NSigma

J. Ihringer

Gegeben sei eine Messung von N Daten $Y^{obs}{}_j$ mit Standardabweichungen σ_j, $(1 \le j \le N)$. Für die Ergebnisse der Messung gebe es ein Modell, das die Berechnung der Werte $Y^{cal}{}_j$ für jeden Wert j $(1 \le j \le N)$ erlaubt. Für das Folgende ist wichtig, dass die Information über das Experiment in der Gesamtheit der beobachteten Werte $Y^{obs}{}_j$ und ihren Standardabweichungen σ_j liegt.

Ein einzelner Messwerte $Y^{obs}{}_j$ ist eine Zufallsvariable aus einer Verteilung mit Mittelwert $\overline{Y^{obs}{}_j}$ und Standardabweichung σ_j. Der aus dem Modell berechnete Wert $Y^{cal}{}_j$ kann bestenfalls den Mittelwert $\overline{Y^{obs}{}_j}$ ergeben, deshalb wird die Differenz $Y^{obs}{}_j - Y^{cal}{}_j$ im Allgemeinen ungleich Null sein. Für unterschiedliche Modelle werden sich diese Differenzen unterscheiden. Eine Maßzahl für die Übereinstimmung von Modell und Messung ist die Summe M der durch das Quadrat der Standardabweichung dividierten Abweichungsquadrate (Tabelle 1).

Stehen mehrere Modelle zur Auswahl, dann wird sich das am besten passende durch den kleinsten Wert von M auszeichnen. Aus der Definition ist ersichtlich, dass M aber auch von der Anzahl der Messwerte bzw. der Freiheitsgrade abhängt, deshalb findet man bei gleicher Qualität von Modell und Messdaten für Datensätze mit unterschiedlicher Anzahl von Freiheitsgraden unterschiedliche Werte M. Die Signifikanz von M folgt dann mit Hilfe des χ^2-Tests für die jeweilige Anzahl von Freiheitsgraden.

An dieser Stelle setzt N_σ ein: Diese leicht zu errechnende Zahl ersetzt den χ^2-Test. N_σ zeigt, unabhängig von der Anzahl der Freiheitsgrade, unmittelbar die Signifikanz der Übereinstimmung von Modell, Messwerten und ihren Standardabweichungen. Im Besonderen zeigen ***Messungen und Modelle mit unterschiedlicher Anzahl von Freiheitsgraden, aber von gleicher Qualität, gleiches*** N_σ. Damit können Datensätze mit unterschiedlicher Zahl von Daten und Modelle mit unterschiedlicher Zahl von Parametern unmittelbar verglichen werden.

N	Anzahl der Beobachtungen
$Y^{obs}{}_j$	Messwert bei Beobachtung Nr. j
$Y^{cal}{}_j$	Zur Beobachtung Nr. j aus einem Modell berechneter Wert
σ_j	Standardabweichung zur dieser Beobachtung
$M = \sum_{j=1}^{N} \frac{(Y^{obs}{}_j - Y^{cal}{}_j)^2}{\sigma_j{}^2}$	Summe der gewichteten Abweichungsquadrate

Tabelle 1 Summe der gewichteten Abweichungsquadrate

Definition von NSigma

$N_\sigma = \frac{M - n}{\sqrt{2n}}$	Defintion von N_σ: Quotient, im Zähler steht die Differenz zwischen M und seinem Erwartungswert n, im Nenner die Standardabweichung der χ^2-Verteilung
n	Anzahl der Freiheitsgrade: Anzahl der Beobachtungen N minus Anzahl der verfeinerten Parameter
M	Summe der gewichteten Abweichungsquadrate

Tabelle 2 Definition von N_σ für n Freiheitsgrade

Für die Signifikanz der Werte von N_σ gelten die aus den Gaußverteilungen bekannten Prozentzahlen:

$\lvert N_\sigma \rvert$	Bei oftmaliger Wiederholung von Messung und Auswertung wird $\lvert N_\sigma \rvert$ bei folgen Anteilen aller Messungen erwartet:
≤ 1	66%
≤ 2	95%
≤ 3	99%

Tabelle 3 Signifikanzniveaus für unterschiedliche Werte von N_σ

Wenn das Modell die Messwerte im Rahmen ihrer Standardabweichungen beschreibt, ist für Datensätze mit beliebiger Anzahl von Daten $\lvert N_\sigma \rvert \leq 3$ zu erwarten.

$\lvert N_\sigma \rvert >> 3$ ***erhält man, wenn Messwerte, ihre Standardabweichungen und das Modell nicht zusammenpassen.***

Die Definition von N_σ folgt aus Mittelwert und Standardabweichung der χ^2-Verteilung:

Vielfache Wiederholung der Messung

Das Histogramm der Ergebnisse für M bei vielfacher Wiederholung der Messung von N Werten entspricht der χ^2-Verteilung, wenn das Modell die Messwerte im Rahmen ihrer Standardabweichungen beschreibt. Mittelwert und Standardabweichung dieser Verteilung sind ausschließlich Funktionen der Anzahl der Freiheitsgrade:

$\overline{M} = n$	Mittelwert von M bei Vielfacher Wiederholung der Messung von N Werten
$\sigma(M) = \sqrt{2n}$	Standardabweichung von M

Tabelle 4 Mittelwert und Standardabweichung der χ^2-Verteilung für n Freiheitsgrade

Mit zunehmender Anzahl n der Freiheitsgrade unterscheidet sich χ^2-Verteilung immer weniger von einer Gaußverteilung mit Mittelwert n und Standardabweichung $\sqrt{2n}$.

Beurteilung einer einzigen Messung

Bei einer einzigen Messung interessiert, ob ihre Ergebnisse im Rahmen der Standardabweichungen mit einem Modell übereinstimmen. Anschaulich zeigt sich die Übereinstimmung in der Lage des erzielten Wertes für M im Histogramm der χ^2-Verteilung. Für ein richtiges Modell ist zu erwarten, dass M in der Nähe des Erwartungswerts $\overline{M} = n$ der χ^2-Verteilung liegt. Ein numerisches Maß für den Abstand zwischen M und seinem Erwartungswert $\overline{M}$ ist die Anzahl N_σ der Standardabweichungen $\sigma(M)$ zwischen diesen Werten.

$N_\sigma = \frac{M-n}{\sqrt{2n}}$	N_σ ist ein Quotient, im Zähler steht die Differenz zwischen M und seinem Erwartungswert n, im Nenner die Standardabweichung der χ^2-Verteilung
n	Anzahl der Freiheitsgrade: Anzahl der Beobachtungen N minus Anzahl der verfeinerten Parameter
M	Summe der gewichteten Abweichungsquadrate

Tabelle 5 Definition von N_σ für n Freiheitsgrade

Referenz zu N_σ: Ihringer, J. “A quantitative measure for the goodness of fit in profile refinements with more than 20 degrees of freedom”. J. Appl. Crystallogr. **28**, 618–619 (1995).

Link zu den Skripten: http://www.uni-tuebingen.de/uni/pki/skripten/skripten.html