

Změny efektu a fluktuace při doměřování

Tomáš Opatrný

5. ledna 2020

1 Úvod

J. Navařík ve svém textu „Kujme pikle . . .“ [1] argumentuje, že při pokračujícím měření v Moessbauerovském experimentu dochází ke změnám pozorovaného efektu. Dle jeho slov „*s přibývajícím statistikou umíme přesněji určit pozici čáry pozadí a celkový obraz spektra se "zostřuje" (od určité chvíle se efekt mění už jen málo)*“. V podstatě tedy jde o změny dané běžnými fluktuacemi načítaných dat. Podle této teze by tedy odlišná hodnota efektu v obrázcích dodaných prvním autorem a korespondenčním autorem článku v Nature Communications [2] (viz rozbor [3]) měla být vysvětlitelná přirozenými fluktuacemi dat, která jsou ze své podstaty náhodná. Podobná argumentace se objevuje i v textu korespondenčního autora zaslaném členům vědecké rady PřF [4]. Následující výpočty ukazují, jak velkým změnám tímto způsobem může dojít.

2 Parametry měření a odhad efektu

Uvažujme data z moessbauerovského experimentu ve tvaru

$$h_k = B - Ag_k + f_k \quad \text{pro } k = 1, \dots, N. \quad (1)$$

Zde k označuje index kanálu (v typickém moessbauerovském experimentu je $N = 512$), h_k je naměřený počet countů v kanálu k , B je pozadí (střední počet countů s prázdným přístrojem bez vzorku), g_k je fitovací funkce s hodnotami z intervalu mezi 0 a 1, A je amplituda signálu a f_k je šum. Předpokládejme, že B a g_k jsou známé, přičemž úkolem je najít hodnotu A z naměřených dat h_k . O šumu je známo, že jde o odchylku nekorelovaného poissonovského šumu od své střední hodnoty. Variance šumu je pak rovna pozadí, tedy

$$\langle f_k \rangle = 0, \quad (2)$$

$$\langle f_j f_k \rangle = \delta_{jk} B, \quad (3)$$

kde δ_{jk} je Kroneckerovo delta (přesnější by bylo psát $\langle f_j f_k \rangle = \delta_{jk}(B - Ag_k)$, ale protože $A \ll B$, jde o zcela dostačující aproximaci). Poměr $E = A/B$ nazýváme „efekt“. V experimentech souvisejících se článkem [2] byla hodnota efektu singletu kolem 0.2 %.

Z naměřených dat lze odhadnout hodnotu A metodou nejmenších čtverců: nechť $\mathcal{A}$ je odhadovaná hodnota A , pak součet čtverců odchylek dat od fitu je

$$S = \sum_{k=1}^N (h_k - B + \mathcal{A}g_k)^2. \quad (4)$$

Součet S nabývá nejmenší hodnoty pokud

$$\frac{\partial S}{\partial \mathcal{A}} = 2 \sum_{k=1}^N (h_k - B + \mathcal{A}g_k)g_k = 0, \quad (5)$$

tedy pro

$$\mathcal{A} = \frac{\sum_{k=1}^N (B - h_k) g_k}{\sum_{k=1}^N g_k^2}. \quad (6)$$

Protože data fluktuují, fluktuuje i tento odhad. Velikost fluktuací lze zjistit dosazením h_k z (1) do (6), tedy

$$\mathcal{A} = A - \frac{\sum_{k=1}^N f_k g_k}{\sum_{k=1}^N g_k^2}. \quad (7)$$

S využitím vztahů (2) a (3) dostaneme

$$\langle \mathcal{A} \rangle = A, \quad (8)$$

$$\Delta \mathcal{A}^2 = \langle \mathcal{A}^2 \rangle - \langle \mathcal{A} \rangle^2 = \frac{B}{\sum_{k=1}^N g_k^2}. \quad (9)$$

Směrodatná odchylka odhadu amplitudy je tedy

$$\Delta \mathcal{A} = \sqrt{\Delta \mathcal{A}^2} = \frac{\sqrt{B}}{\sqrt{\sum_{k=1}^N g_k^2}}. \quad (10)$$

Podělením získaných hodnot velikostí pozadí dostaneme střední hodnotu a směrodatnou odchylku pro odhad efektu, tedy pro $\mathcal{E} \equiv \mathcal{A}/B$

$$\mathcal{E} = \frac{\sum_{k=1}^N (B - h_k) g_k}{B \sum_{k=1}^N g_k^2}, \quad (11)$$

$$\langle \mathcal{E} \rangle = E, \quad (12)$$

$$\Delta \mathcal{E} = \frac{1}{\sqrt{B \sum_{k=1}^N g_k^2}}. \quad (13)$$

3 Změna odhadu způsobená dodatečným měřením

Předpokládejme nyní, že k naměřeným datům byly doměřené nové hodnoty, a zjistíme, jak se tím změní odhad efektu. Nová data budou nyní

$$h'_k = B' - A' g_k + f'_k, \quad (14)$$

kde

$$B' = B + \tilde{B}, \quad (15)$$

$$A' = E B', \quad (16)$$

$$f'_k = f_k + \tilde{f}_k. \quad (17)$$

Zde $\tilde{B}$ je střední počet nově doměřených countů a $\tilde{f}_k$ je dodatečný šum odpovídající těmto countům splňující podmínky

$$\langle \tilde{f}_k \rangle = 0, \quad (18)$$

$$\langle \tilde{f}_k \tilde{f}_j \rangle = 0, \quad (19)$$

$$\langle \tilde{f}_j \tilde{f}_k \rangle = \delta_{jk} \tilde{B}. \quad (20)$$

Vztah (16) vyjadřuje, že vzorek nemění své vlastnosti. Pro nový odhad efektu $\mathcal{E}' = \mathcal{A}'/B'$ platí podobné vztahy jako pro původní odhad (podobně jako v předchozím případě, B' a g_k jsou známé veličiny)

$$\mathcal{E}' = \frac{\sum_{k=1}^N (B' - h'_k) g_k}{B' \sum_{k=1}^N g_k^2}, \quad (21)$$

$$\langle \mathcal{E}' \rangle = E, \quad (22)$$

$$\Delta \mathcal{E}' = \frac{1}{\sqrt{B' \sum_{k=1}^N g_k^2}}. \quad (23)$$

Zjistíme nyní varianci rozdílu nového a starého odhadu efektu $\langle (\mathcal{E}' - \mathcal{E})^2 \rangle$. Rozdíl odhadů je

$$\begin{aligned} \mathcal{E}' - \mathcal{E} &= \frac{1}{\sum_{k=1}^N g_k^2} \sum_{k=1}^N \left(\frac{B' - h'_k}{B'} - \frac{B - h_k}{B} \right) g_k \\ &= \frac{1}{\sum_{k=1}^N g_k^2} \sum_{k=1}^N \left(\frac{f_k}{B} - \frac{f'_k}{B'} \right) g_k. \end{aligned} \quad (24)$$

S využitím vztahů (2), (3), (18) a (20) dostaneme

$$\begin{aligned} \langle \mathcal{E}' - \mathcal{E} \rangle &= 0, \\ \langle (\mathcal{E}' - \mathcal{E})^2 \rangle &= \frac{1}{\left(\sum_{k=1}^N g_k^2 \right)^2} \sum_{k=1}^N \sum_{j=1}^N \left\langle \left(\frac{f'_k}{B'} - \frac{f_k}{B} \right) \left(\frac{f'_j}{B'} - \frac{f_j}{B} \right) \right\rangle g_k g_j \\ &= \frac{1}{\left(\sum_{k=1}^N g_k^2 \right)^2} \sum_{k=1}^N \sum_{j=1}^N \left\langle \left(\frac{f_k + \tilde{f}_k}{B'} - \frac{f_k}{B} \right) \left(\frac{f_j + \tilde{f}_j}{B'} - \frac{f_j}{B} \right) \right\rangle g_k g_j \\ &= \frac{1}{\left(\sum_{k=1}^N g_k^2 \right)^2} \sum_{k=1}^N \left\langle \frac{f_k^2}{B'^2} - \frac{f_k^2}{B'B} + \frac{\tilde{f}_k^2}{B'^2} - \frac{f_k^2}{B'B} + \frac{f_k^2}{B^2} \right\rangle g_k^2 \\ &= \frac{1}{\left(\sum_{k=1}^N g_k^2 \right)^2} \left(\frac{B}{B'^2} - \frac{B}{B'B} + \frac{\tilde{B}}{B'^2} - \frac{B}{B'B} + \frac{B}{B^2} \right) \sum_{k=1}^N g_k^2 \\ &= \frac{1}{\sum_{k=1}^N g_k^2} \frac{\tilde{B}}{B(B + \tilde{B})}, \end{aligned} \quad (26)$$

kde jsme v posledním řádku využili vztah (15).

Směrodatná odchylka změny odhadovaného efektu při doměření je odmocnina této hodnoty, tedy

$$\delta \mathcal{E} \equiv \sqrt{\langle (\mathcal{E}' - \mathcal{E})^2 \rangle} = \sqrt{\frac{\tilde{B}}{B(B + \tilde{B}) \sum_{k=1}^N g_k^2}}. \quad (27)$$

Pokud je relativní nárůst počtu countů malý (ve sledovaném případě jde o nárůst o cca 6 %), lze v poslední rovnici nahradit výraz $B + \tilde{B} \approx B$, takže pro směrodatnou odchylku změny efektu dostaneme přiblížení

$$\delta \mathcal{E} \approx \frac{\sqrt{\tilde{B}}}{B \sqrt{\sum_{k=1}^N g_k^2}}. \quad (28)$$

V této rovnici $\sqrt{\tilde{B}}/B$ odpovídá relativním fluktuacím „odskoků“ nových datových bodů od starých, jak se diskutuje v [3]. Faktor $\sqrt{\sum_{k=1}^N g_k^2}$ snižuje tuto hodnotu pro fluktuace fitovací křivky průměrováním přes větší množství relevantních datových bodů.

4 Srovnání s experimentálními hodnotami

4.1 Stanovení $\sum_{k=1}^N g_k^2$

Veličina $\sum_{k=1}^N g_k^2$ má analogickou roli jako velikost statistického souboru, ze kterého se počítá průměr odhadované veličiny. Může se počítat přímo z hodnot fitovací funkce, případně ji lze odhadnout z analytického vyjádření fitovacích funkcí. To lze například pro lorentzovskou fitovací funkci

$$g_k \equiv g(v_k) = \frac{1}{1 + \left(\frac{v_k}{\Delta v}\right)^2}, \quad (29)$$

kde Δv je pološířka lorentzovského píku. Jsou-li data sbírána v kanálech vzdálených od sebe o $\delta v \equiv v_{k+1} - v_k$, lze sumaci aproximovat integrálem:

$$\int g^2(v) dv \approx \sum_k g^2(v_k) \delta v. \quad (30)$$

Protože

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{dv}{\left[1 + \left(\frac{v}{\Delta v}\right)^2\right]^2} = \frac{\pi}{2} \Delta v, \quad (31)$$

lze sumu aproximovat vztahem

$$\sum_{k=1}^N g_k^2 \approx \frac{\pi \Delta v}{2 \delta v}. \quad (32)$$

V datech dodaných korespondenčním autorem je uváděna šířka singletu 0.5793 mm/s, což odpovídá $\Delta v \approx 0.29$ mm/s. Vzdálenost kanálů je $\delta v = 20/512$ mm/s ≈ 0.039 mm/s. Ve výsledku tak podle (32) pro toto měření dostáváme $\sum_{k=1}^N g_k^2 \approx 11.6$. Při odečítání datových bodů z grafu vychází $\sum_{k=1}^N g_k^2 \approx 12.2$, což je ve velmi dobré shodě s předchozím odhadem.

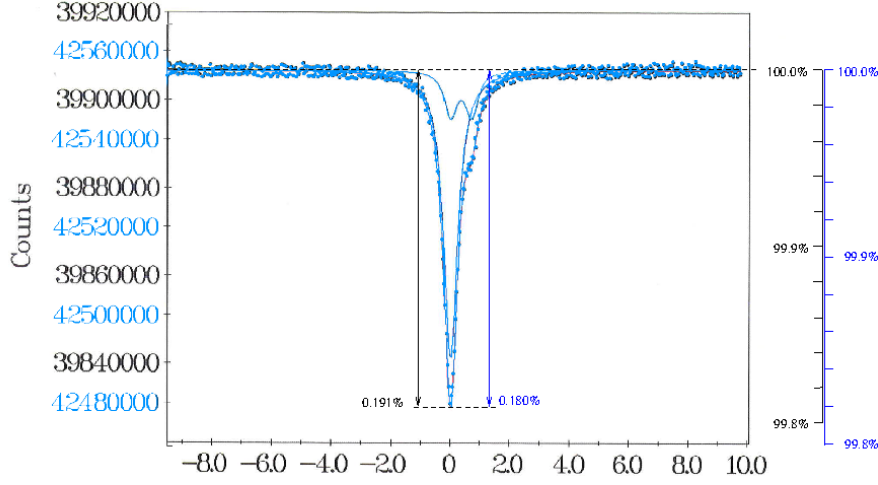
4.2 Směrodatná odchylka změny odhadovaného efektu v případě Nature Comm.

Obrázek dodaný prvním autorem článku [2] má hodnotu pozadí $B = 3.991 \times 10^7$, zatímco obrázek dodaný korespondenčním autorem má pozadí $B' = 4.256 \times 10^7$. Pokud by šlo o změnu způsobenou dodatečným měřením, odpovídalo by to dodatečné hodnotě $\tilde{B} = 2.65 \times 10^6$. Po dosazení do vztahu (28) dostaneme směrodatnou odchylku změny odhadovaného efektu $\delta \mathcal{E} \approx 1.2 \times 10^{-5}$. Nepřesnost stanovení efektu odměřováním z obrázku lze odhadnout na cca 1.0×10^{-5} (cca šířka datové tečky a přesnost odhadu vrcholu fitovací křivky) a je tedy zhruba stejná jako odhadovaná statistická fluktuace. Efekt plynoucí z obrázku dodaného prvním autorem je $\mathcal{E} = 1.91 \times 10^{-3}$, efekt plynoucí z obrázku dodaného korespondenčním autorem je $\mathcal{E}' = 1.80 \times 10^{-3}$, tedy o cca 6% menší (viz obr. 1). Rozdíl efektů je přitom $\mathcal{E} - \mathcal{E}' = 1.1 \times 10^{-4}$, což **odpovídá cca 9 směrodatným odchylkám** plynoucím ze statistických fluktuací. Hypotézu, že by změna efektu mohla být dána fluktuacemi dodatečných měření lze tedy spolehlivě odmítnout.

Proti této hypotéze můžeme postavit alternativu, že obrázek dodaný korespondenčním autorem vznikl pouhým posunutím datové množiny po vertikální ose. Tomu by odpovídala stejná hodnota amplitudy A , přičemž při původním efektu $E = A/B = 1.91 \times 10^{-3}$ by měl být nový efekt $E' = A/B' = EB/B' \approx 1.791 \times 10^{-3}$. Rozdíl oproti zjištěné hodnotě 1.80×10^{-3} je 9×10^{-6} , což je ve shodě s odhadovanou nepřesností odečítání z grafu.

4.3 Směrodatná odchylka změny odhadovaného efektu v měřeních dr. Navaříka

V textu [1] se diskutuje několik případů, kdy podle autora dochází ke změně efektu v průběhu doměřování dat. Dr. Navařík bohužel nebyl ochoten sdílet originální data, proto je následující rozbor založen pouze na odečítání hodnot z obrázků (viz obr. 2).



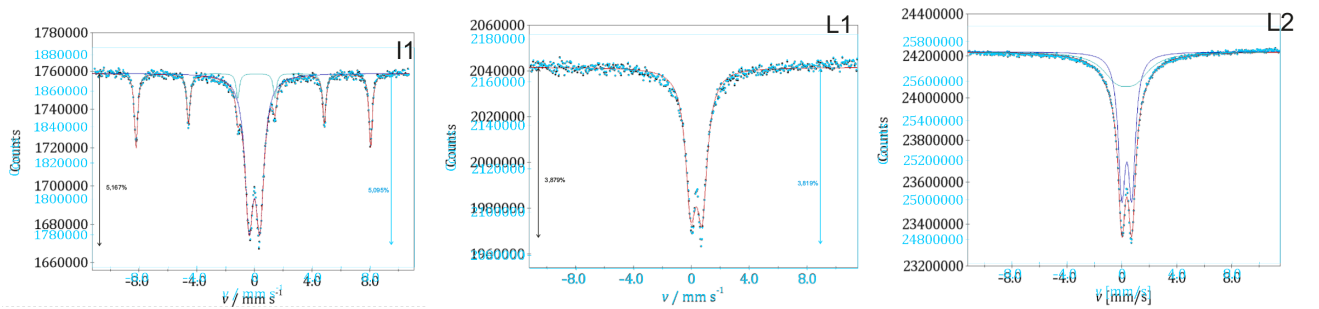
Obrázek 1: Srovnání efektů v obrázcích dodaných prvním autorem (černá) a korespondenčním autorem (modrá) článku [2] (viz [3]).

4.3.1 Obrázek I1

Odečtením dat z obrázku I1 z [1] vychází $\sum_{k=1}^N g_k^2 \approx 27$, původní pozadí je $B = 1.759 \times 10^6$, nové pozadí $B' = 1.869 \times 10^6$, změna je $\tilde{B} \approx 1.1 \times 10^5$, tedy směrodatná odchylka změny odhadovaného efektu počítaná podle (28) je $\delta\mathcal{E} \approx 3.6 \times 10^{-5}$. Nepřesnost stanovení efektu odměřováním z obrázku lze odhadnout na cca 2×10^{-4} a je tedy nad odhadovanou statistickou fluktuací. Nepřesnost je tu výrazně vyšší oproti předchozímu případu zejména kvůli odlišnému rozsahu obou grafů: zde se jedná o dvacetkrát větší efekt a tomu odpovídá použitý rozsah na svislé ose.

Odečtením hodnot fitovací křivky z grafu dostaneme původní efekt 4.821% a nový efekt 4.804%. Při navýšení pozadí o cca 6% tak zjišťujeme relativní změnu efektu o cca 0.4%. Rozdíl efektů činí 1.7×10^{-4} , což je v rámci nepřesnosti odečítání z grafu.

Je třeba zmínit, že v obrázku v [1] jsou vyznačeny jiné hodnoty efektu: 5.167% a 5.095%. To je dáno tím, že šipky vyznačující efekt směřují nikoliv k vrcholu fitovací křivky, ale k extrémnímu datovému bodu. Jednotlivé datové body však fluktuují se směrodatnou odchylkou cca pětikrát větší ($\sqrt{\sum_{k=1}^N g_k^2} \approx 5.2$) než vrchol fitovací křivky, takže jsou tyto údaje pro srovnání fluktuací efektu irelevantní.



Obrázek 2: Obrázky z měření J. Navaříka [1]. Obrázek L2 byl použit též v textu [4].

4.3.2 Obrázek L1

Pro obrázek L1 z [1] vychází $\sum_{k=1}^N g_k^2 \approx 28$, původní pozadí je $B = 2.0415 \times 10^6$, nové pozadí $B' = 2.1668 \times 10^6$, změna je $\tilde{B} \approx 1.25 \times 10^5$, tedy směrodatná odchylka změny odhadovaného efektu je $\delta\mathcal{E} \approx 3.3 \times 10^{-5}$. Nepřesnost stanovení efektu odměřováním z obrázku lze odhadnout na cca 2.6×10^{-4} a je tedy nad odhadovanou statistickou fluktuací. Původní efekt je 3.328%, nový efekt je 3.307%.

Při navýšení pozadí o cca 6% tak zjišťujeme relativní změnu efektu o cca 0.6%. Rozdíl efektů činí 2.03×10^{-4} , což je v rámci nepřesnosti odečítání z grafu.

Podobně jako v předchozím případě, v obrázku L1 z [1] vyznačené šipky s údaji 3.879% a 3.819% směřují k datovým bodům a nikoliv k vrcholu fitovací křivky a jsou tedy pro srovnání velikostí efektů irelevantní.

4.3.3 Obrázek L2

Pro obrázek L2 z [1] (též v [4]) vychází $\sum_{k=1}^N g_k^2 \approx 27$, původní pozadí je $B = 2.3337 \times 10^7$, nové pozadí $B' = 2.5746 \times 10^7$, změna je $\tilde{B} \approx 1.527 \times 10^6$, tedy směrodatná odchylka změny odhadovaného efektu je $\delta\mathcal{E} \approx 9.8 \times 10^{-6}$. Nepřesnost stanovení efektu odměřováním z obrázku lze odhadnout na cca 3.5×10^{-4} a je tedy nad odhadovanou statistickou fluktuací. Původní efekt je 3.6382%, nový efekt je 3.6336%. Při navýšení pozadí o cca 6% tak zjišťujeme relativní změnu efektu o cca 0.1%. Rozdíl efektů činí 4.6×10^{-5} , což je opět v rámci nepřesnosti odečítání z grafu.

5 Závěr

Změnu efektu v obrázcích dodaných prvním autorem a korespondenčním autorem článku [1] nelze vysvětlit ani nepřesností odečítání datových hodnot z obrázků ani statistickou fluktuací způsobenou dodatečným měřením. Rozdíl efektů je cca 9 směrodatných odchylek, které by odpovídaly dodatečným fluktuacím. Pokud bychom odlišnost jedné směrodatné odchylky přičetli odhadované nepřesnosti odečítání hodnot z grafu, zbývá 8 směrodatných odchylek, což umožňuje zamítnout hypotézu náhodné fluktuace při doměřování na hladině významnosti $\approx (1/2) \operatorname{erfc}(8/\sqrt{2}) \approx 6 \times 10^{-16}$ (testování při jednostranné alternativě). Snížení efektu o cca 6% je naproti tomu v dobré shodě s předpokladem prostého posunutí datové množiny o cca 6% vzhůru. Ve prospěch stejného závěru mluví i absence pozorovatelných „odskoků“ mezi jednotlivými datovými hodnotami z obou datasetů, jak se diskutuje v [3].

To je v kontrastu s měřeními J. Navaříka [1], kde při navýšení pozadí o cca 6% je zjištěná změna efektu menší než 1% a rozdíl je v rámci nepřesnosti odečítání hodnot z obrázku. Obrázky J. Navaříka též ukazují náhodné odskoky nových datových bodů od starých nahoru i dolů ve shodě s předpovědí v [3] (bohužel bez možnosti kvantifikovat jejich velikost). Přesnější srovnání by bylo možné, pokud by byla k dispozici originální experimentální data. Pro smysluplné srovnání by ale bylo vhodnější provést měření se vzorkem se srovnatelným efektem (tedy cca 0.2%) a zobrazovat výsledky v takovém měřítku, kde by byla statistická fluktuace efektu pozorovatelná.

Reference

- [1] J. Navařík, *Kujme pikle, pikle kujme, spekulujme, přefitujme...* UPre-flexe 9.12.2019 <https://www.zurnal.upol.cz/nc/reflexe/zprava-int/clanek/kujme-pikle-pikle-kujme-spekulujme-prefitujme/>
- [2] Tuček et al., *Air-stable superparamagnetic metal nanoparticles entrapped in graphene oxide matrix*. Nature Communications 7:12879—DOI: 10.1038/ncomms12879 (2016).
- [3] T. Opatrný, „Obrázky ze stejného datasetu?“ DŽurnál 26.11.2019 <http://www.dzurnal.cz/index.php/2019/11/26/obrazky-ze-stejneho-datasetu/>
- [4] R. Zbořil, *Komentáře ke zpochybnění výsledků v práci Tuček et al. Nature Comm. 2016*. Dokument rozeslaný členům vědecké rady PřF UP 10. 12. 2019, opravená verze 16. 12. 2019.