实验物理中的统计方法

chap 01 基本概念

1. 随机事件：现象A有可能发生，也有可能不发生，那么现象A发生的事例叫做随机事件。
2. 概率

   柯尔莫戈夫公理：（概率的定义）概率是事件的函数。

   - $P(A) \geq 0$
   - $P(S) = 1$
   - 若$A \cap B = \varnothing$，则$P(A) + P(B) = P(A \cup B)$
3. 条件概率与独立性

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

   A与B独立：$P(A|B) = P(A)$

   > $A \cap B = \varnothing$ 不能推出 AB独立无关。
4. 概率的诠释
   - 概率是相对频率（**可重复**实验中某个结果出现的次数占所有结果的比例）
   - **主观**概率（贝叶斯概率）

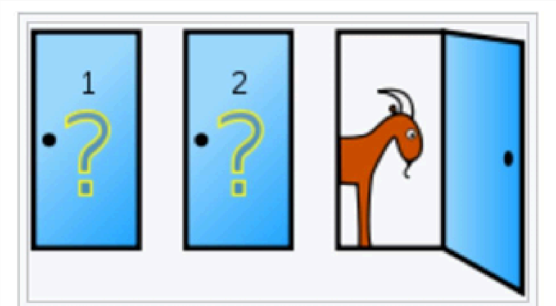
     $P(A) = $ 对A为真的信心程度
5. 贝叶斯定理与全概率公式

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

$$P(B) = P(\cup_i (B \cap A_i)) = \sum_i P(B \cap A_i) = \sum_i P(B|A_i) P(A_i)$$

> 阐释：
>
> - $P(A)$为理论的**先验概率**："抛掷一枚硬币，正面反面向上的可能性各占一半"这一理论正确的概率
> - $P(B|A)$为理论预言的实验正确的概率："硬币正面向上的概率为$\frac{1}{2}$"
> - $P(A|B)$为理论的**后验概率**
>
> 将$P(A|B)$作为下一次的先验概率，进行不断迭代。
>
> 例子：三门问题

➢ 参赛者可看见三扇关闭的门，其中一扇门后面有一辆汽车，选中它即可赢得汽车；另外两扇门后面各藏有一只山羊。
参赛者先选定一扇门，但在开启之前，知情的主持人会在其余两扇门中打开一个后面是山羊的门，并讯问参赛者是否更换其选择的门。
问题是：参赛者更换选择是否会增加赢得汽车的机会？



三门问题的贝叶斯解法：

不失一般性，可以始终将嘉宾选择的门标记为“1”，将主持人打开的门标记为“3”，将剩下的门标记为“2”。

第 i 个门后面是汽车的先验概率为

$$P(T_i) = 1/3$$

如果汽车在1号门，主持人打开3号门的条件概率为

$$P(O_3|T_1) = 1/2$$

如果汽车在2号门，主持人打开3号门的条件概率为

$$P(O_3|T_2) = 1$$

如果汽车在3号门，主持人打开3号门的条件概率为

$$P(O_3|T_3) = 0$$

由贝叶斯定理，主持人打开3号门的条件下，在1号门和2号门发现汽车的条件概率分别为：

$$P(T_1|O_3) = \frac{P(O_3|T_1)P(T_1)}{\sum_{i=1}^{3} P(O_3|T_i)P(T_i)} = \frac{P(O_3|T_1)}{\sum_{i=1}^{3} P(O_3|T_i)} = \frac{1/2}{1/2+1+0} = \frac{1}{3}$$

$$P(T_2|O_3) = \frac{P(O_3|T_2)P(T_2)}{\sum_{i=1}^{3} P(O_3|T_i)P(T_i)} = \frac{P(O_3|T_2)}{\sum_{i=1}^{3} P(O_3|T_i)} = \frac{1}{1/2+1+0} = \frac{2}{3}$$

所以，嘉宾变更选择后获得汽车的概率更大。

6. 随机变量与概率密度函数、累积分布函数

概率密度函数 (p.d.f.)

累积分布函数 (c.d.f.)

7. α分位数、中位数、众数

   定义：

   $$F(x_\alpha) = \alpha$$

   按照数值小的一方面积分定义。

   即，α-分位数称为下侧α-分位数，当然也可以对应的定义上侧α-分位数。

8. 直方图与概率密度函数

   联合概率密度分布函数$f(x, y)$

   边缘概率密度$f_x(x), f_y(y)$

   相互独立：

   $$f(x, y) = f_x(x) f_y(y)$$

9. 随机变量的函数

   - 一维随机变量

   函数 $a = a(x)$，x的概率密度函数$f(x)\mathrm{d}x$

   $$g(a)\mathrm{d}a = f(x)\mathrm{d}x$$

   得到：

   $$g(a) = f(x)\left|\frac{\mathrm{d}x(a)}{\mathrm{d}a}\right|$$

   - 多维随机变量的函数

     如：$z = xy$

     Mellin 卷积

     $$f(z) = \int_{-\infty}^{\infty} g(x) h(\frac{z}{x}) \frac{\mathrm{d}x}{|x|}$$

     Flourier 卷积

     $$f(z) \int_{-\infty}^{\infty} g(x) h(z - x) \mathrm{d}x$$

   - Jacobi 行列式

     做变换，将我们不关心的函数部分积分掉，得到我们关心的概率。

10. 期待值与方差

    期待值、方差、标准差

    - 期待值

    $$\mu = E[x] = \int x f(x) \mathrm{d}x$$

    - 协方差

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

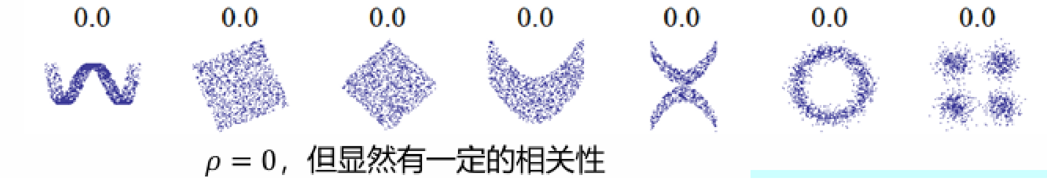
    - (Pearson)相关系数

$$\rho_{x,y}=\frac{\mathrm{cov}[x,y]}{\sigma_x\sigma_y}$$

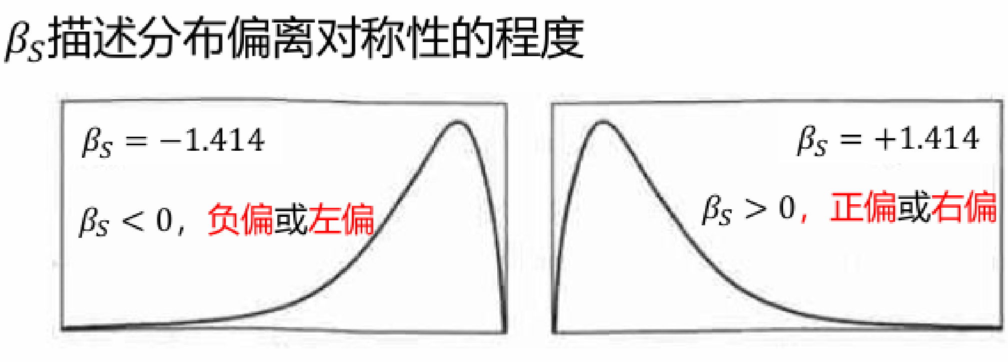
- 协方差矩阵V：

$$V_{ij}=\mathrm{cov}[x_i,x_j]$$

由定义，协方差矩阵为对称矩阵。

> 相关性定义的局限性：相关系数为0，但是不能说明x与y不相关。
>
> 其他的比较方式：秩相关性（只看顺序，不看数值）等等
>
> 
>

> 原点矩与中心矩
>
> $$\mu_k=E(X^k)$$
>
> $$\nu_k=E[(X-E(X))^k]$$

> 其他特征数：
>
> 偏度系数
>
> 
>

11. 特征函数

    对于随机变量X，称$\mathrm{e}^{\mathrm{i}tX}$的数学期望值为随机变量的特征函数。

    $$\varphi(t)=E[\mathrm{e}^{\mathrm{i}tX}]$$

    对于连续的情况，

    $$\varphi(t)=\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{e}^{\mathrm{i}tX}f(x)\mathrm{d}x$$

    特征函数的性质：

    如果XY相互独立，则特征函数

    $$\varphi_{X+Y}(t)=E[\mathrm{e}^{\mathrm{i}t(X+Y)}]=E[\mathrm{e}^{\mathrm{i}tX}\mathrm{e}^{\mathrm{i}tY}]=\varphi_X(t)\varphi_Y(t)$$

    > 一例：
    >
    > 已知随机变量$X_1,\ldots,X_n$服从相同的概率分布$f(x)$且相互独立，则如何计算$X=\Sigma_{i=1}^nX_i$的概率分布函数？
    >
    > 解：

> 将卷积转化为乘积，都化成特征函数处理。（傅里叶变换的性质）

12. 不确定度的传递

    问题表述：

    假设我们对某个量测量了一组值 $\vec{x}=(x_1,...,x_n)$，并得到其 协方差 $V_{ij}=\mathrm{cov}[x_i,x_j]$（表征与$x_i$有关的测量不确定度）。 不确定度的传递(1) 73 现考虑一函数 $y=y(\vec{x})$，如何求其方差$V[y]$?

    例：

    考虑随机变量X_1,X_2与不确定度σ_1,σ_2，计算$Y=f(X_1,X_2)$的不确定度?

    $$\sigma_Y=\sqrt{\left(\frac{\partial f}{\partial X_1}\right)^2\sigma_{X_1}^2+\left(\frac{\partial f}{\partial X_2}\right)^2\sigma_{X_2}^2+2\frac{\partial f}{\partial X_1}\frac{\partial f}{\partial X_2}\mathrm{cov}[X_1,X_2]}$$

    证明：

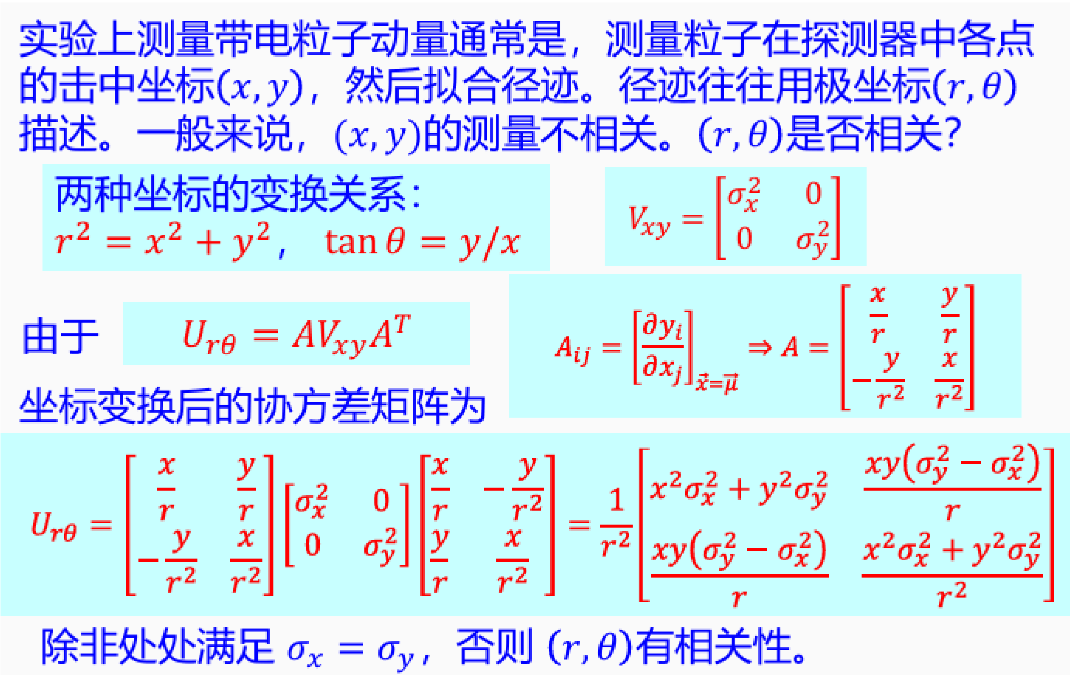
    认为误差不太大，将Y在平均值附近展开：

    $$y(\vec{x})=y(\vec{\mu})+\Sigma_{i=1}^n\frac{\partial y}{\partial x_i}(x_i-\mu_i)$$

    计算

    $$\sigma_y=E[y^2]-E[y]^2$$

    即可得到结果。

    > 随机变量之间的相关性往往与坐标选取有关，可以通过正交变换消除相关性。可以使用类似的方案得到结果：
    >
    > 
    >
    >
    > 由于实对称矩阵可以正交相似对角化，所以一定可以找到对角化的协方差矩阵。

chap 02 常用概率分布

二项分布

1. 定义

   N 次**独立**测量(伯努利试验)，每次**只有**成功(概率始终为p) 或失败(概率为$1-p$)两种可能。

   定义随机变量n为成功的次数，则n服从二项分布：

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

记作 $B(N,p)$。

2. 平均值与方差

   随机变量n的平均值

   $$E[n]=Np$$

   方差

   $$V[n]=Np(1-p)$$

   > 例：计算探测效率与探测效率的不确定度。
   >
   > 探测效率
   >
   > $$\varepsilon=\frac{N'}{N}$$
   >
   > 假设探测到的粒子数遵循二项分布，（$E(N')=N\varepsilon$）
   >
   > 则
   >
   > $$\Delta\varepsilon=\frac{\Delta N}{N}=\frac{\sqrt{N\varepsilon(1-\varepsilon)}}{N}$$

多项分布

- 测量的结果不止一种，将其中一种视为成功，其他视作失败，则变为二项分布。

泊松分布

- 泊松分布可以看作二项分布的极限近似，在$N\to\infty,p\to 0,N\to\nu$的情况下，得到：

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

- 均值

  $$E[n]=\nu$$

  方差

  $$V[n]=\nu$$

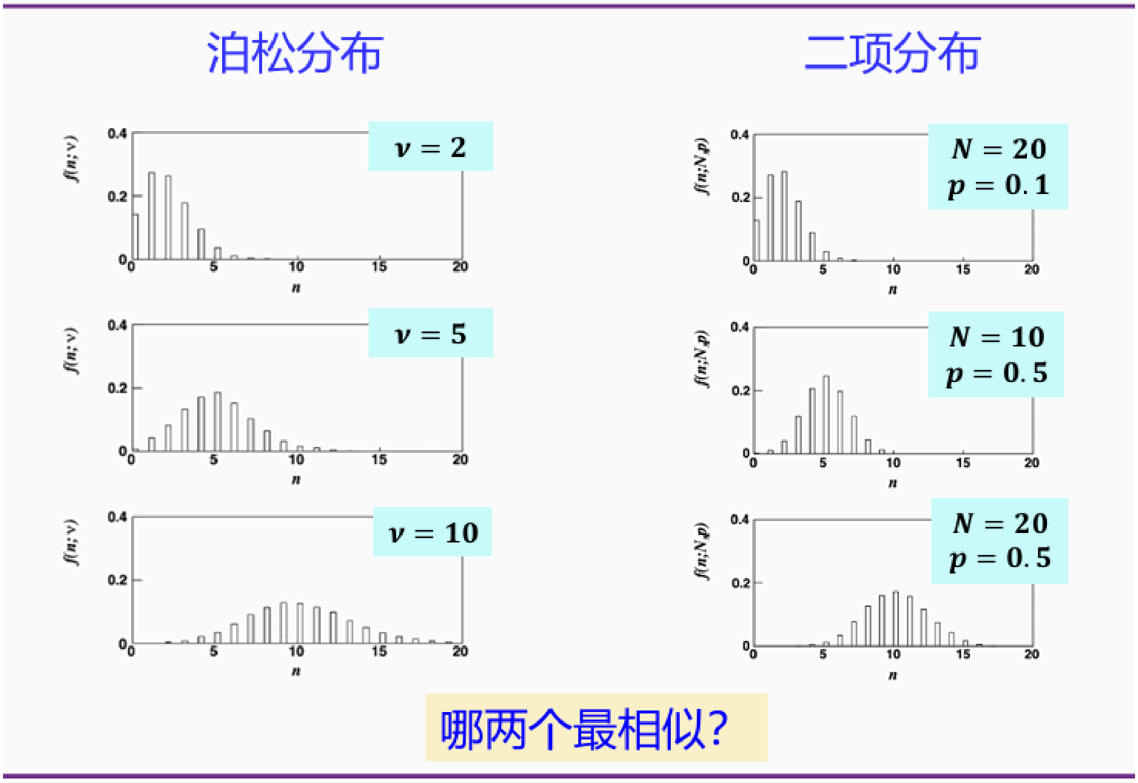
  泊松分布的特点：$n\pm\sqrt{n}$

- 泊松过程——泊松分布的产生

  条件：

  - 单位时间事件发生的概率固定
  - 同时发生两次事件几乎不可能（每次事件发生的概率低）
  - 每次事件发生是相互独立的

> 例：



N越大，p越小，泊松分布与二项分布越接近！

例：

假设某人站在路边想搭便车。

（1）每分钟过路的汽车数服从泊松分布，平均每分钟过路一辆，计算一小时通过的汽车数的分布。

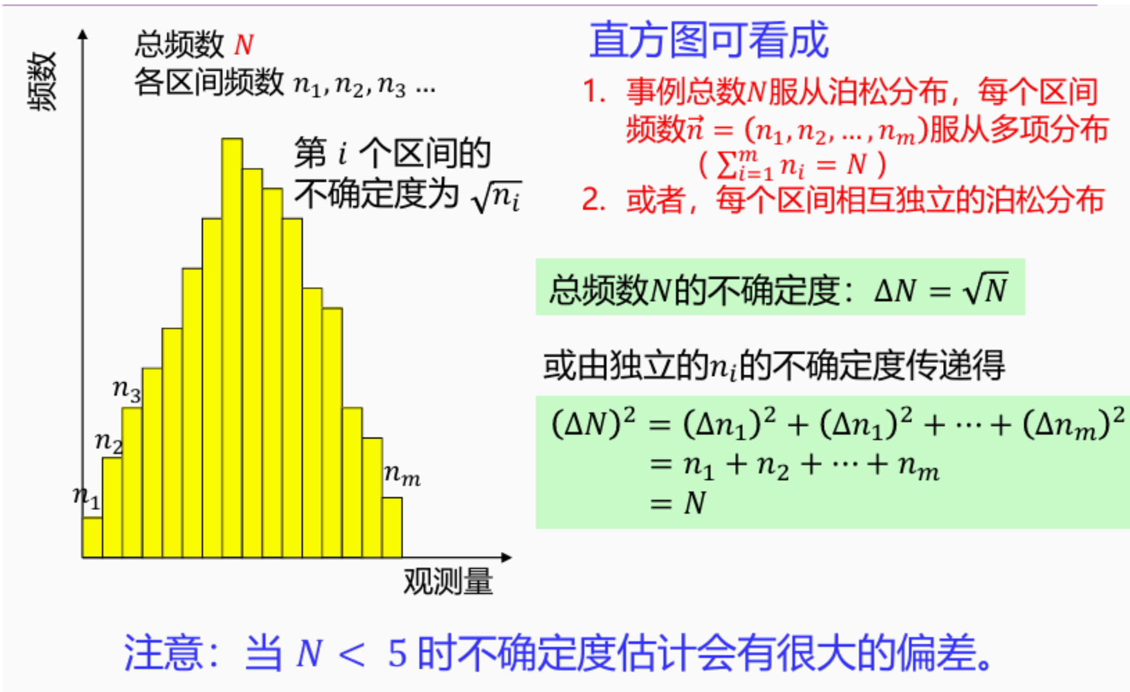
（2）每分钟过路的汽车数服从泊松分布，平均每分钟过路一辆。假设每辆车让搭便车的概率为 1%，并相互独立。 计算过了60辆车后还未能搭上车的概率。

解：

对于问题1，分布显然满足泊松分布的条件（时间可以无限细分，时间无限短的时候通过的汽车数目趋于零）。

对于问题2，分布满足二项分布的条件。

例：



均匀分布

1. 函数形式

$$f(x;\alpha,\beta)=\begin{cases}\dfrac{1}{\beta-\alpha},\alpha<x<\beta\\ \qquad 0,\text{else.}\end{cases}$$

2. 均值与方差

$$E[x]=\frac{\alpha+\beta}{2}$$

$$V[x]=\frac{(\beta-\alpha)^2}{12}$$

> 均匀分布是蒙特卡洛方法实现的基础!

指数分布

1. 函数形式

$$f(x;\xi)=\begin{cases}\dfrac{1}{\xi}\mathrm{e}^{-x/\xi},x>0\\ \qquad 0,\text{else}\end{cases}$$

2. 期望与方差

$$E[x]=\xi,V[x]=\xi^2$$

> 指数分布没有记忆性，可以任意选取开始位置!

高斯分布

1. 函数形式

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

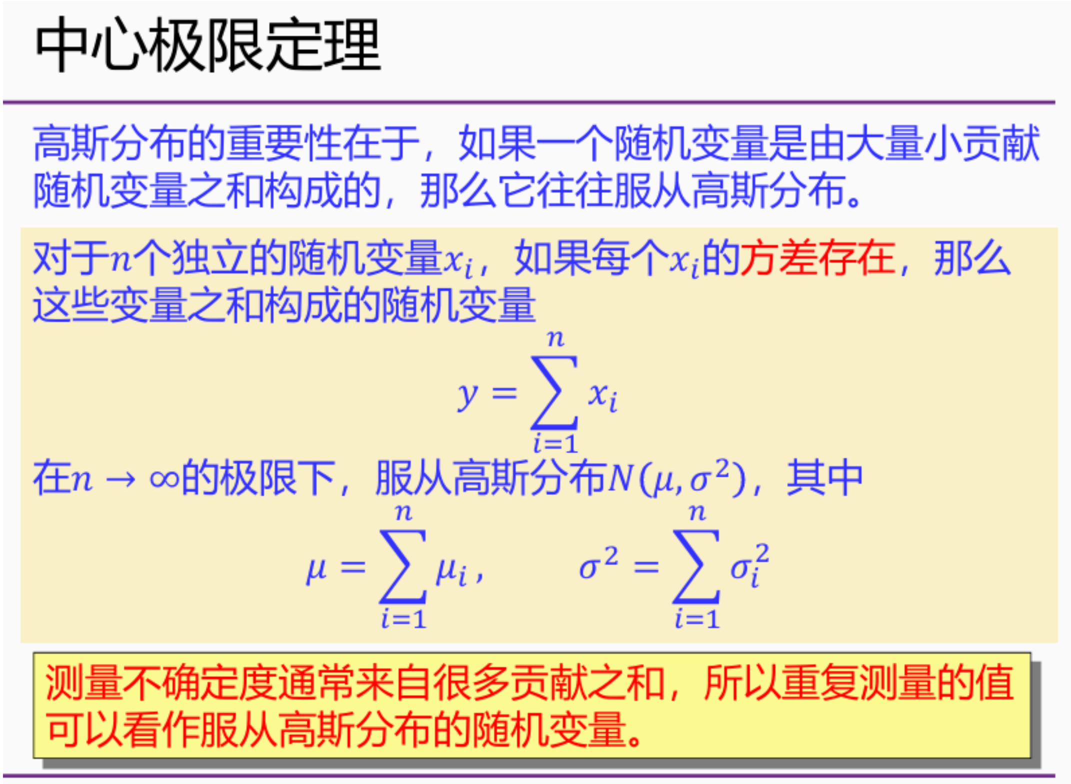
记作 $N(\mu,\sigma^2)$ 。

2. 期望值

$$E[x] = \mu$$

方差

$$V[x] = \sigma^2$$

> 高斯分布是对连续变量概率分布的的很好近似。
>
> 
>
>
> 注意，变量y的分布形式与x原来的分布形式无关。

> 多维高斯分布通过协方差矩阵定义：
>
> $$f(\vec{x}; \vec{\mu}, V) = \frac{1}{(2\pi)^{n/2}|V|^{1/2}} \mathrm{e}^{\left[\frac{1}{2}(\vec{x}-\vec{\mu})^T V^{-1}(\vec{x}-\vec{\mu})\right]}$$

> 对于二维高斯分布可以证明

卡方分布

1. 定义

   对于相互独立的高斯随机变量$x_1, \ldots, x_n$，定义

   $$z = \sum_{i=1}^{n} \frac{(x_i - \mu_i)^2}{\sigma_i^2}$$

   得到z满足的分布：

   $$f(z; n) = \frac{1}{2^{n/2}\Gamma(n/2)} z^{n/2-1} \mathrm{e}^{-z/2}$$

   记作$\chi^2(n)$

2. 均值

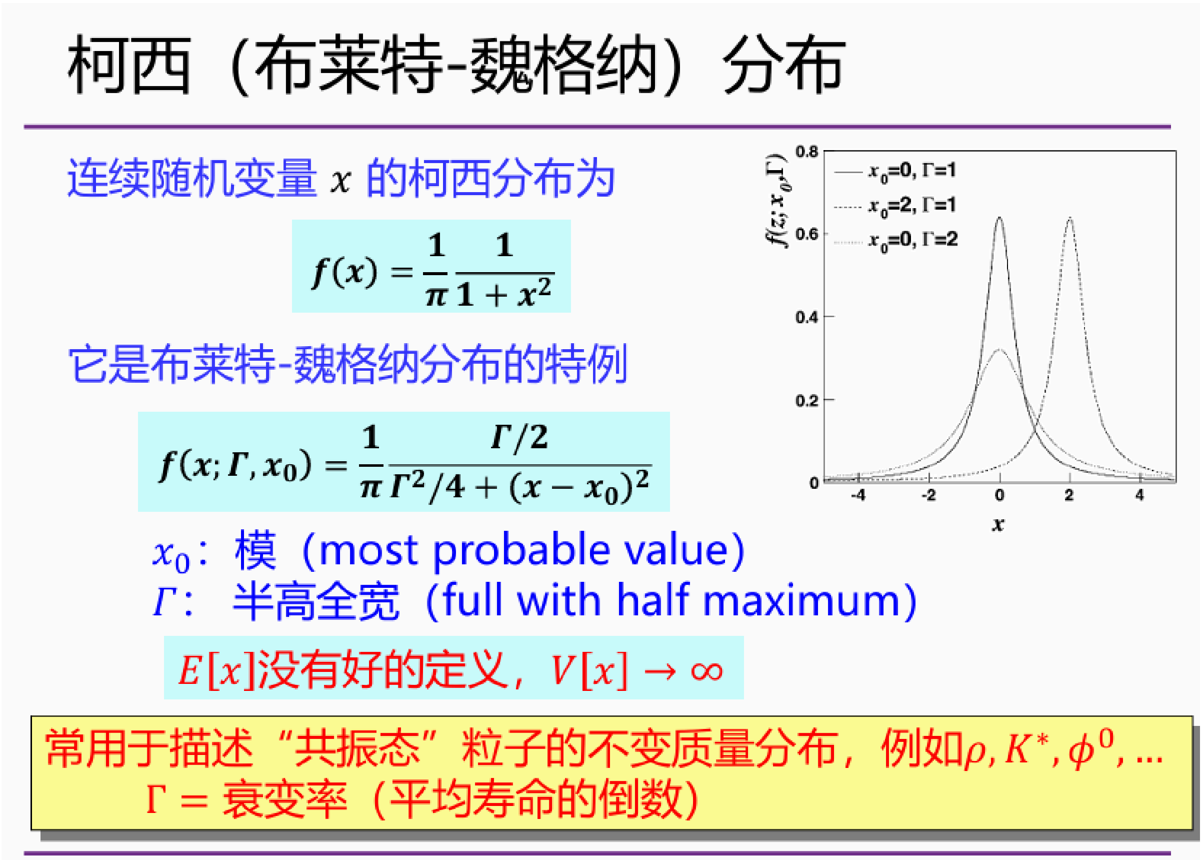
   $$E[z] = n$$

方差

$$V[z] = 2n$$

> 例：最小二乘法的拟合优度检验
>
> $$y = f(x) = kx + b$$
>
> 改变k与b的取值，使得
>
> $$\chi^2 = \sum_{i=1}^{n} \frac{(y_i - f(x_i))^2}{\sigma_i^2}$$
>
> 极小。此时我们认为估计的结果是最好的。
>
> 不断重复实验，得到一系列卡方的值，这个值满足自由度为$(n-2)$的卡方分布。
>
> > 拟合优度：
> >
> > P值（假设检验）判断有多大的概率出错（理论模型与实际情况是否可以认为相符）

柯西分布



朗道分布

速度为$\beta = v/c$的带电粒子穿过厚度为 d 的薄物质层，其能量损失 Δ 服从朗道分布：

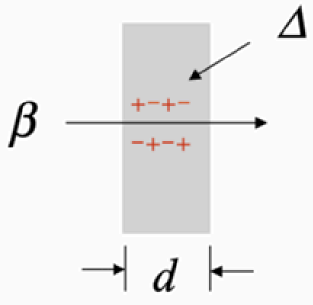
$$\boxed{f(\Delta;\beta) = \frac{1}{\xi}\phi(\lambda),}$$

$$\phi(\lambda) = \frac{1}{\pi}\int_0^\infty e^{-u\ln(u)-\lambda u}\sin \pi u\, du$$

$$\lambda = \frac{1}{\xi}\left[\Delta - \xi\left(\ln\frac{\xi}{\epsilon'} + 1 - \frac{1}{\sqrt{1-\beta^2}}\right)\right]$$

$$\xi = \frac{2\pi N_A e^4 z^2 \rho \Sigma Z}{m_e c^2 \Sigma A}\frac{d}{\beta^2}$$

$$\epsilon' = \frac{I^2(1-\beta^2)\exp(\beta^2)}{2m_e c^2\beta^2}$$

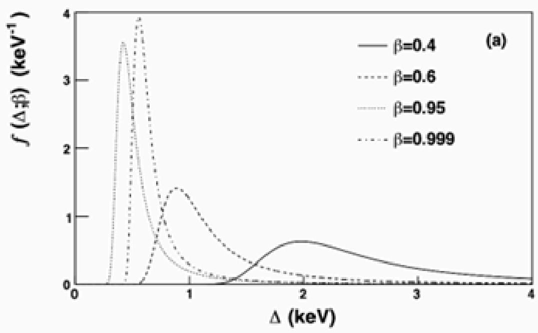


厚度 d 增大时，趋于正态分布。

常用于描述粒子的电离能损或能量沉积。

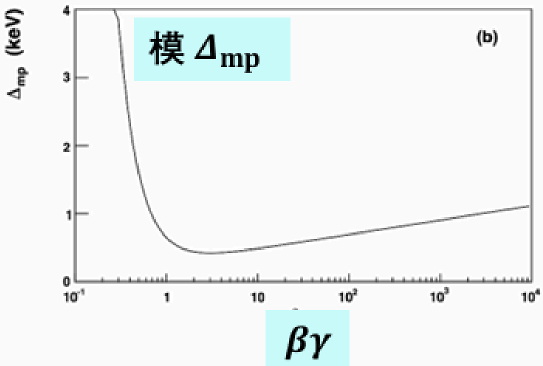
朗道分布有长的“朗道尾部”

➔ 所有的矩都发散



模（most probable value）对β很敏感

➔ 可用于粒子鉴别(PID)



贝塔分布

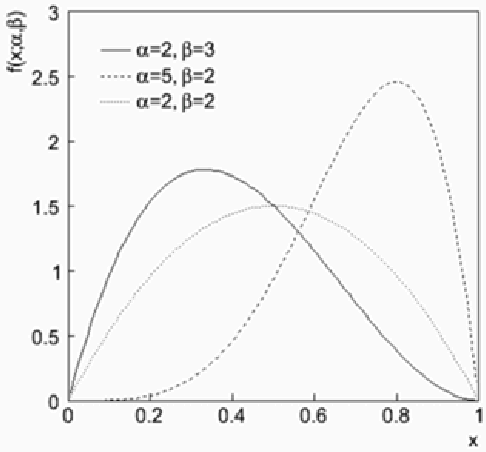
连续随机变量$0 < x < 1$的贝塔分布为：

$$f(x;\alpha,\beta)=\frac{\Gamma(\alpha+\beta)}{\Gamma(\alpha)\Gamma(\beta)}x^{\alpha-1}(1-x)^{\beta-1}$$

简记$Be(\alpha,\beta)$

$$E[x]=\frac{\alpha}{\alpha+\beta}$$

$$V[x]=\frac{\alpha\beta}{(\alpha+\beta)^2(\alpha+\beta+1)}$$



$$Be(1,1)=U(0,1)$$

常用来表示只在某个有限区间非零的连续随机变量。

> $\alpha=\beta=1$变为均匀分布。

伽马分布

连续随机变量 x 的伽马分布为：

$$f(x;\alpha,\beta)=\frac{1}{\Gamma(\alpha)\beta^{\alpha}}x^{\alpha-1}e^{-x/\beta}$$

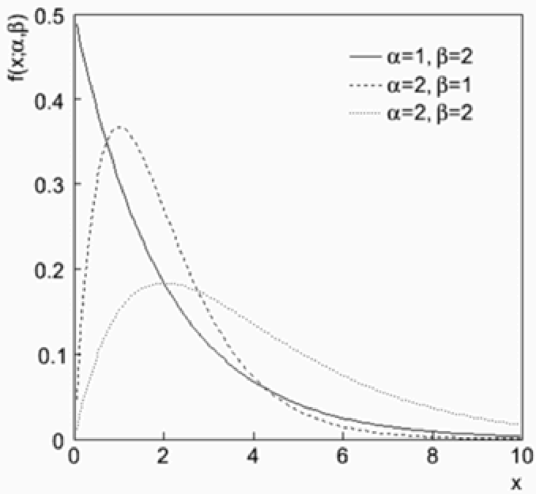
简记$Ga(\alpha,\beta)$

$$E[x]=\alpha\beta$$

$$V[x]=\alpha\beta^2$$

$$Ga(1,\xi)=Exp(\xi)$$

$$Ga(n/2,2)=\chi^2(n)$$



常用来表示在$[0,\infty]$内不为零的连续随机变量。

例：n个指数分布随机变量的和，泊松过程第n个事件发生的时间。

学生氏分布

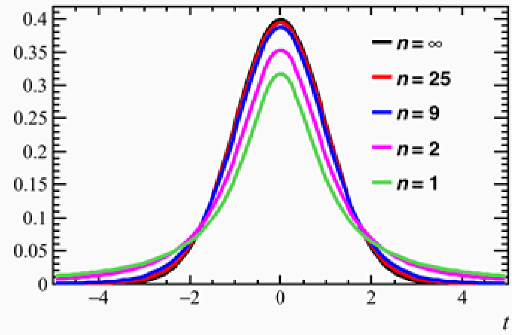
连续随机变量 x 的自由度为ν的学生氏分布为：

$$f(x;\nu)=\frac{\Gamma\left(\frac{\nu+1}{2}\right)}{\sqrt{\nu\pi}\,\Gamma(\nu/2)}\left(1+\frac{x^2}{\nu}\right)^{-\frac{\nu+1}{2}}$$

简记$t(\nu)$

$$E[x]=0\ \ (\nu>0)$$

$$V[x]=\frac{\nu}{\nu-2}$$



ν：自由度的数目（可以不是整数）

$$t(1)\ =\text{柯西分布}$$
$$t(\infty)=N(0,1)$$

chap 03 蒙特卡罗方法 Monte Carlo Method

方法简介

应用场景

1. 对于分布不方便解析求解；
2. 没有必要进行解析求解。
3. 处理高维数值定积分方面具有独特的优势。

使用方法

- 使用MC方法计算定积分：
  1. 生成随机数序列$r_1,...,r_n$；
  2. 按照函数$f(x)$生成随机数序列$x_1,...x_n$；
  3. 根据函数所占比例计算积分值。
- 使用MC方法进行数据模拟。

随机数的产生

- 用物理方法产生真随机数：不可重复，产生速度慢
- 用数学方法产生伪随机数：可重复，产生速度快

随机数产生子

函数变换法与舍选法

函数变换法

考虑随机变量$r = F(x) = \int f(x)\mathrm{d}x$

$$g(r)\mathrm{d}r = f(x)\mathrm{d}x$$

$$g(r) = 1$$

故知随机变量r为均匀分布。

取$x = F^{-1}(r)$，随机生成0-1之间的均匀分布，就可以得到x的分布。

> 对于指数分布$f(x) = \mathrm{e}^{-x}$，进行处理得到：
>
> $$r = F(x) = 1 - \mathrm{e}^{-x}$$
>
> $$x = -\ln(1-r)$$
>
> 实现代码如下：

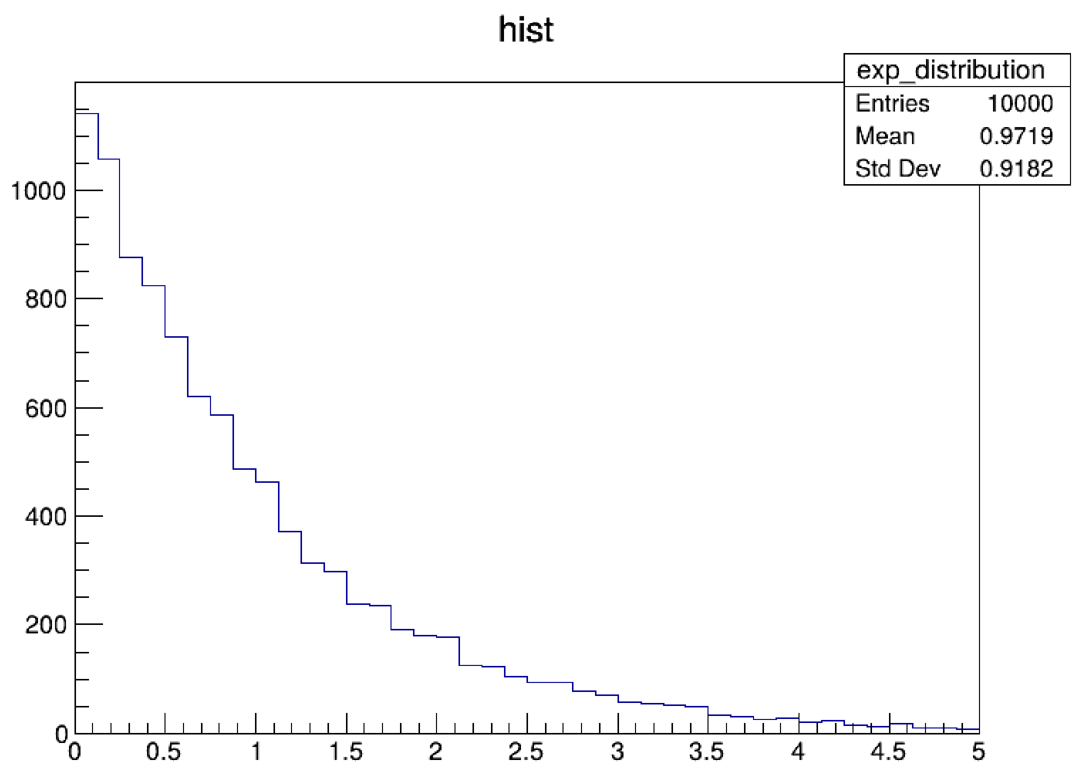
```
import ROOT
import math
rnd = ROOT.TRandom3()

hist = ROOT.TH1F('exp_distribution', 'hist', 40, 0, 5)

for i in range(10000):
hist.Fill(-math.log(1-rnd.Rndm()))

canvas = ROOT.TCanvas('canvas', 'Canvas', 800, 600)
hist.Draw()

canvas.SaveAs('exp_distribution.png')
```



蒙特卡罗方法在物理实验中的应用

习题

1. 公平的抽签：袋中有r个红球与b个黑球，现任意不放回地一一摸出，求事件第k次摸出红球的概率.

   解：

   $$P(K)=\frac{r}{r+b}$$

   样本空间

   $$n_\Omega=(r+b)!$$

   成功的次数

   $$n_A=r\cdot(r+b-1)!$$

   概率

   $$P(A)=\frac{n_A}{n_\Omega}=\frac{r}{r+b}$$

2. 生日问题：求任意n（n≤365）个人中，至少有两个人生日相同的概率。

   解：

   将事件转化成对立事件进行计算。n个人生日各不相同的概率为

   $$P(\overline{A})=\frac{n_{\overline{A}}}{n_\Omega}=\frac{\frac{365!}{(365-n)!}}{365^n}=(1-\frac{1}{365})\cdots(1-\frac{n-1}{365})$$
   $$P(A)=1-P(\overline{A})$$

3. 约会问题：小明和小红二人约定在[0,T]时段内去未名湖会面，规定先到者等候一段时间t(t≤T)再离开。试求小明和小红将会面的概率。

   解：

   两人出现的时间范围在$[0,T]$之间均匀分布，在两者事件相差的绝对值为t之内的情形可以相遇。

   $$P(A)=\frac{n_A}{n_\Omega}=1-\frac{(T-t)^2}{T^2}$$

4. 贝特朗奇论：1889 年，法国数学家贝特朗提出下述几何概率问题，并给出三种不同的答案。这就使有的人对当时的概率论中的一些概念与方法产生怀疑，因此被称作＂奇论＂。请思考： 在单位圆上任作一弦，求弦长大于$\sqrt{3}$的概率.

   解：

   这与任意的方式具有相关性，对于任意的理解不同会导致结果不同。

   可以任意先选择圆周上的一个点，然后任意选择一个角度；或者任意选择弦的中点的位置。

5. 有n个人参加聚会，每个人都随身带了一份礼物，之后把礼物混合放在一起。会后每个人随机拿取一份礼物。求至少有一个人拿到了自己的礼物的概率。

   解：

   事件A_i代表第i个人拿到属于自己的礼物，则

$$P(\cup_{i=1}^n A_i) = \frac{C_n^1}{A_n^1} - \frac{C_n^2}{A_n^2} + \cdots + (-1)^{n+1}\frac{C_n^n}{A_n^n} = 1 - \frac{1}{2!} + \frac{1}{3!} - \cdots + (-1)^{n+1}\frac{1}{n!}$$

6. 有n个人参加聚会，每个人都随身带了一份礼物，之后把礼物混合放在一起。会后每个人随机拿取一份礼物。求恰好有 k 个人拿到了自己的礼物的概率。

   解:

$$P = \frac{1}{k!}\sum_{i=1}^{n-k}\frac{(-1)^i}{i!}$$

7. 二项分布，泊松分布，高斯分布的特点以及转化关系

8.

   假设有一系列独立同分布的随机变量 $X_i \sim U(0,1)$, $i = 1, 2, \cdots$。定义

$$N_a = \min\left\{k : \prod_{i=1}^{k} X_i < a\right\} \quad (0 < a < 1).$$

   求 N_a 的分布。

   解:

$$P(N_a = n_0) = \int_a^1 \mathrm{d}x_1 \int_{a/x_1}^1 \mathrm{d}x_2 \cdots \int_{a/x_1\cdots x_{n_0-2}}^1 \mathrm{d}x_{n_0-1} \int_0^{a/x_1\cdots x_{n_0-1}} \mathrm{d}x_{n_0} = \frac{a}{(n_0-1)!}(-\ln a)^{n_0-1}$$

9. $Z = XY, X+Y, Y/X, \min X, Y, \max X, Y$ 的随机变量分布

   实例：计算存在两种衰变方式时的粒子寿命。

   分析:

   设粒子的寿命为x，则粒子寿命小于等于a的概率（累积分布函数）:

$$H(a) = P(x \le a) = 1 - P(x > a) = 1 - P(x_1 > a)P(x_2 > a) = 1 - [1 - F(a)][1 - G(a)]$$

   同理可以计算出

$$P(x \le a) = P(x \le a_1)P(x \le a_2)$$

   下面对实例进行处理:

$$f(x) = \lambda_1 \mathrm{e}^{-\lambda_1 x}$$
$$g(x) = \lambda_2 \mathrm{e}^{-\lambda_2 x}$$
$$F(x) = 1 - \mathrm{e}^{-\lambda_1 x}$$
$$G(x) = 1 - \mathrm{e}^{-\lambda_2 x}$$
$$H(x) = 1 - \mathrm{e}^{-(\lambda_1+\lambda_2)x}$$
$$h(x) = (\lambda_1 + \lambda_2)\mathrm{e}^{-(\lambda_1+\lambda_2)x}$$

   得到粒子寿命:

$$\tau = \frac{1}{\frac{1}{\tau_1} + \frac{1}{\tau_2}}$$

   例:

   $X, YU(0,1), Z = \min(X, Y)/\max(X, Y)$

令$u=\min$, $v=\max$

$$f(u,v)=2, 0\leq u\leq v\leq 1$$

10. 某粒子在 A 气体中的平均自由程为L_A，在 B 气体中的平均自由程为L_B，求它在 AB 等量混合气体中的平均自由程
11. 习题 1.13， 1.14，1.15 讲解

    相关性：线性相关，即：$Y=X^2$的关系不能得到验证

    习题 1.13. 假设 X 和 Y 是两个连续的随机变量，且其方差有限。证明相关系数 $\rho \equiv \frac{\mathrm{cov}(X,X)}{\sigma_X\sigma_Y}=\pm 1$ 的充要条件是 X 与 Y 几乎处处有线性关系，即存在常数 $a\neq 0$ 和 b 使得 $Y=aX+b$。

    构造统计量$U=Y-aX-b$，计算$\sigma[U], E[U]$, 证明二者均为零即可。

    不妨取：

    $$b=E$$

12. 重期望法则

    $$E[E[X|Y]]=E[X]$$

13. Stein's lemma
14. 一名矿工被困在一个有三扇门的矿井中。如果选择 1 号门，3 小时后可以到达安全区域；如果选择 2 号门，5 小时后会回到原来的位置；如果选择 3 号门，7 小时会回到原来的位置。如果假设这名矿工对走过的门没有记忆，每次都以相等的概率选择每扇门，那么他平均需要多少时间才能到达安全区域？

    $$\begin{aligned}&E[X|Y=1]=3\\&E[X|Y=2]=5+E[X]\\&E[X|Y=3]=7+E[X]\\&E[X]=E[E[X|Y]]=\frac{1}{3}(E[X|Y=1]+E[X|Y=2]+E[X|Y=3])\end{aligned}$$

    可以解出$E[X]$。

15. Skewness（偏度） 与 Kurtosis（峰度）

chap 04 统计检验

假设、检验、显著水平、功效、临界域

- 假设 hypothesis（pl. hypotheses）

  假设->物理理论：预测数据出现的概率，通过实验进行检验。

  简单假设：给出的假设H_0可以完全确定概率密度函数$f(x|H)$，称为假设的似然值（likelihood）$L(x|H)$.

  > 假设的似然值：假设成立时可观测量x出现的概率$f(x|H)$，即$x\sim f(x|H)$.

  符合假设：仍然包含未确定的参数。

- 检验

  零假设（null hypothesis）H_0与备择假设（alternative hypothesis）H_1。

  对简单假设H_0的检验：在假设H_0正确的情形下，在临界域W内观测到结果的（小）概率不超过α，即

  $$P(x\in W|H_0)\leq\alpha$$

α：显著性水平/检验大小

> 一般情形下α的取值范围在$10^{-6}\sim 10^{-7}$之间。

临界域：拒绝域，补集称为接受域。

- 第一类错误与第二类错误
  - 第一类错误：假设H_0为真，但是假设被拒绝。这类错误犯错的最大概率$P(x\in W|H_0)$就是显著性水平α。
  - 第二类错误：假设H_0为假，但是假设H_1为真。这类错误的概率为$P(x\in S-W|H_1)=\beta$，$1-\beta$称为功效（检验对于排除备择假设H_1的效力）。

> 一般而言，调整临界域不可能使得α与β同时减小，但是增大样本量可以实现这一点。

- 临界域的选择：单边检验与双边检验

信号本底的甄别

对于一次测量的实验结果通常不止是一个数值，而是一个向量$\vec{x}=(x_1,x_2,\cdots x_n)$，我们需要构造检验统计量来检验假设是否正确。

检验统计量t

构造一个标量检验统计量$t=t(x_1,x_2,\cdots,x_n)$，对假设进行检验。检验统计量也可以直接取为矢量$\vec{t}=\vec{t}(x_1,x_2,\cdots,x_n)$。

纯度

事例选择的纯度：信号事例被正确分类的概率。（换言之，被判断为信号的所有事例中真正为信号的事例所占的比例。）

$$P(s|x\in W)=\frac{P(x\in W|s)P(s)}{P(x\in W|s)P(s)+P(x\in W|b)P(b)}$$

检验效率

信号事例被接受的概率（被接受的信号事例占所有信号事例的比例）

即：

$$\varepsilon_s=\int f(t|s)\mathrm{d}t=1-\alpha$$

Neyman-Pearson引理与检验统计量的构造

对于多维统计检验量，应当如何选取最佳的临界域？

Neyman-Pearson引理

在给定效率的条件下，想要得到最高纯度的信号样本，接受域的选择可以为：

$$\frac{g(\vec{t}|H_0)}{g(\vec{t}|H_1)}>c$$

检验统计量可以取为

$$r=\frac{g(\vec{t}|H_0)}{g(\vec{t}|H_1)}$$

引理的证明(from https://chatgpt.com)

下面给出内曼–皮尔逊引理（Neyman–Pearson定理）的一个经典证明。假设我们要在两种简单假设之间做出检验：

- 零假设 H_0：随机变量 X 的概率密度（或概率质量）函数为 $p(x)$；
- 备择假设 H_1：X 的密度为 $q(x)$。

我们希望构造一个检验函数 $\phi(x)$，其中

$$\phi(x) = \begin{cases} 1, & \text{拒绝 } H_0, \\ 0, & \text{接受 } H_0. \end{cases}$$

（为简单起见，也可以允许在边界点上取介于 0 和 1 的值以调整精确水平。）

定理的结论是：在所有显著性水平不超过 α 的检验中，以似然比为依据的检验

$$\phi^*(x) = \begin{cases} 1, & \text{当 } \dfrac{q(x)}{p(x)} > k, \\ 0, & \text{当 } \dfrac{q(x)}{p(x)} < k, \end{cases}$$

（在 $\frac{q(x)}{p(x)} = k$ 的点上可能随机化，使得 $E_{H_0}[\phi^*(X)] = \alpha$）具有最大的统计功效，也就是说对于任何其它检验 $\phi(x)$（其第一类错误率不超过 α），都有

$$E_{H_1}[\phi^*(X)] \geq E_{H_1}[\phi(X)].$$

下面是证明步骤：

---

1. 构造最优检验

设我们构造的似然比检验函数为

$$\phi^*(x) = \begin{cases} 1, & \dfrac{q(x)}{p(x)} > k, \\ \gamma(x), & \dfrac{q(x)}{p(x)} = k, \\ 0, & \dfrac{q(x)}{p(x)} < k, \end{cases}$$

其中 $k > 0$ 和 $\gamma(x) \in [0, 1]$ 取值，使得该检验的显著性水平满足

$$E_{H_0}[\phi^*(X)] = \int \phi^*(x) p(x)\, dx = \alpha.$$

---

2. 对任一水平不超过 α 的检验比较功效

设任一其它检验函数为 $\phi(x)$，满足

$$E_{H_0}[\phi(X)] = \int \phi(x) p(x)\, dx \leq \alpha.$$

我们要证明

$$E_{H_1}[\phi^*(X)] - E_{H_1}[\phi(X)] \geq 0.$$

为此，考虑积分

$$I = \int \big[\phi^*(x) - \phi(x)\big] \Big[q(x) - k\,p(x)\Big]\,dx.$$

注意： 根据 $\phi^*(x)$ 的构造，

- 当 $\frac{q(x)}{p(x)} > k$ 时，$\phi^*(x) = 1$；此时 $q(x) - k\,p(x) > 0$，故 $\phi^*(x) - \phi(x) \geq 0$ 时乘上正数得非负；
- 当 $\frac{q(x)}{p(x)} < k$ 时，$\phi^*(x) = 0$；此时 $q(x) - k\,p(x) < 0$，而 $\phi^*(x) - \phi(x) = -\phi(x) \leq 0$，乘上负数依然非负；
- 在 $\frac{q(x)}{p(x)} = k$ 的点上，由于可以通过随机化调整，积分对这一处的贡献为零（或可以忽略）。

因此可以证明 $I \geq 0$。

---

3. 将积分 I 与各检验的期望联系起来

将 I 展开得：

$$I = \int \phi^*(x)q(x)\,dx - k\int \phi^*(x)p(x)\,dx - \Big[\int \phi(x)q(x)\,dx - k\int \phi(x)p(x)\,dx\Big].$$

也就是说，

$$E_{H_1}[\phi^*(X)] - k\,E_{H_0}[\phi^*(X)] - [E_{H_1}[\phi(X)] - k\,E_{H_0}[\phi(X)]] \geq 0.$$

由于按构造 $E_{H_0}[\phi^*(X)] = \alpha$ 而 $E_{H_0}[\phi(X)] \leq \alpha$，则

$$E_{H_1}[\phi^*(X)] - k\alpha \geq E_{H_1}[\phi(X)] - k\,E_{H_0}[\phi(X)] \geq E_{H_1}[\phi(X)] - k\alpha.$$

从而可得

$$E_{H_1}[\phi^*(X)] \geq E_{H_1}[\phi(X)].$$

这说明在所有显著性水平不超过 α 的检验中，似然比检验 ϕ^* 的功效是最大的。

---

4. 总结

以上证明利用了如下关键思想：

- 将两种检验函数之差乘以 $q(x) - k\,p(x)$ 后积分，利用似然比检验的构造保证该乘积非负。
- 从而证明了似然比检验在 H_1 下的期望（功效）至少不低于任何其它同水平检验。

这便是内曼–皮尔逊引理的证明，其结论说明在两个简单假设的情形下，基于似然比的检验是均匀最优的，即在控制第一类错误率（显著性水平）的条件下，其功效最大。

参考

本证明的思路与标准教材中给出的证明类似，例如参见

- [维基百科：内曼–皮尔逊引理]
- [知乎：Neyman–Pearson基本引理证明]

希望这个证明能帮助你理解内曼–皮尔逊定理的基本原理和数学推导过程。

线性检验统计量、费舍尔(Fisher)甄别函数

$$J(\boldsymbol{a})=\frac{\boldsymbol{a}^T B\boldsymbol{a}}{\boldsymbol{a}^T W\boldsymbol{a}}$$

注意到这是关于a的齐次函数，所以需要在固定a的模长的情况下进行偏导数运算。

不妨假设 $\boldsymbol{a}W\boldsymbol{a}^T=1$，得到

$$J(\boldsymbol{a})=\boldsymbol{a}^T B\boldsymbol{a}-\lambda(\boldsymbol{a}^T W\boldsymbol{a}-1)$$

对其求偏导数$\frac{\partial J(\boldsymbol{a})}{\partial \boldsymbol{a}}$得到

$$B\boldsymbol{a}=\lambda W\boldsymbol{a}$$

$$W^{-1}B\boldsymbol{a}=\lambda\boldsymbol{a}$$

即$\boldsymbol{a}$是矩阵$W^{-1}B$的特征向量。

再注意到

$$\begin{aligned}B_{ij}a_j=(\mu_0-\mu_1)_i\boxed{(\mu_0-\mu_1)_j a_j}=\lambda_a(\mu_0-\mu_1)_i\\ =\lambda_a\end{aligned}$$

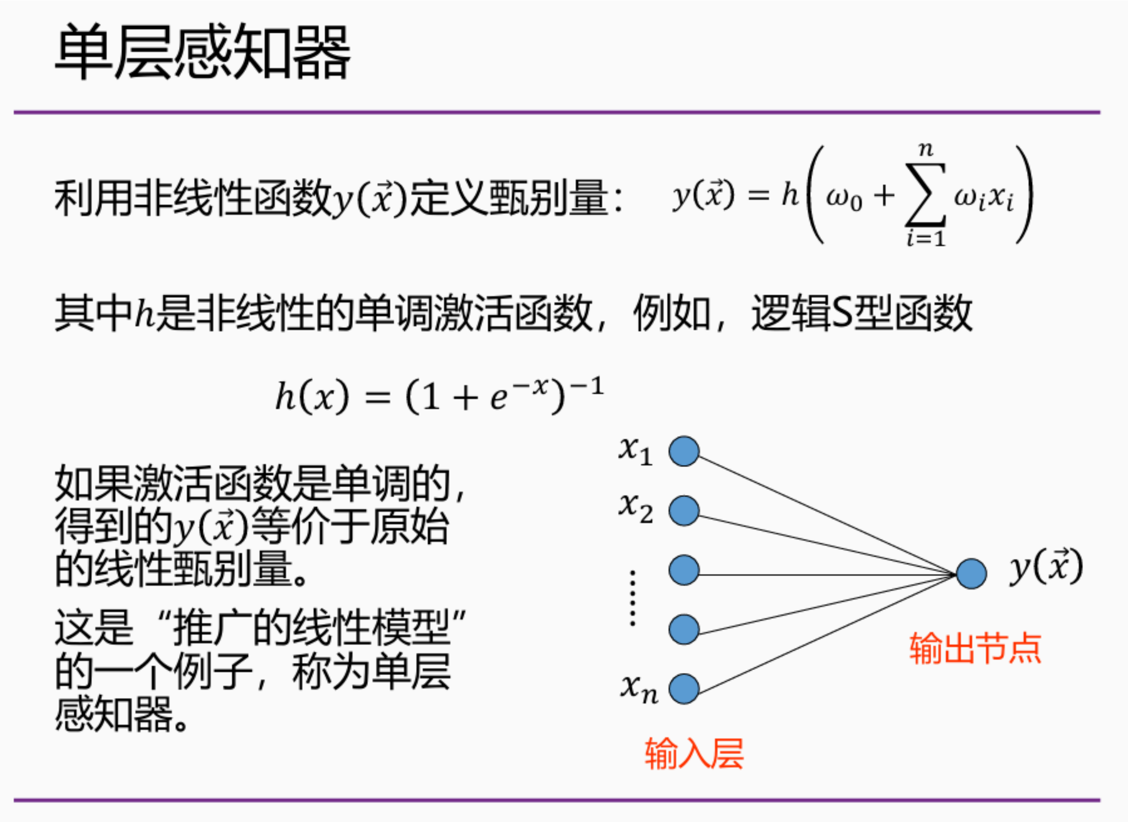
最终得到:

$$a\propto W^{-1}(\mu_0-\mu_1)$$

在高斯分布的情形下，Fisher检验统计量给出的结果与Neymann-Pearson引理的结果相同。在其他情形下并不相同，但是可以通过做变换实现更好的结果。

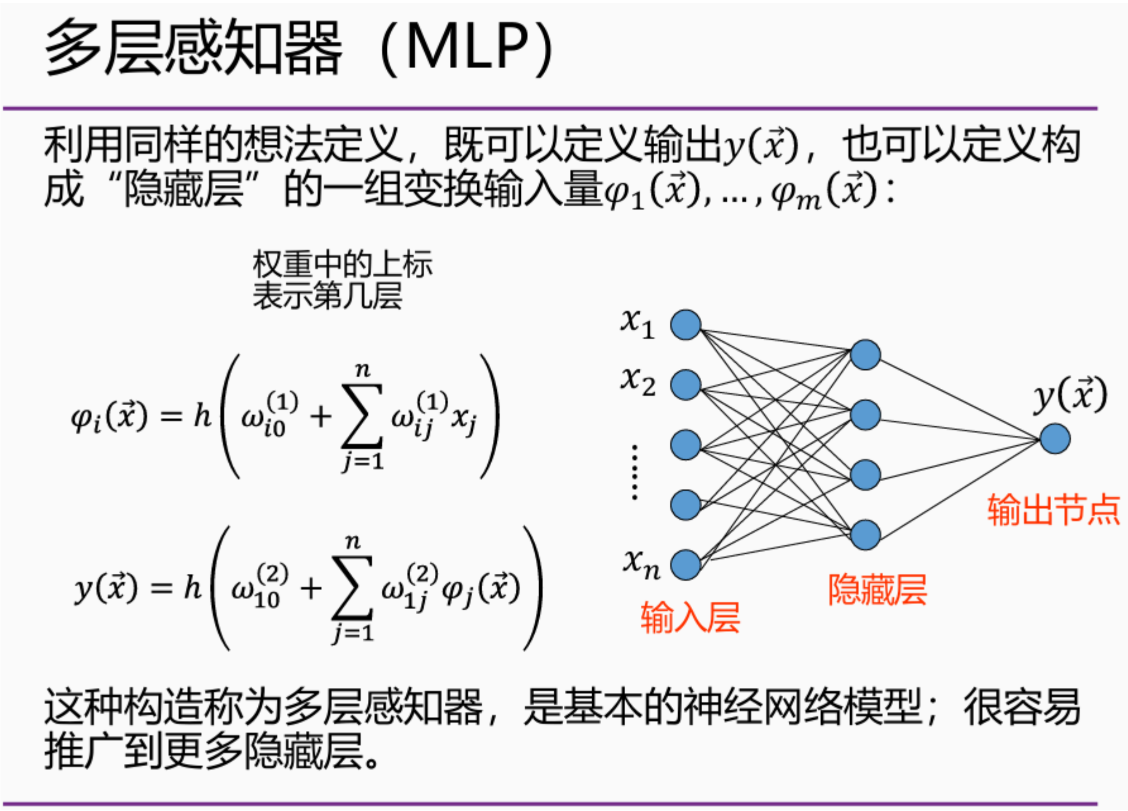
（待续：高斯分布情形下证明相同）

> 神经网络:
>
> - 单层感知器:
>
>   输入层->输出层



- 多层感知器：

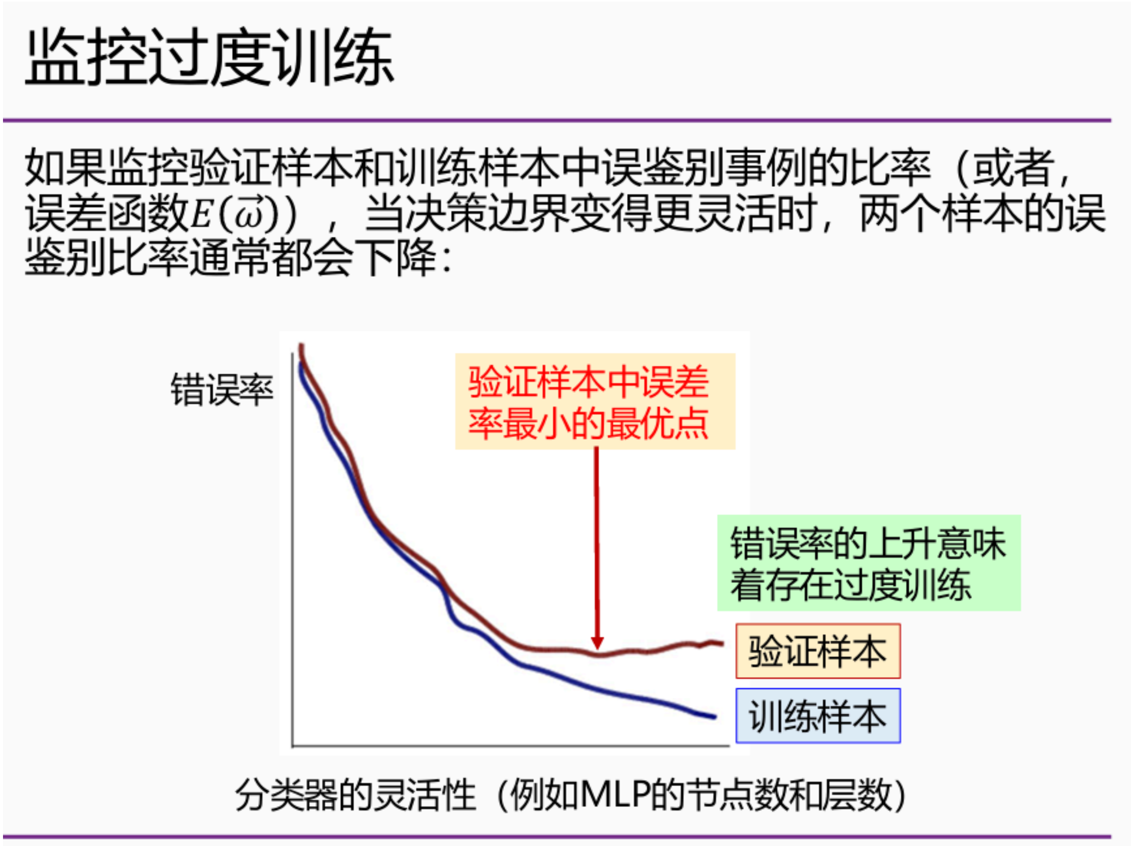
  输入层->隐藏层->输出层



确定中间的参数是机器学习核心的内容！

- 过度训练(overfitting)

  参数过多，对训练数据的符合非常好，但是反而不能准确预测其他数据的结果。

> 
>
>
> - 输入变量选择
>
>   如果输入变量的相关性较强，常常对结果的影响不大。如，x^2, x^4的结果常常区别不是很大，一般情形下不需要保留高阶矩。

检验拟合优度、p值的定义与应用

p值的定义

对于给定的简单假设H_0，我们可以可以预测出各个结果出现的概率。实验中的结果是其中一种，考虑预期结果不好于实验结果的概率，定义为p值。即：

$$p = \text{观测到数据}\vec{x}\text{与假设}H\text{的符合程度不好于实际数据}\vec{x}_{obs}\text{与}H\text{的符合程度的概率}$$

> 例子：在抛硬币实验中，一共抛掷20次硬币，实验结果为17次正面向上。但是，实验预期的最有可能出现的结果为10。所以，与实验结果相比，更糟糕或者一样糟糕的预期结果为0，1，2，3，17，18，19，20。根据二项式分布的计算可以得到：
>
> $$p = P(N = 0, 1, 2, 3, 17, 18, 19, 20) = 0.0026$$
>
> 实验中，想要检验假设是否正确，可以重复实验，检测这些极端事例出现的概率是否与p值相符。（假设H_0为真的概率并不是p值）

对于这一实验结果，能不能认为假设H_0并不成立？换言之，有多少信心（Bayes主观概率的角度）认为原假设H_0正确或者错误？这是假设检验中的重要问题。

H_0的检验

由p值的定义，容易知道：

$$P(p_0 \leq \alpha) = \alpha$$

> 证明：

> $$p(t)=\int_t^{\infty} f(x)\mathrm{d}x$$
> $$g(p)=1(\text{累积分布的随机变量是均匀分布})$$
> $$\alpha=\int_{t_0}^{\infty} f(x)\mathrm{d}x$$
> $$P(p_0\le\alpha)=\int_0^{\alpha} g(p)\mathrm{d}p=\alpha$$

信号观测的显著程度

考虑泊松计数实验（假设信号与本底的测量结果均遵循泊松分布），设本底数的均值为b，信号的均值为s，H_0为没有信号产生，则：

$$P(n|H_0)=\frac{b^n}{n!}\mathrm{e}^{-b}$$

假设$b=0.5,\ n=5$，问是否可以认为发现了信号？

解：

计算p值：

$$p=\sum_{n=5}^{\infty}\frac{b^n}{n!}\mathrm{e}^{-b}=1.7\times10^{-4}$$

显著性Z：高斯变量在一个方向涨落得到相同p值所对应的标准差的倍数。

Pearson χ^2检验

χ^2统计量的定义

实验观测值：$\vec{n}=(n_1,n_2,\ldots,n_N)$

理论预期值：$\vec{\mu}=(\mu_1,\mu_2,\ldots\mu_N)$

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

chap 05 参数估计的一般概念

估计量

问题

对于测量结果$\vec{x}_i$，对于概率密度函数的参数有估计$\hat{\theta}_i$，问，应该如何对数据进行处理，得到最佳的估计结果？即，如何通过$\hat{\theta}$估计θ？

如果用更加数学的语言进行表述，在实际操作过程中，我们并不知道概率密度函数$f(\vec{x};\theta)$的具体形式，只能通过n次测量的结果$\vec{x}_1,\ldots,\vec{x}_n$对概率密度函数的形式进行估计。

> 测量结果$\vec{x}$称为**样本**，估计量是样本的函数。经过多次测量，可以得到估计量的分布$g(\hat{\theta},\theta)$。

对估计量的要求

- 相合性：在样本容量无限大的极限下，估计量趋近于真值。
- 无偏性：$b = E[\hat{\theta}] - \theta$越小越好。
- 有效性：方差$V[\hat{\theta}]$越小越好。

定义均方误差MSE

$$MSE = E[(\hat{\theta} - \theta)^2] = V[\hat{\theta}] + b^2$$

> 对于偏倚为0，方差最小的估计量称为有效估计量。在$n \to \infty$的情形下偏倚趋近于0的估计量称为渐进有效估计量。

然而，在实际操作时，减小估计量的方差与减小估计量的偏移是相互矛盾的，要进行权衡。

样本均值

问题

对于随机变量X，具有未知的概率密度函数$f(x)$，想要通过有限次独立测量得到 $E[X] = \int f(x)\mathrm{d}x$ 的估计量 $\hat{E}[X]$，问应该如何构造函数得到的这一估计值?

> 显然，这一估计量为无参数估计量。

函数构造

构造函数

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

函数性质检验

相合性

$$lim_{n \to \infty} \mu = \overline{x}$$

(大数弱定律保证)

偏倚

$$E[\mu] = E[x] = \overline{x}$$

估计量的方差

$$\begin{aligned} V[\mu] &= E[\mu^2] - E[\mu]^2 \\ &= \frac{\sigma^2}{n} \end{aligned}$$

样本方差

函数构造

假设**分布的均值与方差**都不能提前确定精确的值，构造函数：

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

> 注意，这里的公式与样本的方差不同，分母减去1的作用是，保证估计量是无偏估计量。

函数性质检验

方差估计量的偏倚

$$E[s^2] = V[X]$$

方差估计量的方差

s^2 的方差

$$V[s^2] = \frac{1}{n}\left(\mu_4 - \frac{n-3}{n-1}\mu_2^2\right)$$

样本协方差

协方差与相关系数的估计量

协方差 $V_{xy} = \mathrm{cov}[x, y]$ 的估计量为

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

(无偏)

相关系数 $\rho = V_{xy}/(\sigma_x\sigma_y)$的估计量为

$$\hat{\rho} = r = \frac{\hat{V}_{xy}}{s_x s_y} = \frac{\sum_{i=1}^{n}(x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y})}{\left(\sum_{i=1}^{n}(x_i - \bar{x})^2 \sum_{k=1}^{n}(y_k - \bar{y})^2\right)^{1/2}} = \frac{\overline{xy} - \bar{x}\cdot\bar{y}}{\sqrt{\left(\overline{x^2} - \bar{x}^2\right)\left(\overline{y^2} - \bar{y}^2\right)}}$$

r有偏倚。但是当$n \to \infty$时，该偏倚趋于零。

一般而言，概率密度$g(r; \rho, n)$形式复杂；对于高斯变量x, y

$$E[r] = \rho - \frac{\rho(1-\rho^2)}{2n} + O(n^{-2}); \qquad V[r] = \frac{1}{n}(1-\rho^2)^2 + O(n^{-2})$$

chap 06 极大似然法

似然函数、极大似然估计量

最大似然法的基本思想

假设函数分布的形式$f(x;\theta)$，对于多次测量$\vec{x} = (x_1, \ldots, x_n)$，如何估计$\vec{\theta} = (\theta_1, \ldots, \theta_m)$?

$$P(x_i \in [x_i, x_i + \mathrm{d}x_i]) = \Pi_{i=1}^{n} f(x_i;\theta)\mathrm{d}x_i$$

我们直观上有理由相信，观测到的结果具有相对较高的概率值。

定义似然函数：

$$L(\vec{x}, \theta) = \Pi_{i=1}^{n} f(x_i;\theta)$$

对数似然函数：

$$\ln L(\vec{x},\theta)=\sum_{i=1}^{n}\ln f(x_i;\theta)$$

> 给定一组实验数据，似然函数就是估计量的函数。

最大似然估计量（Maximum Likelihood Estimator）定义为：使得似然函数取最大值的估计量，满足：

$$\frac{\partial L(\vec{\theta})}{\partial\theta_i}=0$$

> 准确来说，上式求出的是平稳值的位置，一般情况下从中挑选使得L最大的值即可。

为了方便计算，一般情形下，可以选取参数的函数进行处理，即：

$$\frac{\partial\ln L(h)}{\partial h}=0,\ h=h(\theta)$$

> 最大似然法的好处：利用了所有数据的信息，与区间的划分无关，对测量值不做任何的修正。
>
> > 关于“与分区间是否有关”这一点，可以通过与最小二乘法的对比来理解。对于最小二乘法在分区间的过程中，距离较近的点的值被合并，每个点的作用被削弱。但是最大似然法着重于“计数”的性质，合并区间并不会造成实质性的影响。

> 最大似然法的缺点：
>
> 一般情况下最大似然法给出的结果不会非常糟糕（渐进（$n\to\infty$）有效），但是在个别极端情况下会带来问题（如$U[X]$，估计随机变量的范围）。同时，在参数较多的情形，这一方案的计算难度较大。

例子：指数分布与高斯分布的估计量确定

指数分布

分布形式：

$$f(t;\tau)=\frac{1}{\tau}\mathrm{e}^{-\frac{t}{\tau}}$$

给定实验样本之后：

$$\ln L(\tau)=-\sum_{i=1}^{n}\frac{t_i}{\tau}-n\ln\tau$$

> 对于实验样本，要求为简单数据样本（意味着各次测量独立同分布）。

由最大似然法：

$$\hat{\tau}=\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}t_i$$

估计量的偏倚

由于形式是平均值的分布，所以应该是无偏估计量。

另一种指数分布形式的表达

$$f(t;\lambda)=\lambda\mathrm{e}^{-\lambda t}$$

显然估计量为：

$$\hat{\lambda} = \frac{1}{\frac{1}{n}\sum_{i=1}^n t_i}$$

但是这一估计量仅仅是渐近无偏的。

> 使用特征函数的方法可以硬算得到概率密度分布函数，可以验证。

高斯分布

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

得到：

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

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

> 显然，均值的估计量是无偏估计量，方差的估计量是渐近无偏估计量。

估计量的方差

使用MC方法确定估计量的方差

具体而言，将估计值作为真值，进行多次MC模拟，计算数据样本的方差s^2近似作为估计量的方差的值。

使用解析方法确定估计量的方差

对于常见的分布形式，直接积分计算估计量的方差是可行的，但是一般情形下的计算是困难的。

使用RCF边界确定估计量的方差

信息不等式：

$$V[\theta] = \frac{(1 + \frac{\partial b}{\partial \theta})^2}{E[-\frac{\partial^2 \ln L}{\partial \theta^2}]}$$

如果最大似然估计量(ML估计量)为有效估计量，则$V[\hat{\theta}] \approx \frac{1}{-E[-\frac{\partial^2 \ln L}{\partial \theta^2}]}$。

对于高维情形：

多维参数的信息不等式：费舍尔信息矩阵

对于 m 个参数 $\vec{\theta} = (\theta_1, \ldots, \theta_m)$，最小方差界由费舍尔信息矩阵给出：

$$I_{ij} = E\left[-\frac{\partial^2 \ln L}{\partial\theta_i\partial\theta_j}\right] = -n\int f(x;\vec{\theta})\frac{\partial^2 \ln f(x;\vec{\theta})}{\partial\theta_i\partial\theta_j}\mathrm{d}x$$

信息不等式：$V - I^{-1}$是半正定矩阵，其中$V_{ij} = \mathrm{cov}[\hat{\theta}_i, \hat{\theta}_j]$。

因此，$V[\hat{\theta}_i] \geq (I^{-1})_{ii}$

经常用 I^{-1} 近似协方差矩阵，利用 L 在最大值处的二阶微分矩阵来估计。

$$(V^{-1})_{ij} = -\left.\frac{\partial^2 \ln L}{\partial\theta_i\partial\theta_j}\right|_{\vec{\theta}=\hat{\vec{\theta}}}$$

费舍尔信息矩阵

一维：

$$\hat{V}(\hat{\theta}) = \left.\left(-\frac{\partial^2 \ln L}{\partial\theta^2}\right)^{-1}\right|_{\theta=\hat{\theta}}$$

使用图解法确定估计量的方差

用ML估计量处的值估计不确定度，可以看出：

$$\begin{aligned}\ln L(\theta) &= \ln L(\hat{\theta}) + \frac{\partial \ln L(\theta)}{\partial\theta}\Big|_{\theta=\hat{\theta}}(\theta-\hat{\theta}) + \frac{1}{2}\frac{\partial^2 \ln L}{\partial\theta^2}\Big|_{\theta=\hat{\theta}}(\theta-\hat{\theta})^2 \\ &= \ln L(\hat{\theta}) - 0.5\frac{(\theta-\hat{\theta})^2}{V[\theta]}\end{aligned}$$

可以看出，在图中$\ln L$下降为0.5时的半宽度为方差的估计值。

扩展的最大似然估计

解决的是样本容量不固定的情形。在实验过程中，样本空间的大小n也是随机变量（一定时间内衰变事例发生的次数）。容易看出，事例发生的次数（样本空间的大小）满足均值为ν的泊松分布。

$$L(\nu;\theta) = \frac{\nu^n}{n!}\mathrm{e}^{-\nu}\prod_{i=1}^{n} f(x_i;\theta)$$

均值与未知参数相关的情形

$$\begin{aligned}\ln L(\nu;\theta) &= n\ln\nu(\theta) - \nu(\theta) - \ln(n!) + \sum_{i=1}^{n}\ln f(x_i;\theta) \\ &= c - \nu(\theta) + \sum_{i=1}^{n}\ln(\nu(\theta)\cdot f(x_i,\theta))\end{aligned}$$

扩展的最大似然函数利用了样本空间大小的信息，理论上可以减小不确定度。

> $\vec{x} = (x_1, x_2, \ldots, x_n), X_i \sim N(\mu, \sigma^2)$，则均值$\sim N(\mu, \sigma^2/n)$。

均值与未知参数无关的情形

此时：

$$\ln L(\nu, \theta) = c + \sum_{i=1}^{n} \ln \nu f(x_i, \theta)$$

形式与样本空间的大小固定时相同，但是这样的形式有利于处理$f(x)$已知有不同成分叠加的情形。

> 例如，$f(x) = \frac{\mu_s}{\mu_s+\mu_b} f_s(x) + \frac{\mu_b}{\mu_s+\mu_b} f_b(x)$，使用扩展的极大似然估计的结果具有更加直观的"事例数"的估计的意义。

> 对于非物理结果，（本底信号较大时信号的估计值时是负数），也应该按照统计涨落来正常记录。

分区间数据的极大似然估计

在数据分区间的情形下，可以对分区间数据进行拟合。根据假设，得到预期的区间内的事例数：$\vec{\nu} = (\nu_1, \ldots, \nu_n)$，似然函数为多项分布，对数似然函数的结果为：

$$\ln L = \sum_{i=1}^{n} n_i \nu_i(\theta)$$

> 相比于点估计(unbinned ML)，误差稍大，但是影响不大。

> 对于拟合优度检验，一般可以直接利用ML方法对$\ln L$进行模拟，p值的确定就是$P(\ln L \leq \ln L_{actual})$。

不等精度似然结果的合并

假设对μ进行独立测量n次，测量结果为$x_i \pm \sigma_i$,且$x_i \sim N(\mu, \sigma_i^2)$。使用最大似然法对$\mu$进行估计，得到：

$$\ln L(x_i, \mu) = c - \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{n} \frac{(x_i - \mu)^2}{\sigma_i^2}$$

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

$$\hat{\mu} = \frac{\sum_{i=1}^{n} w_i x_i}{\sum_{i=1}^{n} w_i}, \, w_i = \frac{1}{\sigma_i^2}$$

由各个测量量相互独立，可以方便的计算出

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

> 对所有测量结果的合并，不确定度一定比任何一次测量的结果更低。

> 对于权重因子也可以按照这种方式进行定义，本质是完全相同的。

不等精度观测结果的合并：另一种权重

对某一固定量 μ 作 n 次不等精度测量，测量值为 $x_1,\dots,x_n$，对应的标准差分别为$\sigma_1,\dots,\sigma_n$ 。每个测量值 $x_i\sim N(\mu,\sigma_i^2)$，且各测量值相互独立，方差已知。则该样本的似然函数为

$$L(\mu)=\prod_{i=1}^{n}\frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_i}\exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{x_i-\mu}{\sigma_i}\right)^2\right]$$

取对数并解似然方程

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

权重因子

$$\omega_i=\frac{1/\sigma_i^2}{\sum_{i=1}^{n}1/\sigma_i^2}$$

$$\widehat{\sigma^2}_{\hat{\mu}}=\left({}^{-1}\Big/\frac{\partial^2\ln L}{\partial\mu^2}\right)\Bigg|_{\mu=\hat{\mu}}=\frac{1}{\sum_{i=1}^{n}\frac{1}{\sigma_i^2}}$$

$$\sum_{i=1}^{n}\omega_i=1$$

chap 07 最小二乘法

最小二乘法与最大似然法之间的关系

对于n个相互独立的高斯变量Y_i，对数似然函数可以直接等价于：

$$\chi^2=\sum_{i=1}^{n}\frac{(y_i-\lambda(x_i;\theta))^2}{\sigma_i^2}\text{取最小值。}$$

λ_i为待确定的真值，$\lambda_i=\lambda(x_i;\theta)$，$x_i$认为是精确测量的结果。

对于并不相互独立的高斯变量，但是可以用高维高斯密度函数分布描述的结果，可以写为：

$$\chi^2=\sum_{i,j=1}^{n}(y_i-\lambda(x_i;\theta))V_{ij}^{-1}(y_j-\lambda(x_j;\theta))\text{取最小值。}$$

对于不是高斯分布的情形（一般情形下偏离不太多），也可以使用χ^2最小值来确定参数的取值。

线性情形下的最小二乘估计

对于λ对各个参数θ_j, $j=1,\dots,m$线性的情形：

$$\lambda_i=\sum_{j=1}^{m}a_j(x_i)\theta_j,\ a_j(x)\text{是任意线性独立函数。}$$

此时得到的估计量是有效估计量。（无偏且方差最小）

设$\mathbf{A}:A_{ij}=a_j(x_i)$，则$\vec{\lambda}=\mathbf{A}\vec{\theta}$。

$$\begin{aligned}\chi^2&=(\vec{y}-\mathbf{A}\vec{\theta})^T\mathbf{V}^{-1}(\vec{y}-\mathbf{A}\vec{\theta})\\&=-\mathbf{A}^T\mathbf{V}^{-1}(\vec{y}-\mathbf{A}\vec{\theta})-(\vec{y}-\mathbf{A}\vec{\theta})^T\mathbf{V}^{-1}\mathbf{A}\end{aligned}$$

$$\hat{\vec{\theta}}=(\mathbf{A}^T\mathbf{V}^{-1}\vec{A})^{-1}\mathbf{A}^T\mathbf{V}^{-1}\vec{y}=:\mathbf{B}\vec{y}$$

计算参数估计的协方差矩阵：

$$\mathbf{U}=\mathbf{BVB^T}=(\mathbf{AV^{-1}A^T})^{-1}=(\frac{1}{2}\nabla\nabla\chi^2)^{-1}$$

换言之，

$$\chi^2(\hat{\vec{\theta}}\pm\sigma_{\hat{\vec{\theta}}})=\chi^2_{min}+1$$

> 在高斯分布的形式下，由于$\chi^2=-2\ln L+c$，可以对应于最大似然法的图解法条件。

> 这一范围确定下来的$\vec{\theta}$区间称为置信区间。

多项式的最小二乘拟合

作为线性估计量的一个实例，考虑多项式的假设为：

$$\lambda(x_i;\vec{\theta})=\sum_{i=1}^{m}\theta_i x_i^{i-1}$$

当多项式自由变量$m+1=n$时，$\chi^2=0$恒成立，估计无意义。（过拟合）

> 非线性最小二乘法拟合估计：一般情形$\lambda(x;\vec{\theta})$下只能进行数值求解。

> 有约束情形下的最小二乘拟合
>
> 为了简单起见，仅考虑无参数的最小二乘拟合。使用Lagrange乘子法计算
>
> $$\chi^2(\vec{x},\vec{\alpha})=(\vec{x}'-\vec{x})^T\mathbf{V}^{-1}(\vec{x}'-\vec{x})+2\vec{\psi}^T\alpha$$
>
> 的最小值即可。

检验最小二乘法的拟合优度

χ^2_{min}的大小决定了数据与假设之间的符合程度，进而可以直接用来检验拟合优度。

如果n个变量相互独立的高斯分布变量，由定义χ^2显然满足自由度为$n-m$的卡方分布。

如果χ^2_{min}较小，只能说明实验数据与当前假设相对符合。

> “较小”的标准:$E[\chi^2(n_d)]=n_d$，认为是可以接受的结果。

> 拟合优度与统计不确定度之间的关系：统计不确定度对应于χ^2在最小值附近的变化快慢，拟合优度对应χ^2_{min}的大小。换言之，拟合优度与测量的不确定度直接并没有直接的关系。
>
> 例如，如果对某次测量的结果进行上下“平移”的同时保持误差不变，对于参数的估计值的误差保持不变，但是χ^2_{min}的值可以变大或变小。

最小二乘法处理分区数据

对直方图进行拟合。假设X的概率密度分布函数$f(x;\theta)$，Y_i为第i个区间的频数，则$\lambda_i=n\int_{x_{\mathrm{min}}}^{x_{\mathrm{max}}}f(x;\theta)\mathrm{d}x=np_i(\vec{\theta})$。假设区间的宽度足够小，则$Y_i$可以看作是泊松变量。

测量结果的合并

chap 08 矩方法

chap 09 统计推断与信息、决策、置信区间

chap 10 解谱法

附录：概率论沉思录

chap 01 合情推理

1. 强三段论（演绎推理）：A真 -> B真，A真，则B真

   弱三段论（合情推理）：A真 -> B真，B真，则A更合情

2. 布尔代数：

   积：AB（A与B同时为真，则为真）

   和：A+B（A或B为真，则为真）

   否：$\overline{A}$ （A为假）

   > - 写成加法与乘法的形式，为了直接运用加法与乘法的运算律。
   > - 运算的实例：
   >   - $AA=A$，$A\overline{A}=False(0)$，$0+A=A$，$\overline{\overline{A}}=A$，$A+A=A$
   >   - $A+\overline{A}=True(1)$，$True(1)A=A$
   >   - $\overline{A}+A\overline{B}=\overline{AB}$

3. 蕴含关系

   $A\Rightarrow B$ （A为真，则B为真；B为假，则A为假）

   用布尔代数表达：$A=AB$，可以验证满足上面的蕴含关系的定义。

   > $A\Rightarrow B$的布尔值与$\overline{A}+B$的布尔值相同。

4. 逻辑函数

   对n个命题，最多有2^{n+1}个不同的概率函数。（n个命题有2^n种结果，函数可能有两种取值）

   > 2^{n+1}种函数，可以简化为规范析取范式（形如$A_1...A_n$，$\overline{A_1}...A_n$的合取（交/乘积）式的析取（或/和）式）

5. 完备集：合取(AND)、析取(OR)与否定(NOT)

   > 实际上这三种逻辑关系中，两者可以表出第三者，如$A+B=\overline{\overline{A}\,\overline{B}}$
   > ，$AB=\overline{\overline{A}+\overline{B}}$。进而可以定义与非（$\uparrow$）运算：$A\uparrow B=\overline{A}+\overline{B}$（合取式的否定），或非（$\downarrow$）运算：$A\downarrow B=\overline{A}\,\overline{B}$（析取式的否定）

6. 合情条件

   - 合情程度用实数表示$(A|B)$
   - 定性地与常识相符
   - 一致性推理（结果与路径无关）

chap 02 定量规则

1. 乘法规则

   $(AB|C) = F[(B|C), (A|BC)]$

   $(AB|C) = F[(A|C), (B|AC)]$

进一步确定$F(x, y)$的形式：

- 由合情条件I：$F_x \geq 0, F_y \geq 0$
- 由迭代关系：$F[x, F(y, z)] = F[F(x, y), z]$

  记$u = F(x, y), v = F(y, z)$，对上面的表达式分别对x，y求偏导：

  $$F_1(u, z)F_1(x, y) = F_1(x, v)$$

  $$F_1(u, z)F_2(x, y) = F_2(x, v)F_1(y, z)$$

  记$G(x, y) = \frac{F_2(x,y)}{F_1(x,y)}$

  $$G(x, y) = G(x, v)F_1(y, z) \ldots \ldots (\#)$$

  或

  $$G(x, y)G(y, z) = G(x, v)F_2(y, z) \ldots \ldots (\#\#)$$

  对（#）式，对求z偏导：

  $$0 = G_2(x, v)F_2(y, z)F_1(y, z) + G(x, v)F_{12}(y, z)$$

  对（##）式，对y求偏导：

  $$[G(x, y)G(y, z)]_y = G_2(x, v)F_1(y, z)F_2(y, z) + G(x, v)F_{21}(y, z)$$

  连续性给出：

  $$F_{12}(y, z) = F_{21}(y, z)$$

  代入得到：

  $$[G(x, y)G(y, z)]_y = 0$$

  进而可以确定函数$G(x, y)$的形式：

  $$G(x, y) = r\frac{H(x)}{H(y)}$$

  将分离变量的形式代入（#）（##）式，略去推导，积分得到：

  $$\phi(v) = c\phi(y)\phi^r(z)$$

  其中：

  $$\phi(x) = \int \frac{\mathrm{d}x}{H(x)}$$

  将这一结果代入迭代关系的表达式，化简得到：

  $$\phi(F(x, y)) = c \cdot \phi(x)\phi(y)$$

  令$w(x) = c \cdot \phi(x)$，得到：

$$w(F(x,y)) = w(x)w(y)$$

回到原来的问题，得到结论：

$$w(AB|C) = w(A|BC)w(B|C)$$

2. 加法规则

略去推导，用类似的方式可以推出：

$$P(A|B) + P(\overline{A}|B) = 1$$

3. 推理规则与演绎推理、合情推理之间的关系（合情推理的合情程度用概率函数表达）