Einführung in die Statistik

Andreas Eberle

21. Juni 2024

Inhaltsverzeichnis

1. Statistische Verfahren: Grundbegriffe und Beispiele

1.1. Zwei Hypothesentests

a) Stilles Mineralwasser oder Leitungswasser?
Eine Person behauptet, dass sie anhand des Geschmacks unterscheiden kann, ob es sich um stilles Mineralwasser oder Leitungswasser handelt. Um diese Behauptung zu überprüfen, wird der folgende Test durchgeführt:

Dem Probanden werden insgesamt $2l$ Gläser präsentiert, wovon l mit Leitungswasser und die restlichen l mit stillem Mineralwasser gefüllt sind. Der Proband wählt l Gläser aus, von denen er annimmt, dass sie Leitungswasser enthalten. Sei X die Anzahl der korrekt ausgewählten Gläser.

Das Ziel des Tests ist es zu zeigen, ob die Person tatsächlich über die behauptete Fähigkeit verfügt. Es ist jedoch einfacher, die Nullhypothese zu widerlegen, die besagt, dass die Person keinen Unterschied erkennen kann. Unter der Annahme der Nullhypothese ist die Verteilung von X hypergeometrisch. Wir möchten herausfinden, wie groß X sein muss, damit die Nullhypothese H_0 verworfen werden kann. Für einen beobachteten Wert x betrachten wir den p-Wert.

$$p := \mathbb{P}_0 [X \geq x] = 1 - \mathbb{P}_0 [X \leq x - 1] = 1 - F_{2l,l} (x - 1)$$

Bei gegebenem *Signifikanzniveau* α ergibt sich die Entscheidungsregel:

Verwerfe Nullhypothese H_0 falls $p \leq \alpha \Leftrightarrow F_{2l,l}(x - 1) \geq 1 - \alpha$.

> **Beispiel.** Betrachten wir den beschriebenen Test mit $l = 5$. Bei $x = 4$ korrekt ausgewählten Gläsern ergibt sich ein p-Wert von
>
> $$p = \mathbb{P}_0 [X \geq 4] = \frac{\binom{5}{4}\binom{5}{1}}{\binom{10}{5}} + \frac{\binom{5}{5}\binom{5}{0}}{\binom{10}{5}} = \frac{26}{252} > 0,1$$
>
> Folglich können wir H_0 nicht zum Signifikanzniveau 10% verwerfen. Für den Fall $l = 5, x = 5$ ergibt sich $p = \mathbb{P}_0 [X \geq 5] = \frac{1}{252} \approx 0,4\%$. Somit können wir H_0 sogar zum Signifikanzniveau $0,5\%$ verwerfen.

Bemerkung. 1) Bedeutung des Signifikanzniveaus Sei beispielsweise $\alpha = 5\%$. Bei 100 Wiederholungen desselben Experiments würden wir unter H_0 durchschnittlich höchstens 5 mal einen so hohen p-Wert sehen, dass wir H_0 tatsächlich verwerfen.

2) Wenn wir H_0 nicht signifikant verwerfen können, bedeutet das nicht, dass wir davon ausgehen sollten, dass H_0 wahr ist. Möglicherweise haben wir nur zu wenige Daten, um eine Entscheidung zu treffen.

> **Beispiel.** Sei nun jedes Glas unabhängig, zufällig mit Wahrscheinlichkeit $\frac{1}{2}$ mit Mineral- bzw. Leitungswasser gefüllt. Unter H_0 gilt dann $X \sim \text{Bin}(2l, \frac{1}{2})$. Wir erhalten für $l = 5$ und $x = 4$:
>
> $$p = \mathbb{P}_0 [X \geq 4] = \frac{\binom{5}{4}\binom{5}{5}}{2^5} = \frac{6}{32} \approx 0,19$$

Einen nicht signifikanten p-Wert für $\alpha = 10\%$. Andererseits ist $l = 5, x = 5$ mit

$$p = \mathbb{P}_0 [X \geq 5] = \frac{1}{32} \approx 3\%$$

Schon signifikant zum Wert $\alpha = 5\%$.

b) Fischers exakter Test
Angenommen man möchte die Wirksamkeit eines Medikaments nachweisen. Um dies gegebenenfalls zu zeigen, werden $N = n_1 + n_2$ Probanden zufällig in zwei Gruppen eingeteilt: Die n_1 Individuen der 1. Gruppe erhalten das Medikament, die n_2 Individuen in Gruppe 2 erhalten ein Placebo. Nach einer gewissen Zeit wird ermittelt, wie viele Behandlungserfolge und -misserfolge in den beiden Gruppen auftraten. Die Ergebnisse lassen sich als *Viefeldertafel* zusammenfassen.

	Erfolg	Misserfolg	
Medikament	H_1	$n_1 - H_1$	n_1
Placebo	H_2	$n_2 - H_2$	n_2
	$H_+ = H_1 + H_2$	$N - H_+$	N

Unter der Nullhypothese H_0, dass das Medikament genau wie das Placebo wirkt (kein Effekt), sind die Verteilungen von H_1, H_2 und H_+ unbekannt. Jedoch gilt unter H_0, dass die bedingte Verteilung von H_1 gegeben $H_+ = l$ hypergeometrisch verteilt ist: $H_1 | H_+ = l \sim \text{Hyp}(N, l, n_1)$. Damit gilt:

$$\mathbb{P}_0 [H_1 > q \mid H_+ = l] = 1 - F_{N,l,n_1}(q) \leq \alpha$$

Die Frage ist nun, wie groß H_1 sein sollte, damit wir die Nullhypothese verwerfen können. Zu diesem Zweck fixieren wir ein Testniveau $\alpha \in (0, 1)$ und betrachten den kleinsten Wert von q, welcher die obige Ungleichung erfüllt:

$$q_{1-\alpha} = \min \left\{ x \in \mathbb{R} : F_{N,l,n_1}(x) \geq 1 - \alpha \right\}$$

Im Falle von $H_1 > q_{1-\alpha}$ können wir mit einer Sicherheit von $1 - \alpha$ behaupten, dass die Nullhypothese nicht stimmt. Dies motiviert die Entscheidungsregel:

Verwerfe H_0 zum Signifikanzniveau α falls $H_1 > q_{1-\alpha}$, wobei l der realisierte Wert von H_+ ist.

Beispiel. Fishers exakter Test Um die Wirksamket eines Medikamentes zu testen wird wie beschrieben ein Test durchgeführt mit $N = 40$ Probanden, $n_1 = n_2 = 20$ und einem Signifikanzniveau von $\alpha = 5\%$. Bei beobachteten Häufigkeiten von $H_+ = 26, H_1 = 15, H_2 = 11$ und dem 95%-Quantil $q_{0,95:40,26,20} = 15$ kann die Nullhypothese nicht verworfen werden, da $H_1 \not> 15$. Folglich kann keine Aussage getroffen werden.

Quantile

Quantile sind Punkte, an denen die Verteilungsfunktion einen bestimmten Wert überschreitet. Diese Punkte sind besonders in praktischen Anwendungen wie der Qualitätskontrolle von Bedeutung. Quantile ermöglichen es, verallgemeinerte Umkehrfunktionen der im Allgemeinen nicht bijektiven Verteilungsfunktion zu definieren.

Sei μ eine Wahrscheinlichkeitsverteilung auf $(\mathbb{R}, \mathcal{B}(\mathbb{R}))$ mit Verteilungsfunktion

$$F(c) = \mu [(-\infty, c]], \quad c \in \mathbb{R}.$$

Die Funktion F ist monoton wachsend und rechtsstetig. Den linksseitigen Limes bezeichnen wir als $F(c_-) = \lim_{\varepsilon \downarrow 0} F(c - \varepsilon) = \mu [(-\infty, c)]$.

Definition 1.1 (Quantile). Sei $u \in [0,1]$. Ein u-Quantil $q \in \mathbb{R}$ der Wahrscheinlichkeitsverteilung μ erfüllt die Bedingungen:

$$F(-q) = \mu[(-\infty, q)] \le u \quad \text{und} \quad F(q) = \mu[(-\infty, q]] \ge u.$$

Ein *Median* ist ein $\frac{1}{2}$-Quantil.

Wenn die Verteilungsfunktion streng monoton wachsend ist, ist $q = F^{-1}(u)$ für $u \in (0,1)$ das eindeutige u-Quantil. Im Allgemeinen kann es jedoch mehrere u-Quantile geben, die denselben Wert u haben. Wir definieren nun zwei verallgemeinerte Inverse einer Verteilungsfunktion F, da diese im Allgemeinen nicht bijektiv ist. Für $u \in (0,1)$ sei

$$\begin{aligned} \underline{G}(u) &:= \inf\{x \in \mathbb{R} : F(x) \ge u\} = \sup\{x \in \mathbb{R} : F(x) < u\}, \qquad \text{und} \\ \overline{G}(u) &:= \inf\{x \in \mathbb{R} : F(x) > u\} = \sup\{x \in \mathbb{R} : F(x) \le u\}. \end{aligned}$$

Wie die folgende Abbildung zeigt, sind Quantille im Allgemeinen nicht eindeutg.

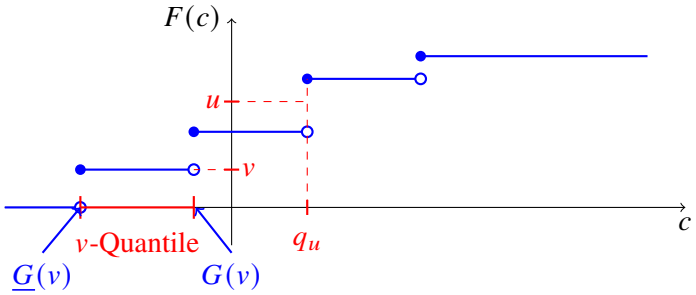


Abbildung 1.1.: Quantilillustration mit Verteilungsschritten und Quantilen.

Offensichtlich gilt $\underline{G}(u) \le \overline{G}(u)$. Die Funktionen $\underline{G}$ bzw. $\overline{G}$ sind links- bzw. rechtsstetig. Ist F stetig und streng monoton wachsend, also eine Bijektion von $\mathbb{R}$ nach $(0,1)$, dann ist $\underline{G}(u) = \overline{G}(u) = F^{-1}(u)$. Die Funktion $\underline{G}$ wird daher auch als die *linksstetige verallgemeinerte Inverse* von F bezeichnet. Das folgende Lemma zeigt, dass $\underline{G}(u)$ das kleinste und $\overline{G}(u)$ das größte u-Quantil ist:

Lemma 1.2. *Für $u \in (0,1)$ und $q \in \mathbb{R}$ sind die folgenden Aussagen äquivalent:*

(i) *q ist ein u-Quantil.*

(ii) $F(q-) \le u \le F(q)$.

(iii) $\underline{G}(u) \le q \le \overline{G}(u)$.

Beweis. Nach Definition ist q genau dann ein u-Quantil, wenn $P[X < q] \le u \le 1 - P[X > q] = P[X \le q]$ gilt. Hieraus folgt die Äquivalenz von (i) und (ii).

Um zu zeigen, dass (iii) äquivalent zu diesen Bedingungen ist, müssen wir zeigen, dass $\underline{G}(u)$ das kleinste und $\overline{G}(u)$ das größte u-Quantil ist. Wir bemerken zunächst, dass $\underline{G}(u)$ ein u-Quantil ist, da

$$F(\underline{G}(u)-) = \lim_{x \nearrow \underline{G}(u)} F(x) \le u, \quad \text{und} \quad F(\underline{G}(u)) = \lim_{x \searrow \underline{G}(u)} F(x) \ge u.$$

Andererseits ist $x < \underline{G}(u)$ kein u-Quantil, denn es gilt $F(x) < u$. Somit ist $\underline{G}(u)$ das kleinste u-Quantil. Auf ähnliche Weise folgt, dass $\overline{G}(u)$ das größte u-Quantil ist. ■

Satz 1.3 (Quantiltransformation). Sei $U \sim \mathrm{Unif}(0,1)$ eine auf $(0,1)$ gleichverteilte Zufallsvariable. Dann ist durch

$$X := \underline{G}(u)$$

eine Zufallsvariable mit Verteilung μ definiert.

Beweis (*Beweisskizze*). Sei $c \in \mathbb{R}$ und F_X, bzw. F_μ die jeweiligen Verteilungsfunktionen. Da Verteilungen eindeutig über ihre Verteilungsfunktionen bestimmt sind, reicht es, deren Gleichheit zu zeigen:

$$F_X(c) = \mathbb{P}[\underline{G}(u) \le c] = \mathbb{P}[U \le F_\mu(c)] = F_\mu(c).$$

Die mittlere Gleichheit ist eine Übungsaufgabe. ■

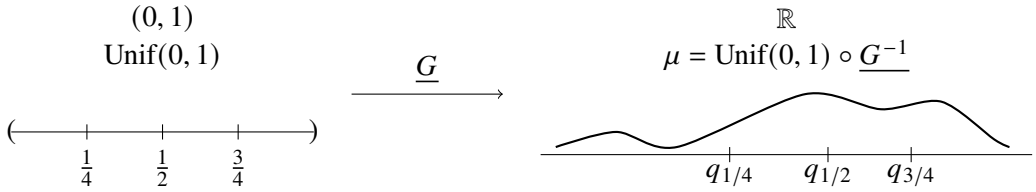


Abbildung 1.2.: Quantiltransformation

Anwendung Da Stichproben der Gleichverteilung auf $(0,1)$ einfacher zu simulieren sind, ist die Quantiltransformation besonders hilfreich bei der Simulation von Stichproben einer Wahrscheinlichkeitsverteilung μ. Bei gegebenen unabhängigen Stichproben $u_1, \dots, u_n$ von $\mathrm{Unif}(0,1)$ erhält man durch Quantiltransformation unabhängige Stichproben $\underline{G}(u_1), \dots, \underline{G}(u_n)$ von μ.
Sei u nun eine Stichprobe der Gleichverteilung $\mathrm{Unif}(0,1)$, dann erhalten wir beispielsweise Stichproben aus gegebenen Verteilungen wie

$$\mathrm{Bernoulli}(p) \sim 1_{u>1-p}, \quad \mathrm{Exp}(\lambda) \sim -\frac{1}{\lambda}\log(1-u).$$

p-Werte

Sei $X : \Omega \to \mathbb{R}$ eine Zufallsvariable auf dem Wahrscheinlichkeitsraum $(\Omega, \mathcal{A}, \mathbb{P})$. Wir beobachten den Wert $x = X(\omega)$. Nun stellt sich die Frage, ob X tatsächlich der Verteilung folgt oder ob der beobachtete Wert "verdächtig klein"bzw. "verdächtig großïst. Dies motiviert die folgende Definition:

Definition 1.4 (p-Wert). Sei F die Verteilungsfunktion der Zufallsvariable X. Dann definieren wir

$$\begin{aligned} p_l &:= \mathbb{P}[X \le x] = F(x), && \text{linksseitiger } p\text{-Wert}, \\ p_r &:= \mathbb{P}[X \ge x] = 1 - F(x_-), && \text{rechtsseitiger } p\text{-Wert}, \\ p &:= 2\min(p_l, p_r), && \text{beidseitiger } p\text{-Wert}. \end{aligned}$$

Kleine p-Werte sprechen dafür, dass X nicht gemäß $\mathbb{P}$ verteilt ist. Dies wird im folgenden Lemma präzisiert:

Lemma 1.5. *Sei $\alpha \in [0,1]$. Dann gilt für die drei p-Werte:*

(i) $\mathbb{P}[p_l \leq \alpha] = \mathbb{P}[F(X) \leq \alpha] \leq \alpha$,

(ii) $\mathbb{P}[p_r \leq \alpha] = \mathbb{P}[1 - F(X_-) \leq \alpha] \leq \alpha$,

(iii) $\mathbb{P}[p \leq \alpha] = \mathbb{P}[2\min(F(X), 1 - F(X)) \leq \alpha] \leq \alpha$.

Für den Fall, dass F bijektiv ist, gilt jeweils Gleichheit.

Beweis. Sei $\underline{G}$ die verallgemeinerte inverse Funktion von F, $U \sim \text{Unif}(0,1)$ und wir definieren die Zufallsvariable $X = \underline{G}(U)$. Dann gilt:

(i)
$$\mathbb{P}[F(X) \leq \alpha] = \mathbb{P}[F(\underline{G}(U)) \leq \alpha] \leq \mathbb{P}[U \leq \alpha] = \alpha$$
Da $F(\underline{G}(U)) \geq U$ gemäß der Definition von $\underline{G}$ und der Rechtsstetigkeit von F.

(ii)
$$\mathbb{P}[1 - F(X_-) \geq 1 - \alpha] = \mathbb{P}[F(\underline{G}(U)_-) \geq 1 - \alpha] \geq \mathbb{P}[U \leq 1 - \alpha] = \alpha$$
Da $F(\underline{G}(U)_-) \leq U$ gemäß der Definition von $\underline{G}$.

(iii) Folgt aus (i) und (ii), da:
$$\min(F(X), 1 - F(X)) \leq \frac{\alpha}{2} \Rightarrow F(X) \leq \frac{\alpha}{2} \text{ oder } 1 - F(X) \leq \frac{\alpha}{2}$$
Nach (i) und (ii) ist die Wahrscheinlichkeit für beide Ausdrücke $\leq \frac{\alpha}{2}$ und somit für den Gesamtausdruck $\leq \alpha$. ■

Bemerkung (Bedeutung des p-Wertes). Wenn das Zufallsexperiment oft wiederholt wird und jedes Mal der p-Wert berechnet wird, dann sehen wir nur selten einen kleinen p-Wert. Zum Beispiel für $\alpha = 0,05$ nur in durchschnittlich 5 von 100 Fällen. Ein kleiner p-Wert legt daher nahe, die Verteilungshypothese zu verwerfen.

> **Beispiel (Fishers exakter Test).** Betrachten wir erneut den oben beschriebenen Test zur Prüfung der Wirksamkeit eines Medikaments. Wir hatten gesehen, dass wir die Nullhypothese verwerfen können, falls
> $$H_1 > q_{1-\alpha;N,H_+,n_1} \overset{\text{Übung}}{\Leftrightarrow} \underbrace{1 - F_{N,H_+,n_1}(H_{1-})}_{p_r} \leq \alpha.$$
> Nach Lemma 1.5 folgt: Die Wahrscheinlichkeit, die Nullhypothese zu verwerfen, obwohl sie wahr ist, beträgt höchstens α.

1.2. Schätzen von Populationsgrößen

In vielen statistischen Anwendungen analysiert man Stichproben aus einer bestimmten Population. Ziel ist es, anhand der Stichprobe Rückschlüsse auf die Zusammensetzung der gesamten Population zu ziehen. Die Frage nach der Größe der Population ist dabei besonders nützlich für verschiedene statistische Verfahren, wie das folgende illustrierte Taxiproblemßeigt.

Taxiproblem

In einer Stadt gibt es eine unbekannte Anzahl N an Taxis, die von 1 bis N durchnummeriert sind. Um die Anzahl der Taxis zu bestimmen, beobachten wir n verschiedene Taxis mit den Nummern $\omega_1, \dots, \omega_n$. Konkret lässt sich das Beispiel durch das folgende Modell darstellen: Sei

$$\Omega = \left\{\omega = (\omega_1, \dots, \omega_n) : \omega_i \in \mathbb{N}, \omega_i \neq \omega_j \text{ für } i \neq j\right\} \subset \mathbb{N}^n$$

mit der Stichprobe $X(\omega) = \omega$ und den Stichprobenwerten $X_i(\omega) = \omega_i$. Abhängig vom unbekannten Parameter N definieren wir die Wahrscheinlichkeitsverteilung $\mathbb{P}_N = \mathrm{Unif}(\Omega_N)$, wobei $\Omega_N = \{\omega \in \Omega : \omega_i \leq N \; \forall \, i \in \{1, \dots, n\}\}$.

Im Folgenden betrachten wir zwei Schätzer für den unbekannten Parameter N. Nach dem Gesetz der großen Zahlen konvergiert das arithmetische Mittel $\overline{X}_n$ der Stichprobenwerte für große n gegen $(N-1)/2$. Daher ist der Schätzer

$$Y = 2 \cdot \frac{X_1 + \ldots + X_n}{n} - 1$$

naheliegend. Ein weiterer interessanter Schätzer ist die Zahl $M = \max(X_1, \dots, X_n)$. Um diese beiden Schätzer zu vergleichen, betrachten wir ihre Nähe zum unbekannten Parameter N.

Zu Y: Mit dem Erwartungswert $\mathbb{E}_N[X_1] = (N+1)/2$ folgt

$$\mathbb{E}_N[Y] = 2\mathbb{E}_N[X_1] - 1 = N.$$

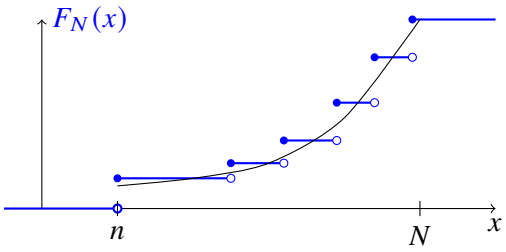
Man sagt, dass der Schätzer Y *erwartungstreu* ist. Ein weiteres gängiges Maß für die Ungenauigkeit eines Schätzers ist der mittlere quadratische Fehler (MSE):

$$\mathbb{E}_N[(Y-N)^2] = \mathrm{Var}_N[Y] = \frac{4}{n^2}\mathrm{Var}[X_1 + \ldots + X_n] \approx \frac{4n}{n^2}\mathrm{Var}_N[X_1] \quad \text{für } n \ll N,$$

was in $O\left(\frac{N^2}{n}\right)$ liegt, falls N deutlich größer als n ist. Die Ungenauigkeit von Y nimmt also linear mit n ab.

Zu M: Nach Definition des Maximumschätzers gilt $\mathbb{E}_N[M] < N$ für alle $N > 1$. Der Schätzer M ist *nicht erwartungstreu*. Um eine genauere Fehlerabschätzung zu erhalten, ist die Berechnung der Verteilung von M unter $\mathbb{P}_N$ erforderlich. Für $n \leq x \leq N$ gilt dann

$$F_N(x) := \mathbb{P}_N[M \leq x] = \frac{x(x-1)(x-2)\ldots(x-n+1)}{N(N-1)(N-2)\ldots(N-n+1)} =: \frac{[x]_n}{[N]_n}. \qquad (*)$$



Lemma 1.6. *Seien N, n, M wie oben. Dann gilt:*

(i) $\mathbb{E}_N[M] = \frac{n}{n+1}(N+1) = N - \frac{N-n}{n+1} \quad \in O\left(\frac{N}{n}\right)$

(ii) $\mathrm{Var}_N[M] = \frac{n(N-n)(N+1)}{(n+1)^2(n+2)} \quad \in O\left(\frac{N^2}{n^2}\right)$

Beweis. Nach $(*)$ gilt

$$\mathbb{P}_N[M = x] = F_N(x) - F_N(x-1) \overset{(*)}{=} \frac{n[x-1]_{n-1}}{[N]_n}.$$

Somit folgt

$$\mathbb{E}_N[M] = \sum_{x=n}^{N} x\mathbb{P}_N[M = x] = \frac{n}{[N]_n} \sum_{x=n}^{N} [x-1]_{n-1} = \frac{n}{n+1}(N+1),$$

da

$$\sum_{x=n}^{N} \mathbb{P}[M = x] = 1 \Rightarrow \sum_{x=n}^{N} [x-1]_{n-1} = \frac{[N]_n}{n}.$$

Analog erhält man

$$\mathbb{E}_N[M(M+1)] = \frac{n}{n+2}(N+1)(N+2) \Rightarrow \mathrm{Var}_N[M] = \mathbb{E}_N[M^2] - (\mathbb{E}_N[M])^2 = \ldots = \frac{n(N-n)(N+1)}{(n+1)^2(n+2)}.$$

Die Varianz von M fällt schneller ab als die von Y, aber M ist nicht erwartungstreu. Daher betrachten wir den folgenden modifizierten Schätzer:

Korollar 1.7. Für den modifizierten Maximumschätzer

$$\hat{N} := \frac{n+1}{n} M - 1$$

gilt:

$$\mathbb{E}_N[\hat{N}] = N \quad \text{und} \quad \mathbb{E}_N[(\hat{N} - N)^2] < \frac{N^2}{n^2}.$$

Beweis. Nach Definition von $\hat{N}$ gilt

$$\mathbb{E}_N[\hat{N}] = \frac{n+1}{n}\mathbb{E}_N[M] - 1 \overset{(1.6)}{=} N.$$

Für die mittlere quadratische Abweichung erhalten wir somit

$$\mathbb{E}_N[(\hat{N} - N)^2] = \mathrm{Var}_N[\hat{N}] = \left(\frac{n+1}{n}\right)^2 \mathrm{Var}_N[M] \overset{(1.6)}{=} \frac{(N-n)(N+1)}{n(n+2)} < \frac{N^2}{n^2}.$$

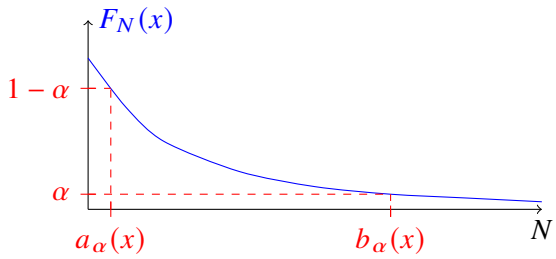
Der modifizierte Schätzer $\hat{N}$ ist erwartungstreu und seine Ungenauigkeit fällt schneller mit n ab.

Konfidenzschranken für N

Anstatt eines konkreten Schätzers kann man auch Schranken für N angeben, die mit vorgegebener Sicherheit korrekt sind. Wir wollen für mögliche Werte von N bestimmen, ob der Wert x für die Verteilungsfunktion F_N "verdächtig klein"bzw. "verdächtig großïst. Beispielsweise liefert uns der Maximumschätzer eine sichere untere Schranke, denn $N \geq M$ gilt immer. Sei also $\alpha \in (0,1)$ gegeben, so suchen wir eine obere Schranke für N mit Sicherheit bzw. Konfidenzniveau $1 - \alpha$.

Für die Verteilungsfunktion gilt nach $(*)$

$$F_N(x) = \mathbb{P}_N[M \leq x] = \frac{[x]_n}{[N]_n} \quad \text{für } n \leq x \leq N.$$



Die Verteilungsfunktion F_N ist monoton wachsend in x, aber monoton fallend in N. Wenn N größer wird, verschiebt sich die Verteilung von M zu größeren Werten, wodurch die Verteilungsfunktion später ansteigt.

Wie die Abbildung zeigt, betrachten wir die beiden Werte

$$a_\alpha := \min\{N \geq n : F_N(x_-) < 1-\alpha\} \quad \text{und} \quad b_\alpha := \max\{N \geq n : F_N(x) > \alpha\}.$$

Nach Lemma 1.5 gibt uns $b_\alpha(x)$ eine obere Schranke mit Sicherheit $1-\alpha$. Dies wird im folgenden Lemma konkretisiert.

Lemma 1.8. *Die datenabhängige Zahl $b_\alpha(x)$ ist eine obere Konfidenzschranke für N zum Konfidenzniveau $1-\alpha$ bzw. Signifikanzniveau α. Das heißt:*

$$\mathbb{P}[N \leq b_\alpha(M)] \geq 1-\alpha \quad \textit{für alle } N \in \mathbb{N}.$$

Beweis. Sei $\alpha \in (0,1)$. Nach Lemma 1.5 gilt:

$$\mathbb{P}_N[F_N(M) \leq \alpha] \leq \alpha.$$

Da die Abbildung $N \to F_N(M)$ monoton fallend ist, ist dies äquivalent zu:

$$\mathbb{P}_N[N \leq b_\alpha(M)] = \mathbb{P}_N[F_N(M) > \alpha] \geq 1-\alpha.$$

Wie erwähnt liefert uns M zudem eine untere Konfidenzschranke für N zum Konfidenzniveau $1-\alpha$. Eine untere Konfidenzschranke zu einem anderen Konfidenzniveau $1-\alpha$ können wir analog zu Lemma 1.7 mithilfe des rechtsseitigen p-Wertes p_r erhalten:

$$\mathbb{P}_N[N \geq a_\alpha(M)] = \mathbb{P}_N[F_N(M_-) < 1-\alpha] = \mathbb{P}_N[1-F_N(M_-) > \alpha] \geq 1-\alpha.$$

Insgesamt erhalten wir:

Satz 1.9. Die Intervalle $[M, b_\alpha(M)]$ sowie $[a_{\frac{\alpha}{2}}, b_{\frac{\alpha}{2}}(M)]$ sind jeweils *Konfidenzintervalle für N zum Konfidenzniveau* $1-\alpha$, das heißt:

$$\mathbb{P}_N\left[N \notin [M, b_\alpha(M)]\right] \leq \alpha \quad \text{für alle } N \in \mathbb{N},$$

$$\mathbb{P}_N\left[N \notin [a_{\frac{\alpha}{2}}(M), b_{\frac{\alpha}{2}}(M)]\right] \leq \alpha \quad \text{für alle } N \in \mathbb{N}.$$

Bemerkung.

(i) Die Konfidenzintervalle hängen von M ab. Bei jeder Durchführung des Zufallsexperiments ergibt sich also ein anderes Konfidenzintervall.

(ii) Führen wir mehrere unabhängige Untersuchungen durch und erhalten jeweils ein $(1-\alpha)$-Konfidenzintervall, dann liegen die wahren Parameterwerte in durchschnittlich mindestens $100(1-\alpha)\%$ der Fälle im jeweiligen Konfidenzintervall.

(iii) Bei einer Durchführung erhält man eine konkrete Realisierung des Konfidenzintervalls. Die Aussage *"Der wahre Parameter liegt mit Wahrscheinlichkeit $1-\alpha$ in dem (festen, realisierten) Intervall"* ist falsch und sinnlos, denn N ist nicht zufällig.

Capture-Recapture-Verfahren

Ein weiteres Verfahren zur Bestimmung einer unbekannten Populationsgröße N ist das sogenannte Capture-Recapture-Verfahren. Im einfachsten Fall handelt es sich um ein zweistufiges Experiment:

1. Capture Entnehme eine Zufallsstichprobe der Größe $l \leq N$. Markiere diese und entlasse sie wieder.

2. Recapture Nehme eine unabhängige Zufallsstichprobe der Größe $n \leq N$.

Sei nun H die Anzahl der Markierten in der 2. Stichprobe. Unter der Wahrscheinlichkeitsverteilung $\mathbb{P}_N$ ist H dann hypergeometrisch verteilt mit den Parametern N, l, n. Ein möglicher Schätzer für N wäre:

$$\hat{N} := \frac{nl}{H}$$

Denn wenn wir davon ausgehen, dass der Anteil der Markierten in der 2. Stichprobe annähernd dem Anteil in der gesamten Population entspricht, ergibt sich:

$$\frac{l}{N} \approx \frac{H}{n} \Rightarrow N \approx \frac{nl}{H} = \hat{N}.$$

Konfidenzintervall

Wie in der Übungsaufgabe bewiesen, ist die Abbildung $N \mapsto F_{N,l,n}(x)$ monoton wachsend. Nach Lemma 1.5 ergibt sich die untere Konfidenzschranke:

$$1 - \alpha \leq \mathbb{P}_N[F_{N,l,n}(H) > \alpha] = \mathbb{P}_N[N \geq a_\alpha(H)] \quad \text{wobei} \quad a_\alpha(x) := \min\{N : F_{N,l,n}(H) > \alpha\}.$$

Eine obere Konfidenzschranke erhält man analog.

Beispiel. Wir betrachten das Capture-Recapture-Verfahren mit $l = n = 20$ und dem Beobachtungswert $H = 2$. Somit erhalten wir den Schätzer:

$$\hat{N} = 20 \cdot \frac{20}{2} = 200.$$

Gegeben sei das Signifikanzniveau $\alpha = 5\%$:

$$F_{N,20,20}: \quad N = 77 \sim 0{,}0495 \quad ; \quad N = 78 \sim 0{,}0537.$$

Somit ergibt sich eine untere 95%-Konfidenzschranke von 78 für N.

1.3. Statistische Modelle und Verfahren

In diesem Abschnitt befassen wir uns mit der schließenden Statistik. Hierbei werden aus empirischen Daten Rückschlüsse auf zugrundeliegende Phänomene gezogen, selbst wenn die Daten fehlerbehaftet oder unvollständig sind. Wir betrachten den folgenden allgemeinen Rahmen für statistische Modelle.

Definition 1.10 (Statistisches Modell). 1) Ein *statistisches Modell* besteht aus:

a) Einer Menge $\Omega \neq \emptyset$ zusammen mit einer σ-Algebra $\mathcal{A}$.

b) Einer Parametermenge $\Theta \neq \emptyset$.

c) Einer Familie $(P_\theta)_{\theta \in \Theta}$ von Wahrscheinlichkeitsverteilungen auf $(\Omega, \mathcal{A})$, wobei $\theta \in \Theta$ der unbekannte Parameter ist.

d) Einer messbaren Abbildung $X : \Omega \to S$ (Stichprobe), wobei $(S, \mathcal{B})$ ein messbarer Raum ist.

2) Eine *Statistik* ist eine Abbildung $T(X)$, wobei $T : S \to \mathbb{R}$ eine messbare Abbildung ist.

Der realisierte Wert $T(x)$ einer Statistik ist eine Kenngröße, die wir aus den Beobachtungsdaten $x = X(\omega)$ berechnen können.

Beispiel (Capture-Recapture). Betrachten wir das beschriebene Capture-Recapture-Verfahren zur Bestimmung einer Populationsgröße. Hierbei gilt $\Theta = \mathbb{N}_{\geq \max(l,n)}$ mit

$$\Omega = \left\{(\omega_1^{(1)}, \ldots, \omega_1^{(l)}, \omega_2^{(1)}, \ldots, \omega_2^{(n)}) : \omega_i^{(k)} \neq \omega_i^{(l)} \text{ für } k \neq l,\ i \in \{1,2\}\right\} \subset \mathbb{N}_0^{l+n}$$

und $X(\omega) = \omega$. Mit der Familie $\mathbb{P}_N = \mathrm{Unif}(\Omega_N)$, wobei $\Omega_N = \{\omega \in \Omega : \omega_i^{(k)} \leq N \text{ für alle } i, k\}$. Die Anzahl der Markierten in der 2. Stichprobe ist beispielsweise eine Statistik, die durch

$$H(\omega) = \left|\{\omega_1^{(1)}, \ldots, \omega_1^{(l)}\} \cap \{\omega_2^{(1)}, \ldots, \omega_2^{(n)}\}\right|$$

gegeben ist.

Einige grundlegende Modelle

1) Bernoulli-Modell, Schätzen von Wahrscheinlichkeiten
Wir betrachten ein Bernoulli-Experiment mit unbekannter Erfolgswahrscheinlichkeit θ und dem eindimensionalen Parameterraum $\Theta = [0,1]$. Die n-fache Durchführung des Experiments liefert die Stichprobe $X = (X_1, \ldots, X_n)$, wobei $X_i \sim \mathrm{Bernoulli}(\theta)$ unabhängig unter $\mathbb{P}_\theta$ verteilt sind. Eine interessante Statistik hierbei ist die relative Häufigkeit

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

Nach dem Gesetz der großen Zahlen gilt $\overline{X}_n \approx \theta$ für große n. Eine Fehlerabschätzung kann beispielsweise über die Tschebyscheff-Ungleichung oder exponentielle Ungleichungen erfolgen.

2) Gauß-Modell, Parameterschätzung
Das Schätzen einer Wahrscheinlichkeitsverteilung kann komplex sein. Unter der Annahme, dass die Verteilung annähernd normal ist, lässt sich dieses Problem jedoch erheblich vereinfachen. Bei einer Normalverteilung, die durch Erwartungswert und Varianz eindeutig bestimmt ist, betrachten wir den zweidimensionalen Parameterbereich $\Theta = \mathbb{R} \times (0,\infty) \sim (m, v)$. Die Stichproben sind $X = (X_1, \ldots, X_n)$, wobei $X_i \sim N(m, v)$ unabhängig unter $\mathbb{P}_{m,v}$ verteilt sind. Interessante Statistiken sind hierbei $\overline{X}_n$ und

$$V_n = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^n (X_i - \overline{X}_n)^2, \qquad T_n = \frac{\overline{X}_n - m_0}{\sqrt{V_n/n}}.$$

Hierbei ist T_n die Student-t-Statistik mit der Nullhypothese $m = m_0$. Insbesondere werden wir später zeigen, dass der Schätzer $V_n^* = \frac{n}{n-1}V_n$ genauer ist als V_n.

3) Nichtparametrische Schätzung der Verteilung bzw. Verteilungsfunktion
Hierbei ist Θ die Menge aller Wahrscheinlichkeitsverteilungen auf $(\mathbb{R}, \mathcal{B}(\mathbb{R}))$ mit der Stichprobe $X = (X_1, \ldots, X_n)$, wobei $X_i \sim \mu$ unabhängig unter $\mathbb{P}_\mu$ verteilt sind. Statistiken sind:

$$\hat{\mu}_n = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^n \delta_{X_i}, \qquad \hat{F}_n(c) = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^n 1_{\{X_i \leq c\}}.$$

Die *empirische Verteilung* $\hat{\mu}_n[B]$ gibt die relative Häufigkeit der Werte in B unter $X_1, \ldots, X_n$ an. Analog beschreibt die *empirische Verteilungsfunktion* die relative Häufigkeit der Werte $\leq c$ in der Stichprobe.

4) Nichtparametrische Dichteschätzung
Sei

$$\Theta = \left\{ f : \mathbb{R} \to [0, \infty) : \int f(x)\, dx = 1, \exists \text{ schwache Ableitung } f'' \text{ mit } \int (f''(x))^2\, dx < \infty \right\}.$$

Hierbei bedeutet schwache Ableitung, dass f geschrieben werden kann als $f(x) = \int_0^x \int_0^t g(s)\, ds\, dt$, wobei $\int g^2 < \infty$. Die Stichproben $X_1, \ldots, X_n$ sind unabhängig mit Dichte f unter $\mathbb{P}_f$. Mögliche Statistiken sind:

$$\hat{f}_n(x) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} \varphi_h(x - X_i), \qquad \varphi_h(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi h}} e^{-\frac{x^2}{2h}}, \qquad \text{für } h > 0.$$

5) Regression
Betrachten wir nun die Regression. Gegeben seien $(X_1, Y_1), \ldots, (X_n, Y_n) \subset \Omega \to \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}$, wobei X_i Kontrollgrößen und Y_i abhängige Variablen darstellen. Die abhängigkeit sei gegeben durch

$$Y_i = f(X_i) + \sqrt{v}\varepsilon_i$$

Hierbei sind ε_i identisch und unabhängig verteilt und unabhängig von X. Im Folgenden betrachten wir einige grundlegende Modelle der Regression.

- **Nichtparametrisches Modell:**

  $$\Theta = \{(v, f) \mid v \in (0, \infty), f : \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}\}$$

  Ein nichtparametrisches Modell ist *unendlichdimensional* und bietet große Flexibilität, da keine spezifische Form für f angenommen wird.

- **Lineares Modell:**

  $$f(x) = \omega^T x$$

  Hierbei ist der Parameterraum:

  $$\Theta = \{(v, \omega) \mid v \in (0, \infty), \omega \in \mathbb{R}^d\}$$

  Ein lineares Modell ist relativ einfach und hat die Dimension $d + 1$, wobei d die Anzahl der Kontrollgrößen ist.

- **Neuronales Netzwerk:**

  $$f(x)$$

  In diesem Fall ist $f(x)$ eine nichtlineare Funktion, die sich über ein vorgegebenes neuronales Netzwerk darstellen lässt. Diese Modelle sind *hochdimensional* und können sehr komplexe Zusammenhänge abbilden.

1.4. Statistische Verfahren

In diesem Abschnitt befassen wir uns mit verschiedenen statistischen Verfahren, die zur Schätzung unbekannter Parameter und zur Beurteilung der Genauigkeit dieser Schätzungen verwendet werden. Wir werden wichtige Konzepte wie Schätzer, systematische Fehler (Bias) und mittlere quadratische Fehler (MSE) einführen und an Beispielen veranschaulichen.

Schätzer

Gesucht sei $g(\theta)$, wobei $g : \Theta \to \mathbb{R}$ eine Funktion ist. Zum Beispiel hatten wir im Gaußmodell $\theta = (m, v)$, und gesucht war m.

Ein *Schätzer für* $g(\theta)$ ist durch eine Statistik $\hat{g} = T(X)$ gegeben. Um verschiedene Schätzer zu vergleichen, betrachten wir unter anderem die folgenden Größen:

Definition 1.11. (i) Der *systematische Fehler* (Bias) von $\hat{g}$ ist

$$\mathrm{Bias}_\theta(\hat{g}) := \mathbb{E}_\theta[\hat{g}] - g(\theta).$$

Der Schätzer $\hat{g}$ heißt *erwartungstreu* (unbiased), falls

$$\mathrm{Bias}_\theta(\hat{g}) = 0 \qquad \text{für alle } \theta \in \Theta.$$

(ii) Der *mittlere quadratische Fehler* (mean squared error, MSE) von $\hat{g}$ ist

$$\mathrm{MSE}_\theta(\hat{g}) := \mathbb{E}_\theta\left[(\hat{g} - g(\theta))^2\right].$$

Das folgende Lemma liefert eine praktische Konkretisierung des mittleren quadratischen Fehlers.

Lemma 1.12. *Für einen Schätzer $\hat{g}$ von $g(\theta)$ gilt:*

$$MSE_\theta(\hat{g}) = Var_\theta[\hat{g}] + Bias_\theta(\hat{g})^2.$$

Beweis.

$$\mathrm{MSE}_\theta(\hat{g}) = \mathbb{E}_\theta\big[(\hat{g} - \mathbb{E}_\theta[\hat{g}] + \overbrace{\mathbb{E}_\theta[\hat{g}] - g(\theta)}^{\mathrm{Bias}_\theta(\hat{g})})^2\big].$$

Die Behauptung folgt, weil

$$\mathbb{E}_\theta\left[(\hat{g} - \mathbb{E}_\theta[\hat{g}]) \cdot \mathrm{Bias}_\theta(\hat{g})\right] = 0.$$

Beispiel (Nichtparametrisches Schätzen von Erwartungswert, Varianz und Verteilung). Wir betrachten Θ als die Menge aller Wahrscheinlichkeitsverteilungen μ auf $(\mathbb{R}, \mathcal{B}(\mathbb{R}))$ mit $\int_{\mathbb{R}} x^2 \mu(dx) < \infty$. Mit der Stichprobe $X = (X_1, \ldots, X_n)$, wobei $X_i \sim \mu$ unabhängig unter $\mathbb{P}_\mu$ sind, sind Erwartungswert und Varianz durch die folgenden Abbildungen gegeben:

$$m(\mu) = \int_{\mathbb{R}} x\,\mu(dx), \qquad v(\mu) = \int_{\mathbb{R}} (x - m(\mu))^2\,\mu(dx).$$

1) Schätzen von m: Die relative Häufigkeit $\overline{X}_n = \frac{1}{n}\sum X_i$ ist ein erwartungstreuer Schätzer für den Erwartungswert, denn

$$\mathbb{E}_\mu[\overline{X}_n] = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^n \mathbb{E}[X_i] = m(\mu) \qquad \text{für alle } \mu \in \Theta.$$

Da $\overline{X}_n$ erwartungstreu ist und die Stichproben X_i unabhängig sind, folgt:

$$\mathrm{MSE}_\mu(\overline{X}_n) = \mathrm{Var}_\mu[\overline{X}_n] = \frac{1}{n^2}\sum_{i=1}^n \mathrm{Var}_\mu[X_i] = \frac{v(\mu)}{n} \qquad \in O\left(\frac{1}{n}\right).$$

2) Schätzen von v: Die Stichprobenvarianz $V_n = \frac{1}{n}\sum(X_i - \overline{X}_n)^2$ ist nicht erwartungstreu. Zuerst wollen wir die folgende Behauptung beweisen:

$$\mathbb{E}_\mu\left[\sum_{i=1}^n (X_i - \overline{X}_n)^2\right] = (n-1)v(\mu).$$

Sei ohne Beschränkung der Allgemeinheit $\mathbb{E}_\mu[X_i] = 0$, ansonsten betrachte $\widetilde{X}_i = X_i - \mathbb{E}_\mu[X_i]$. Nun gilt:

$$\begin{aligned}\sum_{i=1}^n (X_i - \overline{X}_n)^2 &= \sum_{i=1}^n X_i^2 - 2\overbrace{\sum_{i=1}^n X_i \overline{X}_n}^{n\overline{X}_n^2} + \overbrace{\sum_{i=1}^n \overline{X}_n^2}^{n\overline{X}_n^2} \\ &= \sum_{i=1}^n X_i^2 - n\overline{X}_n^2 \\ \Rightarrow \mathbb{E}_\mu\left[\sum_{i=1}^n (X_i - \overline{X}_n)^2\right] &= n\underbrace{\mathbb{E}_\mu[X_1^2]}_{=v(\mu)} - n\underbrace{\mathbb{E}_\mu[\overline{X}_n^2]}_{=\mathrm{Var}_\mu[\overline{X}_n]=\frac{v(\mu)}{n}} = (n-1)v(\mu).\end{aligned}$$

Es folgt also, dass $V_n^* := \frac{1}{n-1}\sum(X_i - \overline{X}_n)^2$ ein erwartungstreuer Schätzer von v ist.

3) Schätzen von μ: Als Schätzer der Verteilung μ betrachten wir die empirische Verteilung

$$\hat{\mu}_n := \frac{1}{n}\sum_{i=1}^n \delta_{X_i}, \qquad \hat{\mu}_n(B) = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^n 1_B(X_i),$$

die die relative Häufigkeit von Werten in $B \in \mathcal{B}(\mathbb{R})$ angibt. Es ergibt sich insbesondere:

$$\mathbb{E}_\mu[\hat{\mu}_n(B)] = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^n \mathbb{P}_\mu[X_i \in B] = \mu(B) \quad \text{für alle } B \in \mathcal{B}(\mathbb{R}).$$

Somit ist die empirische Verteilung $\hat{\mu}_n$ ein erwartungstreuer Schätzer für μ.

Konfidenzbereiche

Definition 1.13. Sei $\alpha \in (0,1)$. Ein *Konfidenzbereich für $g(\theta)$ mit Konfidenzniveau* $1-\alpha$ ist eine Abbildung $C(X)$, so dass

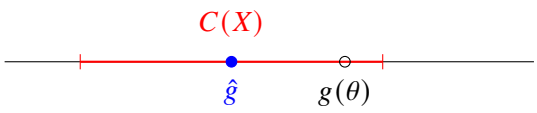
$$C : S \to \mathcal{P}(G),$$

wobei $\mathcal{P}(G)$ die Menge aller Teilmengen von G ist, und

$$\mathbb{P}_\theta[g(\theta) \in C(X)] \geq 1 - \alpha \quad \text{für alle } \theta \in \Theta.$$

Bemerkung. Insbesondere soll $\{x \in S : g(\theta) \in C(x)\}$ für jedes $\theta \in \Theta$ eine messbare Teilmenge von S sein.

Für $G = \mathbb{R}$ folgt meistens, dass die Konfidenzbereiche durch $C(X) = [a(X), b(X)]$ gegeben sind, wobei a und b Statistiken sind.



Konstruktionsverfahren für Konfidenzintervalle

1) Über die Verteilungsfunktion einer Statistik: Sei $T(X) : \Omega \to \mathbb{R}$ eine Statistik mit der Verteilungsfunktion $F_\theta(c) = \mathbb{P}_\theta[T(X) \leq c]$ für $c \in \mathbb{R}$. Nach Lemma 1.3 gilt dann: $\mathbb{P}_\theta[F_\theta(T(X)) > \alpha] \geq 1 - \alpha$. Dies liefert den Konfidenzbereich

$$C(x) := \{g(\theta) : \theta \in \Theta \text{ mit } F_\theta(T(X)) > \alpha\},$$

welcher jene Parameterwerte ausschließt, für die $T(X)$ "verdächtig kleinïst. Folglich gilt mit Lemma 1.3: $\mathbb{P}_\theta[g(\theta) \in C(X)] \geq 1 - \alpha$ für alle $\theta \in \Theta$. Analog erhalten wir

$$C'(x) := \{g(\theta) : \theta \in \Theta \text{ mit } F_\theta(T(X)_-) < 1 - \alpha\},$$

welcher Werte ausschließt, für die $T(X)$ "verdächtig großïst. Schließlich definiert man

$$C''(x) := \left\{g(\theta) : \theta \in \Theta \text{ mit } F_\theta(T(X)_-) < 1 - \frac{\alpha}{2} \text{ und } F_\theta(T(X)_-) > \frac{\alpha}{2}\right\},$$

welcher Werte ausschließt, für die $T(X)$ "verdächtig klein oder großïst. Diese Konfidenzintervalle sind wie folgt konkretisiert:

Korollar 1.14. Die beschriebenen Konfidenzbereiche $C(X), C'(X)$ und $C''(X)$ sind $(1 - \alpha)$-Konfidenzintervalle für $g(\theta)$.

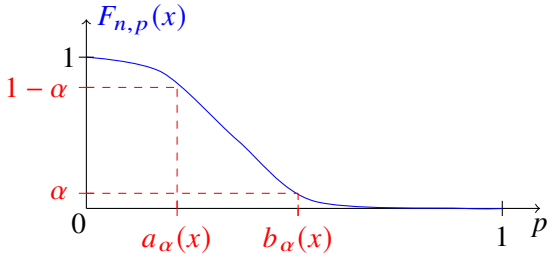
Beispiel (Bernoulli-Modell). Sei $\Theta = [0, 1]$ und $p \in \Theta$ mit den Stichproben $X_1, \ldots, X_n \sim \text{Bernoulli}(p)$ unabhängig unter $\mathbb{P}_p$. Dann ist die Stichprobensumme $H_n = X_1 + \ldots + X_n$ unter $\mathbb{P}_p$ binomialverteilt mit Parametern (n, p) und der Verteilungsfunktion

$$F_{n,p}(c) = \mathbb{P}_p[H_n \leq c] = \sum_{k=0}^{c} \binom{n}{k} p^k (1-p)^{n-k} \quad \text{für } c = 0, 1, \ldots, n.$$

Insbesondere ist die Abbildung $p \mapsto F_{n,p}(c)$ für $c < n$ stetig differenzierbar mit

$$\frac{d}{dp} F_{n,p}(c) = -n \binom{n-1}{c} p^c (1-p)^{n-1-c} < 0,$$

somit ist sie streng monoton fallend.



Nach Korollar folgt, dass $C(X) = \{p : F(n,p)(H_n) > \alpha\} = [0, b_\alpha(H_n))$ ein Konfidenzintervall zum Niveau $1 - \alpha$ und $(a_\alpha(H_n)), b_\alpha(H_n)$ ein Konfidenzintervall zum Niveau $1 - 2\alpha$ ist.

2) Über die Likelihood-Funktion: Gegeben den Beobachtungswert $x = X(\omega)$ wollen wir Parameterwerte ausschließen, unter denen x eher unwahrscheinlich ist. Hierfür setzen wir folgende Annahmen voraus:

a) S ist abzählbar mit der Massenfunktion $f_\theta(x) = \mathbb{P}_\theta[X = x]$,

b) $S = \mathbb{R}^d$ mit der Dichtefunktion $\mathbb{P}_\theta[X \in B] = \int_B f_\theta(x)\,dx$.

Die Funktion $\theta \mapsto f_\theta(x)$ wird als *Likelihood* oder Plausibilität bezeichnet. Für einen festen Schwellenwert c_θ definieren wir $C(x) = \{g(\theta) : f_\theta(x) \geq c_\theta\}$. Damit ergibt sich:

$$\mathbb{P}_\theta[g(\theta) \in C(X)] \geq \mathbb{P}_\theta[f_\theta(X) \geq c_\theta] \geq 1 - \alpha \quad \text{für alle } \theta \in \Theta. \tag{(*)}$$

Abhängig von θ sollte c_θ so groß wie möglich gewählt werden, damit $(*)$ gerade noch erfüllt ist.

Beispiel. Ein Energieunternehmen besitzt $N = 10$ Heizkraftwerke, davon werden $n = 4$ auf ihre Schadstoffwerte überprüft. Bei der Überprüfung wird bei x Heizkraftwerken ein zu hoher Schadstoffwert festgestellt. Wir möchten anhand dieser Stichprobe den Parameter θ = Änzahl der Kraftwerke mit zu hohen Werten"bestimmen. Die Zufallsvariable X ist hypergeometrisch verteilt mit Parametern (N, θ, n), wobei $S = \{0, 1, ..., n\}$. Die Massenfunktion ist gegeben durch

$$f_\theta(x) = \frac{\binom{\theta}{x}\binom{N-\theta}{n-x}}{\binom{N}{n}} \quad \text{für } x \leq \theta, \quad 0 \text{ sonst.}$$

Die folgende Tabelle veranschaulicht die Verteilung sowohl abhängig von θ als auch von x.

$\binom{\theta}{x}\binom{N-\theta}{n-x}$		xx					
		0	1	2	3	4	
	0	210	0	0	0	0	$\geq 80\%$
	1	126	84	0	0	0	$\geq 80\%$
	2	70	112	28	0	0	$\geq 80\%$
	3	35	105	63	7	0	$\geq 80\%$
	4	15	80	90	24	1	$\geq 80\%$
θ	5	5	50	100	50	5	$\geq 80\%$
	6	1	24	90	80	15	$\geq 80\%$
	7	0	7	63	105	35	$\geq 80\%$
	8	0	0	28	112	70	$\geq 80\%$
	9	0	0	0	84	126	$\geq 80\%$
	10	0	0	0	0	210	$\geq 80\%$

Für den Wert $X = 0$ erfibt sich der Konfidenzbereich $C(X) = \{0, 1, 2\}$ mit Konfidenzniveau $0,8$.

3) Über eine Pivot-Statistik:

Beispiel (Gauß-Modell mit fester Varianz). Gegeben sei die Varianz $v > 0$ einer Normalverteilung und der Erwartungswert $m \in \mathbb{R}$ sei unbekannt. Wir betrachten ein statistisches Modell mit dem Parameterbereich $\Theta = \mathbb{R}$ und unabhängigen Stichproben $X_1, \ldots, X_n \sim N(m, v)$ unter $\mathbb{P}_{m,v}$. Die Summe $\sum X_i$ ist wieder normalverteilt mit $N(nm, nv)$ und somit ist $\overline{X}_n = \frac{1}{n}\sum X_i \sim N\left(m, \frac{v}{n}\right)$. Um ein Konfidenzintervall für m zu bestimmen, standardisieren wir:

$$Z := \frac{\overline{X}_n - m}{\sqrt{v/n}} \sim N(0, 1).$$

Man sagt, dass Z ein *Pivot* ist, was bedeutet, dass die Verteilung nicht vom Parameter m abhängt. Damit können wir ein Konfidenzintervall konstruieren:

$$\mathbb{P}_{m,v}\left[|X_n - m| \geq \sqrt{\frac{v}{n}}\right] = \mathbb{P}_{m,v}\left[|Z| \geq c\right] = 2(1 - \Phi(c)) \leq \alpha \quad \text{mit} \quad \Phi(c) = \int_{-\infty}^{c} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{x^2}{2}}\,dx.$$

Diese Ungleichung ist erfüllt, falls $c = \Phi^{-1}\left(1 - \frac{\alpha}{2}\right)$. Das Konfidenzintervall wird wie folgt konstruiert:

$$\left(\overline{X}_n - \Phi^{-1}\left(1 - \frac{\alpha}{2}\right)\sqrt{\frac{v}{n}},\ \overline{X}_n + \Phi^{-1}\left(1 - \frac{\alpha}{2}\right)\sqrt{\frac{v}{n}}\right)$$

zum Niveau $1 - \alpha$. Allgemeiner definieren wir:

Definition 1.15 (Pivot). Ein *Pivot* für $g(\theta)$ ist eine Statistik $T(X, g(\theta))$, wobei $T : S \times \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ messbar ist und deren Verteilung μ unter $\mathbb{P}_\theta$ nicht von θ abhängt.

Ein Pivot hat die besondere Eigenschaft, dass seine Verteilung unter der Nullhypothese nicht vom Parameter θ abhängt, was es zu einem robusten Werkzeug in der statistischen Inferenz macht. Diese Eigenschaft wird im folgenden Satz demonstriert:

Satz 1.16. Ist $T(X, g(\theta))$ ein Pivot und $B \in \mathcal{B}(\mathbb{R})$, dann ist

$$C(X) = \{\gamma \in \mathbb{R} : T(X, \gamma) \in B\}$$

ein Konfidenzbereich für $g(\theta)$ zum Niveau $\mu(B)$.

Beweis. Falls $T(X, g(\theta)) \in B$ ist, dann ist $g(\theta) \in C(X)$. Daher gilt

$$\mathbb{P}_\theta\left[g(\theta) \in C(X)\right] \geq \mathbb{P}_\theta\left[T(X, g(\theta)) \in B\right] = \mu(B).$$

Beispiel (Gauß-Modell mit m, v unbekannt). Betrachten wir erneut das statistische Modell $\Theta = \{(m, v) : m \in \mathbb{R}, v > 0\}$ mit den unabhängigen Stichproben $X_1, \ldots, X_n$, welche unter $\mathbb{P}_{m,v}$ als $N(m, v)$ verteilt angenommen werden. Gesucht ist ein Konfidenzintervall für den Erwartungswert m. Seien $\overline{X}_n$ und V_n^* wie oben, dann ist

$$T_n = \frac{\overline{X}_n - m}{\sqrt{V_n^*/n}}$$

ein Pivot für m.

Beweis. Die standardisierten Zufallsvariablen $Y_i := \frac{X_i - m}{\sqrt{v}}$ sind unter $\mathbb{P}_{m,v}$ unabhängig und folgen der Verteilung $N(0, 1)$. Folglich hängt die Verteilung von $Y = (Y_1, \ldots, Y_n)$ nicht von m und v ab. Wir können T_n wie folgt als Funktion von Y darstellen:

$$T_n = \sqrt{n}\frac{\frac{\overline{X}_n - m}{\sqrt{v}}}{\sqrt{\frac{V_n^*}{v}}} = \sqrt{n}\frac{\overline{Y}_n}{\sqrt{\frac{1}{n-1}\sum_{i=1}^n (Y_i - \overline{Y}_n)^2}}.$$

Da

$$\frac{V_n^*}{v} = \frac{1}{n-1}\sum_{i=1}^n \left(\frac{X_i - \overline{X}_n}{\sqrt{v}}\right)^2 = \frac{1}{n-1}\sum_{i=1}^n \left(\frac{Y_i - \overline{Y}_n}{\sqrt{1}}\right)^2,$$

hängt auch die Verteilung von T_n nicht von m und v ab, und die Behauptung folgt. ∎

Damit erhalten wir analog zum vorherigen Beispiel:

$$\left\{|T_n| < q_{1-\frac{\alpha}{2}}\right\} = \left(\overline{X}_n - q_{1-\frac{\alpha}{2}}\sqrt{\frac{V_n^*}{n}},\ \overline{X}_n + q_{1-\frac{\alpha}{2}}\sqrt{\frac{V_n^*}{n}}\right)$$

mit $q_n := F_{T_n}^{-1}(c)$ ein Konfidenzintervall für m zum Niveau $1 - \alpha$.

Die Verteilung von T_n wird als *Student'sche t-Verteilung mit $n - 1$ Freiheitsgraden* bezeichnet. Die Dichte und die Verteilungsfunktion dieser Verteilung werden später berechnet.

4) Approximative Konfidenzintervalle (über eine Normalapproximation)
Beispiel (Bernoulli- bzw. Binomialmodell)

Wir betrachten das Bernoulli- bzw. Binomialmodell mit der unbekannten Wahrscheinlichkeit $p \in [0,1] = \Theta$. Sei $H_n = X_1 + \ldots + X_n$, wobei $X_i \sim \text{Bernoulli}(p)$ unabhängig unter $\mathbb{P}_p$ sind. H_n ist binomialverteilt, daher gilt $\mathbb{E}_p[H_n] = np$ und $\text{Var}_p[H_n] = np(1-p)$. Sei nun $\hat{p} = \frac{H_n}{n}$. Nach dem zentralen Grenzwertsatz bzw. dem Satz von de Moivre/Laplace gilt:

$$\mathbb{P}_p\left[\frac{H_n - np}{\sqrt{np(1-p)}} \in (-c,c)\right] = \mathbb{P}_p\left[|p - \hat{p}_n| < c\sqrt{\frac{p(1-p)}{n}}\right] \xrightarrow{n\to\infty} N(0,1)(-c,c) = 2\left(\Phi(c) - \frac{1}{2}\right)$$

Für große n gilt also approximativ:

$$\mathbb{P}_p\left[|p - \hat{p}_n| < c\sqrt{\frac{p(1-p)}{n}}\right] \approx 2\left(\Phi(c) - \frac{1}{2}\right) \quad \geq 1-\alpha \text{ für } c \geq \Phi^{-1}\left(1 - \frac{\alpha}{2}\right)$$

Die Breite dieses Konfidenzintervalls hängt jedoch vom Parameter p ab, was die Berechnung und Interpretation der Intervalle kompliziert macht. Im Folgenden betrachten wir Möglichkeiten, diese Abhängigkeit zu umgehen.

1. Für alle $p \in [0,1]$ gilt die Ungleichung $p(1-p) \leq \frac{1}{4}$. Dies ergibt das Konfidenzintervall:

$$\left(\hat{p}_n \pm \frac{c}{\sqrt{4n}}\right)$$

Dieses Intervall ist zwar einfach zu berechnen, aber konservativ.

2. Nach dem Gesetz der großen Zahlen gilt $\hat{p}_n \approx p$ für große n. Daraus ergibt sich das approximative Konfidenzintervall:

$$\left(\hat{p}_n \pm c\sqrt{\frac{\hat{p}_n(1-\hat{p}_n)}{n}}\right) \quad \text{praktisch, aber ungenau.}$$

3. Der Ansatz von Abraham Wald zeigt, dass das Konfidenzintervall auch als Lösung einer Ungleichung der Form

$$\begin{aligned} |p - \hat{p}_n| \leq \frac{c}{\sqrt{n}}\sqrt{p(1-p)} &\Leftrightarrow p^2 - 2p\hat{p}_n + \hat{p}_n^2 \leq \frac{c^2}{n}(p - p^2) \\ &\Leftrightarrow \left(1 + \frac{c^2}{n}\right)p^2 - 2p\left(\hat{p}_n + \frac{c^2}{2n}\right) + \hat{p}_n^2 \leq 0 \\ &\Leftrightarrow p \in \left(\frac{\hat{p}_n + \frac{c^2}{2n} \pm \frac{c}{\sqrt{n}}\sqrt{\hat{p}_n(1-\hat{p}_n) + \frac{c^2}{4n}}}{1 + \frac{c^2}{n}}\right) \end{aligned}$$

beschrieben werden kann. Durch quadratische Ergänzung erhalten wir im letzten Schritt ein approximatives Konfidenzintervall. Heutzutage können exakte Konfidenzintervalle oft numerisch sehr genau berechnet werden, wodurch eine Normalapproximation nicht mehr erforderlich ist.

c) Hypothesentests

Für $\theta \in \Theta$ betrachten wir den Wahrscheinlichkeitsraum $(\Omega, \mathcal{A}, \mathbb{P}_\theta)$ mit $X : \Omega \to S$. Seien $\Theta_0, \Theta_1 \subseteq \Theta$ disjunkte Teilmengen. Durch sie sind die Nullhypothese H_0 und die alternative Hypothese H_1 bestimmt:

$$H_0 : \theta \in \Theta_0 \quad \text{und} \quad H_1 : \theta \in \Theta_1$$

Definition 1.17 (Hypothesentest). Ein *Hypothesentest* für das obige Testproblem ist gegeben durch eine messbare Funktion

$$\varphi : S \to \{0,1\} \quad \text{(nicht-randomisierter Test)}, \quad \text{bzw.} \quad \varphi : S \to [0,1] \quad \text{(randomisierter Test)}$$

mit der Entscheidungsregel:

- Verwerfe H_0 falls $\varphi(x) = 1$,
- Verwerfe H_0 nicht falls $\varphi(x) = 0$,
- Verwerfe H_0 mit Wahrscheinlichkeit $\varphi(x)$ falls $\varphi(x) \in (0,1)$.

Der *Verwerfungsbereich* des Tests ist die Menge

$$R = \{x \in S : \varphi(x) = 1\}.$$

Die Funktion

$$\beta(\theta) = \mathbb{E}_\theta[\varphi(X)] \quad (\theta \in \Theta)$$

heißt *Gütefunktion*. Sie beschreibt die Verwerfungswahrscheinlichkeit in Abhängigkeit von θ.

Der Test hat *Signifikanzniveau* α, falls die Niveaubedingung

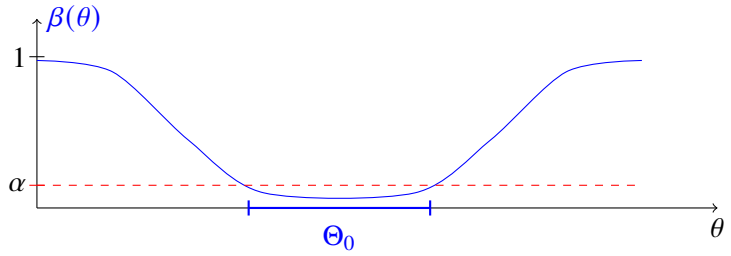
$$\beta(\theta) \le \alpha \quad \text{für alle } \theta \in \Theta_0$$

erfüllt ist. Die auf Θ_1 eingeschränkte Gütefunktion

$$\beta(\theta), \quad \theta \in \Theta_1,$$

heißt *Macht* des Hypothesentests.

Ziel sollte es sein, dass $\beta(\theta)$ für $\theta \in \Theta_1$ möglichst groß ist, um Fehler 2. Art zu vermeiden, aber die Nebenbedingung $\beta(\theta) \le \alpha$ für alle $\theta \in \Theta_0$ noch immer erfüllt ist.



Ein Fehler 1. Art liegt vor, wenn die Nullhypothese H_0 verworfen wird, obwohl sie in Wirklichkeit wahr ist. Bei gegebenem Signifikanzniveau α tritt dies mit einer Wahrscheinlichkeit $\le \alpha$ ein. Im Gegensatz dazu bedeutet ein Fehler 2. Art, dass der Test die Nullhypothese H_0 nicht verwirft, obwohl die Alternative zutrifft. Dies geschieht mit einer Wahrscheinlichkeit $1-\beta(\theta)$, $\theta \in \Theta_1$, welche möglichst klein sein sollte.

Hypothesentests hängen eng mit Konfidenzbereichen zusammen, wie der folgende Satz zeigt:

Satz 1.18. Sei $C(X)$ ein $(1-\alpha)$-Konfidenzbereich für θ. Dann ist für jedes $\theta_0 \in \Theta$ ein Hypothesentest mit Signifikanzniveau α für die Nullhypothese $H_0 : \theta = \theta_0$ gegeben durch

$$\varphi = \begin{cases} 0 & \text{falls } \theta_0 \in C(X) \\ 1 & \text{falls } \theta_0 \notin C(X). \end{cases}$$

Beweis. Für $\theta_0 \in \Theta$ gilt nach Definition des Konfidenzbereichs

$$\beta(\theta_0) = \mathbb{E}_{\theta_0}[\varphi(X)] = \mathbb{P}_{\theta_0}[\theta_0 \notin C(X)] \leq \alpha.$$

Dies zeigt das Signifikanzniveau α. Die Umkehrung ist in Übung. ■

Der Satz zeigt, dass wir Tests mit analogen Methoden konstruieren können wie Konfidenzintervalle.

Beispiel (Gauß-Modell, *t*-Test). Seien $X_1, \ldots, X_n$ unabhängig und normalverteilt mit $N(m, v)$, und $m_0 \in \mathbb{R}$.

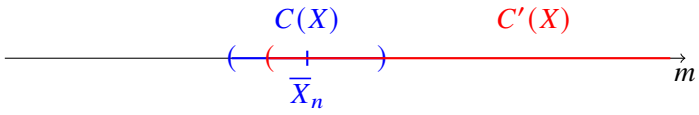
a) Wir betrachten die Nullhypothese $H_0 : m = m_0$ mit der Alternative $H_1 : m \neq m_0$. Wir hatten gezeigt, dass wir mit der Student'schen t-Statistik T_n den folgenden $(1-\alpha)$-Konfidenzbereich erhalten:

$$C(X) = \left\{ m \in \mathbb{R} : \left| \frac{\overline{X}_n - m}{\sqrt{V_n^*/n}} \right| < q_{1-\frac{\alpha}{2}} \right\}.$$

Mit dem Satz erhalten wir einen α-Niveau-Test $\varphi(X) = 1$, falls $|T_n(m_0)| \geq q_{1-\frac{\alpha}{2}}$. Dieser Test wird als *Student's t-Test* bezeichnet.

b) Sei $H_0 : m = m_0$ nun jedoch mit der linksseitigen Alternative $H_1 : m < m_0$. Analog zu 1) liefert dies den $(1-\alpha)$-Konfidenzbereich:

$$C'(X) = \{m \in \mathbb{R} : T_n(m) < q_{1-\alpha}\}.$$



Welcher den Niveau α-Test $\varphi(X) = 1$ falls $T_n(m_0) \geq q_{1-\alpha}$. ($\Leftrightarrow m_0 \notin C'(X)$)

c) Mit der rechtsseitigen alternative $H_1 : m > m_0$ erhalten wir dann den $(1-\alpha)$ Konfidenzbereich

$$C'''(X) = \{m \in \mathbb{R} : T_n(m) > q_\alpha\}$$

Analog ergibt sich der Niveau α-Test $\varphi(X) = 1$ falls $T_n(m_0) < q_{1-\alpha}$

2. Likelihood

In diesem Kapitel betrachten wir stets ein reguläres statistisches Modell mit Dichten bzw. Massenfunktionen $f_\theta(x)$ ($x \in S$, $\theta \in \Theta$). Angenommen, wir beobachten einen Wert x. Dann können wir $f_\theta(x)$ als Maß für die „Plausibilität“ des Wertes x bezüglich des Parameters θ interpretieren.

Definition 2.1 (Likelihood). Die Funktion

$$L(\theta; x) \;=\; f_\theta(x)\,, \qquad \theta \in \Theta\,,$$

heißt *Likelihood-Funktion* des statistischen Modells bei Beobachtungswert x. Die *log-Likelihood-Funktion* ist definiert als natürlicher Logarithmus der Likelihood-Funktion, d.h.

$$\ell(\theta; x) \;=\; \log f_\theta(x)\,, \qquad \theta \in \Theta\,,$$

wobei wir $\log 0 := -\infty$ setzen.

Wichtig ist, dass wir hier die Dichte bzw. Massenfunktion als Funktion des unbekannten Parameters θ (bzw. als Funktion von θ und x) betrachten, während in der Wahrscheinlichkeitstheorie θ üblicherweise einen festen Wert hat. Die Likeklihood-Funktion ermöglicht uns eine einfache ad hoc Konstruktion von verschiedenen statistischen Verfahren.

2.1. Das Maximum-Likelihood-Prinzip

Das Maximum-Likelihood-Prinzip ist ein einfaches und allgemeines ad hoc Verfahren zur Konstruktion von Parameterschätzern. Beim Beobachtungswert x wählen wir als Schätzwert für θ denjenigen Parameterwert $T(x)$, bezüglich dessen x „am plausibelsten“ ist, das heißt für den

$$L(T(x); x) \;=\; \max_{\theta \in \Theta} L(\theta; x)$$

gilt. Im Allgemeinen ist dieser Wert nicht eindeutig, da es mehrere globale Maxima geben kann. Daher definieren wir:

Definition 2.2 (Maximum-Likelihood-Schätzer). Eine Statistik $\hat\theta = T(X)$ heißt *Maximum-Likelihood-Schätzer* (engl. Maximum Likelihood Estimator, kurz MLE) für den Parameter θ falls

$$T(x) \;\in\; \operatorname{argmax}_{\theta \in \Theta} L(\theta; x) \qquad \text{für alle } x \in S$$

gilt, wobei $\operatorname{argmax}_{\theta \in \Theta} L(\theta; x)$ die Menge aller globalen Maxima der Funktion $\theta \mapsto L(\theta; x)$ bezeichnet.

Da der Logarithmus eine strikt monoton wachsende Funktion ist, können wir zur Berechnung des MLE statt der Likelihood-Funktion auch die Log-Likelihood-Funktion maximieren.

Beispiele. a) Taxiproblem. Die Taxis in einer Stadt sind von 1 bis N durchnummeriert. Wir beobachten n verschiedene Taxis, und wollen den Wert des unbekannten Parameters $\theta = N$ schätzen. Sei $X = (X_1, \dots X_n)$ das zufällige n-Tupel mit den beobachteten Taxinummern. Sei S die Menge aller n-Tupel $x = (x_1, \dots, x_n)$ mit $x_i \in \mathbb{N}$ und $x_i \neq x_j$ für $i \neq j$. Wir nehmen an, dass X unter P_N gleichverteilt ist auf der Teilmenge

$$S_N \;=\; \{x \in S : x_1, \dots, x_n \in \{1, 2, \dots, N\}\} \;=\; \{x \in S : \max(x_1, \dots, x_n) \leq N\}\,.$$

Die entsprechende Likelihood-Funktion

$$L(N; x) \;=\; f_N(x) \;=\; \begin{cases} 1/|S_N| & \text{für } \max(x_1, \dots, x_n) \leq N, \\ 0 & \text{sonst,} \end{cases}$$

ist maximal für $N = \max(x_1, \dots, x_n)$. Also ist

$$\hat{N} \;=\; \max(X_1, \dots, X_n)$$

der (eindeutige) Maximum-Likelihood-Schätzer für N.

b) Capture-Recapture-Verfahren. Wir wollen die Größe N einer unbekannten Population schätzen. Dazu markieren wir im ersten Schritt ℓ zufällig ausgewählte Objekte, und entnehmen im zweiten Schritt eine unabhängige Zufallsstichprobe der Größe n. Die zufällige Anzahl X der markierten Objekte in der zweiten Stichprobe ist dann unter P_N hypergeometrisch verteilt mit Parametern N, ℓ, n. Nachrechnen zeigt. dass der ganzzahlige Anteil

$$\hat{N} \;=\; \left\lfloor \frac{n\ell}{N} \right\rfloor$$

ein Maximum-Likelihood-Schätzer für N ist. Die Details sind eine Übungsaufgabe.

c) Schätzen einer unbekannten Wahrscheinlichkeit. Sei $p \in [0, 1]$ eine unbekannte Wahrscheinlichkeit. Beispielsweise ist p bei einer Wahlprognose der relative Stimmenanteil einer Kandidatin unter allen Wählern. Diese relative Häufigkeit können wir als Wahrscheinlichkeit bezüglich der entsprechenden empirischen Verteilung deuten. Um p zu schätzen, führen wir eine Befragung von n zufällig ausgewählten Wählern durch. Sei $X_i = 1$ falls der i-te Wähler beabsichtigt, für die Kandidatin zu stimmen, und $X_i = 0$ sonst. Da die Gesamtpopulation aller Wähler sehr viel größer als unsere Stichprobe ist, nehmen wir der Einfachheit halber an, dass $X_1, \dots, X_n$ unter P_p unabhängige und zum Parameter p Bernoulli-verteilte Zufallsvariablen sind. Die Likelihood und die Log-Likelihood sind dann für $x = (x_1, \dots, x_n) \in \{0, 1\}^n$ gegeben durch

$$\begin{aligned} L(p; x) \;&=\; \prod_{i=1}^{n} p^{x_i} (1-p)^{1-x_i}\,, \\ \ell(p; x) \;&=\; \log(p) \sum_{i=1}^{n} x_i \;+\; \log(1-p) \sum_{i=1}^{n} (1 - x_i)\,. \end{aligned}$$

Um das Maximum zu bestimmen, berechnen wir die erste Ableitung der Log-Likelihood nach p:

$$\frac{\partial \ell}{\partial p}(p; x) \;=\; \frac{1}{p} \sum_{i=1}^{n} x_i \;-\; \frac{1}{1-p} \sum_{i=1}^{n} (1 - x_i)\,.$$

An der Stelle $p = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} x_i = \bar{x}_n$ hat die erste Ableitung einen Vorzeichenwechsel von positiven zu negativen Werten. Also ist die Log-Likelihood an dieser Stelle maximal, und somit ist der Stichprobenmittelwert

$$\hat{p} \;=\; \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} X_i \;=\; \bar{X}_n$$

der (eindeutige) Maximum-Likelihood-Schätzer für p.

d) Schätzen einer unbekannten Wahrscheinlichkeitsverteilung. Das letzte Beispiel können wir folgendermaßen verallgemeinern: Angenommen, wir haben nicht zwei mögliche Werte (0 und 1), sondern k mögliche Werte $a_1, a_2, \dots a_k$ mit unbekannten Wahrscheinlichkeiten $p_1, \dots, p_k$. Beispielsweise sind $p_1, \dots, p_k$ die Stimmenanteile von k verschiedenen Parteien unter allen Wählern. Der Parameterraum ist dann die Menge aller Wahrscheinlichkeitsverteilungen auf $\{a_1, \dots, a_k\}$, d.h.

$$\Theta \;=\; \mathrm{WV}\left(\{a_1, \dots, a_k\}\right) \;=\; \left\{ p = (p_1, \dots, p_k) : p_i \geq 0 \,\forall\, i \,,\; \sum_i p_i = 1 \right\}.$$

Geometrisch ist Θ ein $(k-1)$-dimensionales Simplex im $\mathbb{R}^k$. Gegeben seien wieder die Werte $x_1, \dots, x_n$ von n unabhängigen Einzelstichproben. Wir nehmen an, dass diese Beobachtungswerte Realisierungen von unabhängigen Zufalllsvariablen $X_1, \dots, X_n$ mit Verteilung

$$P_p[X_i = a_l] \;=\; p_l \qquad \text{für } l = 1, \dots, k$$

sind. Die Likelihood-Funktion ist dann gegeben durch

$$L(p; x_1, \dots, x_n) \;=\; \prod_{i=1}^{n} p_{x_i} \;=\; \prod_{l=1}^{k} p_l^{h_l} \,,$$

wobei h_l die Häufigkeit des Werts a_l in der Stichprobe $x = (x_1, \dots, x_n)$ ist. Wir behaupten, dass der Maximum-Likelihood-Schätzer $\hat{p}$ für p durch die empirische Verteilung gegeben ist, d.h.

$$\hat{p}_l \;=\; \frac{H_l}{n} \;=\; \text{relative Häufigkeit von } a_l \text{ unter } X_1, \dots, X_n.$$

Zum Beweis bestimmt man das Maximum der Log-Likelihood

$$\ell(p; x) \;=\; \sum_{l=1}^{k} h_l \log(p_l)$$

unter der Nebenbedingung $\sum_{l=1}^{k} p_l = 1$ mithilfe von Lagrange-Multiplikatoren. Wegen

$$\frac{\partial \ell}{\partial p_l}(p; x) \;=\; \frac{h_l}{p_l} \qquad \text{und} \qquad \frac{\partial}{\partial p_l} \sum_{l=1}^{k} p_l \;=\; 1$$

führt dies unter Beachtung der Nebenbedingung auf die notwendige Bedingung $p_l = h_l/n$ für ein Maximum im Inneren des Simplex, und wegen

$$\frac{\partial^2 \ell}{\partial p_j \partial p_l}(p; x) \;=\; -\frac{h_l}{p_l^2}\, \delta_{jl}$$

ist die Log-Likelihood strikt konkav, und damit ist die notwendige Bedingung auch hinreichend.

e) Gaußsches Produktmodell. In einem Experiment beobachten wir n unabhängige Messwerte $x_1, \dots, x_n$ einer reellwertigen Messgröße. Wir gehen davon aus, dass die Fluktuationen der Messwerte durch die additive Überlagerung vieler kleiner unabhängiger Zufallseffekte entstehen. Aufgrund des zentralen Grenzwertsatzes liegt es dann nahe, die Werte $x_1, \dots, x_n$ als Realisierungen von unabhängigen Zufallsvariablen $X_1, \dots, X_n$ mit Normalverteilung $N(m, v)$ zu deuten. Dabei sind im Allgemeinen sowohl der Mittelwert m als auch die Varianz v unbekannte Parameter, d.h. die Parametermenge ist

$$\Theta \;=\; \{\theta = (m, v) \;:\; m \in \mathbb{R},\; v \in [0, \infty)\}\,.$$

Die Likelihood-Funktion ist dann durch die Produktdichte

$$L(m, v; x_1, \dots, x_n) \;=\; \prod_{i=1}^{n} \frac{1}{\sqrt{2\pi v}} e^{-\frac{(x_i - m)^2}{2v}}$$

gegeben, und für die Log-Likelihood erhalten wir

$$\begin{aligned}\ell(m, v; x_1, \dots, x_n) &= -\frac{n}{2}\log(2\pi v) - \frac{1}{2v}\sum_{i=1}^{n}(x_i - m)^2 \\ &= -\frac{n}{2}\log(2\pi v) - \frac{1}{2v}\sum_{i=1}^{n}(x_i - \bar{x}_n)^2 - \frac{n}{2v}(\bar{x}_n - m)^2 \,. \qquad (2.1)\end{aligned}$$

(i) *Schätzen des Erwartungswerts m bei bekannter Varianz v.* Wenn v fest ist, dann ist die Log-Likelihood maximal für $m = \bar{x}_n$. Der MLE ist also

$$\hat{m} = \bar{X}_n \,.$$

(ii) *Schätzen der Varianz v bei bekanntem Erwartungswert m.* Wenn m fest ist, dann können wir das Maximum der Log-Likelihood bestimmen, indem wir die partielle Ableitung

$$\frac{\partial}{\partial v}\ell(m, v; x_1, \dots, x_n) = -\frac{n}{2v} + \frac{1}{2v^2}\sum_{i=1}^{n}(x_i - m)^2$$

betrachten. Diese verschwindet für $v = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(x_i - m)^2$, und zum Beispiel durch Betrachten der zweiten Ableitung sieht man, dass dies das eindeutige Maximum ist. Also ist

$$\hat{v} = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(X_i - m)^2$$

der eindeutige MLE für v.

(iii) *Schätzen von Erwartungswert und Varianz.* Üblicherweise kennt man weder den Erwartungswert noch die Varianz. Der unbekannte Parameter $\theta = (m, v)$ ist dann zweidimensional. Das Maximum können wir auch in diesem Fall einfach bestimmen: Für jeden Wert von v ist ℓ maximal für $m = \bar{x}_n$, und der entsprechende Wert der Log-Likelihoood wird am größten, wenn wir $v = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(x_i - \bar{x}_n)^2$ wählen. Der MLE ist also

$$\hat{\theta} = \left(\bar{X}_n\,,\ \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(X_i - \bar{X}_n)^2\right).$$

2.2. Suffiziente Statistiken

Datensätze können oft sehr groß sein. Wenn wir beispielsweise bei einer Wahlbefragung 5000 Wählerinnen und Wähler befragen, dann ist unser Beobachtungswert zunächst ein 5000 dimensionaler Vektor, der als Komponenten die Angaben aller Befragten enthält. Tatsächlich ist aber intuitiv klar, dass für die Wahlprognose nur relevant ist, wieviele der Befragten jeweils für die einzelnen Parteien stimmen wollen. Für statistische Rückschlüsse sollte die entsprechende Häufigkeitsverteilung $H = (H_1, \dots, H_k)$ ausreichend sein, wobei $H_1, \dots, H_k$ die Häufigkeiten der k Parteien in der Stichprobe sind. Eine solche Statistik nennt man *suffizient*; für Rückschlüsse auf den unbekannten Parameter sollte nur der Wert der suffizienten Statistik relevant sein. Wir wollen den Begriff nun mathematisch formalisieren. Wir beginnen mir einer praktischen Definition, die sich in Anwendungsbeispielen leicht nachprüfen lässt. Im Anschluss zeigen wir, dass diese Definition äquivalent zu einer anderen anschaulichen Bedingung ist.

Definition 2.3 (Suffiziente Statistik). Eine Statistik $T(X)$ heißt *suffizient* für den unbekannten Parameter θ, falls sich die Likelihood-Funktion in der Form

$$L(\theta; x) = g_\theta(T(x))\, h(x) \qquad \text{für alle } \theta \in \Theta \text{ und } x \in S \qquad (2.2)$$

mit messbaren Funktionen $g_\theta : \mathbb{R} \to [0, \infty)$ ($\theta \in \Theta$) und $h : S \to [0, \infty)$ darstellen lässt.

Anschaulich hängt die Likelihood also nur über die suffiziente Statistik $T(x)$ vom Parameter θ ab. Diese Anschauung werden wir gleich noch präzisieren. Gilt $h(x) > 0$, dann folgt aus (2.2) unmittelbar, dass der Maximum-Likelihood-Schätzer nur von der suffizienten Statistik $T(x)$ abhängt, vorausgesetzt, das Maximum der Likelihood-Funktion ist eindeutig. Ebenso hängen andere Likelihood-basierte statistische Verfahren (z.B. Likelihood-Quotienten-Tests, s.u.) nur von den Werten der suffizienten Statistik ab.

Beispiel (Schätzen einer unbekannten Wahrscheinlichkeit). In Beispiel c) von oben ist

$$L(p;x) \;=\; \prod_{i=1}^{n} p^{x_i}(1-p)^{1-x_i} \;=\; (1-p)^n \left(\frac{p}{1-p}\right)^{\sum_{i=1}^n x_i}.$$

Also ist die Häufigkeit $H_1 = \sum_{i=1}^n X_i$ von „1" eine suffiziente Statistik, und ebenso die relative Häufigkeit $\bar{X}_n = H_1/n$.

Beispiel (Schätzen einer unbekannten Wahrscheinlichkeitsverteilung). Entsprechend hängt in Beispiel d) von oben die Likelihood-Funktion nur von den Häufigkeiten der möglichen Werte $a_1, \ldots, a_k$ ab. Daher ist der Histogrammvektor $H = (H_1, \ldots, H_k)$ der Stichprobe eine suffiziente Statistik, und ebenso die empirische Verteilung, d.h. der Vektor H/n der relativen Häufigkeiten.

Wir geben nun eine äquivalente Charakterisierung von suffizienten Statistiken. Dabei beschränken wir uns der Einfachheit halber auf den diskreten Fall. Eine entsprechende Aussage gilt aber auch allgemein, wenn man sie mithilfe von allgemeinen bedingten Erwartungen formuliert.

Lemma 2.4 (Charakterisierung von Suffizienz). *Ist S abzählbar, und $T : S \to \mathbb{R}$ eine Abbildung, dann ist die Statistik $T(X)$ genau dann suffizient für den unbekannten Parameter θ, wenn die bedingten Wahrscheinlichkeiten $P_\theta[X = x|T(x) = t]$ für x, t mit $P[T(X) = t] \neq 0$ nicht von θ abhängen.*

Mit anderen Worten: *Eine Statistik $T(X)$ ist genau dann suffizient, wenn die bedingte Verteilung von X gegeben $T(X)$ nicht von θ abhängt.*

Beweis. "⇐':' Wir nehmen zunächst an, dass die bedingten Wahrscheinlichkeiten nicht von θ abhängen. Dann erhalten wir für die Likelihood

$$\begin{aligned} L(\theta;x) &= P_\theta[X = x] \;=\; P_\theta[X = x \text{ und } T(X) = T(x))] \\ &= P_\theta[X = x|T(X) = T(x)] \cdot P_\theta[T(X) = T(x)] \;=\; h(x) \cdot g_\theta(T(x)) \end{aligned}$$

mit geeigneten Funktionen h und g_θ.

"⇒':' Gilt umgekehrt $L(\theta;x) = g_\theta(T(x))h(x)$ mit Funktionen g_θ und h, dann folgt

$$\begin{aligned} P_\theta[X = x|T(X) = t] &= \frac{P_\theta[X = x\,,\, T(X) = t]}{P_\theta[T(X) = t]} \;=\; \frac{P_\theta[X = x] \cdot 1_{T(x)=t}}{\sum_{a:T(a)=t} P_\theta[X = a]} \\ &= \frac{g_\theta(t)h(x)}{\sum_{a:T(a)=t} g_\theta(t)h(a)} \;=\; \frac{h(x)}{\sum_{a:T(a)=t} h(a)}\,, \end{aligned}$$

und somit hängen die bedingten Wahrscheinlichkeiten nicht von θ ab. ■

Darstellung als Zweistufenmodell

Ist $T(X)$ eine suffiziente Statistik, dann können wir das zugrundeliegende Zufallsexperiment *"Ziehen einer Stichprobe x"* als ein Zweistufenmodell darstellen, in dem der unbekannte Parameter θ nur in der zweiten Stufe eingeht:

1. Ziehe Stichprobe t von der Verteilung der suffizienten Statistik $T(X)$ *(hängt von θ ab)*
2. Ziehe Stichprobe x von der bedingten Verteilung von X gegeben $T(X)$ *(hängt **nicht** von θ ab)*

Wir betrachten unter diesem Aspekt noch einmal einige der Beispiele von oben.

Beispiele. c) Schätzen einer unbekannten Wahrscheinlichkeit. Hier ist $T(X) = \sum_{i=1}^n X_i$ eine suffiziente Statistik. $T(X)$ ist die Häufigkeit von "1", also binomialverteilt mit Parametern n und p. Die bedingte Verteilung von X gegeben $T(X) = t$ ist die Gleichverteilung auf der Menge S_t aller $x \in \{0,1\}^n$ mit $\sum_{i=1}^n x_i = t$. Also erhalten wir die folgende Darstellung als Zweistufenmodell:

1. Ziehe $t \sim \mathrm{Bin}(n,p)$.
2. Ziehe $x = (x_1, \dots, x_n) \sim \mathrm{Unif}(S_t)$.

Der unbekannte Parameter p geht nur im ersten Schritt ein.

d) Schätzen einer unbekannten Wahrscheinlichkeitsverteilung. In diesem Modell ist der Histogrammvektor $H = (H_1, \dots, H_k)$ eine suffiziente Statistik, die multinomialverteilt ist mit Parametern n und p. Überlegen Sie sich selbst, wie die Darstellung als Zweistufenmodell aussieht.

e) Gaußsches Produktmodell. Aus der Formel (2.1) für die log-Likelihood folgt, dass

$$T(X_1, \dots, X_n) \;=\; \left(\bar{X}_n \,,\; \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (X_i - \bar{X}_n)^2 \right)$$

eine suffiziente Statistik im Gauß-Modell ist. Diese Statistik enthält sowohl den empirischen Mittelwert als auch die empirische Varianz. Die Verteilung von $T(X)$ werden wir in Abschnitt 2.5 berechnen. Die bedingte Verteilung von X gegeben $T(X) = (m, v)$ ist eine Gleichverteilung auf dem Schnitt der Sphäre mit Mittelpunkt $(m, \dots, m) \in \mathbb{R}^n$ und Radius $\sqrt{nv}$ mit der Hyperebene $\{x \in \mathbb{R}^n : \sum x_i = nm\}$. Eine andere suffiziente Statistik ist $\widetilde{T}(X) = \sum X_i \,,\, \sum X_i^2)$.

f) Allgemeines Produktmodell. In einem allgemeinen Produktmodell mit n identischen reellen Faktoren mit stetiger Verteilung können wir die Likelihood schreiben als

$$L(\theta; x) \;=\; \prod_{i=1}^n f_\theta(x_i) \;=\; \prod_{i=1}^n f_\theta(x_{(i)})$$

wobei $x_{(1)} \le x_{(2)} \le \ldots \le x_{(n)}$ die *Ordnungsstatistiken*, d.h. die der Größe nach geordneten Werte $x_1, \dots, x_n$ sind. Also ist

$$T(X) \;=\; (X_{(1)}, X_{(2)}, \dots, X_{(n)})$$

eine suffiziente Statistik. Diese enthält nur die Informationen über die vorkommenden Datenwerte, aber nicht über deren Reihenfolge. Das Zweistufenmodell sieht in diesem Fall folgendermaßen aus:

1. Ziehe $y = (x_{(1)}, x_{(2)}, \dots, x_{(n)})$ von der Verteilung mit Dichte $n! \prod_{i=1}^n f_\theta(y_i)$ auf der Menge aller $(y_1, \dots, y_n) \in \mathbb{R}^n$ mit $y_1 \le y_2 \le \ldots \le y_n$.
2. Wähle die Positionen (Ränge) $R(1), \dots, R(n)$ von $x_1, \dots, x_n$ zufällig gemäß der Gleichverteilung auf der Menge $\mathcal{S}_n$ aller Permutationen von $\{1, \dots, n\}$, und setze $x_i := y_{R(i)}$.

Die Beispiele zeigen: Je größer die betrachtete Klasse von Wahrscheinlichkeitsverteilungen in unserem Modell ist, desto mehr Informationen müssen in einer suffizienten Statistik enthalten sein. Im Extremfall, in dem wir alle Wahrscheinlichkeitsverteilungen auf dem Grundraum in Betracht ziehen, enthält eine suffiziente Statistik die komplette Information.

Verbessern von Schätzern

Sei $T(X)$ eine suffiziente Statistik für den Parameter $\theta \in \Theta$ und $g : \Theta \to \mathbb{R}$ eine Funktion. Ist der Maximum-Likelihood-Schätzer eindeutig, dann hängt dieser nur von $T(X)$ ab. Wir zeigen nun, dass wir einen beliebigen Schätzer, der keine Funktion von $T(X)$ ist, mithilfe von $T(X)$ verbessern können. Dazu

nehmen wir der Einfachheit halber an, dass der Wertebereich $T(S)$ abzählbar ist. In diesem Fall ist die bedingte Erwartung einer reellwertigen Zufallsvariable Y gegeben $T(X)$ bezüglich P_θ definiert als

$$E_\theta\left[Y\,|T(X)\right] \;=\; \sum_{t:P_\theta[T(X)=t]>0} E_\theta\left[Y\,|T(X)=t\right]\cdot 1_{\{T(X)=t\}}\,. \tag{2.3}$$

Die bedingte Erwartung von Y gegeben $T(X)$ ist also wieder eine *Zufallsvariable*, deren Wert auf der Menge $\{T(X)=t\}$ die bedingte Erwartung von Y gegeben $T(X)=t$ ist. Insbesondere ist die bedingte Erwartung eine Funktion von $T(X)$.

Satz 2.5 (Rao-Blackwell). Sei $\hat{g}$ ein Schätzer für $g(\theta)$ und $T(X)$ eine suffiziente Statistik mit abzählbarem Wertebereich. Dann ist die bedingte Erwartung $\widetilde{g} := E_\theta[\hat{g}|T(X)]$ ein Schätzer für $g(\theta)$ mit

$$\begin{aligned}\mathrm{Bias}_\theta(\widetilde{g}) &= \mathrm{Bias}_\theta(\hat{g}) \qquad \text{für alle } \theta\in\Theta, \qquad \text{und} &(2.4)\\ \mathrm{MSE}_\theta(\widetilde{g}) &\le \mathrm{MSE}_\theta(\hat{g}) \qquad \text{für alle } \theta\in\Theta. &(2.5)\end{aligned}$$

Beweis. Nach Lemma 2.4 folgt aus der Suffizienz von $T(X)$, dass $\widetilde{g}$ nicht von θ abhängt. Außerdem ist $\widetilde{g}$ nach Definition eine Funktion von $T(X)$, also insbesondere eine Statistik. Mithilfe der Definition der bedingten Erwartung und der Cauchy-Schwarz-Ungleichung erhalten wir

$$\begin{aligned}E_\theta[\widetilde{g}] &= \sum_{t:P_\theta[T(X)=t]>0} E_\theta\left[\hat{g}\,|T(X)=t\right]\cdot P_\theta[T(X)=t] \;=\; E_\theta[\hat{g}]\,, \qquad \text{und}\\
\mathrm{MSE}_\theta[\widetilde{g}] &= E_\theta\left[(\widetilde{g}-g(\theta))^2\right] \;=\; \sum_{t:P_\theta[T(X)=t]>0} \left(E_\theta\left[\hat{g}\,|T(X)=t\right]-g(\theta)\right)^2\cdot P_\theta[T(X)=t]\\
&\le \sum_{t:P_\theta[T(X)=t]>0} E_\theta\left[(\hat{g}-g(\theta))^2\,|T(X)=t\right]\cdot P_\theta[T(X)=t] \;=\; \mathrm{MSE}_\theta[\hat{g}]\end{aligned}$$

für alle $\theta\in\Theta$. ∎

Bedingte Erwartungen werden systematisch in der Vorlesung »Stochastic Processes« behandelt. Mit der dort gegebenen allgemeinen Definition kann man den Satz von Rao-Blackwell auf den Fall erweitern, dass der Wertebereich von $T(X)$ nicht abzählbar ist.

Beispiel (Bernoulli-Modell). Seien $X_1,\dots,X_n$ unter P_p unabhängig und Bernoulli(p) verteilt. Wegen $E_p[X_1]=p$ ist $\hat{p}=X_1$ ein ewartungstreuer Schätzer für p. Dieser Schätzer ist selbst nicht sonderlich interessant, da er nur die Werte 0 oder 1 annimmt. Mithilfe des Satzes von Rao-Blackwell können wir aber daraus einen besseren erwartungstreuen Schätzer $\widetilde{p}$ konstruieren, der auf der suffizienten Statistik $T(X)=X_1+\cdots+X_n$ basiert. Wir erhalten

$$\widetilde{p} \;=\; E_p[X_1|T(X)] \;=\; \frac{X_1+\cdots+X_n}{n} \;=\; \bar{X}_n.$$

Hierbei haben wir benutzt, dass aus Symmetriegründen die bedingte Erwartung von X_i gegeben $T(X)$ nicht von i abhängt. Daher gilt

$$E_p[X_1|T(X)] \;=\; \frac{1}{n}E_p\left[X_1+\cdots+X_n|\,T(X)\right] \;=\; \frac{1}{n}E_p[T(X)|T(X)] \;=\; \frac{1}{n}T(X).$$

2.3. Exponentielle Familien

Wir betrachten nun eine wichtige Klasse von statistischen Modellen, die viele der üblichen Modelle umfasst.

Definition 2.6 (Exponentielle Familie).

(i) Eine *exponentielle Familie* ist ein reguläres statistisches Modell mit Dichten bzw. Massenfunktionen, die sich in der Form

$$f_\theta(x) \;=\; e^{c(\theta)\cdot T(x)+d(\theta)+U(x)}\, 1_A(x) \tag{2.6}$$

mit $l \in \mathbb{N}$, messbaren Funktionen $T : S \to \mathbb{R}^l$ und $U : S \to \mathbb{R}$, einer messbaren Menge $A \subseteq S$, und Funktionen $c : \Theta \to \mathbb{R}^l$, $d : \Theta \to \mathbb{R}$ darstellen lässt.

(ii) Eine exponentielle Familie ist *in natürlicher Form*, falls $c(\theta) = \theta$ gilt.

Die Dichte bzw. Massenfunktion einer exponentiellen Familie können wir auch schreiben als

$$f_\theta(x) \;=\; \frac{1}{\mathcal{Z}(\theta)} e^{c(\theta)\cdot T(x)}\, h(x) \tag{2.7}$$

mit der *Normierungskonstanten* $Z(\theta) := e^{-d(\theta)}$ und der *Referenzdichte* $h(x) := e^{U(x)} 1_A(x)$. Die Funktionen T und U sind nicht eindeutig festgelegt. In vielen Fällen kann man exponentielle Familien durch eine Substitution im Parameterraum in natürliche Form bringen. Daher werden wir oft nur diesen Fall betrachten.

Bemerkung (Suffiziente Statistik). In einer exponentiellen Familie ist $T(X)$ eine suffiziente Statistik.

Bemerkung (Boltzmann-Verteilung). In der statistischen Physik treten exponentielle Familien als Gleichgewichtsverteilungen auf. Beispielsweise hat die Verteilung im thermodynamischen Gleichgewicht in einem abgeschlossenen System bei inverser Temperatur $\beta = 1/T$ die Dichte bzw. Massenfunktion

$$f_\beta(x) \;=\; \frac{1}{\mathcal{Z}(\beta)} e^{-\beta H(x)},$$

wobei $H(x)$ die Energie des Zustands x ist. Die Normierungskonstante $Z(\beta)$ heißt in der statistischen Physik *Partitionsfunktion*.

Wir betrachten nun zunächst einige elementare Beispiele von exponentiellen Familien:

Beispiele. a) Exponentialverteilungen. Die Dichte der Exponentialverteilung mit Parameter $\lambda \in (0, \infty)$ ist

$$f_\lambda(x) \;=\; \lambda e^{-\lambda x} 1_{(0,\infty)}(x) \;=\; e^{-\lambda x + \log \lambda} 1_{(0,\infty)}(x).$$

Die Exponentialverteilungen bilden also eine exponentielle Familie mit $T(x) = x$, $U(x) = 0$, $A = (0, \infty)$, $c(\lambda) = -\lambda$, und $d(\lambda) = \log \lambda$.

b) Bernoulli-, Binomial- und Poisson-Verteilungen. Die Massenfunktion der Bernoulli-Verteilung mit Parameter p ist

$$f_p(x) \;=\; p^x (1-p)^{1-x} \;=\; e^{\log(p/(1-p))x + \log(1-p)}, \qquad x \in \{0, 1\}.$$

Dies ist eine exponentielle Familie mit $T(x) = x$, $U(x) = 0$, $c(p) = \log(p/(1-p))$ und $d(p) = \log(1-p)$. Entsprechend gilt für die Binomialverteilungen

$$f_{n,p}(x) \;=\; \binom{n}{x} p^x (1-p)^{n-x} \;=\; e^{\log(p/(1-p))x + n\log(1-p) + \log\binom{n}{x}}, \qquad x \in \{0, 1, \ldots, n\}.$$

Für festes n und variables p bilden diese eine exponentielle Familie mit $T(x) = x$ und $U(x) = \log \binom{n}{x}$. Die Poisson-Verteilungen bilden eine exponentielle Familie mit $T(x) = x$ und $U(x) = -\log(x!)$, denn

$$f_\lambda(x) \;=\; \frac{\lambda^x}{x!} e^{-\lambda} \;=\; e^{\log(\lambda)x - \lambda - \log(x!)}, \qquad x \in \mathbb{N}_0.$$

c) *Normalverteilungen.* Die Dichte der eindimensionalen Normalverteilung $N(m, v)$ ist

$$f_{m,v}(x) \;=\; \frac{1}{\sqrt{2\pi v}} e^{-\frac{(x-m)^2}{2v}} \;=\; e^{c_1(m,v)x + c_2(m,v)x^2 + d(m,v)}$$

mit $c_1(m, v) = m/v$, $c_2(m, v) = -1/(2v)$ und $d(m, v) = -\frac{1}{2}\left(\frac{m^2}{2v} + \log(2\pi v)\right)$. Die Normalverteilungen bilden also eine *zweiparametrige* exponentielle Familie (d.h. $l = 2$) mit $T(x) = (x, x^2)$ und $U(x) = 0$.

Faktorisierung

Eine wichtige Eigenschaft exponentieller Familien ist die Stabilität unter Produktbildung. Sind $X_1, \ldots, X_n$ unter P_θ unabhängige identisch verteilte Zufallsvariablen mit Dichten bzw. Massenfunktionen $f_\theta(x_i)$, wobei $(f_\theta)_{\theta\in\Theta}$ eine exponentielle Familie ist, dann ist die Likelihood gegeben durch

$$L(\theta; x) \;=\; \prod_{i=1}^{n} f_\theta(x_i) \;=\; \exp\left(c(\theta)\cdot\sum_{i=1}^{n} T(x_i) + nd(\theta) + \sum_{i=1}^{n} U(x_i)\right) 1_{A_1\times\cdots\times A_n}(x_1, \ldots, x_n). \tag{2.8}$$

Das Produktmodell ist also wieder eine exponentielle Familie mit

$$\widetilde{T}(x) = \sum_{i=1}^{n} T(x_i), \quad \widetilde{U}(x) = \sum_{i=1}^{n} U(x_i), \quad \widetilde{A} = A_1 \times \cdots \times A_n. \tag{2.9}$$

Erwartungswerte und Kovarianzen

Wir betrachten nun eine exponentielle Familie in natürlicher Form. Sei $\Theta \subseteq \mathbb{R}^l$ und

$$f_\theta(x) \;=\; e^{\theta\cdot T(x)}\, e^{d(\theta)}\, h(x), \qquad \theta \in \Theta.$$

Wie nehmen an, dass die Verteilungen absolutstetig sind - im diskreten Fall gelten entsprechende Aussagen mit Summen statt Integralen. Wie zuvor bezeichnen wir mit $\mathcal{Z}(\theta)$ die Normierungskonstante der Verteilung mit Dichte f_θ, d.h.

$$\mathcal{Z}(\theta) \;=\; e^{-d(\theta)} \;=\; \int e^{\theta\cdot T(x)}\, h(x)\, dx.$$

Sei $\overset{\circ}{\Theta} := \Theta \setminus \partial\Theta$ das Innere des Parameterbereichs.

Lemma 2.7 (Berechnung der Momente in exponentiellen Familien). *Es gilt $d \in C^2(\overset{\circ}{\Theta})$, und für $\theta \in \overset{\circ}{\Theta}$,*

$$E_\theta\left[T_i(X)\right] \;=\; -\frac{\partial d}{\partial\theta_i}(\theta)\,, \tag{2.10}$$

$$\mathrm{Cov}_\theta\left[T_i(X), T_j(X)\right] \;=\; -\frac{\partial^2 d}{\partial\theta_i\partial\theta_j}(\theta)\,. \tag{2.11}$$

Beweis. Zum Beweis betrachten wir für ein festes $\theta \in \overset{\circ}{\Theta}$ die momentenerzeugende Funktion

$$M(s) \;:=\; E_\theta\left[e^{s\cdot T(x)}\right] \;=\; \int e^{s\cdot T(x)}\, e^{\theta\cdot T(x)}\, h(x)\, dx, \qquad s \in \mathbb{R}^l.$$

Für $\theta \in \overset{\circ}{\Theta}$ gilt $\int e^{(s+\theta)\cdot T(x)} h(x)\, dx = \mathcal{Z}(s+\theta) < \infty$ falls $|s|$ hinreichend klein ist. In diesem Fall erhalten wir

$$M(s) \;=\; \frac{\mathcal{Z}(s+\theta)}{\mathcal{Z}(\theta)} \;=\; e^{d(\theta)-d(s+\theta)} \;<\; \infty.$$

Hieraus folgt, dass die momentenerzeugende Funktion in einer Umgebung der 0 beliebig oft stetig differenzierbar ist, da die entsprechende Potenzreihe absolut konvergiert. Die Momente ergeben sich dann durch Ableiten der momentenerzeugenden Funktion. Insbesondere erhalten wir

$$\begin{aligned} E_\theta[T_i(X)] &= \frac{\partial M}{\partial s_i}(0) = -\frac{\partial d}{\partial \theta_i}(\theta), \\ E_\theta[T_i(X)T_j(X)] &= \frac{\partial^2 M}{\partial s_i \partial s_j}(0) = -\frac{\partial^2 d}{\partial \theta_i \partial \theta_j}(\theta) + \frac{\partial d}{\partial \theta_i}(\theta)\frac{\partial d}{\partial \theta_j}(\theta), \end{aligned}$$

und damit $\operatorname{Cov}_\theta[T_i(X), T_j(X)] = -\frac{\partial^2 d}{\partial \theta_i \partial \theta_j}(\theta)$. ■

Die Aussage aus dem Lemma können wir benutzen, um den Maximum-Likelihood-Schätzer in einer exponentiellen Familie zu charakterisieren. Dazu beschränken wir uns der Einfachheit halber auf den Fall einer einparametrigen exponentiellen Familie.

Satz 2.8 (Maximum-Likelihood-Schätzer in exponentiellen Familien). Sei $\Theta \subseteq \mathbb{R}$ ein offenes Intervall. Dann ist eine Statistik $\hat{\theta}$ mit Werten in Θ genau dann ein Maximum-Likelhood-Schätzer für θ, wenn

$$E_{\hat{\theta}}[T(X)] = -d'(\theta) = T(X).$$

Eine entsprechende Aussage folgt mit analogem Beweis auch für mehrparametrige exponentielle Familien.

Beweis. Die log-Likelihood ist gegeben durch

$$\ell(\theta; x) = \theta \cdot T(x) + d(\theta) + \log h(x).$$

Damit erhalten wir für $\theta \in \Theta$ nach dem Lemma und der Voraussetzung

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \theta}\ell(\theta; x) &= T(x) + d'(\theta) = T(x) - E_\theta[T(X)], \\ \frac{\partial^2}{\partial \theta^2}\ell(\theta; x) &= d''(\theta) = -\operatorname{Var}_\theta[T(X)] \leq 0. \end{aligned}$$

Insbesondere ist die log-Likelihood-Funktion konkav. Also ist θ genau dann eine Maximalstelle von $\theta \mapsto \ell(\theta; x)$, wenn $E_\theta[T(X)] = T(x)$ gilt. ■

Ist $T(X)$ für $\theta \in \Theta$ nicht P_θ-fast sicher konstant, dann ist die log-Likelihood sogar strikt konkav, und die Funktion $\theta \mapsto E_\theta[T(X)]$ ist streng monoton. In diesem Fall ist der Maximum-Likelihood-Schätzer eindeutig. Die Existenz ist hingegen nicht gewährleistet, da das Maximum zum Beispiel auch auf dem Rand des Intervalls Θ angenommen werden könnte, welcher hier nicht in der Parametermenge enthalten ist. Im Allgemeinen ist der MLE nicht explizit, sondern nur numerisch berechenbar.

Beispiel (Schätzen der Intensität einer Exponentialverteilung). Sind $X_1, \dots X_n$ unter P_θ unabhängige Einzelstichproben von einer Exponentialverteilung mit unbekannter Intensität θ, dann gilt

$$f_\theta(x) = \prod_{i=1}^{n} \theta e^{-\theta x_i} = e^{d(\theta)+\theta T(x)}$$

mit $d(\theta) = n \log \theta$ und $T(x) = -\sum x_i$. Aus der Gleichung $d'(\hat{\theta}) = -T(X)$ ergibt sich der Maximum-Likelihood-Schätzer

$$\hat{\theta} = \frac{n}{\sum X_i} = \frac{1}{\overline{X}_n}.$$

Beispiel (MLE im Produktfall). Wie in (2.8) betrachten wir wieder eine exponentielle Familie basierend auf n unabhängigen identisch verteilten Stichproben. Nach (2.9) ist in diesem Fall $\widetilde{T}(x) = \sum_{i=1}^n T(x_i)$, und damit

$$E_\theta[\widetilde{T}(X_1, \dots, X_n)] \;=\; \sum_{i=1}^n E_\theta[T(X_i)] \;=\; n \cdot E_\theta[T(X_1)].$$

Nach Satz A.7 folgt, dass der Maximum-Likelihood-Schätzer $\widetilde{\theta}$ im Produktmodell durch die Gleichung

$$E_{\widetilde{\theta}}[T(X_1)] \;=\; \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n T(X_i)$$

charakterisiert ist. Somit ergibt sich im Produktmodell derselbe Maximum-Likelihood-Schätzer wie im Einkomponentenmodell mit gemitteltem Beobachtungswert $\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n T(X_i)$.

2.4. Likelihood-Quotienten-Tests

Wir führen nun einen allgemeinen Rahmen für Hypothesentests ein. Wie zuvor betrachten wir ein reguläres statistisches Modell mit Wahrscheinlichkeitsräumen $(\Omega, \mathcal{A}, P_\theta), \theta \in \Theta$, Beobachtungsabbildung $X : \Omega \to S$, und Massen- bzw. Dichtefunktionen $f_\theta(x)$. Die Nullhypothese H_0 und die Alternative H_1 sind durch disjunkte Teilmengen Θ_0 und Θ_1 des Parameterbereichs Θ bestimmt:

$$H_0 : \; \theta \in \Theta_0 \,, \qquad H_1 : \; \theta \in \Theta_1 \,.$$

Definition 2.9 (Hypothesentest, Gütefunktion, Signifikanzniveau und Macht).

(i) Ein *Hypothesentest* für das obige Testproblem ist gegeben durch eine messbare Funktion

$$\begin{aligned} &\varphi : S \to \{0, 1\} && \text{(nicht-randomisierter Test),} && \text{bzw.} \\ &\varphi : S \to [0, 1] && \text{(randomisierter Test)} \end{aligned}$$

mit der Entscheidungsregel

- verwerfe H_0 falls $\varphi(x) = 1$,
- verwerfe H_0 nicht falls $\varphi(x) = 0$,
- verwerfe H_0 mit Wahrscheinlichkeit $\varphi(x)$ falls $\varphi(x) \in (0, 1)$.

Der *Verwerfungsbereich* des Tests ist die Menge

$$R \;=\; \{x \in S \,:\, \varphi(x) = 1\} \,.$$

(ii) Die Funktion

$$\beta(\theta) \;=\; E_\theta[\varphi(X)] \qquad (\theta \in \Theta)$$

heißt *Gütefunktion*. Sie beschreibt die Verwerfungswahrscheinlichkeit in Abhängigkeit von θ.

(iii) Der Test hat *Signifikanzniveau* α, falls die Niveaubedingung

$$\beta(\theta) \;\le\; \alpha \qquad \text{für alle } \theta \in \Theta_0$$

erfüllt ist. Die auf Θ_1 eingeschränkte Gütefunktion

$$\beta(\theta) \,, \quad \theta \in \Theta_1 \,,$$

heißt *Macht* des Hypothesentests.

Man kann sich nun fragen, ob es zu einem vorgegebenen Signifikanzniveau α einen mächtigsten Test gibt. Dies ist im Allgemeinen nicht der Fall, aber in einigen einfachen Fällen können wir die Frage positiv beantworten.

Einfache Hypothese und Alternative

Seien $\theta_0,\ \theta_1 \in \Theta$ mit $\theta_0 \neq \theta_1$. Angenommen, wir wissen, dass die Stichproben von einer der beiden Verteilungen mit Dichten bzw. Massenfunktionen f_{θ_0} und f_{θ_1} stammen, und wir wollen entscheiden zwischen der

$$\textit{Nullhypothese } H_0\colon \qquad »\theta = \theta_0«$$

und der

$$\textit{Alternative } H_1\colon \qquad »\theta = \theta_1«.$$

Ein solches Problem tritt in Anwendungen zwar selten auf, bildet aber einen ersten Schritt zum Verständnis allgemeinerer Testprobleme. Sei

$$\lambda(x) \;=\; \frac{L(\theta_1; x)}{L(\theta_0; x)} \;=\; \frac{f_{\theta_1}(x)}{f_{\theta_0}(x)}$$

der Quotient der Likelihood-Funktionen, also die relative Dichte der beiden Wahrscheinlichkeitsverteilungen.

Definition 2.10 (Likelihood-Quotienten-Test). Seien $c \in (0, \infty)$ und $p \in [0, 1]$. Ein Test mit Entscheidungsregel

- verwerfe H_0, falls $\lambda(x) > c$;
- verwerfe H_0 nicht, falls $\lambda(x) < c$;
- verwerfe H_0 mit Wahrscheinlichkeit p, falls $\lambda(x) = c$;

heißt *Likelihood-Quotienten-Test* mit *Schwellenwert* c und *Randomisierungswahrscheinlichkeit* p.

Der Verwerfungsbereich eines Likelihood-Quotienten-Tests ist also $R = \{\lambda > c\}$, und die Entscheidungsfunktion ist

$$\varphi \;=\; 1_{\lambda > c} + p \cdot 1_{\lambda = c}\,.$$

Die Verwerfungswahrscheinlichkeit beträgt

$$\beta(\theta) \;=\; E_\theta[\varphi(X)] \;=\; \int \varphi(x)\, f_\theta(x)\, dx \quad \text{bzw.} \quad \sum_{x \in S} \varphi(x) f_\theta(x)$$

im absolutstetigen bzw. diskreten Fall. Insbesondere hat der Test das Niveau $\alpha = \beta(\theta_0)$. Der Zweck der Randomisierung ist, dass man so zu jedem Niveau α einen Likelihood-Quotienten-Test finden kann, der dieses Niveau genau erreicht. Dies ist für die Praxis nicht relevant, aber es ermöglicht uns, zu jedem vorgegebenen Niveau einen mächtigsten Test zu konstruieren.

Satz 2.11 (Neyman-Pearson-Lemma). Der Likelihood-Quotienten-Test ist der *mächtigste Test zu seinem Niveau* α, d.h. jeder Test mit

$$\beta(\theta_0) \;=\; \text{Wahrscheinlichkeit (Fehler 1.Art)} \leq \alpha$$

hat eine kleinere Macht (d.h. eine höhere Wahrscheinlichkeit für den Fehler 2. Art).

Beweis. Wir zeigen die Aussage im absolutstetigen Fall; der Beweis im diskreten Fall verläuft analog. Sei $\psi : S \to [0,1]$ die Entscheidungsfunktion eines Tests mit Niveau α. Dann gilt

$$\int \psi \, f_{\theta_0} \, dx \;\leq\; \alpha \;=\; \int \varphi \, f_{\theta_0} \, dx,$$

und damit

$$\int (\varphi - \psi) \, f_{\theta_0} \, dx \;\geq 0. \tag{2.12}$$

Zu zeigen ist, dass ψ eine kleinere Macht als φ hat, d.h.

$$\int (\varphi - \psi) \, f_{\theta_1} \, dx \;\geq 0. \tag{2.13}$$

Da φ ein Likelihood-Quotienten-Test ist, gilt

$$\varphi - \psi \;=\; \begin{cases} 1 - \psi \;\geq\; 0 & \text{auf } \{\lambda > c\}, \\ 0 - \psi \;\leq\; 0 & \text{auf } \{\lambda < c\}. \end{cases}$$

Also ist $(\varphi - \psi) \cdot (\lambda - c) \geq 0$, und wegen $\lambda = f_{\theta_1} / f_{\theta_0}$ und (2.12) erhalten wir

$$\begin{aligned} 0 \;&\leq\; \int (\varphi - \psi) \cdot (\lambda - c) \, f_{\theta_0} \, dx \\ &=\; \int (\varphi - \psi) \, f_{\theta_1} \, dx \;-\; c \int (\varphi - \psi) \, f_{\theta_0} \, dx \\ &\leq\; \int (\varphi - \psi) \, f_{\theta_1} \, dx. \end{aligned}$$

Damit ist die Behauptung (2.13) gezeigt. ∎

Bemerkung (Existenz eines Likelihood-Quotienten-Tests mit vorgegebenem Niveau). Die Randomisierung stellt sicher, dass zu jedem Niveau $\alpha \in (0,1)$ ein Likelihood-Quotienten-Test existiert, der das Niveau genau erreicht (und somit ein mächtigster Test zu dem vorgegebenen Niveau ist). Für den Likelihood-Quotienten-Test mit Schwellenwert c und Randomisierungswahrscheinlichkeit p beträgt die Wahrscheinlichkeit für den Fehler 1. Art nämlich

$$E_{\theta_0}[\varphi(X)] \;=\; P_{\theta_0}[\lambda(X) > c] + p \cdot P_{\theta_0}[\lambda(X) = c].$$

Ist nun c ein α-Quantil der Verteilung von $\lambda(X)$ unter der Nullhypothese, dann ist dieser Wert für $p = 0$ kleiner oder gleich α, und für $p = 1$ größer oder gleich α. Also gibt es einen Zwischenwert $p \in [0,1]$ für den die Wahrscheinlichkeit für den Fehler 1. Art exakt gleich α ist.

Beispiel (Signal oder Rauschen ?). Wir wollen mithilfe von n unabhängigen reellen Beobachtungswerten entscheiden, ob ein Signal vorliegt, oder nur zufälliges Rauschen. Als Nullhypothese („nur Rauschen") nehmen wir an, dass die Beobachtungswerte Stichproben von unabhängigen Zufallsvariablen $X_1, \ldots, X_n$ mit Verteilung $\mathcal{N}(0, v)$ sind, die Alternative („Signal eingetroffen") modellieren wir durch unabhängige Zufallsvariablen $X_1, \ldots, X_n$ mit Verteilung $\mathcal{N}(m, v)$. Wir nehmen an, dass sowohl die Signalstärke m als auch die Varianz v der zufälligen Fluktuationen bekannt sind. Als Likelihood-Quotient ergibt sich in diesem Fall

$$\lambda(x) \;=\; \prod_{i=1}^{n} \exp\left(\frac{x_i^2}{2v} - \frac{(x_i - m)^2}{2v} \right) \;=\; \exp\left(\frac{m}{v} \sum_{i=1}^{n} x_i \;-\; \frac{nm^2}{2v} \right).$$

Insbesondere ist der Likelihood-Quotient für $m > 0$ eine streng monoton wachsende Funktion des Stichprobenmittelwerts $\bar{x}_n$. Der Likelihood-Quotienten-Test (ohne Randomisierung) verwirft daher die Nullhypothese, falls $\bar{x}_n > c$ für einen vorgegebenen Schwellenwert c gilt. Randomisierung ist hier nicht

nötig, da die Verteilung absolutstetig ist, und das Ereignis $\bar{X}_n = c$ daher die Wahrscheinlichkeit Null hat. Unter der Nullhypothese hat $\bar{X}_n$ die Verteilung $\mathcal{N}(0, v/n)$, also ist $\bar{X}_n/\sqrt{v/n}$ standardnormalverteilt. Damit erhalten wir als Wahrscheinlichkeit für den Fehler 1. Art

$$P_0[\bar{X}_n > c] \;=\; P_0[\bar{X}_n/\sqrt{v/n} > c/\sqrt{v/n}] \;=\; 1 - \Phi(c/\sqrt{v/n}).$$

Insbesondere hat der Test genau das Niveau α, falls wir $c = q_{1-\alpha}\sqrt{v/n}$ wählen, wobei $q_{1-\alpha} = \Phi^{-1}(1-\alpha)$ das $(1-\alpha)$-Quantil der Standardnormalverteilung ist. Um die Macht zu berechnen, bemerken wir, dass unter der Alternative die Zufallsvariable $(\bar{X}_n - m)/\sqrt{v/n}$ standardnormalverteilt ist. Daher erhalten wir

$$\begin{aligned}\beta(m) \;&=\; P_1[\bar{X}_n > c] \;=\; P_1[(\bar{X}_n - m)/\sqrt{v/n} > (c-m)/\sqrt{v/n}] \;=\; 1 - \Phi\left((c-m)/\sqrt{v/n}\right)\\ &=\; 1 - \Phi\left(q_{1-\alpha} - m\sqrt{n/v}\right) \;=\; \Phi\left(q_\alpha + m\sqrt{n/v}\right).\end{aligned}$$

Die Gütefunktion ist also eine reskalierte Verteilungsfunktion der Standardnormalverteilung. Um eine gewisse Macht zu erreichen, muss das *"signal-to-noise-ratio"* $m/\sqrt{v}$ von der Größenordnung $\Omega\left(1/\sqrt{n}\right)$ sein, die Anzahl der n der nötigen Stichproben ist also von der Größenordnung $O\left((m/\sqrt{v})^{-2}\right)$.

Monotone Likelihood-Quotienten

Wir betrachten nun ein Testproblem

$$H_0 :\; \theta \in \Theta_0 \qquad \text{vs.} \qquad H_1 :\; \theta \in \Theta_1 \tag{2.14}$$

mit einer zusammengesetzten Hypothese und Alternative. Das Neyman-Pearson-Lemma liefert für feste Werte $\theta_0 \in \Theta_0$ und $\theta_1 \in \Theta_1$ einen mächtigsten Test. Im Allgemeinen hängt dieser aber von θ_0 und θ_1 ab. Es stellt sich daher die Frage, ob es unter bestimmten Voraussetzungen einen gleichmäßig mächtigsten Test gibt.

Definition 2.12 (Gleichmäßig mächtigster Test). Ein Test mit Entscheidungsfunktion $\varphi : S \to [0,1]$ heißt *gleichmäßig mächtigster Test* für das Testproblem (2.18) zum Niveau $\alpha \in [0,1]$, falls der Test das Niveau α hat, und für jeden Test $\psi : S \to [0,1]$ mit Niveau α gilt:

$$\beta_\psi(\theta) \;:=\; E_\theta[\psi(X)] \;\le\; E_\theta[\varphi(X)] \;=:\; \beta_\varphi(\theta) \qquad \text{für alle } \theta \in \Theta_1.$$

Im Allgemeinen kann man die Existenz eines gleichmäßig mächtigsten Tests nicht erwarten. Eine wichtige Ausnahme bilden Modelle mit Likelihood-Quotienten, die monoton von einer Teststatistik abhängen. Beispielsweise waren die Likelihood-Quotienten im Beispiel oben (Signal oder Rauschen) monotone Funktionen des Stichprobenmittelwerts. Allgemeiner gilt in einer exponentiellen Familie mit Parameterbereich $\Theta \subseteq \mathbb{R}$ und Likelihood-Funktion $L(\theta; x) = \mathcal{Z}(\theta)^{-1} e^{c(\theta)T(x)} h(x)$ für $\theta < \widetilde{\theta}$:

$$\frac{L(\widetilde{\theta}; x)}{L(\theta; x)} \;=\; \frac{\mathcal{Z}(\theta)}{\mathcal{Z}(\widetilde{\theta})}\, e^{(c(\widetilde{\theta}) - c(\theta))T(x)}.$$

Ist die Funktion c streng monoton wachsend, dann ist der Likelihood-Quotient also eine streng monoton wachsende Funktion von $T(x)$. Somit hat ein Likelihood-Quotienten-Test für $\{\theta\}$ vs. $\{\widetilde{\theta}\}$ unabhängig von θ und $\widetilde{\theta}$ die einfache Form

$$\varphi(x) \;=\; \begin{cases} 1 & \text{für } T(x) > c, \\ 0 & \text{für } T(x) < c, \\ p & \text{für } T(x) = c. \end{cases} \tag{2.15}$$

Da die Form der Likelihood-Quotienten-Tests nicht von den Parametern abhängt, gibt es in diesem Fall einen gleichmäßig mächtigsten Test.

Satz 2.13 (Gleichmäßig mächtigster Test bei monotonen Likelihood-Quotienten). Ist $\Theta \subseteq \mathbb{R}$, und sind die Likelihood-Quotienten in obigem Sinne streng monoton wachsend in einer Statistik $T(x)$, dann existiert für jedes $\theta_0 \in \Theta$ und für jedes Niveau $\alpha \in (0,1)$ ein gleichmäßig mächtigster Test von der Form (2.15) für das *einseitige* Testproblem

$$H_0 : \theta \leq \theta_0 \qquad \text{vs.} \qquad H_1 : \theta > \theta_0. \tag{2.16}$$

Beweis. Sei zunächst $\theta > \theta_0$ fest. Dann gibt es einen mächtigsten Test zum Niveau α für $\{\theta_0\}$ vs. $\{\theta\}$ von der Form (2.15). Dabei sind der Schwellenwert $c \in \mathbb{R}$ und die Randomisierungswahrscheinlichkeit $p \in [0,1]$ eindeutig bestimmt durch die Bedingung

$$\alpha \;=\; E_{\theta_0}[\varphi(X)] \;=\; P_{\theta_0}[T(X) > c] + p \cdot P_{\theta_0}[T(X) = c].$$

Insbesondere sind c und p unabhängig von θ. Also ist φ gleichmäßig mächtigster Test zum Niveau α für das Testproblem mit einfacher Hypothese $\theta = \theta_0$ und zusammengesetzter Alternative $\theta > \theta_0$.

Für den Beweis der Behauptung bleibt nur noch zu zeigen, dass φ auch ein Test zum Niveau α für das Testproblem mit zusammengesetzter Hypothese $\theta \leq \theta_0$ und Alternative $\theta > \theta_0$ ist. Sei also $\theta \leq \theta_0$, und sei $\widetilde{\alpha} := E_\theta[\varphi(X)]$. Dann ist φ auch ein Likelihood-Quotienten-Test für das Testproblem mit einfacher Hypothese $\{\theta\}$ und einfacher Alternative $\{\theta_0\}$. Also ist φ nach dem Neyman-Pearson-Lemma ein mächtigster Test zum Niveau $\widetilde{\alpha}$ für dieses Testproblem. Durch Vergleich mit dem Test mit konstanter Entscheidungsfunktion $\psi \equiv \widetilde{\alpha}$ folgt daher

$$\alpha \;=\; E_{\theta_0}[\varphi(X)] \;\geq\; E_{\theta_0}[\psi(X)] \;=\; \widetilde{\alpha} \;=\; E_\theta[\varphi(X)].$$

Also erfüllt φ die Niveaubedingung auch für die zusammengesetzte Hypothese $\theta \leq \theta_0$, und ist somit auch gleichmäßig mächtigster Test für das Testproblem mit linksseitiger Hypothese und rechtsseitiger Alternative. ■

Beispiel (Tests in einparametrigen Gauß-Modellen). Sei $X = (X_1, \ldots, X_n)$ mit unabhängigen Zufallsvariablen $X_1, \ldots X_n \sim \mathcal{N}(m, v)$. Die Likelihood-Funktion ist dann gegeben durch

$$L(m, v; x_1, \ldots, x_n) \;=\; \prod_{i=1}^{n} \frac{1}{\sqrt{2\pi v}} e^{-\frac{(x_i - m)^2}{2v}}, \tag{2.17}$$

und für die Log-Likelihood erhalten wir die Darstellungen

$$\ell(m, v; x_1, \ldots, x_n) \;=\; -\frac{n}{2}\log(2\pi v) \;-\; \frac{1}{2v}\sum_{i=1}^{n}(x_i - m)^2 \;=\; -\frac{n}{2}\left(\log(2\pi v) \;+\; \frac{v_n}{v} \;+\; \frac{1}{v}\,(\bar{x}_n - m)^2\right)$$

mit dem Stichprobenmittelwert $\bar{x}_n$ und der (nicht renormierten) Stichprobenvarianz v_n. Meistens sind sowohl der Mittelwert m als auch die Varianz v unbekannt. Mit diesem Fall beschäftigen wir uns im nächsten Abschnitt. An dieser Stelle betrachten wir zunächst die einfacheren einparametrigen Fälle, in denen entweder die Varianz oder der Mittelwert bekannt ist.

(i) *Testproblem $H_0 : m \leq m_0$ vs. $H_1 : m > m_0$ bei bekannter Varianz $v > 0$.* Wenn v fest ist, dann können wir die Log-Likelihood schreiben als

$$\ell(m, v; x_1, \ldots, x_n) \;=\; \text{const.}(m, v) \;+\; \frac{nm}{v}\bar{x}_n \;-\; -\frac{1}{2v}\sum_{i=1}^{n} x_i^2.$$

Der Likelihood-Quotient $L(\widetilde{m}, v; x)/L(m, v; x)$ ist daher für $m < \widetilde{m}$ eine streng monoton wachsende Funktion von $\bar{x}_n$. Also ist der Test mit Verwerfungsbereich $\{\bar{X}_n > c\}$ für jeden Schwellenwert $c \in \mathbb{R}$ gleichmäßig mächtigster Test zu seinem Niveau α. Um ein festes Niveau α genau zu erreichen wählt man $c = m_0 + q_{1-\alpha}\sqrt{v/n}$ mit dem $(1-\alpha)$-Quantil $q_{1-\alpha}$ der Standardnormalverteilung.

Auf analoge Weise wie im Beispiel von oben mit einfacher Hypothese und Alternative erhalten wir als Gütefunktion

$$\beta(m) \;=\; \Phi\left(q_\alpha + \frac{m - m_0}{\sqrt{v}}\sqrt{n}\right).$$

(ii) *Testproblem $H_0 : v \geq v_0$ vs. $H_1 : v < v_0$ bei bekanntem Mittelwert m.* Der Likelihood-Quotient $L(m, \widetilde{v}; x)/L(m, v; x)$ ist für $\widetilde{v} < v$ eine *streng monoton fallende* Funktion von $\sum_{i=1}^n (x_i - m)^2$. Daher ist der Test mit Verwerfungsbereich $\sum_{i=1}^n (X_i - m)^2 < c$ für jeden Schwellenwert $c > 0$ ein gleichmäßig mächtigster Test zu seinem Niveau. Die Wahl des Schwellenwerts zu vorgegebenem Niveau ergibt sich aus

$$P_{m,v}\left[\sum_{i=1}^n (X_i - m)^2 < c\right] \;=\; P_{m,v}\left[\sum_{i=1}^n \left(\frac{X_i - m}{\sqrt{v}}\right)^2 < \frac{c}{v}\right] \;=\; F_{\chi^2(n)}\left(\frac{c}{v}\right) \;\leq\; F_{\chi^2(n)}\left(\frac{c}{v_0}\right)$$

für $v \geq v_0$, wobei $F_{\chi^2(n)}$ die Verteilungsfunktion der Chiquadrat-Verteilung mit n Freiheitsgraden ist. Hierbei haben wir benutzt, dass $Z_1^2 + \cdots + Z_n^2$ Chiquadrat-verteilt ist, falls $Z_1, \ldots, Z_n$ unabhängige standardnormalverteilte Zufallsvariablen sind, siehe unten. Um das Niveau α genau zu erreichen, muss man also $c = v_0 \cdot q_{\chi^2(n),\alpha}$ wählen.

Im letzten Beispiel sehen wir auch, dass der Verwerfungsbereich des gleichmäßig mächtigsten Tests von m abhängt. Daher existiert kein gleichmäßig mächtigster Test für das Testproblem (ii) falls m und v beide unbekannt sind. Welchen Test sollten wir dann verwenden?

Der oben verwendete Test φ_m mit Verwerfungsbereich $\sum_{i=1}^n (X_i - m)^2 < c$ ist für jeden festen Wert von m unbrauchbar, wenn der Mittelwert unbekannt ist, denn für jeden Schwellenwert c und jedes $v > 0$ gilt

$$\lim_{\widetilde{m}\to\infty} \beta_{\varphi_m}(\widetilde{m}, v) \;=\; \lim_{\widetilde{m}\to\infty} P_{\widetilde{m},v}\left[\sum_{i=1}^n (X_i - m)^2 < c\right] \;=\; 0.$$

Selbst wenn $v < v_0$ gilt, wird die Verwerfungswahrscheinlichkeit also beliebig klein, wenn $\widetilde{m}$ groß wird. Insbesondere ist die Niveaubedingung für große $\widetilde{m}$ auch auf der Alternative erfüllt. Einen Test mit dieser Eigenschaft nennt man *verfälscht*.

Als Ausweg liegt es nahe, den Mittelwert durch $\bar{x}_n$ zu schätzen, und die Nullhypothese zu verwerfen, falls der Wert der Teststatistik $\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x}_n)^2$ unterhalb eines Schwellenwerts c liegt. Tatsächlich kann man zeigen, dass ein solcher Test ein *gleichmäßig mächtigster unverfälschter Test* zu seinem Niveau ist, siehe zum Beispiel Abschnitt 10.4 in [**Georgii**].

Allgemeine Likelihood-Quotienten-Tests

Wir betrachten wieder ein allgemeines Testproblem

$$H_0 :\; \theta \in \Theta_0 \qquad \text{vs.} \qquad H_1 :\; \theta \in \Theta_1 \tag{2.18}$$

mit einer zusammengesetzten Hypothese und Alternative. Da der Likelihood-Quotient von den Parameterwerten abhängt, können wir ihn im Allgemeinen nicht zur Konstruktion eines Tests benutzen. Stattdessen betrachtet man als ad-hoc-Verfahren zur Konzeption von Hypothesentests den *verallgemeinerten Likelihood-Quotienten*

$$\lambda(x) \;:=\; \frac{\sup\{L(\theta; x) : \theta \in \Theta_1\}}{\sup\{L(\theta; x) : \theta \in \Theta_0\}} \;=\; \frac{\text{max. likelihood von } x \text{ falls } H_1 \text{ wahr}}{\text{max. likelihood von } x \text{ falls } H_0 \text{ wahr}}.$$

Definition 2.14 (Verallgemeinerter Likelihood-Quotienten-Test). Seien $c \in (0, \infty)$ und $p \in [0, 1]$. Ein Test mit Entscheidungsregel

- verwerfe H_0, falls $\lambda(x) > c$;

- verwerfe H_0 nicht, falls $\lambda(x) < c$;
- verwerfe H_0 mit Wahrscheinlichkeit p, falls $\lambda(x) = c$;

heißt *verallgemeinerter Likelihood-Quotienten-Test* mit *Schwellenwert c* und *Randomisierungswahrscheinlichkeit p*.

Im oben diskutierten Beispiel (ii) erhält man falls m und v beide unbekannt sind:

$$\lambda(x) \;=\; \frac{\sup\{L(m,v;x) : v < v_0\}}{\sup\{L(m,v;x) : v \geq v_0\}} \;=\; \begin{cases} \exp\left(-\frac{n}{2}\left(\frac{v_n}{v_0} - 1 - \log\frac{v_n}{v_0}\right)\right) & \text{für } v_n \geq v_0, \\ \exp\left(+\frac{n}{2}\left(\frac{v_n}{v_0} - 1 - \log\frac{v_n}{v_0}\right)\right) & \text{für } v_n \leq v_0. \end{cases}$$

Da der verallgemeinerte Likelihood-Quotient eine streng monoton fallende Funktion von v_n ist, verwirft ein verallgemeinerter Likelihood-Quotienten-Test die Nullhypothese genau dann, wenn die Stichprobenvarianz $V_n = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^n (X_i - \bar{X}_n)^2$ unterhalb eines Schwellenwerts c liegt. Ein verallgemeinerter Likelihood-Quotienten-Test stimmt damit in diesem Beispiel mit dem oben erwähnten gleichmäßig mächtigsten unverfälschten Test überein.

2.5. Studentsche Konfidenzintervalle und t-Test

Angenommen, wir beobachten reellwertige Messwerte (Stichproben, Daten), die von einer unbekannten Wahrscheinlichkeitsverteilung μ auf $\mathbb{R}$ stammen. Ziel der Statistik ist es, Rückschlüsse auf die zugrundeliegende Verteilung aus den Daten zu erhalten. Im einfachsten Modell (Gauß-Modell) nimmt man an, dass die Daten unabhängige Stichproben von einer Normalverteilung mit unbekanntem Mittelwert und/oder Varianz sind:

$$\mu = N(m, v), \quad m, v \text{ unbekannt.}$$

Eine partielle Rechtfertigung für die Normalverteilungsannahme liefert der zentrale Grenzwertsatz. Letztendlich muss man aber in jedem Fall überprüfen, ob eine solche Annahme gerechtfertigt ist.Ein erstes Ziel ist es nun, den Wert von m auf der Basis von n unabhängigen Stichproben $X_1(\omega) = x_1, \ldots, X_n(\omega) = x_n$ zu schätzen, und zu quantifizieren.

Problemstellung: Schätzung des Erwartungswerts

- Schätze m auf der Basis von n unabhängigen Stichproben $X_1(\omega), ..., X_n(\omega)$ von μ.
- Herleitung von Konfidenzintervallen.

Im mathematischen Modell interpretieren wir die Beobachtungswerte als Realisierungen von unabhängigen Zufallsvariablen $X_1, \ldots, X_n$. Da wir die tatsächliche Verteilung nicht kennen, untersuchen wir alle in Betracht gezogenen Verteilungen simultan:

$$X_1, \ldots, X_n \sim N(m, v) \quad \text{unabhängig unter } P_{m,v}. \tag{2.19}$$

Ein naheliegender Schätzer für m ist der *empirische Mittelwert*

$$\overline{X}_n(\omega) \;:=\; \frac{X_1(\omega) + \ldots + X_n(\omega)}{n}\,.$$

Wir haben oben bereits gezeigt, dass dieser Schätzer *erwartungstreu (unbiassed)* und *konsistent* ist, d.h. für alle m, v gilt:

$$E_{m,v}[\overline{X}_n] \;=\; m$$

und

$$\overline{X}_n \to m \quad P_{m,v}\text{-stochastisch für } n \to \infty.$$

Wie wir den Schätzfehler quantifizieren hängt davon ab, ob wir die Varianz kennen.

Schätzung von m bei bekannter Varianz v.
Um den Schätzfehler zu kontrollieren, berechnen wir die Verteilung von $\overline{X}_n$:

$$\begin{aligned} X_i \sim N(m,v) \text{ unabhängig} \quad &\Rightarrow \quad X_1 + \ldots + X_n \sim N(nm, nv) \\ &\Rightarrow \quad \overline{X}_n \sim N(m, v/n) \\ &\Rightarrow \quad \frac{\overline{X}_n - m}{\sqrt{v/n}} \sim N(0,1) \end{aligned}$$

Bezeichnet Φ die Verteilungsfunktion der Standardnormalverteilung, dann erhalten wir

$$P_{m,v}\left[|\overline{X}_n - m| < q\sqrt{\frac{v}{n}}\right] = N(0,1)(-q,q) = 2\left(\Phi(q) - \frac{1}{2}\right) \quad \text{für alle } m \in \mathbb{R}.$$

Satz 2.15 (Konfidenzintervalle bei bekannter Varianz). Im Gaußmodell (2.19) mit bekannter Varianz v ist das zufällige Intervall

$$\left(\overline{X}_n - \Phi^{-1}(\alpha)\sqrt{\frac{v}{n}}\,,\ \overline{X}_n + \Phi^{-1}(\alpha)\sqrt{\frac{v}{n}}\right)$$

ein *Konfidenzintervall zum Konfidenzniveau* $2\alpha - 1$ für m, d.h.

$$P_{m,v}[m \in \text{Intervall}] \geq 2\alpha - 1 \qquad \text{für alle } m \in \mathbb{R}.$$

Man beachte, dass die Länge des Konfidenzintervalls in diesem Fall nicht von den beobachteten Stichproben abhängt!

Schätzung von m bei unbekannter Varianz v. In Anwendungen ist meistens die Varianz unbekannt. In diesem Fall können wir das Intervall oben nicht verwenden, da es von der unbekannten Varianz v abhängt. Stattdessen schätzen wir m und v simultan, und konstruieren ein Konfidenzintervall für m mithilfe beider Schätzwerte. Erwartungstreue Schätzer für m und v sind

$$\overline{X}_n = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^n X_i \quad \text{und} \quad V_n = \frac{1}{n-1}\sum_{i=1}^n (X_i - \overline{X}_n)^2 .$$

Um ein Konfidenzintervall für m zu erhalten, bestimmen wir mithilfe des Transformationssatzes die gemeinsame Verteilung von $\overline{X}_n$ und V_n:

Lemma 2.16. *$\overline{X}_n$ und V_n sind unabhängig unter $P_{m,v}$ mit Verteilung*

$$\overline{X}_n \sim N\left(m, \frac{v}{n}\right) \quad , \quad \frac{n-1}{v}V_n \sim \chi^2(n-1) .$$

Beweis. Wir führen eine lineare Koordinatentransformation $Y = OX$ durch, wobei O eine orthogonale $n \times n$-Matrix vom Typ

$$O = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{n}} \cdots \frac{1}{\sqrt{n}} \\ \text{beliebig} \end{pmatrix}$$

ist. Eine solche Matrix erhalten wir durch Ergänzen des normierten Vektors $(\frac{1}{\sqrt{n}}, ..., \frac{1}{\sqrt{n}})$ zu einer Orthonormalbasis des $\mathbb{R}^n$. Da die Matrix O orthogonal ist, gilt in den neuen Koordinaten

$$\begin{aligned} \overline{X}_n &= \frac{1}{n}\sum_{i=1}^n X_i = \frac{1}{\sqrt{n}} Y_1, \qquad \text{und} \\ (n-1)V_n &= \sum_{i=1}^n (X_i - \overline{X}_n)^2 = \sum_{i=1}^n X_i^2 - n\overline{X}_n^2 = \|X\|_{\mathbb{R}^n}^2 - n\overline{X}_n^2 = \|Y\|_{\mathbb{R}^n}^2 - Y_1^2 = \sum_{i=2}^n Y_i^2 . \end{aligned}$$

Da die Zufallsvariablen X_i $(1 \le i \le n)$ unabhängig und $N(m,v)$-verteilt sind, ist der Zufallsvektor $X = (X_1, ..., X_n)$ multivariat normalverteilt mit Mittel $(m, \dots, m)$ und Kovarianzmatrix $v \cdot I_n$. Nach dem Transformationssatz oder mithilfe von charakteristischen Funktionen folgt

$$Y \sim N\left(O\begin{pmatrix} m \\ \vdots \\ m \end{pmatrix}, v \cdot OI_nO^T\right) = N\left(\begin{pmatrix} m\sqrt{n} \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}, v \cdot I_n\right).$$

Also sind $Y_1, ..., Y_n$ unabhängige Zufallsvariablen mit Verteilungen

$$Y_1 \sim N(m\sqrt{n}, v) \quad , \quad Y_i \sim N(0,v) \quad \text{für } i \ge 2.$$

Es folgt, dass

$$\overline{X}_n = \frac{Y_1}{\sqrt{n}} \quad \text{und} \quad \frac{n-1}{v} V_n = \sum_{i=2}^n \left(\frac{Y_i}{\sqrt{v}}\right)^2$$

unabhängige Zufallsvariablen mit Verteilungen $N(m, v/n)$ bzw. $\chi^2(n-1)$ sind. ■

Bei bekannter Varianz v hatten wir Konfidenzintervalle für m vom Typ $\overline{X}_n \pm q \cdot \sqrt{v/n}$ erhalten, wobei q ein geeignetes Quantil der Standardnormalverteilung ist. Daher liegt es nahe, zu versuchen, bei unbekannter Varianz Konfidenzintervalle vom Typ $\overline{X}_n \pm q \cdot \sqrt{V_n/n}$ herzuleiten. Es gilt

$$P_{m,v}\left[|\overline{X}_n - m| \ge q\sqrt{V_n/n}\right] = P_{m,v}[|T_{n-1}(X)| \ge q] \qquad \text{mit}$$

$$T_{n-1}(X) := \frac{\sqrt{n} \cdot (\overline{X}_n - m)}{\sqrt{V_n}} .$$

Die Statistik $T_{n-1}(X)$ heißt **Studentsche t-Statistik mit $n-1$ Freiheitsgraden**. Unsere Überlegungen zeigen, dass wir aus Quantilen der Studentschen t-Statistik Konfidenzintervalle für das Gauß-Modell herleiten können, falls die t-Statistik ein Pivot ist, das heißt ihre Verteilung nicht von den unbekannten Parametern m und v abhängt. Dies ist in der Tat der Fall.

Satz 2.17 (Student). Die Verteilung von $T_{n-1}(X)$ ist absolutstetig mit Dichte

$$f_{t(n-1)}(t) = B\left(\frac{1}{2}, \frac{n-1}{2}\right)^{-1} \cdot (n-1)^{-1/2} \cdot \left(1 + \frac{t^2}{n-1}\right)^{-n/2} \qquad (t \in \mathbb{R}). \tag{2.20}$$

Hierbei ist der Normierungsfaktor $B(a,b) = \int_0^1 s^{a-1}(1-s)^{b-1}\,ds$ die *Eulersche Beta-Funktion*.

Beweis. Direkt oder mithilfe des Transformationssatzes zeigt man: Sind Z und Y unabhängige Zufallsvariablen mit Verteilungen $N(0,1)$ bzw. $\chi^2(n)$, dann ist $Z/\sqrt{\frac{1}{n}Y}$ absolutstetig mit Dichte f_{T_n}. Der Satz folgt dann nach Lemma 2.16 mit $Z := \frac{\overline{X}_n - m}{\sqrt{v/n}}$ und $Y := \frac{n-1}{v} V_n$. ■

Definition 2.18 (Studentsche t-Verteilung). Die Wahrscheinlichkeitsverteilung auf $(\mathbb{R}, \mathcal{B}(\mathbb{R}))$ mit Dichtefunktion (2.20) nennt man **»Studentsche t-Verteilung mit $n-1$ Freiheitsgraden«**.

Anwendung auf Konfidenzintervalle und Tests

Aus Satz 2.17 ergibt sich unmittelbar die folgende Aussage.

Korollar 2.19 (Studentsche Konfidenzintervalle und t-Test). Sei $\alpha \in (0,1)$, und sei

$$q = F^{-1}_{t(n-1)}(1-\alpha/2)$$

das $(1-\alpha/2)$-Quantil der t-Verteilung mit $n-1$ Freiheitsgraden. Dann gilt:

(i) Das zufällige Intervall

$$\left(\overline{X}_n - q \cdot \sqrt{V_n/n}\,,\ \overline{X}_n + q \cdot \sqrt{V_n/n}\right)$$

ist ein Konfidenzintervall für m zum Konfidenzniveau $1-\alpha$.

(ii) Für $m_0 \in \mathbb{R}$ ist

$$|\overline{X}_n - m_0| \ \geq\ q \cdot \sqrt{V_n/n}$$

der Verwerfungsbereich eines Hypothesentest für das beidseitige Testproblem

$$H_0 :\ m = m_0 \qquad \text{vs.} \qquad H_1 :\ m \neq m_0$$

zum Signifikanzniveau α.

Entsprechend erhält man auch einseitige Konfidenzintervalle sowie Verwerfungsbereiche für Hypothesentests mit einseitiger Alternative mithilfe der Studentschen t-Statistik. Im Korollar zeigt sich auch ein Zusammenhang von Konfidenzintervallen und Hypothesentests, der auch allgemeiner gilt.

Übung (Dualität von Konfidenzbereichen und Hypothesentests). Sei $(\Omega, \mathcal{A}, (P_\vartheta)_{\vartheta\in\Theta})$ ein statistisches Modell, und $X : \Omega \to S$ die Beobachtung.

a) Zeigen Sie: Ist $x \mapsto C(x) \subseteq \Theta$ ein Konfidenzbereich für ϑ zum Niveau $1-\alpha$ und $\vartheta_0 \in \Theta$, dann ist

$$R(\vartheta_0) \ =\ \{x \in S : \vartheta_0 \notin C(x)\}$$

der Verwerfungsbereich eines Tests zum Niveau α der Hypothese $\Theta_0 = \{\vartheta_0\}$.

b) Umgekehrt sei $R(\theta_0)$ für jedes $\vartheta_0 \in \Theta$ der Verwerfungsbereich eines Tests der Hypothese $\Theta_0 = \{\vartheta_0\}$ zum Niveau α. Konstruieren Sie einen Konfidenzbereich für ϑ zum Niveau $1-\alpha$.

c) Illustrieren Sie die Aussagen anhand eines Beispiels.

Hier sieht man auch, dass die Angabe eines Konfidenzbereichs eine allgemeinere Aussage liefert als die 0-1-Entscheidung eines Hypothesentests, welche nur eine feste Hypothese betrifft.

Der t-Test als Likelihood-Quotienten-Test

Wir zeigen nun, dass der t-Test im Gauß-Modell der Likelihood-Quotienten-Test für das Testproblem

$$H_0 : \ m = m_0 \qquad \text{vs.} \qquad H_1 : \ m \neq m_0$$

ist. Für die Likelihood gilt nach (2.17)

$$\ell(m, v; x_1, \ldots, x_n) \ = \ -\frac{n}{2}\log(2\pi v) \ - \ \frac{1}{2v}\sum_{i=1}^{n}(x_i - m)^2 \ = \ -\frac{n}{2}\left(\log(2\pi v) \ + \ \frac{v_n}{v} \ + \ \frac{1}{v}\,(\bar{x}_n - m)^2\right).$$

Mit $\widetilde{v}_n := \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(x_i - m_0)^2$ und $\hat{v}_n = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(x_i - \bar{x}_n)^2$ erhalten wir

$$\begin{aligned}\sup_{m=m_0} \ell(m, v; x) \ &= \ -\frac{n}{2}\left(\log(2\pi\widetilde{v}_n) + 1\right), \\ \sup_{m\neq m_0} \ell(m, v; x) \ &= \ -\frac{n}{2}\left(\log(2\pi\hat{v}_n) + 1\right),\end{aligned}$$

und damit als Likelihood-Quotienten

$$\lambda(x) \ = \ e^{\frac{n}{2}(\log\widetilde{v}_n - \log\hat{v}_n)} \ = \ \left(\frac{\widetilde{v}_n}{\hat{v}_n}\right)^{n/2} \ = \ \left(1 + \frac{(\bar{x}_n - m_0)^2}{\hat{v}_n}\right)^{n/2} \ = \ \left(\frac{1 + T_{n-1}(x)^2}{n-1}\right)^{n/2},$$

wobei $T_{n-1}(x) = (\bar{x}_n - m_0)/\sqrt{v_n/n}$ mit $v_n = n\hat{v}_n/(n-1)$ die Studentsche t-Statistik zur Nullhypothese ist. Also verwirft der Likelihood-Quotienten-Test in der Tat genau dann, wenn $|T_{n-1}(x)|$ oberhalb eines festen Schwellenwerts $c > 0$ liegt.

Optimalität des t-Tests

Wir betrachten nun das einseitige Testproblem

$$H_0 : \ m \leq m_0 \qquad \text{vs.} \qquad H_1 : \ m > m_0\,.$$

Der t-Test zum Niveau $\alpha \in (0, 1)$ für dieses Testproblem hat die Entscheidungsregel

$$\varphi(X) \ = \ 1_{T_{n-1}(X)>q} \qquad \text{wobei} \qquad T_{n-1}(X) \ = \ \sqrt{n}(\overline{X}_n - m_0)/\sqrt{V_n}$$

die Studentsche t-Statistik, und $q = q_{1-\alpha;t(n-1)}$ das $(1-\alpha)$-Quantil der t-Verteilung mit $n-1$ Freiheitsgraden ist. Für dieses Testproblem gibt es keinen gleichmäßig mächtigsten Test, aber wir werden sehen, dass der t-Test der beste *unverfälschte* Test ist.

Lemma 2.20. *Der t-Test mit Entscheidungsregel φ ist unverfälscht zum Niveau α, das heißt*

$$P_{m,v}\left[T_{n-1}(X) > q\right] \ \begin{cases} \leq \alpha & \text{für } m \leq m_0, \\ \geq \alpha & \text{für } m \geq m_0. \end{cases}$$

Beweis. Wir können ohne Beschränkung der Allgemeinheit $m_0 = 0$ annehmen. Da $T_{n-1}(X)$ unter der Nullhypothese die Verteilung $t(n-1)$ hat, gilt

$$P_{0,v}[T_{n-1}(X) > q] \ = \ \alpha.$$

Für $m \neq 0$ Hat $X = (X_1, \ldots, X_n)$ unter $P_{m,v}$ dieselbe Verteilung wie $\widetilde{X} = (X_1 + m, \ldots, X_n + m)$ unter $P_{0,v}$. Wegen $T_{n-1}(\widetilde{X}) = T_{n-1}(X) + m\sqrt{n/V_n}$ folgt

$$P_{m,v}[T_{n-1}(X) > q] \ = \ P_{0,v}[T_{n-1}(\widetilde{X}) > q] \ \begin{cases} \geq \ P_{0,v}[T_{n-1}(X) > q] \ = \ \alpha & \text{für } m \geq 0, \\ \leq \ P_{0,v}[T_{n-1}(X) > q] \ = \ \alpha & \text{für } m \leq 0, \end{cases}$$

und damit die Behauptung. ∎

Satz 2.21 (Optimalität des *t*-Tests). Der t-Test mit Entscheidungsregel φ ist *bester unverfälschter Test zum Niveau* α für H_0 vs. H_1, das heißt für jeden unverfälschten Niveau-α-Test ψ gilt

$$E_{m,v}[\psi(X)] \;\le\; E_{m,v}[\varphi(X)] \qquad \text{für alle } m > m_0 \text{ und } v > 0.$$

Beweis (Skizze). Für $x = (x_1, \dots, x_n) \in \mathbb{R}^n$ setzen wir $z := \sqrt{n}\overline{x}_n$, und $s := \sum_{i=1}^n x_i^2$. Damit gilt $s - z^2 = \sum_{i=1}^n (x_i - \overline{x}_n)^2$, und somit

$$T_{n-1}(x) \;=\; \sqrt{n-1}\,\frac{z}{s-z^2}.$$

Der t-Test verwirft also, falls $z/\sqrt{s-z^2} > r$ für einen festen Schwellenwert r gilt, bzw., äquivalent, falls $z > \widetilde{r}\sqrt{s}$ mit $\widetilde{r} := r/\sqrt{1+r^2}$. Für die Likelihood gilt

$$L(m, v; x) \;=\; \text{const.}(m, v) \cdot e^{az - bs}$$

mit $a := m\sqrt{n}/v$ und $b := 1/(2v)$, und somit hat der Likelihood-Quotient die Form

$$\lambda(m, v, 0, v; x) \;:=\; \frac{L(m, v; x)}{L(0, v; x)} \;=\; \text{const.}(m, v) \cdot e^{az}.$$

Der t-Test verwirft also genau dann, wenn

$$\lambda(m, v, 0, v; x) \;>\; h(s)$$

gilt, wobei h eine Funktion der Form $h(s) = ce^{d\sqrt{s}}$ mit positiven reellen Konstanten c und d ist. Für einen beliebigen unverfälschten Test mit Entscheidungsregel ψ folgt

$$(\varphi(x) - \psi(x)) \cdot (\lambda(m, v, 0, v; x) - h(s)) \;\ge\; 0 \quad \text{für alle x,}$$

und daher

$$\begin{aligned} \int (\varphi(x) - \psi(x)) f_{m,v}(x)\,dx \;&=\; \int (\varphi(x) - \psi(x)) \lambda(m, v, 0, v; x) f_{0,v}(x)\,dx \\ &\ge\; \int (\varphi(x) - \psi(x)) h(s) f_{0,v}(x)\,dx. \end{aligned} \tag{2.21}$$

Die Behauptung folgt, wenn wir zeigen können, dass dieser Ausdruck für jede sub-exponentiell wachsende Funktion $h \in C(\mathbb{R}_+, \mathbb{R})$ nicht negativ ist. Für $h \equiv 1$ ergibt sich dies aus der Unverfälschtheit von φ und ψ. Allgemeiner folgt für $h(s) = e^{-ks}$ mit $k \in \mathbb{N}$

$$\int (\varphi(x) - \psi(x)) h(s) f_{0,v}(x)\,dx \;=\; \int (\varphi(x) - \psi(x)) h(s) f_{0,\widetilde{v}}(x)\,dx \;=\; 0$$

mit einer Konstanten $\widetilde{v} > 0$. Daher verschwindet die rechte Seite von (2.21), falls $h(s)$ ein Polynom von e^{-s} ist. Die Behauptung folgt nun durch ein Approximationsargument. ■

3. Relative Entropie, Information und statistische Unterscheidbarkeit

Asymptotische Aussagen über Wahrscheinlichkeiten, die wir in diesem Abschnitt herleiten werden, betreffen meistens nur die exponentielle Abfallrate. Subexponentiell fallend oder wachsende Faktoren werden ignoriert. Wir führen einen entsprechenden Äquivalenzbegriff für Folgen auf der exponentiellen Skala ein:

Definition 3.1 (Asymptotische exponentielle Äquivalenz von Folgen). Zwei Folgen $(a_n)_{n\in\mathbb{N}}$ und $(b_n)_{n\in\mathbb{N}}$ von positiven reellen Zahlen heißen *asymptotisch exponentiell äquivalent* ($a_n \simeq b_n$), falls

$$\frac{1}{n}\log\frac{a_n}{b_n} = \frac{1}{n}(\log a_n - \log b_n) \longrightarrow 0 \qquad \text{für } n\to\infty.$$

Beispielsweise gilt $n^{-k}\exp(-cn) \simeq \exp(-cn)$ für alle $k, c \in \mathbb{R}$.

Um exponentielle Äquivalenz zu zeigen werden wir häufig separat eine Abschätzung nach oben („obere Schranke") und eine Abschätzung nach unten („untere Schranke") beweisen. Entsprechend schreiben wir „$a_n \preceq b_n$", falls

$$\limsup_{n\to\infty}\frac{1}{n}\log\frac{a_n}{b_n} \leq 0$$

ist. Beispielsweise gilt für reelle Zahlen c, d, k, l:

$$n^{-k}\exp(-cn) \preceq n^{-l}\exp(-dn) \qquad \Longleftrightarrow \qquad c \geq d.$$

3.1. Entropie und relative Entropie

Wir definieren zunächst die Entropie einer diskreten Wahrscheinlichkeitsverteilung und die relative Entropie zweier beliebiger Wahrscheinlichkeitsmaße. Mithilfe des Gesetzes der großen Zahlen können wir statistische Interpretationen dieser Größen geben. Insbesondere misst die relative Entropie die Unterscheidbarkeit zweier Wahrscheinlichkeitsmaße durch Folgen von unabhängigen Stichproben.

Entropie und Information

Wir bemerken zunächst, dass die auf $[0,\infty)$ definierte Funktion

$$u(x) := \begin{cases} x\log x & \text{für } x > 0 \\ 0 & \text{für } x = 0 \end{cases}$$

stetig und strikt konvex ist mit $u'(x) = 1 + \log x$ und $u''(x) = 1/x$ für $x > 0$. Insbesondere gilt

$$u(x) \leq 0 \qquad \text{für alle } x \in [0,1], \tag{3.1}$$
$$u(x) \geq x - 1 \qquad \text{für alle } x \geq 0, \tag{3.2}$$

und $u(1/e) = -1/e$ ist das absolute Minimum der Funktion u.

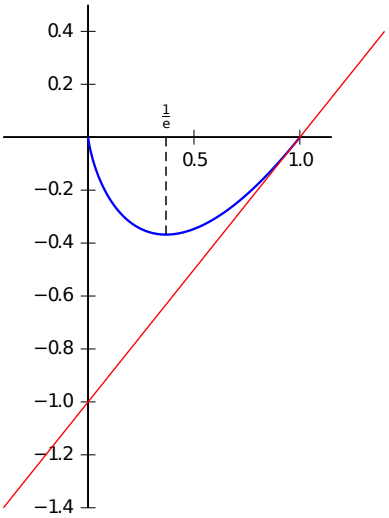


Abbildung 3.1.: Graph der Funktion $u(x)$ (blau) und ihrer unteren Schranke $x - 1$ (rot)

Sei nun S eine abzählbare Menge, und $\mu = (\mu(x))_{x \in S}$ eine Wahrscheinlichkeitsverteilung auf S.

Definition 3.2 (Entropie einer diskreten Wahrscheinlichkeitsverteilung). Die Größe

$$H(\mu) \quad := \quad - \sum_{\substack{x \in S \\ \mu(x) \neq 0}} \mu(x) \log \mu(x) \quad = \quad - \sum_{x \in S} u(\mu(x)) \quad \in [0, \infty]$$

heißt **Entropie** der Wahrscheinlichkeitsverteilung μ.

Anschaulich können wir $-\log \mu(x)$ interpretieren als Maß für die »Überraschung« bzw. den »Informationsgewinn«, falls eine Stichprobe von der Verteilung μ den Wert x hat. Die »Überraschung« ist umso größer, je unwahrscheinlicher x ist. Die Entropie $H(\mu)$ ist dann die »mittlere Überraschung« bzw. der »mittlere Informationsgewinn« beim Ziehen einer Stichprobe von ν. Eine wichtige Eigenschaft der Entropie, die auch die Wahl des Logarithmus erklärt, ist:

Satz 3.3 (Faktorisierungseigenschaft). Für beliebige diskrete Wahrscheinlichkeitsverteilungen ν und μ gilt:

$$H(\nu \otimes \mu) \; = \; H(\nu) + H(\mu).$$

Der mittlere Informationszuwachs in einem aus zwei unabhängigen Experimenten zusammengesetzten Zufallsexperiment ist also die Summe der einzelnen mittleren Informationszuwächse.

Beweis. Nach Definition der Entropie gilt:

$$\begin{aligned} H(\nu \otimes \mu) &= \sum_{\substack{x,y \\ \nu(x)\mu(y) \neq 0}} \nu(x)\mu(y) \log(\nu(x)\mu(y)) \\ &= - \sum_{x : \nu(x) \neq 0} \nu(x) \log(\nu(x)) - \sum_{y : \mu(y) \neq 0} \mu(y) \log(\mu(y)) \\ &= H(\nu) + H(\mu). \end{aligned}$$

■

Wir bestimmen nun auf einer gegebenen abzählbaren Menge S die Wahrscheinlichkeitsverteilungen mit minimaler bzw. maximaler Entropie.

Entropieminima

Nach (3.1) ist die Entropie stets nicht-negativ. Zudem gilt:

$$H(\mu) = 0 \quad \Longleftrightarrow \quad \mu(x) \in \{0,1\} \quad \forall\, x \in S \quad \Longleftrightarrow \quad \mu \text{ ist ein Dirac-Maß.}$$

Die Dirac-Maße sind also die Entropieminima. Ist das Zufallsexperiment deterministisch, d.h. μ ein Diracmaß, dann tritt bei Ziehen einer Stichprobe von μ keine Überraschung bzw. kein Informationszuwachs auf.

Entropiemaximum

Ist S endlich, dann gilt für alle Wahrscheinlichkeitsverteilungen μ auf S:

$$H(\mu) \;\le\; \log(|S|) \;=\; H(\mathrm{Unif}_S),$$

wobei Unif_S die Gleichverteilung auf S ist. Nach der Jensenschen Ungleichung gilt nämlich

$$\begin{aligned} -\sum_{x\in S} u(\mu(x)) &= -|S| \cdot \int u(\mu(x))\, \mathrm{Unif}_S(dx) \\ &\le -|S| \cdot u\left(\int \mu(x)\, \mathrm{Unif}_S(dx)\right) \\ &= -|S| \cdot u\,(1/|S|) \quad = \quad \log|S| \end{aligned}$$

mit Gleichheit genau dann, wenn μ die Gleichverteilung ist.

Die Gleichverteilung maximiert also die Entropie auf einem endlichen Zustandsraum. Anschaulich können wir die Gleichverteilung als eine »völlig zufällige« Verteilung auffassen – d.h. wir verwenden die Gleichverteilung als Modell, wenn wir keinen Grund haben, einen der Zustände zu bevorzugen. Die Entropie ist in diesem Sinne ein Maß für die *»Zufälligkeit«* (bzw. *»Unordnung«*) der Wahrscheinlichkeitsverteilung μ.

Ist S abzählbar unendlich, dann gibt es Wahrscheinlichkeitsverteilungen auf S mit unendlicher Entropie.

Als nächstes geben wir eine statistische Interpretation der Entropie. Sei μ eine Wahrscheinlichkeitsverteilung auf einer abzählbaren Menge S. Die Wahrscheinlichkeit einer Folge von Ausgängen $x_1, \ldots, x_n$ bei Entnehmen einer Stichprobe aus n unabhängigen Zufallsgrößen mit Verteilung μ beträgt

$$p_n(x_1, ..., x_n) = \prod_{i=1}^{n} \mu(x_i).$$

Der gemittelte Informationszuwachs durch Auswertung der Werte $x_1, \ldots, x_n$ ist also

$$-\frac{1}{n} \log p_n(x_1, ..., x_n).$$

Mithilfe des Gesetzes der großen Zahlen können wir die Asymptotik dieser Größen für $n \to \infty$ untersuchen:

Satz 3.4 (Entropie als asymptotische Informationszuwachsrate). Seien $X_1, X_2, \ldots : \Omega \to S$ unter P unabhängige Zufallsvariablen mit Verteilung μ. Dann gilt P-fast sicher :

$$-\frac{1}{n} \log p_n(X_1, \ldots, X_n) \quad \longrightarrow \quad H(\mu) \qquad \text{für } n \to \infty.$$

In der zu Beginn dieses Kapitels eingeführten Notation zur Äquivalenz auf der exponentiellen Skala besagt die Aussage des Satzes, dass fast sicher

$$p_n(X_1, \ldots, X_n) \quad \simeq \quad e^{-nH(\mu)} \qquad \text{gilt.}$$

Beweis. Mit Wahrscheinlichkeit 1 gilt $0 < \mu(X_i) \leq 1$, also $-\log \mu(X_i) \in [0, \infty)$ für alle i. Nach dem Gesetz der großen Zahlen folgt, dass fast sicher

$$-\frac{1}{n} \log p_n(X_1, \ldots, X_n) \quad = \quad -\frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} \log \mu(X_i) \quad \stackrel{n\to\infty}{\longrightarrow} \quad -\int \log \mu \, d\mu \quad = \quad H(\mu)$$

gilt.

Relative Entropie und statistische Unterscheidbarkeit

Die Entropie ist nur für diskrete Wahrscheinlichkeitsmaße definiert. Eine Übertragung der Definition auf absolutstetige Wahrscheinlichkeitsmaße auf $\mathbb{R}^d$ ist möglich, indem man

$$H(\mu) \; = \; -\int_{\mathbb{R}^d} f \, \log f \, dx \qquad \text{mit} \qquad f = d\mu/dx$$

setzt. Allerdings kann die so definierte Entropie sowohl positive als auch negative Werte annehmen. Wir führen jetzt den allgemeineren Begriff der *relativen Entropie* zweier Wahrscheinlichkeitsmaße auf einem beliebigen meßbaren Raum $(S, \mathcal{B})$ ein:

Definition 3.5 (Relative Entropie zweier Wahrscheinlichkeitsmaße). Seien μ und ν Wahrscheinlichkeitsmaße auf $(S, \mathcal{B})$. Die durch

$$H(\mu \mid \nu) \quad := \quad \begin{cases} \int \log w \, d\mu \; = \; \int w \log w \, d\nu & \text{falls } \mu \ll \nu \text{ mit Dichte } w, \\ \infty \qquad \text{sonst.} \end{cases} \tag{3.3}$$

definierte Größe $H(\mu \mid \nu) \in [0, \infty]$ heißt *relative Entropie* (oder *Kullback-Leibler Information*) von μ bzgl. ν.

Um eine anschauliche Interpretation der relativen Entropie zu geben, nehmen wir an, dass μ und ν Wahrscheinlichkeitsmaße auf $S = \mathbb{R}^d$ oder einem diskreten Raum mit Dichten (bzw. Massenfunktionen) $f, g > 0$ sind. Die relative Dichte w von μ bzgl. ν ist dann

$$w(x) \quad = \quad \frac{d\mu}{d\nu}(x) \quad = \quad \frac{f(x)}{g(x)} \qquad \text{für } \nu\text{-fast alle } x \in S,$$

und

$$H(\mu \mid \nu) \quad = \quad \int \log \frac{f}{g} \, d\mu \quad = \quad \int (-\log g(x) - (-\log f(x))) \, \mu(dx).$$

Wir können $-\log g(x)$ und $-\log f(x)$ als Maß für die Überraschung (den Informationsgewinn) bei Eintreten von x interpretieren, falls ν bzw. μ das zugrundeliegende Modell ist. Wenn wir also ν als Modell annehmen, aber tatsächlich μ die zugrundeliegende Verteilung ist, dann erhöht sich die Überraschung (der Informationszuwachs) bei Ziehen einer Stichprobe im Vergleich zum korrekten Modell im Mittel um $H(\mu|\nu)$.

Bemerkung (Entropie als Spezialfall der relativen Entropie). Ist ν das Zählmaß auf einer abzählbaren Menge S, dann gilt

$$H(\mu \mid \nu) \quad = \quad \sum_{\mu(x)\neq 0} \mu(x) \log \mu(x) \quad = \quad -H(\mu). \tag{3.4}$$

Ist S endlich, und ν die Gleichverteilung (also das normierte Zählmaß) auf S, dann folgt entsprechend

$$H(\mu \mid \nu) \quad = \quad \sum_{\mu(x)\neq 0} \mu(x) \log(\mu(x) \cdot |S|) \quad = \quad \log |S| - H(\mu).$$

Aussagen über die relative Entropie liefern also als Spezialfall entsprechende Aussagen für die Entropie (wobei sich aber das Vorzeichen umkehrt!)

Das folgende Lemma fasst elementare Eigenschaften der relativen Entropie zusammen:

Lemma 3.6 (Eigenschaften der relativen Entropie).

(i) Es gilt $H(\mu \mid \nu) \geq 0$, mit Gleichheit genau dann, wenn $\mu = \nu$.

(ii) $H(\mu_1 \otimes \ldots \otimes \mu_n \mid \nu_1 \otimes \ldots \otimes \nu_n) \quad = \quad \sum_{i=1}^{n} H(\mu_i \mid \nu_i).$

Beweis. Sei $\mu \ll \nu$ mit relativer Dichte w. Wegen $x \log x \geq x - 1$ folgt

$$H(\mu \mid \nu) \quad = \quad \int w \log w \, d\nu \quad \geq \quad \int (w-1) \, d\nu \quad = \quad \int w \, d\nu - 1 \quad = \quad 0.$$

Gleichheit gilt genau dann, wenn w ν-fast sicher gleich 1, also $\mu = \nu$ ist. Der Beweis der zweiten Aussage ist eine Übungsaufgabe. ■

Die folgenden Beipiele zeigen, dass die relative Entropie im Allgemeinen *nicht symmetrisch* ist.

Beispiele (Relative Entropie von Bernoulli- und Binomialverteilungen).

(i) Für die Bernoulli-Verteilungen mit $\nu_p(1) = p$ und $\nu_p(0) = 1 - p$ gilt:

$$H(\nu_a \mid \nu_p) \quad = \quad a \log\left(\frac{a}{p}\right) + (1-a) \log\left(\frac{1-a}{1-p}\right) \qquad \text{für alle } a, p \in (0,1).$$

(ii) Für Normalverteilungen mit Mittelwerten $m, \widetilde{m} \in \mathbb{R}$ und Varianzen $v, \widetilde{v} > 0$ gilt

$$\begin{aligned} H(N(\widetilde{m}, \widetilde{v}) \mid N(m,v)) \quad &= \quad \frac{1}{2}\left(\log\left(\frac{v}{\widetilde{v}}\right) + \frac{\widetilde{v}}{v} - 1 + \frac{(\widetilde{m}-m)^2}{v}\right), \qquad \text{also insbesondere} \\ H(N(\widetilde{m}, v) \mid N(m,v)) \quad &= \quad \frac{(\widetilde{m}-m)^2}{2v}. \end{aligned}$$

Bemerkung (Zusammenhang von relativer Entropie und Chiquadrat-Divergenz). Für $\mu \approx \nu$, also $w = \frac{d\mu}{d\nu} \approx 1$ erhalten wir mit der Taylor-Approximation $w \log w = w - 1 + \frac{1}{2}(w-1)^2 + O(|w-1|^3)$ die Näherung

$$H(\mu|\nu) \;=\; \int w \log w \, d\nu \;\approx\; \int (w-1)\, d\nu + \frac{1}{2}\int (w-1)^2 \, d\nu \;=\; \frac{1}{2}\chi^2(\mu|\nu). \tag{3.5}$$

Wir können die Chiquadrat-Divergenz also als quadratische Approximation der relativen Entropie für $\mu \approx \nu$ interpretieren.

Wir geben nun eine statistische Interpretation der relativen Entropie. Dazu nehmen wir wieder an, dass μ und ν Wahrscheinlichkeitsverteilungen auf $S = \mathbb{R}^d$ oder einem diskreten Raum mit Dichten (bzw. Massenfunktionen) $f, g > 0$, und relativer Dichte $w = f/g$ sind.

Wie kann man anhand von unabhängigen Stichproben erkennen, welche der beiden Verteilungen ν und μ in einem Zufallsexperiment vorliegt? Dazu betrachten wir den *Likelihood-Quotienten*

$$w_n(x_1, \ldots, x_n) \quad := \quad \frac{L_n(\mu; x_1, \ldots, x_n)}{L_n(\nu; x_1, \ldots, x_n)} \quad = \quad \frac{\prod_{i=1}^n f(x_i)}{\prod_{i=1}^n g(x_i)} \quad = \quad \prod_{i=1}^n w(x_i).$$

Analog zu Satz 3.4 erhalten wir die folgende (allgemeinere) Aussage:

Satz 3.7 (Relative Entropie als statistische Unterscheidbarkeit; Shannon-McMillan). Seien $X_1, X_2, \ldots : \Omega \to S$ unabhängige Zufallsvariablen unter P_ν bzw. P_μ mit Verteilung ν bzw. μ. Dann gilt für $n \to \infty$:

$$\frac{1}{n} \log w_n(X_1, \ldots, X_n) \quad \longrightarrow \quad H(\mu \mid \nu) \qquad P_\mu\text{-fast sicher, und} \tag{3.6}$$

$$\frac{1}{n} \log w_n(X_1, \ldots, X_n) \quad \longrightarrow \quad -H(\nu \mid \mu) \qquad P_\nu\text{-fast sicher.} \tag{3.7}$$

Beweis. (i) Für $n \to \infty$ gilt nach dem Gesetz der großen Zahlen

$$\frac{1}{n} \log w_n(X_1, \ldots, X_n) \quad = \quad \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \log w(X_i) \quad \longrightarrow \quad \int \log w \, d\mu \qquad P_\mu\text{-fast sicher.}$$

Das Gesetz der großen Zahlen ist anwendbar, da

$$\int (\log w)^- \, d\mu \quad = \quad \int (w \log w)^- \, d\nu \quad \leq \quad \frac{1}{e} \quad < \quad \infty.$$

(ii) Da ν absolutstetig bzgl. μ mit Dichte $1/w$ ist, gilt entsprechend

$$\begin{aligned} \frac{1}{n} \log w_n(X_1, \ldots, X_n) \quad &= \quad -\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \log \frac{1}{w(X_i)} \\ &\xrightarrow{\text{GGZ}} \quad -\int \log \frac{1}{w} \, d\nu \quad = \quad -H(\nu \mid \mu) \qquad P_\nu\text{-fast sicher.} \end{aligned}$$

■

Der Satz von Shannon-Mc Millan zeigt, dass sich die Produktdichte (der Likelihood-Quotient) asymptotisch auf der exponentiellen Skala (d.h. unter Vernachlässigung subexponentiell wachsender Faktoren) folgendermaßen verhält:

$$w_n(X_1, \ldots, X_n) \quad \simeq \quad \begin{cases} e^{nH(\mu \mid \nu)} & P_\mu\text{-fast sicher,} \\ e^{-nH(\nu \mid \mu)} & P_\nu\text{-fast sicher.} \end{cases}$$

Damit erhalten wir eine statistische Interpretation der relativen Entropie als natürlichen *(nicht-symmetrischen!)* Abstandsbegriff für Wahrscheinlichkeitsmaße. Wir werden diese statistische Interpretation im folgenden noch weiter präzisieren.

3.2. Anwendung auf die Asymptotik von Likelihood-basierten statistischen Verfahren

Konsistenz von Maximum-Likelihood-Schätzern

Als erste Folgerung aus Satz 3.7 zeigen wir, dass Maximum-Likelihood-Schätzer unter geeigneten Voraussetzungen konsistent sind. Sei dazu ν_θ ($\theta \in \Theta$) eine einparametrige (d.h. $\Theta \subseteq \mathbb{R}$) Familie von Wahrscheinlichkeitsverteilungen mit Dichten bzw. Massenfunktionen f_θ. Es gelte:

Annahme (Unimodalität): Für alle $n \in \mathbb{N}$ und $x \in S^n$ existiert ein $\hat{\theta}_n(x_1, ..., x_n)$, sodass

$$\theta \mapsto L_n(\theta; x_1, ..., x_n) \begin{cases} \text{ist monoton wachsend für } \theta \leq \hat{\theta}_n(x_1, ..., x_n). \\ \text{ist monoton fallend für } \theta \geq \hat{\theta}_n(x_1, ..., x_n). \end{cases}$$

Bemerkung. (i) Die Annahme ist z.B. erfüllt, falls $\theta \mapsto \log f_\theta(x)$ für jedes x konkav ist - denn dann ist auch $\log L_n(\theta, x_1, ..., x_n) = \sum_{i=1}^n \log f_\theta(x_i)$ konkav in θ.

(ii) $\hat{\theta}_n(X_1, ..., X_n)$ ist im unimodalen Fall eindeutiger Maximum-Likelihood-Schätzer für θ.

Satz 3.8 (Konsistenz von Maximum-Likelihood-Schätzern). Es gelte die Annahme, sowie $\nu_\theta \neq \nu_{\widetilde{\theta}}$ für $\theta \neq \widetilde{\theta}$. Dann ist $\hat{\theta}_n(X_1, \ldots, X_n)$ ($n \in \mathbb{N}$) eine **konsistente** Folge von Schätzern für θ, d.h. für jedes $\varepsilon > 0$ gilt:

$$P_\theta[|\hat{\theta}_n(X_1, ..., X_n) - \theta| < \varepsilon] \to 1 \quad \text{für } n \to \infty.$$

Beweis. Wegen der Unimodalität gilt $\hat{\theta}_n(x_1, ..., x_n) \in (\theta - \varepsilon, \theta + \varepsilon)$ falls

$$L_n(\theta; x_1, ..., x_n) \; > \; L_n(\theta \pm \varepsilon; x_1, ..., x_n).$$

Also:

$$P_\theta[|\hat{\theta}_n(X_1, ..., X_n) - \theta| < \varepsilon] \geq P_\theta\left[\frac{L_n(\theta; X_1, ..., X_n)}{L_n(\theta \pm \varepsilon; X_1, ..., X_n)} > 1\right].$$

Die rechte Seite konvergiert aber für $n \to \infty$ nach Satz 3.7 für jedes θ gegen 1. ■

Asymptotische Macht von Likelihood-Quotienten-Tests

Wir nehmen nun wieder an, dass μ und ν Wahrscheinlichkeitsverteilungen auf $S = \mathbb{R}^d$ oder einem diskreten Raum mit Dichten (bzw. Massenfunktionen) $f, g > 0$, und relativer Dichte $w = f/g$ sind.

Seien $X_1, X_2, \ldots$ unter P_ν bzw. P_μ unabhängige Zufallsvariablen mit Verteilung ν bzw. μ. Wir betrachten den *Likelihood-Quotienten*

$$w_n(x_1, \ldots, x_n) \quad := \quad \frac{L_n(\mu; x_1, \ldots, x_n)}{L_n(\nu; x_1, \ldots, x_n)} \quad = \quad \frac{\prod_{i=1}^n f(x_i)}{\prod_{i=1}^n g(x_i)} \quad = \quad \prod_{i=1}^n w(x_i)$$

für n unabhängige Stichproben $x_1, \ldots, x_n$. Nach dem Neyman-Pearson-Lemma ist der Lihelihood-Quotienten-Test mit Verwerfungsbereich

$$C \; = \; \{w_n > c\}$$

für jedes $c \in (0, \infty)$ der mächtigste Test für das Testproblem

$$H_0: \quad \text{»} X_i \sim \nu \text{«} \quad \text{vs.} \quad H_1: \quad \text{»} X_i \sim \mu \text{«}$$

zum Niveau $\alpha = \nu^n(w_n > c)$. Wie mächtig ist dieser Test asymptotisch für große n?

Satz 3.9 (Asymptotische Macht des Likelihoodquotiententests). Sei $\alpha \in (0,1)$ ein festes Niveau, und sei $c_n \in (0,\infty)$ $(n \in \mathbb{N})$ mit

$$\nu^n(w_n > c_n) \;\le\; \alpha \le \nu^n(w_n \ge c_n) \tag{3.8}$$

Dann gilt:

(i)
$$\frac{1}{n}\,\log c_n \;\longrightarrow\; -H(\nu|\mu) \qquad \text{für } n \to \infty.$$

(ii)
$$\frac{1}{n}\,\log \mu^n(w_n \le c_n) \;\longrightarrow\; -H(\nu|\mu) \qquad \text{für } n \to \infty,$$

d.h. die Wahrscheinlichkeit für den Fehler 2. Art fällt exponentiell mit Rate $H(\nu|\mu)$.

Der Satz demonstriert erneut, daß die relative Entropie ein gutes Maß für die Unterscheidbarkeit zweier Wahrscheinlichkeitsverteilungen ist. Der Beweis basiert auf dem Satz von Shannon-McMillan und einem Lemma zu unteren Schranken für Wahrscheinlichkeiten bei Maßwechsel, dass wir im Anschluss beweisen werden.

Beweis. (i) Sei $\varepsilon > 0$. Für große n gilt nach dem Satz von Shannon-McMillan

$$\nu^n\left(w_n > e^{-n(H(\nu|\mu)+\varepsilon)}\right) > \alpha \overset{(3.8)}{\ge} \nu^n(w_n > c_n).$$

Es folgt $e^{-n(H(\nu|\mu)+\varepsilon)} < c_n$. Analog zeigt man $e^{-n(H(\nu|\mu)-\varepsilon)} > c_n$. Die Behauptung folgt dann für $\varepsilon \to 0$.

(ii) *Untere Schranke:* Wegen

$$\nu^n(w_n \le c_n) \;\ge\; 1-\alpha \;>\; 0 \qquad \forall\, n \in \mathbb{N}$$

folgt nach Lemma 3.11, dass

$$\liminf \frac{1}{n}\,\log \mu^n(w_n \le c_n) \;\ge\; -H(\nu|\mu).$$

Obere Schranke: Wegen

$$\mu^n(w_n \le c_n) \;=\; \int_{w_n \le c_n} w_n \, d\nu^n \;\le\; c_n$$

folgt nach (i) die Abschätzung

$$\limsup \frac{1}{n}\,\log \mu^n(w_n \le c_n) \;\le\; \limsup \frac{1}{n}\,\log c_n \;=\; -H(\nu|\mu),$$

und damit die Behauptung. ■

Wir kommen nun zum Beweis des oben verwendeten Lemmas. Dieses spielt auch allgemein in der Theorie großer Abweichungen eine wichtige Rolle. Wir beginnen mit einer Definition.

Definition 3.10 (Wesentliche Mengen in Produktmodellen). Eine Folge von Mengen $B_n \subseteq S^n$ $(n \in \mathbb{N})$ heißt *wesentlich bzgl.* ν, falls

$$\liminf_{n\to\infty} P_\nu[(X_1,\ldots,X_n) \in B_n] \;=\; \liminf_{n\to\infty} \nu^n[B_n] \;>\; 0\,.$$

Wie wahrscheinlich muss eine bzgl. ν wesentliche Folge von Mengen unter μ mindestens sein? Das folgende Lemma beantwortet diese Frage auf der exponentiellen Skala.

Lemma 3.11 (Untere Schranken für Wahrscheinlichkeiten bei Maßwechsel). *(i) Für $\varepsilon > 0$ sei*

$$B_{n,\varepsilon} := \{(x_1,\ldots,x_n) : e^{-n(H(\nu\,|\,\mu)+\varepsilon)} \leq w_n(x_1,\ldots,x_n) \leq e^{-n(H(\nu\,|\,\mu)-\varepsilon)}\} \subseteq S^n .$$

Dann gilt $\lim_{n\to\infty} \nu[B_{n,\varepsilon}] = 1$ (insbesondere ist $(B_{n,\varepsilon})_{n\in\mathbb{N}}$ wesentlich bzgl. ν), und

$$\mu^n[B_{n,\varepsilon}] \quad \leq \quad e^{-n(H(\nu\,|\,\mu)-\varepsilon)} \qquad \text{für alle } n \in \mathbb{N}. \tag{3.9}$$

(ii) Für beliebige messbare Mengen $A_n \subseteq S^n$ mit

$$\liminf \nu^n[A_n] > 0 \tag{3.10}$$

gilt

$$\liminf \frac{1}{n} \log \mu^n[A_n] \geq -H(\nu\,|\,\mu). \tag{3.11}$$

Beweis. (i) Die erste Aussage folgt nach Satz 3.7. Zudem gilt

$$1 \geq \nu^n[B_{n,\varepsilon}] \quad = \quad \int_{B_{n,\varepsilon}} \frac{1}{w_n}\, d\mu^n \quad \geq \quad \mu^n[B_{n,\varepsilon}] \cdot e^{n(H(\nu\,|\,\mu)-\varepsilon)}.$$

(ii) Aus

$$\mu^n[A_n] \quad = \quad \int_{A_n} w_n\, d\nu_n \quad \geq \quad e^{-n(H(\nu\,|\,\mu)+\varepsilon)} \nu^n[A_n \cap B_{n,\varepsilon}]$$

folgt

$$\begin{aligned} \liminf \frac{1}{n} \log \mu^n[A_n] &\geq -(H(\nu\,|\,\mu)+\varepsilon) + \liminf \frac{1}{n} \log \nu^n[A_n \cap B_{n,\varepsilon}] \\ &= -(H(\nu\,|\,\mu)+\varepsilon), \end{aligned}$$

da $\liminf \nu^n[A_n \cap B_{n,\varepsilon}] = \liminf \nu^n[A_n] > 0$ nach (i) gilt. Die Behauptung folgt für $\varepsilon \to 0$. ■

Die zweite Aussage der Satzes können wir als eine allgemeine untere Schranke für große Abweichungen interpretieren: Ist $A_n \subseteq S^n$ eine beliebige Folge von Ereignissen, dann liefert uns (3.11) für jede Wahrscheinlichkeitsverteilung ν mit (3.10) eine asymptotische untere Schranke für die Wahrscheinlichkeiten

$$P_\mu[(X_1,\ldots,X_n) \in A_n] \quad = \quad \mu^n[A_n]$$

auf der exponentiellen Skala.

Fisher-Information

Wir betrachten nun wieder ein parametrisches Modell. Der Einfachheit halber nehmen wir an, dass der Parameterraum Θ ein offenes Teilintervall von $\mathbb{R}$ ist. Entsprechende Aussagen gelten aber auch für mehrdimensionale Parametermengen. Sei μ_θ ($\theta \in \Theta$) eine Familie von Wahrscheinlichkeitsverteilungen auf $S \subseteq \mathbb{R}^d$ (bzw. auf einem diskreten Raum S) mit Dichten (bzw. Massenfunktionen) f_θ. Für die folgenden Aussagen benötigen wir zudem unterschiedliche Regularitätsannahmen. Die folgende (relativ starke) Annahme ist für alle Aussagen hinreichend, kann aber noch deutlich abgeschwächt werden.

Annahme (Regularität): Die folgenden Bedingungen sind erfüllt:

- *Identifizerbarkeit:* Für $\theta \neq \widetilde{\theta}$ gilt $\mu_\theta \neq \mu_{\widetilde{\theta}}$.

- *Nicht-degeneriert:* Für alle $x \in S$ und $\theta \in \Theta$ ist $f_\theta(x) > 0$.
- *Glattheit der Log-Likelihood:* Für jedes $x \in S$ ist $\theta \mapsto f_\theta(x)$ dreimal stetig differenzierbar, und für $k = 2$ sowie $k = 3$ gilt
$$\sup_{x,\theta} \left| \frac{\partial^k}{\partial \theta^k} \log f_\theta(x) \right| < \infty.$$
- *Vertauschen von Ableitung und Integral:* Für $k = 1$ und $k = 2$ gilt
$$\int \frac{\partial^k}{\partial \theta^k} f_\theta(x)\, dx = \frac{\partial^k}{\partial \theta^k} \int f_\theta(x)\, dx = 0.$$

Unter den Annahmen ist die log-Likelihood

$$\ell(\theta; x) = \log f_\theta(x)$$

eine glatte Funktion, deren erste Ableitung die **Score-Funktion**

$$\ell'(\theta) = \frac{\partial}{\partial \theta} \ell(\theta; x) = \frac{1}{f_\theta(x)} \frac{\partial}{\partial \theta} f_\theta(x)$$

ist. Die Score-Funktion misst also, wie stark die log-Likelihood vom Parameter θ abhängt. Um zu quantifizieren wie stark die Verteilung von θ abhängt, betrachten wir die Fisher-Information.

Definition 3.12 (Fisher-Information). Die **Fisher-Information** des parametrischen Modells ist für $\theta \in \Theta$ definiert als
$$I(\theta) = \int \ell'(\theta)^2 f_\theta\, dx = \int \frac{1}{f_\theta(x)} \left| \frac{\partial f_\theta(x)}{\partial \theta} \right|^2 dx.$$

Aus den Regularitätsannahmen folgt unmittelbar

$$\int \ell'(\theta) f_\theta\, dx = 0, \qquad \text{und} \qquad -\int \ell''(\theta) f_\theta\, dx = I(\theta), \tag{3.12}$$

denn
$$0 = \int \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} f_\theta\, dx = \int \ell''(\theta) f_\theta\, dx + \int \ell'(\theta) \frac{\partial}{\partial \theta} f_\theta\, dx = \int \ell''(\theta) f_\theta\, dx + I(\theta).$$
Insbesondere ist die Fisher-Information sowohl die Varianz der Score-Funktion als auch der Erwartungswert der negativen zweiten Ableitung der log-Likelihood. Letztere kann geometrisch als Krümmung des Modells interpretiert werden.

Wenn die Fisher-Information groß ist, dann hängt die Verteilung stark von θ ab, und es sollte einfacher sein, den Parameter zu schätzen. Umgekehrt sollte es schwierig sein, den Parameter zu schätzen, wenn $I(\theta)$ klein ist. Dies wird durch die Informationsungleichung bestätigt.

Satz 3.13 (Informationsungleichung von Cramér-Rao). Ist das Modell regulär, dann gilt für jeden erwartungstreuer Schätzer $\hat{\theta}$ für θ die untere Schranke
$$\mathrm{MSE}(\hat{\theta}) = \mathrm{Var}_\theta[\hat{\theta}] \geq \frac{1}{I(\theta)} \qquad \text{für alle } \theta \in \Theta.$$

Beweis. Die Behauptung ergibt sich (nach kurzer Rechnung) durch Anwenden der Cauchy-Schwarz-Ungleichung auf die Kovarianz von $\hat{\theta}$ und der Score-Funktion $\frac{\partial \ell}{\partial \theta}(\theta; X)$. ■

Auf ähnliche Weise sieht man auch, dass in der Informationsungleichung für einen erwartungstreuen Schätzer $\hat{\theta} = T(X)$ genau dann Gleichheit gilt, wenn $(\mu_\theta)_{\theta \in \Theta}$ eine exponentielle Familie zur Statistik $T(X)$ ist. In diesem Fall nennt man den Schätzer *effizient*. Auf die Voraussetzungen Erwartungstreue und Regularität kann man nicht verzichten, wie Beispiele aus den Übungen zeigen.

> **Beispiel (Produktmodell).** In einem regulären Produktmodell mit n unabhängigen, identisch verteilten Faktoren ist die Fisher-Information durch $I_n(\theta) = nI(\theta)$ gegeben, wobei I die Fisher-Information der einzelnen Komponenten ist. Aufgrund der Informationsungleichung gilt also
>
> $$\mathrm{Var}_\theta[\hat{\theta}] \;\geq\; \frac{1}{nI(\theta)}$$
>
> für jeden erwartungstreuen Schätzer. Andererseits haben wir in den Übungen „supereffiziente" erwartungstreue Schätzer $\hat{\theta}_n$ in einem (nicht-regulären) Produktmodell betrachtet, deren Varianz mit Ordnung $O(1/n^2)$ abfällt.

Der folgende Satz zeigt, dass die Fisher-Information die Unterscheidbarkeit von den Verteilungen μ_θ und μ_{θ_0} für $\theta \approx \theta_0$ quantifiziert.

Satz 3.14 (Zusammenhang von relativer Entropie und Fisher-Information). Sei $\theta_0 \in \Theta$ ein fester Parameterwert. Dann gilt unter Regularitätsvoraussetzungen

$$H(\mu_{\theta_0}|\mu_\theta) \;=\; \frac{1}{2} I(\theta_0) \cdot (\theta - \theta_0)^2 \,+\, O(|\theta - \theta_0|^3), \qquad \text{und} \tag{3.13}$$

$$H(\mu_\theta|\mu_{\theta_0}) \;=\; \frac{1}{2} I(\theta_0) \cdot (\theta - \theta_0)^2 \,+\, O(|\theta - \theta_0|^3). \tag{3.14}$$

Beweis. Die Aussagen folgen durch eine Taylor-Entwicklung der relativen Entropie. Sei

$$h(\theta) \;:=\; H(\mu_{\theta_0}|\mu_\theta) \;=\; \int \log\left(f_{\theta_0}/f_\theta\right) f_{\theta_0}.$$

Dann gilt $h(\theta_0) = 0$. Wegen $\log\left(f_{\theta_0}/f_\theta\right) = \ell(\theta_0) - \ell(\theta)$ folgt zudem

$$h'(\theta) = -\int \ell'(\theta) f_{\theta_0} \qquad \text{und} \qquad h''(\theta) = -\int \ell''(\theta) f_{\theta_0},$$

und somit $h'(\theta_0) = 0$ und $h''(\theta_0) = I(\theta_0)$ nach (3.12). Also erhalten wir unter den obigen Regularitätsvoraussetzungen die Taylor-Entwicklung

$$h(\theta) \;=\; h(\theta_0) + (\theta - \theta_0)h'(\theta_0) + \frac{1}{2}(\theta - \theta_0)^2 h''(\theta_0) + O(|\theta - \theta_0|^3) \;=\; \frac{1}{2} I(\theta_0) \cdot (\theta - \theta_0)^2 + O(|\theta - \theta_0|^3).$$

Die zweite Aussage zeigt man auf ähnliche Weise. ■

Bemerkung (Mehrdimensionale Verallgemeinerung; Fisher-Informationsmatrix und Informationsgeometrie). Für $\Theta \subseteq \mathbb{R}^d$ folgt auf ähnliche Weise $D_\theta^2 H(\mu_{\theta_0}|\mu_\theta) = I(\theta_0)$ wobei $I(\theta_0) \in \mathbb{R}^{d \times d}$ die durch

$$I(\theta)_{kl} \;=\; \int \frac{\partial}{\partial \theta_k} (\log f_\theta) \, \frac{\partial}{\partial \theta_l} (\log f_\theta) \; f_\theta$$

definierte *Fisher-Informations-Matrix* ist. Unter Regularitätsvoraussetzungen folgt wie im eindimensionalen Fall $I(\theta) = -\int D^2 \ell(\theta) \, f_\theta$. Ist die log-Likelihood konkav, dann definiert die Fisher-Information eine Riemannsche Metrik auf dem Parameterraum, die auf natürliche Weise mit dem zugrundeliegenden statistischen Modell verbunden ist.

Asymptotische Normalität von Maximum-Likelihood-Schätzern

Wir betrachten nun ein reguläres Produktmodell mit Dichte f_θ, $\theta \in \Theta \subseteq \mathbb{R}$. Die Log-Likelihood ℓ_n für n unabhängige Stichproben ist dann gegeben durch

$$\ell_n(\theta; x_1, \dots, x_n) \;=\; \sum_{i=1}^{n} \log f_\theta(x_i)\,.$$

Ist $\hat\theta_n = T_n(X_1, \dots, X_n)$ ein Maximum-Likelihood-Schätzer, dann gilt die *Likelihood-Gleichung*

$$\frac{\partial \ell_n}{\partial \theta}(T_n(x_1, \dots, x_n); x_1, \dots, x_n) \;=\; 0 \tag{3.15}$$

für alle Beobachtungswerte $x_1, \dots, x_n$. Mithilfe der relativen Entropie konnten wir bereits zeigen, dass Maximum-Likelihood-Schätzer unter Regularitätsannahmen konsistent sind. Mithilfe der Fisher-Information

$$I(\theta) \;=\; \int \left|\frac{\partial}{\partial\theta} \log f_\theta(x)\right|^2 f_\theta(x)\,dx$$

kann man nun die asymptotische Varianz identifizieren, und einen zentralen Grenzwertsatz für Maximum-Likelihood-Schätzer beweisen.

Satz 3.15 (Fisher, Wilks, Wald). Sei $T_n(X_1, \dots, X_n)$ ($n \in \mathbb{N}$) eine konsistente Folge von Schätzern, die die Likelihood-Gleichung (3.15) erfüllt. Dann gilt unter Regularitätsvoraussetzungen für jeden Parameterwert $\theta \in \Theta$

$$\sqrt{n}\,\left(\hat\theta_n(X_1, ..., X_n) - \theta\right) \;\xrightarrow{\mathcal{D}}\; \mathcal{N}\left(0, \frac{1}{I(\theta)}\right),$$

wobei „$\xrightarrow{\mathcal{D}}$" für Konvergenz in Verteilung bezüglich P_θ für $n \to \infty$ steht.

Da andererseits nach der Informationsungleichung die Varianz eines erwartungstreuen Schätzers für θ basierend auf n unabhängigen Stichproben unter Regularitätsbedingungen stets größer als $\frac{1}{nI(\theta)}$ ist, folgt, dass Maximum-Likelihood-Schätzer *asymptotisch effizient* sind.

Beweis. Wir skizzieren hier nur die Beweisidee. Ein vollständiger Beweis erfordert eine sorgfältige Rechtfertigung der einzelnen Schritte inklusive der Kontrolle der Restterme in den folgenden Approximationen mithilfe der Regularitätsannahmen.

Nach (3.15) und einer Taylor-Approximation gilt

$$0 \;=\; \ell_n'(T_n) \;\approx\; \ell_n'(\theta) \,+\, (T_n - \theta)\,\ell_n''(\theta),$$

und damit

$$\sqrt{n}(T_n - \theta) \;\approx\; \frac{n^{-1/2}\ell_n'(\theta)}{-\frac{1}{n}\ell_n''(\theta}\,.$$

Wir betrachten nun den Zähler und Nenner separat. Für den Zähler erhalten wir unter P_θ nach dem zentralen Grenzwertsatz für Summen von unabhängigen identisch verteilten Zufallsvariablen

$$\frac{1}{\sqrt{n}}\ell_n'(\theta) \;=\; \frac{1}{\sqrt{n}}\sum_{i=1}^{n}\frac{\partial}{\partial\theta}\log f_\theta(X_i) \;\xrightarrow{\mathcal{D}}\; N\left(0, I(\theta)\right)\,.$$

Hierbei haben wir benutzt, dass die Summanden nach (3.12) und der Definition der Fisher-Information unabhängige zentrierte Zufallsvariablen mit Varianz $I(\theta)$ sind. Für den Nenner erhalten wir entsprechend nach dem Gesetz der großen Zahlen und (3.12)

$$\frac{1}{\sqrt{n}}\ell_n''(\theta) \;=\; \frac{1}{\sqrt{n}}\sum_{i=1}^{n} -\frac{\partial^2}{\partial\theta^2}\log f_\theta(X_i) \;\xrightarrow{\text{f.s.}}\; I(\theta)\,.$$

Insgesamt folgt damit nach dem Satz von Slutsky, dass

$$\sqrt{n}(T_n-\theta) \;\xrightarrow{\mathcal{D}}\; W/I(\theta),$$

wobei W eine Zufallsvariable mit Verteilung $\mathcal{N}(0,\theta)$ ist, also $W/I(\theta)\sim\mathcal{N}(0,1/I(\theta))$. ■

Der Satz von Fisher, Wilks und Wald ermöglicht es, approximative Konfidenzintervalle basierend auf Maximum-Likelihood-Schätzern anzugeben. Für „große" n gilt nach dem Satz näherungsweise

$$\frac{\hat\theta_n-\theta}{\sqrt{\frac{1}{nI(\theta)}}} \;\approx\; \mathcal{N}(0,1)\,.$$

Nach dem Satz von Slutsky folgt auch

$$\frac{\hat\theta_n-\theta}{\sqrt{\frac{1}{nI(\hat\theta_n)}}} \;\approx\; \mathcal{N}(0,1)\,.$$

Also ist

$$\hat\theta_n \pm \Phi^{-1}(1-\alpha/2)\sqrt{\frac{1}{nI(\hat\theta_n)}}$$

ein *approximatives Konfidenzintervall* für θ zum Konfidenzniveau $1-\alpha$. Beispielsweise ist $\hat\theta_n \pm 2/\sqrt{nI(\hat\theta_n)}$ ein approximatives 95%-Konfidenzintervall. Allerdings ist unklar, wie groß man n wählen muss, damit die Approximation hinreichend genau ist.

3.3. Weitere Anwendungen von Entropie und relativer Entropie

Hoeffdings Entropietest

Seien $x_1,\dots,x_n$ unabhängige Stichproben von einer unbekannten Wahrscheinlichkeitsverteilung p auf einer endlichen Menge $S=\{a_1,a_2,\dots,a_K\}$ mit Gewichten $p_1,\dots,p_K$. Wir betrachten das Testproblem

$$H_0:\; p=p^0 \qquad \text{vs.} \qquad H_1:\; p\neq p^0\,,$$

wobei p^0 eine feste Wahrscheinlichkeitsverteilung auf S ist. Der Parameterraum ist in diesem Fall das $(K-1)$-dimensionale Simplex

$$\Theta \;=\; \left\{p\in[0,1]^k \;:\; \sum p_i = 1\right\},$$

und $\Theta_0=\{p^0\}$.Wir wollen den entsprechenden Likelihood-Quotienten-Test finden. Die Likelihood-Funktion ist

$$L(p;x_1,\dots,x_n) \;=\; \prod_{i=1}^{n} p(x_i) \;=\; \prod_{l=1}^{K} p_l^{H_l},$$

wobei H_l die Häufigkeit von a_l unter $x_1, \dots, x_n$ ist. Mit den relativen Häufigkeiten $\hat{p}_l = H_l/n$ ergibt sich

$$\begin{aligned} \frac{1}{n} \log L(p;x) &= \sum_{l=1}^{K} \hat{p}_l \log p_l = \sum_{l=1}^{K} \hat{p}_l \log \hat{p}_l - \sum_{l=1}^{K} \hat{p}_l \log \frac{\hat{p}_l}{p_l} \\ &= -H(\hat{p}) - H(\hat{p}|p), \end{aligned}$$

also

$$L(p;x) = e^{-n(H(\hat{p})+H(\hat{p}|p))}. \tag{3.16}$$

Da die relative Entropie nicht negativ ist, ist $p = \hat{p}$ der eindeutige Maximum-Likelihood-Schätzer für p, und als Likelihood-Quotient ergibt sich

$$\frac{\sup\{L(p;x) : p \neq p^0\}}{L(p^0;x)} = \frac{\max\{L(p;x) : p \in \mathrm{WV}(S)\}}{L(p^0;x)} = \frac{e^{-nH(\hat{p})}}{e^{-n(H(\hat{p})+H(\hat{p}|p^0))}} = e^{nH(\hat{p}|p^0)}.$$

Also verwirft der Likelihood-Quotienten-Test die Nullhypothese, falls

$$H(\hat{p}|p^0) > c$$

für einen geeigneten Schwellenwert $c > 0$ gilt. Man kann zeigen, dass dieser Test asymptotisch optimal ist, siehe [**DemboZeitouni**]. Allerdings ist es schwierig, die Verteilung der relativen Entropie zu berechnen. Als Ausweg bieten sich zwei Optionen an:

- Zum einen kann man statt der relativen Entropie die einfachere Chiquadrat-Divergenz als Teststatistik verwenden. Dann gelangt man zum üblichen *Chiquadrat-Anpassungstest*. Eine gewisse Rechtfertigung dafür liefert die Approximation (3.5) der relativen Entropie durch die Chiquadrat-Divergenz für nahe beieinander liegende Verteilungen.
- Alternativ kann man direkt einen Monte-Carlo-Test verwenden, der auf der relativen Entropie als Teststatistik basiert.

Große Abweichungen für empirische Verteilungen

Mithilfe von Satz 3.11 können wir noch eine stärkere Form der unteren Schranke für große Abweichungen vom Gesetz der großen Zahlen herleiten. Sei dazu ν ein Wahrscheinlichkeitsmaß auf einem metrischen Raum S mit Borelscher σ-Algebra $\mathcal{B}$. Wir nehmen an, dass S separabel ist, also eine abzählbare dichte Teilmenge besitzt. Seien

$$\hat{\nu}_n(\omega) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} \delta_{X_i(\omega)}, \qquad n \in \mathbb{N},$$

die empirischen Verteilungen einer Folge $(X_i)_{i\in\mathbb{N}}$ unabhängiger Zufallsvariablen mit Verteilung ν bzgl. P_ν. Aus dem Gesetz der großen Zahlen folgt, dass die Erwartungswerte einer integrierbaren Funktion $U \in \mathcal{L}^1(\nu)$ bezüglich der zufälligen Maße $\hat{\nu}_n(\omega)$ für fast alle ω gegen die Erwartungswerte bzgl. ν konvergieren:

$$\int U \, d\hat{\nu}_n(\omega) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} U(X_i(\omega)) \longrightarrow \int U \, d\nu \qquad \text{für } P_\nu\text{-fast alle } \omega. \tag{3.17}$$

Die Ausnahmemenge kann dabei aber von der Funktion U abhängen. Da der Raum der stetigen beschränkten Funktionen $U : S \to \mathbb{R}$ im Allgemeinen nicht mehr separabel ist, ist die folgende Erweiterung des Gesetzes der großen Zahlen nicht offensichtlich:

Satz 3.16 (GGZ für empirische Verteilungen; Varadarajan). Ist S separabel, dann konvergieren die empirischen Verteilungen fast sicher schwach gegen ν:

$$\hat{\nu}_n(\omega) \quad \xrightarrow{w} \quad \nu \qquad \text{für } P_\nu\text{-fast alle } \omega. \tag{3.18}$$

Beweis (*Beweisskizze.*). Wir bezeichnen mit $C_{b,L}(S)$ den Raum aller beschränkten, Lipschitz-stetigen Funktionen $U : S \to \mathbb{R}$. Nach Satz **??** genügt es zu zeigen, dass mit Wahrscheinlichkeit 1

$$\int U \, d\hat{\nu}_n(\omega) \longrightarrow \int U \, d\nu \qquad \text{für alle } U \in C_{b,L}(S) \tag{3.19}$$

gilt. Man kann beweisen, dass im Raum $C_{b,L}(S)$ eine *bezüglich der Supremums-Norm* dichte, abzählbare Teilmenge $\{U_k : k \in \mathbb{N}\}$ existiert, wenn S separabel ist, siehe z.B. [Dudley: Real Analysis and Probability]. Aus (3.17) können wir schließen, dass (3.19) außerhalb einer P_ν-Nullmenge N für die Funktionen U_k, $k \in \mathbb{N}$, simultan gilt. Hieraus folgt aber, dass (3.19) für $\omega \notin N$ sogar für alle beschränkten Lipschitz-stetigen Funktionen wahr ist: Ist $U \in C_{b,L}(S)$, dann existiert zu jedem $\varepsilon > 0$ ein $k \in \mathbb{N}$ mit $\sup |U - U_k| \leq \varepsilon$, und damit gilt

$$\limsup_{n\to\infty} \left| \int U \, d\hat{\nu}_n(\omega) - \int U \, d\nu \right| \;\leq\; \limsup_{n\to\infty} \left| \int U_k \, d\hat{\nu}_n(\omega) - \int U_k \, d\nu \right| + 2\varepsilon \;\leq\; 2\varepsilon$$

für alle $\omega \notin N$ und $\varepsilon > 0$. ■

Nach dem Satz konvergiert die Wahrscheinlichkeit $P_\nu[\hat{\nu}_n \notin \mathcal{U}]$ für jede Umgebung $\mathcal{U}$ des Wahrscheinlichkeitsmaßes ν bzgl. der Topologie der schwachen Konvergenz gegen 0. Hierbei ist eine Menge $\mathcal{U}$ von Wahrscheinlichkeitsmaßen *offen*, wenn ihr Komplement $\mathcal{A} = WV(S) \setminus \mathcal{U}$ abgeschlossen ist, also alle schwachen Limiten von Folgen in $\mathcal{A}$ enthält.

Die Konvergenzgeschwindigkeit auf der exponentiellen Skala lässt sich durch ein Prinzip der großen Abweichungen auf dem Raum $\mathrm{WV}(S)$ der Wahrscheinlichkeitsverteilungen auf $(S, \mathcal{B})$ mit der Topologie der schwachen Konvergenz beschreiben:

Satz 3.17 (Sanov). Die empirischen Verteilungen $\hat{\nu}_n = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} \delta_{X_i}$ erfüllen das folgende Prinzip der großen Abweichungen:

(i) *Obere Schranke:* Für jede abgeschlossene Menge $\mathcal{A} \subseteq \mathrm{WV}(S)$ gilt:

$$\limsup_{n\to\infty} \frac{1}{n} \log P_\nu[\hat{\nu}_n \in \mathcal{A}] \quad \leq \quad - \inf_{\mu\in\mathcal{A}} H(\mu \mid \nu).$$

(ii) *Untere Schranke:* Für jede offene Menge $O \subseteq \mathrm{WV}(S)$ gilt:

$$\liminf_{n\to\infty} \frac{1}{n} \log P_\nu[\hat{\nu}_n \in O] \quad \geq \quad - \inf_{\mu\in O} H(\mu \mid \nu).$$

Beweis. (ii) Zum Beweis der unteren Schranke wechseln wir wieder das zugrundeliegende Maß, und wenden Satz 3.11 an. Sei $O \subseteq \mathrm{WV}(S)$ offen und $\mu \in O$. Nach (3.18) ist dann die Folge

$$A_n \quad = \quad \left\{ (x_1, \ldots, x_n) \in S^n \;:\; \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} \delta_{x_i} \in O \right\}$$

wesentlich bzgl. μ, denn

$$\mu^n[A_n] \quad = \quad P_\mu[\hat{\nu}_n \in O] \quad \longrightarrow \quad 1$$

für $n \to \infty$. Daher folgt nach Korollar 3.11(2):

$$\liminf_{n\to\infty} \frac{1}{n} \log P_\nu[\hat{\nu}_n \in O] \quad = \quad \liminf_{n\to\infty} \frac{1}{n} \log \nu^n[A_n] \quad \geq \quad -H(\mu \mid \nu).$$

Die Behauptung ergibt sich, da dies für alle $\mu \in O$ gilt.

(i) Die obere Schranke beweisen wir hier nur für endliche Zustandsräume S, s. z.B. [Dembo, Zeitouni: Large Deviations] für den Beweis im allgemeinen Fall. Ist S endlich, und μ eine bzgl. ν absolutstetige Wahrscheinlichkeitsverteilung mit Dichte $w = d\mu/d\nu$, dann gilt für alle $(x_1, \ldots, x_n) \in S^n$ mit empirischer Verteilung $\frac{1}{n}\sum_{i=1}^n \delta_{x_i} = \mu$:

$$\begin{aligned} \frac{d\mu^n}{d\nu^n}(x_1, \ldots, x_n) &= \prod_{i=1}^n \frac{d\mu}{d\nu}(x_i) \quad = \quad \exp\left(\sum_{i=1}^n \log\left(\frac{d\mu}{d\nu}(x_i)\right)\right) \\ &= \exp\left(n \int \log\left(\frac{d\mu}{d\nu}\right) d\mu\right) \quad = \quad \exp(nH(\mu \mid \nu)). \end{aligned}$$

Damit folgt

$$\begin{aligned} P_\nu[\hat{\nu}_n = \mu] &= \nu^n\left[\left\{(x_1, \ldots, x_n) \,:\, \frac{1}{n}\sum_{i=1}^n \delta_{x_i} = \mu\right\}\right] \\ &= e^{-nH(\mu \mid \nu)} \cdot \mu^n\left[\left\{(x_1, \ldots, x_n) \,:\, \frac{1}{n}\sum_{i=1}^n \delta_{x_i} = \mu\right\}\right] \qquad (3.20) \\ &\leq e^{-nH(\mu \mid \nu)}. \end{aligned}$$

Jeder empirischen Verteilung von n Elementen $x_1, \ldots, x_n \in S$ entspricht ein Histogramm $\vec{h} = (h_a)_{a\in S} \in \{0, 1, \ldots, n\}^S$. Für die Anzahl der möglichen empirischen Verteilungen gilt daher

$$\left|\left\{\frac{1}{n}\sum_{i=1}^n \delta_{x_i} \,:\, (x_1, \ldots, x_n) \in S^n\right\}\right| \quad \leq \quad (n+1)^{|S|}.$$

Nach (3.20) erhalten wir nun für eine beliebige Menge $\mathcal{A} \subseteq \mathrm{WV}(S)$ die (nicht-asymptotische) Abschätzung

$$P_\nu[\hat{\nu}_n \in \mathcal{A}] \quad = \quad \sum_{\mu\in\mathcal{A}} P_\nu[\hat{\nu}_n = \mu] \quad \leq \quad (n+1)^{|S|} \cdot \exp\left(-n \inf_{\mu\in\mathcal{A}} H(\mu \mid \nu)\right),$$

aus der die asymptotische obere Schranke wegen $|S| < \infty$ folgt. ■

Bemerkung. Wie der Beweis schon andeutet, gilt auch die obere Schranke in diesem Fall nur noch asymptotisch und modulo subexponentiell wachsender Faktoren. Der Übergang von endlichen zu allgemeinen Zustandsräumen ist bei der oberen Schranke nicht trivial, s. [Dembo,Zeitouni: Large deviations].

Den Satz von Sanov bezeichnet man gelegentlich auch als ein „Prinzip der großen Abweichungen auf Level II“, d.h. für die empirischen Verteilungen. Wir bemerken abschließend, dass sich eine Version des Satzes von Cramér, d.h. ein „Prinzip der großen Abweichungen auf Level I“ als Spezialfall ergibt:

Für eine stetige beschränkte Funktion $U : S \to \mathbb{R}$ und eine offene Menge $B \subseteq \mathbb{R}$ gilt nach dem Satz von Sanov:

$$P_\nu\left[\frac{1}{n}\sum_{i=1}^n U(X_i) \in B\right] \quad = \quad P_\nu[\hat{\nu}_n \in O] \quad \geq \quad \exp\left(-\inf_{\mu\in O} H(\mu \mid \nu)\right)$$

mit $O = \{\mu \in \mathrm{WV}(S) \,:\, \int U\, d\mu \in B\}$. Entsprechend ergibt sich eine analoge obere Schranke, falls B abgeschlossen ist.

Entropie und Kodierung

Als Spezialfall der Aussagen (1) und (2) in Satz 3.11 erhalten wir, wenn S endlich und ν die Gleichverteilung ist, zwei bekannte Aussagen aus der Informationstheorie: die „asymptotische Gleichverteilungseigenschaft" und den Quellenkodierungssatz von Shannon:

Wir betrachten die *möglichst effiziente Beschreibung/Kodierung einer Zufallsfolge.* Eine unbekannte Signalfolge mit Werten in einer endlichen Menge S (dem zugrundeliegenden „Alphabet") beschreibt man im einfachsten A-Priori-Modell durch unabhängige Zufallsvariablen $X_1, X_2, \ldots$ mit Verteilung μ, wobei $\mu(x)$ die relative Häufigkeit des Buchstabens x in der verwendeten Sprache ist. Eine „perfekte" Kodierung ordnet jedem Wort mit einer vorgegebenen Anzahl n von Buchstaben, also jedem Element des Produktraums S^n, eine Binärfolge zu. Will man alle Wörter mit n Buchstaben perfekt kodieren, werden $n \cdot \log_2 |S|$ Bits benötigt. Wir betrachten stattdessen „effiziente" Kodierungen, die nur den „meisten" Wörtern mit n Buchstaben eindeutig eine Binärfolge zuordnen.

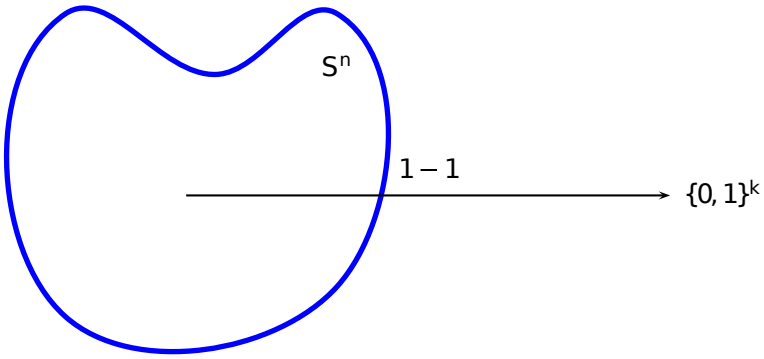


Abbildung 3.2.: Perfekte Kodierung

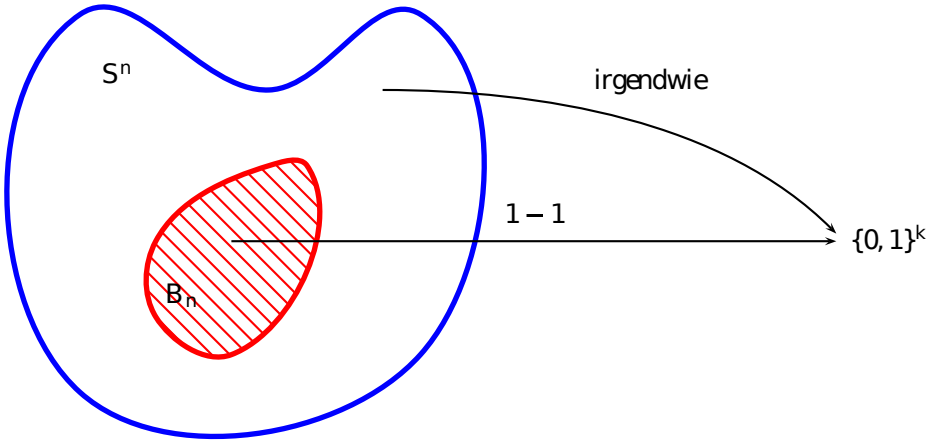


Abbildung 3.3.: Effiziente Kodierung bzgl. einer Folge von wesentlichen Mengen B_n.

Sei $p_n(x_1, \ldots, x_n) = \prod_{i=1}^n \mu(x_i)$ die A-Priori-Wahrscheinlichkeit von $(x_1, \ldots, x_n)$ unter dem Produktmaß μ^n. Wählen wir für ν die Gleichverteilung auf S, dann gilt

$$|A_n| \;=\; \nu^n[A_n] \cdot |S|^n \qquad \text{für alle Mengen } A_n \subseteq S^n,\ n \in \mathbb{N}.$$

Damit können wir die Aussage von Satz 3.11 (1) folgendermaßen umformulieren:

Korollar 3.18 (Asymptotische Gleichverteilungseigenschaft). Für jedes $\varepsilon > 0$ ist die Folge

$$B_{n,\varepsilon} := \left\{(x_1, ...x_n) \in S^n : e^{-n(H(\mu)+\varepsilon)} \leq p_n(x_1, ..., x_n) \leq e^{-n(H(\mu)-\varepsilon)}\right\}, \qquad n \in \mathbb{N},$$

wesentlich bzgl. μ, und es gilt

$$|B_{n,\varepsilon}| \leq e^{n(H(\mu)+\varepsilon)} \qquad \text{für alle } n \in \mathbb{N}.$$

Beweis. Die Aussage folgt aus Satz 3.11 (1) wegen $H(\mu|\nu) = \log|S| - H(\mu)$ und $d\mu^n/d\nu^n = |S|^n \cdot p_n$. ■

Die asymptotische Gleichverteilungseigenschaft zeigt, dass Folgen von wesentlichen Mengen existieren, deren Mächtigkeit auf der exponentiellen Skala nicht viel schneller als $\exp(n \cdot H(\mu))$ wächst.

Wieviele Elemente enthalten wesentliche Mengen mindestens ? Für $p \in (0, 1)$ sei

$$K(n, p) = \inf\{|A_n| : A_n \subseteq S^n \text{ mit } P[(X_1, ..., X_n) \in A_n] \geq p\}$$

die mindestens benötigte Anzahl von Wörtern, um den Text $(X_1, ..., X_n)$ mit Wahrscheinlichkeit $\geq p$ korrekt zu erfassen. Dann ist $\log_2 K(n, p)$ die für eine korrekte binäre Kodierung von $(X_1, ..., X_n)$ mit Wahrscheinlichkeit $\geq p$ mindestens benötigte Anzahl von Bits. Aus dem zweiten Teil von Satz 3.11 ergibt sich:

Korollar 3.19 (Quellenkodierungssatz von Shannon). Für alle $p \in (0, 1)$ gilt:

$$\begin{aligned}\lim_{n\to\infty} \frac{1}{n} \log K(n, p) &= H(\mu), \quad \text{bzw.} \\ \lim_{n\to\infty} \frac{1}{n} \log_2 K(n, p) &= H_2(\mu) := -\sum_{x:\mu(x)\neq 0} \mu(x) \log_2 \mu(x).\end{aligned}$$

Insbesondere gilt: Ist A_n $(n \in \mathbb{N})$ wesentlich bzgl. μ, so ist $|A_n| \succeq \exp(nH(\mu))$.

Die Größe $\frac{1}{n} \log_2 K(n, p)$ kann als die für eine mit Wahrscheinlichkeit $\geq p$ korrekte Kodierung benötigte Zahl von Bits pro gesendetem Buchstaben interpretiert werden.

Bemerkung. Der Quellenkodierungssatz zeigt, dass es keine Folge von wesentlichen Mengen gibt, die auf der exponentiellen Skala deutlich langsamer wächst als die in Korollar 3.18 angegebenen Folgen $B_{n,\varepsilon}$ $(n \in \mathbb{N})$.

Beweis. Die Aussage ergibt sich wieder als Spezialfall von Satz 3.11 wenn wir $\nu = \text{Unif}_S$ setzen:

Obere Schranke: $\limsup \frac{1}{n} \log K(n, p) \leq H(\mu)$:

Sei $\varepsilon > 0$. Nach Korollar 3.18 erfüllt die dort konstruierte Folge $B_{n,\varepsilon}$ $(n \in \mathbb{N})$ die Bedingung

$$\lim_{n\to\infty} P[(X_1, ..., X_n) \in B_{n,\varepsilon}] = 1 > p,$$

und es gilt $\frac{1}{n} \log|B_{n,\varepsilon}| \leq H(\mu) + \varepsilon$. Damit folgt

$$\limsup_{n\to\infty} \frac{1}{n} \log K(n, p) \leq \limsup_{n\to\infty} \frac{1}{n} \log|B_{n,\varepsilon}| \leq H(\mu) + \varepsilon.$$

■

Die Behauptung ergibt sich für $\varepsilon \to 0$.

Untere Schranke: $\liminf \frac{1}{n} \log K(n,p) \geq H(\mu)$:

Für Mengen $A_n \subseteq S^n$ mit $P[(X_1,...,X_n) \in A_n] \geq p$ gilt nach Satz 3.11 (2):

$$\liminf_{n\to\infty} \frac{1}{n} \log |A_n| \;=\; \liminf_{n\to\infty} \frac{1}{n} \log \left(\nu^n(A_n) \cdot S^n\right) \;\geq\; \log|S| - H(\mu|\nu) \;=\; H(\mu).$$

Entropie von Markovketten

Sei $p(x,y)$ $(x,y \in S)$ eine stochastische Matrix auf einer endlichen Menge S mit Gleichgewichtsverteilung $\nu \in WV(S)$, d.h. für alle $y \in S$ gelte

$$\sum_{x\in S} \nu(x)\, p(x,y) \quad = \quad \nu(y). \tag{3.21}$$

Der folgende wichtige Satz zeigt, dass die relative Entropie $H(\mu p^n|\nu)$ der Verteilung zur Zeit n einer Markovkette mit Startverteilung μ und Übergangsmatrix p bezüglich des Gleichgewichts ν monoton fällt:

Satz 3.20 (Abfall der relativen Entropie). Ist p eine stochastische Matrix auf S und ν ein Gleichgewicht von p, dann gilt für jede Wahrscheinlichkeitsverteilung μ auf S:

$$H(\mu p|\nu) \quad \leq \quad H(\mu|\nu)\,. \tag{3.22}$$

Insbesondere ist $n \mapsto H(\mu p^n|\nu)$ stets monoton fallend.

Beweis. Ist μ nicht absolutstetig bezüglich ν, dann ist die Aussage (3.22) automatisch erfüllt. Andernfalls sei w eine Version der relativen Dichte $d\mu/d\nu$. Dann gilt

$$(\mu p)(y) \;=\; \sum_{x\in S} \mu(x)\, p(x,y) \;=\; \sum_{x\in S} w(x)\, \nu(x)\, p(x,y). \tag{3.23}$$

Aus der Gleichgewichtsbedingung (3.21) folgt $\nu(x)p(x,y) \leq \nu(y)$ für alle $x,y \in S$. Also ist auch μp absolutstetig bzgl. ν, mit relativer Dichte

$$\frac{(\mu p)(y)}{\nu(y)} \;=\; \sum_{x\in S} w(x)\, \frac{\nu(x)\, p(x,y)}{\nu(y)}. \tag{3.24}$$

Aus der Gleichgewichtsbedingung folgt auch, dass $x \mapsto \nu(x)p(x,y)/\nu(y)$ die Massenfunktion einer Wahrscheinlichkeitsverteilung auf S ist. Darum können wir die Jensensche Ungleichung auf die konvexe Funktion $u(x) = x \log_+ x$ anwenden, und erhalten

$$u\left(\sum_{x\in S} w(x)\, \frac{\nu(x)\, p(x,y)}{\nu(y)}\right) \quad \leq \quad \sum_{x\in S} u(w(x))\, \frac{\nu(x)\, p(x,y)}{\nu(y)}.$$

Zusammen mit (3.24) ergibt sich

$$\begin{aligned} H(\mu p|\nu) \;&=\; \sum_{y:\nu(y)\neq 0} u\left(\sum_{x\in S} w(x)\, \nu(x)\, p(x,y)/\nu(y)\right) \nu(y) \\ &\leq\; \sum_{y\in S}\sum_{x\in S} u(w(x))\, \nu(x)\, p(x,y) \\ &=\; \sum_{x\in S} u(w(x))\, \nu(x) \quad = \quad H(\mu|\nu). \end{aligned}$$

■

Bemerkung (Zunahme der Entropie; thermodynamische Irreversibilität). Als Spezialfall ergibt sich wegen $H(\mu) = \log|S| - H(\mu|\nu)$ die Aussage, dass die Entropie $H(\mu p^n)$ der Verteilung einer Markovkette zur Zeit n monoton wächst, falls der Zustandsraum endlich und die Gleichverteilung ν ein Gleichgewicht ist. In der Interpretation der statistischen Physik geht die zeitliche Entwicklung auf makroskopischer Ebene (Thermodynamik) von einem geordneten hin zu einem ungeordneten Zustand mit (lokal) maximaler Entropie (»thermodynamische Irreversibilität«). Trotzdem ist auf mikroskopischer Ebene die Dynamik rekurrent, d.h. jeder Zustand $x \in S$ wird von der Markovkette mit Wahrscheinlichkeit 1 unendlich oft besucht – dies dauert nur eventuell astronomisch lange. Die Einführung eines Markov-Modells durch die österreichischen Physiker Tatjana und Paul Ehrenfest konnte eine entsprechende Kontroverse von Zermelo („Dynamik kehrt immer wieder zurück“) und Boltzmann („soll solange warten“) lösen.

> **Beispiel (Irrfahrten).** Ist p die Übergangsmatrix eines symmetrischen Random Walks auf dem diskreten Kreis $\mathbb{Z}_k = \mathbb{Z}/(k\mathbb{Z})$, der symmetrischen Gruppe S_n („Mischen eines Kartenspiels“), oder dem diskreten Hyperwürfel $\{0,1\}^n$ („Ehrenfest-Modell“), dann ist die Gleichverteilung ein Gleichgewicht, und die Entropie wächst monoton.

4. Empirische Verteilungen

Sei μ eine unbekannte Wahrscheinlichkeitsverteilung auf S mit einem messbaren Raum $(S, \mathcal{B})$. Wir arbeiten abermals mit einer endlichen Stichprobe $X_1, \ldots, X_n$ von Zufallsvariablen, welche unter $\mathbb{P}_\mu$ unabhängig und identisch zu μ verteilt sind. Wir betrachten die *empirische Verteilung* der Stichproben, gegeben durch:

$$L_n(\omega) := \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} \delta_{X_i(\omega)} \qquad L_n(B) = \frac{1}{n} \overbrace{\sum_{i=1}^{n} 1_{\{X_i \in B\}}}^{H_n(B)}$$

welche die relative Häufigkeit von Werten der Stichproben in der Menge B angibt. Hierbei definieren wir wie angezeigt die absoluten Häufigkeiten durch $H_n(B)$. Für eine Abbildung $f : S \to \mathbb{R}$ erhalten wir somit den empirischen Mittelwert von f:

$$\int f \, dL_n = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} f(X_i)$$

Die empirische Verteilung L_n ist eine *zufällige Wahrscheinlichkeitsverteilung*, das heißt, L_n ist eine Zufallsvariable mit Werten im Raum der Wahrscheinlichkeitsverteilungen auf S.

Die empirische Verteilung ist gegeben durch $L_n = \frac{1}{n} H_n$. Um also die Verteilung der empirischen Verteilung zu bestimmen, betrachten wir H_n. Für eine feste Menge $B \in \mathcal{B}$ gilt:

$$H_n(B) \quad \sim \quad \mathrm{Bin}(n, \mu(B))$$

Allgemeiner gilt für jede disjunkte Zerlegung $S = B_1 \cup B_2 \cup \cdots \cup B_k$ mit $B_i \in \mathcal{B}$:

$$(H_n(B_1), H_n(B_2), \ldots, H_n(B_k)) \quad \sim \quad \mathrm{Mult}(n, \mu(B_1), \ldots, \mu(B_k))$$

Somit erhalten wir für $h \in \mathbb{N}^k$ mit $\sum h_l = n$, dass gilt

$$\mathbb{P}_\mu[H_n(B_l) = h_l \quad \forall\, l = 1, \ldots, k] = \frac{n!}{h_1! h_2! \cdot \cdots \cdot h_k!} \prod_{l=1}^{k} \mu(B_l)^{h_l}$$

Hierdurch ist die Verteilung der maß-wertigen Zufallsvariablen H_n und $L_n = \frac{1}{n} H_n$ eindeutig festgelegt.

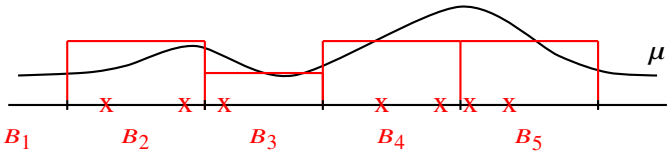


Abbildung 4.1.: Histogramm der Bins $B_1, ..., B_5$

Die empirische Verteilung können wir als Schätzer für die unbekannte Wahrscheinlichkeitsverteilung μ verwenden:

$$\hat{\mu}_n := L_n = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} \delta_{X_i}$$

Wegen $L_n(B) = \frac{1}{n}\sum_1^n 1_B(X_i)$ gilt für $B \in \mathcal{B}$:

$$\begin{aligned}
\mathbb{E}_\mu[L_n(B)] &= \mu(B) && \text{erwartungstreu} \\
\mathrm{Var}_\mu[L_n(B)] &= \frac{\mu(B)(1-\mu(B))}{n} \leq \frac{1}{4n} \\
\mathbb{P}_\mu[|L_n(B) - \mu(B) \geq \varepsilon] &\leq 2e^{-2\varepsilon^2 n} && \text{für alle } \varepsilon > 0
\end{aligned}$$

Die Abschätzung der Varianz folgt nach der Bernstein-Ungleichung, siehe Stochastik bzw. Algorithmische Mathematik 2.

Gesetz der großen Zahlen

Nach dem Gesetz der großen Zahlen folgt die fast sichere Konvergenz der empirischen Verteilung zur unbekannten μ. Also:

$$L_n(B) \overset{n\uparrow\infty}{\to} \mu(B) \qquad \mathbb{P}_\mu\text{-fast sicher für alle } B \in \mathcal{B}$$

Eine wichtige Frage ist, ob man die Annahmemenge unabhängig von B wählen kann. Im Allgemeinen gilt die Aussage jedoch nicht. Wenn die Anzahl der Teilmengen von S endlich ist, kann man die Annahmemenge unabhängig wählen, da es nur endlich viele Teilmengen gibt, für die die Konvergenz zu überprüfen ist. Für den allgemeinen Fall gibt es jedoch eine schwächere Aussage:

Satz 4.1 (Varadarajan). Ist S separabel und $\mathcal{B} = \mathcal{B}(S)$ die Borelsche σ-Algebra, dann gilt:

$$\mathbb{P}_\mu[L_n \overset{w}{\to} \mu] = 1$$

Eine Menge ist separabel, falls es eine abzählbare Teilmenge gibt, welche dicht in der Menge selbst ist.

Bemerkung. Erinnerung: Schwache Konvergenz von Wahrscheinlichkeitsverteilungen Nach dem Portmanteau-Theorem (siehe Einführung in die Wahrscheinlichkeitstheorie) gelten die folgenden Äquivalenzen:

$$\begin{aligned}
L_n \overset{w}{\to} \mu \Leftrightarrow \int f\, dL_n = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^n f(X_i) \quad &\to \quad \int f\, d\mu && \text{für alle } f \in C_b(S) \\
\Leftrightarrow L_n(B) &\to \mu(B) && \text{für alle } B \text{ mit } \mu(\partial B) = 0
\end{aligned}$$

Beweis. Nach dem Portmanteau-Theorem genügt es zu zeigen, dass $\mathbb{P}_\mu$-fast sicher gilt:

$$\int f\, dL_n \to \int f\, d\mu \qquad \text{für alle } f \in C_{b,L}(S) \tag{*}$$

wobei $C_{b,L}(S)$ die beschränkten lipschitzstetigen Funktionen enthält, siehe Einführung in die Wahrscheinlichkeitstheorie. Zudem gilt:

$$S \text{ separabel} \Rightarrow \exists \text{ abzählbare Teilmenge } A \subseteq C_{b,L}, \text{ die dicht bzgl. der Supremumsnorm ist.}$$

Nach dem Gesetz der großen Zahlen gilt $\mathbb{P}_\mu$-fast sicher:

$$\int f\, dL_n \to \int f\, d\mu \text{ für alle } f \in A$$

denn die Vereinigung von abzählbar vielen Nullmengen ist wieder eine Nullmenge. Sei nun $f \in C_{b,L}(S)$ und $\varepsilon > 0$. Dann existiert $\widetilde{f} \in A$ mit $||f - \widetilde{f}||_{\sup} \leq \varepsilon/2$. Damit folgt:

$$\left|\int f\,dL_n - \int f\,d\mu\right| \leq \underbrace{\left|\int f\,dL_n - \int \widetilde{f}\,dL_n\right|}_{\leq ||f-\widetilde{f}||_{\sup} \leq \frac{\varepsilon}{2}} + \underbrace{\left|\int \widetilde{f}\,dL_n - \int \widetilde{f}\,d\mu\right|}_{\to 0} + \underbrace{\left|\int \widetilde{f}\,d\mu - \int f\,d\mu\right|}_{\leq \frac{\varepsilon}{2}}$$

also $\limsup_{n\to\infty} |\int f\,dL_n - \int f\,d\mu| \leq \varepsilon$ $\mathbb{P}_\mu$-fast sicher. Die Behauptung $(*)$ folgt dann für $\varepsilon = 1/k$ gegen 0. ■

Bemerkung. Für $S = \mathbb{R}$ gilt eine stärkere, nicht asymptotische Abschätzung (Dvoretzky-Kiefer-Wolfowitz-Ungleichung):

$$\mathbb{P}_\mu\left[\sup_{c\in\mathbb{R}} |L_n((-\infty, c]) - \mu((-\infty, c])| \geq \varepsilon\right] \leq 2e^{-2\varepsilon^2 n}$$

für alle $n \in \mathbb{N}$ und $\varepsilon > 0$, siehe Abschnitt 4.3.

4.1. Plug-in-Schätzer und Bootstrap

Das folgende Kapitel basiert zum großen Teil auf den Kapiteln 7 und 8 des Buches "All of Statistics" von L. Wasserman.

Definition 4.2. 1) Ein *statistisches Funktional* ist eine Abbildung

$$g : \mathcal{P} \to \mathbb{R}, \mu \mapsto g(\mu)$$

wobei $\mathcal{P}$ eine Teilmenge der Menge $WV(S)$ der Wahrscheinlichkeitsverteilungen auf $(S, \mathcal{B}(S))$ ist.

2) Die Statistik $\hat{g}_n := g(L_n)$ heißt *Plug-in-Schätzer* für $g(\mu)$.

Wir haben bereits einige statistische Funktionale bzw. Plug-in-Schätzer gesehen. Im Folgenden werden wir noch einige weitere betrachten.

Beispiele. Lineare Funktionale

a) Wir sehen, dass das Auswerten an einer Menge $B \in \mathcal{B}$ ein lineares Funktional liefert:

$$g(\mu) = \mu(B) \qquad : \qquad \hat{g}_n = L_n(B) = \frac{1}{n} H_n(B)$$

Wie oben ist hierbei H_n die Häufigkeit der Werte von X_i in B.

b) Analog gibt der Erwartungswert einer Funktion f unter μ ein lineares Funktional:

$$g(\mu) = \int f\,d\mu \qquad : \qquad \hat{g}_n = \int f\,dL_n = \frac{1}{n}\sum_1^n f(X_i)$$

Numerische Merkmale In den folgenden Fällen sei $S = \mathbb{R}$.

a) Der bereits bekannte Mittelwert $\overline{X}_n$ ist auch Pulg- in Schätzer

$$m(\mu) = \int x\,d\mu \qquad : \qquad \hat{m}_n = \overline{X}_n$$

b) Auch die Standardabweichung können wir als Funktional betrachten:

$$\sigma(\mu) = \sqrt{\int (x - m(\mu))^2 \, d\mu} \qquad : \qquad \hat{\sigma}_n = \sqrt{\frac{1}{n}\sum_1^n (X_i - \overline{X}_n)^2}$$

c) Das statistische Funktional $K(\mu)$ heißt *Schiefe* der Verteilung μ. Die Schiefe ist ein Maß für die Asymmetrie der Verteilung. Sie ist gegeben durch:

$$K(\mu) = \left(\int (x - m(\mu))^3 \, d\mu\right) \,/\, \sigma(\mu)^3 \qquad : \qquad \hat{K}_n = \frac{1}{n}\left(\sum_1^n (X_i - \overline{X}_n)^3\right) \,/\, \hat{\sigma}_n^3$$

d) Wir können auch die Verteilungsfunktion, ausgewertet an einem Wert $c \in \mathbb{R}$, als statistisches Funktional betrachten:

$$F_\mu(c) = \mu((-\infty, c)) \qquad : \qquad \hat{F}_n(c) = L_n((-\infty, c]) = |\{i \le n \,:\, X_i \le c\}|/n$$

$\hat{F}_n$ heißt *empirische Verteilungsfunktion*. Die empirische Verteilungsfunktion ist stückweise konstant mit Sprüngen an den Stellen $X_1, \ldots, X_n$.

e) Auch die verallgemeinerten Inversen können wir als statistische Funktionale betrachten.

$$\underline{q}_\alpha(\mu) = \underline{G}_\mu(\alpha) \qquad : \qquad \hat{\underline{q}}_{\alpha,n} = \underline{G}_{L_n}(\alpha) = \inf\{x \,:\, \hat{F}_n(x) \ge \alpha\}$$

Sind $X_{(1)} \le X_{(2)} \le \ldots \le X_{(n)}$ die Ordnungsstatistiken, also die der Reihe nach geordneten Werte $X_1, \ldots, X_n$, dann gilt:

$$\hat{\underline{q}}_{a,n} = X_{(\lceil n\alpha \rceil)} \qquad \text{das untere Stichprobenquantil}$$

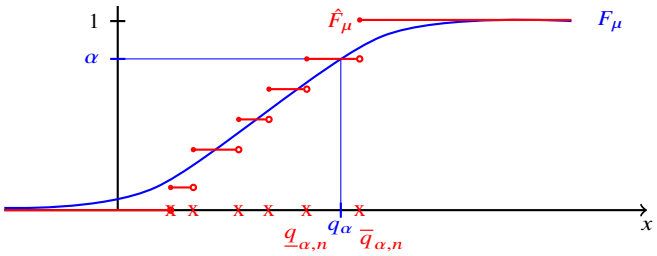
Entsprechend können wir die oberen Quantile betrachten:

$$\overline{q}_\alpha(\mu) = \overline{G}_\mu(\alpha) \qquad : \qquad \hat{\overline{q}}_{\alpha,n} = \overline{G}_{L_n}(\alpha) = \sup\{x : \hat{F}_n(x) \le \alpha\}, \quad \hat{\overline{q}}_{\alpha,n} = X_{(\lfloor n\alpha+1 \rfloor)}$$

Mit dem gegeben oberen Stichprobenquantil. Als (zentrales) Stichprobenquantil definieren wir

$$q_\alpha(\mu) = \frac{\overline{q}_\alpha(\mu) + \underline{q}_\alpha(\mu)}{2} \qquad : \qquad \hat{q}_{\alpha,n} = \frac{X_{(\lfloor n\alpha+1 \rfloor)} + X_{(\lceil n\alpha \rceil)}}{2}$$

Insbesondere erhalten wir für $\alpha = 1/2$ den Median.



Als graphische Darstellung verwendet man häufig einen *Boxplot*, in dem die Quantile $\hat{q}_{1/4}, \hat{q}_{1/2}, \hat{q}_{3/4}$ sowei die Extremwerte aufgetragen sind:

Zusammenhang zweier numerischer Merkmale In den folgenen Beispielen sei $S = \mathbb{R}^2$, mit den zwei Stichproben $X_1, ..., X_n$ und $Y_1, ..., Y_n$ welche μ verteilt und jeweils unabhängig sind unter $\mathbb{P}_\mu$.

a) Dann können wir die Kovarianz betrachen

$$c(\mu) = \int (x - \int x \, d\mu)(y - \int y \, d\mu) \; d\mu \qquad : \qquad \hat{c}_n = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^n (X_i - \overline{X}_n)(Y_i - \overline{Y}_n)$$

Welche uns die empirische Kovarianz als Plug-in Schätzer liefert.

b) Analog ergibt sich er Korrelationskoeffizient.

$$\varrho(\mu) = \frac{c(\mu)}{\sigma_X(\mu)\sigma_Y(\mu)} \qquad : \qquad \hat{\varrho}_n = \frac{\hat{c}_n}{\hat{\sigma}_{X,n} \cdot \hat{\sigma}_{Y,n}}$$

Insbesondere folgt nach Cauchy-Schwart, dass gilt $\varrho(\mu) \in [-1, 1]$.

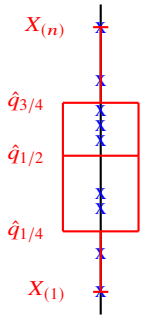


Abbildung 4.2.: Boxplot einer empirischen Verteilung auf $\mathbb{R}$

Bootstrap

Die nun betrachtete Bootstrap-Methode geht auf den US-amerikanischen Statistiker B. Efron zurück (1979). Der Name der Methode entstammt dem englischen Spruch Pulling yourself up by your own bootstraps", was auf Deutsch so viel heißt wie SSich am eigenen Schopf aus dem Sumpf ziehen".

Sei $\hat{g}_n = g(L_n)$ ein Plug-in-Schätzer. Wir wollen die Varianz von $\hat{g}_n$ bestimmen und basierend auf $\hat{g}_n$ Konfidenzintervalle für $g(\mu)$ angeben. Diese ist aber nicht bekannt, da wir die zugrundeliegende Wahrscheinlichkeitsverteilung μ nicht kennen. Die grundlegende Idee des Bootstrap-Verfahrens ist, dass die empirische Verteilung L_n unter geeigneten Voraussetzungen für große n eine hinreichend gute Approximation der unbekannten Verteilung μ liefern sollte. Wir beginnen mit zwei einfachen Fällen:

Beispiele (Lineare Funktionale).

a) Für $g(\mu) = \mu(B)$ ist der Plug-in-Schätzer die relative Häufigkeit $\hat{g}_n = L_n(B) = H_n(B)/n$. Die absolute Häufigkeit $H_n(B)$ ist eine binomialverteilte Zufallsvariable mit Parametern n und $\mu(B)$. Daher können wir die in Kapitel 1 hergeleiteten Konfidenzintervalle für das Binomialmodell verwenden (z.B. exaktes Konfidenzintervall, Wilson, Wald). Die auf der Normalapproximation basierenden Wald-Intervalle haben die Form $\hat{g}_n \pm (\Phi^{-1}(1-\alpha/2)\hat{\sigma}_n)/\sqrt{n}$, wobei $\hat{\sigma}_n = \sqrt{\hat{g}_n(1-\hat{g}_n)}$ mit dem Plug-in-Schätzer für die Standardabweichung übereinstimmt.

b) Für $g(\mu) = \int f \, d\mu$ ist $\hat{g}_n = \frac{1}{n}\sum f(X_i)$ der Plug-in-Schätzer. Die Standardabweichung von $\hat{g}_n$ unter $\mathbb{P}_n$ ist

$$\sigma(\hat{g}_n) = \frac{1}{\sqrt{n}\sigma_\mu(f)}$$

Da wir μ nicht kennen, können wir $\sigma_\mu(f)$ nicht berechnen. Stattdessen approximieren wir μ durch die empirische Verteilung L_n und erhalten:

$$\sigma_\mu(f)^2 \approx \sigma_{L_n}(f)^2 = \int (f - \hat{g}_n)^2 \, dL_n = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(f(X_i) - \hat{g}_n)^2$$

Wenn die Voraussetzungen des zentralen Grenzwertsatzes erfüllt sind, dann erhalten wir approximative Konfidenzintervalle

$$\hat{g}_n \pm \frac{\Phi^{-1}(1-\frac{\alpha}{2})\sigma_{L_n}(f)}{\sqrt{n}}$$

für $g(\mu)$. Möglicherweise sind diese aufgrund der verwendeten Approximation allerdings ungenau.

Für nicht-lineare Funktionale $g(\mu)$ gibt es keine so elementare Schätzmethode für die Varianz und die Verteilung von $\hat{g}_n$. Eine erste Idee wäre, ein Monte Carlo Verfahren zu verwenden:
Angenommen, wir können viele unabhängige Kopien $X^{(1)}, X^{(2)}, ..., X^{(B)}$ von der Stichprobe $X = (X_1, ..., X_n)$

erzeugen. Jede dieser Kopien wäre also ein Datenvektor mit n Komponenten: $X^{(b)} = (X_1^{(b)}, ..., X_n^{(b)})$. Dann würde nach dem Gesetz der großen Zahlen und den entsprechenden Fehlerabschätzungen gelten:

$$F(c) = \quad \mathbb{P}_\mu[\hat{g}_n \le c] \approx \frac{1}{B}\sum_{i=1}^{B} 1_{\hat{g}_n^{(b)} \le c} \quad =: \hat{F}_B(c) \tag{*}$$

$$\mathbb{P}_\mu \circ \hat{g}_n^{-1} \approx \frac{1}{B}\sum_{i=1}^{B} \delta_{\hat{g}_n^{(b)}} \quad =: L_n^B \tag{**}$$

$$\mathrm{Var}_\mu[\hat{g}_n] \approx \frac{1}{B-1}\sum_{b=1}^{B}\left(\hat{g}_n^{(b)} - \frac{1}{B}\sum_{r=1}^{B}\hat{g}_n^{(r)}\right)^2 \quad =: V_B \tag{***}$$

Zum Beispiel würde die Bernstein-Ungleichung eine sehr gute Fehlerabschätzung für die Monte-Carlo-Approximation in $(*)$ liefern. Wir stoßen jedoch auf das Problem, dass wir nur eine Stichprobe $(X_1, ..., X_n)$ haben.

Bootstrap-Idee: Falls n groß genug ist, folgt $\mu \approx L_n$ mit großer Wahrscheinlichkeit. Anstatt unabhängige Stichproben von μ zu erzeugen, simulieren wir *gegeben den Wert von X* (bedingt) unabhängige Stichproben

$$X^{(1)} = (X_1^{(1)}, ..., X_n^{(1)}), ..., X^{(B)} = (X_1^{(B)}, ..., X_n^{(B)}) \quad \sim \quad \bigotimes_{i=1}^{n} L_n$$

durch Ziehen mit Zurücklegen von der empirischen Verteilung L_n, und schätzen

$$F(c) = \mathbb{P}_\mu[\hat{g}_n \le c] \approx \mathbb{P}_{L_n}[\hat{g}_n \le c] \approx \frac{1}{B}\sum_{b=1}^{B} 1_{\hat{g}_n^{(b)} \le c} \quad =: \hat{F}_B(c)$$

Wir wollen die beschriebenen Schritte im Folgenden konkretisieren.

Bootstrap-Verfahren

Gegeben einer Stichprobe X erhalten wir die empirische Verteilung L_n.

1) Erzeuge unabhängige Stichproben $X_i^{(b)} \sim L_n$ mit $1 \le b \le B, 1 \le i \le n$.
2) Berechne $\hat{g}_n^{(b)} = g(L_n^{(b)}), L_n^{(b)} = 1/n \cdot \sum_i \delta_{X_i^{(b)}}$, für $b = 1, ..., B$.
3) Schätze Verteilung bzw. Varianz von $\hat{g}_n$ durch $(*), (**), (***)$.

Die erzeugten Stichproben heißen *Bootstrap-Stichproben* $X^* = (X_1^*, ..., X_n^*)$. Bezüglich der bedingten Verteilungen gegeben X sind $X_1^*, ..., X_n^*$ unabhängig mit Verteilung L_n. Wir können die Stichproben explizit konstruieren durch eine Simulation von Ziehen mit Zurücklegen:

$$X_j^* = X_{I_j}, \quad \text{wobei } I_1, ..., I_n \text{ unabhängig gleichverteilt sind auf } \{1, ..., n\}$$

Analog zu oben erhalten wir $\hat{g}_n^* = g(L_n)$ mit $L_n^* = \frac{1}{n}\sum \delta_{X_i^*}$.

Schätzen der Verteilung von $\hat{g}_N$ Seien $X^{(b)} = (X_1(b), ..., X_n^{(b)}), b = 1, ..., B$ unabhängige (beding X) Bootstrap-Stichproben mit

$$\hat{g}_n^{(b)} = g(L_n^{(b)}), \qquad L_n^{(b)} = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} \delta_{X_i^{(b)}}$$

Unter $\mathbb{P}_\mu$ hat $\hat{g}_n$ durch Bootstrap-Approximation die Verteilung $\approx \frac{1}{B}\sum_{b=1}^{B} \delta_{\hat{g}_n^{(B)}}$ auch Bootstrap Verteilung. Analog erhatlen wir

$$F(c) \approx \hat{F}_B(c) = \frac{1}{B}\sum_{b=1}^{B} 1_{\hat{g}_n^{(b)} \le c}$$

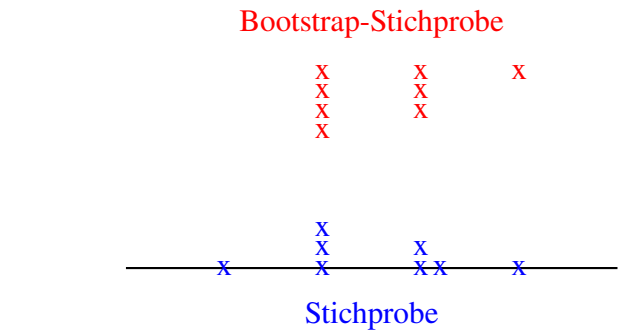


Abbildung 4.3.: Multinomiales Resampling

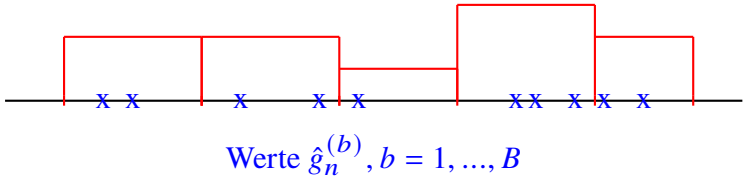


Abbildung 4.4.: Histogramm der Bootstrap Verteilung

Graphische Darstellung der Bootstrap-Verteilung über ein Histogramm:

Heuristische Rechtfertigung des Bootstrap-Verfahrens Im Folgenden wollen wir eine praktikable Anschauung über die Sinnhaftigkeit der Methoden des Bootstrap-Verfahrens geben. Hierfür betrachten wir die folgenden Approximationen

$$\hat{F}_B(c) \overset{①}{\approx} \mathbb{P}_\mu \left[\hat{g}_n^* \leq c | X\right] \overset{②}{=} \mathbb{P}_{L_n} \left[g(L_n) \leq c\right] \overset{③}{\approx} \mathbb{P}_\mu \left[g(L_n) \leq c\right] = F(c)$$

① Dieser Schritt erfolgt durch klassische Monte-Carlo-Approximation. Dies ist in Ordnung, da $\hat{g}_n^{(b)}$ bedingt X unabhängig sind mit Verteilung $\hat{g}_n^* = g(L_n^*)$. Insbesondere erhalten wir eine präzise Fehlerabschätzung über die Bernstein-Ungleichung.

② Diese Gleichung stimmt, da L_n^* die empirische Verteilung von $X_1^*, ..., X_n^*$ ist, und die X_i^* unter der bedingten Verteilung gegeben X unabhängig sind mit Verteilung L_n.

③ Dies ist der problematische Schritt. Denn dann ist für

$$\phi_n(\mu) := \mathbb{P}_\mu \left[g(L_n) \leq c\right] \quad \text{zu zeigen, dass} \quad \phi_n(L_n) \approx \phi_n(\mu)$$

für n ausreichend groß. Diese Approximation ist nicht trivial und kann auch schiefgehen, siehe Beispiel unten. Würde ϕ_n nicht explizit von n abhängen, dann würde es ausreichen, dass L_n in einer gewissen Topologie gegen μ konvergiert und ϕ in dieser Topologie stetig ist. Da ϕ_n aber auch von n abhängt, benötigt man eine kompliziertere Approximation zur Rechtfertigung. Zum Beispiel:

$$\phi_n(\mu) \approx \phi_\infty(\mu) \approx \phi_\infty(L_n) \approx \phi_n(L_n)$$

Eine solche Schlussweise ist anwendbar, wenn folgende Bedingungen bezüglich eines geeigneten Konvergenzbegriffs erfüllt sind:

1. $L_n \to \mu$ 2. $\phi_n \to \phi_\infty$ gleichmäßig in der Umgebung von μ 3. ϕ_∞ stetig

siehe zum Beispiel "Davidson, Hinkley: Bootstrap methods and their applications."Betrachten wir nun ein Beispiel, in dem dieser Schritt schiefgeht.

Beispiel. Seien $X_1, ..., X_n$ unabhängig mit Verteilung $\mathrm{Unif}(0, \vartheta)$. Der MLE für ϑ ist $\hat{\vartheta}_n = \max(X_1, ..., X_n)$, siehe oben. Wir können die exakte Verteilung von $\hat{\vartheta}_n$ berechnen:

$$\mathbb{P}_\vartheta\left[\hat{\vartheta}_n \le \left(1 - \frac{c}{n}\right)\vartheta\right] = \left(1 - \frac{c}{n}\right)^n \sim e^{-c} \quad \text{für alle } c > 0$$

Insbesondere hat $\hat{\vartheta}_n$ eine absolutstetige Verteilung, genauer nähert sich die Verteilung von $n(1 - \hat{\vartheta}_n)$ für n gegen unendlich einer EXP(1)-Verteilung an.

Sei nun $(x_1, ..., x_n)$ eine feste Realisierung von X mit $x_i \neq x_j$ für alle $i \neq j$. Dann gilt für die exakte Bootstrap-Verteilung:

$$\mathbb{P}_{L_n}[\hat{\vartheta}_n = x_{(n)}] = 1 - \left(1 - \frac{1}{n}\right)^n \overset{n\uparrow\infty}{\to} 1 - e^{-1}$$

Mit $L_n = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^n \delta_{x_i}$. Die Bootstrap-Verteilung enthält also einen Dirac-Anteil bei $x_{(n)}$, dessen Gewicht für n gegen unendlich nicht gegen 0 geht. Mit anderen Worten: Die Bootstrap-Verteilung hat einen diskreten Anteil, der auch für n gegen unendlich nicht verschwindet. Daher liefert diese Verteilung auch für große n keine Approximation der tatsächlichen Verteilung von $\hat{\vartheta}_n$.

Konfidenzintervalle für $g(\mu)$

Normalapproximation: Eine sehr grobe Methode, um mithilfe des Bootstrap-Verfahrens Konfidenzintervalle zu erhalten, geht davon aus, dass $\hat{g}_n$ unter $\mathbb{P}_\mu$ näherungsweise normalverteilt ist. Dies ist nicht immer der Fall und sollte zuvor empirisch getestet werden, zum Beispiel mithilfe des Bootstrap-Histogramms. Geht man von einer approximativen Normalverteilung aus, dann kann man das Bootstrap-Konfidenzintervall

$$\hat{g}_n \pm \Phi^{-1}\left(1 - \frac{\alpha}{2}\right)\sqrt{\hat{V}_B} \qquad \text{mit} \qquad \hat{V}_B = \frac{1}{B-1}\cdot\sum_{n=1}^B\left(\hat{g}_n^{(b)} - \sum_{r=1}^B \hat{g}_n^{(r)}\right)^2$$

verwenden, wobei $\hat{V}_B$ der Bootstrap-Schätzwert der Varianz von $\hat{g}_n$ ist.

Bootstrap-Intervalle Sei $R_n := \hat{g}_n - g(\mu)$. Sind C und D Statistiken, dann ist das Intervall (C, D) ein Konfidenzintervall für $g(\mu)$ zum Niveau $1 - \alpha$, falls

$$\mathbb{P}_\mu[g(\mu) \notin (C, D)] = \mathbb{P}_\mu[R_n \notin (\hat{g}_n - D, \hat{g}_n - C)] \le \alpha$$

Dies ist erfüllt, falls

$$\begin{aligned} \hat{g}_n - C = q_{1-\alpha/2} \qquad &\text{also} \qquad C = \hat{g}_n - q_{1-\alpha/2} \quad \text{, und} \\ \hat{g}_n - D = q_{\alpha/2} \qquad &\text{also} \qquad D = \hat{g}_n - q_{\alpha/2} \end{aligned}$$

wobei q_β das β-Quantil der Verteilung von R_n unter $\mathbb{P}_\mu$ ist. Da wir diese Quantile nicht kennen, schätzen wir sie mit einem Bootstrap-Verfahren. Dabei ersetzen wir wieder die exakte Verteilung μ durch die empirische Verteilung L_n. Die Bootstrap-Replikationen von $R_n = \hat{g}_n - g(\mu)$ sind

$$R^{(b)} := \hat{g}_n^{(b)} - g(L_n) = \hat{g}_n^{(b)} - \hat{g}_n \qquad \text{mit } b = 1, ..., B$$

und wir schätzen

$$q_\beta \approx \hat{q}_\beta(R_n^{(1)}, ..., R_n^{(B)}) = \hat{q}_\beta(\hat{g}_n^{(1)}, ..., \hat{g}_n^{(B)}) - \hat{g}_n$$

wobei $\hat{q}_\beta$ das jeweilige Stichprobenquantil bezeichnet. Damit ergibt sich das Bootstrap-Konfidenzintervall

$$\begin{aligned} (\hat{C}, \hat{D}) &= \left(\hat{g}_n - \hat{q}_{1-\alpha/2}(R_n^{(1)}, ..., R_n^{(B)}), \hat{g}_n - \hat{q}_{\alpha/2}(R_n^{(1)}, ..., R_n^{(B)})\right) \\ &= \left(2\hat{g}_n - \hat{q}_{1-\alpha/2}(\hat{g}_n^{(1)}, ..., \hat{g}_n^{(B)}), 2\hat{g}_n - \hat{q}_{\alpha/2}(\hat{g}_n^{(1)}, ..., \hat{g}_n^{(B)})\right) \end{aligned}$$

4.2. Anpassungstest

Sei μ eine unbekannte Wahrscheinlichkeitsverteilung auf S. $X_1, ..., X_n$ sind unabhängige Stichproben mit $X_i \sim \mu$ unter $\mathbb{P}_\mu$. Anhand der Stichproben soll eine gewisse Verteilung μ_0 auf die Verteilung der Stichproben getestet werden. Wir betrachten also das Testproblem:

$$H_0 : \mu = \mu_0 \qquad H_1 : \mu \neq \mu_0$$

Beispielsweise können wir uns fragen, ob die Augenzahlen eines Würfels gleichverteilt auf der Menge $\{1, ..., 6\}$ sind. Ebenso könnte man einen Zufallsgenerator anhand seiner Ausgaben U_i auf seine Genauigkeit testen wollen, also $(U_i, U_{i+1}, ..., U_{i+k}) \sim \text{Unif}(0,1)^{k+1}$?

Wie bereits oben erwähnt, wollen wir in einigen Fällen die Normalverteilung testen, um herauszufinden, ob gewisse Modellierungsannahmen gerechtfertigt sind. Wir betrachten zunächst kategorielle Merkmale, das heißt, dass die Menge S endlich ist. Sei also $S = \{a_1, ..., a_k\}$. Wir setzen $p_l := \mu(a_l)$ und $p_l^0 := \mu_0(a_l)$.

Bemerkung. Ist S nicht endlich, sondern zum Beispiel $\mathbb{R}$, dann können wir die folgenden Verfahren trotzdem anwenden, indem wir S in endlich viele disjunkte Teilmengen (*"bins"*) $B_1, ..., B_k$ unterteilen, und dann die kategoriellen Merkmale $\widetilde{X}_i := \sum_{l=1}^k l \cdot 1_{\{X_i = l\}}$ betrachten. Dabei ist es natürlich wichtig, die Unterteilung möglichst geschickt zu wählen.

Eine suffiziente Statistik ist die empirische Verteilung L_n sowie die Häufigkeitsverteilung nL_n, die wir graphisch als Histogramm darstellen können. Es gilt

$$nL_n \sim \text{Mult}(n, p_1, ..., p_n) \qquad \text{unter} \qquad \mathbb{P}_\mu$$

Die Likelihood-Funktion können wir mithilfe der (relativen) Entropie ausdrücken:

Lemma 4.3. *Sei μ eine Wahrscheinlichkeitsverteilung auf S mit $\mu(a_l) > 0$ für $l = 1, ..., k$. Dann gilt*

$$L(\mu; X_1, ..., X_n) = e^{-n(H(L_n) + H(L_n|\mu))}$$

Beweis. Wegen der Unabhängigkeit von $X_1, ..., X_n$ gilt:

$$\begin{aligned} L(\mu; X) &= \prod_{i=1}^n P_{X_i} = \prod_{l=1}^k p_l^{nL_n(a_l)} \\ &\Rightarrow \frac{1}{n} \log L(\mu; X) = \sum_{l=1 : L_n(a_l) \neq 0}^k L_n(a_l) \log p_l \\ &= \sum_{l=1}^k L_n(a_l) \log L_n(a_l) - \sum_{l=1}^k L_n(a_l) \log \frac{L_n(a_l)}{p_l} \\ &= -H(L_n) - H(L_n|\mu) \end{aligned}$$

∎

Insbesondere ist $\hat{\mu} = L_n$ das globale Maximum der Likelihood-Funktion, also der MLE, und

$$\sup_\mu L(\mu; X) = L(L_n, X) = e^{-nH(L_n)}$$

Damit erhalten wir den Likelihood-Quotienten

$$\lambda(X) = \frac{\sup\limits_{\mu \neq \mu_0} L(\mu, X)}{L(\mu_0; X)} = \frac{\sup\limits_\mu L(\mu; X)}{L(\mu_0; X)} = \frac{e^{-nH(L_n)}}{e^{-n(H(L_n) + H(L_n|\mu))}} = e^{nH(L_n|\mu)}$$

Im Folgenden werden wir verschiedene Anpassungstest betrachen.

G-Test (Hoeffdings Entropietest)

Der G-Test ist der Likelihood-Quotienten-Test für das Testproblem $H_0 : \mu = \mu_0$ und $H_1 = \mu \neq \mu_0$. Die Entscheidungsregel zum Schwellenwert c lautet:

$$\text{Verwerfe } H_0, \text{ falls } G := nH(L_n|\mu_0) \geq c.$$

Explizit erhalten wir:

$$G = n \sum_{l=1}^{k} L_n(a_l) \log \frac{L_n(a_l)}{\mu_0(a_l)} = \sum_{l=1}^{k} H_l \log \frac{H_l}{np_l^0}$$

mit $H_l := nL_n(a_l)$ und $p_l^0 := \mu_0(a_l)$. Dabei ist H_l die Häufigkeit von a_l in der Stichprobe $X = (X_1, \ldots, X_n)$ und np_l^0 ist die erwartete Häufigkeit.

Sei nun g der beobachtete Wert der Teststatistik G. Der (rechtsseitige) p-Wert ist dann $p = \mathbb{P}_0[G \geq g]$. Der exakte G-Test verwirft die Nullhypothese zum Niveau α, falls $p \leq \alpha$ gilt. Normalerweise können wir den p-Wert jedoch nicht exakt berechnen. Stattdessen können wir ein Monte-Carlo-Verfahren zur Approximation von p verwenden. Sind $G_1, \ldots, G_B$ unabhängige Stichproben der Verteilung von G unter $\mathbb{P}_0$, dann gilt

$$p \approx \frac{|\{b \in \{1, \ldots, B\} : G_b \geq g\}| + 1}{B + 1} \quad =: \hat{p}_{MC}.$$

Der Schätzer $\hat{p}_{MC}$ heißt *Monte-Carlo-p-Wert*. Dieser liefert den folgenden Test:

Monte-Carlo-G-Test:

(i) Simuliere $X_i^{(b)} \sim \mu_0$ mit $i = 1, \ldots, n$ und $b = 1, \ldots, B$ unabhängig.

(ii) Für $b = 1, \ldots, B$ berechne jeweils den Wert G_b der G-Statistik für $X^{(b)} = (X_1^{(b)}, \ldots, X_n^{(b)})$.

(iii) Berechne $\hat{p}_{MC}$ und verwerfe H_0, falls $\hat{p}_{MC} \leq \alpha$.

Das folgende Lemma zeigt, dass der Monte-Carlo-Test die Niveaubedingung nicht nur asymptotisch für B gegen unendlich, sondern sogar für jedes feste $B \in \mathbb{N}$ erfüllt.

Lemma 4.4 (Niveau bei Monte-Carlo-Test). *Seien $G_0, \ldots, G_B : \Omega \to \mathbb{R}$ austauschbare Zufallsvariablen auf einem Wahrscheinlichkeitsraum $(\Omega, \mathcal{A}, \mathbb{P})$. Das heißt, für jede Permutation σ von $\{0, 1, \ldots, B\}$ gilt:*

$$(G_{\sigma(0)}, G_{\sigma(1)}, \ldots, G_{\sigma(B)}) \quad \sim \quad (G_0, G_1, \ldots, G_B) \qquad \text{und sei} \quad \hat{p} := \frac{|\{b \in \{1, \ldots, B\} : G_b \geq G_0\}| + 1}{B + 1}.$$

Dann gilt

$$\mathbb{P}[\hat{p} \leq \alpha] \leq \frac{\lfloor (B+1)\alpha \rfloor}{B+1} \leq \alpha \qquad \text{für alle } \alpha \in (0, 1), B \in \mathbb{N}.$$

Bemerkung. Insbesondere sind unabhängige und identisch verteilte Zufallsvariablen austauschbar.

> **Beispiel (Monte-Carlo-Anpassungstest).** Sei $G_0 = G$ der beobachtete G-Wert und $G_1, \ldots, G_B$ simulierte G-Werte. Diese sind unabhängig und identisch verteilt, also gilt:
>
> $$\mathbb{P}_0[\hat{p}_{MC} \leq \alpha] \leq \alpha.$$
>
> Das heißt, dass der Monte-Carlo-Test ein Niveau-α-Test ist. Dies gilt für jedes $B \in \mathbb{N}$, also sogar für $B = 1$. Ist aber $B + 1 < \frac{1}{\alpha}$, dann ist $\frac{\lfloor (B+1)\alpha \rfloor}{B+1} = 0$, das heißt, der Test verwirft nie. Damit eine sinnvolle Anwendung möglich ist, sollte zumindest $B + 1 \geq \frac{2}{\alpha}$ gelten, denn dann folgt $\frac{\lfloor (B+1)\alpha \rfloor}{B+1} \geq \frac{\alpha}{2}$.

Beweis. Für $i \in \{0, \dots, B\}$ sei

$$\hat{p}_i := \frac{|\{b \in \{0, \dots, B\} : G_b \geq G_i\}|}{B+1}.$$

Da $G_0, \dots, G_B$ austauschbar sind, haben die Zufallsvariablen alle dieselbe Verteilung, also $\hat{p}_i \sim \hat{p}_0 = \hat{p}$ für alle $i \in \{0, \dots, B\}$. Damit erhalten wir:

$$\mathbb{P}_0[\hat{p} \leq \alpha] = \frac{1}{B+1} \sum_{i=0}^{B} \mathbb{P}_0[\hat{p}_i \leq \alpha] = \mathbb{E}_0 \left[\frac{1}{B+1} \sum_{i=0}^{B} 1_{\hat{p}_i \leq \alpha} \right].$$

Der Beweis ist abgeschlossen, wenn wir zeigen können, dass die Anzahl aller $i \in \{0, \dots, B\}$ mit $\hat{p}_i \leq \alpha$ kleiner gleich $\lfloor (B+1)\alpha \rfloor$ ist. Dazu bemerken wir:

$$\hat{p}_i \leq \alpha \Leftrightarrow |\{b \in \{0, \dots, B\} : G_b \geq G_i\}| \leq \lfloor (B+1)\alpha \rfloor.$$

Dies ist äquivalent dazu, dass es höchstens $\lfloor (B+1)\alpha \rfloor$ Werte $G_b \geq G_i$ gibt. Dies kann aber nur für die $\lfloor (B+1)\alpha \rfloor$ größten Werte gelten, also höchstens $\lfloor (B+1)\alpha \rfloor$ mal. ■

Chiquadrat-Anpassungstest

Da es früher nicht möglich war, Monte-Carlo-Tests durchzuführen, verwendete man approximative Tests. Der bekannteste approximative Anpassungstest ist der Chiquadrat-Test, bei dem sowohl die relative Entropie durch eine einfache (quadratische) Funktion als auch die Verteilung der Teststatistik mithilfe einer Normalapproximation approximiert wird. Die Taylor-Approximation

$$x \log x = x - 1 + \frac{1}{2}(x-1)^2 + O(|x-1|^3)$$

liefert für die relative Entropie zweier Wahrscheinlichkeitsverteilungen μ, ν mit relativer Dichte $\varrho = \frac{d\mu}{d\nu} \approx 1$ die Näherung

$$H(\mu|\nu) = \int \varrho \log \varrho \, d\nu \approx \underbrace{\int (\varrho - 1) \, d\nu}_{=0} + \frac{1}{2} \int (\varrho - 1)^2 \, d\nu$$

Definition 4.5. Die *Chiquadrat-Divergenz* von μ bezüglich ν ist gegeben durch

$$D_2(\mu|\nu) := \begin{cases} \int (\varrho - 1)^2 \, d\nu & \text{falls } \mu \ll \nu \text{ mit Dichte } \varrho \\ +\infty & \text{sonst} \end{cases}$$

Ersetzt man die relative Entropie (Kullback-Leibler-Divergenz) durch die Chiquadrat-Divergenz, ergibt sich die folgende Entscheidungsregel des approximativen Likelihood-Quotienten-Tests:

$$\text{Verwerfe } H_0, \text{ falls } T := nD_2(L_n|\mu_0) \geq c$$

Explizit erhalten wir:

$$T = n \sum_{l=1}^{k} \left(\frac{L_n(a_l)}{\mu_0(a_l)} - 1 \right)^2 \mu_0(a_l) = n \sum_{l=1}^{k} \frac{(L_n(a_l) - \mu_0(a_l))^2}{\mu_0(a_l)} = \sum_{l=1}^{k} \frac{(H_l - np_l^0)^2}{np_l^0} = \sum_{l=1}^{k} \frac{H_l^2}{np_l^0} - n$$

also

$$T = \sum_{l=1}^{k} \frac{(\text{Häufigkeit von } a_l - \text{erwartete Häufigkeit von } a_l)^2}{\text{erwartete Häufigkeit von } a_l}$$

Die Verteilung dieser Teststatistik unter H_0 berechnen wir approximativ mithilfe einer Normalapproximation der Multinomialverteilung. Unter H_0 gilt:

$$H = (H_1, \dots, H_k) \quad \sim \quad \text{Mult}(n, p^0), \qquad H_l \sim \text{Bin}(n, p_l^0)$$

Wir betrachten nun $Y = (Y_1, \dots, Y_k)$ mit $Y_l := \frac{H_l - np_l^0}{\sqrt{np_l^0}}$. Nach Definition der Teststatistik gilt

$$T = \sum_{l=1}^{k} Y_l^2 = ||Y||_{\mathbb{R}^k}^2$$

Wegen $\sum H_l = n$ kann der Vektor nur Werte in einer $(k-1)$-dimensionalen Hyperebene im $\mathbb{R}^k$ annehmen. In der Tat gilt

$$\sum_l \sqrt{p_l^0} Y_l = \frac{1}{\sqrt{n}} \sum_l (H_l - np_l^0) = \frac{n-n}{\sqrt{n}} = 0$$

also

$$Y \in (\sqrt{p_1^0}, \dots, \sqrt{p_k^0})^\perp \quad =: \mathbb{H} \subseteq \mathbb{R}^k$$

Seien $e_1, \dots, e_{k-1}$ eine Orthonormalbasis von $\mathbb{H}$ und $\widetilde{Y} := (e_1 \cdot Y, \dots, e_{k-1} \cdot Y) \in \mathbb{R}^{k-1}$ die entsprechende Koordinatendarstellung von Y in dieser Basis. Dann folgt wegen $Y \in \mathbb{H}$:

$$T = ||Y||_{\mathbb{R}^k}^2 = ||\widetilde{Y}||_{\mathbb{R}^{k-1}}^2 = \sum_{l=1}^{k-1} \widetilde{Y}_l^2$$

Der zentrale Grenzwertsatz liefert eine Normalapproximation für $\widetilde{Y}$:

Satz 4.6. Im Grenzwert n gegen unendlich gilt:

1) Die Verteilung von $\widetilde{Y}$ unter $\mathbb{P}_0$ konvergiert schwach gegen eine $(k-1)$-dimensionale Standardnormalverteilung.

2) Die Verteilung von T unter $\mathbb{P}_0$ konvergiert schwach gegen eine Chiquadrat-Verteilung mit $k-1$ Freiheitsgraden.

Bemerkung. Die Verteilung von Y konvergiert gegen eine Normalverteilung im $\mathbb{R}^k$ mit degenerativer Kovarianzmatrix C.

Aus dem Satz ergibt sich als Approximation des p-Werts für große n:

$$p = \mathbb{P}_0[T \geq t] \approx 1 - F_{\chi^2(k-1)}(t)$$

wobei t der beobachtete Wert von T ist. Damit erhalten wir den folgenden approximativen Test zum Niveau α:

Chiquadrat-Test zum Niveau α (Pearson 1900):

$$\text{Verwerfe } H_0, \text{ falls } t \geq q_{1-\alpha, \chi^2(k-1)}.$$

Beweis. 1) Für $l = 1, \dots, k$ gilt

$$Y_l = \frac{H_l - np_l^0}{\sqrt{np_l^0}} = \frac{1}{\sqrt{n}} \sum_{i=1}^{n} V_{il} \text{ mit } V_{il} := \frac{1_{X_i=l} - p_l^0}{\sqrt{p_l^0}}$$

also $Y = \frac{1}{\sqrt{n}} \sum_{i=1}^{n} V_i$. Die Zufallsvektoren V_i sind unabhängig und identisch verteilt mit Werten in der Hyperebene $\mathbb{H} \subseteq \mathbb{R}^k$. Sei

$$\widetilde{V}_i := (e_1 \cdot V_i, \dots, e_{k-1} \cdot V_i) \in \mathbb{R}^{k-1}$$

die Darstellung in der Orthonormalbasis $\{e_1, \dots, e_{k-1}\}$ von $\mathbb{H}$. Damit gilt dann

$$\widetilde{Y} = \frac{1}{\sqrt{n}} \sum_{i=1}^{n} \widetilde{V}_i$$

und auch die $\widetilde{V}_i$ sind wieder unabhängig und identisch verteilt. Wir rechnen nun nach, dass diese Zufallsvektoren standardisiert sind und wenden dann den zentralen Grenzwertsatz im $\mathbb{R}^{k-1}$ an. In der Tat gilt

$$\mathbb{E}_0[V_{il}] = 0 \text{ für } l = 1, \dots, k \qquad \Rightarrow \qquad \mathbb{E}_0[\widetilde{V}_{ir}] = e_r \cdot \mathbb{E}_0[V_i] = 0 \text{ für } r = 1, \dots, k-1$$

Für die Kovarianzmatrizen erhalten wir

$$\begin{aligned} C_{lm} := \mathrm{Cov}_0(V_{il}, V_{im}) &= \frac{1}{\sqrt{p_l^0 p_m^0}} \mathrm{Cov}_0(1_{X_i=l}, 1_{X_i=m}) \\ &= \frac{1}{\sqrt{p_l^0 p_m^0}} (\delta_{lm} p_l^0 - p_l^0 p_m^0) = \delta_{lm} - \sqrt{p_l^0 p_m^0} \end{aligned}$$

also

$$\begin{aligned} \mathrm{Cov}_0(\widetilde{V}_{ir}, \widetilde{V}_{is}) &= \sum_{l,m} e_{rl} e_{sm} \cdot \mathrm{Cov}_0(V_{il}, V_{im}) \\ &= \sum_{l} e_{rl} e_{sl} - \sum e_{rl} \sqrt{p_l^0} \cdot \sum_{s} e_{sm} \sqrt{p_m^0} = e_r \cdot e_s = \delta_{rs} \end{aligned}$$

wobei wir benutzt haben, dass die Vektoren e_r und e_s in der Hyperebene $\mathbb{H}$ liegen. Also sind $V_1, V_2, \dots$ unabhängige, identisch verteilte, standardisierte Zufallsvektoren im $\mathbb{R}^{k-1}$. Nach dem zentralen Grenzwertsatz folgt, dass $\widetilde{Y} = \frac{1}{\sqrt{n}} \sum_{i=1}^{n} \widetilde{V}_i$ in Verteilung gegen $N(0, I_{k-1})$ konvergiert.

2) Wegen $T = \sum_{l=1}^{k} Y_l^2 = ||Y||_{\mathbb{R}^k}^2 = ||\widetilde{Y}||_{\mathbb{R}^{k-1}}^2$ folgt

$$\mathbb{P}_0[t \le c] = \mathbb{P}_0[||\widetilde{Y}||_{\mathbb{R}^{k-1}}^2 \le c] \overset{n\uparrow\infty}{\to} \mathbb{P}_0[||Z||^2 \le c]$$

mit $Z \sim N(0, I_{k-1})$ für alle $c \in \mathbb{R}$. Die Behauptung folgt, da $||Z||^2$ die Verteilung $\chi^2(k-1)$ hat. ■

Beispiel (Mendels Erbsen). Nach dem 2. Mendelschen Gesetz sollte sich in der 2. Generation eine Verteilung 9 : 3 : 3 : 1 zwischen den vier möglichen Typen von Erbsen ergeben, das heißt $p^0 = (\frac{9}{16}, \frac{3}{16}, \frac{3}{16}, \frac{1}{16})$. Ein empirischer Test liefert die Häufigkeitsverteilung $h = (272, 89, 90, 29)$. Als beobachteter Wert der Chiquadrat-Statistik ergibt sich

$$t = \frac{1}{480} \left(\frac{272^2}{9/16} + \frac{89^2}{3/16} + \frac{90^2}{3/16} + \frac{29^2}{1/16} \right) - 400 = 0,0059.$$

Der empirische p-Wert ist

$$p_r = \mathbb{P}_0[T \geq t] \approx 1 - F_{\chi^2(3)}(0,0059) > 0,995.$$

Der beobachtete Wert t ist also nicht auffällig groß, aber auffällig klein. Genauer gilt $p_l = \mathbb{P}_0[T \leq t] < 0,005$. Die empirische Verteilung liegt also näher an der tatsächlichen Verteilung, als man es bei einem Zufallsexperiment erwarten würde! Dies deutet darauf hin, dass die beobachteten Werte möglicherweise manipuliert sind.

Die asymptotische Chiquadrat-Verteilung gilt nicht nur für die Teststatistik $T_n = nD_2(L_n|\mu)$ im Chiquadrat-Test, sondern auch für die Teststatistik $G_n = nH(L_n|\mu)$ im G-Test:

Lemma 4.7. *Sei $L_n = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^n \delta_{X_i}$ die empirische Verteilung von unabhängigen, identisch verteilten Zufallsvariablen X_i mit Verteilung μ_0. Dann gilt für $n \to \infty$:*

1) $2G_n - T_n \quad \to \quad 0 \qquad \mathbb{P}_0$*-stochastisch,*

2) $\mathbb{P}_0 \circ (2G_n)^{-1} \quad \xrightarrow{w} \quad \chi^2(k-1)$.

Der Beweis ist eine Übungsaufgabe.

Anpassungstest für parametrische Familie

Oft will man nicht testen, ob eine bestimmte Verteilung vorliegt, sondern ob die zugrunde liegende Verteilung aus einer bestimmten Familie kommt (um dann das entsprechende parametrische Modell zu betrachten). Die Nullhypothese hat dann die Form

$$H_0 : \mu \in \{\mu_\vartheta : \vartheta \in \Theta_0\},$$

wobei Θ_0 eine d-dimensionale Parametermenge ist. In diesem Fall kann man den G-Test (oder Chiquadrat-Test) mit Parameterschätzung durchführen. Die Verwerfungsregel lautet: Verwerfe H_0, falls $G := nH(L_n|\hat{\mu}_\vartheta) \geq c/2$, wobei $\hat{\vartheta}$ der Maximum-Likelihood-Schätzer für ϑ ist. Das *Chiquadrat-Prinzip von Wilks* besagt, dass unter geeigneten Voraussetzungen die modifizierte G-Statistik unter der Nullhypothese asymptotisch Chiquadrat-verteilt ist mit $k - 1 - d$ Freiheitsgraden.

Konfidenzbereich für μ

Als Alternative zu Anpassungstests kann man einen Konfidenzbereich für die unbekannte Wahrscheinlichkeitsverteilung μ angeben. Seien $X_1, ..., X_n$ unabhängig unter $\mathbb{P}_0$ mit Verteilung μ. Dabei sei μ eine Wahrscheinlichkeitsverteilung auf $\{a_1, ..., a_k\}$ mit Gewichten $p_l = \mu(a_l)$ und $p = (p_1, ..., p_k) \in \mathbb{R}^k$. Ein einfacher Konfidenzbereich für die Massenfunktion p hat die Form

$$C = (A_1, B_1) \times (A_2, B_2) \times ... \times (A_n, B_n),$$

wobei A_l und B_l für $l = 1, .., n$ Statistiken $A_l \leq B_l$ sind. Es gilt:

$$\mathbb{P}_\mu[p \notin C] = \mathbb{P}_\mu[\text{ Es gibt ein } l \in \{1, ..., k\} : p_l \notin (A_l, B_l)] \leq \sum_{l=1}^k \mathbb{P}_\mu[p_l \notin (A_l, B_l)].$$

Damit folgt unmittelbar das Lemma:

Lemma 4.8. *Ist (A_l, B_l) für jedes $l = 1, ..., k$ ein Konfidenzintervall für p_l zum Niveau $1 - \alpha/k$, dann ist C ein Konfidenzbereich für p zum Niveau $1 - \alpha$.*

Da H_l unter $\mathbb{P}_\mu$ binomialverteilt ist mit Parametern n und p_l, können wir für die Komponenten p_l die Konfidenzintervalle aus dem Binomialmodell verwenden.

Vorteil: Kontrolle aller Werte $p_1, ..., p_k$, nicht nur im quadratischen Mittel.

Nachteil: Wir benötigen Konfidenzintervalle zum Niveau $\frac{\alpha}{k}$ statt α ("Bonferroni-Korrektur"), das heißt wir brauchen mehr Stichprobenwerte.

4.3. Empirische Verteilungen numerischer Merkmale

Wir betrachten nun numerische Merkmale, das heißt reellwertige Stichprobenwerte. Sei also μ eine unbekannte Wahrscheinlichkeitsverteilung auf $(\mathbb{R}, \mathcal{B}(\mathbb{R}))$, und sei $L_n = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^n \delta_{X_i}$ die empirische Verteilung von unabhängigen Stichprobenwerten $X_1, ..., X_n \sim \mu$. In diesem Fall bilden die Ordnungsstatistiken $(X_{(1)}, ..., X_{(n)})$ eine suffiziente Statistik, das heißt es ist irrelevant, in welcher Reihenfolge die Werte $X_{(1)}, ..., X_{(n)}$ beobachtet wurden. Die empirische Verteilung können wir durch ihre Verteilungsfunktion

$$F_n(c) = L_n((-\infty, c]) = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^n 1_{X_i \le c} \qquad \text{für alle } c \in \mathbb{R}$$

beschreiben. Diese ist durch die Ordnungsstatistiken festgelegt:

$$F_n(c) = \frac{i}{n} \qquad \text{für} \qquad c \in [X_{(i)}, X_{(i+1)}],$$

wobei wir $X_{(0)} := -\infty$ und $X_{(n+1)} := \infty$ setzen. Die empirische Verteilungsfunktion ist ein erwartungstreuer Schätzer für die Verteilungsfunktion F von μ:

$$\mathbb{E}_\mu[F_n(c)] = F(c) \qquad \text{für alle } c \in \mathbb{R}.$$

Konfidenzbereich für F

Wir zeigen nun, dass Konfidenzbereiche für die unbekannte Verteilungsfunktion F durch ε-Bänder um die empirische Verteilungsfunktion gegeben sind. Die benötigte Abschätzung können wir mithilfe einer Quantiltransformation auf den Fall unabhängiger Zufallsvariablen $U_1, ..., U_n \sim \text{Unif}(0,1)$ auf $(\Omega, \mathcal{A}, \mathbb{P})$ zurückführen. Für $v \in [0,1]$ sei

$$F_n^U(v) = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^n 1_{U_i \le v}$$

die entsprechende empirische Verteilungsfunktion.

Satz 4.9 (Dvoretzky-Kiefer-Wolfowitz-Ungleichung; Massart 1990). Für alle $n \in \mathbb{N}, \varepsilon > 0$ und alle Wahrscheinlichkeitsverteilungen μ auf $(\mathbb{R}, \mathcal{B}(\mathbb{R}))$ gilt

$$\mathbb{P}_\mu\left[\sup_{c\in\mathbb{R}} |F_n(c) - F(c)| \ge \varepsilon\right] \le \mathbb{P}\left[\sup_{v\in[0,1]} |F_n^U(v) - v| \ge \varepsilon\right] \le 2e^{-2n\varepsilon^2}. \qquad \text{(DKW)}$$

Aus dem Satz folgt unmittelbar, dass für $2e^{-2n\varepsilon^2} \le \alpha$ die Verteilungsfunktion F mit Sicherheit $1-\alpha$ in einem ε-Band (ε-Umgebung bezüglich der sup-Norm) um F_n liegt.

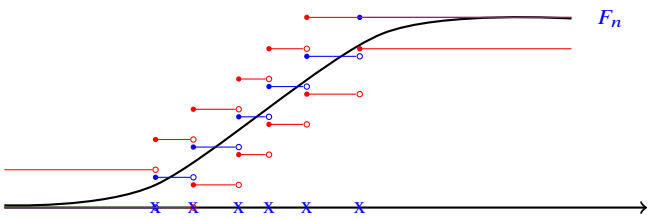


Abbildung 4.5.: Konfidenzband für F

Bemerkung. Da Verteilungsfunktionen rechtsstetig sind, gilt

$$\sup_{c\in\mathbb{Q}} |F_n(c) - F(c)| = \sup_{c\in\mathbb{Q}} |F_n(c) - F(c)| \qquad (**)$$

Hieraus folgt, dass das Supremum eine Zufallsvariable ist.

Beweis. Der Beweis der ersten Ungleichung beruht auf einer Quantiltransformation. Mit $\underline{G}(u) = \inf\{c \in \mathbb{R} : F(c) \geq u\}$ gilt

$$(X_1, ..., X_n) \quad \sim \quad (\underline{G}(U_1), ..., \underline{G}(U_n)) \qquad (*)$$

Da das Supremum in $(**)$ eine Funktion von $X_1, ..., X_n$ ist, folgt

$$\begin{aligned}\mathbb{P}_\mu\left[\sup_{c\in\mathbb{R}} |F_n(c) - F(c)| \geq \varepsilon\right] &= \mathbb{P}\left[\sup_{c\in\mathbb{R}} \left|\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} 1_{\underline{G}(U_i)\leq c} - F(c)\right| \geq \varepsilon\right] \\ &\overset{v:=F(c)}{\leq} \mathbb{P}\left[\sup_{v\in[0,1]} \left|\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} 1_{U_i\leq v}\right| \geq \varepsilon\right]\end{aligned}$$

Dies ist die erste Ungleichung in (DKW).
Statt der zweiten Ungleichung zeigen wir hier nur eine etwas schwächere Abschätzung. Der Beweis der vollen Aussage findet sich in *"Massart, Annals of Probability 1990"*. Zum Beweis der schwächeren Abschätzung sei $k \in \mathbb{N}$ und

$$M_k := \max_{j=0,...,k} \left|F_n^U\left(\frac{j}{k}\right) - \frac{j}{k}\right|$$

aus der Bernstein-Ungleichung folgt:

$$\mathbb{P}[M_k \geq \varepsilon] \leq \sum_{j=1}^{k-1} \mathbb{P}\left[|F_n^U\left(\frac{j}{k}\right) - \frac{j}{k}| \geq \varepsilon\right] \leq 2(k-1)e^{-2n\varepsilon^2}$$

Für $v \in [0,1]$ sei $j \in \{0, ..., n-1\}$ mit $v \in \left[\frac{j-1}{k}, \frac{j}{k}\right]$. Dann folgt:

$$\begin{aligned} F_n^U(v) - v &\leq F_n^U\left(\frac{j}{k}\right) - \frac{j-1}{k} \leq M_k + \frac{1}{k} \qquad \text{und} \\ v - F_n^U(v) &\leq \frac{j}{k} - F_n^U\left(\frac{j-1}{k}\right) \leq M_k + \frac{1}{k}\end{aligned}$$

Hierbei haben wir benutzt, dass Verteilungsfunktionen monoton wachsend sind. Da die Abschätzungen für alle $v \in [0,1]$ gelten, erhalten wir:

$\sup_{v\in[0,1]} \left|F_n^U(v) - v\right| \leq M_k + \frac{1}{k}$ und damit $\mathbb{P}\left[\sup_{v\in[0,1]} \left|F_n^U(v) - v\right| \geq \varepsilon\right] \leq \mathbb{P}\left[M_k \geq \varepsilon - \frac{1}{k}\right]$

Wählen wir nun $k := \lceil \frac{2}{\varepsilon} \rceil$, dann erhalten wir

$$\mathbb{P}\left[\sum_{v\in[0,1]} |F_n^U(v) - v| \geq \varepsilon\right] \geq \mathbb{P}\left[M_k \geq \frac{\varepsilon}{2}\right] \leq 2(k-1)e^{-\frac{n\varepsilon^2}{2}} \leq \frac{4}{\varepsilon}e^{-\frac{n\varepsilon^2}{2}}$$

In dieser Abschätzung ist der Exponent etwas kleiner als in der optimalen Abschätzung, und wir haben zusätzlich den Faktor $\frac{1}{\varepsilon}$ vor dem Exponenten erhalten. ■

Aus Satz 4.8 (oder auch aus der bewiesenen schwächeren Abschätzung) folgt, dass die empirischen Verteilungsfunktionen für $n \to \infty$ fast sicher gleichmäßig konvergieren:

Korollar 4.10 (Satz von Glivenko-Cantelli). Für jede Wahrscheinlichkeitsverteilung μ auf $(\mathbb{R}, \mathcal{B}(\mathbb{R}))$ gilt:

$$\mathbb{P}_\mu[\sup|F_n - F| \to 0] \quad = \quad 1$$

Beweis. Nach Satz 4.8 ist $\sum_{n=1}^{\infty} \mathbb{P}_\mu[\sup|F_n - F| > \varepsilon] < \infty$ für alle $\varepsilon > 0$. Die Folge der Suprema konvergiert also schnell stochastisch gegen Null, und die Behauptung folgt aus dem Borel-Cantelli-Lemma. ■

Anpassungstests

Satz 4.8 lieferte einen Konfidenzbereich für die Verteilungsfunktion F. Ebenso können wir den Satz benutzen, um Hypothesentests zu konstruieren. A) Kolmogorov-Smirnov-Test
Hier testen wir die Nullhypothese $\mu = \mu_0$, wobei μ_0 eine feste Wahrscheinlichkeitsverteilung auf $(\mathbb{R}, \mathcal{B}(\mathbb{R}))$ ist. Die Nullhypothese wird verworfen, falls

$$S_n := \sup_{c \in \mathbb{R}} |F_n(c) - F_0(c)| \geq \varepsilon$$

gilt, wobei ε ein vorgegebener Schwellenwert und F_0 die Verteilungsfunktion von μ_0 ist. S_n heißt Kolmogorov-Smirnov-Statistik. Aus Satz 4.8 folgt insbesondere:

Korollar 4.11. Der Kolmogorov-Smirnov-Test hat Niveau α, falls $2e^{-2n\varepsilon^2} \geq \alpha$ gilt. Dies ist genau dann erfüllt, wenn

$$\varepsilon \geq \sqrt{\frac{1}{2n} \log\left(\frac{2}{\alpha}\right)} \qquad \text{bzw.} \qquad n \geq \frac{1}{2\varepsilon^2} \log\left(\frac{2}{\alpha}\right)$$

B) Lilliefors-Test auf Normalverteilung
Um zu testen, ob die zugrunde liegende Verteilung eine Normalverteilung ist, kann man eine Variante des Kolmogorov-Smirnov-Tests verwenden. Dabei werden die Parameter geschätzt, und die Kolmogorov-Smirnov-Statistik zu den geschätzten Parametern betrachtet. Wir betrachten die Nullhypothese

$$H_0 : \quad \mu \in \{\mu_{m,\sigma^2} : m \in \mathbb{R}, \sigma > 0\}$$

Hierbei ist $\mu_{m,\sigma^2} \sim N(m, \sigma^2)$ die Normalverteilung, und Φ_{m,σ^2} deren Verteilungsfunktion. Die Nullhypothese wird verworfen, falls

$$\widetilde{S}_n := \sup_{c \in \mathbb{R}} |F_n(c) - \Phi_{\overline{X}_n, V_n}(c)| \geq \varepsilon$$

für einen Schwellenwert $\varepsilon > 0$ gilt. Wesentlich ist, dass aufgrund der Skalierungseigenschaften der Normalverteilungen die Verwerfungswahrscheinlichkeit unter der Nullhypothese nicht von den unbekannten Parametern m und σ abhängt.

Lemma 4.12 (Skaleninvarianz). *Die Verwerfungswahrscheinlichkeit $\beta = \mathbb{P}_{m,\sigma^2}\left[\widetilde{S}_n \geq \varepsilon\right]$ hängt nicht von m und σ ab.*

Beweis. Es gilt $X_i = \sigma Z_i + m$ mit unabhängigen unter $\mathbb{P}_{m,\sigma^2}$ standardnormalverteilten Zufallsvariablen Z_i, und damit $\overline{X}_n = \sigma\overline{Z}_n + m$ und $V_n = \sigma^2 V_n^Z$. Für die Verteilungsfunktion erhalten wir

$$F_n(c) = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^n 1_{X_i \le c} = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^n 1_{Z_i \le \frac{c-m}{\sigma}} = F_n^Z\left(\frac{c-m}{\sigma}\right)$$

$$\Phi_{\overline{X}_n, V_n}(c) = \Phi_{0,1}\left(\frac{c-\overline{X}_n}{\sqrt{V_n}}\right) = \Phi_{0,1}\left(\frac{c-m-\sigma\overline{Z}_n}{\sigma\sqrt{V_n^Z}}\right) = \Phi_{\overline{Z}_n, V_n^Z}\left(\frac{c-m}{\sigma}\right)$$

und damit

$$\widetilde{S}_n = \sup|F_n - \Phi_{\overline{X}_n, V_n}| = \sup|F_n^Z - \Phi_{\overline{Z}_n, V_n^Z}| =: \widetilde{S}_n^Z$$

Wegen $Z_i \sim N(0,1)$ folgt:

$$\mathbb{P}_{m,\sigma^2}[\widetilde{S}_n \ge \varepsilon] = \mathbb{P}_{m,\sigma^2}[\widetilde{S}_n^Z \ge \varepsilon] = \mathbb{P}_{0,1}[\widetilde{S}_n \ge \varepsilon]$$

Ist s ein beobachteter Wert der Statistik $\widetilde{S}_n$, dann ist nach Lemma 4.11 $p = \mathbb{P}_{0,1}[\widetilde{S}_n \ge s]$ der rechtsseitige p-Wert des Tests mit zusammengesetzter Nullhypothese H_0. Wie in Lemma 4.4 können wir diesen nicht explizit berechenbaren p-Wert durch den entsprechenden Monte-Carlo-p-Wert ersetzen und erhalten so einen Hypothesentest zu einem vorgegebenen Niveau α.

c) Anderson-Darling-Test

Ein Nachteil des Kolmogorov-Smirnov- bzw. Lilliefors-Tests ist, dass wir an beliebigen Stellen eine Abweichung ε der Verteilungsfunktion und der empirischen Verteilungsfunktion tolerieren. Dies gilt auch in den Tails, das heißt, wenn der Wert von $F(c)$ nahe bei 0 liegt, obwohl in diesem Fall die relative Abweichung sehr groß ist. Eine Abweichung der Verteilung in den Tails wird daher eventuell nicht erkannt. Eine mögliche Alternative, bei der die Tails der Verteilung entsprechend stärker gewichtet werden, ist die Anderson-Darling-Teststatistik

$$W_n = n\int_{-\infty}^{\infty} \frac{F_n(c) - F_0(c)}{F_0(c)(1-F_0(c))}\,\mu_0(dc)$$

wobei μ_0 die Verteilung ist, auf die getestet wird, und F_0 die Verteilungsfunktion von μ_0 ist. Indem man das Integral als Summe der Integrale über die Intervalle $[X_{(i)}, X_{(i+1)}]$ schreibt und partiell integriert, kann man nachrechnen, dass

$$W_n = -n - \sum_{j=1}^n \frac{2j-1}{n}\left(\log(F_0(X_{(j)})) + \log(1 - F_0(X_{(n-j+1)}))\right)$$

gilt. Um auf Normalverteilung zu testen, schätzt man wieder die Parameter und verwendet die entsprechend modifizierte Teststatistik $\widetilde{W}_n$.

Neben dem Shapiro-Wilk-Test, den wir hier nicht besprechen, sind der Lilliefors- und der Anderson-Darling-Test häufig verwendete Normalitätstests. Auch die graphische Analyse mit QQ-Plots wird oft verwendet, siehe unten. Dabei ist zu beachten, dass keiner dieser Anpassungstests perfekt ist, da jeder Test nur auf einer bestimmten Teststatistik basiert. Es ist daher sinnvoll, verschiedene Normalitätstests durchzuführen, bevor man von einer Normalverteilungsannahme ausgeht.

A. Ergänzungen aus der Wahrscheinlichkeitstheorie

A.1. Kovarianz, Korrelation und lineare Prognosen

Kovarianz und Korrelation

Für Zufallsvariablen $X, Y \in \mathcal{L}^2$ können wir die Kovarianz und die Korrelation definieren.

Definition A.1. Seien X und Y Zufallsvariablen in $\mathcal{L}^2(\Omega, \mathcal{A}, P)$.

(i) Die **Kovarianz** von X und Y ist definiert als

$$\mathrm{Cov}[X,Y] \;=\; E[(X - E[X])\,(Y - E[Y])] \;=\; E[XY] - E[X]\,E[Y].$$

(ii) Gilt $\sigma[X]\,\sigma[Y] \neq 0$, so heißt

$$\varrho[X,Y] \;=\; \frac{\mathrm{Cov}[X,Y]}{\sigma[X]\,\sigma[Y]}$$

Korrelationskoeffizient von X und Y.

(iii) Die Zufallsvariablen X und Y heißen **unkorreliert**, falls $\mathrm{Cov}[X,Y] = 0$, d.h. falls

$$E[XY] \;=\; E[X] \cdot E[Y].$$

Gilt $\mathrm{Cov}[X,Y] > 0$ bzw. < 0, dann heißen X und Y **positiv** bzw. **negativ korreliert**.

Satz A.2 (Cauchy-Schwarz-Ungleichung für Kovarianz).

(i) Die Kovarianz ist eine symmetrische und bilineare Abbildung von $\mathcal{L}^2 \times \mathcal{L}^2$ nach $\mathbb{R}$ mit

$$\mathrm{Cov}[X,X] \;=\; \mathrm{Var}[X] \;\geq\; 0 \qquad \text{für alle } X \in \mathcal{L}^2.$$

(ii) Für $X, Y \in \mathcal{L}^2$ gilt die *Cauchy-Schwarz-Ungleichung*

$$|\mathrm{Cov}[X,Y]| \;\leq\; \sqrt{\mathrm{Var}[X]} \cdot \sqrt{\mathrm{Var}[Y]} \;=\; \sigma[X] \cdot \sigma[Y]. \tag{A.1}$$

Insbesondere gilt für den Korrelationskoeffizienten im Fall $\sigma[X] \cdot \sigma[Y] \neq 0$ stets

$$|\varrho[X,Y]| \quad\leq\quad 1. \tag{A.2}$$

(iii) Gleichheit gilt in den Ungleichungen (A.1) bzw. (A.2) genau dann, wenn Konstanten $a, b \in \mathbb{R}$ existieren, sodass

$$Y \;=\; aX + b \qquad \text{mit Wahrscheinlichkeit 1.}$$

In diesem Fall ist $\varrho[X,Y] = 1$ falls $a > 0$, und $\varrho[X,Y] = -1$ falls $a < 0$.

Beweis. Nach Definition gilt $\mathrm{Cov}[X,Y] = \mathrm{Cov}[Y,X]$ und $\mathrm{Cov}[X,X] = \mathrm{Var}[X]$. Außerdem folgt aus der Linearität des Erwartungswerts für $X, Y, Z \in \mathcal{L}^2$ und $a \in \mathbb{R}$:

$$\mathrm{Cov}[X, aY + Z] = E\left[(X - E[X])(aY + Z - E[aY + Z])\right] = a\,\mathrm{Cov}[X,Y] + \mathrm{Cov}[X,Z].$$

Somit ist die Kovarianz linear in der zweiten Komponente und damit wegen der Symmetrie auch bilinear. Cov ist also eine nicht-negative definite symmetrische Bilinearform auf dem Vektorraum $\mathcal{L}^2$. Damit gilt insbesondere die Cauchy-Schwarz-Ungleichung, siehe die Vorlesung Lineare Algebra. Den letzten Teil der Aussage und auch die Cauchy-Schwarz-Ungleichung werden wir gleich nebenbei im Rahmen eines Exkurses zu linearen Prognosen beweisen. ■

Lineare Prognosen

Angenommen, wir wollen den Ausgang eines Zufallsexperiments vorhersagen, dass durch eine reellwertige Zufallsvariable $Y : \Omega \to \mathbb{R}$ beschrieben wird. Welches ist der *beste Prognosewert* b für $Y(\omega)$, wenn uns keine weiteren Informationen zur Verfügung stehen?

Die Antwort hängt offensichtlich davon ab, wie wir den Prognosefehler messen. Häufig verwendet man den mittleren quadratischen Fehler (*M*ean *S*quare *E*rror)

$$\mathrm{MSE} \quad = \quad E[(Y-b)^2]\,.$$

Satz A.3 (Erwartungswert als bester Prognosewert im quadratischen Mittel). Ist Y eine Zufallsvariable in $L^2(\Omega, \mathcal{A}, P)$, dann gilt für alle $b \in \mathbb{R}$:

$$E[(Y-b)^2] \quad = \quad \mathrm{Var}[Y] + (b - E[Y])^2 \quad \geq \quad E[(Y - E[Y])^2].$$

Der mittlere quadratische Fehler des Prognosewertes b ist also die Summe der Varianz von Y und des Quadrats des systematischen bzw. mittleren Prognosefehlers (engl. *Bias*) $b - E[Y]$:

$$\mathrm{MSE} \quad = \quad \text{Varianz} + \text{Bias}^2.$$

Insbesondere ist der mittlere quadratische Fehler genau für $b = E[Y]$ minimal.

Beweis. Für $b \in \mathbb{R}$ gilt wegen der Linearität des Erwartungswertes:

$$E[(Y-b)^2] \quad = \quad \mathrm{Var}[Y-b] \; + \; E[Y-b]^2 \; = \; \mathrm{Var}[Y] + (E[Y] - b)^2. \qquad ■$$

Seien nun $X, Y \in \mathcal{L}^2(\Omega, \mathcal{A}, P)$ quadratintegrierbare Zufallsvariablen mit $\sigma[X] \neq 0$. Angenommen, wir kennen bereits den Wert $X(\omega)$ in einem Zufallsexperiment und suchen die beste *lineare* Vorhersage

$$\hat{Y}(\omega) \quad = \quad aX(\omega) + b, \qquad (a, b \in \mathbb{R}) \tag{A.3}$$

für $Y(\omega)$ im quadratischen Mittel. Zu minimieren ist jetzt der mittlere quadratischen Fehler

$$\mathrm{MSE} \quad := \quad E[(\hat{Y} - Y)^2]$$

unter allen Zufallsvariablen $\hat{Y}$, die affine Funktionen von X sind. In diesem Fall erhalten wir

$$\mathrm{MSE} \quad = \quad \mathrm{Var}[Y - \hat{Y}] + E[Y - \hat{Y}]^2 \; = \; \mathrm{Var}[Y - aX] + (E[Y] - aE[X] - b)^2.$$

Den zweiten Term können wir für gegebenes a minimieren, indem wir

$$b \quad = \quad E[Y] - aE[X]$$

wählen. Für den ersten Term ergibt sich

$$\begin{aligned}\operatorname{Var}[Y-aX] &= \operatorname{Cov}[Y-aX,Y-aX] = \operatorname{Var}[Y]-2a\operatorname{Cov}[X,Y]+a^2\operatorname{Var}[X]\\ &= \left(a\cdot\sigma[X]-\frac{\operatorname{Cov}[X,Y]}{\sigma[X]}\right)^2+\operatorname{Var}[Y]-\frac{\operatorname{Cov}[X,Y]^2}{\operatorname{Var}[X]}.\end{aligned} \tag{A.4}$$

Dieser Ausdruck wird minimiert, wenn wir $a = \operatorname{Cov}[X,Y]/\sigma[X]^2$ wählen. Die bzgl. des mittleren quadratischen Fehlers optimale Prognose für Y gestützt auf X ist dann

$$\hat{Y}_{\text{opt}} \quad = \quad aX+b \quad = \quad E[Y]+a(X-E[X]).$$

Damit haben wir gezeigt:

Satz A.4 (Lineare Prognose/Regression von Y gestützt auf X). Der mittlere quadratische Fehler $E[(\hat{Y}-Y)^2]$ ist minimal unter allen Zufallsvariablen der Form $\hat{Y} = aX+b$ mit $a, b \in \mathbb{R}$ für

$$\hat{Y}(\omega) \quad = \quad E[Y] \;+\; \frac{\operatorname{Cov}[X,Y]}{\operatorname{Var}[X]}\cdot(X(\omega)-E[X]).$$

Das Problem der linearen Prognose steht in engem Zusammenhang mit der Cauchy-Schwarz-Ungleichung für die Kovarianz. In der Tat ergibt sich diese Ungleichung unmittelbar aus Gleichung (A.4):

Beweis (Cauchy-Schwarz-Ungleichung, Satz A.2 (ii) und (iii)). Im Fall $\sigma[X] = 0$ gilt $X = E[X]$ mit Wahrscheinlichkeit 1, und die Ungleichung (A.1) ist trivialerweise erfüllt. Wir nehmen nun an, dass $\sigma[X] \neq 0$ gilt. Wählt man dann wie oben $a = \operatorname{Cov}[X,Y]/\sigma[X]^2$, so folgt aus (A.4) die Cauchy-Schwarz-Ungleichung

$$\operatorname{Var}[Y]-\frac{\operatorname{Cov}[X,Y]^2}{\operatorname{Var}[X]} \quad \geq \quad 0.$$

Die Ungleichung (A.2) folgt unmittelbar. Zudem erhalten wir nach (A.4) genau dann Gleichheit in (A.1) bzw. (A.2), wenn $\operatorname{Var}[Y-aX] = 0$ gilt, also wenn $Y-aX$ mit Wahrscheinlichkeit 1 konstant ist. In diesem Fall folgt $\operatorname{Cov}[X,Y] = \operatorname{Cov}[X,aX] = a\operatorname{Var}[X]$, also hat $\varrho[X,Y]$ dasselbe Vorzeichen wie a. ■

Beispiel (Regressionsgerade, Methode der kleinsten Quadrate). Wenn die gemeinsame Verteilung von X und Y eine empirische Verteilung von Daten $(x_i, y_i) \in \mathbb{R}^2$, $i = 1, \dots n$, ist, d.h. wenn

$$(X,Y) \;=\; (x_i,y_i) \qquad \text{mit Wahrscheinlichkeit } 1/n$$

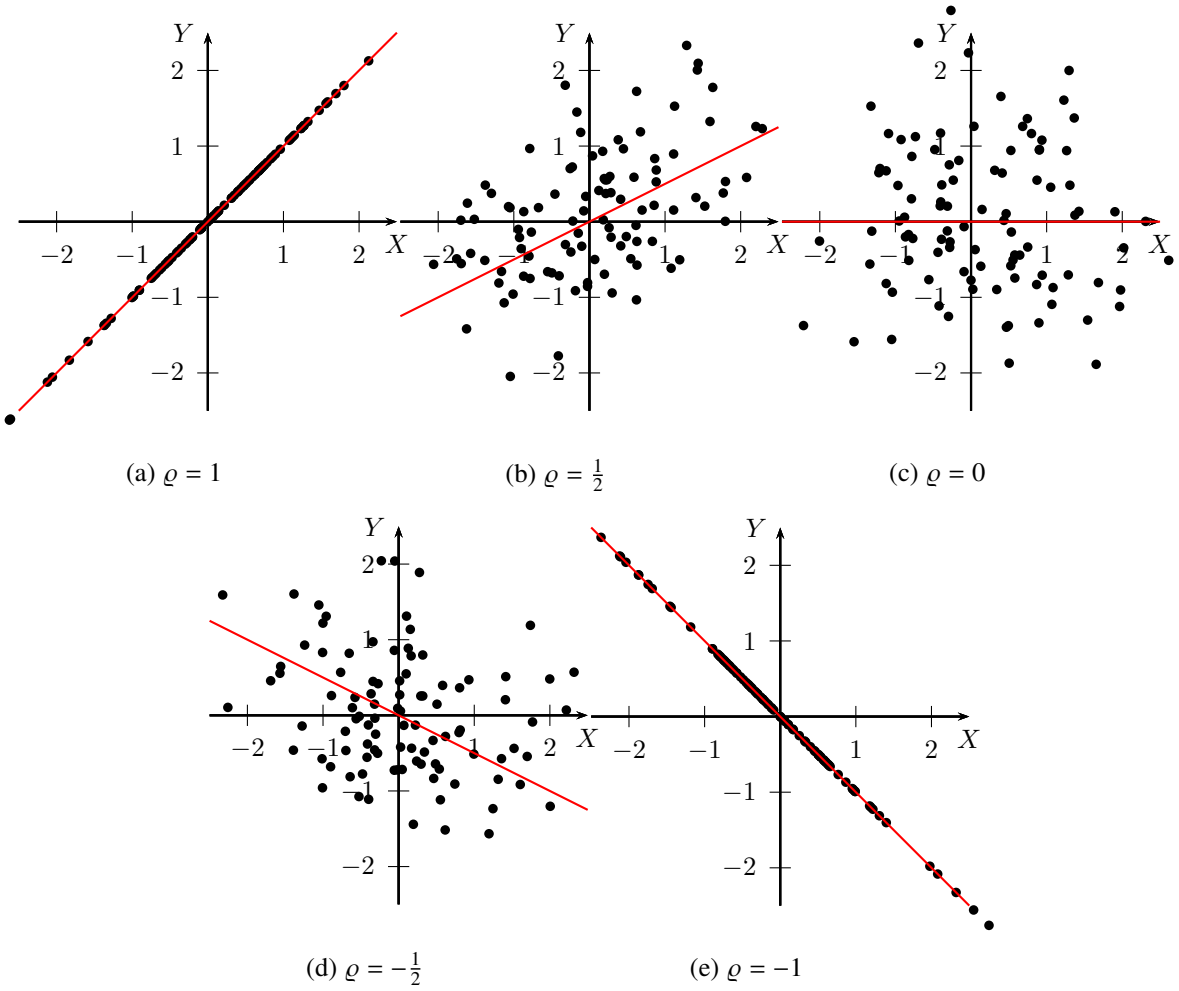
für $1 \leq i \leq n$ gilt, dann sind die Erwartungswerte und die Kovarianz gegeben durch

$$\begin{aligned}E[X] &= \frac{1}{n}\sum_{i=1}^n x_i =: \overline{x}_n, \qquad E[Y] = \overline{y}_n,\\ \operatorname{Cov}[X,Y] &= \frac{1}{n}\sum_{i=1}^n (x_i-\overline{x}_n)(y_i-\overline{y}_n) = \frac{1}{n}\left(\sum_{i=1}^n x_iy_i\right)-\overline{x}_n\overline{y}_n.\end{aligned}$$

Der entsprechende *empirische Korrelationskoeffizient* der Daten (x_i, y_i), $1 \leq i \leq n$, ist

$$\varrho[X,Y] \quad = \quad \frac{\operatorname{Cov}[X,Y]}{\sigma[X]\sigma[Y]} \quad = \quad \frac{\sum_{i=1}^n (x_i-\overline{x}_n)(y_i-\overline{y}_n)}{\left(\sum_{i=1}^n (x_i-\overline{x}_n)^2\right)^{1/2}\left(\sum_{i=1}^n (y_i-\overline{y}_n)^2\right)^{1/2}}$$

Diesen verwendet man als Schätzer für die Korrelation von Zufallsgrößen mit unbekannten Verteilungen. Die Grafiken in Abbildung A.1 zeigen Datensätze mit verschiedenen Korrelationskoeffizienten ϱ.



(a) $\varrho = 1$ (b) $\varrho = \frac{1}{2}$ (c) $\varrho = 0$

(d) $\varrho = -\frac{1}{2}$ (e) $\varrho = -1$

Abbildung A.1.: Korrelationskoeffizienten und Regressionsgeraden für verschiedene Datensätze

Als beste lineare Prognose von Y gestützt auf X im quadratischen Mittel erhalten wir die *Regressionsgerade* $y = ax + b$, die die Quadratsumme

$$\sum_{i=1}^{n} (ax_i + b - y_i)^2 \quad = \quad n \cdot \mathrm{MSE}$$

der Abweichungen minimiert. Hierbei gilt nach Satz A.4:

$$a = \frac{\mathrm{Cov}[X,Y]}{\sigma[X]^2} = \frac{\sum (x_i - \overline{x}_n)(y_i - \overline{y}_n)}{\sum (x_i - \overline{x}_n)^2} \qquad \text{und} \qquad b = E[Y] - a \cdot E[X] = \overline{y}_n - a \cdot \overline{x}_n.$$

Die Regressionsgeraden sind in Abbildung A.1 eingezeichnet.

A.2. Wahrscheinlichkeitsverteilungen im $\mathbb{R}^n$

Transformation von mehrdimensionalen Dichten

Absolutstetige reellwertige Zufallsvariablen $X_1, \dots, X_n$ sind genau dann unabhängig, wenn ihre gemeinsame Verteilung absolutstetig ist mit einer Dichte, die sich in Produktform darstellen lässt:

$$f_{X_1,\dots,X_n}(x_1,\dots,x_n) \;=\; \prod_{i=1}^{n} g_i(x_i)\,, \qquad g_i : \mathbb{R} \to [0,\infty) \text{ meßbar.}$$

In diesem Fall sind die Dichten der einzelnen Zufallsvariablen X_i proportional zu den Funktionen g_i. Modelle mit komplizierterer Abhängigkeitsstruktur können manchmal durch geeignete Transformationen in eine (vollständige oder partielle) Produktform gebracht werden.

Satz A.5 (Mehrdimensionaler Dichtetransformationssatz). Seien $S, T \subseteq \mathbb{R}^n$ offen, und sei $X : \Omega \to S$ eine Zufallsvariable auf einem Wahrscheinlichkeitsraum $(\Omega, \mathcal{A}, P)$ mit absolutstetiger Verteilung μ_X mit Dichte f_X. Ist $\psi : S \to T$ ein Diffeomorphismus (C^1) mit $\det D\psi(x) \neq 0$ für alle $x \in S$, dann ist die Verteilung von $\psi(X)$ absolutstetig mit Dichte

$$f_{\psi(X)}(y) \;=\; f_X(\psi^{-1}(y)) \cdot |\det D\psi^{-1}(y)|, \tag{A.5}$$

wobei $\det D\psi^{-1}(y) = \det(\frac{\partial x_i}{\partial y_j})$ die Jacobideterminante der Koordinatentransformation ist.

Beweis. Die Behauptung folgt aus dem Transformationssatz der multivariaten Analysis:

$$\begin{aligned} P[\psi(X) \in B] &= P[X \in \psi^{-1}(B)] \\ &= \int_{\psi^{-1}(B)} f_X(x)\,dx \overset{\text{Subst.}}{=} \int_B f_X(\psi^{-1}(y)) \cdot |\det D\psi^{-1}(y)|\,dy\,. \end{aligned}$$

■

Bemerkung (Volumentransformation). Der Zusatzfaktor $|\det D\psi^{-1}(y)|$ in (A.5) beschreibt die Transformation des Volumens (also des Lebesguemaßes) bei Anwenden der Abbildung ψ^{-1}. Anschaulich wird ein infinitesimaler Quader am Punkt y mit Volumen $dy = dy_1 \cdots dy_n$ durch die Abbildung ψ^{-1} auf ein infinitesimales Parallelepiped am Punkt $\psi^{-1}(y)$ abgebildet, das von den Vektoren $\frac{\partial \psi^{-1}}{\partial y_i}(y)\,dy_i$ $(i = 1,\dots,n)$ aufgespannt wird. Das Volumen dieses infinitesimalen Parallelepipeds beträgt

$$\left|\det\left(\frac{\partial \psi^{-1}}{\partial y_1}(y)\,dy_1, \dots, \frac{\partial \psi^{-1}}{\partial y_n}(y)\,dy_n\right)\right| \;=\; \left|\det D\psi^{-1}(y)\right|\,dy.$$

Für einen rigorosen Beweis der mehrdimensionalen Substitutionsformel verweisen wir auf die Analysisvorlesung.

Multivariate Normalverteilungen

Sei $Z = (Z_1, Z_2, ..., Z_n)$ mit unabhängigen, standardnormalverteilten Zufallsvariablen Z_i. Die Verteilung des Zufallsvektors Z ist dann absolutstetig bzgl. des Lebesguemaßes im $\mathbb{R}^n$ mit Dichte

$$f_Z(x) \;=\; \prod_{i=1}^{n}\left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\,e^{-x_i^2/2}\right) \;=\; (2\pi)^{-n/2} e^{-|x|^2/2} \quad \textit{(n-dimensionale Standardnormalverteilung)}.$$

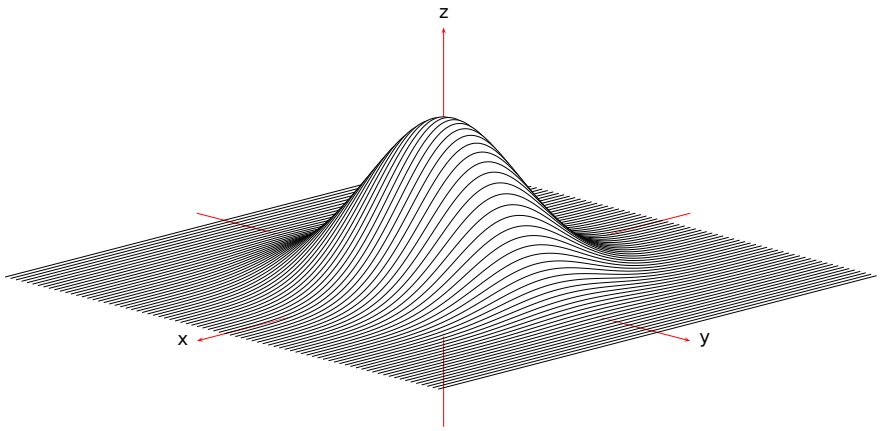


Abbildung A.2.: Dichte der Standardnormalverteilung in $\mathbb{R}^2$.

Sei nun $m \in \mathbb{R}^n$, und $\sigma \in \mathbb{R}^{n\times n}$ eine $n \times n$-Matrix. Wir betrachten den Zufallsvektor

$$Y = \sigma Z + m \ .$$

Ist σ *regulär*, dann können wir die Dichte der Verteilung von Y bzgl. des Lebesgue-Maßes im $\mathbb{R}^n$ mithilfe des Transformationssatzes explizit berechnen. Mit $C := \sigma\sigma^T$ erhalten wir

$$\begin{aligned} f_Y(y) &= f_X(\sigma^{-1}(y-m)) \cdot |\det \sigma^{-1}| \\ &= \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^n |\det C|}} \exp\left(-\frac{1}{2}(y-m)\cdot C^{-1}(y-m)\right) \ . \end{aligned}$$

Ist σ nicht regulär, dann nimmt X nur Werte in einem echten Unterraum des $\mathbb{R}^n$ an. Die Verteilung von X ist in diesem Fall *nicht absolutstetig* bzgl. des Lebesgue-Maßes im $\mathbb{R}^n$.

Definition A.6 (Normalverteilung im $\mathbb{R}^n$). Sei $m \in \mathbb{R}^n$, und sei $C \in \mathbb{R}^{n\times n}$ eine symmetrische, positiv definite Matrix. Die Verteilung $N(m, C)$ im $\mathbb{R}^n$ mit Dichte f_Y heißt **n-dimensionale Normalverteilung** mit Mittelwertvektor m und Kovarianzmatrix C.

Wir werden unten nachrechnen, dass die Kovarianzen der Komponenten eines Zufallsvektors $Y \sim N(m, C)$ tatsächlich durch die Einträge C_{ij} der Matrix C gegeben sind.

Beispiel (Zufällige Punkte in der Ebene). Sind X und Y unabhängige, $N(0, \sigma^2)$-verteilte Zufallsvariablen auf $(\Omega, \mathcal{A}, P)$ mit $\sigma > 0$, dann ist die gemeinsame Verteilung $\mu_{X,Y}$ absolutstetig mit Dichte

$$f_{X,Y}(x, y) \quad = \quad \frac{1}{2\pi\sigma^2} \cdot \exp\left(-\frac{x^2+y^2}{2\sigma^2}\right), \qquad (x, y) \in \mathbb{R}^2.$$

Insbesondere gilt $(X, Y) \neq (0, 0)$ P-fast sicher. Wir definieren den Radial- und Polaranteil

$$R \ : \ \Omega \to (0, \infty), \qquad \Phi \ : \ \Omega \to [0, 2\pi)$$

durch

$$X \quad = \quad R \cdot \cos\Phi \qquad \text{und} \qquad Y \quad = \quad R \cdot \sin\Phi,$$

d.h. $R = \sqrt{X^2 + Y^2}$ und $\Phi = \arg(X + iY)$ falls $(X, Y) \neq (0, 0)$. Auf der Nullmenge $\{(X, Y) = (0, 0)\}$ definieren wir (R, Φ) in beliebiger Weise, sodass sich messbare Funktionen ergeben. Wir berechnen nun

die gemeinsame Verteilung von R und Φ:

$$\begin{aligned} P[R \le r_0, \Phi \le \varphi_0] &= P[(X,Y) \in \text{„Kuchenstück“ mit Winkel } \varphi_0 \text{ und Radius } r_0] \\ &= \int\!\!\int_{\text{„Kuchenstück“}} f_{X,Y}(x,y)\,dx\,dy \\ &= \int_0^{r_0}\int_0^{\varphi_0} f_{X,Y}(r\cos\varphi, r\sin\varphi)\,\underbrace{r}_{\substack{\text{Jacobideterminante}\\ \text{der Koordinatentransf.}}}\,d\varphi\,dr \\ &= \int_0^{r_0}\int_0^{\varphi_0} \frac{r}{2\pi\sigma^2} e^{-r^2/(2\sigma^2)}\,d\varphi\,dr. \end{aligned}$$

Hierbei haben wir im 3. Schritt den Transformationssatz (Substitutionsregel) für mehrdimensionale Integrale verwendet - der Faktor r ist die Jacobideterminante der Koordinatentransformation. Es folgt, dass die gemeinsame Verteilung $\mu_{R,\Phi}$ absolutstetig ist mit Dichte

$$f_{R,\Phi}(r,\varphi) = \frac{1}{2\pi}\cdot\frac{r}{\sigma^2}\cdot e^{-r^2/(2\sigma^2)}.$$

Da die Dichte Produktform hat, sind R und Φ unabhängig. Die Randverteilung μ_Φ ist absolutstetig mit Dichte

$$f_\Phi(\varphi) = \text{const.} = \frac{1}{2\pi} \qquad (0 \le \varphi < 2\pi),$$

d.h. Φ ist gleichverteilt auf $[0, 2\pi)$. Somit ist μ_R absolutstetig mit Dichte

$$f_R(r) = \frac{r}{\sigma^2}\cdot e^{-r^2/(2\sigma^2)} \qquad (r > 0).$$

Die Berechnung können wir verwenden, um Stichproben von der Standardnormalverteilung zu simulieren:

Beispiel (Simulation von normalverteilten Zufallsvariablen). Die Verteilungsfunktion einer $N(0,1)$-verteilten Zufallsvariable X ist

$$F_X(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{x} e^{-t^2/2}\,dt\,.$$

Das Integral ist nicht explizit lösbar und die Inverse F_X^{-1} ist dementsprechend nur approximativ berechenbar. Daher ist die Simulation einer Standardnormalverteilung durch Inversion der Verteilungsfunktion relativ aufwendig. Ein einfacheres Simulationsverfahren ergibt sich, wenn wir eine zweidimensionale Standardnormalverteilung betrachten und auf Polarkoordinaten transformieren. Dann gilt für den Radialanteil:

$$F_R(s) = \int_0^s e^{-r^2/2} r\,dr = 1 - e^{-s^2/2} \qquad \text{für alle } s \ge 0.$$

Das Integral ist also explizit berechenbar, und

$$F_R^{-1}(u) = \sqrt{-2\log(1-u)}\,, \quad u \in (0,1).$$

Der Winkelanteil Φ ist unabhängig von R und gleichverteilt auf $[0, 2\pi)$. Wir können Zufallsvariablen mit der entsprechenden gemeinsamen Verteilung erzeugen, indem wir

$$\begin{aligned} \Phi &:= 2\pi U_1\,, \\ R &:= \sqrt{-2\log(1-U_2)} \qquad \left(\text{bzw. } = \sqrt{-2\log U_2}\right), \end{aligned}$$

setzen, wobei U_1 und U_2 unabhängige, auf $(0,1)$ gleichverteilte Zufallsvariablen sind. Stichproben von U_1 und U_2 können durch Pseudozufallszahlen simuliert werden. Die Zufallsvariablen

$$X := R\cos\Phi \qquad \text{und} \qquad Y := R\sin\Phi$$

sind dann unabhängig und $N(0,1)$-verteilt. Für $m \in \mathbb{R}$ und $\sigma > 0$ sind $\sigma X + m$ und $\sigma Y + m$ unabhängige $N(m, \sigma^2)$-verteilte Zufallsvariable.

Wir erhalten also den folgenden Algorithmus zur Simulation von Stichproben einer Normalverteilung:

Algorithmus 1: Box-Muller-Verfahren

Input : $m \in \mathbb{R}, \sigma > 0$
Output Unabhängige Stichproben $\widetilde{x}, \widetilde{y}$ von $N(m, \sigma^2)$
:
1 Erzeuge unabhängige Zufallszahlen $u_1, u_2 \sim \mathrm{Unif}_{(0,1)}$;
2 $x := \sqrt{-2\log u_1}\cos(2\pi u_2)$, $y := \sqrt{-2\log u_1}\sin(2\pi u_2)$;
3 $\widetilde{x} := \sigma x + m$, $\widetilde{y} := \sigma y + m$;
4 **return** x, y;

Ordnungsstatistiken, Beta-Verteilung

Ist die Verteilung von unabhängigen, identisch verteilten Zufallsvariablen $X_1, \ldots, X_n$ absolutstetig mit Dichte f, dann kann man die Dichte der gemeinsamen Verteilung der Ordnungsstatistiken $X_{(1)} \le \ldots \le X_{(n)}$ mit einem Symmetrieargument berechnen. Dazu bemerken wir, dass für beliebige Permutationen $\pi \in \mathcal{S}_n$

$$(X_{\pi(1)}, \ldots, X_{\pi(n)}) \;\sim\; (X_1, \ldots, X_n)$$

gilt, da die gemeinsame Dichte $\prod_{i=1}^n f(x_i)$ von $X_1, \ldots, X_n$ invariant unter Permutationen der Koordinaten ist. Wegen $P[X_i = X_j] = 0$ für $i \neq j$ erhalten wir damit

$$\begin{aligned} P[X_{(1)} \le c_1, \ldots, X_{(n)} \le c_n] &= \sum_{\pi \in \mathcal{S}_n} P[X_{\pi(1)} \le c_1, \ldots, X_{\pi(n)} \le c_n, X_{\pi(1)} < \ldots < X_{\pi(n)}] \\ &= n!\, P[X_1 \le c_1, \ldots, X_n \le c_n, X_1 < X_2 < \ldots < X_n] \\ &= n! \int_{-\infty}^{c_1} \cdots \int_{-\infty}^{c_n} I_{\{y_1 < y_2 < \ldots < y_n\}} f(y_1) \cdots f(y_n)\, dy_1 \cdots dy_n. \end{aligned}$$

Hieraus folgt, dass die gemeinsame Verteilung von $X_{(1)}, \ldots, X_{(n)}$ absolutstetig ist mit Dichte

$$f_{X_{(1)},\ldots,X_{(n)}}(y_1, \ldots, y_n) \;=\; n! \cdot I_{\{y_1 < y_2 < \ldots < y_n\}} f(y_1) \cdots f(y_n).$$

Durch Aufintegrieren erhält man daraus mithilfe des Satzes von Fubini und einer erneuten Symmetrieüberlegung die Dichten der Verteilungen der einzelnen Ordnungsstatistiken:

$$f_{X_{(k)}}(y) \;=\; \frac{n!}{(k-1)!(n-k)!}\, F(y)^{k-1}\,(1 - F(y))^{n-k}\, f(y).$$

Beispiel (Beta-Verteilungen). Sind die Zufallsvariablen X_i auf $(0, 1)$ gleichverteilt, dann hat $X_{(k)}$ die Dichte

$$f_{X_{(k)}}(u) \;=\; B(k, n-k+1)^{-1} u^{k-1} (1-u)^{n-k} I_{(0,1)}(u)$$

mit Normierungskonstante

$$B(a, b) \;=\; \int_0^1 u^{a-1}(1-u)^{b-1}\, du \quad \left(= \frac{(a-1)!(b-1)!}{(a+b-1)!} \text{ für } a, b \in \mathbb{N} \right).$$

Die entsprechende Verteilung heißt *Beta-Verteilung mit Parametern* $a, b > 0$, die Funktion B ist die *Eulersche Beta-Funktion*.

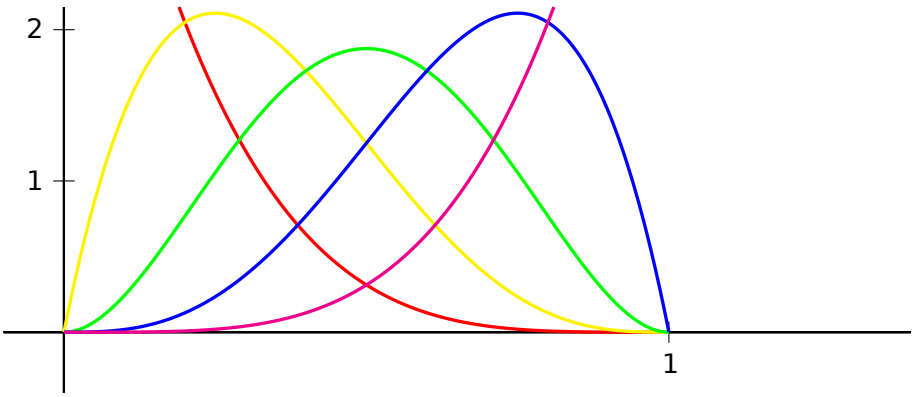


Abbildung A.3.: Abbildung der Dichtefunktionen der Ordnungsstatistiken $X_{(1)}, \ldots, X_{(5)}$ (rot, gelb, grün, blau, magenta) bzgl. der Gleichverteilung auf $(0, 1)$.

A.3. Charakteristische Funktionen und mehrdimensionaler zentraler Grenzwertsatz

Momentenerzeugende und charakteristische Funktionen

Sei $(\Omega, \mathcal{A}, P)$ ein Wahrscheinlichkeitsraum und $X : \Omega \to \mathbb{R}^d$ eine Zufallsvariable mit Verteilung μ. Wir definieren den Erwartungswert (bzw. das Lebesgue-Integral bzgl. P) für eine komplexwertige Zufallsvariable $Z = U + iV$ mit Real- und Imaginärteil $U, V : \Omega \to \mathbb{R}$ durch $E[Z] = E[U] + iE[V]$. Der Erwartungswert ist immer dann definiert, wenn $|Z| = \sqrt{U^2 + V^2}$ integrierbar ist, da dann U und V integrierbare reellwertige Zufallsvariablen sind. Man verifiziert leicht, dass grundlegende Rechenregeln für den Erwartungswert (z.B. Linearität, $|E[Z]| \le E[|Z|]$, Satz von Lebesgue) sich auf komplexwertige Zufallsvariablen übertragen.

Definition A.7 (Momentenerzeugende und charakteristische Funktion).
Die Funktionen $M : \mathbb{R}^d \to (0, \infty]$ bzw. $\phi : \mathbb{R}^d \to \mathbb{C}$,

$$\begin{aligned} M(t) &:= E[e^{t \cdot X}] = \int_{\mathbb{R}^d} e^{t \cdot x} \, \mu(dx), \\ \phi(t) &:= E[e^{it \cdot X}] = \int_{\mathbb{R}^d} e^{it \cdot x} \, \mu(dx), \end{aligned}$$

heißen *momentenerzeugende* bzw. *charakteristische Funktion* der Zufallsvariable X oder der Verteilung μ.

Da die Funktionen $t \mapsto e^{t \cdot x}$ und $t \mapsto e^{it \cdot x}$ für $t \in \mathbb{R}^d$ nichtnegativ bzw. beschränkt sind, sind die Erwartungswerte definiert. Dabei nimmt $M(t)$ den Wert $+\infty$ an, falls $\exp(t \cdot X)$ nicht integrierbar ist. Für die Norm der komplexen Zahl $\phi(t)$ gilt dagegen

$$|\phi(t)| \le E[|\exp(it \cdot x)|] = 1 \qquad \text{für alle } t \in \mathbb{R}^d.$$

Bemerkung (Fourier- und Laplace-Transformation). Die Funktion $\phi(-t) = \int e^{-itx} \mu(dx)$ ist die *Fourier-Transformation* des Maßes μ. Ist μ absolutstetig bzgl. des Lebesguemaßes mit Dichte f, dann ist $\phi(-t)$ die Fourier-Transformation der Funktion f, d.h.

$$\phi(-t) = \widehat{f}(t) := \int_{\mathbb{R}^d} e^{-it \cdot x} f(x) \, dx.$$

Entsprechend ist

$$M(-t) \quad = \quad \int_{\mathbb{R}^d} e^{-t\cdot x}\,\mu(dx) \qquad (t>0)$$

die *Laplace-Transformation* des Maßes μ bzw. der Dichte f.

Rechenregeln. Die folgenden Rechenregeln ergeben sich unmittelbar aus den Definitionen der momentenerzeugenden bzw. charakteristischen Funktionen:

(i) Sind $X, Y : \Omega \to \mathbb{R}^d$ unabhängige Zufallsvariablen auf $(\Omega, \mathcal{A}, P)$, dann gilt

$$M_{X+Y}(t) \quad = \quad M_X(t)\cdot M_Y(t) \qquad \text{und} \qquad \phi_{X+Y}(t) \quad = \quad \phi_X(t)\cdot\phi_Y(t)$$

für alle $t \in \mathbb{R}^d$.

(ii) Ist $X = (X_1, \ldots, X_d) : \Omega \to \mathbb{R}^d$ ein Zufallsvektor mit unabhängigen Komponenten $X_1, \ldots, X_d$, dann gilt für $t = (t_1, \ldots, t_d) \in \mathbb{R}^d$:

$$M_X(t) \quad = \quad \prod_{i=1}^{d} M_{X_i}(t_i) \qquad \text{und} \qquad \phi_X(t) \quad = \quad \prod_{i=1}^{d} \phi_{X_i}(t_i).$$

(iii) Für $A \in \mathbb{R}^{d\times d}$ und $b \in \mathbb{R}^d$ gilt

$$M_{AX+b}(t) \quad = \quad e^{t\cdot b}\, M_X(A^T t) \qquad \text{und} \qquad \phi_{AX+b}(t) \quad = \quad e^{it\cdot b}\phi_X(A^T t).$$

(iv) Es gilt stets $M(0) = \phi(0) = 1$ und $\phi(-t) = \overline{\phi(t)}$ für alle $t \in \mathbb{R}$.

Beispiel (Binomialverteilung). Die Binomialverteilung $Bin(n,p)$ ist die Verteilung der Summe $\sum_{i=1}^n Y_i$ von unabhängigen Bernoulli(p)-verteilten Zufallsvariablen $Y_1, ..., Y_n$. Also sind

$$\phi(t) \quad = \quad \prod_{i=1}^{n} \phi_{Y_i}(t) \;=\; \left(1-p+pe^{it}\right)^n \;, \quad \text{und} \quad M(t) \;=\; \left(1-p+pe^{t}\right)^n$$

die charakteristische und momentenerzeugende Funktion von $\mathrm{Bin}(n,p)$.

Der Übersichtlichkeit halber beschränken wir uns nun auf den Fall $d = 1$. Wir zeigen, dass sich die Momente $E[X^n]$ einer Zufallsvariable $X : \Omega \to \mathbb{R}$ unter geeigneten Voraussetzungen aus der momentenerzeugenden bzw. charakteristischen Funktion berechnen lassen. Die nötigen Voraussetzungen sind allerdings im Fall der momentenerzeugenden Funktion viel stärker.

Satz A.8 (Momentenerzeugung). (i) Ist $M(t) = E[e^{tX}]$ endlich auf $(-\delta, \delta)$ für ein $\delta > 0$, dann existiert der Erwartungswert $M(z) := E[e^{zX}]$ für alle $z \in \mathbb{C}$ mit $|\mathrm{Re}(z)| < \delta$, und es gilt

$$E[e^{zX}] \quad = \quad \sum_{n=0}^{\infty} \frac{z^n}{n!} E[X^n] \qquad \text{für alle } z \in \mathbb{C} \text{ mit } |z| < \delta.$$

Insbesondere folgt

$$E[X^n] \;=\; M^{(n)}(0) \qquad \text{für alle } n \in \mathbb{Z}_+ \,.$$

(ii) Ist $E[|X|^n] < \infty$ für ein $n \in \mathbb{N}$, dann gilt $\phi \in C^n(\mathbb{R})$ und

$$\phi^{(n)}(t) \quad = \quad i^n \cdot E[X^n e^{itX}] \qquad \text{für alle } t \in \mathbb{R}\,. \tag{A.6}$$

Man beachte, dass die Voraussetzung im ersten Teil des Satzes erfüllt ist, falls $M(s) < \infty$ und $M(-s) < \infty$ für ein festes $s > 0$ gilt. Nach der Jensenschen Ungleichung folgt nämlich aus $M(s) < \infty$ auch

$$M(t) \;=\; E[e^{tX}] \;\le\; E[e^{sX}]^{t/s} \;<\; \infty \qquad \text{für alle } t \in [0,s].$$

Entsprechend folgt $M < \infty$ auf $[-s, 0]$ aus $M(-s) < \infty$.

Beweis. (i) Aus der Voraussetzung und dem Satz von der monotonen Konvergenz ergibt sich

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{s^n}{n!} E[|X|^n] \quad = \quad E\left[e^{s|X|}\right] \quad \le \quad E\left[e^{sX}\right] + E\left[e^{-sX}\right] \quad < \quad \infty \qquad \text{für } s \in (0,\delta).$$

Insbesondere existieren alle Momente $E[X^n]$ ($n \in \mathbb{N}$), sowie die exponentiellen Momente $E[e^{zX}]$ für $z \in \mathbb{C}$ mit $|\mathrm{Re}(z)| < \delta$. Nach dem Satz von Lebesgue erhalten wir für $z \in \mathbb{C}$ mit $|z| < \delta$ zudem

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{z^n}{n!}\, E[X^n] = \lim_{m\to\infty} E\left[\sum_{n=0}^{m} \frac{(zX)^n}{n!}\right] = E\left[\lim_{m\to\infty} \sum_{n=0}^{m} \frac{(zX)^n}{n!}\right] = E[e^{zX}]\,,$$

da $e^{s|X|}$ für $s \ge |z|$ eine Majorante der Partialsummen ist.

(ii) Wir zeigen die Behauptung durch Induktion nach n. Für $n = 0$ gilt (A.6) nach Definition von $\phi(t)$. Ist $E[|X|^{n+1}] < \infty$, dann folgt nach Induktionsvoraussetzung und mit dem Satz von Lebesgue:

$$\begin{aligned} \frac{\phi^{(n)}(t+h) - \phi^{(n)}(t)}{h} \quad &= \quad \frac{1}{h} E\left[(iX)^n \left(e^{i(t+h)X} - e^{itX}\right)\right] \\ &= \quad E\left[(iX)^n \frac{1}{h} \int_t^{t+h} iX e^{isX}\, ds\right] \quad \to \quad E\left[(iX)^{n+1}\, e^{itX}\right] \end{aligned}$$

für $h \to 0$, also

$$\phi^{(n+1)}(t) \quad = \quad E[(iX)^{n+1} e^{itX}].$$

Die Stetigkeit von $\phi^{(n)}(t)$ folgt ebenfalls aus dem Satz von Lebesgue unter der Voraussetzung $E[|X|^n] < \infty$. ■

Beispiele. (i) Für eine Zufallsvariable X mit Verteilungsdichte $f(x) \propto e^{-|x|^{1/2}}$ gilt $E[|X|^n] < \infty$ für alle $n \in \mathbb{N}$. Also ist die charakteristische Funktion beliebig oft differenzierbar. Die momentenerzeugende Funktion $M_X(t)$ ist hingegen nur für $t = 0$ endlich.

(ii) Ein Standardbeispiel einer Verteilung, deren Momente nicht existieren, ist die *Cauchy-Verteilung* mit Dichte

$$f(x) \;=\; \frac{1}{\pi(1+x^2)} \qquad (x \in \mathbb{R}).$$

Für eine Cauchy-verteilte Zufallsvariable X gilt $M_X(t) = \infty$ für alle $t \neq 0$. Trotzdem existiert

$$\phi_X(t) = e^{-|t|} \qquad \text{für alle } t \in \mathbb{R}\,.$$

Die charakteristische Funktion ist allerdings bei 0 nicht differenzierbar.

Bemerkung (Zusammenhang von M und ϕ). Gilt $M < \infty$ auf $(-\delta, \delta)$ für ein $\delta > 0$, dann hat die Funktion M eine eindeutige analytische Fortsetzung auf den Streifen $\{z \in \mathbb{C} : |\mathrm{Re(z)}| < \delta\}$ in der komplexen Zahlenebene, die durch $M(z) = E[\exp(zX)]$ gegeben ist. In diesem Fall gilt

$$\phi(t) \quad = \quad M(it) \qquad \text{für alle } t \in \mathbb{R}.$$

Insbesondere ist die charakteristische Funktion dann durch die momentenerzeugende Funktion eindeutig bestimmt.

Die letzte Bemerkung ermöglicht manchmal eine vereinfachte Berechnung von charakteristischen Funktionen:

Beispiel (Normalverteilungen). (i) Für eine standardnormalverteilte Zufallsvariable Z gilt

$$M_Z(t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{tx-x^2/2}\,dx = e^{t^2/2}\,\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-(x-t)^2/2}\,dx = e^{t^2/2} < \infty \quad \text{für } t \in \mathbb{R}.$$

Die eindeutige analytische Fortsetzung auf $\mathbb{C}$ ist die als Potenzreihe darstellbare Funktion $M_Z(z) = \exp(z^2/2)$. Also ist die charakteristische Funktion gegeben durch

$$\phi_Z(t) = M_Z(it) = e^{-t^2/2} \qquad \text{für alle } t \in \mathbb{R}.$$

(ii) Eine normalverteilte Zufallsvariable X mit Mittel m und Varianz σ^2 können wir darstellen als $X = \sigma Z + m$ mit $Z \sim N(0,1)$. Also gilt

$$M_X(t) = e^{mt}\, M_Z(\sigma t) = \exp\left(mt + \sigma^2 t^2/2\right), \qquad \text{und}$$
$$\phi_X(t) = e^{imt}\, \phi_Z(\sigma t) = \exp\left(imt - \sigma^2 t^2/2\right).$$

Bemerkung (Satz von Bochner). Eine Funktion $\phi : \mathbb{R} \to \mathbb{C}$ ist genau dann eine charakteristische Funktion einer Wahrscheinlichkeitsverteilung auf $\mathbb{R}$, wenn die folgenden Bedingungen erfüllt sind:

(i) $\phi(0) = 1$ und $|\phi(t)| \le 1$ für alle $t \in \mathbb{R}$.

(ii) ϕ ist gleichmäßig stetig.

(iii) ϕ ist *nicht-negativ definit*, d.h.

$$\sum_{i,j=1}^{n} \phi(t_i - t_j) z_i \overline{z_j} \ge 0 \quad \forall\, n \in \mathbb{N},\ t_1, \ldots, t_n \in \mathbb{R},\ z_1, \ldots, z_n \in \mathbb{C}.$$

Dass jede charakteristische Funktion einer Wahrscheinlichkeitsverteilung die Eigenschaften (i)-(iii) hat, prüft man leicht nach. Der Beweis der umgekehrten Aussage findet sich z.B. in Vol. II des Lehrbuchs von Feller [**Feller2**].

Anwendung auf multivariate Normalverteilungen

Multivariate Normalverteilungen haben wir bereits in Abschnitt A.2 eingeführt. Mithilfe von charakteristischen Funktionen können wir eine etwas allgemeinere Definition geben, die auch degenerierte Normalverteilungen (zum Beispiel Dirac-Maße) einschließt:

Definition A.9 (Normalverteilung im $\mathbb{R}^d$). Sei $m \in \mathbb{R}^d$, und sei $C \in \mathbb{R}^{d\times d}$ eine symmetrische, nichtnegativ definite Matrix. Die eindeutige Wahrscheinlichkeitsverteilung $N(m, C)$ im $\mathbb{R}^d$ mit charakteristischer Funktion $\phi(t) = \exp\left(-\frac{1}{2} t \cdot Ct + it \cdot m\right)$ heißt **Normalverteilung mit Mittelwertvektor m und Kovarianzmatrix C.**

Die Existenz und Konstruktion einer Zufallsvariable mit Verteilung $N(m, C)$ ergibt sich aus der folgenden Bemerkung (iii).

Bemerkung (Charakterisierungen und Transformationen von Normalverteilungen). Die folgenden Aussagen beweist man mithilfe von charakteristischen Funktionen:

(i) Ein Zufallsvektor $X : \Omega \to \mathbb{R}^d$ ist genau dann multivariat normalverteilt, wenn jede Linearkombination $\sum_{i=1}^d t_i X_i$ der Komponenten mit $t_1, \ldots, t_d \in \mathbb{R}$ normalverteilt ist. Genauer ist $X \sim N(m, C)$ äquivalent zu

$$t \cdot X \ \sim \ N(t \cdot m, t \cdot Ct) \qquad \text{für alle } t \in \mathbb{R}^d.$$

(ii) Ist $X \sim N(m, C)$, dann gilt

$$AX + b \sim N(Am + b, ACA^T) \qquad \text{für alle } b \in \mathbb{R}^k \text{ und } A \in \mathbb{R}^{k \times d}, k \in \mathbb{N}.$$

(iii) Sind $Z_1, \ldots, Z_d$ unabhängige, standardnormalverteilte Zufallsvariablen, und ist σ eine reelle $d \times d$-Matrix mit $C = \sigma\sigma^T$, dann hat der Zufallsvektor $\sigma Z + m$ mit $Z = (Z_1, \ldots, Z_d)^T$ die Verteilung $N(m, C)$.

(iv) Im Fall $\det C \neq 0$ ist die Verteilung $N(m, C)$ absolutstetig bzgl. des d-dimensionalen Lebesgue-Maßes mit Dichte

$$f(y) \ = \ \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^d |\det C|}} \exp\left(-\frac{1}{2}(y-m) \cdot C^{-1}(y-m)\right) .$$

Beispiel (χ^2-Verteilungen). Wir berechnen die Verteilung vom Quadrat des Abstandes vom Ursprung eines standardnormalverteilten Zufallsvektors im $\mathbb{R}^d$:

$$Z \ = \ (Z_1, ..., Z_d) \ \sim \ N(0, I_d), \quad \|Z\|^2 \ = \ \sum_{i=1}^d Z_i^2.$$

Wegen $f_{|Z_i|}(x) = \frac{2}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{x^2}{2}} \cdot I_{(0,\infty)}(x)$ folgt durch Anwenden des Dichtetransformationssatzes:

$$f_{Z_i^2}(y) \ = \ \sqrt{\frac{2}{\pi}}\, e^{-\frac{y}{2}} \cdot I_{(0,\infty)}(y) \cdot \frac{1}{2\sqrt{y}} ,$$

d.h. Z_i^2 ist $\Gamma(\frac{1}{2}, \frac{1}{2})$-verteilt. Da die Zufallsvariablen $Z_i^2,\ 1 \le i \le d$, unabhängig sind, folgt:

$$\|Z\|^2 \ = \ \sum_{i=1}^d Z_i^2 \ \sim \ \Gamma\left(\frac{1}{2}, \frac{d}{2}\right) .$$

Definition A.10 (χ^2-Verteilung). Die Gamma-Verteilung mit Parametern $1/2$ und $d/2$ heißt auch **Chiquadrat-Verteilung $\chi^2(d)$ mit d Freiheitsgraden**.

Multivariater zentraler Grenzwertsatz

Auch im $\mathbb{R}^d$ gilt ein zentraler Grenzwertsatz:

Satz A.11 (Multivariater zentraler Grenzwertsatz). Seien $X_1, X_2, ... : \Omega \to \mathbb{R}^d$ unabhängige, identisch verteilte, quadratintegrierbare Zufallsvektoren auf $(\Omega, \mathcal{A}, P)$, und sei $S_n = X_1 + \ldots + X_n$. Dann gilt

$$\frac{S_n - E[S_n]}{\sqrt{n}} \ \xrightarrow{\mathcal{D}} \ Z \ \sim \ N(0, C),$$

wobei $C_{jk} = \mathrm{Cov}[X_{1,j}, X_{1,k}]$ die Kovarianzmatrix der Zufallsvektoren X_i ist.

Der Beweis basiert auf folgender Charakterisierung der Verteilungskonvergenz von Zufallsvektoren:

Lemma A.12 (Cramér-Wold Device). *Für Zufallsvariablen $Y, Y_1, Y_2, ... : \Omega \to \mathbb{R}^d$ gilt:*

$$Y_n \xrightarrow{\mathcal{D}} Y \quad \Leftrightarrow \quad p \cdot Y_n \xrightarrow{\mathcal{D}} p \cdot Y \qquad \forall\, p \in \mathbb{R}^d.$$

Beweis. Der Beweis der Implikation „⇒“ ist eine Übungsaufgabe. Umgekehrt gilt:

$$p \cdot Y_n \xrightarrow{\mathcal{D}} p \cdot Y \;\Rightarrow\; E[\exp(ip \cdot Y_n)] \;\to\; E[\exp(ip \cdot Y)] \quad \forall\, p \in \mathbb{R}^d. \tag{A.7}$$

Zudem ist unter dieser Voraussetzung für jedes $i \in \{1, \dots d\}$ die Folge der Verteilungen der eindimensionalen Zufallsvariablen $Y_{n,i} := e_i \cdot Y_n$ ($n \in \mathbb{N}$) schwach konvergent. Daher existiert zu jedem $\varepsilon > 0$ ein $C \in (0, \infty)$, so dass $P[|Y_{n,i}| > C] \le \varepsilon/d$ für alle n, i, und damit

$$P[|Y_n| \notin [-C, C]^d] \;\le\; \sum_{i=1}^{n} P[|Y_{n,i}| > C] \;\le\; \varepsilon \qquad \text{für alle } n \in \mathbb{N}$$

gilt. Somit ist die Folge der Verteilungen μ_n der mehrdimensionalen Zufallsvariablen Y_n ($n \in \mathbb{N}$) eine straffe Folge von Wahrscheinlichkeitsmaßen im $\mathbb{R}^d$. Mit einem ähnlichen Beweis wie im eindimensionalen Fall zeigt man, dass der Satz von Prokhorov auch in diesem Fall gilt. Dabei verwendet man statt der eindimensionalen die multivariaten Verteilungsfunktionen

$$F_n(c_1, ..., c_d) \;=\; P[Y_{n,1} \le c_1, ..., Y_{n,d} \le c_d], \qquad (c_1, \dots, c_d) \in \mathbb{R}^d.$$

Es folgt, dass jede Teilfolge von (μ_n) eine schwach konvergente Teilfolge hat, und mithilfe von (A.7) verifiziert man leicht, dass alle Grenzwerte von Teilfolgen mit der Verteilung μ von Y übereinstimmen. Also konvergiert μ_n schwach gegen μ, d.h. Y_n konvergiert in Verteilung gegen Y. ■

Wir beweisen nun den zentralen Grenzwertsatz im $\mathbb{R}^d$:

Beweis. Für $p \in \mathbb{R}^d$ gilt nach dem eindimensionalen zentralen Grenzwertsatz:

$$p \cdot \left(\frac{S_n - E[S_n]}{\sqrt{n}} \right) \;=\; \frac{1}{\sqrt{n}} \sum_{i=1}^{n} (p \cdot X_i - E[p \cdot X_i]) \;\xrightarrow{\mathcal{D}}\; N\left(0, \mathrm{Var}[p \cdot X_1]\right) \;=\; N(0, p \cdot Cp),$$

da

$$\mathrm{Var}[p \cdot X_1] \;=\; \mathrm{Cov}\left[\sum_k p_k X_{1,k} \,,\, \sum_l p_k X_{1,l} \right] \;=\; \sum_{k,l} p_k p_l C_{kl} \;=\; p \cdot Cp.$$

Ist Y ein $N(0, C)$-verteilter Zufallsvektor, dann ist $N(0, p \cdot Cp)$ die Verteilung von $p \cdot Y$. Mithilfe der Cramér-Wold Device folgt also, dass $(S_n - E[S_n]) / \sqrt{n}$ in Verteilung gegen Y konvergiert. ■