

Moderne Methoden der Datenanalyse

Konfidenz-Intervalle (2)



20. Juni 2017

Fakultät für Physik

Institut für Experimentelle Kernphysik - IEKP



KIT – Universität des Landes Baden-Württemberg und nationales Forschungszentrum in der Helmholtz-Gemeinschaft

www.kit.edu

Vorlesungsprogramm

Einführung: Überblick und grundlegende Konzepte (1)
 Einführung: Überblick und grundlegende Konzepte (2)
 Zufallszahlen und Monte-Carlo Methoden

- Hypothesentests
- Parameterschätzung
- Parameterschätzung (Goodness-of-fit)
- Optimierungs- und Parametrisierungsmethoden

Konfidenzintervalle (1)

- Konfidenzintervalle (2)
- Klassifikation (lineare Methoden)
- Klassifikation (ANN, BDT, SVM)
- Klassifikation (Deep Learning)
- Messen und Entfalten
- Systematische Unsicherheiten



A.MEYER

R.ULRICH

A.MEYER

6. Konfidenz-Intervalle (1)

Neyman-Konstruktion
 Obere und untere Schranken
 Feldman-Cousins Unified Approach

Einfluss des Priors
Limits an physikalischen Grenzen

Die CLs -Methode

6.1 FREQUENTISTISCHER ANSATZ

6.2 BAYES'SCHE STATISTIK

6.3 "MODIFIZIERTER FREQUEN-TISTISCHER" ANSATZ

Literatur:

G.Cowan: Statistical Data Analysis (Kap. 9)

G.Cowan: The Review of Particle Physics (Kap. 39) http://pdg.lbl.gov

R.Cousins: Why isn't every physicist a Bayesian? <u>Am.J.Phys. 65 (1995) 398.</u>

T.Junk: Confidence Level Computation for combining searches with small statistics, <u>NIM, A 434 (1999) 435-443.</u>

A.Read: Presentation of Search Results: the CL_S Technique, <u>J.Phys.G: 28 (2002)</u> 2693-2704.



4 20. Juni 2017 | 6. Konfidenz-Intervalle (2)

6. Konfidenz-Intervalle (2)

Prüfgröße, p-Wert
 Neyman-Pearson Lemma
 Beispiele

- Wilks Theorem
- Störparameter
- Profile-Likelihood-Quotient
- Higgs-Entdeckung
- Look-Elsewhere Effekt

6.4 ERINNERUNG: HYPOTHESENTESTS

6.5 PROFILE-LIKELIHOOD QUOTIENT

Literatur:

- G.Cowan: The Review of Particle Physics (Kap. 39) http://pdg.lbl.gov
- F.James: Statistical Methods in Experimental Physics (Kap. 10)
- ATLAS+CMS "Procedure for the LHC Higgs Boson Search combination in Summer 2011 <u>https://cds.cern.ch/record/1379837</u>
- G.Cowan, K.Cranmer, E.Gross, O.Vitells "Asymptotic Formulae for Likelihood-based tests of new physics, <u>https://arxiv.org/abs/1007.1727</u>





6. KONFIDENZ-INTERVALLE (2)

5 20. Juni 2017 | 6. Konfidenz-Intervalle (2)



6.4 ERINNERUNG HYPOTHESENTESTS

6 20. Juni 2017 | 6. Konfidenz-Intervalle (2)

Hypothesentests / Erinnerung



Hypothesentests: Anwendung statistischer Methoden zur Entscheidungsfindung, d.h. Ja/Nein oder Accept/Reject

- Soll ich morgen einen Regenschirm mitnehmen ?
- Wirkt ein Medikament wirklich?
- Ist das entdeckte Boson das Higgs-Boson des Standard-Modells?

Vergleich Daten/Theorie: Stimmen die Daten innerhalb einer vorgegebenen Signifikanz mit dem Untergrund überein?

 Ausschluss von hypothetischen Signalen typischerweise mit 95% CL
 Entdeckung von Signalen erfordert größere Abweichung von der Untergrundhypothese, im allgemeinen > 5σ, (also p-Wert = 5.7 · 10⁻⁷)

"Extraordinary claims require extraordinary evidence"

Konfidenz-Intervalle und Hypothesentests



- Konfidenzintervall liefert Angabe der Häufigkeit bei wiederholten Experimenten den wahren Wert in den abgeschätzten Intervallen zu finden.
- Intervallbestimmung kann man als Serie von Hypothesentests auffassen: Variiere hypothetischen wahren Wert solange, bis Signal mit einem p-Wert von 5% ausgeschlossen werden kann. Genau an dem Punkt liegt die obere (einseitige) Grenze mit 95% CL.





Einzelne zu testende Hypothese: Null-Hypothese H₀:

Beispiel: Übereinstimmung der Daten mit dem Standard-Modell

- Häufig: Goodness-of-fit tests
- Null-Hypothese kann nie bewiesen werden, nur widerlegt es kann immer eine (geringfügig) bessere Alternative geben.

Hypothesentests / Erinnerung

Hypothesen formuliert als PDF

Vergleich einer Stichprobe (Daten) mit einer oder mehreren Hypothesen H_i



Einzelne zu testende Hypothese: Null-Hypothese H₀:

Beispiel: Übereinstimmung der Daten mit dem Standard-Modell

- Häufig: Goodness-of-fit tests
- Null-Hypothese kann nie bewiesen werden, nur widerlegt es kann immer eine (geringfügig) bessere Alternative geben.

Mehrere Hypothesen: H₀ und Alternativ-Hypothese(n) H_i Beispiel: Standard-Modell (H₀) vs SM + Neue Physik (H₁)

Mehr als zwei Hypothesen



Beispiel: Energieverlust dE/dx vs. Impuls eines Teilchens in einem Spurdetektor
 Pion-Hypothese falsifiziert
 Kaon-Hypothese falsifiziert



Hypothesen können nie streng verifiziert werden. Es könnte immer noch eine bessere Hypothese geben. Konsistenz mit Hypothesen kann getestet werden.



g(t;H₁)

Vorgehensweise

- 2.Festlegung des Signifikanz-Niveaus α
 - \rightarrow definiert Wert von t₀
 - Wahl von α abh. von Fragestellung: Hohe Reinheit *p* oder Effizienz ε?

$$p = \frac{(1-\alpha)N_0}{(1-\alpha)N_0 + \beta N_1} \qquad \epsilon = 1 - \alpha$$

- Aus der Wahl von α ergibt sich die Teststärke 1- β
- Teststärke 1-β i.a. wichtiger als α: wenn zu klein, keine Trennung möglich.
- 3. Messung \rightarrow Bestimmung des gemessenen p-Werts zur Entscheidung:
 - p-Wert liefert Wahrscheinlichkeit, dass Werte t>t_m gemessen würden, falls H₀ wahr

g(t) 1

g(t;H

p-Wert ist selbst eine Zufallsvariable

12 20. Juni 2017 | 6. Konfidenz-Intervalle (2)

ß

ι₀

α

Effizienz-Reinheits-Kurve (ROC)





Arbeitspunkt abhängig von Fragestellung

Häufig wird daher die Area under Curve ("AUC") als Vergleichskriterium für verschiedene Methoden verwendet

Neyman-Pearson Lemma



Falls einfache Hypothesen, d.h. f(x|H_i) vollständig bekannt, dann erreicht der Likelihood-Quotient

$$\lambda(x) = \frac{f(x|H_0)}{f(x|H_1)}$$

optimale Trennung 1-β für vorgegebene Signifikanz α Äquivalent: Log-Likelihood Differenz:

$$q(x) = -2\ln\lambda(x) = 2(\ln f(x|H_1) - \ln f(x|H_0))$$

Bemerkungen:

Finden der optimalen Prüfgröße: Klassifikation \rightarrow folgende Vorlesungen

In der Praxis, verwende Monte Carlo Modelle, um die PDF für unterschiedliche Hypothesen zu generieren.

Neyman-Pearson Lemma gilt <u>nicht allgemein</u> für zusammengesetzte Hypothesen, d.h. Hypothesen mit freien Parametern, also z.B.: f(x|H(λ_i,μ_i)) mit λ_i bekannt und μ_i frei)

Beispiel: Eigenschaften des Higgs Bosons

- Ist das Higgs Boson ein skalares Teilchen?
 - Null-Hypothese: J^P = 0⁺
 - Alternativ-Hypothese: z.B. J^P = 0⁻
- Konstruktion einer skalaren Pr
 üfgr
 ö
 ße (Sample Likelihood aus sog. Matrixelement-Methode):







Beispiel: Spin-Korrelationen



Statistische Methoden der Datenanalyse 2017 | Kurs 4022141 | Andreas B.Meyer, KIT und DESY

D



Beispiel: Spin-Korrelationen



υ



Beispiel: Spin-Korrelationen



υ

Likelihood Quotient



Verallgemeinerung auf nicht-einfache Tests:

$$\lambda(x) = \frac{\max_{\mu_j} \mathcal{L}(x_1, \dots, x_n; \mu_1, \dots, \mu_m)}{\max_{\mu_j \in \omega} \mathcal{L}(x_1, \dots, x_n; \mu_1^{(\omega)}, \dots, \mu_m^{(\omega)})} \qquad \mathsf{H}_{\mathsf{h}}$$

- Zähler: Maximum im gesamten Parameter-Raum (Alternativ-Hypothese), d.h. μ_j freie Parameter
- Nenner: Maximum im zulässigen Parameter-Raum ω für Null-Hypothese (z.B. einige Parameter μ_j festgelegt oder eingegrenzt), d.h. μ_j^(ω) sind Parameter, so dass Null-Hypothese erfüllt

Hypothese wird verworfen, falls $\lambda > \lambda_{\alpha}$ mit

$$\alpha = P(\lambda > \lambda_{\alpha} | H_0) = \int_{\lambda_{\alpha}}^{\infty} g(\lambda | H_0) \, d\lambda$$

z.B. Brandt, Abschnitt 8.6

Satz von Wilks



Für sehr große Stichproben mit *n* Datenpunkten x_i , $n \to \infty$ gilt: Wird eine Grundgesamtheit durch die Wahrscheinlichkeitsdichte $f(x_i, \mu_i)$ beschrieben, und legt die Null-Hypothese $r=m-m^{(0)}$ der Parameter fest, so folgt die Testfunktion $q = -2 \ln \lambda$ einer χ^2 Verteilung mit *r* Freiheitsgraden. r = Unterschied in der Anzahl freier Parameter für H₁ und H₀

Ausgangspunkt f
ür sogenannte asymptotische Verfahren zur Berechnung des Likelihood-Quotienten λ(x). Aber: Anwendbarkeit muss im allgemeinen mit Monte Carlo Simulationen
überpr
üft werden.

Beispiel: Signal s über Untergrund b in Zählexperiment:

$$\Delta \chi^2 = -2\ln\lambda = -2\ln\left(\frac{\mathcal{L}(s+b)}{\mathcal{L}(b)}\right)$$

Für n=s+b groß folgt $\Delta \chi^2$ einer χ^2 -Verteilung mit 1 Freiheitsgrad. Für gemessene Werte von *s* und *b* kann dann der p-Wert für die Signalsignifikanz berechnet werden. S.S. Wilks, The large-sample distribution of the likelihood ratio for testing composite hypotheses. Ann. Math. Stat. 9, 60–62 (1938)

20. Juni 2017 | 6. Konfidenz-Intervalle (2)

Beispiel: Likelihood Quotient bei Zählexperiment



Häufiger Fall: Suche nach Signal (s) über Untergrund (b) Verteilungsdichte für jedes m: n(m) = s(m) + b(m)





$$\Delta \chi^2 = -2 \ln \lambda = -2 \ln \left(\frac{\mathcal{L}(s+b)}{\mathcal{L}(b)} \right) = -73 \text{ für diesen Fall}$$

Wilks: Falls H₀ (nur Untergrund) korrekt, dann folgt $\Delta \chi^2$ einer χ^2 -Verteilung mit 1 Freiheitsgrad: p(- χ^2 = 73) = 2 · 10⁻¹⁶, entspricht z = 8.5 σ

Beispiel: Gauß-verteilte Stichprobe



Hypothesentest: Hat eine Gauß-verteilte Stichprobe den Mittelwert μ_0 ? Verteilung der Stichprobe:

$$f(x_1, ..., x_N) = \left(\frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma}}\right)^N \exp\left[-\frac{1}{2\sigma^2} \sum_{j=1}^N (x_j - \mu)^2\right]$$

Likelihood-Quotient:

$$\begin{split} \lambda &= \exp \left[-\frac{1}{2\sigma^2} \left(\sum_{j=1}^{N} (x_j - \bar{x})^2 - \sum_{j=1}^{N} (x_j - \mu_0)^2 \right) \right] \\ \text{Mit } q &= -2 \ln \lambda \text{ folgt:} \\ q &= \frac{N}{\sigma^2} (\bar{x} - \mu_0)^2 \end{split} \quad \begin{array}{l} \text{Mit } q = \frac{N}{\sigma^2} (\bar{x} - \mu_0)^2 \\ \text{Log-Likelihood Differenz} \end{array} \end{split}$$

Variablen Transformation (Nebenrechnung):

$$\Rightarrow g(q) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} q^{-\frac{1}{2}} \exp(-\frac{q}{2})$$

Wilks' Satz gilt hier für alle N

Statistische Methoden der Datenanalyse 2017 | Kurs 4022141 | Andreas B.Meyer, KIT und DESY

 χ^2 Verteilung für

einen Freiheitsgrad

Brandt, Beispiel 8.5

Nebenrechnung



Durchführen einer Variablentransformation:

$$g(q) = \frac{d\bar{x}}{dq} f(\bar{x}) \qquad \text{mit } f(\bar{x}) = N\left(\bar{x}; \mu_0, \frac{\sigma}{\sqrt{N}}\right)$$

Umstellen des Zusammenhangs zwischen \overline{x} und q:

$$\bar{x} = \sqrt{\frac{\sigma^2}{N}} q^{\frac{1}{2}} + \mu_0 \qquad \Rightarrow \quad \frac{d\bar{x}}{dq} = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\sigma^2}{N}} q^{-\frac{1}{2}}$$

alles einsetzen:

$$\Rightarrow g(q) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} q^{-\frac{1}{2}} \exp\left(-\frac{q}{2}\right)$$

Beispiel: Zählexperiment mit Poisson-Statistik



Beobachtung von n Ereignissen mit <u>kleinem</u> Signal s

$$P_0(n;b) = \frac{1}{n!}b^n e^{-b} \qquad P_1(n;s+b) = \frac{1}{n!}(s+b)^n e^{-(s+b)}$$

$$q = -2\ln\lambda = 2(n\ln(1+\frac{s}{b})-s)$$

Annahme b bekannt, dann ist *n* = *b* + *s*:

$$q = 2(b+s)\ln\left(1+\frac{s}{b}\right) - 2s$$

Für *s* ≪ *b* ist:

$$\sqrt{q} = s/\sqrt{b} + \mathcal{O}((s/b)^2)$$

In Wilks Näherung gilt für einen einzelnen Freiheitsgrad N=1: Signifikanz des Signals s, ausgedrückt durch das Gaußsche Quantil z:

$$z = \sqrt{\Delta \chi^2} = \sqrt{q} = s/\sqrt{b}$$

Cowan, Cranmer, Gross and Vitelis "Asymptotic formulae for likelihood-based tests of new physics" https://arxiv.org/abs/1007.1727

Nebenrechnung



Für *s*«*b*: Taylor-Entwicklung für den Logarithmus:

$$\ln(1+x) = \sum_{\nu=1}^{\infty} \frac{(-1)^{\nu+1}}{\nu} x^{\nu} \qquad \text{für } x \in (-1,1]$$

Einsetzen von x = s/b und Abbruch nach erstem Term:

$$q = 2(b+s)\ln\left(1+\frac{s}{b}\right) - 2s$$
$$\approx 2(b+s)\frac{s}{b} - 2s$$
$$= 2s^2/b$$



6.5 PROFILE-LIKELIHOOD QUOTIENT

CCGV: <u>https://arxiv.org/abs/1007.1727</u> CMS+ATLAS: <u>https://cds.cern.ch/record/1379837</u>

Signalstärke µ



Likelihood für Zählexperiment:

$$\mathcal{L}(\text{data}|\mu) = \text{Poisson}(\text{data}|\mu \cdot s + b)$$

Produkt der Poisson-Likelihoods in Bin *i n_i* Ereignisse zu messen

Poisson(data
$$|\mu \cdot s + b) = \prod_{i} \frac{(\mu \cdot s_i + b_i)^{n_i}}{n_i!} e^{-(\mu \cdot s_i + b_i)}$$

Signalstärke µ:

 μ =0: H_0 Nur Untergrund μ =1: H_1 Erwartetes Signal



28 20. Juni 2017 | 6. Konfidenz-Intervalle (2)

Randbedingungen ("Priors")



Likelihood für Zählexperiment:



 $\mathcal{L}(\text{data}|\mu) = \text{Poisson}(\text{data}|\mu \cdot s(\theta) + b(\theta)) \cdot PDF(\theta)$





- Verwendet bei Suchen (d.h. Setzen oberer Grenzen oder Entdeckung) am LHC (z.B. Higgs-Boson) mit Signal-Hypothese µ.
- Profile-Likelihood: Bestimmung des <u>Intervalls</u> für (wahre) Signalstärke μ , für optimale Störparameter $\hat{\theta}_{\mu}$, normiert auf das <u>globale</u> Maximum der Likelihood

Profile = Scan, d.h bestimme q_{μ} für alle μ







Pseudo-Experimente



Falls asymptotische Formeln nicht anwendbar sind, und zum Testen der asymptotischen Formeln: Bestimmung der <u>erwarteten</u> Verteilungen von q_μ für Untergrund (μ=0) und Signal (μ=1) durch Pseudo-Experimente.



CCGV, Absch. 2.5 und CMS+ATLAS 2.1



Generiere Verteilungen aus Pseudo-Daten (oder Toy-MC) von q_μ für die Hypothesen Signal+Untergrund (μ=1) und Nur-Untergrund (μ=0).
 Verwende dafür gemessene Störparameter θ_{μ,obs}



Aus diesen PDF f($q_{\mu}|\mu, \hat{\theta}_{\mu,obs}$) ermittele p-Werte für CL_{S+B} und CL_B





Konstruiere p-Werte für aus PDF für q_µ

$$p_{\mu} = P(\tilde{q}_{\mu} \ge \tilde{q}_{\mu}^{obs} | \text{signal+background}) = \int_{\tilde{q}_{0}^{obs}}^{\infty} f(\tilde{q}_{\mu} | \mu, \hat{\theta}_{\mu}^{obs}) d\tilde{q}_{\mu}$$
$$1 - p_{b} = P(\tilde{q}_{\mu} \ge \tilde{q}_{\mu}^{obs} | \text{background-only}) = \int_{q_{0}^{obs}}^{\infty} f(\tilde{q}_{\mu} | 0, \hat{\theta}_{0}^{obs}) d\tilde{q}_{\mu}$$

CL_S quantifiziert Übereinstimmung mit Signalhypothese: Falls für μ =1, CL_S < α , dann ist das Signal mit 1- α CL_S Vertrauens-Niveau ausgeschlossen.



- Typischerweise Angabe des Wertes µ95, der mit 95% CLs Vertrauens-Niveau ausgeschlossen ist.
- Pseudo-Experimente zur Bestimmung der Verteilung an der f
 ür die Untergrund-Hypothese erwarteten 95% CL Grenze, d.h. des Medians und der Bereiche f
 ür ±1σ und ± 2σ um μ₉₅.



Stand Dezember 2011



Zahl der erwarteten Ereignisse hängt von Masse des Higgs Bosons ab.



Verdeckte Analyse: Analyse und alle Kriterien wurden vor dem Anschauen der Daten festgelegt.

Stand Juli 2012





Ereignisüberschuss in ZZ und yy bei ATLAS und CMS

Stand Juli 2012



4.Juli 2012: Bekanntgabe der Entdeckung eines "neuen Bosons" am CERN



Ausschluss von Signalen zwischen 131(128) GeV und 523(600) GeV



4.Juli 2012: Bekanntgabe der Entdeckung eines "neuen Bosons" am CERN



Bestimmung der Signalsignifikanz und Bestimmung des <u>lokalen</u> p-Werts durch Vergleich mit Untergrund-Hypothese

Satlas=5.9 σ

 S_{CMS} =5.0 σ



Der Trialfaktor ist i.a. proportional zur Breite der Verteilung und umgekehrt proportional zur Auflösung.

Bestimmung:

Pseudoexperimente (CPU-aufwändig, da seltene Fluktuationen)

Oder Häufigkeit der Aufwärts-Fluktuationen in den Daten selbst



Statistische Methoden der Datenanalyse 2017 | Kurs 4022141 | Andreas B.Meyer, KIT und DESY

4

Zusammenfassung



Intervallschätzung

Im nicht-Gaußischen Fall eine komplexe Angelegenheit.

- Frequentistischer Ansatz: Betrachte alle Messungen â für alle möglichen wahren Werte a => Konfidenzintervall [a_{min},a_{max}]_â liefert Angabe der Häufigkeit bei wiederholten Experimenten den wahren Wert a in den abgeschätzten Intervallen zu finden.
- Bayes: Betrachte aktuelles Experiment und A-Priori Wissen darüber.

Profile-Likelihood Ratio:

- Frequentistische Methode zur Bestimmung von oberen Grenzen bei Such-Analysen.
- Verwendet Störparameter und Randbedingungen (Priors) aus Hilfsmessungen.

Anwendung der CL_S Methode: Robustheit gegen Untergrundschwankungen.