Programmieren in Anwendungen

Annette Bieniusa

Technische Universität Kaiserslautern

bieniusa@cs.uni-kl.de

20./21.06.2013

Überblick

Stochastische Modellbildung

Testtheorie

Korrelation

Stochastische Modellbildung

Zufallsvariablen und deren Eigenschaften

- Messwerte sind i.d.R. nicht-deterministisch und werden daher als *Zufallsvariablen* modelliert.
- Das Erheben von Messdaten entspricht dabei einem *Zufallsexperiment*.
- Zufallszahlen werden mit Grossbuchstaben bezeichnet (X,Y,Z,...), ihre jeweiligen Realisierungen mit entsprechenden Kleinbuchstaben.
- Eine Zufallsvariable ist *diskret*, falls sie nur abzählbar viele Werte annimmt. Eine *kontinuierliche* Zufallszahlen kann hingegen jeden beliebigen Wert aus einem Intervall in $\mathbb{R}$ annehmen.

Reelle Zufallsvariablen

Definition (Reelle Zufallsvariablen)

Eine reelle Zufallsvariable ist eine Funktion $X : \Omega \longrightarrow \mathbb{R}$, die jedem Ereignis $\omega \in \Omega$ eine reelle Zahl $X(\omega)$ zuordnet und, dass die Menge aller Ereignisse, deren Realisierung unterhalb eines bestimmten Wertes liegt, ein Ereignis bilden muss.

- Nicht-reelle Zufallsvariablen können als Zahlenwerte *kodiert* werden.
- Kontinuierliche Zufallsvariablen werden in der Praxis diskretisiert, da nur endlich viele Nachkommastellen erfasst werden können.

Verteilungs- und Dichtefunktion

Definition (Verteilungsfunktion)

Sei X eine Zufallsvariable und $F^X : \mathbb{R} \longrightarrow [0,1]$ eine monoton steigende Funktion. F^X heisst Verteilungsfunktion von X falls

- $F^X(x)$ die Wahrscheinlichkeit dafür angibt, dass X einen Wert kleiner x realisiert, d.h. $F^X(x) = P(X \leq x)$
- $\lim_{x \to -\infty} F^X(x) = 0$
- $\lim_{x \to +\infty} F^X(x) = 1$

Diskrete Dichtefunktionen

Definition

Sei X eine diskrete Zufallsvariable. Die Funktion $f^X : \mathbb{R} \longrightarrow [0, 1]$, für die gilt, dass $F^X(x) = \sum_{x_i \leq x} f^X(x_i)$, ist die *diskrete Dichte* von X.
Für die Wahrscheinlichkeit eines Ereignisses $\{X \in A\}, A \subseteq \mathbb{R}$ gilt

$$P(X \in A) = \sum_{x_i \in A} f^X(x_i) = \sum_{x_i \in A} P(X = x_i)$$

Diskrete Dichtefunktionen: Beispiel

- Die *Binomialverteilung* beschreibt die Anzahl der Erfolge in einer Serie von gleichartigen und unabhängigen Versuchen, die jeweils genau zwei mögliche Ergebnisse haben (Erfolg vs. Misserfolg).
- Sei $p \in [0, 1]$ die Erfolgswahrscheinlichkeit, n die Gesamtanzahl der Versuche und k die Anzahl der Erfolge.
- Dichtefunktion

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

- Verteilungsfunktion

$$F^X(x) = P(X \leq x) = \sum_{k=0}^{x} \binom{n}{k} p^k (1-p)^{n-k}$$

Stetige Dichtefunktionen

Definition

Sei X eine kontinuierliche Zufallsvariable. Die Funktion $f^X : \mathbb{R} \longrightarrow [0, \infty)$, für die gilt, dass $F^X(x) = \int_{-\infty}^{x} f^X(t)dt$, ist die *stetige Dichte* von X.
Für die Wahrscheinlichkeit eines Ereignisses $\{X \in A\}, A \subseteq \mathbb{R}$ gilt

$$P(X \in A) = \int_A f^X(t)dt$$

Stetige Dichtefunktionen: Beispiel

- Die *Normalverteilung* beschreibt eine Vielzahl von naturwissenschaftlicher Vorgänge und Effekte.
- Sei X eine $N(\mu, \sigma^2)$-verteilte Zufallsvariable, wobei μ den Mittelwert und σ^2 die Varianz bezeichnet.
- Dichtefunktion

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

- Verteilungsfunktion

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

Weitere Verteilungen in R

Verteilung	in R	Parameter
Normal-	-norm()	`mean`, sd
Binomial-	-binom()	`size`, prob
Exponential-	-exp()	`rate`
Gleich-	-unif()	`min`, max
Poisson-	-pois()	`lambda`

sowie viele weitere.
Präfixe:

- `r` liefert Zufallszahlen, die der spezifizierten Verteilungsfunktion folgen. Erster Parameter ist hierbei der Umfang der Stichprobe.
- `d` gibt den Wert der Dichtefunktion, `p` den Wert der Verteilungsfunktion an der jeweiligen Stelle.
- `q` bestimmt die Quantile für Werte zwischen 0 und 1.

Zufallszahlen in R

Beispiel: Standardnormalverteilung

- Ziehen von n Zufallszahlen: `rnorm(n, mean=0, sd=1)`
- Dichte im Wert x: `dnorm(x, mean=0, sd=1)`

```
> dnorm(c(-1,0,1))
0.24197 0.39894 0.24197
```

- Verteilungsfunktion im Wert x: `pnorm(x, mean=0, sd=1)`

```
> pnorm(c(-1,0,1))
0.15866 0.50000 0.84134
```

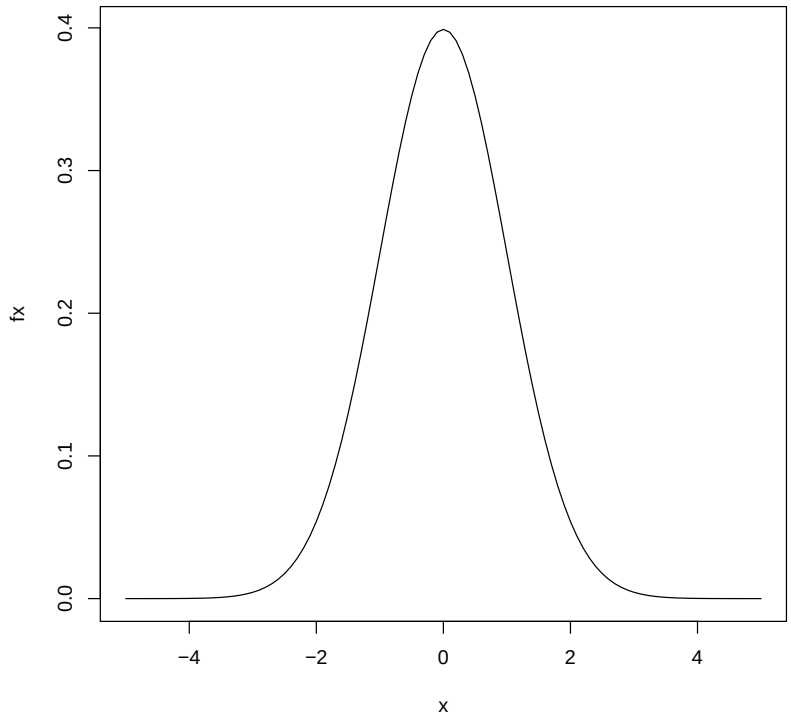
- Quantil für Wahrscheinlichkeit p: `qnorm(p, mean=0, sd=1)`

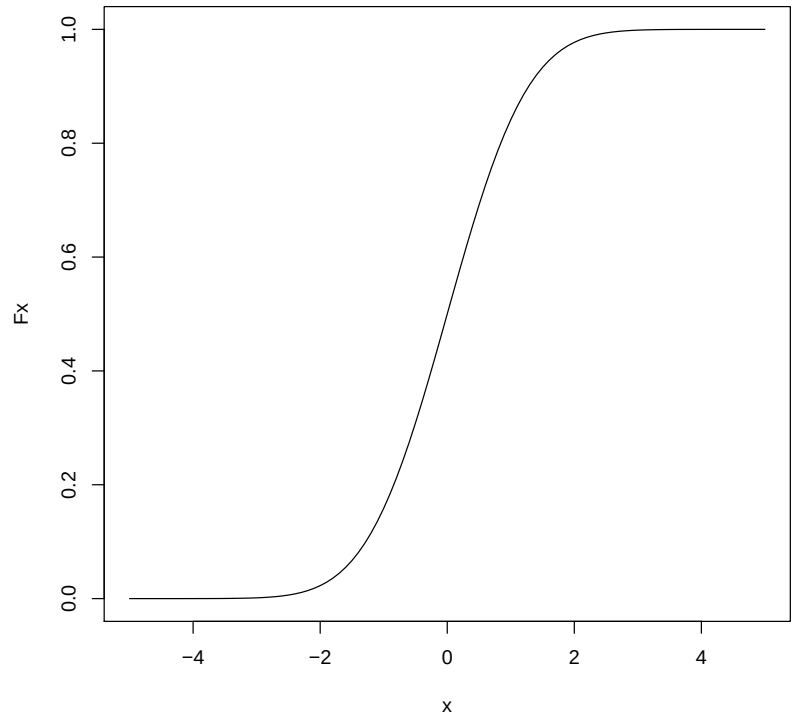
```
> qnorm(c(0.25,0.5,0.75))
-0.67449 0.00000 0.67449
```

Plotten von Verteilungen in R

Beispiel: Standardnormalverteilung

```
x <- seq(from = -10, to = 10, by = 0.1)
fx <- dnorm(x)
plot(x,fx,type="l")
Fx <- pnorm(x)
plot(x,Fx,type="l")
```





Kenngrößen von Zufallsvariablen

Definition (Erwartungswert)

Sei X eine Zufallsvariable und f^X ihre Dichtefunktion. Der *Erwartungswert* $E[X]$ von X ist definiert als

- $E[X] = \sum_{x_i} x_i f^X(x_i)$ für diskrete Zufallsvariablen
- $E[X] = \int_{-\infty}^{+\infty} x f^X(x) dx$ für diskrete Zufallsvariablen

Definition (Varianz)

Die *Varianz* von X ist definiert durch

$$\sigma^2 = Var[X] = E[(X - E[X])^2]$$

Punktschätzer

- Ein *Punktschätzer* schätzt eine relevante Kenngröße einer Verteilung durch die Angabe eines einzelnen Wertes.
- Beispiel: Ein Schätzer für den Erwartungswert einer Zufallsvariablen, basierend auf einer Stichprobe $x_1, \ldots, x_n$, ist das arithmetische Mittel $\bar{x} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} x_i$ (in R: `mean()`).
- Beispiel: Ein Schätzer für die Varianz einer Zufallsvariablen ist $S^2 = \frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^{n} (x_i - \bar{x})^2$ (in R: `var()`).

Intervallschätzer

- Punktschätzer enthalten keine Information über ihre Genauigkeit.
- Sei $I_\alpha \subset \mathbb{R}$ ein Intervall, für das gilt:

$$P(\lambda \in I_\alpha) = 1 - \alpha$$

  wobei λ die zu schätzende Kenngröße bezeichnet. Dann heißt I_α ein Konfidenzintervall zum Niveau $1 - \alpha$ für λ.
- D.h. Mit Wahrscheinlichkeit $1 - \alpha$ liegt der Parameter λ im geschätzten Intervall I_α.

Intervallschätzer: Beispiel

- Für $N(\mu, \sigma^2)$-verteilte Zufallsvariablen ist das Konfidenzintervall zum Niveau $1 - \alpha$ für den Erwartungswert μ gegeben durch:

$$I_\alpha = [\bar{x} - t_{1-\frac{\alpha}{2},n-1}\frac{S_n}{\sqrt{n}}; \bar{x} + t_{1-\frac{\alpha}{2},n-1}\frac{S_n}{\sqrt{n}}]$$

  wobei $t_{1-\frac{\alpha}{2},n-1}$ das $1 - \alpha_2$-Quantil der t-Verteilung mit $n - 1$ Freiheitsgraden bezeichnet.

- Berechnung in R:

```
> konf.level <- qt(0.975, length(x) - 1)
    * (sd(x)) / sqrt (length(x))
> lower <- mean(x) - konf.level
> uppder <- mean(x) + konf.level
```

Testtheorie

Hypothesen

- Bei einem statistischen Testproblem stellt man eine Behauptung auf (*Nullhypothese*, H_0), deren Gültigkeit mit Hilfe statistischer Verfahren überprüft werden soll.
- Die entgegengesetzte Aussage bezeichnet man als *Alternativhypothese* H_1.
- Nur die Ablehnung von H_0 stellt eine statistisch verlässliche Entscheidung da, nicht aber die Annahme der Nullhypothese!

Hypothesen: Beispiel

1. Besitzen Männer und Frauen in Deutschland unterschiedliche Intelligenzquotienten?
   Sei IQ_m der Intelligenzquotient deutscher Männer, IQ_w der Intelligenzquotient deutscher Frauen. Das Testproblem lautet dann:
   $$H_0 : IQ_m = IQ_w \quad \text{vs.} \quad H_1 : IQ_m \neq IQ_w$$
   Da die Alternativhypothese aus zwei Möglichkeiten besteht (IQ der Frauen ist größer oder kleiner), spricht man von einer *zweiseitigen* Hypothese.
2. Ist ein neues Medikament besser als ein bereits zugelassenes Medikament?
   Sei $q = 0.6$ die Heilungswahrscheinlichkeit für das bereits zugelassene Medikament, p die Heilungswahrscheinlichkeit für das neue Medikament. Das Testproblem lautet dann:
   $$H_0 : p \leq 0.6 \quad \text{vs.} \quad H_1 : p > 0.6$$
   Hierbei handelt es sich um eine *einseitige* Hypothese.

Fehler 1. und 2. Art

- Bei einem *Fehler 1. Art* wird die Nullhypothese irrtümlicherweise verworfen.
- Bei einem *Fehler 2. Art* wird die Nullhypothese irrtümlicherweise beibehalten.
- Die Wahrscheinlichkeit für einen Fehler 1. Art bezeichnet man als *Signifikanzniveau* α des Tests.

p-Wert

- Zur Überprüfung einer Nullhypothese berechnet man mit Hilfe der Stichprobe eine *Prüfgröße / Teststatistik* $T(x_1, \ldots, x_n)$, an Hand derer eine Entscheidung getroffen wird.
- Der *p-Wert* ist die Wahrscheinlichkeit dafür, dass man unter der Nullhypothese H_0 die ermittelte Teststatistik beobachtet.
- Je kleiner der p-Wert, desto unwahrscheinlicher ist die Gültigkeit von H_0.
- Häufig wird die Nullhypothese H_0 abgelehnt bei einem p-Wert ≤ 0.05 (bzw. 5%).

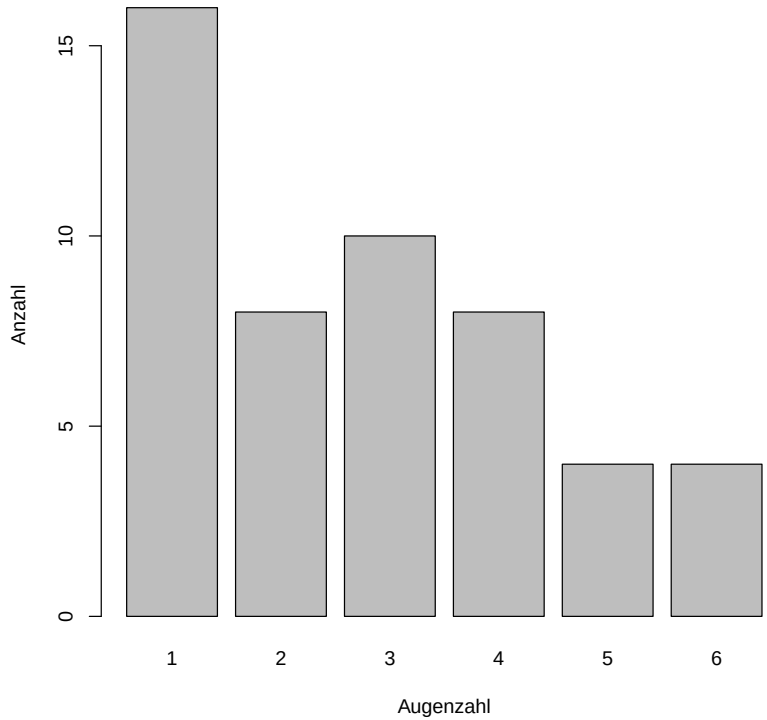
Testentscheidungen

1. Die Hypothese, deren Gültigkeit man zeigen will, muss als Alternativhypothese H_1 formuliert werden.
2. Je nach Testergebnis:
   - Ist $p \leq 0.05$, wird die Nullhypothese H_0 verworfen, und man entscheidet sich für H_1 mit Irrtumswahrscheinlichkeit von 5%.
   - Ist $p > 0.05$, ist keine Testentscheidung möglich!

χ^2-Verteilungstest

- Voraussetzungen: Sei $x_1, \ldots, x_n$ eine Stichprobe bestehend aus Realisationen von unabhängigen und identisch verteilten Zufallsvariablen, deren Wertebereich aus J Kategorien besteht. Für jede dieser Kategorien muss gelten, dass die erwartete Häufigeit in jeder Kategorie mindestens 5 beträgt: $E_j \geq 5$ für $j = 1, \ldots, J$.
- Der χ^2-Verteilungstest überprüft, ob die einzelnen Kategorien in einer vorgegebenen Häufigkeit auftreten.

Beispiel: Würfel



- Vermutung: Würfel ist gezinkt!
- Nullhypothese H_0: Die erwarteten Häufigkeiten sind für alle Augen gleich.

Beispiel: Würfel

```
> table(wuerfel$augenzahl)

 1  2  3  4  5  6
16  8 10  8  4  4

> chisq.test(table(wuerfel$augenzahl),p = rep(1/6,6))

Chi-squared test for given probabilities

data:  table(wuerfel$augenzahl)
X-squared = 11.92, df = 5, p-value = 0.0359
```

- H_0 kann auf dem 5%-Signifikanzniveau verworfen werden.

Binomialtest

- Voraussetzungen: Sei $x_1, \ldots, x_n$ eine Stichprobe bestehend aus Realisationen von unabhängigen Wiederholungen eines Zufallsexperiments, deren Wertebereich aus 2 Kategorien besteht.
- Der Binomialtest überprüft, ob die beiden Kategorien in einer vorgegebenen Häufigkeit auftreten.
- Nullhypothese H_0: Die erwartete Häufigkeit q für die erste Kategorie beträgt (maximal) q_0.

$$H_0 : q = q_0 \quad \text{bzw.} H_0 : q \leq q_0$$

Beispiel: Füllmengen in Verpackungen

- Ein Hersteller von Gummibärchen garantiert, dass höchstens 2.5% seiner Verpackungen von der gekennzeichneten Füllmenge abweichen.
- Ein Verbrauchermagazin will diese Behauptung überprüfen und misst nach. Bei 19 von 540 Verpackungen weicht dass Gewicht um mehr als die zulässige Schwankung vom vorgesehenen Gewicht ab.
- In der Stichprobe verstoßen 3.5% der Verpackungen gegen die Spezifikation, aber ist diese Abweichung in der Stichprobe signifikant?

Beispiel: Füllmengen in Verpackungen

```
> binom.test(19,540,0.025,alternative="g")
Exact binomial test

data:  19 and 540
number of successes = 19, number of trials = 540,
  p-value = 0.08892
alternative hypothesis: true probability of success
  is greater than 0.025
95 percent confidence interval:
 0.02316077 1.00000000
sample estimates:
probability of success
            0.03518519
```

- alternative="g" testet die Hypothese, dass der Anteil der abweichenden Stichproben größer als 0.025 ist.
- H_0 kann auf dem 5%-Signifikanzniveau nicht verworfen werden.
- Dem Hersteller kann auf Grund dieser Stichprobe kein Betrug vorgeworfen werden.

Test auf Normal-Verteilung bei metrischen Daten

- Der Shapiro-Wilk-Test (shapiro.test(...)) bewertet die folgende Nullhypothese:
  H_0 : Die Zufallsvariable ist $N(\mu, \sigma^2)$-verteilt, wobei $\mu \in \mathbb{R}, \sigma^2 > 0$ beliebig sind.
- Über den Test kann nur entschieden werden, ob die Daten *nicht* normalverteilt sind!
- Es ist hilfreich darüber hinaus grafische Hilfsmittel zu verwenden, um die Verteilung der Daten zu approximieren.
- Typische Visualisierungen: Histogramme, Box-Plots, Q-Q-Diagramme

Mittelwertsvergleich mit t-Test

- Der t-Test überprüft, ob sich die Mittelwerte zweier Gruppen normalverteilter Zufallsvariablen voneinander unterscheiden.
- In R: `t.test(x, y, alternative, paired, var.equal)`
- `x`,y: zu vergleichende Daten
- alternative=c("two.sided","less","greater"): Varianten für die Alternativhypothese
- var.equal = TRUE: Gibt an, ob Varianzgleichheit bei den Populationen vorliegt
- paired: Gibt an, ob x und y als gepaarte Stichprobe anzusehen sind

Beispiel: Nettokaltmieten

- Unterscheiden sich die Nettokaltmieten pro m^2 bei Ein- und Zweizimmerwohnungen?

X	8.70	11.28	13.24	8.37	12.16	11.04	10.47	11.16	4.28	19.54
Y	3.36	18.35	5.19	8.35	13.10	15.65	4.29	11.36	9.09	

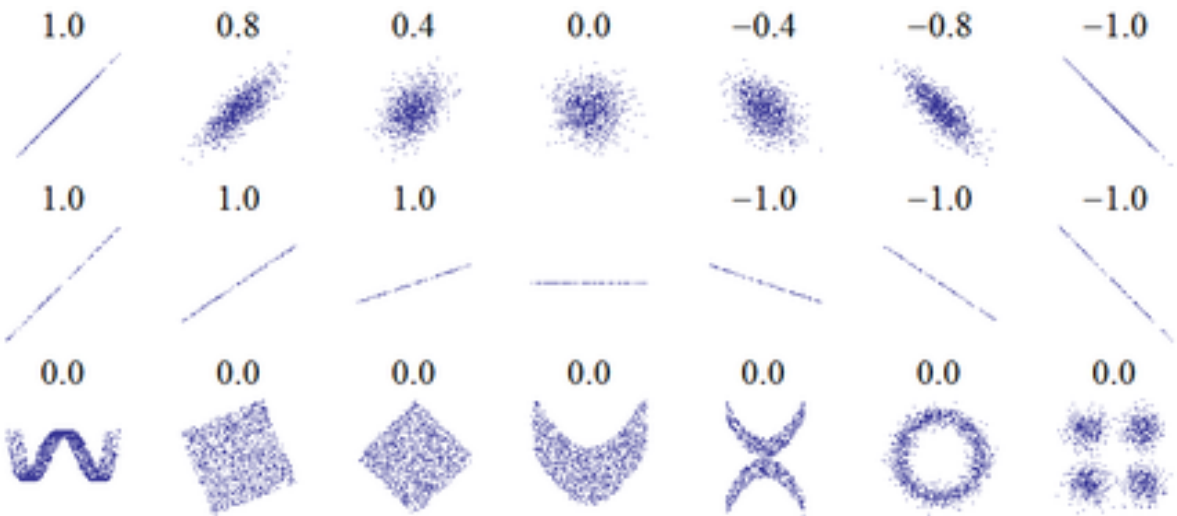
```
t.test(X,Y, var.equal = FALSE, paired = FALSE)
Welch Two Sample t-test
data: X and Y
t = 0.5471, df = 14.788, p-value = 0.5925
alternative hypothesis: true difference in means is
not equal to 0
```

Korrelation

Korrelation

- Eine Korrelation beschreibt eine Beziehung zwischen zwei oder mehreren Merkmalen, Ereignissen oder Größen.
- Der Korrelationskoeffizient ist ein dimensionsloses Maß für den Grad des *linearen Zusammenhangs* zwischen zwei (mindestens intervallskalierbaren) Merkmalen.
  Pearson'scher Korrelationskoeffizient:

$$\rho = \frac{Cov(X,Y)}{\sigma(X)\sigma(Y)} \quad \text{mit} \quad Cov(X,Y) = E[(X - E[X])(Y - E[Y])]$$



Korrelationstest auf metrischen Daten

- Mit der Funktion cor.test(data1,data2) kann man verschiedene Korrelationskoeffizienten und deren Signifikanz berechnen.
- Standardmässig wird der Pearson'sche Korrelationskoeffizient verwendet.
- Beispiel: Korrelation zwischen Sonneneinstrahlung und Temperatur bei Luftqualitätsmessungen

```
> cor.test(airquality$Solar, airquality$Temp)

    Pearson's product-moment correlation
data: airquality$Solar and airquality$Temp
t = 3.4437, df = 144, p-value = 0.0007518
alternative hypothesis: true correlation is not equal to 0
95 percent confidence interval:
  0.1187113 0.4194913
sample estimates:
      cor
0.2758403
```

Korrelation für kategorielle Daten

- Eine *Kontingenztafel* listet die Anzahl der Beobachtungen in den Schnittmengen der jeweiligen Kategorien.

	1	2	...	J	Summe
1	O_{11}	O_{12}	...	O_{1J}	$O_{1\bullet}$
2	O_{21}	O_{22}	...	O_{2J}	$O_{2\bullet}$
...					
I	O_{I1}	O_{I2}	...	O_{IJ}	$O_{I\bullet}$
Summe	$O_{\bullet 1}$	$O_{\bullet 2}$	...	$O_{\bullet J}$	n

Beispiel: Haar- und Augenfarbe

Kontingenztafel basierend auf einer Befragung von 592 Personen

	blau	braun	gruen	nuss	gesamt
blond	94	7	16	10	127
braun	84	119	29	54	286
rot	17	26	14	14	71
schwarz	20	68	5	15	108
gesamt	215	220	64	93	592

χ^2- Unabhängigkeitstest

- Voraussetzungen: Von einem Paar (X, Y) von Zufallsvariablen liegt eine Stichprobe $(x_1, y_1), \ldots, (x_n, y_n)$ von unabhängigen Wiederholungen vor. Die erwarteten Häufigkeiten E_{ij} müssen mindestens den Wert 5 betragen, wobei diese wie folgt aus der Kontingenztabelle ermittelt werden können:

$$E_{ij} = \frac{O_{i\bullet} O_{\bullet j}}{n}$$

Beispiel: Haar- und Augenfarbe

```
> chisq.test(data$haar, data$auge)

Pearson's Chi-squared test

data:  ha$haar and ha$auge
X-squared = 138.2898, df = 9, p-value < 2.2e-16
```

- Nullhypothese H_0: Haar- und Augenfarbe sind unabhängig voneinander.
- Da der p-Wert < 0.05, kann die Nullhypothese verworfen werden.

Korrelation und Kausalzusammenhang

Beispiele

- Je mehr Eiscreme in einem Monat verkauft wird, desto höher ist auch die Rate von Ertrunkenen am Meer und Badeseen. Daher impliziert der Genuss von Eiscreme eine erhöhte Gefahr von Badeunfällen.
- Je mehr Feuerwehrleute ein Feuer bekämpfen, desto größer ist das Feuer. Der verstärkte Einsatz von Löschkräften führt also zu größeren Brandschäden.

- Aus der Korrelation zweier Ereignissen lässt sich nicht ableiten, dass eines der Ereignisse das andere bedingt.
- Beide könnten auch durch eine dritte Größe bedingt sein oder inhaltlich unabhängig sein (*Scheinkorrelation*, Beispiel: Zusammenhang zwischen Geburtenzahlen und Vorkommen von Störchen).
- Lesehinweis: `http://en.wikipedia.org/wiki/Correlation_does_not_imply_causation`

Ausblick: Regressionsanalyse

- Mathematische Modelle zur genaueren Charakterisierung des Zusammenhangs zweier Faktoren
- Einfaches lineares Regressionsmodell:

$$Y = \beta_0 + \beta_1 x + \epsilon$$

- Residuum ϵ umfasst die "Zufallskomponente" in der Beobachtung
- Dabei wird angenommen, dass ϵ normalverteilt unter $N(0, \sigma^2)$ ist.
- Parameter β_0 und β_1 werden mit Hilfe der Stichprobe geschätzt, indem beispielsweise die Residuenquadratsumme minimiert wird.
- In R: `lm(data1 ~ data2)`