实验物理中的统计方法 作业8

1.

习题 5.2. 考虑均值为 μ，方差为 σ^2 的随机变量 x，并得到样本值为 $x_1, x_2, \cdots, x_n$ 的样本空间。

(a) 假设均值 μ 已经利用样本均值 $\overline{x}$ 估计。证明样本方差

$$s^2 = \frac{1}{n-1}\sum_{i=1}^{n}(x_i-\overline{x})^2 = \frac{n}{n-1}(\overline{x^2}-\overline{x}^2) \tag{5.5}$$

为方差 σ^2 的无偏估计量。(利用 $E[x_i x_j]=\mu^2 (i\neq j)$，$E[x_i^2]=\mu^2+\sigma^2 (i=1,2,\ldots,n)$。

(b) 假设均值 μ 已知。证明 σ^2 的无偏估计量为

$$S^2 = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(x_i-\mu)^2 = \overline{x^2}-\mu^2. \tag{5.6}$$

解:

(a)

$$\begin{aligned}
E[s^2] &= \frac{1}{n-1}E[\sum_{i=1}^{n}(x_i^2-\overline{x}^2)] \\
&= \frac{n}{n-1}(\mu^2+\sigma^2) - \frac{1}{n(n-1)}E[(\sum_{i=1}^{n}x_i)^2] \\
&= \frac{n}{n-1}(\mu^2+\sigma^2) - \frac{1}{n(n-1)}E[\sum_{i=1}^{n}x_i^2 + \sum_{i,j=1,i\neq j}^{n}x_i x_j] \\
&= \frac{n}{n-1}(\mu^2+\sigma^2) - \frac{1}{n(n-1)}(n(\mu^2+\sigma^2)+n(n-1)\mu^2) \\
&= \sigma^2
\end{aligned}$$

(b)

$$\begin{aligned}
E[S^2] &= \frac{1}{n}E[\sum_{i=1}^{n}(x_i^2-\mu^2)] \\
&= (\mu^2+\sigma^2)-\mu^2 \\
&= \sigma^2
\end{aligned}$$

2.

习题 5.4. 设 $X_1, X_2, \cdots, X_n$ 是来自正态总体 $N(\mu,\sigma^2)$ 的样本，$\overline{X}$ 是样本均值，S^2 是样 > 本方差。证明

(1) $\overline{X} \sim N(\mu, \sigma^2/n)$。

(2) $\frac{(n-1)S^2}{\sigma^2} \sim \chi^2(n-1)$。

(3) $\overline{X}$ 与 S^2 相互独立。(选做，后面可以直接使用这个结论)

(4) $\frac{\overline{X}-\mu}{S/\sqrt{n}} \sim t(n-1)$。

解:

(1)用数学归纳法证明。

(i) $n=1$时，$\overline{X}=X_1\sim N(\mu,\sigma^2)$结论显然成立。

(ii)假设$n=k-1$时结论成立，计算$n=k$时的结果：

$$
\begin{aligned}
h(\overline{x}) &= \int_{-\infty}^{\infty} f(x) g(\frac{k\overline{x}-x}{k-1}) \mathrm{d}x \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \mathrm{e}^{-\frac{x^2}{2\sigma^2}} \cdot \frac{1}{\sqrt{2\pi\frac{\sigma^2}{k-1}}} \mathrm{e}^{\frac{(\frac{k\overline{x}-x}{k-1})^2}{\frac{2\sigma^2}{k-1}}} \mathrm{d}x \\
&= \frac{1}{\sqrt{2\pi\frac{\sigma^2}{k}}} \mathrm{e}^{-\frac{x^2}{2\frac{\sigma^2}{k}}}
\end{aligned}
$$

故，有数学归纳法知，关系成立。

(2)

由卡方分布的定义，知：

$$
\frac{\sum_{i=1}^{n}(X_i-\mu)^2}{\sigma^2} \sim \chi^2(n)
$$

同时，

$$
\sum_{i=1}^{n}(X_i-\overline{X})^2 = \sum_{i=1}^{n}((X_i-\mu)-(\overline{X}-\mu))^2 = \sum_{i=1}^{n}(X_i-\mu)^2-(\overline{X}-\mu)^2
$$

由(1)知，

$$
\frac{(\overline{X}-\mu)^2}{\sigma^2/n} \sim \chi^2(1)
$$

由卡方分布的可加性以及下一问要证的独立性知，

$$
\frac{(n-1)s^2}{\sigma^2} = \frac{\sum_{i=1}^{n}(X_i-\overline{X})^2}{\sigma^2} \sim \chi^2(n-1)
$$

(3)

做非退化线性替换，将变量从X_i变为$\overline{X}$与$X_i-\overline{X}(i=2,\ldots,n)$。显然这一变换的Jacobi行列式为不为零的常数。

又注意到：

$$
\prod_{i=1}^{n} \mathrm{e}^{-\frac{(x_i-\mu)^2}{2\sigma^2}} = \mathrm{e}^{\frac{\sum_{i=1}^{n}(x_i-\overline{x})^2}{2\sigma^2}} \cdot \mathrm{e}^{\frac{(\overline{x}-\mu)^2}{2\sigma^2}}
$$

前一项指数上边的项可化为：

$$
\sum_{i=1}^{n}(x_i-\overline{x})^2 = \sum_{i=2}^{n}(x_i-\overline{x})^2+(x_1-\overline{x})^2 = \sum_{i=2}^{n}(x_i-\overline{x})^2+\left(-\sum_{i=2}^{n}(x_i-\overline{x})\right)^2
$$

可以看出，等式右边前一项是$X_i-\overline{X}(i=2,\ldots,n)$的函数，后一项是$\overline{X}$的函数。由独立性的定义$f(x,y)=f(x)f(y)$知方差与均值相互独立。

(4)

设

$$x=\frac{(\overline{X}-\mu)^2}{\sigma^2/n},y=\frac{(n-1)s^2}{\sigma^2},z=\frac{\overline{X}-\mu}{s/\sqrt{n}}$$

注意到：

$$X\sim\chi^2(1),Y\sim\chi^2(n-1),X\text{与}Y\text{独立}$$

$$z=\pm\sqrt{\frac{x}{y}(n-1)}$$

$$\begin{aligned}f(z)\mathrm{d}z&=\int_0^{\infty}\int_{\frac{yz^2}{n-1}}^{\frac{y(z+\mathrm{d}z)^2}{n-1}}f(x,y)\mathrm{d}x\mathrm{d}y\\&=\int_0^{\infty}g(\frac{yz^2}{n-1})h(y)\frac{2yz}{n-1}\mathrm{d}y\end{aligned}$$

其中两个概率密度函数分别为自由度为1和n-1的卡方分布的密度函数。

积分得到：

$$f(z)=\frac{\Gamma(\frac{n}{2})}{\sqrt{(n-1)\pi}\Gamma(\frac{n-1}{2})}(1+\frac{z^2}{n-1})^{-\frac{n}{2}}$$

恰为$t(n-1)$。

3.

习题 6.1.

(a) 给定一组数据高斯分布的数据样本 $x_1,\ldots,x_n$，求均值 μ 和方差 σ^2 的最大似然估计量。

(b) 将估计量 $\hat{\mu}$ 和 $\hat{\sigma^2}$ 同《统计数据分析》第 5 章定义的估计量 $\overline{x}$ 和 s^2 联系起来，计算 $\hat{\mu}$ 和 $\hat{\sigma^2}$ 的期待值和方差。

(c) 通过计算

$$(V^{-1})_{ij}=-E\left[\frac{\partial^2\log L}{\partial\theta_i\partial\theta_j}\right],\tag{6.1}$$

近似求解协方差矩阵的逆 (大统计样本有效)。其中 θ_i 和 θ_j $i,j=1,2$ 分别为 μ 和 σ^2。对 V^{-1} 求逆，计算出协方差矩阵，并将对角元素 (方差) 与 (b) 中求得的精确值比较。注意到，在大样本极限下，(b) 和 (c) 的结果符合。

(a)

$$\ln L(\mu,\sigma^2)=\sum_{i=1}^{n}(\ln\frac{1}{\sqrt{2\pi}}+\frac{1}{2}\ln\frac{1}{\sigma^2}-\frac{(x_i-\mu)^2}{2\sigma^2})$$

$$\frac{\partial\ln L}{\partial\mu}=0\Rightarrow\sum_{i=1}^{n}\frac{x_i-\mu}{\sigma^2}=0$$

$$\hat{\mu}=\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}x_i$$

$$\frac{\partial\ln L}{\partial\sigma^2}=0\Rightarrow-\sum_{i=1}^{n}\frac{1}{2}(\frac{1}{\sigma^2}-\frac{(x_i-\mu)^2}{\sigma^4})=0$$

$$\hat{\sigma^2}=\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(x_i-\mu)^2$$

(b)

对比得知:

$$\hat{\mu} = \overline{x}, \hat{\sigma}^2 = \frac{n-1}{n} s^2$$

故知:

$$E[\hat{\mu}] = \mu,$$
$$V[\hat{\mu}] = \sigma^2/n$$
$$E[\hat{\sigma}^2] = E[s^2] = \frac{n-1}{n}\sigma^2,$$
$$V[\hat{\sigma}^2] = (\frac{n-1}{n})^2 V[s^2] = \frac{2(n-1)}{n^2}\sigma^4$$

(c)

$$\frac{\partial^2 \ln L}{\partial \mu^2} = -\sum_{i=1}^{n} \frac{1}{\sigma^2}$$
$$\frac{\partial^2 \ln L}{\partial \mu \partial \sigma^2} = -\sum_{i=1}^{n} \frac{x_i - \mu}{\sigma^4}$$
$$\frac{\partial^2 \ln L}{\partial (\sigma^2)^2} = \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{n}(\frac{1}{\sigma^4} - 2\frac{(x_i-\mu)^2}{\sigma^6})$$

用极大值出的值估计:

$$\mathbf{V} = \begin{bmatrix} \frac{\sigma^2}{n} & 0 \\ 0 & \frac{2\sigma^4}{n} \end{bmatrix}$$

4.

习题 6.5. 支持粒子物理标准模型的早期证据是观测到左手 *(R)* 和右手 *(L)* 极化的电子与氘靶的非弹散射截面 σ_R 和 σ_L 不同。对于给定积分亮度 L(正比于电子束流密度以及取数时间),两种类型的事例数 n_R 和 n_L 均为泊松变量,平均值分别为 ν_R 和 ν_L。均值与散射截面的关系为 $\nu_R = \sigma_R L$ 和 $\nu_L = \sigma_L L$,并且实验中两种情形的亮度 L 相同。利用习题的结果,构造计划不对称度的估计量 $\hat{\alpha}$,

$$\alpha = \frac{\sigma_R - \sigma_L}{\sigma_R + \sigma_L}, \tag{6.3}$$

利用误差传递,求标准差 $\sigma_{\hat{\alpha}}$,用 α 和 $\nu_{tot} = \nu_R + \nu_L$ 表示。将此与习题*6.3*的结果进行比较。预计不对称度大约为 10^{-4} 水平,要想使 $\sigma_{\hat{\alpha}}$ 比不对称度小一个数量级,需要多少散射事例? (事例数非常大,以至于事例不能单独记录下来,而是测量探测器输出电流。参见 *C.Y. Prescott et al., Parity non-conservation in inelastic electron scattering, Phys. Lett. B77(1978)347.*)

构造最大似然估计量:

$$L = \frac{\nu_R^{n_R} \mathrm{e}^{-\nu_R}}{n_R!} \cdot \frac{\nu_L^{n_L} \mathrm{e}^{-n_L}}{n_L!}$$

$$\ln L = c + (n_R + n_L)\ln \nu_{tot} + n_R \ln(1+\alpha) + n_L \ln(1-\alpha) - \nu_{tot}$$

得到:

$$\hat{\alpha} = \frac{n_R - n_L}{n_R + n_L}$$

误差传递:

$$\sigma_{\hat{\alpha}} = \sqrt{(\frac{\partial\hat{\alpha}}{\partial n_R})^2\sigma_{n_R}^2 + (\frac{\partial\hat{\alpha}}{\partial n_L})^2\sigma_{n_L}^2} = \sqrt{(\frac{2n_L\sigma_{n_R}}{(n_R+n_L)^2})^2 + (\frac{2n_R\sigma_{n_L}}{(n_R+n_L)^2})^2} = \sqrt{\frac{1-\alpha^2}{n_{tot}}}$$

估计ν_{tot}:

$$\sigma_\alpha \sim 10^{-5} \sim \frac{1}{\sqrt{\nu_{tot}}}$$

$$\nu_{tot} \sim 10^{10}$$

5.

习题 6.11. 确定阿伏伽德罗常数的最早实验之一是基于布朗运动，实验装置如图6.1所示。*Jean Perrin*[1] 用该装置观测悬浮在水中的乳香 (一种抛光材料) 颗粒。

[1] Jean Perrin, Mouvement brownien et réalité moléculaire, *Ann. Chimie et Physique,* 8^e *série,* **18**(1909)1-114; *Les Atomes*, Flammarion, Paris, 1991(first edition, 1913); *Brownian Movement and Molecular Reality*, in Mary-Jo Nye, ed., *The Question of the Atom*, Tomash, Los Angeles, 1984.

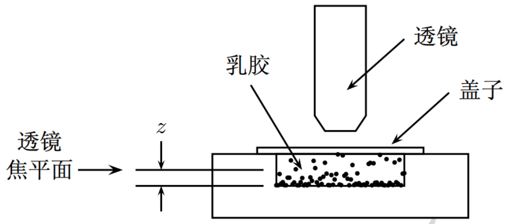

图 6.1: Jean Perrin 的实验装置，用于观测悬浮在水中的粒子数作为高度的函数。

粒子为半径 $r = 0.52\,\mu\mathrm{m}$ 的球状颗粒，密度为 $1.063\,\mathrm{g/cm^3}$，即，比水的密度大 $0.063\,\mathrm{g/cm^3}$。在显微镜中观测这些颗粒，只有大约 $1\,\mu\mathrm{m}$ 的一层在聚焦范围内，范围之外的粒子观测不到。通过调节显微镜的透镜，焦平面可以垂直移动。在 4 个不同高度 z 处拍摄了照片，(最低高度任意设为 $z = 0$)，并数出不同 z 处的粒子数 $n(z)$。数据如表6.1所示。

高度 $z(\mu\mathrm{m})$	粒子数 n
0	1880
6	940
12	530
18	305

表 6.1: Perrin 观测的数据，乳剂中不同高度 z 处乳香粒子的数目。

水中球状乳香粒子的引力势能为

$$E = \frac{4}{3}\pi r^3 \Delta g z, \tag{6.17}$$

其中 $\Delta\rho = \rho_{乳香} - \rho_{水} = 0.063\,\mathrm{g/cm^3}$ 为密度差，$g = 980\,\mathrm{cm/s^2}$ 为重力加速度。统计力学预言，粒子处在能量为 E 的态的概率正比于

$$P(E) \propto e^{-E/kT}, \tag{6.18}$$

其中 k 为 *Boltzmann* 常数，T 为绝对温度。因此，粒子数作为高度的函数服从指数规律，其中在 z 处观测到的粒子数 n 可以看作均值为 $\nu(z)$ 的泊松变量。结合式 (6.17) 和 (6.18) 得到

$$\nu(z) = \nu_0 \exp\left(-\frac{4\pi r^3 \Delta\rho g z}{3kT}\right), \tag{6.19}$$

其中 ν_0 为 $z = 0$ 时粒子数的期待值。

(a) 写程序用最大似然法计算参数 k 和 ν_0。利用表6.1中的数据按照泊松概率构造最大似然函数 (参见《统计数据分析》6.10 节),

$$\log L(\nu_0, k) = \sum_{i=1}^{N} (n_i \log\nu_i - \nu_i), \tag{6.20}$$

其中 $N = 4$ 为测量次数。温度取 $T = 293\,\mathrm{K}$。

(b) 利用得到的 k，通过下面的关系计算阿伏伽德罗常数

$$N_A = R/k, \tag{6.21}$$

其中 R 为气体常数。*Perrin* 计算时取值为 $R = 8.32 \times 10^7\ \mathrm{erg/mol\,K}$。

(c) 不求解对数似然函数 (6.20) 的最大值，而是通过最小化

$$\chi_{\mathrm{P}}^2(\nu_0, k) = 2\sum_{i=1}^{N}\left(n_i \log\frac{n_i}{\nu_i} + \nu_i - n_i\right), \tag{6.22}$$

其中 $\nu_i = \nu(z_i)$ 通过式 (6.19) 依赖于 ν_0 和 k。利用 χ_{P}^2 的值计算拟合优度 (参见《统计数据分析》6.11 节)。讨论 *Perrin* 测量 N_A 中可能的系统不确定度。

解:

(a)

```python
import math
from scipy.optimize import root

r = 0.52e-6
g = 9.80
rho = 6.3
T = 293
z_values = [0, 6e-6, 12e-6, 18e-6]
n_values = [1880, 940, 530, 305]

def nu_z(nu0, k, z):
    C = 4 * math.pi * r**3 * rho * g / (3 * T)
    return nu0 * math.exp(-C * z / k)

def derivatives(params):
    k, nu0 = params
    C = 4 * math.pi * r**3 * rho * g / (3 * T)
    dk = 0.0
    dnu0 = 0.0
    for n, z in zip(n_values, z_values):
        nu = nu_z(nu0, k, z)
        dL_dnu = n / nu - 1
        dnu_dnu0 = math.exp(-C * z / k)
        dnu_dk = nu * (C * z) / (k ** 2)
        dnu0 += dL_dnu * dnu_dnu0
        dk += dL_dnu * dnu_dk
    return [dk, dnu0]

initial = [1.4e-23, 2000]
solution = root(derivatives, initial, method='hybr')
k_sol, nu0_sol = solution.x
print(f"k = {k_sol:.4e} J/K")
print(f"nu_0 = {nu0_sol:.4f}")
```

结果:

```
k = 3.8600e-23 J/K
nu_0 = 508.1491
```

(b)

$$N_A = R/k = 8.32/3.860 \times 10^{-23} = 8.301 \times 10^{21}$$

(c)

```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 += 2 * (n * math.log(n / nu) + nu - n)
    return total

initial = [1.4e-23, 1000]
result = minimize(chi_squared, initial, method='Nelder-Mead')

k_fit, nu0_fit = result.x
chi2_min = result.fun
NA_fit = R / k_fit
dof = len(n_values) - 2
p_value = chi2.sf(chi2_min, dof)

print(f"P-value = {p_value:.4f}")
print(f"k = {k_fit:.4e} J/K")
print(f"nu_0 = {nu0_fit:.4f}")
print(f"chi^2 = {chi2_min:.4f}")
print(f"N_A = {NA_fit:.3e}")
print(f"p_value = {p_value:.4f}")
```

结果：

```
P-value = 0.1009
k = 1.1987e-24 J/K
nu_0 = 1844.9445
chi^2 = 4.5873
N_A = 6.941e+24
p_value = 0.1009
```

系统不确定度：

- 粒子数测量的不确定性，高度测量的精度限制；
- 最大似然法估计的方法本身存在局限性。