9. Vorlesung 24. Nov. 2014

Geradenfit mit Fehlern in beiden Messgrössen

Wir haben Datenpunkte (x_{mi}, y_{mi}) gemessen, wobei beide Messgrössen fehlerbehaftet sind, d.h.

$$x_{mi} = x_i + \epsilon_i$$

↗ Folie

$$y_{mi} = y_i + \eta_i$$

Wir betrachten den Fall, in dem eine lineare Beziehung

$$y_i = \alpha x_i + \beta$$

zwischen den Messgrössen besteht. Die Wahrscheinlichkeitsverteilungen für die Messfehler seien Normalverteilungen mit bekannter Streuung, d.h.

$$\mathrm{pdf}(\epsilon_i | \sigma_x) = \mathcal{N}(\epsilon_i; 0, \sigma_x)$$

$$\mathrm{pdf}(\eta_i | \sigma_y) = \mathcal{N}(\eta_i; 0, \sigma_y).$$

Wir fassen zusammen:

- → bekannte Parameter: σ_x, σ_y
- → bekannte Daten: (x_{mi}, y_{mi}) – N Datenpunkte
- → unbekannte Parameter von Interesse: α, β
- → unbekannte Parameter, die nicht von Interesse sind: x_i – N Werte   sog. "nuisance parameters"

Gemäss Gull: Problem kann (und sollte) symmetrisch in x und y formuliert werden. Wir führen dimensionslose Grössen ein:

$$x_i' = \frac{x_i - x_0}{r_x}$$

↗ Folie

$$y_i' = \frac{y_i - y_0}{r_y}$$

Hierbei sind x_0 und y_0 Positionsparameter und r_x und r_y sind Skalenparameter. Es gilt $r_x > 0$, $r_y > 0$.
Dann kann die Geradengleichung geschrieben werden als

$$r_y y_i' + y_0 = \alpha(r_x x' + x_0) + \beta.$$

Wählen wir $\alpha = \pm \frac{r_y}{r_x}$ und $\beta = y_0 - \alpha x_0$, dann ist die Geradengleichung

$$y_i' = \pm x_i'.$$

Wir fassen zusammen:

- → bekannte Parameter: σ_x, σ_y
- → bekannte Daten (x_{mi}, y_{mi}) – N Datenpunkte
- → unbekannte Parameter von Interesse: r_x, r_y, x_0, y_0 (zwei mehr als vorher!)
- → nuisance parameters: x_i – N values

Likelihood: wir nehmen unkorrelierte Fehler in x und y an. Dann ist

$$\mathrm{pdf}\left(\{(x_{mi}, y_{mi})\} \mid \{x_i\}, r_x, r_y, x_0, y_0, \sigma_x, \sigma_y\right) = \frac{1}{(2\pi\sigma_x\sigma_y)^N} \exp\left[-\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N}\left(\frac{(x_{mi}-x_i)^2}{\sigma_x^2} + \frac{(y-y_i)^2}{\sigma_y^2}\right)\right] \quad (*)$$

Prior-Verteilung der Parameter

$$\mathrm{pdf}(\{x_i\}, r_x, r_y, x_0, y_0) = \underbrace{\mathrm{pdf}(x_0, y_0, r_x, r_y)}_{①} \times \underbrace{\mathrm{pdf}(\{x_i\} \mid x_0, y_0, r_x, r_y)}_{②} \quad (**)$$

① Da $r_x, r_y > 0$ sind, wählen wir für diese Grössen eine konstante Priorverteilung auf der logarithmischen Skala:

$$\mathrm{pdf}(x_0, y_0, \ln r_x, \ln r_y)\, dx_0\, dy_0\, d(\ln r_x)\, d(\ln r_y) = dx_0\, dy_0\, d(\ln r_x)\, d(\ln r_y)$$ das heisst auf der linearen Skala

$$\mathrm{pdf}(x_0, y_0, r_x, r_y)\, dx_0\, dy_0\, dr_x\, dr_y = dx_0\, dy_0 \frac{dr_x}{r_x} \frac{dr_y}{r_y}$$

② Für den zweiten Term wählen wir die Normalverteilung

$$\mathrm{pdf}(\{x_i\} \mid x_0, y_0, r_x, r_y) = \frac{1}{(2\pi r_x^2)^{N/2}} \exp\left[-\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N} \frac{(x_i - x_0)^2}{r_x^2}\right]$$

Diese Form des Priors ist vernünftig und erweist sich in der weiteren Rechnung als sehr praktisch.

Verbundwahrscheinlichkeit von Daten und Parametern

Nun benutzen wir die Likelihood (*) und die Priorverteilung (**) mit Faktoren ① und ②, um die Verbund-wahrsch. zu berechnen:

$$\mathrm{pdf}(\{(x_{mi}, y_{mi})\}, \{x_i\}, x_0, y_0, \ln r_x, \ln r_y \mid \sigma_x, \sigma_y) = \underbrace{\mathrm{pdf}(x_0, y_0, \ln r_x, \ln r_y, \{x_i\})}_{(**)} \times \underbrace{\mathrm{pdf}(\{(x_{mi}, y_{mi})\} \mid \{x_i\}, x_0, y_0, r_x, r_y, \sigma_x, \sigma_y)}_{(*)}$$

Marginalisieren der $\{x_i\}$:

Da wir an den "nuisance parameters" $\{x_i\}$ nicht interessiert sind, integrieren wir sie aus:

$$\mathrm{pdf}(\{(x_{mi}, y_{mi})\}, x_0, y_0, \ln r_x, \ln r_y \mid \sigma_x, \sigma_y) = \int d^N x_i\; \mathrm{pdf}(\{(x_{mi}, y_{mi})\}, \{x_i\}, x_0, y_0, \ln r_x, \ln r_y \mid \sigma_x, \sigma_y)$$

Diese Integration kann Dank ② analytisch durchgeführt werden.

Das resultierende Ergebnis beinhaltet eine Normalverteilung für x_0 und y_0. Zudem hängt es nur von den statistischen Grössen $\overline{x_{mi}}$, $\overline{y_{mi}}$, $Var(x_{mi})$, $Var(y_{mi})$ und ϱ ab.

<u>Posteriorverteilung für die Parameter:</u>

$$pdf(x_0, y_0, \ln r_x, \ln r_y \mid \{(x_{mi}, y_{mi})\}, \sigma_x, \sigma_y) \propto pdf(\{(x_{mi}, y_{mi})\}, x_0, y_0, \ln r_x, \ln r_y \mid \sigma_x, \sigma_y)$$

Daraus lassen sich x_0 und y_0 und ihre Unsicherheiten abschätzen:

$$\boxed{\langle x_0 \rangle = \overline{x_{mi}}} \qquad \langle \Delta x_0^2 \rangle = \frac{\sigma_x^2 + r_x^2}{N} \qquad \langle \Delta x_0 \Delta y_0 \rangle = \frac{r_x r_y}{N}$$

↗ Folie

$$\boxed{\langle y_0 \rangle = \overline{y_{mi}}} \qquad \langle \Delta y_0 \rangle = \frac{\sigma_y^2 + r_y^2}{N}$$

Die Normalverteilung für x_0 und y_0 erlaubt es diese Parameter zu marginalisieren. Man erhält

$$pdf(\ln r_x, \ln r_y \mid \{(x_{mi}, y_{mi})\}, \sigma_x, \sigma_y) \propto \frac{1}{(\sigma_x^2 r_y^2 + r_y^2 \sigma_y^2 + \sigma_x^2 \sigma_y^2)^{N/2}} \exp\left[-\frac{N}{2} \frac{(r_y^2 + \sigma_y^2) Var(x_{mi}) - 2 r_x r_y Cov(x_{mi}, y_{mi}) + (r_x^2 + \sigma_x^2) Var(y_{mi})}{\sigma_x^2 r_y^2 + r_x^2 \sigma_y^2 + \sigma_x^2 \sigma_y^2}\right]$$

Die zeigt, dass $Var(x_{mi})$ und $Var(y_{mi})$ natürliche Skalen des Problems sind. Wir finden r_x und r_y, indem wir

$$-\ln pdf(\ln r_x, \ln r_y \mid \{(x_{mi}, y_{mi})\}, \sigma_x, \sigma_y)$$

bezüglich r_x und r_y minimieren. ↗ Folien

Mit Hilfe der Variablentransformation $\alpha = \frac{r_y}{r_x} \sqrt{\frac{Var(x_{mi})}{Var(y_{mi})}}$ und $R = \left(\frac{r_x r_y}{\sqrt{Var(x_{mi}) Var(y_{mi})}}\right)^{1/2}$ finden wir

$$-\ln pdf(\ln \alpha, \ln R \mid \{(x_{mi}, y_{mi})\}, \sigma_x, \sigma_y) \propto \frac{N}{2} \ln\left(R^2 \alpha \sigma_x'^2 + R^2 \sigma_y'^2 / \alpha + \sigma_x'^2 \sigma_y'^2\right) + \frac{N}{2} \frac{R^2 \alpha^2 - 2R^2 \alpha \varrho + (\sigma_x'^2 + \sigma_y'^2)\alpha + R^2}{R^2 \alpha^2 \sigma_y'^2 + \sigma_x'^2 \sigma_y'^2 \alpha' + R^2 \sigma_y'^2}$$

Graphische Minimierung ergibt den Schätzwert für α und seine Unsicherheit $\Delta\alpha$. ↗ Folien

Für den Schätzwert von β erhält man:

$$\langle \beta \rangle = \overline{y_{mi}} - \alpha \overline{x_{mi}}$$, wobei α der ermittelte Schätzwert ist.

$$\langle \Delta\beta^2 \rangle = \frac{\sigma_y'^2 + \alpha^2 \sigma_x'^2}{N} + \overline{x_{mi}}^2 \langle \Delta\alpha^2 \rangle$$

↗ Folien