A Statistik

Einführung

Hier sollen in sehr knapper, aber in sich abgeschlossener Form die wichtigsten Konzepte der Statistik wiederholt werden, die im Praktikum benötigt werden. Ausführlicher ist der Stoff in der Vorlesung zur Datenverarbeitung behandelt worden.

Messunsicherheiten

Im Praktikum sollen alle Messergebnisse zusammen mit ihrer Unsicherheit angegeben werden, z.B.:

$$R = 99.82 \Omega \pm 0.10 \Omega$$
.

Die Unsicherheit gibt dabei an, mit welcher Genauigkeit eine Größe im Praktikum mit den zur Verfügung stehenden Mitteln bestimmt werden konnte. Sie spiegelt die Qualität und die Präzision einer Messung wider, vorausgesetzt dass sie korrekt bestimmt wurde. Bei der Angabe des Messergebnisses sollen nur die im Rahmen der Genauigkeit signifikanten Stellen angegeben werden. (Am besten, 2 signifikante Stellen angeben, um Rundungsfehler klein zu halten.)

A.1 Wahrscheinlichkeit

A.1.1 Grundbegriffe der Wahrscheinlichkeitsrechnung

Wahrscheinlichkeit

Wir betrachten eine Menge S und nennen sie den Parameterraum. Jeder Untermenge A von S weisen wir eine reelle Zahl P(A) zu, die wir Wahrscheinlichkeit nennen.

Kolmogorov Axiome (1933)

- 1. Für jede Untermenge A in S: P(A) > 0.
- 2. Für alle disjunkten Untermengen A and B: $P(A \cup B) = P(A) + P(B)$.
- 3. P(S) = 1.

Wir möchten mit reellen Zahlen statt mit Elementen von Mengen rechnen, deshalb definieren wir:

Definition 1. Eine Abbildung $X: S \to \mathbb{R}^n$ heißt Zufallsgröße.

Bedingte Wahrscheinlichkeit

Definition 2. Für zwei Untermengen A und B des Parameterraums ist die bedingte Wahrscheinlichkeit P(A|B) definiert durch

$$P(A|B) = \frac{P(A \cap B)}{P(B)}.$$

Die zwei Untermengen heißen unabhängig, wenn $P(A \cap B) = P(A) P(B)$.

Wegen $A \cap B = B \cap A$, $P(B \cap A) = P(A|B)P(B) = P(B|A)P(A)$, und so kommen wir zu dem

Theorem 3 (Satz von Bayes).

$$P(A|B) = \frac{P(B|A)P(A)}{P(B)}.$$

Interpretation von Wahrscheinlichkeiten

Frequentistische Interpretation

$$P(A) = \lim_{n \to \infty} \frac{\text{Anzahl der Vorkommnisse von Ausgang } A \text{ in } n \text{ Messungen}}{n}$$

- Zugrunde liegende Annahme: Das Zufallsexperiment kann prinzipiell beliebig oft wiederholt werden.
- Beispiel: Messung der Kapazität eines Kondensators.
- Problematischer: Aussagen über Zufallsexperimente, die nur ein einziges Mal durchgeführt werden können, z.B.: "Morgen wird es regnen."

Wahrscheinlichkeitsdichte

Betrachten wir einen Parameterraum S und eine Zufallsgröße $X: S \to \mathbb{R}$.

Definition 4. Die Wahrscheinlichkeitsdichte von X ist definiert als

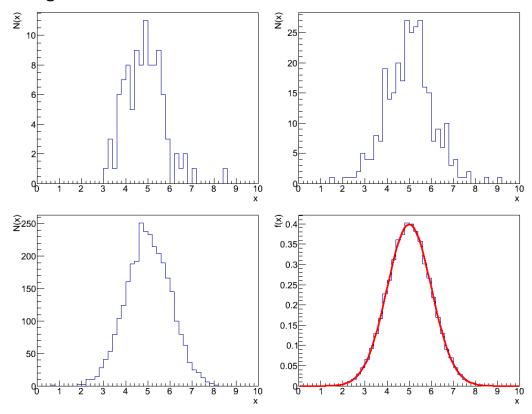
$$f(x) dx = P(X \text{ ergibt Wert in } [x, x + dx]).$$

f(x) ist normiert, so dass

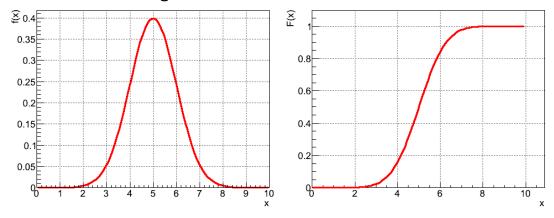
$$\int_{S} f(x) \, dx = 1.$$

Die Definition gilt genauso für kontinuierliche wie für diskrete Zufallsgrößen.

Histogramme



Kumulative Verteilung



Definition 5. Die kumulative Verteilung F(x) zu einer Wahrscheinlichkeitsdichte f(x) ist definiert durch

$$F(x) = \int_{-\infty}^{x} f(x') \, dx'.$$

Erwartungswert und Varianz

Wir betrachten eine 1-D Zufallsgröße X. Um Mittelwert und Streuung von X zu charakterisieren, definieren wir:

Definition 6. Der *Erwartungswert* oder *Mittelwert* von X ist gegeben durch

$$E[X] = \int_{-\infty}^{\infty} x f(x) \, dx = \mu.$$

Die Varianz von X ist gegeben durch

$$V[X] = \int_{-\infty}^{\infty} (x - \mu)^2 f(x) dx = \sigma^2.$$

Die Standardabweichung von X ist gegeben durch $\sigma = \sqrt{V[X]}$. Diese Größe ist sinnvoll, weil sie dieselben Einheiten hat wie x. Beachte, dass $V[X] = (E[X^2]) - \mu^2$.

A.1.2 Wichtige Wahrscheinlichkeitsdichten

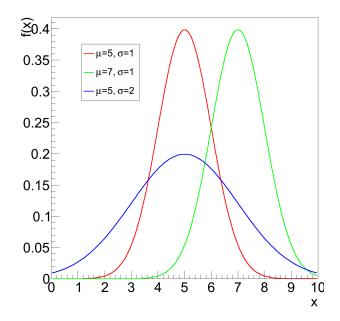
Gauß-Verteilung

Definition 7.

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

- $E[X] = \mu$
- $V[X] = \sigma^2$

Die Wichtigkeit der Gauß-Verteilung liegt im zentralen Grenzwertsatz begründet: Die Summe von n unabhängigen kontinuierlichen Zufallsgrößen mit Mittelwerten μ_i und endlichen Varianzen σ_i^2 nähert sich im Grenzfall $n \to \infty$ einer Gauß-Verteilung mit Mittelwert $\mu = \sum_i \mu_i$ und Varianz $\sigma^2 = \sum_i \sigma_i^2$.



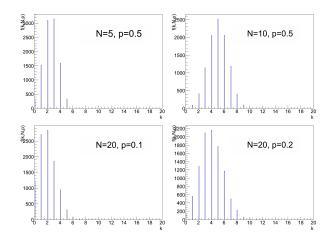
Binomial-Verteilung

Betrachte eine Serie von N unabhängigen Versuchen oder Beobachtungen, von denen jede zwei Mögliche Ausgänge hat ('1' oder '0'), mit fester Wahrscheinlichkeit p für '1' (Bernoulli-Experiment). Die Wahrscheinlichkeit, k-mal '1' in N Versuchen zu messen, ist:

Definition 8.

$$f(k; N,p) = \binom{N}{k} p^k (1-p)^{N-k}$$
 with $\binom{N}{k} = \frac{N!}{k!(N-k)!}$.

- E[X] = Np
- V[X] = Np(1-p)



Poisson-Verteilung

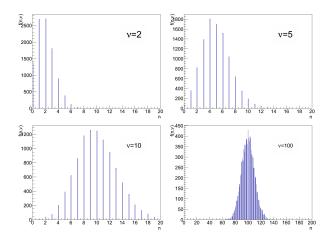
Betrachte die Binomial-Verteilung im Grenzfall, dass N sehr groß wird, p sehr klein wird, aber das Produkt np konstant gleich einem endlichen Wert ν bleibt. Dann nähert sich die Binomial-Verteilung einer Poisson-Verteilung an:

Definition 9.

$$f(k;\nu) = \frac{\nu^k}{k!} e^{-\nu}$$

- $E[X] = \nu$
- $V[X] = \nu$

Beispiel: Zählexperiment. Für große ν nähert sich die Poisson-Verteilung einer Gauß-Verteilung mit Mittelwert ν und Varianz ν an.



Gleichverteilung

Definition 10. Die *Gleichverteilung* ist gegeben durch

$$f(x; \alpha, \beta) = \begin{cases} \frac{1}{\beta - \alpha} & \alpha \le x \le \beta \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$$

- $E[X] = \frac{1}{2}(\alpha + \beta)$
- $V[X] = \frac{1}{12}(\beta \alpha)^2$

Beispiele:

- Digitalisierung im Analog-Digital-Wandler (ADC)
- Maßband (Intervall zwischen zwei Skalenstrichen)

A.1.3 Mehrere Zufallsgrößen

Gemeinsame Wahrscheinlichkeitsdichte und Kovarianz

Definition 11. Seien X und Y zwei Zufallsgrößen. Die gemeinsame Wahrscheinlichkeitsdichte f(x,y) ist definiert als

$$P(X(\omega) \in [x, x + dx] \land Y(\omega) \in [y, y + dy]) = f(x, y) dx dy$$

für alle $\omega \in S$.

Definition 12. Die Kovarianz von zwei Zufallsgrößen X and Y ist definiert als

$$V_{xy} = E[(x - \mu_x)(y - \mu_y)] = E[xy] - \mu_x \mu_y$$

=
$$\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} xy f(x,y) dx dy - \mu_x \mu_y.$$

Korrelationskoeffizient

Ein dimensionsloses Maß für die Korrelation zwischen zwei Zufallsgrößen ist gegeben durch den Korrelationskoeffizienten

$$\rho_{xy} = \frac{V_{xy}}{\sigma_x \sigma_y}.$$

Man kann zeigen, dass $-1 \le \rho_{xy} \le 1$. Per Konstruktion ist die Kovarianzmatrix V_{ab} symmetrisch in a und b, und die Diagonalelemente $V_{aa} = \sigma_a^2$ (d.h. die Varianzen) sind positiv.

Rechnen mit Erwartungswerten

Aus der Definition des Erwartungswert folgt:

• Für die Multiplikation einer Zufallsgröße mit einer Konstanten a:

$$E[aX] = aE[X]$$
$$V[aX] = a^2V[X]$$

• Für die Summe zweier Zufallsgrößen X und Y:

$$E[X + Y] = E[X] + E[Y]$$
$$V[X + Y] = V[X] + V[Y]$$

wobei die letzte Beziehung nur gilt, wenn X and Y unabhängig sind, d.h. die gemeinsame Wahrscheinlichkeitsdichte faktorisiert:

$$f(x,y) dx dy = f_x(x) f_y(y) dx dy.$$

A.2 Statistische Messunsicherheiten

A.2.1 Parameterschätzung

Einführung in die Parameterschätzung

Die Parameter einer Wahrscheinlichkeitsdichte sind Konstanten, die ihre Form beschreiben, z.B. θ in

$$f(x; \theta) = \frac{1}{\theta} e^{-x/\theta}.$$

Um den unbekannten Parameter θ zu bestimmen, benutzen wir eine *Stichprobe* von Beobachtungswerten $\boldsymbol{x}=(x_1,\ldots,x_n)$, die entsprechend der Wahrscheinlichkeitsdichte verteilt sind. Die Aufgabe besteht nun darin, eine Funktion der Daten zu finden, um den gesuchten Parameter zu schätzen:

$$\hat{ heta}(oldsymbol{x})$$

 $\hat{\theta}(\boldsymbol{x})$ wird Schätzgröße für den unbekannten Parameter θ genannt. Im Allgemeinen heißt eine Funktion, die Beobachtungsdaten (x_1, \ldots, x_n) eine Zahl zuordnet, eine Testgröße.

Beispiel: Schätzgrößen für Mittelwert und Varianz

Wir wollen eine Schätzgröße für den Mittelwert μ einer Wahrscheinlichkeitsdichte mit völlig unbekannter Form angeben, basierend auf der Stichprobe (x_1, \ldots, x_n) . Wir benutzen das arithmetische Mittel

$$\bar{x} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} x_i.$$

Der Erwartungswert von \bar{x} ergibt sich zu

$$E[\bar{x}] = E\left[\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}x_i\right] = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}E[x_i] = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\mu = \mu,$$

was bedeutet, dass \bar{x} in der Tat eine erwartungstreue Schätzgröße für μ ist. Man kann zeigen, dass die *empirische Varianz*

$$s^{2} = \frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^{n} (x_{i} - \bar{x})^{2}$$

eine erwartungstreue Schätzgröße für die unbekannte Varianz ist: $E[s^2] = \sigma^2$.

Schätzgröße für die Kovarianz

Ähnlich kann gezeigt werden, dass die Größe

$$\hat{V}_{xy} = \frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^{n} (x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y}) = \frac{n}{n-1} (\bar{x}\bar{y} - \bar{x}\bar{y})$$

eine erwartungstreue Schätzgröße für die Kovarianz V_{xy} zweier Zufallsgrößen X und Y mit unbekanntem Mittelwert ist.

Varianz des arithmetischen Mittels

Für die Varianz des arithmetischen Mittels finden wir

$$V[\bar{x}] = E[\bar{x}^2] - (E[\bar{x}])^2 = E\left[\left(\frac{1}{n}\sum_{i=1}^n x_i\right) \left(\frac{1}{n}\sum_{j=1}^n x_j\right)\right] - \mu^2$$

$$= \frac{1}{n^2}\sum_{i,j=1}^n E[x_i x_j] - \mu^2$$

$$= \frac{1}{n^2}[(n^2 - n)\mu^2 + n(\mu^2 + \sigma^2)] - \mu^2 = \frac{\sigma^2}{n},$$

wo wir benutzt haben, dass $E[x_i x_j] = \mu^2$ für $i \neq j$ und $E[x_i x_j] = \mu^2 + \sigma^2$ für i = j.

Dieses Ergebnis bedeutet, dass die Unsicherheit des Mittelwerts bei n Messungen von x gleich der Standardabweichung von f(x) ist, geteilt durch \sqrt{n} .

A.2.2 Definition der statistischen Messunsicherheit

Standardabweichung als statistischer Fehler

Ein bestimmter Parameter soll aus einer Menge von n wiederholten Messungen bestimmt werden. Wir sind daran interessiert, ein Intervall zu finden, das den wahren Wert der zu messenden Größe mit einer Wahrscheinlichkeit von 68% enthält. Motivation: Bei der Gauß-Verteilung gilt:

$$\int_{\mu-\sigma}^{\mu+\sigma} \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \exp\left(-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}\right) dx \approx 0.68.$$

Wenn wir die Messung eines (wahren aber unbekannten) Parameters θ_t mehrfach wiederholen und dabei Messwerte (t_1, \ldots, t_n) erhalten, können wir das arithmetische Mittel $\theta = (1/n) \sum t_i$ und die empirische Standardabweichung σ_{θ} berechnen. Für n Wiederholungen wird die Unsicherheit auf das arithmetische Mittel, das aus allen Messungen berechnet wird, σ_{θ}/\sqrt{n} betragen. Wir können dann

$$\theta \pm \sigma_{\theta}/\sqrt{n}$$

als Ergebnis der Messung angeben. Aber: Welcher Anteil der Messungen wird im

Mittel einen Wert im Intervall $[\theta - \sigma_{\theta}/\sqrt{n}, \theta + \sigma_{\theta}/\sqrt{n}]$ ergeben? Es stellt sich heraus, dass dieses simple Verfahren streng genommen nur für Gauß-verteilte Messgrößen gilt.

A.2.3 Fehlerfortpflanzung

Fehlerfortpflanzung

Wir betrachten eine Menge von n Zufallsgrößen $\boldsymbol{x}=(x_1,\ldots,x_n)$, die gemäß einer gewissen gemeinsamen Wahrscheinlichkeitsdichte $f(\boldsymbol{x})$ verteit seien. Die Wahrscheinlichkeitsdichte selbst ist unbekannt, aber die Mittelwerte der $x_i, \boldsymbol{\mu}=(\mu_1,\ldots,\mu_n)$ sowie die Kovarianzmatrix V_{ij} seien bekannt oder abgeschätzt. Unser Ziel ist die Bestimmung der Varianz V[y] einer Funktion $y(\boldsymbol{x})$ der n Variablen. (Beispiel: Bestimmung eines Ohmschen Widerstands aus Messung von Strom und Spannung über R=U/I.) Dazu entwickeln wir $y(\boldsymbol{x})$ bis zur ersten Ordnung um die Mittelwerte der x_i :

$$y(\boldsymbol{x}) \approx y(\boldsymbol{\mu}) + \sum_{i=1}^{n} \left[\frac{\partial y}{\partial x_i} \right]_{\boldsymbol{x} = \boldsymbol{\mu}} (x_i - \mu_i).$$

Wegen $E[x_i - \mu_i] = 0$, ist der Erwartungswert von y

$$E[y(\boldsymbol{x})] \approx y(\boldsymbol{\mu}).$$

Der Erwartungswert von y^2 ist

$$E[y^{2}(\boldsymbol{x})] \approx y^{2}(\boldsymbol{\mu}) + 2y(\boldsymbol{\mu}) \cdot \sum_{i=1}^{n} \left[\frac{\partial y}{\partial x_{i}} \right]_{\boldsymbol{x} = \boldsymbol{\mu}} E[x_{i} - \mu_{i}]$$

$$+ E\left[\left(\sum_{i=1}^{n} \left[\frac{\partial y}{\partial x_{i}} \right]_{\boldsymbol{x} = \boldsymbol{\mu}} (x_{i} - \mu_{i}) \right) \left(\sum_{j=1}^{n} \left[\frac{\partial y}{\partial x_{j}} \right]_{\boldsymbol{x} = \boldsymbol{\mu}} (x_{j} - \mu_{j}) \right) \right]$$

$$= y^{2}(\boldsymbol{\mu}) + \sum_{i,j=1}^{n} \left[\frac{\partial y}{\partial x_{i}} \frac{\partial y}{\partial x_{j}} \right]_{\boldsymbol{x} = \boldsymbol{\mu}} V_{ij},$$

so dass die Varianz $\sigma_y^2 = E[y^2] - (E[y])^2$ gegeben ist durch

Gauß'sche Fehlerfortpflanzung

$$\sigma_y^2 \approx \sum_{i,j=1}^n \left[\frac{\partial y}{\partial x_i} \frac{\partial y}{\partial x_j} \right]_{x=\mu} V_{ij}.$$

Häufige Spezialfälle

Für den Fall, dass die x_i nicht korreliert sind, d.h. $V_{ii} = \sigma_i^2$ und $V_{ij} = 0$ für $i \neq j$, erhalten wir die wohlbekannte Formel

$$\sigma_y^2 \approx \sum_{i=1}^n \left[\frac{\partial y}{\partial x_i} \right]_{x=\mu}^2 \sigma_i^2.$$

Wir betrachten zwei Spezialfälle: Wenn $y = x_1 + x_2$, ergibt sich die Varianz von y zu

$$\sigma_y^2 = \sigma_1^2 + \sigma_2^2 + 2V_{12}.$$

Für das Produkt $y = x_1x_2$ erhalten wir

$$\frac{\sigma_y^2}{y^2} = \frac{\sigma_1^2}{x_1^2} + \frac{\sigma_2^2}{x_2^2} + 2\frac{V_{12}}{x_1 x_2}.$$

A.3 Modellanpassung

A.3.1 Methode der kleinsten Quadrate

Die Methode der kleinsten Quadrate

Angenommen, wir haben eine Menge von N unabhängigen $Gau\beta$ 'schen Zufallsgrößen y_i , an verschiedenen Orten x_i . Jeder Wert y_i hat einen anderen Mittelwert λ_i , der durch eine Funktion $\lambda = \lambda(x; \boldsymbol{\theta})$ gegeben ist, aber eine bekannte Varianz σ_i^2 . λ hängt von m Parametern $(\theta_1, \ldots, \theta_m)$ ab, welche wir bestimmen wollen. Die Parameter, die die Größe

$$\chi^{2}(\boldsymbol{\theta}) = \sum_{i=1}^{N} \frac{(y_{i} - \lambda(x_{i}; \boldsymbol{\theta}))^{2}}{\sigma_{i}^{2}}$$

minimieren, heißen χ^2 -Schätzgrößen (LS, least-squares) für die θ .

Varianz der χ^2 -Schätzgrößen

Man kann zeigen, dass für den Fall eines freien Parameters die Unsicherheit auf die best-fit Parameter θ_0 durch diejenigen Werte gegeben ist, bei denen

$$\chi^2(\theta) = \chi^2_{\min} + 1$$

wird.

Güte der Anpassung (goodness of fit)

Der Wert von χ^2_{\min} ist ein Maß für die Übereinstimmung zwischen den Daten und der angepassten Modellkurve:

$$\chi_{\min}^2 = \sum_{i=1}^N \frac{(y_i - \lambda(x_i; \hat{\boldsymbol{\theta}}))^2}{\sigma_i^2}.$$

Er kann deshalb als so genannte goodness-of-fit Testgröße benutzt werden, um die Hypothese der funktionalen Form $\lambda(x; \theta)$ zu testen.

Man kann zeigen, dass wenn die Hypothese korrekt ist, die Testgröße $t=\chi^2_{\min}$ einer χ^2 -Verteilung folgt:

$$f(t; n_{df}) = \frac{1}{2^{n_{df}/2} \Gamma(n_{df}/2)} t^{n_{df}/2 - 1} e^{-t/2},$$

wobei n_{df} die Anzahl der Freiheitsgrade ist:

 n_{df} = Anzahl der Datenpunkte – Anzahl der freien Parameter.

Man erwartet $\chi^2_{\rm min}/n_{df}\approx 1$. Für den Fall, dass...

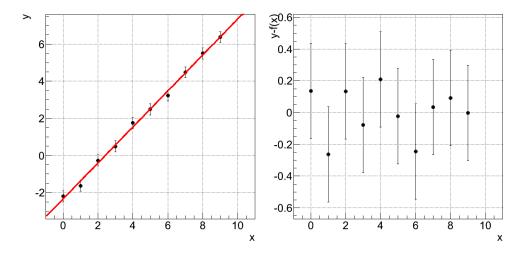
• $\chi^2/n_{df} \gg 1$: Sind die angenommenen Messunsicherheiten zu klein? Ist die funktionale Form der Hypothese $\lambda(x; \boldsymbol{\theta})$ korrekt? Den Mangel an Übereinstimmung kann man durch den p-value quantifizieren:

$$p = \int_{\chi_{\min}^2}^{\infty} f(t; n_{df}) dt,$$

also die Wahrscheinlichkeit für den Fall einer korrekten Hypothese, einen Wert von χ^2_{\min} zu erhalten, der so groß wie oder größer ist als derjenige, den wir tatsächlich gefunden haben.

- $\chi^2/n_{df} \ll 1$: Sind die angenommenen Messunsicherheiten zu groß? Folgen die Datenpunkte wirklich unabhängigen Zufallsgrößen?
- $\chi^2/n_{df} \approx 1$: Sind die angenommenen Messunsicherheiten wirklich korrekt? Wie sieht der Residuenplot aus?

Residuenplots



Zusammenfassen von Messungen

Es sei eine unbekannte Größe λ in N verschiedenen Experimenten gemessen worden, die unabhängige Messwerte y_i mit abgeschätzten Unsicherheiten σ_i geliefert haben. Die χ^2 -Schätzgröße $\hat{\lambda}$ für λ kann dadurch abgeleitet werden, dass wir

$$\chi^{2}(\lambda) = \sum_{i=1}^{N} \frac{(y_{i} - \lambda)^{2}}{\sigma_{i}^{2}}$$

minimieren. Gleichsetzen von $\partial \chi^2(\lambda)/\partial \lambda = 0$ liefert

$$\hat{\lambda} = \frac{\sum_{i=1}^{N} y_i / \sigma_i^2}{\sum_{i=1}^{N} 1 / \sigma_i^2},$$

also die wohlbekannte Formel für das gewichtete Mittel. Die zweite Ableitung von χ^2 liefert die Varianz von $\hat{\lambda}$ (hier ohne Beweis):

$$V[\hat{\lambda}] = \frac{1}{\sum_{i=1}^{N} 1/\sigma_i^2}.$$

(Eine analoge Methode wird im Praktikum zur nummerischen Bestimmung der Maxima einer Kurve eingesetzt (Peakfinding).)

A.3.2 Lineare Regression

Lineare Regression

Eine häufige Anwendung der Methode der kleinsten Quadrate besteht in der Bestimmung von Steigung m und Achsenabschnitt c einer Geraden

$$y = mx + c$$

an n Paare von Messpunkten $(x_1,y_1),\ldots,(x_n,y_n)$ mit Messunsicherheiten σ_i auf die y_i , während die x_i als genau bekannt angenommen werden. Beispiel: Messung

der Schallgeschwindigkeit aus Resonanzlängen einer stehenden Welle gemäß $L_n = (v/2f) n$.

Zu minimieren ist

$$\chi^{2} = \sum_{i=1}^{n} \left(\frac{y_{i} - y(x_{i})}{\sigma_{i}} \right)^{2} = \sum_{i=1}^{n} \left(\frac{y_{i} - mx_{i} - c}{\sigma_{i}} \right)^{2}.$$

$$\begin{split} \chi^2 &= \sum_{i=1}^n \left(\frac{y_i - mx_i - c}{\sigma_i}\right)^2 \\ \frac{\partial \chi^2}{\partial c} &= -2\sum \frac{y_i - \hat{m}x_i - \hat{c}}{\sigma_i^2} = -2\sum \frac{y_i}{\sigma_i^2} + 2\hat{m}\sum \frac{x_i}{\sigma_i^2} + 2\hat{c}\sum \frac{1}{\sigma_i^2} = 0 \\ &\Rightarrow \frac{\sum \frac{y_i}{\sigma_i^2}}{\sum \frac{1}{\sigma_i^2}} - \hat{m}\frac{\sum \frac{x_i}{\sigma_i^2}}{\sum \frac{1}{\sigma_i^2}} - \hat{c} = 0, \end{split}$$

oder

$$\bar{y} - \hat{m}\bar{x} - \hat{c} = 0,$$

wo wir z.B. definieren:

$$\bar{x} = \sum \frac{x_i}{\sigma_i^2} / \sum \frac{1}{\sigma_i^2}.$$

$$\chi^{2} = \sum_{i=1}^{n} \left(\frac{y_{i} - mx_{i} - c}{\sigma_{i}} \right)^{2}$$

$$\frac{\partial \chi^{2}}{\partial m} = -2 \sum_{i=1}^{n} \frac{y_{i} - \hat{m}x_{i} - \hat{c}}{\sigma_{i}^{2}} x_{i} = -2 \sum_{i=1}^{n} \frac{x_{i}y_{i}}{\sigma_{i}^{2}} + 2\hat{m} \sum_{i=1}^{n} \frac{x_{i}^{2}}{\sigma_{i}^{2}} + 2\hat{c} \sum_{i=1}^{n} \frac{x_{i}}{\sigma_{i}^{2}} = 0$$

$$\Rightarrow \overline{xy} - \hat{m}\overline{x^{2}} - \hat{c}\overline{x} = 0$$

Als Lösung des Gleichungssystems ergibt sich schließlich:

$$\hat{m} = \frac{\overline{xy} - \bar{x}\bar{y}}{\overline{x^2} - \bar{x}^2}$$
 und $\hat{c} = \bar{y} - \hat{m}\bar{x}$.

Zur Bestimmung der Unsicherheit $\sigma_{\hat{m}}$ auf \hat{m} schreiben wir

$$\hat{m} = \sum \frac{x_i - \bar{x}}{N(\bar{x}^2 - \bar{x}^2)} y_i$$
, wobei $N = \sum \frac{1}{\sigma_i^2}$,

und mit dem Gesetz über die Fehlerfortpflanzung folgt dann

$$\sigma_{\hat{m}} = \sqrt{\sum \left(\frac{x_i - \bar{x}}{N(\overline{x^2} - \bar{x}^2)}\right)^2 \sigma_i^2}.$$

Analog ergibt sich

$$\sigma_{\hat{c}} = \sqrt{\sum \left(\frac{\overline{x^2} - \bar{x}x_i}{N(\overline{x^2} - \bar{x}^2)}\right)^2 \sigma_i^2}.$$

Korrelation zwischen m und c

Vorsicht: Im Allgemeinen gibt es eine Korrelation zwischen Steigung m und Achsenabschnitt c bei der linearen Regression, die z.B. für den Fall $\sigma_i = \sigma$ gegeben ist durch

$$\rho_{\hat{m},\hat{c}} = -\frac{\bar{x}}{\sqrt{\bar{x}^2}}.$$

Dadurch erhöht sich die Unsicherheit auf m und c! Die Korrelation verschwindet offenbar für den Fall $\bar{x}=0$. Diesen Fall können wir erreichen, indem wir die Geradengleichung wie folgt modifizieren:

$$y = m(x - x_0) + c$$

mit $x_0 = \bar{x}$. Der Parameter x_0 muss im Fit festgehalten werden!

Lineare Regression mit Unsicherheiten in beiden Messgrößen

Im Allgemeinen sind die x-Koordinaten der Datenpunkte nicht beliebig genau bekannt, sondern weisen Messunsicherheiten σ_{xi} auf. In erster Näherung kann man diese Unsicherheiten berücksichtigen, indem man die folgende Größe minimiert:

$$\chi^{2} = \sum_{i} \frac{(y_{i} - f(x_{i}))^{2}}{\sigma_{y_{i}}^{2} + (f'(x_{i})\sigma_{x_{i}})^{2}}.$$

Diese Methode heißt Methode der effektiven Varianz. Um aussagekräftige Residuenplots zu erhalten, trägt man dann $\sqrt{\sigma_{yi}^2 + (f'(x_i)\sigma_{xi})^2}$ als Fehlerbalken in y-Richtung auf.

A.4 Systematische Unsicherheiten

A.4.1 Definition und Abschätzung

Definitionen

Betrachten wir die folgenden zwei Situationen:

- Mit einem Metall-Lineal werden Längenmessungen durchgeführt. Das Lineal wurde bei einer Temperatur von $15\,^{\circ}C$ kalibriert, aber die Messungen werden in einem wärmeren Labor durchgeführt und der Experimentator versäumt es, für die thermische Expansion zu korrigieren.
- Zur Bestimmung der Schallgeschwindigkeit wird die Wellenlänge einer stehenden Schallwelle ausgemessen. Dazu wird ein Wegaufnehmer verwendet, der zuvor nur mit einer endlichen Präzision kalibriert werden konnte.

Frei übersetzt nach R. Barlow

Es ist essentiell, systematische Effekte von systematischen Fehlern zu unterscheiden, die die Unsicherheiten in der Größe dieser Effekte sind, und von handwerklichen Fehlern, die aus dem Übersehen solcher Effekte herrühren.

In diesem Sinne ist der Ausdruck systematische Unsicherheit sprachlich präziser als der Ausdruck "systematischer Fehler".

Abschätzung systematischer Messunsicherheiten

Es existieren viele Methoden, um systematische Messunsicherheiten abzuschätzen. Wir nehmen an, dass das Ergebnis von einer Menge von N unbekannten Parametern ϕ abhängt und dass wir zumindest grobe Kenntnis ihrer Wahrscheinlichkeitsdichten haben. Im Praktikum benutzen wir vor allem die Verschiebemethode: Für N unbekannte Parameter $\phi = (\phi_1, \ldots, \phi_n)$ mit unkorrelierten Gauß'schen Unsicherheiten σ_i , und einer Schätzgröße $f(\phi_1, \ldots, \phi_n)$ für die uns interessierende physikalische Größe, liefert die lineare Näherung:

$$\sigma_f^2 \approx \sum_{i=1}^N \left(\frac{\partial f}{\partial \phi_i}\right)^2 \sigma_i^2.$$

Die partiellen Ableitungen können als finite Differenzen angenähert werden:

$$\frac{\partial f}{\partial \phi_i} \approx \frac{f(\phi_1, \dots, \phi_i + \sigma_i, \dots, \phi_N) - f(\phi_1, \dots, \phi_i, \dots, \phi_N)}{\sigma_i} = \frac{\Delta_i}{\sigma_i},$$

und so erhalten wir $\sigma_f^2 \approx \sum_{i=1}^N \Delta_i^2$.

Beispiel für die Verschiebemethode

Beispiel: Ein Ohmscher Widerstand R soll aus einer linearen Regression an Messpunkte (U_i, I_i) aus Spannungs- und Strommessungen bestimmt werden. Der Hersteller des Messgeräts gibt die folgenden systematischen Unsicherheiten auf Spannungs- und Strommessungen an:

$$\sigma_{U,\text{sys}} = (0.01U_i + 0.005U_{\text{Bereichsendwert}})/\sqrt{3},$$

 $\sigma_{I,\text{sys}} = (0.02I_i + 0.005I_{\text{Bereichsendwert}})/\sqrt{3}.$

Man studiert dann die Verschiebungen, die man jeweils für R erhält, wenn man die Spannungsmessungen bzw. die Strommessungen um die systematischen Unsicherheiten verschiebt. Die systematische Unsicherheit auf R erhält man schließlich durch quadratische Addition der Verschiebungen.

Vergleich

Statistische Fehler

- geben eine nicht zu vermeidende, zufällige Fluktuation der Messwerte wieder,
- können aus der Wiederholung von Messungen unter identischen Bedungungen bestimmt werden und fallen dabei wie $\propto 1/\sqrt{n}$.

Systematische Fehler

- basieren auf Effekten, die stets zu derselben, unbekannten Abweichung von Messwerten führen,
- können durch Wiederholung der Messung weder abgeschätzt noch reduziert werden,

• dürfen daher auch nicht als Gewicht beim gewichteten Mittel eingesetzt werden.

Die statistischen und systematischen Unsicherheiten sollten getrennt und mit der korrekten Anzahl an signifikanten Stellen ausgewiesen werden, z.B.:

$$R = 99.82 \Omega \pm 0.12 \Omega \text{ (stat.)} \pm 0.52 \Omega \text{ (syst.)}.$$

Zusammenfassung

Zusammenfassung der wichtigsten Konzepte

• Empirisches Mittel, Standardabweichung, Fehler des Mittelwerts:

$$\bar{x} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} x_i \quad \sigma_x = \sqrt{\frac{1}{N-1} \sum_{i=1}^{N} (x_i - \bar{x})^2} \quad \sigma_{\bar{x}} = \frac{\sigma_x}{\sqrt{N}}$$

• Gewichtetes Mittel:

$$\bar{y} = \frac{\sum_{i=1}^{N} y_i / \sigma_i^2}{\sum_{i=1}^{N} 1 / \sigma_i^2}$$
 mit $\sigma_{\bar{y}}^2 = \frac{1}{\sum_{i=1}^{N} 1 / \sigma_i^2}$

- Wichtige Wahrscheinlichkeitsdichten: Gauß-Verteilung, Binomial-Verteilung, Poisson-Verteilung, Gleichverteilung
- Gauß'sche Fehlerfortpflanzung, z.B.:

$$y = A^m B^n \quad \Rightarrow \quad \left(\frac{\sigma_y}{y}\right)^2 \approx \left(m\frac{\sigma_A}{A}\right)^2 + \left(n\frac{\sigma_B}{B}\right)^2$$

- Regressions rechnung, χ^2 , Residuen plots
- Statistische und systematische Unsicherheiten