Komputerowa analiza danych doświadczalnych

Wykład 9
27.04.2018

dr inż. Łukasz Graczykowski
lukasz.graczykowski@pw.edu.pl

Semestr letni 2017/2018

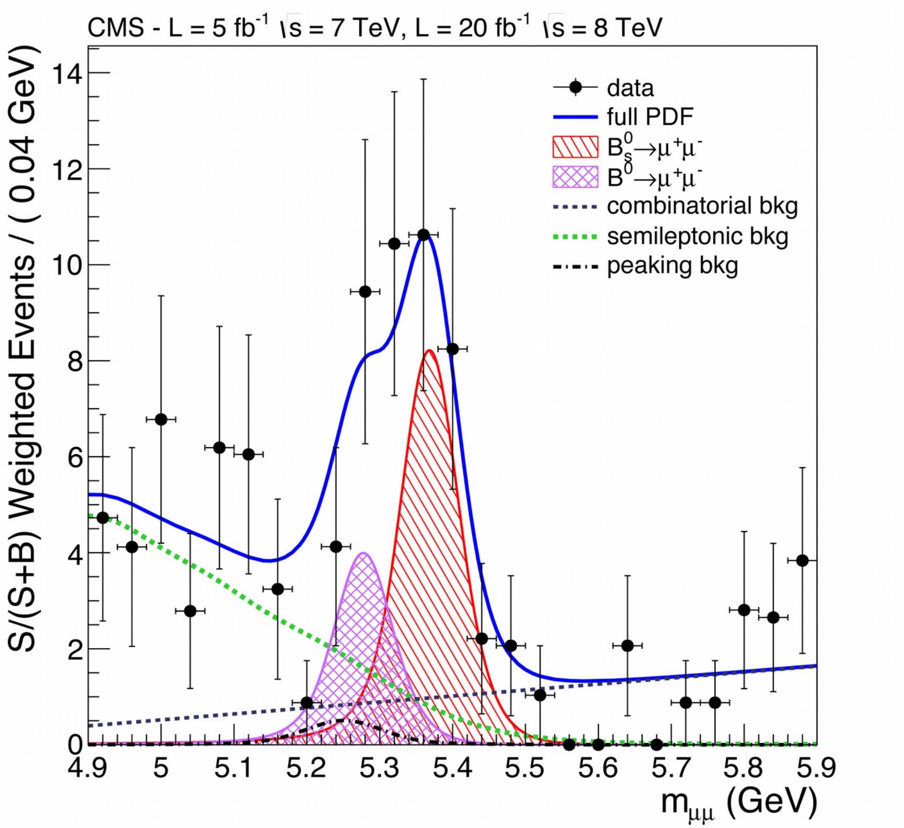
Metoda największej wiarygodności

Nierównosć informacyjna

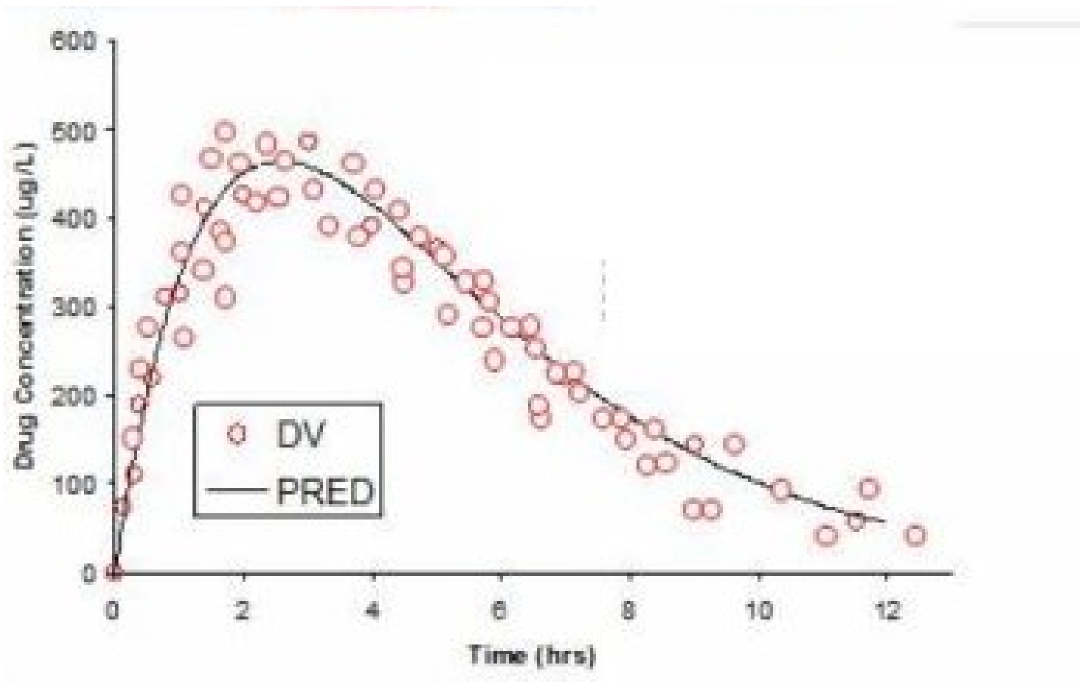
Metoda największej wiarygodności

“Magiczna” funkcja fit

- Do tej pory zajmowaliśmy się estymacją parametrów rozkładów, wprowadziliśmy estymatory i warunki, jakie powinny spełniać. Nie zajmowaliśmy się natomiast sposobem ich konstruowania (oprócz estymatora wartości oczekiwanej i wariancji)
- W praktyce mamy pewien zestaw danych (punkty pomiarowe) i chcemy do niego dopasować jakiś model teoretyczny, który pozwoli nam określić jego parametry

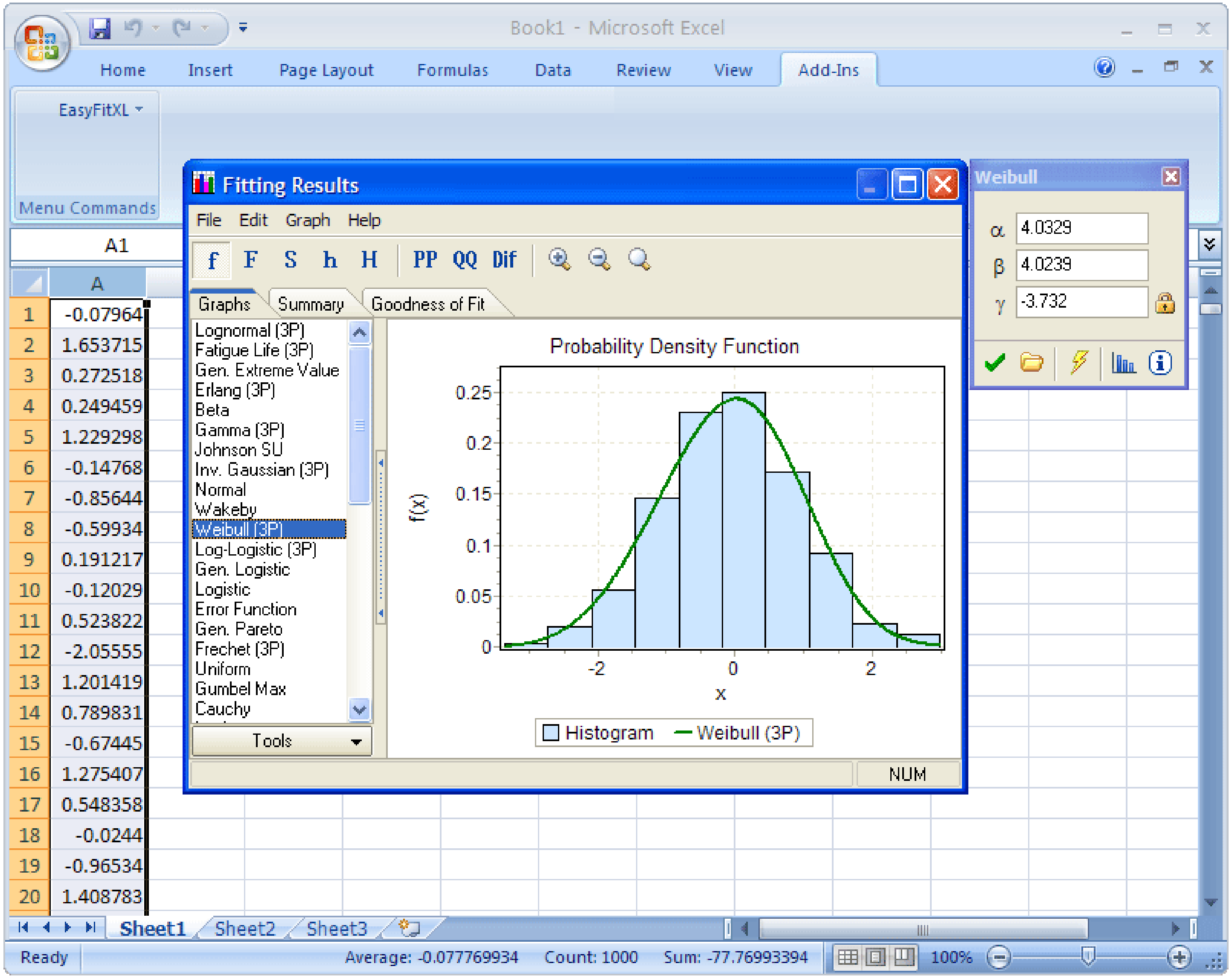


http://cms.web.cern.ch/news/very-rare-decay-has-been-seen-cms



https://www.ndm.ox.ac.uk/principal-investigators/researcher/joel-tarning

“Magiczna” funkcja fit



http://www.mathwave.com/articles/fit-distributions-excel.html

“Magiczna” funkcja fit

7.1 The Fit Method

The Fit method is implemented in ROOT for the histogram classes `TH1`, the sparce histogram classes, `THnSparse`, the graph classes, `TGraph`, `TGraph2D` and `TMultiGraph` for fitting a collection of Graphs with the same function.

7.1.1 The TH1::Fit Method

To fit a histogram programmatically, you can use the `TH1::Fit` method. Here is the signatures of `TH1::Fit` and an explanation of the parameters:

```
TFitResultPtr Fit(TF1 *function, Option_t *option, Option_t *goption,
          Axis_t xxmin, Axis_t  xxmax)
```

- `function` a pointer to the fitted function (the fit model) object. One can also use the function name. This name may be one of ROOT pre-defined function names or a user-defined function. See the next paragraph for the list of pre-defined functions.
- `*option:` The second parameter is the fitting option. Here is the list of fitting options:
    - “ `W` ” Set all weights to 1 for non empty bins; ignore error bars
    - “ `WW` ” Set all weights to 1 including empty bins; ignore error bars
    - “ `I` ” Use integral of function in bin instead of value at bin center
    - “ `L` ” Use log likelihood method (default is chi-square method). To be used when the histogram represents counts
    - “ `WL` ” Weighted log likelihood method. To be used when the histogram has been filled with weights different than 1.
    - “ `P` ” Use Pearson chi-square method, using expected errors instead of the observed one given by `TH1::GetBinError` (default case). The expected error is instead estimated from the the square-root of the bin function value.

Funkcja wiarygodności

- Do tej pory zajmowaliśmy się estymacją parametrów rozkładów, wprowadziliśmy estymatory i warunki, jakie powinny spełniać. Nie zajmowaliśmy się natomiast sposobem ich konstruowania (oprócz estymatora wartości oczekiwanej i wariancji)
- Problem ogólny:
  - mamy zbiór p parametrów: $\boldsymbol{\lambda}=(\lambda_{1,}\lambda_{2,\ldots},\lambda_p)$
  - określony gęstością prawdopodobieństwa: $f=f(\boldsymbol{x};\boldsymbol{\lambda})$
  - dla n zmiennych losowych: $\boldsymbol{X}=(X_{1,}X_{2,}\ldots,X_n)$
- Jeden pomiar wielkości $\boldsymbol{X}$, czyli pobranie próby o liczności 1, prowadzi do uzyskania wyniku $\boldsymbol{X}^{(j)}=(X_1=x_1^{(j)},X_2=x_2^{(j)},\ldots,X_n=x_n^{(j)})$
- Takiemu doświadczeniu przypisujemy liczbę:

$$dP^{(j)}=f(\boldsymbol{x}^{(j)};\lambda)\,dx$$

- Która jest tzw. **prawdopodobieństwem a posteriori**. Mówi ona po uzyskaniu wyniku, jakie było prawdopodobieństwo jego uzyskania

Funkcja wiarygodności

- **Prawdopodobieństwem a posteriori**. Mówi ona po uzyskaniu wyniku, jakie było prawdopodobieństwo jego uzyskania, czyli wartości $\boldsymbol{X}^{(j)}$ takiej, że: $x_i^{(j)} < \boldsymbol{x}^{(j)} \leqslant x_i^{(j)} + dx_i^{(j)}, \ (i=1,2,\ldots,n)$
- Dla próby o N niezależnych elementach omawiane prawdopodobieńśtwo uzyskania wyniku $\boldsymbol{X}^{(j)}, \boldsymbol{X}^{(1)}, \ldots, \boldsymbol{X}^{(N)}$ dane jest iloczynem:

$$dP = \prod_{j=1}^{N} f\left(\boldsymbol{x}^{(j)}; \boldsymbol{\lambda}\right) d\,\boldsymbol{x}$$

- Gdy populacja jest charakteryzowana przez <u>dwa różne</u> zbiory parametrów, $\boldsymbol{\lambda}_1, \boldsymbol{\lambda}_2$, wtedy możemy określić **iloraz wiarygodności**:

$$Q = \frac{\prod_{j=1}^{N} f\left(\boldsymbol{x}^{(j)}; \boldsymbol{\lambda}_1\right) d\,\boldsymbol{x}}{\prod_{j=1}^{N} f\left(\boldsymbol{x}^{(j)}; \boldsymbol{\lambda}_2\right) d\,\boldsymbol{x}}$$

- Możemy go określić: “zbiór parametrów $\boldsymbol{\lambda}_1$ jest Q razy bardziej prawdopodobny niż zbiór parametrów $\boldsymbol{\lambda}_2$“

Funkcja wiarygodności

- **Funkcją wiarygodności** nazywamy iloczyn postaci:

$$L=\prod_{j=1}^{N} f\left(\boldsymbol{x}^{(j)};\boldsymbol{\lambda}\right)$$

- Funkcja wiarygodności **jest zmienną losową** (jest funkcją próby)
- **Przykład:** iloraz wiarygodności – rzut asymetryczną monetą
  - na podstawie rzutu asymetryczną monetąil wyników tych rzutów chcemy ustalić, czy moneta należy do klasy A lub klasy B
  - załóżmy, że próba to 5 rzutów: 1 orzeł i 4 reszki
  - stąd funkcja wiarygodności:

	A	B
orzeł	1/3	2/3
reszka	2/3	1/3

$$L_A=\frac{1}{3}\cdot\left(\frac{2}{3}\right)^4 \qquad L_B=\frac{2}{3}\cdot\left(\frac{1}{3}\right)^4 \qquad Q=\frac{L_A}{L_B}=8$$

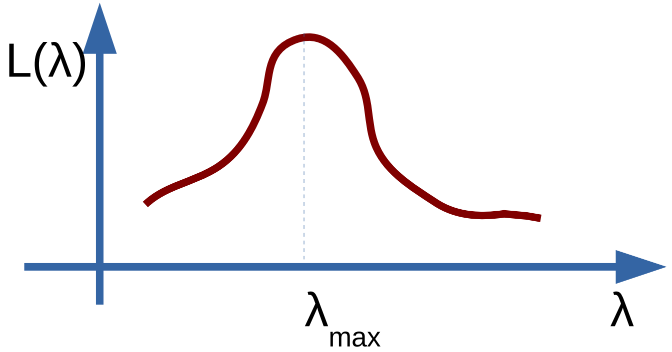
  - z dużą dozą prawdopodobieństwa moneta należy do klasy A

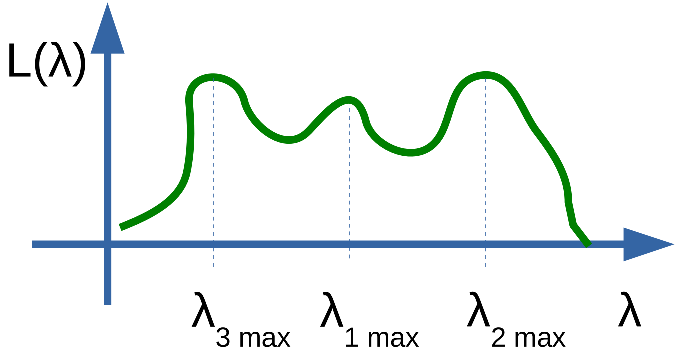
Metoda największej wiarygodności

- **Największą ufnością** obdarzamy zbiór parametrów, dla którego funkcja wiarygodności osiąga **maksymalną wartość**
- **Jak wyznaczyć maksimum?**
  - warunek konieczny: przyrównać pierwszą pochodną L do zera
- Różniczkowanie iloczynu jest jednak niewygodne, wprowadzamy więc **logarytm funkcji wiarygodności** L:

$$l = \ln L = \sum_{j=1}^{N} \ln f\left(\boldsymbol{x}^{(j)}; \boldsymbol{\lambda}\right)$$

- **Funkcją wiarygodności** jest odpowiednikiem gęstości prawdopodobieństwa, tylko określona dla parametrów. Ponieważ jest funkcją próby losowej, jest również zmienną losową





Metoda największej wiarygodności

- W najprostszym przypadku wektor parametrów **λ** ma tylko jedną składową λ
- Musimy wtedy rozwiązać **równanie wiarygodności**: $l' = \frac{dl}{d\lambda} = 0$
- Czyli: $l' = \sum_{j=1}^{N} \frac{d}{d\lambda} \ln f(\boldsymbol{x}^{(j)}; \lambda) = \sum_{j=1}^{N} \frac{f'}{f} = \sum_{j=1}^{N} \varphi(x^{(j)}; \lambda)$
- gdzie: $\varphi(x^{(j)}; \lambda) = \left(\frac{d}{d\lambda} f(\boldsymbol{x}^{(j)}; \lambda) \right) / \left(f(\boldsymbol{x}^{(j)}; \lambda) \right)$

  jest **pochodną logarytmiczną** f względem λ

- W przypadku gdy wektor **λ** ma p składowych, mamy układ p równań:

$$\frac{\partial l}{\partial \lambda_i} = 0, \quad i = 1, 2, \ldots, p$$

Metoda największej wiarygodności – pods.

- **Funkcją wiarygodności** nazywamy iloczyn postaci:

$$\boxed{L=\prod_{j=1}^{N} f\left(\boldsymbol{X}^{(j)};\boldsymbol{\lambda}\right)}$$

- Funkcja wiarygodności **jest zmienną losową** (jest funkcją próby)
- **Największą ufnością** obdarzamy zbiór parametrów, dla którego funkcja wiarygodności osiąga **maksymalną wartość**
- **Jak wyznaczyć maksimum?**
  - warunek konieczny: przyrównać pierwszą pochodną L do zera
- Różniczkowanie iloczynu jest jednak niewygodne, wprowadzamy więc **logarytm funkcji wiarygodności** L:

$$l=\ln L=\sum_{j=1}^{N} \ln f\left(\boldsymbol{X}^{(j)};\boldsymbol{\lambda}\right)=\sum_{j=1}^{N} \frac{f'\left(\boldsymbol{X}^{(j)};\boldsymbol{\lambda}\right)}{f\left(\boldsymbol{X}^{(j)};\boldsymbol{\lambda}\right)}$$

- **Funkcją wiarygodności** jest odpowiednikiem gęstości prawdopodobieństwa, tylko określona dla parametrów. Ponieważ jest funkcją próby losowej, jest również zmienną losową
- Równania wiarygodności: $\frac{\partial l}{\partial \lambda_i}=0, \quad i=1,2,\dots,p$

Metoda największej wiarygodności

- **Przykład:** powtarzanie pomiarów o różnej dokładności
  - pomiar danej wielkości różnymi przyrządami pomiarowymi:
    - pomiary $x^{(j)}$ będą się układały wokół wartości rzeczywistej λ
    - niepewności bedą miały rozkład normalny
    - mamy 1 wielkość, więc z wektora $\mathbf{x}^{(j)}$ robi się jedna zmienna $x^{(j)}$
  - **Wniosek:** pojedynczy pomiar to pobranie próby o liczebności 1 z rozkładu Gaussa o wartości średniej λ i wariancji σ_j
  - Prawdopodobieństwo *a posteriori* możemy zatem wyrazić jako:

$$dP^{(j)} = f\left(X^{(j)};\lambda\right)dx = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\,\sigma_j}\exp\left(-\frac{\left(X^{(j)}-\lambda\right)^2}{2\sigma_j^2}\right)dx$$

  - Zatem dla N pomiarów funkcja wiarygodności wynosi:

$$L = \prod_{j=1}^{N}\frac{1}{\sqrt{2\pi}\,\sigma_j}\exp\left(-\frac{\left(X^{(j)}-\lambda\right)^2}{2\sigma_j^2}\right)$$

Najbardziej wiarygodny wynik

– Logarytmiczna funkcja wiarygodności wynosi:

$$l = -\frac{1}{2}\sum_{j=1}^{N}\frac{\left(X^{(j)}-\lambda\right)^2}{\sigma_j^2} + const$$

– Równanie wiarygodności przybiera postać:

$$\frac{dl}{d\lambda} = \sum_{j=1}^{N}\frac{X^{(j)}-\lambda}{\sigma_j^2} = 0$$

– A jego rozwiązanie to:

$$\tilde{\lambda} = \sum_{j=1}^{N}\frac{X^{(j)}}{\sigma_j^2} / \sum_{j=1}^{N}\frac{1}{\sigma_j^2}$$

– **Wniosek:** wynik najbardziej wiarygodny jest średnią ważoną N pomiarów **tej samej cechy**, gdzie waga każdego pomiaru jest odwrotnością jego wariancji

Uśrednianie wielu pomiarów – przykład

S. Eidelman et al.,
Phys. Lett. B 592, 1 (2004)

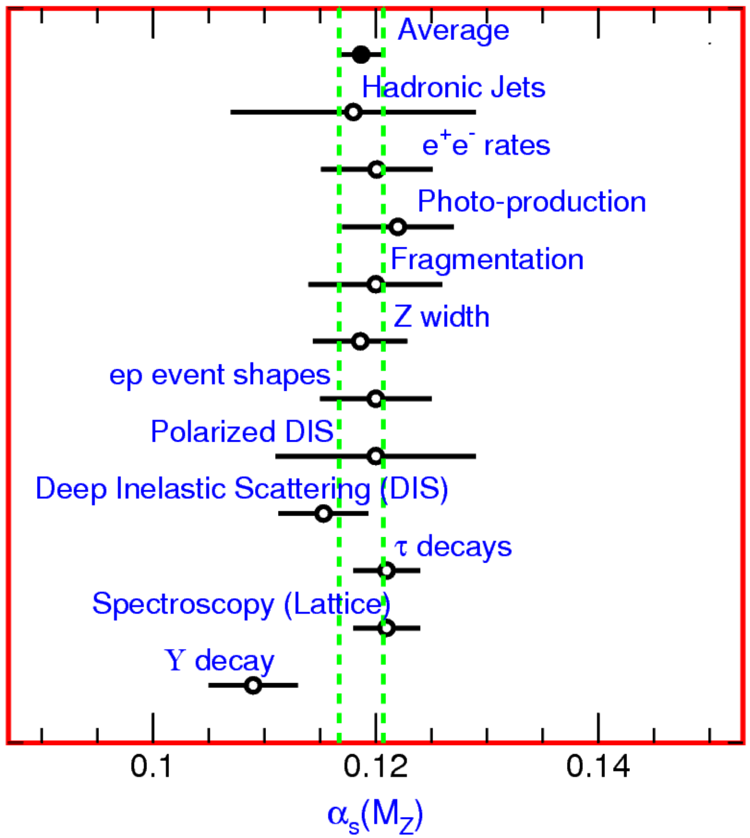


Figure 9.1: Summary of the value of $\alpha_s(M_Z)$ from various processes. The values shown indicate the process and the measured value of α_s extrapolated to $\mu = M_Z$. The error shown is the *total* error including theoretical uncertainties. The average quoted in this report which comes from these measurements is also shown. See text for discussion of errors.

- Pomiar stałej sprzężenia oddziaływań silnych – szukanie najbardziej wiarygodnego wyniku → uśredniamy wszystkie wyniki z różnych pomiarów ważąc je odwrotnością wariancji

Przykład – estymacja rozkładu norm.

- **Przykład:** badamy rozkład wagi studentek amerykańskich college'ów
  - rozkład wagi studentek w populacji jest opisany rozkładem normalnym o wartości średniej μ i wariancji σ^2
  - załóżmy, że wybraliśmy $N=10$ reprezentantów, których wagi (w kg) $X^{(j)}$ układają się następująco:
    - 52,2 55,3 59,0 57,6 67,6 72,6 68,9 62,6 67,6 81,6
  - **Zadanie:** na podstawie wyniku pomiaru znajdź najbardziej wiarygodną estymację parametrów rozkładu
  - oczywiście funkcja rozkładu prawdopodobieństwa każdego wyniku (wagi studentek) dana jest wzorem:

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

  - konstruujemy funkcję wiarygodności:

$$L(\hat{\mu},\hat{\sigma})=\sigma^{-n}(2\pi)^{-n/2}\exp\left[-\frac{1}{2\hat{\sigma}^2}\sum_{j=1}^{N}\left(x^{(j)}-\hat{\mu}\right)^2\right]$$

Przykład – estymacja rozkładu norm.

- oraz logarytmiczną funkcję wiarygodności:

$$l(\hat{\mu},\hat{\sigma}) = \ln L(\hat{\mu},\hat{\sigma}) = \ln\left(\hat{\sigma}^{-N}(2\pi)^{-n/2}\left[-\frac{1}{2\hat{\sigma}^2}\sum_{j=1}^{N}\left(x^{(j)}-\hat{\mu}\right)^2\right]\right) = -\frac{1}{2\hat{\sigma}^2}\sum_{j=1}^{N}\left(x^{(j)}-\hat{\mu}\right)^2 + const$$

- równania wiarygodności:

$$\boxed{\frac{dl(\hat{\mu},\hat{\sigma})}{d\hat{\mu}} = 0 \qquad \frac{dl(\hat{\mu},\hat{\sigma})}{d\hat{\sigma}} = 0}$$

$$\frac{dl(\hat{\mu},\hat{\sigma})}{d\hat{\mu}} = \frac{-2\sum_{j=1}^{N}\left(x^{(j)}-\hat{\mu}\right)(-1)}{2\sigma} = 0 \Rightarrow \sum_{j=1}^{N}\left(x^{(j)}\right) - N\hat{\mu} = 0 \Rightarrow \boxed{\hat{\mu} = \frac{\sum_{j=1}^{N} x^{(j)}}{n}}$$

$$\frac{dl(\hat{\mu},\hat{\sigma})}{d\hat{\sigma}} = -\frac{n}{2\hat{\sigma}} + \frac{\sum_{j=1}^{N}\left(x^{(j)}-\hat{\mu}\right)}{2\hat{\sigma}^2} = 0 \Rightarrow \boxed{\hat{\sigma}^2 = \frac{\sum_{j=1}^{N}\left(x^{(j)}-\hat{\mu}\right)^2}{n}}$$

- dla formalności powinniśmy jeszcze sprawdzić drugie pochodne...

Przykład – estymacja rozkładu norm.

- liczymy estymatory:

$$\hat{\mu}=\frac{\sum_{j=1}^{n} x^{(j)}}{n}=645/10=64,5 \qquad \hat{\sigma}^2=\frac{\sum_{j=1}^{n}\left(x^{(j)}-\hat{\mu}\right)}{n}=714/10=71.4$$

- otrzymaliśmy (poprzez metodę największej wiarygodności) estymację parametrów rozkładu normalnego całej populacji na podstawie pomiaru próby
- **Koniec**

Przykłady funkcji wiarygodności

Przykłady funkcji wiarygodności

- Rozkład Poissona

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

- Funkcja wiarygodności

$$l=\sum_{j=1}^{N}\left\{k^{(j)}\ln\lambda-\ln(k^{(j)}!)-\lambda\right\}$$

- oraz jej pochodna

$$\frac{dl}{d\lambda}=l'=\sum_{j=1}^{N}\left\{\frac{k^{(j)}}{\lambda}-1\right\}=$$

$$\frac{1}{\lambda}\sum_{j=1}^{N}\left\{k^{(j)}-\lambda\right\}=\frac{N}{\lambda}(\bar{K}-\lambda)$$

- Średnia arytmetyczna z *k* jest nieobciążonym estymatorem o minimalnej wariancji równej

$$\frac{\lambda}{N}$$

- Rozkład dwumianowy

$$L(k;\lambda)=\binom{n}{k}\lambda^k(1-\lambda)^{n-k}$$

- Stąd:

$$l=\ln L=k\ln\lambda+(n-k)\ln(1-\lambda)+\ln\binom{n}{k}$$

$$l'=\frac{k}{\lambda}-\frac{n-k}{1-\lambda}=\frac{n}{\lambda(1-\lambda)}\left(\frac{k}{n}-\lambda\right)$$

- czyli średnia arytmetyczna k/n jest estymatorem o minimalnej wariancji równej $\lambda(1-\lambda)/n$

Nierówność informacyjna

Nierówność informacyjna

- **Pytanie:** jak skonstruować estymator o optymalnych własnościach?
  - estymator jest nieobciążony, jeżeli **wartość obciążenia dla każdej próby**: $B(\lambda)=E(S)-\lambda=0$
  - oraz (**estymator zgodny**) **wariancja estymatora jest jak najmniejsza** (dąży do 0 dla liczebności próby losowej dążacej do nieskończoności): $\sigma^2(S)$ - *minimalna*
  - bardzo często istnieje jednak związek pomiędzy obciążeniem a wiarancją i musimy szukać kompromisu – taki związek nazywamy **nierównością informacyjną**
- Po dłuższych przekształceniach (Brandt) otrzymujemy nierówność informacyjną – związek między obciążeniem, wariancją i informacją zawartą w próbie:

$$\boxed{\frac{(B'(\lambda)+1)^2}{I(\lambda)} \le \sigma^2(S)}$$

$$I(\lambda)=E(l'^2)=-E(l'') \qquad l'=\sum_{j=1}^{N}\frac{f'(x^{(j)};\lambda)}{f(x^{(j)};\lambda)}$$

$$I(\lambda)=E(l'^2)=NE\left(\left(\frac{f'(x^{(j)};\lambda)}{f(x^{(j)};\lambda)}\right)^2\right)$$

Nierówność informacyjna

- **Nierówność informacyjna**:

$$\boxed{\frac{\left(B'(\lambda)+1\right)^2}{I(\lambda)} \leq \sigma^2(S)}$$

$$l' = \sum_{j=1}^{N} \frac{f'\left(x^{(j)};\lambda\right)}{f\left(x^{(j)};\lambda\right)}$$

- **Nierówność informacyjna** to związek pomiędzy obciążeniem, wariancją i informacją zawartą w próbie
- Jest to definicja ogólna. Prawa strona jest dolnym ograniczeniem dla wariancji danego (dowolnego) estymatora – ograniczenie to nazywamy **ograniczeniem minimalnej wariancji** albo **ograniczeniem Cramea-Rao**
- Kiedy obciążenie nie zależy od λ, a w szczególności gdy znika (równa się zero), nierówność redukuje się do:

$$\sigma^2(S) \geq \frac{1}{I(\lambda)}$$

Nierówność informacyjna

- **Możemy teraz zadać pytanie:** jaki jest warunek osiągnięcia <u>minimalnej wariancji</u>? Innymi słowy, kiedy we wzorze Cramea-Rao zachodzi równość?

$$E(S)=B(\lambda)+\lambda$$

- Można pokazać (Brandt), że zajdzie tak, gdy:

$$\boxed{l'=A(\lambda)(S-E(S)) \qquad l=B(\lambda)S+C(\lambda)+D \qquad L=d\exp(B(\lambda)S+C(\lambda))}$$

- Wtedy w przypadku <u>estymatora nieobciażonego</u> o minimalnej wariancji otrzymujemy:

$$\sigma^2(S)=\frac{1}{I(\lambda)}=\frac{1}{E(l'^2)} \qquad \boxed{\sigma^2(S)=\frac{1}{|A(\lambda)|}}$$

- Estymatory spełniające powyższe warunki nazywamy **estymatorami o najniższej wariancji**
- Jeżeli zamiast: $L=d\exp(B(\lambda)S+C(\lambda))$ spełniony jest słabszy warunek:

$$L=g(S;\lambda)c(X^{(1)},X^{(2)},\dots,X^{(N)})$$

- Wtedy S nazywamy **estymatorem wystarczającym** dla λ

KONIEC