

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК
Ордена Ленина Сибирское отделение
ИНСТИТУТ ЯДЕРНОЙ ФИЗИКИ
им. Г.И. Будкера СО РАН

А.Д. Букин

ПОДГОНКА
АСИММЕТРИЧНЫХ ПИКОВ

ИЯФ 2007-35

НОВОСИБИРСК
2007

Подгонка асимметричных пиков

А.Д. Буклин

Институт ядерной физики им. Г.И.Будкера
630090, Новосибирск, Россия

Аннотация

В работе предложена новая функция для подгонки асимметричных пиков, которая может существенно пополнить инструментарий для подгонки произвольных асимметричных распределений с единственным максимумом.

Fitting function for asymmetric peaks

A.D. Bukin

Budker Institute of Nuclear Physics
630090, Novosibirsk, Russia

Abstract

In the paper a new fitting function is suggested, which can essentially increase the existing instrumentation for fitting of asymmetric peaks with the only maximum.

1 Введение

При обработке экспериментальных данных часто возникает задача подгонки произвольного распределения с единственным пиком какой-либо функцией с некоторым набором параметров. Это может потребоваться для более точного определения полной ширины на полувысоте (разрешение приборов), для определения формы сигнала на моделированных событиях для последующего анализа экспериментальных распределений и т.д. Существующий набор функций для подгонки не всегда удовлетворяет требованиям эксперимента, особенно при высокой статистике (трудно добиться хорошего статистического согласия).

Наиболее часто применяют для подгонки таких пиков сумму трех Гауссовых распределений. Почти всегда с такой функцией можно добиться приемлемого статистического согласия. В крайнем случае, можно добавлять еще столько Гауссовых распределений, сколько потребуется для достижения статистического согласия. Недостатком этого метода является то, что каждое Гауссово распределение является симметричным, поэтому принципиально нельзя использовать Гауссовы распределения с общим центром — невозможно обеспечить асимметрию пика, — а при наличии различных положений центра в составляющих трудно сформулировать требования, обеспечивающие единственность максимума и монотонность функций распределения справа и слева от максимума.

Другой часто используемой функцией является сплайн из двух половинок Гауссова распределения, гладко «сшитых» в точке максимума. Эта функция хороша, если «хвосты» могут быть описаны Гауссовым распределением. Однако, при высокой статистике большинство экспериментальных распределений, имеющие экспоненциальные или даже степенные «хвосты», не согласуются с такой функцией.

Также часто используется логарифмическое Гауссово распределение (в СЛАК такую функцию называют «Новосибирской»):

$$F_N(x; x_p, h, \lambda) = A \exp \left[-\frac{1}{2\sigma^2} \ln^2 \frac{x_m - x}{x_m - x_p} \right], \quad \int_{\frac{x_m - x}{x_m - x_p} > 0} F_N dx = 1, \quad (1)$$

где x_p — положение пика (максимум функции), h — полная ширина на полувысоте, λ — параметр асимметрии, A — нормирующий множитель.

$$x_m = x_p - \frac{z + \frac{1}{z}}{2\lambda}, \quad (2)$$

$$\sigma = \frac{1}{\sqrt{2 \ln 2}} \ln z, \quad A = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{|\lambda|}{\left(z + \frac{1}{z}\right) \sigma} e^{-\frac{\sigma^2}{2}}, \quad (3)$$

$$z = \sqrt{h |\lambda| + \sqrt{h^2 \lambda^2 + 1}}. \quad (4)$$

Как видно из соотношения (2), при $\lambda > 0$ предельная координата $x_m < x_p$ и все $x > x_m$. Если $\lambda < 0$, то $x_m > x_p$ и $x < x_m$. Используя эти обозначения, можно переписать функцию, исключив неудобную переменную x_m :

$$F_N(x; x_p, h, \lambda) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \cdot \frac{1}{z + \frac{1}{z}} \cdot \frac{|\lambda|}{\sigma} \times \exp \left[-\frac{\sigma^2}{2} - \frac{1}{2\sigma^2} \ln^2 \left(1 + 2z\lambda \frac{x - x_p}{z^2 + 1} \right) \right]. \quad (5)$$

Функция равна нулю для тех x , для которых аргумент логарифма становится отрицательным. Допустимые значения параметров: $h > 0$, λ — любое, x_p — любое. При $\lambda \sim 0$ в формулах появляется неопределенность типа $0/0$, поэтому многие величины надо разлагать в ряд Тейлора.

$$z \underset{\lambda \sim 0}{\sim} 1 + \frac{h|\lambda|}{2} + \frac{h^2 \lambda^2}{8}, \quad (6)$$

поэтому

$$\frac{2\lambda z}{z^2 + 1} \underset{\lambda \sim 0}{\sim} \lambda \cdot \left[1 - \frac{h^2 \lambda^2}{8} + \frac{7h^4 \lambda^4}{128} \right], \quad (7)$$

$$\sigma^2 \underset{\lambda \sim 0}{\sim} \frac{h^2 \lambda^2}{8 \ln 2} \cdot \left[1 - \frac{h^2 \lambda^2}{3} \right], \quad \frac{\sigma}{|\lambda|} \underset{\lambda \sim 0}{\sim} \frac{h}{2\sqrt{2 \ln 2}} \cdot \left[1 - \frac{h^2 \lambda^2}{6} \right], \quad (8)$$

$$\frac{\sigma^2}{2} + \frac{1}{2\sigma^2} \ln^2 \left(1 + 2z\lambda \frac{x - x_p}{z^2 + 1} \right) \underset{\lambda \sim 0}{\sim} \frac{4 \ln 2 (x - x_p)^2}{h^2} \cdot [1 - (x - x_p) \lambda]. \quad (9)$$

При $\lambda = 0$ функция превращается в

$$F_N(x; x_p, h, 0) = \sqrt{\frac{\ln 2}{\pi}} \cdot \frac{2}{h} \cdot \exp \left[-\frac{4 \ln 2 (x - x_p)^2}{h^2} \right], \quad (10)$$

то есть Гауссово распределение со среднеквадратичным отклонением от среднего

$$\sqrt{\langle (x - x_p)^2 \rangle} = \frac{h}{2\sqrt{2 \ln 2}} \approx \frac{h}{2.3548}.$$

Такая функция удобна для подгонки распределений с очень резким краем. Однако, обычно экспериментальные распределения более гладкие, и предлагаемая в данной работе функция может быть более успешной.

2 Свертка Гауссового распределения и экспоненциального

Предлагается строить подгоночную функцию на основе свертки Гауссового распределения и экспоненциального:

$$F_{B1}(x; x_g, \sigma_g, \lambda) = \frac{1}{2|\lambda|} \left[1 - \operatorname{erf} \left(-\frac{(x-x_g)\lambda}{\sigma_g|\lambda|\sqrt{2}} + \frac{\sigma_g}{|\lambda|\sqrt{2}} \right) \right] \times \quad (11)$$

$$\times \exp \left[-\frac{x-x_g}{\lambda} + \frac{\sigma_g^2}{2\lambda^2} \right].$$

Интеграл от этой функции равен 1. Такая функция впервые была использована автором в 2004 году в СЛАК (ВаВар note №582) для подгонки распределений по выделенной энергии в калориметре с целью определения разрешения и положения пика для алгоритмов абсолютной калибровки энергии фотона, и несмотря на некоторые технические трудности, оказалась достаточно удобной для подгонки таких распределений, особенно при высокой статистике.

Технические трудности появляются при больших значениях аргумента функции ERF:

$$\operatorname{erf}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x e^{-\xi^2} d\xi \quad (12)$$

Если обозначить аргумент функции ERF в формуле (11) через z

$$z = -\frac{(x-x_g)\lambda}{\sigma_g|\lambda|\sqrt{2}} + \frac{\sigma_g}{|\lambda|\sqrt{2}}, \quad (13)$$

то формула (11) принимает вид:

$$F_{B1}(x; x_g, \sigma_g, \lambda) = \frac{1}{2|\lambda|} [1 - \operatorname{erf}(z)] \exp \left[\frac{z\sigma_g\sqrt{2}}{|\lambda|} - \frac{\sigma_g^2}{2\lambda^2} \right]. \quad (14)$$

Если $z \rightarrow +\infty$, то и показатель экспоненты стремится к бесконечности, и тогда возникает неопределенность вида $0 \cdot \infty$. Из-за ограниченной точности вычислений на ЭВМ, эта трудность появляется достаточно рано, уже при умеренных значениях $z \sim 10$.

Справиться с этой проблемой помогает асимптотическое разложение

$$1 - \operatorname{erf}(z) \approx \frac{e^{-z^2}}{z\sqrt{\pi}} \left[1 + \sum_{k=1}^{k_0} \frac{(-1)^k (2k-1)!!}{2^k z^{2k}} \right], \quad k_0 \leq z^2. \quad (15)$$

Подставляем это разложение в (14):

$$F_{B1}(x; x_g, \sigma_g, \lambda) = \frac{1}{2|\lambda|z\sqrt{\pi}} \exp \left[- \left(z - \frac{\sigma_g}{\sqrt{2}|\lambda|} \right)^2 \right] \times \left[1 + \sum_{k=1}^{k_0} \frac{(-1)^k (2k-1)!!}{2^k z^{2k}} \right]. \quad (16)$$

Здесь уже при больших z неопределенностей не возникает, функция стремится к нулю. Это же разложение позволяет рассмотреть предельный переход при $\lambda \rightarrow 0$. Действительно,

$$\lim_{\lambda \rightarrow 0} z = +\infty, \quad \lim_{\lambda \rightarrow 0} \left(z - \frac{\sigma_g}{\sqrt{2}|\lambda|} \right) = \pm \frac{(x - x_g)}{\sigma_g \sqrt{2}}, \quad \lim_{\lambda \rightarrow 0} |\lambda| z = \frac{\sigma_g}{\sqrt{2}}, \quad (17)$$

и

$$F_{B1}(x; x_g, \sigma_g, 0) = \frac{1}{\sigma_g \sqrt{2\pi}} \exp \left[- \frac{(x - x_g)^2}{2\sigma_g^2} \right] \quad (18)$$

Рассмотрим теперь предел $\sigma_g \rightarrow 0$.

$$\lim_{\sigma_g \rightarrow 0} z = - \frac{x - x_g}{\lambda} \cdot \infty, \quad \lim_{\sigma_g \rightarrow 0} z \sigma_g = - \frac{(x - x_g)|\lambda|}{\lambda \sqrt{2}}, \quad (19)$$

и подставляя это в (14), получим

$$F_{B1}(x; x_g, 0, \lambda) = \begin{cases} 0, & \frac{(x - x_g)}{\lambda} < 0, \\ \frac{1}{|\lambda|} \exp \left[- \frac{(x - x_g)}{\lambda} \right], & \frac{(x - x_g)}{\lambda} > 0. \end{cases} \quad (20)$$

Графики функции F_{B1} при нескольких наборах параметров приведены на рис. 1.

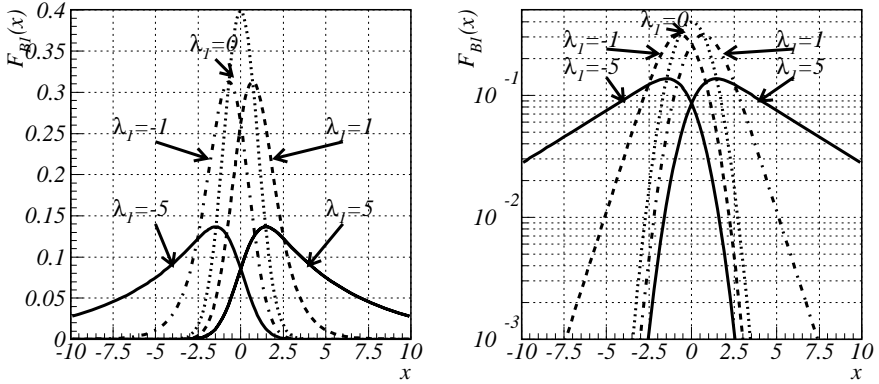


Рис. 1: График функции $F_{B1}(x; x_g, \sigma_g, \lambda_1)$ при $\sigma_g = 1$, $x_g = 0$ и нескольких значениях λ_1

Иногда может быть полезным интегральное распределение:

$$\begin{aligned} \Phi_{B1}(x; x_g, \sigma_g, \lambda) = \\ = \int_{-\infty}^x d\xi F_{B1}(\xi; x_g, \sigma_g, \lambda) = \frac{1}{2} \left[1 + \operatorname{erf} \left(\frac{x-x_g}{\sqrt{2}\sigma_g} \right) \right] - \\ - \frac{\lambda}{2|\lambda|} e^{\frac{\sigma_g^2}{2\lambda^2} - \frac{x-x_g}{\lambda}} \left[1 - \operatorname{erf} \left(\frac{\sigma_g}{\sqrt{2}|\lambda|} - \frac{(x-x_g)|\lambda|}{\sqrt{2}\sigma_g\lambda} \right) \right]. \end{aligned} \quad (21)$$

Использование F_{B1} для подгонки распределений было бы намного удобнее, если бы независимым параметром подгонки была переменная x_m — положение максимума функции, вместо x_g . Уравнение для поиска x_m выглядит довольно сложно:

$$1 - \operatorname{erf} \left(-\frac{(x_m-x_g)\lambda}{\sigma_g|\lambda|\sqrt{2}} + \frac{\sigma_g}{|\lambda|\sqrt{2}} \right) = \frac{\sqrt{2}|\lambda|}{\sigma_g\sqrt{\pi}} \exp \left[-\left(-\frac{(x_m-x_g)\lambda}{\sigma_g|\lambda|\sqrt{2}} + \frac{\sigma_g}{|\lambda|\sqrt{2}} \right)^2 \right] \quad (22)$$

Или в других обозначениях

$$1 - \operatorname{erf}(z_m) = \rho \exp(-z_m^2), \quad (23)$$

где $\rho = \frac{\sqrt{2}|\lambda|}{\sigma_g \sqrt{\pi}} > 0$. При $\rho \rightarrow \infty$ $z_m \rightarrow -\infty$:

$$e^{z_m^2} = \frac{\rho}{2 - \frac{e^{-z_m^2}}{|z_m| \sqrt{\pi}} \cdot \left[1 - \frac{1}{2z_m^2}\right]} \implies z_m \approx -\sqrt{\ln \frac{\rho}{2 - \frac{2}{\rho \sqrt{|\ln \frac{\rho}{2}}| \sqrt{\pi}} \cdot \left[1 - \frac{1}{2 \ln \frac{\rho}{2}}\right]}} \implies$$

$$\implies -\frac{(x_m - x_g)\lambda}{\sigma_g |\lambda| \sqrt{2}} + \frac{\sigma_g}{|\lambda| \sqrt{2}} = -\sqrt{\ln \frac{|\lambda|}{\sigma_g \sqrt{2\pi}}} \quad (24)$$

или

$$x_m - x_g \underset{\sigma_g \ll |\lambda|}{\approx} \frac{\sigma_g^2}{\lambda} + \frac{\sigma_g |\lambda| \sqrt{2}}{\lambda} \cdot \sqrt{\ln \frac{|\lambda|}{\sigma_g \sqrt{2\pi}}} \rightarrow 0. \quad (25)$$

При $\rho \ll 1$ $z_m \rightarrow +\infty$ и здесь мы тоже можем получить приближенное решение:

$$\frac{e^{-z_m^2}}{z_m \sqrt{\pi}} \left[1 + \sum_{k=1}^{k_0} \frac{(-1)^k (2k-1)!!}{2^k z_m^{2k}}\right] = \rho \exp(-z_m^2) \quad (26)$$

$$z_m \approx \frac{1}{\rho \sqrt{\pi}} \cdot \left(1 - \frac{\pi \rho^2}{2}\right) \implies -\frac{(x_m - x_g)\lambda}{\sigma_g |\lambda| \sqrt{2}} + \frac{\sigma_g}{|\lambda| \sqrt{2}} = \frac{\sigma_g}{\sqrt{2}|\lambda|} - \frac{|\lambda|}{\sqrt{2}\sigma_g} \quad (27)$$

или

$$x_m - x_g \approx \lambda \rightarrow 0. \quad (28)$$

Вернемся к уравнению (23), которое нам необходимо решать, чтобы находить положение максимума F_{B1} . Приведем интервал изменения переменной ρ к интервалу $(0, 1)$:

$$\mu = e^{-\rho} \iff \rho = -\ln \mu \quad (29)$$

На краях интервала решение нам известно:

$$\mu \sim 0 \implies z_m \approx -\sqrt{\ln \left(-\frac{\ln \mu}{2}\right)}, \quad (30)$$

$$\mu \sim 1 \implies z_m \approx \frac{\sqrt{\pi} \ln \mu}{2} - \frac{1}{\sqrt{\pi} \ln \mu}$$

Будем искать аппроксимирующую функцию в виде:

$$z_m = F_p(\mu) \cdot \frac{(1-\rho)(8+\rho)(\mu+0.13)(1-\mu)}{(3+\rho)\rho\sqrt{\pi}} \times$$

$$\times \sqrt{\frac{1}{\rho+1} + \pi \ln \left(1 + \frac{\rho}{2 - \frac{2 \ln \frac{\rho}{2} - 1}{(\rho+2)\sqrt{|\ln(1+\frac{\rho}{2})|}^3 \sqrt{\pi}}}\right)} \quad (31)$$

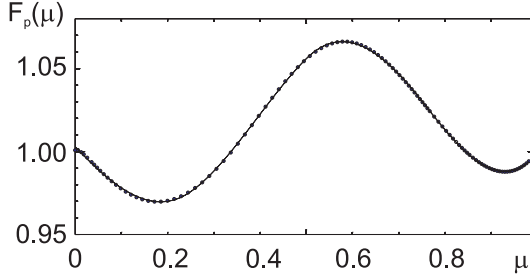


Рис. 2: График функции $F_p(\mu)$ (точки) и результат аппроксимации кубическим сплайном

Таблица 1: Коэффициенты сплайна дефекта 2 для аппроксимации функции $F_p(\mu)$.

Координата узла	0	0.25	0.5	0.75	1
Значение сплайна	1.00298	0.97574	1.05593	1.03058	0.99898
Производная	-0.29472	0.19545	0.27768	-0.35485	0.33206

График функции $F_p(\mu)$ и результат аппроксимации ее кубическим сплайном с пятью узлами приведен на рис. 2. Среднеквадратичное отклонение равно $4.1 \cdot 10^{-4}$, максимальная ошибка интерполяции $2.2 \cdot 10^{-3}$ достигается при $\mu = 1.0 \cdot 10^{-5}$. Коэффициенты сплайна приведены в табл. 1. Теперь мы можем вычислить сдвиг положения пика относительно центра Гауссова распределения:

$$x_m - x_g = \frac{\sigma_g^2}{\lambda} - \frac{\sigma_g |\lambda| \sqrt{2}}{\lambda} z_m = \Delta X_{mg}(\sigma_g, \lambda). \quad (32)$$

Функцию ΔX_{mg} легко написать на любом языке программирования, пользуясь вышеприведенными формулами.

3 Построение подгоночной функции на основе F_{B1}

В некоторых случаях может оказаться подходящей функцией непосредственно функция F_{B1} . Однако, чаще будет и эта функция иметь недостаточное статистическое согласие с экспериментальным распределением.

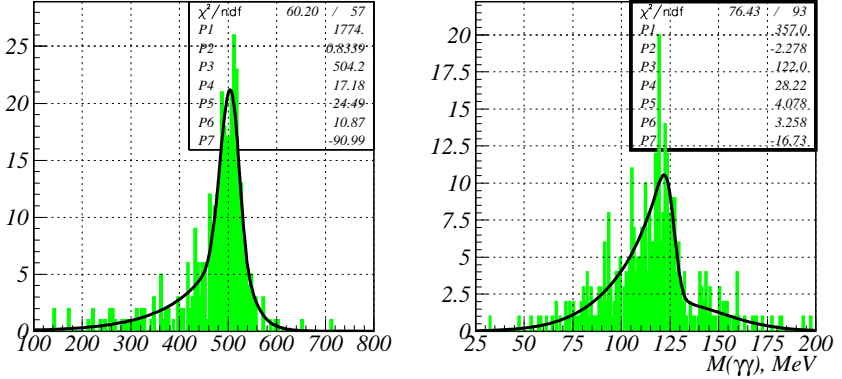


Рис. 3: Распределения по инвариантным массам пары фотонов. Слева — фотоны от распада η , справа — от распада π^0 . Подгонка функцией FIT2FB1

Можно было бы попытаться воспользоваться функцией, которая является сверткой трех распределений: Гауссового и двух разных экспоненциальных. Такая функция могла бы быть полезной в случаях, когда «хвосты» распределения справа и слева от пика не соответствуют Гауссовому распределению.

Однако, и этот случай, и другие сложные распределения гораздо более успешно подгоняются суммой разных функций F_{B1} с единым параметром — положением пика. Для суммы двух функций можно было бы написать такое выражение:

$$\begin{aligned}
 F_{2B1}(x; x_m, \xi, \sigma_1, \lambda_1, \sigma_2, \lambda_2) &= \\
 &= \cos^2 \xi \cdot F_{B1}(x; x_m - \Delta X_{mg}(\sigma_1, \lambda_1), \sigma_1, \lambda_1) + \quad (33) \\
 &+ \sin^2 \xi \cdot F_{B1}(x; x_m - \Delta X_{mg}(\sigma_2, \lambda_2), \sigma_2, \lambda_2).
 \end{aligned}$$

Пример использования такой функции приведен на рис. 3 (добавлен еще один параметр — общий множитель A). В принципе, в более сложных случаях можно использовать сумму и большего числа функций F_{B1} . Однако, в этом случае часто минимизация функции правдоподобия проходит неустойчиво, и требуются некоторые действия в помощь программе MINUIT. Наиболее простой и достаточно эффективный способ — поэтапное освобождение параметров, вначале зафиксированных на некоторых разумных значениях.

4 Заключение

Для подгонки гладких распределений с одним пиком предложена функция, являющаяся сверткой Гауссова и экспоненциального распределения.

В тех случаях, когда этой функции недостаточно гибкости для обеспечения удовлетворительного статистического согласия, можно использовать суммы нескольких таких функций с разными параметрами, но одинаковыми положениями пика.

А.Д. Букин

Подгонка асимметричных пиков

A.D. Bukin

Fitting function for asymmetric peaks

ИЯФ 2007-35

Ответственный за выпуск А.М. Кудрявцев
Работа поступила 28.11.2007 г.

Сдано в набор 29.11.2007 г.

Подписано в печать 29.11.2007 г.

Формат бумаги 60×90 1/16 Объем 0.7 печ.л., 0.6 уч.-изд.л.

Тираж 100 экз. Бесплатно. Заказ № 35

Обработано на IBM PC и отпечатано на
ротапринте ИЯФ им. Г.И. Будкера СО РАН
Новосибирск, 630090, пр. академика Лаврентьева, 11.