Письма в ЭЧАЯ. 2003. № 2[117] Particles and Nuclei, Letters. 2003. No. 2[117]

УДК 519.22

КАКУЮ ИНФОРМАЦИЮ МОЖНО ИЗВЛЕЧЬ ИЗ ФАКТА НЕНАБЛЮДЕНИЯ СОБЫТИЯ?

В. Б. Злоказов[1]

Объединенный институт ядерных исследований, Дубна

Пусть $P(t,T)$, $t \in [0,\infty]$, является функцией распределения моментов регистрации какого-либо временного события; параметр T неизвестен, но представляет интерес. Интервал наблюдения этого события — $[0,b]$, где b — случайное значение, выбранное из $[0,B]$ согласно функции распределения $F(t,B)$. Задача: что можно сказать о параметре T, если в период $[0,b]$ событие, представляющее интерес, не наблюдалось? В данной работе предложен метод для построения оценки нижней границы параметра T — величины, меньшей T с определенной вероятностью. Метод иллюстрируется анализом данных, зарегистрированных в эксперименте по синтезу 114-го элемента.

Let $P(t,T)$, $t \in [0,\infty]$, be the probability function of a time event occurence; the parameter T is unknown, but is of interest. The observation interval of this event is $[0,b]$, where b is a random value picked up from $[0,B]$ according to some probability function $F(t,B)$. The problem is: what can we say about the parameter T, if within $[0,b]$ the interesting event hasn't been observed? In this paper a method is suggested to build an estimate of the lower bound of parameter T, which is less than T with a certain probability. The method is illustrated by the analysis of data registered in the experiment on the synthesis of the element 114.

В отношении к этой проблеме можно отметить две крайности: иронические комментарии по поводу оценок, полученных из «данных нет», с одной стороны, и явно преувеличенные надежды, распространяемые авторами статистических методов для анализа малых выборок, с другой. Прежде всего, сделаем два философских замечания. Во все времена действует золотое правило: «нет статистики — нет информации»; с другой стороны, отсутствие информации — это тоже информация. Так что всякая разумная стратегия должна маневрировать, будучи направляемой этими двумя указателями.

Конечно, целью усилий может быть только малое количество информации, содержащееся в факте, что событие, которое a priori могло произойти, а posteriori не произошло. Было бы нереалистично надеяться построить точные оценки параметров в этом частном случае. Но все же осторожная математическая стратегия для получения, по крайней мере, в определенном смысле границ параметра вполне возможна.

Модель «отсутствия события». Последнее обычно рассматривают как частный случай выпада «нуля» при испытаниях, подчиненных соответствующему распределению, например, пуассоновскому, которое часто используется для описания редких событий [1]. Однако это не вполне правильно. «Отсутствие события» — это не просто один из многих возможных выходов испытаний, а скорее принципиальный дефект нашего эксперимента,

[1]E-mail: zlokazov@nf.jinr.ru

который сводит пространство значений случайной величины N к значению 0; имеющиеся выборки всегда состоят только из 0; не 0 — это событие, которое могло произойти, но не произошло.

Здесь мы имеем дело уже с другой случайной величиной ψ, определенной на дискретном выборочном пространстве $[0, 1]$, хотя и имеющей параметры, унаследованные от исходного распределения. Например, в пуассоновском случае функция распределения $P(x)$ для ψ будет такой

$$P(\psi) = \begin{cases} \exp(-\lambda), & \text{если } \psi = 0, \\ 1 - \exp(-\lambda) & \text{иначе.} \end{cases} \tag{1}$$

Математическое ожидание ψ, вычисленное только по выборочным значениям 0, будет смещенным; к тому же величина этого смещения непредсказуема и неконтролируема.

Об интервальных оценках. Попробуем построить интервал, содержащий истинное значение параметра λ с какой-то определенной вероятностью. Обычно в математической статистике используются 2 типа интервальных оценок: доверительные интервалы и доверительные множества.

Предположим, что для непрерывной случайной величины, подчиненной функции распределения (ФР) $F(x, p)$, существует функция $g(x, p)$, монотонно зависящая от параметра p, и что ФР для $g(x, p)$ не зависит от p. Тогда, если x_s — выборочное значение x и для чисел g_1, g_2 справедливо равенство

$$\int_{g_1}^{g_2} f(x, p)dx = 1 - \alpha, \text{ где } f\text{— плотность } F, \tag{2}$$

то для корней p_1, p_2 уравнений $g(x_s, p) = g_1$ и $g(x_s, p) = g_2$ выполняется

$$P(p_1 \le p_{\text{true}} \le p_2) = 1 - \alpha, \tag{3}$$

где P — вероятность того, что событие в скобках имеет место при $x = x_s$ и p_{true} — истинное значение параметра [2]. Интервал $[p_1, p_2]$ называется $\alpha \cdot 100\,\%$ *доверительным интервалом* для параметра p.

Доверительное множество возникает, когда функция $g(x, p)$ не удовлетворяет условию монотонности. В этом случае мы получаем множество E пар $(p_1(x_s), p_2(x_s))$, которое и называется доверительным множеством. Здесь (3) заменяется на [2]:

$$P(p_{\text{true}} \in (p_1(x_s), p_2(x_s)) \| (p_1(x_s), p_2(x_s)) \in E) = 1 - \alpha. \tag{4}$$

В [2] не рекомендуется использовать доверительные множества в случае одного параметра, так как существует метод для построения функции g с требуемыми свойствами, а доверительные интервалы интерпретируются на практике легче и проще, чем множества. Кроме того, p_1, p_2 в случае интервалов скорее субъективны, чем случайны, тогда как в случае множеств это прежде всего случайные величины, имеющие статистический разброс, который может перекрыть область $p_2 - p_1$, как в примере, даваемом прилагаемой к рукописи программой.

О методе G. J. Feldman и R. D. Cousins. Он [1] в настоящее время, по-видимому, является наиболее популярным методом для анализа малых выборок в физике. Он совпадает с методом построения доверительных множеств для параметра, но алгоритмически проще: функция $g(x,p)$ не требуется, а используется только x_s.

Однако следует подчеркнуть, что этот метод работает только в простых случаях: когда, например, оценка параметра сильно коррелирует с выборочным средним или если $F(x,p)$ такова, что x,p в ней могут меняться местами и выполняются условия для построения фидуциальных интервалов Фишера.

Приведенная далее паскаль-программа показывает, что когда параметр имеет значение среднего x, метод работает хорошо, но совершенно иная ситуация имеет место в случае, например, дисперсии или других случаях.

В общем случае, хотя (4) удовлетворяется, метод имеет все вышеуказанные недостатки. Очень значительным дополнительным недостатком метода является и то, что границы параметра могут иметь физически бессмысленные значения, если только они искусственно не ограничиваются областью допустимых значений, что, однако, требует априорной информации о параметре. Пусть в последнем случае область допустимых значений параметра равна δ; разумно ожидать, что диаметр множества значений границ параметра, получаемых с помощью [1], не превосходит «доверительный интервал» слепого угадывания (который очевидно равен $(1-\alpha)\cdot\delta$), но, как показывает приложенная программа, ситуация может оказаться прямо противоположной этому.

Случай распределения Пуассона. Здесь параметр λ имеет значение математического ожидания; но здесь мы наталкиваемся на трудности другого рода.

Распределение Пуассона дискретно, и мы не можем выбрать g_1, g_2, в которых (2) выполняется точно, но, разумеется, мы можем взять такие числа, при которых (2) справедливо как неравенство [2]. Субъективность выбора этих границ, не столь заметная в непрерывном случае, здесь становится очевидной, особенно для нашего биномиального распределения. Здесь мы имеем только две точки, где ФР не равна нулю: 0 и не 0. Мы не знаем границ доверительного интервала для истинного значения параметра, но мы можем установить такие g_1, g_2, которые кажутся нам достаточно «доверительными», и, вычисляя λ_1, λ_2 — решения уравнений: $\exp(-\lambda) = g_2$ и $1 - \exp(-\lambda) = g_1$, соответственно, мы будем иметь [2]

$$P(\lambda_1 \le \lambda_{\text{true}} \le \lambda_2) \ge g,$$

где $g = 1 - g_1 - g_2$. Верхний предел в нашем случае «отсутствия события» нас не интересует. Из другого уравнения мы имеем

$$\lambda_2 = \ln(1/g_2).$$

Границы не зависят от параметра, т. е. от среднего. Небольшие изменения в g_2 могут сделать λ_2 сколь угодно близкой к нулю. Но нас как раз интересует вопрос: $\lambda_{\text{true}} = 0$ или нет? И если нет, то насколько близка эта величина к нулю. Совершенно очевидно, что рассмотренная процедура не даст нам объективного ответа.

Концепция нижнего предела для параметра. Итак, доверительные интервалы и множества, относящиеся к асимптотическим методам статистики, не являются подходящим инструментом для случая «отсутствия события». Нецелесообразно также и использование байесовских методов, поскольку те требуют априорное распределение параметра, что в случае «передовой исследовательской физики» (подлинно передовой), где «отсутствие события» — это весьма актуальная проблема, означало бы недопустимую степень субъективизма.

Целью данной работы было создание альтернативного метода, который бы получал ответы на вопросы не из субъективных предположений, а из условий эксперимента.

Мы будем действовать следующим образом. Пусть $P(t,T), \quad t \in [0,\infty]$, ФР моментов наблюдаемости некоторого временного события (обозначим его ψ); параметр T неизвестен, но для нас представляет интерес.

Пусть затем $[0,B]$ — возможный интервал наблюдения события ψ. Подлинный интервал наблюдения $[0,b]$, где b — случайное значение, взятое из $[0,B]$, согласно некоторой ФР $F(t,B)$. B может быть равно, в частности, бесконечности.

Задача: что мы можем сказать о параметре T, если в период $[0,b]$ событие ψ не наблюдалось?

Если параметр T принимает только положительные значения, можно сказать, что отсутствие события в период наблюдения доказывает, что подлинное значение T наиболее вероятно лежит где-то далеко за b и мы можем попытаться оценить, по крайней мере, T_l — нижнюю границу T — значение, которое с определенной вероятностью меньше, чем T.

Взгляд на b — правую границу интервала наблюдения — как на случайную величину — это необходимость. Прежде всего, взять действительно нужное время для наблюдения можно лишь, если имеется априорная информация о параметре T, что нетипично для подлинно новаторских экспериментов. Далее, часто длина интервала наблюдения лимитируется не столько научными, сколько техническими и финансовыми условиями эксперимента. И, наконец, часто (в случаях радиоактивного распада всегда) эта длина в принципе короче, чем период, в течение которого событие может произойти; пренебрежение этим фактом ведет к систематической ошибке оценки параметра — смещению.

Оценка T_l. Запишем вероятность Q того, что ψ не наблюдается в период времени $[0,b_0]$, где b_0 взято из $[0,B]$ согласно $F(t,B)$. Очевидно, для любого $u, \quad u \le B$ эта вероятность равна

$$Q(b_0 < u) = \int_0^u \frac{dF(t,B)}{dt}(1 - P(t,T))dt. \tag{5}$$

На основе (5) мы можем построить математическое ожидание такой величины b

$$\hat{E}b = \int_0^B u\frac{dQ}{du}du, \tag{6}$$

ее дисперсию и «сигму» (корень квадратный из дисперсии):

$$\hat{V}b = \int_0^B u^2\frac{dQ}{du}du - (\hat{E}b)^2, \quad \sigma_b = \sqrt{\hat{V}b}. \tag{7}$$

Если $[0,b_0]$ — выборочный интервал наблюдения, в течение которого ψ не было зарегистрировано, мы можем сформулировать следующую оценку нижнего предела T:

$$T_l = b_0. \tag{8}$$

Его математическое ожидание и дисперсия даются формулами (6), (7), и его значение покрывается интервалом $[0, T_x]$, где $T_x = \min(E_b + \sigma_b, B)$, с вероятностью $P_1 = Q(T_x)$.

Чтобы показать, что действительно каждое значение x, $\quad x \in [0, T_x]$ с вероятностью P_1 меньше, чем T, нам необходимо конкретизировать функции $F(t, B)$ и $P(t, T)$.

Модель 1: $F(t, B)$ ***и*** $P(t, T)$ ***— равномерные распределения***. Имеем

$$F(b < t) = \begin{cases} 0, & t < 0; \\ t/B, & 0 \le t \le B; \\ 1, & t > B; \end{cases} \qquad P(\psi < t) = \begin{cases} 0, & t < 0; \\ t/T, & 0 \le t \le T; \\ 1, & t > T. \end{cases}$$

Подставляя эти формулы в (5)–(7), получим

$$Q(u) = \int_0^u \frac{1}{B}\frac{T-t}{T}dt = \frac{Tu - u^2/2}{BT}, \quad u \in [0, B],$$

$$\hat{E}b = E_b = \int_0^B \frac{t}{B}\frac{T-t}{T}dt = \begin{cases} 1/TB(B^2(T/2 - B/3)), & \text{если } T > B; \\ T^2/(6B), & \text{если } T \le B, \end{cases}$$

$$\hat{E}b^2 = \int_0^B \frac{t^2}{B}\frac{T-t}{T}dt = \begin{cases} 1/TB(B^3(T/3 - B/4)), & \text{если } T > B; \\ T^3/(12B), & \text{если } T \le B, \end{cases}$$

$$\hat{V}b = \hat{E}b^2 - E_b^2, \qquad \sigma_b = \sqrt{\hat{V}b}.$$

Здесь T_x следует заменить на $\min(T_x, B)$. Достаточно доказать, что отношение T_x к T действительно меньше, чем 1 для любой пары B, T.

- Случай $T > B$. Положим $r = B/T$. Имеем

$$R = \frac{T_x}{T} = \frac{r}{2} - \frac{r^2}{3} + \frac{r}{6}\sqrt{3 + 3r - 4r^2}.$$

Так как $3 + 3r - 4r^2 < 4$, то это ведет к $R < r(1/2 + 1/3) - r^2/3 < 1$ для любого $r \le 1$.

- Случай $T \le B$. Положим $r = T/B$. Имеем

$$R = \frac{T_x}{T} = r/6 + 1/6\sqrt{r - r^2} < r/6 + 1/6 < 1$$

для любого $r \le 1$.

Это завершает наше доказательство: $T_x \le T$ для любых B, T.

Модель 2: $F(t, B)$ ***равномерное, а*** $P(t, T)$ ***— экспоненциальное распределение***.

$$F(b < t) = \begin{cases} 0, & t < 0; \\ t/B, & 0 \le t \le B; \\ 1, & t > B; \end{cases} \qquad P(\psi < t) = \begin{cases} 0, & t < 0; \\ 1 - \exp(-t/T), & t \in [0, \infty]. \end{cases}$$

Подставляя эти формулы в (5)–(7), получим

$$Q(u) = \int_0^u \frac{1}{B}\exp(-t/T)dt = \frac{T}{B}(1 - \exp(-u/T)), \quad u \in [0, B],$$

$$\hat{E}b = E_b = \int_0^B \frac{t}{B}\exp(-t/T)dt = \frac{T}{r}(1-(r+1)\exp(-r)),$$

$$\hat{E}b^2 = \int_0^B \frac{t^2}{B}\exp(-t/T)dt = \frac{T^2}{r}(2-(r^2+2(r+1))\exp(-r)),$$

$$\hat{V}b = \hat{E}b^2 - E_b^2, \quad \sigma_b = \sqrt{\hat{V}b}.$$

Здесь T_x следует тоже заменить на $\min(T_x, B)$; $r = B/T$, $r \in (0,\infty]$. Выражение $R = T_x/T$ в этом случае очень громоздкое, но численно можно показать, что $R < 1$.

Модель 3: $F(t,B)$ ***и*** $P(t,T)$ ***— экспоненциальные распределения.***

$$F(b<t) = \begin{cases} 0, & t<0; \\ 1-\exp(-t/T), & t\in[0,\infty]; \end{cases}$$

$$P(\psi<t) = \begin{cases} 0, & t<0; \\ 1-\exp(-t/T), & t\in[0,\infty]. \end{cases}$$

Подставляя эти формулы в (5)–(7), получим

$$Q(u) = \int_0^u \frac{1}{B}\exp(-t/B)\exp(-t/T)dt = \frac{T}{(T+B)}(1-\exp(-u(1/B+1/T))),$$

$$\hat{E}b = E_b = \int_0^B \frac{t}{B}\exp(-t/B)\exp(-t/T)dt = \frac{B}{(1+r)^2},$$

$$\hat{E}b^2 = \int_0^B \frac{t^2}{B}\exp(-t/B)\exp(-t/T)dt = \frac{2B^2}{(r+1)^3},$$

$$\hat{V}b = \hat{E}b^2 - E_b^2, \quad \sigma_b = \sqrt{\hat{V}b}.$$

Здесь $r = B/T$ и u не ограничены. Имеем

$$R = \frac{T_x}{T} = \frac{r}{(1+r)^2} + r\sqrt{(2r+1)/(1+r)^4};$$

R меньше, чем сумма максимумов обоих членов, которая меньше 1.

Выводы

• Гарантированным образом (с вероятностью P_1) T_l действительно меньше, чем T для всех значений B, T и может рассматриваться как нижний предел T.

• Вероятность $P_1(T_x)$ зависит от неизвестных величин B и T и качественно может быть оценена в следующих двух крайних случаях.

— Отношение $B > T$ не типично для ситуации «отсутствие события» — мы рассмотрим более интересный случай: B сравнимо с T. В этом случае мы можем положить $B \simeq T$ и избавиться, по крайней мере, от T. Рассмотрим, например, модель 2. Имеем:

$$\frac{T}{B}(1-\exp(-u/T)) \simeq 1-\exp(-u/B).$$

Отсюда $T_l \simeq B \cdot 0{,}264$ и $P_1(E_b) \simeq 0{,}23$.

— Наиболее интересный для нас случай это: B пренебрежимо мало по сравнению с T. В этом случае мы можем положить $T \to \infty$ и показать, что $Q(u) \simeq u/B$ для $u \in [0, B]$. Действительно, для модели 2 при $u \in [0, B]$ мы имеем:

$$\frac{T}{B}(1 - \exp(-u/T)) \simeq \frac{T}{B}(1 - (1 - u/T)) = \frac{u}{B}.$$

Видно, что $E_b \to B$, когда $T \to \infty$, и, таким образом, $P_1(E_b) \to 1$.

Благодаря монотонной зависимости Q от T в других случаях P_1 будет заключено между этими двумя величинами.

Применение к данным по синтезу 114-го элемента. Элемент 114 был идентифицирован по последовательности, состоявшей из сигналов ядра отдачи, трех альфа-частиц и заключительного спонтанного деления [3], зарегистрированного на протяжении временного интервала в 34 мин; полное время эксперимента и время калибровки составляли около 48800 мин каждое [4]. Все сигналы были зарегистрированы в одном и том же стрипе детектора.

Калибровочное измерение случайных сигналов дало следующие частоты последних: имплантаций ядер отдачи = 1,3 в час; альфа-частиц = 1 в час; имитаторов спонтанного деления зарегистрировано не было за все время калибровки. Альтернативной гипотезой при интерпретации этой последовательности является: все сигналы — случайные имитаторы (т. е. не подлинные). Мы будем использовать временные стохастические процессы пуассоновского типа, которые являются, по-видимому, наилучшим формализмом для описания случайных (фоновых) событий.

Это функции времени $k(t)$, описывающие число случайных событий, произошедших за время $(0, t)$ с вероятностью $Q_k(t)$ и удовлетворяющих очень общим и простым требованиям к природе этих событий, таким, как стационарность, независимость от предыстории и редкость [5]. Функция распределения $k(t)$ есть

$$Q_k(t) = \frac{(lt)^k}{k!} \exp(-lt), \quad t \in [0, \infty], \tag{9}$$

где l — параметр распределения Пуассона; t — время. Величина lt — это математическое ожидание и в то же время дисперсия $k(t)$ в момент t.

Для сигналов разного типа формула, описывающая вероятности их сумм с учетом их порядка и конфигурации, имеет вид

$$Q_{sk}(t) = p_s \prod_{i=1}^{m} Q_{k_i}(t), \quad t \in [0, \infty], \tag{10}$$

где m — число типов, а p_s — вероятность упорядоченной комбинации сигналов s-типов, и sk есть полная сумма этих сигналов.

Из этих данных можно получить вероятности цепочки событий: один имитатор имплантации ядра отдачи за 34 мин до спонтанного деления и три имитатора альфа-частиц между ними.

Временной интервал в 34 мин является минимально возможным, но, конечно, он не оптимален. Реальный интервал, содержащий 5 случайных сигналов, должен быть умножен на $(n + 1)/n$ — это даст нам т. н. суперэффективную (т. е. имеющую асимптотику $1/n^2$)

оценку размера интервала; имеем $n = 5$, так что следует положить интервал равным 40,8 мин. Из калибровочных данных мы имеем:

$$l_i \cdot 60 = 1{,}3, \quad l_a \cdot 60 = 1,$$

что дает нам $l_i = 1{,}3/60$; $\quad l_a = 1/60$.

Но возникает вопрос: а как извлечь l_{sf} лишь из одного факта ненаблюдения ложного сигнала спонтанного деления? Мы применим метод, описанный выше, и построим нижний предел соответствующего параметра T при условии, что значения, большие, чем он, сделают наш вывод еще более убедительным. Модель 1 является, по-видимому, наиболее подходящей. Отсюда мы имеем $T_l = 48800$, а так как среднее есть половина от этого, то $l_{sf} = 1/24400$.

Далее мы имеем следующие вероятности:

$$Q_{1_i}(40{,}8) = \frac{(40{,}8 \cdot 1{,}3/60)^1}{1!} \exp\left(-(40{,}8/60)\right) \text{ — имплантации,}$$

$$Q_{3_a}(40{,}8) = \frac{(40{,}8 \cdot 1/60)^3}{3!} \exp\left(-(40{,}8/60)\right) \text{ — альфа-частиц,}$$

$$Q_{1_{sf}}(40{,}8) = \frac{(40{,}8 \cdot \ln(2)/24400)^1}{1!} \exp\left(-(40{,}8 \ln(2)/24400)\right) \text{ — спонт. дел.}$$

Используя вероятность порядка сигналов $p_s = 0{,}05$, мы получим полную вероятность

$$P_{\text{tot}} = p_s Q_{1_i} Q3_a Q_{1_{sf}} \sim 0{,}0000008093.$$

Далее, мы можем оценить среднее N_m и дисперсию N_v числа интервалов, содержащих подобную конфигурацию сигналов

$$N_m = 48800/40{,}8 \cdot P_{\text{tot}} \sim 0{,}001, \quad N_v \sim N_m.$$

Другими словами, в течение времени (0,48800) математическое ожидание числа интервалов с подобной конфигурацией сигналов равно нулю. В силу этого мы можем сказать, что четыре сигнала, заключаемые сигналом спонтанного деления, противоречат гипотезе об их фоновой природе.

Паскаль-программа для тестирования метода [1]. Она осуществляет анализ трех множеств данных, порожденных:

1) случайной величиной $10 * r + \lambda$, где r имеет равномерное распределение в $[0, 1]$;
2) случайной величиной $\lambda(r - 0{,}5)$ с аналогичным r;
3) случайной величиной, подчиненной функции распределения с плотностью $f(x) = (\lambda - x)^2/(\lambda^2 - \lambda + 1/3)$.

Здесь λ — параметр. Из выходных данных можно видеть, что, в то время как в первом случае метод [1] работает хорошо, в случаях 2, 3 «оценка слепого угадывания» дает лучшие результаты.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Feldman G. J., Cousins R. D.* // Phys. Rev. D. 1998. V. 57. P. 3873–3889.
2. *Вилкс С. С.* Математическая статистика: Пер. с англ. М., 1967.
3. *Oganessian Yu. Ts. et al.* JINR Preprint E7-99-53. Dubna, 1999.
4. *Stoyer N. J. et al.* // Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. A. 2000. V. 455. P. 443–441.
5. *Zlokazov V. B.* // Eur. Phys. J. A. 2000. V. 8, No. 1. P. 81–86.

Получено 28 января 2003 г.