1}{\theta} & \text{falls} \quad 0 \le x_i \le \theta \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$$

Maximum-Likelihood-Schätzung

Gleichverteilung, 2

Likelihood:

$$\begin{aligned} L_n(\theta) &= \prod_{i=1}^{n} f_{X_i}(x_i) \qquad \text{(Unabhängigkeit)} \\ &= \begin{cases} \frac{1}{\theta^n} & \text{falls} \quad 0 \le x_i \le \theta \quad \forall x_i \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \end{aligned}$$

Maximal, wenn $\theta \ge x_1, \ldots, x_n$, und wenn θ möglichst klein, also

$$\hat{\theta} = \max(x_1, \ldots, x_n).$$

Maximum-Likelihood-Schätzung

Gemischte Normalverteilung

Dichte ($\boldsymbol{\theta} = (\mu_1, \sigma_1^2, \mu_2, \sigma_2^2, p)$):

$$f(x; \boldsymbol{\theta}) = (1-p)\phi\big(\frac{x-\mu_1}{\sigma_1}\big) + p\phi\big(\frac{x-\mu_2}{\sigma_2}\big)$$

$X_i \sim \mathcal{N}(\mu_1, \sigma_1^2)$ mit Wkt. $(1-p)$ und $X_i \sim \mathcal{N}(\mu_2, \sigma_2^2)$ mit Wkt. $(1-p)$, aber p ist nicht bekannt.

Likelihood:

$$L(\boldsymbol{\theta}) = \prod_{i=1}^{n}\big((1-p)\phi(\frac{x_i-\mu_1}{\sigma_1}) + p\phi(\frac{x_i-\mu_2}{\sigma_2})\big)$$

Maximieren des (log-)Likelihood → Newton-Raphson o. EM-Algorithmus (Stochastik-Vorlesung)

Eigenschaften von ML-Schätzern

Unter Regularitätsannahmen gilt

- ML-Schätzungen sind konsistent.
- Wenn sie erwartungstreu ist: sie sind (asymptotisch) effizient, d.h. sie haben minimale Varianz. Die Varianz ist durch die Cramér-Rao Ungleichung gegeben.
- sie sind asymptotisch normal verteilt (wichtig für die Konstruktion von Konfidenzintervallen, s.u.)
- Nachteil: ML-Schätzungen beruhen auf Verteilungsannahmen.

Kleinste Quadrat Schätzung

KQS des Lageparameters

Modell:

$$Y_i = \mu + \epsilon_i, \qquad \epsilon_i \sim (0, \sigma^2)$$

Die Summe der Fehlerquadrate

$$\sum_{i=1}^{n}\epsilon_i^2 = \sum_{i=1}^{n}(Y_i - \mu)^2.$$

minimieren: Differenzieren und Nullsetzen liefert:

$$\hat{\mu}_{KQS} = \overline{Y}.$$

Kleinste Quadrat-Schätzung

KQS im einfachen linearen Regressionsmodell

$$Y_i = \theta_2 + \theta_1 X_i + \epsilon_i, \qquad \epsilon_i \sim (0, \sigma^2)$$

$$f(X, \theta_1, \theta_2) = \theta_1 X + \theta_2$$

$$\frac{\partial f}{\partial \theta_1} = X \qquad \frac{\partial f}{\partial \theta_2} = 1$$

Minimieren von $\sum(Y_i - f(X_i, \theta_1, \theta_2))^2$ liefert:

$$\begin{aligned}\sum_{i=1}^{n}(Y_i - (\theta_1 X_i + \theta_2)) \cdot X_i &= 0\\ \sum_{i=1}^{n}(Y_i - (\theta_1 X_i + \theta_2)) \cdot 1 &= 0\end{aligned}$$

Kleinste Quadrat-Schätzung

$\Rightarrow$

$$\begin{aligned} \sum_i X_i Y_i - \theta_1 \sum_i X_i^2 - \theta_2 \sum_i X_i &= 0 \\ \sum_i Y_i - \theta_1 \sum_i X_i - \theta_2 \cdot n &= 0 \end{aligned}$$

Die zweite Gleichung nach θ_2 auflösen:

$$\theta_2 = \frac{1}{n}\sum_i Y_i - \theta_1 \frac{1}{n}\sum_i X_i = \overline{Y} - \theta_1 \cdot \overline{X}$$

und in die erste einsetzen:

Kleinste Quadrat-Schätzung

$$\sum_i X_i Y_i - \theta_1 \sum_i X_i^2 - \frac{1}{n}\sum_i Y_i \sum_i X_i + \theta_1 \frac{1}{n}\sum_i X_i \sum_i X_i = 0$$

$$\sum_i X_i Y_i - \frac{1}{n}\sum_i Y_i \sum_i X_i - \theta_1 \big((\sum_i X_i^2 - \frac{1}{n}\sum_i X_i \sum_i X_i\big) = 0$$

$\Rightarrow$

$$\begin{aligned} \hat{\theta}_1 &= \frac{\sum_i X_i Y_i - \frac{1}{n}\sum_i X_i \sum_i Y_i}{\sum_i X_i^2 - \frac{1}{n}(\sum_i X_i)^2} = \frac{S_{XY}}{S_X^2} \\ \hat{\theta}_2 &= \frac{1}{n}\big(\sum_i Y_i - \hat{\theta}_1 \sum_i X_i\big) \end{aligned}$$

Einschub: Die Prozedur GPLOT

(vgl. ÜA 6)

Darstellung von Dichten und Wahrscheinlichkeitsfunktionen

SYMBOL1 i=spline c=green v=point; SYMBOL2 i=needle c=blue v=plus; **PROC GPLOT**; PLOT y1*x=1 y2*x=2 /overlay; **RUN**;

Die darzustellenden Paare (x,y) sind vorher in einem DATA-Step zu erzeugen oder einzulesen.
Nach dem Gleichheitszeichen im Plot-Kommando steht die Nummer der zugehörigen SYMBOL-Anweisung.

Die Prozedur GPLOT (2)

Die Symbol-Anweisung beschreibt die Art, den Stil des Plot

i=needle: Nadelplot (für diskrete Wahrscheinlichkeiten praktisch)

i=join: (nach x) aufeinander folgende Punkte werden verbunden

i=spline: Punkte werden durch einen Spline verbunden

c=<Farbe>

v=<Zeichen>

overlay: alles in ein Plot.

5.4 Streuungsmaße

Die angegebenen Maßzahlen sind empirisch, d.h. sie sind Schätzungen für die wahre Varianz

(empirische) Varianz (Streuung)

$$s^2 = \frac{1}{n-1}\sum_{i=1}^{n}(x_i - \overline{X})^2$$

$$s^2 \to_{n\to\infty} var(X)$$

Warum Division durch $(n-1)$: Erwartungstreue (ÜA)

Standardabweichung

$$s = \sqrt{s^2}$$

Spannweite (Range)

$$x_{(n)} - x_{(1)}$$

(Inter-)Quartilsabstand, IR

$$IR = x_{0.75} - x_{0.25}$$

Wenn $X \sim \mathcal{N}$ so $\mathbf{E}(IR/1.34898) = \sigma$.

Mittlere absolute Abweichung vom Median

$$d = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}|x_i - x_{0.5}|$$

Median absolute deviation, MAD

$$MAD = med(|x_i - x_{0.5}|)$$

Wenn $X \sim \mathcal{N}$ so $\mathbf{E}(1.4826 \cdot MAD) = \sigma$

Gini's Mean Difference

$$G = \frac{1}{\binom{n}{2}}\sum_{i<j}|x_i - x_j| \qquad X \sim \mathcal{N} \Rightarrow \mathbf{E}\big(\frac{\sqrt{\pi}}{2}G\big) = \sigma$$

S_n und Q_n (Croux, Rousseuw 1992, 1993)

$$\begin{aligned} S_n &= 1.1926 \cdot \text{lomed}_i(\text{highmed}_j|x_i - x_j|) \\ Q_n &= 2.2219 \cdot \{|x_i - x_j|, i < j\}_{(k)} \end{aligned}$$

Bei $n = 2m+1$ ist lomed=highmed=med, bei $n = 2m$ ist lomed=$X_{(\frac{n}{2})}$, highmed=$X_{(\frac{n}{2}+1)}$.
$k = \binom{h}{2}, h = \lfloor\frac{n}{2}\rfloor + 1 \qquad \big(k \approx \binom{n}{2}/4\big)$

$\{...\}_{(k)}$ bezeichnet das k-te Element der geordneten (Multi-)Menge.

- SAS verwendet einen modifizierten Schätzer (Korrekturfaktor) für kleine Umfänge.
- Die konstanten Faktoren sichern Konsistenz und Erwartungstreue bei Normalverteilung, $X \sim \mathcal{N}$: $\Rightarrow \mathbf{E}\big(S_n\big) = \mathbf{E}\big(Q_n\big) = \sigma$

Streuungsmaße (5)

Eigenschaften:

- Varianz und Standardabweichung und Spannweite sind nicht "robust".
- IR und MAD sind robust. (MAD etwas besser da höherer "Bruchpunkt")
- G ist bedingt robust, effizient bei F normal.
- IR und MAD sind wenig effizient. (0.37 bei Normal)
- S_n oder Q_n sind geeignetste Schätzungen.

Streuungsmaße (6)

Nicht-Robuste Skalenschätzungen

$$\begin{aligned} s^2 &= \frac{1}{n-1}\sum_{i=1}^{n}(x_i - \overline{X})^2 \\ \text{Range} &= x_{(n)} - x_{(1)} \\ CV &= \frac{s \cdot 100}{\overline{X}} \end{aligned}$$

Streuungsmaße (7)
Robuste Skalenschätzungen

$$\begin{aligned} IR &= x_{0.75} - x_{0.25} \\ MAD &= med(|x_i - x_{0.5}|) \\ G &= \frac{1}{\binom{n}{2}}\sum_{i<j}|x_i - x_j| \\ S_n &= 1.1926 \cdot med_i(med_j|x_i - x_j|) \\ Q_n &= 2.219 \cdot \{|x_i - x_j|, i < j\}_{(k)} \\ & \quad k = \binom{h}{2}, h = \lfloor \frac{n}{2} \rfloor + 1 \end{aligned}$$

SAS (Option ROBUSTSCALE) gibt neben diesen Werten auch die (im Fall der Normalverteilung) erwartungstreuen Schätzungen an.

Lage- und Streuungsmaße in SAS (1)

PROC MEANS; VAR Zeit; **RUN**;

Standardausgabe: N, Mean, Std Dev, Minimum, Maximum

Vorteil: übersichtliche Darstellung

Nachteil: nur wenige Statistiken

Es können aber zusätzliche Statistiken durch Optionen angefordert werden, z.B. **PROC MEANS** Median Sum CL;

Descr1.sas

Lage- und Streuungsmaße in SAS (2)

Die Prozedur Univariate

PROC UNIVARIATE; VAR Zeit; **RUN**;

N, Mean, Std Deviation, Variance Sum Observations, Median, Mode Range, Interquartile Range Lokationstests (später) Quantile Extreme Beobachtungen

Lage- und Streuungsmaße in SAS (3)

Getrimmte Mittel und robuste Skalenschätzer können einfach berechnet werden durch:

PROC UNIVARIATE ROBUSTSCALE TRIMMED=10 WINSORIZED=10; VAR ...; **RUN**;

TRIMMED: getrimmte Mittel

TRIMMED=10: die je 10 kleinsten und größten Beobachtungen werden weggelassen.

WINSORIZED: winsorisierte Mittel

ROBUSTSCALE: robuste Skalenschätzer

Descr_MAD

Lage- und Streuungsmaße in SAS (4)

Abkürzung

PROC CAPABILITY ROBUSTSCALE TRIMMED=10 WINSORISED=10; ODS SELECT BASICMEASURES TRIMMEDMEANS ROBUSTSCALE VAR ...; **RUN**;

Variationskoeffizient

$$CV = \frac{s \cdot 100}{\overline{X}}$$

kein Skalenmaß, weder lageinvariant noch skalenequivariant

5.5 Formmaße

Formmaße (1)

(Theoretische) Schiefe

$$\beta_1 = \mathbf{E}\left(\frac{X - \mathbf{E}X}{\sqrt{var(X)}}\right)^3$$

(Empirische) Schiefe

$$\begin{aligned} \hat{\beta}_1 &= \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\left(\frac{x_i - \overline{X}}{s}\right)^3 \\ \hat{\beta}_{1,SAS} &= \hat{\beta}_1 \frac{n^2}{(n-1)(n-2)} \end{aligned}$$

PROC MEANS skewness; **PROC MEANS** skewness vardef=n; (ohne Faktor)

Formmaße (2)

(Theoretische) Wölbung, Kurtosis

$$\beta_2 = \mathbf{E}\left(\frac{X - \mathbf{E}X}{\sqrt{var(X)}}\right)^4 - 3$$

(Empirische) Wölbung, Kurtosis

$$\hat{\beta}_2 = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\left(\frac{x_i - \overline{X}}{s}\right)^4 - 3$$

$$\hat{\beta}_{2,SAS} = \hat{\beta}_2 \frac{n^2(n+1)}{(n-1)(n-2)(n-3)} - 3\frac{(n-1)^2}{(n-2)(n-3)}$$

Formmaße (3)

Exzeß

$\beta_2 + 3$ $\hat{\beta}_2 + 3$

$\beta_2 = 0$ bei Normalverteilung

$\beta_2 > 0$ Tails "dicker, länger, stärker" als bei NV

$\beta_2 < 0$ Tails "dünner, kürzer, schwächer" als bei NV

PROC MEANS kurtosis; **PROC MEANS** kurtosis vardef=n; (ohne Faktor)

Erinnerung:

$\beta_2 = 0$ heißt nicht notwendig: $F \sim$ Normal.

6 Datenvisualisierung

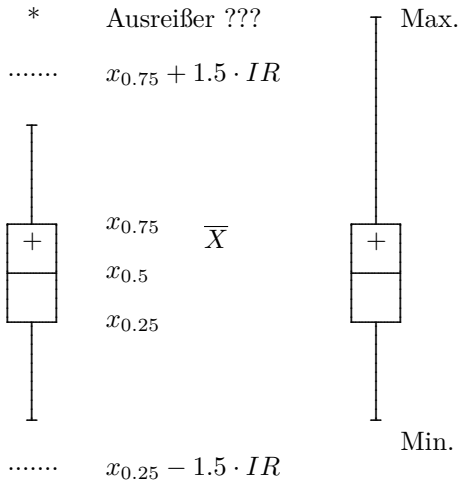
6.1 Box-Plots

Ziel: übersichtliche Darstellung der Daten.
Boxplot zu dem Eingangsbeispiel mit n=5:

Descr_Boxplot0.sas

Prozeduren: UNIVARIATE, GPLOT, BOXPLOT
PROC UNIVARIATE PLOT; **RUN**;
SYMBOL1 INTERPOL=BOXT10; **PROC GPLOT**; PLOT y*x=1; **RUN**; **PROC BOXPLOT**; PLOT y*x /BOXSTYLE=SCHEMATIC; /BOXSTYLE=SKELETAL; **RUN**;

Prozedur BOXPLOT



Schematic Skeletal
... sind gedachte Linien

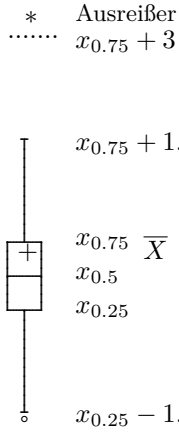
Erläuterung zu BOXSTYLE=Schematic

$X \sim \mathcal{N}(\mu, \sigma^2)$ etwa 99% der Daten liegen zwischen den "fences" (den ...).

$$\begin{aligned}
0.99 &= 0.995 - 0.005 \\
&= \Phi(2.575) - \Phi(-2.575) \\
&= P(\mu - 2.575\sigma < X < \mu + 2.575\sigma) \\
&\approx P(x_{0.5} - 2.575 \cdot \underbrace{0.7434 \cdot IR}_{} < X < \\
&\qquad x_{0.5} + 2.575 \cdot \underbrace{0.7434 \cdot IR}_{}) \\
&= P(x_{0.5} - 1.914 \cdot IR < X < x_{0.5} + 1.914 \cdot IR) \\
&\approx P(x_{0.5} - 2 \cdot IR < X < x_{0.5} + 2 \cdot IR) \\
&= P(x_{0.25} - 1.5 \cdot IR < X < x_{0.75} + 1.5 \cdot IR)
\end{aligned}$$

Prozedur UNIVARIATE, Option PLOT

Zum Vergleich: es gibt auch andere Boxplotdefinitionen



Box-Plots in SAS

Ein Merkmal, eine Gruppe (Merkmal gr)

gr = 1; **PROC BOXPLOT**; PLOT zeit*gr; **RUN**;

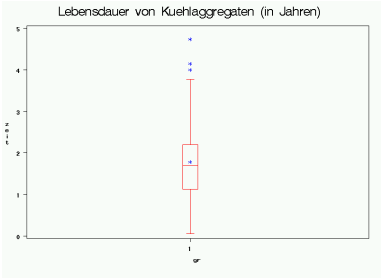
Ein Merkmal (zeit), mehrere Gruppen (z.B. gr=1,2,3)
PROC BOXPLOT; PLOT zeit*gr; **RUN**;

Ein Merkmal (X), mehrere Gruppen (gr)
SYMBOL INTERPOL=BOXT10; **PROC GPLOT**; PLOT X*gr; **RUN**;

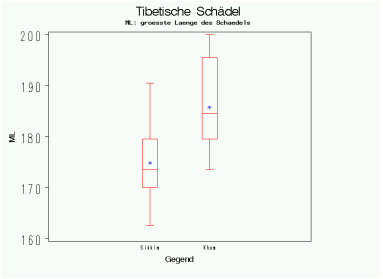
Descr_Boxplot.sas Descr_Boxplot1.sas

Boxplots - Beispiele

Lebensdauern von 100 Kühlaggregaten



Schädelmaße in zwei Regionen Tibets



Box-Plots in SAS (2)

Box-Plots von mehreren Variablen
Descr_Boxplot2.sas

1. Data-Step:

   Definition von neuen Variablen, die konstant gesetzt werden.

2. Symbol-Anweisungen für die einzelnen darzustellenden Variablen definieren.

3. Achsenbeschriftung entsprechend den Variablen definieren.

4. Prozedur GPLOT;

6.2 Probability Plots

Erinnerung: Normalverteilung

(i) Dichte der Standard-Normalverteilung

$$\phi(x) = \frac{1}{\sqrt{2 \cdot \pi}} \cdot e^{-\frac{x^2}{2}}, \qquad -\infty < x < \infty$$

(ii) Verteilungsfunktion der Standard-Normal

$$\Phi(x) = \int_{-\infty}^{x} \frac{1}{\sqrt{2 \cdot \pi}} \cdot e^{-\frac{t^2}{2}} dt, \qquad -\infty < x < \infty$$

(iii) Dichte der Normalverteilung

$$\frac{1}{\sigma}\phi(\frac{x-\mu}{\sigma}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \cdot e^{-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}},$$

mit Erwartungswert μ und Varianz σ^2.

Probability Plots

Erinnerung: Normalverteilung, Quantile

Der Wert $\Phi^{-1}(u)$ heißt u-Quantil
der Standard-Normalverteilung.

Die Funktion $\Phi^{-1}(u), u \in (0,1)$, heißt Quantilfunktion
der Standard-Normalverteilung.

$\alpha = 0.05$

$$u_{1-\alpha} = \Phi^{-1}(1-\alpha) = \Phi^{-1}(0.95) = 1.645$$
$$u_{1-\alpha/2} = \Phi^{-1}(1-\frac{\alpha}{2}) = \Phi^{-1}(0.975) = 1.96$$

$\Phi^{-1}(\alpha)$	α-Quantil, theoretisch
$\hat{x}_\alpha$	α-Quantil, empirisch,
	z.B. $= x_{(\lfloor \alpha n \rfloor + 1)}$: falls αn nicht ganzzahlig

Q-Q-Plot, Variante 1

$X \sim \mathcal{N}(\mu, \sigma^2) \Leftrightarrow \frac{X-\mu}{\sigma} \sim \mathcal{N}(0,1)$

$$\frac{x_\alpha - \mu}{\sigma} = u_\alpha = \Phi^{-1}(\alpha) \quad \text{gdw.} \quad x_\alpha = \sigma\Phi^{-1}(\alpha) + \mu$$

Wenn Normalverteilung zutrifft, so müssen die Punkte $(\Phi^{-1}(\alpha), \hat{x}_\alpha)$ etwa auf einer Geraden liegen,

$$\Phi^{-1}(\alpha) \approx \frac{\hat{x}_\alpha - \mu}{\sigma} \approx \frac{x_{(\lfloor \alpha n \rfloor)} - \mu}{\sigma}$$

ODS GRAPHICS ON; **PROC UNIVARIATE** PLOT; **RUN**;

Die theoretischen Werte ($\circ$) und die theoretische Gerade werden eingezeichnet. Je näher die $\circ$ an der Geraden desto mehr spricht es für Normalverteilung und umgekehrt. Descr_QQPlot.sas

Q-Q-Plot

Variante 2

PROC UNIVARIATE; QQPLOT var /Optionen; **RUN**;

wie oben, bessere Grafik, aber keine Linie.
Es werden die Punkte

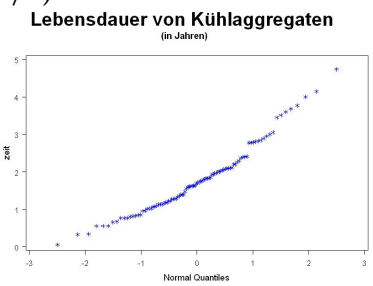
$$(\Phi^{-1}(\frac{i-0.375}{n+0.25}), x_{(i)})$$

geplottet. $i = 1, \ldots, n$.

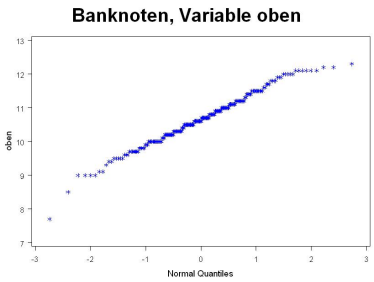
Bem.: $\Phi^{-1}(\frac{i-0.375}{n+0.25})$ ist eine Approximation von $\mathbf{E}X_{(i)}$ bei Standard-Normalverteilung.

Q-Q Plots - Beispiele (1/2)

Lebensdauern von 100 Kühlaggregaten

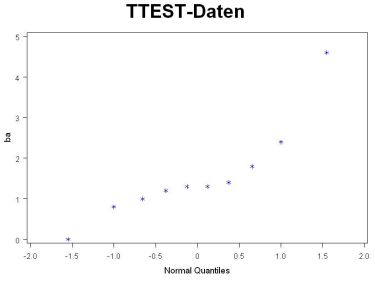


Abmessungen von Banknoten



Q-Q Plots - Beispiele (2/2)

Verlängerung der Schlafdauer



Probability Plot

PROC UNIVARIATE; PROBPLOT var /Optionen; **RUN**;

wie oben, x-Achse hat die selbe Skala, aber eine andere Beschriftung, statt $\Phi^{-1}(u)$ steht u, also

$$(\alpha, x_{(i)}) = (\frac{i - 0.375}{n + 0.25}, x_{(i)})$$

Bem.: Es können auch einige andere Verteilungen verwendet werden.

Q-Q Plot, Übersicht

Eigenschaften der QQ-Kurve	Interpretation
wenige Punkte weg von der Geraden	Ausreißer
linkes Ende unter der Linie	
rechtes Ende über der Linie	lange Tails
linkes Ende über der Linie	
rechtes Ende unter der Linie	kurze Tails
gebogene Kurve, steigender Anstieg	rechtsschief
gebogene Kurve, fallender Anstieg	linksschief
Plateaus und Sprünge	diskrete Daten
	gerundete Daten

Gerade $y = x$	empirische $\approx$ theoretische Verteilung
Gerade $y = ax + b$	nur Lage- oder Skalenunterschied

6.3 Histogramme

PROC GCHART DATA=sasdatei;

VBAR	Variablenliste /Optionen;	/*vertikales Histogramm*/
HBAR	Variablenliste /Optionen;	/*horizontales Histogramm*/
PIE	Variablenliste /Optionen;	/*Kreisdiagramm*/
STAR	Variablenliste /Optionen;	/*Sterndiagramm*/
BLOCK	Variablenliste /Optionen;	/*3 dim. Balkendiagramm*/
VBAR3D	Variablenliste /Optionen;	
HBAR3D	Variablenliste /Optionen;	
PIE3D	Variablenliste /Optionen;	

RUN;

Histogramme, Optionen (1)

VBAR3D, HBAR3D, PIE3D anstelle von VBAR, HBAR, PIE liefern schönere Bilder.

DISCRETE	Zusammenfassung von Ausprägungen wird unterdrückt, d.h. für jeden Wert wird eine Säule erzeugt
LEVELS = anzahl	gewünschte Anzahl Säulen
TYPE = FREQ	Häufigkeiten (Standard)
= PERCENT	Prozente
= CFREQ	kumulative Häufigkeiten
= CPERCENT	kumulative Prozente
= SUM	Summen (nur mit SUMVAR)
SUMVAR = anzahl	Anzahl ist bereits aufsummierte Häufigkeit

Histogramme, Optionen (2)

MIDPOINTS = Mittelpunkte der Balken. Balken haben alle die gleiche Breite!

GROUP= Gruppierungsvariable

SUBGROUP= Gruppierungsvariable, gemeinsame Auswertung

PATTERNID=Musterzuordnung Vergleiche die PATTERN-Anweisung

Descr_Gchart_1a.sas Descr_Gchart_1b.sas Descr_Gchart_3.sas 3a,3b Descr_Gchart_1.sas

Histogramme (Design)

PATTERNxn	**C=**	**V=**
C, COLOR	Farbe: blue,cyan,red,black...	
	black ist Voreinstellung	
V, VALUE	Wert: star,plus point,...	
x	Muster:	
	X_n:	schraffiert
	S_n:	Solid
	R_n:	///
	L_n:	\\\
n	1-5:	Dichte des Musters.

6.4 Dichteschätzung

Histogramme und Dichteschätzung

Auch Prozedur UNIVARIATE liefert Histogramme

PROC UNIVARIATE; HISTOGRAM varname /Optionen; **RUN**;

Sie liefert auch Tabellen von Histogrammen

PROC UNIVARIATE; CLASS Klassenvariablen; HISTOGRAM varname /Optionen; **RUN**;

Descr_Plot_Kuehl.sas Desc_ZweidimHisto_Heroin.sas

Histogramme und Dichteschätzung (Optionen)

CBARLINE=	Farbe des Histogramms
WBARLINE=	Dicke der Histogrammlinien
L=	Linientyp (Standard: 1, solid)
MIDPOINTS=	wie bei GPLOT
KERNEL	Nichtparametrische Dichteschätzung
COLOR=	Farbe der Dichtekurve
NORMAL	Parametrische Dichteschätzung (Normalverteilung)
GAMMA	Parametrische Dichteschätzung (Gammaverteilung)

Parametrische Dichteschätzung

Vorgabe: Modell, z.B. Normalverteilung oder Gammaverteilung

Lediglich die Parameter werden geschätzt.

PROC UNIVARIATE; HISTOGRAM varn / normal gamma; /*Parametrisch*/ HISTOGRAM varn / kernel; /*Nichtparametrisch*/ **RUN**;

Frage: Wie wird geschätzt?

bei Normalverteilung ist das klar: $\overline{X}$ und s^2 sind optimale Schätzungen für μ und σ^2.

Wie findet man (gute) Schätzungen bei anderen Verteilungen? → Abschnitt Schätzmethoden.

SAS berechnet in der Regel Maximum-Likelihood-Schätzungen.

Nichtparametrsiche Dichteschätzung

Überlagerung der Daten mit einer (Dichte-) Funktion

$K(t)$ **eine Kernfunktion,**

$$\begin{aligned} \int K(t)\,dt &= 1, \quad \int tK(t)\,dt = 0, \\ \int t^2K(t)\,dt &= 1, \quad \int K^2(t)\,dt < \infty \end{aligned}$$

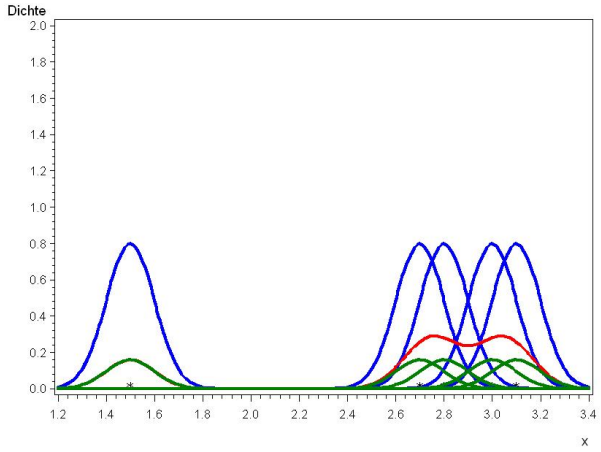
Dichteschätzung oder Dichtefunktionsschätzung.

$$\hat{f}(x) = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\frac{1}{h}K(\frac{x-x_i}{h})$$

$x_1, \ldots, x_n$: die Beobachtungen. h: ein sogenannter Glättungsparameter.

Dichteschätzung

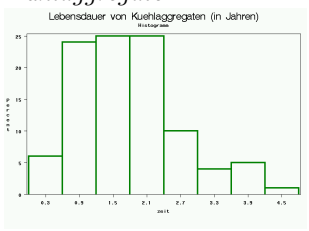
Motivation Kern-Dichteschätzung

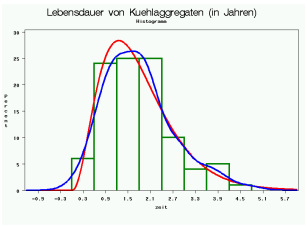


Descr_Dichteschaetzung.sas

Dichteschätzung, Beispiel

Kühlaggregate





Histogramm Parametrische Dichteschätzung (Gamma) Nichtparametrische Dichteschätzung

Dichteschätzung

Wahl des Kernes K

• Normaldichte • Epanechnikov-Kern (minimiert, bei gegebenem h, den IMSE)

Wahl des Glättungsparameters h

Minimiere den Integrated Mean Square Error bzl. h

$$\begin{aligned} IMSE &= \int (\mathbf{E}\hat{f}_h(t) - f(t))^2\,dt + \int \mathrm{var}(\hat{f}_h(t))\,dt \\ &\approx \frac{h^4}{4}\int (f''(t))^2\,dt + \frac{1}{nh}\int K^2(t)\,dt \end{aligned}$$

Frage: Was ist hier f? Das ist doch zu schätzen!

Standard-Annahme hier: f ist normal-Dichte.

7 Beschreibung von Zusammenhängen

7.1 Häufigkeitstabellen

Die Prozedur FREQ

Ein-, zwei- und höherdimensionale Häufigkeiten

Eindimensionale Zufallsvariablen

$$X: \quad \begin{pmatrix} x_0 & x_1 & \cdots & x_n & \cdots \\ p_0 & p_1 & \cdots & p_n & \cdots \end{pmatrix}$$

Die p_i sind zu schätzen:

$$\hat{p_i} = \frac{n_i}{N}$$

N: Stichprobenumfang n_i: absolute Häufigkeiten $\hat{p_i}$: relative Häufigkeiten

PROC FREQ Optionen; TABLES variablenliste /Optionen; **RUN**;

DescrFreqBanknote.sas DescrFreq.sas

Zweidimensionale diskrete Zufallsgrößen

Einführendes Beispiel

3maliges Werfen einer Münze

X: Anzahl von Blatt nach 3 Würfen Y: Anzahl von Blatt nach 2 Würfen

Element von Ω	X	Y
BBB	3	2
BBZ	2	2
BZB	2	1
BZZ	1	1
ZBB	2	1
ZBZ	1	1
ZZB	1	0
ZZZ	0	0

Besetzungswahrscheinlichkeiten

$X\|Y$	0	1	2	
0	$\frac{1}{8}$	0	0	$\frac{1}{8}$
1	$\frac{1}{8}$	$\frac{1}{4}$	0	$\frac{3}{8}$
2	0	$\frac{1}{4}$	$\frac{1}{8}$	$\frac{3}{8}$
3	0	0	$\frac{1}{8}$	$\frac{1}{8}$
	$\frac{1}{4}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{4}$	1

$$X: \quad \begin{pmatrix} 0 & 1 & 2 & 3 \\ \frac{1}{8} & \frac{3}{8} & \frac{3}{8} & \frac{1}{8} \end{pmatrix} \qquad Y: \begin{pmatrix} 0 & 1 & 2 \\ \frac{1}{4} & \frac{1}{2} & \frac{1}{4} \end{pmatrix}$$

Tabelle der zweidimensionalen Wahrscheinlichkeiten

$X\|Y$	y_1	y_2	$\cdots$	y_j	$\cdots$	y_N	
x_1	p_{11}	p_{12}	$\cdots$	p_{1j}	$\cdots$	p_{1N}	$p_{1.}$
x_2	p_{21}	p_{22}	$\cdots$	p_{2j}	$\cdots$	p_{2N}	$p_{2.}$
$\cdots$							
x_i	p_{i1}	p_{i2}	$\cdots$	p_{ij}	$\cdots$	p_{iN}	$p_{i.}$
$\cdots$							
x_M	p_{M1}	p_{M2}	$\cdots$	p_{Mj}	$\cdots$	p_{MN}	$p_{M.}$
	$p_{.1}$	$p_{.2}$	$\cdots$	$p_{.j}$	$\cdots$	$p_{.N}$	1

Zweidimensionale Zufallsvariable

Seien X, Y Zufallsgrößen. Das Paar (X, Y) heißt zweidimensionale Zufallsvariable.
Seien X und Y diskret und (x_i, y_j) die möglichen Ergebnisse von (X, Y), $\quad i = 1, \ldots, M, j = 1, \ldots, N$.

gemeinsame Wahrscheinlichkeitsfunktion von (X, Y)

$$p_{ij} = P(X = x_i, Y = y_j),$$

$$\begin{aligned} p_{ij} &\geq 0 \\ \sum_{i,j} p_{ij} &= 1 \end{aligned}$$

$$p_{i.} := \sum_{j=1}^{N} p_{ij}$$

$$p_{.j} := \sum_{i=1}^{M} p_{ij}$$

X und Y heißen unabhängig, wenn

$$p_{ij} = P(X = x_i, Y = y_j) = P(X = x_i) \cdot P(Y = y_j) = p_{i.} \cdot p_{.j}$$

$p_{i.}$ und $p_{.j}$ heißen Randwahrscheinlichkeiten.

Beispiel: Treiben Sie Sport?
X: 0 - nein 1 - ja

Y: 0 - weiblich 1 - männlich

X | Y	0	1	
0	p_{00}	p_{01}	$p_{0.}$
1	p_{10}	p_{11}	$p_{1.}$
	$p_{.0}$	$p_{.1}$	

p_{ij}: unbekannt!

Frage: Ist das Sportverhalten von Männern und Frauen unterschiedlich? Hängt das Sportverhalten vom Geschlecht ab?

Befragung liefert Häufigkeiten für die einzelnen Felder. Anhand dieser Häufigkeiten werden die Wahrscheinlichkeiten geschätzt!

Die Tabelle der Häufigkeiten heißt Kontingenztafel

X | Y	0	1	# der beobachteten	
0	n_{00}	n_{01}	$n_{0.}$	Nichtsportler
1	n_{10}	n_{11}	$n_{1.}$	Sportler
	$n_{.0}$	$n_{.1}$		
	# der befragten			
	Frauen	Männer		

$$p_{ij} \approx \frac{n_{ij}}{n} = \hat{p}_{ij}$$

Zweidimensionale diskrete Zufallsgrößen

Häufigkeitstabellen in SAS

PROC FREQ Optionen; TABLES variablenliste /Optionen; TABLES vliste1*vliste2 /Optionen; TABLES vliste1*vliste2*varliste3;**RUN**;

Option im Prozedur-Step

ORDER=schlüsselwort, z.B. ORDER=FREQ wenn die Ausgabe nach Häufigkeiten geordnet.

Optionen der TABLES-Anweisung

MISSING: fehlende Werte werden bei der Berechnung relativer Häufigkeiten mit einbezogen.

OUT=sasfile: Ausgabe der Tabelle in ein SAS-File

Optionen der TABLES-Anweisung

nur für mehrdimensionale Tabellen

CHISQ:	χ^2-Unabhängigkeitstest
CMH:	u.a. Odds Ratio
MEASURES:	Assozitionsmaße, Korrelationskoeffizient
NO...	keine Ausgabe von:
NOFREQ:	absoluten Häufigkeiten
NOPERCENT:	relativen Häufigkeiten
NOROW:	Zeilenhäufigkeiten
NOCOL:	Spaltenhäufigkeiten

Assoziationsmaße

nur für zweidimensionale Tabellen

χ^2

$$\chi^2 = \sum_{i,j} \frac{(p_{ij} - p_{i.}p_{.j})^2}{p_{i.}p_{.j}}$$

Φ-Koeffizient für 2x2 Tafeln

$$\Phi^2 = \frac{(p_{11}p_{22} - p_{12}p_{21})^2}{p_{1.}p_{2.}p_{.1}p_{.2}}$$

Odds Ratio für 2x2 Tafeln

$$OR = \frac{p_{11}p_{22}}{p_{12}p_{21}}$$

Schätzung: Ersetzen der Wahrscheinlichkeiten durch die jeweiligen relativen Häufigkeiten.

Beispiel: Mendelsche Kreuzungsversuche

DATA Erbsen; INPUT rund gruen Anzahl; CARDS;

```
0 0 101
0 1  32
1 0 315
1 1 108
```

;

RUN; **PROC FREQ**; WEIGHT Anzahl; TABLES rund*gruen \ chisq cmh; **RUN**;

$\chi^2 = 0.1163$ Φ-Koeffizient=0.0145.

7.2 Scatterplots, Zusammenhangsmaße

Erinnerung: Varianz der Zufallsvariablen X

$$\begin{aligned} var(X) &= \mathbf{E}(X - \mathbf{E}X)^2 \\ &= \mathbf{E}[(X - \mathbf{E}X)(X - \mathbf{E}X)] \end{aligned}$$

Kovarianz der Zufallsvariablen X und Y

$$\begin{aligned} Cov(X,Y) &= \mathbf{E}[(X - \mathbf{E}X)(Y - \mathbf{E}Y)] \\ &= \mathbf{E}(XY) - \mathbf{E}(X)\mathbf{E}(Y) \end{aligned}$$

Korrelation der Zufallsvariablen X und Y

$$Corr(X,Y) = \frac{\mathbf{E}[(X - \mathbf{E}X)(Y - \mathbf{E}Y)]}{\sqrt{var(X) \cdot var(Y)}}$$

Zusammenhangsmaße (2)

Erinnerung: empirische Varianz

$$s_X^2 = \frac{1}{n-1}\sum_{i=1}^{n}(x_i - \overline{X})(x_i - \overline{X})$$

empirische Kovarianz

$$s_{XY} = \frac{1}{n-1}\sum_{i=1}^{n}(x_i - \overline{X})(y_i - \overline{Y})$$

empirische Korrelation, Pearson-Korrelationskoeffizient

$$r_{XY} := \frac{s_{XY}}{s_X s_Y}$$

Pearson-Korrelationskoeffizient, Eigenschaften

- Es gilt stets:
$$-1 \leq r_{XY} \leq 1.$$
- Der Korrelationskoeffizient ist invariant gegenüber linearen Transformationen
$$x \longrightarrow a + bx$$
- $|r_{XY}| = 1$ gdw. alle Punkte auf einer Geraden liegen, $y = mx + b, m \neq 0$ $r_{XY} = 1 \rightarrow$ Anstieg > 0
  $r_{XY} = -1 \rightarrow$ Anstieg < 0

Pearson-Korrelationskoeffizient

- Der Pearson-Korrelationskoeffizient ist also ein Maß für die lineare Abhängigkeit von X und Y.
- $r_{XY} \approx 0 \longrightarrow$ keine lineare Beziehung zwischen X und Y erkennbar, aber es sind durchaus andere Abhängigkeiten möglich!
- Der Pearson-Korrelationskoeffizient ist nicht robust gegen Ausreißer (siehe Übung)

Realisierung in SAS:
PROC CORR PEARSON; VAR X Y; **RUN**;

Spearman-Korrelationskoeffizient

Spearman-Rangkorrelationskoeffizient
$$r_S = \frac{\sum_{i=1}^{n}(R_i - \overline{R})(S_i - \overline{S})}{\sqrt{\sum_i (R_i - \overline{R})^2 \sum_i (S_i - \overline{S})^2}}$$

R_i: Rang von X_i in der geordneten Stichprobe $X_{(1)} \leq ... \leq X_{(n)}$
S_i: Rang von Y_i in der geordneten Stichprobe $Y_{(1)} \leq ... \leq Y_{(n)}$

PROC CORR SPEARMAN; VAR X Y; **RUN**;

Spearman-Korrelationskoeffizient

$$\begin{aligned} r_S &= \frac{\sum_{i=1}^{n}(R_i - \overline{R})(S_i - \overline{S})}{\sqrt{\sum_{i=1}^{n}(R_i - \overline{R})^2 \sum_{i=1}^{n}(S_i - \overline{S})^2}} \\ &= \frac{\sum_{i=1}^{n}(R_i - \frac{n+1}{2})(S_i - \frac{n+1}{2})}{\sqrt{\sum_{i=1}^{n}(R_i - \overline{R})^2 \sum_{i=1}^{n}(S_i - \overline{S})^2}} \\ &= 1 - \frac{6 \cdot \sum_{i=1}^{n}(R_i - S_i)^2}{n \cdot (n^2 - 1)} \end{aligned}$$

$$-1 \leq r_S \leq +1$$

$|r_S| = 1$ gdw. X_i, Y_i in gleicher oder entgegengesetzter Weise geordnet sind!

Spearman-Korrelationskoeffizient

Beweis der letzten Formel (1)

$$r_S = \frac{\sum_{i=1}^{n}(R_i - \overline{R})(S_i - \overline{S})}{\sqrt{\sum_{i=1}^{n}(R_i - \overline{R})^2 \sum_{i=1}^{n}(S_i - \overline{S})^2}}$$

Nenner:

$$\sum_{i=1}^{n}(R_i - \overline{R})^2 = \sum_{i=1}^{n}(S_i - \overline{S})^2 = \sum_{i=1}^{n}(i - \frac{n+1}{2})^2$$

$$\begin{aligned} &= \sum i^2 - 2 \cdot \frac{n+1}{2} \sum i + n \cdot (\frac{n+1}{2})^2 \\ &= \frac{n \cdot (n+1) \cdot (2n+1)}{6} - \frac{n \cdot (n+1)^2}{2} + \frac{n \cdot (n+1)^2}{4} \\ &= \frac{n \cdot (n+1)}{12} \cdot [2 \cdot (2n+1) - 3 \cdot (n+1)] \\ &= \frac{(n-1) \cdot n \cdot (n+1)}{12} = \frac{n \cdot (n^2-1)}{12} \end{aligned}$$

Spearman-Korrelationskoeffizient

Beweis der letzten Formel (2)

Zähler:

$$\sum_{i=1}^{n}(R_i - \overline{R})(S_i - \overline{S}) = \sum_{i=1}^{n}(R_i - \frac{n+1}{2})(S_i - \frac{n+1}{2})$$

$$= \sum_{i=1}^{n} R_i S_i - 2 \cdot \frac{n+1}{2} \sum_{i=1}^{n} R_i + n \cdot (\frac{n+1}{2})^2$$

$$= \sum_{i=1}^{n} R_i S_i - \frac{n \cdot (n+1)^2}{4}$$

Damit erhalten wir eine weitere Darstellung für r_S:

$$r_S = 12 \cdot \frac{\sum_{i=1}^{n} R_i S_i - \frac{n \cdot (n+1)^2}{4}}{(n-1) \cdot n \cdot (n+1)}$$

Spearman-Korrelationskoeffizient

Andere Darstellung für den Zähler

Setzen: $d_i := R_i - S_i = (R_i - \frac{n+1}{2}) + (\frac{n+1}{2} - S_i)$

$$\begin{aligned} \sum d_i^2 &= \sum (R_i - \frac{n+1}{2})^2 + \sum (S_i - \frac{n+1}{2})^2 \\ &\quad -2 \sum (R_i - \frac{n+1}{2})(S_i - \frac{n+1}{2}) \\ &= \frac{(n-1)n(n+1)}{12} + \frac{(n-1)n(n+1)}{12} \\ &\quad -2 \cdot r_S \cdot \frac{(n-1)n(n+1)}{12} \\ &= \frac{(n-1)n(n+1)}{6}(1 - r_S) \\ r_S &= 1 - \frac{6 \sum d_i^2}{(n-1)n(n+1)} \end{aligned}$$

Spearman-Korrelationskoeffizient

Drei Darstellungen

$$\begin{aligned} r_S &= \frac{\sum_{i=1}^{n}(R_i - \overline{R})(S_i - \overline{S})}{\sqrt{\sum_i (R_i - \overline{R})^2 \sum_i (S_i - \overline{S})^2}} \\ &= 12 \cdot \frac{\sum_{i=1}^{n} R_i S_i - \frac{n\cdot(n+1)^2}{4}}{(n-1)n(n+1)} \\ &= 1 - \frac{6\sum(R_i - S_i)^2}{(n-1)n(n+1)} \end{aligned}$$

Bem.: Es gilt:

a) $-1 \leq r_S \leq 1$

b) $r_S = 1 \Leftrightarrow R_i = S_i \quad \forall i = 1, \ldots, n$

c) $r_S = -1 \Leftrightarrow R_i = n + 1 - S_i \quad \forall i = 1, \ldots, n$

Vergleich der Korrelationskoeffizienten

Pearson - Spearman

Vorteile Spearman

- es genügt ordinales Meßniveau
- leicht zu berechnen
- r_S ist invariant gegenüber monotonen Transformationen
- gute Interpretation, wenn $r_S \approx -1, 0, 1$ (wie bei Pearson)
- eignet sich als Teststatistik für einen Test auf Unabhängigkeit
- ist robust gegen Abweichungen von der Normalverteilung.

Vergleich der Korrelationskoeffizienten

Pearson - Spearman

Nachteile Spearman

- wenn kardinales (stetiges) Meßniveau $\longrightarrow$ evtl. (geringer) Informationsverlust
- schwierige Interpretation, wenn r_S nicht nahe 0, 1, oder -1 (gilt eingeschränkt auch für Pearson)

Kendalls τ (Konkordanzkoeffizient)

$(X_i, Y_i), i = 1, ..., n$

$$\begin{aligned} a_{ij} &= \begin{cases} 1, \text{ falls } x_i < x_j \wedge y_i < y_j \text{ oder} \\ \qquad\qquad x_i > x_j \wedge y_i > y_j \\ -1, \text{ falls } x_i < x_j \wedge y_i > y_j \text{ oder} \\ \qquad\qquad x_i > x_j \wedge y_i < y_j \\ 0, \text{ sonst} \end{cases} \\ &= sgn[(x_i - x_j)(y_i - y_j)] \end{aligned}$$

Falls $a_{ij} = 1$ so heißen die Punktepaare $(x_i, y_i), (x_j, y_j)$ konkordant Falls $a_{ij} = -1$ so heißen sie diskordant Falls $a_{ij} = 0$ so heißen sie gebunden

Kendalls τ (Konkordanzkoeffizient)

$$\begin{aligned}\tau &= \frac{2 \cdot \sum_{i<j} a_{ij}}{N \cdot (N-1)} = \frac{1}{\binom{N}{2}} \cdot \sum_{i<j} a_{ij} \\ &= \frac{\sharp \text{ konkordanter Paare - } \sharp \text{ diskordanter Paare}}{\binom{N}{2}}\end{aligned}$$

Bem.: einfache Berechnung, wenn neue Paare hinzukommen

Bem.: Es gilt, falls X, Y stetig: $-1 \leq 3\tau - 2r_S \leq 1$.

$$\text{Approximation:} \quad \tau_{appr.} = \frac{2}{3}\frac{N+1}{N} r_S$$

PROC CORR KENDALL; VAR X Y; **RUN**;

Behandlung von Bindungen

Spearman: Ränge werden gemittelt

Kendall: bei SAS wird der Nenner modifiziert

$$r_K = \frac{\sharp \text{ konkordanter Paare - } \sharp \text{ diskordanter Paare}}{\sqrt{(\binom{N}{2} - T_1)(\binom{N}{2} - T_2)}},$$

wobei

$$T_1 = \frac{1}{2}\sum_{j=1}^{k_1} t_j(t_j - 1), \qquad T_2 = \frac{1}{2}\sum_{j=1}^{k_2} u_j(u_j - 1)$$

und t_j und u_j die jeweiligen Häufigkeiten des Auftretens der verschiedenen Werte von X bzw. Y sind. Wenn also keine Bindungen auftreten, dann sind alle $t_j = 1$ und alle $u_j = 1$, also $T_1 = T_2 = 0$.

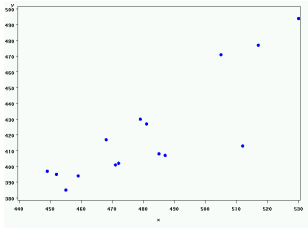
7.3 Das Regressionsproblem

Scatterplot

Zweidimensionale Stichproben können als Punkte in der Ebene dargestellt werden

Länge und Breite von Venusmuscheln

PROC GPLOT; PLOT y*x; **RUN**;



Descr_Scatter.sas Descr_Scatter1.sas

Das Regressionsproblem

X, Y: Zufallsvariablen (auch mehrdimensional)

Modell:

$$Y = f(X, \underbrace{\theta_1, ..., \theta_p}_{\text{Parameter}}) + \underbrace{\epsilon}_{\text{zufälliger Fehler}}, \qquad \epsilon \sim (0, \sigma^2).$$

f linear, bekannt bis auf Parameter: lineare Regression f nichtlinear, bekannt bis auf Parameter: nichtlineare Regression f unbekannt: nichtparametrische Regression

Regression

f bekannt (bis auf Parameter)

Aufgabe:

$$min_{\theta_1,...,\theta_p}\mathbf{E}(Y - f(\mathbf{X}, \theta_1, ..., \theta_p))^2$$

Parameter $\theta_1, \ldots, \theta_p$: unbekannt.

Beobachtungen: $(Y_i, \mathbf{X}_i)$.

Erwartungswert durch arithmetisches Mittel ersetzen

$$min_{\theta_1,...,\theta_p}\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(Y_i - f(\mathbf{X}_i, \theta_1, ..., \theta_p))^2$$

Kleinste Quadrat-Schätzung für $\theta_1, ..., \theta_p$ (KQS) Least-Squares-Estimation (LSE)

Regression

f bekannt (bis auf Parameter)

Lösung des Minimum-Problems

$$min_{\theta_1,...,\theta_p}\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(Y_i - f(\mathbf{X}_i, \theta_1, ..., \theta_p))^2$$

zu minimierende Funktion nach den Parametern differenzieren und Null setzen:

$$\frac{2}{n}\cdot\sum_{i=1}^{n}(Y_i - f(\mathbf{X}_i, \theta_1, ..., \theta_p))\cdot\frac{\partial f(\mathbf{X}_i, \theta_1, ..., \theta_p)}{\partial\theta_j} = 0$$

$j = 1, ..., p, \Rightarrow$ Gleichungssystem mit p Gleichungen.

Regression

f linear: lineares Gleichungssystem (1)

$f(X, \theta_1, \theta_2) = \theta_1 X + \theta_2$

$$\frac{\partial f}{\partial\theta_1} = X \qquad \frac{\partial f}{\partial\theta_2} = 1$$

$$\begin{aligned}\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(Y_i - (\theta_1 X_i + \theta_2))\cdot X_i &= 0\\ \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(Y_i - (\theta_1 X_i + \theta_2))\cdot 1 &= 0\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\sum_i X_i Y_i - \theta_1\sum_i X_i^2 - \theta_2\sum_i X_i &= 0\\ \sum_i Y_i - \theta_1\sum_i X_i - \theta_2\cdot n &= 0\end{aligned}$$

Regression

f linear: lineares Gleichungssystem (2)

Die zweite Gleichung nach θ_2 auflösen:

$$\theta_2 = \frac{1}{n}\sum_i Y_i - \theta_1 \frac{1}{n}\sum_i X_i$$

und in die erste einsetzen:

$$\sum_i X_i Y_i - \theta_1 \sum_i X_i^2 - \frac{1}{n}\sum_i Y_i \sum_i X_i + \theta_1 \frac{1}{n}\sum_i X_i \sum_i X_i = 0$$

$$\sum_i X_i Y_i - \frac{1}{n}\sum_i Y_i \sum_i X_i - \theta_1\big((\sum_i X_i^2 - \frac{1}{n}\sum_i X_i \sum_i X_i\big) = 0$$

$\Rightarrow$

$$\hat{\theta}_1 = \frac{\sum_i X_i Y_i - \frac{1}{n}\sum_i X_i \sum_i Y_i}{\sum_i X_i^2 - \frac{1}{n}(\sum_i X_i)^2} = \frac{S_{XY}}{S_X^2}, \hat{\theta}_2 = \frac{1}{n}\big(\sum_i Y_i - \hat{\theta}_1 \sum_i X_i\big)$$

Regression

Zähler und Nenner in $\hat{\theta}_1$

$$\begin{aligned}
S_{XY} &= \frac{1}{n-1}\sum_i (X_i - \overline{X})(Y_i - \overline{Y}) \\
&= \frac{1}{n-1}\big(\sum_i X_i Y_i - \overline{X}\sum_i Y_i - \overline{Y}\sum_i X_i + n\overline{XY}\big) \\
&= \frac{1}{n-1}\big(\sum_i X_i Y_i - n\overline{XY} - n\overline{XY} + n\overline{XY}\big) \\
&= \frac{1}{n-1}\big(\sum_i X_i Y_i - n\overline{XY}\big) \\
&= \frac{1}{n-1}\big(\sum_i X_i Y_i - \frac{1}{n}\sum_i X_i \sum_i Y_i\big) \\
S_{X^2} &= \frac{1}{n-1}\big(\sum_i X_i X_i - \frac{1}{n}\sum_i X_i \sum_i X_i\big)
\end{aligned}$$

Spezialfall $f(X, \theta) = \theta$ (konstant)

$$Y_i = \theta + \epsilon_i, \quad \epsilon_i \sim (0, \sigma^2)$$

Minimierungsaufgabe:

$$\min_\theta\big(\sum_{i=1}^n (Y_i - \theta)^2\big)$$

Lösung:

$$2\sum_{i=1}^n (Y_i - \theta) = 0 \qquad \sum_{i=1}^n Y_i - n\theta = 0$$

$$\hat{\theta} = \frac{1}{n}\sum Y_i = \overline{Y}$$

D.h. $\overline{Y}$ ist auch KQS.

Spezialfall $f(X,\theta)=\theta$
Schätzung des Schätzfehlers

$$\sigma^2_{Y_i}=\sigma^2_{\theta+\epsilon_i}=\sigma^2_{\epsilon_i}=\sigma^2.$$

Schätzfehler:

$$\begin{aligned}\sigma^2_{\hat\theta} &= var(\hat\theta)=var(\frac{1}{n}\cdot\sum Y_i)=\frac{1}{n^2}\cdot n\cdot varY_i\\ &= \frac{1}{n}\cdot\sigma^2 \qquad \to_{n\to\infty}\quad 0\\ \hat\sigma^2_{\hat\theta} &= \frac{\hat\sigma^2}{n}\end{aligned}$$

Lineare und Nichtlineare Regression

f: linear, $f(X,\theta_1,\theta_2)=\theta_1X+\theta_2$
θ_1 und θ_2 werden geschätzt.

Descr_Scatter_1.sas Descr_Scatter_Heroin.sas

f: nichtlinear, z.B. $f(X,\theta_1,\theta_2)=ln(\theta_1X+\theta_2)$
a) Lösung des nichtlinearen Gleichungssystems

b) wird auf den linearen Fall zurückgeführt, z.B.

$$\begin{aligned}Y &= \ln(\theta_1X+\theta_2)+\epsilon\\ e^Y &= \theta_1X+\theta_2+\widetilde{\epsilon}\end{aligned}$$

Modelle sind aber i.A. nicht äquivalent!

Weitere nichtlineare Regressionsfunktionen
Auswahl

$$\begin{aligned}f(t) &= a+bt+ct^2 && \text{Parabel}\\ f(t) &= at^b && \text{Potenzfunktion}\\ f(t) &= ae^t && \text{Exponentialfunktion}\\ f(t) &= k-ae^{-t}\\ f(t) &= \frac{k}{1+be^{-ct}} && \text{logistische Funktion}\\ \ln f(t) &= k-\frac{a}{b+t} && \text{Johnson-Funktion}\\ \ln f(t) &= k-\lambda e^{-t} && \text{Gompertz-Funktion}\end{aligned}$$

Nichtparametrische Regression

f unbekannt, aber "glatt"

Sei f 2x stetig differenzierbar, $f \in C_2$, $\lambda \geq 0$

$$\text{Ziel:} \qquad \min_{f \in C_2} \left(\sum_{i=1}^{n} (Y_i - f(X_i))^2 + \lambda \cdot \int \left(f''(x) \right)^2 dx \right)$$

Lösung: Glättender Kubischer Spline.

PROC GPLOT Descr_Scatter.sas

SYMBOL I=SMnnS;

SM:	Smoothing Spline
nn:	Glättungsparameter nn=00: Interpolierender Spline nn=99: Gerade
S:	Punktepaare werden vor der Auswertung nach dem Argument sortiert.

Nichtparametrische Regression

Kernschätzung, Motivation, wird in SAS nicht mehr angeboten, s.u.

K: Kernfunktion, standardisierte Dichte (z.B. Normal, Epanechnikov-Kern).

Regressionsmodell:

$$\begin{aligned} Y &= f(X) + \epsilon, \quad \epsilon \sim (0, \sigma^2) \quad \text{also} \\ \mathbf{E}(Y|X = x) &= f(x) \\ f(x) &= \mathbf{E}(Y|X = x) = \int y f_{Y|X}(y|x)\, dy \\ &= \int y \frac{g(x,y)}{f_0(x)}\, dy = \frac{\int y g(x,y) dy}{f_0(x)} \end{aligned}$$

Regression, Kernschätzung

$$f(x) = \frac{\int y g(x,y) dy}{f_0(x)}$$

$g(x,y)$:	gemeinsame Dichte von (X, Y)
$f_0(x)$:	Randdichte von X
$f_{Y\|X}$:	bedingte Dichte von Y unter Bedingung X

Der Nenner wird geschätzt durch

$$\hat{f}_0(x) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} \frac{1}{h} \cdot K(\frac{x - x_i}{h})$$

und der Zähler durch

$$\frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} y_i \hat{g}(x_i, y_i) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} y_i \cdot \frac{1}{h} \cdot K(\frac{x - x_i}{h})$$

Regression

Kernschätzung

Beide zusammen ergeben die

Kernschätzung

$$\hat{f}(x) = \frac{\sum_{i=1}^{n} y_i \cdot \frac{1}{h} \cdot K(\frac{x - x_i}{h})}{\sum_{i=1}^{n} \frac{1}{h} \cdot K(\frac{x - x_i}{h})}$$

K: Kernfunktion h: Glättungsparameter

Bem. Diese (feste) Kernschätzung hat einen Bias, insbesondere an den Rändern. Deshalb nimmt man *variable* Kernschätzungen, oder was sehr ähnlich ist, sogen. LOESS (local weighted scatterplot smoothing): in SAS: **proc loess**

Zeichnen von Funktionen mit der Prozedur GPLOT, Die SYMBOL-Anweisung

SYMBOLnr I= (I steht für INTERPOL)

I=needle	Nadelplot	diskrete Wktn.
I=spline	interpolierender Spline	glatte Kurven
I=SMnnS	glättender Spline	glatte Kurven
	nn: Glättungsparameter	
	S: Daten müssen vorher nach dem x-Merkmal sortiert sein	
I=RL	Regressionsgerade	
I=RQ	quadratische Regressionskurve	
I=RC	kubische Regressionskurve	
I=RLCLI	Konfidenzbereiche für Beobachtungen	
I=RLCLM	Konfidenzbereiche für Regressionsgerade	

Beschreibende Statistik

Zusammenfassung (1)

Verteilungsfunktion

$$F(x) = P(X \leq x)$$

diskrete Verteilung

$$F(x) = \sum_{i:x_i \leq x} p_i \qquad p_i = P(X = x_i)$$

stetige Verteilung

$$F(x) = \int_{-\infty}^{x} f(t)dt, \qquad f(t): \text{ Dichte.}$$

Bsp:	diskrete Verteilung:	Binomial, Poisson
	stetige Verteilung:	Normal, Gleich, Exponential

Beschreibende Statistik

Zusammenfassung (2)

Erwartungswert

$$\mathbf{E}(X) = \begin{cases} \sum x_i p_i & X \text{ diskret} \\ \int x f(x)dx & X \text{ stetig} \end{cases}$$

Varianz

$$var(X) = \mathbf{E}(X - \mathbf{E}X)^2$$

Normalverteilung, Dichte

$$\begin{aligned} f(x) &= \frac{1}{\sqrt{2 \cdot \pi}} \cdot e^{-\frac{x^2}{2}} \quad \text{Standard} \\ f_{\mu,\sigma}(x) &= \frac{1}{\sqrt{2 \cdot \pi} \cdot \sigma} \cdot e^{-\frac{1}{2}(\frac{x-\mu}{\sigma})^2} \end{aligned}$$

Beschreibende Statistik

Zusammenfassung (3)

Gesetz der Großen Zahlen ($\mathbf{E}(X) < \infty$)

$$\overline{X} \longrightarrow \mathbf{E}X, \qquad \overline{X} = \frac{1}{n}\sum X_i$$

Zentraler Grenzwertsatz (X_i iid)

$$\sqrt{n} \cdot \frac{\overline{X} - \mu}{\sigma} \longrightarrow Z \sim \mathcal{N}(0,1)$$

$$\sqrt{n} \cdot \frac{\overline{X} - \mu}{s} \longrightarrow Z \sim \mathcal{N}(0,1)$$

$$s^2 = \frac{1}{n-1}\sum (X_i - \overline{X})^2 \to \sigma^2$$

ZGWS.sas

Beschreibende Statistik

Zusammenfassung (4)

Statistische Maßzahlen

Lagemaße: $\overline{X}, x_{0.5}, x_\alpha, x_{0.25}, x_{0.75}, \overline{x}_\alpha, \overline{x}_{\alpha,w}$

Skalenmaße: s^2, s, R, IR, MAD, Gini, S_n, Q_n

Formmaße: β_1, β_2

PROC UNIVARIATE

PROC UNIVARIATE ROBUSTSCALE

PROC UNIVARIATE TRIMMED=

PROC UNIVARIATE WINSORIZED=

PROC MEANS MEDIAN STD

PROC CAPABILITY

ODS SELECT ROBUSTSCALE TRIMMEDMEANS
WINSORIZEDMEANS

Beschreibende Statistik

Zusammenfassung (5)

Boxplots	**PROC BOXPLOT**
	PROC GPLOT
Häufigkeitsdiagramme	**PROC GCHART**
	PROC UNIVARIATE
	HISTOGRAM
Häufigkeitstabellen:	**PROC FREQ**
Zusammenhangsmaße:	**PROC CORR**

Pearson, Spearman, Kendall-Korrelationskoeffizient

Scatterplots, Regression

Schätzung der Regressionskoeffizienten:	**PROC GPLOT**
	PROC REG

8 Statistische Tests

8.1 Statistische Tests: Einführung und Übersicht

Sei X ein Merkmal (eine Zufallsvariable), $F_X(x) = P(X \leq x) = P_\theta(X \leq x) = F_{X,\theta}(x)$ θ: Parametervektor

Beispiel: $\theta = (\mu, \sigma^2)$
μ: Erwartungswert von X σ^2: Varianz von X

$X_1, X_2, ..., X_n$ **Beobachtungen von** X
$\mu \approx \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} X_i = \overline{X}$ $\sigma^2 \approx \frac{1}{n-1}\sum_{i=1}^{n}(X_i - \overline{X})^2 = s^2$

D.h. die unbekannten Parameter werden geschätzt.

Statistische Tests: Einführung

Problem
Schätzungen können sehr schlecht ausfallen!

I.a. vertritt der Fachexperte gewisse Hypothesen bzgl. der (unbekannten) Parameterwerte!

Hypothesenpaar: Nullhypothese-Alternativhypothese

Die Nullypothesen werden verworfen, wenn die erhaltenen Schätzwerte (z.B. $\overline{X}, s^2$) mit ihnen nicht in Einklang stehen.

Statistische Tests: Einführungsbeispiele

- Einstichprobenproblem, einfache Alternative $H_0 : \mu = \mu_0$ $H_1 : \mu = \mu_1, \quad (\mu_1 \neq \mu_0)$
- Einstichprobenproblem, zusammengesetzte (zweiseitige) Alternative $H_0 : \mu = \mu_0$ $H_1 : \mu \neq \mu_0$
- Einstichprobenproblem, zusammengesetzte (einseitige) Alternative $H_0 : \mu = \mu_0$ $H_1 : \mu > \mu_0$
- Zweistichprobenproblem, einfache Alternative $H_0 : \mu_1 = \mu_2$ $H_1 : \mu_1 = \mu_2 + \theta, \quad (\theta > 0$, fest)
- Zweistichprobenproblem, zusammengesetzte (zweiseitige) Alternative $H_0 : \mu_1 = \mu_2$ $H_1 : \mu_1 \neq \mu_2,$

Statistische Tests: Eine verwandte Problemstellung

Elektronischer Großhandel: TV-Geräte
Händler sagt: Ausschußquote $p \leq 1\%$ ($p = 0.01$) Käufer wäre einverstanden, prüft aber N Geräte! Davon: N_f fehlerhaft, N_f: Teststatistik

$$\frac{N_f}{N} \cdot 100\% \gg 1\% \Rightarrow \text{ Ablehnung}$$

Zwei Fehler möglich

a) Zufällig N_f zu groß! $p < 0.01$ $\Rightarrow$ Käufer lehnt ab

b) Zufällig N_f zu klein! p groß, $p \gg 0.01$ $\Rightarrow$ Käufer kauft

Statistische Tests: Risiken - Fehler

Risiko des Händlers

Käufer lehnt gute Ware ab (weil N_f zufällig zu groß)

Risiko des Käufers

Käufer kauft schlechte Ware (weil N_f zufällig zu klein)

Risiken sollen quantifiziert werden:

a) $P($ Nicht kaufen $\mid p \leq 1\%)$ b) $P($ Kaufen $\mid p > 1\%)$

Beide Risiken nicht gleichzeitig zu minimieren.

Lösung:

$P($ Nicht kaufen $\mid p \leq 1\%) = \alpha$ vorgeben $P($ Kaufen $\mid p > 1\%)$ minimieren (oder es versuchen)

Hypothesentest

Beispiel: Einstichproben-Lagetest
Sei μ ein Lageparameter, z.B. der Erwartungswert. Sei μ_0 ein vorgegebener Wert.

Nullhypothese und Alternativhypothese

a) $H_0: \quad \mu \leq \mu_0 \qquad H_A: \mu > \mu_0$

b) $H_0: \quad \mu \geq \mu_0 \qquad H_A: \mu < \mu_0$

c) $H_0: \quad \mu = \mu_0 \qquad H_A: \mu \neq \mu_0$

Teststatistik, Testgröße, Prüfgröße, Stichprobenfunktion

$$T = T(X_1, ..., X_n) = \frac{\overline{X} - \mu_0}{s} \cdot \sqrt{n}$$

Hypothesentest, allgemein

Die Entscheidung für H_A oder für H_0 wird anhand einer Teststatistik

$$T = T(x_1, ..., x_n)$$

gefällt.

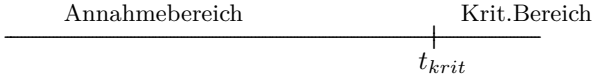
Liegt der Wert von T in einem vorher bestimmten Bereich K, dem sogen. Ablehnungsbereich oder kritischen Bereich, dann wird H_0 abgelehnt, anderenfalls wird H_0 nicht abgelehnt.

$T \in K \Rightarrow H_0$ ablehnen, Entscheidung für H_A $T \notin K \Rightarrow H_0$ nicht ablehnen, Entscheidung für H_0.

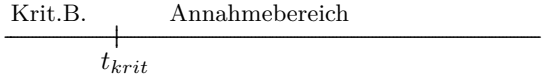
$$\phi(x_1, ..., x_n) = \begin{cases} 1 & \text{falls} \quad T \in K \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$$

Hypothesentest, Annahme- und Ablehnungsbereich

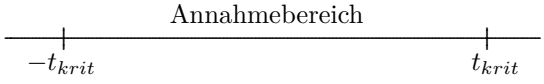
- a) $H_0: \quad \mu \leq \mu_0 \qquad H_A: \mu > \mu_0$ große Werte von T sprechen für H_A.



- b) $H_0 \quad \mu \geq \mu_0 \qquad H_A: \quad \mu < \mu_0$ kleine Werte von T sprechen für H_A.



- c) $H_0: \quad \mu = \mu_0 \qquad H_A: \quad \mu \neq \mu_0$ große Werte von $|T|$ sprechen für H_A.



Hypothesentest, Fehler 1. Art, Fehler 2. Art

Fehler 1.Art

Entscheidung für H_A obwohl H_0 richtig ist.

Fehler 2.Art

Entscheidung für H_0 obwohl H_A richtig ist

	Entscheidung für H_0	Entscheidung für H_A
H_0 richtig	richtig, Sicherheitswkt. $1-\alpha$	Fehler 1. Art Fehlerwkt. α.
H_A richtig	Fehler 2.Art Fehlerwkt. 1-β	richtig, Güte β

Entscheidung für H_0 heißt nicht notwendig, dass H_0 richtig ist.

Hypothesentest, Fehler 1. Art, Fehler 2. Art

α **und** $(1-\beta)$ **können nicht gleichzeitig minimiert werden.**

$\Rightarrow$ Man gibt α vor (z.B. $\alpha = 0.05$), d.h. man behält α unter Kontrolle und versucht die Teststatistik so zu definieren, daß β maximal wird.

β (und manchmal auch α) hängen von wahren (i.A. unbekannten) Parametern ab.

Signifikanzniveau

$$\alpha = \sup_{\theta \in \mathbf{\Theta}_0} \beta(\theta).$$

$\mathbf{\Theta}_0$: Nullhypothesenraum, also z.B. die Menge $\{\mu : \mu \geq \mu_0\}$ oder $\{\mu : \mu = \mu_0\}$.

Gütefunktion

$$\beta = \beta(\theta) = \beta(\mu) = P_\mu(T \in K)$$

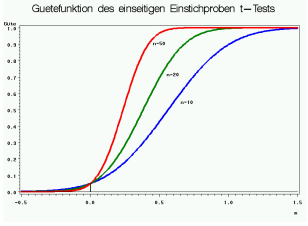
K heißt Ablehnungsbereich oder Kritischer Bereich.

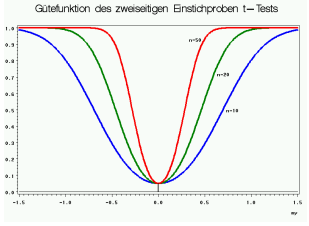
Beispiel: t-Test

$\beta(\mu) = P(T \in K)$ K: kritischer Bereich $= P(T > t_{1-\alpha,n-1}|\mu,\sigma^2)$ $= 1 - CDF('T', t_{1-\alpha,n-1}, n-1, nc)$

$nc = \sqrt{n}\frac{\mu-\mu_0}{\sigma}$:	Nichtzentralitätsparameter
$t_{1-\alpha,n-1}$:	kritischer Wert
$K = [t_{1-\alpha,n-1}, \infty)$:	kritischer Bereich.

Gütefunktion

Einseitiger Test 

Zweiseitiger Test 

Test_Guete_t.sas Test_Guete_t2.sas

Gütefunktion

Ideal:

Unter H_0: Güte 0 (d.h. Fehler 1. Art =0) Unter H_A: Güte 1 (d.h. Fehler 2. Art =0)

Das ist aber nicht möglich!

Ziel:

Test mit möglichst großer Gütefunktion (unter H_A).

Wir schlagen natürlich nur solche "sinnvollen" Tests vor.

Lagetests (bei Normalverteilungsannahme, 1)

Einstichprobenproblem

$H_0 : \mu \leq \mu_0$	$H_A : \mu > \mu_0$	Einstichproben t-Test
$H_0 : \mu \geq \mu_0$	$H_A : \mu < \mu_0$	**PROC UNIVARIATE**
$H_0 : \mu = \mu_0$	$H_A : \mu \neq \mu_0$	**PROC TTEST**

Zweistichprobenproblem

$H_0 : \mu_1 \leq \mu_2$	$H_A : \mu_1 > \mu_2$	Einstichproben t-Test (verbundene Stichproben)
$H_0 : \mu_1 \geq \mu_2$	$H_A : \mu_1 < \mu_2$	t-Test (unverbundene Stichproben)
$H_0 : \mu_1 = \mu_2$	$H_A : \mu_1 \neq \mu_2$	**PROC UNIVARIATE** **PROC TTEST**

Lage- und Skalentests (bei Normalverteilungsannahme)

c-Stichprobenproblem

$H_0 : \mu_1 = ... = \mu_c$ $H_A : \exists (i,j) : \mu_i \neq \mu_j$ einfache Varianzanalyse **PROC ANOVA, PROC GLM**

Andere Alternativen sind z.B.: $\mu_1 \leq ... \leq \mu_c$ $\mu_1 \geq ... \geq \mu_c$

Skalentest

Zwei unverbundene Stichproben

$$H_0 : \sigma_1^2 = \sigma_2^2 \qquad H_A : \sigma_1^2 \neq \sigma_2^2$$

PROC TTEST (nur wenn wirklich Normalverteilung) **PROC ANOVA, PROC GLM**

p-Werte

bisher: "H_0 abgelehnt" oder "H_0 beibehalten" $\Rightarrow$ wenig informativ.

Wir könnten uns auch bei jedem α fragen, ob H_0 abgelehnt wird oder nicht.

Wenn der Test bei Signifikanzniveau α ablehnt, wird er das auch für $\alpha' > \alpha$ tun.

Es gibt also ein kleinstes α, bei dem der Test H_0 ablehnt.

Der p-Wert

ist das kleinste α, bei dem wir H_0 ablehnen können.

Test_t_p_value

p-Wert

T: (zufällige) Teststatistik, t: beobachtete Teststatistik

Nullhypothese:

$$H_0 : \mu = \mu_0$$

Zweiseitige Alternative: $\mu \neq \mu_0$

p-Wert $= P_0(|T| > |t|)$

Einseitige Alternative: $\mu < \mu_0$

p-Wert $= P_0(T < t)$

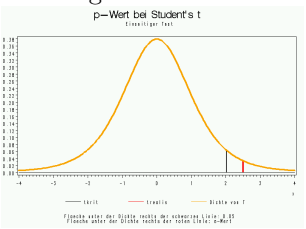
Einseitige Alternative: $\mu > \mu_0$

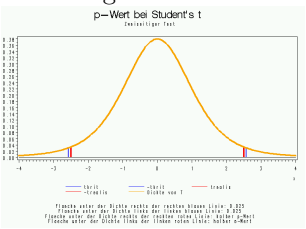
p-Wert $= P_0(T > t)$

Der p-Wert heißt auch Überschreitungswahrscheinlichkeit.

p-Wert, Illustration

Einseitiger Test Zweiseitiger Test





Fäche unter der Dichte rechts der schwarzen Linie:

0.05 0.025

Fäche unter der Dichte rechts der roten Linie:

p-Wert halber p-Wert

links entsprechend.

Bewertung von p-Werten

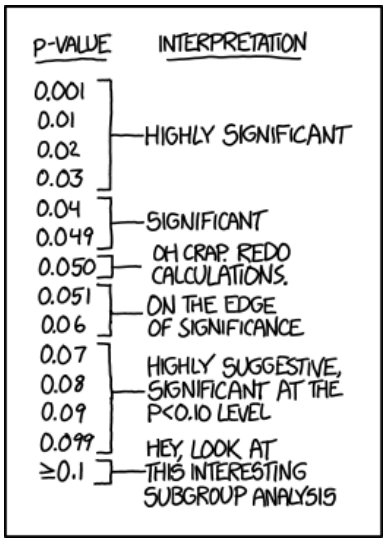
Der p-Wert ist also, grob, ein Maß für den Grad dafür, dass die Nullhypothese nicht zutrifft.

(vorsichtige) Interpretation	
p-Wert	Grad des Nicht-Zutreffens von H_0
< 0.01	sehr streng gegen H_0
$0.01 \ldots 0.05$	streng gegen H_0
$0.05 \ldots 0.1$	schwach gegen H_0
> 0.1	wenig oder gar nichts gegen H_0

Warnung:

Ein großer p-Wert heißt noch lange nicht, dass H_0 zutrifft. H_0 kann zutreffen, Der große p-Wert kann aber auch daran liegen, dass der Test niedrige Güte hat!

Bewertung von p-Werten



aus https://xkcd.com/1478/ (Dank an Herrn Rieger)

p-Wert und kritischer Wert

Einseitige Alternative, $t_{krit} = t_{1-\alpha}$

$t \leq t_{krit} \Leftrightarrow$ p-Wert $\geq \alpha \Longrightarrow H_0$ angenommen, $t > t_{krit} \Leftrightarrow$ p-Wert $< \alpha \Longrightarrow H_0$ abgelehnt.

Zweiseitige Alternative, $t_{krit} = t_{1-\alpha/2}$

$|t| \leq t_{krit} \Leftrightarrow$ p-Wert $\geq \alpha \Longrightarrow H_0$ angenommen, $|t| > t_{krit} \Leftrightarrow$ p-Wert $< \alpha \Longrightarrow H_0$ abgelehnt.

Ausgabe bei SAS

Wenn nicht anders vermerkt: zweiseitige p-Werte.

Der p-Wert ist* nicht *die Wahrscheinlichkeit, dass H_0 ***zurifft,*** $P(H_0|\textbf{\textit{Daten}}) \neq$ ***p-Wert***

.

8.2 Einstichprobenproblem

	Nulhypothese	Alternative
a)	$H_0:$ $\mu \leq \mu_0$	$H_A: \mu > \mu_0$
b)	$H_0:$ $\mu \geq \mu_0$	$H_A: \mu < \mu_0$
c)	$H_0:$ $\mu = \mu_0$	$H_A: \mu \neq \mu_0$

Teststatistik

$$T(X_1, ..., X_n) = \frac{\overline{X} - \mu_0}{s} \cdot \sqrt{n}$$


'Student' in 1908

'Student'

Durchführung des Tests mit

PROC UNIVARIATE MU0=μ_0 oder

PROC TTEST H0=μ_0

Beispiel: Test_t1_Banknote.sas

μ_0	gr	p-Wert Pr> $\lvert t\rvert$		
215	1	0.4258	$> \alpha = 0.05$	nosign
	2	< 0.0001	$< \alpha = 0.05$	sign.
214.9	1	0.0784	$> \alpha = 0.05$	nosign.
	2	0.03	$< \alpha = 0.05$	sign.

Das sind also zweiseitige p-Werte (Alternative c)).

Was machen wir bei Alternative a) oder b)? → s.u.

vorgegeben: Fehler 1.Art α (Signifikanzniveau) (üblich ist $\alpha = 0.05$ oder $\alpha = 0.01$) d.h. $P_{\mu_0}(|T| > t_{krit}) = \alpha$.

Verteilung der Teststatistik T

Nehmen wir in unserem Beispiel an, die Beobachtungen

$$X_i \sim \mathcal{N}(\mu_0, \sigma^2), \quad , i = 1, \ldots, n$$

sind normal und unabhängig, dann hat die (zufällige) Teststatistik T eine t-Verteilung (Student's t),

$$T = \frac{\sqrt{n}(\overline{X} - \mu_0)}{s} \sim \frac{\mathcal{N}(0,1)}{\sqrt{\frac{1}{n-1}\chi^2_{n-1}}} =: t_{n-1}$$

(t-Verteilung mit $n-1$ Freiheitsgraden) und

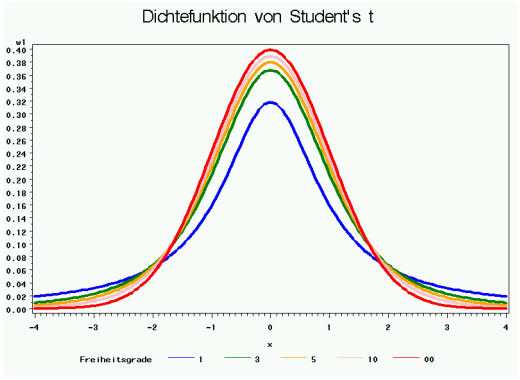
$$t_{krit} = t_{1-\frac{\alpha}{2}, n-1}$$

ist $(1 - \frac{\alpha}{2})$ - Quantil einer t-Verteilung mit $n-1$ Freiheitsgraden.

Dichtefunktion einer t-Verteilung

mit $\nu (= n-1)$ Freiheitsgraden (FG)

$$f_{t_\nu}(x) = \frac{\Gamma(\frac{\nu+1}{2})}{\sqrt{\nu \cdot \pi} \cdot \Gamma(\frac{\nu}{2})} \cdot (1 + \frac{x^2}{\nu})^{-\frac{\nu+1}{2}} \qquad PDF('T', x, \nu)$$



Test_t_Dichte.sas

Einstichprobenproblem

t-Test

a) $H_0 : \mu \leq \mu_0 \qquad H_A : \mu > \mu_0 \Rightarrow$ große Werte von

$$T = \frac{\overline{X} - \mu_0}{s} \cdot \sqrt{n}$$

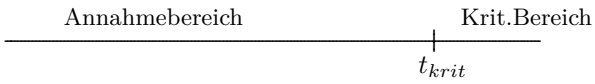
indizieren Gültigkeit von H_A.

b) $H_0 : \mu \geq \mu_0 \qquad H_A : \mu < \mu_0 \Rightarrow$ kleine Werte von T indizieren H_A

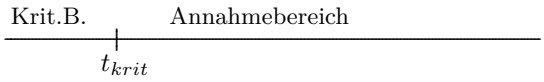
c) $H_0 : \mu = \mu_0 \qquad H_A : \mu \neq \mu_0 \Rightarrow |T|$ groß indiziert Gültigkeit von H_A.

Hypothesentest, Annahme- und Ablehnungsbereich

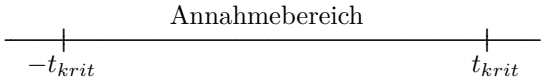
- a) $H_0: \quad \mu \leq \mu_0 \qquad H_A: \mu > \mu_0$ große Werte von T sprechen für H_A.



- b) $H_0 \quad \mu \geq \mu_0 \qquad H_A: \quad \mu < \mu_0$ kleine Werte von T sprechen für H_A.

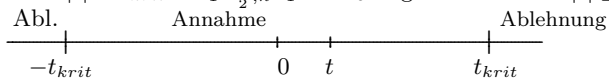


- c) $H_0: \quad \mu = \mu_0 \qquad H_A: \quad \mu \neq \mu_0$ große Werte von $|T|$ sprechen für H_A.



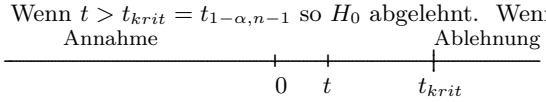
Hypothesentest, sei jetzt t eine Realisierung von T.
Zweiseitige Alternative $H_A: \mu \neq \mu_0$

Wenn $|t| > t_{krit} = t_{1-\frac{\alpha}{2},n-1}$ so H_0 abgelehnt. Wenn $|t| \leq t_{krit} = t_{1-\frac{\alpha}{2},n-1}$ so H_0 nicht abgelehnt.



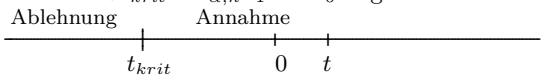
Einseitige Alternative $H_A: \mu > \mu_0$

Wenn $t > t_{krit} = t_{1-\alpha,n-1}$ so H_0 abgelehnt. Wenn $t \leq t_{krit} = t_{1-\alpha,n-1}$ so H_0 nicht abgel.



Einseitige Alternative: $H_A: \mu < \mu_0$

Wenn $t < t_{krit} = t_{\alpha,n-1}$ so H_0 abgelehnt. Wenn $t \geq t_{krit} = t_{\alpha,n-1}$ so H_0 nicht abgel.



p-Werte bei einseitigen Alternativen (1)

Erinnerung: Der zweiseitige p-Wert ist: $P(|T| > t)$.

$$\begin{aligned} P(|T| > t) &= P((T > t) \vee (-T > t)) \\ &= P((T > t) \vee (T < -t)) \\ &= 2 \cdot P(T > t), \qquad t > 0 \\ P(T > t) &= P(T < -t) \\ &= 1 - P(T \geq -t) \\ &= 1 - \frac{1}{2} P(|T| > -t), \qquad t \leq 0 \end{aligned}$$

(Die Verteilung von T ist stetig und symmetrisch.)

p-Werte bei einseitigen Alternativen (2)

Fall a) $H_0: \mu \leq \mu_0 \qquad H_a: \mu > \mu_0$

$$\text{p-Wert} = P(T > t) = \begin{cases} \frac{1}{2} P(|T| > t), & \text{falls } t > 0 \\ 1 - \frac{1}{2} P(|T| > -t), & \text{falls } t \leq 0 \end{cases}$$

Ablehnung von H_0 falls $P(T > t) < \alpha$. Die p-Werte von SAS sind zweiseitig, sie sind also (wenn $t > 0$) durch 2 zu dividieren (wenn $t \leq 0$ wird H_0 ohnehin nicht abgelehnt)

PROC TTEST H0=μ_0 p-Wert Modifikation nötig

PROC TTEST H0=μ_0 sides=u (u: upper) keine p-Wert Modifikation nötig

p-Werte bei einseitigen Alternativen (3)

Fall b) $H_0: \quad \mu \geq \mu_0 \qquad H_a: \mu < \mu_0$

$$\text{p-Wert} = P(T < t) = \begin{cases} \frac{1}{2}P(|T| > |t|), & \text{falls } t \leq 0 \\ 1 - \frac{1}{2}P(|T| > -t), & \text{falls } t > 0 \end{cases}$$

Ablehnung von H_0 falls $P(T < t) < \alpha$ also wenn $t < 0$ so SAS-p-Wert durch 2 teilen!

PROC TTEST H0=μ_0 p-Wert Modifikation nötig

PROC TTEST H0=μ_0 sides=l (l: lower) keine p-Wert Modifikation nötig

Im Fall der zweiseitigen Alternative (c) ist der p-Wert $P(|T| > t)$ genau das was SAS ausgibt, wir brauchen also nichts zu ändern.

Zusammenfassung Einstichprobenproblem (1)

Teststatistik

$$T = \sqrt{n} \cdot \frac{\overline{X} - \mu_0}{s} \qquad \text{Realisierung } t$$

$\overline{X} = \frac{1}{n}\sum_i X_i, \quad s^2 = \frac{1}{n-1}\sum_i (X_i - \overline{X})^2$

Zweiseitige Alternative, $H_0: \mu = \mu_0 \qquad H_A: \mu \neq \mu_0$

$\lvert t \rvert > t_{krit}$	$\Leftrightarrow$	H_0 ablehnen
p-value $< \alpha$	$\Leftrightarrow$	H_0 ablehnen
"Pr $> \lvert t \rvert$" $< \alpha$	$\Rightarrow$	H_0 ablehnen

Zusammenfassung Einstichprobenproblem (2)

Einseitige Alternative, $H_0: \mu \leq \mu_0 \qquad H_A: \mu > \mu_0$

$t > 0$ und $\frac{\text{p-value}}{2} < \alpha \Leftrightarrow H_0$ ablehnen

Einseitige Alternative, $H_0: \mu \geq \mu_0 \qquad H_a: \mu < \mu_0$

$t < 0$ und $\frac{\text{p-value}}{2} < \alpha \Leftrightarrow H_0$ ablehnen

Konfidenzbereiche (1)

am Beispiel des t-Tests

$X \sim \mathcal{N}(\mu, \sigma^2) \quad \Rightarrow \quad \sqrt{n} \cdot \frac{\overline{X}-\mu}{s} \sim t_{n-1}$ wenn μ der wahre (Lokations-) Parameter ist. $\Rightarrow$

$$\underbrace{P(-t_{1-\frac{\alpha}{2},n-1} \leq \sqrt{n} \cdot \frac{\overline{X} - \mu}{s} \leq t_{1-\frac{\alpha}{2},n-1})}_{(*)} = 1 - \alpha$$

Die Ungleichungen sind äquivalent zu

$$\begin{aligned}
(*) \quad &\Leftrightarrow \quad -\frac{s}{\sqrt{n}} t_{1-\frac{\alpha}{2},n-1} \leq \overline{X} - \mu \leq \frac{s}{\sqrt{n}} t_{1-\frac{\alpha}{2},n-1} \\
&\Leftrightarrow \quad -\overline{X} - \frac{s}{\sqrt{n}} t_{1-\frac{\alpha}{2},n-1} \leq -\mu \leq -\overline{X} + \frac{s}{\sqrt{n}} t_{1-\frac{\alpha}{2},n-1} \\
&\Leftrightarrow \quad \overline{X} + \frac{s}{\sqrt{n}} t_{1-\frac{\alpha}{2},n-1} \geq \mu \geq \overline{X} - \frac{s}{\sqrt{n}} t_{1-\frac{\alpha}{2},n-1} \\
&\Leftrightarrow \quad \overline{X} - \frac{s}{\sqrt{n}} t_{1-\frac{\alpha}{2},n-1} \leq \mu \leq \overline{X} + \frac{s}{\sqrt{n}} t_{1-\frac{\alpha}{2},n-1}
\end{aligned}$$

Konfidenzbereiche (2)

$(1-\alpha)$ **Konfidenzintervall für den (unbekannten) Parameter** μ

$$\left[\overline{X} - \frac{s}{\sqrt{n}} \cdot t_{1-\frac{\alpha}{2},n-1}, \overline{X} + \frac{s}{\sqrt{n}} \cdot t_{1-\frac{\alpha}{2},n-1}\right]$$

PROC TTEST ALPHA=Wert **PROC UNIVARIATE** ALPHA=Wert CIBASIC

ALPHA: Signifikanzniveau, $1-\alpha$: Konfidenzniveau

CIBASIC: Konfidenzintervalle für μ, σ^2, σ basierend auf Normalverteilung

CIPCTLDF: verteilungsfreie Konfidenzintervalle (basierend auf empirischen Quantilen)

Konfidenzbereiche (3)

Beispiel

Test_t1_Banknote

$(1-\alpha)$-Konfidenzintervalle für den Lageparameter $\mu =$ **E**'laenge':

	echt		gefälscht	
$\alpha = 0.01$	214.87	215.07	214.73	214.92
$\alpha = 0.05$	214.89	215.05	214.75	214.89
$\alpha = 0.05$	214.9	215.1	214.7	214.9
nichtparam. KI (für Median)				

PROC TTEST ALPHA=Wert **PROC UNIVARIATE** ALPHA=Wert CIBASIC CIPCTLDF

Einseitige Konfidenzintervalle mit

PROC TTEST sides=u (upper) oder **PROC TTEST** sides=l (lower)

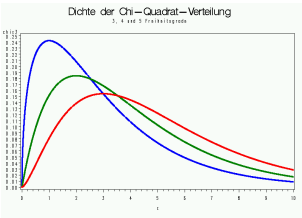
Konfidenzintervalle für σ^2

bei Normalverteilung

$$X_1, \ldots, X_n \sim \mathcal{N}(\mu, \sigma^2), \text{unabhängig} \quad \Rightarrow \quad (n-1)\frac{s^2}{\sigma^2} \sim \chi^2_{n-1}$$

Dichte einer χ^2_ν**-Verteilung**

$$f_{\chi^2_\nu}(x) = \begin{cases} \frac{1}{2^{\nu/2}\Gamma(\frac{\nu}{2})} e^{-x/2} x^{\nu/2-1} & \text{falls} \quad x \geq 0 \\ 0 & \text{sonst.} \end{cases}$$



Test_Chi2_Dichte

Konfidenzintervall für σ^2 **(2)**

bei Normalverteilung

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

auflösen nach σ^2:

$$\begin{aligned} 1-\alpha &= P\big(\chi^2_{\alpha/2,n-1} \le (n-1)\frac{s^2}{\sigma^2} \le \chi^2_{1-\alpha/2,n-1}\big) \\ &= P\big(\frac{1}{\chi^2_{1-\alpha/2,n-1}} \le \frac{\sigma^2}{(n-1)s^2} \le \frac{1}{\chi^2_{\alpha/2,n-1}}\big) \\ &= P\big(\frac{(n-1)s^2}{\chi^2_{1-\alpha/2,n-1}} \le \sigma^2 \le \frac{(n-1)s^2}{\chi^2_{\alpha/2,n-1}}\big) \end{aligned}$$

Konfidenzintervall für σ^2 (3)
nur bei Normalverteilung!

Konfidenzintervall
(Vertrauensintervall) für den (unbekannten) Parameter σ^2

$$\left[\frac{(n-1)s^2}{\chi^2_{1-\alpha/2,n-1}}, \frac{(n-1)s^2}{\chi^2_{\alpha/2,n-1}}\right]$$

PROC TTEST PROC UNIVARIATE ALPHA CIBASIC CIPCTLDF

8.3 Vergleich zweier abhängiger Gruppen

verbundene Stichproben

$H_0 : \mu_1 = \mu_2 \quad H_1 : \mu_1 \neq \mu_2$

$H_0 : \mu_1 \geq \mu_2 \quad H_1 : \mu_1 < \mu_2$

$H_0 : \mu_1 \leq \mu_2 \quad H_1 : \mu_1 > \mu_2$

- Gewicht einer Person zu den Zeitpunkten t_1, t_2. - Banknoten (oben- unten, links - rechts) - Patient nimmt Medikament 1 und 2 - Kreuz- und selbstbefruchtete Pflanzen

Test_t2_Banknote Test_t2_Darwin

Vergleich zweier abhängiger Gruppen
Folgende Möglichkeiten:

a) Transformation $Z := X_1 - X_2$ und testen auf $\mu = 0$ PROC UNIVARIATE; VAR Z; RUN; oder PROC TTEST H0=0; VAR Z; RUN;

b) Mit der Prozedur TTEST:

PROC TTEST; PAIRED X1*X2; **RUN**;

8.4 Vergleich zweier unabhängiger Gruppen

unverbundene Stichproben

$H_0 : \mu_1 = \mu_2 \quad H_1 : \mu_1 \neq \mu_2$

$H_0 : \mu_1 < \mu_2 \quad H_1 : \mu_1 \geq \mu_2$

$H_0 : \mu_1 > \mu_2 \quad H_1 : \mu_1 \leq \mu_2$

- Tibetische Schädel (Sikkim - Kham) - Wasserhärte (Nord - Süd) - Klinikaufenthalt (Klinik1 - Klinik2) - Banknoten (echt - gefälscht)

Test_t2_Tibetan Test_t2_Heroin Test_t2_Banknote

Vergleich zweier unabhängiger Gruppen (2)

$$X_1 \sim \mathcal{N}(\mu_1, \sigma_1^2), \quad X_2 \sim \mathcal{N}(\mu_2, \sigma_2^2)$$

Fall 1: Varianzen σ_1^2, σ_2^2 sind gleich Fall 2: Varianzen σ_1^2, σ_2^2 sind verschieden

Fall 1:

$$T = \frac{\overline{X}_1 - \overline{X}_2}{}$$

$$X_1 \sim \mathcal{N}(\mu_1, \sigma_1^2), \quad X_2 \sim \mathcal{N}(\mu_2, \sigma_2^2)$$

Fall 1: Varianzen σ_1^2, σ_2^2 sind gleich Fall 2: Varianzen σ_1^2, σ_2^2 sind verschieden

Fall 1. Seien n, m: Umfänge von Stichprobe 1 und 2.

$$T = \frac{\overline{X}_1 - \overline{X}_2}{\sqrt{\frac{1}{n} + \frac{1}{m}} \sqrt{\frac{(n-1)S_1^2 + (m-1)S_2^2}{n+m-2}}}$$

$$S_1^2 = \frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^{n} (X_{1i} - \overline{X}_1)^2, \qquad S_2^2 = \frac{1}{m-1} \sum_{i=1}^{m} (X_{2i} - \overline{X}_2)^2$$

Bem.: Bisher haben wir die erwartungstreue empirische Varianz mit s^2 (Kleinbuchstabe) bezeichnet. Da wir hier betonen, dass es Zufallsvariablen sind, verwenden wir jetzt Großbuchstaben, also S_1^2 und S_2^2.

Erläuterung des Quotienten T

$X_1 \sim \mathcal{N}(\mu_1, \sigma^2), X_2 \sim \mathcal{N}(\mu_2, \sigma^2)$

$$\overline{X}_1 \sim \mathcal{N}(\mu_1, \sigma^2 \cdot \frac{1}{n}), \quad \overline{X}_2 \sim \mathcal{N}(\mu_2, \sigma^2 \cdot \frac{1}{m})$$

$$\frac{(n-1)}{\sigma^2} \cdot S_1^2 \sim \chi_{n-1}^2, \quad \frac{(n-1)}{\sigma^2} \cdot S_2^2 \sim \chi_{m-1}^2$$

$$\overline{X}_1 - \overline{X}_2 \sim \mathcal{N}(\mu_1 - \mu_2, \sigma^2 \cdot (\frac{1}{n} + \frac{1}{m}))$$

$$\frac{1}{\sigma^2} \Big((n-1) \cdot S_1^2 + (m-1) \cdot S_2^2 \Big) \sim \chi_{n+m-2}^2$$

$$T \sim t_{n+m-2} \qquad \text{unter} \quad H_0 \ (\mu_1 = \mu_2)$$

Bem.: Bei Normalverteilung sind Zähler und Nenner stochastisch unabhängig!

Vergleich zweier unabhängiger Gruppen (4)

T ist eine Zufallsgröße!

Die Wahrscheinlichkeit dafür, daß T sehr große Werte annimmt (wenn H_0 richtig ist) ist also sehr klein.

Sei jetzt t eine Realisierung von T (also der Wert, der bei Ausrechnen anhand der gegebenen Daten entsteht).

Wenn jetzt t sehr groß, $|t| \in K$ (kritischer Bereich) (aber die Wahrscheinlichkeit dafür ist sehr klein, wenn H_0 richtig ist) $\Rightarrow H_0$ ablehnen.

Vergleich zweier unabhängiger Gruppen
Fall 2: Varianzen ungleich

$$T = \frac{\overline{X}_1 - \overline{X}_2}{\sqrt{\frac{S_1^2}{n} + \frac{S_2^2}{m}}}$$

$T \sim t_\nu$ approximativ. Die Zahl ν der Freiheitsgrade wird auch approximativ berechnet. (Welch-Test, 1937)

SAS bietet Tests für beide Fälle (gleiche, ungleiche Varianzen) an. Satterthwaite-Approximation (1946).

PROC TTEST; CLASS Klassifikationsvariable; VAR auszuwertende Variable(n); **RUN**;

Vergleich zweier unabhängiger Gruppen

Welchen Test soll man nehmen?

- Aus Vorinformation ist vielleicht bekannt, ob man gleiche Varianzen annehmen kann.

- Man könnte einen Test auf gleiche Varianzen vorschalten

Problem: 2 stufiger Test
Wird das Signifikanzniveau eingehalten??

Vorschlag
gleich den t-Test für ungleiche Varianzen nehmen ist einigermaßen robust gegen Abweichungen von der Normalverteilung, aber nicht gegen Ausreißer

8.5 Test auf Gleichheit der Varianzen (1)

Voraussetzung: Normalverteilung!!

$H_0 : \sigma_1^2 = \sigma_2^2 \qquad H_1 : \sigma_1^2 \neq \sigma_2^2$

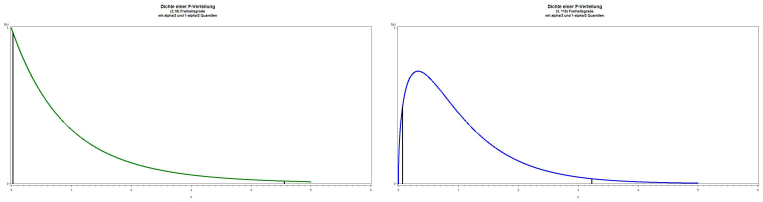
$$F = \frac{S_1^2}{S_2^2} \sim F_{n-1,m-1} \qquad \text{unter} \quad H_0$$

(Fisher-) F- Verteilung mit $(n-1, m-1)$ Freiheitsgraden.

F ist Quotient zweier unabhängiger χ^2-verteilter Zufallsgrößen.
H_0 ablehnen, falls

$$\frac{s_1^2}{s_2^2} < F_{\frac{\alpha}{2},n-1,m-1} \quad \text{oder} \quad \frac{s_1^2}{s_2^2} > F_{1-\frac{\alpha}{2},n-1,m-1}$$

Test auf Gleichheit der Varianzen (bei Normalverteilung)
F-Test



Test_F_Dichte

Zweistichprobenproblem
Output der Prozedur TTEST

- Konfidenzintervalle für μ_1, μ_2 und für $\mu_1 - \mu_2$ Für die ersten beiden siehe Abschnitt 5.2 Konfidenzintervalle für $\mu = \mu_1 - \mu_2$ bekommt man analog zum Einstichprobenfall
- Tabelle der durchgeführten t-Tests - für gleiche Varianzen (pooled) - für ungleiche Varianzen (Satterthwaite)
- F-Test zum Vergleich der Varianzen (bitte ignorieren)

8.6 Anmerkungen

Ein- und Zweistichprobenproblem
Anmerkungen (1)

- Der F-Test (zum Skalenvergleich) ist sehr empfindlich gegenüber Abweichungen von der Normalverteilungsannahme $\Rightarrow$ mit größter Vorsicht genießen.
- Der Einstichproben- t-Test ist nicht robust!
- Der Zweistichproben t-Test ist etwas robuster als der t-Test im Einstichprobenproblem
- Ausreißer können extremen Einfluss haben (ÜA).
- Wenn Gleichheit der Varianzen unklar $\Rightarrow$ **t-Test mit ungleichen Varianzen nehmen**. (ist bei gleichen Varianzen nur ganz wenig weniger effizient)

Ein- und Zweistichprobenproblem
Anmerkungen (2)

- Besser nicht auf das Ergebnis des F-Tests verlassen. (Problematik: 2-Stufentest, Nicht-Robustheit).
- Es gibt robustere Skalentests $\Rightarrow$ Levene Test und Brown-Forsythe Test.

8.7 Test auf Gleichheit der Varianzen (2)

Seien $X_1, \ldots, X_n$ und $Y_1, \ldots, Y_m$ unabhängige Beobachtungen.

Levene-Test
Bilden die Werte

$$\begin{aligned} X_j^* &:= |X_j - \overline{X}| \\ Y_j^* &:= |Y_j - \overline{Y}| \end{aligned}$$

Skalenunterschiede in (X, Y) spiegeln sich jetzt in Lageunterschieden in (X^*, Y^*) wieder. Mit den "neuen Beobachtungen" wird jetzt ein t-Test durchgeführt. Die t-Verteilung der entsprechenden Teststatistik gilt nur approximativ.

Test auf Gleichheit der Varianzen

Brown-Forsythe Test

Analog zum Levene-Test, nur hier bilden wir die Werte

$$\begin{aligned} X_j^* &:= |X_j - \text{med}(X_1, \ldots, X_n)| \\ Y_j^* &:= |Y_j - \text{med}(Y_1, \ldots, Y_m)| \end{aligned}$$

Beide Tests, Levene und Brown-Forsythe, sind (einigermaßen) robust gegen Abweichungen von der Normalverteilung.

Test auf Gleichheit der Varianzen

Syntax

PROC ANOVA; CLASS Klasse; MODEL var=Klasse; MEANS Klasse / HOVTEST=Levene (TYPE=ABS); MEANS Klasse / HOVTEST=BF; **RUN**;

Test_t2_Banknote

9 Varianzanalyse

9.1 Vergleich von k unabhängigen Gruppen

Einfaktorielle, einfache Varianzanalyse

A: Faktor (Gruppenvariable) mit k Stufen (Faktorstufen)

Modell

$$Y_{ij} = \mu + \alpha_i + \epsilon_{ij}, \quad i = 1...k, j = 1...n_i$$

μ:	Gesamterwartungswert
α_i:	Effekt der i-ten Stufe von A
ϵ_{ij}:	Fehler, $\epsilon_{ij} \sim (0, \sigma^2)$, unabhängig
Y_{ij}:	j-te Beobachtung der i-ten Faktorstufe
$\sum_{i=1}^k \alpha_i = 0$	Parametrisierungsbedingung

Zum Testen brauchen wir (vorläufig) die Annahme $\epsilon_{ij} \sim \mathcal{N}(0, \sigma^2)$

Einfache Varianzanalyse

Testproblem

$H_0 : \alpha_1 = \alpha_2 = ... = \alpha_k$
$H_1 : \alpha_i \neq \alpha_l$ (für ein $i \neq l$)

Im Fall $k = 2$ führt dieses Testproblem auf das Zweistichprobenproblem ($\rightarrow$ t-Test).

Output der Maschinen gleich? Klausurergebnisse unterschiedlich? Mageninhalt der Eidechsen gleich? Cortisolgehalt unterschiedlich?

ANOVA_Maschinen PI12erg GLM_Eidechsen GLM_Cortisol

Varianzanalyse

Varianzanalyse macht eine Streuungszerlegung:

Quadratsumme	=	Quadratsumme zwischen	+	Quadratsumme innerhalb	
Gesamtfehler		den Faktorstufen		der Faktorstufen	
SST	=	SSB	+	SSW	(SSE)
(Total)		(Between)		(Within)	(Error)

$$N = \sum_{i=1}^{k} n_i$$

$$\overline{Y}_i = \frac{1}{n_i} \cdot \sum_{j=1}^{n_i} Y_{ij}, \qquad \overline{Y} = \frac{1}{N} \sum_{i,j} Y_{i,j}$$

Einfache Varianzanalyse

Satz: Es gilt

$$SSB + SSW = SST$$

wobei

$$\begin{aligned} SSB &= \sum_{i=1}^{k} n_i (\overline{Y}_i - \overline{Y})^2 && (\underline{B}\text{etween}) \\ SSW &= \sum_{i=1}^{k} \sum_{j=1}^{n_i} (Y_{ij} - \overline{Y}_i)^2 && (\underline{W}\text{ithin}) \\ SST &= \sum_{i=1}^{k} \sum_{j=1}^{n_i} (Y_{ij} - \overline{Y})^2. && (\underline{T}\text{otal}) \end{aligned}$$

Einfache Varianzanalyse

Satz: $SSB + SSW = SST$

Beweis:

$$SSB = \sum_i n_i \overline{Y}_i^2 - 2 \cdot N \cdot \overline{Y}^2 + \overline{Y}^2 \cdot N$$

$$SSW = \sum_{i,j} Y_{ij}^2 - 2 \cdot \sum_i n_i \overline{Y}_i^2 + \sum_i n_i \overline{Y}_i^2$$

$SSB + SSW =$

$$\begin{aligned} &= \sum_{i,j} Y_{ij}^2 + \sum_i n_i \overline{Y}_i^2 - N \cdot \overline{Y}^2 - \sum_i n_i \overline{Y}_i^2 \\ &= \sum_{i,j} Y_{ij}^2 - N \cdot \overline{Y}^2 = \sum_j \sum_i (Y_{ij} - \overline{Y})^2 = SST \ \blacksquare \end{aligned}$$

Varianzanalyse

Programm

PROC ANOVA; CLASS A; /*A: Faktor */ MODEL var=A; MEANS A / HOVTEST=Levene (TYPE=ABS); HOVTEST=BF; MEANS OUT=SAS-Ausgabedatei; **RUN**;

Varianzanalyse, Programm

PROC ANOVA; **PROC GLM**; CLASS A; /*A: Faktor */ [-0.5ex] MODEL var=A; [-0.5ex] MEANS A / [-0.5ex] HOVTEST=Levene (TYPE=ABS);[-0.5ex] HOVTEST=BF;[-0.5ex] MEANS OUT=SAS-Ausgabedatei; **RUN**;

- ANOVA: schneller
- GLM: zusätzliche Auswertungen möglich, z.B. Ausgabe der Residuen $(\hat{Y}_i - Y_i)$
- HOVTEST: Test auf Varianzhomogenität (nur bei ANOVA!)

Varianzanalyse-Tabelle

Dependent Variable: Y

Source	DF	Sum of Squares	Mean Squares	F-value	$Pr > F$
MODEL	k-1	SSB(M)	MSB	$\frac{MSB}{MSE}$	p-Wert
ERROR	N-k	SSW(E)	MSE		
Total	N-1	SST			

$$MSB = \frac{SSB}{k-1}, \qquad MSE = \frac{SSW}{N-k}, \qquad F = \frac{MSB}{MSE} \sim F_{k-1,N-k}$$

$$H_0: \quad \alpha_1 = \cdots = \alpha_k \qquad H_1: \quad \exists (i,j) : \alpha_i \neq \alpha_j$$

Wenn H_0 richtig ist und die Beobachtungen normalverteilt sind, so hat $F = \frac{MSB}{MSE}$ eine F-Verteilung mit $(k-1, N-k)$ Freiheitsgraden.

Einfache Varianzanalyse (2)

H_0 wird getestet mit

$$F = \frac{MSB}{MSE} = \frac{\text{geschätzte Varianz zwischen den Gruppen}}{\text{geschätzte Varianz innerhalb der Gruppen}}$$
$$= \frac{N-k}{k-1} \cdot \frac{SSB}{SSW} = \frac{N-k}{k-1} \cdot \frac{SST - SSW}{SSW}$$

F groß, $F > F_{1-\alpha,k-1,N-k} \Leftrightarrow H_0$ abgelehnt

Bestimmtheitsmaß

$$R^2 := \frac{SSB}{SST} = \frac{SST - SSW}{SST} = 1 - \frac{SSW}{SST}$$

Der Anteil der Fehlerquadratsummen, der durch das Modell bestimmt wird, heißt Bestimmtheitsmaß

Einfache Varianzanalyse (3)

Offenbar: $0 \leq R^2 \leq 1$.

$$F = \frac{MSB}{MSE} = \frac{N-k}{k-1} \cdot \frac{SSB}{SST} \cdot \frac{SST}{SSW} = \frac{N-k}{k-1} \cdot \frac{R^2}{1-R^2}$$

$R^2 \to 0 \quad \Longrightarrow \quad F \to 0$

$R^2 \to 1 \quad \Longrightarrow \quad F \to \infty.$

Schätzung der Modellstandardabweichung σ

$RootMSE = \sqrt{MSE} = \sqrt{\frac{1}{N-k} SSE}$

Variationskoeffizient

$CV = \frac{100 \cdot RootMSE}{\overline{Y}}$

Einfache Varianzanalyse

Anmerkungen (1)

- Der F-Test in der Varianzanalyse ist (einigermaßen) robust gegenüber Abweichungen von der Normalverteilungsannahme
- Wenn man die Prozedur GLM verwendet, dann kann man die sogenannten Residuen

$$\hat{\epsilon}_{ij} = Y_{ij} - \hat{\alpha}_i - \hat{\mu}$$

abspeichern (Option RESIDUAL im OUTPUT-Statement) und später auf Normalität testen. (**PROC UNIVARIATE** NORMAL)

Varianzanalyse

Anmerkungen (2)

- F-Test verlangt auch Varianzhomogenität Daten balanziert (gleiche Stichprobenumfänge) $\rightarrow$ Abweichungen nicht so schwerwiegend.
- Wenn die Varianzen verschieden sind, kann die Welch-Modifikation verwendet werden: MEANS Var/ WELCH;

Einfache Varianzanalyse

Test auf Varianzhomogenität

$$H_0 : \sigma_1^2 = \sigma_2^2 = ... = \sigma_k^2$$
$$H_1 : \exists(i,l) : \sigma_i^2 \neq \sigma_l^2$$

Levene Test (1960)

HOVTEST= LEVENE im MEANS-Statement $Z_{ij}^* = |Y_{ij} - \overline{Y}_{i.}|$

Brown-Forsythe-Test (1974)

HOVTEST = BF $Z_{ij}^* = |Y_{ij} - medY_i|$

Einfache Varianzanalyse

Test auf Varianzhomogenität (2)

Mit diesen neuen Zufallsvariablen wird eine Varianzanalyse durchgeführt.

$$W = \frac{\frac{1}{k-1}\sum n_i(\overline{Z}_{i.}^* - \overline{Z}^*)^2}{\frac{1}{N-k}\sum_{i,j}(Z_{ij}^* - \overline{Z}_{i.}^*)^2} \sim F_{k-1,N-k}.$$

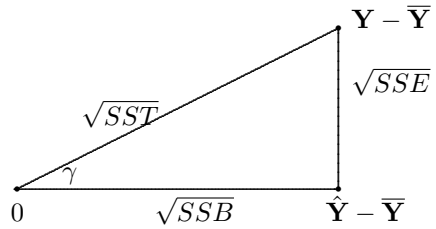
GLM_Cortisol

Geometrische Veranschaulichung

$\mathbf{Y} = (Y_{11}, \ldots, Y_{kn_k})$ Dimension N

$\hat{\mathbf{Y}} = (\underbrace{\overline{Y}_1, \ldots, \overline{Y}_1}_{n_1 \text{mal}}, \ldots, \underbrace{\overline{Y}_k, \ldots, \overline{Y}_k}_{n_k \text{mal}})$

$\overline{\mathbf{Y}} = (\underbrace{\overline{Y}, \ldots, \overline{Y}}_{N \text{mal}}), \quad \overline{Y} = \frac{1}{N}\sum_{i,j} Y_{ij}$



$$\begin{aligned} SSB + SSW &= SST \qquad R^2 = cos^2\gamma \\ ||\hat{\mathbf{Y}} - \overline{Y}||^2 + ||\mathbf{Y} - \hat{\mathbf{Y}}||^2 &= ||\mathbf{Y} - \overline{Y}||^2 \end{aligned}$$

9.2 Multiple Vergleiche

Problemstellung: H_0 abgelehnt, aber zwischen welchen Faktorstufen liegt der Unterschied?

- Idee: Alle Paarvergleiche machen.
- Problem: Wenn wir das Signifikanzniveau $\alpha(= 0.05)$ so lassen, wird das Testniveau nicht eingehalten!
- Veranschaulichung: Bei 20 gleichzeitigen Tests können wir $20 \cdot \alpha = 1$ Ablehnung erwarten, auch wenn H_0 richtig ist.

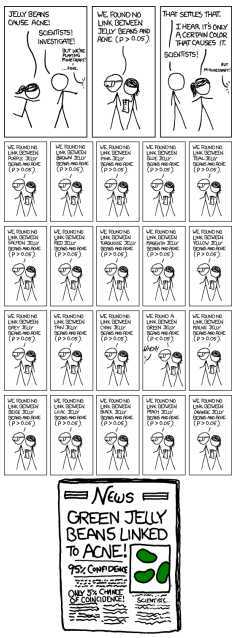


Illustration zum Problem vieler gleichzeitiger Tests

aus: https://xkcd.com/882/
(Dank an Herrn Tobias Rieger)

Multiple Vergleiche

Lösungsmöglichkeiten (1)

Option BON im MEANS Statement

Signifikanzniveau für die gleichzeitigen Tests wird herabgesetzt auf $\frac{\alpha_{nom}}{\binom{k}{2}}$, bei $k = 4$ und $\alpha_{nom} = 0.05$ wäre das $\frac{\alpha_{nom}}{\binom{4}{2}} = \frac{0.05}{6}$. Begründung: Bonferroni-Ungleichung.

A_i: Ereignis, H_{0i} (i-ter Paarvergleich) abgelehnt.

$$\underbrace{P_0\left(\bigcup A_i\right)}_{\text{Wkt},H_{0i}\geq 1\text{mal abgelehnt}} \leq \sum_{i=1}^{M} P(A_i) \leq M \cdot \frac{\alpha}{M} = \alpha$$

M: Anzahl der Paarvergleiche.

Multiple Vergleiche, Lösungsmöglichkeiten (2)

Option TUKEY im MEANS Statement

Bilden die $\overline{Y}_j$ und die Spannweite dazu $w = max_{i,j}|\overline{Y}_i - \overline{Y}_j|$. Dazu kommt noch die empirische Standardabweichung s.

$$t_{\max} = \frac{w}{s}$$

die sogenannnte *studentisierte Spannweite*.

Diese hat (wenn die $Y_i \sim \mathcal{N}$) eine (dem SAS-Programmierer) wohlbekannte Verteilung, und entsprechende Quantile und kritische Werte. Damit erhalten wir simultane Konfidenzintervalle für alle Paardifferenzen $\mu_i - \mu_j$. Liegt 0 nicht darin, so wird $H_{0,ij}: \ \mu_i = \mu_j$ abgelehnt zugunsten von $H_{A,ij}: \ \mu_i \neq \mu_j$.

Bem.: Es gibt eine Fülle weiterer Varianten.

9.3 Vergleich von k abhängigen Gruppen

Zwei-faktorielle Varianzanalyse

Modell:

$$Y_{ij} = \mu + \alpha_i + \beta_j + \epsilon_{ij}, \quad \epsilon_{ij} \sim (0, \sigma^2) \quad \text{unabhängig}$$

$i = 1, \ldots, a, j = 1, \ldots, b.$ (eine Beobachtung je Zelle)

Das Modell ist überparametrisiert, deswegen Bedingung: $\sum_{i=1}^{a} \alpha_i = 0, \quad \sum_{j=1}^{b} \beta_j = 0.$

Folgene Hypothesen sind zu testen:

$H_{0a}: \quad \alpha_1 = \cdots = \alpha_a = 0 \quad$ gegen $H_{1a}: \quad \exists(i_1, i_2) : \alpha_{i_1} \neq \alpha_{i_2}$

$H_{0b}: \quad \beta_1 = \cdots = \beta_b = 0 \quad$ gegen $H_{1b}: \quad \exists(j_1, j_2) : \beta_{j_1} \neq \beta_{j_2}$

GLM_Synchro GLM_Cache

Zum Testen brauchen wir wieder (vorläufig) die Annahme $\epsilon_{ij} \sim \mathcal{N}(0, \sigma^2)$

2-faktorielle Varianzanalyse

$$\begin{aligned}
\overline{Y}_{..} &= \frac{1}{a \cdot b} \sum_{i=1}^{a} \sum_{j=1}^{b} Y_{ij} \quad \text{arithmet. Mittel aller Beobachtungen} \\
\overline{Y}_{i.} &= \frac{1}{b} \sum_{j=1}^{b} Y_{ij} \quad \text{Mittel aller Beobachtungen der i-ten Stufe von A} \\
\overline{Y}_{.j} &= \frac{1}{a} \sum_{i=1}^{a} Y_{ij} \quad \text{Mittel aller Beobachtungen der j-ten Stufe von B} \\
SSA &:= b \sum_{i=1}^{a} (\overline{Y}_{i.} - \overline{Y}_{..})^2 \qquad SSB := a \sum_{j=1}^{b} (\overline{Y}_{.j} - \overline{Y}_{..})^2 \\
SSE &:= \sum_{i=1}^{a} \sum_{j=1}^{b} (Y_{ij} - \overline{Y}_{i.} - \overline{Y}_{.j} + \overline{Y}_{..})^2 \\
SST &:= \sum_{i=1}^{a} \sum_{j=1}^{b} (Y_{ij} - \overline{Y}_{..})^2
\end{aligned}$$

Varianzanalyse-Tabelle

Source	DF	Sum of Squares	Mean of Squares	F-value	$Pr > F$ p-value
A	a-1	SSA	MSA	$\frac{MSA}{MSE}$	H_{1a}
B	b-1	SSB	MSB	$\frac{MSB}{MSE}$	H_{1b}
Model	a+b-2	SSM	MSM	$\frac{MSM}{MSE}$	H_1
Error	(a-1)(b-1)	SSE	MSE		
Total	a b - 1	SST			

$$\begin{aligned} SSM &= SSA + SSB & SST &= SSA + SSB + SSE \\ MSA &= \frac{SSA}{(a-1)} & MSB &= \frac{SSB}{(b-1)} \\ MSM &= \frac{SSA + SSB}{a+b-2} & MSE &= \frac{SSE}{(a-1)(b-1)} \end{aligned}$$

2-faktorielle Varianzanalyse

Tests (1), Teilhypothesen

H_{0a} gegen H_{1a}:

$$F_1 = \frac{MSA}{MSE} = \frac{\text{geschätzte Varianz zwischen Stufen von A}}{\text{geschätzte Varianz innerhalb der Gruppen}}$$

$$F_1 \sim F_{a-1,(a-1)(b-1)}$$

H_{0b} gegen H_{1b}:

$$F_2 = \frac{MSB}{MSE} = \frac{\text{geschätzte Varianz zwischen Stufen von B}}{\text{geschätzte Varianz innerhalb der Gruppen}}$$

$$F_2 \sim F_{b-1,(a-1)(b-1)}$$

große Werte von F führen zur Ablehnung!

$$\begin{aligned} F_1 &> F_{1-\alpha,a-1,(a-1)(b-1)} \rightarrow \text{Ablehnung von } H_{0a} \\ F_2 &> F_{1-\alpha,b-1,(a-1)(b-1)} \rightarrow \text{Ablehnung von } H_{0b} \end{aligned}$$

2-faktorielle Varianzanalyse

Tests (2), Globale Hypothese

H_0: $\alpha_1 = \cdots \alpha_a = 0$ und $\beta_1 = \cdots \beta_a = 0$ gegen
H_1: $\exists(i_1, i_2)$: $\alpha_{i_1} \neq \alpha_{i_2} \vee \exists(j_1, j_2)$: $\beta_{j_1} \neq \beta_{j_2}$.

$$F = \frac{MSModell}{MSE} = \frac{SSA + SSB}{SSE} \cdot \frac{(a-1)(b-1)}{a+b-2}$$

$$\begin{aligned} MSModell &= \frac{SSModell}{a+b-2} \\ SSModell &= SSA + SSB. \end{aligned}$$

H_0 ablehnen, falls

$$F > F_{1-\alpha,a+b-2,(a-1)(b-1)}.$$

Zweifaktorielle Varianzanalyse

Programm

PROC GLM; CLASS A B; /*die beiden Faktoren*/ MODEL Y = A B; **RUN**;

Output

- Balanzierter Fall: Variante I und III identisch
- Unbalanzierter Fall: Typ III-Summen sind vorzuziehen, da der entsprechende Test unabhängig von den Stichprobenumfängen ist.

9.4 Weitere Varianzanalyse-Modelle

Mehrere Beobachtungen pro Kombination der Faktoren A und B

Mehrere Beobachtungen pro Kombination der Faktoren A und B

SAS-Prozedur ändert sich nicht!

Output ändert sich gegebenenfalls a) balanzierter Fall → eindeutig b) unbalanzierter Fall → Es gibt verschiedene Möglichkeiten die Fehlerquadratsummen zu zerlegen. → SAS bietet die Varianten an

3 Forscher graben eine Reihe von Schädeln in 3 verschiedenen Schichten aus.
Gemessen wird die Nasenlänge. ? Forschereffekt, Schichteneffekt

Klinische Untersuchung in mehreren Zentren
Ein Medikament zur Gewichtsreduktion soll getestet werden.

1: Medikament

0: Placebo

1-6: Zentren

Modell:

$$Y_{ijk} = \mu + \alpha_i + \beta_j + \epsilon_{ijk}, \quad \epsilon_{ijk} \sim \mathcal{N}(0, \sigma^2) \quad \text{unabhängig}$$

Es interessiert nur das Medikament, nicht das Zentrum:

$$H_0: \quad \alpha_0 = \alpha_1 \qquad H_1: \alpha_0 < \alpha_1$$

Weitere Varianzanalyse-Modelle

PROC GLM; CLASS Medik Zentrum; /*die beiden Faktoren*/ MODEL Y = Medik Zentrum; **RUN**;
(dieselbe Prozedur wie oben)

GLM_Drugeffect

Zum Output: wie bisher.

Balanzierter Fall: Variante I und III identisch.

Unbalanzierter Fall: Typ III-Summen zu bevorzugen, da der entsprechende Test unabhängig von den Stichprobenumfängen ist.

Wechselwirkungen ins Modell mit aufnehmen

Wechselwirkungen ins Modell mit aufnehmen

$$Y_{ijk} = \mu + \alpha_i + \beta_j + \gamma_{ij} + \epsilon_{ijk}, \qquad \epsilon_{ijk} \sim \mathcal{N}(0, \sigma^2) \quad \text{unabhängig}$$

(+Reparametrisierungsbedingungen)
geht nur, wenn für jede Faktorstufenkombination mehrere Beobachtungen vorliegen. **PROC GLM**; CLASS A B; /*die beiden Faktoren*/ MODEL Y = A B A*B; **RUN**;

GLM_Insekten

Weitere Varianzanalyse-Modelle

Modell mit Wechselwirkungen
Folgene Hypothesen sind zu testen:

$H_{0a}: \quad \alpha_1 = \cdots = \alpha_a = 0 \quad$ gegen $\quad H_{1a}: \quad \exists(i_1, i_2) : \alpha_{i_1} \neq \alpha_{i_2}$

$H_{0b}: \quad \beta_1 = \cdots = \beta_b = 0 \quad$ gegen $\quad H_{1a}: \quad \exists(j_1, j_2) : \beta_{j_1} \neq \beta_{j_2}$

$H_{0c}: \quad \gamma_{11} = \cdots = \gamma_{a*b} = 0 \quad$ gegen $\quad H_{1c}: \quad \exists(j_1, j_2) : \gamma_{j_1, j_2} \neq 0$

Faktoren (Effekte, Faktorstufen) sind zufällig

Faktoren (Effekte, Faktorstufen) zufällig

hier ist Schätzung der Varianzkomponenten interessant und evtl. ein Hypothesentest

Preisrichter seien zufällig ausgewählt.
Die Frage ist, ob die Variabilität in den Scores an den Preisrichtern liegt?

$$\begin{aligned} Y_{ij} &= \mu + \underbrace{A_i}_{\text{zufällig}} + b_j + \epsilon_{ij}, \quad \epsilon_{ij} \sim \mathcal{N}(0, \sigma^2) \quad \text{unabhängig} \\ A_i &\sim (0, \sigma_P^2) \\ \epsilon_{ij} &\sim (0, \sigma^2) \end{aligned}$$

Varianzkomponentenschätzung

PROC VARCOMP METHOD=Type1; CLASS Preisrichter Wettkaempferin; MODEL Score = Preisrichter; **RUN**;

GLM_syncro_zufaelligeEffekte

METHOD=Type1: Auf den Quadratsummen beruhende Varianzschätzungen

Annahme: A_i und ϵ_{ij} unabhängig.

$$var(Y_{ij}) = var(A_i) + var(\epsilon_{ij})$$

Output: Schätzungen für die Varianzkomponenten.

Varianzkomponentenschätzung, 2

Betrachten wir hier das Modell der 2-faktoriellen Varianzanalyse

$$\begin{aligned} Y_{ij} &= \mu + \underbrace{A_i + B_j}_{\text{zufällig}} + \epsilon_{ij}, A_i \sim (0, \sigma_A^2), \quad B_j \sim (0, \sigma_B^2),\ \epsilon_{ij} \sim (0, \sigma^2) \\ \text{var} Y_{ij} &= \text{var} A_i + \text{var} B_j + \text{var} \epsilon_{ij} \end{aligned}$$

wenn alle Komponenten unanbhängig (das ist ggf. zu hinterfragen).

Und erinnern wir uns an die Quadratsummen

$$SSA := b \sum_{i=1}^{a} (\overline{Y}_{i.} - \overline{Y}_{..})^2 \qquad SSB := a \sum_{j=1}^{b} (\overline{Y}_{.j} - \overline{Y}_{..})^2$$

dann wird evtl. der folgende Output verständlich

$$\begin{aligned} \mathbf{E}(MSA) &= \text{var(error)} + 40\text{var (Preisrichter)} \qquad (b = 40) \\ \mathbf{E}(MSB) &= \text{var(error)} + 5\text{var (Wettkaempferin)} \qquad (a = 5) \end{aligned}$$

verständlich. (Die Fehlerquadrate MSE werden hier jeweils dazu addiert.)

Mehr als 2 Faktoren

Mehr als 2 Faktoren- höherfaktorielle Varianzanalyse

Frequenzspektren

Gemessen wird die Amplitude bei 35 verschiedenen Frequenzen, 4 Füllungen, 3 Richtungen, jede Messung wird 5 mal wiederholt. ? Füllungs-, Richtungseffekt, Wiederholungseffekt? Frequenzeffekt? $\rightarrow$ 4 Faktoren.

PROC GLM; CLASS A B C D; MODEL Y = A B C D; **RUN**;

Hierarchische Modelle

Hierarchische Modelle

Die Faktoren liegen in hierarchischer Ordnung vor.

						A					
	A1			A2			A3			A4	
B11	B12	B13	B21	B22	B23	B31	B32	B33	B41	B42	B43

Kalzium-Gehalt verschiedener Pflanzen und von verschiedenen Blättern

4 Pflanzen werden zufällig ausgewählt (zufällige Effekte) 3 Blätter davon 2 Stichproben zu 100mg von jedem Blatt Frage: Gibt es zwischen Pflanzen oder zwischen Blättern unterschiedliche CA-Konzentrationen?

Weitere Varianzanalyse-Modelle

Hierarchische Modelle (2)

Modell

$$Y_{ijk} = \mu + A_i + B_{ij} + \epsilon_{ijk}$$

$A_i \sim \mathcal{N}(0, \sigma_a^2)$, $B_{ij} \sim \mathcal{N}(0, \sigma_b^2)$, $\epsilon_{ijk} \sim \mathcal{N}(0, \sigma^2)$ alle unabhängig

hier: $n = 2$ $a = 4$ $b = 3$

$$\begin{aligned} \text{var}Y_{ijk} &= \text{var}A_i + \text{var}B_{ij} + \text{var}\epsilon_{ijk} \\ &= \sigma_a^2 + \sigma_b^2 + \sigma^2 \end{aligned}$$

$H_{0a} : \sigma_a^2 = 0$ $H_{0b} : \sigma_b^2 = 0$

GLM_hierarch

Weitere Varianzanalyse-Modelle

Hierarchische Modelle (3)

PROC GLM; CLASS A B; MODEL Y = A B(A); (hierarchische Struktur) RANDOM A B(A); (Faktoren sind zufällig) **RUN**; **PROC VARCOMP**; CLASS A B; MODEL Y=A B(A); **RUN**;

10 Anpassungstests

10.1 Einführung

9.1 Einführung

empirische Verteilungsfunktion

9.2 EDF-Anpassungstests

Kolmogorov-Smirnov-Test

Anderson-Darling-Test

Cramer-von Mises-Test

9.3 Anpassungstest auf Normalverteilung -

Shapiro-Wilk-Test

9.4. Anpassungstests auf weitere Verteilungen

Problem

Klassische Test- und Schätzverfahren sind oft konzipiert unter der Normalverteilungsannahme.

Frage

Gilt sie überhaupt?

Gilt die Normalverteilung? (1)

Hampel, 1980, Biometrisches Journal

Eine Zeitlang glaubte (fast) jeder an das 'normale Fehlergesetz',

die Mathematiker, weil sie es für ein empirisches Faktum hielten,

und die Anwender, weil sie es für ein mathematisches Gesetz hielten.

Gilt die Normalverteilung? (2)

Geary 1947, Biometrika

Normality is a myth;

there never was,

and never will be,

a normal distribution.

Anpassungstests

Seien $X_1, \ldots, X_n$ unabhängige identisch verteilte Beobachtungen, $X_i \sim F$, F unbekannt.

Anpassungstest auf eine spezifizierte Verteilung:

$$H_0: \quad F = F_0 \qquad \text{gegen} \qquad H_1: \quad F \neq F_0.$$

I.A. hängt F von unbekannten Parametern ab.

Anpassungstest auf eine Normalverteilung:

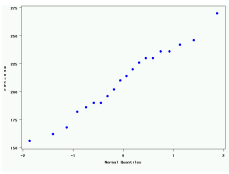
$$\begin{aligned} H_0: F(x) &= \Phi\Big(\frac{x-\mu}{\sigma}\Big) \quad (\mu, \sigma \text{ unbekannt}) \\ H_1: F(x) &\neq \Phi\Big(\frac{x-\mu}{\sigma}\Big) \quad \forall \mu, \sigma, \sigma > 0 \end{aligned}$$

(Φ: Verteilungsfunktion der Standardnormal.).

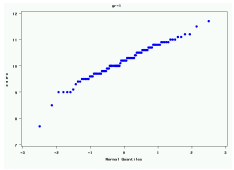
Anpassungstests

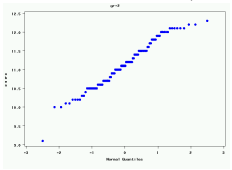
Gewicht von Hühnern

156	162	168	182	186
190	190	196	202	210
214	220	226	230	230
236	236	242	246	270



Abmessungen von Banknoten, oben (echt, falsch)





10.2 EDF-Tests

Empirische Verteilungsfunktion

Seien $X_1, ..., X_n$ unabhängige Beobachtungen, und $X_{(1)} \leq ... \leq X_{(n)}$ die geordneten Beobachtungen Die Funktion

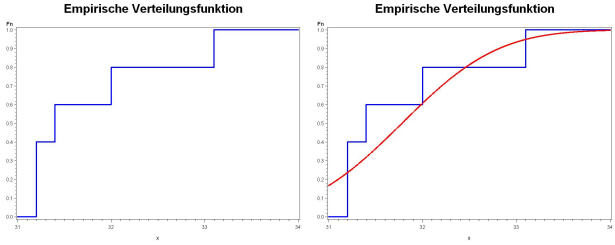
$$F_n(x) = \begin{cases} 0 & x < X_{(1)} \\ \frac{i}{n} & X_{(i)} \leq x < X_{(i+1)} \qquad i = 1...n \\ 1 & X_{(n)} \leq x \end{cases}$$

heißt empirische Verteilungsfunktion.

Satz v. Glivento-Cantelli: $F_n(x) \to F(x)$. (Hauptsatz der Mathematischen Statistik genannt)

EDF EDF_2

Die empirische Verteilungsfunktion



Anpassungstests

Auf der empirischen Verteilungsfunktion beruhende Tests

Kolmogorov-Smirnov-Test

$$D = \sqrt{n} \sup_x |F_n(x) - F_0(x)|$$

Cramér-von Mises-Test

$$\text{W-sq} = n \int_{-\infty}^{\infty} \big(F_n(x) - F_0(x)\big)^2 dF_0(x)$$

Anderson-Darling-Test

$$\text{A-sq} = n \int_{-\infty}^{\infty} \frac{(F_n(x) - F_0(x))^2}{F_0(x)(1 - F_0(x))} dF_0(x)$$

Anpassungstests auf Normalverteilung

Auf der empirischen Verteilungsfunktion beruhende Tests

hier:

$$\begin{aligned} F_0(x) &= \Phi\big(\frac{x - \hat{\mu}}{\hat{\sigma}}\big), \\ \hat{\mu} = \overline{X} &= \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} X_i, \\ \hat{\sigma}^2 = s^2 &= \frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^{n} (X_i - \overline{X})^2 \end{aligned}$$

$D \sim D_n$ (Kolmogorov-Verteilung) approx.

$$\lim_{n \to \infty} P_0(D < \frac{x}{\sqrt{n}}) = 1 - 2 \sum_{k=1}^{\infty} (-1)^k e^{-2k^2 x^2}$$

(Kolmogorov, 1933).

Anpassungstests auf Normalverteilung

Auf der empirischen Verteilungsfunktion beruhende Tests (2)

Modifikationen für endliche Stichproben (zur Info.)

D: $D \cdot (\sqrt{n} - 0.01 + 0.85/\sqrt{n})/\sqrt{n}$

A − sq: $A\text{-sq} \cdot (1.0 + 0.75/n + 2.25/n^2)$

W-sq: $W\text{-sq} \cdot (1.0 + 0.5/n)$

Große Werte von D, A-sq und W-sq führen jeweils zur Ablehnung von H_0.
p-Werte werden vom Programm berechnet.

Test_GoF_Banknote.sas Test_GoFDarwin.sas

10.3 Shapiro-Wilk-Test

Anpassungstests, Shapiro-Wilk-Test (1)
Vorbemerkungen:

$$X_i \sim \mathcal{N}(\mu, \sigma^2), \qquad Y_i = \frac{X_i - \mu}{\sigma} \sim \mathcal{N}(0,1)$$

$i = 1, \ldots, n$.
Geordnete Beobachtungen:

$$X_{(1)} \leq \ldots \leq X_{(n)} \qquad Y_{(1)} \leq \ldots \leq Y_{(n)}.$$

Die Erwartungswerte

$$\begin{aligned} m_i &:= E(Y_{(i)}) \\ &= \frac{n!}{(i-1)!(n-i)!} \cdot \int_{-\infty}^{\infty} t\ \Phi^{i-1}(t)(1-\Phi(t))^{n-i}\phi(t)dt \end{aligned}$$

sind bekannt (und vertafelt).

Shapiro-Wilk-Test (2)

Approximation (Blom, 1958)

$$m_i \approx \tilde{m}_i = \Phi^{-1}\left(\frac{i-0.375}{n+0.25}\right)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{E}X_{(i)} &= \mu + \sigma m_i \\ X_{(i)} &= \mu + \sigma m_i + \epsilon_i \end{aligned}$$

einfaches lineares Regressionsmodell mit Parametern μ, σ. $\mathbf{E}\epsilon_i = 0$, aber die ϵ_i sind nicht unabhängig.

$$\begin{aligned} \mathbf{V} &:= \operatorname{cov}(Y_{(i)}, Y_{(j)}), \qquad \mathbf{m}' := (m_1, \ldots, m_n) \\ \mathbf{X}' &:= (X_{(1)}, \ldots, X_{(n)}). \end{aligned}$$

Shapiro-Wilk-Test (3)
Verallgemeinerter Kleinster Quadrat-Schätzer von σ:

$$\hat{\sigma} = \frac{\mathbf{m}'\mathbf{V}^{-1}\mathbf{X}}{\mathbf{m}'\mathbf{V}^{-1}\mathbf{m}}$$

wird verglichen mit der gewöhnlichen empirischen Standardabweichung s

$$s^2 = \frac{1}{n-1}\sum_{i=1}^{n}(X_i - \overline{X})^2.$$

Bem.: Der gewöhnliche Kleinste Quadrat-Schätzer von σ ist:

$$\hat{\sigma}_{KQS} = \frac{\mathbf{m}'\mathbf{X}}{\mathbf{m}'\mathbf{m}}.$$

Shapiro-Wilk Test (4)

Shapiro-Wilk-Statistik

$$W = \frac{\hat{\sigma}^2}{s^2(n-1)} \cdot \frac{(\mathbf{m}'\mathbf{V}^{-1}\mathbf{m})^2}{\mathbf{m}'\mathbf{V}^{-2}\mathbf{m}} = \frac{(\mathbf{h}'\mathbf{X})^2}{\sum_{i=1}^n (X_i - \overline{X})^2 \cdot \mathbf{h}'\mathbf{h}}$$

wobei $\mathbf{h}' = \mathbf{m}'\mathbf{V}^{-1}$ (bekannt, vertafelt).

Wegen $\sum h_i = 0$ folgt:
W ist Quadrat des (empirischen) Korrelationskoeffizienten von $\mathbf{h}$ und $\mathbf{X}$:

$$W = \frac{\left(\sum_{i=1}^n (X_i - \overline{X})(h_i - \overline{h})\right)^2}{\sum_{i=1}^n (X_i - \overline{X})^2 \cdot \sum_{i=1}^n (h_i - \overline{h})^2},$$

Shapiro-Wilk Test (5)

$$W = \frac{\left(\sum_{i=1}^n (X_i - \overline{X})(h_i - \overline{h})\right)^2}{\sum_{i=1}^n (X_i - \overline{X})^2 \cdot \sum_{i=1}^n (h_i - \overline{h})^2},$$

- Offenbar: $0 \leq W \leq 1$.
- $W \approx 1$ indiziert, $\mathbf{h}' = \mathbf{m}'\mathbf{V}^{-1} (\approx 2\mathbf{m}')$ ist Vielfaches von $\mathbf{X}$.

  D.h. die Punkte $(m_i, X_{(i)})$ liegen etwa auf einer Geraden, was Normalverteilung indiziert.
- H_0 wird ablehnt, falls $W < W_\alpha(n)$. SAS verwendet dabei noch eine (Normalisierungs-)Transformation von W.

Test_GoF_Shapiro_Wilk.sas

Shapiro-Wilk Test (6)
zur groben Illustration:

Scores der 1. Wettkämpferinnen (5 Preisrichter)
31.2, 31.2, 31.4, 32.0, 33.1 Mit der Prozedur UNIVARIATE erhalten wir $s = 0.80747$ und mit der Prozedur GPLOT (Option REGEQN) $\sigma_{\hat{KQS}} = 0.805$ im Regressionsmodell $Y_i = \mu + \sigma m_i + \epsilon_i$ Es wird allerdings die verallgemeinerte KQS $\hat{\sigma}$ verwendet. Für die Shapiro-Wilk Statistik bekommen wir

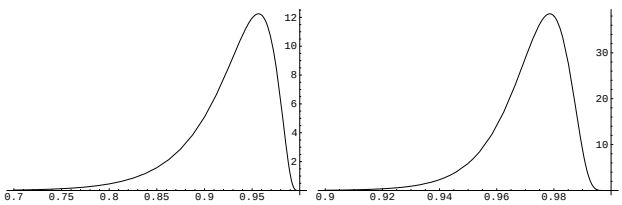
$$W = \frac{\hat{\sigma}^2}{s^2} \cdot c = 0.966 \qquad \text{(c: Normierungsfaktor)}$$

Nach der Transformation wird daraus: $W = 0.8125$.

Shapiro-Wilk Test (7)
Approximative Dichtefunktion von W (unter H_0)

$$W = \frac{\left(\sum_{i=1}^n (X_i - \overline{X})(h_i - \overline{h})\right)^2}{\sum_{i=1}^n (X_i - \overline{X})^2 \cdot \sum_{i=1}^n (h_i - \overline{h})^2},$$

$n = 10$ $n = 50$



Anpassungstests

- SAS verwendet eine Approximation von W.
- Der Shapiro-Wilk-Test erweist sich für kleinere, mittlere und größere Stichprobenumfänge als geeignetster Test (er hat für die meisten Alternativen die höchste Güte).
- Früher wurde meist der sogenannte χ^2-Anpassungstest verwendet. Dieser hat jedoch geringe Güte.
- W ist etwas besser als A-sq, besser als W-sq, und viel besser als D und χ^2.
- D ist nur für sehr große Stichprobenumfänge zu empfehlen ($n \geq 2000$).

Anpassungstests

- Man sollte beim Test auf Normalverteilung das Signifikanzniveau auf $\alpha = 0.1$ hochsetzen, insbesondere wenn wenig robuste Tests (die Normalverteilung verlangen) angewendet werden sollen.
- Die Verwendung eines Test auf Normalverteilung als Vortest für weitere Tests ist etwas umstritten.
- Robuste Tests haben meist geringen Effizienzverlust bei Vorliegen von Normalverteilung.

Durchführung des Tests auf Normalverteilung

Unter Verwendung von $\hat{\mu}, \hat{\sigma}$:

PROC UNIVARIATE NORMAL; **RUN**;

PROC UNIVARIATE; HISTOGRAM variable / NORMAL; **RUN**;

mit vorgebenen μ, σ: **PROC UNIVARIATE**; HISTOGRAM variable / NORMAL(mu=0, sigma=1); **RUN**;

Bem.: Mit der Prozedur UNIVARIATE (Kommando HISTOGRAM) können Sie auch auf andere Verteilungen testen.

10.4 Anpassungstests auf weitere Verteilungen

χ^2-Anpassungstest (Pearson, 1900)

Prinzip: Daten werden in p Klassen eingeteilt. Klassenhäufigkeiten: N_i theoretische Klassenhäufigkeiten: np_i

$$X^2 = \sum_{i=1}^{p} \frac{(N_i - np_i)^2}{np_i}$$

$X^2 \sim \chi^2_{p-1}$ asymptotisch (bei bekannten μ, σ^2) (Fisher, 1922)

$X^2 \sim \chi^2_{p-3}$ approx. (bei 2 zu schätzenden Parametern, ML-Schätzung mit gruppierten Daten oder Minimum-χ^2-Schätzung).

Anpassungstests

χ^2-Anpassungstest

Nachteile des χ^2-Anpassungstests

- Wert von X^2 abhängig von Klasseneinteilung.
- χ^2- Anpassungstest auf Normalverteilung hat geringe Güte.

Diskrete Verteilungen

Hier kann der χ^2-Anpassungstest genommen werden (natürliche Klasseneinteilung)

Prozedur FREQ, Option CHISQ

χ^2-Anpassungstest

Diskrete Gleichverteilung

PROC FREQ; TABLES var1 /CHISQ; **RUN**;

Sonstige diskrete Verteilungen

wie oben, zusätzlich sind die Einzelwktn. explizit zu formulieren, /CHISQ TESTP=$(p_1, ..., p_k)$;

Test_GoF_Poisson PoissonHorsekicks

Anzahlen schon gegeben

Die Variablen, die Anzahlen bezeichnen, werden durch ein WEIGHT-Kommando angegeben.

Anpassungstests

EDF-Tests

Stetige Verteilungen

zugelassen sind:

Normal, Gamma, Weibull, Lognormal, Exponential

HISTOGRAM var1 / Gamma;

Descr_Plot_Kuehl.sas

Test_GoF_Darwin_1.sas

11 Nichtparametrische Tests

11.1 Einführung

Es werden die wichtigsten Rang-Analoga zu den Tests in 7.2.-7.4., 8.1,8.3 behandelt.

10.1 Einführung

10.2 Einstichprobenproblem (vgl 7.2), 2 verbundene Stichproben (vgl. 7.3)

Vorzeichentest, Vorzeichen-Wilcoxon-Test

10.3 Zwei unverbundene Stichproben (vgl. 7.4)

Wilcoxon-Test

10.4 Mehrere unabhängige Stichproben (vgl. 8.1)

Kruskal-Wallis-Test

10.5 Mehrere verbundene Stichproben (vgl. 8.3)

Friedman-Test

Was tun wenn Normalverteilung nicht vorliegt?

Nichtparametrische Tests

- sie verwenden keine Parameterschätzung (wie $\overline{X}, s$)
- sie halten das Signifikanzniveau (α) für jede stetige Verteilung (approximativ) ein. α hängt also nicht von der zugrundeliegenden Verteilungsfunktion ab.
- sie sind relativ effizient. Der Effizienzverlust bei Normalverteilung ist in vielen Fällen gering!

Annahme: Verteilungsfunktion ist stetig (wenn nicht anders vermerkt)

11.2 Einstichprobenproblem

	Nulhypothese	Alternative
a)	$H_0: \quad \mu \leq \mu_0$	$H_A: \quad \mu > \mu_0$
b)	$H_0: \quad \mu \geq \mu_0$	$H_A: \quad \mu < \mu_0$
c)	$H_0: \quad \mu = \mu_0$	$H_A: \quad \mu \neq \mu_0$

Vorzeichentest

Wie bisher werden die Differenzen $X_i - \mu_0$ gebildet.

$$V_i := \begin{cases} 1 & \text{falls } X_i - \mu_0 > 0 \\ 0 & \text{falls } X_i - \mu_0 < 0 \end{cases}$$

$$V^+ = \sum_{i=1}^{n} V_i$$

$V^+ = \#$ Differenzen mit positivem Vorzeichen

Vorzeichentest (2)

Der Fall $X_i - \mu_0 = 0$ ***tritt wegen der Stetigkeit***

der Verteilungsfunktion nur mit Wahrscheinlichkeit Null auf. Sollte der Fall trotzdem eintreten (Messungenauigkeit) so wird die entsprechnede Beobachtung weggelassen und der Stichprobenumfang entsprechend verringert. (Nachteil: Es werden gerade Beobachtungen weggelassen, die für die Nullhypothese sprechen!)

Es gilt: $V^+ \sim Bi(n, \frac{1}{2})$

($V^+ = \#$ "Erfolge" bei n Versuchen mit Wkt. je $\frac{1}{2}$).

$\Rightarrow$ kritische Werte könnten leicht selbst bestimmt werden: BINV$(1-\alpha, n, \frac{1}{2})$ oder QUANTILE('Binomial',$1-\alpha, n, \frac{1}{2}$)

Vorzeichentest (3)

Teststatistik

$$\underline{M} = V^+ - \frac{n}{2} \qquad (= \frac{V^+ - V^-}{2}) \qquad \text{(zentrierte Statistik)}$$

n^+: Realisierung von V^+ n^-: Realisierung von V^-

Zweiseitiger p-Wert: $P(|\underline{M}| \geq |n^+ - \frac{n}{2}|) = P(|\underline{M}| \geq \max(n^+, n^-) - \frac{n}{2})$=(*)

$$\text{denn } |n^+ - \frac{n}{2}| = \begin{cases} n^+ - \frac{n}{2} & n^+ > \frac{n}{2} \\ \frac{n}{2} - n^+ & n^+ < \frac{n}{2} \\ = n^- - \frac{n}{2} & \end{cases}$$

Vorzeichentest (4)

Der p-Wert ist gleich

$$\begin{aligned} (*) &= P\big(V^+ - \frac{n}{2} \geq \max(n^+, n^-) - \frac{n}{2}\big) + P\big(\frac{n}{2} - V^+ \geq \max(n^+, n^-) - \frac{n}{2}\big) \\ &= P\big(V^+ \geq \max(n^+, n^-)\big) + P\big(n - V^+ \geq \max(n^+, n^-)\big) \\ &= 2 \sum_{j=\max(n^+,n^-)}^{n} \binom{n}{j} (\frac{1}{2})^j (\frac{1}{2})^{n-j} = (\frac{1}{2})^{n-1} \sum_{j=\max(n^+,n^-)}^{n} \binom{n}{j} \\ &= (\frac{1}{2})^{n-1} \sum_{j=0}^{\min(n^+,n^-)} \binom{n}{j}. \end{aligned}$$

Vorzeichentest (5)

Die Verteilung von V^+ ist diskret, d.h. es gibt nicht zu jedem α einen entsprechenden kritischen Wert. Aber: p-Werte gibt es immer, d.h.:

$$\begin{aligned} p < \alpha &\quad \Rightarrow \quad H_0 \text{ (c) ablehnen} \\ M > 0 \wedge \tfrac{p}{2} < \alpha &\quad \Rightarrow \quad H_0 \text{ (b) ablehnen} \\ M < 0 \wedge \tfrac{p}{2} < \alpha &\quad \Rightarrow \quad H_0 \text{ (a) ablehnen} \end{aligned}$$

Der Vorzeichentest ist meist nicht sehr effizient (Ausnahme: Verteilung=Doppelexponential) besser ist der Wilcoxon-Vorzeichen-Rangtest

Wilcoxon-Vorzeichen-Rangtest

Bilden zu den "Beobachtungen" $D_i = |X_i - \mu_0|$ die Rangzahlen, d.h. den Rang (den Platz) in der geordneten Stichprobe $\underbrace{D_{(1)}}_{\text{Rang 1}} \leq ... \quad ... \leq \underbrace{D_{(n)}}_{\text{Rang n}}$ Sei R_i^+ der Rang von D_i.

$$W_n^+ = \sum_{i=1}^{n} R_i^+ \cdot V_i$$

Summe der Ränge von D_i für die $X_i - \mu_0 > 0$.

Wilcoxon-Vorzeichen-Rangtest (2)

Erwartungswert und Varianz von W_n^+

$$\mathbf{E}_0 W_n^+ = \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{n} R_i^+ = \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{n} i = \frac{n\cdot(n+1)}{4} \qquad \mathbf{E}V_i = \frac{1}{2}$$

$$\text{var } W_n^+ = \mathbf{E}(W_n^+ - \mathbf{E}W_n^+)^2 = \frac{n\cdot(n+1)(2n+1)}{24} \quad (\text{ÜA})$$

Die Berechnung der exakten Verteilung von W_n^+ kann durch Auszählen aller Permutationen erfolgen ($\rightarrow$ schon für kleinere n größere Rechenzeit!)
Deshalb verwendet man (für mittlere und große n) die asymptotische Verteilung.

Wilcoxon-Vorzeichen-Rangtest (3)

Asymtotische Verteilung

$$W_n^+ \sim \mathcal{N}(EW_n^+, \text{var}W_n^+) \qquad \text{asymptotisch}$$

Große Werte von

$$\frac{|W_n^+ - EW_n^+|}{\sqrt{\text{var } W_n^+}}$$

führen zur Ablehnung von H_0 (gegen die zweiseitige Alternative).

Wilcoxon-Vorzeichen-Rangtest (4)

SAS-Implementation (Wilcoxon-Vorzeichen-Test)

$$S = W_n^+ - EW_n^+ = \sum_{X_i - \mu_0 > 0} R_i^+ V_i - \frac{n(n+1)}{4}$$

R_i^+ Rang von $|X_i - \mu_0|$,
Summe nur über positive $X_i - \mu_0$

$n \leq 20$: p-Werte aus der exakten Verteilung von S.

$n > 20$: Es wird eine t-Approximation verwendet:

$$t = \frac{S\cdot\sqrt{n-1}}{\sqrt{n \text{ Var } (S) - S^2}} \sim t_{n-1}$$

Wilcoxon-Vorzeichen-Rangtest (5)

Bindungen (= Messwertwiederholungen): Ränge werden gemittelt.
Sei t_i: # Bindungen in der i-ten Gruppe. Korrektur in Var(S):

$$\text{var}(S) = \frac{n(n+1)(2n+1)}{24} - \frac{1}{2}\sum t_i(t_i+1)(t_i-1)$$

Wilcoxon-Vorzeichen-Rangtest (6)

IQ-Werte von Studenten (Wiwi),

$H_0 : \mu = \mu_0 = 110$ $\quad H_1 : \mu > \mu_0$

x_i=IQ	d_i	$\lvert d_i \rvert$	r_i^+	V_i
99	-11	11	5	0
131	21	21	8	1
118	8	8	3	1
112	2	2	1	1
128	18	18	7	1
136	26	26	10	1
120	10	10	4	1
107	-3	3	2	0
134	24	24	9	1
122	12	12	6	1

$d_i = x_i - 110$

Vorzeichentest:

$M = 8 - \frac{10}{2}$

p-Wert(exakt) = 0.1094

Wilcoxon-signed

$W^+ - \mathbf{E}(W^+) = 48 - \frac{10 \cdot 11}{4} =$ 20.5. p-Wert=0.0371.

Test_IQ_Daten

Wilcoxon-Vorzeichen-Rangtest (7)

- Im Gegensatz zum Vorzeichentest ist der Vorzeichen-Wilcoxon-Test (= signed rank test) sehr effizient, bei Normalverteilung nur wenig schlechter, bei den meisten Verteilungen besser als der t-Test. ⇒ Wenn Normalverteilung nicht gesichert ist Vorzeichen-Wilcoxon-Rang-Test nehmen!
- Der Vorzeichentest und der (Vorzeichen-)Wilcoxon-Test sind sogenannte Rangtests, da sie nur auf den Rangzahlen der Beobachtungen beruhen. Es gibt weitere Rangtests.
- Durchführung der Tests: **PROC UNIVARIATE** MU0=Wert;

Zwei verbundene Stichproben

Bilden $Z := X - Y$ und testen wie beim Einstichprobenproblem, z.B.

$$H_0 : \mu_Z = 0 \qquad H_1 : \mu_Z \neq 0$$

Banknoten: oben-unten, links-rechts

Darwin: kreuz-selbstbefruchtete Pflanzen (zur Illustration mit Prozedur RANK)

PROC UNIVARIATE; VAR Z; **RUN**;

Npar_1_Banknote Npar_1_Darwin

Weitere Fragestellungen im Einstichprobenfall (1)

Binärvariablen

Sei X eine 0-1 Variable, d.h.

$$P(X = 0) = p, \quad P(X = 1) = 1 - p$$

$H_0 : p = p_0$ $\quad T$: Anzahl der Beobachtungen in Klasse 0.

H_{1a} $\quad p < p_0 :$ $\quad$ p-Wert $= P(T \leq t) =$ CDF('Binomial',t, n, p_o)

H_{1b} $\quad p > p_0 :$ $\quad$ p-Wert $= P(T \geq t)$

H_{1c} $\quad p \neq p_0 :$ $\quad$ p-Wert $= P(T \leq t$ oder $T \geq n - t + 1)$

Weitere Fragestellungen im Einstichprobenfall (2)

Binomialtest, PROC FREQ, Option Binomial im Tables-Kommando

T: zufällige Anzahl der Beobachtungen in Klasse 0 t: realisierte Anzahl der Beobachtungen in Klasse 0

$$\begin{aligned} \hat{p} &= \frac{t}{n} = \frac{\#\text{ Beobachtungen in Klasse 0}}{n} \\ \hat{se}(\hat{p}) &= \sqrt{\hat{p}(1-\hat{p})/n} = ASE \\ Z &= \frac{\hat{p} - p_0}{\hat{se}(\hat{p})} \end{aligned}$$

Einseitige p-Werte bei SAS sind

$$\begin{cases} P(Z > z) & \text{falls} \quad z > 0 \\ P(Z < z) & \text{falls} \quad z \leq 0 \end{cases}$$

Binomialtest
PROC FREQ; TABLES var / BINOMIAL(P=0.8); **RUN**;

Binomialtest_toxaemia.sas

Warenliefung, ÜA
Der Hersteller behauptet, höchstens 5% sind schlecht.
Sie haben $n = 20$ Stücke geprüft, und $X = 3$ schlechte Stücke gefunden. Hat der Hersteller recht?
Betrachten Sie sowohl die exakte als auch die asymptotische Version.

Konfidenzintervalle:
a) Normalapproximation: $\hat{p} \pm u_{\alpha/2} se(\hat{p})$
b) exakt: Binomialverteilung (CDF('Binomial',....))

Weitere Fragestellungen im Einstichprobenfall (4)
Zum Vergleich, zur Erinnerung und Ergänzung

χ^2-Anpassungstest
Anpassungstest auf diskrete Gleichverteilung:
PROC FREQ; TABLES var /CHISQ; **RUN**;

Anpassungstest auf vorgegebene diskrete Verteilung
PROC FREQ; TABLES var /CHISQ TESTP=$(p_1, ..., p_k)$; **RUN**;

Nichtparametrische Konfidenzintervalle
Option CIPCTLDF in der PROC UNIVARIATE
$(1-\alpha)$-Konfidenzintervall für p-Quantil, d.h. für x_p
Die Verteilung der j-ten Ordnungsstatistik $X_{(j)}$:

$$P(X_{(j)} \leq x) = \sum_{i=j}^{n} \binom{n}{i} F(x)^i (1 - F(x))^{n-i}$$

"Erfolg" gdw. $X_i < x$, "Erfolgswahrscheinlichkeit" $F(x)$.
Insbesondere, für $x = x_p$ (das wahre p-Quantil)

$$\begin{aligned} P(X_{(j)} \leq x_p) &= \sum_{i=j}^{n} \binom{n}{i} F(x_p)^i (1 - F(x_p))^{n-i} \\ &= \sum_{i=j}^{n} \binom{n}{i} p^i (1-p)^{n-i} \end{aligned}$$

Nichtparametrische Konfidenzintervalle

Option CIPCTLDF in der PROC UNIVARIATE (2)

$$P(X_{(j)} \leq x_p) = \sum_{i=j}^{n} \binom{n}{i} p^i (1-p)^{n-i}$$

Untere und obere Konfidengrenzen $X_{(l)}$ und $X_{(u)}$ für x_p werden so bestimmt, dass l und u (möglichst) symmetrisch um $\lfloor np \rfloor + 1$ und so dass (vgl. Hahn und Meeker, 1991, Bibliothek: SK850 H148)

$$P(X_{(l)} \leq x_p < X_{(u)}) = \sum_{i=l}^{u-1} \binom{n}{i} p^i (1-p)^{n-i} \geq 1 - \alpha$$

($X_{(\lfloor np \rfloor)}$ ist Schätzung für x_p.)

PROC UNIVARIATE CIPCTLDF;

11.3 Zweistichprobenproblem

Zwei unverbundene Stichproben: Wilcoxon Test

Wir setzen keine Normalverteilung voraus, aber den gleichen Verteilungstyp, insbesondere gleiche Varianzen

$H_0 : \mu_1 = \mu_2 \quad H_1 : \mu_1 \neq \mu_2$

$H_0 : \mu_1 \geq \mu_2 \quad H_1 : \mu_1 < \mu_2$

$H_0 : \mu_1 \leq \mu_2 \quad H_1 : \mu_1 > \mu_2$

Wir fassen die Beobachtungen $X_{11}, ..., X_{1n}, X_{21}, ..., X_{2m}$
zu einer Stichprobe zusammen und bilden die Rangzahlen R_{ij}, $i = 1, 2$, $j = 1 \ldots n, m$

$$\underbrace{Z_{(1)}}_{\text{Rang 1}} \leq ... \leq \underbrace{Z_{(n+m)}}_{\text{Rang n+m}}$$

Nichtparametrische Tests

Wilcoxon-Test

Summe der Ränge zur 1. bzw. 2. Stichprobe

$$S_1 = \sum_{j=1}^{n} R_{1j} \qquad S_2 = \sum_{j=1}^{m} R_{2j}$$

Die Erwartungswerte (unter H_0) sind

$$\mathbf{E}_0 S_1 = \frac{n(n+m+1)}{2} \quad \text{und} \quad \mathbf{E}_0 S_2 = \frac{m(n+m+1)}{2}$$

und die Varianzen

$$\text{var} S_1 = \text{var } S_2 = \frac{n \cdot m(n+m+1)}{12}.$$

Wilcoxon-Test (2)

Sei S die Statistik S_1 oder S_2, die zur kleineren Stichprobe gehört.

Die Teststatistik des Wilcoxon-Tests ist

$$Z = \frac{S - E(S)}{\sqrt{varS}} \qquad \text{SAS: } Z = \frac{S - E(S) + 0.5}{\sqrt{varS}}$$

$Z \sim \mathcal{N}(0,1)$ approximativ

(0.5 = Stetigkeitskorrektur) bei Bindungen: korrigierte (kleinere) Varianz

Npar1way_Carnitinfraktion.sas Npar1way_Banknote.sas Npar1way_Heroin.sas Npar1way_Tibetan.sas

Wilcoxon-Test (3)

- SAS gibt die Teststatistik (Z) und die ein- und zweiseitigen p-Werte an. a) $H_0 : \mu_1 = \mu_2$ $H_1 : \mu_1 \neq \mu_2$
  $\Rightarrow$ two-sided $Pr > |Z| = P(|Z| > Z)$ b) $H_0 : \mu_1 \leq \mu_2$ $H_1 : \mu_1 > \mu_2$ $\Rightarrow$ one-sided $z > 0$
  $\rightarrow P(Z > z) = Pr > Z$ c) $H_0 : \mu_1 \geq \mu_2$ $H_1 : \mu_1 < \mu_2$ $\Rightarrow$ one-sided $z < 0$
  $\rightarrow P(Z < z) = Pr < Z$

- SAS bietet die Normalapproximation und die t-Approximation an.

PROC NPAR1WAY WILCOXON; CLASS x; **RUN**;

Wilcoxon-Test (4)

- Manche Programmpakete, z.B. R, verwenden die Mann-Whitney-Version des Wilcoxon Tests mit folgender Prüfgröße

$$U = \sum_{i,j} I(X_i < Y_j),$$

wobei I Indikatorfunktion ist.

U zählt also alle Paare von X und Y-Beobachtungen, für die eine X-Beobachtung kleiner ist als eine Y-Beobachtung. Beide Versionen sind äquivalent, d.h. die p-Werte sind dieselben. Es gilt:

$$U = n(n+m) - \underbrace{\sum_{i=1}^{n} R_i}_{W} - \frac{(n-1)n}{2}$$

Fligner-Policello Test (1)

Verteilungsannahme: keine, außer Symmetrie.

Seien θ_1, θ_2 die Mediane von X bzw. Y.

$$\begin{aligned} H_0 &: \quad \theta_1 = \theta_2 \qquad H_1 : \quad \theta_1 \neq \theta_2 \\ H_0 &: \quad \theta_1 \leq \theta_2 \qquad H_1 : \quad \theta_1 > \theta_2 \\ H_0 &: \quad \theta_1 \geq \theta_2 \qquad H_1 : \quad \theta_1 < \theta_2 \end{aligned}$$

Placements:

$$Pl(X_i) = \sum_{j=1}^{n_2} I(Y_j < X_i) + \frac{1}{2} I(Y_j = X_i), \qquad \overline{Pl}_1 = \frac{1}{n_1} \sum_{i=1}^{n_1} Pl(X_i)$$

$$Pl(Y_j) = \sum_{i=1}^{n_1} I(X_i < Y_j) + \frac{1}{2} I(X_i = Y_j), \qquad \overline{Pl}_2 = \frac{1}{n_2} \sum_{j=1}^{n_2} Pl(Y_j)$$

Fligner-Policello Test (2)

Fligner-Policello Test

$$\begin{aligned} FP &= \frac{\sum_{j=1}^{n_2} Pl(Y_j) - \sum_{i=1}^{n_1} Pl(X_i)}{2\sqrt{V_1 + V_2 + \overline{Pl}_1 \overline{Pl}_2}} \\ V_1 &= \sum_{i=1}^{n_1} (Pl(X_i) - \overline{Pl}_1)^2, \qquad V_2 = \sum_{j=1}^{n_2} (Pl(Y_j) - \overline{Pl}_2)^2 \\ FP &\sim \mathcal{N}(0,1) \qquad \text{unter} \quad \theta_1 = \theta_2 \end{aligned}$$

PROC NPAR1WAY FP

Wir machen gar keine Verteilungsannahmen.

$$\begin{aligned} H_0: \quad & F_1 = F_2 \qquad & H_1: \quad & F_1 \neq F_2 \\ H_0: \quad & F_1 \leq F_2 \qquad & H_1: \quad & F_1 > F_2 \\ H_0: \quad & F_1 \geq F_2 \qquad & H_1: \quad & F_1 < F_2 \end{aligned}$$

Kolmogorov-Smirnov Test

$$\begin{aligned} D &= \max_i |F_{1,n}(x) - F_{2,m}(x)| \quad \text{(zweiseitig, EDF)} \\ D^+ &= \max_i (F_{1,n}(x) - F_{2,m}(x)) \quad \text{(einseitig, D)} \\ D^- &= \max_i (F_{2,m}(x) - F_{1,n}(x)) \quad \text{(einseitig, D)} \end{aligned}$$

PROC NPAR1WAY EDF D;

Cramér-von Mises Test

Wir machen gar keine Verteilungsannahmen.

$$\begin{aligned} H_0: \quad & F_1 = F_2 \qquad & H_1: \quad & F_1 \neq F_2 \\ H_0: \quad & F_1 \leq F_2 \qquad & H_1: \quad & F_1 > F_2 \\ H_0: \quad & F_1 \geq F_2 \qquad & H_1: \quad & F_1 < F_2 \end{aligned}$$

Cramér-von Mises Test

$$\begin{aligned} CM &= \frac{1}{n^2} \sum_{i=1}^{2} n_i \sum_{j=1}^{n_i} t_j (F_{1,n}(x_j) - F_n(x_j))^2 \\ F_n(x_j) &= \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{2} n_i F_{i,n} \end{aligned}$$

PROC NPAR1WAY EDF ;

Allgemeine Empfehlungen (1)

- Wenn Normalverteilung, gleiche Varianzen und keine Ausreißer: t-Test
- Wenn Normalverteilung, ungleiche oder unbekannte Varianzen und keine Ausreißer: Welch-Test (t-Test, unpooled, Satterthwaite)
- Wenn "sehr nahe" an Normalverteilung und keine Ausreißer: wie bei Normalverteilung
- keine Normalverteilung oder unbekannte Verteilung, gleiche Varianzen, und etwa gleicher Verteilungstyp (Ausreißer in begrenztem Maße erlaubt): Wilcoxon Test oder: Adaptiver Test (von SAS nicht angeboten)

Allgemeine Empfehlungen (2)

- keine Normalverteilung oder unbekannte Verteilung, ungleiche Varianzen, und etwa gleicher Verteilungstyp (Ausreißer in begrenztem Maße erlaubt) $n_1 \approx n_2$ oder $(n_1 > n_2, \sigma_1 < \sigma_2)$: Wilcoxon Test
- keine Normalverteilung oder unbekannte symmetrische Verteilung, ungleiche Varianzen, nicht zu kleine Stichprobenumfänge: Fligner-Policello Test
- keine Normalverteilung, Verteilungstypen verschieden, ungleiche Varianzen (kleine Varianz zu kleinem Stichprobenumfang): K-S Test oder: Brunner-Munzel Test (von SAS selbst nicht angeboten, kann aber heruntergeladen werden (TSP.sas): http://www.ams.med.uni-goettingen.de/amsneu/sasmakr-de.shtm

11.4 Mehrere unverbundene Stichproben

Modell:

$$Y_{ij} = \mu_i + \epsilon_{ij}, \quad \epsilon_{ij} \sim (0, \sigma^2) \quad \text{unabhängig}, i = 1, .., k, j = 1, ..., n_i.$$

$H_0 : \mu_1 = ... = \mu_k \qquad H_1 : \exists\ (i_1, i_2)\ \ \mu_{i_1} \neq \mu_{i_2}$

Wir fassen alle Beobachtungen $X_{11}, ..., X_{1n_1}, ..., X_{k1}, ..., X_{kn_k}$
zusammen und bilden die Rangzahlen R_{ij}, $i = 1...k, j = 1...n_i$.

Mit den Rangzahlen führen wir eine einfaktorielle Varianzanalyse durch = Kruskal-Wallis Test

Kruskal-Wallis Test

$$KW = \frac{\sum_{i=1}^{k}(T_i - E_0(T_i))^2 \cdot n_i}{S^2/(N-1)} = \frac{12\sum_{i=1}^{k}(T_i - E_0(T_i))^2 \cdot n_i}{N(N+1)},$$

wobei $T_i = \frac{1}{n_i}\sum_{j=1} R_{ij}$ mittlere Rangsumme der i-ten Gruppe

Kruskal-Wallis	Varianzanalyse
T_i	$\overline{Y}_{i.}$
$E_0 T_i = \frac{N+1}{2}$	$\overline{Y}_{..} = \overline{Y}$
Zähler	SSB
$S^2 = \frac{(N-1)N(N+1)}{12} = \sum_i \sum_j (R_{ij} - \frac{N+1}{2})^2$	SST
$N = \sum_{i=1}^{k} n_i$ Gesamtstichprobenumfang	

Kruskal-Wallis-Test (2)

$$\begin{aligned}
S^2 &= \sum_i \sum_j (R_{ij} - \frac{N+1}{2})^2 == \sum_{k=1}^{N} (k - \frac{N+1}{2})^2 \\
&= \sum_k k^2 - (N+1)\sum_k k + \frac{(N+1)^2}{4} \cdot N \\
&= \frac{N(N+1)(2N+1)}{6} - \frac{N(N+1)^2}{2} + \frac{(N+1)^2}{4} \cdot N \\
&= \frac{(N+1)\cdot N}{12}\big(4N + 2 - 6N - 6 + 3N + 3\big) \\
&= \frac{N(N+1)}{12} \cdot (N-1) = \frac{(N-1)\cdot N \cdot (N+1)}{12}.
\end{aligned}$$

Kruskal-Wallis-Test (3)

Vorteil: S^2 ist nicht zufällig, hängt nur vom Stichprobenumfang ab.

$KW \sim \chi^2_{k-1}$ (asymptotisch)

H_0 ablehnen, falls p-value = "Pr > Chi Square" $< \alpha$

SAS-Output

Mean Score: T_i

Chi-Square: realisierte KW

DF=$k-1$: Freiheitsgrade.

Npar1way_Maschinen.sas PI12erg.sas

Kruskal-Wallis-Test (4)

- Bei Bindungen erfolgt eine Korrektur der Statistik, es werden die Ränge gemittelt.
- KW-Test ist relativ effizient bei Normalverteilung. Bei Nicht-Normalverteilung meist besser als der Varianzanalyse-F-Test.
- KW-Test hält (wie alle nichtparametrischen Tests) asymptotisch das Signifikanzniveau ein.
- kleine Stichproben ($N \leq 20$): Option EXACT möglich

PROC NPAR1WAY WILCOXON; CLASS Faktor; VAR var; EXACT Wilcoxon; **RUN**;

Kruskal-Wallis-Test (5)

- Auch beim Kruskal-Wallis Test wird eine Stetigkeitskorretur vorgenommen. Wenn diese nicht erwünscht ist, so Option CORRECT=NO ziehen.
- Mit der Option DSCF können Sie auch wieder paarweise multiple Vergleiche durchführen.

11.5 Mehrere verbundene Stichproben

Friedman Test

Modell, wie bei der 2-faktoriellen Varianzanalyse

$$Y_{ij} = \mu + \alpha_i + \beta_j + \epsilon_{ij}, \quad \epsilon_{ij} \sim (0, \sigma^2) \quad \text{unabhängig}$$

$$j = 1, \ldots, k, i = 1, \ldots, n$$

$H_0 : \beta_1 = ... = \beta_k (= 0) \qquad H_1 : \exists\ (j_1, j_2) : \beta_{j1} \neq \beta_{j2}$

Ränge werden zeilenweise gebildet, $Y_{1(1)} \leq ... \leq Y_{1(k)}$
R_{ij} der Rang von Y_{ij} in der i-ten Zeile.

Nichtparametrische Tests

Friedman Test (2)

	Behandlung				
Block	1	2	...	k	Zeilensummme
1	R_{11}	R_{12}	...	R_{1k}	$\frac{k(k+1)}{2}$
.					
.					
n	R_{n1}	R_{n2}	...	R_{nk}	$\frac{k(k+1)}{2}$
	$R_{.1}$	$R_{.2}$	...	$R_{.k}$	$\frac{nk(k+1)}{2}$
	$n\overline{R}_{.1}$	$n\overline{R}_{.2}$	...	$n\overline{R}_{.k}$	

$$F_k = \frac{n^2 \sum_{j=1}^{k} (\overline{R}_{.j} - E(\overline{R}_{.j}))^2}{n \cdot k(k+1)/12}$$

Nichtparametrische Tests

Friedman Test (3)

$$F_k = \frac{n^2 \sum_{j=1}^{k} (\overline{R}_{.j} - E(\overline{R}_{.j}))^2}{n \cdot k(k+1)/12}$$

$\overline{R}_{.j} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} R_{ij}$ Spaltenmittel der j-ten Spalte (Vergleiche mit $\overline{Y}_{.j}$)

$E\overline{R}_{.j} = \frac{1}{n} \cdot \frac{n(k+1)}{2} = \frac{k+1}{2}$ (Vergleiche mit $\overline{Y}_{..}$)

$$\text{Unter } H_0: \qquad F_k \sim \chi^2_{k-1} (\text{asymptotisch})$$

H_0 ablehnen, falls $F_k > \chi^2_{1-\alpha,k-1}$ oder falls p-value $< \alpha$.

Nichtparametrische Tests

Friedman-Test (4)

- Bei Bindungen Korrektur des Nenners.
- Für kleinere n ist Friedman-Test (asymptotisch) meist etwas konservativ (d.h. der wahre Fehler 1. Art ist kleiner als z.B. 0.05).
- Für größere k (etwa $k \geq 5$) ist der Friedman-Test (bei Normalverteilung) einigermaßen effizient.
- Für $k = 2$ ist der Friedman-Test zum Vorzeichentest äquivalent (also nicht besonders effizient).

Durchführung des Friedman-Tests

PROC FREQ; TABLES Faktor A * Faktor B * Y /CMH2 SCORES=RANK NOPRINT; **RUN**;

NOPRINT: unterdrückt den Druck von Kontingenztafeln

SCORES=RANK: Ränge werden (zeilenweise) gebildet.

CMH2: Cochran-Mantel-Haenszel

Test_Friedman_Hypnose.sas Test_Friedman_Synchro.sas

Hier ist nur die folgende Zeile interessant: *Row Mean Scores Differ*

12 Korrelation und Regression

Übersicht

12.1 Korrelation und Unabhängigkeit

Unabhängigkeit und Unkorreliertheit, Wdh.

Die Zufallsvariablen $X_1, \ldots, X_N$ heißen unabhängig, falls für alle $x_1, \ldots, x_N \in \mathbb{R}$

$$P(X_1 < x_1, \ldots, X_N < x_N) = P(X_1 < x_1) \cdots P(X_N < x_N)$$

Die Zufallsvariablen $X_1, \ldots, X_N$ heißen unkorreliert, falls

$$\mathbf{E}(X_1 \cdots X_N) = \mathbf{E}(X_1) \cdots \mathbf{E}(X_N).$$

Unabhängigkeit	$\Rightarrow$	Unkorreliertheit	
	$\not\Leftarrow$		
Unabhängigkeit	$\Leftrightarrow$	Unkorreliertheit	falls $X_i \sim \mathcal{N}$

Korrelation und Unabhängigkeit

Fall a) Stetige (metrische) Merkmale

Seien (X_i, Y_i), $i = 1, \ldots, N$ unabhängige bivariate Zufallsvariablen. Wir testen

H_0 : X und Y sind unabhängig (unkorreliert) gegen

H_1 : X und Y sind linear abhängig (korreliert)

Pearson-Korrelation

$$r_{XY} = \frac{\sum (X_i - \overline{X})(Y_i - \overline{Y})}{\sqrt{\sum (X_i - \overline{X})^2 \sum (Y_i - \overline{Y})^2}}$$

$$T = \sqrt{N-2} \cdot \frac{r_{XY}}{\sqrt{1 - r_{XY}^2}} \sim t_{N-2}$$

wird in SAS zur Berechnung der p-Werte verwendet.

Korrelation und Unabhängigkeit

Fall a) Stetige (metrische) Merkmale (3)

H_0 : X und Y sind unabhängig (unkorreliert) gegen

H_1 : X und Y sind monoton abhängig

Spearman-Rangkorrelationskoeffizient

$$r_S = \frac{\sum_{i=1}^{n} (R_i - \overline{R})(S_i - \overline{S})}{\sqrt{\sum_i (R_i - \overline{R})^2 \sum_i (S_i - \overline{S})^2}}$$

Weitere Korrelationskoeffizienten: Kendall.

Wenn keine Normalverteilung vorliegt, so Spearman oder Kendall nehmen!

Korrelation und Unabhängigkeit

a) Metrisch skalierte Merkmale

PROC CORR PEARSON SPEARMAN KENDALL; VAR vars; **RUN**;

b) Ordinal oder nominal skalierte Merkmale

PROC FREQ; TABLES var1*var2 / CHISQ; **RUN**;

Descr_Scatter.sas Descr_Scatter_Heroin.sas

Ordinal oder nominal skalierte Merkmale

Frage: Bestehen Abhängigkeiten?
Geschlecht - Studienfach Studiengang - Note Geburtsmonat - IQ

Antwort: χ^2 - Unabhängigkeitstest (Pearson, 1908)

Annahme: X hat Ausprägungen $a_1, \ldots, a_m$ Y hat Ausprägungen $b_1, \ldots, b_l$

(sind die Daten metrisch, so wird automatisch eine Klasseneinteilung vorgenommen.)

$$P(X = a_i) = p_{i.} \qquad P(Y = b_j) = p_{.j}, \qquad P(X = a_i, Y = b_j) = p_{ij}$$

Häufigkeitstabelle (= Kontingenztafel)

$X\|Y$	b_1	b_2	$\cdots$	b_j	$\cdots$	b_l	
a_1	h_{11}	h_{12}	$\cdots$	h_{1j}	$\cdots$	h_{1l}	$h_{1.}$
a_2	h_{21}	h_{22}	$\cdots$	h_{2j}	$\cdots$	h_{2l}	$h_{2.}$
$\cdots$							
a_i	h_{i1}	h_{i2}	$\cdots$	h_{ij}	$\cdots$	h_{iN}	$h_{i.}$
$\cdots$							
a_m	h_{m1}	h_{m2}	$\cdots$	h_{mj}	$\cdots$	h_{ml}	$h_{m.}$
	$h_{.1}$	$h_{.2}$	$\cdots$	$h_{.j}$	$\cdots$	$h_{.l}$	$h_{..}$=n

h_{ij}: Häufigkeiten

Unabhängigkeitstests
Die Häufigkeiten h_{ij} werden verglichen mit den theoretischen Häufigkeiten np_{ij}.

$$\begin{aligned} H_0: \quad p_{ij} &= p_{i.} \cdot p_{.j}, \quad i = 1, ..., m, j = 1, ...l \\ H_1: \quad p_{ij} &\neq p_{i.} \cdot p_{.j}, \quad \text{für ein Paar}(i, j) \end{aligned}$$

H_0: X und Y sind unabhängig. H_1: X und Y sind abhängig.

Betrachten zunächst die Stichprobenfunktion

$$\widetilde{T} = \sum_i \sum_j \frac{(h_{ij} - np_{ij})^2}{np_{ij}}$$

Unabhängigkeitstests
Konstruktion der Teststatistik
Unter H_0 (X und Y unabhängig) gilt: $p_{ij} = p_{i.}p_{.j}$.
Problem: $p_{i.}$ und $p_{.j}$ sind unbekannt. Sie müssen also geschätzt werden,
das sind $m + l - 2$ Parameter ($\sum p_{i.} = \sum p_{.j} = 1$)

$$\hat{p}_{i.} = \frac{h_{i.}}{n} \qquad \hat{p}_{.j} = \frac{h_{.j}}{n}$$

$$h_{i.} = \sum_{j=1}^{l} h_{ij} \qquad h_{.j} = \sum_{i=1}^{m} h_{ij}$$

Unabhängigkeitstests

Einsetzen der Schätzungen in $\widetilde{T}$

$$\begin{aligned} Q_P &= \sum_i \sum_j \frac{(h_{ij} - n\hat{p}_{i.}\hat{p}_{.j})^2}{n\hat{p}_{i.}\hat{p_{.j}}} \\ &= n \sum_i \sum_j \frac{(h_{ij} - \frac{h_{i.}h_{.j}}{n})^2}{h_{i.}h_{.j}} \\ &\sim \chi^2_{(m-1)(l-1)} \quad \text{approximativ, unter } H_0 \end{aligned}$$

Die Anzahl der Freiheitsgrade ergibt sich aus:

$m \cdot l - 1 - \underbrace{(m + l - 2)}_{\#\text{geschätzte Werte}}$

H_0 ablehnen, falls

$$Q_P > \chi^2_{1-\alpha,(m-1)(l-1)}, \quad \text{bzw. falls p-Wert} < \alpha$$

Korrelation und Unabhängigkeit

Faustregel für die Anwendung des χ^2-Unabhängigkeitstests:

- alle $h_{ij} > 0$.
- $h_{ij} \geq 5$ für mindestens 80% der Zellen, sonst Klassen zusammenfassen.

Descr_Freq_Heroin_Unabhaengigkeitstest

Weitere Unabhängigkeitstests (1)

- LQ-χ^2- Unabhängigkeitstest

$$G^2 = 2 \sum_i \sum_j h_{ij} \ln \frac{n h_{ij}}{h_{i.} h_{.j}} \sim \chi^2_{(m-1)(l-1)}$$

- Continuity Adjusted χ^2 (bei SAS nur: 2x2-Tafel)

$$Q_c = n \sum_i \sum_j \frac{\max(0, |h_{ij} - \frac{h_{i.}h_{.j}}{n}| - 0.5)^2}{h_{i.}h_{.j}} \sim \chi^2_{(m-1)(l-1)}$$

- Mantel-Haenszel (r_{XY}: Pearson-Korrelation)

$$Q_{MH} = (n-1) r^2_{XY} \sim \chi^2_1$$

- Phi-Koeffizient

$$\Phi = \begin{cases} \frac{h_{11}h_{22} - h_{12}h_{21}}{\sqrt{h_{1.}h_{2.}h_{.1}h_{.2}}} & m = l = 2 \\ \sqrt{Q_p/n} & sonst \end{cases}$$

Weitere Unabhängigkeitstests (2)

- Kontingenzkoeffizient

$$P = \sqrt{\frac{Q_P}{Q_P + n}}$$

- Fishers Exact Test (bei 2x2-Tafeln) durch Auszählen aller Tafel-Möglichkeiten bei gegebenen Rändern. (gilt als etwas konservativ.)

• Cramers V

$$V = \begin{cases} \Phi & \text{falls} \quad \text{2x2 Tafel} \\ \sqrt{\frac{Q_P/n}{\min(m-1,l-1)}} & \text{sonst} \end{cases}$$

Weitere Unabhängigkeitstests (3)

Anmerkungen

• Mantel- Haenszel Test verlangt ordinale Skalierung, vgl. $(n-1)r^2_{XY}$ 'gut' gegen lineare Abhängigkeit.

• Der χ^2 Unabhängigkeitstest testet gegen allgemeine Abhängigkeit.

• Der LQ-Test G^2 ist plausibel und geeignet.

• Der LQ-Test G^2 und der χ^2 Unabhängigkeitstest sind asymptotisch äquivalent.

Unabhängigkeitstests

Φ-*Koeffizient (2x2 Tafel)*

Y X	Sportler	Nichtsportler	Summe
w	p_{11}	p_{12}	$p_{1.}$
m	p_{21}	p_{22}	$p_{2.}$
Summe	$p_{.1}$	$p_{.2}$	1

$$X \sim Bi(1, p_{.2}) \qquad Y \sim Bi(1, p_{2.})$$

$$\begin{aligned} \mathbf{E}(X) &= p_{.2} \quad var(X) = p_{.2}(1-p_{.2}) = p_{.2}p_{.1} \\ \mathbf{E}(Y) &= p_{2.} \quad var(Y) = p_{2.}(1-p_{2.}) = p_{2.}p_{1.} \end{aligned}$$

$$cov(X,Y) = \mathbf{E}(X \cdot Y) - \mathbf{E}(X)\mathbf{E}(Y) = p_{22} - p_{.2}p_{2.}$$

Unabhängigkeitstests

Korrelationskoeffizient in einer 2x2 Tafel

$$\rho = \frac{p_{22} - p_{.2}p_{2.}}{\sqrt{p_{.2}p_{1.}p_{2.}p_{.1}}} = \frac{p_{11}p_{22} - p_{12}p_{21}}{\sqrt{p_{.2}p_{2.}p_{1.}p_{.1}}}$$

$$\begin{aligned} p_{22} - p_{2.}p_{.2} &= p_{22} - (p_{21}+p_{22})(p_{12}+p_{22}) \\ &= p_{22} - (p_{21}p_{12} + p_{22}p_{12} + p_{21}p_{22} + p_{22}^2) \\ &= p_{22}(1 - p_{12} - p_{21} - p_{22}) - p_{21}p_{12} \\ &= p_{22}p_{11} - p_{21}p_{12} \end{aligned}$$

Für $m = l = 2$ ist der Phi-Koeffizient eine Schätzung des Korrelationskoeffizienten.

12.2 Lineare Regression

Einfache lineare Regression (vgl. Kap. 6.3)

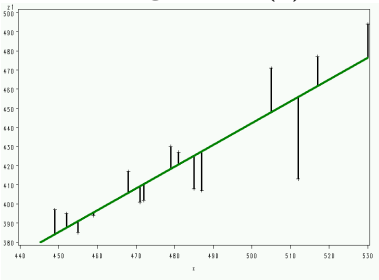
$$Y_i = \theta_0 + \theta_1 X_i + \epsilon_i \qquad \epsilon_i \sim (0, \sigma^2)$$

$$\begin{aligned} \hat{\theta}_1 &= \frac{S_{XY}}{S_X^2} \\ \hat{\theta}_0 &= \frac{1}{n}\left(\sum Y_i - \hat{\theta}_1 \sum X_i\right) = \overline{Y} - \hat{\theta}_1 \overline{X} \end{aligned}$$

als Lösung der Minimumaufgabe

$$\sum_{i=1}^{n} (Y_i - \theta_1 X_1 - \theta_0)^2 \rightarrow \text{ min.}$$

Lineare Regression (2)



Die Summe der Quadrate der Länge der Streckenabschnitte soll minimal werden.

$$\begin{aligned} S_{XY} &= \frac{1}{n-1} \sum_i (X_i - \overline{X})(Y_i - \overline{Y}) \\ S_X^2 &= \frac{1}{n-1} \sum_i (X_i - \overline{X})^2 \end{aligned}$$

Regression_Venusmuscheln Regression_Plot

Lineare Regression (3)

PROC REG; MODEL y = x1 / Optionen; **RUN**;

Multiple lineare Regression

Modell

$$\begin{aligned} Y_i &= \theta_0 + \theta_1 x_{1i} + \theta_2 x_{2i} + ... + \theta_m x_{mi} + \epsilon_i \\ Y_i &= \theta_0 + \theta_1 X_{1i} + \theta_2 X_{2i} + ... + \theta_m X_{mi} + \epsilon_i \end{aligned}$$

Y_i, ϵ_i Zufallsvariablen, unabhängig, $\epsilon_i \sim (0, \sigma^2)$, $i = 1...n$
$\theta_0 ... \theta_m, \sigma$: Modellparameter $\Rightarrow$ zu schätzen

Man unterscheidet Fälle: $x_i = (x_{1i}, ..., x_{mi})$ fest, und $X_i = (X_{1i}, ..., X_{mi})$ zufällig oder auch gemischt.
Matrix-Schreibweise:

$$\mathbf{Y} = \mathbf{X}\boldsymbol{\theta} + \boldsymbol{\epsilon}$$

Multiple lineare Regression (2)

Modell

$$\mathbf{Y} = \mathbf{X}\boldsymbol{\theta} + \boldsymbol{\epsilon}$$

$$\mathbf{Y} = \begin{pmatrix} Y_1 \\ ... \\ Y_n \end{pmatrix}, \quad \mathbf{X} = \begin{pmatrix} 1 & X_{11} & ... & X_{1m} \\ . & . & ... & . \\ 1 & X_{n1} & ... & X_{nm} \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{\theta} = \begin{pmatrix} \theta_0 \\ ... \\ \theta_m \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{\epsilon} = \begin{pmatrix} \epsilon_1 \\ ... \\ \epsilon_n \end{pmatrix}$$

Methode der kleinsten Quadrate: Bestimme $\hat{\boldsymbol{\theta}}$ so daß

$$(\mathbf{Y} - \mathbf{X}\hat{\boldsymbol{\theta}})'(\mathbf{Y} - \mathbf{X}\hat{\boldsymbol{\theta}}) = \min_{\boldsymbol{\theta}}(\mathbf{Y} - \mathbf{X}\boldsymbol{\theta})'(\mathbf{Y} - \mathbf{X}\boldsymbol{\theta})$$

Multiple lineare Regression (2a)

Ableiten von $(\mathbf{Y} - \mathbf{X}\boldsymbol{\theta})'(\mathbf{Y} - \mathbf{X}\boldsymbol{\theta})$ nach $\boldsymbol{\theta}$ und Nullsetzen liefert:

$$\begin{aligned} 2(\mathbf{Y} - \mathbf{X}\boldsymbol{\theta})'\mathbf{X} &= 0 \\ \mathbf{Y}'\mathbf{X} - \boldsymbol{\theta}'\mathbf{X}'\mathbf{X} &= 0 \\ \mathbf{Y}'\mathbf{X} &= \boldsymbol{\theta}'\mathbf{X}'\mathbf{X} \\ \mathbf{X}'\mathbf{Y} &= \mathbf{X}'\mathbf{X}\boldsymbol{\theta} \\ \hat{\boldsymbol{\theta}} = \boldsymbol{\theta} &= (\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}'\mathbf{Y} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} 2(\underbrace{\mathbf{Y} - \mathbf{X}\hat{\boldsymbol{\theta}}}_{\hat{\boldsymbol{\epsilon}}})'\mathbf{X} &= \mathbf{0} \\ \hat{\boldsymbol{\epsilon}}'\mathbf{X} &= \mathbf{0} \quad \text{insbesondere} \\ \sum_{i=1}^{n} \hat{\epsilon}_i &= 0 \\ \sum_{i=1}^{n} \hat{\epsilon}_i X_{ij} &= 0 \quad \forall j \end{aligned}$$

Kleinste Quadrat Schätzung.

Multiple lineare Regression (3)

Kleinste Quadrat-Schätzung

Voraussetzung: $\text{rg}(\mathbf{X}'\mathbf{X}) = m$ (voll)

$$\hat{\boldsymbol{\theta}} = (\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}'\mathbf{Y}$$

wenn $(\mathbf{X}'\mathbf{X})$ nicht regulär: verallgemeinerte Inverse (Moore-Penrose)

$$\hat{\boldsymbol{\theta}} = (\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-}\mathbf{X}'\mathbf{Y}$$

Multiple lineare Regression (4)

Kleinste Quadrat-Schätzung, Spezialfall $m = 1$ (1)

$$\begin{aligned} (\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1} &= \left[\begin{pmatrix} 1 & 1 & ... & 1 \\ X_{11} & . & ... & X_{n1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & X_{11} \\ ... & ... \\ 1 & X_{n1} \end{pmatrix} \right]^{-1} \\ &= \begin{pmatrix} n & \sum_i X_i \\ \sum_i X_i & \sum_i X_i^2 \end{pmatrix}^{-1} \qquad (X_i = X_{1i}) \\ &= \frac{1}{n\sum X_i^2 - (\sum X_i)^2} \begin{pmatrix} \sum X_i^2 & -\sum X_i \\ -\sum X_i & n \end{pmatrix} \end{aligned}$$

Multiple lineare Regression (5)

Kleinste Quadrat-Schätzung, Spezialfall $m = 1$ (2)

$$\begin{aligned}
\mathbf{X'Y} &= \begin{pmatrix} 1 & 1 & ... & 1 \\ X_1 & . & ... & X_n \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} Y_1 \\ ... \\ Y_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sum Y_i \\ \sum X_i Y_i \end{pmatrix} \\
\hat{\boldsymbol{\theta}} &= (\mathbf{X'X})^{-1}\mathbf{X'Y} \\
&= \frac{1}{n\sum X_i^2 - (\sum X_i)^2} \begin{pmatrix} \sum X_i^2 \sum Y_i - \sum X_i \sum X_i Y_i \\ -\sum X_i \sum Y_i + n \sum X_i Y_i \end{pmatrix}
\end{aligned}$$

Multiple lineare Regression (6)

Schätzung für $\mathbf{Y}$: $\hat{\mathbf{Y}} = \mathbf{X}\hat{\boldsymbol{\theta}}$

Vergleiche mit $\mathbf{Y} = \mathbf{X}\boldsymbol{\theta} + \boldsymbol{\epsilon}$

Einsetzen von $\hat{\boldsymbol{\theta}} = (\mathbf{X'X})^{-1}\mathbf{X'Y}$:

$$\begin{aligned}
\hat{\mathbf{Y}} &= \underbrace{\mathbf{X}(\mathbf{X'X})^{-1}\mathbf{X'}}_{\mathbf{H'}}\mathbf{Y} \\
&= \mathbf{H'Y}
\end{aligned}$$

H: Hat-Matrix

Aus dem Beobachtungsvektor $\mathbf{Y}$ wird der geschätzte Beobachtungsvektor $\hat{\mathbf{Y}}$.

Multiple Lineare Regression (7)

Quadratsummenaufspaltung:

$$\underbrace{\sum (Y_i - \overline{Y})^2}_{SST} = \underbrace{\sum (\hat{Y}_i - \overline{Y})^2}_{SSM} + \underbrace{\sum (Y_i - \hat{Y}_i)^2}_{SSE}$$

$MST = \frac{1}{n-1}SST$: Schätzung für die Gesamtvarianz. $MSE = \frac{1}{n-m-1}SSE = \hat{\sigma}^2$. (erwartungstreu) $MSM = \frac{1}{m}SSM$ ($m+1$ Einflussvariablen)

Bestimmtheitsmaß (wie bei der Varianzanalyse)

$$R^2 = \frac{SSM}{SST}.$$

Multiple Lineare Regression (7a)

Quadratsummenaufspaltung: $\sum_i (Y_i - \overline{Y})^2 =$

$$\begin{aligned}
&= \sum_i (Y_i - \hat{Y}_i + \hat{Y}_i - \overline{Y})^2 \\
&= \sum_i (Y_i - \hat{Y}_i)^2 + \sum_i (Y_i - \overline{Y})^2 + 2\sum_i (Y_i - \hat{Y}_i)(\hat{Y}_i - \overline{Y})
\end{aligned}$$

Der letzte Summand $\sum_i \underbrace{(Y_i - \hat{Y}_i)}_{\hat{\epsilon}_i}(\hat{Y}_i - \overline{Y})$ ist

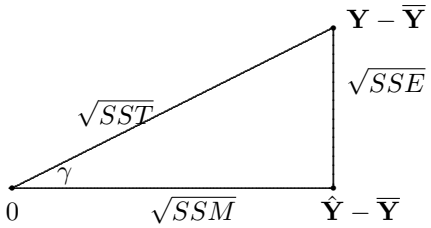
$$\begin{aligned}
&= \sum_i \hat{\epsilon}_i (\mathbf{X}\hat{\boldsymbol{\theta}})_i - \overline{Y} \underbrace{\sum_i \hat{\epsilon}_i}_{=0} = \sum_i \hat{\epsilon}_i \sum_j x_{ij}\hat{\theta}_j \\
&= \sum_j \hat{\theta}_j \underbrace{\sum_i \hat{\epsilon}_i x_{ij}}_{=0 \quad \forall j} = 0
\end{aligned}$$

Geometrische Veranschaulichung

$\mathbf{Y} = (Y_{11}, \ldots, Y_{kn})$ Dimension $N = n \cdot k$

$\hat{\mathbf{Y}} = (\hat{Y}_1, \ldots, \hat{Y}_N)$

$\overline{\mathbf{Y}} = (\underbrace{\overline{Y}, \ldots, \overline{Y}}_{\text{N mal}})$, $\overline{Y} = \frac{1}{N} \sum_{i,j} Y_{ij}$



$$\begin{aligned} SSM + SSE &= SST & R^2 = cos^2\gamma \\ ||\hat{\mathbf{Y}} - \overline{Y}||^2 + ||\mathbf{Y} - \hat{\mathbf{Y}}||^2 &= ||\mathbf{Y} - \overline{Y}||^2 \end{aligned}$$

Multiple Lineare Regression (8)

$H_0 : \theta_0 = \theta_2 = ... = \theta_m = 0 \quad H_1 :\sim H_0$

Unter der Annahme $\epsilon_i \sim \mathcal{N}(0, \sigma^2)$ gilt:

$$F = \frac{SSM}{SSE} \cdot \frac{n - m - 1}{m} \sim F_{m,n-m-1}$$

PROC REG; MODEL y = x1 x2 x3 / Optionen; TEST x2=0 x3=0; /*zusaetzl. Hypothesen*/ **RUN**;

Regression_Tibetan Regression_Phosphor

Multiple Lineare Regression (9)

Zusätzliche Hypothesen, z.B.

$H_{0a} : \theta_1 = 0$, $H_{1a} : \theta_1 \neq 0$

$H_{0b} : \theta_k = 0$, $H_{1b} : \theta_k \neq 0$

$H_{0c} : \theta_1 = \theta_2 = 0$, $H_{1c} : \theta_1 \neq 0 \vee \theta_2 \neq 0$

Multiple Lineare Regression (10)

R^2-adjustiert für Anzahl p der Parameter im Modell

$$Adj\_R^2 = 1 - \frac{n - i}{n - p}(1 - R^2)$$

$$\begin{cases} i = 0 & \text{ohne intercept} \\ i = 1 & \text{mit intercept} \end{cases}$$

Dependent Mean: Mittelwert der abhängigen Variable (Y)

StdError MeanPredict: Standardfehler für vorhergesagten Erwartungswert (erscheint nur, wenn Option CLM gezogen)

Multiple Lineare Regression (11)

Optionen (Auswahl)

XPX:	Ausgabe der Matrizen $\mathbf{X'X}, \mathbf{X'Y}, \mathbf{Y'Y}$
I:	Ausgabe der Inversen von $\mathbf{X'X}$
COVB:	Schätzung der Kovarianzmatrix der Schätzung $= \hat{\sigma}^2(\mathbf{X'X})^{-1}$
CLM, CLI:	Konfidenzbereiche (s.u.)
CLB:	Konfidenzintervall für Parameter $\boldsymbol{\theta}$
R:	studentisierte Residuen (s.u.)
DW:	Durbin-Watson "Test" auf Autokorrelation (s.u.)

Output Statistics (Optionen CLI, CLM, R)

Dependent Variable	Y_i
Predicted Value	$\hat{Y}_i = (\hat{\boldsymbol{\theta}}\mathbf{X})_i$
StdErrorMeanPredict	$\hat{\sigma}_{\hat{Y}_i}$
95% CL Mean (s.u.)	nur Variablität in Parameter-schätzung berücksichtigt
95% CL Predict (s.u.)	Variablilität im Fehlerterm mit berücksichtigt
Residual	$e_i = Y_i - \hat{Y}_i$
StdErrorResidual	$s\sqrt{1-h_{ii}}$, s.u.
Student Residual	r_i s.u.
Cook's D_i	s.u.
Predicted Residual SS	s.u.

Lineare Regression

Multiple Lineare Regression (13)

Konfidenzintervalle für allgemeinen Parameter ϑ_i:

$$\frac{\hat{\vartheta}_i - \vartheta_i}{s_{\hat{\vartheta}_i}} \sim t_{n-1} \qquad \underline{\text{Vor.}}\ \epsilon_j \sim \mathcal{N}(0, \sigma^2)$$

KI: $[\hat{\vartheta}_i - t_{1-\frac{\alpha}{2},n-1} \cdot s_{\hat{\vartheta}_i}, \hat{\vartheta}_i + t_{1-\frac{\alpha}{2},n-1} \cdot s_{\hat{\vartheta}_i}]$

95% Konfidenzintervall für $\underline{E(Y_i)}$

($\vartheta_i = \mathbf{E}(Y_i)$, Option CLM) Nur die Variabilität in der Parameterschätzung wird berücksichtigt.

Lineare Regression

Multiple Lineare Regression (14)

95% Konfidenzintervall für Vorhersagen $\underline{Y_i}$

($\vartheta_i = Y_i$, Option CLI) Die Variabilität im Fehlerterm wird mit berücksichtigt.

95% Konfidenzintervall für $\boldsymbol{\theta}$

($\vartheta_i = \theta_j$, Option CLB)

Darstellung von Konfidenzbereichen bei der einfachen Regressionsanalyse

SYMBOL I=RLCLI95; **PROC GPLOT**;

Residualanalyse (1)

Studentisierte Residuen (Option R)

$$r_i = \frac{e_i}{s\sqrt{1-h_{ii}}}$$

$e_i = y_i - \hat{y}_i$ (Residuen) sind korreliert, var $e_i = \sigma^2(1-h_{ii})$ $s = \hat{\sigma}$

Cook's D_i

$$D_i = \frac{(\hat{\boldsymbol{\theta}} - \hat{\boldsymbol{\theta}}_{(i)})'(\mathbf{X}'\mathbf{X})(\hat{\boldsymbol{\theta}} - \hat{\boldsymbol{\theta}}_{(i)})}{(m+1)S^2}, \qquad i = 1...n$$

beschreibt den Einfluß der i-ten Beobachtung auf die Parameterschätzung $\hat{\boldsymbol{\theta}}_{(i)}$: KQS von $\boldsymbol{\theta}$ ohne Beobachtung i. Faustregel: $D_i > 1 \rightarrow$ 'starker' Einfluß

Residualanalyse (2)

Predicted Residual SS (PRESS)

$$\sum (y_i - \hat{y}_{i(i)})^2$$

$\hat{y}_{i(i)}$: i-te Beobachtung weggelassen.

"Test" auf Autokorrelation: Durbin-Watson-Test (Option DW)

$$DW = \frac{\sum_{i=2}^{n}(e_i - e_{i-1})^2}{\sum_{i=1}^{n} e_i^2}$$

DW=2: Unkorreliertheit der Residuen

Weitere Bewertung der Residuen

Kommando PLOT in der Prozedur REG

PLOT rstudent.*obs.; PLOT residual.*y residual.*predicted.; OUTPUT OUT=dateiname RESIDUAL=;

und evtl. Test auf Normalverteilung.

rstudent.	:	studentisierte Residuen
residual.	:	Residuen
obs	:	Beobachtungsnummer
y	:	beobachteter Wert von Y
predicted.	:	geschätzter Wert von Y: $\hat{Y}$

Anmerkung: wenn Sie ODS graphics on gesetzt haben, kommen eine Reihe der o.g. Plots automatisch.

Multiple Lineare Regression (Fortsetzung)

Modellwahl in der linearen Regression

SELECTION=

BACKWARD: Alle Variablen, die mit größten p-Wert werden nacheinander herausgenommen (min. p-Wert: SLSTAY [=0.1])

FORWARD: Start ohne Variablen, die Var. mit kleinstem p-Wert kommt hinzu (max. p-Wert: SLENTRY[= 0.5])

STEPWISE: Start ohne Variable, 1.Schritt wie bei FORWARD (Standard: SLENTRY = 0.15), Variablen können wieder eliminiert werden (Standard: SLSTAY=0.1)

MAXR: Für jeweils eine feste Anzahl von Variablen wird das Modell mit max. R^2 ausgegeben.

Werte in [ ] sind Standardwerte

Multiple Lineare Regression (Fortsetzung)

a) Wenn $rg(\mathbf{X'X})$ nicht voll ($< m+1$)

$\Rightarrow (\mathbf{X'X})^-$ und Anmerkung im Output

b) Condition number

$\sqrt{\frac{\lambda max}{\lambda min}}$ $\lambda_{max}, \lambda_{min}$ größter und kleinster Eigenwert von $\mathbf{X'X}$ (ohne 1-Spalte).
große Konditionszahl (etwa > 30): schlechte Kondition ($\approx$ lineare Abhängigkeit)

c) C(p): Mallows (1973) Kriterium für die Modellwahl

$$C(p) = \frac{SSE_p}{MSE} - n + 2p$$

SSE_p: SSE im Modell mit p Parametern

Multiple Lineare Regression (Fortsetzung)

Modellwahl in der linearen Regression

$$\begin{aligned} R^2 &= \frac{SSM}{SST} \\ C(p) &= \frac{SSE_p}{MSE} - n + 2p \end{aligned}$$

SSE_p: SSE im Modell mit p Parametern
Ziel: R^2 groß, $C(p)$ nahe p

Idee von $C(p)$: Wenn die Wahl von p Parametern gut, dann

$$MSE \approx MSE_p = \frac{SSE_p}{n-p} \quad \Rightarrow \quad C(p) \approx n - p - n + 2p = p$$

Regression_Tibetan_Modellwahl
Einfache Varianzanalyse: $Y_{ij} = \mu + \alpha_j + \epsilon_{ij}$

$$\begin{pmatrix} Y_{11} \\ Y_{21} \\ ... \\ Y_{n_1 1} \\ Y_{12} \\ ... \\ Y_{n_2 2} \\ ... \\ ... \\ Y_{1k} \\ ... \\ Y_{n_k k} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 & ... & 0 \\ 1 & 1 & 0 & ... & 0 \\ . & . & . & & . \\ 1 & 1 & 0 & ... & 0 \\ 1 & 0 & 1 & ... & 0 \\ . & . & . & & . \\ 1 & . & 1 & ... & 0 \\ . & . & 0 & ... & 0 \\ . & . & . & & . \\ 1 & . & . & 0 & 1 \\ . & . & . & & \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mu \\ \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ ... \\ \alpha_k \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \epsilon_{11} \\ . \\ . \\ . \\ . \\ . \\ . \\ . \\ . \\ . \\ . \\ \epsilon_{n_k k} \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{Y} = \mathbf{X}\boldsymbol{\theta} + \boldsymbol{\epsilon}$$

Multiple Lineare Regression (Fortsetzung)

$$\begin{pmatrix} Y_1 \\ ... \\ ... \\ Y_N \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & X_{11} & ... & X_{1p} \\ . & ... & & ... \\ . & ... & & ... \\ 1 & X_{N1} & ... & X_{Np} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mu \\ \theta_1 \\ ... \\ \theta_p \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \epsilon_1 \\ ... \\ ... \\ \epsilon_N \end{pmatrix} \Leftrightarrow$$

$$\mathbf{Y} = \mathbf{X}\boldsymbol{\theta} + \boldsymbol{\epsilon}$$

Anmerkung: Mit der Prozedur MIXED
können Sie auch kategorielle Variablen als Einflussvariable ins Modell aufnehmen, z.B. bei den Tibetischen Schädeln:
PROC MIXED; MODEL maxlengt = upface .... typ; RUN;

12.3 Robuste lineare Regression

Mögliche Probleme bei der linearen Regression

Probleme	Lösungsansätze
• Ausreißer	Robuste Lineare Regression
• keine Normalverteilung	Datentransformation, (L_1-Regression)
• kein linearer Zusammenhang	Nichtlineare Regression, Nichtparametrische Regression
• Zielvariable nicht stetig	Logistische Regression

Robuste Lineare Regression (Skizze)

Ausreißer können auftreten in • Y-Richtung • X-Richtung(en) (Leverage points) • Y- und X- Richtungen

Fall: Ausreißer(verdacht) in Y-Richtung: es werden nicht die Abstandsquadrate minimiert, sondern (z.B.) die Gewichtsfunktion (Bisquare Biweight, Huber, c=4.685, Voreinstellung bei SAS)

$$W(x,c) = \begin{cases} 1 - \left(\frac{x}{c}\right)^2 & \text{falls} \quad |x| < c \\ 0 & \text{sonst.} \end{cases}$$

verwendet.

Robuste Lineare Regression (2)
Außerdem wird der Skalenparameter σ nicht durch s sondern durch den MAD geschätzt.

PROC ROBUSTREG; MODEL y=x1 x2 x3/DIAGNOSTICS LEVERAGE; **RUN**;

Regression_Phosphor

Robuste Lineare Regression (3)
Diagnosestatistiken

Ausreißer: standardis. robust residual > cutoff (outlier)

Leverage Point: robuste MCD-Distanz > cutoff (Leverage)

Mahalanobis-Distanz
≈ mit Kovarianzmatrix gewichteter mittlerer quadratischer Abstand von $\overline{X}$.

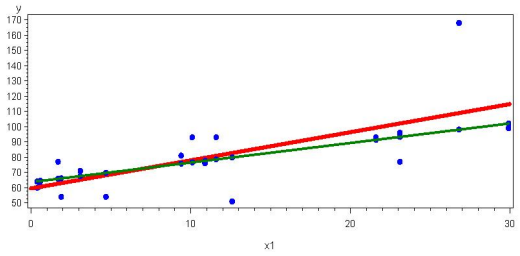
Robust MCD Distance:
anstelle von $\overline{X}$: robuste multivariate Lokationsschätzung (MCD)

Goodness of fit: zum Modellvergleich
je größer R^2, je kleiner AICR, BICR desto besser.

Robuste Lineare Regression (4)

Beispiel: Phosphorfraktionen

Lineare (rot) vs. Robuste lineare Regression



12.4 Nichtlineare Regression

Quasilineare Regression

z.B. Polynomregression $Y_i = a_0 + a_1 x_i + a_2 x_i^2 + a_3 x_i^3 + \epsilon_i$ wird auf lineare Regression zurückgeführt $x_{ij} := x_i^j$

Echt nichtlineare Regression

- Wachstumskurven

$$\begin{aligned} y &= \alpha + \frac{\gamma}{1 + exp(-\beta(x-\mu))} \quad \text{logistische Fkt.} \\ y &= \alpha + \gamma exp(-exp(-\beta(x-\mu))) \quad \text{Gompertzfkt.} \end{aligned}$$

- Wettervohersagemodell ($Y(t)$: mittlere Temperatur im Monat t)

$$Y(t) = aY(t-6) + bY(t-12) + \epsilon_t$$

Modell, f wird als bekannt angenommen

$$\begin{aligned} Y &= f(x,\theta) + \epsilon \qquad \epsilon \sim (0, \sigma^2) \\ \mathbf{Y} &= \mathbf{F}(\mathbf{X}, \boldsymbol{\theta}) + \boldsymbol{\epsilon} \end{aligned}$$

$$L(\boldsymbol{\theta}) = \boldsymbol{\epsilon}'\boldsymbol{\epsilon} = \sum_i (Y_i - \mathbf{F}(\mathbf{X}_i, \boldsymbol{\theta}))^2 \longrightarrow min_\theta$$

Dazu werden Iterationsverfahren verwendet.

PROC NLIN METHOD = NEWTON; MODEL abhaengige Variable = Ausdruck; PARMS Anfangswerte; **RUN**;

Andere Methoden: Gauss-Newton, Marquardt, steepest descent

Nichtlineare Regression (2)

Ausgabe

R, PPC, RPC: Konvergenzmaßzahlen Object: Zielfunktionswertänderung (letzte Iteration) Objective: Zielfunktionswert $L(\boldsymbol{\theta})$

Details zu den Iterationsverfahren siehe OnlineDoc.

Parameterschätzungen (mit Iterationsverlauf) und Konfidenzintervallen

Nlin1_usapop.sas Nlin1_usapop_est.sas Nlin2_wind.sas

Anmerkung: Es gibt noch andere Prozeduren, die nichtlineare Regressionen durchführen, z.B. **PROC** OPTMODEL

12.5 Nichtparametrische Regression

Modell: f unbekannt, aber "glatt"

$$Y_i = f(\mathbf{x}_i) + \epsilon_i$$

$\epsilon_i \sim (0, \sigma^2)$ ($\mathbf{x}_i$ fest oder zufällig)

$$\min_{f \in C^2} \sum_{i=1}^{n} (Y_i - f(x_i))^2 + \lambda \int (f''(x))^2 dx$$

• $\int (f'')^2$: Strafterm • λ: Glättungsparameter $\lambda \to 0$: Interpolierender Spline $\lambda \to \infty$: lineare Regression Lösung der Minimumaufgabe: natürlicher kubischer Spline

Nichtparametrische Regression (2)

PROC TPSPLINE; MODEL abhängige Variable = (unabhängige Variablen); OUTPUT OUT=Datei1 PRED RESID; **RUN**;

Wahl der Glättungsparameter

Kreuzvalidierung (Standard)

vorgeben: LAMBDA0=Wert

Es kann eine ganze Liste abgearbeitet werden mit der Option LOGNLAMBDA in der MODEL-Anweisung, z.B. MODEL y = (x) /LOGNLAMBDA=-4 to -2 by 0.1;

Nichtparametrische Regression (3)

Ausgabe (u.a.)

$Log_{10}(n * \hat{\lambda})$ Strafterm $\int (f'')^2(t)\, dt$ Residual Sum of Squares Schätzung für σ, $\hat{\sigma}^2 = \frac{RSS}{sp(I-A)}$, A: entspricht der Hat-Matrix.

Npar_USApop.sas Anwendung in der 3D-Darstellung: Npar_Banknote.sas

Visualisierung

PROC GPLOT DATA=Datei1; PLOT pred*x; **RUN**;

12.6 Logistische Regression

Y: Binäre Zielgröße, $P(Y = 1) = p, P(Y = 0) = 1 - p$, $Y \sim Bi(1, p)$

Wenn wir lineare Regression machen würden:

$$\begin{aligned} Y_i &= \alpha + \beta x_i + \epsilon_i \\ \mathbf{E}Y_i &= \alpha + \beta x_i, \quad \mathbf{E}\epsilon_i = 0 \\ p_i &= \alpha + \beta x_i \end{aligned}$$

Problem: Wahrscheinlichkeiten sind beschränkt, lineare Funktionen aber nicht.

Ausweg: Odds ratio $OR := \dfrac{p}{1-p}$

nach oben unbeschränkt, aber nicht nach unten

Logistische Regression (2)

Logit

$$Logit(p) := \ln\Big(\frac{p}{1-p}\Big)$$

ist auch nach unten unbeschränkt.

Modell

$$\begin{aligned} Logit(p_i) &= \ln\Big(\frac{p_i}{1-p_i}\Big) \\ &= \alpha + \beta_1 x_{i1} + \cdots + \beta_k x_{ik} = \boldsymbol{\beta}'\mathbf{x}_i, \end{aligned}$$

$i = 1, \ldots, n, p_i = P(Y_i = 1)$. $\mathbf{x}_i' = (1, x_{i1}, \ldots, x_{ik}), \boldsymbol{\beta}' = (\alpha, \beta_1, \ldots, \beta_k)$.

Umstellen der letzten Gleichung liefert

Logistische Regression (3)

$$p_i = \frac{e^{\boldsymbol{\beta}'\mathbf{x}_i}}{1 + e^{\boldsymbol{\beta}'\mathbf{x}_i}} = 1 - \frac{1}{1 + e^{\boldsymbol{\beta}'\mathbf{x}_i}}.$$

Gegeben sind Beobachtungen: $(y_i, \mathbf{x}_i)$. Unbekannt sind p_i.

Frage: Wie schätzen wir $\boldsymbol{\beta}$?

Methode: Maximum-Likelihood

PROC LOGISTIC; **PROC SURVEYLOGISTIC**; MODEL Y=X1 X2 /Optionen; **RUN**;

Logistic_banknote Logistic_tibetan Logistic_water

Maximum-Likelihood Schätzung der Parameter

Idee: Eine Schätzung ist "gut", wenn sie für die beobachteten Daten die "plausibelste" ist, d.h. wenn sie eine hohe Wahrscheinlichkeit produziert. Ziel: maximiere (die Beobachtungen sind unabhängig)

$$\begin{aligned} L &= P(y_1) \cdot P(y_2) \cdots P(y_n) = \prod_{i=1}^{n} P(y_i) \\ y_i &= \begin{cases} 1 & \text{mit Wkt. } p_i \\ 0 & \text{mit Wkt. } 1 - p_i \end{cases} \qquad P(y_i) = p_i^{y_i}(1-p_i)^{1-y_i} \\ P(0) &= p_i^0(1-p_i)^{1-0} = 1 - p_i \\ P(1) &= p_i^1(1-p_i)^{1-1} = p_i \end{aligned}$$

hier: y_i bekannt (Beobachtungen), p_i zu schätzen.

Logistische Regression (5)

Maximum-Likelihood Schätzung der Parameter (2)

Einsetzen

$$\begin{aligned} L &= \prod_{i=1}^{n} p_i^{y_i}(1-p_i)^{1-y_i} \\ &= \prod_{i=1}^{n} \Big(\frac{p_i}{1-p_i}\Big)^{y_i}(1-p_i) \\ \ln L &= \sum_{i=1}^{n} y_i \ln\Big(\frac{p_i}{1-p_i}\Big) + \sum_{i=1}^{n} \ln(1-p_i) \\ &= \sum_{i=1}^{n} \boldsymbol{\beta}'\mathbf{x}_i y_i - \sum_{i=1}^{n} \ln\big(1 + e^{\boldsymbol{\beta}'\mathbf{x}_i}\big) \end{aligned}$$

Da der Logarithmus monoton wachsend ist, genügt es $\ln L$ zu maximieren.

Logistische Regression (6)

$$\begin{aligned}\frac{\partial \ln L}{\partial \boldsymbol{\beta}} &= \sum_{i=1}^{n} \mathbf{x}_i y_i - \sum_{i=1}^{n} \mathbf{x}_i \left(1 + e^{\boldsymbol{\beta}' \mathbf{x}_i}\right)^{-1} e^{\boldsymbol{\beta}' \mathbf{x}_i} \\ &= \sum_{i=1}^{n} \mathbf{x}_i y_i - \sum_{i=1}^{n} \mathbf{x}_i \left(1 + e^{-\boldsymbol{\beta}' \mathbf{x}_i}\right)^{-1} \\ &= \sum_{i=1}^{n} \mathbf{x}_i y_i - \sum_{i=1}^{n} \mathbf{x}_i \tilde{y}_i,\end{aligned}$$

wobei

$$\tilde{y}_i = \frac{1}{1 + e^{-\boldsymbol{\beta}' \mathbf{x}_i}}$$

die Vorhersagewahrscheinlichkeit für $y_i = 1$ bei gegebenen $\mathbf{x}_i$.

Logistische Regression (7)

$$\frac{\partial \ln L}{\partial \boldsymbol{\beta}} = 0$$

ist Nichtlineares Gleichungssystem $\rightarrow$ numerische Lösung, z.B. Newton-Raphson Methode hier: = Fisher Scoring (man nimmt statt $I(\beta)$: $\mathbf{E}(I(\beta))$ $\mathbf{U}(\boldsymbol{\beta})$: Vektor der ersten Ableitungen von $\ln L$ $\mathbf{I}(\boldsymbol{\beta})$: Matrix der zweiten Ableitungen von $\ln L$ Iteration

$$\boldsymbol{\beta}_{j+1} = \boldsymbol{\beta}_j - \mathbf{I}^{-1}(\boldsymbol{\beta}_j)\mathbf{U}(\boldsymbol{\beta}_j)$$

Konvergenz? hoffentlich.

Vergleiche: Newton-Verfahren ($k = 1$) zur Lösung von $g(x) = 0$.

Logistische Regression (8)

Output

- Modellinformationen
- Konvergenzstatus
- Score-Statistik: $\mathbf{U}(\hat{\beta}))'\mathbf{E}(\mathbf{I}(\hat{\beta}))^{-1}\mathbf{U}(\hat{\beta}) \sim \chi^2_r$, r: Anzahl der durch H_0 gegebenen Restriktionen
- Modellanpassungsstatistiken
- Test der globalen Nullhypothese $\boldsymbol{\beta} = 0$ (z.B. LQ-Test)
- ML-Schätzungen mit χ^2-Statistiken und p-Werten
- Schätzungen der Odds Ratios $e^{\hat{\beta}_j}$

Logistische Regression (9)

Modellanpassungsstatistiken

zum Vergleich verschiedener Modelle

- je kleiner AIC, SC, $-2 \ln L$ desto besser $-2 \ln L$: Abweichung vom saturierten Modell, d.h. vom anhand der Daten (bei perfekter Anpassung) möglichen Modell (perfekte Anpassung bei $L = 1$) AIC=$-2 \ln L + 2p$, p: Anzahl der Parameter im Modell
- Hosmer-Lemeshov Anpassungstest (Option LACKFIT)

Logistische Regression (10)
Vorhersagefähigkeit des Modells

- Association of Predicted Probabilities and Observed Responses
- alle möglichen Paare (y_i, y_j) werden verglichen bzgl. ihres Vorhersagewertes, d.h. mit $(\hat{y}_i, \hat{y}_j)$
- Anteil der konkordanten Paare C
- Kendall-Konkordanzkoeffizient Tau-a (kann als Bestimmtheitsmaß interpretiert werden)
- Somer's D, Gamma, c hängen mit C zusammen.

Modellwahl durch Selektion möglich (Option SELECTION= in Model-Anweisung)

Hosmer-Lemeshov Test
Alle Beobachtungen haben nach der Schätzung der Parameter eine Vorhersagewahrscheinlichkeit in die Referenzgruppe (z.B. 'echte Banknoten')

$$\hat{p}_i = \frac{1}{1 + e^{-\hat{\beta}' \mathbf{x}_i}}.$$

Das Intervall $[0, 1]$ wird in etwa 10 Teile G_j eingeteilt, und ausgezählt, wieviele der $\hat{p}_i$ in die einzelnen Teile fallen, total, und für beide Gruppen (z.B. echte und gefälschte Banknoten) getrennt.
Diese Anzahlen werden jeweils verglichen mit der erwarteten vorhergesagten Häufigkeit $\sum_{i \in G_j} \hat{p}_i$ mit Hilfe eines χ^2 Anpassungstests.

Vorhersagen durch logistische Regression (1)
Anhand der Parameterschätzungen im logistischen Regressionsmodell können Vorhersagen getroffen werden bei bekannten Einflussvariablen.
Dazu muss zunächst in der Eingabedatei eine Beobachtung stehen mit Werten der Einflussvariablen, der Wert der Inzidenz wird auf Missing Value (.) gesetzt. Damit geht diese Beobachtung nicht in die Parameterschätzung mit ein.
Dann muss eine Ausgabedatei erzeugt werden, die für die vorhandenen Beobachtungspunkte die Inzidenzwahrscheinlichkeiten angibt.

Vorhersagen durch logistische Regression (2)
PROC LOGISTIC; [-0.5ex] MODEL Y=X1 X2 /Optionen; [-0.5ex] SCORE OUT=pred; **RUN**;
wobei pred der Name der Ausgabedatei ist.
PROC PRINT DATA=pred; **RUN**;
In der Zeile mit der fraglichen Beobachtung (Inzidenz=.) findet man dann die Vorhersagewahrscheinlichkeiten.
Sollte nur eine Einflussvariable (X1) vorliegen, so kann man die Vorhersagewahrscheinlichkeiten auch plotten:
PROC SORT DATA=pred OUT=predsort; BY X1; **RUN**; **PROC GPLOT** DATA=predsort; PLOT P_1*X1; **RUN**;

12.7 Übersicht Regressionsverfahren

Regressionsverfahren, kurze Übersicht (1)

a) Lineare Regression
Modell:

$$Y_i = \theta_0 + \sum_{j=1}^{m} \theta_j X_{ij} + \epsilon_i$$

$\epsilon_i \sim (0, \sigma^2)$, $i = 1, \ldots, n$ Y_i, ϵ_i zufällig X_i zufällig oder fest $\theta_0 ... \theta_m; \sigma$: Modellparameter

PROC REG; MODEL abhängige Variable = unabhängige Variable(n) / R DW; **RUN**;

Regressionsverfahren, kurze Übersicht (2)

b) Robuste Lineare Regression

Modell wie bei der linearen Regression

$$Y_i = \theta_0 + \sum_{j=1}^{m} \theta_j X_{ij} + \epsilon_i$$

robuste Abstandsfunktion MAD statt s als Skalenschätzung.

PROC ROBUSTREG; MODEL abhängige Variable = unabhängige Variable(n) / diagnostics leverage; **RUN**;

Regressionsverfahren

Kurze Übersicht (3)

c) Nichtlineare Regression

Modell:

$$Y_i = f(X_{1i}, ..., X_{mi}, \theta_1, ..., \theta_p) + \epsilon_i$$

f: bekannt (i.A. nichtlinear)

PROC NLIN; MODEL abhängige Variable = Ausdruck; PARMS Parameter = Anfangswert(e); **RUN**;

Regressionsverfahren

Kurze Übersicht (4)

d) Nichtparametrische Regression

Modell:

$$Y_i = f(X_{1i}, ..., X_{mi}) + \epsilon_i$$

f unbekannt, aber "glatt", z.B. $f \in C^2$.

PROC TPSPLINE; MODEL abhängige Variable = (unabhängige Variable(n)); **RUN**;

Regression_Phosphor_Uebersicht.sas

Regressionsverfahren

Kurze Übersicht (5)

e) Logistische Regression

Y: binäre Zielgröße

$$p_i = P(Y_i = 1) = \frac{e^{\boldsymbol{\beta}' \mathbf{x}_i}}{1 + e^{\boldsymbol{\beta}' \mathbf{x}_i}}.$$

Parameter: $\boldsymbol{\beta}$. Odds ratio: $\frac{p_i}{1-p_i}$

PROC LOGISTIC; MODEL binäre Variable = abhängige Variable(n); **RUN**;

13 Clusteranalyse

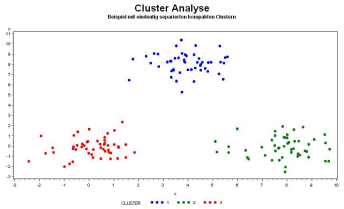
Ziel der Clusteranalyse: Zusammenfassung von
- "ähnlichen" Objekten zu Gruppen (Clustern),
- unähnliche Objekte in verschiedene Cluster.
Cluster sind vorher nicht bekannt.

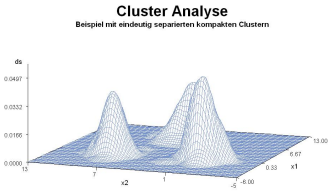
20 Patienten, Blutanalyse
Merkmale: Eisengehalt X_1, alkalische Phosphate X_2

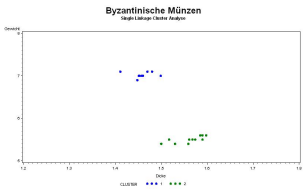
Umweltverschmutzung in verschiedenen Städten
Merkmale: Schwebeteilchen, Schwefeldioxid

Byzantinische Münzen
Lassen sich gesammelte Münzen verschiedenen Epochen zuordnen?

Clusteranalyse
Beispiel







Clusteranalyse
Wir unterscheiden:

partitionierende Clusteranalyse
Zahl der Cluster ist vorgegeben (MAXCLUSTERS=) **PROC FASTCLUS** (k-means), **PROC MODECLUS** (nichtparametrische Dichteschätzung)

hierarchische Clusteranalyse
PROC CLUSTER, gefolgt von **PROC TREE** und evtl. **PROC GPLOT**

Fuzzy Clusteranalyse

Clusteranalyse
Abstandsdefinitionen (p: # Merkmale)
Euklidischer Abstand (das ist Standard)

$$d_E^2(x,y) = \sum_{i=1}^{p}(x_i - y_i)^2$$

City-Block Abstand (Manhattan-Abstand)

$$d_C(x,y) = \sum_{i=1}^{p} |x_i - y_i|$$

Tschebyschev-Abstand

$$d_T(x,y) = \max_i |x_i - y_i|$$

Clusteranalyse

Anmerkungen zu den Abständen

- Nichteuklidische Abstände müssen selbst berechnet werden. Macro %DISTANCE
- Abstandsmatrix kann in der DATA-Anweisung angegeben werden. **DATA**=name (TYPE=DISTANCE)
- Die Variablen sollten i.A. vor der Analyse standardisiert werden, da Variablen mit großer Varianz sonst großen Einfluß haben (Option STANDARD oder die Prozedur **ACECLUS** zuvor laufen lassen). davor: Ausreißer beseitigen.

Hierarchische Clusteranalyse

Methoden (1)

Die Methoden unterscheiden sich durch die Definition der Abstände $D(C_i, C_j)$ zwischen Clustern C_i und C_j.

Single Linkage

$D_S(C_i, C_j) = \min\{d(k,l), k \in C_i, l \in C_j)\}$

Complete Linkage

$D_C(C_i, C_j) = \max\{d(k,l), k \in C_i, l \in C_j)\}$

Centroid

$D_{CE}(C_i, C_j) = d(\overline{X}_i, \overline{X}_j)$ Abstände der Schwerpunkte

Hierarchische Clusteranalyse

Methoden (2)

Average Linkage

$D_A(C_i, C_j) = \frac{1}{n_i n_j} \sum_{k \in C_i, l \in C_j} d(k,l)$

Ward

ANOVA-Abstände innerhalb der Cluster minimieren, außerhalb maximieren. Nach Umrechnen erhält man $D_W(C_i, C_j) = \frac{n_i n_j}{n_i + n_j} D_{CE}(C_i, C_j)$.

Density Linkage

beruht auf nichtparametrischer Dichteschätzung (DENSITY, TWOSTAGE)

Hierarchische Clusteranalyse

Tendenzen

WARD:	Cluster mit etwa gleicher Anzahl von Objekten
AVERAGE:	ballförmige Cluster
SINGLE:	große Cluster, "Ketteneffekt", langgestreckte Cluster
COMPLETE:	kompakte, kleine Cluster

Im Mittel erweisen sich **Average Linkage** und **Ward** sowie die nichtparametrischen Methoden als die geeignetsten Methoden.

Hierarchische Clusteranalyse

Agglomerative Verfahren

1. Beginne mit der totalen Zerlegung, d.h. $Z = \{C_1, ..., C_n\}, C_i \cap C_j = \varnothing \quad C_i = \{O_i\}$

2. Suche C_r, C_l : $\quad d(C_r, C_l) = \min_{i \neq j} d(C_i, C_j)$

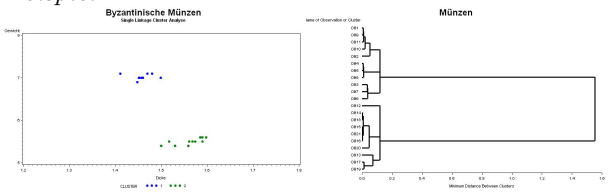
3. Fusioniere C_r, C_l zu einem neuen Cluster: $\quad C_r^{new} = C_r \cup C_l$

4. Ändere die r-te Zeile und Spalte der Distanzmatrix durch Berechnung der Abstände von C_r^{new} zu den anderen Clustern! Streiche die l-te Zeile und Spalte!

5. Beende nach n-1 Schritten, ansonsten fahre bei 2. mit geänderter Distanzmatrix fort!

Clusteranalyse

Beispiel



Hierarchische Clusteranalyse

Anmerkungen

• Alle von SAS angebotenen hierarchischen Methoden sind agglomerativ.

• Es gibt auch divisive Methoden.

• Fall großer Datensätze:

PROC FASTCLUS: Vorclusteranalyse mit großer Anzahl von Clustern PROC CLUSTER: Clusteranalyse mit diesen Clustern.

Hierarchische Clusteranalyse

zu WARD:

ANOVA Abstände innerhalb eines Clusters i

$$D_i = \frac{1}{n_i} \sum_{l \in C_i} d^2(O_l, \overline{X}_i)$$

Fusioniere die Cluster C_i und C_j, wenn

$$D_{CE}(C_i, C_j) - D_i - D_j \longrightarrow \min_{i,j}$$

Clusteranalyse, Durchführung

PROC CLUSTER /*hierarchische Clusteranalyse*/ [-1ex] METHOD=methode [-1ex] STANDARD /*Standardisierung* [-1ex] OUTTREE=datei; /*Eingabedatei für Proc Tree*/ **RUN**; [-1ex] **PROC TREE** DATA=datei [-1ex] OUT=out /*Ausgabedatei z.B.für PROC GPLOT*/ [-1ex] NCLUSTERS=nc /*Anz. Cluster*/ [-1ex] COPY vars /*vars in die Ausgabedatei*/ **RUN**; [-1ex] **PROC GPLOT**; [-1ex] PLOT variablen=cluster; /*Symbol-Anweisungen [-1ex] vorher definieren*/ [-1ex] **RUN**;

Hierarchische Clusteranalyse

Die Ausgabedatei OUTTREE=

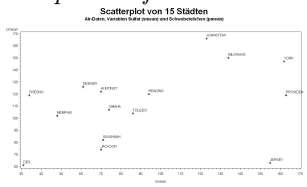
NAME	Bezeichnung der Cluster
	≥ 2 Beobachtungen: CLn
	1 Beobachtung: OBn
NCL	Anzahl der Cluster
FREQ	Anzahl der Beobachtungen
	im jeweiligen Cluster

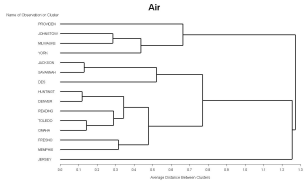
n: Clusternummer (CLn) oder Beobachtungsnummer (OBn = _N_)

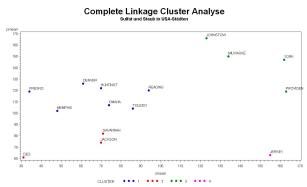
Cluster_Air.sas Cluster.sas Cluster_Banknoten.sas Cluster_Muenzen.sas

Hierarchische Clusteranalyse

Beispiel: Luftverschmutzung in USA-Städten







3D-Darstellung von Datenpunkten

PROC G3D; SCATTER y*x = z; **RUN**; Wertetabelle erstellen, vgl. z.B. Texashut.sas **PROC G3D**; PLOT y*x = z; **RUN**;

Glatte 3D-Darstellung, Kontur-Plot

Glatte 3D-Darstellung

PROC G3GRID; GRID var1*var2=y/SPLINE SMOOTH=Wert; AXIS1=von TO bis BY Schrittweite; AXIS2=von TO bis BY Schrittweite; **RUN**;

Kontur-Plot

PROC GCONTOUR; PLOT var1*var2 = y /LLEVEL=1; **RUN**;

Erläuterung dazu siehe Programm Npar_Banknote.sas

14 Hauptkomponentenanalyse

14.1 Problemstellung und Übersicht

Problemstellung

- viele (hoch) korrelierte Variablen → diese sollen ersetzt werden, durch neue, unkorrelierte Variablen, durch eine lineare Transformation
- **Ziel**: wenig neue Variablen, die aber möglichst viel Information aus den Daten erhalten.

Daten: Punkte im p-dimensionalen Raum Ziel: Projektion in einen p'-dimensionalen (p' ≤ p) Teilraum mit möglichst viel erhaltener Information.

Hauptkomponenten_Venusmuscheln.sas $(p = 2)$

Hauptkomponentenanalyse (2)

Annahmen

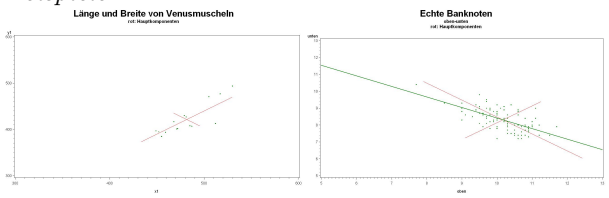
Daten sind Realisierungen eines p-variaten zufälligen Vektors $\mathbf{X} := (X_1, ..., X_p)$ mit $\mathbf{E}(\mathbf{X}) = \mathbf{0}$ und $\text{corr}\mathbf{X} = \mathbf{\Sigma} > 0$ (Korrelationsmatrix, positiv definit)

Bem: Die erste Bedingung erreicht man durch zentrieren um die Mittelwerte $\overline{X}_{.j}$, $j = 1, \ldots, p$

Wenn zwischen einzelnen Komponenten des zufälligen Vektors ein gewisser (etwa ein linearer) Zusammenhang besteht, so ist eine Dimensionsreduzierung möglich. Der Zusammenhang wird durch Gerade dargestellt (ausgezeichnete Richtung in der Ebene).

Hauptkomponentenanalyse

Beispiele



Frage: Wie kann man diese ausgezeichnete Richtung erfassen?

Hauptkomponentenanalyse (3)

1. Hauptkomponente. Die Linearkombination

$$Y_1 = \sum_{j=1}^{p} b_{1j} X_j$$

ist so zu bestimmen, dass var $Y_1 \to$ max. unter der Normierungsbedingung $(\sum_j b_{1j}^2 = 1)$ Die Variablen werden vorher standardisiert, $X_j := \frac{X_j - \overline{X}_{.j}}{s_j}$

2. Hauptkomponente. Die Linearkombination

$$Y_2 = \sum_{j=1}^{p} b_{2j} X_j$$

ist so zu bestimmen, dass var $Y_2 \to$ max, unter Normierungsbedingung ($\sum_j b_{2j}^2 = 1$) und unter der Bedingung $cov(Y_1, Y_2) = 0$

Hauptkomponentenanalyse (4)

Die Bedingung $cov(Y_1, Y_2) = 0$ sichert Unkorreliertheit der Hauptkomponenten.

Hauptkomponenten sind durch die Korrelationsmatrix eindeutig bestimmt.

Hauptachsentransformation: $\mathbf{\Sigma} = \mathbf{B\Lambda B'}$

$\mathbf{\Sigma}$: Korrelationsmatrix (bekannt) $\mathbf{B}$: Orthogonalmatrix (die Spalten von $\mathbf{B}$) $\mathbf{\Lambda} = \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \lambda_2 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & \ddots & 0 \\ 0 & \dots & 0 & \lambda_p \end{pmatrix}$ λ_i :

Eigenwerte, $\lambda_1 \geq ... \geq \lambda_p \geq 0$

Hauptkomponentenanalyse (5)

Hauptkomponenten

$\mathbf{Y} = \mathbf{B}' \cdot \mathbf{X}$

Mahalanobis-Distanz eines Datenpunktes $\mathbf{X} = (X_1, \dots, X_p)$ zum Ursprung:

$$\begin{aligned} \mathbf{X'\Sigma^{-1}X} &= \mathbf{X'B\Lambda^{-1}B'X} = \mathbf{Y'\Lambda^{-1}Y} \\ &= \sum_{i=1}^{p} \frac{Y_i^2}{\lambda_i}. \end{aligned}$$

Die Konturen sind Ellipsoide.

14.2 Berechnung der Hauptkomponenten

Aufgabe

gesucht Linearkombination Y_1 der Komponenten von $\mathbf{X}$ derart, dass die Varianz var Y_1 maximal.

Ansatz: $Y_1 := \mathbf{b}_1'\mathbf{X}$

$\mathbf{b}_1$: - p-variater Gewichtsvektor, Y_1 eindimensional var $Y_1 = \text{var}(\mathbf{b}_1'\mathbf{X}) = \mathbf{b}_1'\mathbf{\Sigma}\mathbf{b}_1$. Sinnvolle Lösung der Aufgabe bei Normierung von $\mathbf{b}_1 : \mathbf{b}_1'\mathbf{b}_1 = 1$. Maximiere

$$L(\mathbf{b}_1) = \mathbf{b}_1'\mathbf{\Sigma}\mathbf{b}_1 - \lambda(\mathbf{b}_1'\mathbf{b}_1 - 1) \quad \text{bzgl.} \quad \mathbf{b}_1$$

Maximiere

$$\begin{aligned} L(\mathbf{b}_1) &= \mathbf{b}_1'\mathbf{\Sigma}\mathbf{b}_1 - \lambda(\mathbf{b}_1'\mathbf{b}_1 - 1) \quad \text{bzgl.} \quad b_1 \\ \frac{\partial L(\mathbf{b}_1)}{\partial \mathbf{b}_1} &= 2\mathbf{\Sigma}\mathbf{b}_1 - 2\lambda\mathbf{b}_1 \\ &= 2(\mathbf{\Sigma} - \lambda\mathbf{I})\mathbf{b}_1 = 0 \qquad (*) \\ \frac{\partial L(\mathbf{b}_1)}{\partial \lambda} &= \mathbf{b}_1'\mathbf{b}_1 - 1 = 0 \Rightarrow \mathbf{b}_1'\mathbf{b}_1 = 1 \end{aligned}$$

Lösungen von $(*)$ sind die Eigenwerte von $\mathbf{\Sigma}$:

$$\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq ... \geq \lambda_q > 0.$$

$$\text{var}Y_1 = \mathbf{b}_1'\mathbf{\Sigma}\mathbf{b}_1 =_{(*)} \mathbf{b}_1'\lambda\mathbf{I}\mathbf{b}_1 = \mathbf{b}_1'\lambda\mathbf{b}_1 = \lambda$$

maximal für $\lambda = \lambda_1$ (maximaler Eigenwert von $\mathbf{\Sigma}$.) $\mathbf{b}_1$: der zu λ_1 gehörende Eigenvektor.

Def.: Y_1 **heisst erste Hauptkomponente von X.**

Berechnung der Hauptkomponenten (2)

Aufgabe: gesucht Linearkombination Y_2 der Komponenten von X derart, dass var Y_2 maximal und Y_1 und Y_2 unkorreliert sind.

Ansatz: $Y_2 := \mathbf{b}_2'\mathbf{X}$ b_2: p-variater Gewichtsvektor, Y_2 eindimensional var $Y_2 = \text{var}(\mathbf{b}_2'\mathbf{X}) = \mathbf{b}_2'\mathbf{\Sigma}\mathbf{b}_2$ Sinnvolle Lösung der Aufgabe bei Normierung von $\mathbf{b}_2$: $\mathbf{b}_2'\mathbf{b}_2 = 1.$

Berechnung der Hauptkomponenten (3)

Jetzt kommt noch die Bedingung $cov(Y_1, Y_2) = 0$ hinzu:

$$\begin{aligned}
0 &= cov(Y_1, Y_2) = cov(\mathbf{b}_1'\mathbf{X}, \mathbf{b}_2'\mathbf{X}) = \\
&= \mathbf{E}((\mathbf{b}_1'\mathbf{X})(\mathbf{b}_2'\mathbf{X})') \quad \text{da} \quad \mathbf{E}(\mathbf{X}) = 0 \\
&= \mathbf{b}_1' \underbrace{\mathbf{E}(\mathbf{X}\cdot\mathbf{X}')}_{\mathbf{\Sigma}} \mathbf{b}_2 \\
&= \mathbf{b}_1'\mathbf{\Sigma}\mathbf{b}_2 \\
&= \lambda_1\mathbf{b}_1'\mathbf{b}_2 \quad \text{da } \mathbf{b}_1 \text{ Eigenvektor} \\
&= \lambda_1\mathbf{b}_1'\mathbf{b}_2
\end{aligned}$$

$\Rightarrow \mathbf{b}_1$ und $\mathbf{b}_2$ sollen orthogonal sein.

Berechnung der Hauptkomponenten (4)

Maximiere bzgl. $\mathbf{b}_2$:

$$\begin{aligned}
L(\mathbf{b}_2) &= \mathbf{b}_2'\mathbf{\Sigma}\mathbf{b}_2 - \lambda(\mathbf{b}_2'\mathbf{b}_2 - 1) + \theta(\mathbf{b}_1'\mathbf{b}_2) \\
\frac{\partial L(\mathbf{b}_2)}{\partial \mathbf{b}_2} &= 2\mathbf{\Sigma}\mathbf{b}_2 - 2\lambda\mathbf{b}_2 + \theta\mathbf{b}_1 = 0 \qquad (**) \\
\frac{\partial L(\mathbf{b}_2)}{\partial \lambda} &= \mathbf{b}_2'\mathbf{b}_2 - 1 = 0 \\
\frac{\partial L(\mathbf{b}_2)}{\partial \theta} &= \mathbf{b}_1'\mathbf{b}_2 = 0.
\end{aligned}$$

Multiplizieren $(**)$ von links mit $\mathbf{b}_1'$:

$$\underbrace{2\mathbf{b}_1'\mathbf{\Sigma}\mathbf{b}_2}_{=0} - \underbrace{2\lambda\mathbf{b}_1'\mathbf{b}_2}_{=0} + \theta\mathbf{b}_1'\mathbf{b}_1 = 0$$

$\Rightarrow \theta = 0 \quad \Rightarrow (\mathbf{\Sigma} - \lambda\mathbf{I})\mathbf{b}_2 = 0 \quad \Rightarrow |\mathbf{\Sigma} - \lambda\mathbf{I}| = 0$ (wie im ersten Schritt).

$$\text{var}Y_2 = \mathbf{b}_2'\mathbf{\Sigma}\mathbf{b}_2 = \lambda\mathbf{b}_2'\mathbf{b}_2 = \lambda$$

var Y_2 maximal unter der Vorausetzung Y_2 und Y_1 unkorreliert für: $\lambda = \lambda_2$ $\mathbf{b}_2$: der zu λ_2 gehörige Eigenvektor

Def.: $Y_2 := \mathbf{b}_2'\mathbf{X}$ heißt zweite Hauptkomponente von $\mathbf{X}$.

Allgemein: Die k-te Hauptkomponente von $\mathbf{X}$ wird definiert durch die Linearkombination $Y_k = \mathbf{b}_k'\mathbf{X}$ unter der Voraussetzung Y_k ist unkorreliert zu $Y_1, ..., Y_{k-1}$, und var Y_k ist maximal $(=\lambda_k)$ $(k = 2, ..., p)$

Bem: Wenn der Eigenwert λ mehrmals auftritt, so ist der zugehörige Eigenvektor nicht eindeutig.

14.3 Anzahl der Hauptkomponenten

Ziel: Dimensionen verkleinern.

Dazu brauchen wir ein Maß für Übereinstimmung an Information. Betrachten als skalares Maß für die Gesamtvariabilität des Vektors X die Spur von $\mathbf{\Sigma}$:

$$sp(\mathbf{\Sigma}) = \sum_{i=1}^{p} \sigma_{ii}^2 = \sum_{i=1}^{p} \sigma_i^2$$

$\mathbf{\Sigma}\mathbf{b}_i = \lambda_i \mathbf{b}_i$, $i = 1, ..., p$, $\mathbf{b}_i$: Eigenvektoren von $\mathbf{\Sigma}$. $\mathbf{B} := (\mathbf{b}_1, ..., \mathbf{b}_p)$ (orthogonale) Matrix (p, p)

$$\mathbf{B}'\mathbf{B} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & ... & 0 \\ 0 & 1 & ... & 0 \\ . & . & ... & . \\ 0 & . & ... & 1 \end{pmatrix} = \mathbf{I}$$

Hauptkomponenten:

$$\mathbf{Y} := \begin{pmatrix} Y_1 \\ ... \\ ... \\ Y_p \end{pmatrix} = \mathbf{B}'\mathbf{X}$$

$$\text{cov}\mathbf{Y} = \mathbf{B}'\mathbf{\Sigma}\mathbf{B} = \Lambda = \begin{pmatrix} \lambda_1 & ... & 0 \\ & ... & \\ 0 & ... & \lambda_p \end{pmatrix}$$

Hauptachsentransformation

$$\mathbf{\Sigma} = \mathbf{B}\Lambda\mathbf{B}' = \sum_{i=1}^{p} \lambda_i \mathbf{b}_i \mathbf{b}_i'$$

Spektralzerlegung von $\mathbf{\Sigma}$.

$$sp(\mathbf{\Sigma}) = sp(\mathbf{B}\mathbf{\Lambda}\mathbf{B}') = sp(\underbrace{\mathbf{B}'\mathbf{B}}_{=I}\mathbf{\Lambda}) = \sum_{i=1}^{p} \lambda_i$$

Aufgabe: X soll durch einen r-dimensionalen Vektor so ersetzt werden, dass sich die Gesamtvariation $sp(\mathbf{\Sigma})$ möglichst wenig ändert. Lösung: Man nehme die ersten r Hauptkomponenten.

$\mathbf{B}^* := (\mathbf{b}_1, \ldots, \mathbf{b}_r)$ ($\mathbf{B}^*$ ist $(p \times r)$ Matrix)

$$Y^* := \mathbf{B}^{*'}\mathbf{X}$$

$$\begin{aligned} sp(\text{cov}\mathbf{Y}^*) &= sp(\mathbf{B}^{*'}\mathbf{\Sigma}\mathbf{B}^*) = sp(\mathbf{B}^{*'}\mathbf{B}\mathbf{\Lambda}\mathbf{B}'\mathbf{B}^*) \\ &= sp\big((\mathbf{I}_r, \mathbf{0_{p-r}})\mathbf{\Lambda}(\mathbf{I_r}, \mathbf{0_{p-r}})'\big) = \mathbf{sp}(\mathbf{\Lambda_r}) = \sum_{\mathbf{i=1}}^{\mathbf{r}} \lambda_\mathbf{i} \end{aligned}$$

Anmerkungen: Es gilt $(A, C : (n \times n))$: $sp(\mathbf{AC}) = sp(\mathbf{CA})$ (ÜA). $\mathbf{B}^{*'}\mathbf{B} = (\mathbf{I}_r, \mathbf{0_{p-r}})$

Zum Vergleich betrachtet man den Quotienten

$$Q := \frac{\sum_{i=1}^{r} \lambda_i}{\sum_{i=1}^{p} \lambda_i}$$

und fordert z.B. $Q > 0.85$.

Bemerkung: Es gibt auch andere Kriterien, z.B. $r=$ Anzahl der Eigenwerte > 1 $r=$ Anzahl der Eigenwerte bis zu einem evtl. Knick in der Eigenwertkurve (vgl. Scree-Plot bei der Prozedur **FACTOR**)

Bestimmung der Hauptkomponenten, wenn $\boldsymbol{\Sigma}$ unbekannt

- 1. Schätzung für $\boldsymbol{\Sigma}$ durch das Beobachtungsmaterial durchführen $\Rightarrow \hat{\boldsymbol{\Sigma}}$
- 2. Berechnung der Hauptkomponenten auf Basis von $\hat{\boldsymbol{\Sigma}}$. Diese Hauptkomponenten werden dann die empirischen Hauptkomp genannt.
- 3. Um Standardisierung zu erreichen $\overline{X}_{.j}$ und s_j berechnen, dann $X_{ij} := \frac{X_{ij}-\overline{X}_{.j}}{s_j}$

Die Höhenlinien der Dichten beschreiben Ellipsen mit Hauptachsen in Hauptkomponentenrichtung (falls Normalverteilung vorliegt).

Beispiel: $\mathbf{X}$*: 2-dimensional normalverteilte Zufallsvariable,* $\boldsymbol{\Sigma} > 0$
gesucht: Hauptkomponenten von $\mathbf{X}$:

$$\mathbf{X} = \begin{pmatrix} X_1 \\ X_2 \end{pmatrix}, \qquad x = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix}$$

Dichte:

$$f_{N(0,\boldsymbol{\Sigma})}(x) = \frac{1}{2\pi\sqrt{|\boldsymbol{\Sigma}|}} exp\{-\frac{1}{2}x'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}x\}$$

Betrachten die Menge der Punkte x mit

$$c = f_{N(0,\boldsymbol{\Sigma})}(x) = \frac{1}{2\pi\sqrt{|\boldsymbol{\Sigma}|}} e^{-\frac{1}{2}c_1} \Rightarrow c_1 = x'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}x$$

d.h. die Konturlinien sind Ellipsen mit Ursprung in $\mathbf{0}$.

$\mathbf{Y}$ sei Vektor der Hauptkomponenten $\mathbf{Y} = \mathbf{B'X}$ $\mathbf{B} = (b_1, b_2)$ $\mathbf{b}_1$ Eigenvektor von $\boldsymbol{\Sigma}$, der zum größeren Eigenwert gehört $\mathbf{b}_2$ Eigenvektor von $\boldsymbol{\Sigma}$, der zum kleineren Eigenwert gehört

$$\mathbf{Y} = \begin{pmatrix} Y_1 \\ Y_2 \end{pmatrix}$$

$$\begin{aligned} c_1 &= \mathbf{x}'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\mathbf{x} = \mathbf{x}'(\mathbf{B}')^{-1}\boldsymbol{\Lambda}^{-1}\mathbf{B}^{-1}\mathbf{x} = \mathbf{x}'\mathbf{B}\boldsymbol{\Lambda}^{-1}\mathbf{B}'\mathbf{x} = (\mathbf{B}'\mathbf{x})'\boldsymbol{\Lambda}^{-1}\mathbf{B}'\mathbf{x} \\ &= \mathbf{Y}'\Lambda^{-1}\mathbf{Y} = \sum_{i=1}^{2}\frac{1}{\lambda_i}Y_i^2 \end{aligned}$$

Nebenrechnung: $\boldsymbol{\Sigma} = B\Lambda B' \quad \Rightarrow \quad \boldsymbol{\Sigma}^{-1} = (\mathbf{B}')^{-1}\boldsymbol{\Lambda}^{-1}\mathbf{B}^{-1} = \mathbf{B}\boldsymbol{\Lambda}^{-1}\mathbf{B}^{-1}$ Darstellung einer Ellipse in Hauptachsen Y_1, Y_2:

$$\frac{Y_1^2}{a^2} + \frac{Y_2^2}{b^2} = 1$$
$$a = \lambda_1 c_1 \quad b = \lambda_2 c_1$$

PROC PRINCOMP
OUTSTAT=Statistiken;
VAR varnamen;
RUN;

PROC FACTOR;
VAR varnamen;
RUN;

Ausgabe PRINCOMP: Eigenwerte und normierte Eigenvektoren von $\mathbf{\Sigma}$. OUTSTAT: Ausgabestatistiken

Hauptkomponenten_Banknote.sas

Zwei Variablen (oben, unten), nur echte: Interpretation: 1. Hauptkomponente: unten-oben 2. Hauptkomponente: unten+oben

Ausgabe FACTOR: siehe Faktoranalyse

15 Faktorenanalyse

15.1 Modell

Faktorenanalyse

- Analyse der Beziehungen zwischen verschiedenen Merkmalen (Variablen).
- Finden gemeinsamer Ursachenkomplexe, sogenannter Faktoren.
- Geschichte: Spearman (1904) Thurstone (1931,1947) Psychologie: Finden von 'Faktoren' der Intelligenz
- hängt eng mit der Hauptkomponentenanalyse zusammen, ist jedoch viel mehr.

Modell:

$$X_j = d_{j1}F_1 + ... + d_{jr}F_r + \boldsymbol{\epsilon}_j, \quad j = 1...p, \qquad r \leq p$$

in Matrizenschreibweise

$$\mathbf{X} = \mathbf{D} \cdot \mathbf{F} + \boldsymbol{\epsilon} \qquad \mathbf{X} = (X_1, ..., X_p)'$$

$$\mathbf{D} = \begin{pmatrix} d_{11} & ... & d_{1r} \\ ... & ... & ... \\ d_{p1} & ... & d_{pr} \end{pmatrix}$$

$\mathbf{F} = (F_1...F_r)'$ zufälliger Vektor der Faktoren (unbekannt) $\boldsymbol{\epsilon} = (\epsilon_1...\epsilon_p)'$ zufälliger Vektor $var(\boldsymbol{\epsilon}) = V$ Diagonalmatrix, d.h. ϵ_j sind unkorelliert

ϵ_j wirkt nur auf X_j (nicht auf die anderen Komponenten)

$$\mathbf{E}(\mathbf{X}) = \mathbf{E}(\mathbf{F}) = \mathbf{E}(\boldsymbol{\epsilon}) = \mathbf{0}$$

$\mathbf{F}$ und $\boldsymbol{\epsilon}$ seien unabhängig, insbesondere

$$cov(\mathbf{F}, \boldsymbol{\epsilon}) = 0, \quad cov\mathbf{F} = \mathbf{I}$$

d.h. die Faktoren seien auch standardisiert und unabhängig voneinander.

Annahme: Die Variablen sind standardisiert; gegebenenfalls sind sie zu standardisieren (SAS: Option STANDARD)

$$X_{ij} := \frac{X_{ij} - \overline{X_{.j}}}{s_j}$$

$\boldsymbol{\Sigma} = cov\mathbf{X}$ Korrelationsmatrix

Faktorenanalyse

Einsetzen in das Modell liefert:

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\Sigma} &= cov\mathbf{X} = cov(\mathbf{D} * \mathbf{F} + \boldsymbol{\epsilon}) \\ &= \mathbf{D} \underbrace{(cov\mathbf{F})}_{=\mathbf{I}} \mathbf{D}' + cov(\boldsymbol{\epsilon}) \\ &= \mathbf{D}\mathbf{D}' + \mathbf{V} \end{aligned}$$

Σ: bekannt = (empir.) Kovarianzmatrix $\mathbf{D}, \mathbf{V}$ sind gesucht Lösung nicht eindeutig.
Im folgenden werden wir annehmen, die Variablen sind standardisiert, es gilt also $cov\ \mathbf{X} = \text{corr}\ \mathbf{X}$.

15.2 Schätzung der Faktorladungen

Schätzung der Faktorladungen D

Nehmen fürs erste an $r = p$, d.h. $\boldsymbol{\epsilon} = \mathbf{0}$ und X ist eine Lineartransformation der (unbekannten) Faktoren,

$$\mathbf{X} = \mathbf{D} \cdot \mathbf{F}$$

Nach dem vorigen Kapitel (Hauptkomponentenanalyse) wissen wir:

$\mathbf{Y} = \mathbf{B}'\mathbf{X}$ ist Vektor der Hauptkomponenten

Wegen $\mathbf{B}'\mathbf{B} = \mathbf{I}$ ($\mathbf{B}$ ist Orthogonalmatrix) folgt:

$$\mathbf{X} = \mathbf{B}\mathbf{Y}$$

Vergleichen wir die Modelle miteinander, so sehen wir, daß

$$\mathbf{F} = \mathbf{Y} \qquad (\text{mit} \quad \mathbf{D} = \mathbf{B})$$

eine (vollständige Faktoren-) Lösung wäre.

Aber: die Faktoren sind noch nicht standardisiert. Zur Lösung des Problems berechnen wir die Korrelationsmatrix

$$\begin{aligned} corr\mathbf{X} = \boldsymbol{\Sigma} &= \mathbf{B}\underbrace{cov(\mathbf{Y})}_{=\boldsymbol{\Lambda}}\mathbf{B}' = \mathbf{B}\Lambda\mathbf{B}' \\ &= \mathbf{B}\Lambda^{1/2} \cdot \Lambda^{1/2}\mathbf{B}' = (\mathbf{B}\Lambda^{1/2}) \cdot (\mathbf{B}\Lambda^{1/2})' \\ &= \mathbf{D}\mathbf{D}' \end{aligned}$$

mit $\mathbf{D} = \mathbf{B}\Lambda^{1/2}$. Λ: Diagonalmatrix, Hauptdiagonale: Eigenwerte von Σ

$\mathbf{D}$: Faktorenmatrix, Faktorladungsmatrix d_{jk}: Elemente von $\mathbf{D}$: Faktorladungen, $\quad j = 1, ..., p, \quad k = 1, ..., p$

Anmerkung: Prozedur PRINCOMP gibt die Matrix $\mathbf{B}$ der Eigenvektoren aus, die Prozedur FACTOR die Matrix $\mathbf{D}$ der Faktorladungen. Die Matrix $\mathbf{D}$ beschreibt die Beziehungen zwischen Faktoren $\mathbf{F}$ und den Variablen $\mathbf{X}$

$$cov(\mathbf{X}, \mathbf{F}) = cov(\mathbf{D} \cdot \mathbf{F}, \mathbf{F}) = \mathbf{D}cov\mathbf{F} = \mathbf{D}$$

und, da die Variablen $\mathbf{X}$ standardisiert sind, ist d_{jk} die Korrelation zwischen Variable X_j und Faktor F_k.

Erinnerung:

$$\mathbf{D}\mathbf{D}' = \boldsymbol{\Sigma}$$

$\boldsymbol{\Sigma}$: Korrelationsmatrix, also insbesondere

$$1 = \sigma_{jj} = \sum_{k=1}^{p} d_{jk}d_{jk} = \sum_{k=1}^{p} d_{jk}^2 \quad \forall j.$$

Wenn Sie also in einer Zeile die Einträge quadrieren und dann aufaddieren, dann kommt jeweils 1 heraus.

Faktorenanalyse

Wir haben also gesehen, daß die vollständige Faktorenlösung mit der Hauptkomponentenmethode bestimmt werden kann.

Ziel: Möglichst wenig Faktoren $F_1 ... F_r, r < p$ mit möglichst wenig Informationsverlust.

Erinnerung: vollständige Faktorenlösung

$$\begin{aligned} X_j &= d_{j1}F_1 + ... + d_{jr}F_r + \underbrace{d_{jr+1}F_{r+1} + ... + d_{jq}F_q}_{=:\epsilon_j} \\ X_j &= d_{j1}F_1 + ... + d_{jr}F_r + \epsilon_j \qquad j = 1...p \end{aligned}$$

Faktoranalyse Modell.

Faktorenanalyse

Zerlegen für jedes Merkmal X_j die Quadratsummen $\sum_{k=1}^{q} d_{jk}^2 = 1 = \underbrace{\sum_{k=1}^{r} d_{jk}^2}_{Var(d_{j1}F_1+...+d_{jr}F_r)} + \underbrace{\sum_{k=r+1}^{q} d_{jk}^2}_{Var(d_{jr+1}F_{r+1}+...+d_{jp}F_p)}$

Erinnerung: Die Faktoren sind unabhängig.

Wenn wir r Faktoren auswählen, dann ist der erste Summand durch die r Faktoren bedingt, die sogenannte Kommunalität.

Der zweite Summand ist die sogenannte Restvarianz - diese ist variablenspezifisch.

Die Kommunalität beschreibt also wie gut die Variable durch die r-Faktoren beschrieben werden kann.

Faktorenanalyse

Ziel: hohe Kommunalität (und kleine Restvarianzen) Ziel: r klein Beide Ziele sind gegenläufig.

Vorgehen: 1. Vollständige Faktorlösung bestimmen 2. Anzahl der Faktoren anhand der Eigenwerte von $\mathbf{\Sigma}$ bestimmen (als ersten Ansatz).

Erinnerung: Die höchsten Eigenwerte liefern die ersten Hauptkomponenten, den größten Anteil an Gesamtvarianz. Als Kriterium für die Wahl der Anzahl der Faktoren kann der Scree-Plot (Option SCREE) dienen: "Knick" in der "Eigenwertkurve".

Faktorenanalyse

Evtl. ist eine Interpretation der Faktoren möglich. Meistens jedoch nicht. Deshalb werden die Faktoren rotiert.

- Die Unabhängigkeit der Faktoren bleibt erhalten
- Die Varianzanteile ändern sich.

15.3 Rotation der Faktoren

Varimax-Rotation (Standard)

Die Rotation der Faktoren geschieht so dass die neuen Faktoren möglichst dicht an den Koordinatenachsen liegen (jede Variable wird möglichst nur einem Faktor zugeordnet), wir möchten eine sogenannte "Einfachstruktur" heißt: Korrelationen ρ_{jk} in der Faktorenmatrix (das sind die Faktorladungen in der Matrix $\mathbf{D}$) sind den Werten -1, 0, oder 1 möglichst nahe. ($j = 1...p, k = 1...r$)

$$v_k^2 := \sum_{j=1}^{p} \left(\rho_{jk}^2\right)^2 - \frac{1}{p}(\sum_{j=1}^{p} \rho_{jk}^2)^2$$

ist bis auf Faktor $\frac{1}{p-1}$ die Varianz der quadrierten Elemente der k-ten Spalte der Faktormatrix. (Die quadrierten Faktorladungen sollten möglichst weit streuen.)

Faktorenanalyse

rohes Varimax-Kriterium:

$$v_{roh}^2 = \sum_{k=1}^{q} v_k^2$$

ist zu maximieren (deshalb Varimax)

Praxis: zusätzliche Berücksichtigung der Kommunalitäten ersetzen ρ_{jk}^2 durch $\frac{\rho_{jk}^2}{c_j^2}$.,
wobei c_j^2 die Kommunalität der (standardisierten) Variable X_j ist.

Varimax-Kriterium

Maximiere:

$$v^2 = \sum_{k=1}^{r}[\sum_{j=1}^{q}(\frac{\rho_{jk}^2}{c_j^2})^2 - \frac{1}{q}(\sum_{j=1}^{q}\frac{\rho_{jk}^2}{c_j^2})^2].$$

Praktische Durchführung der Rotation:

- r = 2 analytisch.
- r > 2 nehmen jeweils 2 Faktoren, halten die anderen fest und drehen nach dem Varimax-Kriterium. Das geschieht mit allen Paaren. (Nacheinanderausführung von Drehungen ist wieder eine Drehung.)
- Iteration bis sich das Varimax-Kriterium nicht mehr wesentlich ändert.

Faktorenanalyse

Durchführung mit SAS:

PROC FACTOR ROTATE=VARIMAX NFACTORS=n; VAR Variablen; **RUN**;

FaktoranayseBanknoten.sas

Ausgabe: Korrelationskoeffizienten Eigenwerte von $\mathbf{\Sigma}$ Faktorladungsmatrizen Kommunalitäten rotierte Faktorladungsmatrizen

Rotation ist optional.

Die Anzahl der Faktoren kann vorgegeben werden.

wenn nicht: automatisch nach Eigenwertkriterium.

16 Zusammenfassung

Zusammenfassung (1)

Basiswissen

- Klassifikation von Merkmalen
- Wahrscheinlichkeit
- Zufallsvariable
- Diskrete Zufallsvariablen (insbes. Binomial)
- Stetige Zufallsvariablen
- Normalverteilung
- Erwartungswert, Varianz
- Gesetz der großen Zahlen, Zentraler Grenzwertsatz

Zusammenfassung (2)

Beschreibende Statistik

(Robuste) Lage- und Skalenschätzungen

PROC UNIVARIATE TRIMMED=Zahl ROBUSTSCALE; **RUN**;

Boxplots

PROC BOXPLOT; PLOT Variable*Faktor /BOXSTYLE=SCHEMATIC; **RUN**;

Häufigkeitsdiagramme:

PATTERN1 ...; **PROC GCHART**; VBAR Variable; **RUN**;

Scatterplots, Regressionsgerade:

SYMBOL1 ...; **PROC GPLOT**; PLOT y*x=1 / REGEQN; **RUN**;

Zusammenfassung (3)

Statistische Tests

Testproblem: Nullhypothese - Alternative, z.B.

$H_0 : \mu = \mu_0 \qquad H_1 : \mu \neq \mu_0$

Entscheidung für H_0/gegen H_0: anhand einer

Teststatistik, z.B.

$$T = \frac{\overline{X} - \mu_0}{s} \cdot \sqrt{n}$$

Entscheidung

$|t| > t_{krit} \Rightarrow H_0$ ablehnen, $\quad P(|T| > t_{krit}) = \alpha$

α : Fehler 1. Art, Signifikanzniveau (in der Regel vorgegeben)

Zusammenfassung (4)

Statistische Tests (2)

p-Wert (zweiseitg)

$P(|T| > t)$, wobei t: Realisierung von T

p-Wert $< \alpha \Rightarrow H_0$ ablehnen

p-Wert $\geq \alpha \Rightarrow H_0$ nicht ablehnen

Gütefunktion

P(H_0 abgelehnt$|\mu$ richtig) $= \beta(\mu)$

Fehler 2.Art: $1 - \beta(\mu)$

Wir betrachten Tests mit einer vergleichsweise hohen Gütefunktion.

Zusammenfassung (5)

Einseitige Tests

Alternative geht in eine Richtung, (aus sachlichen Gründen kann es nur eine Richtung geben) z.B. $\mu > \mu_0$

Zweiseitige Tests

Alternative geht in alle Richtungen, z.B. $\mu \neq \mu_0$

Übersicht über Mittelwertvergleiche

k	unverbunden	verbunden
1	Einstichproben t-Test,Vorzeichen-Wilcoxon-Test	
	PROC UNIVARIATE; o. PROC TTEST H0=Wert; VAR Variable; RUN	
2	t-Test	t-Test
	PROC TTEST; CLASS=Faktor; VAR Variable; RUN;	PROC TTEST; PAIRED Var1*Var2; RUN;
	Wilcoxon-Test	Vorzeichen-Wilcoxon-Test
	PROC NPAR1WAY WILCOXON CLASS=Faktor; VAR Variable;RUN;	diff=a-b; PROC UNIVARIATE; VAR diff; RUN;

einfache Varianzanalyse = einfaktorielle VA	einfaches Blockexperiment = zweifaktorielle VA
PROC ANOVA; (GLM) CLASS Faktor; MODEL Y=Faktor; RUN;	PROC GLM; CLASS FaktorA FaktorB; MODEL Y=FaktorA Fakto RUN;
Kruskal-Wallis-Test	Friedman-Test
PROC NPAR1WAY Wilcoxon; CLASS Faktor; VAR var; RUN;	PROC FREQ; TABLES FaktorA*FaktorB / CMH2 SCORES=RANK NOPRINT; RUN;

Zusammenfassung (8)

Anpassungstest auf Normalverteilung:

PROC UNIVARIATE NORMAL; VAR var; **RUN**;

Shapiro-Wilk-Test oder Anderson-Darling-Test

Anpassungstest auf Verteilung mit begrenzter Anzahl von Ausprägungen
PROC FREQ; TABLES Var1 /CHISQ NOPRINT TESTP=(p1,p2,...pk); **RUN**;
($p_1, \ldots, p_k$ vorher ausrechnen)

Zusammenfassung (9)

Test auf Korrelation (metrisch oder ordinal skalierte Merkmale)
PROC CORR PEARSON SPEARMAN KENDALL; **RUN**;

Test auf Unabhängigkeit (beliebig skalierte Merkmale):
PROC FREQ; TABLES Var1*Var2 /CHISQ NOPRINT; **RUN**;

Zusammenfassung (10)
Lineare Regression (1)

Parameterschätzung und Test
PROC REG; MODEL Y=Var1 Var2 ... Varn / CLI CLM R; TEST Var1=0 Var2=0; /*Zusaetzl.Hypothesen */
RUN;

Modellwahl
PROC REG; MODEL Y=Var1 Var2 ... Varn / SELECTION=backward; **RUN**;

Zusammenfassung (11)
Lineare Regression (2)

Residualanalyse
PROC REG; MODEL Y=Var1 Var2 ... Varn / R; PLOT rstudent.*obs.; /*und/oder*/ PLOT residual.*y; residual.*predicted.; **RUN**;
und evtl. Test auf Normalverteilung.

Zusammenfassung (12)
Sonstige Regressionsverfahren, nur Übersicht
Robuste Lineare Regression Nichtlineare Regression Nichtparametrische Regression Logistische Regression

Hierarchische Clusteranalyse

Zusammenfassung (13)
PROC CLUSTER /*hierarchische Clusteranalyse*/ [-.5ex] METHOD=methode [-0.5ex] STANDARD /*Standardisierun [-0.5ex] OUTREE=datei; /*Eingabedatei für Proc Tree*/[-0.5ex] **RUN**; **PROC TREE** DATA=datei [-0.5ex] OUT=out /*Ausgabedatei z.B.für PROC GPLOT*/ [-0.5ex] NCLUSTERS=nc /*Anz. Cluster*/ [-0.5ex] COPY vars /*vars in die Ausgabedatei*/ [-0.5ex] **RUN**; **PROC GPLOT**; [-0.5ex] PLOT variablen=cluster; /*Symbol-Anweis. vorher definieren* [-0.5ex] **RUN**;

Zusammenfassung (14)
Konfidenzbereiche
für Parameter im Regressionsmodell
PROC REG; MODEL Y=var1...varn/ CLI CLM; RUN;

Grafische Darstellung von Konfidenzbereichen bei der Regression
SYMBOL1 I=RLCLI95; **PROC GPLOT**; PLOT y*x=1; **RUN**;

Zusammenfassung (15)
Wichtige Sprachelemente

Normalverteilte Zufallsvariable
mit zufälligem Startwert: seed=-1; RANNOR(seed);

Gleichverteilte Zufallsvariable
mit zufälligem Startwert: seed=-1; RANUNI(seed);

Zusammenfassung (16)
Wahrscheinlichkeitsverteilungen:

Verteilungsfunktion (Parameter)
CDF('Verteilung',z,Parameterliste)

Dichte oder Wahrscheinlichkeitsfunktion (Parameter)
PDF('Verteilung',z,Parameterliste) z.B.: ('normal',z,0,1) ('binomial',z,n,p)

Quantile
Standardnormal: PROBIT(u), $u \in (0,1)$. Quantile('Verteilung',z,Parameterliste)

Zusammenfassung (17)

Hauptkomponentenanalyse, nur Übersicht
PROC PRINCOMP

Übungen (1)

1. Mathematik, Folgen und Reihen, Potenzreihen, Funktionen

2. Mathematik, Differential- und Integralrechnung, Matrizen

3. Zufallsvariablen, Wahrscheinlichkeiten

4. Rechnen mit Erwartungswerten

5. Berechnen von robusten Lage- und Skalenschätzungen

6. Fisher Information, optimale Schätzungen, Dichteschätzung

7. Abhängigkeitsmaße, Korrelationen, Regression

8. Hypothesentest

Übungen (2)

9. Varianzanalyse

10. Quadratische Formen, Matrizen und Eigenwerte

11. Matrizenrechnung, Anwendung auf χ^2-Statistiken

12. Anpassungstests und Nichtparametrische Tests

13. Unabhängigkeitstests, Regression

14. Matrizenrechnung

Übungsaufgaben

2-6 Wahrscheinlichkeitsverteilungen

7-13 Statist. Maßzahlen, Boxplots,Schätzungen

12e,f,16 Histogramme, Dichteschätzung

14,15,17-19,34,36,40 Korrelation, Unabhängigkeit, Lineare Regression

20-25,28,35 Lagetests, Anpassungstests

26-27,39 Varianzanalyse

29-33,37,38 Nichtparametrische Tests

42 Regression

43,44 Zufallszahlen

44 Clusteranalyse

45 Logistische Regression