объединенный
институт
ядерных
исследований
дубна

Р5-88-221

Н.И.Чернов, В.С.Курбатов, Г.А.Ососков

ЭФФЕКТИВНЫЙ МЕТОД ОЦЕНКИ ПАРАМЕТРОВ, КРИТЕРИЙ СОГЛАСИЯ МНОГОМЕРНЫХ РАСПРЕДЕЛЕНИЙ ДЛЯ ДАННЫХ, ПРЕДСТАВЛЕННЫХ В ВИДЕ ОДНОМЕРНЫХ ГИСТОГРАММ

Направлено в журнал "NIM"

1988

Начнем с примера. Представим себе, что в эксперименте изме
ряется некоторая двумерная случайная величина $\vec{E}(E_1, E_2)$. Для
простоты предположим, что область определения переменной имее
вид прямоугольника /рис.1/.

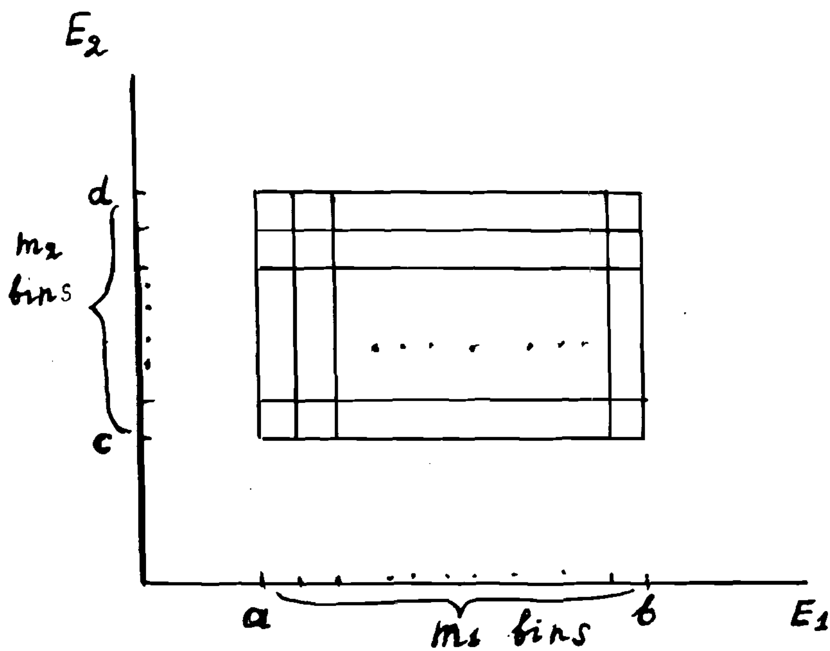

Рис.1. Двумерная область определения: m_1 разбиений по оси E_1, m_2 разбиений по оси E_2.

Пусть есть некоторая правильная физическая теория, описывающая распределение случайного вектора $\vec{E}$ в этой области и зависящая от некоторых параметров, подлежащих оценке из сра
нения с экспериментальными данными. Как правильно оценивать параметры? Ответ на этот вопрос зависит от того, в каком виде получена и насколько полна экспериментальная информация. Если в эксперименте при регистрации каждого события одновременно измеряются обе величины E_1 и E_2, то параметры можно оцениват
либо методом максимального правдоподобия, либо методом миниму

ма χ^2. При оценке параметров методом минимума χ^2 двумерную область определения следует разбить на некоторое число двумерных ячеек - например, прямоугольников /пусть число разбиений по оси E_1 равно m_1, по оси E_2 - m_2, теоретически ожидаемую вероятность попадания в прямоугольник с индексами k и ℓ обозначим $p_{k\ell}$/. Если $N_{k\ell}$ - экспериментально наблюденное число попаданий в прямоугольник с индексами k, ℓ, то параметры следует оценивать из условия минимума функционала:

$$\Phi = \sum_{k,\ell} \frac{(N_{k\ell} - N \cdot p_{k\ell})^2}{N \cdot p_{k\ell}},$$

N - полное число событий /$= \Sigma N_{k\ell}$/. Известно, что оценки параметров, получаемые этим методом, обладают оптимальными свойствами.

Теперь допустим, что в эксперименте измеряется одна из двух величин, например E_1. Тогда параметры нужно оценивать из условия минимума функционала

$$\Phi_1 = \sum_k \frac{(N_{k.} - N \cdot p_{k.})^2}{N \cdot p_{k.}},$$

где

$$p_{k.} = \sum_\ell p_{k\ell}; \quad N_{k.} = \sum_\ell N_{k\ell}.$$

Если же измеряется величина E_2, то соответствующий функционал будет иметь вид

$$\Phi_2 = \sum_\ell \frac{(N_{.\ell} - N \cdot p_{.\ell})^2}{N \cdot p_{.\ell}};$$

$$p_{.\ell} = \sum_k p_{k\ell}; \quad N_{.\ell} = \sum_k N_{k\ell}.$$

Далее предположим, что по каким-то причинам мы располагаем одномерными гистограммами $N_{k.}$ и $N_{.\ell}$, но не располагаем информацией в виде чисел $N_{k\ell}$. Как тогда оценивать параметры?

Приведенная постановка вопроса может показаться надуманной, однако она имеет под собой реальную основу.

Действительно, некоторое время тому назад в физике частиц до ~ 1 ГэВ актуальной проблемой было изучение реакции рождения дополнительного пиона при взаимодействии π-мезонов с нуклоном, т.е. реакции

$$\pi N \to \pi\pi N. \qquad /1/$$

При анализе этих реакций довольно широко применялась методика парциально-волнового анализа с использованием изобарных моделей [1,2]. В рамках этих моделей предполагалось, что основной вклад дают такие квантовые состояния, у которых в конечном состоянии может рождаться $\Delta(1232)$ резонанс. Для достаточно точного количественного описания спектров частиц в конечном состоянии требовался учет большого количества парциальных волн. Это приводило к тому, что соответствующее выражение для квадрата матричного элемента содержало большое количество /до 20 $\div$ $\div$30/ неизвестных параметров. Поскольку 3 частицы в конечном состоянии полностью описываются 4 переменными /если пренебречь спинами/ мы приходили к ситуации, когда необходимо было оценивать параметры по четырехмерной плотности вероятности.

Выше мы уже говорили, как нужно корректно оценивать параметры, однако на практике это часто делалось таким образом: строился набор одномерных гистограмм, для каждой из них составлялся свой χ^2 функционал

$$\Phi_k = \sum_i \frac{(N_i^k - N \cdot p_i^k)^2}{N \cdot p_i^k},$$

k - номер гистограммы, i - индекс суммирования гистограммы, и отыскивался минимум общего функционала

$$\Phi = \sum_k \Phi_k.$$

Подобная практика использовалась также и тогда, когда была необходимость в добавлении данных из других зарядовых каналов. Например, если реакция /1/ изучалась методикой водородных пузырьковых камер в пучке π^--мезонов, то анализу были доступны следующие два /из пяти/ зарядовых канала:

$$\pi^- p \to \pi^-\pi^+ n$$
$$\qquad\;\; \pi^-\pi^0 p.$$

Анализируя эти два канала, физики приходили к такому выводу, когда для определения параметров их модели требовалась дополнительная информация о реакции /1/ в других зарядовых каналах. Эту информацию физики брали из опубликованных работ, где она была приведена в виде одномерных гистограмм угловых или энергетических распределений. Как использовалась дополнительная информация?

В этом случае физик строил соответствующий функционал Φ для своих данных и добавлял к своему функционалу соответствующие выражения, сконструированные для других данных.

Если использовать приведенный выше пример, то минимизировался функционал

$$\Phi' = \Phi + \Phi_1 + \Phi_2 = \Phi + \sum_k \frac{(N_{k.} - N\cdot p_{k.})^2}{N\cdot p_{k.}} + \sum_\ell \frac{(N_{.\ell} - N\cdot p_{.\ell})^2}{N\cdot p_{.\ell}} = \Phi + T,$$

где

$$T = \sum_k \frac{(N_{k.} - N\cdot p_{k.})^2}{N\cdot p_{k.}} + \sum_\ell \frac{(N_{.\ell} - N\cdot p_{.\ell})^2}{N\cdot p_{.\ell}}.$$

Возникает вопрос - корректна ли данная процедура? Интуитивно чувствуется, что так нельзя делать, поскольку функционалы Φ_1 и Φ_2 используют одни и те же данные*.

Наша работа посвящена этому вопросу. Здесь мы не излагаем подробных доказательств, а приводим лишь результаты. Читателю, интересующемуся точными доказательствами, рекомендуем обратиться к работам [3,4].

Все последующие утверждения мы будем проводить на примере, о котором говорилось выше.

1. РАСПРЕДЕЛЕНИЕ СТАТИСТИКИ "T"

Первое, что приходит в голову, - это попытаться получить функцию распределения статистики "T", так как если мы знаем вид распределения, то для оценки параметров можем применить стандартную методику максимального правдоподобия. Для этого представим "T" в виде

$$T = x^T \cdot x,$$

где x - вектор-столбец с компонентами

$$x = (x_1, \dots, x_m),$$

*Случай независимых выборок рассмотрен в приложении.

x^T - его транспозиция, $m = m_1 + m_2$, $N_k = N_{k.}$, $p_k = p_{k.}$ для $k = 1, \dots, m_1$ и $N_{m_1+\ell} = N_{.\ell}$, $p_{m_1+\ell} = p_{.\ell}$ для $\ell = 1, \dots, m_2$ и

$$x_j = \frac{N_j - N\cdot p_j}{\sqrt{N\cdot p_j}}; \quad j = 1, \dots, m.$$

Можно показать, что вектор $x = (x_1, \dots, x_m)$ асимптотически нормален со средним нуль и ковариационной матрицей [3]

$$V = \begin{bmatrix} V_1 & V_{12} \\ V_{12}^T & V_2 \end{bmatrix},$$

состоящей из подматриц $V_1\,(m_1\times m_1)$, $V_2(m_2\times m_2)$, $V_{12}(m_1\times m_2)$. Матрицы $V_1 = I_{m_1} - u_1 u_1^T$, $V_2 = I_{m_2} - u_2 u_2^T$ здесь и далее I_k - единичная матрица размерности $k\times k$, u_1 и u_2 - векторы-столбцы:

$$u_1 = (\sqrt{p_{1.}}, \sqrt{p_{2.}}, \dots, \sqrt{p_{m_1.}})$$

$$u_2 = (\sqrt{p_{.1}}, \sqrt{p_{.2}}, \dots, \sqrt{p_{.m_2}}),$$

и (k, ℓ)-ый элемент матрицы V_{12} имеет вид

$$(V_{12})_{k\ell} = \frac{p_{k\ell} - p_{k.}\cdot p_{.\ell}}{\sqrt{p_{k.}\cdot p_{.\ell}}}.$$

Доказательство этого утверждения проводится с помощью метода характеристических функций [5].

Зная вид распределения вектора x, попробуем найти вид распределения статистики "T". Определим вспомогательный вектор $e = (e_1, \dots, e_m)$, связанный с вектором x следующим соотношением:

$$e = C^T x,$$

C^T - произвольная ортогональная матрица. Тогда вектор e также асимптотически нормален со средним нуль и ковариационной матрицей

$$\langle e e^T \rangle = C^T V C.$$

Здесь и далее $\langle\cdot\rangle$ означает ожидание случайной величины. Можно выбрать матрицу таким образом, что $C^T V C$ - диагональна, пусть ее диагональные элементы $\lambda_1, \lambda_2, \ldots, \lambda_m$. Нетрудно видеть, что

$$T = x^T \cdot x = e^T C^T C e = e^T e = e_1^2 + e_2^2 + \ldots + e_m^2.$$

В этом случае статистика "T" является суммой квадратов асимптотически независимых нормально распределенных случайных величин $e_1, e_2, \ldots, e_m$.

Их характеристическая функция имеет вид:

$$\lim_{N \to \infty} \phi_T(t) = \prod_{k=1}^{m} \lim_{N \to \infty} \phi_{e_k^2}(t) =$$

$$= \prod_{k=1}^{m} (1 - 2i\sqrt{\lambda_k}\, t)^{-1/2},$$

а соответствующая функция распределения

$$f(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-itx} \prod_{k=1}^{m} (1 - 2i\sqrt{\lambda_k}\, t)^{-1/2}\, dt.$$

Нам не удалось найти аналитическое выражение для функции $f(x)$.

2. МОДИФИКАЦИЯ СТАТИСТИКИ "T"

Вместо статистики "T" введем другую статистику

$$T_m = \sum_{k,\ell} x_k x_\ell q_{k\ell} = x^T Q x,$$

где $Q = (q_{k\ell})$ - симметричная $m \times m$ матрица, удовлетворяющая соотношению

$$A^T Q A = I_m - c_{m_1} \cdot c_{m_1}^T - c_m \cdot c_m^T,$$

где I_m - единичная $(m \times m)$ матрица, а c_k - вектор-столбец размерности m с единицей в к-ой позиции и нулями в других.

Матрица A в свою очередь выбирается из условия $A A^T = V$.

В этом случае можно показать, что статистика T_m имеет χ^2 распределение с $m-2$ степенями свободы [3].

3. ОЦЕНКА НЕИЗВЕСТНЫХ ПАРАМЕТРОВ НА ОСНОВЕ СТАТИСТИКИ T_m

Мы знаем вид распредления статистики T_m. Теперь нам надо научиться с ее помощью находить оценки неизвестных параметров.

Как это делать?

Можно показать [3], что если функции $p_{k\ell}$ и T_m удовлетворяют довольно общим условиям, оценки параметров следует находить из условия минимума функционала T_m. Иначе говоря, если $a = (a_1, \ldots, a_s)$ - вектор неизвестных параметров, то его оценки следует находить из уравнений:

$$\frac{\partial T_m}{\partial a_i} = 0 \qquad (i = 1, \ldots, s). \qquad /2/$$

Доказательство этого утверждения дано в работе [3] и оно проводится аналогично соответствующему утверждению для классического метода минимума χ^2.

Кроме того, можно показать в предположении правильности теоретической гипотезы, что статистика T_m при значениях вектора $\hat{a}$, найденного из уравнений /2/, имеет в асимптотическом пределе χ^2-распределение с $/m - s - 2/$ степенями свободы. Так же, как и для классического χ^2, это утверждение можно использовать при проверке согласия теории с экспериментом.

Выражение для ковариационной матрицы оценок параметров $C_Q = (B^T Q B)^{-1}$.

Здесь

$$B_{ir} = \left(\frac{1}{\sqrt{p_i}}\right) \frac{\partial p_i}{\partial a_r},$$

$$1 \leq i \leq m; \quad 1 \leq r \leq s.$$

Наконец, последний вопрос - эффективность оценки параметров, получаемых данным методом. Иначе говоря, если вы о многомерном распределении имеете информацию только в виде одномерных гистограмм, то нет ли других методов, дающих оценки с меньшей дисперсией?

В работе [4] доказывается, что предлагаемая оценка асимптотически эффективна.

4. ЧИСЛЕННЫЕ ПРИМЕРЫ

Для численного примера мы взяли некий аналог из практики парциально-волнового анализа реакции $\pi^- p \to \pi^- \pi^+ n$.

Известно[2], что при энергиях первичного пиона 400-500 МэВ одним из главных состояний является D_{13}-состояние /угловой момент $\Delta(1232)$ резонанса относительно дополнительного пиона в конечном состоянии равен 2, изотопический спин 1/2, полный угловой момент $J = 3/2$/.

Для упрощения расчетов мы предположили, что эта реакция полностью описывается амплитудой D_{13} перехода. В этом случае выражение для совместной плотности вероятности распределения энергии E_1, E_2 вторичных[1] пионов имеет вид:

$$\frac{\partial^2 F}{\partial E_1 \partial E_2} \cong |a R_1|^2 + |b \cdot R_2|^2 + 2\mu_0' \operatorname{Re}[a R_1 b^* R_2^*],$$

где

$$a = -\sqrt{\frac{2}{15}}\, a_3 - \frac{1}{\sqrt{3}}\, a_1 e^{i\phi},$$

$$b = \sqrt{\frac{8}{135}}\, a_3 - \frac{1}{\sqrt{27}}\, a_1 e^{i\phi}. \qquad /3/$$

Для других величин мы использовали те же самые обозначения, что и в[1]

$$R_1 = \left(\frac{\Gamma_1}{2\pi p'}\right)^{1/2} \frac{1}{\omega_0 - \omega_{13} - \frac{1}{2} i \Gamma_1},$$

$$R_2 = \left(\frac{\Gamma_1}{2\pi p_2'}\right)^{1/2} \frac{1}{\omega_0 - \omega_{23} - \frac{1}{2} i \Gamma_1},$$

Γ_1 - ширина Δ_{33} изобары, ω_0 - ее масса, ω_{13} и ω_{23} - эффективные массы $\pi^- n$ и $\pi^+ n$ систем в конечном состоянии, p_1', p_2' - импульсы Δ_{33} резонанса в системе центра масс реакции.

В выражении /3/ параметры a_1, a_3, ϕ неизвестны и подлежат оценке. На самом деле имеются только два независимых параметра, так как имеется еще условие нормировки

$$\iint \frac{\partial^2 F}{\partial E_1 \partial E_2}\, dE_1 dE_2 = 1.$$

В качестве "истинных" значений параметров были выбраны $a_1^\circ = 8$, $a_3^\circ = 1$, $\phi^\circ = 4{,}23$.

Точность метода оценки параметров a_1, a_3 характеризуется эллипсом рассеяния с центром при значениях a_1°, a_3°. Уравнения для эллипсов рассеяния оценок параметров, получаемых этими двумя методами, были рассчитаны на компьютере и показаны на рис.2. Видно, что предложенный метод оценки имеет существенно меньший эллипс рассеяния, чем тот, который получается в случае оценки параметров по статистике "T".

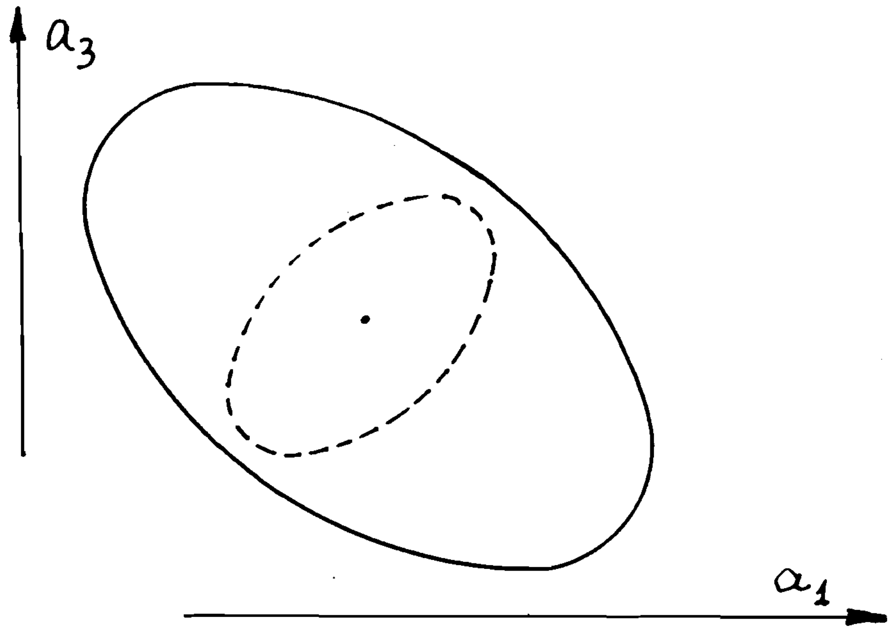

Рис.2. Эллипсы рассеяния: сплошная линия - при оценке параметров по статистике "T", пунктирная - при оценке параметров по статистике T_m.

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Подытожим результаты данной работы. В ней рассмотрена проблема оценки неизвестных параметров многомерного распределения в случае, когда информация доступна в форме одномерных гистограмм. Предложен метод оценки неизвестных параметров. Получено выражение для ковариационной матрицы. Доказана асимптотическая эффективность предложенного метода.

В заключение авторы выражают благодарность А.А.Тяпкину за полезные замечания.

ПРИЛОЖЕНИЕ

Предложенная статистика T_m позволяет получить оптимальные оценки параметров только для ситуации, когда частоты наблюдений по обеим переменным $/N_{k.}$ и $N_{.\ell}/$ получены из одного набора данных. Однако на практике возможны оценки параметров по двум независимым наборам данных /выборкам/, когда каждый набор дает наблюдения только по одной оси. В этом случае частоты $N_{.k}$ и $N_{.\ell}$ для двух интервалов на разных осях всегда независимы /даже в случае зависимых переменных E_1 и E_2/ и в ковариационной матрице V вектора x блоки V_{12} и V_{12}^T нулевые. Поэтому оценка по минимуму $T = x^T x$ будет обладать всеми оптимальными свойствами: она будет асимптотически эффективна, ее асимптотическое распределение будет χ^2 с $m-2$ степенью свободы в случае проверки простых гипотез и χ^2 с $m - s - 2$ степенями свободы в случае оценки s-мерного вектора параметров. Эти свойства сохраняются, даже если объемы выборок N_1 и N_2, дающих гистограммы по различным осям, различны $/N_1 \neq N_2/$, лишь бы $\min\{N_1, N_2\} \to \infty$.

ЛИТЕРАТУРА

1. Olsson M.G., Yodh G.B. - Phys.Rev., 1966, 145, p.1309.
2. Бунятов С.А., Курбатов В.С., Лиходед А.К. - ЯФ, 1972, 16/6/, с.1279.
3. Chernov N.I., Ososkov G.A., Kurbatov V.G. Communication of the Joint Institute for Nuclear Research, E5-87-698, Dubna, 1987.
4. Chernov N.I., Ioseliani Ts.I., Kurbatov V.S., Ososkov G.A. Commun. JINR E5-88-98, Dubna, 1988.
5. Крамер Г. Математические методы статистики. Изд-во "Мир", Москва, 1976.

Рукопись поступила в издательский отдел
4 апреля 1988 года.