

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ
В ЯДЕРНЫХ ТЕХНОЛОГИЯХ

УДК 51.73

ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДОВ ОБРАТНОЙ
СВЕРТКИ ДЛЯ ВОССТАНОВЛЕНИЯ
ЭНЕРГЕТИЧЕСКОГО СПЕКТРА КОСМИЧЕСКИХ ЛУЧЕЙ

© 2020 г. Ю. В. Богомолов^а, О. А. Леванова^{а, *}, А. Г. Майоров^б

^аФГБОУ ВО Ярославский государственный университет им. П.Г. Демидова,
ул. Советская 14, Ярославль, 150003 Россия

^б“Национальный исследовательский ядерный университет “МИФИ”, Каширское ш. 31, Москва, 115409 Россия

*E-mail: olaydy@gmail.com

Поступила в редакцию 04.03.2021 г.

После доработки 11.05.2021 г.

Принята к публикации 12.05.2021 г.

В статье рассматривается проблема восстановления истинного распределения физической величины из измеренного и искаженного из-за приборных эффектов. Данная задача имеет название обратной свертки (unfolding, деконволюция) и для ее решения наиболее распространенными методами являются байесовский алгоритм д’Агостини, подход на основе алгоритма SVD и регуляризационный метод TUnfold. В работе проводится сравнительный анализ различных подходов и обсуждается вопрос выбора оптимальных параметров и условий для их использования. В качестве объекта для анализа работы алгоритмов был выбран энергетический спектр частиц в космических лучах, смоделированный методом Монте-Карло и измеренный магнитным спектрометром PAMELA. Основное внимание в работе уделено анализу качества восстановления спектра для различных значений параметров алгоритмов, а также сравнительному анализу подходов в зависимости от особенностей дискретизации спектра. Основным результатом является предложенный подход к подбору оптимального значения параметра регуляризации для метода на основе SVD и количества итераций для байесовского метода. Показано, что результат восстановления энергетического спектра протонов с помощью SVD метода и байесовского алгоритма согласуется с истинным спектром по критерию Колмогорова–Смирнова.

Ключевые слова: космические лучи, восстановление спектра, unfolding, байесовские алгоритмы, регуляризация

DOI: 10.1134/S2079562920060123

1. ВВЕДЕНИЕ

Одной из важных задач астрофизики является задача построения энергетического спектра частиц, входящих в состав космических лучей. Поэтому, в качестве примера работы методов, была взята задача подбора оптимального метода восстановления истинного спектра космических протонов по данным эксперимента PAMELA [1]. Основным детектор прибора PAMELA — это магнитная трековая система, благодаря которой измеряется магнитная жесткость частицы (отношение ее импульса к заряду). Однако из-за конечного пространственного разрешения детектора и физических процессов, например, рассеяния, измеренная жесткость отличается от истинного значения. В результате измеренный энергетический спектр отличается от истинного распределения и в таком случае применение методов обратной свертки может восстановить истинный спектр космических лучей.

2. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Рассмотрим некоторую измеряемую физическую величину (жесткость). Пусть ее значения лежат в диапазоне, разбитом на набор интервалов (бинов) $\Delta = (\Delta_1, \Delta_2, \dots, \Delta_k)$. В эксперименте регистрируются события, в которых жесткость принимает значение в одном из интервалов. Обозначим математическое ожидание истинного количества событий в соответствующих интервалах как $\tau = (\tau_1, \tau_2, \dots, \tau_k)$, а общее количество таких событий в серии наблюдений обозначим как $n_\tau = \sum n_i$, где n_i — количество событий в i -м интервале. В результате искажений получаем измеренный спектр $m = (m_1, m_2, \dots, m_n)$, где m_i — количество событий, когда значение величины оказывается в i -м интервале.

Для восстановления истинного распределения необходимо оценить вероятность того, что при

обработке отдельного события величина, принимающая свое настоящее значение в интервале Δ_j , прибором будет отнесена к интервалу Δ_j . Матрицу таких вероятностей $R = (R_{ij})$ называют матрицей миграций и ее можно получить с помощью численного моделирования или экспериментальной калибровки прибора.

Задачей восстановления спектра (обратной свертки, unfolding) называется задача построения статистической оценки истинного спектра τ измеряемой величины по имеющемуся измеренному ее спектру m с использованием матрицы миграций R и, возможно, некоторой дополнительной информации об истинном спектре.

3. МЕТОДЫ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧИ ОБРАТНОЙ СВЕРТКИ

Одним из распространенных методов решения задачи обратной свертки является байесовский подход. Эта идея в работе [2] реализована в виде итеративного алгоритма: на каждой итерации получаем уточненную оценку истинного распределения (спектра) величины, восстанавливая это распределение из текущего (искаженного по матрице миграций) приближения спектра с помощью формулы Байеса. Критерием остановки процесса является близость (однородность) спектров, полученных на последних двух итерациях. В работе [2] предлагается использовать для этого χ^2 -критерий Пирсона (и соответствующую метрику различия между текущим и новым распределением). Сходимость итеративной процедуры означает, что результаты восстановления спектра измеренной величины перестали изменяться, но при этом могут заметно отклоняться от истинного спектра величины.

Другой метод SVD unfolding [3] использует идею регуляризации. Здесь минимизируется функция правдоподобия вида $\Phi(\tau) = (R\tau - m) \times (R\tau - m)^T + \alpha S(\tau)$, где первое слагаемое минимально, когда измеренное распределение линейно зависит от истинного, а второе слагаемое содержит регуляризационную функцию $S(\tau) = \sum_i (\tau_{i-1} - 2\tau_i + \tau_{i+1})^2$, отражающую гладкость распределения. В других методах регуляризационная функция может выбираться иначе.

Также на идее регуляризации основан алгоритм TUnfold [4], [5], реализованный в пакетах ROOT и RooUnfold. Он предполагает минимизацию функции правдоподобия следующего вида: $\Phi(\tau) = L_1(\tau) + \alpha L_2(\tau) + \lambda L_3(\tau)$. Здесь $L_1(\tau)$ аналогично первому слагаемому в предыдущем методе, а регуляризационные функции L_2 и L_3 отражают непрерывность или гладкость распределения, а также ограничивают смещение оценки.

4. МЕТРИКИ КАЧЕСТВА

При сравнении результатов работы методов восстановления спектра важно выбрать подходящую меру расхождения истинного и восстановленного распределений. В данной работе в качестве такой меры предлагается использовать оценку статистики Колмогорова–Смирнова [6] в которой максимум расхождения эмпирических функций распределений будет вычисляться не по всей области измерения жесткости, а только в концах бинов.

Восстановленное количество событий в бинах $(\Delta_1, \dots, \Delta_n)$ обозначим как $u = (u_1, \dots, u_n)$. Общее количество событий в восстановленном распределении равно $n_u = \sum u_i$. Сами бины зададим как $\Delta_k = (x_{k-1}, x_k)$. В концах бинов (во всех x_k) вычисляем значения эмпирической функции распределения истинных и восстановленных значений:

$F_\tau(x_k) = \frac{1}{n_\tau} \sum_{i=1}^k \tau_i$ и $F_u(x_k) = \frac{1}{n_u} \sum_{i=1}^k u_i$ соответственно. Наибольшее отклонение этих функций обозначим как $D_{\tau,u} = \max_k |F_\tau(x_k) - F_u(x_k)|$. Мера расхождения восстановленного и истинного спектра вычисляется следующим образом [6]:

$$\rho_{\tau,u} = \sqrt{\frac{n_\tau n_u}{n_\tau + n_u}} D_{\tau,u}.$$

Это значение является нижней оценкой статистики Колмогорова–Смирнова, при превышении критического значения распределения Колмогорова для выбранного уровня значимости (для 0.05 и 0.01 критические значения 1.36 и 1.63 соответственно [6]) делаем вывод о значимом расхождении восстановленного и истинного спектров; обратное, строго говоря, неверно. Такая мера рассматривается как метрика качества работы алгоритмов: близкие к 0 значения характеризуют хорошую согласованность спектров, высокие значения позволяют говорить о значительных погрешностях при восстановлении спектра.

5. ДАННЫЕ ДЛЯ АНАЛИЗА

Для рассматриваемой задачи методом Монте-Карло прохождения частиц через спектрометр РАМЕЛА был получен набор событий (протонов) с информацией об истинной и измеренной прибором жесткости. При моделировании генерировались протоны с жесткостями из диапазона от 5 до 800 ГВ. Истинное распределение протонов в космических лучах неизвестно, спектр в рассматриваемом диапазоне близок к степенному с показателем -2.7 [7].

В действительности, реальный спектр частиц имеет более сложную форму: в распределении есть изломы, показатель может быть не одинаковым на всем интервале рассмотрения. Так как истинное

распределение нам доподлинно не известно, встает вопрос применимости методов обратной свертки: смогут ли они восстановить истинное распределение, если матрица миграций была построена по другому распределению, похожему, но довольно сильно отличающемуся от истинного. Поэтому для моделирования такой ситуации при построении матрицы миграций был использован спектр с показателем -1 , существенно отличающийся от -2.7 . В таком эксперименте выбор распределения для восстановления не принципиален (пусть он более простой по сравнению с реальным спектром протонов), важно лишь то, что они существенно отличаются.

Другой важной задачей является проблема дискретизации распределения — разбиения жесткости на интервалы и ее влияния на качество восстановления спектра. Для начала заметим, что возможна ситуация, когда истинное значение принадлежит

диапазону 5–800 ГВ, но результат измерения выпал из него. Для учета таких миграций были введены дополнительные бины справа и слева. Рекомендаций по дискретизации распределения в литературе крайне мало, лишь в [2] говорится, что для корректной работы методов восстановления необходимо, чтобы матрица миграций была статистически обеспечена и близка к диагональной.

В данной статье исследуется вопрос как будут работать методы обратной свертки, в случае, когда на диагонали матрицы миграций будет менее 50%. Поэтому для анализа алгоритмов были взяты два разбиения на бины — для случая диагональной (рис. 1 сверху слева) и не диагональной (снизу слева) матрицы миграций. В первом случае для низких энергий (ниже 30 ГВ) на диагонали находится около 70% частиц, а для высоких — чуть больше 50% из-за ухудшающейся с ростом энергии точности определения жесткости. Для второго

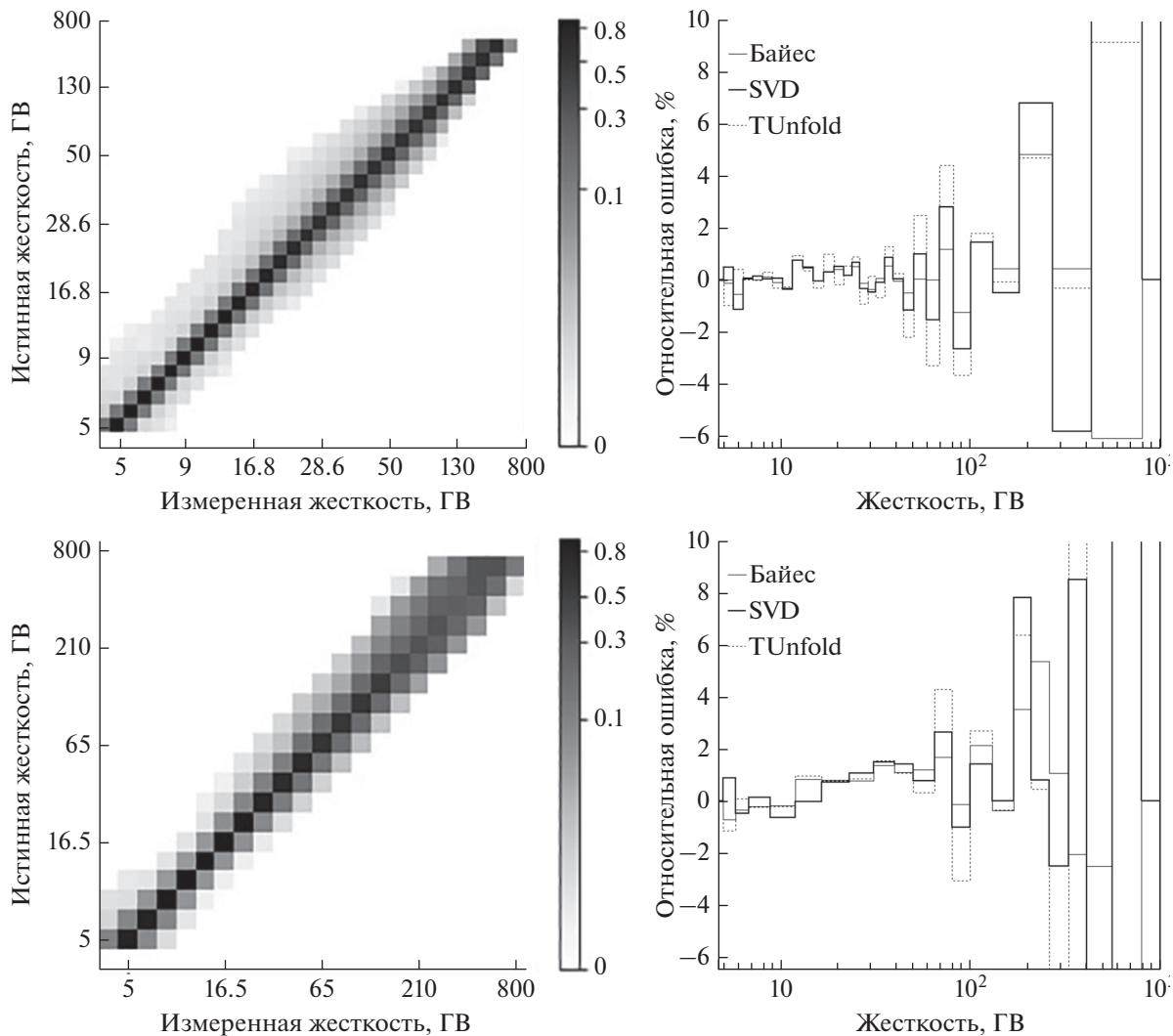


Рис. 1. Матрица миграций (слева) и относительная ошибка алгоритмов (справа).

Таблица 1. Сравнение методов по критерию Колмогорова–Смирнова

	диагональный	не диагональный
Метод Байеса	1.30 (2 итерации)	3.49 (2 итерации)
SVD	1.23 ($reg = 22$)	1.98 ($reg = 15$)
TUnfold	1.87	3.73

случая при высоких энергиях на диагонали менее 30% частиц.

6. СРАВНЕНИЕ МЕТОДОВ

Для байесовского метода в диагональном случае значения статистики Пирсона быстро убывают, что свидетельствует о хорошей сходимости метода. Она оказывается меньше критической уже после третьей итерации, но при сравнении восстановленного спектра с истинным по критерию Колмогорова–Смирнова лучшей оказалась вторая итерация. Для недиагонального случая лучшие итерации такие же, но истинный и восстановленный спектры значительно расходятся (больше критического значения см. табл. 1).

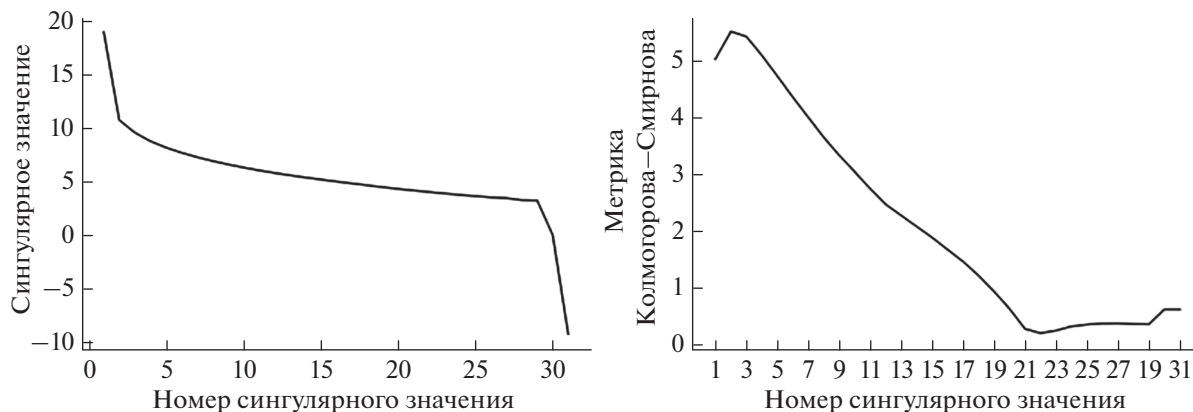
Для метода SVD встает вопрос выбора параметра регуляризации reg . В исходном методе SVD [3] рекомендуется выбрать коэффициент регуляризации как последнее “большое” сингулярное значение, график которых в логарифмическом масштабе показан на рис. 2 слева (диагональный случай). При близких к нулю значениях (сильная регуляризация) алгоритм лишь сглаживает измеренный спектр, а слабая (вблизи числа бинов) дает большие погрешности. Поэтому для наших данных эта рекомендация не позволяет выбрать пара-

метр регуляризации. Проведенный авторами анализ значений метрики Колмогорова–Смирнова (рис. 2 справа) позволил определить оптимальное значение параметра регуляризации reg . Для недиагонального случая ситуация выбора параметра аналогична, однако восстановленный и истинный спектры значительно расходятся (значение в табл. 1 больше критического 1.63).

В методе TUnfold выбор параметра происходит автоматически внутри алгоритма. Отметим, что для недиагональной матрицы миграций результат восстановления ощутимо расходится с истинным спектром, а для диагонального случая результат уступает другим методам (см. табл. 1).

Теперь сравним результаты работы методов между собой, при выбранных оптимальным образом параметрах. На рис. 1 справа показаны графики относительных ошибок методов для каждого бина для диагонального (сверху) и не диагонального (снизу) случаев. Ошибка метода TUnfold (пунктирная линия) в большинстве бинов существенно больше ошибки других методов. Для метода SVD и Байесовского подхода для соседних бинов часто наблюдается ошибка разных знаков, но в среднем ошибка невелика. Сравнить их качество восстановления по графику затруднительно, для недиагонального графика можно заметить, что ошибка SVD-метода в среднем находится ближе к нулю, чем для итерационного Байеса.

Из табл. 1 видно, что для диагонального случая по критерию Колмогорова–Смирнова проходят метод Байеса и SVD, который показал немного меньшее значение. А для недиагонального случая SVD-подход показал существенно меньшее значение критерия (по сравнению с двумя другими методами), но все равно выше критического, что свидетельствует о важности диагональности матрицы миграций.

**Рис. 2.** Подбор регуляризации для метода SVD.

7. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В статье был предложен более точный подход к подбору параметра регуляризации для метода SVD и количества итераций для итеративного байесовского метода. В случае разбиения на бины, когда матрица миграций получается не диагональной качество работы всех методов существенно хуже. Таким образом показано, что требование диагональности матрицы миграции ($R_{ii} > 0.5$) является принципиальным. Для диагонального случая при выбранных параметрах результаты байесовского алгоритма и SVD метода удовлетворяют критерию Колмогорова–Смирнова (в табл. 1 значения выделены жирным), а результаты метода TUnfold нет.

БЛАГОДАРНОСТИ

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект № 19-72-10161).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ/REFERENCES

1. *Picozza P et al.* // *Astropart. Phys.* 2007. V. 27 (4). P. 296–315.
2. *D’Agostini G.* // *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. A.* 1995. V. 362. P. 487. [https://doi.org/10.1016/0168-9002\(95\)00274-X](https://doi.org/10.1016/0168-9002(95)00274-X).
3. *Höcker A., Kartvelishvili V.* // *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. A.* 1996. V. 372. P. 469. [https://doi.org/10.1016/0168-9002\(95\)01478-0](https://doi.org/10.1016/0168-9002(95)01478-0) [arXiv:hep-ph/9509307].
4. *Adye T.* // *Proc. PHYSTAT 2011 Workshop.* CERN, Geneva, Switzerland. January 2011 / CERN-2011-006, P. 313–318.
5. *Schmitt S.* // *J. Instrum.* 2012. V. 7. P. T10003.
6. *Smirnov N.V.* // *Ann. Math. Statist.* 1948. V. 19. P. 279–281.
7. *Adriani O. et al.* // *Science.* 2011. V. 332. No. 6025. P. 69–72. <https://doi.org/10.1126/science.1199172>
8. *Blobel V.* // *Proc. Conf. Advanced Statistical Techniques in Particle Physics.* Durham, 2002.

Applying Unfolding Methods for Reconstruction of Cosmic Rays Energy Spectrum

Yu. V. Bogomolov¹, O. A. Levanova^{1, *}, and A. G. Mayorov²

¹*Yaroslavl Demidov State University, Sovetskaya st. 14, Yaroslavl, 150003 Russia*

²*National Research Nuclear University MPhI (Moscow Engineering Physics Institute), Kashirskoye sh. 31, , Moscow, 115409 Russia*

**e-mail: olaydy@gmail.com*

Received March 4, 2021; revised May 11, 2021; accepted May 12, 2021

In article the problem of reconstructing the true physical value distribution from measured one (distorted by instrumental effects) is considered. This problem is known as deconvolution (unfolding). There are several common ways to solve it: bayesian algorithm, singular value decomposition approach and TUnfold method, based on regularisation. We are discussing terms of use, how to choose optimal parameters for different methods, and comparing the reconstruction quality. The object of analysis was chosen the cosmic rays energetical spectrum simulated by Monte-Carlo method and measured by PAMELA magnetic spectrometer. We focused on the analysis of spectrum reconstruction quality for different algorithm parameters and the comparative analysis of methods results depend on spectrum discretisation features. The main result is the approach to optimal regularisation parameter choice for SVD method and iterations number for bayesian method.

Keywords: cosmic rays, spectrum reconstruction, deconvolution, unfolding, bayesian algorithms, regularization