

DOI:10.22144/ctu.jsi.2020.101

SỬ DỤNG CÁC HÀM PHÂN BỐ GAUSS ĐỂ MIÊU TẢ HÀM PHÂN BỐ MẬT ĐỘ XÁC SUẤT CỦA TÁN XẠ NHIỀU LẦN

Nguyễn Duy Thông*

Khoa Vật lý - Vật lý Kỹ thuật, Trường Đại học Khoa học Tự nhiên, ĐHQG-HCM

*Người chịu trách nhiệm về bài viết: Nguyễn Duy Thông (email: ngdthong@hcmus.edu.vn)

Thông tin chung:

Ngày nhận bài: 04/03/2020

Ngày nhận bài sửa: 15/05/2020

Ngày duyệt đăng: 29/06/2020

Title:

Using Gaussian functions to describe the probability density function of multiple scattering angle

Từ khóa:

Gaussian distribution, g4beamline, Kullback-Leibler, multiple scattering

Keywords:

Gaussian, g4beamline, Kullback-Leibler, tán xạ nhiều lần

ABSTRACT

Multiple scattering is being considered as a main reason of leading to statistical errors in position finding of incoming particles. A probability density function (PDF) of multiple scattering angles plays an important role in track-fitting of high energy physics experiments. Nowadays, the track-fitting codes in high energy physics experiments with Gaussian-PDF of multiple scattering angles are being used. That makes many errors in the track-fitting. In order to understand deeply about multiple scattering angle distribution, in this article, interaction between particles and material to estimate the PDF of the multiple scattering angles by using g4beamline simulation code was done. Base on calculation χ^2 and Kullback-Leibler distance, number of Gaussian functions to describe the PDF was determined.

TÓM TẮT

Tán xạ nhiều lần được xem là nguyên nhân chính dẫn đến các sai số trong việc xác định vị trí của các hạt tới trong thực nghiệm. Hàm phân bố mật độ xác suất của góc tán xạ nhiều lần đóng vai trò quan trọng trong quá trình làm khớp các số liệu thực nghiệm. Hiện nay, nhiều công trình vẫn đang sử dụng hàm phân bố mật độ xác suất của góc tán xạ nhiều lần tuân theo phân bố Gauss. Điều này dẫn đến các sai số trong quá trình làm khớp. Để xác định hàm phân bố mật độ xác suất của góc tán xạ nhiều lần, trong bài báo này, mô phỏng tương tác của hạt tới để đạt được phân bố của góc tán xạ bằng chương trình g4beamline đã được tiến hành và dựa vào các tính toán χ^2 và hệ số Kullback-Leibler để xác định số hàm Gauss có thể được áp dụng để miêu tả hàm mật độ xác suất.

Trích dẫn: Nguyễn Duy Thông, 2020. Sử dụng các hàm phân bố Gauss để miêu tả hàm phân bố mật độ xác suất của tán xạ nhiều lần. Tạp chí Khoa học Trường Đại học Cần Thơ. 56(Số chuyên đề: Khoa học tự nhiên)(1): 134-140.

1 MỞ ĐẦU

Tương tác của một hạt nhân mang điện khi đi qua môi trường vật chất của đầu dò được xem là nguyên nhân chủ yếu dẫn đến sai số trong việc xác định vị trí của hạt đó. Nguyên nhân chủ yếu của

tương tác này là tương tác Coulomb giữa điện tích hạt tới và trường Coulomb xung quanh hạt nhân của môi trường vật chất. Kết quả của tương tác này dẫn đến hướng bay của hạt đến sẽ bị thay đổi. Góc tán xạ của tương tác này nhỏ và tuân theo phân bố Gauss

(Bethe, 1953). Tuy nhiên, do quá trình tán xạ nhiều lần, phân bố góc tán xạ sẽ không còn tuân theo một hàm Gauss thuần túy. Thay vào đó, góc tán xạ nhiều lần sẽ hình thành dạng phân bố Gauss kết hợp với hai đuôi dài Highland (1975) và Lynch and Dahl (1991) đã đưa ra độ lệch chuẩn gần đúng cho góc tán xạ nhiều lần được trình bày trong công thức sau:

$$q_0 = \frac{13,6MeV}{bcp} z \sqrt{\frac{x}{X_0} \left[1 + 0,038 \ln \frac{x}{X_0} \right]} \quad (1)$$

Trong công thức (1), θ_0 là góc tán xạ (rad), c là vận tốc ánh sáng, p (MeV/c) là động lượng của hạt tới, x là bề dày của vật liệu, X_0 là độ dài bức xạ, z là điện tích của hạt tới.

Hàm phân bố mật độ xác suất của góc tán xạ nhiều lần được chia thành hai hàm phân bố Gauss (Frühwirth and Liendl, 2001), các kết quả tính toán và mô phỏng tương đối miêu tả được phần lõi cũng như phần đuôi của phân bố góc tán xạ. Tuy nhiên, các công bố trên vẫn chưa miêu tả được chính xác hoàn toàn cũng như chưa đánh giá được độ chính xác khi thêm nhiều hàm Gauss.

Việc hiểu rõ hàm phân bố mật độ xác suất của góc tán xạ nhiều lần đóng vai trong quá trình làm khớp track-fitting trong thực nghiệm vật lý năng lượng cao. Mục đích của quá trình track-fitting nhằm tái tạo lại thông tin của hạt tới thông qua các số liệu thực nghiệm như vị trí của hạt tới được ghi nhận được bởi các đầu dò kết hợp với mô hình toán học nhằm đưa ra quỹ đạo của hạt tới đồng thời đưa ra các thông tin hạt như động lượng, loại hạt, hướng bay, ... Quá trình track-fitting sử dụng phương pháp nguyên lý cơ hội cực đại để xác định các tham số quan tâm.

Hiện nay, thuật toán Kalman filter (Fruhwith, 1987) đang được sử dụng rộng rãi trong track-

fitting. Đối với thuật toán Kalman filter, hàm phân bố mật độ xác suất tuân theo phân bố Gauss. Tuy nhiên, trong thực tế, hàm phân bố mật độ xác suất như vị trí của các hệ đầu dò không tuân theo hàm phân bố Gauss. Do đó, việc sử dụng thuật toán Kalman sẽ dẫn đến sự sai biệt trong quá trình track-fitting.

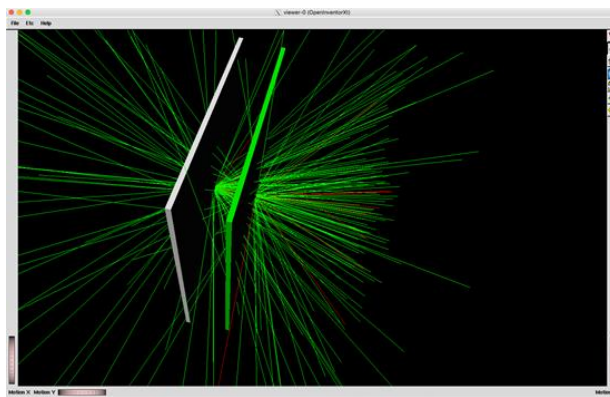
Thuật toán Gaussian sum filter (Fruthwirth, 1997) trong track-fitting với việc mở rộng hàm phân bố mật độ xác suất là sự tổng hợp nhiều hàm Gauss với trị trung bình, độ lệch chuẩn từng thành phần khác nhau với các trọng số nhất định. Việc mở rộng hàm phân bố mật độ xác suất sẽ miêu tả gần đúng với thực tế các phân bố.

Gần đây, nhiều công trình (Adam *et al*, 2005; Strandlee and Wroldsen, 2005) đã sử dụng thuật toán Gaussian Sum Filter với việc mở rộng phân bố mật độ xác suất của quá trình tán xạ nhiều lần và phân bố mật độ xác suất của năng lượng mất.

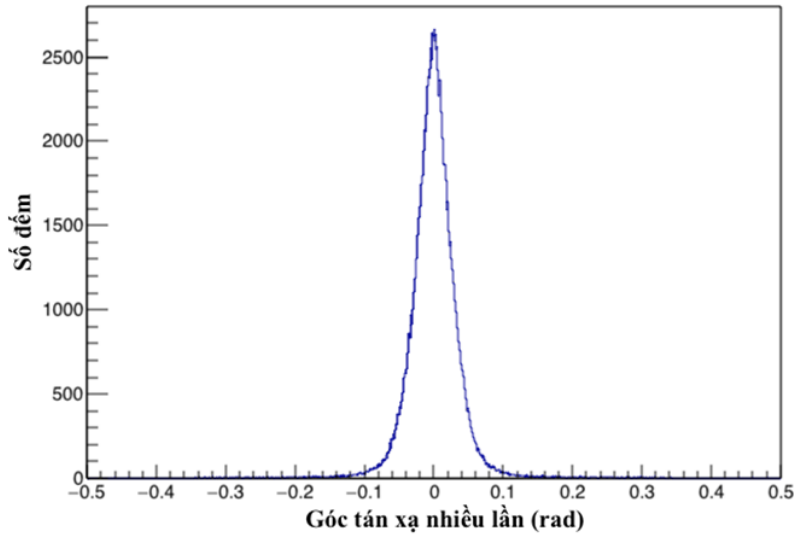
Với mục tiêu xử lý được phân bố của góc tán xạ nhiều lần, trong bài báo này, mô hình hoá hàm phân bố mật độ xác suất với với nhiều hàm Gauss và áp dụng đối với vật liệu nhôm với bề dày 5mm được tiến hành. Từ đó, đưa ra được dạng phân bố mật độ xác suất miêu tả tương đối hoàn chỉnh của phân bố góc tán xạ nhiều lần.

2 MÔ PHỎNG

Trong bài toán mô hình hoá hàm phân bố mật độ xác suất của góc tán xạ nhiều lần, chương trình mô phỏng g4beamline (Roberts, 2004) được sử dụng. Chùm 10^6 electron có động lượng 1,0 GeV/c được sử dụng để bắn qua bia nhôm có bề dày 5mm (rộng: 500mm và cao 500mm). Để thu được tín hiệu, virtualdetector được sử dụng có kích thước tương tự như kích thước bia nhôm. Hình 1 thể hiện quá trình mô phỏng bằng g4beamline và kết quả góc tán xạ nhiều lần thu được thể hiện trong Hình 2.



Hình 1: Hình ảnh mô phỏng bằng chương trình g4beamline

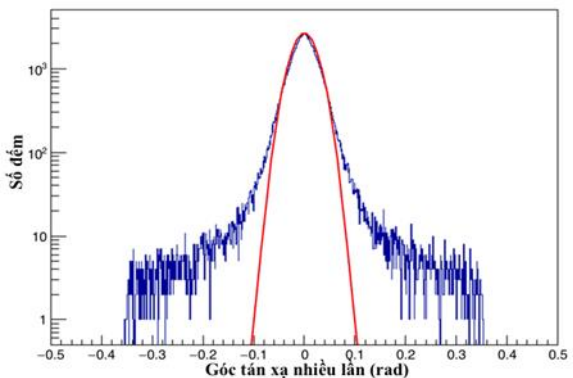
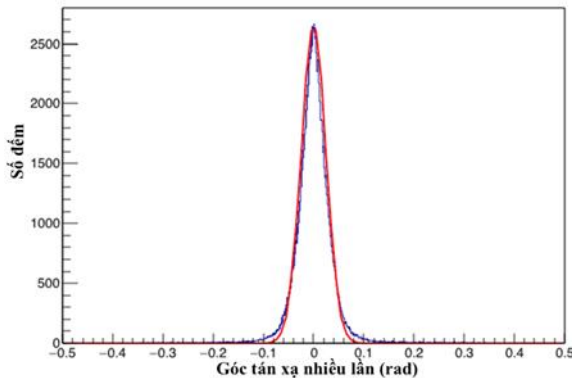


Hình 2: Phân bố góc tán xạ nhiều lần

3 MÔ HÌNH HOÁ PHÂN BỐ MẬT ĐỘ XÁC SUẤT CỦA GÓC TÁN XẠ NHIỀU LẦN

Để miêu tả phân bố mật độ xác suất của góc tán xạ nhiều lần, hàm Gauss đã được sử dụng. Hình ảnh

hàm phân bố khi làm khớp với một hàm Gauss thể hiện trong Hình 2.



Hình 3: Phân bố góc tán xạ nhiều lần với đường làm khớp một Gauss màu đỏ

Trong Hình 3, sử dụng một hàm Gauss để miêu tả phân bố góc tán xạ chưa đầy đủ. Sự khác biệt giữa hàm làm khớp và phân bố gây ra bởi đuôi của góc tán xạ nhiều lần. Tán xạ một lần tuân theo phân bố Gauss, tuy nhiên, khi các quá trình tán xạ xảy ra liên tiếp, các hàm phân bố sẽ bị cuộn lại với nhau, từ đó dẫn đến đuôi của góc tán xạ nhiều lần cao hơn trong hàm Gauss. Để giải quyết bài toán đuôi góc tán xạ nhiều lần, trong công trình về mô phỏng và tính toán cho góc tán xạ nhiều lần (Frühwirth and Liendl, 2001), các hàm Gauss khác đã được đưa thêm vào để miêu tả phân bố góc tán xạ : (i) một hàm Gauss với độ lệch chuẩn nhỏ để miêu tả phần lõi của quá trình, nguyên nhân từ quá trình tán xạ một lần và (ii) một hoặc nhiều hàm Gauss khác để miêu tả phần

đuôi của quá trình, nguyên nhân do chồng chập của nhiều lần tán xạ.

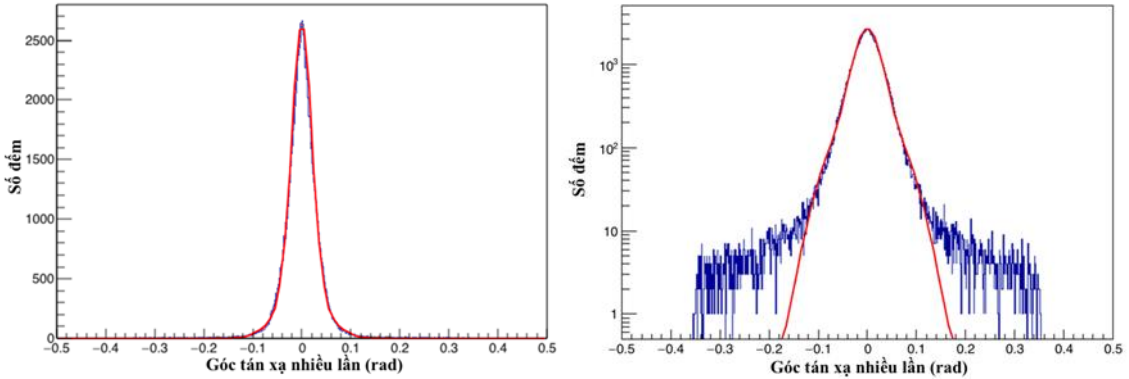
Hàm miêu tả với hai hàm Gauss có dạng như trong công thức (2)

$$f(\theta) = w_1 \times g(\theta, \mu, \sigma_1) + w_2 \times g(\theta, \mu, \sigma_2) \quad (2)$$

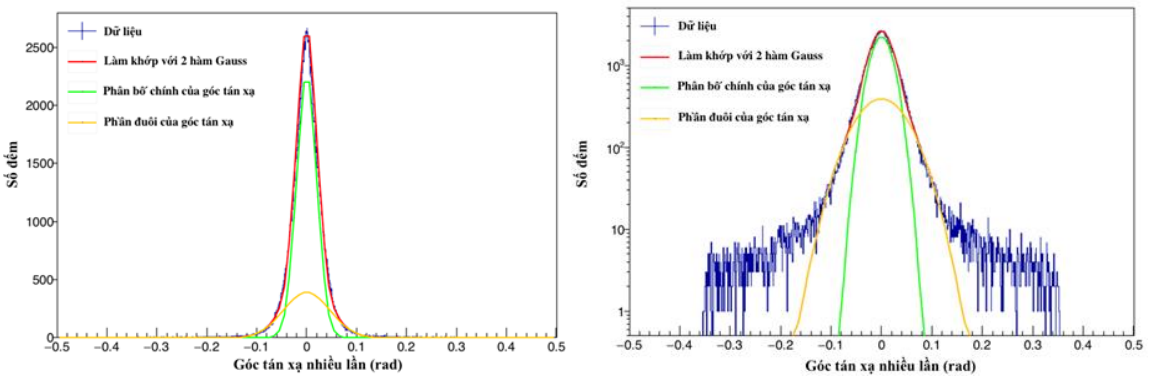
Trong công thức (2), w_1 và w_2 là các hệ số chuẩn hoá thoả điều kiện

$$w_1 + w_2 = 1 \quad (3)$$

$g(q, m_i, S_i)$ là hàm phân bố Gauss với σ_i là độ lệch chuẩn và trị trung bình của góc tán xạ $m_i = 0$



Hình 4: Phân bố góc tán xạ nhiều lần khi được làm khớp 2 hàm Gauss



Hình 5: Phân bố góc tán xạ nhiều lần khi được làm khớp với hai hàm Gauss với các thành phần

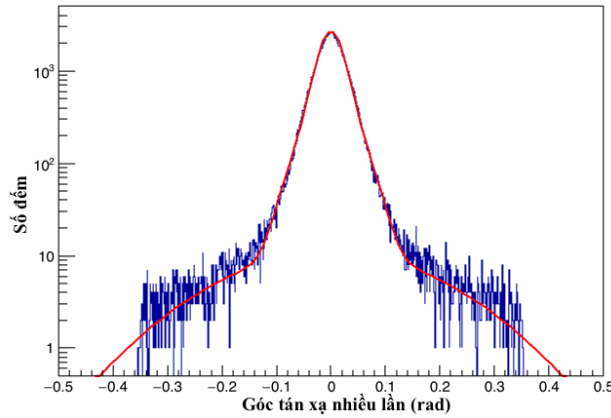
Khi sử dụng công thức số (2) để làm khớp số liệu của góc tán xạ nhiều lần, hàm phân bố có dạng như trong Hình 4 và Hình 5. So sánh các kết quả trong Hình 2 và Hình 3, góc tán xạ được miêu tả đầy đủ hơn khi sử dụng hai hàm Gauss so với khi sử dụng một hàm Gauss.

Tuy nhiên, trong Hình 4 và Hình 5, vẫn còn phần số liệu chưa khớp với hai hàm Gauss. Về mặt toán học, chúng ta có thể mở rộng công thức số (2) với nhiều hàm Gauss khác để miêu tả trọn vẹn phân bố của góc tán xạ nhiều lần.

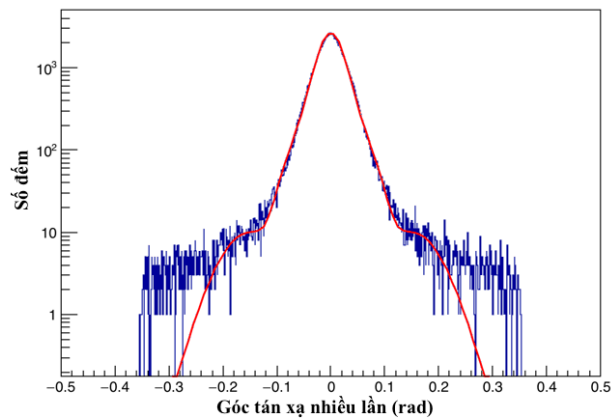
$$f(\theta) = \sum_{i=1}^{N_{\text{Gauss}}} w_i \times g(\theta, \theta, \sigma_i) \quad (4)$$

Trong công thức (4), w_i là trọng số ứng với hàm Gauss $g(\theta, \theta, \sigma_i)$ và N_{Gauss} là số hàm Gauss được sử dụng.

Áp dụng công thức (4), hàm phân bố với tổng hợp của ba và bốn hàm Gauss được thể hiện trong hình 6 và Hình 7. Trong Hình 6 và 7, hàm làm khớp tương đối phù hợp hơn số với khi sử dụng chỉ một hay hai hàm Gauss. Khi tăng số lượng hàm Gauss, hàm làm khớp sẽ miêu tả tốt thực phân bố của góc tán xạ nhiều lần. Tuy nhiên, việc sử dụng nhiều hàm Gauss sẽ dẫn đến việc tăng thời gian tính toán của máy tính cũng như xuất hiện cực trị địa phương.



Hình 6: Phân bố góc tán xạ nhiều lần khi được làm khớp với ba hàm Gauss



Hình 7: Phân bố góc tán xạ nhiều lần khi được làm khớp với bốn hàm Gauss

4 XÁC ĐỊNH SỐ HÀM GAUSS TRONG HÀM LÀM KHỚP

4.1 Giá trị χ^2

Trong quá trình làm khớp số liệu thực nghiệm, hệ số χ^2 được sử dụng để đánh giá khác biệt giữa thực nghiệm và giá trị được tính toán từ hàm làm khớp. Giá trị χ^2 được xác định bởi công thức:

$$\chi^2 = \sum_{i=0}^N \frac{(X - X_{\text{fit}})_i^2}{\sigma^2} \quad (5)$$

Trong công thức tính χ^2 (5), σ là độ lệch chuẩn và N là số hạt đến.

Chương trình làm khớp với số lượng làm khác nhau được viết dựa trên chương trình ROOT (CERN group, 1994). Trong ROOT, giá trị χ^2 được giá định bởi hàm có sẵn:

$$\chi^2 = \text{fitFunc} \rightarrow \text{GetChisquare}() \quad (6)$$

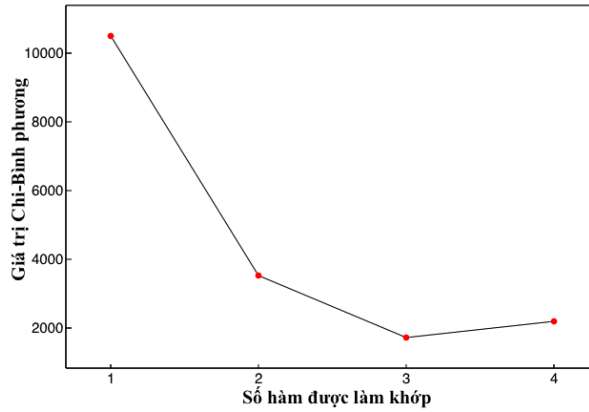
Trong bài báo này, tác giả sử dụng công thức (6) trong ROOT để lấy được giá trị của χ^2 .

Khi làm khớp với số lượng hàm khác nhau, giá trị χ^2 sẽ khác nhau. Bảng (1) thể hiện mối quan hệ giữa số lượng hàm làm khớp và giá trị χ^2 .

Bảng 1: Giá trị χ^2 ứng với số lượng hàm khác nhau

Số hàm Gauss	χ^2
1	10507,5
2	3530,1
3	1703,1
4	2195,4

Trong Bảng 1, khi tăng số lượng hàm lên thì giá trị χ^2 sẽ giảm dần. Điều này có nghĩa là giá trị thu được hàm làm khớp gần với giá trị từ mô phỏng. Việc tăng số lượng hàm sẽ giảm được giá trị của χ^2 nhưng khi số lượng hàm được sử dụng nhiều, cực đại hoá địa phương của quá trình làm khớp sẽ xuất hiện. Kết quả của việc này sẽ đến việc hiểu sai về quy luật của một hàm thống kê.



Hình 8: Miêu tả mối quan hệ giữa giá trị chi bình phương và số hàm được làm khớp

Trong Hình 8, giá trị χ^2 sẽ giảm dần khi tăng số hàm làm khớp. Tuy nhiên, khi sử dụng ba, bốn hàm để làm khớp, không có sự khác biệt lớn giữa các giá trị χ^2 . Điều này có thể hình dung khi tăng số hàm làm khớp, hiện tượng cực tiểu địa phương sẽ xuất hiện.

4.2 Hệ số hội tụ Kullback-Leibler

Trong thực tế, việc sử dụng nhiều hàm Gauss với các trọng số nhất định sẽ có thể miêu tả tốt được hàm phân bố góc tán xạ nhiều lần. Tuy nhiên, việc sử dụng nhiều hàm Gauss có thể dẫn đến việc bị cực trị hoá địa phương làm cho quy luật của quá trình không được tường minh. Hơn nữa, khi làm khớp với nhiều hàm Gauss sẽ tốn thời gian cho quá trình tính toán mà kết quả có thể không được cải thiện hơn.

Để đánh giá được sự trùng khớp giữa hàm làm khớp với thực tế, hệ số Kullback-Leibler (Frühwirth and Liendl, 2001) được sử dụng.

Hệ số Kullback-Leibler được định nghĩa như trong công thức (7):

$$D_{KL}(f \parallel g) = \int_{-\infty}^{+\infty} f(x) \log\left(\frac{f(x)}{g(x)}\right) dx \quad (7)$$

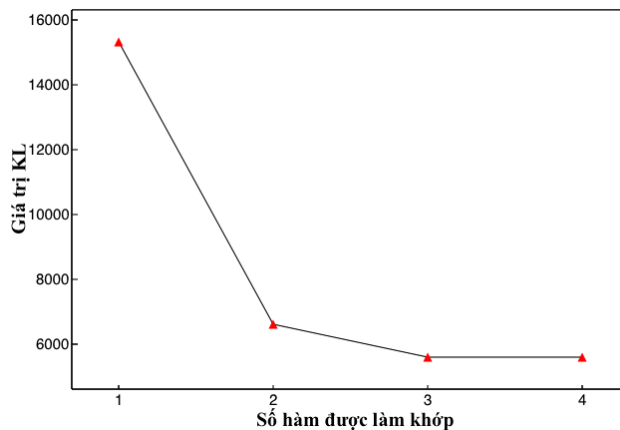
Trong công thức (7), $f(x)$ là một hàm đã biết rõ và $g(x)$ là một hàm xấp xỉ. Bằng cách xác định giá trị cực tiểu của hệ số D_{KL} , hàm $g(x)$ có thể được xác định.

Trong trường hợp các giá trị x là rời rạc, công thức (7) có thể được xấp xỉ gần đúng như sau:

$$D_{KL}(f \parallel g) = \sum_i f(x_i) \log\left(\frac{f(x_i)}{g(x_i)}\right) \quad (8)$$

Bảng 2 : Số liệu hệ số D_{KL} theo số lượng hàm được sử dụng trong làm khớp

Số hàm Gauss	Giá trị D_{KL}
1	15345,9
2	6606,9
3	5590,2
4	5579,0



Hình 9: Mối quan hệ giữa hệ số D_{KL} và số hàm được làm khớp

Hình 9 thể hiện mối quan hệ giữa hệ số KL và số hàm được sử dụng trong quá trình làm khớp. Từ Hình 9 và Bảng 2, không có sự khác biệt lớn khi tính giá trị KL. Về mặt toán học, giá trị KL ~ 0 là tối ưu, khi đó, hàm miêu tả phù hợp với các giá trị cần khảo sát. Tuy nhiên, rất khó để đạt được KL ~ 0 . Dựa vào Hình 9, vùng bão hoà của giá trị KL bắt đầu từ số lượng hàm 3. Khi đó, việc tăng thêm số lượng hàm sẽ không ảnh hưởng lớn đến giá trị KL.

5 KẾT LUẬN VÀ ĐÁNH GIÁ

Trong bài báo này, nghiên cứu về việc sử dụng mô hình toán học để miêu tả lại hàm phân bố mật độ xác suất của góc tán xạ thông qua việc kết hợp của nhiều hàm phân bố Gauss khác nhau với độ lệch chuẩn và trọng số tương ứng đã được tiến hành. Việc xác định được số lượng hàm cũng như các tham số liên quan đóng vai trò quan trọng trong quá trình track-fitting khi sử dụng thuật toán Gaussian Sum Filter.

Mô phỏng lại quá trình tán xạ bằng cách sử dụng hạt tới electron có động lượng là 1,0 GeV/c bắn vào bia nhôm với bề dày 5mm đã được thực hiện bằng chương trình g4beamline. Qua quá trình làm khớp, với ba hàm Gauss, hàm phân bố mật độ xác suất có thể được miêu tả tương đối đầy đủ.

Tuy nhiên, trong thực tế, năng lượng của hạt tới không đơn năng, do đó, việc mở sử dụng ba hàm Gauss để miêu tả hàm phân bố mật độ xác suất của góc tán xạ sẽ không hợp lý. Có thể áp dụng hoặc mở rộng thêm nhiều hàm phân bố Gauss khác để miêu tả toàn diện hơn.

LỜI CẢM ƠN

Nghiên cứu được tài trợ bởi Trường Đại học Khoa học Tự nhiên, ĐHQG-HCM trong khuôn khổ Đề tài mã số T2019-06.

TÀI LIỆU THAM KHẢO

- Bethe, H.A., 1953. Molière's Theory of Multiple Scattering. *Physical Review*, 89(6): 1256-1266.
- Highland, V. L., 1975. Some practical remarks on multiple scattering. *Nuclear Instruments and Methods*. 129(2): 497-499.
- Lynch, G. R. and Dahl, O. L., 1991. Approximations to multiple Coulomb scattering. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms*. 58: 6-10.
- Frühwirth, R. and Liendl, M., 2001. Mixture models of multiple scattering: computation and simulation. *Computer Physics Communications*. 141(2): 230-246.
- Fruhwith, R., 1987. Application of Kalman filtering to track and vertex fitting. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment*. 262(2-3): 444-450.
- Fruthwirth, R., 1997. Track fitting with non-Gaussian noise. *Computer Physics Communications*, 100(1-2):1-16.
- CERN group, 1994. ROOT, access on 18 November 2019. Available from <https://root.cern.ch/>
- Roberts, T., 2004. G4beamline, access on 18 November 2019. Available from <http://www.muonsinternal.com/muons3/G4beamline>
- Adam, W. R., Fruhwirth, R., Strandlie, A. and Todorov, T., 2005. Reconstruction of electrons with the Gaussian-sum filter in the CMS tracker at the LHC. *Journal of Physics G: Nuclear and Particle Physics*. 31: N9-N20.
- Strandlie, A. and Wroldsen, J., 2006. Treatment of non-Gaussian tails of multiple Coulomb scattering in track fitting with a Gaussian-sum filter. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A*. 559(1):158-161