

Байесовская деконволюция для эксперимента СФЕРА-2

Игорь Вайман

26 апреля 2021 г.

Глава 1

Описание эксперимента СФЕРА-2

Эксперимент СФЕРА-2 основан на сборе и регистрации черенковского света ШАЛ, отражённого от «экрана» – ровной заснеженной поверхности льда озера Байкал. Установка представляет собой сферическое зеркало и мозаику ФЭУ, установленную вблизи фокальной поверхности. Черенковский свет ШАЛ, рассеиваясь на снегу, проходит через диафрагму установки, отражается от зеркала, и попадает на фотокатод. При попадании фотона с длиной волны в области чувствительности фотокатода с него выбиваются 1 – 10 (уточнить) вторичных электронов, которые проходят систему динодов с разностью потенциалов между каждой парой, создавая в результате избыточный на аноде. Этот заряд стекает с анода через цепь усиления, создавая в результате напряжение на входе АЦП. Это напряжение считывается электроникой, в результате и составляя (вместе с некоторой телеметрией) экспериментальные данные.

Этот набор физических процессов мы описываем в следующих положениях:

1. В системе нет электронных шумов – единственным источником шума являются фоновые фотоны (от звёздного и зодиакального света, так как эксперимент проводится в ясные безлунные ночи). Фотоны шума попадают в установку аналогично «сигнальным» фотонам – после рассеяния на поверхности. Их поток можно приблизительно оценить по каталогам светимости звёзд и из моделей зодиакального света. (Ссылка на работу Энтиной)

2. Работу ФЭУ можно эффективно описать одной «рандомизированной» импульсной характеристикой (РИХ). Понятие и применение РИХ будет раскрыто далее, в общем виде это случайная функция времени, описывающая отклик системы на один фотон, падающий на фотокатод. Главный источник случайности в установке СФЕРА-2 – неопределённость числа вторичных фотонов, вылетевших с фотокатода, приводящая к неопределённости амплитуды импульса тока. Стоит отметить, что случайный характер ИХ проявляется именно на границе между режимом счёта фотонов и режимом измерения потока, поскольку поток фотонов уже слишком велик, чтобы разрешать отдельные импульсы, но недостаточно – чтобы случайные характеристики эффективно усреднялись. Мы также предполагаем, что случайность импульсной характеристики проявлялась независимо между отдельными фотонами и между разными ФЭУ.
3. Используя экспериментальные данные (данные, записанные АЦП, постоянную компоненту анодного тока и абсолютную калибровку ФЭУ) мы можем восстановить показания анодного тока (ссылка на работу по электронике). Неопределённость, вносимая анодной цепью, усилителем и (главным образом) дискретизацией сигнала на входе АЦП, хорошо известна и учитывается во вторую очередь.

Глава 2

Байесовская деконволюция

2.1 Общие допущения

Рассмотрим N последовательных равновеликих временных бинов. Для простоты будем считать единицей времени длительность одного бина. Тогда мы можем задать временные бины интервалами $[i-1, i]$, $i = 1 \dots N$. Обратим внимание, что при такой нумерации бинов эффект от фотонов, попавших в i -тый временной бин проявляется впервые в момент времени i . Обозначим число фотонов в каждом бине как n_i , $i = 1, \dots, N$.

Время прихода отдельного фотона относительно начала бина $t_{inbin} = \{t\}$ будем описывать случайной величиной, подразумевая, что мы не интересуемся такими детальными характеристиками сигнала. Эта величина может быть, вообще говоря, распределена произвольным образом в интервале $[0, 1)$, однако мы в простейшем случае будем считать $t_{inbin} \sim U(0, 1)$. Это оправдано для независимых друг от друга фоновых фотонов, и может служить приближением для фотонов ШАЛ в случае, если дисперсия времён прихода фотонов внутри «пакета» сильно превышает длительность временного бина. По данным модельных ливней это не всегда так, поэтому влияние неравномерности распределения времён прихода фотонов будет исследовано отдельно.

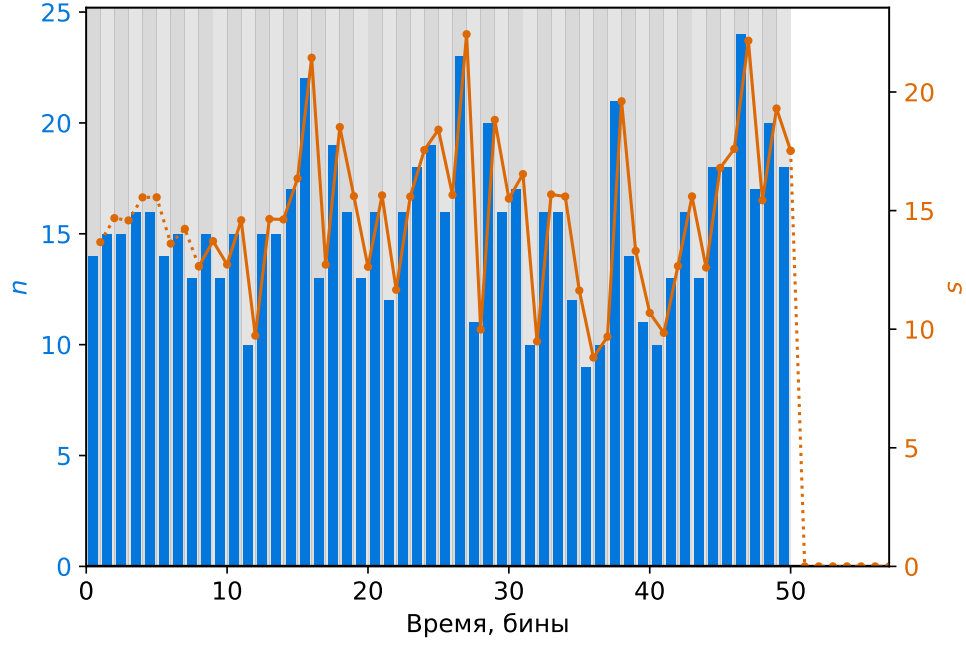


Рис. 2.1: Пример данных для задачи байесовской деконволюции. Здесь $N = 50$, количество фотонов в каждом бине выбрано из пуассоновского распределения с $\lambda = \mathbb{E}(n_i) = 15$, они показаны синими столбцами; РИХ – $A \exp(-t/2)$, обрезанная на $L = 10$, где случайный множитель $A \sim U(0.75, 1)$; оранжевые точки – выходной сигнал; пунктиром показаны участки, исключаемые из рассмотрения из-за краевых эффектов.

Предположим, что импульсная характеристика системы – случайная функция $\tilde{h}(t)$ в том смысле, что для входного сигнала, состоящего из конечного числа дельта-функций на единицу времени, каждая из этих дельта функций сворачивается с отдельной независимой реализацией $h(t) \sim \tilde{h}(t)$. Будем также считать, что любая реализация удовлетворяет условию каузальности, то есть $\forall t < 0 \quad \forall h \sim \tilde{h} \quad h(t) = 0$, и конечности во времени, то есть $\exists \tilde{L}$ такое, что $\forall t > \tilde{L} \quad \tilde{h}(t) = 0$.

Заметим, что эффект от фотонов в i -том бине проявляется в отсчётах с i по $i + \lfloor \tilde{L} \rfloor$, где $\lfloor \tilde{L} \rfloor$ – наибольшее целое число, не превышающее \tilde{L} (округление вниз). Обозначим $L \equiv \lfloor \tilde{L} \rfloor$. Тогда полный сигнал от фотонов

гарантированно содержится в отсчётах с 1 по $N + L$.

Таким образом, фотоны, приходящие на вход в течение времени $[0, N]$ будут приводить к регистрации отсчётов s_j в моменты времени $j = 1, \dots, N + L$. Иллюстрация этой постановки задачи приведена на рис. 2.1.

2.1.1 Краевые эффекты

В реальном эксперименте входные фотоны не ограничены интервалом $[0; N]$, но приходят постоянно. Модифицируем постановку задачи так, чтобы устранить краевые эффекты – плавный рост сигнала в начале и затухание в конце.

Для этого достаточно исключить из всего дальнейшего рассмотрения эти участки сигнала. Так, в реальной ситуации фотоны продолжают приходить после $t = N$, и вносят соответствующий вклад в отсчёты начиная с $N - 1$. Фотоны, пришедшие до $t = 0$, вносят вклад в отсчёты до L .

Поэтому для восстановления значений n_i , $i = 1, \dots, N$ мы будем использовать только отсчёты S_j при $j = L + 1, \dots, N$. Этот участок изображён на рис. 2.1 сплошной линией, участки по краям, исключаемые из рассмотрения – пунктиром.

2.2 Постановка задачи

Поставим задачу статистической деконволюции следующим образом, используя байесовскую терминологию (поэтому будем также называть эту процедуру байесовской деконволюцией):

Пусть дана рандомизированная импульсная характеристика системы $\tilde{h}(t)$ и значения s_j , $j = 1, \dots, N + L$. Найти апостериорные функции плотности вероятности для значений n_i , $i = 1, \dots, N$.

Заметим, что, в отличие от обычной деконволюции, мы не ставим задачу оценить исходный сигнал сам по себе, представляющий собой сумму δ -функций, но только его несколько обобщённую характеристику.

2.3 Решение

2.3.1 Выходной сигнал как реализация случайного процесса

Ясно, что в силу случайного характера отклика системы, а также агрегирования фотонов в бины, значения отсчётов $\{s_j\}$ являются реализациями некоторых случайных величин. Обозначим сами эти случайные величины как $\{S_j\}$.

Запишем S_j как сумму случайных вкладов от фотонов разных бинов

$$S_j = \sum_{l=0}^L C(n_{j-l}, l) \quad (2.1)$$

Здесь $C(n, l)$ – случайная величина, описывающая вклад в сигнал на j -том временном отсчёте от n фотонов в бине $j - l$, иначе говоря, вклад с *задержкой* l бинов. Из выбранной схемы индексации бинов и условий каузальности и ограниченности во времени РИХ легко видеть, что $l \in [0, L]$.

Получим распределение $C(n, l)$. Проще всего сделать это через Монте-Карло-сэмплирование её

распределения. Получим сначала с произвольной точностью эмпирическую функцию плотности распределения для $C(1, l)$. Для этого сгенерируем значения $t_k \sim t_{inbin}$; и функции $h_k(t) \sim \tilde{h}(t)$ для $k = 1 \dots N_{sample}$. Выборка для $C(1, l)$ тогда будет состоять из значений $h_k(l + 1 - t_k)$. Выборка для $C(n, l)$ легко получить, проделав описанную процедуру n раз и сложив все n реализаций N_{sample} -мерных векторов выборок.

2.3.2 Грубая оценка

Перед тем, как полностью решать саму задачу байесовской деконволюции, сделаем грубую оценку \vec{n} . Сначала запишем систему уравнений для математических ожиданий случайных величин S_j .

Для этого используем независимость фотонов в пределах одного бина, из чего следует $\mathbb{E} C(n, l) = n \mathbb{E} C(1, l)$. Нетрудно заранее вычислить для данной РИХ выборки значений $C(1, l)$ для $l = 0 \dots L$. Тогда получим, обозначая $c_l \equiv \mathbb{E} C(1, l)$,

$$\bar{S}_j = \mathbb{E} S_j = \sum_{l=0}^L \mathbb{E} C(n_{j-l}, l) = \sum_{l=0}^L n_{j-l} \mathbb{E} C(1, l) = \sum_{l=0}^L n_{j-l} c_l \quad (2.2)$$

Суммирование можно записать в матричном виде для $j = 1, \dots, N + L$:

$$\begin{pmatrix} c_0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ c_1 & c_0 & 0 & \cdots & 0 \\ c_2 & c_1 & c_0 & & \vdots \\ c_3 & c_2 & c_1 & \ddots & 0 \\ \vdots & c_3 & c_2 & \ddots & c_0 \\ c_L & \vdots & c_3 & \ddots & c_1 \\ 0 & c_L & \vdots & \ddots & c_2 \\ \vdots & & c_L & & c_3 \\ 0 & \cdots & 0 & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & 0 & 0 & c_L \end{pmatrix} \begin{pmatrix} n_1 \\ n_2 \\ n_3 \\ \vdots \\ n_N \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \bar{S}_1 \\ \bar{S}_2 \\ \vdots \\ \bar{S}_N \\ \bar{S}_{N+1} \\ \vdots \\ \bar{S}_{N+L} \end{pmatrix} \quad (2.3)$$

Для перехода к случаю непрерывного потока фотонов достаточно, как указано в разделе 2.1.1, ограничиться рассмотрением строк $j = L + 1, \dots, N$, то есть убрать первые и последние L уравнений системы.

Это переопределённая система линейных уравнений, для которой можно найти решение в смысле наименьших квадратов с помощью псевдообратной матрицы Мура-Пенроуза (ссылка). Псевдообратная матрица C^+ для C определяется следующими условиями: (1) $CC^+C = C$, (2) $C^+CC^+ = C^+$, (3) CC^+ и C^+C – эрмитовы матрицы. Псевдообратная матрица всегда существует, и для системы $C\vec{n} = \vec{S}$ вектор $C^+\vec{S}$ даёт искомое МНК-решение системы. Приближённый численный расчёт такой матрицы можно проводить, например, с помощью функции `pinv` модуля `numpy.linalg` в Python (ссылка).

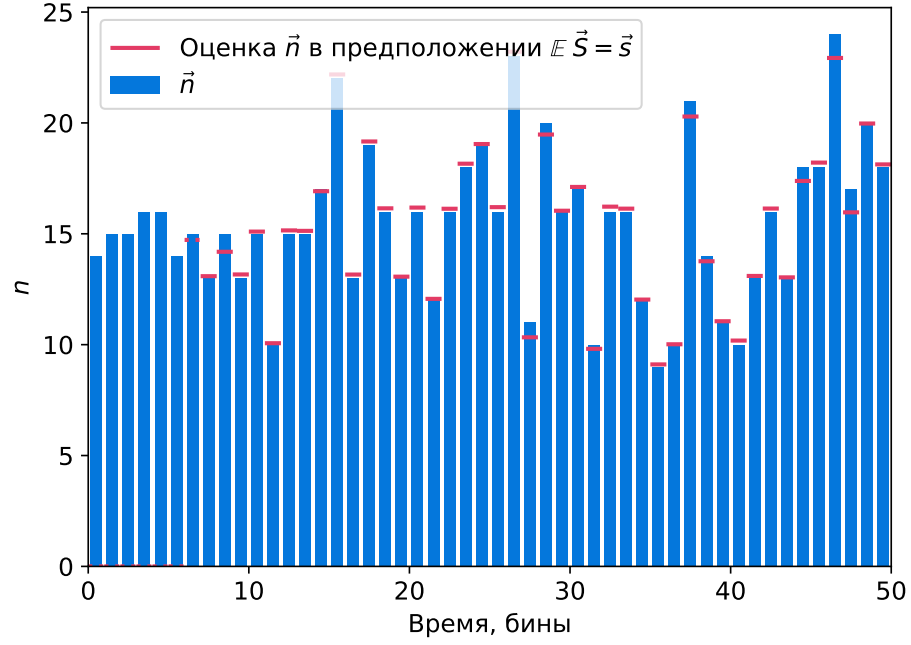


Рис. 2.2: Оценка \vec{n} в предположении, что выходной сигнал \vec{s} равен своему математическому ожиданию. Пунктиром показана область, где оценка искажена эффектом ограниченности выборки во времени.

Решение системы предполагает, что нам известны $\mathbb{E} S_j$, в то время как в эксперименте мы имеем единственную реализацию этой случайной величины s_j , и принципиально не можем пропустить одни и те же фотоны через установку несколько раз для получения выборки. Для грубой оценки остаётся положить $\mathbb{E} S_j \approx s_j$. Результат этой процедуры приведён на рис. 2.2 фиолетовым, пунктиром отмечена область, в которой оценка искажена краевым эффектом, её необходимо отбросить.

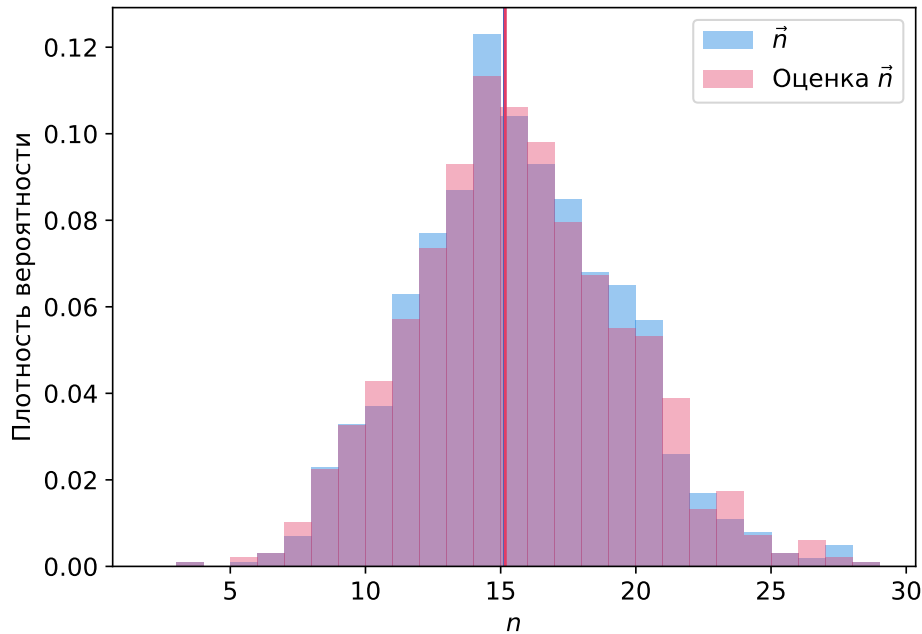


Рис. 2.3: Распределения истинных и грубо восстановленных значений \vec{n} для 1000 значений. Истинные значения выбраны из пуассоновского распределения с $\lambda = 15$, аналогично рис. 2.1 и 2.2.

Строгое исследование корректности и свойств такой оценки \vec{n} находится за рамками данной работы. Однако для простой численной проверки можно провести описанную процедуру для большего числа входных бинов и сравнить распределения истинных и оцененных значений \vec{n} . На рис. 2.3 приведено такое сравнение для 1000 бинов. Видно, что распределения практически совпадают, систематический сдвиг отсутствует, а значит, метод подходит в качестве первого приближения.

2.3.3 Метод Монте-Карло с марковскими цепями (Markov Chain Monte Carlo)

Теперь перейдём к решению полноценной статистической задачи, используя метод, описанный в предыдущем разделе, как первое прибли-

жение.

Запишем сначала теорему Байеса в общем виде, учитывая, что наблюдаемыми значениями является сигнал \vec{s} , а неизвестными параметрами, которые задают распределение наблюдаемых – \vec{n} :

$$P(\vec{n}|\vec{s}) = \frac{P(\vec{s}|\vec{n}) P(\vec{n})}{P(\vec{s})} \quad (2.4)$$

Поясним вероятности, входящие в выражение:

1. $P(\vec{n}|\vec{s})$ – искомое *апостериорное* распределение, описывающее (в байесовском определении вероятности) наши знания о \vec{n} после проведения измерений
2. $P(\vec{s}|\vec{n}) \equiv \mathcal{L}(\vec{s}, \vec{n})$ – функция правдоподобия, описывающая, насколько вероятна регистрация определённых значений \vec{s} при заданных параметрах \vec{n}
3. $P(\vec{n}) \equiv \pi(\vec{n})$ – *априорное* распределение \vec{n} , не требующее знаний о конкретном выходном сигнале
4. $P(\vec{s})$ – полная вероятность регистрации данного сигнала при всех возможных значениях \vec{n} . Она также называемая маргинальной вероятностью или нормировочным множителем, по определению $P(\vec{s}) = \int_{\infty} P(\vec{s}|\vec{n}) P(\vec{n}) d\vec{n}$. Эту величину можно использовать для сравнения моделей, например, если бы мы имели в распоряжении альтернативную модель генерации значений \vec{s} и хотели бы понять, какая из двух лучше описывает данные. Однако для поставленной задачи нет нужды ни вычислять, ни даже учитывать этот множитель.

Учитывая введённые обозначения, запишем

$$P(\vec{n}|\vec{s}) \propto \mathcal{L}(\vec{s}, \vec{n}) \pi(\vec{n}) \quad (2.5)$$

Выбор априорного распределения

В качестве априорного распределения будем использовать неограниченное равномерное, или *неинформативное* распределение. Методы байесовской статистики работают даже в ситуации, когда у нас нет вообще никакой информации о распределении \vec{n} до начала измерений. Формально для этого нужно положить $\pi(\vec{n}) = \text{Const} \forall \vec{n}$. Такое распределение

нельзя использовать напрямую, поскольку его невозможно отнормировать на 1. Однако тогда в выражении 2.5 можно просто исключить $\pi(\vec{n})$ из правой части.

TBD Пуассоновское априорное распределение. Базовое предположение задачи – фотонный шум на входе нескоррелирован, а значит, приводит к пуассоновскому распределению \vec{n} . Для реального сигнала параметр λ можно оценить грубым методом, описанным в разделе 2.3.2 на достаточно большом числе отсчётов в области отсутствия сигнала. Пока же мы можем положить, что нам точно известен параметр λ для фотонов на входе. Заметим, что это априорное распределение справедливо также и в области, где мы стремимся найти сигнал. В этом случае

Функция правдоподобия

Функция правдоподобия $\mathcal{L}(\vec{s}, \vec{n})$ определяется как вероятность того, что данный сигнал \vec{s} получился в результате преобразования системой входного сигнала \vec{n} .

Опишем сначала Монте-Карло метод оценки правдоподобия, и затем введём упрощения, которые позволят эффективнее вычислять эту функцию, а также обоснуем корректность этих упрощений.

Полное вычисление функции правдоподобия методом Монте-Карло

Идейно наиболее простой метод состоит в прямой оценке $\mathcal{L}(\vec{s}, \vec{n})$ методом Монте-Карло. При фиксированных \vec{n} необходимо смоделировать выборку из большого числа реализаций случайной величины \vec{S} , а затем оценить плотность вероятности в точке \vec{s} по этой выборке.

Существует несколько методов для такой оценки, самый простой из которых – многомерная гистограмма. Для этого пространство реализаций \vec{S} делится на ячейки, подсчитывается число элементов выборки, попавших в каждую ячейку, делится на общее число элементов выборки и на объём ячейки. Нетрудно видеть, что полученное число как раз и даёт оценку плотности вероятности в произвольной точке – и, с точки зрения нашей задачи, искомую оценку функции правдоподобия.

Эффективная реализация алгоритма оценки n -мерной функции плотности вероятности дана в приложении ! **TBD** !, алгоритм аналогичен пакету MEPDF в языке R [2].

Однако оказывается, что для поставленной задачи метод прямого вычисления функции правдоподобия плохо годится из-за «проклятия размерности». Размерность пространства, в котором нужно оценить эмпирическую функцию плотности вероятности, равна ширина окна, в котором рассматривается входной сигнал. Соответственно, общее число N -мерных бинов составляет g^N , где g – мощность бинирования каждого отсчёта. В этой ситуации для надёжной оценки придётся генерировать выборку сравнимого объёма.

Поэтому вместо прямого использования описанного метода аппроксимируем распределение \vec{S} более доступной к вычислению формой.

Аппроксимация $\mathcal{L}(\vec{S})$ многомерным нормальным распределением

Частные распределения Из общих соображения ясно, что распределение $S_j \forall j$ будет более или менее близко к нормальному просто в силу того, что каждая из этих величин является суммой независимых вкладов от фотонов в предыдущих бинах. Также из общих соображений можно сказать, что *чем меньше среднее число фотонов в бине, тем хуже будет аппроксимация нормальным распределением*. На рис. 2.4 приведены несколько распределений «лучшего», «медианного» и «худшего» распределений S_j для нескольких значений среднего число фотонов в бине $\bar{n} \equiv \mathbb{E} n_i$. Из предварительного анализа и независимых соображений известно, что менее 5 фотонов на бин – весьма нечастая ситуация в экспериментальных данных – но даже в этом случае видно, что самое существенное отклонение плотности распределения от гауссианы не превышет 7%. Таким образом, *частное распределение* каждой компоненты вектора \vec{S} можно приблизить нормальным распределением с эффективной погрешностью в несколько процентов для практически значимых случаев.

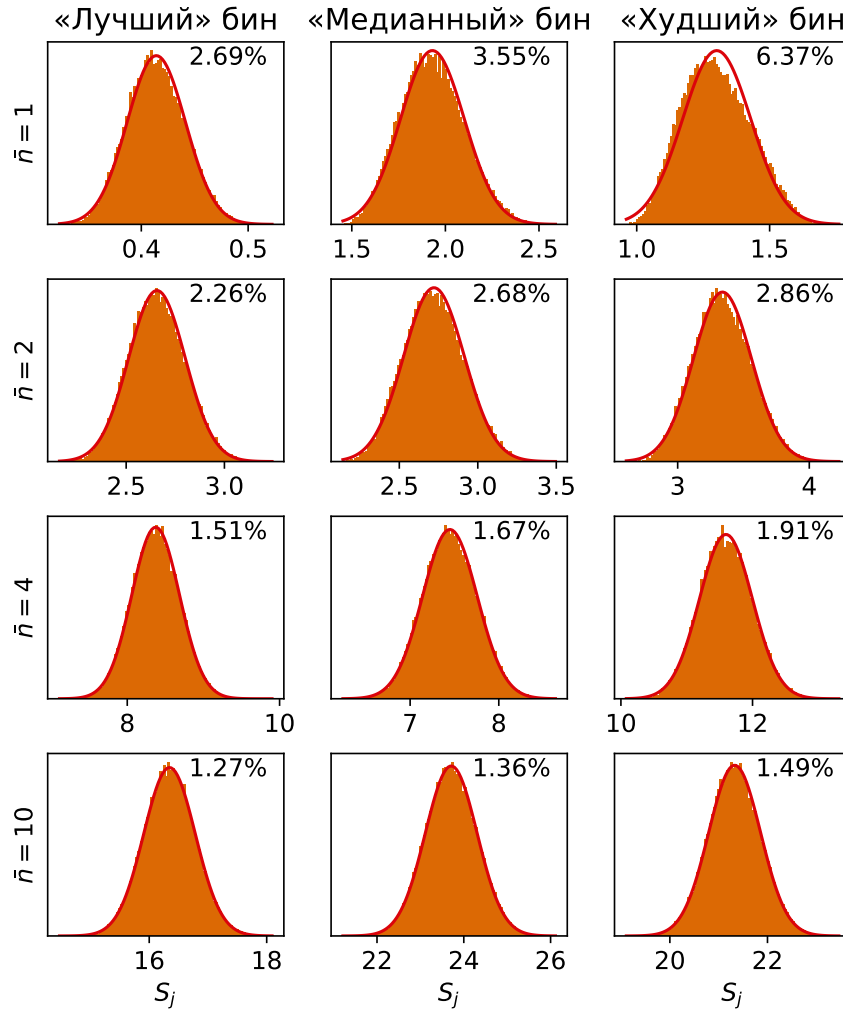


Рис. 2.4: Оценка нормальности частных распределений компонент \vec{S} для разных интенсивностей входного потока: от экстремально низких 1 и 2 до средней ожидаемой 10. «Лучший», «медианный» и «худший» бины определены по квадрату разницы выборочного среднего и медианы – то есть по простой оценке асимметрии распределения. На каждом графике построена аппроксимация гауссианой с соответствующими μ и σ , а также приведено среднеквадратичное отклонение гистограммы от гауссианы в процентах относительно пикового значения.

Полное $(N - L)$ -мерное распределение Описанная процедура для полного многомерного распределения представляет собой непростую задачу, поэтому ограничимся здесь визуальным исследованием двумерных распределений пар значений в отсчётах, разделённых не более чем L бинами (из постановки задачи ясно, что на больших расстояниях S_j являются независимыми). На рис. 2.5 представлены такие распределения. Видно, что двумерные распределения представляют собой овалы правильной симметричной формы. Таким образом, можно положить, что *распределение вектора \vec{S} можно приблизить многомерным нормальным распределением*. Можно также сказать, что мы можем описывать \vec{S} как выборку из *гауссова процесса*.

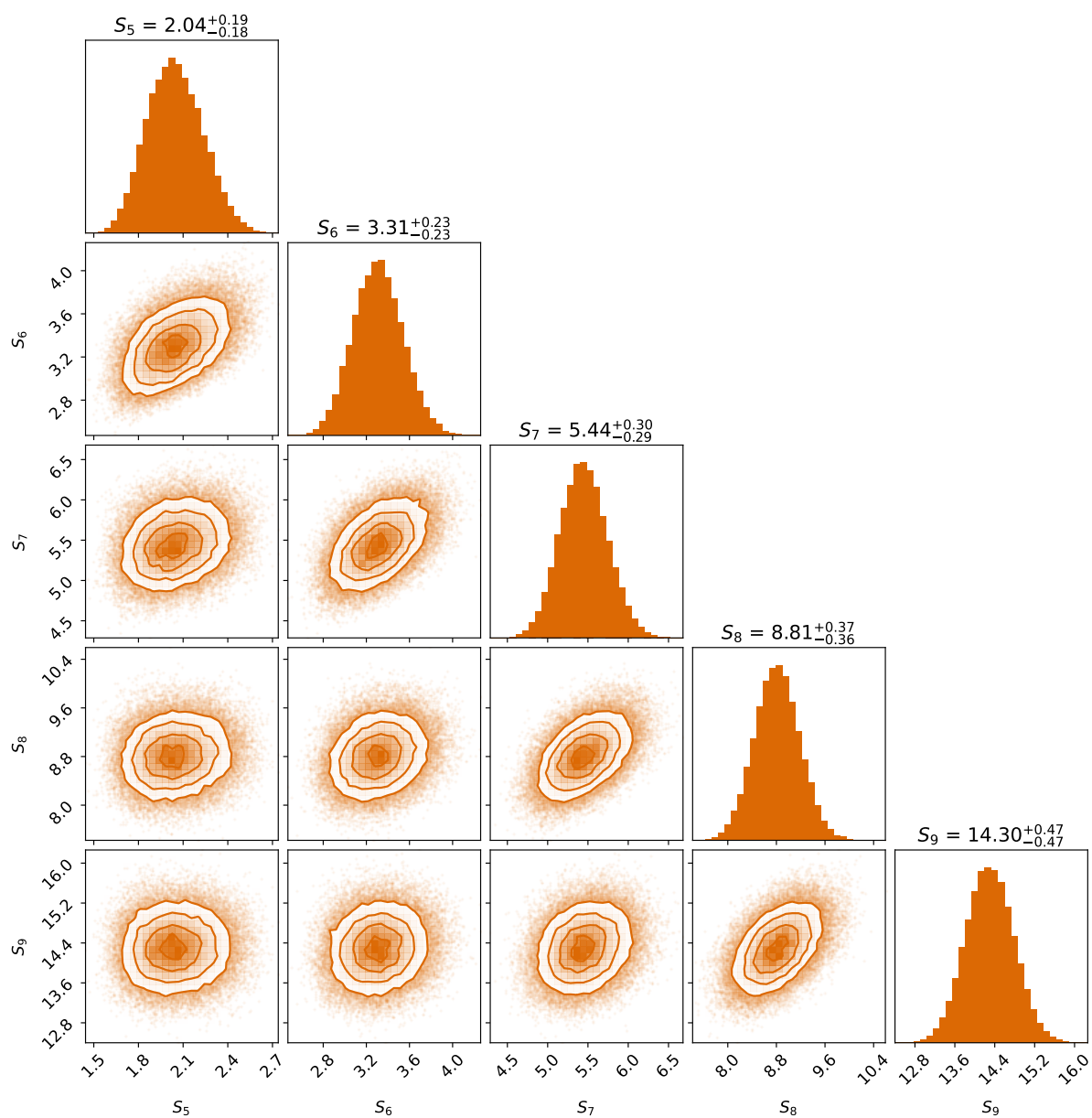


Рис. 2.5: Оценка нормальности совместных двумерных распределений для пар компонент \vec{S} . График построен с помощью библиотеки corner [1].

Эффективное вычисление аппроксимации \mathcal{L}

TBD :)

Список литературы

- [1] Daniel Foreman-Mackey. “corner.py: Scatterplot matrices in Python”. в: *The Journal of Open Source Software* 1.2 (июнь 2016), с. 24. DOI: 10.21105/joss.00024.
- [2] Martin Wiegand и Saralees Nadarajah. “MEPDF: Multivariate empirical density functions”. в: *Communications in Statistics - Simulation and Computation* 50.2 (январь 2019), с. 367—375. DOI: 10.1080/03610918.2018.1554118.