

МИНОБРНАУКИ РОССИИ

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования

«Ярославский государственный университет им. П.Г. Демидова»

Кафедра математического анализа

Сдано на кафедру
«5» июня 2024 г.
Заведующий кафедрой
д. ф.-м. н.
_____ Невский М. В.

Курсовая работа

Восстановление треков заряженных частиц по данным
электромагнитного калориметра

направление подготовки
01.03.02 Прикладная математика и информатика

Научный руководитель
_____ Алексеев В.В.
«5» июня 2024 г.

Студент группы ПМИ-33БО
_____ Нехаенко П.А.
«5» июня 2024 г.

Ярославль, 2024г.

Содержание

1	Введение.	2
2	Постановка задачи.	3
3	Целевая функция.	3
4	Итеративное решение задачи оптимизации.	4
5	Параметризация и восстановление 3D-траектории.	6
6	Заключение.	7
	Список литературы	8

1 Введение.

В данной работе рассматривается задача реконструкции трехмерного распределения энерговыделений в калориметре на основе измерений в двух проекциях. Калориметр предназначен для регистрации энерговыделений заряженных частиц, проходящих через его структуру. Частицы, взаимодействуя с материалом калориметра, либо ионизируют его и продолжают своё движение, либо вступают в реакции с веществом, порождая вторичные частицы, что обычно сопровождается более значительным энерговыделением. Считывание информации о энерговыделениях осуществляется отдельно в двух проекциях, что создаёт ограниченное количество данных для полноценной трёхмерной реконструкции.

Задача состоит в восстановлении трехмерного распределения размерности $22 \times 96 \times 96$ на основе двух двумерных проекций размерности 22×96 , 22×96 . Основные трудности заключаются в недоопределенности задачи — количество имеющихся уравнений значительно меньше количества неизвестных, что делает задачу недоопределенной и некорректной. Более того, раздельное считывание энерговыделений в разных проекциях приводит к отсутствию прямого соответствия между данными, что создаёт дополнительные трудности при решении задачи реконструкции.

Для решения этой проблемы предлагается использовать априорную информацию, полученную как из экспериментальных данных, так и из модельных данных, характеризующих энерговыделение в калориметре. Экспериментальные данные предоставляют возможность эмпирической проверки подходов, однако истинное распределение неизвестно, что затрудняет оценку качества восстановления.

Планируемый подход включает методы оптимизации и регуляризации для решения задачи реконструкции. Задача может быть решена с использованием методов оптимизации, которые включали мягкие ограничения и минимизацию целевой функции. Также рассматриваются алгебраические методы реконструкции, позволяющие эффективно восстановить трёхмерную картину энерговыделений в условиях ограниченной доступности проекционных данных.

Таким образом, целью данной работы является разработка и анализ методов восстановления трехмерного распределения энерговыделений в калориметре на основе двух проекций, с применением различных подходов к регуляризации и оптимизации, что позволит обеспечить максимально возможную точность при наличии неполных данных.

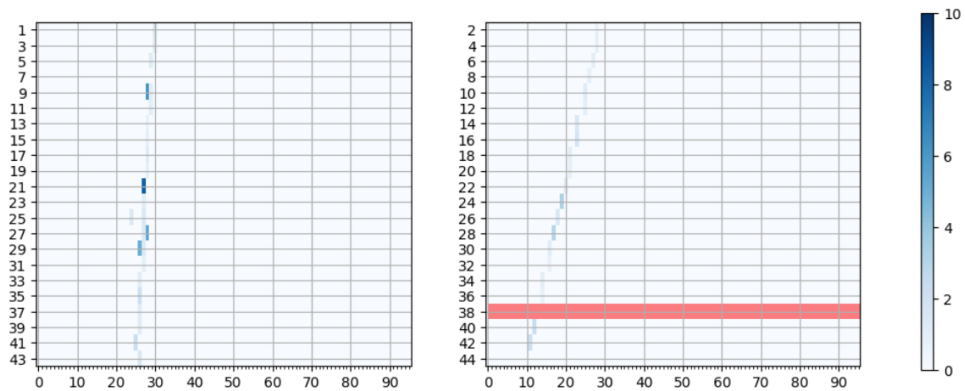


Рис. 1: Изображение проекций калориметра.

2 Постановка задачи.

Необходимо восстановить трёхмерное распределение энерговывделений в калориметре размером $22 \times 96 \times 96$, используя данные, представленные в виде двух двумерных проекций 22×96 , 22×96 . Это задача является недоопределённой, так как число неизвестных значительно превышает число имеющихся уравнений.

Формально задача реконструкции ставится следующим образом: необходимо найти трёхмерное распределение x_{ijk} , которое удовлетворяет следующим условиям:

$$\begin{cases} \sum_i x_{ijk} = c_{jk}, & \forall j, k, \\ \sum_j x_{ijk} = d_{ik}, & \forall i, k, \\ x_{ijk} \geq 0, & \forall i, j, k \end{cases} \quad (1)$$

где $i \in 1, \dots, I$, $j \in 1, \dots, J$, $k \in 1, \dots, K$ - представляют размеры матриц, которые используются для построения трехмерного распределения x_{ijk} .

I - это проекция, связанная с осью, для которой используется у-проекция. Это соответствует числу элементов в первом измерении матрицы энерговывделений. Это ось, связанная с вертикальным направлением калориметра (по данным проекции). J - это проекция, связанная с осью, для которой используется х-проекция. Это соответствует числу элементов во втором измерении матрицы энерговывделений. K - количество сегментов вдоль оси глубины калориметра. В данном случае это количество элементов вдоль третьего измерения трёхмерной матрицы. Эта ось связана с глубиной проникновения частицы в калориметр, или количеством сегментов в направлении движения частицы.

3 Целевая функция.

Целевая функция $f(x)$ состоит из двух основных компонент — ошибки по проекции c_{jk} и ошибки по проекции d_{ik} , которые выражаются как суммы квадратов отклонений между измеренными и восстановленными значениями.

Целевая функция имеет вид:

$$f(x) = \sum_{j=1}^J \sum_{k=1}^K \left(\sum_{i=1}^I x_{ijk} - c_{jk} \right)^2 + \sum_{i=1}^I \sum_{k=1}^K \left(\sum_{j=1}^J x_{ijk} - d_{ik} \right)^2 \quad (2)$$

Первая часть целевой функции:

$$\sum_{j=1}^J \sum_{k=1}^K \left(\sum_{i=1}^I x_{ijk} - c_{jk} \right)^2 \quad (3)$$

отвечает за отклонение между рассчитанными суммами энерговывделений вдоль оси X измеренной проекцией c_{jk} . Сумма по индексу i даёт оценку общей энергии, накопленной вдоль оси глубины для каждой пары индексов j и k . Это слагаемое минимизирует разницу между восстановленным распределением и измеренной проекцией, что позволяет учитывать данные стрипов, расположенных вдоль соответствующего направления. Можно сказать, что данную часть целевой функции можно обозначить, как ошибку по проекции c_{jk} :

$$error_c = \sum_{j=1}^J \sum_{k=1}^K \left(\sum_{i=1}^I x_{ijk} - c_{jk} \right)^2 \quad (4)$$

Вторая часть целевой функции:

$$\sum_{i=1}^I \sum_{k=1}^K \left(\sum_{j=1}^J x_{ijk} - d_{ik} \right)^2 \quad (5)$$

отвечает за отклонение между рассчитанными суммами энерговывделений вдоль оси Y и измеренной проекцией d_{ik} .

Здесь сумма по индексу j даёт оценку общей энергии вдоль другого направления, что помогает согласовать восстановленное распределение с данными стрипов, ориентированных вдоль другой оси калориметра. То есть данную часть целевой функции можно обозначить, как ошибку по проекции d_{ik} :

$$error_d = \sum_{j=1}^J \sum_{k=1}^K \left(\sum_{i=1}^I x_{ijk} - c_{jk} \right)^2 \quad (6)$$

После данных пояснений и нововведений мы можем скорректировать нашу целевую функцию:

$$f(x) = error_c + error_d = \sum_{j=1}^J \sum_{k=1}^K \left(\sum_{i=1}^I x_{ijk} - c_{jk} \right)^2 + \sum_{i=1}^I \sum_{k=1}^K \left(\sum_{j=1}^J x_{ijk} - d_{ik} \right)^2 \quad (7)$$

4 Итеративное решение задачи оптимизации.

Данная задача имеет больше неизвестных, чем уравнений, и включает физические ограничения, такие как неотрицательность энерговыделений, поэтому было необходимо использовать итеративный подход, который позволяет постепенно находить оптимальное решение. Для этой цели использовался метод доверительного региона, известный своей устойчивостью и способностью справляться с нелинейными ограничениями.

Начальные условия: формирование исходного распределения

Оптимизационный процесс начинается с выбора начальных условий, которые играют важную роль в эффективности поиска решения. В данной работе начальное приближение x_0 было выбрано как равномерное распределение:

$$x_0 = \{1, 1, \dots, 1\}, \quad x_0 \in \mathbb{R}^{I \times J \times K}$$

Выбор единичных значений для всех элементов x_{ijk} обеспечил ненулевые начальные данные, что помогло избежать возможных проблем с застреванием алгоритма в начальной нулевой точке. При использовании оптимизации начальное приближение играет роль "отправной точки", от которой алгоритм начинает искать наилучшее распределение, постепенно корректируя значения переменных на каждом шаге.

Ограничения и реализация физических условий

Поскольку энерговыделение не может быть отрицательным, необходимо было ввести ограничение на значения x_{ijk} :

$$x_{ijk} \geq 0, \quad \forall i, j, k.$$

Для этой цели в функции *minimize* использовался параметр *bounds*, который обеспечивал физически реалистичные значения энерговыделений. Это ограничение позволяло избежать некорректных решений, которые не имеют физического смысла в контексте задачи.

Алгоритм оптимизации: метод доверительного региона

Основной метод, использованный для решения задачи, — это *trust – constr* (метод доверительного региона), который является одним из мощных инструментов для оптимизации в условиях ограничений. Основная идея метода заключается в создании локального аппроксимирующего "доверительного региона", в котором строится модель целевой функции, которой оптимизатор "доверяет". На каждой итерации строится квадратичная аппроксимация функции, и оптимизатор решает локальную задачу в этом регионе, постепенно обновляя значение.

Основная идея метода заключается в поиске такого вектора x , который минимизирует целевую функцию, с учётом ограничений:

$$x = \arg \min f(x), \text{ при } x_{ijk} \geq 0, \forall i, j, k$$

Преимущества метода *trust – constr* заключаются в:

1. **Устойчивости к сложным условиям:** метод хорошо справляется с ситуациями, когда целевая функция может быть нелинейной и не всегда гладкой.
2. **Контролируемость шагов:** если на каком-то шаге аппроксимирующая модель оказывается неэффективной, "доверительный регион" корректируется, что позволяет избежать слишком больших шагов и улучшает общую сходимость.

Процесс оптимизации: Итерации и критерии остановки

Мы можем выделить несколько шагов оптимизации:

1. **Инициализация и первая итерация:** оптимизатор начинает с оценки целевой функции для начального распределения. На основе этой оценки строится линейная модель для первой итерации.
2. **Обновление решения:** в ходе каждой итерации метод изменяет значения x_{ijk} в рамках доверительного региона, чтобы минимизировать целевую функцию $f(x)$. После каждого изменения проводится проверка, насколько улучшилась целевая функция и насколько эффективен данный шаг.
3. **Динамическое изменение региона:** если выбранный шаг приводит к улучшению значений целевой функции, "доверительный регион" увеличивается, что позволяет ускорить сходимость. Если улучшение отсутствует, регион уменьшается, чтобы метод мог искать более глубоко.
4. **Проверка сходимости:** оптимизация продолжалась до достижения заданной точности (параметр *gtol*, который определяет градиентный критерий остановки) или достижения максимального количества итераций (*maxiter*). Это предотвращало бесконечные вычисления и ограничивало процесс поиска в условиях, когда дальнейшие улучшения были незначительными.

После выполнения поиска наши итоговые данные хранятся в переменной *res*. В *res* хранятся следующие данные: статус успешности оптимизации (*success*), оптимальное значение переменной (*x*), значение целевой функции в найденной точке (*fun*), сообщение о статусе завершения (*message*), количество выполненных итераций (*nit*), числовой код завершения (*status*), значение градиента в найденной точке (*jac*), аппроксимированная инвертированная гессианская матрица (*hessinv*).

```
res1
[20]:
      message: 'gtol' termination condition is satisfied.
      success: True
      status: 1
      fun: 8.198768922744113
      x: [ 2.000e-03  2.000e-03 ...  2.000e-03  2.000e-03]
      nit: 73
      nfev: 345069
      njev: 69
      nhev: 0
      cg_niter: 1046
      cg_stop_cond: 4
      grad: [ 8.001e-02  8.001e-02 ...  8.001e-02  8.001e-02]
      lagrangian_grad: [ 9.454e-11  9.477e-11 ...  9.430e-11  9.466e-11]
      constr: [array([ 2.000e-03,  2.000e-03, ...,  2.000e-03,
                    2.000e-03])]
      jac: [<Compressed Sparse Row sparse matrix of dtype 'float64'
            with 5000 stored elements and shape (5000, 5000)>]
      constr_nfev: [0]
      constr_njev: [0]
      constr_nhev: [0]
      v: [array([-8.001e-02, -8.001e-02, ..., -8.001e-02,
                -8.001e-02])]
      method: tr_interior_point
      optimality: 8.456517108860041e-05
      constr_violation: 0.0
      execution_time: 29.527947902679443
      tr_radius: 214375.00000000434
      constr_penalty: 1.0
      barrier_parameter: 0.00016000000000000007
      barrier_tolerance: 0.00016000000000000007
      niter: 73
```

Рис. 2: Итоговые значения работы алгоритма.

Так же мы можем узнать, что находится в логах *minimize*. В логах хранится следующая информация, которая помогает анализировать корректность работы алгоритма: условие завершения оптимизации (*gtol*), количество итераций (*Number of iterations*), количество вызовов функции (*function evaluations*), количество итераций сопряжённого градиента (*CG iterations*), оптимальность (*optimality*), нарушение ограничений (*constraint violation*), время выполнения (*execution time*). В нашем случае:

```
'gtol' termination condition is satisfied.
Number of iterations: 73, function evaluations: 345069, CG iterations: 1046, optimalit
y: 8.46e-05, constraint violation: 0.00e+00, execution time: 3e+01 s.
Решение найдено
```

Рис. 3: Логи работы алгоритма.

5 Параметризация и восстановление 3D-траектории.

После успешного восстановления трёхмерного распределения энерговывделений x_{ijk} . в калориметре необходимо использовать полученные данные для визуализации трека частицы. Восстановление трёхмерной траектории частицы позволяет увидеть, как частица двигалась через калориметр, и исследовать характеристики её взаимодействия с материалом детектора. В данной задаче для восстановления траектории используются известные начальные параметры движения частицы, такие как углы θ , ϕ , начальные координаты X_0 , Y_0 , и конечная координата Z_{end} .

Параметризация трека

Для того чтобы восстановить траекторию частицы, необходимо описать её движение в трёхмерном пространстве с помощью параметризации. В данной работе параметризация основана на использовании параметра $t \in [0, Z_{end}/\cos(\theta)]$, который описывает положение частицы вдоль траектории:

1. **Углы движения:** : сначала исходные углы θ , ϕ , которые определяют направление движения частицы, переводятся в радианы:

$$\theta_{rad} = \frac{\pi}{180} \times \theta, \quad \phi_{rad} = \frac{\pi}{180} \times \phi$$

2. **Полученные данные после работы алгоритма:** распределение x_{ijk} было использовано для описания интенсивности взаимодействий частицы в различных точках трека. Для этого была рассчитана средняя интенсивность по осям i , j в каждом слое калориметра:

$$sizes(t) = \frac{1}{I \times J} \sum_{i=1}^I \sum_{j=1}^J x_{ijk}(t)$$

где t представляет различные шаги параметризации вдоль оси Z . Величина описывает среднее энерговывделение в каждом слое и используется для визуализации размера и цвета точек на треке частицы, что даёт более полное представление о процессе взаимодействия.

3. **Параметризация координат:** с помощью параметра t были восстановлены трёхмерные координаты траектории $X(t)$, $Y(t)$, $Z(t)$:

$$X(t) = X_0 + t \times (Z_{end} - X_0) \times \sin(\theta_{rad}) \times \cos(\phi_{rad})$$

$$Y(t) = Y_0 + t \times (Z_{end} - Y_0) \times \sin(\theta_{rad}) \times \sin(\phi_{rad})$$

$$Z(t) = t \times \cos(\theta)$$

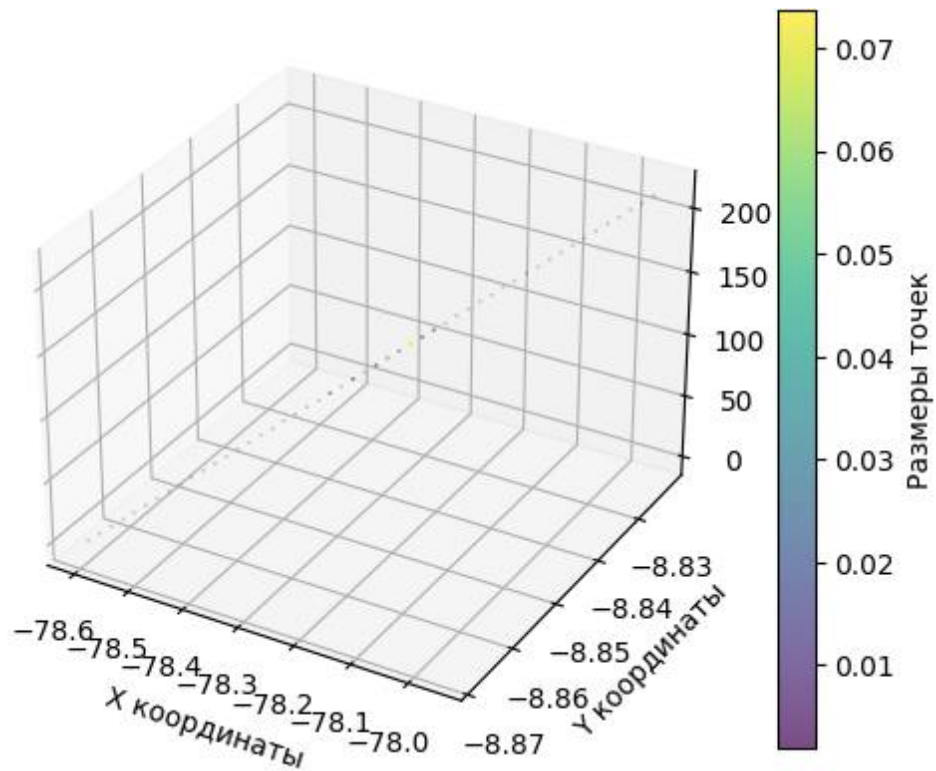


Рис. 4: Трёхмерная визуализация полёта частицы.

6 Заключение.

В работе решена задача реконструкции трёхмерного распределения энерговыделений в калориметре на основе двух проекций. Применение оптимизации позволило найти физически обоснованное распределение, согласующееся с измеренными данными, и построить 3D модель траектории частицы. Подход показал свою эффективность даже при ограниченности данных, что открывает перспективы для дальнейших улучшений.

Список литературы

- [1] Иванов В. К., Васин В. В., Танана В. П. Теория линейный некорректных задач и ее приложения // Академия Наук СССР // Уральский Научный центр. Институт Математики и Механики. 1978.
- [2] Тихонов А. Н., Арсенин В. Я. Методы решения некорректных задач // Наука. Главная редакция физико-математической литературы. 1979.
- [3] Поляк Б. Т. Введение в оптимизацию// Наука. Главная редакция физико-математической литературы. 1983.