

随机事件实验测量的误差

朱永生

(高能物理研究所、中国科学院大学)

《粒子物理数据分析基础与前沿》研讨会

2016.9.11~14, 北京

1. 误差的定义
 - 1.1 统计误差的含义和性质
 - 1.2 系统误差的含义和性质
2. 实验测量中统计误差的确定
 - 2.1 统计误差确定的一般方法
 - 2.2 统计误差确定的 ML 方法实例 (分支比测量)
3. 系统误差的归类和确定
 - 3.1 信号探测效率的误差
 - 3.2 本底事例期望值的误差
 - 3.3 输入参数误差
 - 3.4 分析流程的输入/输出误差
4. 系统误差的合并
 - 4.1 各直接测定值相互不关联
 - 4.2 各直接测定值相互关联
5. 统计误差和系统误差的合并处理
6. 结语

1. 误差的定义

》粒子物理、核物理、宇宙线物理研究的问题大量属于随机现象
随机现象—“相同”条件下对同一事物作多次测量，个别测量结果可以不同，
大量测量结果呈现某种规律性分布。

- 不稳定粒子衰变时间 (指数分布)
- n 个粒子被探测器记录到的计数 (二项分布)

- 计数器一定时间间隔内的计数 (泊松分布)
- 加速器轰击靶产生一定种类反应的事例数 (泊松分布)

》实验目的：测量感兴趣的物理量（参数） θ （或 θ ）

待测物理量 (例如衰变寿命、探测效率、分支比，截面，.....)
往往与物理过程观测量（随机变量）服从的分布的某个（些）参数相关。

- 不稳定粒子寿命 τ (指数分布期望值)
- 探测器探测效率 (二项分布参数 p)
- 计数器一定时间间隔内的计数期望值 (泊松分布期望值)
- 加速器轰击靶产生一定种类反应的事例数期望值 (泊松分布期望值)
- 粒子衰变分支比 $B_i = \bar{n}_i / \bar{n}$. (某衰变末态事例数期望值/不稳定粒子总数期望值)

》实验结果的表示（参数的点估计和区间估计）：

$$\hat{\theta}_{-\sigma_-}^{+\sigma_+} = \hat{\theta}_{-\sigma_{st-} - \sigma_{sys-}}^{+\sigma_{st+} + \sigma_{sys+}} \quad (1.1)$$

- 统计误差 (所研究的物理现象的随机性质导致物理量观测结果的不确定性)
- 系统误差 (统计误差之外的测量误差)
- 过失误差 (观测者错误操作或记录导致错误的测量结果，应当排除)
- 统计误差与系统误差 两者相互独立，大样本正态近似下

$$\sigma^2 = \sigma_{st}^2 + \sigma_{sys}^2 \quad (1.2)$$

1.1 统计误差的含义和性质

(表 1)

	一般定义	特例
待测物理量	随机变量 x 的参数 θ	衰变时间 t 的寿命 τ
随机变量的分布	$f(x; \theta)$	$f(t; \tau) = e^{-t/\tau} / \tau$
直接观测量	x 的随机子样本 $\mathbf{x} = \{x_1, \dots, x_n\}$ (x_i 是精确值，无测量误差)	t 的样本 $\mathbf{t} = \{t_1, \dots, t_n\}$
物理量直接可测性	θ 直接不可测 用估计量(随机变量) $\hat{\theta}(\mathbf{x})$ 估计	τ 直接不可测 用估计量 $\hat{\tau}(\mathbf{t})$ 估计
估计量分布	$g_{\hat{\theta}}(\bar{\theta}, \sigma_{\hat{\theta}})$, 均值 $\bar{\theta}$, 标准偏差 $\sigma_{\hat{\theta}}$ $\hat{\theta}(\mathbf{x})$ 为无偏估计时 $\bar{\theta} = \theta$ (真值)	$g_{\hat{\tau}}(\bar{\tau}, \sigma_{\hat{\tau}})$, ML 估计 $\hat{\tau} = \bar{t}, \bar{\tau} = \tau, \bar{t} = \frac{\sum_{i=1}^n t_i}{n}$
物理量结果表示	$\hat{\theta}_{-\sigma_-}^{+\sigma_+}$, $\hat{\theta}$ 名义值, σ_+, σ_- 标准误差; $[\hat{\theta} - \sigma_-, \hat{\theta} + \sigma_+]$ 包含 θ 概率 0.683; $[\hat{\theta} + \sigma_+, \infty)$ 和 $(-\infty, \hat{\theta} - \sigma_-]$ 包含 θ 概率均等于 $(1-0.683)/2$ (中心区间)。 利用 $g_{\hat{\theta}}$ 计算。	$\tau_{obs} = \bar{t}_{-\sigma_-}^{+\sigma_+}$, σ_+, σ_- 标准误差: $\sigma_- \cong \frac{\bar{t}}{\sqrt{n+1}}, \sigma_+ \cong \frac{\bar{t}}{\sqrt{n-1}}$
近似性质	$g_{\hat{\theta}} \sim N(\theta, \sigma_{\hat{\theta}})$ 时 $\sigma_+ = \sigma_- = \sigma_{\hat{\theta}}$	

》统计误差的性质

- 不可直接测定的分布参数 θ 才有统计误差。
- 参数 θ 反映随机分布整体性质，无穷多子样样本 ($n \rightarrow \infty$) 才能精确测定，有限子样估计量 $\hat{\theta}(\mathbf{x})$ 对于真值 θ 必定存在统计误差。
- 样本量 n 越大， $\hat{\theta}$ 确定精度越高（相对统计误差越小）。
- 统计误差反映 $\hat{\theta}$ 对于 $g_{\hat{\theta}}(\bar{\theta}, \sigma_{\hat{\theta}})$ 期望值 $\bar{\theta}$ 的统计涨落， $\hat{\theta}$ 无偏估计时反映对真值 θ 的统计涨落。
- 统计（标准）误差 σ_+, σ_- ， $[\hat{\theta} - \sigma_-, \hat{\theta} + \sigma_+]$ 包含 θ 概率 0.683，根据估计量 pdf $g_{\hat{\theta}}(\bar{\theta}, \sigma_{\hat{\theta}})$ 计算； $g_{\hat{\theta}} \sim N(\theta, \sigma_{\hat{\theta}})$ 时 $\sigma_+ = \sigma_- = \sigma_{\hat{\theta}}$ 。
- 测量系统对特定 x_i 的测量误差导致 $\hat{\theta}$ 的统计误差，而是 $\hat{\theta}$ 的系统误差来源之一。
- $\hat{\theta}$ 为有偏估计时 $\bar{\theta} \neq \theta$ ，其偏差 Δ 若不修正构成 $\hat{\theta}$ 的系统误差来源之一。

》 $\hat{\theta}$ 和 σ_+, σ_- 的确定

- $\hat{\theta}$ 的确定：点估计（ML 估计，LS 估计）
 例如变量 $\hat{\theta}$ 期望值的点估计为子样平均： $\hat{\mu} = \bar{\hat{\theta}} = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m \hat{\theta}_i$ 。（ m 为测量样本数）
 当只有一次测量值 ($m=1$)， $\hat{\mu} = \hat{\theta}_1$ 。（反应事例数测量，分支比测量）
- σ_+, σ_- 的确定：区间估计，经典（Neyman）方法
 1. 给定 θ 值对应的 $\hat{\theta}$ 的概率密度 pdf $g_{\hat{\theta}}$ 必须知道
 2. 对每个 θ 值，选择具有给定置信概率（例如 CL = 68.3%）的 $\hat{\theta}$ 值的一个区间。
 3. 将一切 θ 值对应的这一区间连接起来形成所置信带（如图 1b 所示）。
 4. 对一定的观测值 $\hat{\theta}_{obs}$ ，得到给定置信概率的区间 $[\theta_l, \theta_u]$

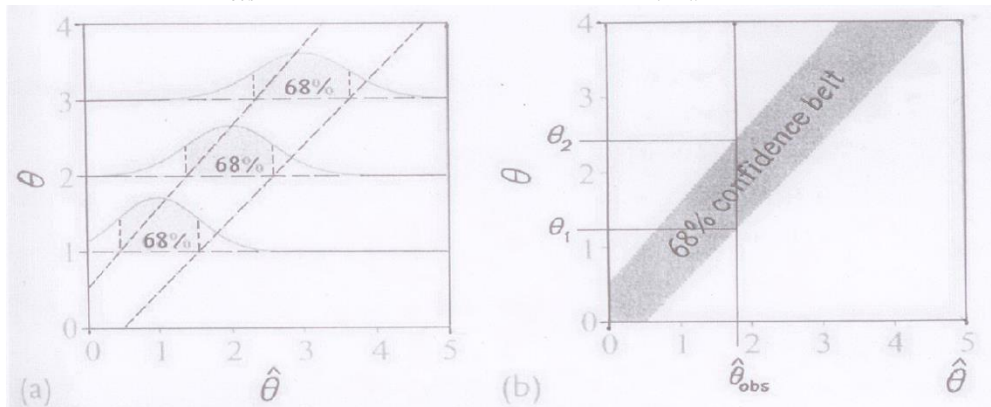


图 1 (a) 参数 θ 的 68.3% CL 区间的 Neyman 构建方法。

(b) 该方法用以确定特定观测值对应的 68.3% CL 区间。

1.2 系统误差的含义和性质

(表 2)

	一般定义	特例
待测物理量	特定常量 x , 可直接测量	特定衰变时间 t
测量值分布	$\hat{x} = r(x + \delta, \sigma_x)$, 均值 $x + \delta$, 偏差 δ , ($\delta = 0$ 测量系统无偏差); 标准偏差 σ_x 。 r 分辨函数, 反映测量系统对于被测值的不确定性。	$\hat{t} = N(t + \delta, \sigma_t)$
测量结果表示	$x_{obs}^{+\sigma_+}, x_{obs}^{-\sigma_-}$ 测量值, σ_+, σ_- 标准误差; $[x_{obs}^{-\sigma_-}, x_{obs}^{+\sigma_+}]$ 包含 x 概率 0.683, $[x_{obs}^{+\sigma_+}, \infty)$ 和 $(-\infty, x_{obs}^{-\sigma_-}]$ 包含 x 真值概率均等于 $(1-0.683)/2$ (中心区间)。 由分辨函数 r 的函数形式决定。	$t_{obs} \pm \sigma_t$, t_{obs} 测量值, $[t_{obs} - \sigma_t, t_{obs} + \sigma_t]$ 包含 t 真值概率 0.683。
近似性质	$r \sim N(x + \delta, \sigma_x)$ 时 $\sigma_+ = \sigma_- = \sigma_x$	
对于待测量 θ 导致的系统误差	若估计量 $\hat{\theta}(x, c; \theta)$ 包含 x 之外的其他带误差的物理量 $c = \{c_1, \dots, c_m\}$, 测量值分布函数 $r(x + \delta, \sigma_x)$ 以及 c 的误差构成 $\hat{\theta}$ 系统误差的来源。	

》系统误差的性质

- 可直接测定的物理量只有系统误差, 没有统计误差。
- 系统误差反映测量系统对于被测值的系统不确定性。包含仪器测量误差、刻度误差、仪器不稳定性导致的误差、测量原理中涉及的公式的误差等等。
- 若估计量 $\hat{\theta}(x, c; \theta)$ 中包含其他有误差的“已知量” c , 其误差构成 $\hat{\theta}$ 的系统误差。
- 系统误差可包含非随机误差和随机误差。
- 估计量 pdf $g_{\hat{\theta}}(\bar{\theta}, \sigma_{\hat{\theta}})$ 需要由随机变量 x 的 pdf $f(x; \theta)$, 测量值分布函数 $r(x + \delta, \sigma_x)$ 和 c 的分布函数共同确定, 一般情形下 $g_{\hat{\theta}}(\bar{\theta}, \sigma_{\hat{\theta}})$ 很难求出。

2. 实验测量中统计误差的确定

2.1 统计误差确定的一般方法

- 实验中涉及大量随机过程和数据的测量, θ 估计量的 pdf $g_{\hat{\theta}}(\bar{\theta}, \sigma_{\hat{\theta}})$ 很难求出。
- θ 的最优解通常是使描述物理问题的目标函数 $F(\theta)$ 达到极小:

$$\min F(\theta) = F(\theta^*) \quad (2.1)$$

- $F(\boldsymbol{\theta})$ 表征测量数据样本与理论模型预期分布间的一致性, $F(\boldsymbol{\theta})$ 越小, 一致性越好。

该理论模型 (\oplus 实验测量到的经验分布) 考虑到了实验中的一切随机过程的分布和测量系统对一切物理量的测量误差 (分辨函数) 对于所测数据的效应, 能够在统计意义上正确地预言测量的数据样本。

目标函数 $F(\boldsymbol{\theta})$ 达到极小 \rightarrow 数据样本与理论模型最优拟合 $\rightarrow \boldsymbol{\theta}$ 的最优估计

- ML: 目标函数 $F(\boldsymbol{\theta}) = -L(\mathbf{x}|\boldsymbol{\theta})$, LS: 目标函数 $F(\boldsymbol{\theta}) = Q^2(\boldsymbol{\theta})$ 。
- 目标函数 $F(\boldsymbol{\theta})$ 极小点值 $\boldsymbol{\theta}^*$ 的解析求解:

在 $\boldsymbol{\theta}^*$ 点的梯度向量等于 $\mathbf{0}$:

$$\nabla F(\boldsymbol{\theta}^*) = \left(\frac{\partial F(\boldsymbol{\theta})}{\partial \theta_1}, \frac{\partial F(\boldsymbol{\theta})}{\partial \theta_2}, \dots, \frac{\partial F(\boldsymbol{\theta})}{\partial \theta_n} \right)_{\boldsymbol{\theta}=\boldsymbol{\theta}^*}^T = \mathbf{0}. \quad (2.2)$$

在 $\boldsymbol{\theta}^*$ 点的黑塞(Hesse)矩阵为正定矩阵:

$$H_{ij}(\boldsymbol{\theta})_{\boldsymbol{\theta}=\boldsymbol{\theta}^*} \equiv \frac{\partial^2 F(\boldsymbol{\theta})}{\partial \theta_i \partial \theta_j} \Big|_{\boldsymbol{\theta}=\boldsymbol{\theta}^*}, \quad i, j = 1, 2, \dots, n. \quad (2.3)$$

所谓矩阵 A 为正定, 是指对于任何向量 $\mathbf{x} \neq \mathbf{0}$, 总有

$$\mathbf{x}^T A \mathbf{x} > 0. \quad (2.4)$$

- 目标函数 $F(\boldsymbol{\theta})$ 求极小点值 $\boldsymbol{\theta}^*$ 的数值方法:

最常见的是迭代法, 其基本思想如下: 先给出极小值点的估计初值 $\boldsymbol{\theta}_0$, 然后根据某种算法计算一系列的 $\boldsymbol{\theta}_k (k=1, 2, \dots)$, 使得点列 $\{\boldsymbol{\theta}_k\}$ 的极限就是 $F(\boldsymbol{\theta})$ 的一个极小值点 $\boldsymbol{\theta}^*$ ($\boldsymbol{\theta}$ 的最优估计)。

- 确定 $\boldsymbol{\theta}^*$ 对于参数 $\boldsymbol{\theta}$ 的误差, 它可由 $\boldsymbol{\theta}$ 的协方差矩阵及求出的 $\boldsymbol{\theta}^*$ 求得。

($\boldsymbol{\theta}^*$ 为正态分布、或大子样容量情形下是好的近似)

将 $\boldsymbol{\theta}^*$ 的各分量 $\theta_1^*, \theta_2^*, \dots, \theta_k^*$ 的标准差视为参数的标准误差。

ML: 当子样容量 n ($\mathbf{x} = \{x_1, \dots, x_n\}$) 很大, 似然函数为渐近的多维正态分布,

$\boldsymbol{\theta}^*$ 的协方差矩阵

$$V_{ij}^{-1}(\boldsymbol{\theta}^*) = \left(\frac{\partial^2 \ln L(\boldsymbol{\theta})}{\partial \theta_i \partial \theta_j} \right)_{\boldsymbol{\theta}=\boldsymbol{\theta}^*}. \quad (2.5)$$

LS: 线性近似下, 测量值服从正态分布时, Q^2 函数为 χ^2 分布

$\boldsymbol{\theta}^*$ 的协方差矩阵

$$V_{ij}^{-1}(\boldsymbol{\theta}^*) = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2 Q^2}{\partial \theta_i \partial \theta_j} \right)_{\boldsymbol{\theta}=\boldsymbol{\theta}^*}. \quad (2.6)$$

故有

$$V_{ij}^{-1}(\boldsymbol{\theta}^*) \propto \frac{\partial^2 F(\boldsymbol{\theta})}{\partial \theta_i \partial \theta_j} \Big|_{\boldsymbol{\theta}=\boldsymbol{\theta}^*} \equiv H_{ij}(\boldsymbol{\theta})_{\boldsymbol{\theta}=\boldsymbol{\theta}^*} \quad (2.7)$$

- $\boldsymbol{\theta}^*$ 的协方差矩阵的逆阵正比于目标函数的黑塞矩阵在极小值点 $\boldsymbol{\theta}^*$ 处的值。
- 给出黑塞矩阵的极小化方法 (牛顿法、共轭方向法、变尺度法) 直接确定参数误差。

- 无法求出黑塞矩阵的极小化方法，参数误差的确定要寻求别的途径。
- MINUIT 中的 MINOS 方法

LS: ($F(\theta) = Q^2(\theta)$),

$F(\theta)$ 曲面与 $F(\theta^*) + 1$ 平面相截形成等概率截线，该截线在 θ 各分量 $\theta_j (j=1, 2, \dots)$ 轴上的投影的两个极值决定了 $\hat{\theta}_j$ 的一倍标准误差区间。

ML: ($F(\theta) = -\ln(\theta)$), 方法同上, $F(\theta^*) + 1$ 换成 $F(\theta^*) + 0.5$ 。

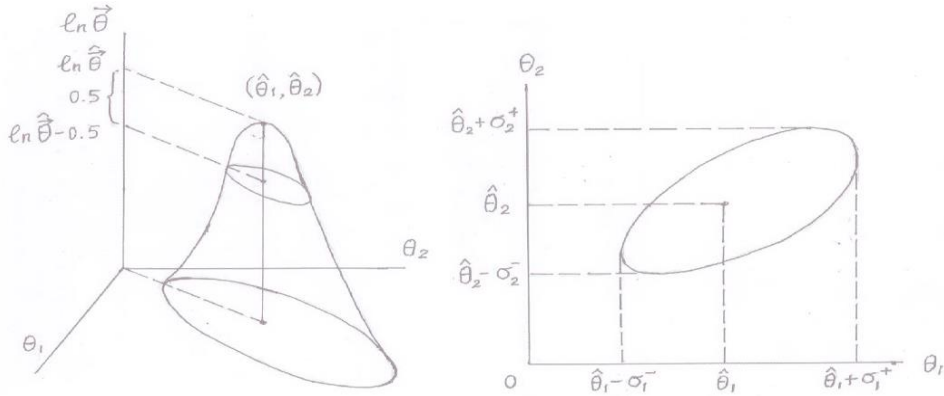


图 2 $\hat{\theta}_j$ 的一倍标准误差区间的确定

2.2 统计误差确定的 ML 方法实例（分支比测量）

- $\psi' \rightarrow \eta J / \psi$ 分支比测量。衰变末态是 $\gamma\gamma e^+e^-$ 和 $\gamma\gamma\mu^+\mu^-$ 。
- 经过事例判选（包括要求轻子对不变质量约束到 J/ψ 粒子的质量），信号区间内候选信号事例的特征量—两光子不变质量 $M_{\gamma\gamma}$ 的谱分布如图所示。

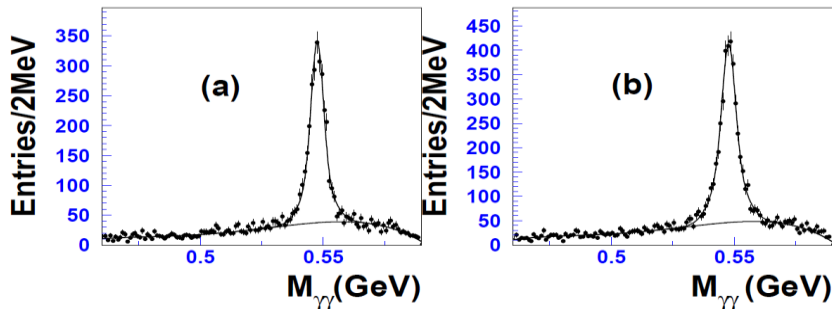


图 3 $\psi' \rightarrow \eta J / \psi$ 候选事例 $M_{\gamma\gamma}$ 的分布。(a) $\gamma\gamma e^+e^-$ 末态 (b) $\gamma\gamma\mu^+\mu^-$ 末态。

- 过程 $\psi' \rightarrow X$ 的分支比: (估计量)

$$\hat{B}(\psi' \rightarrow X) = \frac{N_s[\psi' \rightarrow X \rightarrow Y]}{N_{\psi'} \cdot BR(X \rightarrow Y) \cdot \varepsilon[\psi' \rightarrow X \rightarrow Y]}, \quad (2.8)$$

N_s --- 信号事例数, $N_{\psi'}$ --- ψ' 粒子总数, ε --- 信号探测效率,

X --- 信号 $\eta J / \psi$, Y --- 末态 $\gamma\gamma e^+e^-$ 和 $\gamma\gamma\mu^+\mu^-$,

$BR(X \rightarrow Y)$ --- $\eta J / \psi \rightarrow \gamma\gamma e^+e^-, \gamma\gamma\mu^+\mu^-$ 衰变分支比

简化为

$$\hat{B} = \frac{N_s}{N_R \cdot BR \cdot \varepsilon_s} \equiv \frac{N_s}{A}. \quad (2.9)$$

- B 的统计误差由随机变量 N_s 的分布性质决定。
- 特征量 ($m_{\gamma\gamma}$) 分布的测量谱与理论谱的最优拟合求得参数 (分支比) 及其统计误差。
应当选择信号分布与本底分布有明显差异的特征量, 实验者对特征量的分布应当有充分的知识。
- 拟合过程中 N_R, BR, ε_s 处理为已知常量。

》 常规 ML 法 (散点图数据)

- 信号区间内实验散点图的事例数为 N , 这 N 个事例出现在特征变量值 m_1, \dots, m_N 处。
- 信号区间内 $m_{\gamma\gamma} \equiv m$ 的概率密度

$$f(m|\theta) = w_s f_s(m|\theta_s) + (1-w_s) f_b(m|\theta_b). \quad (2.10)$$

θ_s 和 θ_b 分别是描述信号区间内信号和本底的概率密度 f_s 和 f_b (形式已知) 的参数。

w_s 为信号事例数 N_s 占全部事例的比例, 即

$$w_s = N_s/N. \quad (2.11)$$

这里 N 视为已知常数, $B = N_s/A$ 的误差与 N_s 的误差 (即 w_s 的误差) 直接相关。

代入(2.10)式得

$$f(m|\theta) = \frac{A}{N} B \cdot f_s(m|\theta_s) + \left(1 - \frac{A}{N} B\right) f_b(m|\theta_b). \quad (2.12)$$

- N 个事例的似然函数为:

$$\begin{aligned} L(m_1, \dots, m_N | \theta) &= \prod_{i=1}^N f(m_i | \theta) \\ &= \prod_{i=1}^N \left[\frac{A}{N} B \cdot f_s(m_i | \theta_s) + \left(1 - \frac{A}{N} B\right) f_b(m_i | \theta_b) \right]. \\ \ln L(\theta) &= \sum_{i=1}^N \ln \left[\frac{A}{N} B \cdot f_s(m_i | \theta_s) + \left(1 - \frac{A}{N} B\right) f_b(m_i | \theta_b) \right]. \end{aligned} \quad (2.13)$$

- 似然函数中待拟合的未知参数 θ 包括 θ_s, θ_b 和 B 。 (θ_s, θ_b 也可能是已知值)
 $\ln L$ 求极大可求得 θ 的估计值 $\hat{\theta}$ (包括分支比估计 \hat{B}) 及其统计误差。

》 广义 ML 法 (散点图数据)

- 广义极大似然法中, 总事例数 N 应考虑为泊松变量, λ 是 N 的期望值。 w_s 为:

$$w_s = N_s/\lambda. \quad (2.14)$$

概率密度为

$$f(m|\theta) = \frac{A}{\lambda} B \cdot f_s(m|\theta_s) + \left(1 - \frac{A}{\lambda} B\right) f_b(m|\theta_b). \quad (2.15)$$

- 散点图数据的广义似然函数为

$$L(m_1, \dots, m_N | \theta) = e^{-\lambda} \frac{\lambda^N}{N!} \prod_{i=1}^N f(m_i | \theta),$$

略去不依赖于 θ 的项，可得

$$L(\theta) = e^{-\lambda} \prod_{i=1}^N [AB \cdot f_s(m_i | \theta_s) + (\lambda - AB) f_b(m_i | \theta_b)].$$

$$\ln L(\theta) = -\lambda + \sum_{i=1}^N \ln [AB \cdot f_s(m_i | \theta_s) + (\lambda - AB) f_b(m_i | \theta_b)]. \quad (2.16)$$

- 似然函数中的未知参数 θ 包括 $\theta_s, \theta_b, \lambda$ 和 B 。（ θ_s, θ_b 也可能是已知值）
- 常规 ML 中， $N = N_s + N_b$ ， N 视为观测值（常数），此约束不合理。
- 广义 ML 中， $\lambda = N_s + N_b$ ， λ 为泊松变量 N 期望值（待拟合参数）。

考虑 N 为泊松变量具有物理上的合理性，结果比常规 ML 更为合理。增加了待拟合参数，预期 B 值及其误差会发生变化。

3. 系统误差的归类 and 确定

》 参数的系统误差是除统计误差外的所有误差

需要将可能导致结果产生误差的一切因素考虑在内。

》 分支比测量中，估计量 $\hat{B} = \frac{N_s}{N_R \cdot BR \cdot \varepsilon_s}$ 。

N_R, BR, ε_s 在特征量 ($m_{\gamma\gamma}$) 分布的测量谱与理论谱的拟合中，被视为“已知量”而没有考虑其误差，事实上它们的确定过程可能相当复杂，它们的测定结果包含误差（其中包括随机性误差），这些误差是分支比 B 的系统误差来源的一部分。

》 分支比测量的系统误差可以归纳为以下几类：

- 信号事例探测效率的误差 (ε_s)
- 本底事例期望值的误差 ($N_s = N - N_b$)
- 外部输入参数的误差 (N_R, BR)
- 分析流程的输入/输出误差

3.1 信号事例探测效率的误差

》 实验测定的对象是一定物理（随机）过程（信号事例）的某个参数，

》 须通过某种事例分析流程将信号事例的一部分从实验产生的全部事例中挑选出来。

》 事例分析流程选出的信号事例数占全部信号事例数的比例称为信号探测效率 ε_s 。

》 ε_s 的误差直接或间接影响到待测参数的精度，构成系统误差的一个重要组成部分。

》 信号探测效率 ε_s 可表示为

$$\varepsilon_s = \varepsilon_{trg} \cdot \varepsilon_{rec} \cdot \varepsilon_{sel}. \quad (3.1)$$

》 信号触发效率 ε_{trg} （触发、在线系统），

信号重建效率 ε_{rec} （重建软件），

信号判选效率 ε_{sel} （信号事例判选程序） 三者相互独立：

$$\frac{\sigma(\varepsilon_s)^2}{\varepsilon_s^2} = \frac{\sigma(\varepsilon_{trg})^2}{\varepsilon_{trg}^2} + \frac{\sigma(\varepsilon_{rec})^2}{\varepsilon_{rec}^2} + \frac{\sigma(\varepsilon_{sel})^2}{\varepsilon_{sel}^2}. \quad (3.2)$$

» $\varepsilon_{trg}, \varepsilon_{rec}, \varepsilon_{sel}$ 及其误差可以利用信号事例的 MC 模拟数据确定。

- 例如，信号事例产生子产生的信号事例数在事例判选前后为 N_g 和 N_s ，

$$\text{则} \quad \varepsilon_{sel} = N_s / N_g.$$

- 误差 $\sigma(\varepsilon_{sel})$ ：

- * N_g 是有限数导致的误差为：

$$\sigma_{st}(\varepsilon_{sel}) \approx \sqrt{\frac{\varepsilon_{sel}(1-\varepsilon_{sel})}{N_g}}. \quad (3.3)$$

- * 特征变量分布的理论模型与真实的物理过程存在偏差，当利用各种 cuts 判选信号事例时，导致 ε_{sel} 的另一项误差 $\sigma_{cuts}(\varepsilon_{sel})$ 。

- * $\sigma_{cuts}(\varepsilon_{sel})$ 与 $\sigma_{st}(\varepsilon_{sel})$ 不相关联，

$$\sigma^2(\varepsilon_{sel}) = \sigma_{st}^2(\varepsilon_{sel}) + \sigma_{cuts}^2(\varepsilon_{sel}). \quad (3.4)$$

3.2 本底事例期望值的误差

» 本底事例期望值 N_b 是根据某种模型估计的，存在不确定性

» 注意到 $N_s = N - N_b$ ， N_b 的不确定性导致 N_s 的附加不确定性，

构成参数（分支比）系统误差的又一来源。

» 确定本底分布的常用方法

- 利用单举（inclusive）MC 模拟数据，即实验产生的信号事例之外的一切事例的 MC 模拟数据。

这种模拟可利用不同的理论模型，或同一模型的不同参数的产生子。

求得的 N_b 间的差别可作为 N_b 的系统误差。

- 边带区（side band）本底扣除法。

假定信号峰下的本底与峰两侧的边带区的本底服从同一形式的函数分布。

这种函数分布的选择是经验性的，具有不确定性。

- 本底分布的确定与信号效率的确定是不相关联的，因而 N_b 的误差 $\sigma(N_b)$ 与 ε_s 误差 $\sigma(\varepsilon_s)$ 不相关联。

3.3 外部输入参数的误差

» 为了获得待测参数，还需要利用本项测量之外的若干外部参数。

$N_{\psi'}$ 和 $BR(X \rightarrow Y)$ 是外部输入参数，

$BR(X \rightarrow Y)$ 查 PDG， $N_{\psi'}$ 需要专门的研究加以确定。

» 外部输入参数的误差构成待测参数（分支比）系统误差的来源。

» 外部输入参数的误差独立于 $\sigma(\varepsilon_s)$ 和 $\sigma(N_b)$ 。

3.4 分析流程的输入/输出误差

» 实验数据经过事例分析流程后求得的参数值 B 与其真值可能存在系统性的偏离。

这种偏离用输入/输出检验来确定。

》待测参数 B 的输入/输出误差的确定

- 让比例与真实数据相一致的（信号+本底）MC 模拟样本集（事例数与真实数据相一致）通过探测器模拟和事例分析流程，求得待测参数输出值 B_{out} ，

模拟样本的产生子中待测参数真值（输入值） B_{in} 为已知，

$$\sigma_{in/out} \text{ 定义为 } \sigma_{in/out} = B_{out} - B_{in}. \quad (3.5)$$

- 产生大量（~20-100 组）这样的类数据 MC 模拟样本集，求得各自相应的 $\sigma_{in/out}^i$
- $\sigma_{in/out}^i$ 分布的期望值 $\bar{\sigma}_{in/out}$ 为参数 B 的输入/输出误差； $\sigma_{in/out}^i$ 分布的标准差令为 $\delta_{in/out}$
- 输入/输出误差可以进行修正：

$$B_{cor} = B_{out} - \bar{\sigma}_{in/out}. \quad (3.6)$$

此时 $\delta_{in/out}$ 可令为 B_{cor} 的误差。

- 在确定 $\bar{\sigma}_{in/out}$ 的过程中， ε_s, n_b^{obs} 和外部输入参数利用同一组固定常数，因此， $\bar{\sigma}_{in/out}$ 、 $\sigma(\varepsilon_s)$ 和 $\sigma(n_b^{obs})$ 、外部输入参数的误差导致的待测参数系统误差相互之间是弱关联或相互独立的。

4. 系统误差的合并

各类系统误差必须合并为总的系统误差。

令待测参数 θ 是 n 个直接测定值 $\mathbf{x} = (x_1, x_2, \dots, x_n)^T$ 的函数

4.1 各直接测定值 x_i 相互不关联

》 θ 的方差可表示为

$$\sigma^2(\theta) \approx \sum_{i=1}^n \left(\frac{\partial \theta}{\partial x_i} \right)_{x=\mu}^2 \cdot \sigma_i^2. \quad (4.1)$$

μ 为 \mathbf{x} 的期望值，它是未知的，实际计算时可用 \mathbf{x} 的一组实验测量值作为近似。

》分支比测量中， $\delta_{in/out}$ 、 $\sigma(\varepsilon_s)$ 和 $\sigma(N_b)$ 、外部输入参数的误差导致的待测参数系统误差的合并属于这种情形：

$$\frac{\sigma_{B,sys}^2}{B^2} = \frac{\sigma_{N_{\psi'}}^2}{N_{\psi'}^2} + \frac{\sigma_{BR(X \rightarrow Y)}^2}{BR^2(X \rightarrow Y)} + \frac{\sigma_{\varepsilon}^2}{\varepsilon^2} + \frac{\sigma_{N_b}^2}{(N_b)^2} + \frac{\delta_{in/out}^2}{B_{cor}^2}. \quad (4.2)$$

4.2 各直接测定值 x_i 相互关联

》 θ 的方差表示为

$$\sigma^2(\theta) \approx \sum_{i=1}^n \left(\frac{\partial \theta}{\partial x_i} \right)_{x=\mu}^2 \cdot \sigma_i^2 + 2 \sum_{i < j, j=2}^n \left(\frac{\partial \theta}{\partial x_i} \cdot \frac{\partial \theta}{\partial x_j} \right)_{x=\mu} \cdot \rho_{ij} \sigma_i \sigma_j, \quad (4.3)$$

σ_i 为 x_i 的误差， ρ_{ij} 为 x_i, x_j 间的关联系数。

》相互关联的各特征变量 x_i 的截断导致的 ε_{sel} 的误差合并为 $\sigma_{cuts}(\varepsilon_{sel})$ 用公式(4.3)估计。

》MC 模拟信号事例集 → 经过事例判选 → 获得模拟信号观测事例集

》 x_i 与 x_j 的关联系数 ρ_{ij} 利用模拟信号观测事例集的样本关联系数 R_{ij} 估计

$$R_{ij} = \frac{\sum_{k=1}^K x_{ik} x_{jk} - K \bar{x}_i \bar{x}_j}{\left(\sum_{k=1}^K x_{ik}^2 - K \bar{x}_i^2 \right)^{1/2} \left(\sum_{k=1}^K x_{jk}^2 - K \bar{x}_j^2 \right)^{1/2}}, \quad (4.4)$$

K 是模拟信号观测事例集事例数,
 x_{ik} 是第 k 个事例的特征变量 x_i 值,
 \bar{x}_i 是 x_i 的样本平均:

$$\bar{x}_i = \frac{1}{K} \sum_{k=1}^K x_{ik} \quad (4.5)$$

》偏导数 $\partial\theta/\partial x_i$ 的确定。

- 若待测参数 θ 与特征变量 \mathbf{x} 的函数关系已知, 立即可以求得偏导数 $\partial\theta/\partial x_i$ 。
- 实际情形中 θ 与 \mathbf{x} 的函数关系未知, 利用数值差分作为偏导数的近似。
- 利用特征变量截断法判选信号, $\partial\theta/\partial x_i$ 同样用**模拟信号观测事例集**来估计
- 单侧截断值 \mathbf{x}^{cut} 情形, 定义

$$\begin{aligned} \mathbf{x}_i^{cut+} &= \{x_1^{cut}, \dots, x_{i-1}^{cut}, x_i^{cut+}, x_{i+1}^{cut}, \dots, x_n^{cut}\}, \\ \mathbf{x}_i^{cut-} &= \{x_1^{cut}, \dots, x_{i-1}^{cut}, x_i^{cut-}, x_{i+1}^{cut}, \dots, x_n^{cut}\}, \\ x_i^{cut+} &= x_i^{cut} + \Delta x_i, x_i^{cut-} = x_i^{cut} - \Delta x_i, \end{aligned} \quad \begin{matrix} i = 1, 2, \dots, n. \\ \\ \Delta x_i \text{ 为一小量 (} x_i \text{ 的测量误差 } \sigma_i \text{)} . \end{matrix} \quad (4.6)$$

$$\left(\frac{\partial\theta}{\partial x_i} \right)_{\mathbf{x}=\mathbf{x}^{cut}} \cong \frac{\theta(\mathbf{x}_i^{cut+}) - \theta(\mathbf{x}_i^{cut-})}{2\Delta x_i}, \quad i = 1, 2, \dots, n. \quad (4.7)$$

- 双侧截断值 $\mathbf{x}^{cut} = [\mathbf{x}^{cut-l}, \mathbf{x}^{cut-u}]$, 定义

$$\begin{aligned} \mathbf{x}_i^{cut-l+} &= \{[x_1^{cut-l}, x_1^{cut-u}], \dots, [x_{i-1}^{cut-l}, x_{i-1}^{cut-u}], [x_i^{cut-l+}, x_i^{cut-u}], [x_{i+1}^{cut-l}, x_{i+1}^{cut-u}], \dots, [x_n^{cut-l}, x_n^{cut-u}]\}, \\ \mathbf{x}_i^{cut-l-} &= \{[x_1^{cut-l}, x_1^{cut-u}], \dots, [x_{i-1}^{cut-l}, x_{i-1}^{cut-u}], [x_i^{cut-l-}, x_i^{cut-u}], [x_{i+1}^{cut-l}, x_{i+1}^{cut-u}], \dots, [x_n^{cut-l}, x_n^{cut-u}]\}, \\ & \quad i = 1, 2, \dots, n. \\ x_i^{cut-l+} &= x_i^{cut-l} + \Delta x_i, x_i^{cut-l-} = x_i^{cut-l} - \Delta x_i. \end{aligned} \quad (4.8)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{x}_i^{cut-u+} &= \{[x_1^{cut-l}, x_1^{cut-u}], \dots, [x_{i-1}^{cut-l}, x_{i-1}^{cut-u}], [x_i^{cut-l}, x_i^{cut-u+}], [x_{i+1}^{cut-l}, x_{i+1}^{cut-u}], \dots, [x_n^{cut-l}, x_n^{cut-u}]\}, \\ \mathbf{x}_i^{cut-u-} &= \{[x_1^{cut-l}, x_1^{cut-u}], \dots, [x_{i-1}^{cut-l}, x_{i-1}^{cut-u}], [x_i^{cut-l}, x_i^{cut-u-}], [x_{i+1}^{cut-l}, x_{i+1}^{cut-u}], \dots, [x_n^{cut-l}, x_n^{cut-u}]\}, \\ & \quad i = 1, 2, \dots, n. \end{aligned} \quad (4.9)$$

$$\begin{aligned} x_i^{cut-u+} &= x_i^{cut-u} + \Delta x_i, x_i^{cut-u-} = x_i^{cut-u} - \Delta x_i. \\ \left(\frac{\partial\theta}{\partial x_i} \right)_{\mathbf{x}=\mathbf{x}^{cut}} &\cong \frac{\theta(\mathbf{x}_i^{cut-u+}) - \theta(\mathbf{x}_i^{cut-u-})}{2\Delta x_i} - \frac{\theta(\mathbf{x}_i^{cut-l+}) - \theta(\mathbf{x}_i^{cut-l-})}{2\Delta x_i}, \quad i = 1, 2, \dots, n. \end{aligned} \quad (4.10)$$

5. 统计误差和系统误差的合并处理

》贝叶斯统计提供了同时处理统计误差和系统误差的方法。

- 参数 θ 的**系统误差**效应利用**冗余参数** ν 的 pdf (先验密度) $\pi(\nu)$ 来描述,
- 似然函数同时依赖于参数 θ 和 ν , 用 $L(\mathbf{x}|\theta, \nu)$ 表示。

- 通常正态分布 $G(\theta, \sigma_v^2)$ 是 $\pi(v)$ 的合理模型， σ_v 取 $v = \theta$ 时的系统误差值 $\sigma_{\theta, \text{sys}}$ 。
- 于是 $L(\mathbf{x} | \theta, v)$ 可表示为

$$L(\mathbf{x} | \theta, v) = L(\mathbf{x} | v) \cdot \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_{\theta, \text{sys}}} \exp\left(-\frac{(v - \theta)^2}{2\sigma_{\theta, \text{sys}}^2}\right). \quad (5.1)$$

同时考虑统计误差和系统误差的似然函数为

$$\tilde{L}(\mathbf{x} | \theta) = \int L(\mathbf{x} | v) \cdot \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_{\theta, \text{sys}}} \exp\left(-\frac{(v - \theta)^2}{2\sigma_{\theta, \text{sys}}^2}\right) dv. \quad (5.2)$$

后验密度 $h(\theta | \mathbf{x})$ 为

$$h(\theta | \mathbf{x}) = \frac{\tilde{L}(\mathbf{x} | \theta)}{\int \tilde{L}(\mathbf{x} | \theta) d\theta}. \quad (5.3)$$

- 给定信度水平 $\text{CL} = \gamma$ ，贝叶斯统计下的最优区间称为最大后验密度 (HPD — Highest posterior Density) 区间：

$$P(\theta \in \Theta | \mathbf{x}) = \int_{\Theta} h(\theta | \mathbf{x}) d\theta = \gamma, \quad (5.4)$$

且对任意 $\theta_{in} \in \Theta, \theta_{out} \notin \Theta$ ，总有

$$h(\theta_{in} | \mathbf{x}) \geq h(\theta_{out} | \mathbf{x}). \quad (5.5)$$

- 参数 θ 的信度水平 γ 的上限 θ_{up} 则为：

$$P(\theta \leq \theta_{up} | \mathbf{x}) = \int_{\theta \leq \theta_{up}} h(\theta | \mathbf{x}) d\theta = \gamma. \quad (5.6)$$

- 这样求得的 θ 的 68.3% 信度区间或 $\text{CL} = 90\%$ 的上限同时包含了统计误差和系统误差的贡献。

》根据以下策略来确定给出 θ 的 68.3% 信度区间还是 $\text{CL} = 90\%$ 的上限。

- 若满足式(5.4)的 $\gamma = 90\%$ 的 HPD 区间 $\theta_{0.9}$ 存在：

$$\theta_{0.9} \in [\tilde{\theta}_l, \tilde{\theta}_u], \quad \tilde{\theta}_l < \tilde{\theta}_u, \quad h(\tilde{\theta}_l | \mathbf{x}) = h(\tilde{\theta}_u | \mathbf{x}), \quad (5.7)$$

则实验结果报道估计值 θ 的 68.3% 信度区间 $\theta_{0.683}$ ：

$$\theta_{0.683} \in [\theta_l, \theta_u], \quad \theta_l < \theta_u, \quad h(\theta_l | \mathbf{x}) = h(\theta_u | \mathbf{x}), \quad (5.8)$$

且有

$$\theta = \hat{\theta}_{-\sigma_-}^{+\sigma_+}, \quad \sigma_+ = \theta_u - \hat{\theta}, \quad \sigma_- = \hat{\theta} - \theta_l, \quad (5.9)$$

其中 $\hat{\theta}$ 是参数 θ 的极大似然估计。

- 若满足式(5.4)的 $\theta_{0.9}$ 不存在，则根据式(5.6)给出 $\text{CL} = 90\%$ 的上限。

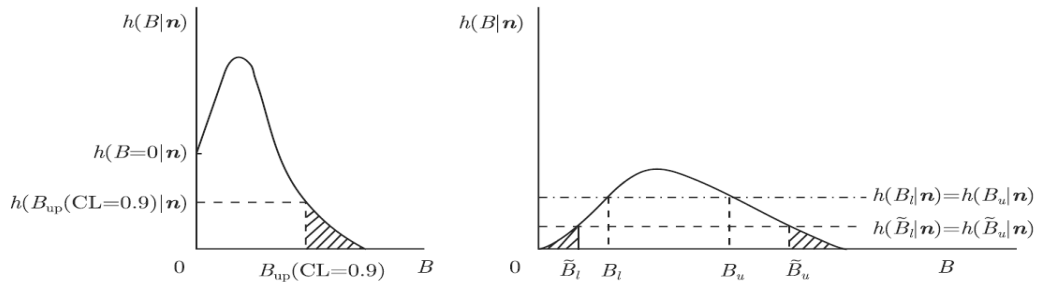


图4 确定参数 B 的 68.3% 信度区间或 $\text{CL} = 90\%$ 上限的 flip-flopping 策略

6. 结语

- 待测物理量对应于随机变量 x 的分布参数 θ (或 $\boldsymbol{\theta}$)，不能直接测定；
需应用数据 (随机子样) 样本 \mathbf{x} 构建估计量 (随机变量) $\hat{\theta}(\mathbf{x})$ 或 $\hat{\boldsymbol{\theta}}(\mathbf{x})$ 进行估计。
- 统计误差 -- 来源于估计量 $\hat{\theta}(\mathbf{x})$ 的随机分布性质，
统计误差反映观测值 $\hat{\theta}$ 对于其期望值的涨落。
当估计量 $\hat{\theta}(\mathbf{x})$ 是无偏的，点估计 $\hat{\theta}$ 的期望值是 θ 的真值。
统计误差一定是随机误差，大小与 \mathbf{x} 子样容量直接相关。
结果为 $\hat{\theta}_{-\sigma_{st-}}^{+\sigma_{st+}} \cdot [\hat{\theta} - \sigma_{st-}, \hat{\theta} + \sigma_{st+}]$ 包含 θ 真值的概率 0.683 (标准误差)。
当 $\hat{\theta}(\mathbf{x}) \sim N(\theta, \sigma_{\hat{\theta}})$ 时， $\hat{\theta}(\mathbf{x})$ 的标准误差等于标准离差。
- 利用极大似然法进行测量数据和理论模型的拟合，以此估计 θ 及其统计误差。
- 系统误差 -- 统计误差之外的测量误差 (非随机性 and/or 随机性误差)。
反映测量系统对于被测物理量的系统不确定性。
若估计量 $\hat{\theta}(\mathbf{x}, \mathbf{c})$ 中包含其他有误差的“已知量” \mathbf{c} ，其误差构成 $\hat{\theta}$ 的系统误差来源。
- 统计误差与系统误差一般相互独立。
- 应用贝叶斯方法合并统计误差与系统误差，得到参数的总误差。

(谢谢!)