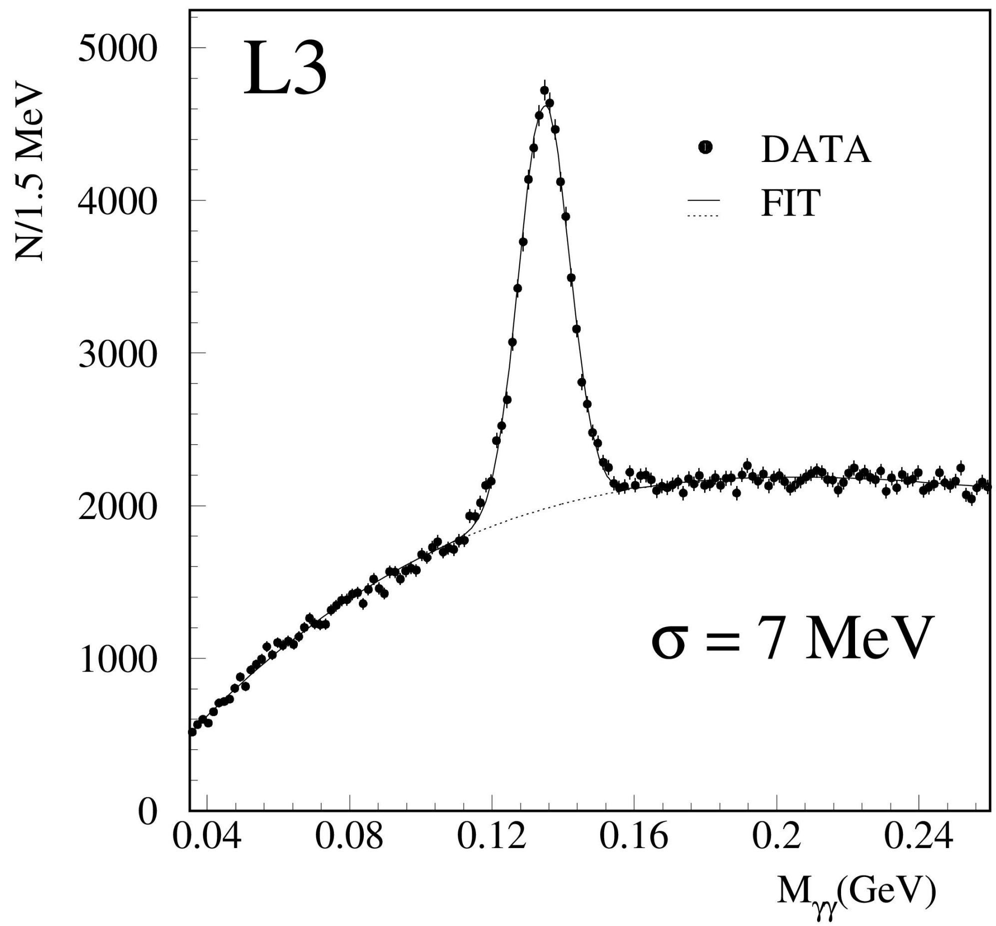
Statistik - Fehlerrechnung - Auswertung von Messungen

TEIL I

Vorbereitungskurs F-Praktikum B (Physik), RWTH Aachen

Thomas Hebbeker

- Literatur
- Eindimensionaler Fall:
  - Grundbegriffe
  - Wahrscheinlichkeitsverteilungen:
    - Gauß
    - Poisson
    - Binomial
    - χ^2
  - Parameterbestimmung (Fit):
    - Maximum-Likelihood
    - χ^2



Literatur

- **Lehrbücher**
  - Roger J. Barlow, 'Statistics: A Guide to the Use of Statistical Methods in the Physical Sciences', Wiley, 1989
  - Louis Lyons, 'Statistics for Nuclear and Particle Physics', Cambridge University Press, 1986
  - Glen Cowan, Statistical Data Analysis, Clarendon Press, 1998
  - Volker Blobel und Erich Lohrmann, Statistische und numerische Methoden der Datenanalyse, Teubner, 1998
  - Martin Erdmann und Thomas Hebbeker, Experimentalphysik 5 - Moderne Methoden der Datenanalyse, Springer Spektrum, 2013

- **Vorlesungsskripten**
  - Wes Metzger:
    `http://www.hef.ru.nl/~wes/stat_course/statist_2002.pdf`
  - Glen Cowan:
    `www.pp.rhul.ac.uk/~cowan/stat_course.html`

- **Kurzreferenz**
  - 'Particle Physics Booklet',
    `pdg.lbl.gov/`

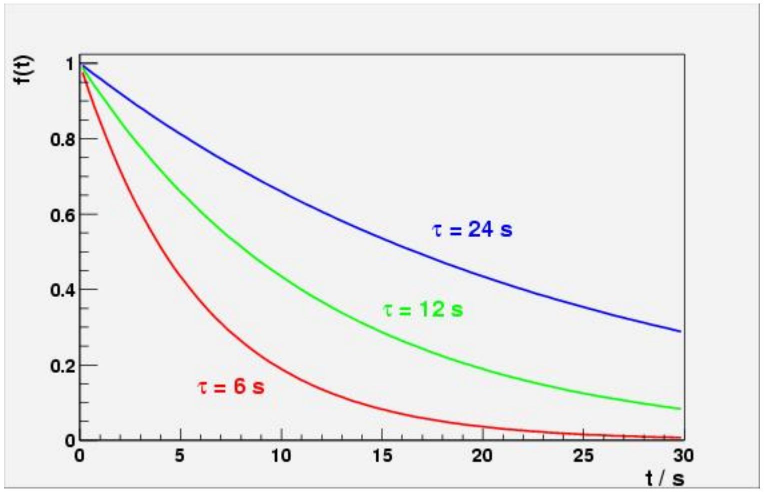
Aufgabenstellungen

Wahrscheinlichkeitsrechnung (= Theorie)

'Wahrscheinlichkeitsdichte' analytisch als Funktion von (physikalischen) Parametern gegeben
$\longrightarrow$ Verteilungen berechenbar

Beispiel:

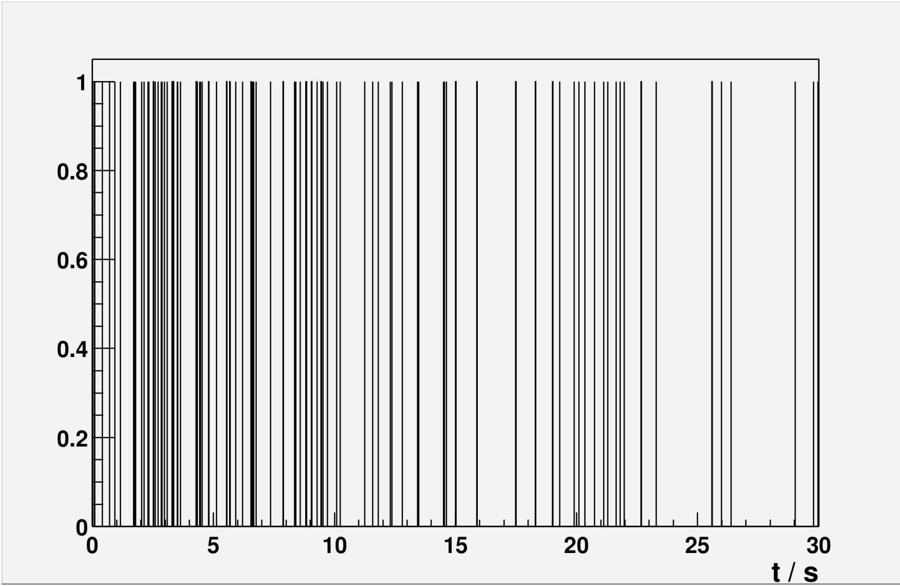
$$f(t|\tau) = N(\tau) \cdot e^{-t/\tau}$$
$$t \geq 0$$

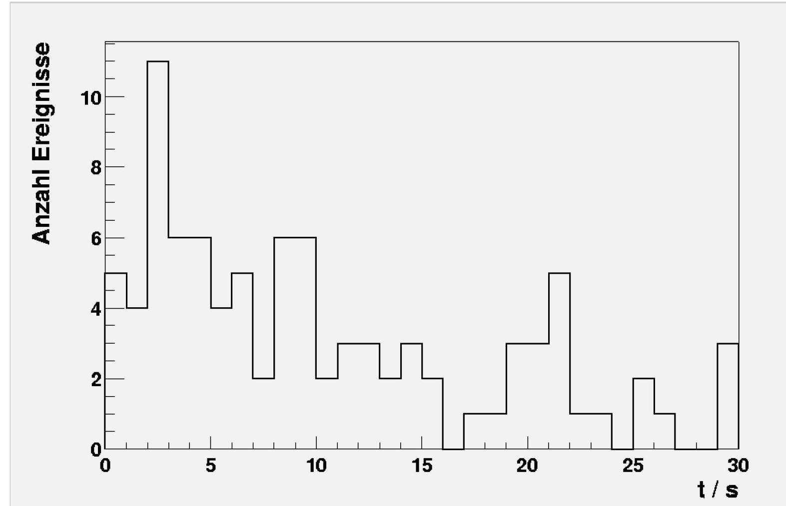


Statistik (= Experiment)

Wahrscheinlichkeitsdichte näherungsweise durch 'Häufigkeitsverteilung' von einzelnen Messresultaten gegeben
$\longrightarrow$ 'Estimatoren' für physikalische Parameter $+$ statistische Fehler

Beispiel:





$$[\tau] = (13.1 \pm 0.7)\,\mathrm{s}$$

Fehlerfortpflanzung

Gemessene Größen und Fehler $\longrightarrow$ Abgeleitete Größen und deren Fehler.

Beispiel:

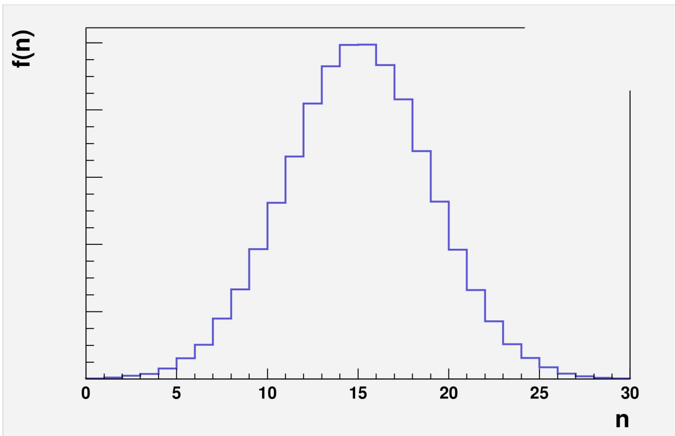
$$[\tau] = (13.1 \pm 0.7)\,\mathrm{s}$$

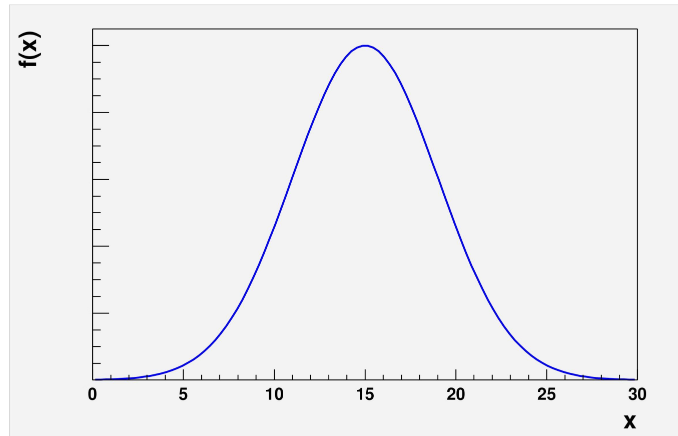
$$\rightarrow \qquad [T_{1/2}] = [\tau] \cdot \ln 2 = (9.1 \pm 0.5)\,\mathrm{s}$$

Definitionen (eindimensional)

THEORIE: Wahrscheinlichkeitsdichte (bzw. Wahrscheinlichkeitsverteilung) eines Messwertes (= Zufallsvariable):

$$\boldsymbol{f(n)} \ \ \text{[diskret]} \qquad \text{bzw.} \qquad \boldsymbol{f(x)} \ \ \text{[kontinuierlich]} \qquad (\boldsymbol{f \geq 0})$$





Normierung:

$$\sum_{n} f(n) = 1 \qquad \int_{-\infty}^{\infty} f(x)\,\mathrm{d}x = 1$$

Wahrscheinlichkeit:

$$p(n_1 \leq n \leq n_2) = \sum_{n_1}^{n_2} f(n) \qquad p(x_1 \leq x \leq x_2) = \int_{x_1}^{x_2} f(x)\,\mathrm{d}x$$

$f(n)$ bzw. $f(x)$ können von ‘Parametern’ abhängen!

Erwartungswert einer Funktion $\boldsymbol{H}(\boldsymbol{x})$:

$$\boxed{\langle \boldsymbol{H}(\boldsymbol{x})\rangle = \int \boldsymbol{H}(\boldsymbol{x}) \cdot \boldsymbol{f}(\boldsymbol{x})\, \mathrm{d}\boldsymbol{x}}$$

z.B. Sonnenstrahlung(Wolkendichte)

Bedeutung: Mittelwert von $\boldsymbol{H}$.

Spezialfälle: a) arithmetischer Mittelwert:

$$\boxed{\boldsymbol{\mu} \equiv \langle \boldsymbol{x}\rangle = \int \boldsymbol{x}\, \boldsymbol{f}(\boldsymbol{x})\, \mathrm{d}\boldsymbol{x}}$$

b) Varianz:

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\sigma^2} &\equiv \langle (\boldsymbol{x}-\boldsymbol{\mu})^2\rangle = \int (\boldsymbol{x}-\boldsymbol{\mu})^2\, \boldsymbol{f}(\boldsymbol{x})\, \mathrm{d}\boldsymbol{x} \\ &= \int \boldsymbol{x}^2\, \boldsymbol{f}(\boldsymbol{x})\, \mathrm{d}\boldsymbol{x} - \int \boldsymbol{\mu}^2\, \boldsymbol{f}(\boldsymbol{x})\, \mathrm{d}\boldsymbol{x} = \langle \boldsymbol{x}^2\rangle - \langle \boldsymbol{x}\rangle^2 \end{aligned}$$

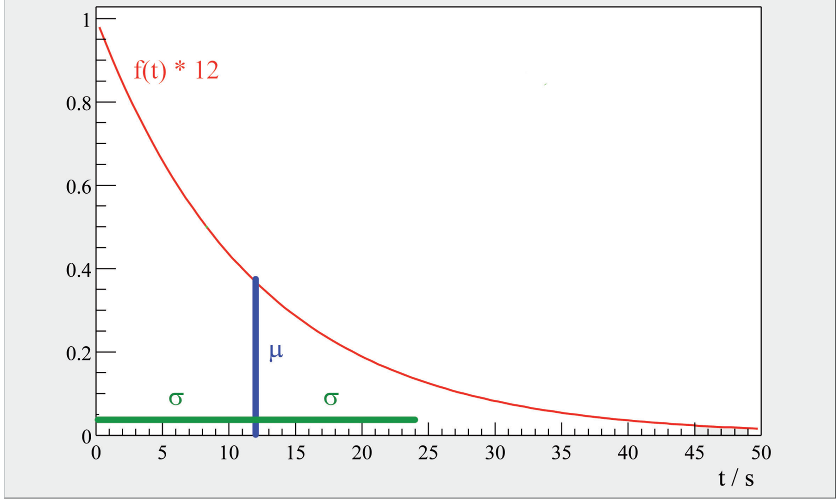
c) Standardabweichung:

$$\boxed{\boldsymbol{\sigma} = \sqrt{\boldsymbol{\sigma}^2} = \sqrt{\langle \boldsymbol{x}^2\rangle - \langle \boldsymbol{x}\rangle^2}}$$

Bedeutung: Maß für die Breite der Verteilung

root mean square = r.m.s. $= \sqrt{\langle \boldsymbol{x}^2\rangle}$

Beispiel:



$$\boldsymbol{f(t) = \frac{1}{\tau} \cdot e^{-t/\tau}}$$

$$\boldsymbol{\mu \;=\; \frac{1}{\tau} \cdot \int t \cdot e^{-t/\tau}\, \mathrm{d}t = \ldots = \tau}$$

$$\boldsymbol{\sigma^2 \;=\; \frac{1}{\tau} \int (t-\tau)^2 \cdot e^{-t/\tau}\, \mathrm{d}t = \ldots = \tau^2}$$

Man beachte:

$$\boldsymbol{\langle a + b \rangle = \langle a \rangle + \langle b \rangle}$$

aber:

$$\boldsymbol{\langle a \cdot b \rangle \neq \langle a \rangle \cdot \langle b \rangle}$$

EXPERIMENT: Aus N Messwerten berechnet man Estimatoren:

$$\boxed{[H(x)] = \frac{1}{N} \cdot \sum_i H(x_i)}$$

Für große N:

$$[H(x)] \to \langle H(x) \rangle$$

Speziell für Mittelwert und Varianz/Standardabweichung:

$$\boxed{\bar{x} \equiv [x] = \frac{1}{N} \sum_i x_i} \qquad \boxed{s^2 \equiv [(x-\mu)^2] = \frac{1}{N} \sum_i (x_i - \mu)^2}$$

Falls μ nicht bekannt: in Formel für s^2 ersetze $\mu \to \bar{x}$:

$$\tilde{s}^2 = \frac{1}{N-1} \sum_i (x_i - \bar{x})^2$$

Modifizierte Normierung $(N-1)$: Estimator 'ungebiased'.

WARNUNG:

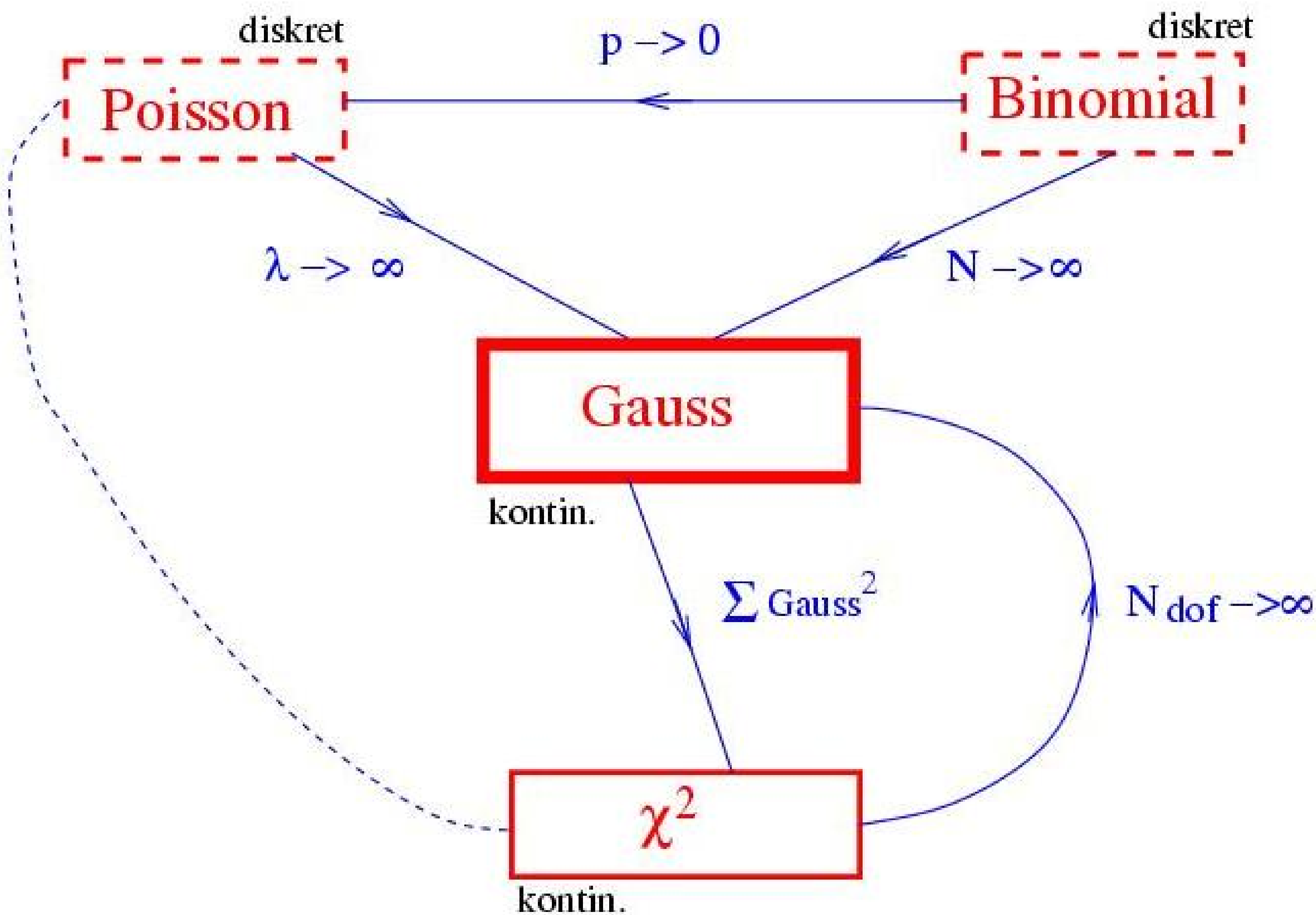
Oft benutzt man doch den gleichen Buchstaben statt zwischen $\boldsymbol{\sigma}$, $\boldsymbol{s}$, $\tilde{\boldsymbol{s}}$ zu unterscheiden!

Häufig $\boldsymbol{\Delta x = \sigma_x}$ für den Fehler.

$$\boldsymbol{a = [a] = \langle a \rangle}$$

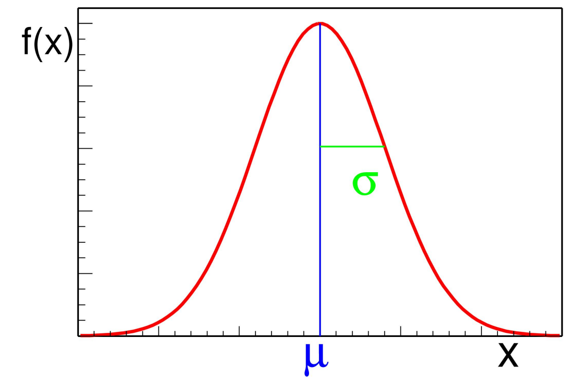
Immer auf Kontext achten!

Wichtige Wahrscheinlichkeitsverteilungen



Gauß-Verteilung (Normal-Verteilung)

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



Standard-Form ($\mu = 0, \sigma = 1$):

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

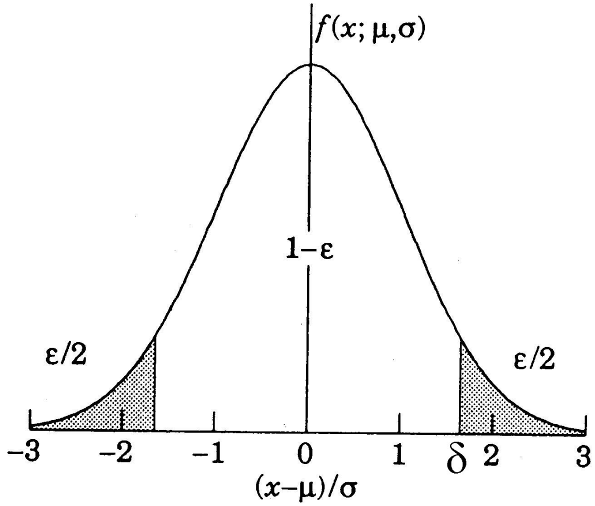
- kontinuierlich
- 1-dimensional (kann auf n Dim. verallgem. werden)
- 2 Parameter:

$$\text{Mittelwert} = \langle x \rangle = \mu$$

$$\text{Varianz} = \langle (x-\mu)^2 \rangle = \sigma^2$$

Universelle Bedeutung wegen des ‘Zentralen Grenzwertsatzes’ (s.u.)

Gauß-Fehler



ε (%)	δ
31.73	1σ
4.55	2σ
0.27	3σ
6.3×10^{-3}	4σ
5.7×10^{-5}	5σ
2.0×10^{-7}	6σ

ε (%)	δ
20	1.28σ
10	1.64σ
5	1.96σ
1	2.58σ
0.1	3.29σ
0.01	3.89σ

Viele Messgrößen streuen ‘gaußisch’ um Erwartungswert (s.u.).

Messgröße und Fehler: $\boldsymbol{G \pm \Delta G}$

Normalerweise: Statistischer Fehler $\boldsymbol{\Delta G} = 1$ Standardabweichung

$$\boldsymbol{\pm 1\,\sigma \quad \leftrightarrow \quad p = 68.27\%}$$

Beispiel: Messresultat $\boldsymbol{\bar{x} = 24.3 \pm 1.1}$ (gaußisch).
Wahrscheinlichkeit, dass wahrer Wert $\boldsymbol{\mu}$ im Intervall $\boldsymbol{24.3 \pm 2.2}$? $\boldsymbol{p \approx 95\%}$

Zentraler Grenzwertsatz

Seien x_i irgendwelche Zufallsvariablen mit IRGENDEINER Wahrscheinlichkeitsdichte g(x) (so dass Mittelwert = 0 und Varianz =1), dann ist die Zufallsvariable

$$y^N = \frac{1}{\sqrt{N}} \cdot \sum_i^N x_i$$

GAUSS-verteilt (Mittelwert = 0 und Varianz =1) im Grenzfall $N \to \infty$.

Das bedeutet: Immer wenn sich ein Effekt aus vielen Einzeleffekten zusammensetzt, erhält man näherungsweise eine Gauß-Verteilung

Illustration: g(x) = flach [$\rightarrow$ nächste Seite]

Beispiel aus der Teilchenphysik: Vielfachstreuung!

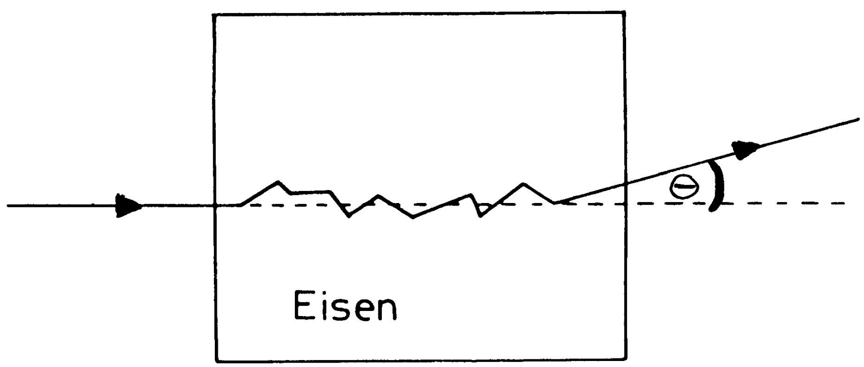
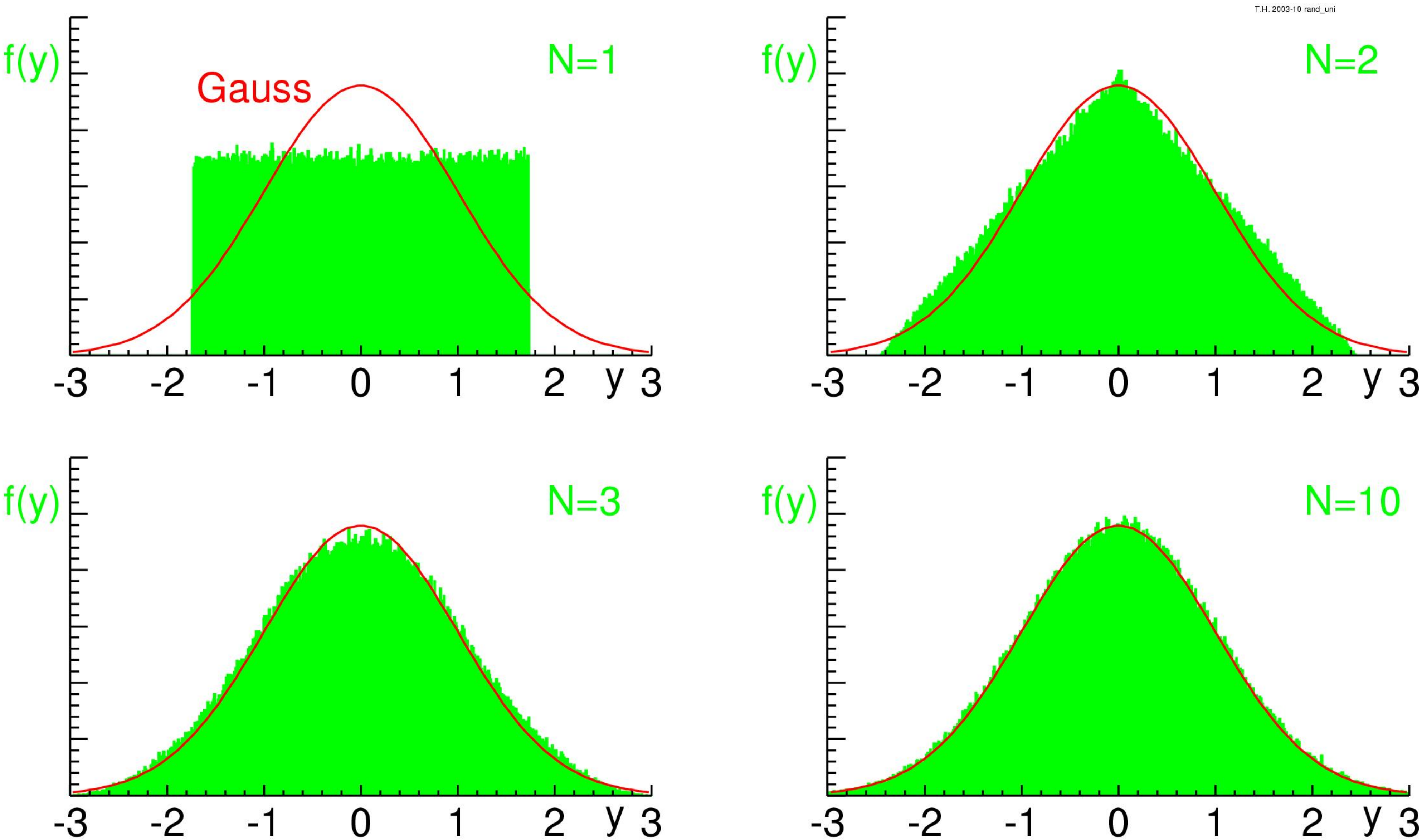


Illustration: Zentraler Grenzwertsatz (uniform verteilte Zufallszahlen)



Wichtige **Anwendung** (Begründung folgt):

N Einzelmessungen $\rightarrow$ Mittelwert und statistischer Fehler:

$$\bar{x} \pm \Delta x \;\equiv\; \bar{x} \pm \frac{\tilde{s}}{\sqrt{N}} \approx\; \bar{x} \pm \frac{\sigma}{\sqrt{N}}$$

Mittelwert ist um wahren Wert **gaußisch** verteilt mit Standardabweichung

$$\Delta x = \tilde{s}/\sqrt{N} \approx \sigma/\sqrt{N}$$

(auch für nicht gaußische Einzelverteilungen, wenn nur N groß)

Nicht verwechseln: σ und Δx !

Beispiel: $N = 20$ Einzelmessungen:

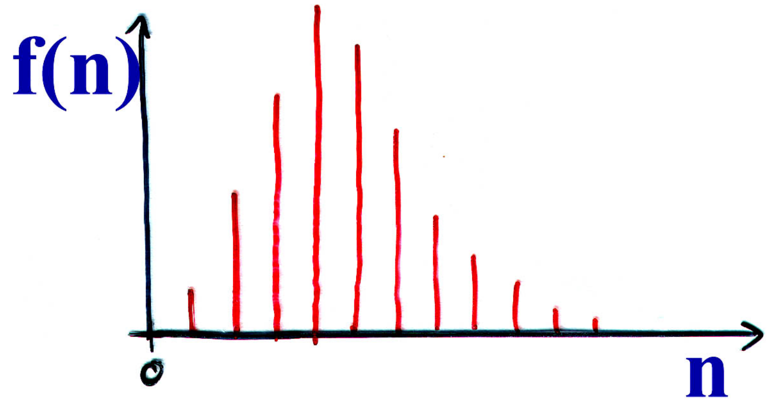
$$x_i = \quad 3.4, 2.7, 2.9, 3.1, 2.7, 3.0, 3.5, 3.1, 2.8, 2.8,$$
$$3.1, 2.8, 2.2, 3.1, 3.2, 2.7, 2.5, 2.4, 2.8, 3.1$$

Form der Verteilung nicht (genau) bekannt.

$$\bar{x} = 2.90 \qquad \tilde{s} = 0.32 \qquad \Delta x = 0.07$$

Poisson-Verteilung

$$\boxed{f(n|\lambda) = e^{-\lambda} \cdot \frac{\lambda^n}{n!}}$$



- diskret
- 1-dimensional
- 1 Parameter:

$$\text{Mittelwert} = \lambda > 0$$

$$\text{Varianz} = \lambda$$

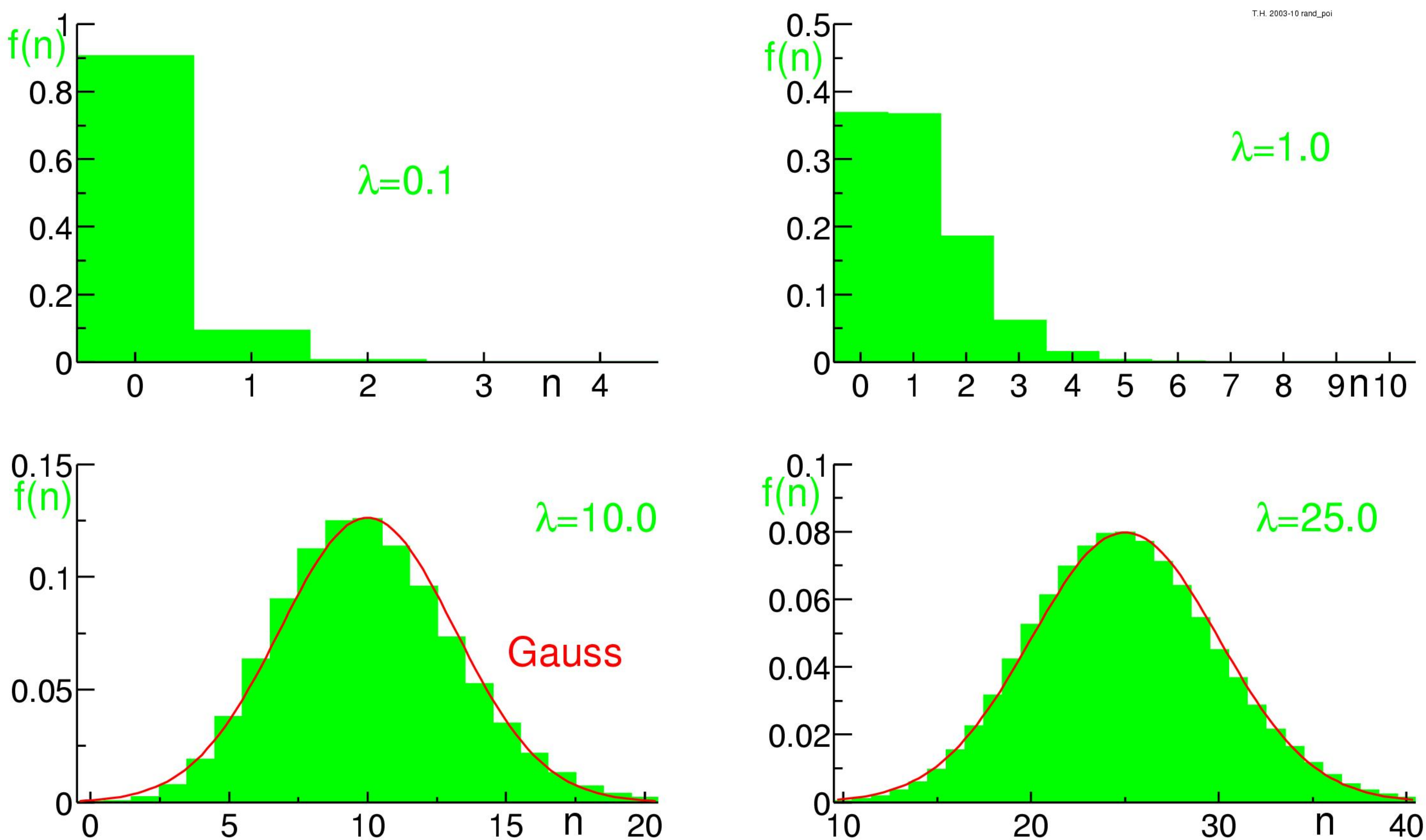
Bedeutung: beschreibt die Verteilung der Zahl 'seltener' und 'unabhängiger' Ereignisse (in Zeit- oder Raumintervall).

Beispiel aus dem 'Leben': Zahl der Verkehrsunfälle pro Tag und Stadt

Beispiel aus der Kernphysik: Zahl der radioaktiven Zerfälle in einem 1 kg Uran-block in einer Sekunde

Zusammenhang mit Gauß-Verteilung:
Für $\lambda \to \infty$ Gauß-Verteilung mit $\mu = \lambda$ und $\sigma = \sqrt{\lambda}$. Nur ein freier Paramter!

Illustration: Poisson-Verteilung



Poisson-Fehler

Wichtig hier: Anwendung der gaußischen Näherung!

Beispiel: kosmische Strahlung

Auf Fläche von $\mathbf{0.5}\,\mathrm{m}^2$ werden $\boldsymbol{n = 97}$ kosmische Myonen in Zeitraum von $\mathbf{1}\,\mathrm{s}$ registriert.

Bei $\boldsymbol{n = 97}$ ist Poisson-Verteilung in guter Näherung gaußisch!

Estimator für Mittelwert:

$$\bar{x} = 97 \pm \sqrt{97} = 97 \pm 10$$

Beispiel: Boulevard-Zeitung

Aufgrund ... konnte die Zahl der Verkehrsunfälle in XYZ gegenüber dem Vorjahr um $\mathbf{11.6\%}$ gesenkt werden, nämlich von 43 auf 38.

Gauß-Näherung: Differenz ist

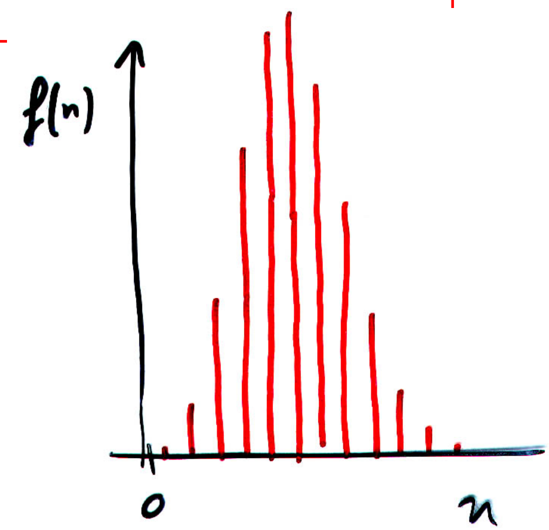
$$(43 \pm \sqrt{43}) - (38 \pm \sqrt{38}) = 43 - 38 \pm \sqrt{43 + 38} = 5 \pm 9$$

Varianzen addieren! (s. unten)

$\longrightarrow$ Quatsch !

Binomial-Verteilung $0 \leq n\,(= Erfolge) \leq N$

$$f(n|N,p) = \binom{N}{n} \cdot p^n \cdot (1-p)^{N-n} = \frac{N!}{n!\,(N-n)!} \cdot p^n \cdot (1-p)^{N-n}$$



- diskret

1-dimensional (Verallgemeinerung: Multinomial)

- 2 Parameter: Wahrscheinlichkeit p für ‘Erfolg’

und Zahl der Versuche ’N’

Mittelwert $= Np$ Varianz $= Np\,(1-p)$

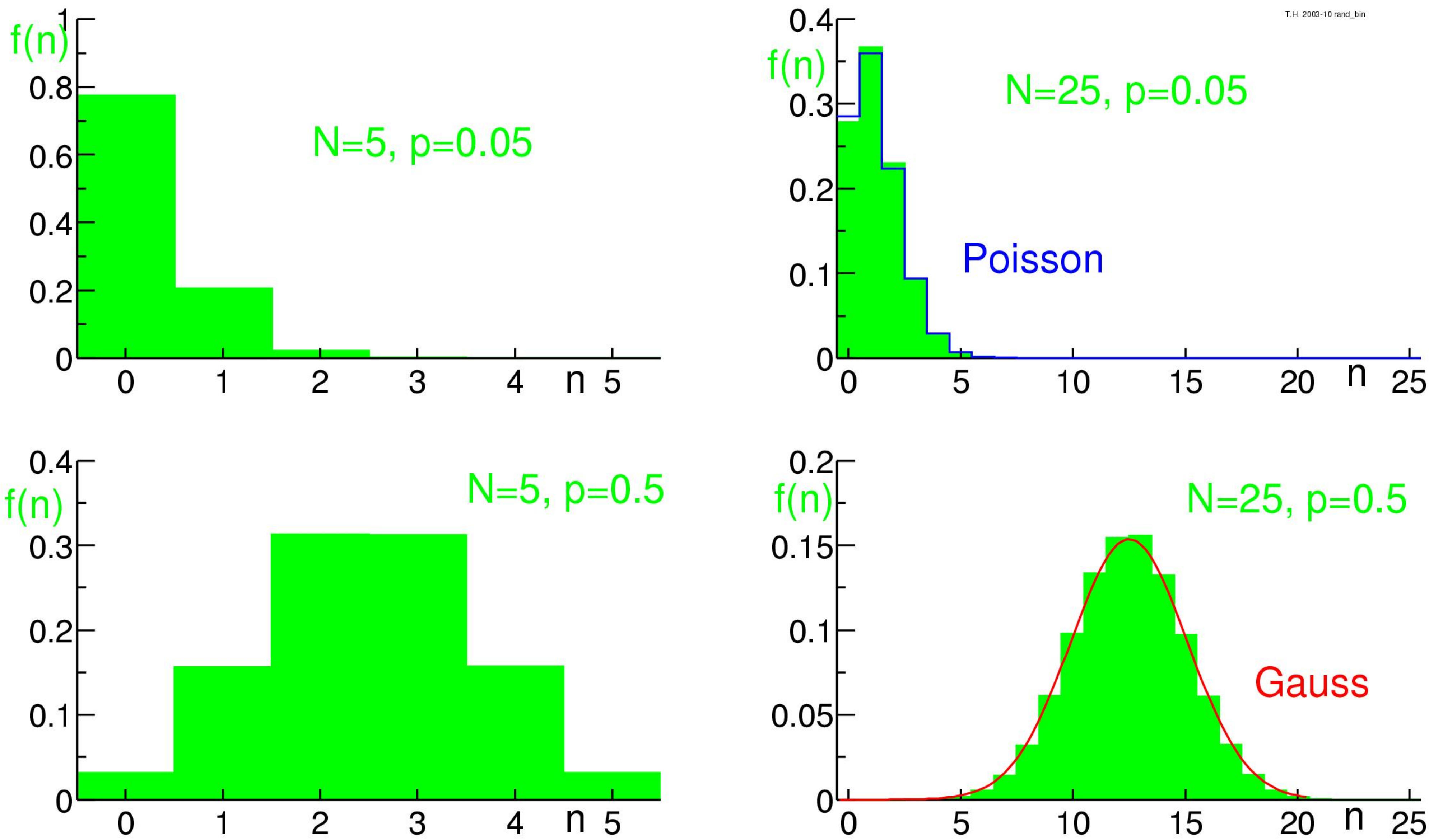
Bedeutung: Wahrscheinlichkeitsverteilung bei genau zwei möglichen Ergebnissen (Erfolg oder nicht)

Beispiel: Wahrscheinlichkeit, bei N maligem Würfeln n mal eine 6 zu erhalten. Hier normalerweise $p = 1/6$

Zusammenhang mit Poisson-Verteilung:
Für $p \to 0$ $(Np = \text{const})$ Poisson-Vert. mit $\lambda = Np$

Zusammenhang mit Gauß-Verteilung:
Für $N \to \infty$, $p \neq 0, 1$ Gauß-Verteilung mit $\mu = Np$ und $\sigma = \sqrt{Np(1-p)}$

Illustration: Binomial-Verteilung



Binomial-Fehler

Beispiel:

Ein Teilchendetektor weist von $N = 11000$ auftreffenden Teilchen $n = 9600$ nach.

Verteilung: Binomial

Estimator für Effizienz:

$$\boxed{\epsilon = \frac{n}{N} = 87.3\% \; (= p)}$$

Standardabweichung (Zahl der Treffer) = Variationsbreite von n:

$$\sigma^2 = N\,\epsilon\,(1-\epsilon)$$

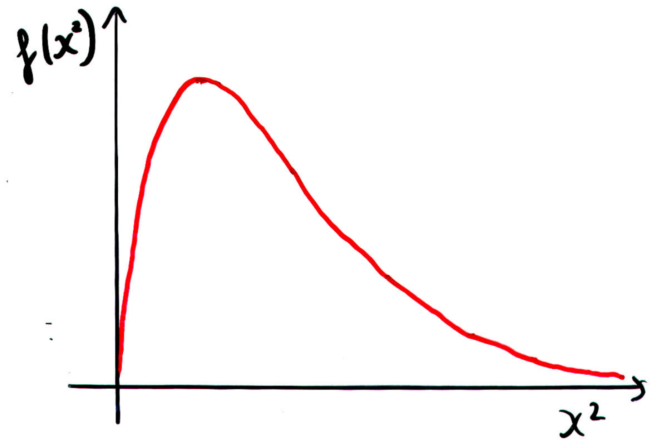
Stat. Fehler der Effizienz:

$$\boxed{\Delta\epsilon = \frac{1}{N}\sqrt{N\epsilon(1-\epsilon)} = \frac{\sqrt{n}}{N}\sqrt{1-\epsilon} = \sqrt{\frac{\epsilon(1-\epsilon)}{N}} = 0.3\%}$$

Man beachte:
- Bedingungen für Näherung durch eine Gaußverteilung erfüllt $\rightarrow$ Fehler normalverteilt.
- Fehler für ϵ und $(1-\epsilon)$ sind gleich groß!

χ^2-Verteilung

$$\boxed{f(\chi^2|N_{dof}) \sim (\chi^2/2)^{N_{dof}/2-1} \cdot e^{-\chi^2/2}} \qquad x \equiv \chi^2$$



- kontinuierlich
- 1-dimensional
- 1 Parameter: Zahl der 'Freiheitsgrade' N_{dof}

Mittelwert $= N_{dof}$ Varianz $= 2N_{dof}$

Zusammenhang mit Gauß-Zufallsvariablen:
Sind x_i Gauß-Zufallsvariable ($\mu = 0, \sigma = 1$), dann ist

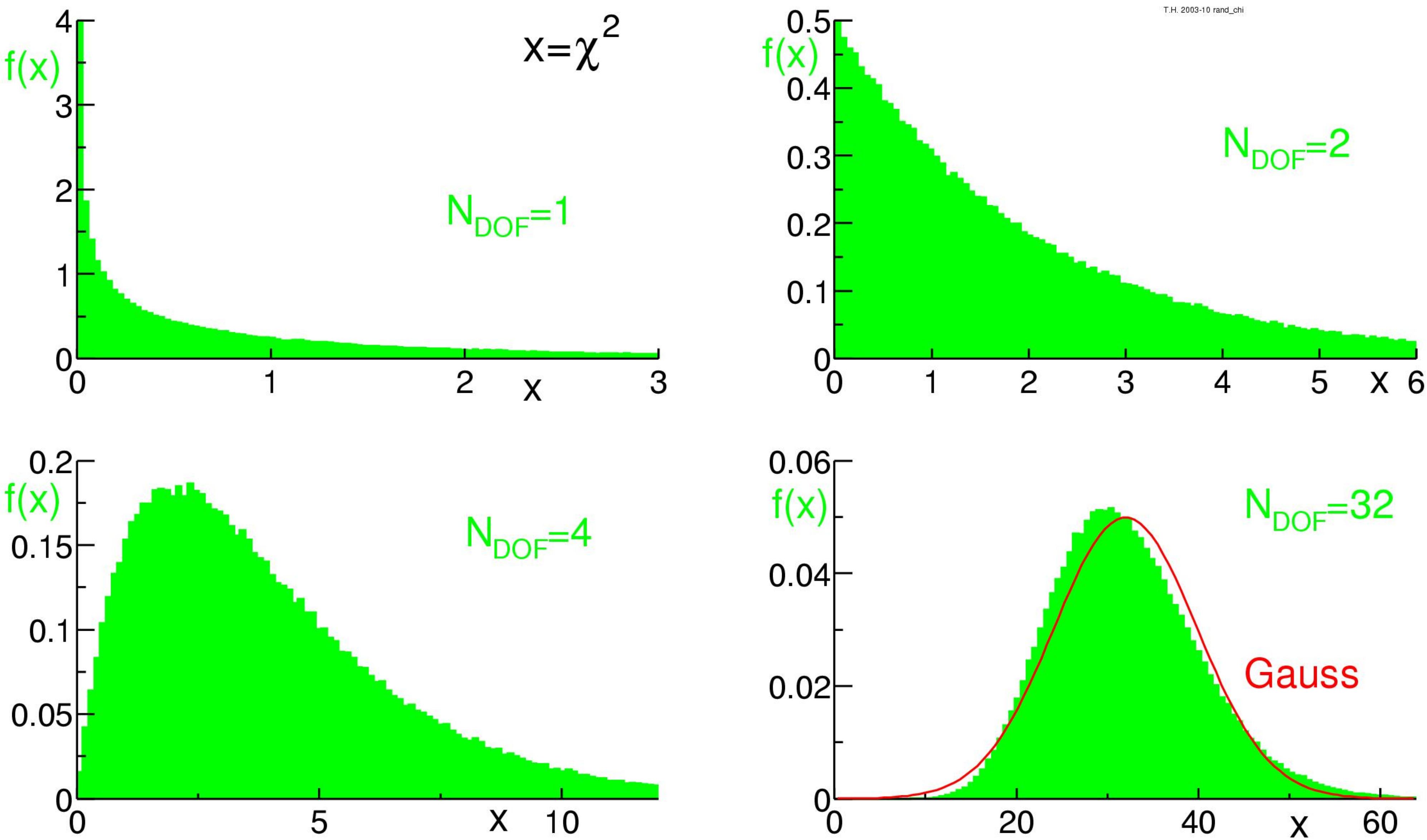
$$\chi^2 = \sum_i^{N_{dof}} x_i^2$$

Zufallsvariable mit χ^2-Verteilung für N_{dof} Freiheitsgrade

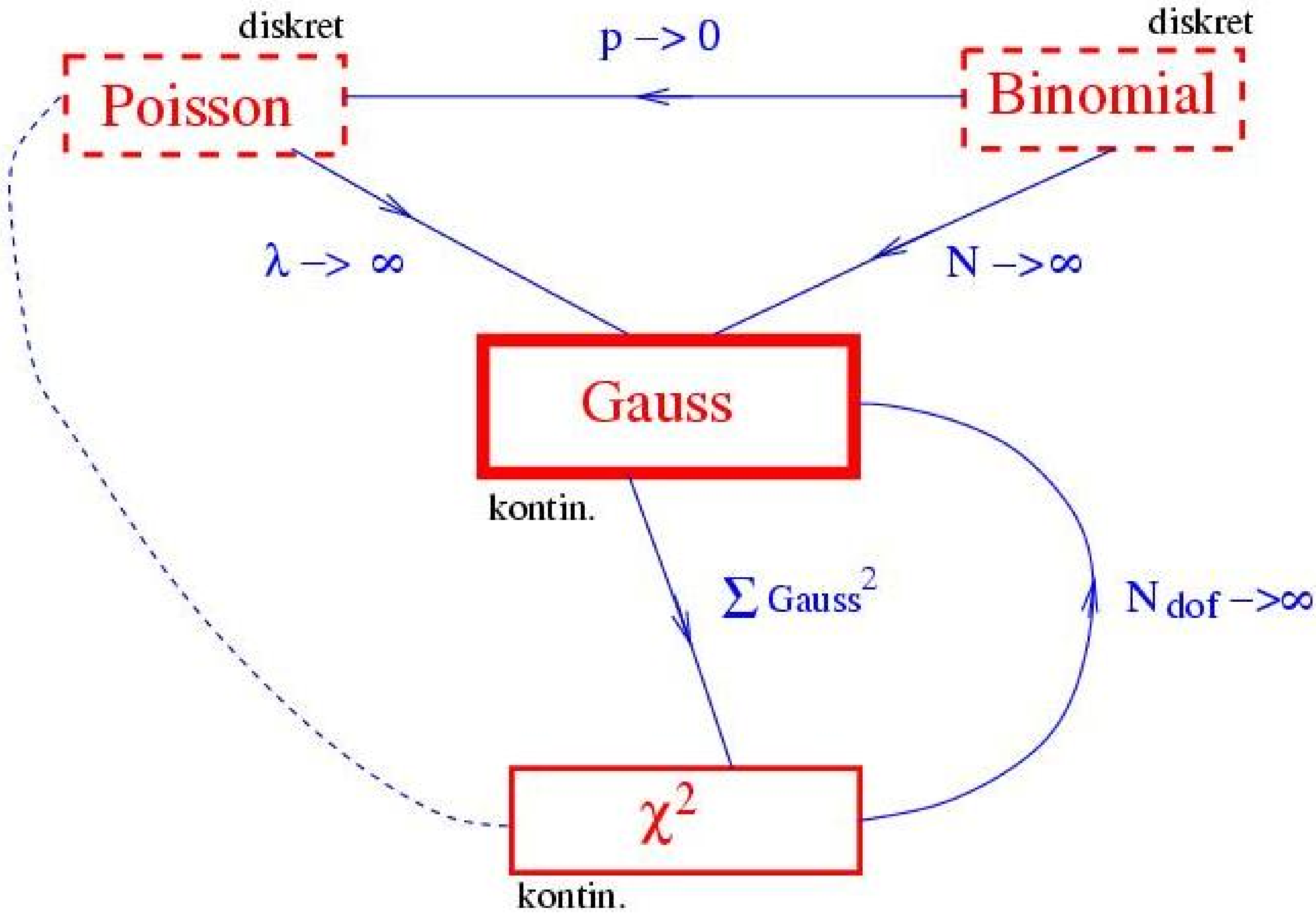
Wichtigste Anwendung: χ^2-Fit, $x_i = (\mathrm{Messung}_i - \mathrm{Theorie}_i)/\mathrm{Fehler}_i$

Zusammenhang mit Gauß-Verteilung:
Für $N_{dof} \to \infty$: Gauß-Verteilung mit $\mu = N_{dof}$ und $\sigma = \sqrt{2N_{dof}}$

Illustration: χ^2-Verteilung



Wichtige Wahrscheinlichkeitsverteilungen



Parameterbestimmung (1-dim.)

Aufgabe:

$$\left.\begin{array}{l}\bullet\text{Theorie mit unbekanntem Parameter } \boldsymbol{a} \\ \bullet\text{Experiment}\end{array}\right\} \rightarrow \text{Estimator für } \boldsymbol{a}$$

Beispiel: Radioaktiver Zerfall mit Lebensdauer $\boldsymbol{\tau} = \boldsymbol{a}$.

Methoden:

- 'Formel' für Estimator (Beispiel: $=$ Mittelwert Messdaten)
- Maximum-Likelihood-Fit: Maximiere Übereinstimmung Theorie($\boldsymbol{a}$) $\leftrightarrow$ Experiment
- $\boldsymbol{\chi^2}$-Fit: $=$ Spezialfall (auch: 'Methode der kleinsten Quadrate')

Maximum-Likelihood-Fit-Methode, 1-dim.

Bestimmung eines freien Parameters a aus Vergleich von N unabhäng. Messwerten x_i mit Wahrscheinlichkeitsdichte $f(x_i|a)$:
Maximiere Likelihood

$$\prod_i f(x_i|a)$$

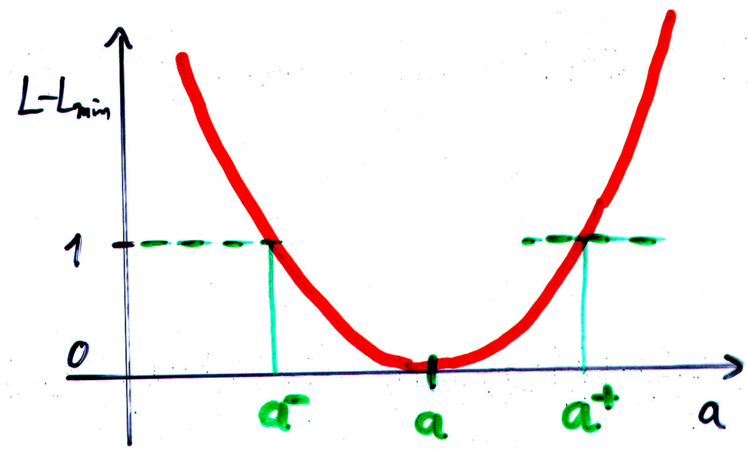
bzw. minimiere Log-Likelihood

$$\boxed{L(a) = -2 \ln \prod_{i=1}^{N} f(x_i|a) = -2 \sum_{i=1}^{N} \ln f(x_i|a)}$$

Estimator für a: $L(a) = L_{\min}$

Fehler a^+, a^-: $L(a^\pm) = L_{\min} + 1$

Fehler im allgemeinen asymmetrisch!



Nachteil: keine Information über Qualität des Fits = Anpassungrechnung
VORSICHT: Größe des Fehlers sagt NICHTS über Fit-Qualität

Beispiel: Messung: N Ereignisanzahlen n_i

Theorie: Poisson-Verteilung

Zu bestimmen: Parameter λ ($=$ Mittelwert) der Poisson-Verteilung

$$
\begin{aligned}
L(\lambda) &= -2 \sum_i \ln f(n_i|\lambda) \\
&= -2 \sum_i \ln \left[e^{-\lambda} \frac{\lambda^{n_i}}{n_i!} \right] \\
&= -2 \left[-N\lambda + \sum_i n_i \ln \lambda - \sum \ln n_i! \right] \\
&= 2N\lambda - 2 \sum_i n_i \ln \lambda + const
\end{aligned}
$$

Minimum:

$$
\frac{dL}{d\lambda} = 0 \quad \leftrightarrow \quad 2\,N - 2 \sum_i \frac{n_i}{\lambda} = 0
$$

$$
\boxed{\lambda = \frac{1}{N} \cdot \sum_i n_i} \quad = \text{arithmetischer Mittelwert !}
$$

Beispiel (konkreter Fall): Zahl der Geburten pro Tag in Stadt.

Messung: $N = 3$ Tage: $n_1 = 2, n_2 = 6, n_3 = 4$

Minimum für

$$\boxed{\lambda = \frac{1}{N}\sum_i n_i = 4.0}$$

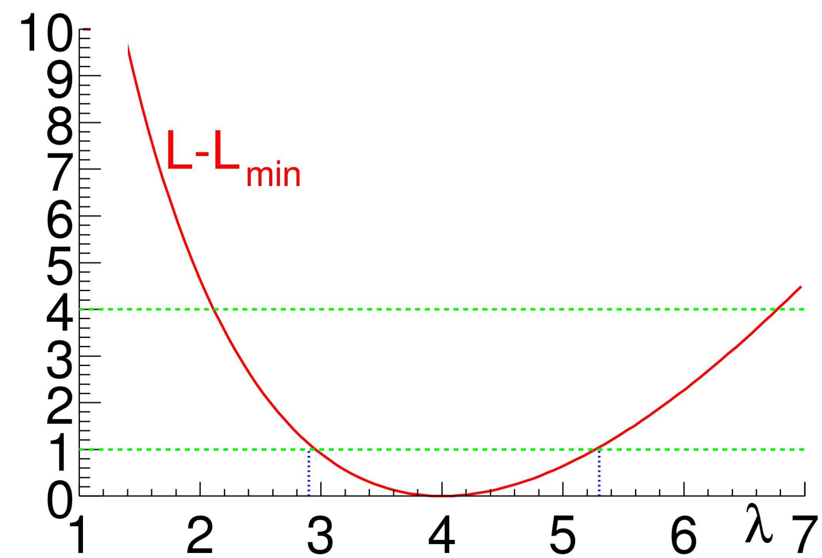
Fehlerberechnung:

$$\begin{aligned} L_{\min} &= 2\sum_i n_i - 2\sum_i n_i \ln(\frac{1}{N}\sum_i n_i) + const \\ &= 24 - 24\ln 4 + const = -9.271 + const \end{aligned}$$

68%-Fehler aus

$$1 = L(\lambda) - L_{\min} = 6\lambda - 24\ln\lambda + 9.271$$

$$\boxed{\lambda = 4.0^{+1.3}_{-1.1}}$$

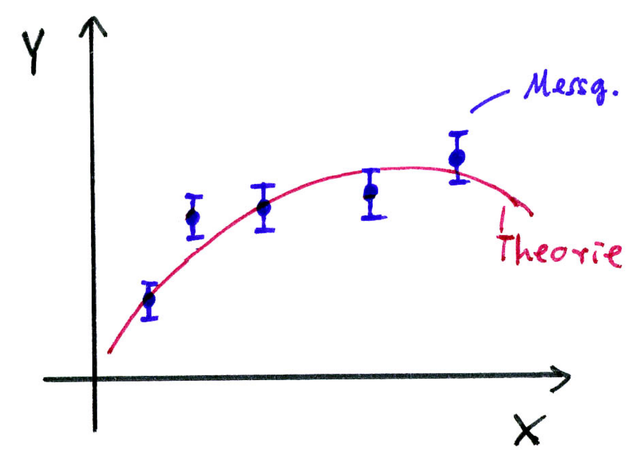


χ^2-Fit-Methode, unkorreliert, 1-dimensional

N Messungen: $x_i,\ y_i \pm \sigma_i$ (gaußisch)

KEINE Korrelationen zwischen Messwerten

Theorie: 1 freier Parameter a



A-posteriori-Wahrscheinlichkeit:

$$f(x_i, y_i|a) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_i} \cdot e^{-(y_i - t(x_i|a))^2/(2\,\sigma_i^2)}$$

Zu minimieren:

$$\boxed{L(a) \equiv \chi^2(a) = \sum_{i=1}^{N} \frac{(y_i - t(x_i|a))^2}{\sigma_i^2} = \sum \left(\frac{\text{Messung} - \text{Theorie(a)}}{\text{Fehler}}\right)^2}$$

Estimator für a: $\chi^2(a) = \chi^2_{\text{min}}$

Fehler von a:

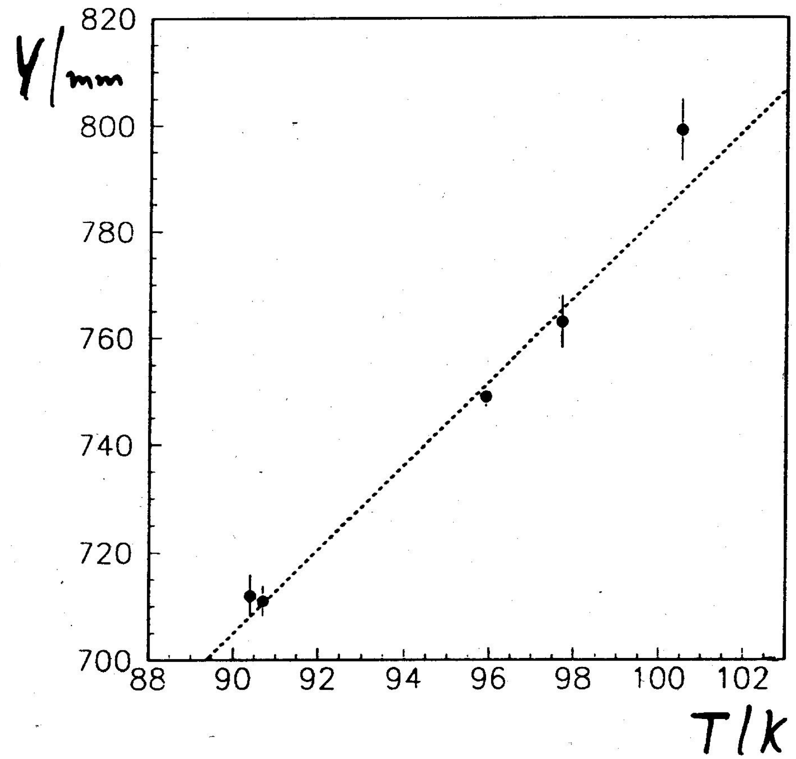
$$\chi^2(a \pm \Delta a) = \chi^2_{\text{min}} + 1$$

Qualität des Fits: Falls gut: χ^2_{min} ist χ^2-verteilt (!) mit
$[\chi^2_{min}] = N_{dof}$ = Zahl Messpunkte N minus Zahl Fit-Parameter $= N - 1 \approx N$

Beispiel: Temperaturkoeffizient, Folge 1

Unkorrelierte Daten (Gas in Kolben):

i	T_i/K	y_i/mm
1	$\mathbf{90.4}$	$\mathbf{712 \pm 4}$
2	$\mathbf{100.5}$	$\mathbf{799 \pm 6}$
3	$\mathbf{95.9}$	$\mathbf{749 \pm 2}$
4	$\mathbf{90.7}$	$\mathbf{711 \pm 3}$
5	$\mathbf{97.7}$	$\mathbf{763 \pm 5}$



Theorie: $y_i(T_i) \leftrightarrow t(T_i|a) = a \cdot T_i$

χ^2-Fit liefert:

$$\boxed{a = (7.833 \pm 0.015)\ \mathrm{mm/K}}$$

$$\chi^2/N_{dof} = 6.4/4 \approx 1 \quad \text{ok!}$$