

Gerhard Bohm, Günter Zech

Einführung in Statistik
und Messwertanalyse
für Physiker

SUB Göttingen

219 110 697



7

2006 A 12486

Verlag Deutsches Elektronen-Synchrotron

Inhaltsverzeichnis

| | |
|---|----|
| 1 Einführung | 1 |
| 1.1 Ziel der Statistik | 1 |
| 1.2 Wie definieren wir Wahrscheinlichkeit? | 3 |
| 1.3 Zufallsereignisse und -variable | 5 |
| 1.4 Mathematische Axiome und Sätze | 6 |
| 1.4.1 Axiome | 6 |
| 1.4.2 Bayes-Theorem | 7 |
| 1.5 Zuordnung von Wahrscheinlichkeiten zu Ereignissen | 9 |
| 2 Wahrscheinlichkeitsverteilungen und ihre Eigenschaften | 11 |
| 2.1 Definition | 11 |
| 2.1.1 Diskrete Verteilungen | 12 |
| 2.1.2 Kontinuierliche Verteilungen | 13 |
| 2.1.3 Empirische Verteilungen | 15 |
| 2.2 Erwartungswerte | 16 |
| 2.2.1 Definition und Eigenschaften des Erwartungswerts | 17 |
| 2.2.2 Mittelwert | 17 |
| 2.2.3 Varianz | 18 |
| 2.2.4 Schiefe | 22 |
| 2.2.5 Kurtosis (Exzess) | 22 |
| 2.2.6 Diskussion | 23 |
| 2.2.7 Beispiele | 25 |
| 2.3 Momente und charakteristische Funktion | 29 |
| 2.3.1 Momente | 29 |
| 2.3.2 Charakteristische Funktion | 30 |
| 2.3.3 Beispiele | 33 |
| 2.4 Variablentransformationen | 36 |
| 2.4.1 Berechnung der transformierten Dichte | 36 |
| 2.4.2 Berechnung der passenden Transformation | 40 |
| 2.5 Multivariate Wahrscheinlichkeitsdichten | 41 |
| 2.5.1 Wahrscheinlichkeitsdichte von zwei Variablen | 41 |

| | | |
|--------|--|----|
| 2.5.2 | Momente | 44 |
| 2.5.3 | Variablentransformation | 46 |
| 2.5.4 | Variablenreduktion | 47 |
| 2.5.5 | Berechnung der passenden Transformation | 50 |
| 2.5.6 | Verteilungen von mehr als zwei Variablen | 51 |
| 2.5.7 | Unabhängige, identisch verteilte Variable | 52 |
| 2.6 | Einige wichtige Verteilungen | 52 |
| 2.6.1 | Binomialverteilung | 52 |
| 2.6.2 | Multinomialverteilung | 54 |
| 2.6.3 | Poisson-Verteilung | 55 |
| 2.6.4 | Gleichverteilung | 61 |
| 2.6.5 | Normalverteilung | 62 |
| 2.6.6 | Exponentialverteilung | 67 |
| 2.6.7 | χ^2 -Verteilung | 68 |
| 2.6.8 | Gammaverteilung | 70 |
| 2.6.9 | Cauchy-Verteilung | 71 |
| 2.6.10 | Extremwertverteilung | 72 |
| 3 | Messfehler | 75 |
| 3.1 | Allgemeine Überlegungen | 75 |
| 3.1.1 | Bedeutung der Fehlerbestimmung | 75 |
| 3.1.2 | Überprüfung von zugeordneten Fehlern | 76 |
| 3.1.3 | Angabe von Fehlern | 76 |
| 3.1.4 | Definition des Messwertes und seiner Unsicherheit | 77 |
| 3.2 | Bestimmung der Messunsicherheit | 78 |
| 3.2.1 | Statistische Prozesse mit vorgegebener Form der Verteilung | 78 |
| 3.2.2 | Ablesen eines Messgeräts | 79 |
| 3.2.3 | Empirische Ermittlung aus einer Messreihe | 79 |
| 3.2.4 | Fehler der empirischen Varianz | 80 |
| 3.3 | Systematische Fehler | 81 |
| 3.4 | Lineare Fehlerfortpflanzung | 83 |
| 3.4.1 | Mittelung über mehrere Messwerte | 83 |
| 3.4.2 | Funktionelle Abhängigkeit von einer Messgröße | 84 |
| 3.4.3 | Fehler einer Funktion mehrerer Messgrößen | 85 |
| 3.4.4 | Mehrere Funktionen mehrerer Messgrößen | 87 |
| 3.4.5 | Beispiele | 88 |
| 3.4.6 | Verfälschung (Bias) einer Messung | 91 |
| 3.5 | Konfidenzintervalle | 92 |
| 4 | Monte-Carlo-Simulation | 95 |
| 4.1 | Einleitung | 95 |
| 4.2 | Erzeugung einfacher statistischer Verteilungen | 97 |
| 4.2.1 | Pseudozufallszahlen im Computer | 97 |

| | | |
|--------|--|-----|
| 4.2.2 | Erzeugungen einfacher Verteilungen durch Variablentransformationen | 99 |
| 4.2.3 | Einfache Wegwerfmethode zur Erzeugung von Verteilungen | 103 |
| 4.2.4 | Majorantenmethode | 104 |
| 4.2.5 | Behandlung additiver Wahrscheinlichkeitsdichten | 107 |
| 4.2.6 | Wichtung der Ereignisse | 108 |
| 4.2.7 | Migrationsmethode | 109 |
| 4.3 | Lösung von Integralen | 112 |
| 4.3.1 | Primitive Wegwerfmethode | 112 |
| 4.3.2 | Verbesserte Wegwerfmethode | 114 |
| 4.3.3 | Wichtungsmethode | 116 |
| 4.3.4 | Rückführung auf Erwartungswerte | 118 |
| 4.3.5 | Intervallbildung | 118 |
| 4.4 | Allgemeine Bemerkungen | 118 |
| 5 | Parameterschätzung I | 121 |
| 5.1 | Einführung | 121 |
| 5.2 | Schätzung bei gegebener Priorwahrscheinlichkeit | 124 |
| 5.2.1 | Diskrete Hypothesen | 124 |
| 5.2.2 | Kontinuierliche Parameter | 126 |
| 5.3 | Definition und anschauliche Bedeutung der Likelihood | 127 |
| 5.4 | Das Likelihoodverhältnis - Beispiele | 131 |
| 5.5 | Die Maximum-Likelihood-Methode zur Parameterbestimmung | 134 |
| 5.5.1 | Das Rezept bei einen unbekannten Parameter | 135 |
| 5.5.2 | Beispiele | 136 |
| 5.5.3 | Likelihoodanpassung für mehrere Parameter | 139 |
| 5.5.4 | Kombination von Messungen | 140 |
| 5.5.5 | Likelihood für Histogramme | 141 |
| 5.5.6 | Erweiterte Likelihood | 144 |
| 5.5.7 | Weitere Beispiele | 144 |
| 5.5.8 | Kurvenanpassung an Messpunkte | 146 |
| 5.5.9 | Komplizierte Likelihoodfunktionen | 147 |
| 5.5.10 | Vergleich von Beobachtungen mit einer Monte-Carlo-Simulation | 149 |
| 5.6 | Berücksichtigung von Zwangsbedingungen | 153 |
| 5.7 | Reduktion des Variablenraums | 155 |
| 5.7.1 | Das Problem | 155 |
| 5.7.2 | Zwei Variable und ein linearer Parameter | 155 |
| 5.7.3 | Verallgemeinerung auf mehrere Variable und Parameter | 156 |
| 5.7.4 | Nichtlineare Parameter | 158 |
| 5.7.5 | Methode des approximierten Likelihoodschätzers | 158 |
| 5.8 | Eliminieren von Störparametern | 161 |
| 5.8.1 | Faktorisierung der Likelihood | 162 |
| 5.8.2 | Parametertransformation, Restrukturierung | 162 |

XII Inhaltsverzeichnis

| | | |
|----------|--|------------|
| 5.8.3 | Formale Restrukturierung | 164 |
| 5.8.4 | Profillikelihood | 165 |
| 5.8.5 | Integration über den Störparameter | 166 |
| 5.8.6 | Explizite Angabe der Abhängigkeit vom Störparameter . | 166 |
| 5.8.7 | Empfehlung | 167 |
| 6 | Parameterschätzung II | 169 |
| 6.1 | Likelihood und Information | 169 |
| 6.1.1 | Erschöpfende Statistiken | 169 |
| 6.1.2 | Das Konditionierungsprinzip | 171 |
| 6.1.3 | Das Likelihoodprinzip | 172 |
| 6.1.4 | Bias von Maximum-Likelihood-Ergebnissen | 173 |
| 6.1.5 | Anwendung von Abbruchregeln | 176 |
| 6.2 | Weitere Methoden der Parameteranpassung | 178 |
| 6.2.1 | Momentenverfahren | 178 |
| 6.2.2 | Methode der kleinsten Quadrate | 180 |
| 6.2.3 | Lineare Regression | 182 |
| 6.3 | Zusammenfassung und Vergleich der Parameterschätzverfahren | 183 |
| 7 | Intervallschätzung | 185 |
| 7.1 | Einführung | 185 |
| 7.2 | Fehlerintervalle | 186 |
| 7.2.1 | Parabolische Näherung | 187 |
| 7.2.2 | Allgemeiner Fall | 188 |
| 7.3 | Einseitige Grenzen | 193 |
| 7.3.1 | Allgemeiner Fall | 193 |
| 7.3.2 | Obere Poisson-Grenzen, einfacher Fall | 194 |
| 7.3.3 | Poisson-Grenzen bei Daten mit Untergrund | 195 |
| 7.3.4 | Unphysische Parameterwerte | 198 |
| 8 | Entfaltung | 199 |
| 8.1 | Einführung | 199 |
| 8.1.1 | Das Problem | 199 |
| 8.1.2 | Entfaltung durch Matrixinversion | 202 |
| 8.1.3 | Die Transfermatrix | 204 |
| 8.1.4 | Regularisierung | 205 |
| 8.2 | Entfaltung von Histogrammen | 206 |
| 8.2.1 | Die Likelihoodfunktion | 206 |
| 8.2.2 | Stärke der Regularisierung | 207 |
| 8.2.3 | Überlegungen zum Binning | 207 |
| 8.2.4 | Wahl der Regularisierungsfunktion | 208 |
| 8.2.5 | Iterative Entfaltung | 209 |
| 8.2.6 | Regularisierung der Transfermatrix | 212 |
| 8.3 | Binningfreie Verfahren | 214 |
| 8.3.1 | Iterative Entfaltung | 214 |

| | | |
|-----------|--|------------|
| 8.3.2 | Migrationsverfahren | 214 |
| 8.4 | Vergleich der Verfahren | 216 |
| 8.5 | Fehlerabschätzung für die entfaltete Verteilung | 217 |
| 8.6 | Entfaltung von Spektren hoher Statistik | 220 |
| 8.6.1 | Entropieverfahren | 220 |
| 9 | Signifikanztests | 223 |
| 9.1 | Einführung | 223 |
| 9.2 | Der χ^2 -Test in verallgemeinerter Form | 227 |
| 9.2.1 | Die Idee des χ^2 -Vergleichs | 227 |
| 9.2.2 | Die χ^2 -Verteilung und der χ^2 -Test | 228 |
| 9.2.3 | Verallgemeinerung auf beliebige Messwerte | 230 |
| 9.2.4 | Die Wahl des Binning | 231 |
| 9.2.5 | Der χ^2 -Test bei Anpassung von Parametern | 233 |
| 9.2.6 | χ^2 -Test bei kleinen Proben | 234 |
| 9.3 | Der Likelihoodverhältnistest für Histogramme | 234 |
| 9.4 | Der Kolmogorov-Smirnov-Test | 235 |
| 9.5 | Weitere verteilungsfreie Tests ohne Binning | 236 |
| 9.5.1 | Tests der Kolmogorov-Smirnov und Cramer-v.Mises-Familien | 237 |
| 9.5.2 | Der Neymansche Glattheitstest | 238 |
| 9.5.3 | Der Energietest | 239 |
| 9.5.4 | Der L_2 -Test | 242 |
| 9.5.5 | Problemangepasste Tests | 242 |
| 9.6 | Vergleich unterschiedlicher Testverfahren | 244 |
| 9.6.1 | Univariate Verteilungen | 244 |
| 9.6.2 | Multivariate Verteilungen | 245 |
| 9.7 | Vergleich von Proben | 246 |
| 9.7.1 | Die Problemstellung | 246 |
| 9.7.2 | χ^2 - und Kolmogorov-Smirnov-Test | 247 |
| 9.7.3 | Der Energietest | 247 |
| 10 | Statistisches Lernen | 251 |
| 10.1 | Einführung | 251 |
| 10.2 | Funktionsnäherung | 253 |
| 10.2.1 | Wichtungsmethoden | 254 |
| 10.2.2 | Orthogonalfunktionen | 255 |
| 10.2.3 | Wavelets | 256 |
| 10.2.4 | Splineanpassung | 258 |
| 10.2.5 | Anpassung mit allgemeinen Funktionen | 261 |
| 10.2.6 | Beispiel | 261 |
| 10.3 | Hauptkomponentenanalyse, Faktorenanalyse | 263 |
| 10.4 | Klassifizierung | 268 |
| 10.4.1 | Diskriminanzanalyse | 269 |
| 10.4.2 | Neuronale Netze | 270 |

XIV Inhaltsverzeichnis

| | |
|---|------------|
| 10.4.3 Wichtungsmethoden | 277 |
| 10.4.4 Entscheidungsbäume | 281 |
| 10.4.5 Vergleich der Methoden | 284 |
| 11 Hilfsmethoden | 287 |
| 11.1 Dichteschätzung | 287 |
| 11.2 Bootstrap | 289 |
| 11.2.1 Einführung | 289 |
| 11.2.2 Definitionen und Varianzschätzung | 290 |
| 11.2.3 Genauigkeit der Fehlerschätzung | 291 |
| 11.2.4 Konfidenzintervalle | 293 |
| 11.2.5 Vergleich von zwei Proben | 293 |
| 12 Anhang | 295 |
| 12.1 Allgemeine Sätze, Aspekte der Häufigkeitsstatistik | 295 |
| 12.1.1 Allgemeine Eigenschaften von Punktschätzungen | 295 |
| 12.1.2 Klassische Konfidenzintervalle | 302 |
| 12.2 P-Werte für EDF-Statistiken | 307 |
| 12.3 Extremwertsuche | 308 |
| 12.3.1 Monte-Carlo-Suche | 310 |
| 12.3.2 Simplexverfahren | 310 |
| 12.3.3 Parabelmethode | 310 |
| 12.3.4 Gradientenabstiegsverfahren | 311 |
| 12.3.5 Stochastische Elemente bei der Minimumssuche | 313 |
| 12.4 Formeln für B-Splinefunktionen | 314 |
| 12.4.1 Lineare B-Splines | 314 |
| 12.4.2 Quadratische B-Splines | 315 |
| 12.4.3 Kubische B-Splines | 315 |
| Sachverzeichnis | 323 |