Письма в ЖЭТФ, том 115, вып. 12, с. 745 – 752

Модификация регуляризационного SVD-метода обратной свертки

Ю. В. Богомолов[+*1)], В. В. Алексеев[+*], О. А. Леванова[+*], А. Г. Майоров[*], В. В. Малахов[*], С. Г. Язынин[+]

[+]Ярославский государственный университет им. П. Г. Демидова, 150003 Ярославль, Россия

[*]Национальный исследовательский ядерный университет МИФИ, 115409 Москва, Россия

Поступила в редакцию 22 апреля 2022 г.
После переработки 3 мая 2022 г.
Принята к публикации 4 мая 2022 г.

Обратная свертка (unfolding) сегодня является важным этапом обработки экспериментальных данных, позволяя снижать влияние погрешностей и восстанавливать приближенные к истинным распределения измеряемых физических величин. В настоящее время для решения этой задачи разработано много подходов, в том числе широко используемых в современной физике атомного ядра и элементарных частиц, космофизике и других смежных научных направлениях. Однако многие применяемые алгоритмы не предназначены или плохо адаптированы для восстановления многомерных распределений, когда, например, измеряются сразу несколько характеристик частиц. В работе предложен способ адаптации SVD-алгоритма обратной свертки на многомерный случай. Для проверки построенный модифицированный метод применен к данным моделирования спектра космических лучей, измеряемого в космофизическом эксперименте PAMELA. Метод не только позволил решить задачу восстановления оценки истинного распределения многомерной величины (импульс и два угла, определяющих направление входа частицы в прибор), но и показал лучший результат в сравнении с классическим SVD-подходом в одномерном случае (только импульс частицы).

DOI: 10.31857/S1234567822120011, EDN: imfewl

1. Введение. Экспериментальные возможности определения любой физической величины ограничены характеристиками используемой научной аппаратуры, и по этой причине получаемые непосредственно при измерениях рапределения принято называть приборными. Однако интерес для анализа и физических выводов представляют истинные распределения физических величин или, по крайней мере, их оценки. Отличия приборных и истинных спектров могут быть связаны с конечными энергетическим, угловым или пространственным разрешениями приборов, наличием шумов и других источников ложных или искаженных сигналов в научной аппаратуре. Знание подобных инструментальных эффектов и возможность их воспроизведения в математической модели прибора позволяют строить качественные оценки истинных распределений с использованием специального математического подхода, в котором формулируется так называемая задача обратной свертки или анфолдинга (от англоязычного термина “unfolding”) [1–3]. Подробные обзоры методов решения этой задачи приведены, например, в работах [4–8].

Для построения статистических оценок, полученных в измерениях распределений изучаемых величин, используются разные способы, которые можно условно разделить на две большие группы:

- гистограммные, где диапазон изменения физической величины разделяется на дискретные интервалы (бины);
- безбиновые, не требующие такого разбиения.

В статье будут рассматриваться методы обратной свертки, применяемые к гистограммным способам представления измерений, поскольку именно они широко применяются в различных областях современной экспериментальной физики, в том числе в экспериментах по физике частиц и космофизике, например, в [9–12].

В гистограммном подходе при восстановлении распределений множество значений непрерывной физической величины (или окрестность около искомого значения дискретной величины) разбивается на интервалы. При этом описание измерительных искажений сводится к определению вероятностей регистрации случайной величины в различных бинах при условии, что истинное значение величины попадает в свой бин. Эти вероятности образуют так называемую матрицу миграций [1, 2]. Искажение распределения, возникающее при измерении, предполагает свертку истинного распределения с этой

1)e-mail: yuribogomolov@gmail.com

матрицей. Тогда оценка истинного распределения определяется путем свертки измеренного распределения с обратной матрицей миграции. Однако такая оценка оказывается неустойчивой [3, 13, 14], что приводит к необходимости выбора других подходов.

Некоторые методы обратной свертки позволяют не только учитывать информацию о характере искажений, но также использовать априорные предположения об особенностях восстанавливаемого распределения физической величины (например, непрерывность или гладкость) [15]. На этой идее основаны так называемые регуляризационные алгоритмы [3, 5, 16], широко применяемые для корректировки одномерных распределений в современных экспериментах [4, 17–20].

Однако рассматриваемая физическая величина в общем виде может являться многомерной, например, ее компонентами может быть набор характеристик элементарной частицы (энергия, масса, направление движения и др.). В этом случае адаптация методов обратной свертки затруднительна, и такая задача сегодня остается открытой, а для некоторых алгоритмов не решенной. В представленной статье предлагается подход, позволяющий перенести хорошо зарекомендовавшие себя алгоритмы обратной свертки, применяемые в одномерном анализе, на случай многомерного распределения. Также приводится его проверка с использованием данных моделирования регистрации космических лучей космофизической аппаратурой PAMELA [21], рассматривая три характеристики частицы – магнитную жесткость, полярный и азимутальный углы входа в прибор.

2. Постановка задачи и обзор методов ее решения в одномерном случае. Пусть в ходе эксперимента наблюдаются N частиц, характеристики которых измеряются с помощью соответствующей аппаратуры (факт детектирования частицы прибором будем называть событием). Разобьем множество истинных значений величины на n ячеек (многомерных бинов) $(\Delta_1, \Delta_2, \ldots, \Delta_n)$, где $\Delta_i \subset \mathbb{R}^k$. Дискретизацией истинного распределения физической величины является набор вероятностей попадания характеристик частицы в соответствующие бины: $\mathbf{p} = (p_1, p_2, \ldots, p_n)$. Также истинным распределением будем называть математические ожидания количества частиц в этих бинах: $\boldsymbol{\tau} = (\tau_1, \tau_2, \ldots, \tau_n)$, где $\tau_i = Np_i$. Множество измеренных значений величины также разбиваем на интервалы $(\Delta'_1, \Delta'_2, \ldots, \Delta'_{n'})$, где $\Delta'_i \subset \mathbb{R}^k$ (зачастую для истинных и измеренных значений используется одно и то же разбиение на бины, однако в общем виде такие разбиения могут различаться). Количество частиц, по итогам эксперимента, детектированных аппаратурой в выделенных ячейках, обозначим как $\mathbf{m} = (m_1, m_2, \ldots, m_{n'})$ и будем называть измеренным многомерным спектром.

Искажения, обусловленные конечным разрешением аппаратуры, шумами или другими приборными эффектами, описываются матрицей миграций R, где элемент R_{ij} — вероятность того, что истинное значение величины из j-й ячейки будет детектировано как попавшее в i-ю ячейку. Тогда математические ожидания $\boldsymbol{\nu} = (\nu_1, \nu_2, \ldots, \nu_{n'})$ количества событий, детектированных в рассматриваемых ячейках, вычисляются следующим образом: $\boldsymbol{\nu} = R\boldsymbol{\tau}$.

Основной задачей является разработка методов состоятельной статистической оценки неизвестных $\mathbf{p}$ или пропорциональных им математических ожиданий $\boldsymbol{\tau}$ по известному измеренному спектру $\mathbf{m}$. Такая задача носит название обратной свертки (также используются термины деконволюция и unfolding). Важный прикладной интерес представляют задачи сравнительного анализа методов обратной свертки: как сопоставления методов между собой, так и сравнения оценок истинного распределения, полученные для разных реализаций одного метода (для различных параметров алгоритма, способов выделения бинов и особенностей матрицы миграций) [16, 22].

Естественные допущения позволяют считать последовательность зарегистрированных событий в каждом из бинов пуассоновским потоком [2], что дает возможность построить статистическую оценку истинного количества событий в рассматриваемых бинах с помощью метода максимального правдоподобия. Решением соответствующей задачи является оценка $\hat{\boldsymbol{\tau}} = R^{-1}\mathbf{m}$ [3, 23], что также соответствует "наивному" оцениванию истинного распределения (считать, что $\boldsymbol{\nu} = \mathbf{m}$, и решать систему уравнений $R\boldsymbol{\tau} = \mathbf{m}$, инвертируя матрицу миграций). Такая оценка истинного распределения является состоятельной, несмещенной и имеющей наименьшую дисперсию среди всех несмещенных оценок [3, 24]. Тем не менее, ее дисперсия зачастую является достаточно высокой, а оценка оказывается неустойчивой (чувствительной к возмущениям измеренного распределения), что делает затруднительным ее использование на практике [3, 13, 14, 23].

Это требует искать другие пути построения оценки, в том числе основанные на искусственном введении смещения. На практике особо выделяются такие два подхода [25].

1. Итеративные методы, в которых последовательно производится уточнение статистической оценки истинного распределения, с

ранней остановкой итеративного процесса. На этой идее основаны байесовский алгоритм д'Агостини [26] и некоторые его модификации, а также ряд других итеративных процедур [27].

2. Минимизация функции правдоподобия с введенным "штрафным" слагаемым (идея регуляризации). Такой подход применяется в SVD-методе [28], использующем регуляризацию Тихонова, алгоритме TUnfold [16, 29] и некоторых других методах [30].

Программные реализации метода д'Агостини, SVD-метода и алгоритма TUnfold включены в библиотеки пакета программ ROOT [31], применяемого в экспериментальных задачах физики высоких энергий, а также связанного с ним пакета RooUnfold [32], предназначенного для решения задачи обратной свертки. Также авторы методов восстановления спектра используют собственные программные разработки, содержащие реализации конкретных алгоритмов решения задачи [33–37].

Регуляризационный подход привлекателен возможностью использовать для построения оценок функции, отражающие предполагаемые особенности восстанавливаемого спектра. Например, регуляризация Тихонова, используемая в SVD-методе, отражает гладкость распределения, однако существующие реализации этого алгоритма применимы только для восстановления одномерных спектров, так как соответствующая регуляризационная функция построена на основе разности значений в соседних линейно занумерованных бинах. В то же время в многомерном случае не существует нумерации бинов, при которой пространственно близкие бины имели бы близкие номера, поэтому применение упомянутых алгоритмов для восстановления многомерных распределений в существующем виде невозможно. Тем не менее, можно поставить задачу модификации регуляризационной функции, основанной на степени близости одномерных или многомерных бинов, что позволило бы адаптировать существующие алгоритмы на более широкий класс задач, а также повысить точность статистических оценок спектров и для одномерного случая. Возможный вариант такой модификации, разработанный авторами, предлагается в следующем разделе.

3. Многомерный регуляризационный метод. Перед описанием предлагаемого метода отметим некоторые основные положения, которые использовались при адаптации описанных ранее подходов.

1. Метод должен позволять использование в многомерном случае и учитывать миграцию между ячейками (бинами), заданную матрицей R.

2. Алгоритм должен учитывать непрерывность или гладкость истинного многомерного распределения. Для этого естественным является подход, основанный на регуляризации.

3. Соответствующее этим особенностям спектра регуляризационное слагаемое основывается на рассмотрении разностей значений величин в пространственно близких ячейках (необходимо учитывать, какие ячейки являются близкими или соседними, а какие не являются).

4. В предельном случае для одномерных измеряемых величин метод должен сводиться к ранее рассмотренным подходам (например, SVD-алгоритму), особенности применения которых для восстановления спектра изучены.

Оценку истинного распределения $\boldsymbol{\tau}$ будем искать как решение задачи минимизации:

$$\Phi(\boldsymbol{\tau}) = (R\boldsymbol{\tau} - \mathbf{m})^T(R\boldsymbol{\tau} - \mathbf{m}) + \alpha S(\boldsymbol{\tau}) \to \min_{\boldsymbol{\tau}},$$

где первое слагаемое соответствует функции правдоподобия без дополнительного смещения (минимум этого слагаемого достигается при $\boldsymbol{\tau} = R^{-1}\mathbf{m}$), а регуляризационная функция $S(\boldsymbol{\tau})$ описывает заданные особенности искомого распределения [38]. При этом числовой параметр α отражает вклад регуляризационного слагаемого в функцию, используемую при построении оценки спектра.

В одномерном случае отношение близости бинов вводилось естественным путем: бины нумеровались в порядке возрастания значения характеристики и соседними бинами считались те, номера которых отличаются на 1. В частности, это отношение позволяло использовать при построении оценки спектра регуляризационную функцию

$$S(\boldsymbol{\tau}) = \sum_{i=2}^{n-1} (\tau_{i-1} - 2\tau_i + \tau_{i+1})^2,$$

отражающую гладкость искомого распределения [28]. Она также может быть записана в виде

$$S(\boldsymbol{\tau}) = (C\boldsymbol{\tau})^T(C\boldsymbol{\tau}),$$

где матрица C отражает близость соседних бинов и имеет следующий вид:

$$C = \begin{pmatrix} 1 & -1 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ -1 & 2 & -1 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 2 & -1 & \dots & 0 & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 2 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & -1 & 1 \end{pmatrix}.$$

Предлагаемая модификация общего подхода основана на использовании при построении регуляризационной функции такой матрицы, которая позволяет отразить сложные виды отношения соседства или близости бинов. Для бинарного отношения (два бина либо являются соседними, либо нет) в одномерном или многомерном случае в таком качестве будем использовать матрицу Кирхгофа $K = (k_{ij})$, где

$$k_{ij} = \begin{cases} \deg(\Delta_i), & \text{при } i = j; \\ -1, & \text{если } i \neq j, \text{а } \Delta_i \text{ и } \Delta_j \text{ соседние;} \\ 0, & \text{в остальных случаях.} \end{cases}$$

Здесь через $\deg(\Delta_i)$ обозначено количество бинов, соседних с бином Δ_i. Например, соседними можно считать пространственные бины, имеющие общий участок границы. Несложно убедиться, что в одномерном случае со стандартным бинарным отношением соседства такая матрица K совпадает с описанной выше матрицей C, а построенная оценка истинного спектра будет соответствовать результатам упомянутых ранее регуляризационных алгоритмов [28, 29].

Для многомерных ячеек становится все более заметной ограниченность бинарного подхода: во-первых, можно считать соседними (близкими) не обязательно ячейки с общим участком границы, а во-вторых, степень близости даже для граничащих ячеек может быть различной (и зависеть от размера области касания, от размера самих ячеек и других характеристик). Развивая предложенную идею, можно перейти к небинарным отношениям близости бинов. Для этого введем показатель $w(\Delta_i, \Delta_j) \geqslant 0$ — весовой коэффициент соседства ячеек Δ_i и Δ_j (при $i \neq j$). Бинарный случай соответствует значениям $w(\Delta_i, \Delta_j) = 1$ для соседних ячеек и $w(\Delta_i, \Delta_j) = 0$ для ячеек, не являющихся соседними; однако можно гибко настроить весовые коэффициенты, считая их пропорциональными степени связи, определяемой заранее выбранным способом (по области соприкосновения, размеру ячеек, расстоянию между центрами масс ячеек и другим характеристикам). Общих жестких рекомендаций по выбору элементов матрицы K нет, выбор весов $w(\Delta_i, \Delta_j)$ может варьироваться в зависимости от особенностей текущей задачи.

С учетом этих обозначений для построения регуляризационной функции будем использовать обобщенную матрицу Кирхгофа (K), элементы k_{ij} которой вводятся так:

$$k_{ij} = \begin{cases} \sum\limits_{v \neq i} w(\Delta_i, \Delta_v), & \text{при } i = j; \\ -w(\Delta_i, \Delta_j), & \text{при } i \neq j. \end{cases}$$

Соответственно, оценка истинного распределения будет получена как минимум функции

$$\Phi(\boldsymbol{\tau}) = (R\boldsymbol{\tau} - \mathbf{m})^T (R\boldsymbol{\tau} - \mathbf{m}) + \alpha (K\boldsymbol{\tau})^T (K\boldsymbol{\tau}).$$

Для многомерного случая рассматривается последовательная (линейная) нумерация бинов. Поэтому структура функции не меняется, но связи между бинами определяются не их нумерацией, а видом матрицы K. И поскольку отношение близости теперь вводится не только для соседних бинов, то появляется возможность строить оценки распределения для случая, когда параметры сильно коррелируют.

Точка минимума получается как решение переопределенной расширенной системы уравнений:

$$\begin{bmatrix} RK^{-1} \\ \sqrt{\alpha} \cdot I \end{bmatrix} K\boldsymbol{\tau} = \begin{bmatrix} \mathbf{m} \\ 0 \end{bmatrix},$$

где I — единичная матрица.

Отметим, что матрица K является вырожденной, поэтому для вычисления обратной матрицы и корректного решения задачи ее нужно возмутить. Для этого прибавим константу ξ к диагональным элементам, т.е. рассмотрим вместо K матрицу $K + \xi I$. Далее при вычислении K^{-1} будем предполагать, что эта поправка уже сделана.

Для решения системы воспользуемся подходом, применяемым в исходном SVD-алгоритме обратной свертки [28]. Пусть система линейных уравнений имеет вид $A\boldsymbol{\tau} = \mathbf{m}$. Сингулярным разложением матрицы A размера $l \times k$ называется ее представление в форме $A = USV^T$, где U и V — ортогональные матрицы размером $l \times l$ и $k \times k$ соответственно, S — диагональная матрица $l \times k$ (диагональные значения s_i неотрицательны и называются сингулярными значениями), сама матрица S называется сингулярной матрицей. Выбором U и V можно добиться того, чтобы сингулярные значения шли по убыванию. Для $l = k$ все матрицы будут квадратными.

Точное решение системы линейных уравнений $A\boldsymbol{\tau} = \mathbf{m}$ с помощью сингулярного разложения выполняется по следующему алгоритму [28]:

1. Составляется система $USV^T\boldsymbol{\tau} = \mathbf{m}$.
2. Выполняется замена $\mathbf{z} = V^T\boldsymbol{\tau}$. Система приобретает вид $US\mathbf{z} = \mathbf{m}$.

3. Домножается слева на обратную матрицу $U^{-1} = U^T$, получается система $S\mathbf{z} = U^T\mathbf{m}$.

4. Выполняется замена: $\mathbf{d} = U^T\mathbf{m}$. Система приобретает вид $S\mathbf{z} = \mathbf{d}$.

5. Матрица S является диагональной, поэтому компоненты решения строятся как $z_i = d_i/s_i$.

6. Записывается решение системы: $\boldsymbol{\tau} = V\mathbf{z}$.

Для плохо обусловленных матриц A значения d_i и соответствующие s_i малы, поэтому малые возмущения этих значений приводят к сильным погрешностям решений z_i и решений исходной системы τ.

Решение описанной выше расширенной системы уравнений производится приведенным способом на основе сингулярного разложения, однако промежуточные решения z_i теперь выглядят так [28]:

$$z_i = \frac{d_i}{s_i} \cdot \frac{s_i^2}{s_i^2 + \alpha}.$$

При $s_i^2 \gg \alpha$ решения практически совпадают с рассмотренным прямым решением задачи. При малых сингулярных значениях s_i уже становится более заметным поправочный коэффициент. В качестве коэффициента регуляризации авторы SVD-алгоритма рекомендуют выбирать квадрат "последнего большого" сингулярного значения [28]: расположить диагональные элементы s_i матрицы S в порядке убывания и взять $\alpha = s_k^2$, где $s_k \gg s_{k+1}$.

Перед решением системы для уменьшения погрешностей также производится перенормировка уравнений исходной линейной системы (чтобы каждое уравнение вносило одинаковый "вклад") [28].

4. Результаты. В качестве исходных данных для анализа алгоритма использовано моделирование потока протонов с характеристиками, соответствующими галактической компоненте космических лучей, который измеряется в космофизическом эксперименте PAMELA [21]. Для каждого события измеряется магнитная жесткость частицы, а также направление прилета, характеризуемое зенитным и азимутальным углами. В результате моделирования получен набор пар истинных и измеренных значений жесткости, зенитного угла и азимута. Область истинных значений величин (жесткость от 0.1 до 200 ГВ, зенитный угол от 0 до 45 градусов, азимутальный угол произвольный) разбивалась на трехмерные ячейки (бины): по направлению прилета рассматриваемый участок небесной сферы разбивался на близкие по размеру области, в каждой такой области рассматривалось неравномерное разбиение диапазона значений жесткости. Полученный набор данных был разбит на две выборки: по одной из них строилась матрица миграций, а другая использовалась для тестирования. Для выделенных трехмерных бинов строились трехмерные истинный и измеренный спектры рассматриваемых величин, а также матрица миграций.

Восстановление спектра в трехмерном случае производилось предложенным модифицированным SVD-алгоритмом. Матрица Кирхгофа строилась на основе бинарного отношения соседства трехмерных бинов: $w(\Delta_i, \Delta_j) = 1$, если бины Δ_i и Δ_j имеют ненулевую площадь касания, и $w(\Delta_i, \Delta_j) = 0$ в противном случае. Величина параметра регуляризации α выбиралась как квадрат наибольшего сингулярного значения при разложении матрицы системы после перенормировки (процедура выбора параметров описана в разделе 3).

Рассмотрим одномерные проекции трехмерного спектра, например, на область значений магнитной жесткости для некоторого сегмента апертуры. На верхнем графике рис. 1 представлен пример восстановленного предложенным методом спектра (полужирная сплошная линия) в диапазоне азимута $\phi = 42°$ и зенитного угла $z = 17°$. Для сравнения приведены истинный и приборный спектры, показанные соответственно пунктирной и тонкой сплошной линиями. В качестве показателя точности (погрешности) метода принимаем относительное отклонение измеренного и восстановленного спектров от истинного. Значения показателя точности для измеренного и восстановленного спектров приведены на нижнем графике рис. 1 контурными и закрашенными маркерами соответственно.

Из графика рис. 1 следует, что предложенный алгоритм обратной свертки восстановил заниженный спектр в области малых значений магнитной жесткости (до 1 ГВ) и завышенный спектр в диапазоне жесткостей от 1.5 до 3 ГВ. Среднее значение погрешности в рассматриваемом диапазоне от 0.35 до 40 ГВ снизилось с $\delta_{\text{meas}} = 0.076$ до $\delta_{\text{unf}} = 0.040$. Для сравнения, использование прямого алгоритма восстановления спектра (применение обратной матрицы миграций к измеренному спектру) приводит к средней погрешности восстановленного спектра $\delta_{\text{inv}} = 0.088$, что выше не только средних погрешностей обратной свертки для предложенного алгоритма, но и погрешностей при измерении (отклонении приборного спектра от истинного).

Приведенная погрешность вычислялась для результата работы алгоритма при однократном разбиении выборки на две подвыборки: для построения матрицы миграций и тестирования. Более

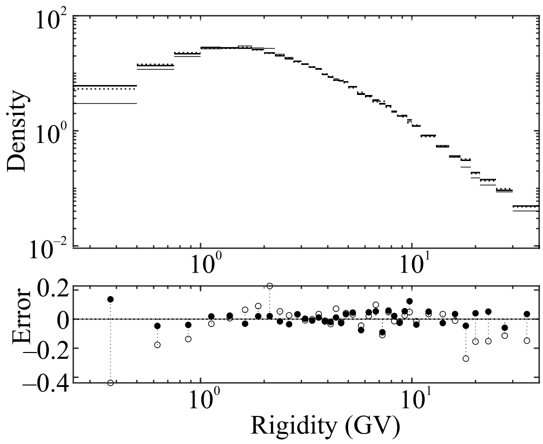

Рис. 1. Восстановление спектра в выбранном диапазоне зенитного и азимутального углов. На верхнем рисунке показаны истинный (пунктирная линия), приборный (тонкая сплошная линия) и восстановленный (полужирная сплошная линия) спектры. На нижнем рисунке показано относительное отклонение измеренного (контурные маркеры) и восстановленного (закрашенные маркеры) спектров от истинного

глубокий анализ систематических и статистических погрешностей может быть проведен в ходе серии вычислительных экспериментов, в каждом из которых проводится разбиение исходной выборки с дальнейшим построением оценок отклонений восстановленного спектра от истинного. Это исследование предполагается вынести в отдельную работу.

Предложенный алгоритм позволяет решать задачу восстановления спектра и в одномерном случае, более гибко учитывая отношение соседства между бинами. Для каждой частицы в качестве изучаемой физической характеристики рассмотрена только магнитная жесткость. Как и для многомерного случая, выполнено численное моделирование, в результате которого получен набор пар истинных и измеренных значений жесткости. Далее построены истинный и измеренный спектр в аналогично заданном диапазоне значений жесткости, неравномерно разбитом на интервалы. Для этого разбиения и данных моделирования построена матрица миграций. Алгоритм применяется к измеренному распределению жесткости в тестовой выборке, результат восстановления спектра сопоставляется с соответствующим истинным спектром (для тестовой выборки).

Восстановление спектра проводилось предложенным алгоритмом, в котором весовой коэффициент связи между бинами экспоненциально уменьшается в зависимости от их удаленности (по номерам): $w(\Delta_i, \Delta_j) = cq^{-|i-j|}$ (рассмотрен случай $c = 2$, $q = 2$). Для сравнения результатов рассмотрена оценка, полученная исходным SVD- методом [28]. На рисунке 2 показаны относительные ошибки вос-

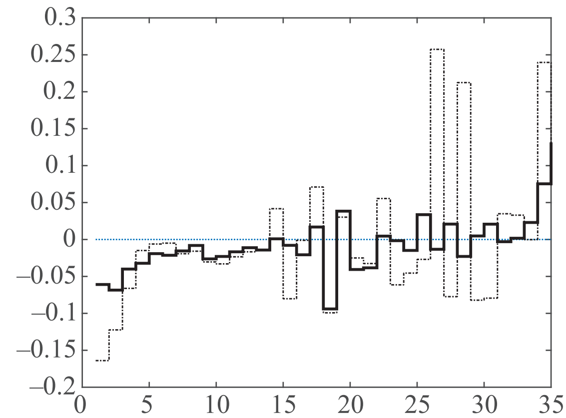

Рис. 2. (Цветной онлайн) Погрешность восстановления спектра для классического SVD-метода (штрихпунктирная линия) и предложенного модифицированного SVD-метода (сплошная линия) в зависимости от номера бина (приборный спектр не представлен)

становленного спектра по отношению к истинному спектру (в каждом бине): сплошной линией — ошибки предложенного в статье алгоритма, штрихпунктирной линией — ошибки SVD-алгоритма, истинный спектр показан горизонтальной пунктирной линией на уровне 0. Для корректного отображения исключен первый бин, в котором для обоих алгоритмов характерна высокая относительная погрешность.

В области высоких значений магнитной жесткости (правая часть спектра) для предложенного алгоритма отметим подавление больших колебаний оценки спектра. Среднее относительное отклонение также снижено (по отношению к ошибке классического SVD-алгоритма). Таким образом, предложенный алгоритм показал более качественные результаты восстановления спектра и в одномерном случае.

Стоит отметить, что разработанный алгоритм базируется на использовании регуляризационного слагаемого, отражающего в том числе непрерывность и гладкость по каждому из параметров многомерного распределения. Поэтому он может быть применим для подобных распределений, что подтверждается проведенным анализом. К распределениям, удовлетворяющим перечисленным свойствам, например, относятся и спектры космических лучей, в которых наблюдаются изменения показателя при разных энергиях. Разработанный алгоритм при восстановлении оценки истинного распределения сохраняет эту особенность (“излом” спектра).

5. Заключение. В работе изложен подход, позволяющий адаптировать регуляризационные алгоритмы обратной свертки (в том числе распространенный в физике частиц SVD-алгоритм) для применения в более широком классе случаев. В частности, можно отметить описание и применение алгоритма обратной свертки, позволяющего восстанавливать гладкие многомерные спектры, сохраняя возможность применения и в одномерном случае. Возможность применения предложенного алгоритма к распределениям, для которых, например, характерны заметные немонотонные изменения по одной или нескольким переменным, требует отдельного изучения.

На данном этапе отмечается, что для рассмотренных в работе исходных данных представленный модифицированный алгоритм не уступает и даже превосходит исходные версии алгоритмов по точности восстановления спектра (например, по средней относительной погрешности в бинах). Также для многомерного случая он позволяет строить достаточно точные оценки спектров для матрицы миграций, не удовлетворяющих жестким требованиям диагональности. Это дает возможность предполагать перспективность предложенного подхода и возможность его дальнейшей адаптации для решения актуальных прикладных задач.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект # 19-72-10161).

1. V. Blobel, in *Proc. of the 1984 CERN School of Computing*, CERN 85-09, p. 88.
2. V. Blobel, hep-ex/0208022.
3. G. Cowan, in *Proc. Conf. on Advanced Statistical Techniques in Particle Physics*, ed. by M. R. Whalley and L. Lyons, IPPP/02/39, Durham (2002).
4. F. Span'o, EPJ Web Conf. **55**, 03002 (2013).
5. S. Schmitt, arXiv:1611.01927v2, EPJ Web Conf. **137**, 11008 (2017).
6. G. Zech, arXiv:1607.06910.
7. Ю. В. Богомолов, В. В. Алексеев, О. А. Леванова, А. Г. Майоров, В. В. Малахов, УФН 2022 (принята к печати); doi: https://doi.org/10.3367/UFNr.2022.05.039189 (english https://doi.org/10.3367/UFNe.2022.05.039189).
8. А. Ю. Егоров, Я. А. Бердников, В. А. Бакаев, И. М. Никитцина, Науч.-тех. ведомости СПбГПУ. Физ.-мат. науки **12**(3), 123 (2019).
9. S. Chatrchyan, V. Khachatryan, A. M. Sirunyan et al. (CMS Collaboration), Phys. Lett. B **709**, 28 (2012).
10. M. Aguilar, D. Aisa, D. Alpat et al. (AMS Collaboration), Phys. Rev. Lett. **114**, 171103 (2015).
11. F. P. An, A. B. Balantekin, H. R. Band et al. (Daya Bay Collaboration), arXiv:2102.04614, Chin. Phys. C **45**(7), 073001 (2021).
12. Д. Е. Карманов, И. М. Ковалев, И. А. Кудряшов, А. А. Курганов, А. Д. Панов, Д. М. Подорожный, А. Н. Турундаевский, О. А. Васильев, Письма в ЖЭТФ **111**(7), 435 (2020).
13. H. W. Engl, M. Hanke, and A. Neubauer, *Regularization of Inverse Problems*, Kluwer Academic Publishers, Dordrecht (2000).
14. J. Kaipio and E. Somersalo *Statistical and Computational Inverse Problems*, Springer, N.Y. (2005).
15. G. Cowan, *Statistical Data Analysis*, Clarendon Press, Oxford (1998).
16. T. Adye, *Proceedings of the PHYSTAT 2011 Workshop, CERN, Geneva, Switzerland, January 2011*, CERN-2011-006; arXiv:1105.1160.
17. M. Arratia, A. Butter, M. Campanelli, V. Croft, A. Ghosh, D. Gillberg, K. Lohwasser, B. Malaescu, V. Mikuni, B. Nachman, J. Rojo, J. Thaler, and R. Winterhalder, arXiv:2109.13243.
18. G. Aad, B. Abbott, J. Abdallah et al. (ATLAS collaboration), Eur. Phys. J. C **72**, 2039 (2012).
19. V. Verzi, D. Ivanov, and Y. Tsunesada, Prog. Theor. Exp. Phys. **2017**(12), 12A103 (2017).
20. F. Li, Zh. Gu, L. Ge, H. Li, X. Tang, X. Lang, and B. Hu, Results in Physics **13**, 102211 (2019).
21. O. Adriani, G. C. Barbarino, G. A. Bazilevskaya et al. (PAMELA Collaboration), Phys. Rep. **544**(4), 30 (2014).
22. L. Brenner, P. Verschuuren, R. Balasubramanian, C. Burgard, V. Croft, G. Cowan, and W. Verkerke, arXiv:1910.14654.
23. B. W. Rust, D. T. Ingersoll, and W. R. Burrus, *A User's Manual for the FERDO and FERD Unfolding Codes*, Oakridge National Laboratory, Oak Ridge (1983).
24. P. Vischia, arXiv:2009.02913.
25. M. Kuusela and P. B. Stark, arXiv:1512.00905.
26. G. D'Agostini, Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. A **362**, 487 (1995).
27. M. Kuusela and V. M. Panaretos, Annals of Appl. Stat. **9**(3), 1671 (2015).
28. A. Hoecker and V. Kartvelishvili, Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. A **372**, 469 (1996).
29. S. Schmitt, J. Instrum. **7**(10), T10003 (2012).
30. P. Baron, Acta Phys. Pol. B **51**(6), 1241 (2020).
31. Офиц. сайт пакета ROOT https://root.cern.ch/.

32. Офиц. сайт пакета RooUnfold http://hepunx.rl.ac.uk/adye/software/unfold/RooUnfold.html.
33. A. Andreassen, P. T. Komiske, E. M. Metodiev, B. Nachman, and J. Thaler, Phys. Rev. Lett. **124**(18), 182001 (2020); arXiv:1911.09107.
34. V. Blobel, OPAL Technical Note TN361, 28 (1996).
35. N. Milke, M. Doert, S. Klepser, D. Mazin, V. Blobel, and W. Rhode, Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. A **697**, 133 (2013).
36. J. Bourbeau and Z. Hampel-Arias, J. Open Source Softw. **3**(26), 741 (2018).
37. M. Pivk and F. R. Le Diberder, Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. A **555**, 356 (2005).
38. A. N. Tikhonov, Soviet Math. Dokl. **4**, 1035 (1963).