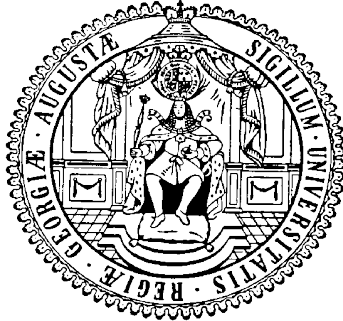


Das Behrens-Fisher-Problem für hochdimensionale Split-Plot-Designs



Masterarbeit
angefertigt am
Institut für Mathematische Stochastik
im Masterstudiengang Mathematik
der
Georg-August-Universität Göttingen

vorgelegt von:

Markus Harden

geboren am 27. Mai 1987

in Wilhelmshaven

Erstgutachter:

Prof. Dr. Edgar Brunner

Zweitgutachter:

Prof. Dr. Tatyana Krivobokova

Inhaltsverzeichnis

1	Einführung	1
1.1	Motivation	1
1.2	Ziel der Arbeit	2
1.3	Historie	3
1.4	Beispiel: Gewichtsentwicklung bei Wistar-Ratten	5
2	Modelle und Hypothesen	8
2.1	Statistisches Modell	8
2.2	Hypothesen	9
2.3	Allgemeine Strukturierung	10
3	Theoretische Grundlagen	11
3.1	Grundlegende Matrixeigenschaften	11
3.2	Aussagen über quadratische Formen	12
3.3	Aussagen über Bilinearformen	14
3.4	Wahrscheinlichkeitstheoretische Aussagen	17
4	Testverfahren	19
4.1	Ein- und Zwei-Stichprobenfall	19
4.2	Mehr-Stichprobenfall	20
4.2.1	Box-Approximation I	21
4.2.2	Zerlegung der Spur	22
4.2.3	Box-Approximation II	23
4.3	Schätzung der Freiheitsgrade	26
4.3.1	Dimensionsstabilität	26
4.3.2	Spurschätzer für die Subplots	28
4.3.3	Spurschätzer	30
4.3.4	Freiheitsgradschätzer	31
4.4	Spezialfall: Zwei Behandlungsgruppen	33
5	Simulationen	34
5.1	Struktur der simulierten Daten	34
5.2	Alternative Auswertungsverfahren	35
5.2.1	Huynh-Feldt-Korrektur	36
5.2.2	Weitere Teststatistiken	36

5.3	Niveausimulationen	37
5.3.1	Zwei-Stichprobenfall	38
5.3.2	Mehr-Stichprobenfall	40
5.4	Powersimulationen	42
5.4.1	Trend-Alternativen	42
5.4.2	Ein-Punkt-Alternativen	44
5.5	Beispiel: Gewichtsentwicklung bei Wistar-Ratten II	45
6	Zusammenfassung und Diskussion	47
7	Anhang	I
7.1	Beweise	I
7.2	Niveau-Grafiken	XIII
7.2.1	Zwei-Stichprobenfall: Homoskedastische AR-Modelle	XIII
7.2.2	Zwei-Stichprobenfall: Heteroskedastische AR-Modelle	XIV
7.2.3	Mehr-Stichprobenfall: Homoskedastische AR-Modelle	XV
7.2.4	Mehr-Stichprobenfall: Heterskedastisches AR(0,2)-Modell	XVI
7.2.5	Mehr-Stichprobenfall: Heterskedastisches AR(0,6)-Modell	XVII
7.3	SAS-Code	XVIII
	Literatur	XXV

Abbildungsverzeichnis

1	Beispiel: Entwicklung des mittleren Körpergewichtes	6
2	Beispiel: Boxplots des Körpergewichtes	7
3	Niveau: CS-Struktur mit gleichen Varianzen für 2 Gruppen	38
4	Niveau: CS-Struktur mit ungleichen Varianzen und Stichprobenumfängen für 2 Gruppen	39
5	Niveau: CS-Struktur mit gleichen Varianzen für 3 Gruppen	40
6	Niveau: CS-Struktur mit ungleichen Varianzen für 3 Gruppen	41
7	Niveau: CS-Struktur mit ungleichen Varianzen und Stichprobenumfängen für 3 Gruppen	41
8	Niveau: CS-Struktur mit ungleichen Varianzen und Stichprobenumfängen für 4 Gruppen	41
9	Power: CS-Struktur für Trend-Alternativen	43
10	Power: AR(0,2)-Struktur für Trend-Alternativen	43
11	Power: AR(0,9)-Struktur für Trend-Alternativen	43
12	Power: CS-Struktur für Ein-Punkt-Alternativen	44
13	Power: AR(0,2)-Struktur für Ein-Punkt-Alternativen	44
14	Power: AR(0,9)-Struktur für Ein-Punkt-Alternativen	45
15	Niveau: AR(0,2)-Struktur mit gleichen Varianzen für 2 Gruppen	XIII
16	Niveau: AR(0,6)-Struktur mit gleichen Varianzen für 2 Gruppen	XIII
17	Niveau: AR(0,9)-Struktur mit gleichen Varianzen für 2 Gruppen	XIII
18	Niveau: AR(0,2)-Struktur mit ungleichen Varianzen und Stichprobenumfängen für 2 Gruppen	XIV
19	Niveau: AR(0,6)-Struktur mit ungleichen Varianzen und Stichprobenumfängen für 2 Gruppen	XIV
20	Niveau: AR(0,9)-Struktur mit ungleichen Varianzen und Stichprobenumfängen für 2 Gruppen	XIV
21	Niveau: AR(0,2)-Struktur mit gleichen Varianzen für 3 Gruppen	XV
22	Niveau: AR(0,6)-Struktur mit gleichen Varianzen für 3 Gruppen	XV
23	Niveau: AR(0,9)-Struktur mit gleichen Varianzen für 3 Gruppen	XV
24	Niveau: AR(0,2)-Struktur mit ungleichen Varianzen für 3 Gruppen	XVI
25	Niveau: AR(0,2)-Struktur mit ungleichen Varianzen und Stichprobenumfängen für 3 Gruppen	XVI

26	Niveau: AR(0,2)-Struktur mit ungleichen Varianzen und Stichprobenumfängen für 4 Gruppen	XVI
27	Niveau: AR(0,6)-Struktur mit ungleichen Varianzen für 3 Gruppen	XVII
28	Niveau: AR(0,6)-Struktur mit ungleichen Varianzen und Stichprobenumfängen für 3 Gruppen	XVII
29	Niveau: AR(0,6)-Struktur mit ungleichen Varianzen und Stichprobenumfängen für 4 Gruppen	XVII

Tabellenverzeichnis

1	Versuchsaufbau eines zweifaktoriellen Split-Plot-Designs für a Behandlungsgruppen mit je n_i Versuchsobjekten, an denen d Messwiederholungen durchgeführt werden.	2
2	Beispiel: Deskriptive Kennzahlen der gemessenen Körpergewichte	5
3	Verzerrung der Plug-In-Schätzer bei hochdimensionalen Daten am Beispiel einer Compound Symmetry	27
4	Quotienten simulierter empirischer Erwartungswerte und Varianzen von \hat{f} und \tilde{f} für $a = 1$, $n = 10$ bei wachsenden Dimensionen und $n_{sim} = 1.000$ Simulationen.	32
5	Quotienten simulierter empirischer Erwartungswerte und Varianzen von \hat{f} und \tilde{f} für $a = 1$, $n = 100$ bei wachsenden Dimensionen und $n_{sim} = 1.000$ Simulationen.	32
6	Auswertung des Beispieldatensatzes mit den Testverfahren Anova, Geisser-Greenhouse, Huynh-Feldt und dem neuen Testverfahren.	45

Danksagung

Hiermit bedanke ich mich bei Herrn Prof. Dr. Edgar Brunner für die Bereitstellung des Themas und seine intensive Betreuung. Frau Prof. Dr. Tatyana Krivobokova danke ich für die Übernahme des Co-Referats.

Herrn Prof. Dr. Tim Friede danke ich für den Arbeitsplatz in der Abteilung Medizinische Statistik. Die dort vorhandene hervorragende technische Ausstattung und der problemlose Zugang zu allen Hilfsmitteln hat die Anfertigung der Arbeit deutlich erleichtert.

Ich danke allen Mitarbeitern in der Abteilung Medizinische Statistik für viele hilfreiche Gespräche und die angenehme Arbeitsatmosphäre. Insbesondere danke ich Hans-Joachim Helms und Benjamin Becker für ihre Unterstützung.

Meinem guten Freund und Bürokollegen Tobias Lohse möchte ich an dieser Stelle ebenfalls danken. Über die Jahre haben wir uns während des gemeinsamen Mathematikstudiums immer wieder motivieren und uns die Freude am Fach als auch am Forschen bis zuletzt erhalten können.

Ich danke Till Sabel für das Korrekturlesen meiner Arbeit und die vielen hilfreichen Kommentare.

Meinen Eltern und meiner Schwester Melanie danke ich für die fortwährende Unterstützung während meines gesamten Studiums, die Geduld und das Vertrauen, das sie mir stets entgegengebracht haben.

Versicherung an Eides statt

Ich,

versichere an Eides statt durch meine Unterschrift, dass ich die vorstehende Arbeit selbständig und ohne fremde Hilfe angefertigt und alle Stellen, die ich wörtlich oder dem Sinne nach aus Veröffentlichungen entnommen habe, als solche kenntlich gemacht habe, mich auch keiner anderen als der angegebenen Literatur oder sonstiger Hilfsmittel bedient habe.

Göttingen, den

1 Einführung

1.1 Motivation

Bei einem Split-Plot-Design mit Repeated Measures handelt es sich um einen Versuchsaufbau, bei dem an unabhängigen, auf mehrere Behandlungsgruppen aufgeteilten Versuchsobjekten wiederholt dieselben Messungen vorgenommen werden. Zwischen diesen Messwiederholungen besteht, sofern sie zu demselben Versuchsobjekt gehören, eine Abhängigkeit, die bei der späteren statistischen Modellierung und der Wahl des Auswertungsverfahrens berücksichtigt werden muss.

Soll beispielsweise der Einfluss eines Medikamentes in mehreren Dosisstufen auf den postoperativen Blutdruckverlauf von Patienten untersucht werden, ist davon auszugehen, dass sich die Messwerte eines Patienten in einem direkten Abhängigkeitsverhältnis befinden, das es zu modellieren gilt. Da die Patienten zwischen den Behandlungsgruppen in der Regel keinen direkten Einfluss aufeinander ausüben, werden die Messungen als statistisch unabhängig angesehen.

Die Bezeichnung Split-Plot kommt ursprünglich aus der Agrarwissenschaft, in der mehrere Anbaufelder (sog. *Wholeplot*-Faktor) in Parzellen (*Splitplot*- oder auch *Subplot*-Faktor) unterteilt und diese beispielsweise mit unterschiedlichem Saatgut bepflanzt wurden. In dem oben beschriebenen Beispiel ließen sich die Dosisstufen des Medikamentes mit den Anbaufeldern assoziieren, unter denen die Patienten als Parzellen verschachtelt sind. Die Messungen des Blutdruckes erfolgen, zwischen den Patienten räumlich getrennt, innerhalb einer jeden Patienten-Parzelle. Da Messstellen aufgrund der Versuchsplanung nur in den Patienten-Parzellen benachbart liegen, wird eine Abhängigkeitsstruktur ausschließlich in diesen Parzellen unterstellt. Allgemeiner lässt sich ein Split-Plot-Design mit a Behandlungsgruppen, n_i Versuchsobjekten je Behandlungsgruppe $i = 1, \dots, a$ und d Versuchswiederholungen wie in Tabelle 1 darstellen. Die Abhängigkeitsstruktur verläuft über die Spalten, die Zeilen signalisieren die voneinander unabhängigen Versuchsobjekte und Behandlungsgruppen.

Unter der Annahme, dass es sich bei den gemessenen Daten um Realisationen normalverteilter Zufallsvariablen handelt, existieren zahlreiche sowohl uni- als auch multivariate Verfahren, die sich für die Auswertung eines Split-Plot-Designs anbieten. Zu jedem dieser Verfahren gibt es bestimmte Voraussetzungen, die für die Anwendung erfüllt sein müssen, um zu verlässlichen Ergebnissen zu gelangen.

Tabelle 1: Versuchsaufbau eines zweifaktoriellen Split-Plot-Designs für a Behandlungsgruppen mit je n_i Versuchsobjekten, an denen d Messwiederholungen durchgeführt werden.

Gruppe/ Wholeplot	Versuchsobjekt/ Subplot	Versuchswiederholung		
		1	\dots	d
1	1	x_{111}	\dots	x_{11d}
	\vdots	\vdots		\vdots
	n_1	x_{1n_11}	\dots	x_{1n_1d}
\vdots	\vdots		\vdots	
a	1	x_{a11}	\dots	x_{a1d}
	\vdots	\vdots		\vdots
	n_a	x_{an_a1}	\dots	x_{an_ad}

Für die klassische Varianzanalyse ist die Annahme eines homoskedastischen Modells gefordert. Die multivariate Teststatistik von Hotelling verlangt, dass die Anzahl der Versuchsobjekte größer als die Anzahl der Versuchswiederholungen ist ($n_i > d, i = 1, \dots, a$), da die inverse, empirische Kovarianzmatrix berechnet werden muss, die im Falle $n_i < d$ singulär ist (vgl. [13]). Es wäre wünschenswert, über ein Testverfahren zu verfügen, das weder Annahmen an die Kovarianzstrukturen im Modell noch über das Verhältnis aus Messwiederholungen und Versuchsobjekten stellt, d.h. insbesondere dann noch anwendbar ist, wenn deutlich mehr Messwiederholungen als Versuchsobjekte vorliegen. Diese Forderung ist dem Trend einer immer umfassenderen Datenerfassung geschuldet.

Die Erhebung einer wachsenden Anzahl von Messwiederholungen ist darauf zurückzuführen, dass mit immer leistungsfähiger werdenden Computer- und Auswertungssystemen die Erfassung weiterer Messwerte kaum Probleme darstellt, während die Hinzunahme weiterer Versuchsobjekte meist aus finanziellen oder ethischen Gründen beschränkt ist. Es ist daher wichtig, sich gerade mit solchen Versuchsdesigns auseinanderzusetzen, in denen die Anzahl der Messwiederholungen die der Versuchsobjekte übersteigt ($d > n_i$). In diesem Fall spricht man auch von "hochdimensionalen" Daten.

1.2 Ziel der Arbeit

In der vorliegenden Arbeit soll ein approximatives Testverfahren vorgestellt werden, mit dem hochdimensionale Split-Plot-Designs ausgewertet werden können. Man betrachte

$N = \sum_{i=1}^a n_i$ Versuchsobjekte, die auf a Gruppen verteilt sind und an denen jeweils d Messwiederholungen vorgenommen werden. Die Anzahl der Gruppen a und der Messwiederholungen d werden als fest angesehen, eine Asymptotik der Verteilung der Teststatistik mit $d, n_i \rightarrow \infty$ wird in dieser Arbeit nicht betrachtet. Auf die restriktiven Annahmen gleicher Kovarianzmatrizen oder einer gleichen Anzahl an Versuchsobjekten je Behandlungsgruppe wird verzichtet. Genauso sollen die Parameter d und n_i weitestgehend ohne Einschränkung gewählt werden können, um eine möglichst breite Anwendbarkeit des neuen Verfahrens zu ermöglichen.

Ungleiche Stichprobenumfänge treten häufig durch äußere Einflussfaktoren auf, die mit dem eigentlichen Modellaufbau nichts zu tun haben. So kann es zum Beispiel bei Studien mit Versuchstieren aufgrund technischer Gründe, unabhängig von der Behandlung, zum Tod von einzelnen Tieren kommen, woraus schließlich unbalancierte Stichproben resultieren, auch wenn der Versuch anfangs mit einem balancierten Design begonnen wurde.

Versuchsanlagen mit ungleichen Varianzen und Stichprobenumfängen wurden bereits von Fisher, damals für den Vergleich zweier Behandlungsgruppen mittels t-Test, diskutiert (vgl. [9]). Ein solches Design und die damit verbundene Problematik wird in der Literatur "Behrens-Fisher-Problem" genannt.

Als methodischer Ausgangspunkt für das neue Verfahren dienen die Arbeiten von Box, Huynh und Feldt und die Arbeiten von Werner und Becker (vgl. [2, 4, 14, 23]). In den beiden zuletzt genannten Arbeiten wurde eine Teststatistik für zweifaktorielle Repeated Measures Versuchsanlagen mit einer bzw. zwei Gruppen entwickelt, die nun für beliebig viele Behandlungsgruppen $a \geq 2$ verallgemeinert werden soll.

1.3 Historie

Im Jahre 1954 erschien eine Arbeit von Box, in der für ein einfaktorielles lineares Modell mit Repeated Measures verschiedene F -Approximationen für den Fall vorgestellt wurden, dass die Annahmen der klassischen Varianzanalyse verletzt sind (vgl. [4]). Aufbauend auf der Theorie quadratischer Formen wurde für die Verteilung der Teststatistik eine Momentenapproximation verwendet, die auch schon von Patnaik im Jahre 1949 beschrieben wurde (vgl. [17]). Als Approximation resultierte eine Korrektur der Freiheitsgrade der klassischen Varianzanalyse um einen Faktor, der in der Literatur als "Box'sches Epsilon" bezeichnet wird.

In den Folgejahren wurde diese Idee u.a. von Geisser und Greenhouse aufgegriffen und

auf den Fall eines zweifaktoriellen, gemischten, linearen Modells verallgemeinert (vgl. [10, 11]). In diesen Arbeiten wurde - wenn auch nur kurz - die Hochdimensionalität der Daten thematisiert. Unter der Annahme gleicher Kovarianzmatrizen ($\Sigma_i \equiv \Sigma$) wurde eine sehr konservative F-Approximation vorgestellt.

Für dasselbe Split-Plot-Design wurde von Huynh und Feldt eine erwartungstreue Schätzung für Zähler und Nenner des Box'schen Epsilons angegeben, für die später von Leconte eine Korrektur publiziert wurde (vgl. [14, 15]). Für diese Approximationen ist jedoch die Voraussetzung der "sphericity" verlangt, was bedeutet, dass die Struktur der Kovarianzmatrix die Bedingung

$$\sigma_{x-y}^2 = \sigma_x^2 + \sigma_y^2 - 2\sigma_{xy} \stackrel{!}{=} \sigma^2 \quad \forall x, y$$

erfüllt, wobei σ_x^2, σ_y^2 die Varianzen und σ_{xy} die Kovarianz der Messungen x, y bezeichnet und $\sigma^2 > 0$.

Weitere Artikel zu hochdimensionalen Split-Plot-Designs stammen von Bai und Saranadasa sowie Srivastava und Du, in denen jedoch, im Gegensatz zu der vorliegenden Arbeit, standardisierte Teststatistiken für $d, n_i \rightarrow \infty$ betrachtet werden (vgl. [1, 20]). All diese Verfahren beschränken sich dabei auf eine oder zwei Behandlungsgruppen und identische Kovarianzmatrizen in allen Behandlungsgruppen.

Für das einfaktorielle Split-Plot-Design wurde von Werner ein Testverfahren entwickelt, dass die Idee der Momentenapproximation von Patnaik und Box als sog. Anova-Typ-Statistik verwendet (vgl. [3, 7, 17, 23]). Der Hauptunterschied zu den Arbeiten von Huynh und Feldt besteht in der direkten Spürschätzung, statt der Verwendung von Plug-In-Schätzern. Die Schätzer aus der Arbeit von Werner erfüllen das Kriterium der *Dimensionsstabilität*, was anschaulich bedeutet, dass das Konvergenzverhalten der Schätzer nur von der Anzahl der Versuchsobjekte n_i $i = 1, \dots, a$ und nicht von der Anzahl der Messwiederholungen abhängt. Dieser Punkt muss bei hochdimensionalen Versuchsplänen bedacht werden, da die Konsistenz der Schätzer insbesondere von den Versuchswiederholungen d abhängen kann. Dimensionsstabilität ist bei der einfachen Plug-In-Schätzung durch die empirische Kovarianzmatrix nicht erfüllt, wie in den Arbeiten von Werner und Becker anhand von Beispielen gezeigt wurde.

Becker erweiterte diesen Ansatz auf zwei Behandlungsgruppen für ungleiche Kovarianzmatrizen und ungleiche Stichprobenumfänge. Parallel zu der Arbeit von Becker erschien

ein Artikel von Chen und Qin in den Annals of Statistics, in der der Ansatz von Bai und Saranadasa aufgegriffen und ein Testverfahren für den Zwei-Stichprobenfall mit ungleichen Kovarianzmatrizen und Stichprobenumfängen vorgestellt wurde (vgl. [8]).

1.4 Beispiel: Gewichtsentwicklung bei Wistar-Ratten

In einer breit angelegten Teratogenitäts- und Fertilitätsstudie an Wistar-Ratten in den Jahren 1980 und 1981 wurde unter anderem bei Tieren der Parental-Generation untersucht, ob die tägliche orale Behandlung mit einer Testsubstanz in vier Dosisstufen zu signifikanten Unterschieden in der Körpergewichtsentwicklung führt.

Dazu wurde das Körpergewicht der Versuchstiere über einen Zeitraum von sechs Wochen zweimal wöchentlich zu festgelegten Zeiten bestimmt. Die Testsubstanz wurde den Tieren täglich mit starrer Schlucksonde in den Dosen 0,1 mg/ 100 g Körpergewicht, 0,8 mg/ 100 g Körpergewicht, 6,4 mg/ 100 g Körpergewicht sowie 12,8 mg/ 100 g Körpergewicht verabreicht. Hierbei entsprechen 0,1 mg/ 100 g Körpergewicht der humantherapeutischen Tagesdosis des Wirkstoffes. Zusätzlich wurde eine Gruppe betrachtet, der anstelle des Verum ein Placebo, in diesem Fall 1 ml Leitungswasser je 100 g Körpergewicht, verabreicht wurde.

Tabelle 2: Deskriptive Kennzahlen der gemessenen Körpergewichte.

Gruppe	Anzahl	Mittelwert	Varianz	Minimum	Maximum
Placebo	286	369,38	1554,10	284	478
Dosis 1	264	342,10	1659,10	275	440
Dosis 4	528	309,33	841,28	240	386

In diesem Beispiel werden 3 Dosisgruppen der männlichen Parental-Generation aus dem Jahr 1981 betrachtet. Die Gewichtsentwicklung der $N = 49$ Tiere wurde über $d = 22$ Zeitpunkte betrachtet. Die ungleiche Anzahl der Tiere je Dosisgruppe ($n_0 = 13$, $n_1 = 12$ und $n_4 = 24$) ist darauf zurückzuführen, dass die Dosisstufe 4 erst im 2. Jahr der Studie betrachtet wurde und aus diesem Grund die doppelte Anzahl der Tiere herangezogen wurde, um über die Jahre hinweg ein annähernd balanciertes Versuchsdesign auswerten zu können.

Einige deskriptive Kennzahlen sind für die drei Dosisstufen in Tabelle 2 aufgeführt. Man erkennt, dass die Mittelwerte über die $d = 22$ Zeitpunkte mit steigender Dosis abnehmen. Die Varianzen in den Gruppen Placebo und Dosis 1 sind ähnlich groß, während die

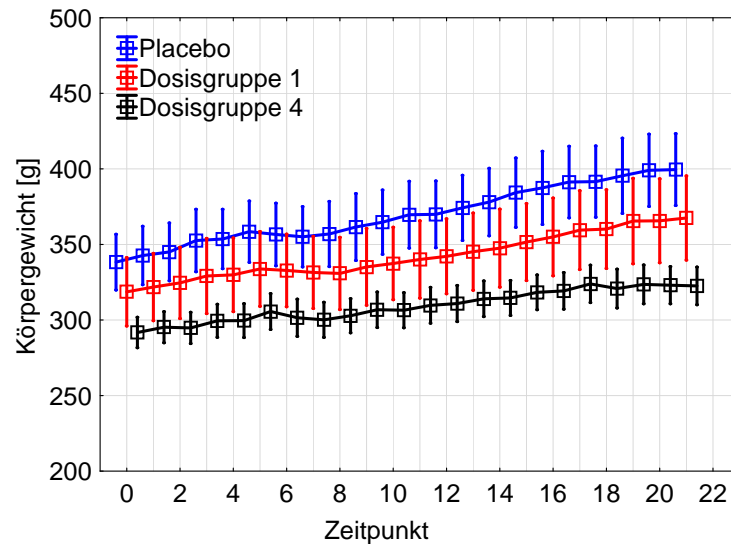


Abbildung 1: Entwicklung des mittleren Körpergewichtes über die 22 Zeitpunkte.

empirische Varianz in der Gruppe Dosis 4 deutlich kleiner ist. Der mittlere Zeitverlauf des Körpergewichtes ist in der Abbildung 1 dargestellt. Der Eindruck abnehmender mittlerer Körpergewichte mit steigender Dosis lässt sich durch die Mittelwertplots bestätigen.

Die Verteilung der Daten lässt sich gut durch eine Normalverteilung approximieren. Dafür spricht, dass die Daten auf einer stetigen Skala gemessen wurden und die Verteilung der Boxplots in Abbildung 2 annähernd symmetrisch ist.

Die deskriptive Analyse legt ein statistisches Modell mit ungleichen Varianzen und einem normalverteilten Versuchsfehler nahe. Zu diesen Überlegungen lässt sich ein singuläres lineares Modell aufstellen, dass jede Beobachtung in seine Effekte der modellierten Faktoren zerlegt

$$X_{ijk} = \mu + \alpha_i + \beta_j + (\alpha\beta)_{ij} + \epsilon_{ijk}; i = 0, 1, 4; j = 1, \dots, 22; k = 1, \dots, n_i.$$

Hierbei bezeichnet μ den Gesamteffekt, α_i den Effekt der i -ten Dosisstufe, β_j den Effekt des j -ten Zeitpunktes und $(\alpha\beta)_{ij}$ den Effekt der Wechselwirkung zwischen Dosis und Zeitpunkt der Stufen i, j . Effekt steht in diesem Zusammenhang für die mittlere Abweichung der Daten von dem Mittelwert über alle Beobachtungen \bar{X} ..., bzw. dem Gesamteffekt μ .

Da über die Zeit verbundene Daten vorliegen, wird ein multivariat normalverteilter Ver-

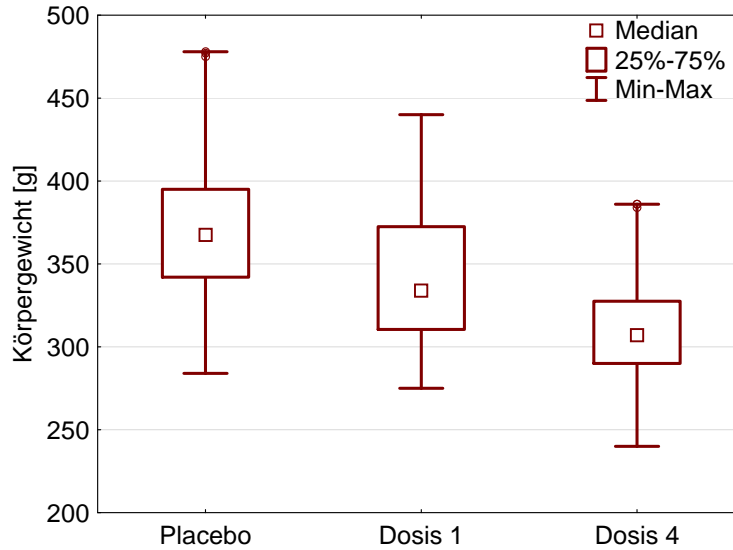


Abbildung 2: Boxplots des Körpergewichtes gruppiert nach den Dosisstufen.

suchsfehler $\epsilon_{ik} \sim N_{22}(\mathbf{0}, \Sigma_i)$ mit unbekannten Kovarianzmatrizen $\Sigma_i \in \mathbb{R}^{22 \times 22}$ $i = 1, 2, 4$ angenommen.

Die Fragestellungen des Versuches könnten wie folgt lauten.

1. Gibt es einen signifikanten Unterschied zwischen den Dosisstufen der Testsubstanz?
2. Kommt es im Zeitverlauf zu signifikanten Gewichtsveränderungen der Tiere?
3. Gibt es eine messbare Interaktion zwischen Dosis und Zeit, d.h. variieren die Zeitprofile der Dosisstufen signifikant untereinander?

Diese Fragestellungen lassen sich durch die folgenden drei Globalhypothesen formalisieren.

$$\begin{aligned}
 H_0(\boldsymbol{\alpha}) : \quad & \alpha_0 = \alpha_1 = \alpha_4 = 0, \\
 H_0(\boldsymbol{\beta}) : \quad & \beta_1 = \dots = \beta_{22} = 0, \\
 H_0(\boldsymbol{\alpha\beta}) : \quad & (\alpha\beta)_{ij} = 0 \quad \forall i, j.
 \end{aligned}$$

Die statistische Auswertung dieses Beispieldatensatzes erfolgt nach der theoretischen Herleitung des neuen Testverfahrens.

2 Modelle und Hypothesen

In diesem Abschnitt werden das statistische Modell beschrieben und die Hypothesen formuliert, die aus einem allgemeinen Split-Plot-Design mit den zwei festen Faktoren Behandlung und Zeit resultieren. Es werden N Versuchsobjekte betrachtet, von denen $n_i > 0$ Individuen der i -ten von insgesamt a Behandlungsgruppen zugeordnet werden. An jedem Versuchsobjekt erfolgen wiederholt zu d Zeitpunkten Messungen. Die Anzahl an Behandlungen a und Messwiederholungen d wird als fest und damit reproduzierbar angesehen. Es bezeichne $\boldsymbol{\mu}_i = (\mu_{i1}, \dots, \mu_{id})' \in \mathbb{R}^d$ den Erwartungsvektor und $\boldsymbol{\Sigma}_i \in \mathbb{R}^{d \times d}$ die positiv definite Kovarianzmatrix der Versuchsobjekte aus der i -ten Behandlungsgruppe. Unter der Annahme multivariat normalverteilter Daten lässt sich jeder Realisierungsvektor der $N = \sum_{i=1}^a n_i$ Versuchsobjekte schreiben als

$$\mathbf{X}_{ij} \sim N_d(\boldsymbol{\mu}_i, \boldsymbol{\Sigma}_i), i = 1, \dots, a; j = 1, \dots, n_i. \quad (2.1)$$

2.1 Statistisches Modell

Der Faktor Behandlung ist mit dem Faktor Zeit gekreuzt, die Versuchsobjekte sind unter der Behandlung verschachtelt und mit der Zeit gekreuzt. Es handelt sich um ein Split-Plot-Design mit dem Wholeplot-Faktor Behandlung und dem Subplot-Faktor Zeit. Anschaulich kann man das Design wie in Tabelle 1 darstellen, die in Kapitel 1.1 beschrieben wurde.

Die in diesem Modell auftretenden Effekte sind die der Faktoren Behandlung, Zeit und die der Wechselwirkung aus Behandlung und Zeit. In der Sprache der linearen Modelle lässt sich jede Beobachtung in die im Modell modellierten Effekte zerlegen. Das singuläre Modell hat die Gestalt

$$X_{ijk} = \mu + \alpha_i + \beta_k + (\alpha\beta)_{ik} + \epsilon_{ijk}, \quad (2.2)$$

mit $\epsilon_{ij} \sim N_d(\mathbf{0}, \boldsymbol{\Sigma}_i)$, $i = 1, \dots, a$, $j = 1, \dots, n_i$, $k = 1, \dots, d$. An dieser Stelle bezeichnet μ den Gesamteffekt, α_i den i -ten Behandlungseffekt, β_k den k -ten Zeiteffekt und $(\alpha\beta)_{ik}$ den Einfluss der Wechselwirkung der (i, k) -ten Faktorkombination. Diese Effekte lassen

sich ebenso durch die Erwartungsvektoren aus (2.1) darstellen, dabei ist

$$\begin{aligned}\mu &= \bar{\mu}_{..}, \\ \alpha_i &= \bar{\mu}_{i.} - \mu, \\ \beta_k &= \bar{\mu}_{.k} - \mu, \\ (\alpha\beta)_{ik} &= \bar{\mu}_{ik} - \bar{\mu}_{i.} - \bar{\mu}_{.k} + \mu.\end{aligned}$$

Für die Summen der jeweiligen Effekte gilt $\sum_{i=1}^a \alpha_i = \sum_{k=1}^d \beta_k = \sum_{i,k} (\alpha\beta)_{ik} = 0$.

2.2 Hypothesen

Nachdem die Effekte des Modells bestimmt und abgegrenzt sind, lassen sich nun die zu testenden Hypothesen formulieren. Da sich alle festen Effekte aus (2.2) durch die Erwartungswerte aus (2.1) darstellen lassen, erscheint es sinnvoll, auch die Hypothesen mit dem Erwartungsvektor $\boldsymbol{\mu} = (\boldsymbol{\mu}'_1, \dots, \boldsymbol{\mu}'_a)'$ zu bilden. Die Hypothesen für *kein Behandlungseffekt*, *kein Zeiteffekt* und *keine Wechselwirkung* lauten

$$H_0(\alpha) : \alpha_1 = \dots = \alpha_a \iff \bar{\mu}_{1.} = \dots = \bar{\mu}_{a.}, \quad (2.3)$$

$$H_0(\beta) : \beta_1 = \dots = \beta_d \iff \bar{\mu}_{.1} = \dots = \bar{\mu}_{.d}, \quad (2.4)$$

$$H_0(\alpha\beta) : (\alpha\beta)_{ik} = 0 \forall i, k \iff \bar{\mu}_{ik} - \bar{\mu}_{i.} - \bar{\mu}_{.k} + \mu = 0 \forall i, k. \quad (2.5)$$

Jede der soeben formulierten Hypothesen lässt sich in einer äquivalenten Form

$$H_0 : \mathbf{H}\boldsymbol{\mu} = \mathbf{0}$$

mit passender Hypothesenmatrix \mathbf{H} darstellen. Aus jeder dieser Hypothesenmatrizen lässt sich durch die Konstruktion

$$\mathbf{T} = \mathbf{H}'(\mathbf{H}\mathbf{H}')^- \mathbf{H}$$

ein Projektor, d.h. eine symmetrische und idempotente Matrix, erzeugen, der eine zu $H_0 : \mathbf{H}\boldsymbol{\mu} = \mathbf{0}$ äquivalente Hypothese $H_0 : \mathbf{T}\boldsymbol{\mu} = \mathbf{0}$ testet und unabhängig von der Wahl der g-Inverse $(\mathbf{H}\mathbf{H}')^-$, also eindeutig ist. Der folgende Satz fasst diese Aussage zusammen.

Satz 2.2.1 (Hypothesenäquivalenz). *Sei $\boldsymbol{\mu} \in \mathbb{R}^n$ beliebig, es bezeichne $\mathbf{H}_1\boldsymbol{\mu} = \mathbf{0}$ und*

$\mathbf{H}_2\boldsymbol{\mu} = \mathbf{0}$ zwei lineare Hypothesen und es bezeichne $\mathbf{T}_i = \mathbf{H}_i' [\mathbf{H}_i \mathbf{H}_i']^{-1} \mathbf{H}_i$ den Projektor zu \mathbf{H}_i , $i = 1, 2$. Dann sind die Hypothesen genau dann äquivalent, wenn $\mathbf{T}_1 = \mathbf{T}_2$ ist.

Beweis. s. Brunner [5], Satz 1.2, Seite 28. □

Zusammenfassend lassen sich die Hypothesen aus (2.3), (2.4), (2.5) mit dem Erwartungsvektor $\boldsymbol{\mu}$ und den folgenden Projektoren darstellen

$$H_0(\alpha) : \left(\mathbf{P}_a \otimes \frac{1}{d} \mathbf{J}_d \right) \boldsymbol{\mu} = \mathbf{0}, \quad (2.6)$$

$$H_0(\beta) : \left(\frac{1}{a} \mathbf{J}_a \otimes \mathbf{P}_d \right) \boldsymbol{\mu} = \mathbf{0}, \quad (2.7)$$

$$H_0(\alpha\beta) : (\mathbf{P}_a \otimes \mathbf{P}_d) \boldsymbol{\mu} = \mathbf{0}. \quad (2.8)$$

Hierbei ist jeder Projektor das Kroneckerprodukt eines Wholeplot- und eines Subplotprojektors, was bedeutet, dass jeder Projektor allgemein die Gestalt

$$H_0 : (\mathbf{T}_W \otimes \mathbf{T}_S) \boldsymbol{\mu} = \mathbf{0}$$

mit geeigneten Projektoren $\mathbf{T}_W \in \mathbb{R}^{a \times a}$, $\mathbf{T}_S \in \mathbb{R}^{d \times d}$ aufweist. Gerade diese Darstellung wird in den späteren Kapiteln verwendet, um die Teststatistik und die Freiheitsgrade zu bestimmen.

2.3 Allgemeine Strukturierung

Das soeben beschriebene Modell lässt sich erweitern, indem man eine Strukturierung der Versuchswiederholungen oder der Behandlungsgruppen mit weiteren festen Faktoren vornimmt. Für die in dieser Arbeit verwendeten Techniken ist allerdings nur die Zusammensetzung des Hypothesen-Projektors aus Wholeplot- und Subplot-Projektor

$$\mathbf{T} = (\mathbf{T}_W \otimes \mathbf{T}_S)$$

wichtig. Ob einer dieser Projektoren eine zusätzliche Strukturierung besitzt, d.h. sich als Kroneckerprodukt weiterer Projektormatrizen darstellen lässt, ist für die theoretischen Überlegungen und Nachweise uninteressant. Aufgrund dessen wird für die Herleitung des Testverfahrens das in Kapitel 2.1 beschriebene Modell verwendet.

3 Theoretische Grundlagen

Für die später vorgestellte Theorie werden nun einige Begriffe und Aussagen wiederholt, die den späteren Kapiteln verwendet werden.

3.1 Grundlegende Matriceigenschaften

Definition 3.1.1 (Kronecker-Operatoren). Für zwei Matrizen $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m \times n}$ und $\mathbf{B} \in \mathbb{R}^{o \times p}$ ist die Kroneckersumme definiert als

$$\mathbf{A} \oplus \mathbf{B} = \begin{pmatrix} \mathbf{A} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{B} \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{(m+o) \times (n+p)}.$$

Das Kroneckerprodukt der Matrizen \mathbf{A} , \mathbf{B} ist definiert als

$$\mathbf{A} \otimes \mathbf{B} = \begin{pmatrix} a_{11} \cdot \mathbf{B} & \cdots & a_{1n} \cdot \mathbf{B} \\ \vdots & & \vdots \\ a_{m1} \cdot \mathbf{B} & \cdots & a_{nm} \cdot \mathbf{B} \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{(m \cdot o) \times (n \cdot p)}.$$

Satz 3.1.2 (Hauptachsentransformation). Zu jeder symmetrischen Matrix $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ existiert eine orthogonale Matrix \mathbf{P} , sodass

$$\mathbf{P}' \mathbf{A} \mathbf{P} = \mathbf{D} = \begin{pmatrix} \lambda_1 & & 0 \\ & \ddots & \\ 0 & & \lambda_n \end{pmatrix}.$$

Hierbei sind $\lambda_1, \dots, \lambda_n$ die Eigenwerte der Matrix \mathbf{A} .

Beweis. s. Ravishanker und Dey [18], S. 47, Result 2.3.4 Gleichung (2.3.6). □

Es folgen einige Aussagen über die Spur einer Matrix.

Satz 3.1.3. Für die quadratischen Matrizen \mathbf{A} , \mathbf{B} gilt

$$\text{Sp}[\mathbf{A} \otimes \mathbf{B}] = \text{Sp}[\mathbf{A}] \cdot \text{Sp}[\mathbf{B}].$$

Satz 3.1.4 (Spurinvarianz). Die Spur ist invariant unter zyklischer Permutation, d.h.

für Matrizen $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m \times n}$, $\mathbf{B} \in \mathbb{R}^{n \times m}$ gilt

$$\text{Sp}[\mathbf{AB}] = \text{Sp}[\mathbf{BA}].$$

Zusammen mit der Hauptachsentransformation gelangt man zu dem folgenden Resultat.

Satz 3.1.5. Für die Spur einer symmetrischen Matrix $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ mit Eigenwerten $\lambda_1, \dots, \lambda_n$ gilt

$$\text{Sp}[\mathbf{A}] = \sum_{i=1}^n \lambda_i.$$

Korollar 3.1.6 (Spurungleichung). Für die Spur einer symmetrischen Matrix $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ mit Eigenwerten $\lambda_1, \dots, \lambda_n \geq 0$ gilt

$$\text{Sp}[\mathbf{A}^2] \leq \text{Sp}^2[\mathbf{A}] \quad \text{bzw.} \quad \sum_{i=1}^n \lambda_i^2 \leq \left(\sum_{i=1}^n \lambda_i \right)^2.$$

3.2 Aussagen über quadratische Formen

Für Quadratformen, die aus multivariat normalverteilten Vektoren gebildet werden, gibt es eine breit entwickelte Theorie, mit der Aussagen über Verteilungen und Momente getroffen werden können.

Definition 3.2.1 (Quadratische Form). Sei $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ eine symmetrische Matrix. Für jeden Vektor $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$ heißt der Ausdruck $\mathbf{x}'\mathbf{A}\mathbf{x}$ quadratische Form.

Definition 3.2.2 (Definitheit). Sei $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ eine symmetrische Matrix. Die Matrix \mathbf{A} heißt

$$\begin{aligned} &\text{positiv definit, falls } \mathbf{x}'\mathbf{A}\mathbf{x} > 0 \text{ für alle } \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n \neq \mathbf{0}, \\ &\text{positiv semi-definit, falls } \mathbf{x}'\mathbf{A}\mathbf{x} \geq 0 \text{ für alle } \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n \neq \mathbf{0}. \end{aligned}$$

Satz 3.2.3 (Satz von Lancaster). Sei \mathbf{Y} ein Vektor von Zufallsvariablen mit $E(\mathbf{Y}) = \boldsymbol{\mu}$, $\text{Cov}(\mathbf{Y}) = \mathbf{V}$ und \mathbf{A} eine symmetrische Matrix. Dann gilt

$$E(\mathbf{Y}'\mathbf{A}\mathbf{Y}) = \text{Sp}[\mathbf{AV}] + \boldsymbol{\mu}'\mathbf{A}\boldsymbol{\mu}.$$

Beweis. s. Searle [19], S. 55, Theorem 1 (i). □

Satz 3.2.4 (Varianz einer quadratischen Form). *Es sei \mathbf{Y} ein multivariat normalverteilter Zufallsvektor mit $E(\mathbf{Y}) = \boldsymbol{\mu}$, $\text{Cov}(\mathbf{Y}) = \mathbf{V}$ und \mathbf{A} eine symmetrische Matrix. Dann gilt*

$$\text{Var}(\mathbf{Y}'\mathbf{A}\mathbf{Y}) = 2 \text{Sp}[(\mathbf{A}\mathbf{V})^2] + 4\boldsymbol{\mu}'\mathbf{A}\mathbf{V}\mathbf{A}\boldsymbol{\mu}.$$

Beweis. s. Searle [19], S. 55, Theorem 1 (iii). □

Satz 3.2.5 (Darstellung einer quadratischen Form unter Normalverteilung). *Es bezeichne $\mathbf{Y} \sim N_n(\mathbf{0}, \mathbf{V})$ ein multivariat normalverteilter Zufallsvektor mit Kovarianzmatrix $\mathbf{V} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ von vollem Rang n und es sei $\mathbf{T} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ ein Projektor. Dann gilt*

$$\mathbf{Y}'\mathbf{T}\mathbf{Y} = \sum_{i=1}^n \lambda_i C_i,$$

wobei λ_i die Eigenwerte von $\mathbf{T}\mathbf{V}$ und $C_i \sim \chi_1^2$ $i = 1, \dots, n$ unabhängig sind.

Beweis. s. Mathai und Provost [16], S. 29, Representation (3.1a.4) sowie S. 90. □

Mit dem folgenden Resultat aus Mathai und Provost, Seite 53, lassen sich höhere Momente einer quadratischen Form berechnen.

Satz 3.2.6. *Es sei $\mathbf{X} \sim N_n(\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma})$ mit $\boldsymbol{\Sigma}$ positiv semi-definit und $\mathbf{A} = \mathbf{A}'$. Dann ist das r -te Moment ($0 < r \in \mathbb{Z}$) der quadratischen Form $Q = \mathbf{X}'\mathbf{A}\mathbf{X}$ gegeben durch*

$$E^r(Q) = \left(\sum_{r_1=0}^{r-1} \binom{r-1}{r_1} g^{(r-1-r_1)} \sum_{r_2=0}^{r_1-1} \binom{r_1-1}{r_2} g^{(r_1-1-r_2)} \dots \right), \quad (3.1)$$

mit $g^{(0)} = \text{Sp}[\mathbf{A}\boldsymbol{\Sigma}] + \boldsymbol{\mu}'\mathbf{A}\boldsymbol{\mu}$ und $g^{(k)} = 2^k k! \left[\text{Sp}[(\mathbf{A}\boldsymbol{\Sigma})^{k+1}] + (k+1)\boldsymbol{\mu}'(\mathbf{A}\boldsymbol{\Sigma})^k \mathbf{A}\boldsymbol{\mu} \right]$, $k = 1, 2, \dots$

Als Spezialfall erhält man die folgende Aussage.

Korollar 3.2.7. *Unter den Voraussetzungen von Satz 3.2.6 gilt*

$$\begin{aligned} E^4(Q) = & 48 \text{Sp}[(\mathbf{A}\boldsymbol{\Sigma})^4] + 32 \text{Sp}[(\mathbf{A}\boldsymbol{\Sigma})^3] \text{Sp}[\mathbf{A}\boldsymbol{\Sigma}] + 12 \text{Sp}^2[(\mathbf{A}\boldsymbol{\Sigma})^2] \\ & + 12 \text{Sp}[(\mathbf{A}\boldsymbol{\Sigma})^2] \text{Sp}^2[\mathbf{A}\boldsymbol{\Sigma}] + \text{Sp}^4[\mathbf{A}\boldsymbol{\Sigma}]. \end{aligned}$$

Satz 3.2.8 (Craig & Sakamoto). *Sei \mathbf{X} ein multivariat normalverteilter Zufallsvektor mit Erwartungsvektor $\boldsymbol{\mu}$ und Kovarianzmatrix \mathbf{V} und es bezeichne \mathbf{A} , \mathbf{B} zwei positiv semi-definite Matrizen. Die quadratischen Formen $\mathbf{X}'\mathbf{A}\mathbf{X}$ und $\mathbf{X}'\mathbf{B}\mathbf{X}$ sind genau dann stochastisch unabhängig, wenn $\mathbf{B}\mathbf{V}\mathbf{A} = \mathbf{0}$.*

Beweis. s. Ravishanker und Dey [18] S. 178 Result 5.4.7. □

3.3 Aussagen über Bilinearformen

In diesem Abschnitt werden Aussagen über die Momente von Bilinearformen vorgestellt, die für die Konstruktion der späteren Schätzer benötigt werden. Dabei kann ausgenutzt werden, dass sich jede Bilinearform $\mathbf{X}'\mathbf{A}\mathbf{Y}$ mit $\mathbf{X}, \mathbf{Y} \in \mathbb{R}^n$, $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ als quadratische Form

$$\mathbf{X}'\mathbf{A}\mathbf{Y} = \begin{pmatrix} \mathbf{X}' & \mathbf{Y}' \end{pmatrix} \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \mathbf{0} & \mathbf{A} \\ \mathbf{A} & \mathbf{0} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{X} \\ \mathbf{Y} \end{pmatrix}$$

darstellen lässt. Durch diese Konstruktion lassen sich die über Bilinearformen getroffenen Aussagen verallgemeinern.

Satz 3.3.1 (Erwartungswert einer Bilinearform). *Seien $\mathbf{X} \in \mathbb{R}^n$ und $\mathbf{Y} \in \mathbb{R}^n$ unabhängige normalverteilte Zufallsvektoren mit $E(\mathbf{X}) = \boldsymbol{\mu}_X$ und $E(\mathbf{Y}) = \boldsymbol{\mu}_Y$, $\text{Cov}(\mathbf{X}) = \boldsymbol{\Sigma}_X$, $\text{Cov}(\mathbf{Y}) = \boldsymbol{\Sigma}_Y$ und es sei $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ eine symmetrische Matrix. Dann gilt*

$$E(\mathbf{X}'\mathbf{A}\mathbf{Y}) = \boldsymbol{\mu}_X' \mathbf{A} \boldsymbol{\mu}_Y.$$

Falls $\boldsymbol{\mu}_X = \mathbf{0}$ oder $\boldsymbol{\mu}_Y = \mathbf{0}$ gilt $E(\mathbf{X}'\mathbf{A}\mathbf{Y}) = 0$.

Beweis. Wir verwenden die Darstellung

$$\begin{aligned} & \begin{pmatrix} \mathbf{X}' & \mathbf{Y}' \end{pmatrix} \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \mathbf{0} & \mathbf{A} \\ \mathbf{A} & \mathbf{0} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{X} \\ \mathbf{Y} \end{pmatrix} = \mathbf{X}'\mathbf{A}\mathbf{Y}. \\ E(\mathbf{X}'\mathbf{A}\mathbf{Y}) &= E \left(\begin{pmatrix} \mathbf{X}' & \mathbf{Y}' \end{pmatrix} \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \mathbf{0} & \mathbf{A} \\ \mathbf{A} & \mathbf{0} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{X} \\ \mathbf{Y} \end{pmatrix} \right) \\ &= \text{Sp} \left[\frac{1}{2} \begin{pmatrix} \mathbf{0} & \mathbf{A}\boldsymbol{\Sigma}_Y \\ \mathbf{A}\boldsymbol{\Sigma}_X & \mathbf{0} \end{pmatrix} \right] + \begin{pmatrix} \boldsymbol{\mu}_X' & \boldsymbol{\mu}_Y' \end{pmatrix} \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \mathbf{0} & \mathbf{A} \\ \mathbf{A} & \mathbf{0} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \boldsymbol{\mu}_X \\ \boldsymbol{\mu}_Y \end{pmatrix} \\ &= \boldsymbol{\mu}_X' \mathbf{A} \boldsymbol{\mu}_Y. \end{aligned}$$

Die zweite Aussage ist dann trivial. □

Analog zu den quadratischen Formen lässt sich die Varianz einer Bilinearform bestimmen.

Satz 3.3.2 (Varianz einer Bilinearform). *Seien $\mathbf{X} \in \mathbb{R}^n$ und $\mathbf{Y} \in \mathbb{R}^n$ normalverteilte Zufallsvektoren mit $E(\mathbf{X}) = \boldsymbol{\mu}_X$, $E(\mathbf{Y}) = \boldsymbol{\mu}_Y$, $\text{Cov}(\mathbf{X}) = \boldsymbol{\Sigma}_X$, $\text{Cov}(\mathbf{Y}) = \boldsymbol{\Sigma}_Y$, $\text{Cov}(\mathbf{X}, \mathbf{Y}) = \boldsymbol{\Sigma}_{XY}$ und es sei $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ eine symmetrische Matrix. Dann gilt*

$$\begin{aligned} \text{Var}(\mathbf{X}'\mathbf{A}\mathbf{Y}) &= \text{Sp}[\mathbf{A}\boldsymbol{\Sigma}_Y\mathbf{A}\boldsymbol{\Sigma}_X + \mathbf{A}\boldsymbol{\Sigma}_{XY}\mathbf{A}\boldsymbol{\Sigma}_{XY}] \\ &\quad + \boldsymbol{\mu}_X'\mathbf{A}\boldsymbol{\Sigma}_Y\mathbf{A}\boldsymbol{\mu}_X + \boldsymbol{\mu}_X'\mathbf{A}\boldsymbol{\Sigma}_{XY}\mathbf{A}\boldsymbol{\mu}_Y + \boldsymbol{\mu}_Y'\mathbf{A}\boldsymbol{\Sigma}_{XY}\mathbf{A}\boldsymbol{\mu}_X + \boldsymbol{\mu}_Y'\mathbf{A}\boldsymbol{\Sigma}_X\mathbf{A}\boldsymbol{\mu}_Y. \end{aligned}$$

Sind X und Y unabhängig, vereinfacht sich der Ausdruck zu

$$\text{Var}(\mathbf{X}'\mathbf{A}\mathbf{Y}) = \text{Sp}[\mathbf{A}\boldsymbol{\Sigma}_Y\mathbf{A}\boldsymbol{\Sigma}_X] + \boldsymbol{\mu}_X'\mathbf{A}\boldsymbol{\Sigma}_Y\mathbf{A}\boldsymbol{\mu}_X + \boldsymbol{\mu}_Y'\mathbf{A}\boldsymbol{\Sigma}_X\mathbf{A}\boldsymbol{\mu}_Y.$$

Haben beide Zufallsvariablen \mathbf{X} , \mathbf{Y} außerdem einen Erwartungswert identisch $\mathbf{0}$ folgt weiter

$$\text{Var}(\mathbf{X}'\mathbf{A}\mathbf{Y}) = \text{Sp}[\mathbf{A}\boldsymbol{\Sigma}_Y\mathbf{A}\boldsymbol{\Sigma}_X].$$

Beweis.

$$\begin{aligned} \text{Var}(\mathbf{X}'\mathbf{A}\mathbf{Y}) &= \text{Var}\left(\left(\begin{array}{cc} \mathbf{X}' & \mathbf{Y}' \end{array}\right) \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \mathbf{0} & \mathbf{A} \\ \mathbf{A} & \mathbf{0} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{X} \\ \mathbf{Y} \end{pmatrix}\right) \\ &= 2 \text{Sp}\left[\frac{1}{4} \begin{pmatrix} \mathbf{0} & \mathbf{A} \\ \mathbf{A} & \mathbf{0} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \boldsymbol{\Sigma}_X & \boldsymbol{\Sigma}_{XY} \\ \boldsymbol{\Sigma}_{XY} & \boldsymbol{\Sigma}_Y \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{0} & \mathbf{A} \\ \mathbf{A} & \mathbf{0} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \boldsymbol{\Sigma}_X & \boldsymbol{\Sigma}_{XY} \\ \boldsymbol{\Sigma}_{XY} & \boldsymbol{\Sigma}_Y \end{pmatrix}\right] \\ &\quad + 4 \left(\begin{array}{cc} \boldsymbol{\mu}_X' & \boldsymbol{\mu}_Y' \end{array}\right) \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \mathbf{0} & \mathbf{A} \\ \mathbf{A} & \mathbf{0} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \boldsymbol{\Sigma}_X & \boldsymbol{\Sigma}_{XY} \\ \boldsymbol{\Sigma}_{XY} & \boldsymbol{\Sigma}_Y \end{pmatrix} \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \mathbf{0} & \mathbf{A} \\ \mathbf{A} & \mathbf{0} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \boldsymbol{\mu}_X \\ \boldsymbol{\mu}_Y \end{pmatrix} \\ &= \frac{1}{2} \text{Sp}\left[\begin{pmatrix} \mathbf{A}\boldsymbol{\Sigma}_Y\mathbf{A}\boldsymbol{\Sigma}_X + \mathbf{A}\boldsymbol{\Sigma}_{XY}\mathbf{A}\boldsymbol{\Sigma}_{XY} & 2\mathbf{A}\boldsymbol{\Sigma}_{XY}\mathbf{A}\boldsymbol{\Sigma}_Y \\ 2\mathbf{A}\boldsymbol{\Sigma}_X\mathbf{A}\boldsymbol{\Sigma}_{XY} & \mathbf{A}\boldsymbol{\Sigma}_X\mathbf{A}\boldsymbol{\Sigma}_Y + \mathbf{A}\boldsymbol{\Sigma}_{XY}\mathbf{A}\boldsymbol{\Sigma}_{XY} \end{pmatrix}\right] \\ &\quad + \boldsymbol{\mu}_X'\mathbf{A}\boldsymbol{\Sigma}_Y\mathbf{A}\boldsymbol{\mu}_X + \boldsymbol{\mu}_X'\mathbf{A}\boldsymbol{\Sigma}_{XY}\mathbf{A}\boldsymbol{\mu}_Y + \boldsymbol{\mu}_Y'\mathbf{A}\boldsymbol{\Sigma}_{XY}\mathbf{A}\boldsymbol{\mu}_X + \boldsymbol{\mu}_Y'\mathbf{A}\boldsymbol{\Sigma}_X\mathbf{A}\boldsymbol{\mu}_Y \\ &= \text{Sp}[\mathbf{A}\boldsymbol{\Sigma}_Y\mathbf{A}\boldsymbol{\Sigma}_X + \mathbf{A}\boldsymbol{\Sigma}_{XY}\mathbf{A}\boldsymbol{\Sigma}_{XY}] \\ &\quad + \boldsymbol{\mu}_X'\mathbf{A}\boldsymbol{\Sigma}_Y\mathbf{A}\boldsymbol{\mu}_X + \boldsymbol{\mu}_X'\mathbf{A}\boldsymbol{\Sigma}_{XY}\mathbf{A}\boldsymbol{\mu}_Y + \boldsymbol{\mu}_Y'\mathbf{A}\boldsymbol{\Sigma}_{XY}\mathbf{A}\boldsymbol{\mu}_X + \boldsymbol{\mu}_Y'\mathbf{A}\boldsymbol{\Sigma}_X\mathbf{A}\boldsymbol{\mu}_Y. \end{aligned}$$

Im Falle unabhängiger Zufallsvariablen verschwinden die Mischterme mit $\boldsymbol{\Sigma}_{XY}$. Die letzte Aussage folgt, wenn die Erwartungswerte gleich $\mathbf{0}$ sind. \square

Zusammenfassend lassen sich die Aussagen über die Momente von quadratischen und Bilinearformen in dem folgenden Lemma festhalten.

Lemma 3.3.3. *Es seien $\mathbf{X}, \mathbf{Y} \in \mathbb{R}^n$ unabhängige Zufallsvariablen mit $E(\mathbf{X}) = E(\mathbf{Y}) = \mathbf{0}$ und $\text{Var}(\mathbf{X}) = \Sigma_X$, $\text{Var}(\mathbf{Y}) = \Sigma_Y$ und es sei $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ eine symmetrische Matrix. Dann gilt für die Momente der quadratischen Formen $Q_X = \mathbf{X}'\mathbf{A}\mathbf{X}$, $Q_Y = \mathbf{Y}'\mathbf{A}\mathbf{Y}$ und der Bilinearform $Q_{XY} = \mathbf{X}'\mathbf{A}\mathbf{Y}$*

$$\begin{aligned} E(Q_X) &= \text{Sp}[\mathbf{A}\Sigma_X], \\ E(Q_X^2) &= 2\text{Sp}[(\mathbf{A}\Sigma_X)^2] + \text{Sp}^2[\mathbf{A}\Sigma_X], \\ E(Q_X^4) &= 48\text{Sp}[(\mathbf{A}\Sigma_X)^4] + 32\text{Sp}[(\mathbf{A}\Sigma_X)^3]\text{Sp}[\mathbf{A}\Sigma_X] + 12\text{Sp}^2[(\mathbf{A}\Sigma_X)^2] \\ &\quad + 12\text{Sp}[(\mathbf{A}\Sigma_X)^2]\text{Sp}^2[\mathbf{A}\Sigma_X] + \text{Sp}^4[\mathbf{A}\Sigma_X], \\ E(Q_{XY}) &= 0, \\ E(Q_{XY}^2) &= \text{Sp}[\mathbf{A}\Sigma_X\mathbf{A}\Sigma_Y], \\ E(Q_{XY}^4) &= 6\text{Sp}[(\mathbf{A}\Sigma_X\mathbf{A}\Sigma_Y)^2] + 3\text{Sp}^2[\mathbf{A}\Sigma_X\mathbf{A}\Sigma_Y], \\ E((Q_X Q_Y)^2) &= 4\text{Sp}[(\mathbf{A}\Sigma_X)^2]\text{Sp}[(\mathbf{A}\Sigma_Y)^2] + \text{Sp}^2[\mathbf{A}\Sigma_X]\text{Sp}^2[\mathbf{A}\Sigma_Y]. \end{aligned}$$

Beweis. Die erste Gleichung ergibt sich direkt aus dem Satz von Lancaster. Das zweite Resultat folgt aus der Gleichung $\text{Var}(Q_X) = E(Q_X^2) - E(Q_X)^2$. Die dritte Ungleichung ist das Resultat aus dem Korollar 3.2.7. Für das erste und zweite Moment der Bilinearformen wurde der Beweis in den Sätzen 3.3.1 und 3.3.2 bereits gezeigt. Für die vorletzte Gleichung verwendet man zunächst die Darstellung von Q_{XY} als quadratische Form

$$Q_{XY} = \begin{pmatrix} \mathbf{X}' & \mathbf{Y}' \end{pmatrix} \underbrace{\frac{1}{2} \begin{pmatrix} \mathbf{0} & \mathbf{A} \\ \mathbf{A} & \mathbf{0} \end{pmatrix}}_{=: \mathbf{B}} \begin{pmatrix} \mathbf{X} \\ \mathbf{Y} \end{pmatrix} =: \mathbf{Z}'\mathbf{B}\mathbf{Z}.$$

Es gilt $E(\mathbf{Z}) = \mathbf{0}$, $\text{Var}(\mathbf{Z}) =: \Sigma = \text{Diag}(\Sigma_X, \Sigma_Y)$. Insbesondere gilt

$$\begin{aligned} \mathbf{B}\Sigma &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \mathbf{0} & \mathbf{A}\Sigma_Y \\ \mathbf{A}\Sigma_X & \mathbf{0} \end{pmatrix} \Rightarrow \text{Sp}[\mathbf{B}\Sigma] = 0, \\ (\mathbf{B}\Sigma)^2 &= \frac{1}{4} \begin{pmatrix} \mathbf{A}\Sigma_Y\mathbf{A}\Sigma_X & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{A}\Sigma_X\mathbf{A}\Sigma_Y \end{pmatrix} \Rightarrow \text{Sp}[(\mathbf{B}\Sigma)^2] = \frac{1}{2} \text{Sp}[\mathbf{A}\Sigma_X\mathbf{A}\Sigma_Y], \\ (\mathbf{B}\Sigma)^4 &= \frac{1}{16} \begin{pmatrix} (\mathbf{A}\Sigma_Y\mathbf{A}\Sigma_X)^2 & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & (\mathbf{A}\Sigma_X\mathbf{A}\Sigma_Y)^2 \end{pmatrix} \Rightarrow \text{Sp}[(\mathbf{B}\Sigma)^4] = \frac{1}{8} \text{Sp}[(\mathbf{A}\Sigma_X\mathbf{A}\Sigma_Y)^2]. \end{aligned}$$

Der Ausdruck für das vierte Moment der Quadratform $\mathbf{Z}'\mathbf{B}\mathbf{Z}$ lässt sich in diesem Fall vereinfachen zu

$$E(Q_{XY})^4 = 6 \operatorname{Sp} [(\mathbf{A}\Sigma_X \mathbf{A}\Sigma_Y)^2] + 3 \operatorname{Sp}^2 [\mathbf{A}\Sigma_X \mathbf{A}\Sigma_Y].$$

Für die letzte Gleichung benutzt man die Unabhängigkeit von \mathbf{X} und \mathbf{Y} und die Darstellung der Varianz

$$\begin{aligned} E((Q_X Q_Y)^2) &= \operatorname{Var}(Q_X Q_Y) + E^2(Q_X Q_Y) \\ &= \operatorname{Var}(Q_X) \operatorname{Var}(Q_Y) + E^2(Q_X) E^2(Q_Y) \\ &= 4 \operatorname{Sp} [(\mathbf{A}\Sigma_X)^2] \operatorname{Sp} [(\mathbf{A}\Sigma_Y)^2] + \operatorname{Sp}^2 [\mathbf{A}\Sigma_X] \operatorname{Sp}^2 [\mathbf{A}\Sigma_Y]. \end{aligned}$$

□

3.4 Wahrscheinlichkeitstheoretische Aussagen

Definition 3.4.1 (Konvergenz in Wahrscheinlichkeit). *Eine Folge von Zufallsvariablen X_n konvergiert in Wahrscheinlichkeit gegen X ($X_n \xrightarrow{P} X$), falls*

$$\lim_n P(|X_n - X| > \epsilon) = 0 \quad \forall \epsilon > 0.$$

Im Falle von Vektoren und Matrizen ist, sofern nicht anders beschrieben, die komponentenweise Konvergenz gemeint.

Definition 3.4.2 (Konsistenz eines Schätzers). *Ein Folge von Zufallsvariablen X_n heißt konsistent für den Parameter X , falls sie in Wahrscheinlichkeit gegen diesen konvergiert, d.h. $X_n \xrightarrow{P} X$.*

Satz 3.4.3. *Eine Folge von Zufallsvariablen X_n ist konsistent für den Parameter X mit $E(X_n) = X$, falls*

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \operatorname{Var}(X_n) = 0.$$

Beweis. Der Beweis ergibt sich aus Anwendung der Chebyshev-Ungleichung

$$P(|Z| > \epsilon) \leq \frac{E(Z)^2}{\epsilon^2}$$

für die zentrierte Folge von Zufallsvariablen $Z_n = X_n - X$.

□

Satz 3.4.4. Für die Zufallsvektoren $\mathbf{X}_n \in \mathbb{R}^k$ ($n = 1, 2, \dots$) und $\mathbf{X} \in \mathbb{R}^k$ sei $C \subset \mathbb{R}^k$ derart, dass $P(\mathbf{X} \in C) = 1$. Die Funktion $g : \mathbb{R}^k \rightarrow \mathbb{R}^m$ sei auf allen Punkten von C stetig. Dann gilt

$$\mathbf{X}_n \xrightarrow{p} \mathbf{X} \Rightarrow g(\mathbf{X}_n) \xrightarrow{p} g(\mathbf{X}).$$

Beweis. s. van der Vaart [22], Seite 7, Theorem 2.3. □

Lemma 3.4.5 (Slutzky). Es bezeichne $\mathbf{X}_n, \mathbf{Y}_n, \mathbf{X}$ Zufallsvariablen. Falls $\mathbf{X}_n \rightarrow \mathbf{X}$ und $\mathbf{Y}_n \rightarrow c$ mit c konstant, so gilt

$$\begin{aligned}\mathbf{X}_n + \mathbf{Y}_n &\rightarrow \mathbf{X} + c \\ \mathbf{X}_n \cdot \mathbf{Y}_n &\rightarrow c\mathbf{X}, \\ \mathbf{Y}_n^{-1} \cdot \mathbf{X}_n &\rightarrow c^{-1}\mathbf{X}, \text{ falls } c \neq 0.\end{aligned}$$

Beweis. s. van der Vaart [22], Seite 11, Lemma 2.8. □

Mit diesen Eigenschaften soll nun eine F-Approximation für das vorgestellte Modell aus Kapitel 2.1 konstruiert werden.

4 Testverfahren

4.1 Ein- und Zwei-Stichprobenfall

Wie bereits in der Einleitung erwähnt, wurden von Werner und Becker für die Versuchspläne mit $a = 1$ und $a = 2$ Behandlungsgruppen F-Approximationen vorgestellt, die das getestete Niveau auch für den Fall ($d > n_i$) einhalten. Dafür wird die Verteilung einer quadratischen Form mit der einer gestreckten χ^2 -Verteilung approximiert (vgl. [4]). Wiederholt man den Schritt für den Nenner der Teststatistik, gelangt man approximativ zu einer F-Verteilung.

Im Ein-Stichprobenfall lassen sich die Beobachtungsvektoren $\mathbf{X}_k \sim N_d(\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma})$, $k = 1 \dots, n$ mit dem Projektor \mathbf{T} zentrieren, der für die Hypothese $H_0(\beta) : \mathbf{T}\boldsymbol{\mu} = \mathbf{0}$, $\boldsymbol{\mu} = (\mu_1, \dots, \mu_d)'$ verwendet wird. Die Vektoren $\mathbf{Z}_k = \mathbf{T}\mathbf{X}_k \sim N_d(\mathbf{T}\boldsymbol{\mu}, \mathbf{T}\boldsymbol{\Sigma}\mathbf{T})$ sind unabhängig und lassen sich zum Schätzen des Nenners der Teststatistik

$$F_W = \frac{n\overline{\mathbf{Z}}'\overline{\mathbf{Z}}}{\widehat{\text{Sp}[\mathbf{T}\boldsymbol{\Sigma}]}} \dot{\sim} F(f_1, f_2)$$

und der Freiheitsgrade f_1, f_2 verwenden. Das Zeichen $\dot{\sim}$ bedeutet in dieser Arbeit, dass die Verteilung der Statistik auf der linken Seite mit der Verteilung auf der rechten Seite approximiert wird.

Im Zwei-Stichprobenfall lassen sich alle Hypothesen durch die Summe bzw. Differenz der beiden Erwartungsvektoren $\boldsymbol{\mu}_1 = (\mu_{11}, \dots, \mu_{1d})'$, $\boldsymbol{\mu}_2 = (\mu_{21}, \dots, \mu_{2d})'$ formulieren, d.h. $H_0 : \mathbf{T}(\boldsymbol{\mu}_1 \pm \boldsymbol{\mu}_2) = \mathbf{0}$ mit passendem Projektor $\mathbf{T} \in \mathbb{R}^{d \times d}$. Die Schätzung der Spuren und Freiheitsgrade von

$$F_B = \frac{(\overline{\mathbf{Z}}_1 - \overline{\mathbf{Z}}_2)'(\overline{\mathbf{Z}}_1 - \overline{\mathbf{Z}}_2)}{\widehat{\text{Sp}[\mathbf{T}\boldsymbol{\Sigma}_1]}/n_1 + \widehat{\text{Sp}[\mathbf{T}\boldsymbol{\Sigma}_2]}/n_2} \dot{\sim} F(f, f_0)$$

erfolgt wie im Ein-Stichprobenfall durch die unabhängigen, mit dem Projektor zentrierten Beobachtungen $\mathbf{Z}_{ik} = \mathbf{T}\mathbf{X}_{ik} \sim N_d(\mathbf{T}\boldsymbol{\mu}_i, \mathbf{T}\boldsymbol{\Sigma}_i\mathbf{T})$ $i = 1, 2$, $k = 1, \dots, n_i$.

Für die von Werner und Becker verwendeten Schätzer konnte die Eigenschaft der *Dimensionsstabilität* gezeigt werden, was bedeutet, dass die Konvergenz der Schätzer unabhängig von der Dimensionalität der Beobachtungsvektoren ist.

4.2 Mehr-Stichprobenfall

In diesem Kapitel werden $N = \sum_{i=1}^a n_i$, $n_i > 0$ unabhängige Versuchsobjekte

$$\mathbf{X}_{ij} \sim N_d(\boldsymbol{\mu}_i, \boldsymbol{\Sigma}_i); i = 1, \dots, a; j = 1, \dots, n_i,$$

mit Erwartungsvektoren $\boldsymbol{\mu}_i$ und positiv definiten Kovarianzmatrizen $\boldsymbol{\Sigma}_i$ betrachtet, von denen n_i Realisierungsvektoren der i -ten von a Behandlungsgruppen zugeordnet sind. Aus der Verteilungsannahme der Versuchsobjekte ergibt sich für die Verteilung des i -ten Behandlungsgruppenmittelwertes, dass

$$\bar{\mathbf{X}}_i. \sim N_d(\boldsymbol{\mu}_i, \boldsymbol{\Sigma}_i/n_i) \text{ bzw. } \sqrt{N} \cdot \bar{\mathbf{X}}_i. \sim N_d\left(\sqrt{N} \cdot \boldsymbol{\mu}_i, \frac{N}{n_i} \cdot \boldsymbol{\Sigma}_i\right).$$

Ordnet man diese unabhängigen Gruppenmittelwerte in einem Vektor untereinander an, folgt für die Verteilung dieses Vektors

$$\sqrt{N} \cdot \bar{\mathbf{X}}. = \sqrt{N} \cdot (\bar{\mathbf{X}}_1', \dots, \bar{\mathbf{X}}_a')' \sim N_{ad}\left(\sqrt{N} \cdot \boldsymbol{\mu}, N \cdot \mathbf{V}\right),$$

mit $\boldsymbol{\mu} = (\boldsymbol{\mu}_1', \dots, \boldsymbol{\mu}_a')'$ und der Blockdiagonalmatrix $\mathbf{V} = \bigoplus_{i=1}^a \boldsymbol{\Sigma}_i/n_i$. Wie in Kapitel 2.2 beschrieben, lassen sich alle Hypothesen des Modells über den Erwartungsvektor $\boldsymbol{\mu}$ formulieren, der erwartungstreu und konsistent durch den Vektor der Stichprobenmittelwerte $\bar{\mathbf{X}}.$ geschätzt werden kann.

Da die Kovarianzmatrix \mathbf{V} andernfalls für $N \rightarrow \infty$ degeneriert, wird an die Stichprobenumfänge die Bedingung

$$0 < \frac{N}{n_i} \leq n^* < \infty \text{ für } N \rightarrow \infty, i = 1, \dots, a \quad (4.1)$$

gestellt. Sie stellt sicher, dass die Stichproben "gleichmäßig" wachsen und wird später benötigt, um die Konsistenz der Schätzer zu zeigen. Unter Gültigkeit von (4.1) gilt:

$$\lim_{N \rightarrow \infty} N \cdot \mathbf{V} \neq \mathbf{0}.$$

Zum Testen der Hypothesen soll die quadratische Form

$$Q = N \cdot \bar{\mathbf{X}}' \mathbf{T} \bar{\mathbf{X}}. \quad (4.2)$$

mit Projektionsmatrix $\mathbf{T} = (\mathbf{T}_W \otimes \mathbf{T}_S) \in \mathbb{R}^{ad \times ad}$ verwendet werden, die aus der zu

testenden Hypothese $H_0 : \mathbf{H}\boldsymbol{\mu} = \mathbf{0}$ mittels $\mathbf{T} = \mathbf{H}'[\mathbf{H}\mathbf{H}']^{-1}\mathbf{H}$ resultiert. Man kann die obige quadratische Form (4.2) auch unter Berücksichtigung der Eigenschaft des Projektors umformulieren. Benutzt man die Darstellung einer zentrierten quadratischen Form aus Satz 3.2.5 gilt unter der Hypothese $H_0 : \mathbf{T}\boldsymbol{\mu} = \mathbf{0}$

$$Q = N \cdot [\mathbf{T}\bar{\mathbf{X}}.]' [\mathbf{T}\bar{\mathbf{X}}.] = N \cdot \bar{\mathbf{Z}}' \bar{\mathbf{Z}} \stackrel{H_0}{=} N \cdot \sum_{s=1}^{ad} \lambda_s C_s,$$

wobei die C_s unabhängige χ_1^2 -verteilte Zufallsvariablen sind und λ_s die Eigenwerte der Kovarianzmatrix von $\bar{\mathbf{Z}} \sim N_{ad}(\mathbf{T}\boldsymbol{\mu}, \mathbf{T}\mathbf{V}\mathbf{T})$ für $s = 1, \dots, ad$ sind. Als nächstes wird eine Momentenapproximation für die Verteilung von Q vorgestellt, die auf den Ideen von Patnaik und Box basiert.

4.2.1 Box-Approximation I

Im vorherigen Abschnitt wurde gezeigt, dass die quadratische Form Q als Summe unabhängiger χ_1^2 -verteilter Zufallsvariablen dargestellt werden kann. Als Approximation wird nun unterstellt, dass die ersten beiden Momente dieser quadratischen Form denen einer gestreckten χ_f^2 -Verteilung gleichen

$$Q \dot{\sim} g \cdot \chi_f^2.$$

Setzt man die ersten beiden zentrierten Momente dieser Ausdrücke gleich (s. Kapitel 3 für Momente einer Quadratform), resultiert das folgende Gleichungssystem

$$\begin{aligned} E(Q) &= N \cdot \text{Sp}[\mathbf{T}\mathbf{V}] && \stackrel{!}{=} g \cdot f && = E(g \cdot \chi_f^2) \\ \text{Var}(Q) &= 2 \cdot N^2 \cdot \text{Sp}[(\mathbf{T}\mathbf{V})^2] && \stackrel{!}{=} 2g^2 \cdot f && = \text{Var}(g \cdot \chi_f^2), \end{aligned}$$

das nach den Parametern g und f aufgelöst werden kann

$$\begin{aligned} g &= N \cdot \frac{\text{Sp}[(\mathbf{T}\mathbf{V})^2]}{\text{Sp}[\mathbf{T}\mathbf{V}]}, \\ f &= \frac{\text{Sp}[\mathbf{T}\mathbf{V}]^2}{\text{Sp}[(\mathbf{T}\mathbf{V})^2]}. \end{aligned}$$

Mit diesem Ansatz erhält man eine χ^2 -Approximation für die Verteilung der quadratischen Form aus (4.2) mit den unbekannten Parametern f und $\text{Sp}[\mathbf{TV}]$

$$\frac{Q}{gf} = \frac{Q}{N \cdot \text{Sp}[\mathbf{TV}]} \dot{\sim} \chi_f^2/f, \quad (4.3)$$

die es aufgrund der unbekannten Kovarianzmatrix aus den Daten zu schätzen gilt. Verwendet man für die Schätzung des Nenners eine - von Q unabhängige - quadratische Form, lässt sich für deren Verteilung ebenfalls eine Box-Approximation durchführen und der gesamte Quotient kann mit einer F-Verteilung approximiert werden kann. Der so gebildete Quotient

$$F_{\text{MH}} = \frac{Q}{N \cdot \widehat{\text{Sp}[\mathbf{TV}]}} \dot{\sim} F(f, f_0) \quad (4.4)$$

ist dann approximativ F-verteilt und soll als Teststatistik verwendet werden. Die Hypothese $H_0 : \mathbf{H}\boldsymbol{\mu} = \mathbf{0}$ wird verworfen, falls die Teststatistik das $(1 - \alpha)$ -Quantil der F-Verteilung übersteigt, d.h.

$$F_{\text{MH}} > F_{1-\alpha}(f, f_0) \text{ zu einem vorher festgelegten } \alpha \in (0, 1).$$

Auf die Gestalt des Spurschätzers und der Freiheitsgrade f, f_0 wird später eingegangen. Zunächst wird gezeigt, wie sich $\text{Sp}[\mathbf{TV}]$ und $\text{Sp}[(\mathbf{TV})^2]$ durch eine Zerlegung der Matrizen darstellen lassen und was dies für die Schätzung der Spuren bedeutet.

4.2.2 Zerlegung der Spur

Die in Abschnitt 4.2.1 beschriebenen Terme $\text{Sp}[\mathbf{TV}]$ und $\text{Sp}[(\mathbf{TV})^2]$ sind aufgrund der unbekannten Kovarianzmatrix \mathbf{V} aus den Daten zu schätzen. Man kann dabei unter Ausnutzung von einfacher Matrizentechnik zeigen, dass sich die folgenden Spurterme im Wesentlichen auf die Subplots $\mathbf{T}_S \boldsymbol{\Sigma}_i, i = 1, \dots, a$ reduzieren lassen.

Lemma 4.2.1 (Spurzerlegung). *Sei $\mathbf{T} = (\mathbf{T}_W \otimes \mathbf{T}_S)$ ein Projektor mit $\mathbf{T}_W \in \mathbb{R}^{a \times a}, \mathbf{T}_S \in \mathbb{R}^{d \times d}$ und $\mathbf{V} = \bigoplus_{i=1}^a \boldsymbol{\Sigma}_i/n_i$ mit $\boldsymbol{\Sigma}_i \in \mathbb{R}^{d \times d}$ sowie $n_i > 0, i = 1, \dots, a$. Es bezeichne T_{ij} den (i, j) -ten Eintrag der Matrix \mathbf{T}_W . Dann gilt*

$$\text{Sp}[\mathbf{TV}] = \sum_{i=1}^a \frac{T_{ii}}{n_i} \text{Sp}[\mathbf{T}_S \boldsymbol{\Sigma}_i],$$

$$\begin{aligned}\text{Sp}^2[\mathbf{TV}] &= \sum_{i=1}^a \sum_{k=1}^a \frac{T_{ii} \cdot T_{kk}}{n_i \cdot n_k} \text{Sp}[\mathbf{T}_S \boldsymbol{\Sigma}_i] \text{Sp}[\mathbf{T}_S \boldsymbol{\Sigma}_k], \\ \text{Sp}[(\mathbf{TV})^2] &= \sum_{i=1}^a \sum_{k=1}^a \frac{T_{ki}}{n_i} \frac{T_{ik}}{n_k} \text{Sp}[\mathbf{T}_S \boldsymbol{\Sigma}_i \mathbf{T}_S \boldsymbol{\Sigma}_k].\end{aligned}$$

Beweis. S. Satz 7.1.2 im Anhang. \square

Diese Spurzerlegung ermöglicht es, Schätzer für die oben aufgeführten Spurterme direkt aus den Beobachtungsvektoren $\mathbf{Z}_{ik} = \mathbf{T}_S \mathbf{X}_{ik}$ zu konstruieren. Die Einträge der Wholeplot-Matrix \mathbf{T}_W tauchen nur noch, zusammen mit den Stichprobenumfängen, als Gewichte der einzelnen Spuren auf. Es müssen also nur noch die unbekannten Spuren der Kovarianzmatrizen $\mathbf{T}_S \boldsymbol{\Sigma}_i$, $\mathbf{T}_S \boldsymbol{\Sigma}_i \mathbf{T}_S \boldsymbol{\Sigma}_k$, $i, k = 1, \dots, a$ geschätzt werden, da alle anderen Parameter bekannt sind.

4.2.3 Box-Approximation II

Nun soll der Schätzer für den Nenner des Ausdruckes (4.4) mitsamt seiner approximativen Verteilung beschrieben werden. In Lemma 4.2.1 wurde gezeigt, dass

$$\text{Sp}[\mathbf{TV}] = \sum_{i=1}^a \frac{T_{ii}}{n_i} \text{Sp}[\mathbf{T}_S \boldsymbol{\Sigma}_i].$$

Es genügt also, die Kovarianzmatrix der Subplots \mathbf{Z}_{ik} zu schätzen. Ersetzt man $\boldsymbol{\Sigma}_i$ durch die empirische Kovarianzmatrix $\widehat{\boldsymbol{\Sigma}}_i$ erhält man den erwartungstreuen und konsistenten Schätzer

$$\text{Sp}[\widehat{\mathbf{TV}}] = \sum_{i=1}^a \frac{T_{ii}}{n_i} \text{Sp}[\mathbf{T}_S \widehat{\boldsymbol{\Sigma}}_i], \quad (4.5)$$

wobei

$$\text{Sp}[\mathbf{T}_S \widehat{\boldsymbol{\Sigma}}_i] = \frac{1}{n_i - 1} \sum_{j=1}^{n_i} (\mathbf{Z}_{ij} - \bar{\mathbf{Z}}_{i\cdot})' (\mathbf{Z}_{ij} - \bar{\mathbf{Z}}_{i\cdot}) = \frac{1}{n_i - 1} \mathbf{Z}_i' (\mathbf{P}_{n_i} \otimes \mathbf{I}_d) \mathbf{Z}_i$$

mit $\mathbf{Z}_i = (\mathbf{Z}_{i1}', \dots, \mathbf{Z}_{in_i}')'$, $\mathbf{Z}_{ij} = \mathbf{T}_S \mathbf{X}_{ij} \sim N_d(\mathbf{T}_S \boldsymbol{\mu}_i, \mathbf{T}_S \boldsymbol{\Sigma}_i \mathbf{T}_S)$, $i = 1, \dots, a$; $j = 1, \dots, n_i$.

Lemma 4.2.2. *Der Schätzer $\text{Sp}[\widehat{\mathbf{TV}}]$ aus (4.5) ist erwartungstreu für $\text{Sp}[\mathbf{TV}]$. Unter*

Bedingung (4.1) gilt: $N \cdot \text{Sp}[\widehat{\mathbf{TV}}]$ ist konsistent für $N \cdot \text{Sp}[\mathbf{TV}]$, in dem Sinne, dass

$$\text{Var} \left(\frac{N \cdot \text{Sp}[\widehat{\mathbf{TV}}]}{N \cdot \text{Sp}[\mathbf{TV}]} \right) \xrightarrow{N \rightarrow \infty} 0.$$

Beweis. s. Lemma 7.1.3 im Anhang. □

Für die Verteilung des soeben vorgestellten Spurschätzers $\text{Sp}[\widehat{\mathbf{TV}}]$ lässt sich ebenfalls eine Boxapproximation durchführen. Man betrachtet analog zu Kapitel 4.2.1 das Gleichungssystem

$$\begin{aligned} \mathbb{E} \left(N \cdot \sum_{i=1}^a \frac{T_{ii}}{n_i} \text{Sp}[\mathbf{T}_S \widehat{\boldsymbol{\Sigma}}_i] \right) &= N \cdot \sum_{i=1}^a \frac{T_{ii}}{n_i} \text{Sp}[\mathbf{T}_S \boldsymbol{\Sigma}_i] \stackrel{!}{=} g_0 \cdot f_0, \\ \text{Var} \left(N \cdot \sum_{i=1}^a \frac{T_{ii}}{n_i} \text{Sp}[\mathbf{T}_S \widehat{\boldsymbol{\Sigma}}_i] \right) &= 2 \cdot N^2 \cdot \sum_{i=1}^a \left(\frac{T_{ii}}{n_i(n_i-1)} \right)^2 \text{Sp}[\mathbf{P}_{n_i} \otimes (\mathbf{T}_S \boldsymbol{\Sigma}_i)^2] \\ &= 2 \cdot N^2 \cdot \sum_{i=1}^a \left(\frac{T_{ii}}{n_i} \right)^2 \frac{1}{n_i-1} \text{Sp}[(\mathbf{T}_S \boldsymbol{\Sigma}_i)^2] \stackrel{!}{=} 2g_0^2 \cdot f_0. \end{aligned}$$

mit dem Streckungsparameter g_0 und dem Freiheitsgrad f_0 einer $\chi_{f_0}^2$ -Verteilung. Das Umstellen der Gleichungen ergibt

$$\begin{aligned} g_0 &= \frac{N \cdot \sum_{i=1}^a \left(\frac{T_{ii}}{n_i} \right)^2 \frac{1}{n_i-1} \text{Sp}[(\mathbf{T}_S \boldsymbol{\Sigma}_i)^2]}{\left(\sum_{i=1}^a \frac{T_{ii}}{n_i} \text{Sp}[\mathbf{T}_S \boldsymbol{\Sigma}_i] \right)^2}, \\ f_0 &= \frac{\left(\sum_{i=1}^a \frac{T_{ii}}{n_i} \text{Sp}[\mathbf{T}_S \boldsymbol{\Sigma}_i] \right)^2}{\sum_{i=1}^a \left(\frac{T_{ii}}{n_i} \right)^2 \frac{1}{n_i-1} \text{Sp}[(\mathbf{T}_S \boldsymbol{\Sigma}_i)^2]}. \end{aligned}$$

Für die Verteilung des Spurschätzers gilt somit approximativ

$$\frac{\text{Sp}[\widehat{\mathbf{TV}}]}{\text{Sp}[\mathbf{TV}]} \dot{\sim} \chi_{f_0}^2 / f_0. \quad (4.6)$$

Bildet man nun den Quotienten aus den quadratischen Formen (4.3) und (4.6), erhält man, sofern diese unabhängig sind, eine auf der Box-Approximation basierende F-Verteilung mit den Freiheitsgraden f und f_0 . Die explizite Darstellung der Teststatistik F_{MH}

aus (4.4) lautet demnach

$$F_{\text{MH}} = \frac{Q / (N \cdot \text{Sp}[\mathbf{TV}])}{\left(\widehat{\text{Sp}[\mathbf{TV}]} \right) / (\text{Sp}[\mathbf{TV}])} = \frac{Q}{N \cdot \text{Sp}[\widehat{\mathbf{TV}}]} \dot{\sim} F(f, f_0),$$

mit den Freiheitsgraden

$$f = \frac{\text{Sp}[\mathbf{TV}]^2}{\text{Sp}[(\mathbf{TV})^2]} = \frac{\left(\sum_{i=1}^a \frac{T_{ii}}{n_i} \text{Sp}[\mathbf{T}_s \boldsymbol{\Sigma}_i] \right)^2}{\sum_{i=1}^a \sum_{i'=1}^a \frac{T_{ii} T_{i'i'}}{n_i n_{i'}} \text{Sp}[\mathbf{T}_s \boldsymbol{\Sigma}_i \mathbf{T}_s \boldsymbol{\Sigma}_{i'}]}, \quad (4.7)$$

$$f_0 = \frac{\left(\sum_{i=1}^a \frac{T_{ii}}{n_i} \text{Sp}[\mathbf{T}_s \boldsymbol{\Sigma}_i] \right)^2}{\sum_{i=1}^a \left(\frac{T_{ii}}{n_i} \right)^2 \frac{1}{n_i - 1} \text{Sp}[(\mathbf{T}_s \boldsymbol{\Sigma}_i)^2]}. \quad (4.8)$$

Die Unabhängigkeit der beiden quadratischen Formen folgt aus der Anwendung des Theorems von Craig-Sakamoto.

Lemma 4.2.3 (Unabhängigkeit von Zähler und Nenner). *Die quadratischen Formen Q und $N \cdot \text{Sp}[\widehat{\mathbf{TV}}]$ sind stochastisch unabhängig.*

Beweis. Die beiden quadratischen Formen lassen sich mit dem Beobachtungsvektor \mathbf{X} wie folgt darstellen

$$\begin{aligned} Q &= N \cdot \bar{\mathbf{X}}' \mathbf{T} \bar{\mathbf{X}} = \mathbf{X}' \left(\bigoplus_{i=1}^a \mathbf{1}_{n_i} / n_i \otimes \mathbf{I}_d \right) (\mathbf{T}_W \otimes \mathbf{T}_S) \left(\bigoplus_{i=1}^a \mathbf{1}'_{n_i} / n_i \otimes \mathbf{I}_d \right) \mathbf{X} \\ &= N \cdot \mathbf{X}' \left(\left[\begin{array}{ccc} \mathbf{J}_{n_1 \times n_1} \cdot \sum_{i=1}^a \frac{T_{1i} T_{i1}}{n_1 n_1} & \cdots & \mathbf{J}_{n_1 \times n_a} \cdot \sum_{i=1}^a \frac{T_{1i} T_{ia}}{n_1 n_a} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \mathbf{J}_{n_a \times n_1} \cdot \sum_{i=1}^a \frac{T_{ai} T_{i1}}{n_a n_1} & \cdots & \mathbf{J}_{n_a \times n_a} \cdot \sum_{i=1}^a \frac{T_{ai} T_{ia}}{n_a n_a} \end{array} \right]_{N \times N} \otimes \mathbf{T}_S \right) \mathbf{X} \\ &= \mathbf{X}' \mathbf{A} \mathbf{X}, \\ N \cdot \text{Sp}[\widehat{\mathbf{TV}}] &= N \cdot \mathbf{X}' \left(\bigoplus_{i=1}^a \frac{T_{ii}}{n_i(n_i - 1)} (\mathbf{P}_{n_i} \otimes \mathbf{T}_S) \right) \mathbf{X} \\ &= N \cdot \mathbf{X}' \left(\left[\begin{array}{ccc} \mathbf{P}_{n_1} \cdot \frac{T_{11}}{n_1(n_1 - 1)} & & \mathbf{0} \\ & \ddots & \\ \mathbf{0} & & \mathbf{P}_{n_a} \cdot \frac{T_{aa}}{n_a(n_a - 1)} \end{array} \right]_{N \times N} \otimes \mathbf{T}_S \right) \mathbf{X} \\ &= \mathbf{X}' \mathbf{B} \mathbf{X}. \end{aligned}$$

Die Kovarianzmatrix von \mathbf{X} ist die Blockdiagonalmatrix $\mathbf{W} = (\bigoplus_{i=1}^a \mathbf{I}_{n_i} \otimes \boldsymbol{\Sigma}_i)$. Nach

Craig-Sakamoto reicht es zu zeigen, dass $\mathbf{AWB} = \mathbf{0}$ ist, was direkt aus $\mathbf{P}_{n_i} \cdot \mathbf{J}_{n_i n_{i'}} = \mathbf{0}$ folgt. \square

4.3 Schätzung der Freiheitsgrade

In den vorherigen Kapiteln wurde die Teststatistik F_{MH} mitsamt ihrer approximativen Verteilung hergeleitet. Die Freiheitsgrade, die aus den Box-Approximationen resultieren, müssen aus den Realisationen \mathbf{X}_{ij} geschätzt werden.

4.3.1 Dimensionsstabilität

Die Verwendung gewöhnlicher Plug-In-Schätzer führt bei hochdimensionalen Daten zu Problemen, da sie im Allgemeinen verzerrt sind und die Konsistenz nicht unabhängig von den Messwiederholungen ist.

Beispiel 4.3.1. *Man betrachte die Kovarianzmatrix*

$$\Sigma = \begin{pmatrix} 2 & & 1 \\ & \ddots & \\ 1 & & 2 \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{d \times d},$$

und den Subplot-Projektor $\mathbf{T}_S = \mathbf{P}_d$. Ersetzt man die Kovarianzmatrix Σ durch die empirische Kovarianzmatrix $\hat{\Sigma}$ erhält man, nach dem Lemma von Slutsky, konsistente Schätzer für die Ausdrücke $\text{Sp}^2[\mathbf{P}_d \Sigma]$ und $\text{Sp}[(\mathbf{P}_d \Sigma)^2]$. Um zu überprüfen, ob und wie stark die Schätzer verzerrt sind, ist in Tabelle 3 der mittlere Quotient für die Schätzer $\text{Sp}^2[\mathbf{T}_S \hat{\Sigma}]$ und $\text{Sp}[(\mathbf{T}_S \hat{\Sigma})^2]$ und deren Erwartungswerte anhand von $n = 10$ Individuen für wachsende Dimensionen $d = 5, \dots, 100$ bei je $n_{\text{sim}} = 1.000$ Simulationswiederholungen dargestellt.

Der Tabelle kann man entnehmen, dass der Plug-In-Schätzer für $\text{Sp}^2[\mathbf{P}_d \Sigma]$ kaum verzerrt ist und homogene Ergebnisse für wachsendes d liefert. Für den zweiten Quotienten erkennt man eine Verzerrung, die mit steigendem d immer stärker zunimmt. Daher ist die Verwendung der empirischen Kovarianzmatrix, zumindest für die Schätzung von $\text{Sp}[(\mathbf{T}_S \Sigma)^2]$ nicht ratsam, da die Freiheitsgrade ansonsten unterschätzt würden.

Aufgrund dieser Beobachtungen werden alternative, sog. Spurschätzer verwendet, die die Spurterme, die in den Freiheitsgraden f , f_0 auftauchen, direkt schätzen. Für diese Spurschätzer kann gezeigt werden, dass die Konsistenz unabhängig von der Dimension

Tabelle 3: Verzerrung der Plug-In-Schätzer bei hochdimensionalen Daten am Beispiel einer Compound Symmetry

d	$\frac{\text{Sp}^2[\mathbf{T}_S \hat{\Sigma}]}{\text{Sp}^2[\mathbf{T}_S \Sigma]}$	$\frac{\text{Sp}[(\mathbf{T}_S \hat{\Sigma})^2]}{\text{Sp}[(\mathbf{T}_S \Sigma)^2]}$
5	1.0382955	1.5145911
10	1.0152393	2.1023038
20	1.0171884	3.2414928
30	1.0126602	4.3560047
40	1.0058071	5.4310292
50	1.0021705	6.5358418
75	1.0067568	9.3618733
100	0.9992095	12.086978

d ist. Daher soll kurz auf die Eigenschaften von Schätzern eingegangen werden.

Es muss diskutiert werden, welche Eigenschaften ein Schätzer in hochdimensionalen Versuchsdesigns aufweisen sollte. Hochdimensionalität der Daten hat schließlich zur Folge, dass für das Konvergenzverhalten des Schätzers nicht nur die Anzahl der Versuchswiederholungen, sondern ebenso die Dimensionalität der Beobachtungsvektoren berücksichtigt werden muss. Der gewöhnliche Konsistenz-Begriff für eine Folge von Schätzern $\hat{\theta}_n$ ist dann nicht mehr ausreichend.

Brunner beschreibt diesbezüglich den Begriff der Dimensionsstabilität (vgl. [6]).

Definition 4.3.2 (Dimensionsstabilität). *Ein Feld von Schätzern $\hat{\theta}_{n,d}$ für den Parameter $\theta_{n,d}$ heißt dimensionsstabil, falls*

$$\left| \mathbb{E} \left(\frac{\hat{\theta}_{n,d}}{\theta_d} - 1 \right) \right| \leq D_n,$$

$$\text{Var} \left(\frac{\hat{\theta}_{n,d}}{\theta_d} \right) = \frac{1}{\theta_d^2} \text{Var} (\hat{\theta}_{n,d}) \leq K_n,$$

wobei D_n und K_n Nullfolgen, die gleichmäßig beschränkt bzgl. d .

Das dimensionsstabile Verhalten eines Schätzers kann als Verallgemeinerung des gewöhnlichen Konsistenzbegriffes für eine Folge von Schätzern $\hat{\theta}_n$ für Repeated Measures gesehen werden. Es stellt sicher, dass das Konvergenzverhalten nur von der Stichprobenanzahl n , nicht aber von der Anzahl der Messwiederholungen d , abhängt.

4.3.2 Spurschätzer für die Subplots

Für die Schätzung der Freiheitsgrade f , f_0 sollen nun Schätzer für die Ausdrücke $\text{Sp}[\mathbf{T}_S \boldsymbol{\Sigma}_i]$ und $\text{Sp}[\mathbf{T}_S \boldsymbol{\Sigma}_i \mathbf{T}_S \boldsymbol{\Sigma}_j]$, $i, j = 1, \dots, a$ konstruiert werden, die das Kriterium der Dimensionsstabilität erfüllen.

Betrachte fortan die mit dem Subplotprojektor \mathbf{T}_S zentrierten Beobachtungsvektoren $\mathbf{Z}_{ik} \sim N_d(\mathbf{T}_S \boldsymbol{\mu}_i, \mathbf{T}_S \boldsymbol{\Sigma}_i \mathbf{T}_S)$, $i = 1, \dots, a$, $k = 1, \dots, n_i$. Unter Ausnutzung der in Kapitel 3 aufgeführten Resultate, lassen sich Schätzer durch Quadratformen und Bilinearformen formulieren.

Aus Gründen der Übersicht wird im Folgenden die nachstehende Notation verwendet.

$$\begin{aligned} A_{j,k}^i &:= \mathbf{Z}_{ij}' \mathbf{Z}_{ik}, \\ A_{jk,\ell m}^i &:= (\mathbf{Z}_{ij} - \mathbf{Z}_{ik})' (\mathbf{Z}_{i\ell} - \mathbf{Z}_{im}), \\ A_{jk,\ell m}^{i,i'} &:= (\mathbf{Z}_{ij} - \mathbf{Z}_{ik})' (\mathbf{Z}_{i'\ell} - \mathbf{Z}_{i'm}). \end{aligned}$$

Mithilfe dieser Quadrat- und Bilinearformen lassen sich dimensionsstabile Schätzer bestimmen, die auch schon von Becker für den Zweistichprobenfall verwendet wurden (vgl. [2]). Zusammen mit den Aussagen aus Kapitel 3 erhält man die folgenden Aussagen über Momente der oben genannten Terme.

Satz 4.3.3. *Seien $\mathbf{Z}_{ij} \sim N_d(\mathbf{T}_S \boldsymbol{\mu}_i, \mathbf{T}_S \boldsymbol{\Sigma}_i \mathbf{T}_S)$ $i = 1, \dots, a$, $j = 1, \dots, n_i$ unabhängige Zufallsvektoren mit positiv definiten Kovarianzmatrizen $\boldsymbol{\Sigma}_i$ und einem Projektor \mathbf{T}_S . Dann gilt für die unten aufgeführten quadratischen Formen*

$$\begin{aligned} \mathbb{E}(A_{jk,jk}^i) &= 2 \text{Sp}[\mathbf{T}_S \boldsymbol{\Sigma}_i], & j \neq k, \\ \mathbb{E}([A_{jk,jk}^i]^2) &= 8 \text{Sp}[(\mathbf{T}_S \boldsymbol{\Sigma}_i)^2] + 4 \text{Sp}^2[\mathbf{T}_S \boldsymbol{\Sigma}_i], & j \neq k, \\ \text{Var}(A_{jk,jk}^i) &= 8 \text{Sp}[(\mathbf{T}_S \boldsymbol{\Sigma}_i)^2], & j \neq k, \\ \mathbb{E}(A_{jk,jk}^i A_{\ell m,\ell m}^i) &= 4 \text{Sp}^2[\mathbf{T}_S \boldsymbol{\Sigma}_i], & j \neq k \neq \ell \neq m, \\ \mathbb{E}(A_{jk,jk}^i A_{\ell m,\ell m}^{i'}) &= 4 \text{Sp}[\mathbf{T}_S \boldsymbol{\Sigma}_i] \text{Sp}[\mathbf{T}_S \boldsymbol{\Sigma}_{i'}], & j \neq k, \ell \neq m. \end{aligned}$$

Für die nachfolgenden Bilinearformen gilt

$$\begin{aligned} \mathbb{E}(A_{jk,\ell m}^i) &= 0, & j \neq k \neq \ell \neq m, \\ \mathbb{E}([A_{jk,\ell m}^i]^2) &= 4 \text{Sp}[(\mathbf{T}_S \boldsymbol{\Sigma}_i)^2], & j \neq k \neq \ell \neq m, \\ \text{Var}(A_{jk,\ell m}^i) &= 4 \text{Sp}[(\mathbf{T}_S \boldsymbol{\Sigma}_i)^2], & j \neq k \neq \ell \neq m, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 E\left([A_{jk,\ell m}^i]^4\right) &= 96 \operatorname{Sp}[(\mathbf{T}_S \boldsymbol{\Sigma}_i)^4] + 48 \operatorname{Sp}^2[(\mathbf{T}_S \boldsymbol{\Sigma}_i)^2], & j \neq k \neq \ell \neq m, \\
 E\left(A_{jk,\ell m}^{i,i'}\right) &= 0, & j \neq k \neq \ell \neq m, \\
 E\left([A_{jk,\ell m}^{i,i'}]^2\right) &= 4 \operatorname{Sp}[\mathbf{T}_S \boldsymbol{\Sigma}_i \mathbf{T}_S \boldsymbol{\Sigma}_{i'}], & j \neq k, \ell \neq m, \\
 \operatorname{Var}\left(A_{jk,\ell m}^{i,i'}\right) &= 4 \operatorname{Sp}[\mathbf{T}_S \boldsymbol{\Sigma}_i \mathbf{T}_S \boldsymbol{\Sigma}_{i'}], & j \neq k, \ell \neq m, \\
 E\left([A_{jk,\ell m}^{i,i'}]^4\right) &= 96 \operatorname{Sp}[(\mathbf{T}_S \boldsymbol{\Sigma}_i \mathbf{T}_S \boldsymbol{\Sigma}_{i'})^2] + 48 \operatorname{Sp}^2[\mathbf{T}_S \boldsymbol{\Sigma}_i \mathbf{T}_S \boldsymbol{\Sigma}_{i'}], & j \neq k, \ell \neq m.
 \end{aligned}$$

Beweis. Es bezeichne zunächst $\mathbf{X} = \mathbf{Z}_{ij} - \mathbf{Z}_{ik}$ mit $j \neq k$ beliebig aber fest, also $\mathbf{X} \neq \mathbf{0}$ fast sicher. Für die Quadratformen verfährt man mit Hilfe von Lemma 3.3.3 wie folgt. Bezeichne $Q_X = \mathbf{X}'\mathbf{X} = A_{jk,jk}^i$ mit $E(X) = \mathbf{0}$, $\operatorname{Var}(\mathbf{X}) = \boldsymbol{\Sigma}_X = 2\mathbf{T}_S \boldsymbol{\Sigma}_i \mathbf{T}_S$ und $\mathbf{A} = \mathbf{I}_d$. Dann gilt zusammen mit der Invarianz der Spur unter zyklischer Permutation

$$\begin{aligned}
 E(Q_X) &= \operatorname{Sp}[\boldsymbol{\Sigma}_X] = 2 \operatorname{Sp}[\mathbf{T}_S \boldsymbol{\Sigma}_i], \\
 E(Q_X^2) &= 2 \operatorname{Sp}[\boldsymbol{\Sigma}_X^2] + \operatorname{Sp}^2[\boldsymbol{\Sigma}_X] = 8 \operatorname{Sp}[(\mathbf{T}_S \boldsymbol{\Sigma}_i)^2] + 4 \operatorname{Sp}^2[\mathbf{T}_S \boldsymbol{\Sigma}_i], \\
 \operatorname{Var}(Q_X) &= E(Q_X^2) - E^2(Q_X) = 8 \operatorname{Sp}[(\mathbf{T}_S \boldsymbol{\Sigma}_i)^2].
 \end{aligned}$$

Für $\mathbf{Y} = \mathbf{Z}_{i\ell} - \mathbf{Z}_{im}$ und $j \neq k \neq \ell \neq m$ gilt wegen Unabhängigkeit der Quadratformen

$$E(Q_X Q_Y) = E(Q_X) E(Q_Y) = 4 \operatorname{Sp}^2[\mathbf{T}_S \boldsymbol{\Sigma}_i].$$

Für $i \neq i'$ gilt das Gleiche, da die quadratischen Formen Q_X und Q_Y dann unabhängig sind. Damit sind die Momente der Quadratformen gezeigt.

Für die Bilinearformen kann man ebenfalls die Ergebnisse aus Lemma 3.3.3 verwenden. Für $\mathbf{X} = \mathbf{Z}_{ij} - \mathbf{Z}_{ik}$ und $\mathbf{Y} = \mathbf{Z}_{i\ell} - \mathbf{Z}_{im}$, $j \neq k \neq \ell \neq m$ erhält man mit Lemma 3.3.3 für die Bilinearform Q_{XY}

$$\begin{aligned}
 E(Q_{XY}) &= 0, \\
 E(Q_{XY}^2) &= \operatorname{Sp}[\boldsymbol{\Sigma}_X \boldsymbol{\Sigma}_Y] = 4 \operatorname{Sp}[(\mathbf{T}_S \boldsymbol{\Sigma}_i)^2], \\
 \operatorname{Var}(Q_{XY}) &= E(Q_{XY}^2) - E^2(Q_{XY}) = 4 \operatorname{Sp}[(\mathbf{T}_S \boldsymbol{\Sigma}_i)^2], \\
 E(Q_{XY}^4) &= 6 \operatorname{Sp}[(\boldsymbol{\Sigma}_X \boldsymbol{\Sigma}_Y)^2] + 3 \operatorname{Sp}^2[\boldsymbol{\Sigma}_X \boldsymbol{\Sigma}_Y] = 96 \operatorname{Sp}[(\mathbf{T}_S \boldsymbol{\Sigma}_i)^4] + 48 \operatorname{Sp}^2[(\mathbf{T}_S \boldsymbol{\Sigma}_i)^2].
 \end{aligned}$$

Für die Bilinearformen $A_{jk,\ell m}^{i,i'}$ verfährt man analog. □

4.3.3 Spurschätzer

Die vorangegangenen Resultate können nun verwendet werden, um die Spurschätzer zusammenzusetzen.

Korollar 4.3.4. *Die unten angegebenen Spurschätzer $\widehat{\text{Sp}^2[\mathbf{TV}]}$ und $\widehat{\text{Sp}[(\mathbf{TV})^2]}$ sind erwartungstreu für $\text{Sp}^2[\mathbf{TV}]$ und $\text{Sp}[(\mathbf{TV})^2]$.*

$$\begin{aligned}\widehat{\text{Sp}^2[\mathbf{TV}]} &= \sum_{i=1}^a \frac{(T_{ii})^2}{(n_i)^2} \cdot \frac{1}{4n_i(n_i-1)(n_i-2)(n_i-3)} \sum_{m \neq j \neq k \neq \ell}^{n_i} A_{jk,jk}^i A_{\ell m,\ell m}^i \\ &\quad + \sum_{i=1}^a \sum_{i' \neq i} \frac{T_{ii'} T_{i'i}}{n_i n_{i'}} \cdot \frac{1}{4n_i(n_i-1)n_{i'}(n_{i'}-1)} \sum_{j \neq k}^{n_i} \sum_{\ell \neq m}^{n_{i'}} A_{jk,jk}^i A_{\ell m,\ell m}^{i'} \\ \widehat{\text{Sp}[(\mathbf{TV})^2]} &= \sum_{i=1}^a \frac{(T_{ii})^2}{(n_i)^2} \cdot \frac{1}{4n_i(n_i-1)(n_i-2)(n_i-3)} \sum_{j \neq k \neq \ell \neq m} (A_{jk,\ell m}^i)^2 \\ &\quad + \sum_{i=1}^a \sum_{i' \neq i} \frac{T_{ii'} T_{i'i}}{n_i n_{i'}} \cdot \frac{1}{4n_i(n_i-1)n_{i'}(n_{i'}-1)} \sum_{j \neq k}^{n_i} \sum_{\ell \neq m}^{n_{i'}} (A_{jk,\ell m}^{i,i'})^2\end{aligned}$$

Beweis. Mit Satz 4.3.3 gilt zunächst: $A_{jk,jk}^i A_{\ell m,\ell m}^i = 4 \text{Sp}^2[\mathbf{T}_S \mathbf{\Sigma}_i] \forall j \neq k \neq \ell \neq m$. Da alle Indizes j, k, ℓ, m nach Voraussetzung ungleich sind, gibt es $n_i(n_i-1)(n_i-2)(n_i-3)$ Summanden.

Im Falle $i \neq i'$ gilt $A_{jk,jk}^i A_{\ell m,\ell m}^{i'} = 4 \text{Sp}[\mathbf{T}_S \mathbf{\Sigma}_i] \text{Sp}[\mathbf{T}_S \mathbf{\Sigma}_{i'}]$ für $j \neq k, \ell \neq m$. In diesem Fall existieren $n_i(n_i-1)n_{i'}(n_{i'}-1)$ Summanden mit ungleichen Indizes. Es folgt die Erwartungstreue für $\widehat{\text{Sp}^2[\mathbf{TV}]}$. Die Argumentationskette für $\widehat{\text{Sp}[(\mathbf{TV})^2]}$ erfolgt analog. \square

Die Erwartungstreue sichert, dass die Schätzer unverzerrt sind. Der nächste Satz zeigt, dass die so konstruierten Schätzer sogar das Kriterium der Dimensionsstabilität aus Definition 4.3.2 erfüllen. Die erste Bedingung ist durch die Erwartungstreue sichergestellt, die zweite wird im folgenden Satz bewiesen.

Satz 4.3.5 (Dimensionsstabilität der Spurschätzer). *Die Spurschätzer $\widehat{\text{Sp}^2[\mathbf{TV}]}$ und $\widehat{\text{Sp}[(\mathbf{TV})^2]}$ sind unter Gültigkeit von (4.1) dimensionsstabil im Sinne der Definition 4.3.2.*

Beweis. s. Satz 7.1.4 im Anhang. \square

Der Nenner des Freiheitsgrades f_0 kann ebenfalls dimensionsstabil durch den Ausdruck

$$\text{Sp}[\widetilde{(\mathbf{TV})^2}] = \sum_{i=1}^a \left(\frac{T_{ii}}{n_i} \right)^2 \frac{1}{4n_i(n_i - 1)^2(n_i - 2)(n_i - 3)} \sum_{j \neq k \neq \ell \neq m} (A_{jk,\ell m}^i)^2$$

geschätzt werden, wie im folgenden Korollar gezeigt.

Korollar 4.3.6. *Der Schätzer $\text{Sp}[\widetilde{(\mathbf{TV})^2}]$ ist dimensionsstabil.*

Beweis. s. Satz 7.1.5 im Anhang. □

4.3.4 Freiheitsgradschätzer

In dem vorherigen Abschnitt wurde gezeigt, dass Zähler und Nenner der Freiheitsgrade f , f_0 aus (4.7) und (4.8) dimensionsstabil durch $\widehat{\text{Sp}^2[\mathbf{TV}]}$, $\widehat{\text{Sp}[(\mathbf{TV})^2]}$ und $\widehat{\text{Sp}[(\mathbf{TV})^2]}$ geschätzt werden können. Aus diesen Schätzern werden die Freiheitsgradschätzer

$$\hat{f} = \frac{\widehat{\text{Sp}^2[\mathbf{TV}]}}{\widehat{\text{Sp}[(\mathbf{TV})^2]}}, \quad (4.9)$$

$$\hat{f}_0 = \frac{\widehat{\text{Sp}^2[\mathbf{TV}]}}{\widehat{\text{Sp}[(\mathbf{TV})^2]}} \quad (4.10)$$

zusammengesetzt. Aufgrund der Verteilungsannahme der Zufallsvektoren ist der Nenner der Freiheitsgradschätzer fast-sicher größer Null. Da Zähler und Nenner von \hat{f} , \hat{f}_0 nicht unabhängig sind, kann nur approximativ die Dimensionsstabilität dieser Freiheitsgradschätzer gezeigt werden. Dafür werden Erwartungswert und Varianz der Quotienten aus Freiheitsgradschätzer und wahren Freiheitsgrad mittels Taylorapproximation nach Stange bestimmt und gezeigt, dass die Verzerrung dieser Approximationen für großes N verschwindet (vgl. [21]).

Satz 4.3.7 (Eigenschaften der Freiheitsgradschätzer). *Die Freiheitsgradschätzer \hat{f} und \hat{f}_0 sind approximativ dimensionsstabil.*

Beweis. s. Satz 7.1.6 im Anhang. □

Beispiel 4.3.8. *Um den Vorteil der Spurschätzer zu verdeutlichen, sind in den Tabellen 4 und 5 die Quotienten aus Mittelwert und empirischer Varianz des ersten Freiheitsgrades \hat{f}/f und \tilde{f}/f unter den in Beispiel 4.3.1 getroffenen Annahmen dargestellt, wobei \tilde{f}/f den Freiheitsgradschätzer mit Plug-In-Schätzern für die Kovarianzmatrix Σ*

bezeichnet. Diese Quotienten sind für ausreichend groß gewähltes n_{sim} eine Möglichkeit die Dimensionsstabilität der Schätzer empirisch zu untersuchen.

Tabelle 4: Quotienten simulierter empirischer Erwartungswerte und Varianzen von \hat{f} und \tilde{f} für $a = 1$, $n = 10$ bei wachsenden Dimensionen und $n_{sim} = 1.000$ Simulationen.

d	Spurschätzer		Plug-In-Schätzer	
	\hat{f}/f	$\text{Var}(\hat{f})/f^2$	\tilde{f}/f	$\text{Var}(\tilde{f})/f^2$
5	1.045028	0.0547921	1.045028	0.0082674
10	1.0471479	0.056127	1.0471479	0.0024427
20	1.0600445	0.0750266	0.3159279	0.0004857
30	1.0447874	0.0707148	0.2324651	0.0001429
40	1.0525466	0.0718624	0.18498	0.0000617
50	1.0467603	0.0667174	0.1532802	0.0000277
75	1.0678702	0.0703435	0.1076151	< 0.00001
100	1.0690598	0.0688765	0.0827766	< 0.00001

Tabelle 5: Quotienten simulierter empirischer Erwartungswerte und Varianzen von \hat{f} und \tilde{f} für $a = 1$, $n = 100$ bei wachsenden Dimensionen und $n_{sim} = 1.000$ Simulationen.

d	Spurschätzer		Plug-In-Schätzer	
	\hat{f}/f	$\text{Var}(\hat{f})/f^2$	\tilde{f}/f	$\text{Var}(\tilde{f})/f^2$
5	1.0003738	0.0004094	0.9571377	0.0003368
10	1.0006961	0.0004257	0.9110077	0.0002897
20	1.0002897	0.0004268	0.8328381	0.0002033
30	0.999795	0.0004087	0.7678061	0.0001418
40	0.999984	0.0003907	0.7125716	0.0001009
50	0.9998202	0.0004216	0.6645817	0.0000822
75	1.0010005	0.0004217	0.5693934	0.0000437
100	1.001124	0.0004233	0.4977943	0.0000256

Man erkennt, dass die dimensionsstabilen Spurschätzer über alle Dimensionen hinweg den Freiheitsgrad im Mittel stabil approximieren. Erhöht man die Anzahl der Individuen auf $n = 100$ sieht man, dass die leicht positive Verzerrung der Schätzer für großes n deutlich abnimmt. Ein ähnliches Bild bietet sich bei dem empirischen Varianzen, die für steigendes d keine große Variation aufzeigen, für wachsendes n aber geringer werden. Die Plug-In-Schätzer reagieren sehr stark auf den Anstieg der Dimensionen und liefern

keine zufriedenstellenden Simulationsergebnisse. Dieser Eindruck wird durch die stark degenerierende empirische relative Varianz bestärkt. Die unkorrigierten Plug-in-Schätzer sind den Spurschätzern in diesem Versuchsdesign absolut unterlegen.

4.4 Spezialfall: Zwei Behandlungsgruppen

Es kann gezeigt werden, dass die vorgestellte Teststatistik im Falle von zwei Behandlungsgruppen äquivalent zur der Teststatistik von Becker ist (vgl. [2]). Je nach Hypothese ist der Projektor des Whole-Plots \mathbf{T}_W gleich der zentrierenden Matrix \mathbf{P}_2 (Hypothese kein Behandlungseffekt bzw. keine Wechselwirkung zwischen Behandlung und Zeit) oder der Matrix $\frac{1}{2}\mathbf{J}_2$ (Hypothese kein Zeiteffekt), deren Einträge identisch $1/2$ sind. In diesen beiden Fällen gilt

$$\begin{aligned} & N \cdot \bar{\mathbf{X}}' \mathbf{T} \bar{\mathbf{X}} \\ & \stackrel{a)}{=} N \cdot \bar{\mathbf{X}}' (\mathbf{P}_2 \otimes \mathbf{T}_S) \bar{\mathbf{X}} = \frac{N}{2} \cdot (\bar{\mathbf{X}}_1 - \bar{\mathbf{X}}_2)' \mathbf{T}_S (\bar{\mathbf{X}}_1 - \bar{\mathbf{X}}_2), \\ & \stackrel{b)}{=} N \cdot \bar{\mathbf{X}}' (\frac{1}{2} \mathbf{J}_2 \otimes \mathbf{T}_S) \bar{\mathbf{X}} = \frac{N}{2} \cdot (\bar{\mathbf{X}}_1 + \bar{\mathbf{X}}_2)' \mathbf{T}_S (\bar{\mathbf{X}}_1 + \bar{\mathbf{X}}_2). \end{aligned}$$

Für den Nenner der Teststatistik untersucht man den Erwartungswert des Nenners

$$\mathbb{E} \left(N \cdot \bar{\mathbf{X}}' \mathbf{T} \bar{\mathbf{X}} \right) = N \cdot \sum_{i=1}^2 \frac{T_{ii}}{n_i} \text{Sp} [\mathbf{T}_S \boldsymbol{\Sigma}_i].$$

Der Spurschätzer des Nenners hat demnach die folgende Gestalt

$$\text{Sp} [\widehat{\mathbf{T}\mathbf{V}}] = \frac{N}{2n_1} \text{Sp} [\widehat{\mathbf{T}_S \boldsymbol{\Sigma}_1}] + \frac{N}{2n_2} \text{Sp} [\widehat{\mathbf{T}_S \boldsymbol{\Sigma}_2}].$$

Der einzige unbekannte Parameter des Ausdruckes, $\text{Sp} [\mathbf{T}_S \boldsymbol{\Sigma}_i]$, wird durch den passenden Schätzer ersetzt und man gelangt schließlich zu der Äquivalenz der Teststatistiken

$$F_{\text{MH}} = F_{\text{B}} = \frac{(\bar{\mathbf{X}}_1 \pm \bar{\mathbf{X}}_2)' \mathbf{T}_S (\bar{\mathbf{X}}_1 \pm \bar{\mathbf{X}}_2)}{\text{Sp} [\widehat{\mathbf{T}_S \boldsymbol{\Sigma}_1}] / n_1 + \text{Sp} [\widehat{\mathbf{T}_S \boldsymbol{\Sigma}_2}] / n_2}.$$

Die Freiheitsgrade, die der Box-Approximation entstammen sind ebenfalls identisch.

5 Simulationen

In diesem Abschnitt soll anhand von Simulationsstudien gezeigt werden, wie gut das in dieser Arbeit hergeleitete Testverfahren mit zufällig generierten Datensätzen umgeht. Im vorherigen Abschnitt wurde bereits an einem Beispiel empirisch untersucht, inwieweit die konstruierten Spürschätzer und Freiheitsgrade das Kriterium der Dimensionsstabilität erfüllen. Um die Qualität der getroffenen Testentscheidungen zu analysieren, werden das Niveau und die Power (Fehler 1. und 2. Art) anhand verschiedener Behandlungsgruppen, Stichprobenumfänge und Kovarianzmatrizen betrachtet.

5.1 Struktur der simulierten Daten

Die Annahmen, die für die Testprozedur getroffen wurden, verlangen normalverteilte Datenvektoren mit beliebigen, positiv definiten Kovarianzmatrizen Σ_i . Außerdem werden für die Konstruktion der Schätzer mindestens 4 Beobachtungen je Behandlungsgruppe $i = 1, \dots, a$ benötigt. Da hier nur finite Anzahlen an Versuchsobjekten betrachtet werden, ist die Bedingung 4.1 erfüllt. Für die Kovarianzmatrizen werden eine Compound Symmetry und eine autoregressive Struktur betrachtet.

Definition 5.1.1 (Compound Symmetry). *Sei $\mathbf{X} \in \mathbb{R}^d$ ein Zufallsvektor mit Erwartungsvektor $\boldsymbol{\mu} \in \mathbb{R}^d$ und Kovarianzmatrix $\Sigma \in \mathbb{R}^{d \times d}$. Die Kovarianzstruktur ist vom Typ einer Compound Symmetry, falls sie die Gestalt*

$$\Sigma = \begin{pmatrix} \sigma^2 & & \tau \\ & \ddots & \\ \tau & & \sigma^2 \end{pmatrix}$$

mit gleicher Varianz $\sigma^2 > 0$ und konstanter Kovarianz $\tau \in \mathbb{R}$ aufweist.

Definition 5.1.2 (Autoregressiv). *Sei $\mathbf{X} \in \mathbb{R}^d$ ein Zufallsvektor mit Erwartungsvektor $\boldsymbol{\mu} \in \mathbb{R}^d$ und Kovarianzmatrix $\Sigma \in \mathbb{R}^{d \times d}$. Die Struktur der Kovarianzmatrix heißt autoregressiv, falls sie die Gestalt*

$$\Sigma = \begin{pmatrix} \sigma^2 & & \rho^{|i-j|}\sigma^2 \\ & \ddots & \\ \rho^{|i-j|}\sigma^2 & & \sigma^2 \end{pmatrix}$$

mit $\sigma^2 > 0$, $\rho \in [0, 1]$ und $i, j = 1, \dots, d$ aufweist.

Die Compound Symmetry Struktur sagt über die Daten aus, dass eine identische Korrelation zwischen allen Messwiederholungen besteht. In diesem Fall spricht man auch von der *Austauschbarkeit* der Messwerte je Versuchseinheit.

Unterstellt man den Datenvektoren eine autoregressive Kovarianzstruktur, so sind diejenigen Messwiederholungen stärker miteinander korreliert, die näher beieinander liegen, während die Korrelation der Messwerte mit wachsendem Abstand geringer wird. Ein typisches Szenario, in dem eine autoregressive Kovarianzstruktur angenommen wird, ist die Modellierung von Zeitreihen mit äquidistanten Messpunkten.

Für die Erzeugung der Datensätze und Berechnung der Teststatistiken wird die statistische Analysesoftware SAS in den Versionen 9.2 und 9.3 verwendet. Die implementierte IML-Umgebung erlaubt eine sehr schnelle Berechnung von Matrixoperationen, sodass Schleifen häufig durch Matrix- und Vektoroperationen ersetzt werden können, die die Zeiten der Programme mitunter deutlich reduzieren. Die Daten werden mit der RANNOR-Prozedur erzeugt, die Abhängigkeitsstrukturen werden mittels Addition von identischen Zufallsvariablen erzeugt. Die genauen Rechenschritte können im Quelltext im Anhang nachvollzogen werden.

5.2 Alternative Auswertungsverfahren

Um die Simulationsergebnisse besser bewerten zu können, werden weitere Testverfahren auf dieselben generierten Datensätze angewendet. Da es bisher keine Testprozedur für zweifaktorielle hochdimensionale Repeated Measures Modelle gibt, die mit ungleichen Stichprobenumfängen und Kovarianzmatrizen im Falle $a > 2$ umgehen kann, gibt es kein direktes Konkurrenzverfahren.

Dennoch gibt es Methoden, die rein technisch, aus Sicht eines Anwenders, auf ein solches Versuchsdesign angewendet werden könnten, auch wenn nicht alle von dem jeweiligen Testverfahren vorausgesetzten Annahmen erfüllt sind. Dahinter steht die Idee aufzuzeigen, zu welchen Fehlentscheidungen der Anwender durch die Anwendung eines falschen Testverfahrens verleitet werden kann und ob die neue Teststatistik als Alternative gute Ergebnisse liefert. Als konkurrierende Verfahren dienen

- die klassische zweifaktorielle Varianzanalyse für unverbundene Stichproben mit gleichen Varianzen,
- die Korrektur der varianzanalytischen Freiheitsgrade durch das Box'sche Epsilon

aus Geißer-Greenhouse mit empirischer Kovarianzmatrix unter der Annahme gleicher Kovarianzmatrizen je Behandlungsgruppe (vgl. [11]) sowie

- die Huynh-Feldt-Korrektur des Box'schen Epsilon, unter der Annahme gleicher Kovarianzmatrizen je Behandlungsgruppe (vgl. [14, 15]).

Durch schrittweise Verallgemeinerung der Versuchsdesigns sollen die Grenzen der gewählten Konkurrenten aufgezeigt werden.

5.2.1 Huynh-Feldt-Korrektur

Für das zweifaktorielle Split-Plot-Design wurde von Huynh und Feldt eine Approximation publiziert, die von den zugrunde liegenden Daten gleiche Kovarianzmatrizen je Behandlungsgruppe fordert. Ausgehend von der quadratischen Form (4.2) erfolgt eine Box-Approximation und man gelangt schließlich zu der Teststatistik

$$F_{\text{GG}} = \frac{\bar{\mathbf{X}}' \mathbf{T} \bar{\mathbf{X}}}{\text{Sp}[\mathbf{T}_S \mathbf{\Sigma}] \cdot \sum_{i=1}^a T_{ii}/n_i} \approx F(f_{\text{HF}}, f'_{\text{HF}}). \quad (5.1)$$

Die Prüfgröße ist approximativ F-verteilt, dabei wird $\text{Sp}[\mathbf{T}_S \mathbf{\Sigma}]$ mittels der empirischen Kovarianzmatrix $\hat{\mathbf{\Sigma}}$ geschätzt. Die Freiheitsgrade f_{HF} und f'_{HF} setzen sich aus den Freiheitsgraden der Varianzanalyse $f_{\text{ANOVA}} = \text{Sp}[\mathbf{T}]$, $f'_{\text{ANOVA}} = (d-1)(N-a)$ und einem Korrekturterm $\tilde{\epsilon}$ zusammen, es gilt

$$\tilde{\epsilon} = \frac{(N-a+1)(d-1)\hat{\epsilon} - 2}{(d-1)(N-a-(d-1)\hat{\epsilon})} \text{ mit } \hat{\epsilon} = \frac{\text{Sp}^2[\mathbf{T}_S \hat{\mathbf{\Sigma}}]}{(d-1) \text{Sp}[\mathbf{T}_S \hat{\mathbf{\Sigma}} \mathbf{T}_S \hat{\mathbf{\Sigma}}]}.$$

Sie haben die Gestalt $f_{\text{HF}} = f_{\text{ANOVA}} \cdot \tilde{\epsilon}$ sowie $f'_{\text{HF}} = f'_{\text{ANOVA}} \cdot \tilde{\epsilon}$. Es handelt sich bei dem oben aufgeführten Ausdruck $\tilde{\epsilon}$ um die Korrektur von Lecoutre aus dem Jahr 1991 (vgl. [15]).

5.2.2 Weitere Teststatistiken

Neben der Huynh-Feldt-Korrektur sollen in den späteren Simulationen ebenfalls die oben erwähnten Anova-Freiheitsgrade und das unkorrigierte empirische $\hat{\epsilon}$ zur Auswertung der Teststatistik (5.1) herangezogen werden. Die Analyse mit den Freiheitsgraden

$f_{GG} = f_{ANOVA} \cdot \hat{\epsilon}$ und $f'_{GG} = f'_{ANOVA} \cdot \hat{\epsilon}$ wird mit den Kürzeln von Greenhouse und Geisser betitelt, da in deren Arbeit als erstes dieser Lösungsansatz für das zweifaktorielle hochdimensionale Split-Plot-Design beschrieben wurde. Ein Problem der Freiheitsgrade f_{GG} und f'_{GG} besteht darin, dass die Spur-Schätzer das Kriterium der Dimensionsstabilität nicht erfüllen und daher mit steigender Dimension immer konservativere Testergebnisse liefern. Dieser Sachverhalt wurde exemplarisch in den Tabellen 4, 5 dargestellt.

Auch wenn die Huynh-Feldt-Prozedur das Niveau im Falle identischer Kovarianzmatrizen gut einhält, wurde die Dimensionsstabilität der Schätzer bisher nicht gezeigt und die Erweiterung auf ungleiche Kovarianzmatrizen ist bisher ebenfalls nicht erfolgt.

5.3 Niveausimulationen

Für die Niveausimulationen werden Datensätze unter der Globalhypothese $H_0 : \mathbf{T}\boldsymbol{\mu} = \mathbf{0}$ erzeugt. Anhand dieser Realisierungsvektoren wird für $n_{sim} = 10.000$ Simulationen überprüft, wie gut der Fehler 1. Art von der Testprozedur approximiert wird. Dazu wählt man ein festes α -Level und vergleicht für die n_{sim} Datenvektoren die Teststatistik 4.4 mit dem zugehörigen $(1 - \alpha)$ -Quantil der approximativen F-Verteilung der Prüfgröße. In diesem Kapitel wird ausschließlich die Hypothese der Wechselwirkung überprüft, da die Freiheitsgrade, die aus den Daten geschätzt werden müssen, am größten sind und Unterschiede daher am stärksten aufgezeigt werden.

Der Schätzer \hat{p} aus Anzahl der verworfen Hypothesen dividiert durch n_{sim} dient als Schätzer für den Fehler 1. Art (α -Fehler). Die folgenden Grafiken beschränken sich auf das $\alpha = 5\%$ Niveau. Ergänzend ist in den Simulationsgrafiken ein 99%-Zufallsstreifen eingetragen, der den Bereich markiert, in dem sich der so ermittelte Schätzer \hat{p} mit einer Wahrscheinlichkeit von 99% aufhalten sollte. Die Ränder des Zufallsstreifens lauten

$$ZF = [0,04438; 0,05561].$$

Für die Niveausimulationen werden verschiedene Parameterkonstellationen vorgestellt. Wie in Kapitel 4.4 gezeigt wurde, gelangt man bei zwei Behandlungsgruppen zu der Approximation von Becker.

Ausgehend von dem Zwei-Stichproben-Layout wird gezeigt, wie sich die vorgestellten Teststatistiken für wachsende Dimensionen verhalten. Als Kovarianzstrukturen werden

die Compound Symmetry und eine autoregressive Struktur erzeugt. Es werden insgesamt $n_{sim} = 10.000$ unabhängige, normalverteilte Datensätze für jede Parameterkonstellation erzeugt.

5.3.1 Zwei-Stichprobenfall

Im Falle von zwei Gruppen sieht man bei den Simulation des Fehlers 1. Art für eine Compound Symmetry Struktur mit gleichen Varianzen und Stichprobenumfängen, dass die neue Teststatistik das 5%-Niveau ab einer Stichprobenanzahl von $n_i = 10$ Versuchsobjekten je Gruppe sehr gut einhält und für alle simulierten Dimensionen keine konservative oder liberale Tendenz zeigt (vgl. dazu Abbildung 3). Die Verzerrung des Box'schen Epsilon offenbart sich in der Geisser-Greenhouse-Teststatistik, die mit steigender Dimension immer konservativere Ergebnisse liefert. Dieser Effekt bleibt auch bei größeren Stichprobenumfängen bestehen. Die Huynh-Feldt-Statistik hat weist für kleine Stichproben einen liberalen Trend auf, der bei größer gewähltem N verschwindet. Die Anova liefert im Falle gleicher Varianzen bei einer CS-Struktur ordentliche Simulationsergebnisse.

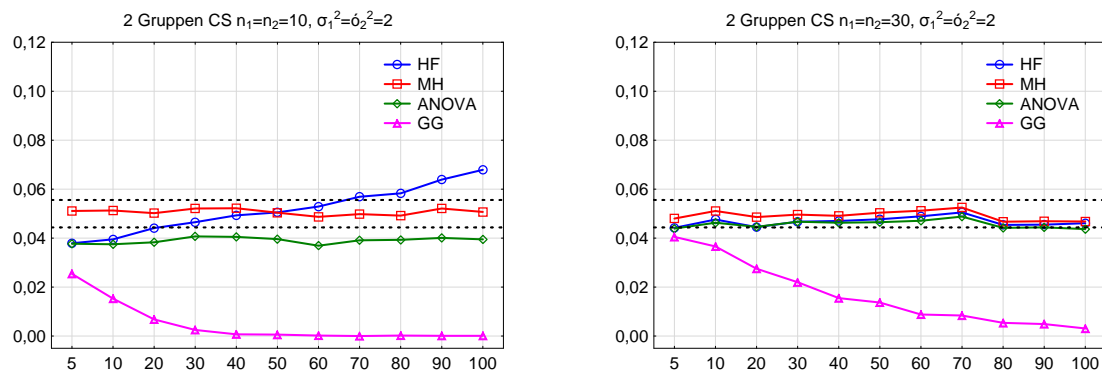


Abbildung 3: CS-Struktur mit $n_1 = n_2 = 10$ (links) bzw. $n_1 = n_2 = 30$ (rechts) Versuchsobjekten und gleichen Varianzen $\sigma_1^2 = \sigma_2^2 = 2$.

Für ungleiche Varianzen in den Behandlungsgruppen wie in Abbildungen 4 sieht man, dass die neue Teststatistik das Niveau weiterhin einhält, während alle anderen Testverfahren entweder extrem liberal oder konservativ werden, abhängig davon, ob die größere Varianz in der Gruppe mit mehr oder weniger Versuchsobjekten zu finden ist. Dieses Verhalten wurde bereits für den t-Test als Auswertungsinstrument zweier Handlungs-

gruppen mit ungleichen Varianzen von Fisher beobachtet (vgl. [9]). Im Falle balancierter Designs ist die Abweichung der anderen Verfahren vom vorgegebenen Niveau deutlich geringer, die Verzerrung der Geisser-Greenhouse-Statistik bleibt für wachsendes d bestehen.

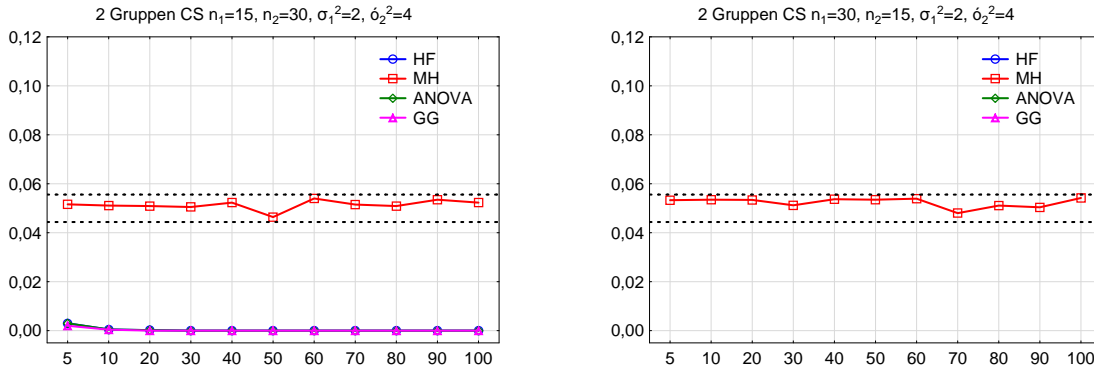


Abbildung 4: CS-Struktur mit $n_1 = 15, n_2 = 30$ (links) bzw. $n_1 = 30, n_2 = 15$ (rechts) Versuchsobjekten und ungleichen Varianzen $\sigma_1^2 = 2, \sigma_2^2 = 4$.

Im Falle einer autoregressiven Kovarianzstruktur gelangt man zu denselben Aussagen wie im Falle einer Compound Symmetry, was in den Abbildungen 15 - 20 im Anhang dargestellt ist. Das neue Verfahren liefert stabile Simulationsergebnisse und liegt fast immer im 99%-Zufallsstreifen. Die vergleichenden Verfahren liefern, insbesondere im Fall ungleicher Varianzen, stark abweichende Ergebnisse und halten das Niveau nicht ein.

5.3.2 Mehr-Stichprobenfall

Die Besonderheit des vorgestellten Testverfahrens stellt die universelle Anwendbarkeit, im Rahmen der getroffenen Voraussetzungen, dar. Für mehr als zwei Behandlungsgruppen sind einige Simulationsergebnisse im Folgenden aufgeführt.

Im Falle einer Compound Symmetry-Struktur mit gleichen Kovarianzmatrizen sieht man, dass die neue Teststatistik F_{MH} das Niveau für $a = 3$ Gruppen weiterhin gut einhält (vgl. Abbildung 5). Die Verzerrung der Geisser-Greenhouse-Statistik zeigt bleibt bestehen, die Anova verhält sich nur leicht konservativ, stabilisiert sich allerdings für steigendes N . Die Hyunh-Feldt-Korrektur hält das Niveau für $n_i \equiv 30$ ebenfalls ein.

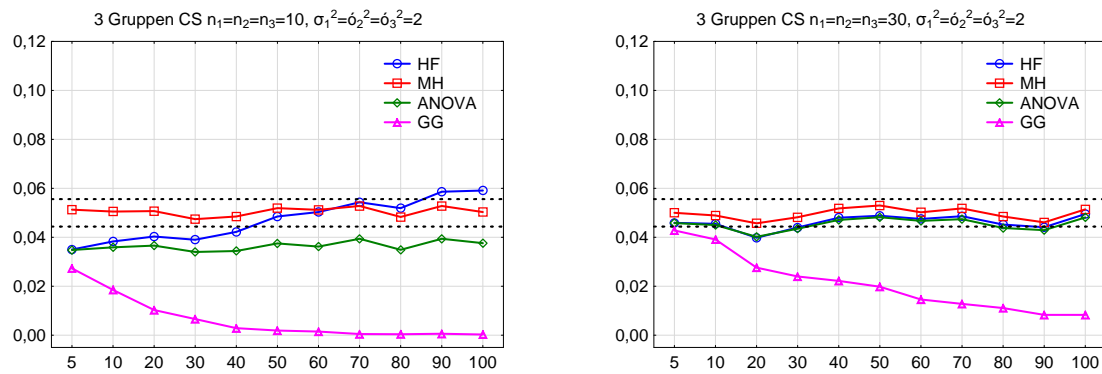


Abbildung 5: CS-Struktur mit $n_1 = n_2 = n_3 = 10$ (links) bzw. $n_1 = n_2 = n_3 = 30$ (rechts) Versuchsobjekten und gleichen Varianzen $\sigma_1^2 = \sigma_2^2 = \sigma_3^2 = 2$.

Lockert man die Annahmen und simuliert Daten mit ungleichen Varianzen, sieht man, dass die Teststatistik F_{MH} das Niveau weiterhin gut einhält (vgl. Abbildung 6). In den Extremfällen ungleicher Varianzen und Stichprobenumfänge lassen sich Szenarien herbeiführen, in denen auch die neue Teststatistik leicht liberal, bzw. konservativ wird (vgl. Abbildung 7), allerdings ist dieses Niveau, aufgrund der Dimensionsstabilität der Schätzer, nicht von der Dimension d abhängig. Die Richtung ist davon abhängig, ob die größere Varianz in der Gruppe mit mehr (konservativ) oder weniger (liberal) Versuchsobjekten vorliegt.

Erhöht man weiter die Anzahl der Gruppen, gelangt man zu dem gerade beschriebenen Verhalten der Teststatistik. Für $a = 4$ Gruppen und ungleiche Varianzen sind die Simulationsergebnisse für eine Compound Symmetry Struktur in Abbildung 8 dargestellt.

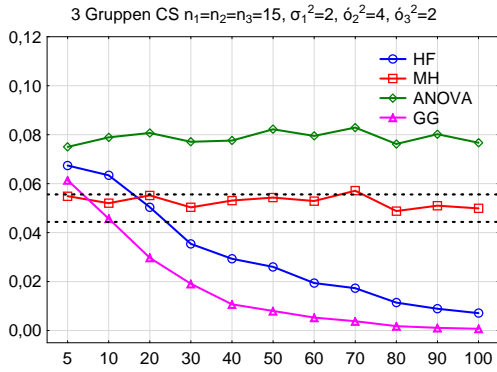


Abbildung 6: CS-Struktur mit $n_1 = n_2 = n_3 = 15$ Versuchsobjekten und ungleichen Varianzen $\sigma_1^2 = \sigma_3^2 = 2$, $\sigma_2^2 = 4$.

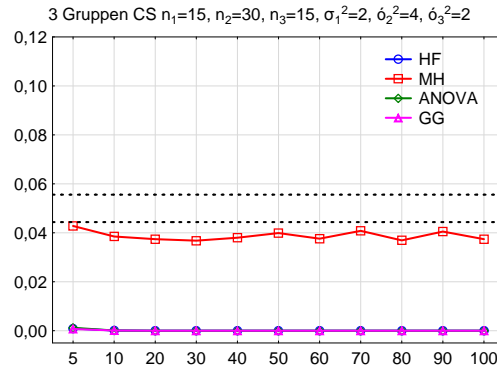
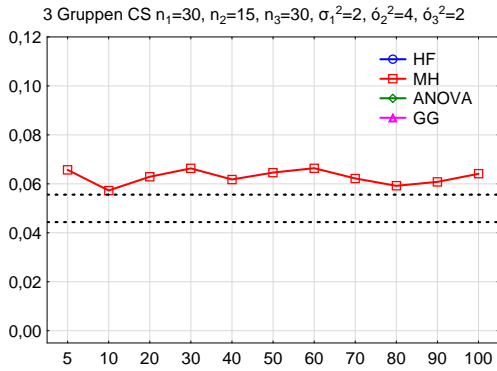


Abbildung 7: CS-Struktur mit $n_1 = n_3 = 30$, $n_2 = 15$ (links) bzw. $n_1 = n_3 = 15$, $n_2 = 30$ (rechts) Versuchsobjekten und ungleichen Varianzen $\sigma_1^2 = \sigma_3^2 = 2$, $\sigma_2^2 = 4$.

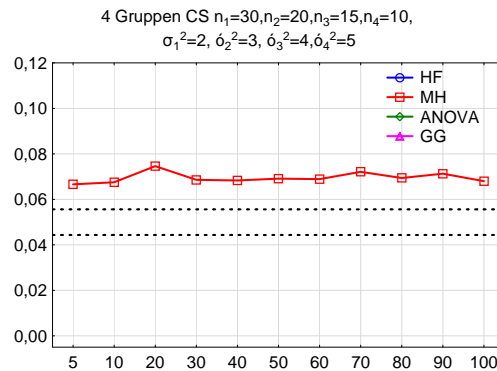
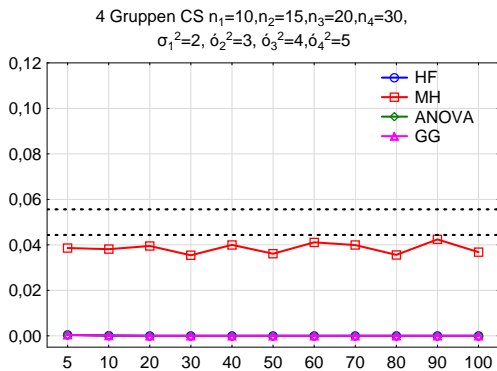


Abbildung 8: CS-Struktur mit $n_1 = 10$, $n_2 = 15$, $n_3 = 20$, $n_4 = 30$ (links) bzw. $n_1 = 30$, $n_2 = 20$, $n_3 = 15$, $n_4 = 10$ (rechts) Versuchsobjekten und ungleichen Varianzen $\sigma_1^2 = 2$, $\sigma_2^2 = 3$, $\sigma_3^2 = 4$, $\sigma_4^2 = 5$.

5.4 Powersimulationen

Die Power eines Tests gibt Aufschluss darüber, wie schnell Alternativen aufgedeckt werden. In diesem Kapitel werden zwei Möglichkeiten von Alternativen betrachtet.

1. Ein aufsteigender Trend in den Versuchswiederholungen einer Behandlungsgruppe, sog. Trend-Alternative,
2. eine Verschiebung in einer der d Messwiederholungen in einer Behandlungsgruppe, sog. Punkt-Alternative.

Um die Power zu überprüfen, werden $n_{sim} = 10.000$ zufällige Datensätze mit einer Verschiebung $\boldsymbol{\mu}_1 = \delta \left(\frac{1}{d}, \dots, 1\right)'$ bzw. $\boldsymbol{\mu}_1 = \delta (1, 0, \dots, 0)'$ in der ersten Behandlungsgruppe und $\boldsymbol{\mu}_i = \mathbf{0}$ sonst erzeugt. Analog zu den Niveausimulationen wird als Globalhypothese die Wechselwirkung von Behandlung und Zeit untersucht, die Kovarianzmatrizen sind in diesen Simulationen identisch und vom Typ einer Compound Symmetry, AR(0,2) oder AR(0,9).

In dem vorangehenden Kapitel wurde gezeigt, dass die Teststatistik das Niveau im Fall $\delta = 0$ gut einhält. Verändert man nun den Erwartungsvektor $\boldsymbol{\mu}_1$ durch ein immer größer werdendes δ , sollte die Teststatistik immer häufiger verworfen werden. Die relative Anzahl der verworfenen Hypothesen je Verschiebung δ wird in einer Simulationsgrafik aufgetragen und gibt Aufschluss darüber, wie schnell die so erzeugte Alternative sicher aufgedeckt wird (rel. Häufigkeit der verworfenen Hypothesen gleich 1). Die Power eines Testverfahrens ist dabei umso höher, je schneller eine solche Alternative aufgedeckt wird.

5.4.1 Trend-Alternativen

Die grafische Aufbereitung der Simulationsergebnisse unterscheidet sich etwas von den Niveausimulationen. Für $a = 2$ Behandlungsgruppen wird die Power für die Dimensionen $d=5, 20$ und 50 in einer Grafik aufgetragen. Für eine Compound Symmetry Struktur erkennt man in Abbildung 9, dass die Trend-Alternativen mit steigender Dimension d immer schneller aufgedeckt werden.

Um den Einfluss einer steigenden Anzahl an Behandlungsgruppen zu untersuchen, sind in Abbildung 9 außerdem die Trend-Alternativen für $d=5$ und eine steigende Anzahl an Gruppen im Falle einer Compound Symmetry-Struktur aufgetragen. Die Abbildung legt den Schluss nahe, dass sich die Power für eine steigende Anzahl an Behandlungsgruppen

nicht verändert. Die entsprechenden Grafiken für AR(0,2)- und AR(0,9)-Strukturen sind in den Abbildungen 10, 11 dargestellt und liefern dieselben Aussagen.

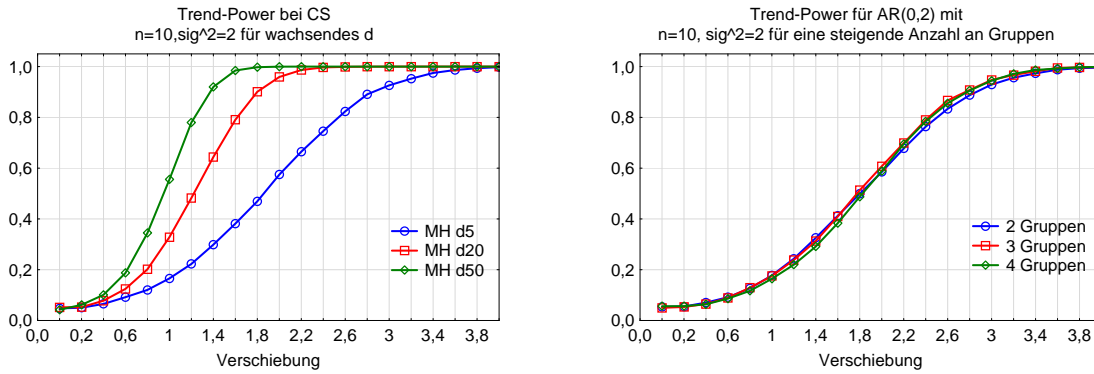


Abbildung 9: CS-Struktur: Trend-Alternativen für steigende Dimensionen (links) bzw. steigende Anzahl an Gruppen bei $d = 5$ Dimensionen.

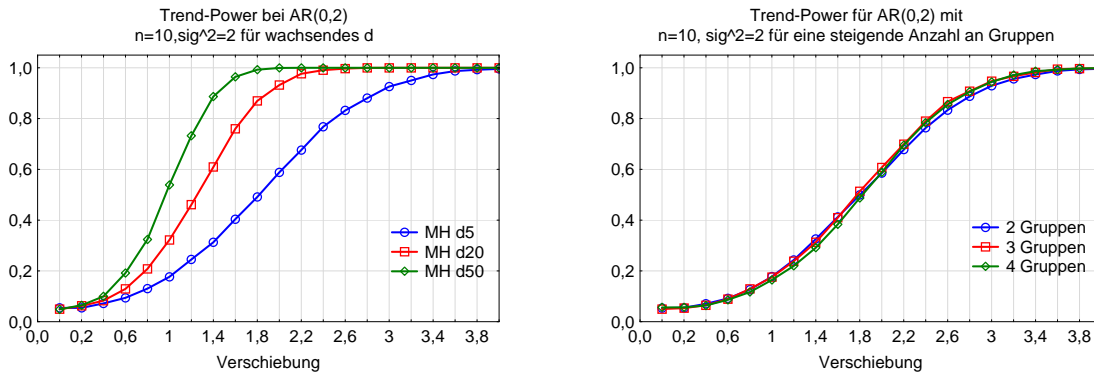


Abbildung 10: AR(0,2)-Struktur: Trend-Alternativen für steigende Dimensionen (links) bzw. steigende Anzahl an Gruppen bei $d = 5$ Dimensionen.

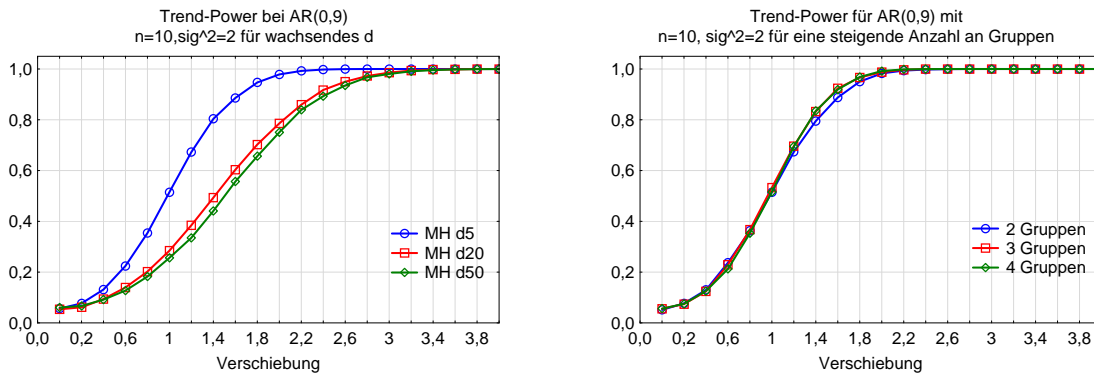


Abbildung 11: AR(0,9)-Struktur: Trend-Alternativen für steigende Dimensionen (links) bzw. steigende Anzahl an Gruppen bei $d = 5$ Dimensionen.

5.4.2 Ein-Punkt-Alternativen

Im Fall von Ein-Punkt-Alternativen dreht sich die Wirkung der Dimensionen auf die Power um. Mit steigender Anzahl an Messwiederholungen d sinkt die Power des Testverfahrens, was sich damit erklären lässt, dass es mit wachsendem d immer schwieriger wird, die Alternative aufzudecken. Denn je größer d , umso geringer ist der Einfluss der Verschiebung δ auf die Teststatistik und damit das Testergebnis. Die Simulationsergebnisse sind den den Grafiken 12 - 14 dargestellt.

Der Anstieg an Behandlungsgruppen hat keinen spürbaren Einfluss auf die Power. Es ist zu bemerken, dass die Struktur der Kovarianzmatrix einen starken Einfluss auf die Power ausübt.

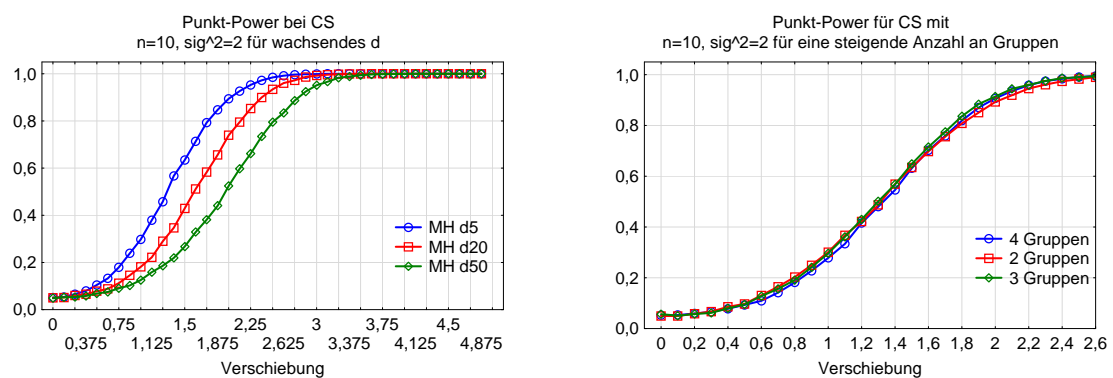


Abbildung 12: CS-Struktur: Ein-Punkt-Alternativen mit $n_i = 10$ Versuchsobjekten für steigende Dimensionen (links) bzw. steigende Anzahl an Gruppen bei $d = 5$ Dimensionen.

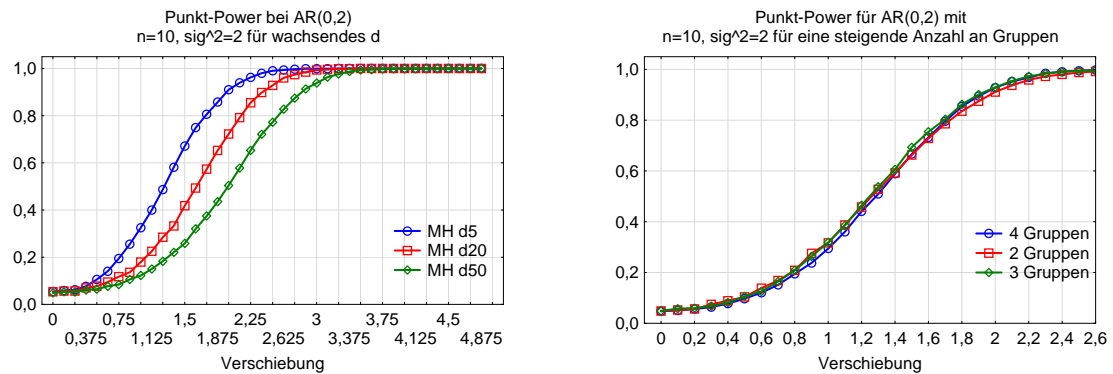


Abbildung 13: AR(0,2)-Struktur: Ein-Punkt-Alternativen mit $n_i = 10$ Versuchsobjekten für steigende Dimensionen (links) bzw. steigende Anzahl an Gruppen bei $d = 5$ Dimensionen.

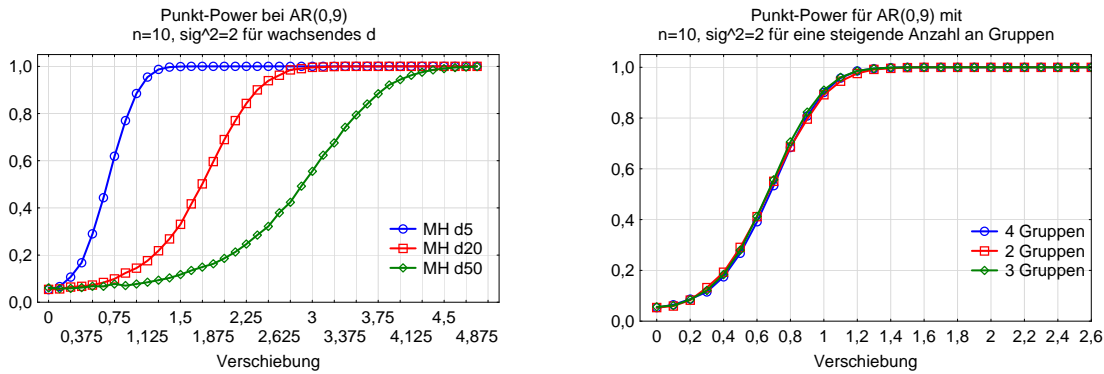


Abbildung 14: AR(0,9)-Struktur: Ein-Punkt-Alternativen mit $n_i = 10$ Versuchsobjekten für steigende Dimensionen (links) bzw. steigende Anzahl an Gruppen bei $d = 5$ Dimensionen.

5.5 Beispiel: Gewichtsentwicklung bei Wistar-Ratten II

Alle zuvor beschriebenen Testverfahren wurden verwendet, um das in Kapitel 1.4 vorgestellte Beispiel auszuwerten. Die grafische Analyse deutete auf Unterschiede sowohl zwischen den Gruppen, den Zeitpunkten und eine Wechselwirkung hin. Die aus den Teststatistiken resultierenden p-Werte sind in der Tabelle 6 dargestellt. Da die Schätzer keine ganzzahligen Werte für die Freiheitsgrade liefern, sind die aufgelisteten Werte zur nächsten natürlichen Zahl auf- bzw. abgerundet.

Tabelle 6: Auswertung des Beispieldatensatzes mit den Testverfahren Anova, Geisser-Greenhouse, Huynh-Feldt und dem neuen Testverfahren.

Effekt	Verfahren	Prüfgröße	Freiheitsgrade	p-Wert
Gruppe	Anova	7.978	2	1012
	GG	7.978	1	48
	HF	7.978	1	48
	Neu	10.589	1	37
Zeit	Anova	215.109	21	42
	GG	215.109	3	124
	HF	215.109	3	132
	Neu	274.691	1	127
Gruppe*Zeit	Anova	6.809	42	1012
	GG	6.809	5	124
	HF	6.809	5	132
	Neu	8.694	1	127

Als erste Beobachtung ist festzuhalten, dass mit jeder Teststatistik alle Globalhypothesen verworfen werden. Die Prüfgrößen der Teststatistik F_{MH} sind etwas größer, als die der anderen drei Verfahren, was darauf zurückzuführen ist, dass der Nenner der Teststatistik F_{MH} die Spur der Kovarianzmatrix je Behandlungsgruppe schätzt und der Gesamtausdruck insgesamt kleiner wird.

Eine weitere Aufschlüsselung und Untersuchung der Daten mittels Paarvergleichen könnte mit den aus der Varianzanalyse bekannten Adjustierungsverfahren nach Bonferroni, Scheffe oder Holm erfolgen, wird an dieser Stelle aber nicht betrachtet.

Das Ergebnis für den Anwender lautet, dass es signifikante Differenzen sowohl zwischen den Dosisstufen, den Zeitpunkten, als auch den Zeitprofilen der Dosisstufen gibt. Die Testsubstanz übt einen erheblichen Einfluss auf die Körpergewichtsentwicklung der Wistar-Ratten aus.

6 Zusammenfassung und Diskussion

In dieser Arbeit wurde ein approximatives Testverfahren vorgestellt, mit dem unbalancierte, hochdimensionale Split-Plot-Designs normalverteilter Daten für mehr als zwei Behandlungsgruppen mit ungleichen Kovarianzmatrizen ausgewertet werden können.

Das Testverfahren ist eine Verallgemeinerung der Arbeiten von Werner und Becker ([2, 23]). Der Ansatz zum Schätzen der Freiheitsgrade zeichnet sich dadurch aus, dass die Konsistenz der Schätzer unabhängig von der Anzahl der Messwiederholungen ist, was für andere Verfahren, die striktere Voraussetzungen fordern, bisher nicht gezeigt wurde.

In den Simulationsstudien konnte gezeigt werden, dass das Niveau für die vorgestellten Parameterkonstellationen, insbesondere im Falle sehr großer Dimensionen, gut eingehalten wird, wobei in dieser Arbeit nur das Niveau $\alpha = 5\%$ dargestellt ist. Für andere α -Level erhält man sehr ähnliche Resultate. Für stark unbalancierte Designs mit ungleichen Kovarianzmatrizen weist die Teststatistik je nach Konstellation der Parameter eine konservative oder liberale Tendenz auf, dennoch wird dieses Niveau konstant über wachsende Messwiederholungen aufrecht erhalten. Im Gegensatz dazu fallen die zum Vergleich herangezogenen Testverfahren in sich zusammen und liefern insbesondere im Fall großer Dimensionen sehr schlechte Simulationsergebnisse.

Für die Power wurden zwei Alternativen betrachtet, die unter der Wechselwirkungshypothese untersucht wurden. Liegt ein Trend über alle Messwiederholungen einer Behandlungsgruppe vor, wird dieser mit steigenden Messwiederholungen besser aufgedeckt. Ist die Alternative in einer Messwiederholung "versteckt", wird diese Alternative mit steigender Anzahl an Zeitpunkten immer schlechter entdeckt.

Eine interessante Erweiterung würde sich bei der Berücksichtigung unvollständiger Datensätze in Bezug auf die Messwiederholungen ergeben. Des Weiteren ist eine Verallgemeinerung auf nichtparametrische Rangstatistiken denkbar, wobei die Abhängigkeitsstruktur sinnvoll mittels Rangvergabe übersetzt werden muss.

Die Konstruktion von Konfidenzintervallen ist ebenfalls ein Aspekt, der in diesem Zusammenhang ausgearbeitet werden könnte. Die Annahme normalverteilter Daten stellt immer noch eine ziemlich restriktive Annahme dar. Die Übertragung der Ergebnisse auf eine breitere Klasse von Verteilungen wie in der Arbeit von Helms erscheint als erster Schritt in die Richtung nichtparametrischer Verfahren sinnvoll (vgl. [12]).

7 Anhang

7.1 Beweise

Korollar 7.1.1. *Es gilt:*

$$\begin{aligned} E(Q)^4 = & 48 \operatorname{Sp} [(\mathbf{A}\Sigma)^4] + 32 \operatorname{Sp} [(\mathbf{A}\Sigma)^3] \operatorname{Sp} [\mathbf{A}\Sigma] + 12 \operatorname{Sp}^2 [(\mathbf{A}\Sigma)]^2 \\ & + 12 \operatorname{Sp} [(\mathbf{A}\Sigma)^2] \operatorname{Sp}^2 [\mathbf{A}\Sigma] + \operatorname{Sp}^4 [\mathbf{A}\Sigma]. \end{aligned}$$

Beweis. Unter Benutzung der Formel für Momente von quadratischen Formen erhält man

$$\begin{aligned} E(Q^4) &= \sum_{a=0}^3 \binom{3}{a} g^{(3-a)} \sum_{b=0}^{a-1} \binom{a-1}{b} g^{(a-1-b)} \dots \\ &= \binom{3}{0} g^{(3)} + \binom{3}{1} g^{(2)} \left[\binom{0}{0} g^{(0)} \right] \\ &\quad + \binom{3}{2} g^{(1)} \left[\binom{1}{0} g^{(1)} + \binom{1}{1} g^{(0)} \left[\binom{0}{0} g^{(0)} \right] \right] \\ &\quad + \binom{3}{3} g^{(0)} \left[\binom{2}{0} g^{(2)} + \binom{2}{1} g^{(1)} \left[\binom{0}{0} g^{(0)} \right] \right] \\ &\quad + \binom{2}{2} g^{(0)} \left[\binom{1}{0} g^{(1)} + \binom{1}{1} g^{(0)} \left[\binom{0}{0} g^{(0)} \right] \right] \\ &= (g^{(3)}) + (3g^{(2)}g^{(0)}) + (3g^{(1)}[g^{(1)} + g^{(0)}g^{(0)}]) \\ &\quad + (g^{(0)}[g^{(2)} + 2g^{(1)}g^{(0)} + g^{(0)}[g^{(1)} + g^{(0)}g^{(0)}]]) . \end{aligned}$$

Für $\mu = \mathbf{0}$ gilt zusammen mit

$$\begin{aligned} g^{(0)} &= \operatorname{Sp} [\mathbf{A}\Sigma] , \\ g^{(1)} &= 2 \operatorname{Sp} [(\mathbf{A}\Sigma)^2] , \\ g^{(2)} &= 8 \operatorname{Sp} [(\mathbf{A}\Sigma)^3] , \\ g^{(3)} &= 48 \operatorname{Sp} [(\mathbf{A}\Sigma)^4] , \\ E(Q^4) &= 48 \operatorname{Sp} [(\mathbf{A}\Sigma)^4] + 32 \operatorname{Sp} [(\mathbf{A}\Sigma)^3] \operatorname{Sp} [\mathbf{A}\Sigma] + 12 \operatorname{Sp}^2 [(\mathbf{A}\Sigma)]^2 \\ &\quad + 12 \operatorname{Sp} [(\mathbf{A}\Sigma)^2] \operatorname{Sp}^2 [\mathbf{A}\Sigma] + \operatorname{Sp}^4 [\mathbf{A}\Sigma] . \end{aligned}$$

□

Lemma 7.1.2 (Spurzerlegung). *Sei $\mathbf{T} = (\mathbf{T}_W \otimes \mathbf{T}_S)$ ein Projektor mit $\mathbf{T}_W \in \mathbb{R}^{a \times a}$, $\mathbf{T}_S \in \mathbb{R}^{d \times d}$ und $\mathbf{V} = \bigoplus_{i=1}^a \Sigma_i / n_i$ mit $\Sigma_i \in \mathbb{R}^{d \times d}$ $i = 1, \dots, a$. Es bezeichne T_{ij} den (i, j) -ten Eintrag der Matrix \mathbf{T}_W und $n_1, \dots, n_a \in \mathbb{N} > 0$. Dann gilt*

$$\begin{aligned} \text{Sp}[\mathbf{TV}] &= \sum_{i=1}^a \frac{T_{ii}}{n_i} \text{Sp}[\mathbf{T}_S \Sigma_i], \\ \text{Sp}^2[\mathbf{TV}] &= \sum_{i=1}^a \sum_{i'=1}^a \frac{T_{ii} \cdot T_{i'i'}}{n_i \cdot n_{i'}} \text{Sp}[\mathbf{T}_S \Sigma_i] \text{Sp}[\mathbf{T}_S \Sigma_{i'}], \\ \text{Sp}[(\mathbf{TV})^2] &= \sum_{i=1}^a \sum_{k=1}^a \frac{T_{ki}}{n_i} \frac{T_{ik}}{n_k} \text{Sp}[\mathbf{T}_S \Sigma_i \mathbf{T}_S \Sigma_k]. \end{aligned}$$

Beweis.

$$\begin{aligned} & [\mathbf{T}_W \otimes \mathbf{T}_S] \bigoplus_{i=1}^a \frac{1}{n_i} \Sigma_i \\ &= \left[\left(\begin{pmatrix} T_{11} & & 0 \\ & \ddots & \\ 0 & & T_{aa} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & \dots & T_{1a} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ T_{a1} & \dots & 0 \end{pmatrix} \right) \otimes \mathbf{T}_S \right] \bigoplus_{i=1}^a \frac{1}{n_i} \Sigma_i \\ &= \left[\begin{pmatrix} T_{11} \mathbf{T}_S & & 0 \\ & \ddots & \\ 0 & & T_{aa} \mathbf{T}_S \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & \dots & T_{1a} \mathbf{T}_S \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ T_{a1} \mathbf{T}_S & \dots & 0 \end{pmatrix} \right] \begin{pmatrix} \frac{1}{n_1} \Sigma_1 & & 0 \\ & \ddots & \\ 0 & & \frac{1}{n_a} \Sigma_a \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \frac{T_{11}}{n_1} \mathbf{T}_S \Sigma_1 & & 0 \\ & \ddots & \\ 0 & & \frac{T_{aa}}{n_a} \mathbf{T}_S \Sigma_a \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & \dots & \frac{T_{1a}}{n_a} \mathbf{T}_S \Sigma_a \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{T_{a1}}{n_1} \mathbf{T}_S \Sigma_1 & \dots & 0 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

und damit gilt für die Spur

$$\text{Sp} \left[[\mathbf{T}_W \otimes \mathbf{T}_S] \bigoplus_{i=1}^a \frac{1}{n_i} \Sigma_i \right] = \sum_{i=1}^a \frac{T_{ii}}{n_i} \text{Sp}[\mathbf{T}_S \Sigma_i].$$

Für die zweite Gleichung folgt unmittelbar

$$\text{Sp}^2[\mathbf{TV}] = \sum_{i=1}^a \sum_{k=1}^a \frac{T_{ii} \cdot T_{kk}}{n_i \cdot n_k} \text{Sp}[\mathbf{T}_S \Sigma_i] \text{Sp}[\mathbf{T}_S \Sigma_k] 1$$

Die dritte Gleichung lässt sich analog zu Teil 1 durch ausmultiplizieren lösen:

$$\begin{aligned}
(\mathbf{TV})^2 &= (\mathbf{T}_W \otimes \mathbf{T}_S) \left(\bigoplus_{i=1}^a \frac{1}{n_i} \Sigma_i \right) (\mathbf{T}_W \otimes \mathbf{T}_S) \left(\bigoplus_{i=1}^a \frac{1}{n_i} \Sigma_i \right) \\
&= \left(\left[\begin{pmatrix} T_{11} \mathbf{T}_S & & 0 \\ & \ddots & \\ 0 & & T_{aa} \mathbf{T}_S \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & & T_{ij} \mathbf{T}_S \\ & \ddots & \\ T_{ij} \mathbf{T}_S & & 0 \end{pmatrix} \right] \left(\bigoplus_{i=1}^a \frac{1}{n_i} \Sigma_i \right) \right)^2 \\
&= \left[\begin{pmatrix} \frac{T_{11}}{n_1} \mathbf{T}_S \Sigma_1 & 0 & 0 \\ 0 & \ddots & 0 \\ 0 & 0 & \frac{T_{aa}}{n_a} \mathbf{T}_S \Sigma_a \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & & \frac{T_{ij}}{n_j} \mathbf{T}_S \Sigma_j \\ & \ddots & \\ \frac{T_{ij}}{n_j} \mathbf{T}_S \Sigma_j & & 0 \end{pmatrix} \right]^2 \\
&= \begin{pmatrix} \left(\frac{T_{11}}{n_1} \right)^2 \mathbf{T}_S \Sigma_1 \mathbf{T}_S \Sigma_1 & 0 & 0 \\ 0 & \ddots & 0 \\ 0 & 0 & \left(\frac{T_{aa}}{n_a} \right)^2 \mathbf{T}_S \Sigma_a \mathbf{T}_S \Sigma_a \end{pmatrix} \\
&\quad + \begin{pmatrix} 0 & \frac{T_{ii}}{n_i} \mathbf{T}_S \Sigma_i \frac{T_{ij}}{n_j} \mathbf{T}_S \Sigma_j \\ & \ddots & \\ \frac{T_{ii}}{n_i} \mathbf{T}_S \Sigma_i \frac{T_{ij}}{n_j} \Sigma_j & & 0 \end{pmatrix} \\
&\quad + \begin{pmatrix} 0 & \frac{T_{ij}}{n_j} \mathbf{T}_S \Sigma_j \frac{T_{ii}}{n_i} \mathbf{T}_S \Sigma_i \\ & \ddots & \\ \frac{T_{ij}}{n_j} \mathbf{T}_S \Sigma_j \frac{T_{ii}}{n_i} \mathbf{T}_S \Sigma_i & & 0 \end{pmatrix} \\
&\quad + \begin{pmatrix} \sum_{i=2}^a \frac{T_{1i}}{n_i} \mathbf{T}_S \Sigma_i \frac{T_{11}}{n_1} \mathbf{T}_S \Sigma_1 & \cdots & \sum_{i=2}^a \frac{T_{1i}}{n_i} \mathbf{T}_S \Sigma_i \frac{T_{(i-1)a}}{n_a} \mathbf{T}_S \Sigma_a \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \sum_{i=1}^{(a-1)} \frac{T_{ai}}{n_i} \mathbf{T}_S \Sigma_i \frac{T_{(i+1)1}}{n_1} \mathbf{T}_S \Sigma_1 & \cdots & \sum_{i=1}^{(a-1)} \frac{T_{1i}}{n_i} \mathbf{T}_S \Sigma_i \frac{T_{i1}}{n_a} \mathbf{T}_S \Sigma_a \end{pmatrix}.
\end{aligned}$$

Bildet man nun die Spur dieser Matrizen erhält man das Resultat. \square

Lemma 7.1.3. *Der Schätzer $\widehat{\text{Sp}}[\mathbf{TV}]$ aus (4.5) ist erwartungstreu für $\text{Sp}[\mathbf{TV}]$. Unter Bedingung (4.1) gilt: $N \cdot \widehat{\text{Sp}}[\mathbf{TV}]$ ist konsistent für $N \cdot \text{Sp}[\mathbf{TV}]$, in dem Sinne, dass*

$$\text{Var} \left(\frac{N \cdot \widehat{\text{Sp}}[\mathbf{TV}]}{N \cdot \text{Sp}[\mathbf{TV}]} \right) \xrightarrow{N \rightarrow \infty} 0.$$

Beweis. Die Erwartungstreue folgt aus dem Satz von Lancaster:

$$\begin{aligned} \mathbb{E} \left(\widehat{\text{Sp}}[\mathbf{TV}] \right) &= \mathbb{E} \left(\sum_{i=1}^a \frac{T_{ii}}{n_i} \frac{1}{n_i - 1} \mathbf{Z}_i' (\mathbf{P}_{n_i} \otimes \mathbf{I}_d) \mathbf{Z}_i \right) \\ &= \sum_{i=1}^a \frac{T_{ii}}{n_i(n_i - 1)} \mathbb{E} (\mathbf{Z}_i' (\mathbf{P}_{n_i} \otimes \mathbf{I}_d) \mathbf{Z}_i) \\ &= \sum_{i=1}^a \frac{T_{ii}}{n_i(n_i - 1)} \text{Sp} [(\mathbf{P}_a \otimes \mathbf{I}_d) \cdot (\mathbf{I}_{n_i} \otimes \mathbf{T}_S \boldsymbol{\Sigma}_i \mathbf{T}_S)] \\ &\quad + \sum_{i=1}^a \frac{T_{ii}}{n_i(n_i - 1)} (\mathbf{1}_{n_i} \otimes \boldsymbol{\mu}_i)' (\mathbf{P}_{n_i} \otimes \mathbf{I}_{n_i}) (\mathbf{1}_{n_i} \otimes \boldsymbol{\mu}_i). \end{aligned}$$

Mit $\mathbf{P}_{n_i} \mathbf{1}_{n_i} = \mathbf{0}$ und $\text{Sp}[\mathbf{P}_{n_i}] = (n_i - 1)$, $i = 1, \dots, a$ vereinfacht sich der Ausdruck zu

$$\begin{aligned} \mathbb{E} \left(\widehat{\text{Sp}}[\mathbf{TV}] \right) &= \sum_{i=1}^a \frac{T_{ii}}{n_i(n_i - 1)} \text{Sp} [\mathbf{P}_{n_i} \otimes \mathbf{T}_S \boldsymbol{\Sigma}_i \mathbf{T}_S] \\ &= \sum_{i=1}^a \frac{T_{ii}}{n_i} \text{Sp} [\mathbf{T}_S \boldsymbol{\Sigma}_i] = \text{Sp}[\mathbf{TV}]. \end{aligned}$$

Für den Nachweis der Konsistenz wird die Aussage $\text{Var} \left(\frac{N \cdot \widehat{\text{Sp}}[\mathbf{TV}]}{N \cdot \text{Sp}[\mathbf{TV}]} \right) \rightarrow 0$, $N \rightarrow \infty$ gezeigt. Zusätzlich wird die Bedingung (4.1) an die Stichprobenumfänge gestellt. Dann gilt

$$\begin{aligned} \text{Var} \left(N \cdot \widehat{\text{Sp}}[\mathbf{TV}] \right) &= N^2 \cdot \sum_{i=1}^a \left(\frac{T_{ii}}{n_i(n_i - 1)} \right)^2 \text{Var} (\mathbf{Z}_i' (\mathbf{P}_{n_i} \otimes \mathbf{I}_d) \mathbf{Z}_i) \\ &= N^2 \cdot \sum_{i=1}^a \left(\frac{T_{ii}}{n_i(n_i - 1)} \right)^2 2 \text{Sp} [(\mathbf{P}_{n_i} \otimes \mathbf{T}_S \boldsymbol{\Sigma}_i \mathbf{T}_S)^2] \\ &\quad + N^2 \cdot \sum_{i=1}^a \left(\frac{T_{ii}}{n_i(n_i - 1)} \right)^2 4 (\mathbf{1}_{n_i} \otimes \boldsymbol{\mu}_i)' (\mathbf{P}_{n_i} \otimes \mathbf{T}_S \boldsymbol{\Sigma}_i \mathbf{T}_S) (\mathbf{1}_{n_i} \otimes \boldsymbol{\mu}_i). \end{aligned}$$

Der letzte Term verschwindet erneut, da $\mathbf{P}_{n_i} \mathbf{1}_{n_i} = \mathbf{0}$, $i = 1, \dots, a$, also

$$\text{Var} \left(N \cdot \text{Sp} [\widehat{\mathbf{TV}}] \right) = \sum_{i=1}^a \left(\frac{N \cdot T_{ii}}{n_i} \right)^2 \frac{2}{n_i - 1} \text{Sp} [\mathbf{T}_S \boldsymbol{\Sigma}_i \mathbf{T}_S \boldsymbol{\Sigma}_i].$$

Da die $\boldsymbol{\Sigma}_i$ nach Voraussetzung positiv definit sind, gilt für den Ausdruck $\text{Sp} [\mathbf{TV}]$

$$0 < \frac{T_{ii}}{n_i} \text{Sp} [\mathbf{T}_S \boldsymbol{\Sigma}_i] \leq \sum_{i=1}^a \frac{T_{ii}}{n_i} \text{Sp} [\mathbf{T}_S \boldsymbol{\Sigma}_i] \forall i = 1 \dots, a.$$

Daher gelten für die Varianz des Quotienten aus Schätzer und wahren Parameter zusammen mit der Spurgleichung 3.1.6 die folgenden Abschätzungen.

$$\begin{aligned} \text{Var} \left(\frac{N \cdot \text{Sp} [\widehat{\mathbf{TV}}]}{N \cdot \text{Sp} [\mathbf{TV}]} \right) &= \sum_{i=1}^a \left(\frac{T_{ii}}{n_i} \right)^2 \frac{2}{n_i - 1} \cdot \frac{\text{Sp} [(\mathbf{T}_S \boldsymbol{\Sigma}_i)^2]}{\text{Sp}^2 [\mathbf{TV}]} \\ &\leq \sum_{i=1}^a \frac{2}{n_i - 1} \cdot \underbrace{\frac{\text{Sp} [(\mathbf{T}_S \boldsymbol{\Sigma}_i)^2]}{\text{Sp}^2 [\mathbf{T}_S \boldsymbol{\Sigma}_i]}}_{\leq 1} \xrightarrow{N \rightarrow \infty} 0. \end{aligned}$$

□

Satz 7.1.4 (Dimensionsstabilität der Spurschätzer). *Die Schätzer $\widehat{\text{Sp}^2 [\mathbf{TV}]}$ und $\widehat{\text{Sp} [(\mathbf{TV})^2]}$ sind unter Gültigkeit von (4.1) dimensionsstabil im Sinne der Definition 4.3.2.*

Beweis. Es genügt zu zeigen, dass die Varianzen der Schätzer, unabhängig von d , gegen 0 konvergieren, also

$$\begin{aligned} \text{Var} \left(\frac{\widehat{\text{Sp}^2 [\mathbf{TV}]} }{\widehat{\text{Sp}^2 [\mathbf{TV}]} } \right) &\xrightarrow{N \rightarrow \infty} 0 \text{ gleichmäßig in } d, \\ \text{Var} \left(\frac{\widehat{\text{Sp} [(\mathbf{TV})^2]} }{\widehat{\text{Sp} [(\mathbf{TV})^2]} } \right) &\xrightarrow{N \rightarrow \infty} 0 \text{ gleichmäßig in } d. \end{aligned}$$

Bezeichne

$$\begin{aligned} v_i &= \frac{n_i(n_i - 1)(n_i - 2)(n_i - 3) - (n_i - 4)(n_i - 5)(n_i - 6)(n_i - 7)}{n_i(n_i - 1)(n_i - 2)(n_i - 3)}, \\ w_{ii'} &= \frac{n_i(n_i - 1)n_{i'}(n_{i'} - 1) - (n_i - 2)(n_i - 3)(n_{i'} - 2)(n_{i'} - 3)}{n_i(n_i - 1)n_{i'}(n_{i'} - 1)}. \end{aligned}$$

Man kann direkt erkennen, dass $v_i \xrightarrow{n_i \rightarrow \infty} 0$ und $w_{ii'} \xrightarrow{n_i, n_{i'} \rightarrow \infty} 0$ $i, i' = 1, \dots, a$. Genauer

sind v_i und $w_{ii'}$ monoton fallenden Nullfolgen, für $n_i \geq 4$.

Dann lassen sich die Varianzen der Spurschätzer folgendermaßen nach oben abschätzen

$$\begin{aligned} \text{Var} \left(\widehat{\text{Sp}^2[\mathbf{T}\mathbf{V}]} \right) &= \text{Var}(A1) + \text{Var}(B1) + 2 \text{Cov}(A1, B1) \text{ mit} \\ A1 &= \sum_{i=1}^a \frac{(T_{ii})^2}{(n_i)^2} \cdot \frac{1}{4n_i(n_i-1)(n_i-2)(n_i-3)} \sum_{m \neq j \neq k \neq \ell}^{n_i} A_{jk,jk}^i A_{\ell m,\ell m}^i, \\ B1 &= \sum_{i=1}^a \sum_{i' \neq i} \frac{T_{ii} T_{i'i'}}{n_i n_{i'}} \cdot \frac{1}{4n_i(n_i-1)n_{i'}(n_{i'}-1)} \sum_{j \neq k}^{n_i} \sum_{\ell \neq m}^{n_{i'}} A_{jk,jk}^i A_{\ell m,\ell m}^{i'}. \end{aligned}$$

Für den Term $A1$ gilt

$$\text{Var}(A1) = \sum_{i=1}^a \left(\frac{T_{ii}}{n_i} \right)^4 \frac{\sum_{j \neq k \neq \ell \neq m} \sum_{j' \neq k' \neq \ell' \neq m'} \text{Cov} \left(A_{jk,jk}^i \cdot A_{\ell m,\ell m}^i, A_{j'k',j'k'}^i \cdot A_{\ell'm',\ell'm'}^i \right)}{(4n_i(n_i-1)(n_i-2)(n_i-3))^2}.$$

Von den $n_i(n_i-1)(n_i-2)(n_i-3)$ Summanden in der i -ten Behandlungsgruppe, ist die Kovarianz gleich 0, wenn alle Indizes $j, k, \ell, m, j', k', \ell', m'$ voneinander verschieden sind. Es verbleiben $n_i(n_i-1)(n_i-2)(n_i-3) - (n_i-4)(n_i-5)(n_i-6)(n_i-7)$ Summanden ungleich 0, deren Kovarianz identisch ist, also

$$\text{Var}(A1) = \sum_{i=1}^a \left(\frac{T_{ii}}{n_i} \right)^4 \frac{v_i}{16} \text{Cov} \left(A_{12,12}^i \cdot A_{34,34}^i, A_{56,56}^i \cdot A_{78,78}^i \right).$$

Mit der Cauchy-Schwarz-Ungleichung $E(XY) \leq E(X^2)$ gelangt man zu der Abschätzung

$$\text{Var}(A1) \leq \sum_{i=1}^a \left(\frac{T_{ii}}{n_i} \right)^4 \frac{v_i}{16} \text{Var} \left(A_{12,12}^i \cdot A_{34,34}^i \right) \stackrel{\text{Satz 4.3.3}}{=} \sum_{i=1}^a \left(\frac{T_{ii}}{n_i} \right)^4 4v_i \text{Sp}^2 [(\mathbf{T}_S \boldsymbol{\Sigma}_i)^2].$$

Die Spurungleichung liefert schließlich

$$\text{Var}(A1) \leq \sum_{i=1}^a \left(\frac{T_{ii}}{n_i} \right)^4 4v_i \text{Sp}^4 [\mathbf{T}_S \boldsymbol{\Sigma}_i].$$

Für den zweiten Summanden $B1$ gilt

$$\text{Var}(B1) = \sum_{i \neq i'} \left(\frac{T_{ii} T_{i'i'}}{n_i n_{i'}} \right)^2 \frac{\sum_{j \neq k}^{n_i} \sum_{\ell \neq m}^{n_{i'}} \sum_{j' \neq k'}^{n_i} \sum_{\ell' \neq m'}^{n_{i'}} \text{Cov} \left(A_{jk,jk}^i \cdot A_{\ell m,\ell m}^{i'}, A_{j'k',j'k'}^{i'} \cdot A_{\ell'm',\ell'm'}^{i'} \right)}{(4n_i(n_i-1)n_{i'}(n_{i'}-1))^2}.$$

Analog zu A1 verschwinden alle Terme, in denen alle Indizes $j, k, \ell, m, j', k', \ell', m'$ voneinander verschieden sind.

$$\text{Var}(B1) = \sum_{i \neq i'} \left(\frac{T_{ii} T_{i'i'}}{n_i n_{i'}} \right)^2 \frac{w_{ii'}}{16} \text{Cov} \left(A_{12,12}^i \cdot A_{12,12}^{i'}, A_{34,34}^i \cdot A_{34,34}^{i'} \right).$$

Mit der Cauchy-Schwarz-Ungleichung $E(XY) \leq E(X^2)$, Satz 4.3.3 und der Spurungleichung gelangt man zu der Abschätzung

$$\begin{aligned} \text{Var}(B1) &\leq \sum_{i \neq i'} \left(\frac{T_{ii} T_{i'i'}}{n_i n_{i'}} \right)^2 \frac{w_{ii'}}{16} \text{Var} \left(A_{12,12}^i \cdot A_{12,12}^{i'} \right) \\ &= \sum_{i \neq i'} \left(\frac{T_{ii} T_{i'i'}}{n_i n_{i'}} \right)^2 4w_{ii'} \text{Sp} \left[(\mathbf{T}_S \mathbf{\Sigma}_i)^2 \right] \text{Sp} \left[(\mathbf{T}_S \mathbf{\Sigma}_{i'})^2 \right] \\ &\leq \sum_{i \neq i'} \left(\frac{T_{ii} T_{i'i'}}{n_i n_{i'}} \right)^2 4w_{ii'} \text{Sp}^2 [\mathbf{T}_S \mathbf{\Sigma}_i] \text{Sp}^2 [\mathbf{T}_S \mathbf{\Sigma}_{i'}]. \end{aligned}$$

Es gilt dann für den gesamten Schätzer $\widehat{\text{Sp}^2[\mathbf{TV}]}$

$$\text{Var} \left(\frac{\widehat{\text{Sp}^2[\mathbf{TV}]}}{\widehat{\text{Sp}^2[\mathbf{TV}]}} \right) = \frac{\text{Var}(A1)}{\text{Sp}^4[\mathbf{TV}]} + \frac{\text{Var}(B1)}{\text{Sp}^4[\mathbf{TV}]} + \frac{2 \text{Cov}(A1, B1)}{\text{Sp}^4[\mathbf{TV}]}.$$

Die einzelnen Terme lassen sich wie folgt abschätzen

$$\frac{\text{Var}(A1)}{\text{Sp}^4[\mathbf{TV}]} \leq \sum_{i=1}^a \left(\frac{T_{ii}}{n_i} \right)^4 4v_i \frac{\text{Sp}^4[\mathbf{T}_S \mathbf{\Sigma}_i]}{\text{Sp}^4[\mathbf{TV}]} \leq \sum_{i=1}^a 4v_i,$$

$$\text{da } 0 < \left(\frac{T_{ii}}{n_i} \right)^4 \text{Sp}^4[\mathbf{T}_S \mathbf{\Sigma}_i] \leq \text{Sp}^4[\mathbf{TV}] \quad \forall i = 1, \dots, a.$$

Für den zweiten Ausdruck erhält man mit derselben Vorgehensweise

$$\frac{\text{Var}(B1)}{\text{Sp}^4[\mathbf{TV}]} \leq \sum_{i \neq i'} \left(\frac{T_{ii} T_{i'i'}}{n_i n_{i'}} \right)^2 4w_{ii'} \frac{\text{Sp}^2[\mathbf{T}_S \mathbf{\Sigma}_i] \text{Sp}^2[\mathbf{T}_S \mathbf{\Sigma}_{i'}]}{\text{Sp}^4[\mathbf{TV}]} \leq \sum_{i \neq i'} 4w_{ii'}.$$

Zusammen mit der Ungleichung $\text{Cov}(X, Y) \leq \sqrt{\text{Var}(X)}\sqrt{\text{Var}(Y)}$ gilt schließlich

$$\begin{aligned} \text{Var} \left(\widehat{\frac{\text{Sp}^2[\mathbf{T}\mathbf{V}]}{\text{Sp}^2[\mathbf{T}\mathbf{V}]}} \right) &\leq \sum_{i=1}^a 4v_i + \sum_{i \neq i'} 4w_{ii'} + 2 \sqrt{4 \sum_{i=1}^a v_i} \sqrt{4 \sum_{i \neq i'} w_{ii'}} \\ &\leq 12 \cdot \max \left(\sum_{i=1}^a v_i, \sum_{i \neq i'} w_{ii'} \right) \xrightarrow{N \rightarrow \infty} 0. \end{aligned}$$

Für die Varianz des Spurschätzers für $\text{Sp}[(\mathbf{T}\mathbf{V})^2]$ wendet man dieselben Schritte an.

$\text{Var} \left(\text{Sp}[\widehat{(\mathbf{T}\mathbf{V})^2}] \right) = \text{Var}(A2) + \text{Var}(B2) + 2 \text{Cov}(A2, B2)$ mit

$$\begin{aligned} A2 &= \sum_{i=1}^a \frac{(T_{ii})^2}{(n_i)^2} \cdot \frac{1}{4n_i(n_i-1)(n_i-2)(n_i-3)} \sum_{j \neq k \neq \ell \neq m} (A_{jk,\ell m}^i)^2, \\ B2 &= \sum_{i=1}^a \sum_{i' \neq i} \frac{T_{ii'} T_{i'i}}{n_i n_{i'}} \cdot \frac{1}{4n_i(n_i-1)n_{i'}(n_{i'}-1)} \sum_{j \neq k} \sum_{\ell \neq m}^{n_i} (A_{jk,\ell m}^{i,i'})^2. \end{aligned}$$

Für den Ausdruck A2 gilt

$$\text{Var}(A2) = \sum_{i=1}^a \left(\frac{T_{ii}}{n_i} \right)^4 \frac{\sum_{j \neq k \neq \ell \neq m} \sum_{j' \neq k' \neq \ell' \neq m'} \text{Cov} \left((A_{jk,\ell m}^i)^2, (A_{j'k',\ell'm'}^i)^2 \right)}{(4n_i(n_i-1)(n_i-2)(n_i-3))^2}.$$

Analog zu A1 verbleiben nur die Kovarianzterme mit mindestens einem gleichen Index $j, k, \ell, m, j', k', \ell', m'$, die alle identisch sind.

$$\text{Var}(A2) = \sum_{i=1}^a \left(\frac{T_{ii}}{n_i} \right)^4 \frac{v_i}{16} \text{Cov} \left((A_{12,34}^i)^2, (A_{56,78}^i)^2 \right)$$

Mit der Cauchy-Schwarz-Ungleichung $\text{E}(XY) \leq \text{E}(X^2)$ gelangt man zu der Abschätzung

$$\text{Var}(A2) \leq \sum_{i=1}^a \left(\frac{T_{ii}}{n_i} \right)^4 \frac{v_i}{16} \text{Var} \left((A_{12,34}^i)^2 \right).$$

Satz 4.3.3 und die Spurgleichung liefern für die Varianz des Spurschätzers

$$\begin{aligned} \text{Var} \left((A_{12,34}^i)^2 \right) &= 96 \text{Sp}[(\mathbf{T}_S \mathbf{\Sigma}_i)^4] + 32 \text{Sp}^2[(\mathbf{T}_S \mathbf{\Sigma}_i)^2] \\ &\leq 128 \text{Sp}^2[(\mathbf{T}_S \mathbf{\Sigma}_i)^2]. \end{aligned}$$

Als obere Grenze für die Varianz von $A2$ erhält man demnach

$$\text{Var}(A2) \leq \sum_{i=1}^a \left(\frac{T_{ii}}{n_i} \right)^4 8v_i \text{Sp}^2 [(\mathbf{T}_S \mathbf{\Sigma}_i)^2].$$

Für den Term $B2$ gilt analog

$$\begin{aligned} \text{Var}(B2) &= \sum_{i \neq i'} \left(\frac{T_{ii'} T_{i'i}}{n_i n_{i'}} \right)^2 \cdot \frac{\sum_{j \neq k}^{n_i} \sum_{\ell \neq m}^{n_{i'}} \sum_{j' \neq k'}^{n_i} \sum_{\ell' \neq m'}^{n_{i'}} \text{Cov} \left(\left(A_{jk, \ell m}^{i, i'} \right)^2, \left(A_{j'k', \ell' m'}^{i, i'} \right)^2 \right)}{(4n_i(n_i - 1)n_{i'}(n_{i'} - 1))^2} \\ &= \sum_{i \neq i'} \left(\frac{T_{ii'} T_{i'i}}{n_i n_{i'}} \right)^2 \frac{w_{ii'}}{16} \text{Cov} \left(\left(A_{12, 12}^{i, i'} \right)^2, \left(A_{34, 34}^{i, i'} \right)^2 \right). \end{aligned}$$

Mit der Cauchy-Schwarz-Ungleichung $E(XY) \leq E(X^2)$ gelangt man zu der Abschätzung

$$\text{Var}(B2) \leq \sum_{i \neq i'} \left(\frac{T_{ii'} T_{i'i}}{n_i n_{i'}} \right)^2 \frac{w_{ii'}}{16} \text{Var} \left(\left(A_{12, 12}^{i, i'} \right)^2 \right).$$

Satz 4.3.3 und die Spurungleichung liefern für die Varianz des Spurschätzers

$$\text{Var} \left(\left(A_{12, 12}^{i, i'} \right)^2 \right) \leq 128 \text{Sp}^2 [\mathbf{T}_S \mathbf{\Sigma}_i \mathbf{T}_S \mathbf{\Sigma}_{i'}].$$

Man erhält schließlich für die Varianz von $B2$

$$\text{Var}(B2) \leq \sum_{i \neq i'} \left(\frac{T_{ii'} T_{i'i}}{n_i n_{i'}} \right)^2 8w_{ii'} \text{Sp}^2 [\mathbf{T}_S \mathbf{\Sigma}_i \mathbf{T}_S \mathbf{\Sigma}_{i'}].$$

Insgesamt lässt sich die Varianz des Schätzers $\widehat{\text{Sp}[(\mathbf{T}\mathbf{V})^2]}$ wie folgt abschätzen

$$\text{Var} \left(\frac{\widehat{\text{Sp}[(\mathbf{T}\mathbf{V})^2]}}{\widehat{\text{Sp}[(\mathbf{T}\mathbf{V})^2]}} \right) = \frac{\text{Var}(A2)}{\text{Sp}^2 [(\mathbf{T}\mathbf{V})^2]} + \frac{\text{Var}(B2)}{\text{Sp}^2 [(\mathbf{T}\mathbf{V})^2]} + \frac{2 \text{Cov}(A2, B2)}{\text{Sp}^2 [(\mathbf{T}\mathbf{V})^2]}.$$

Für die drei Summanden ergibt sich

$$\frac{A2}{\widehat{\text{Sp}[(\mathbf{T}\mathbf{V})^2]}} \leq \sum_{i=1}^a \left(\frac{T_{ii}}{n_i} \right)^4 8v_i \frac{\text{Sp}^2 [(\mathbf{T}_S \mathbf{\Sigma}_i)^2]}{\widehat{\text{Sp}[(\mathbf{T}\mathbf{V})^2]}} \leq \sum_{i=1}^a 8v_i,$$

da $0 < \sum_{i=1}^a \left(\frac{T_{ii}}{n_i}\right)^4 \text{Sp}^2[(\mathbf{T}_S \boldsymbol{\Sigma}_i)^2] \leq \text{Sp}^2[(\mathbf{TV})^2] \forall i = 1, \dots, a$.

Für den zweiten Term gilt die Abschätzung

$$\frac{\text{Var}(B2)}{\text{Sp}^2[(\mathbf{TV})^2]} \leq \sum_{i \neq i'} \left(\frac{T_{ii'} T_{i'i}}{n_i n_{i'}}\right)^2 8w_{ii'} \frac{\text{Sp}^2[\mathbf{T}_S \boldsymbol{\Sigma}_i \mathbf{T}_S \boldsymbol{\Sigma}_{i'}]}{\text{Sp}^2[(\mathbf{TV})^2]} \leq \sum_{i \neq i'} 8w_{ii'}.$$

Als obere Schranke für den Quotienten erhält man daher

$$\begin{aligned} \text{Var} \left(\frac{\text{Sp}[\widehat{(\mathbf{TV})^2}]}{\text{Sp}[(\mathbf{TV})^2]} \right) &\leq \sum_{i=1}^a 8v_i + \sum_{i \neq i'} 8w_{ii'} + 2 \sqrt{\sum_{i=1}^a 8v_i} \sqrt{\sum_{i \neq i'} 8w_{ii'}} \\ &\leq 24 \cdot \max \left(\sum_{i=1}^a v_i, \sum_{i \neq i'} w_{ii'} \right) \xrightarrow{N \rightarrow \infty} 0. \end{aligned}$$

Da die Ausdrücke $v_i, w_{ii'}$ unabhängig von d sind und gegen 0 konvergieren $i, i' = 1, \dots, a$, ist damit die Dimensionsstabilität der Schätzer gezeigt. \square

Korollar 7.1.5. *Der Schätzer $\text{Sp}[\widetilde{(\mathbf{TV})^2}]$ ist dimensionsstabil.*

Beweis. Der Beweis lässt sich mit der Vorgehensweise aus Satz 7.1.4 führen. Die Erwartungstreue folgt mit dem Satz von Lancaster und lässt sich leicht mit den Ergebnissen aus Korollar 4.3.4 leicht nachvollziehen. Die Abschätzung der Varianz folgt aus den folgenden Überlegungen. Es bezeichne $\widetilde{A1} = \frac{\text{Sp}[(\mathbf{TV})^2]}{\sum_{i=1}^a \left(\frac{T_{ii}}{n_i}\right)^2 \frac{1}{n_i-1} \text{Sp}[(\mathbf{T}_S \boldsymbol{\Sigma}_i)^2]}$. Dann gilt

$$\begin{aligned} \text{Var}(\widetilde{A1}) &= \text{Var} \left(\sum_{i=1}^a \left(\frac{T_{ii}}{n_i}\right)^2 \frac{1}{4n_i(n_i-1)^2(n_i-2)(n_i-3)} \frac{\sum_{j \neq k \neq \ell \neq m} (A_{jk,\ell m}^i)^2}{\sum_{i=1}^a \left(\frac{T_{ii}}{n_i}\right)^2 \frac{1}{n_i-1} \text{Sp}[(\mathbf{T}_S \boldsymbol{\Sigma}_i)^2]} \right) \\ &\leq \sum_{i=1}^a \left(\frac{T_{ii}}{n_i}\right)^4 \frac{8v_i}{(n_i-1)^2} \frac{\text{Sp}^2[(\mathbf{T}_S \boldsymbol{\Sigma}_i)^2]}{\left(\sum_{i=1}^a \left(\frac{T_{ii}}{n_i}\right)^2 \frac{1}{n_i-1} \text{Sp}[(\mathbf{T}_S \boldsymbol{\Sigma}_i)^2] \right)^2}. \end{aligned}$$

Dabei ist v_i derselbe Term, der im Beweis zu Satz 4.3.5 verwendet wurde, also

$$v_i = \frac{n_i(n_i-1)(n_i-2)(n_i-3) - (n_i-4)(n_i-5)(n_i-6)(n_i-7)}{n_i(n_i-1)(n_i-2)(n_i-3)}.$$

Aufgrund der Annahme, dass Σ_i positiv definit gilt

$$0 < \left(\frac{T_{ii}}{n_i} \right)^4 \frac{\text{Sp}^2 [(\mathbf{T}_S \Sigma_i)^2]}{(n_i - 1)^2} \leq \left(\sum_{i=1}^a \left(\frac{T_{ii}}{n_i} \right)^2 \frac{1}{n_i - 1} \text{Sp} [(\mathbf{T}_S \Sigma_i)^2] \right)^2, \forall i = 1, \dots, a,$$

und man gelangt schließlich zu der Abschätzung

$$\text{Var} \left(\tilde{A1} \right) \leq \sum_{i=1}^a 8v_i \xrightarrow{N \rightarrow \infty} 0.$$

□

Satz 7.1.6 (Eigenschaften der Freiheitsgradschätzer). *Die Freiheitsgradschätzer \hat{f} und \hat{f}_0 sind approximativ dimensionsstabil.*

Beweis. Für die Erwartungswerte und Varianzen der Freiheitsgradschätzer soll eine Taylorentwicklung als Approximation benutzt werden (vgl. [21], S. 175). Für den Erwartungswert und die Varianz eines Quotienten von Zufallsvariablen X und Y gilt demnach approximativ

$$\begin{aligned} \mathbb{E} \left(\frac{X}{Y} \right) &\approx \frac{\mathbb{E}(X)}{\mathbb{E}(Y)} \left(1 + \frac{\text{Var}(Y)}{\mathbb{E}^2(Y)} - \frac{\text{Cov}(X, Y)}{\mathbb{E}(X) \mathbb{E}(Y)} \right), \\ \text{Var} \left(\frac{X}{Y} \right) &\approx \frac{\mathbb{E}^2(X)}{\mathbb{E}^2(Y)} \left(\frac{\text{Var}(X)}{\mathbb{E}^2(X)} + \frac{\text{Var}(Y)}{\mathbb{E}^2(Y)} - 2 \frac{\text{Cov}(X; Y)}{\mathbb{E}(X) \mathbb{E}(Y)} \right). \end{aligned}$$

Für den Erwartungswert des Schätzers \hat{f} gilt approximativ:

$$\mathbb{E}(\hat{f}) \approx f \left(1 + \frac{\text{Var} \left(\widehat{\text{Sp}[(\mathbf{T}\mathbf{V})^2]} \right)}{\text{Sp}^2[(\mathbf{T}\mathbf{V})^2]} - \frac{\text{Cov} \left(\widehat{\text{Sp}^2[\mathbf{T}\mathbf{V}]}, \widehat{\text{Sp}[(\mathbf{T}\mathbf{V})^2]} \right)}{\text{Sp}^2[\mathbf{T}\mathbf{V}] \cdot \text{Sp}[(\mathbf{T}\mathbf{V})^2]} \right).$$

Dass die Verzerrung des Schätzers mit wachsendem N verschwindet, sieht man anhand der folgenden Abschätzungen. Verwendet man die Ergebnisse aus Satz 4.3.5 erhält man

$$\frac{\text{Var} \left(\widehat{\text{Sp}[(\mathbf{T}\mathbf{V})^2]} \right)}{\text{Sp}^2[(\mathbf{T}\mathbf{V})^2]} \leq 24 \max \left(\sum_{i=1}^a v_i, \sum_{i \neq i'} w_{ii'} \right) \xrightarrow{N \rightarrow \infty} 0$$

sowie

$$\begin{aligned} \frac{\text{Cov}\left(\widehat{\text{Sp}^2[\mathbf{TV}]}, \widehat{\text{Sp}[(\mathbf{TV})^2]}\right)}{\text{Sp}^2[\mathbf{TV}] \cdot \text{Sp}[(\mathbf{TV})^2]} &\leq \sqrt{\frac{\text{Var}\left(\widehat{\text{Sp}^2[\mathbf{TV}]}\right)}{\text{Sp}^4[\mathbf{TV}]}} \sqrt{\frac{\text{Var}\left(\widehat{\text{Sp}[(\mathbf{TV})^2]}\right)}{\text{Sp}^2[(\mathbf{TV})^2]}} \\ &\leq 24 \max\left(\sum_{i=1}^a v_i, \sum_{i \neq i'} w_{ii'}\right) \xrightarrow{N \rightarrow \infty} 0. \end{aligned}$$

Die Varianz des Schätzers \hat{f} lässt sich durch den folgenden Ausdruck approximieren

$$\text{Var}\left(\hat{f}\right) \approx f^2 \left(\frac{\text{Var}\left(\widehat{\text{Sp}^2[\mathbf{TV}]}\right)}{\text{Sp}^4[\mathbf{TV}]} + \frac{\text{Var}\left(\widehat{\text{Sp}[(\mathbf{TV})^2]}\right)}{\text{Sp}^2[(\mathbf{TV})^2]} - 2 \frac{\text{Cov}\left(\widehat{\text{Sp}^2[\mathbf{TV}]}, \widehat{\text{Sp}[(\mathbf{TV})^2]}\right)}{\text{Sp}^2[\mathbf{TV}] \text{Sp}[(\mathbf{TV})^2]} \right).$$

Für die 3 Terme gilt

$$\begin{aligned} \frac{\text{Var}\left(\widehat{\text{Sp}^2[\mathbf{TV}]}\right)}{\text{Sp}^4[\mathbf{TV}]} &\leq 12 \max\left(\sum_{i=1}^a v_i, \sum_{i \neq i'} w_{ii'}\right) \xrightarrow{N \rightarrow \infty} 0, \\ \frac{\text{Var}\left(\widehat{\text{Sp}[(\mathbf{TV})^2]}\right)}{\text{Sp}^2[(\mathbf{TV})^2]} &\leq 24 \max\left(\sum_{i=1}^a v_i, \sum_{i \neq i'} w_{ii'}\right) \xrightarrow{N \rightarrow \infty} 0, \\ \frac{\text{Cov}\left(\widehat{\text{Sp}^2[\mathbf{TV}]}, \widehat{\text{Sp}[(\mathbf{TV})^2]}\right)}{\text{Sp}^2[\mathbf{TV}] \text{Sp}[(\mathbf{TV})^2]} &\leq 24 \max\left(\sum_{i=1}^a v_i, \sum_{i \neq i'} w_{ii'}\right) \xrightarrow{N \rightarrow \infty} 0. \end{aligned}$$

Damit ist gezeigt, dass der Schätzer des erste Freiheitsgrades \hat{f} zumindest approximativ das Kriterium der Dimensionsstabilität erfüllt. Für den zweiten Schätzer \hat{f}_0 erfolgen die Rechenschritte analog. \square

7.2 Niveau-Grafiken

7.2.1 Zwei-Stichprobenfall: Homoskedastische AR-Modelle

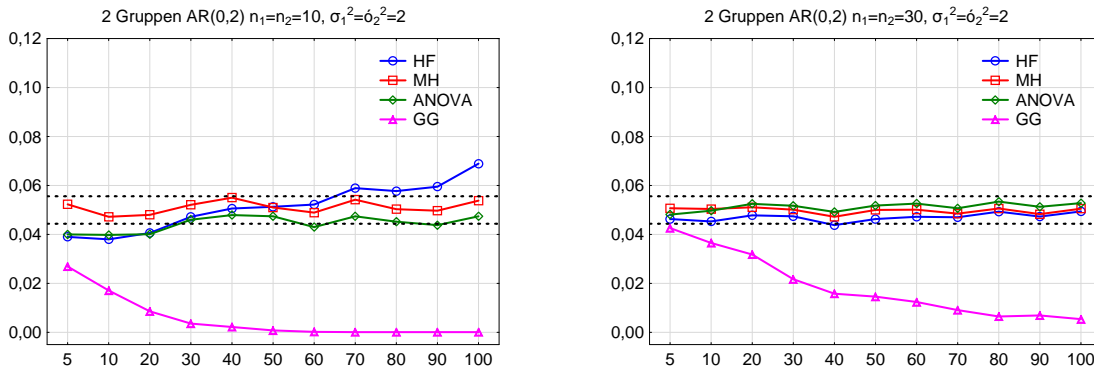


Abbildung 15: AR(0,2)-Struktur mit $n_1 = n_2 = 10$ (links) bzw. $n_1 = n_2 = 30$ (rechts) Versuchssubjekten und gleichen Varianzen $\sigma_1^2 = \sigma_2^2 = 2$.

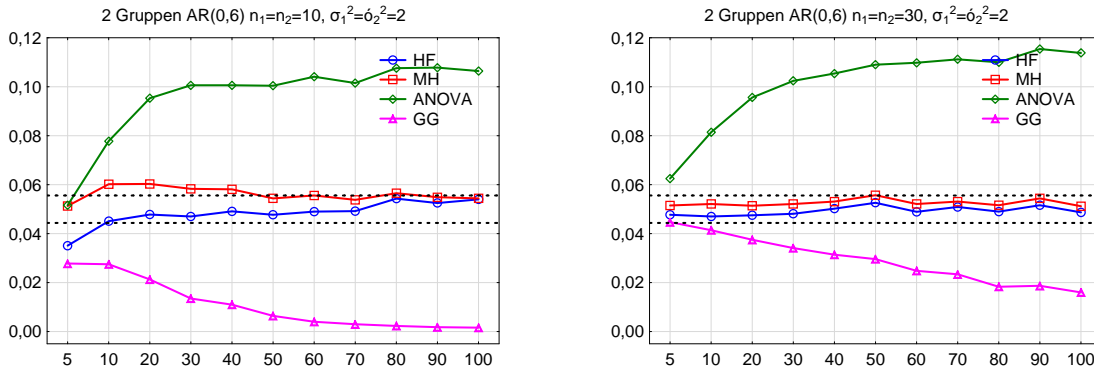


Abbildung 16: AR(0,6)-Struktur mit $n_1 = n_2 = 10$ (links) bzw. $n_1 = n_2 = 30$ (rechts) Versuchssubjekten und gleichen Varianzen $\sigma_1^2 = \sigma_2^2 = 2$.

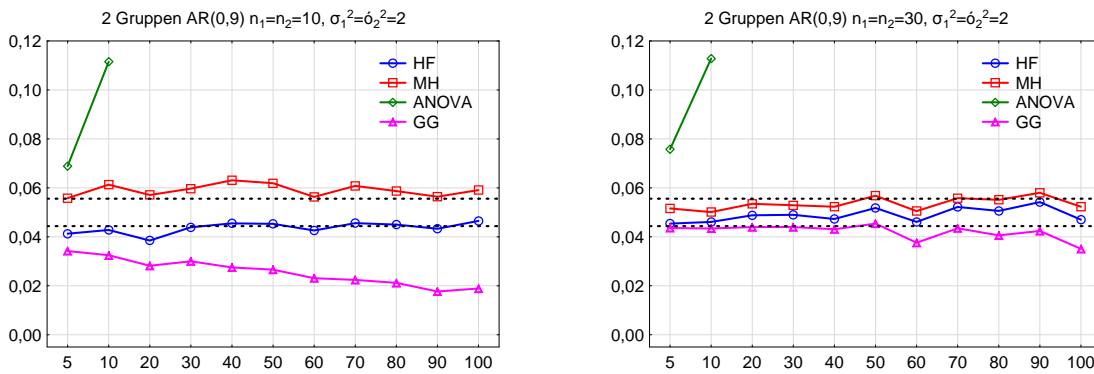


Abbildung 17: AR(0,9)-Struktur mit $n_1 = n_2 = 10$ (links) bzw. $n_1 = n_2 = 30$ (rechts) Versuchssubjekten und gleichen Varianzen $\sigma_1^2 = \sigma_2^2 = 2$.

7.2.2 Zwei-Stichprobenfall: Heteroskedastische AR-Modelle

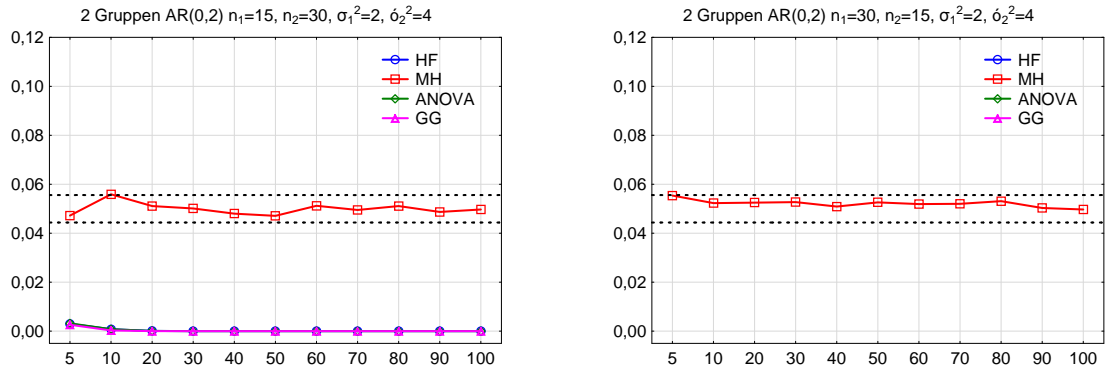


Abbildung 18: AR(0.2)-Struktur mit $n_1 = 15$, $n_2 = 30$ (links) bzw. $n_1 = 30$, $n_2 = 15$ (rechts) Versuchsobjekten und ungleichen Varianzen $\sigma_1^2 = 2$, $\sigma_2^2 = 4$.

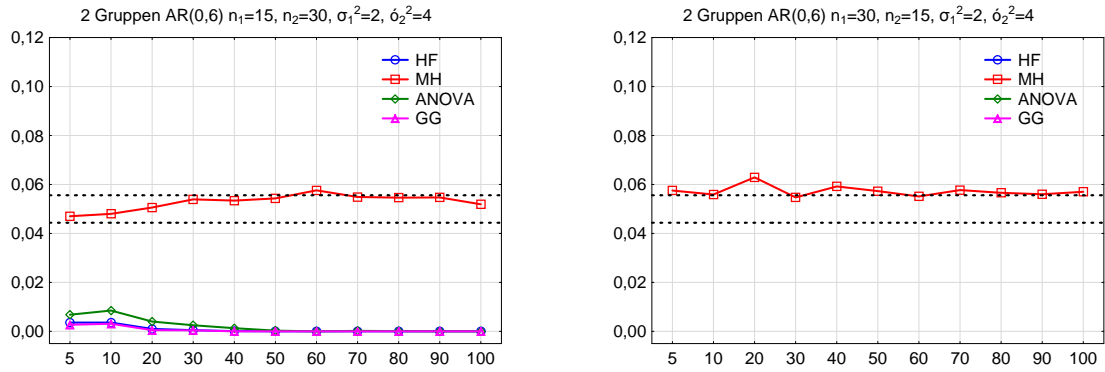


Abbildung 19: AR(0.6)-Struktur mit $n_1 = 15$, $n_2 = 30$ (links) bzw. $n_1 = 30$, $n_2 = 15$ (rechts) Versuchsobjekten und ungleichen Varianzen $\sigma_1^2 = 2$, $\sigma_2^2 = 4$.

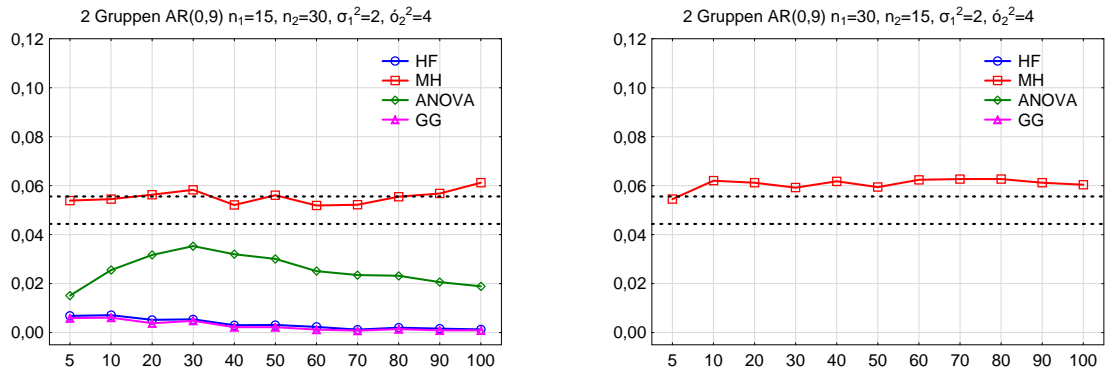


Abbildung 20: AR(0.9)-Struktur mit $n_1 = 15$, $n_2 = 30$ (links) bzw. $n_1 = 30$, $n_2 = 15$ (rechts) Versuchsobjekten und ungleichen Varianzen $\sigma_1^2 = 2$, $\sigma_2^2 = 4$.

7.2.3 Mehr-Stichprobenfall: Homoskedastische AR-Modelle

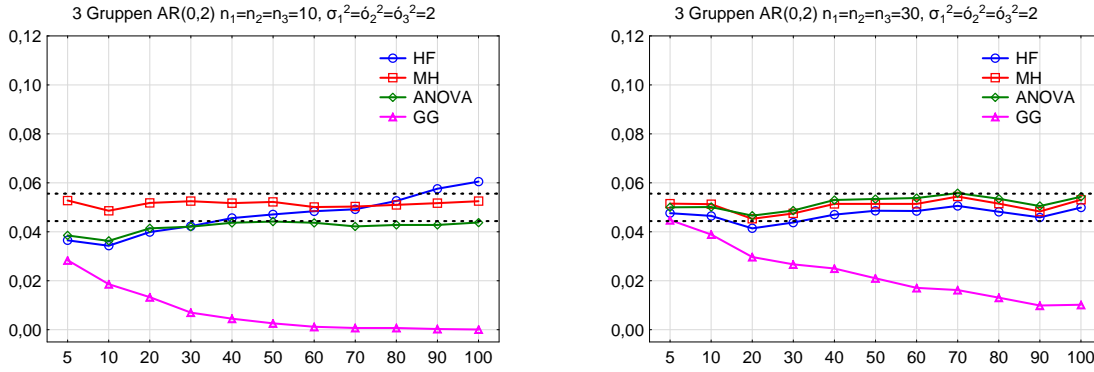


Abbildung 21: AR(0,2)-Struktur mit $n_1 = n_2 = n_3 = 10$ (links) bzw. $n_1 = n_2 = n_3 = 30$ (rechts) Versuchsubjekten und gleichen Varianzen $\sigma_1^2 = \sigma_2^2 = \sigma_3^2 = 2$.

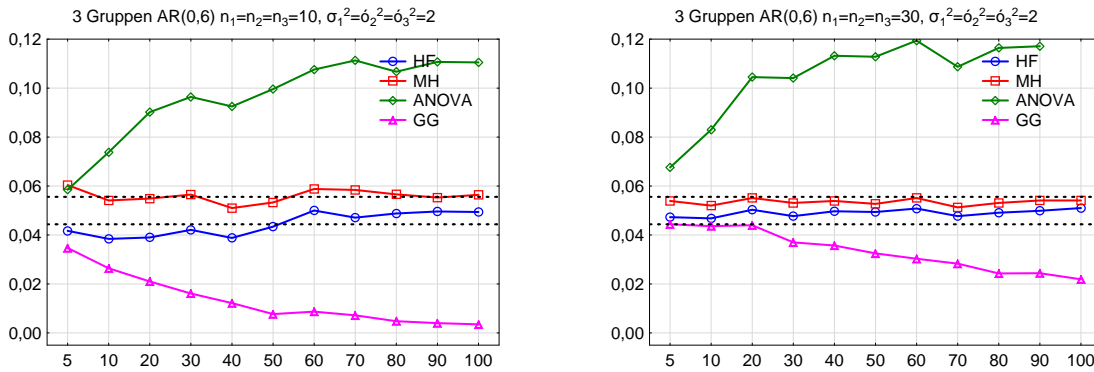


Abbildung 22: AR(0,6)-Struktur mit $n_1 = n_2 = n_3 = 10$ (links) bzw. $n_1 = n_2 = n_3 = 30$ (rechts) Versuchsubjekten und gleichen Varianzen $\sigma_1^2 = \sigma_2^2 = \sigma_3^2 = 2$.

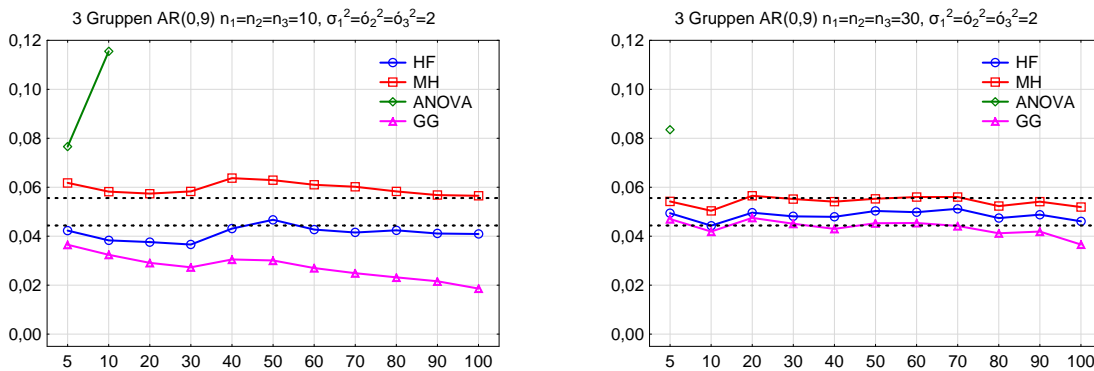


Abbildung 23: AR(0,9)-Struktur mit $n_1 = n_2 = n_3 = 10$ (links) bzw. $n_1 = n_2 = n_3 = 30$ (rechts) Versuchsubjekten und gleichen Varianzen $\sigma_1^2 = \sigma_2^2 = \sigma_3^2 = 2$.

7.2.4 Mehr-Stichprobenfall: Heterskedastisches AR(0,2)-Modell

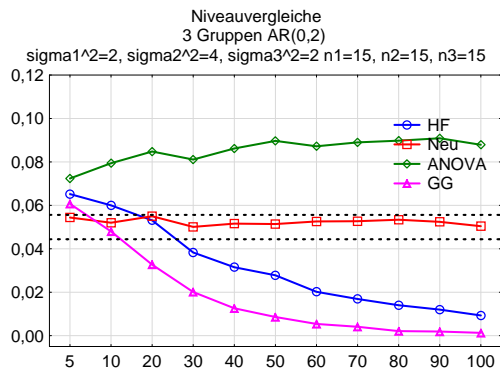


Abbildung 24: AR(0,2)-Struktur mit $n_1 = n_2 = n_3 = 15$ Versuchsobjekten und ungleichen Varianzen $\sigma_1^2 = \sigma_3^2 = 2, \sigma_2^2 = 4$.

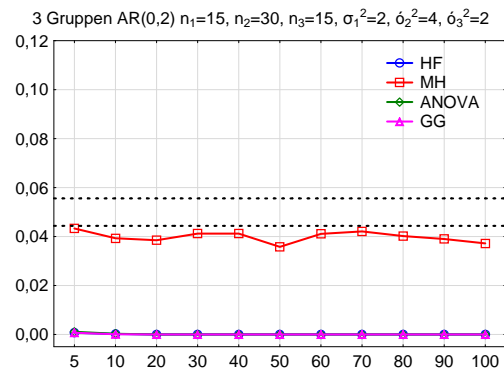
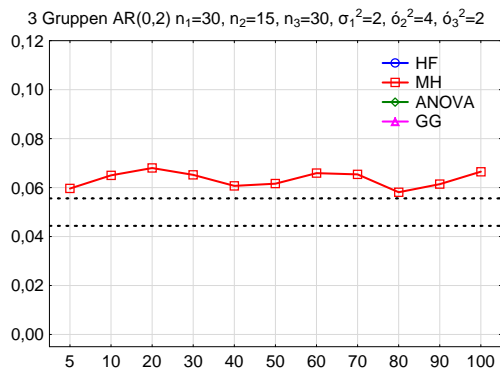


Abbildung 25: AR(0,2)-Struktur mit $n_1 = n_3 = 30, n_2 = 15$ (links) bzw. $n_1 = n_3 = 15, n_2 = 30$ (rechts) Versuchsobjekten und ungleichen Varianzen $\sigma_1^2 = \sigma_3^2 = 2, \sigma_2^2 = 4$.

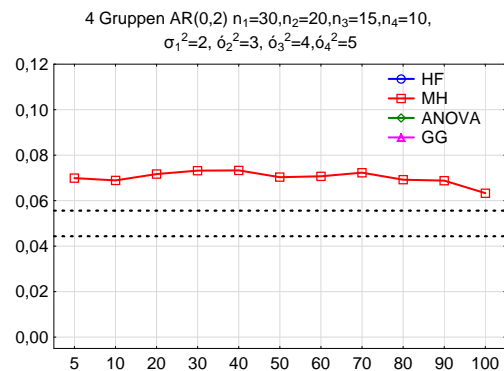
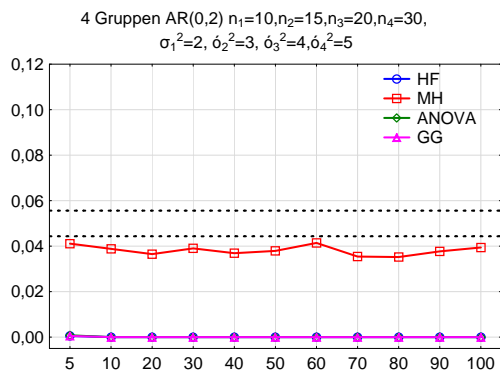


Abbildung 26: AR(0,2)-Struktur mit $n_1 = 10, n_2 = 15, n_3 = 20, n_4 = 30$ (links) bzw. $n_1 = 30, n_2 = 20, n_3 = 15, n_4 = 10$ (rechts) Versuchsobjekten und ungleichen Varianzen $\sigma_1^2 = 2, \sigma_2^2 = 3, \sigma_3^2 = 4, \sigma_4^2 = 5$.

7.2.5 Mehr-Stichprobenfall: Heterskedastisches AR(0,6)-Modell

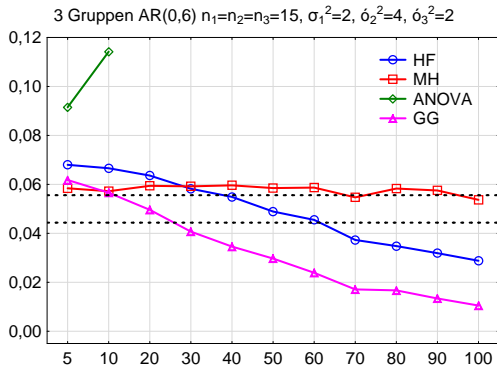


Abbildung 27: AR(0,6)-Struktur mit $n_1 = n_2 = n_3 = 15$ Versuchsobjekten und ungleichen Varianzen $\sigma_1^2 = \sigma_3^2 = 2$, $\sigma_2^2 = 4$.

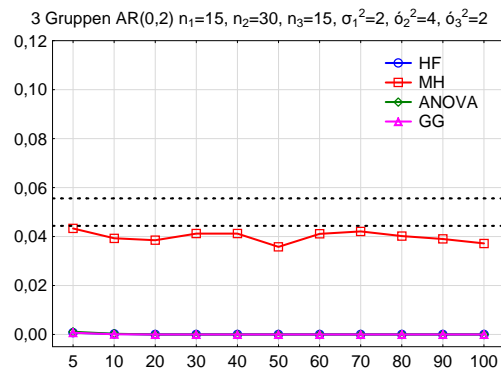
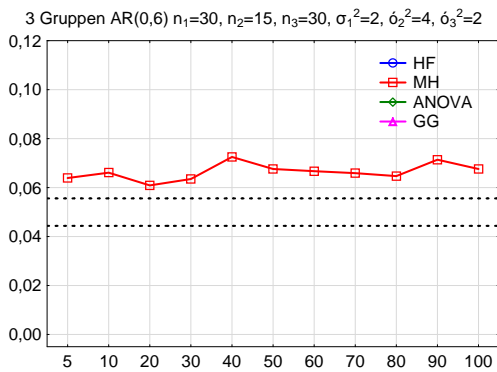


Abbildung 28: AR(0,6)-Struktur mit $n_1 = n_3 = 30$, $n_2 = 15$ (links) bzw. $n_1 = n_3 = 15$, $n_2 = 30$ (rechts) Versuchsobjekten und ungleichen Varianzen $\sigma_1^2 = \sigma_3^2 = 2$, $\sigma_2^2 = 4$.

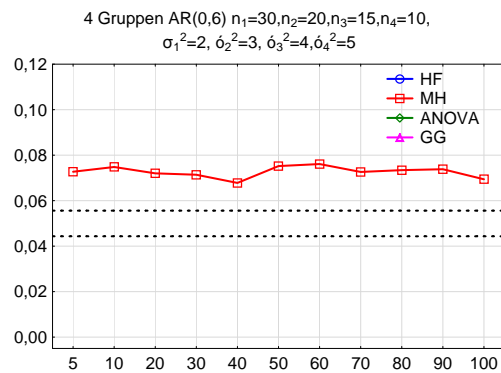
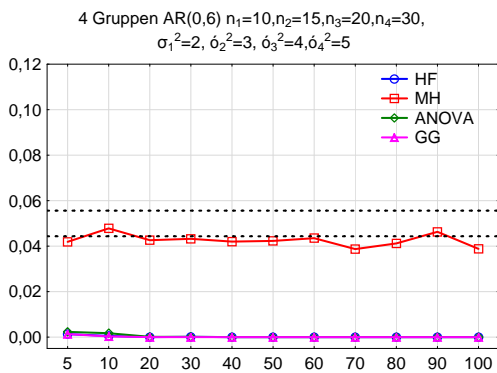


Abbildung 29: AR(0,6)-Struktur mit $n_1 = 10$, $n_2 = 15$, $n_3 = 20$, $n_4 = 30$ (links) bzw. $n_1 = 30$, $n_2 = 20$, $n_3 = 15$, $n_4 = 10$ (rechts) Versuchsobjekten und ungleichen Varianzen $\sigma_1^2 = 2$, $\sigma_2^2 = 3$, $\sigma_3^2 = 4$, $\sigma_4^2 = 5$.

7.3 SAS-Code

```
1  **Makro fuer hochdimensionale Split-Plot-Designs;
2  **Markus Harden, 3.Juni 2012*****;
3  **Daten einlesen;
4  %macro hda(data=,var=,time=,subject=,group=);
5  **Daten sortieren;
6  proc sort data=&data;
7  BY &group &subject &time;
8  run;
9  PROC IML WORKSIZE=120;
10 RESET LINESIZE=80;
11 **Kenngroessen auslesen;
12 USE &data;
13 READ ALL VAR{&var} INTO beob;
14 READ ALL VAR{&group}INTO grp_;
15 lev_a=UNIQUE(grp_);
16 a=ncol(lev_a);
17 READ ALL VAR{&time}INTOtime_;
18 lev_d=UNIQUE(time_);
19 d=ncol(lev_d);
20 n=j(a,1,0);
21 DOi=1toa;
22 READ ALL VAR{&subject} INTO pati_ WHERE (&group=(lev_a[i]));
23 lev_ni=UNIQUE(pati_);
24 n[i]=ncol(lev_ni);
25 END;
26 CLOSE &data;
27 **Testentscheidung berechnen;
28 START HD1Fa(a,n,d,beob);
29 quant={0.90,0.95,0.99};
30 nq=nrow(quant);
31 gn=SUM(n);
32 Pgn=I(gn)-J(gn,gn,1)/gn;
33 *Hypothesenmatrizen;
34 Ja=j(a,a,1)/a;
35 Jd=j(d,d,1)/d;
36 Pa=I(a)-Ja;
```

```

37 Pd=I(d)-Jd;
38 erg=j(3,14,0);
39 mat=j(a,gn,0);
40 DOi=1toa;
41 nim1=0;
42 IF(i>1) then nim1=SUM(n[1:(i-1)]);
43 mat[i,nim1+1:nim1+n[i]]=j(1,n[i],1/n[i]);
44 END;
45 *****;
46 *k-Schleife Globalhypothesen;
47 DO k=1 to 3;
48 IF (k=1) THEN DO;
49 th=Pa;
50 ts=Jd;
51 END;
52 IF (k=2) THEN DO;
53 th=Ja;
54 ts=Pd;
55 END;
56 Ta=(th@ts);
57 IF (k=3) THEN DO;
58 th=Pa;
59 ts=Pd;
60 END;
61 Ta=(th@ts);
62 sig=j(a,1,0);
63 B1=j(a,1,0);
64 B2=j(a,1,0);
65 B20=j(a,1,0);
66 C1=j(a,1,0);
67 C2=j(a,1,0);
68 n123=j(a,1,0);
69 *Teststatistik;
70 xpq=(mat@I(d))*beob;
71 Q=xpq'*Ta*xpq;
72 *projizierte Daten als Matrix;
73 Zm=(shape(beob,gn,d))*ts;

```

```
74 PZm=Pgn*Zm;
75 sigdach=PZm'*PZm/(gn-1);
76 trsigdach=TRACE(sigdach);
77 tr2sigdach=trsigdach*trsigdach;
78 trsigdach2=j(1,d,1)*(sigdach#sigdach)*j(d,1,1);
79 TN=j(a,1,0);
80 *#####;
81 *i-Schleife fuer Hauptsumme;
82 DO i=1 to a;
83   ni=n[i];
84   n123[i]=ni*(ni-1)*(ni-2)*(ni-3);
85   Pni=I(ni)-j(ni,ni,1/ni);
86   nim1=0;
87   IF (i>1) then nim1=SUM(n[1:(i-1)]);
88   *i-te Beobachtungsmatrix;
89   Zmi=Zm[nim1+1:nim1+ni,1:d];
90   Zmiz=Pni*Zmi;
91   *Empirische Kovarianzmatrix;
92   sigd=Zmiz'*Zmiz/(ni-1);
93   trsigd=TRACE(sigd);
94   TN[i]=th[i,i]/ni;
95   *Schaetzer fuer i-te Komponente von Sp[TV];
96   sig[i]=th[i,i]/ni*trsigd;
97   *Matrix mit A_klrs fuer Faktoren a t at;
98   mim=Zmi;
99   *Z_ik'Z_il;
100  Ai=mim*mim';
101  *Z_ik'Z_ik;
102  alpha=vecdiag(Ai);
103  *A_ik,il;
104  kik=alpha*j(1,ni,1)+j(ni,1,1)*alpha'-2*Ai;
105  sumkik=SUM(kik);
106  *Spurschaetzer in i-ter Gruppe;
107  *Sp^2[TV];
108  B11=(sumkik)##2;
109  B12=SSQ(j(1,ni,1)*kik);
110  B13=SUM(kik#kik);
```

```

111 B1[i]=(th[i,i])##2/(n123[i])*(B11-4*B12+2*B13)/4;
112 *Sp[(TV)^2];
113 Ai0=Ai-DIAG(Ai);
114 B21=(ni-2)*(ni-3)*SUM(Ai0#Ai0);
115 B22=(ni-3)*SUM((Ai0*Ai0)#(j(ni,ni,1)-I(ni)));
116 B23=(SUM(Ai0))##2-2*SUM(Ai0#Ai0)-4*SUM((Ai0*Ai0)#(j(ni,ni,1)-I(ni)))
    ;
117 *Nenner Spurschaetzer Sp[T_2S iT_2S_i];
118 B2[i]=(th[i,i])##2/(n123[i])*(B21-2*B22+B23);
119 B20[i]=B2[i]/((ni-1));
120 #####
121 *j-Schleife fuer Nebensumme j ungleich i;
122 DO j=1 to a;
123 IF (j=i) then;
124 ELSE DO;
125 nj=n[j];
126 Pnj=I(nj)-j(nj,nj,1/nj);
127 njm1=0;
128 IF (j>1) then njm1=SUM(n[1:(j-1)]);
129 Zmj=Zm[njm1+1:njm1+nj,1:d];
130 Zmjz=Pnj*Zmj;
131 *Datenmatrix in j-ter Gruppe;
132 mjm=Zmj;
133 Aj=mjm*mjm';
134 beta=vecdiag(Aj);
135 kjk=beta*j(1,nj,1)+j(nj,1,1)*beta'-2*Aj;
136 sumkjk=SUM(kjk);
137 *Mischterme fuer SP^2[TV];
138 C1[i]=C1[i]+(th[i,i]*th[j,j])/(4*ni*(ni-1)*nj*(nj-1))*sumkik*sumkjk;
139 *Mischterme fuer SP[(TV)^2];
140 mijm=mim*mjm';
141 C21=ni*nj*SUM(mijm#mijm);
142 C22=(ni*SUM(mijm*mijm')));
143 C23=(nj*SUM(mijm'*mijm));
144 C24=(SUM(mim*mjm')##2);
145 *Schaetzer fuer Sp[TV iTV_j];
146 C2[i]=C2[i]+(th[i,j]*th[j,i])/(ni*(ni-1)*nj*(nj-1))*(C21-C22-C23+C24

```



```
);
147 END;
148 END;
149 *Ende j-Schleife;
150 *#####;
151 END;
152 *Ende i-Schleife;
153 *#####;
154 trsig=SUM( sig );
155 trsiggl=trsigdach*SUM(TN);
156 test=Q/trsig;
157 testgl=Q/trsiggl;
158 print trsig trsiggl;
159 *Box'schesEpsilon;
160 r=(d-1);
161 eps=(tr2sigdach)/(trsigdach2);
162 e_HF=((gn-a+1)*eps-2)/(r*(gn-a-eps));
163 *#####;
164 *Freiheitsgrade;
165 *Andere_Freiheitsgrade;
166 f_anova=(k=1)*(a-1)+(k=2)*(d-1)+(k=3)*(a-1)*(d-1);
167 f2_anova=d*(gn-a);
168 f_GG=f_anova*eps/r;
169 f2_GG=f2_anova*eps/r;
170 f_HF=f_anova*e_HF;
171 f2_HF=f2_anova*e_HF;
172 *Neue_Freiheitsgrade;
173 B_1=SUM(B1);
174 C_1=SUM(C1);
175 B_2=SUM(B2);
176 B_20=SUM(B20);
177 C_2=SUM(C2);
178 f=(B_1+C_1)/(B_2+C_2);
179 IF ( f < 1 ) then f = 1;
180 f0=(B_1+C_1)/(B_20);
181 *#####;
182 *p-Werte;
```

```

183  erg_MH=1-CDF("F",test,f,f0,0);
184  erg_anova=1-CDF("F",testgl,f_anova,f2_anova,0);
185  erg_GG=1-CDF("F",testgl,f_GG,f2_GG,0);
186  erg_HF=1-CDF("F",testgl,f_HF,f2_HF,0);
187  erg[k,1]=test;
188  erg[k,2]=f;
189  erg[k,3]=f0;
190  erg[k,4]=erg_mh;
191  erg[k,5]=testgl;
192  erg[k,6]=f_anova;
193  erg[k,7]=f2_anova;
194  erg[k,8]=erg_anova;
195  erg[k,9]=f_GG;
196  erg[k,10]=f2_GG;
197  erg[k,11]=erg_GG;
198  erg[k,12]=f_HF;
199  erg[k,13]=f2_HF;
200  erg[k,14]=erg_HF;
201  END;
202  *Ende_k-Schleife;
203  #####
204  print "#####Ausgabe#####";
205  print "Parameter";
206  print _a _n _d;
207  print "p-Werte der Testverfahren";
208  print erg[rowname={"&group","&time","Wechselwirkung"} _colname={"F_MH"
    _"f" _"f0" _"p_MH" _"F_alt" _"f_anova" _"f2_anova" _"p_ANOVA" _"f_GG" _"f2
    _GG" _"p_GG" _"f_HF" _"f2_HF" _"HF"}];
209  FINISH;
210  RUN_HD1Fa(a,n,d,beob);
211  QUIT;
212  %mend;
213
214
215  %hda(data=daten,var=Value,time=Dim,subject=Ratte,group=Gruppe);

```

Literatur

- [1] Bai, Z und Saranadasa, H. Effect of high dimension: by an example of a two sample problem. *Statistica Sinica*, 6:311 – 329 (1996).
- [2] Becker, BM. *Test für hochdimensionale Messwiederholungen mit unbekannten Kovarianzmatrizen*. Institut für Mathematische Stochastik, Universität Göttingen (Diplomarbeit, 2010).
- [3] Box, GEP. Some theorems on quadratic forms applied in the study of analysis of variance problems, i. effect of inequality of variance in the one-way classification. *The Annals of Mathematical Statistics*, 25(2):pp. 290–302 (1954). ISSN 00034851.
- [4] Box, GEP. Some theorems on quadratic forms applied in the study of analysis of variance problems, ii. effects of inequality of variance and of correlation between errors in the two-way classification. *The Annals of Mathematical Statistics*, 25(3):pp. 484–498 (1954). ISSN 00034851.
- [5] Brunner, E. *Lineare Modelle*. Vorlesungsskript an der Universität Göttingen (2011).
- [6] Brunner, E, Becker, B und Werner, C. Approximate distributions of quadratic forms in high-dimensional repeated-measures designs. Technischer Bericht, Department Medizinische Statistik Georg-August-Universität Göttingen (2010).
- [7] Brunner, E, Dette, H und Munk, A. Box-type approximations in nonparametric factorial designs. *Journal of the American Statistical Association* (1997).
- [8] Chen, SX und Qin, YL. A two-sample test for high-dimensional data with applications to gene-set testing. *Annals of Statistics* (2010).
- [9] Fisher, RA. The fiducial argument in statistical inference. *Annals of Human Genetics*, 6(4):391–398 (1935). ISSN 1469-1809. doi:10.1111/j.1469-1809.1935.tb02120.x.
- [10] Geisser, S und Greenhouse, SW. An extension of box’s results on the use of the f distribution in multivariate analysis. *The Annals of Mathematical Statistics*, 29(3):pp. 885–891 (1958). ISSN 00034851.
- [11] Greenhouse, SW und Geisser, S. On methods in the analysis of profile data. *Psychometrika*, 24:95–112 (1959). ISSN 0033-3123. 10.1007/BF02289823.

-
- [12] Helms, HJ. *Robuste Verfahren für strukturierte hochdimensionale Repeated-Measures-Designs unter Nicht-Normalverteilung*. Institut für Mathematische Stochastik, Universität Göttingen (Diplomarbeit, 2011).
- [13] Hotelling, H. A generalized t test and measure of multivariate dispersion. Seiten 23–41 (1951).
- [14] Huynh, H und Feldt, LS. Estimation of the box correction for degrees of freedom from sample data in randomized block and split-plot designs. *Journal of Educational and Behavioral Statistics*, 1(1):69–82 (1976). doi:10.3102/10769986001001069.
- [15] Lecoutre, B. A correction for the ϵ^* approximate test in repeated measures designs with two or more independent groups. *Journal of Educational and Behavioral Statistics*, 16(4):371–372 (1991). doi:10.3102/10769986016004371.
- [16] Mathai, AM und Provost, SB. *Quadratic forms in random variables*. Marcel Dekker (1992).
- [17] Patnaik, PB. The non-central chi- and f-distribution and their applications. *Biometrika*, 36(1/2):pp. 202–232 (1949). ISSN 00063444.
- [18] Ravishanker, N und Dey, DK. *A first course in linear model theory*. Chapman & Hall/CRC (2002).
- [19] Searle, S. *Linear models*. Wiley (1971).
- [20] Srivastava, MS und Du, M. A test for the mean vector with fewer observations than the dimension. *Journal of Multivariate Analysis*, 99(3):386 – 402 (2008). ISSN 0047-259X. doi:10.1016/j.jmva.2006.11.002.
- [21] Stange, K. *Angewandte Statistik: Eindimensionale Probleme*. Angewandte Statistik. Springer-Verlag (1970).
- [22] van der Vaart, AW. *Asymptotic Statistics (Cambridge Series in Statistical and Probabilistic Mathematics)*. Cambridge University Press (1998).
- [23] Werner, C. *Dimensionsstabile Approximation für Verteilungen von zufälligen quadratischen Formen im Repeated-Measures-Design*. Institut für Mathematische Stochastik, Universität Göttingen (Diplomarbeit, 2002).