

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
1.1	Hauptbegriffe	1
1.2	Zielgruppen	2
1.2.1	Einsteiger/innen	2
1.2.2	Physiker/innen	3
1.2.3	SAS-Anwender/innen	4
1.3	Anmerkungen zur Notation	5
1.4	Symbole und Formelzeichen	6
1.5	Gliederung des Buches	11
1.6	Datenmaterial zu diesem Buch	12
2	Wahrscheinlichkeitstheorie	13
2.1	Was ist Wahrscheinlichkeit?	13
2.1.1	Ausgangssituation	13
2.1.2	Ermittlung von klassischen Wahrscheinlichkeiten	14
	<i>Beispiel „Münzwurf“</i>	14
	<i>Beispiel „Zwei Kugeln“</i>	14
	<i>Beispiel „N Münzwürfe“</i>	15
	<i>Beispiel „Verbogene Münze (Teil 1)“</i>	15
2.1.3	Formale Definition des Begriffs Wahrscheinlichkeit	16
2.2	Wahrscheinlichkeit abstrakt mathematisch	17
2.2.1	Der Wahrscheinlichkeitsraum	17
	<i>Beispiel „Verbogene Münze (Teil 2)“</i>	18
	<i>Beispiel „Maxwell-Boltzmann-Verteilung“</i>	18
2.2.2	Bedingte Wahrscheinlichkeit und statistische Unabhängigkeit	18
	<i>Beispiel „Bedingte Wahrscheinlichkeit“</i>	19
2.2.3	Zufallsvariablen	20
2.2.4	Die kumulative Verteilungsfunktion	20
2.2.5	Beispiele für kumulative Verteilungen	21
	<i>Beispiel „10-Euro Münze (Teil 1)“</i>	21
	<i>Beispiel „Kumulative Maxwell-Boltzmann-Verteilung“</i>	21
	<i>Beispiel „Kumulative Binomialverteilung“</i>	22
	<i>Beispiel „Kumulative Poisson-Verteilung“</i>	23
2.2.6	Die Dichtefunktion	23
	<i>Beispiel „10-Euro Münze (Teil 2)“</i>	24

	<i>Beispiel „Energiedichte der Maxwell-Boltzmann-Verteilung“</i>	24
2.2.7	Multidimensionale Verteilungen	25
2.3	Erwartungswert, Varianz, Korrelation	25
2.3.1	Varianz von Funktionen von Zufallsvariablen	26
2.3.2	Das Gaußsche Fehlerfortpflanzungsgesetz	28
2.4	Charakteristische Funktion und Momente	29
2.4.1	Die charakteristische Funktion einer Verteilung	29
2.4.2	Momente und Kumulanten	29
2.4.3	Kumulanten niedrigster Ordnung	30
2.4.4	Zentrale Momente niedrigster Ordnung	31
2.5	Die Berechnung von Verteilungen mit Hilfe der Deltafunktion	31
2.5.1	Verteilung von Funktionen einer Zufallsvariablen	31
2.5.2	Die Erwartungswerte von Delta- und Thetafunktion	32
2.5.3	Verallgemeinerungen auf mehrere Zufallsvariable	32
2.6	Grenzverteilungen und zentraler Grenzwertsatz	33
2.6.1	Historischer Exkurs zur Gauß-Verteilung	33
2.6.2	Zentraler Grenzwertsatz nach Lindenber-Lévy	34
2.6.3	Lévy-Verteilungen	35
2.7	Quantile	37
2.8	Ergänzungen	38
2.8.1	Symmetrierelationen	38
2.8.2	Erwartungswerte von quadratischen Formen	38
2.8.3	Kombinatorik	38
3	Verteilungen	39
3.1	Eindimensionale diskrete Verteilungen	39
3.1.1	Hypergeometrische Verteilung	39
	<i>Beispiel „T-Shirts“</i>	40
	<i>Beispiel „6 aus 49“</i>	41
	<i>Beispiel „Komitee“</i>	41
	<i>Beispiel „Gewinner aus der falschen Stadt“</i>	42
3.1.2	Negative hypergeometrische Verteilung	42
3.1.3	Binomialverteilung	43
	<i>Beispiel „Zwei Grundaufgaben der Binomialverteilung“</i>	46
	<i>Beispiel „Glücksrad“</i>	47
3.1.4	Poisson-Verteilung	48
	<i>Beispiel „Ausfälle einer technischen Anlage“</i>	51
	<i>Beispiel „Giftpilze“</i>	51
3.1.5	Geometrische Verteilung	53
3.1.6	Negative Binomialverteilung	55
3.1.7	Tabellen der eindimensionalen diskreten Verteilungen	55
3.2	Eindimensionale kontinuierliche Verteilungen	58
3.2.1	Gauß-Verteilung	58
3.2.2	Cauchy-Verteilung	63
3.2.3	Chi-Quadrat-Verteilung	65
3.2.4	Nichtzentrale Chi-Quadrat-Verteilung	69
3.2.5	Student-Verteilung	70

3.2.6	Nichtzentrale Student-Verteilung	74
3.2.7	F-Verteilung	75
3.2.8	Nichtzentrale F-Verteilung	77
3.2.9	Exponentialverteilung	77
3.2.10	Weibull-Verteilung	79
3.2.11	Tabellen der eindimensionalen kontinuierlichen Verteilungen .	82
3.3	Mehrdimensionale Verteilungen	85
3.3.1	n -dimensionale Gauß-Verteilung	85
3.3.2	Zweidimensionale Gauß-Verteilung	86
4	Mathematische Stichproben, Messreihen	87
4.1	Definition, Mittelwert und Stichprobenvarianz	87
4.1.1	Definition einer eindimensionalen Stichprobe und verteilungsunabhängige Eigenschaften	87
4.1.2	Einschub: Fehlerrechnung im physikalischen Praktikum . . .	90
4.1.3	Verteilung der Stichprobenmomente bei Gauß-Verteilung . .	92
4.2	Konfidenzintervalle	93
4.2.1	Begriffe	93
4.2.2	Eine Tautologie als Basis	94
4.2.3	Die Tautologie für $\hat{\mu}$ und $\hat{\sigma}^2$	96
4.2.4	μ -Konfidenzintervalle bei bekanntem σ	96
4.2.5	Beispiele für μ -Konfidenzintervalle bei bekanntem σ	97
	<i>Beispiel „Benzinverbrauch“</i>	97
4.2.6	μ -Konfidenzintervall bei unbekanntem σ	97
4.2.7	Beispiele für μ -Konfidenzintervalle bei unbekanntem σ	99
	<i>Beispiel „Spülmittel (Teil 1)“</i>	101
	<i>Beispiel „Spülmittel (Teil 2)“</i>	101
	<i>Beispiel „Kontoführung (Teil 1)“</i>	102
	<i>Beispiel „Kontoführung (Teil 2)“</i>	102
	<i>Beispiel „Astronomische Distanz“</i>	103
	<i>Beispiel „Körpergröße“</i>	104
4.2.8	Konfidenzintervall für die Varianz σ^2	105
4.2.9	Beispiele für Konfidenzintervalle für die Varianz σ^2	107
	<i>Beispiel „Betonstahlmatten“</i>	108
4.2.10	Prognoseintervalle	109
4.2.11	Beispiele für Prognoseintervalle	109
	<i>Beispiel „$\hat{\mu}$-Prognoseintervall“</i>	109
	<i>Beispiel „$\hat{\sigma}^2$-Prognoseintervall“</i>	110
4.3	Parametertests	110
4.3.1	Begriffe: Nullhypothese, Prüfgröße, p-Wert	110
4.3.2	Der „N-Test“ (Test von μ bei bekanntem σ)	112
4.3.3	Beispiele für den „N-Test“	115
	<i>Beispiel „Zuckerpakete“</i>	115
	<i>Beispiel „Massenprodukte 1“</i>	115
	<i>Beispiel „Massenprodukte 2“</i>	117
4.3.4	Der t-Test (Test von μ bei unbekanntem σ)	119
4.3.5	Beispiele für den t-Test	120

	<i>Beispiel „Akkulaufzeit“</i>	120
	<i>Beispiel „Cholesterin 1“</i>	120
	<i>Beispiel „Wasserverbrauch“</i>	121
	<i>Beispiel „Autoreifen“</i>	122
	<i>Beispiel „Tankstelle“</i>	122
	<i>Beispiel „Cholesterin 2“</i>	123
4.3.6	Der t-Verschiebungstest	124
4.3.7	Der doppelte „N-Test“	125
4.3.8	Beispiele für den doppelten „N-Test“	126
	<i>Beispiel „Zweierlei Autoreifen (Teil 1)“</i>	126
4.3.9	Der doppelte t-Test	127
4.3.10	Beispiele für den doppelten t-Test	128
	<i>Beispiel „Zweierlei Autoreifen (Teil 2)“</i>	128
	<i>Beispiel „Vitamin C“</i>	128
4.3.11	Der asymptotische Test bei ungleichen Varianzen	129
4.3.12	Beispiele für den asymptotischen Test	130
	<i>Beispiel „Ziegel“</i>	130
4.3.13	Test der Varianz σ^2	131
4.3.14	Beispiele für Test der Varianz	132
	<i>Beispiel „Blumenzwiebeln“</i>	132
	<i>Beispiel „Abfüllanlage“</i>	132
4.4	Power-Analyse	133
4.4.1	Begriffe: β -Fehler, Power, Güte, OC	133
4.4.2	Das Forellenbeispiel	134
4.4.3	Illustrationen des „Forellenbeispiels“ mit R und SAS	136
	<i>Beispiel „Forellen: β-Fehler“</i>	136
	<i>Beispiel „Forellen: OC-Kurven“</i>	137
4.4.4	Die analytische linksseitige „ μ -power“-Theorie	138
4.4.5	R-Werkstatt für die allgemeine „ μ -power“-Theorie	140
4.4.6	Anwendungsbeispiele für die „ μ -power“-Theorie mit R	140
	<i>Beispiel „Forellen: μ-power-Analyse“</i>	140
	<i>Beispiel „Simple Power-Analyse elementar“</i>	142
	<i>Beispiel „Simple Power-Analyse mit pwr“</i>	143
4.4.7	Die analytische „ μ -sample-size“-Theorie	143
4.4.8	R-Werkstatt für die „ μ -sample-size“-Theorie	144
4.4.9	Beispiele für die „ μ -sample-size“-Theorie mit R	145
	<i>Beispiel „Stahlprüfung“</i>	145
	<i>Beispiel „Milchfettprüfung“</i>	147
5	Regression	149
5.1	Einführung	149
5.1.1	Was ist Regressionsanalyse?	149
5.1.2	Der lineare Regressionsansatz	150
5.1.3	Die Modellgleichung	150
5.1.4	(Ko-)Varianzanalyse und kategoriale Faktoren	150
5.2	Annahmen	151
5.2.1	Die acht Annahmen des klassischen linearen Modells	151

5.3	Modellparameter, Schätzung und Residuen	153
5.3.1	Deterministische Größen im klassischen linearen Modell . . .	153
5.3.2	Zufällige Größen im klassischen linearen Modell	154
5.3.3	Erwartungswert, Kovarianz und geschätzte Kovarianz der zufälligen Größen	155
5.3.4	Ein alternativer Ausdruck für die Varianzen von $\hat{\beta}$	156
5.3.5	Geometrische Eigenschaften aufgrund des KQ-Prinzips	157
5.3.6	Prognose für eine zukünftige Versuchseinstellung	158
5.4	Quadratsummen und Varianzanalyse	159
5.4.1	Quadratsummen und die „ANOVA-Tabelle“	159
5.4.2	Additive Zerlegung der korrigierten Gesamtstreuung	160
5.4.3	Berücksichtigung von Mehrfachversuchen	160
5.4.4	Zerlegung der Reststreuung bei Mehrfachversuchen	162
5.4.5	Das Bestimmtheitsmaß	162
5.4.6	Zerlegung der unkorrigierten Gesamtstreuung	163
5.5	Verteilungseigenschaften	163
5.5.1	Verteilung von Linearkombinationen der Stör-Variablen . . .	164
5.5.2	Drei grundlegende Verteilungseigenschaften	164
5.5.3	Verteilung der standardisierten Regressionsparameter	165
5.5.4	Verteilungseigenschaften der LOF-Quadratsummen	165
5.6	Hypothesentests	166
5.6.1	Der Overall-F-Test (Goodness-of-Fit-Test)	166
5.6.2	Der partielle F-Test	166
5.6.3	Der partielle t-Test	167
5.6.4	Der Lack-of-Fit-Test	167
5.6.5	Resumé: Die vier Tests der linearen Regression	168
5.6.6	Output von R und SAS	169
5.6.7	Beispiele für Regression und Hypothesentests	171
	<i>Beispiel „Blutdruck (Teil 1)“</i>	171
	<i>Beispiel „Blutdruck (Teil 2)“</i>	172
	<i>Beispiel „Blutdruck (Teil 3)“</i>	174
	<i>Beispiel „Stahlausbeute“</i>	175
	<i>Beispiel „Eukalyptusbäume“</i>	177
5.7	Konfidenzintervalle und Prognoseintervalle	179
5.7.1	Zusammenfassung: Konfidenz- und Prognoseintervalle	179
5.7.2	Beispiele	180
	<i>Beispiel „Stahlhärte“</i>	180
	<i>Beispiel „Sojabohnen (Teil 1)“</i>	184
	<i>Beispiel „Fallbeschleunigung“</i>	186
	<i>Beispiel „Federkonstante“</i>	189
5.8	Spezialfall: Einfache lineare Regression	191
5.8.1	Schwerpunktkoordinaten	191
5.8.2	Deterministische Größen	191
5.8.3	Zufällige Größen	192
5.8.4	Versuchsplanung bei der einfachen linearen Regression	192
5.8.5	Quadratsummen und Bestimmtheitsmaß	193
5.8.6	Konfidenz- und Prognoseintervall	193

5.8.7	Beispiele	193
	<i>Beispiel „Sojabohnen (Teil 2)“</i>	193
5.9	Modelldiagnose	195
5.9.1	Analyse der erklärenden Variablen	195
	<i>Beispiel „VIF“</i>	197
5.9.2	Analyse der Stör-Variablen	200
5.9.3	Einflussanalyse	203
5.9.4	Das Diagnose-Quartett <code>plot(lm(...))</code>	205
5.9.5	Beispiele zur Modelldiagnose	208
	<i>Beispiel „Fitness“</i>	208
	<i>Beispiel „Forbes“</i>	213
5.9.6	Alternative Modellierungsansätze nach Modelldiagnose	215
	<i>Beispiel „Reinigungsprozess“</i>	219
5.10	Nichtlineare Regression	220
5.10.1	Schätzverfahren der nichtlinearen Regression	220
5.10.2	R-Beispiele für Nichtlineare Regression	221
	<i>Beispiel „Pflanzenwachstum“</i>	221
	<i>Beispiel „Windgeschwindigkeit“</i>	223
6	Varianzanalyse	225
6.1	Einführung	225
6.1.1	Was ist Varianzanalyse?	225
6.1.2	Was ist Kovarianzanalyse?	226
6.1.3	Die Modelle der Varianzanalyse	226
6.1.4	Die hierarchische Fragestellung in der ANOVA und das Problem der mehrfachen Tests	227
6.1.5	Varianzanalyse mit R	228
6.2	Varianzanalyse mit festen Effekten	229
6.2.1	One-way ANOVA (einfaktorielle Varianzanalyse)	229
	<i>Beispiel „Stellen-Zugfestigkeit“</i>	232
	<i>Beispiel „Lehrmethoden-Zeugnis“</i>	235
6.2.2	Two-way ANOVA mit einfacher Besetzung	238
	<i>Beispiel „Glasart-Phosphorart-Helligkeit“</i>	239
6.2.3	Two-way ANOVA mit mehrfacher Besetzung	242
	<i>Beispiel „Materialien-Temperaturen-Lebensdauer“</i>	242
	<i>Beispiel „Preise-Werbungen-Absatz“</i>	244
	<i>Beispiel „Stoffe-Tage-Festigkeit-Block“</i>	248
	<i>Beispiel „Drucke-Chargen-Ausschuss-Block“</i>	250
6.2.4	Three-way und Four-way ANOVA (einfache Besetzung): Lateinische und Griechisch-Lateinische Quadrate	253
	<i>Beispiel „Treibstoff-Herstellung (Teil 1)“</i>	255
	<i>Beispiel „Treibstoff-Herstellung (Teil 2)“</i>	256
6.2.5	Kovarianzanalyse mit festen Effekten (ANCOVA)	257
	<i>Beispiel „Kilometerleistung“</i>	257
	<i>Beispiel „Truthahngewicht“</i>	258

7	Versuchsplanung	263
7.1	Einführung	263
7.1.1	Einsatzgebiet, Zielsetzung	263
7.1.2	Zwei Grundprinzipien der Versuchsplanung	264
7.1.3	Arten und Zielsetzungen von Versuchsplänen	265
7.1.4	Momentenmatrix und Design-Momente	267
7.2	Vollfaktorielle Pläne	269
7.2.1	Vollfaktorielle Versuchspläne (Definition)	269
7.2.2	Konstruktion faktorieller Pläne mit R	272
7.2.3	Auswertung vollfaktorieller Versuche mit FrF2	274
	<i>Beispiel „Lignit-Konversion“</i>	274
	<i>Beispiel „Prozessentwicklung“</i>	280
	<i>Beispiel „Wirbelschichtreaktor“</i>	285
7.3	Teilfaktorielle Pläne	288
7.3.1	Der Begriff Vermengung (Confounding)	288
7.3.2	Generatoren und Alias-Strukturen	288
7.3.3	Resolution, Aberration und andere Begriffe	290
7.3.4	Konstruktion teilfaktorieller Pläne mit R	293
	<i>Beispiel „rsm versus FrF2“</i>	295
	<i>Beispiel „Vier Aliasketten“</i>	297
7.3.5	Anzahl der Versuche versus möglichem Nutzen	300
7.3.6	Screening Fallstudien mit 2^{k-s} -Plänen	301
	<i>Beispiel „Schlagbiegefestigkeit“</i>	301
	<i>Beispiel „Radfahren“</i>	305
	<i>Beispiel „Spritzgießen“</i>	307
7.3.7	Aufspaltung vollfaktorieller 2^k -Pläne in Blöcke	311
	<i>Beispiel „Aufspaltung von 2^3-Plänen in Blöcke“</i>	313
	<i>Beispiel „Aufspaltung von 2^4-Plänen in Blöcke“</i>	313
	<i>Beispiel „Aufspaltung von 2^5-Plänen in Blöcke“</i>	315
7.4	Qualitätskriterien für Versuchspläne	316
7.4.1	Die Vorhersagevarianz	316
	<i>Beispiel „varfcn für (teil)faktorielle Pläne“</i>	319
7.4.2	Drehbarkeit, Orthogonalität und Uniformität	323
7.5	Response Surface Methodology (RSM)	325
7.5.1	Einführung	325
7.5.2	Bausteine der RSM, FO und SO Designs	328
7.5.3	Central Composite Designs (CCD)	330
7.5.4	RSM Werkzeuge	332
	<i>Beispiel „Vorhersagevarianz eines CCD-Plans“</i>	335
	<i>Beispiel „Schlechte Uniformität“</i>	336
	<i>Beispiel „Studie zur Uniformität“</i>	337
7.6	Beispiele für RSM-Anwendungen	339
7.6.1	Quadratische Regression mit rsm	339
	<i>Beispiel „2d-Optimum, orthogonal geblocktes CCD“</i>	339
	<i>Beispiel „3d-Optimum, ungeblocktes CCD“</i>	344
7.6.2	Umgang mit flachen Extrema und Sattelpunkten	347
	<i>Beispiel „2d-Sattel, Ridge-Design“</i>	347

	<i>Beispiel „Heli (4d-Sattel)“</i>	350
7.6.3	Eine Beispiel-Serie für eine sequentielle Optimierung bei drei Einflussgrößen	355
	<i>Beispiel „Backrezept (Teil 1)“</i>	355
	<i>Beispiel „Backrezept (Teil 2)“</i>	359
	<i>Beispiel „Backrezept (Teil 3)“</i>	366
7.7	Optimale Pläne	370
7.7.1	Einleitung	370
7.7.2	Optimalitätskriterien	371
7.7.3	Die Konstruktion optimaler Versuchspläne	373
	<i>Beispiel „D-optimale 2^{k-s}-Pläne“</i>	374
	<i>Beispiel „Optimale 3^3-Pläne und CCD“</i>	376
7.7.4	Verallgemeinerte (approximative) optimale Pläne	379
	<i>Beispiel „Approximativ optimaler Versuchsplan“</i>	379
7.8	Mixturpläne	381
7.8.1	Einleitung	381
	<i>Beispiel „Festigkeit von Polyblends“</i>	382
A	Mathematische Hilfsmittel	385
A.1	Substitutionsregel für Mehrfachintegrale	385
A.2	Integrale	385
A.3	Die Deltafunktion	386
A.4	Matrizen	387
A.4.1	Definitionen und Schreibweisen	387
A.4.2	Orthogonale und orthonormale Matrizen	388
A.4.3	Idempotente Matrizen	388
A.4.4	Mittelwertzentrierung mit idempotenter Matrix C	389
A.4.5	Der Rang einer Matrix	389
A.4.6	Der Nullraum einer $n \times p$ Matrix A	390
A.4.7	Die Inverse einer Matrix	390
A.4.8	Die Determinante einer quadratischen Matrix	391
A.4.9	Die Spur einer Matrix	391
A.4.10	Hadamard-Matrizen	392
R	Index der 95 R-Beispiele	393
S	Index der 61 SAS-Programme	397
	Literaturverzeichnis	399
	Sachregister	411