

Определения и математический аппарат процедуры деконволюции

- Измерение физических величин во многих экспериментах из области физики космических лучей или физики высоких энергий описывается стандартной математической моделью: $Y(E_i) = \int A(E_i, E_0) S(E_0) dE_0$, где $A(\dots)$ – функция отклика инструмента; $Y(\dots)$ – измеренная физическая величина; $S(\dots)$ – истинная физическая величина.
- Построение гистограмм распределения физических величин описывается еще более простой моделью: вместо вышеприведенного интегрального уравнения имеет место система линейных уравнений $Y_i = \sum_j M_{ij} S_j$ или векторно-матричное уравнение: $Y = MS$, где M – матрица (оператора функции отклика инструмента), называемая матрицей миграции (migration matrix [1]); Y – гистограмма измеренной физической величины; S – гистограмма истинной физической величины.
- Для того, чтобы построить гистограмму истинной физической величины S на основе гистограммы Y ее значений, измеренных в эксперименте в рамках модели $Y = MS$, необходимо решить задачу деконволюции (обратной свертки, «анфолдинга» (unfolding) измеренной гистограммы Y .
- Формальное решение этой задачи через обращение матрицы миграции (либо через обращение произведения матрицы на транспонированную к ней – так называемую матрицу Грама): $S^0 = M^T G^{-1} Y = M^{-1} Y$, где $G = M M^T$, обычно не представляет интереса, т.к. задача является некорректно поставленной: при обращении матрицы вычислительные и измерительные погрешности, близкие к нулю, возводятся в минус первую степень и принимают экстремально большие значения, близкие к сингулярности.
- Поэтому решение задачи требует применения методов регуляризации, препятствующих многократному росту малых ошибок во входных данных, пускай и за счет понижения точности решения. В данном докладе в качестве метода регуляризации при обращении матрицы предлагается низкоранговое матричное разложение, то есть усечение (обнуление) малых собственных значений матрицы, которые при обращении могли бы обратиться в бесконечность (сингулярность).
- Преимуществом такого метода регуляризации является простота нахождения оптимального значения параметра регуляризации. Самым «параметром регуляризации» при этом является количество собственных значений матрицы, оставляемых (не обнуляемых) при обращении. Тем самым параметр регуляризации принимает дискретные значения от 1 до размера матрицы N_{bins} , в отличие от непрерывного интервала значений параметра в таких методах, как регуляризация Тихонова. Для нахождения оптимального значения достаточно сравнить погрешность методики для каждого из значений от 1 до N_{bins} по отдельности и выбрать наименьшую из погрешностей. К тому же, в [2] выяснено, что при оптимальных значениях параметра регуляризации различные методы регуляризации весьма схожи, поэтому предпочтения удобства и простоты применения, в том числе для оптимизации параметра, могут выйти при выборе метода регуляризации на первый план.
- Для применения этого метода регуляризации, матрицу G из уравнения $S^0 = M^T G^{-1} Y$ необходимо обращать в базисе ее собственных векторов, в котором она диагональна: $G = V D V^T$, где V – матрица собственных векторов G ; D – диагональная матрица собственных значений G .

В этом базисе обратная матрица имеет вид: $G^{-1} = V D^{-1} V^T$, где D^{-1} – диагональная матрица обратных собственных значений G ; $D^{-1} = \begin{pmatrix} 1/d_1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 1/d_2 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & 1/d_{N_{bins}} \end{pmatrix}$.

Для регуляризации отсортируем собственные значения в D (все они неотрицательны в силу симметричности G) и обратим только первые r наибольших из них, в то время как оставшиеся $N_{bins} - r$ наименьших

$$\text{из них обнулём: } D^{-1} = \begin{pmatrix} 1/d_1 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 1/d_2 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & 1/d_r & \dots & 0 \\ 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Теперь, псевдообратная матрица $G^{-1} = V D^{-1} V^T$ имеет только r собственных значений вместо N_{bins} , и следовательно ее ранг теперь r вместо N_{bins} . Соответствующее решение $S^0 = M^T G^{-1} Y$ является робастным в отличие от обычного обращения матрицы.

- Для выбора оптимального значения r достаточно перебор всех возможных значений от 0 до N_{bins} , при каждом из которых истинную гистограмму S^0 следует восстановить из измеренной гистограммы Y . Ближайшая к истинной гистограмме среди всех S^0 соответствует оптимальному r .

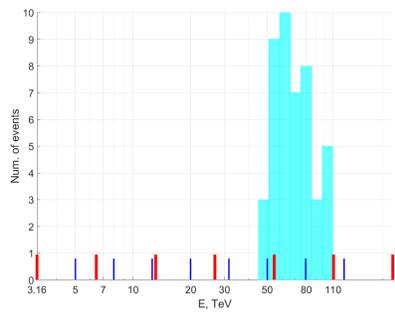
Применение к спектру энергий гамма-квантов в TAIGA-IACT

- Первый телескоп TAIGA-IACT [3] астрофизического комплекса TAIGA [4] зарегистрировал около 600 кандидатов в гамма-кванты Крабовидной туманности за 2 сезона наблюдений (результаты первого сезона наблюдений представлены в [5, 6]). Исходя из этой статистики, энергетический спектр истинной энергии гамма-квантов ищется в виде гистограммы на равномерной по логарифму энергии сетке с началом в точке 3.16 ТэВ (примерно соответствует порогу регистрации) и шагом 0.2, всего 8 бинов: 3.16, 5.01, 7.94, 12.58, 19.94, 31.60, 50.08, 79.38, 125.80 ТэВ.
- Сетка гистограммы по измеренной энергии может быть выбрана любой (никак не связанной с сеткой по истинной энергии). Поэтому можно оптимизировать шаг этой сетки, для определенности выбрав начальную точку такой же (3.16 ТэВ) и тоже избрав равномерную сетку по логарифму энергии. В качестве критерия оптимизации шага сетки выбран критерий, решающий проблему поиска гамма-квантов сверхвысоких энергий (выше приблизительно 100 ТэВ). Наличие или отсутствие таких событий в истинном спектре свидетельствует о наличии или отсутствии в природе так называемых ПэВатронов, интересных астрофизических объектов.
- Для решения этой задачи важно, чтобы при большой энергии число событий в бинах гистограммы измеренной энергии не превышало число событий истинной энергии (т.е. чтобы не появлялись «фейковые», несуществующие события, являющиеся следствием неточного измерения энергии телескопом). Поэтому требуем, чтобы в последнем бине 79.38–125.80 ТэВ после деконволюции не было событий в том случае, если истинная энергия также не превышает левую границу бина (~80 ТэВ). Среди всех удовлетворяющих этому условию сеток измеренной энергии (и всех значений параметра регуляризации) выбираем такие, чтобы разность спектров истинного и полученного после деконволюции измеренного (в метрике «норма разности векторов») была минимальной.
- Данные для решения задачи представляют собой разыгранные методом Монте-Карло изображения гамма-квантов в камере телескопа TAIGA-IACT, соответствующих условиям наблюдения источника гамма-квантов Крабовидной туманности, после всех стандартных этапов обработки и анализа данных. События разыгрывались в интервале энергий от 2 до 200 ТэВ; все этапы отбора прошли около 3000 событий

Результаты (по данным моделирования TAIGA-IACT методом Монте-Карло)

- Оптимальная сетка по измеренной энергии, удовлетворяющая требованию отсутствия после деконволюции высокоэнергетических событий (≥ 80 ТэВ) при отсутствии их в истинной энергии, представляет собой 6 равномерных по логарифму энергии бинов с началом в 3.16 ТэВ и шагом 0.309: 3.16, 6.44, 13.11, 26.71, 54.41, 110.84, 225.78 ТэВ (их границы на рисунке изображены красными засечками; синие засечки – границы восьми бинов по истинной энергии).

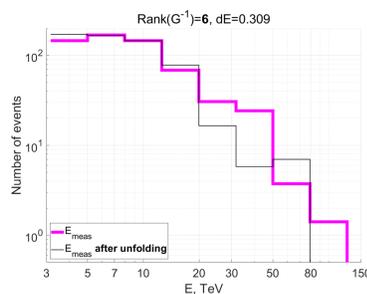
Оптимальный ребиннинг



Тот факт, что для решения задачи поиска ПэВатронов в спектре гамма-квантов потребовалось изменение сетки гистограммы (ребиннинг), объясняется распределением измеренной энергии, соответствующей одному и тому же значению истинной энергии на границе предпоследнего и последнего бинов (синяя засечка ~80 ТэВ). Распределение изображено голубой гистограммой. Видно, что при истинной энергии ~80 ТэВ измеренная может зависать до ~110 ТэВ. Поэтому последний бин оптимальной сетки по измеренной энергии должен начинаться от этого значения (красная засечка на правой границе гистограммы). Тем самым деконволюция спектра не допустит перетекания истинной энергии в последний бин.

- Для малого числа бинов регуляризация не дает существенного улучшения: формально говоря, оптимальным является обнуление только одного собственного значения матрицы миграции, то есть оптимальный ранг псевдообратной матрицы равен всего лишь 5 вместо максимального возможного значения 6. Такова ситуация для деконволюции спектров, истинная энергия которых обрезана в районе высоких энергий, но присутствует на гистограмме энергии измеренной («фейковый ПэВатрон» на рисунках в правой части). Галочкой отмечены как приемлемые оба варианта: ранг 5 и ранг 6. Для ранга 5 спектр после деконволюции (черная линия) всего лишь ненамного ближе к истинному (голубой линии), при этом в обоих случаях гистограмма не дает «фейкового» ненулевого значения в последнем бине, в отличие от измеренной энергии без деконволюции (малиновой линии). Однако в ситуации спектров, истинная энергия которых на самом деле не обрезана («реальный ПэВатрон»), вариант с рангом псевдообратной матрицы 6 (то есть, по сути, без регуляризации) является предпочтительным: соответствующий спектр (черная линия) проходит ближе к истинному (голубой), чем при ранге 5. Поэтому окончательно для построения спектра в эксперименте отобран именно этот вариант: без регуляризации обращения матрицы миграции, но с оптимальным ребиннингом.
- При большом числе бинов ~25 регуляризация, напротив, существенна, и обнуляется большая часть собственных значений, однако статистика TAIGA-IACT для построения спектров с таким биннингом недостаточна.
- Использование оптимальной сетки по измеренной энергии (ребиннинг) имеет решающее значение для поиска ПэВатронов даже при малом биннинге.

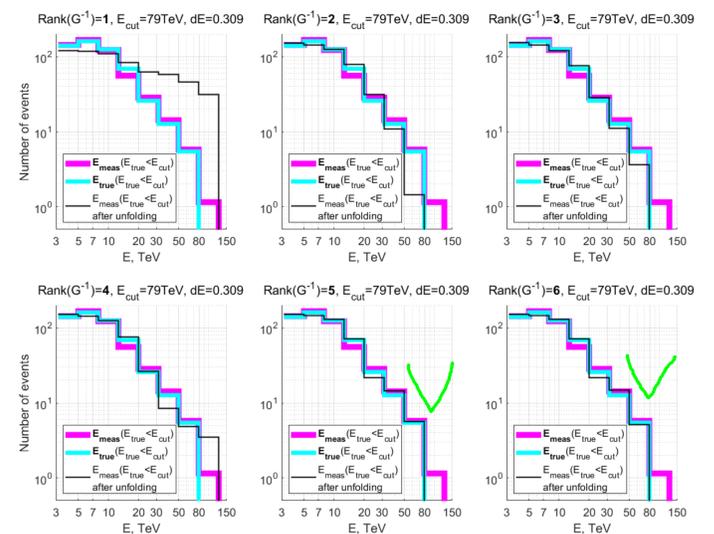
Деконволюция экспериментального спектра (предварительный вариант)



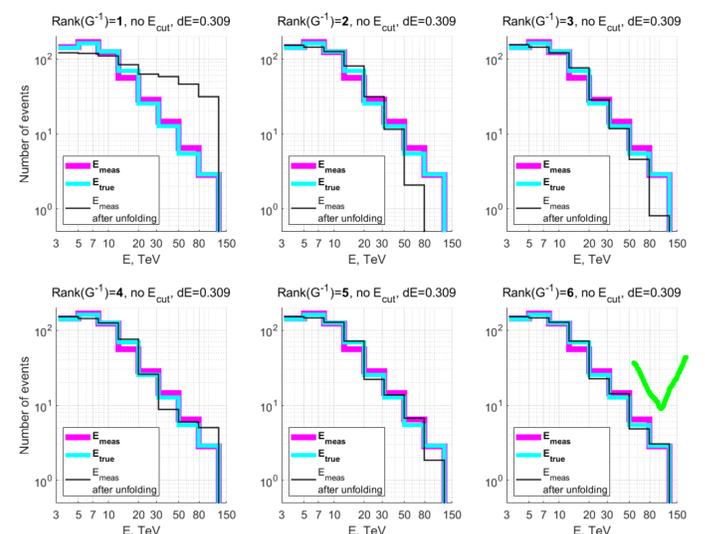
Данный спектр представляет собой гистограмму измеренной в эксперименте энергии гамма-квантов по 8 бином, не нормированную на время и эффективную площадь регистрации (эти процедуры проводятся отдельно от деконволюции на более позднем этапе интерпретации данных [1]). Заметно, что в последнем бине (>80 ТэВ) после деконволюции не остается событий («фейковый ПэВатрон»). После надлежащей нормировки на время и эффективную площадь регистрации данный вариант деконволюции спектра может явиться основой для формирования экспериментального спектра гамма-квантов Крабовидной туманности за 2 сезона работы первого телескопа TAIGA-IACT.

Спектры симулированной энергии для разных параметров регуляризации

Истинная энергия обрывается на 80 ТэВ («фейковый ПэВатрон»)



Истинная энергия не обрывается на 80 ТэВ («реальный ПэВатрон»)



Литература

- Unfolding of differential energy spectra in the MAGIC experiment. J. Albert et al. arXiv:0707.2453.
- Comparative investigation of unfolding methods. V.B. Anykeyev, A.A. Spiridonov and V.P. Zhigunov. NIM A303 (1991) 350–369.
- Commissioning the joint operation of the wide angle timing HiSCORE Cherenkov array with the first IACT of the TAIGA experiment. E.Postnikov et al. PoS(ICRC2017)756.
- Cosmic-Ray Research at the TAIGA Astrophysical Facility: Results and Plans. I.I.Astapov et al. JETP 134 (2022) 469–478.
- Detecting Gamma Rays with Energies Greater than 3–4 TeV from the Crab Nebula and Blazar Markarian 421 by Imaging Atmospheric Cherenkov Telescopes in the TAIGA Experiment. L.G. Sveshnikova et al. Bulletin of the Russian Academy of Sciences: Physics 85 (2021) 398–401.
- First detection of gamma-ray sources at TeV energies with the first imaging air Cherenkov telescope of the TAIGA installation. E. Postnikov et al. JPCS 1690 (2020) 012023.