实验物理中的统计方法 作业10

1.

习题 7.7. 重新考虑练习 *6.9*：N 个独立的泊松变量 $\mathbf{n}=(n_1,\ldots,n_N)$，均值为 $\boldsymbol{\nu}=(\mu_1,\ldots,\nu_N)$，其中均值与某控制变量 x 有关，

$$\nu(x)=\theta a(x). \tag{7.17}$$

(a) 首先考虑最小二乘方法 *(LS)*，χ^2 的分母使用 $\sigma_i^2=\nu_i$。证明 θ 的最小二乘估计量为

$$\hat{\theta}=\left(\frac{\sum_{i=1}^{N}\frac{n_i^2}{a(x_i)}}{\sum_{i=1}^{N}a(x_i)}\right)^{1/2}. \tag{7.18}$$

通过对 $\hat{\theta}(\mathbf{n})$ 在 $\boldsymbol{\nu}$ 处进行泰勒展开至第二阶，计算期待值，证明 *(7.18)* 的偏置为

$$b=\frac{N-1}{2\sum_{i=1}^{N}a(x_i)}+O(E[(n_i-\nu_i)^3]). \tag{7.19}$$

(利用独立泊松变量的协方差 $\mathrm{cov}[n_i,n_j]=\delta_{ij}\nu_j$.*)*

(b) 取 χ^2 的分母为 $\sigma_i^2=n_i$，即把观测值作为方差，用修正的最小二乘法 *(MLS)* 重复 *(a)* 中的步骤。证明 θ 的最小二乘估计量为

$$\hat{\theta}=\frac{\sum_{i=1}^{N}a(x_i)}{\sum_{i=1}^{N}\frac{a(x_i)^2}{n_i}}, \tag{7.20}$$

并且偏置为

$$b=-\frac{N-1}{\sum_{i=1}^{N}a(x_i)}+O(E[(n_i-\nu_i)^3]). \tag{7.21}$$

将 *(a)* 和 *(b)* 得到的偏置与习题 *7.2* 进行比较。

[3]参见 R. Feynman, R. Leighton and M. Sands, *The Feynman Lectures on Physics,* Vol. I, Addison-Wesley, Menlo Park, 1963, Section 26-2.

(c) 利用误差传递，对 *LS* 和 *MLS* 两种情况估计 $\hat{\theta}$ 的方差。

注意，由于习题 *(6.9)* 已经证明了 θ 的最大似然估计量是无偏的并且方差最小，这里并不推荐最小二乘 *(LS)* 和修正的最小二乘 *(MLS)* 估计量。然而，对于足够大的数据样本，三个方法是类似的，参见习题 *(7.8)*。

解：

7.7

$$\chi^2=\sum_{i=1}^{N}\frac{(n_i-\nu_i)^2}{\sigma_i^2}$$

(a) $\sigma_i^2=\nu_i$, $\chi^2=\sum_{i=1}^{N}\frac{(n_i-\theta a_i)^2}{\theta a_i}$

$$\frac{\partial\chi^2}{\partial\theta}\bigg|_{\theta=\hat\theta}=0 \Rightarrow \sum_{i=1}^{N}-\frac{1}{\theta^2}\frac{n_i^2}{a_i}+a_i=0 \Rightarrow \hat\theta=\left(\frac{\sum_{i=1}^{N}\frac{n_i^2}{a_i}}{\sum_{i=1}^{N}a_i}\right)^{\frac{1}{2}}$$

其中 a_i 表示 $a(x_i)$

Taylor 展开：

$$\hat\theta=\frac{1}{\left(\sum_{i=1}^{N}a_i\right)^{\frac{1}{2}}}\left(\sum_{i=1}^{N}\left(\frac{\nu_i^2}{a_i}+\frac{2\nu_i(n_i-\nu_i)}{a_i}+\frac{(n_i-\nu_i)^2}{a_i}\right)\right)^{\frac{1}{2}}$$

$$=\frac{\left(\sum_{i=1}^{N}\frac{\nu_i^2}{a_i}\right)^{\frac{1}{2}}}{\left(\sum_{i=1}^{N}a_i\right)^{\frac{1}{2}}}\left(1+\frac{\sum_{i=1}^{N}\frac{\nu_i(n_i-\nu_i)}{a_i}}{\sum_{i=1}^{N}\frac{\nu_i^2}{a_i}}+\frac{1}{2}\frac{\sum_{i=1}^{N}\frac{(n_i-\nu_i)^2}{a_i}}{\sum_{i=1}^{N}\frac{\nu_i^2}{a_i}}\right.$$

$$\left.-\frac{1}{2}\left(\frac{\sum_{i=1}^{N}\frac{\nu_i(n_i-\nu_i)}{a_i}}{\sum_{i=1}^{N}\frac{\nu_i^2}{a_i}}\right)^2\right)+O\left((n_i-\nu_i)^3\right)$$

$$E[\hat\theta]=\theta\left(1+0+\frac{1}{2}\frac{\sum_{i=1}^{N}\frac{\nu_i}{a_i}}{\sum_{i=1}^{N}\frac{\nu_i^2}{a_i}}-\frac{1}{2}\frac{\sum_{i=1}^{N}\frac{\nu_i^3}{a_i^2}}{\left(\sum_{i=1}^{N}\frac{\nu_i^2}{a_i}\right)^2}\right)+O(E[(n_i-\nu_i)^3])$$

其中已利用 $E[(n_i-\nu_i)^2]=\nu_i$, $E[(n_i-\nu_i)(n_j-\nu_j)]=0,\ i\neq j$

$$\Rightarrow E[\hat\theta]-\theta=\frac{\theta}{2}\left(\frac{N\theta}{\theta^2\sum_{i=1}^{N}a_i}-\frac{\theta^3\sum_{i=1}^{N}a_i}{\theta^4\left(\sum_{i=1}^{N}a_i\right)^2}\right)+O(E[(n_i-\nu_i)^3])$$

$$=\frac{N-1}{2\sum_{i=1}^{N}a(x_i)}+O(E[(n_i-\nu_i)^3])$$

(b) $\sigma_i^2 = n_i \qquad \chi^2 = \sum_{i=1}^{N} \frac{(n_i-\theta a_i)^2}{n_i}.$

$$\left.\frac{\partial \chi^2}{\partial \theta}\right|_{\theta=\hat{\theta}} = 0 \Rightarrow \sum_{i=1}^{N} -2a_i + 2\hat{\theta}\frac{a_i^2}{n_i} = 0$$

$$\Rightarrow \hat{\theta} = \frac{\sum_{i=1}^{N} a_i}{\sum_{i=1}^{N} \frac{a_i^2}{n_i}}$$

在 $\vec{n}=\vec{\nu}$ 附近展开:

$$\hat{\theta} = \frac{\sum_{i=1}^{N} a_i}{\sum_{i=1}^{N} \frac{a_i^2}{\nu_i}\left(1 - \frac{\sum_{i=1}^{N} \frac{(n_i-\nu_i)}{\nu_i^2} a_i^2}{\sum_{i=1}^{N} \frac{a_i^2}{\nu_i}} + \frac{\sum_{i=1}^{N} \frac{(n_i-\nu_i)^2}{\nu_i^3} a_i^2}{\sum_{i=1}^{N} \frac{a_i^2}{\nu_i}}\right)} + O(E[(n_i-\nu_i)^3])$$

$$= \frac{\sum_{i=1}^{N} a_i}{\sum_{i=1}^{N} \frac{a_i^2}{\nu_i}}\left(1 + \frac{\sum_{i=1}^{N} \frac{(n_i-\nu_i)}{\nu_i^2} a_i^2}{\sum_{i=1}^{N} \frac{a_i^2}{\nu_i}} + \frac{\left(\sum_{i=1}^{N} \frac{n_i-\nu_i}{\nu_i^2} a_i^2\right)^2}{\left(\sum_{i=1}^{N} \frac{a_i^2}{\nu_i}\right)^2} - \frac{\sum_{i=1}^{N} \frac{(n_i-\nu_i)^2}{\nu_i^3} a_i^2}{\sum_{i=1}^{N} \frac{a_i^2}{\nu_i}}\right)$$

$$+O(E[(n_i-\nu_i)^3])$$

$$E[\hat{\theta}] = \theta\left(1+0+\frac{\sum_{i=1}^{N} \frac{a_i^4}{\nu_i^4}\nu_i}{\left(\sum_{i=1}^{N} \frac{a_i^2}{\nu_i}\right)^2} - \frac{\sum_{i=1}^{N} \frac{a_i^2}{\nu_i^3}\nu_i}{\sum_{i=1}^{N} \frac{a_i^2}{\nu_i}}\right) + O(E[(n_i-\nu_i)^3])$$

$$b = E[\hat{\theta}] - \theta = \theta\left(\frac{\frac{1}{\theta^2}\sum_{i=1}^{N} a_i}{\frac{1}{\theta^2}\left(\sum_{i=1}^{N} a_i\right)^2} - \frac{\frac{N}{\theta^2}}{\frac{1}{\theta}\sum_{i=1}^{N} a_i}\right) + O(E[(n_i-\nu_i)^3])$$

$$= -\frac{N-1}{\sum_{i=1}^{N} a(x_i)} + O(E[(n_i-\nu_i)^3])$$

(c)

对于 $\hat{\theta}_{LS}=\left(\frac{\sum_{i=1}^{N}\frac{n_i^2}{a_i}}{\sum_{i=1}^{N}a_i}\right)^{\frac{1}{2}}$

$$\sigma^2_{\hat{\theta}_{LS}}=\sum_{i=1}^{N}\left(\frac{\partial\hat{\theta}_{LS}}{\partial n_i}\sigma_{n_i}\right)^2$$

$$=\sum_{i=1}^{N}\left(\frac{1}{\hat{\theta}_{LS}}\frac{n_i}{a_i}\right)^2\cdot\nu_i$$

$$=\sum_{i=1}^{N}\frac{n_i^2\nu_i}{a_i^2}\cdot\frac{1}{\hat{\theta}_{LS}^2}$$

$$=\sum_{i=1}^{N}\frac{n_i^2\nu_i}{a_i^2}\left(\frac{\sum_{i=1}^{N}a_i}{\sum_{i=1}^{N}\frac{n_i^2}{a_i}}\right)^{-}$$ 其中 a_i 表示 $a(x_i)$

对于 $\hat{\theta}_{MLS}=\frac{\sum_{i=1}^{N}a_i}{\sum_{i=1}^{N}\frac{a_i^2}{n_i}}$

$$\sigma^2_{\hat{\theta}_{MLS}}=\sum_{i=1}^{N}\left(\frac{\partial\hat{\theta}_{MLS}}{\partial n_i}\sigma_{n_i}\right)^2=\sum_{i=1}^{N}\left(\frac{\partial\hat{\theta}_{MLS}}{\partial n_i}\sqrt{n_i}\right)^2$$

$$=\sum_{i=1}^{N}\frac{a_i^4}{n_i^3}\left(\frac{\sum_{i=1}^{N}a_i}{\left(\sum_{i=1}^{N}\frac{a_i^2}{n_i}\right)^2}\right)^2$$ 其中 a_i 表示 $a(x_i)$

2.

习题 7.8. 重新考虑 *Perrin* 关于乳香粒子作为高度的函数 *(*习题 *6.11)*。通过最小化

$$\chi^2(k,\nu_0)=\sum_{i=1}^{N}\frac{(n_i-\nu_i(k,\nu_0))^2}{\sigma_i^2},\tag{7.22}$$

求玻尔兹曼常数 k(或者等价于阿伏伽德罗常数 $N_A=R/k$) 和系数 ν_0 的最小二乘估计量。

(a) 取 n_i 的标准差 σ_i 为 $\sqrt{\nu_i}$(通常的最小二乘法)。

(b) 取 σ_i 为 $\sqrt{n_i}$(修正的最小二乘法)。

将 *(a)* 和 *(b)* 得到的估计量与习题 *(6.11)* 中最大似然估计量进行比较。

(a)

```
import math
from scipy.optimize import minimize
from scipy.stats import chi2

r = 0.52e-6
g = 9.80
rho = 6.3
T = 293
R = 8.32

z_values = [0, 6e-6, 12e-6, 18e-6]
n_values = [1880, 940, 530, 305]

C = 4 * math.pi * r**3 * rho * g / (3 * T)

def nu_z(nu0, k, z):
    return nu0 * math.exp(-C * z / k)

def chi_squared(params):
    k, nu0 = params
    total = 0.0
    for n, z in zip(n_values, z_values):
        nu = nu_z(nu0, k, z)
        total += (n - nu)**2 / nu
    return total

initial = [1.4e-23, 1000]
result = minimize(chi_squared, initial, method='Nelder-Mead', bounds = [(1e-25,
None),  (1, None)])

k_fit, nu0_fit = result.x

print(f"k = {k_fit:.4e} J/K")
print(f"nu_0 = {nu0_fit:.4f}")
```

结果:

```
k = 1.1995e-24 J/K
nu_0 = 1845.5166
```

(b)

```python
import math
from scipy.optimize import minimize
from scipy.stats import chi2

r = 0.52e-6
g = 9.80
rho = 6.3
T = 293
R = 8.32

z_values = [0, 6e-6, 12e-6, 18e-6]
n_values = [1880, 940, 530, 305]

C = 4 * math.pi * r**3 * rho * g / (3 * T)

def nu_z(nu0, k, z):
    return nu0 * math.exp(-C * z / k)

def chi_squared(params):
    k, nu0 = params
    total = 0.0
    for n, z in zip(n_values, z_values):
        nu = nu_z(nu0, k, z)
        total += (n - nu)**2 / n
    return total

initial = [1.4e-23, 1000]
result = minimize(chi_squared, initial, method='Nelder-Mead', bounds = [(1e-25,
None),  (1, None)])

k_fit, nu0_fit = result.x

print(f"k = {k_fit:.4e} J/K")
print(f"nu_0 = {nu0_fit:.4f}")
```

结果：

```
k = 1.1971e-24 J/K
nu_0 = 1843.8315
```

这两个结果与最大似然估计量的结果：

```
k = 1.1987e-24 J/K
nu_0 = 1844.9445
```

非常接近。