

基于精确点源响应的液体闪烁体探测器事例重建研究

(申请清华大学工学博士学位论文)

培 养 单 位 : 工程物理系

学 科 : 核科学与技术

研 究 生 : 窦 威

指 导 教 师 : CHEN SHAOMIN 教 授

二〇二二年十二月

**Events Reconstruction Based on
Accurate Point-Source Response Model
in Liquid-Scintillator Detector**

Thesis Submitted to

Tsinghua University

in partial fulfillment of the requirement

for the degree of

Doctor of Philosophy

in

Nuclear science and technology

by

Dou Wei

Thesis Supervisor: Professor CHEN SHAOMIN

December, 2022

学位论文指导小组、公开评阅人和答辩委员会名单

指导小组名单

CHEN	教授	清华大学
SHAOMIN		
王喆	副教授	清华大学
续本达	助理教授	清华大学

公开评阅人名单

肖永顺	副教授	清华大学
黄俊挺	副教授	上海交通大学

答辩委员会名单

主席	王义	教授	清华大学
委员	CHEN	教授	清华大学
	SHAOMIN		
	肖永顺	副教授	清华大学
	黄俊挺	副教授	上海交通大学
	续本达	副教授	清华大学
	于泽源	研究员	中科院
秘书	李进京	博士后	清华大学

关于学位论文使用授权的说明

本人完全了解清华大学有关保留、使用学位论文的规定，即：

清华大学拥有在著作权法规定范围内学位论文的使用权，其中包括：（1）已获学位的研究生必须按学校规定提交学位论文，学校可以采用影印、缩印或其他复制手段保存研究生上交的学位论文；（2）为教学和科研目的，学校可以将公开的学位论文作为资料在图书馆、资料室等场所供校内师生阅读，或在校园网上供校内师生浏览部分内容；（3）按照上级教育主管部门督导、抽查等要求，报送相应的学位论文。

本人保证遵守上述规定。

作者签名： 寅威

日 期： 2022.10.25

导师签名： S. Chen

日 期： 2022.10.25

摘要

中微子振荡证明中微子质量非零，是超出标准模型的新物理。目前中微子质量顺序等问题仍悬而未决，这些问题要求下一代中微子探测器拥有更大的体积和更高的能量分辨率。江门中微子观测站（JUNO）使用两万吨液体闪烁体和高覆盖率的光电倍增管，目标以六年运行时间使中微子质量顺序测量达到 3σ 的显著度。本论文针对在 JUNO 和类似实验中提高能量分辨率的关键问题开展研究，主要工作和创新点为：

1. 根据电子事例的顶点特征建立了点源响应模型。为描述光子在探测介质中传播的非齐次泊松过程，该模型对这个过程采用 Zernike 和勒让德组合的多项式逼近，使其可应用于任意尺寸的球形液体闪烁体探测器。为研究光子在液体闪烁体及其外以水为屏蔽介质的光学传播过程，本文利用 GEANT4 模拟了这种几何构型下的探测器光学效应，包括全反射、多次反射等，据此得到光子按照不同路径的传播方式。对不同路径光子的传播分别用多指数函数描述，改进了光学传播过程的多项式逼近方法，以提升模型精度。

2. 基于点源模型我们描述了多点源事例。中微子信号与任意本底混合包括了暗噪声、堆积和正电子事例，光子传播仍是非齐次泊松过程。通过构造基于该模型的似然函数重建了信号及其本底的能量和位置。与时间窗法相比，我们发现在 JUNO 中该模型有助于剥离暗噪声对能量测量的贡献，由此相对提升了 1% 的能量分辨率。此外，对于堆积事例和正电子事例可借助该模型通过多点源的分辨能力提升 0.5%。

3. 把该模型进一步用于处理 JUNO 实验中内部支撑结构的影响，并基于其几何特征对模型添加了非球对称修正。本文利用菲涅尔定律预测了受支撑结构影响的光子范围，并在该范围内基于模拟数据确定了影响程度，以作为点源响应模型的修正。修正后的模型用于重建可以提升 3% 的能量分辨率。

关键词：中微子，液体闪烁体；事例重建；点源响应模型；PMT 暗噪声

Abstract

Neutrino oscillations indicate that neutrino has non-zero mass, showing new physics beyond the Standard Model. The neutrino mass ordering is still unsolved, requiring neutrino experiments with larger volume and higher energy resolution next generation. Jiangmen Underground Neutrino Observatory (JUNO) is going to use 20 000 t liquid scintillator and high-coverage photo-multiplier tubes, aiming to measure neutrino mass ordering with a significance of 3σ in 6 years. This paper focuses on the key issues of energy resolution improvement in JUNO and similar experiments. The main work and innovations are as follows:

1. We model the point source response model according to the vertex features of the electron events. The photon propagation process is an inhomogeneous Poisson process. To describe this process, the model utilizes Zernike and Legendre polynomials to make approximations, which is applicable to any spherical liquid scintillator detectors. This paper uses GEANT4 to study the optical process of photon propagation in the liquid scintillator with a water buffer. The optical effects include total reflection, multiple reflections, etc., which help obtain photon propagation along different paths. Based on these paths, we describe the different photon propagations using multi-exponential functions. By obtaining a better approximation than polynomials, we improved the model accuracy.

2. We describe the multiple point-source cases based on the point-source model. When neutrino signals are mixed with any background, including dark noise, pile-up, and positron events, the photon propagation is still an inhomogeneous Poisson process. We construct the likelihood function based on the model, and reconstruct the energy and vertex of the signal as well as backgrounds. Compared with the time window method, we found that in JUNO, this model helps to reduce the contribution of the dark noise to the energy measurement, improving the energy resolution of 1 %. In addition, benefiting from the multi-site discrimination ability of the model, the energy resolution of pile-up and positron events improve by 0.5 %.

3. We further apply the model to deal with the influence of internal support structures in the JUNO experiment and modify the model based on the spherical asymmetry of the detector geometry. In this thesis, we use Fresnel's law to predict the region where photons are affected by the supporting structure and determine the influence based on the

simulation of this region. The results are used for the correction of the point-source response model. The reconstruction shows an energy resolution improvement of 3 % after the correction.

Keywords: Neutrino; Liquid scintillator; Event reconstruction; Point-source response model; Dark noise of the PMT

目 录

摘 要.....	I
Abstract.....	II
目 录.....	IV
插图清单.....	VIII
附表清单.....	XI
符号和缩略语说明.....	XII
第 1 章 引言	1
1.1 真空中的中微子振荡	1
1.2 中微子振荡的证据	3
1.2.1 太阳中微子.....	4
1.2.2 反应堆中微子.....	6
1.2.3 大气中微子和加速器中微子.....	7
1.3 中微子开放问题.....	8
1.4 基于液体闪烁体的中微子实验回顾与进展	10
1.4.1 Borexino.....	10
1.4.2 KamLAND 以及 KamLAND-Zen	12
1.4.3 锦屏中微子实验.....	12
1.4.4 台山反中微子实验.....	13
1.5 江门中微子实验.....	14
1.5.1 JUNO 中微子实验概况	14
1.5.2 信号与本底.....	15
1.5.3 显著度计算.....	16
1.5.4 JUNO 建设状态	17
1.6 本文结构安排	18
第 2 章 探测器的能量响应分析	19
2.1 液闪探测器中事例的定义.....	19
2.2 液体闪烁体的能量分辨率公式.....	19

2.3 能量分辨率的影响因素	22
2.3.1 PE 统计量	22
2.3.2 液体闪烁体的能量非线性	22
2.3.3 暗噪声项	25
2.3.4 波形重建	25
2.3.5 基于模拟的能量分辨率影响计算	26
2.4 使用重建算法提升能量分辨率	27
2.4.1 经典重建算法介绍	27
2.4.2 位置及能量分辨率的理论计算	29
2.4.3 本工作对重建算法的突破点	30
第 3 章 球对称假设下点源响应模型 (Probe) 研究	31
3.1 基于非齐次泊松过程的似然函数表示	31
3.2 函数基拟合 Probe 的理论推导	33
3.2.1 对数连接函数	34
3.2.2 平方根连接函数	35
3.3 基于模拟数据的 Probe 拟合	36
3.3.1 给定先验修正拟合 Probe	36
3.3.2 基于置信域法的拟合过程优化	37
3.3.3 使用子集迭代拟合 Probe	38
3.4 Probe 的拟合优度分析	39
3.4.1 使用蒙特卡洛方法获得 Probe	39
3.4.2 Probe 边缘分布与条件分布的拟合效果	40
3.4.3 基于验证集的最优模型选择	42
3.5 本章小结	43
第 4 章 模型中全反射和多次反射的影响研究	45
4.1 使用变系数分解法拟合 Probe	45
4.1.1 一维多项式的拟合结果	45
4.1.2 二维多项式的拟合结果	48
4.2 基于光学传播模型的 Probe 条件分布拟合	48
4.2.1 勒让德多项式拟合	48
4.2.2 光学传播模型的研究	51
4.2.3 基于光学传播模型的多峰拟合	55
4.2.4 使用验证集评选最优模型	57

4.3 光学传播模型对重建的影响	58
4.3.1 使用余弦距离近似重建似然函数	59
4.3.2 使用 3-PMT 模型简化余弦距离	61
4.3.3 防止重建简并的判据推导	63
4.3.4 其他反射对重建的影响研究	64
4.3.5 含时间信息的推广	65
4.4 本章小结	66
第 5 章 基于非齐次泊松过程的暗噪声甄别研究	67
5.1 扩展的非齐次泊松过程	67
5.2 混合模型与期望最大化算法	68
5.2.1 混合模型问题	68
5.2.2 期望最大化算法	69
5.2.3 E-step 下混合模型的优化	70
5.2.4 M-step 下混合模型的优化	71
5.3 含有暗噪声的重建公式推导	71
5.4 暗噪声重建结果	72
5.5 小结	73
第 6 章 探测器中的多点源重建研究	75
6.1 EM 算法的相关性研究	75
6.2 理想探测器 TAO 中的余弦距离计算	76
6.3 JUNO 中的双点源重建	81
6.3.1 基于 MCEM 算法的改进	81
6.3.2 堆积事例重建结果	83
6.3.3 正电子重建结果	87
6.4 本章小结	87
第 7 章 对非球对称修正的研究	89
7.1 球对称性破坏的光学成因研究	91
7.1.1 出、入水口对光路的影响	91
7.1.2 JUNO 中节点对光路的影响	91
7.2 基于几何光学的非球对称修正	93
7.2.1 节点所成的像的计算	94
7.2.2 单节点修正模型研究	95

7.3 多节点修正模型研究	97
7.4 基于非球对称修正的重建结果提升	101
7.5 本章小结	102
第 8 章 对扩展到电子学过程的展望	104
8.1 PMT 原理简述	104
8.2 与小 PMT 电子学的对接	105
8.3 与大 PMT 的电子学的对接	107
8.3.1 打拿级 PMT 波形重建	107
8.3.2 MCP-PMT 波形重建	108
8.3.3 Probe 与波形重建结果对接	108
第 9 章 总结与展望	109
9.1 总结	109
9.2 展望	110
参考文献	111
附录 A 附录	118
致 谢	120
声 明	121
个人简历、在学期间完成的相关学术成果	122
指导教师学术评语	123
答辩委员会决议书	124

插图清单

图 1.1	标准模型中的基本粒子。	2
图 1.2	中微子参与 CC, NC 的费曼图。	2
图 1.3	不同类型太阳的中微子。	4
图 1.4	SNO 测得的不同反应道的中微子通量 ^[20] 。	5
图 1.5	液闪探测器中 $\bar{\nu}_e$ 的快慢信号沉积能量示意图。	7
图 1.6	JUNO 预期的反应堆中微子正序和反序下的能谱 ^[41] 。	9
图 1.7	中微子双贝塔衰变费曼图 ^[46] 。	10
图 1.8	Borexino 结构示意图 ^[54] 。	11
图 1.9	KamLAND 及 KamLAND-zen 结构示意图。	12
图 1.10	通过 GEANT4 ^[66] 模拟的锦屏一吨探测器模型。	13
图 1.11	TAO 探测器结构示意图。	14
图 1.12	江门探测器位置 ^[8] 。	14
图 1.13	江门探测器几何 ^[41] 。	15
图 1.14	JUNO 预期的中微子质量顺序显著度和能量分辨率、曝光量的关系 ^[8] 。	17
图 2.1	液体闪烁体探测器工作简图。	20
图 2.2	初始动能为 $1 \text{ MeV}e^-$ 与 $1 \text{ MeV}e^+$ 沉积能量比总能量的分布。	23
图 2.3	JUNO 离线模拟软件中液闪和水的折射率谱, 版本为 J21v1r0-Pre1。	24
图 2.4	事例位于探测器中心时的不同类型光子的分布。	24
图 2.5	模拟事例位于探测器中心, 起始时刻为 0 ns 。第一击中约为 96 ns 。Cherenkov 代表切伦科夫光 PE, Scintillator 代表闪烁光 PE, Total 代表同时包含两者。(a)为 5000 个事例切伦科夫光和闪烁光 PE 的时间分布。(b)中利用粒子位置、出射方向和 PMT 位置计算了 PE 的角分布, 其中切伦科夫光为 total 与闪烁光之差, 在 $\cos \theta \approx 0.8$ 处有一个峰。	24
图 3.1	使用迭代拟合 Probe 流程图。	39
图 3.2	使用蒙卡 Probe 得到的边缘分布 (即期望 PE) 随 r, θ 变化图, 其中节点的定义见 1.5 小节。边缘分布可以看作 PMT 位于 0 度, 顶点及 PMT 的相对位置可以转化为 r, θ , 图中颜色表示不同顶点对该 PMT 期望 PE 的贡献。	40
图 3.3	对 JUNO 探测器 (含节点) 的 Probe 拟合结果。	41
图 3.4	使用测试集对不同迭代轮数、不同阶数的系数进行评分。	42
图 3.5	函数基拟合 Probe 顶点重建偏差。	43

图 4.1	分位数回归的效果展示。	47
图 4.2	变系数分解法的拟合结果。	49
图 4.3	不同阶数下与最佳模型的相对分数。	50
图 4.4	使用勒让德多项式对 Probe 的条件分布进行拟合。不同颜色代表了拟合时不同的阶数，仅有 96 阶系数对三峰拟合成功。(b)为左图平方之前的形式，有零点。	51
图 4.5	击中同一个 PMT 的不同光路示意图.....	52
图 4.6	JUNO 探测器中的光路。	53
图 4.7	给定 r 下的时间分布与 θ 的关系。	54
图 4.8	JUNO 模拟中不同粒子在液闪中的发光时间谱。	54
图 4.9	不同位置的飞行时间分布。	55
图 4.10	探测器中特定位置使用三指数分布与 Zernike \times 勒让德函数基 (121×96) 的比较结果，数字为期望 PE，对应不同形状的面积。	57
图 4.11	三指数分布拟合中三个峰 PE 数的 r, θ map。	58
图 4.12	d_{\cos} 与 $-\ln \mathcal{L}$ 的对比。	60
图 4.13	不同情况下的余弦距离。	60
图 4.14	顶点重建结果。	61
图 4.15	不同点源响应模型下的等比线。	62
图 4.16	避免简并的判据及最少需要的 PMT 个数.....	63
图 4.17	不同光学过程下 PE 数目的简并。	64
图 4.18	$r = 260 \text{ mm}$ 处的顶点重建结果。	65
图 5.1	混合模型示意图。	68
图 5.2	EM 算法流程图。	69
图 5.3	EM 算法原理图。	70
图 5.4	使用 EM 算法计算得到探测器中心的闪烁光的后验概率。	72
图 5.5	含暗噪声的重建结果。	74
图 6.1	TAO 探测器 Probe 的拟合效果。其中边缘分布对应期望 PE 数，由解析计算得到。条件分布对应击中时间的非齐次泊松过程，假设该分布形状固定，并由 40 阶勒让德多项式拟合得到。不同位置假设仅有时间平移项不同，该项由解析计算得到。	77
图 6.2	将两个 $1 \text{ MeV}e^-$ 事例合并成一个事例的结果。	77
图 6.3	双点源情况下顶点、能量重建结果。	79
图 6.4	固定 E, y, z, t 为真值对似然函数的扫描结果。	80

图 6.5	TAO 探测器中不同位置之间的余弦距离。.....	80
图 6.6	JUNO 探测器中两点的余弦距离。.....	81
图 6.7	多点源重建中 MCEM 算法流程图。.....	82
图 6.8	相距500 mm, 初始能量均为1 MeV 的双点源重建效果。.....	84
图 6.9	相距1 000 mm, 初始能量均为1 MeV 的双点源重建效果。.....	85
图 6.10	相距1 000 mm, 初始能量为1 MeV 和0.1 MeV 的双点源重建效果.....	86
图 6.11	使用电子模型重建正电子结果。.....	88
图 7.1	有无节点在不同光产额下的能量重建均值。.....	89
图 7.2	节点分布示意图。.....	90
图 7.3	蓝色的点对应 PMT 的位置, 橙色的点对应节点的位置, 处于 PMT 的缝隙中。.....	90
图 7.4	节点对 Probe 边缘分布的影响。.....	90
图 7.5	节点剖面图。.....	91
图 7.6	不同顶点半径下光子击中 PMT 表面的位置。.....	92
图 7.7	节点对光路遮挡及泄露效应的模拟。.....	93
图 7.8	节点所成的像。.....	94
图 7.9	出射光路计算示意图。.....	95
图 7.10	对球对称模型的扩展。.....	96
图 7.11	典型位置的节点修正示意图。.....	98
图 7.12	光子击中 PMT 的光路。.....	99
图 7.13	典型位置的多节点修正示意图。.....	100
图 7.14	单个事例的修正结果。.....	100
图 7.15	使用节点修正方法下的能量重建。.....	101
图 7.16	使用 $R_{MC,node}$ 的顶点、能量重建结果。.....	102
图 8.1	MCP-PMT 的原理及其电荷响应。.....	105

附表清单

表 1.1	中微子振荡中的参数的最佳拟合值 (bfp) ^[9] 。	4
表 1.2	不同实验的太阳中微子通量测量。	6
表 1.3	反应堆中微子实验的基线长度。	7
表 1.4	不同液闪实验的材料在1 MeV 时能量、顶点（中心）分辨率。	11
表 1.5	JUNO 实验中的本底信号 ^[8] ，数字为每天的事例数。	16
表 2.1	不同物理过程导致能量分辨率损失。	26
表 2.2	影响能量分辨率的要素。	30
表 4.1	JUNO 液闪中的衰减成分。	52
表 4.2	不同方法得到的 Probe 与理论上限的差距。	58
表 5.1	探测器中心不同时间窗有无暗噪声的能量分辨率（事例发生时刻为0 ns）。	

符号和缩略语说明

LS	液体闪烁体 (Liquid scintillator)
PMT	光电倍增管 (Photomultiplier tube)
MCP-PMT	微通道板光电倍增管 (Microchannel plate PMT)
SiPM	硅光电放大器 (Silicon photomultiplier)
PE	光电子 (Photoelectron)
TOF	飞行时间 (Time of flight)
TT	渡越时间 (Transit time)
TTS	渡越时间离散 (Transit time spread)
Probe	点源响应模型
SM	标准模型 (Standard Model)
SNU	太阳中微子单位 (Solar neutrino unit)
SSM	标准太阳模型 (Standard solar model)
PC	三甲苯
LAB	线性烷基苯
PPO	2,5-二苯基噁唑, 2,5-Diphenyloxazoze
bis-MSB	对-双(σ -甲基苯乙烯基)-苯
BC	重心法 (Bary-center)
MLE	极大似然估计 (Maximum Likelihood estimation)
EM	期望最大化算法 (Expectation Maximization)
MCMC	马尔科夫蒙特卡洛方法 (Markov Chain Monte Carlo)
MCEM	Monte Carlo Expectation Maximization
JUNO	江门中微子探测器
TAO	台山中微子探测器
CJPL	锦屏地下实验室 (China Jinping Laboratory)
DN	暗噪声
NMO	中微子质量顺序
NO	正序
IO	反序

第1章 引言

1930年 Pauli^[1]提出一种质量几乎为0，反应截面极小的粒子来解释贝塔衰变中能量、动量、角动量不守恒，并将其命名为中子。随着1932年 Chadwick 发现中子，Fermi^[2]将 Pauli 预言的粒子命名为中微子，并假设其零质量、零电荷且自旋为1/2。贝塔衰变的本质为

$$n \rightarrow p + e^{-} + \bar{\nu}_e. \quad (1.1)$$

Pauli 曾认为自己预言了无法发现的粒子。1942年王淦昌^[3]首先提出使用 Be 的 K 轨道电子俘获探测中微子，其原理为

$${}^7\text{Be} + e_K^{-} \rightarrow {}^7\text{Li} + \nu_e. \quad (1.2)$$

该实验于1952年被 Allen 证实^[4]，但并不是中微子存在的直接证据。

1956年 Cowan-Reines 使用4200L 液体闪烁体对反应堆中微子进行探测，该反应为反贝塔衰变（Inverse Beta decay, IBD）：

$$p + \bar{\nu}_e \rightarrow e^{+} + n. \quad (1.3)$$

该实验通过反符合技术减少了宇宙线的干扰，最终给出中微子的反应截面为 $6.3 \times 10^{-44} \text{cm}^{-2}$ ^[5]。这个实验开启了大实验装置的先河，Reines 获得1995年诺贝尔物理学奖。

在如图1.1所示的标准模型中，中微子作为轻子分为三代，除上述的电子中微子 ν_e 之外，缪子中微子 ν_μ 于1962年由 Brookhaven AGS 实验^[6]观测到，陶子中微子 ν_τ 于2000年被 DONUT 实验^[7]发现，填补了标准模型的空白。

三代中微子只参与弱相互作用，包括通过交换 Z^0 玻色子的中性流（NC）过程和交换 W^\pm 玻色子的带电流（CC）过程。本论文关注的中微子能量 CC 仅对电子中微子敏感。以上反应的费曼图如图1.2所示。

1.1 真空中的中微子振荡

标准模型中中微子的味本征态有三种 ν_e, ν_μ, ν_τ ，质量均为0。但是不同来源的中微子实验相继观测到中微子在传播过程中会出现味本征态的转化，意味着中微子发生了振荡。在中微子振荡理论中，中微子的质量非0，是超出标准模型的物理现象。

在该理论中，中微子的质量本征态有三种 ν_1, ν_2, ν_3 ，味本征态由质量本征态按

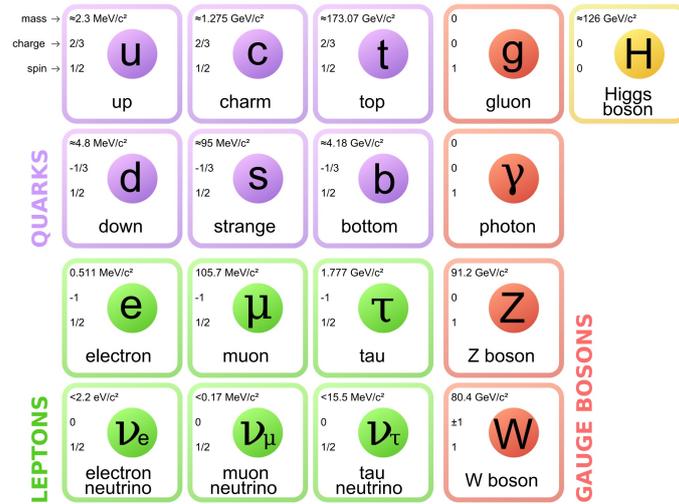


图 1.1 标准模型中的基本粒子。

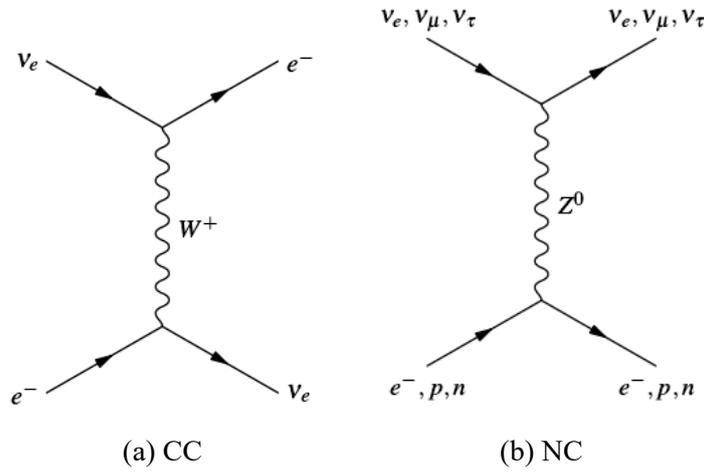


图 1.2 中微子参与 CC, NC 的费曼图。

照一定比例叠加而成：

$$|\nu_\alpha\rangle = \sum_i U_{\alpha i}^* |\nu_i\rangle. \quad (1.4)$$

其中 U 为 PMNS 矩阵，方程展开为

$$\begin{pmatrix} \nu_e \\ \nu_\mu \\ \nu_\tau \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} U_{e1} & U_{e2} & U_{e3} \\ U_{\mu1} & U_{\mu2} & U_{\mu3} \\ U_{\tau1} & U_{\tau2} & U_{\tau3} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \nu_1 \\ \nu_2 \\ \nu_3 \end{pmatrix}. \quad (1.5)$$

不同味中微子的振荡概率^[8]为

$$P(\nu_\alpha \rightarrow \nu_\beta) = \frac{\sum_i |U_{\alpha i}|^2 |U_{\beta i}|^2 + 2 \sum_{i < j} \left[\text{Re}(U_{\alpha i} U_{\beta j} U_{\alpha j}^* U_{\beta i}^*) \cos \Delta_{ij} - \text{Im}(U_{\alpha i} U_{\beta j} U_{\alpha j}^* U_{\beta i}^*) \sin \Delta_{ij} \right]}{(UU^\dagger)_{\alpha\alpha} (UU^\dagger)_{\beta\beta}}. \quad (1.6)$$

其中 $\Delta_{ij} \equiv \Delta m_{ij}^2 L / (2E)$ ，且 $\Delta m_{ij}^2 = m_i^2 - m_j^2$ 。对于反中微子需要对 U 取复共轭，因此反电子中微子的存活概率为

$$P(\bar{\nu}_e \rightarrow \bar{\nu}_e) = 1 - \frac{4}{(\sum_i |U_{ei}|^2)^2} \sum_{i < j} \left(|U_{ei}|^2 |U_{ej}|^2 \sin^2 \frac{\Delta m_{ij}^2 L}{4E} \right). \quad (1.7)$$

其中 U 可以写作三个混合角和三个 CP 破坏相角的形式：

$$U = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & c_{23} & s_{23} \\ 0 & -s_{23} & c_{23} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_{13} & 0 & s_{13} e^{-i\delta} \\ 0 & 1 & 0 \\ -s_{13} e^{-i\delta} & 0 & c_{13} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_{12} & s_{12} & 0 \\ -s_{12} & c_{12} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{i\rho} & & \\ & e^{i\sigma} & \\ & & 1 \end{pmatrix} \quad (1.8)$$

$$= \begin{pmatrix} c_{12} c_{13} & s_{12} c_{13} & s_{13} e^{-i\delta} \\ -s_{12} c_{23} - c_{12} s_{13} s_{23} e^{i\delta} & c_{12} c_{23} - s_{12} s_{13} s_{23} e^{i\delta} & c_{13} s_{23} \\ s_{12} c_{23} - c_{12} s_{13} s_{23} e^{i\delta} & -c_{12} c_{23} - s_{12} s_{13} s_{23} e^{i\delta} & c_{13} s_{23} \end{pmatrix} P_\nu.$$

其中 $c_{ij} = \cos \theta_{ij}$ 以及 $s_{ij} = \sin \theta_{ij}$ ， P_ν 为对角矩阵，使用 ρ, σ 描述了马约拉纳相角，与振荡无关。此时反电子中微子存活概率为

$$P(\bar{\nu}_e \rightarrow \bar{\nu}_e) = 1 - \sin^2 2\theta_{12} c_{13}^4 \sin^2 \frac{\Delta m_{21}^2 L}{4E} - \sin^2 2\theta_{13} \left[c_{12}^2 \sin^2 \frac{\Delta m_{31}^2 L}{4E} + s_{12}^2 \sin^2 \frac{\Delta m_{32}^2 L}{4E} \right] \quad (1.9)$$

该式依赖于 Δm_{21}^2 ， Δm_{31}^2 ，但是目前实验仅能给出 $|\Delta m_{31}^2|$ 的值，其符号尚未确定，该值大于 0 代表正序，反之代表反序。 Δm_{31}^2 的符号是下一代中微子实验要解决的问题之一，将在 1.3 节讨论。目前中微子振荡模型中参数的最佳拟合值 (bfp) 如表 1.1 所示。

1.2 中微子振荡的证据

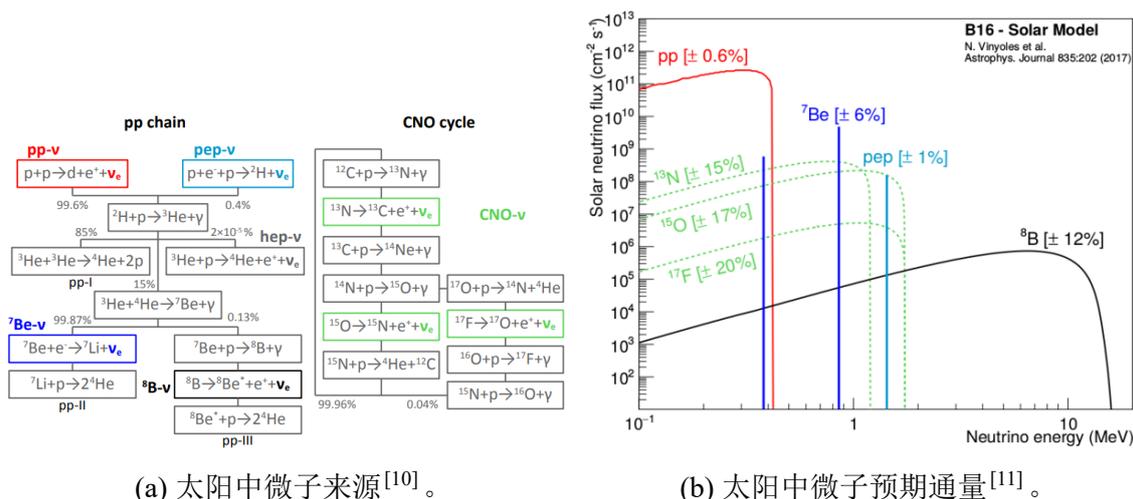
中微子根据其来源可分为太阳、大气、反应堆以及加速器中微子等。在不同实验上均观测到了其振荡的证据。

表 1.1 中微子振荡中的参数的最佳拟合值 (bfp)^[9]。

参数	bfp±1σ (正序)	bfp±1σ (反序)
$\Delta m_{21}^2 / 10^{-5} \text{eV}^2$	$7.42^{+0.21}_{-0.20}$	$7.42^{+0.21}_{-0.20}$
$\Delta m_{31}^2 / 10^{-3} \text{eV}^2$	$+2.515^{+0.028}_{-0.028}$	$-2.498^{+0.028}_{-0.029}$
$\sin^2 \theta_{12}$	$0.304^{+0.013}_{-0.012}$	$0.304^{+0.012}_{-0.012}$
$\sin^2 \theta_{23}$	$0.573^{+0.018}_{-0.023}$	$0.578^{+0.017}_{-0.021}$
$\sin^2 \theta_{13}$	$0.02220^{+0.00068}_{-0.00062}$	$0.02238^{+0.00064}_{-0.00062}$
$\delta_{\text{CP}}/^\circ$	194^{+52}_{-25}	287^{+27}_{-32}

1.2.1 太阳中微子

太阳的能量来源是核聚变，主要方式有 pp 链和 CNO 循环，如图 1.3(a)所示。图 1.3(b)展示了标准太阳模型 (Standard Sun model, SSM) 预测的中微子通量。



(a) 太阳中微子来源^[10]。

(b) 太阳中微子预期通量^[11]。

图 1.3 不同类型太阳的中微子。

图(a)显示了太阳中微子的产生过程，包含 pp 链和 CNO 循环。图(b)为预测的太阳标准模型下不同的中微子通量。

太阳中微子探测器主要分为四代：

第一代:放射化学法 20 世纪 60 年代后期,由 Davis 主导的 Homestake 实验^[12] 拥有 1478 m 的埋深,使用 C_2Cl_4 对太阳中微子进行观测,该反应为

$$^{37}\text{Cl} + \nu_e \rightarrow ^{37}\text{Ar} + e^- \quad (1.10)$$

最终观测到的中微子通量仅有理论预言的 1/3。同时期的实验还有 SAGE^[13],

GALLEX^[14], GNO^[15]等实验, 其探测原理为



中微子通量测量结果均低于预期。

第二代：水探测器 神冈实验^[16]采用3000t超纯水为介质, 利用式(1.12)中微子与电子的弹性散射(ES), 对电子在水中发出的切伦科夫光子进行观测。



神冈随后升级为超级神冈, 由50000t超纯水和超过13000个PMT组成, 测量的⁸B通量仅有SSM预测值约49%^[17]。

第三代：重水探测器 SNO^[18]采用重水, 可同时发生ES、CC以及NC, 三代中微子均可发生ES, 其中 ν_e 的截面最大, 反应为



仅有 ν_e 参与CC, 反应为



三代中微子NC截面相同, 反应为



最终通过NC测得的中微子通量与SSM相符, 但是ES和CC都有明显差异, 说明三代中微子总量不变, 但是 ν_e 的通量发生了改变, 结果如图1.4所示^[19]。

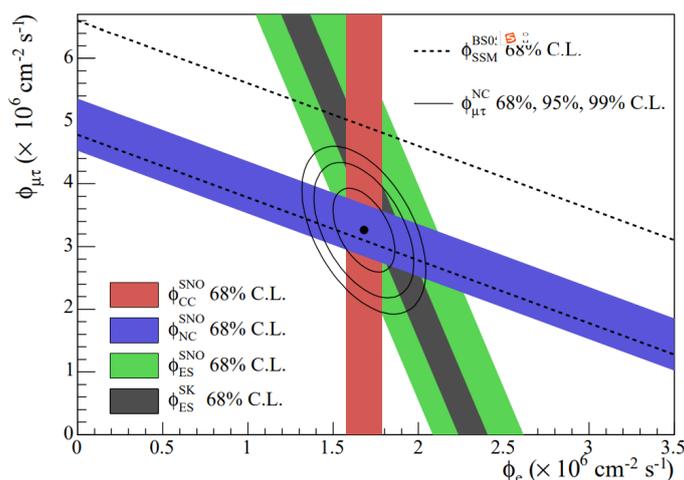


图 1.4 SNO 测得的不同反应道的中微子通量^[20]。

第四代：液体闪烁体探测器 液体闪烁体^[21]探测器极大的提高了探测器的能量分辨率, 并降低了探测阈值, 从而提供了对~1 MeV 甚至亚MeV 能量测量的可能性。其中 Borexino 实验^[22]首次测出 pp, pep 和 CNO 中微子, 并给出了 pp, pep,

^7Be , ^8B 和 CNO 中微子通量。KamLAND 实验^[23] 也给出了 ^7Be 和 ^8B 的测量结果。

以上实验测量结果总结为表1.2, 其中 SNU (太阳中微子单位, solar neutrino unit) 指每秒每个靶原子俘获 10^{-36} 次。观测到的太阳中微子通量明显低于太阳标准模型的预测值, 是中微子振荡理论的重要实验证据。

表 1.2 不同实验的太阳中微子通量测量。

实验名称	靶材料	中微子种类	测量值
Homestake ^[12]	C_2Cl_4	全部	$2.56 \pm 0.16 \pm 0.15$ SNU
SAGE ^[24]	Ga	全部	$65.4^{+3.1+2.6}_{-3.0-2.8}$ SNU
GALLEX + GNO ^[15]	GaCl_3	全部	$69.3 \pm 4.1 \pm 3.6$ SNU
KamioKande ^[25]	H_2O	^8B	$2.80 \pm 0.19 \pm 0.33 \times 10^6 \text{cm}^{-2}\text{s}^{-1}$
Super-KamioKande ^[17]	H_2O	^8B	$2.345 \pm 0.014 \pm 0.036 \times 10^6 \text{cm}^{-2}\text{s}^{-1}$
SNO ^[18]	D_2O	^8B	$5.25 \pm 0.16^{+0.11}_{-0.13} \times 10^6 \text{cm}^{-2}\text{s}^{-1}$
Borexino ^[26]	LS	pp	$6.1 \pm 0.5^{+0.3}_{-0.5} \times 10^{10} \text{cm}^{-2}\text{s}^{-1}$
		pep	$1.27 \pm 0.19^{+0.08}_{-0.13} \times 10^8 \text{cm}^{-2}\text{s}^{-1}$
		^7Be	$4.99 \pm 0.11^{+0.06}_{-0.08} \times 10^9 \text{cm}^{-2}\text{s}^{-1}$
		^8B	$5.68^{+0.39+0.03}_{-0.41-0.03} \times 10^8 \text{cm}^{-2}\text{s}^{-1}$
		CNO	$7.0^{+3.0}_{-2.0} \times 10^6 \text{cm}^{-2}\text{s}^{-1}$
KamLAND	LS	^7Be ^[27]	$5.82 \pm 1.02 \times 10^9 \text{cm}^{-2}\text{s}^{-1}$
		^8B ^[28]	$2.77 \pm 0.26 \pm 0.32 \times 10^6 \text{cm}^{-2}\text{s}^{-1}$

1.2.2 反应堆中微子

反应堆通过核裂变释放出大量的 $\bar{\nu}_e$, 主要核素有 ^{235}U , ^{238}U , ^{239}Pu , ^{241}Pu ^[29]。探测反应堆中微子的主要反应为 IBD:

$$\bar{\nu}_e + p \rightarrow e^+ + n. \quad (1.16)$$

该反应阈值为1.8 MeV。

若使用液体闪烁体进行探测, 其物理图像为: 正电子通常在迅速沉积全部动能后湮灭, 该过程将会释放出两个能量为0.511 keV 的 γ , 也有极低概率放出三个 γ ^[30]。这些 γ 通过康普顿散射和光电效应将能量转移给电子, 整个事例的尺度约在几十厘米量级。随后中子俘获质子 ($n\text{H}$ 俘获) 释放出2.2 MeV 的 γ , 其平均时间为200 us。正电子沉积能量的过程为快信号, $n\text{H}$ 俘获产生的 γ 通过康普顿散射和光电效应沉积能量, 该过程为慢信号。快信号中的沉积能量包括正电子的动能及

其湮灭产物的能量，其中正电子的动能和中微子能量直接相关。

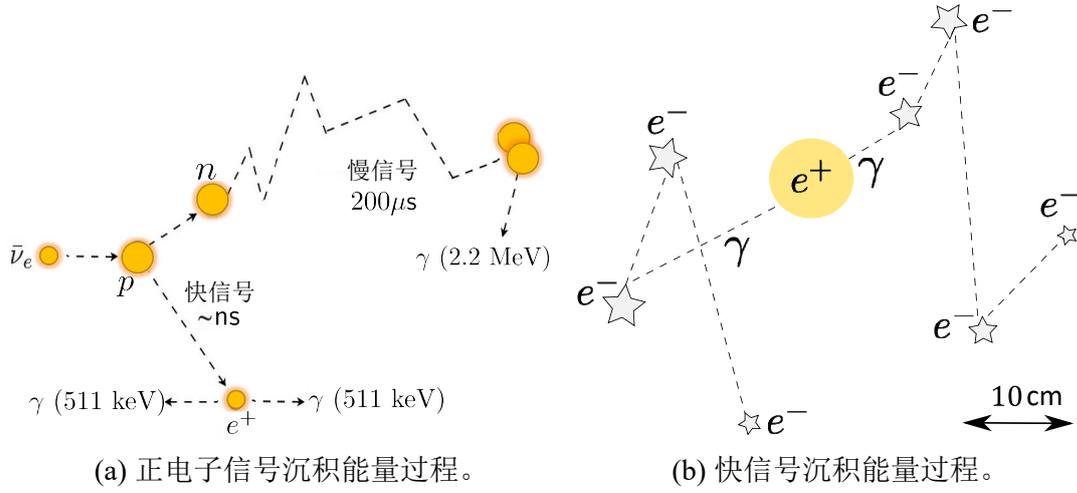


图 1.5 液闪探测器中 $\bar{\nu}_e$ 的快慢信号沉积能量示意图。

中微子探测器到反应堆的距离为基线长度，不同基线长度对不同的振荡参数敏感，其中短基线(约1 km)可测量 $\sin^2 2\theta_{13}$ ，长基线可更准确的测量 Δm_{21}^2 及 θ_{12} 。其中基线长度为约50 km 对中微子质量顺序敏感。不同实验汇总为表1.3，其中 KamLAND 见1.4.2节，JUNO 见1.5节。

表 1.3 反应堆中微子实验的基线长度。

实验名称	基线长度/(km)	备注
Double CHOOZ ^[31]	1.05	
RENO ^[32]	1.38	
Daya Bay ^[33]	1.65	
JUNO	53	在建中
KamLAND	180	

1.2.3 大气中微子和加速器中微子

大气中微子主要来源是高能宇宙射线击中大气中的原子核后产生的强子簇射。产物中的 π 介子可以产生 ν_μ 以及 ν_e ，是大气中微子的主要来源，其反应包括

$$\pi^+ \rightarrow \mu^+ + \nu_\mu, \quad (1.17)$$

$$\pi^- \rightarrow \mu^- + \bar{\nu}_\mu. \quad (1.18)$$

随后的 μ^\pm 继续衰变，反应为

$$\mu^+ \rightarrow e^+ + \nu_e + \bar{\nu}_\mu, \quad (1.19)$$

$$\mu^- \rightarrow e^- + \bar{\nu}_e + \nu_\mu. \quad (1.20)$$

产生的 μ^\pm 的通量约为 ν_e 的两倍。在能量为1 GeV 时大约服从这个规律。能量更高时到达地球表面还未衰变的 μ 变多，导致该通量比值偏高；在低能时，地球磁场会影响宇宙射线方向向上和向下的比例，从下方来的中微子要穿越整个地球。超级神冈实验中观测的是选择了行为像 μ 的事例 (μ -like events)，假设中微子不发生振荡且与物质发生反应的截面极小，则上下方向的中微子通量应该相等，定义不对称性为

$$A = \frac{\text{up} - \text{down}}{\text{up} + \text{down}}. \quad (1.21)$$

其中 up 代表向上的事例,包含天顶角 $\cos \theta \in [-1, -0.2]$ 的事例。down 代表向下的事例,包含天顶角 $\cos \theta \in [0.2, 1]$ 的事例。最终测得 A 的结果为 $-0.296 \pm 0.048 \pm 0.001$ ，以超过 6σ 的显著度证实了 ν_μ 到 ν_τ 的振荡^[34]。

为了验证超级神冈观测到的大气中微子振荡现象，加速器中微子利用加速器中产生的纯 ν_μ ，其振荡概率为

$$P(\nu_\mu \rightarrow \nu_\tau) = \sin^2 2\theta \sin^2 \left(\frac{1.27 \Delta m^2 L}{E_\nu} \right). \quad (1.22)$$

其中 E_ν 为以GeV 表示的中微子能量， L 为以km 表示的基线距离， Δm^2 为质量平方差， θ 为对应的混合角，由 θ_{23} 主导。KEK 实验利用超级神冈观测 ν_μ ，最终接收到的事例数为 112，而预期为 $158.1_{-8.6}^{+9.2}$ ，以 4.3σ 的显著度证实了 ν_μ 的振荡^[35]，并给出 $\sin^2 2\theta = 1$ 时 Δm^2 的最佳拟合值为 $2.8 \times 10^{-3} \text{ eV}^2$ 。随后的 MINOS^[36]，T2K^[37]，NOvA^[38] 等实验也相继观测到 ν_μ 及 $\bar{\nu}_\mu$ 的消失，并给出了更为精确的 $\sin^2 \theta_{23}$ 的限制，如表1.1所示。OPERA 实验^[39] 则通过观测 ν_τ 的出现证明了 $\nu_\mu \rightarrow \nu_\tau$ 的振荡。

1.3 中微子开放问题

中微子振荡需要六个参数拟合，此外还有与振荡无关的用于描述马约拉纳相角的两个参数。目前仍然需要测量的参数有 Δm_{31}^2 的符号， δ_{CP} 的精确测量以及粒子是否为马约拉纳粒子。除此之外，还有中微子的绝对质量大小、惰性中微子、 $\theta_{23} > 45^\circ$ 还是 $\theta_{23} < 45^\circ$ 等。

Δm_{31}^2 的符号 该问题被称为中微子的质量顺序问题，式 (1.9) 显示电子存活概率不仅与混合角有关，还与中微子的质量平方差有关。但是 Δm_{31}^2 的符号无法确定，其中 Δm_{31}^2 基本和大气中微子相关， Δm_{21}^2 主要和太阳中微子相关，但是反应堆中微子测量的结果更准确。其中

$$|\Delta m_{\text{atm}}^2| \approx |m_3^2 - m_1^2|, \quad (1.23)$$

$$\Delta m_{\text{sol}}^2 = m_2^2 - m_1^2. \quad (1.24)$$

由于 Δm_{atm}^2 比 Δm_{sol}^2 大出两个量级，因此中微子质量本征态对应的质量从小到大排列有两种可能， $m_1 < m_2 < m_3$ 为正序 (NO)， $m_3 < m_1 < m_2$ 为反序 (IO)，其中正序的 $|\Delta m_{31}^2|$ 要大于反序，使得正序的振荡频率更高，如图1.6所示。因此区分正序或者反序需要很高的能量分辨率。目前的实验结果给出正序具有 2.7σ 的显著度^[40]，JUNO 实验旨在将该显著度测量提升至 3σ 。

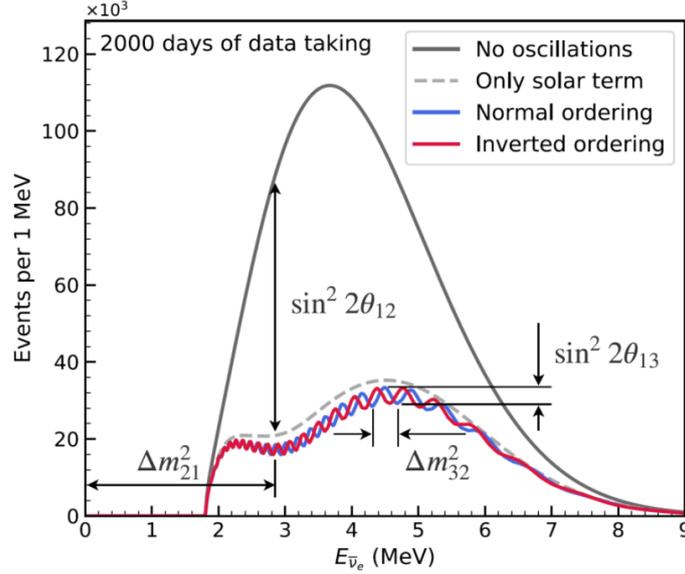


图 1.6 JUNO 预期的反应堆中微子正序和反序下的能谱^[41]。

中微子无振荡时，JUNO 观测到的反应堆中微子能谱为灰色实线，经过太阳项振荡后变为灰色虚线，而正序和反序将会进一步振荡为蓝线和红线。

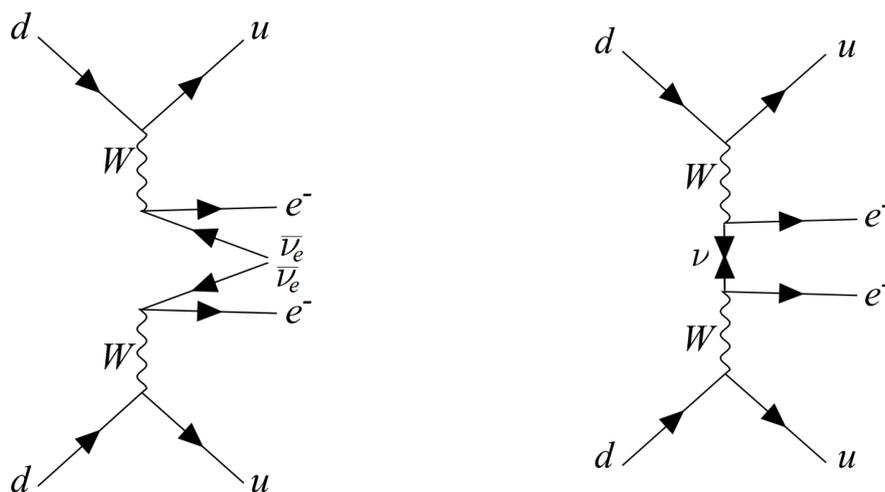
δ_{CP} 的测量 目前 δ_{CP} 主要是测量正反中微子的振荡不对称性，其中不对称性定义为

$$A_{\text{CP}} = \frac{P(\nu_{\mu} \rightarrow \nu_e) - P(\bar{\nu}_{\mu} \rightarrow \bar{\nu}_e)}{P(\nu_{\mu} \rightarrow \nu_e) + P(\bar{\nu}_{\mu} \rightarrow \bar{\nu}_e)}. \quad (1.25)$$

δ_{CP} 是当前 T2K^[42] 与 NOvA^[43] 主要目标之一，也是未来 Hyper-K^[44] 和 DUNE^[45] 的主要目标之一。

无中微子双贝塔衰变 如果中微子是马约拉纳粒子，其反粒子为其本身。无中微子双贝塔衰变 ($0\nu\beta\beta$) 可以为中微子是狄拉克型还是马约拉纳型粒子提供直接的证据，与图1.7(a)中两个贝塔衰变的费曼图相比， $0\nu\beta\beta$ 如图1.7(b)所示。

这些开放问题对下一代中微子实验提出了更高的要求：必须拥有更大的靶质量和更高的能量分辨率。虽然半导体探测器能量分辨率极高，但靶质量难以达到吨量级甚至万吨量级。与之相比，液体闪烁体、水、液氙等材料受下一代中微子实验青睐。液体闪烁体在拥有出色光产额的同时且成本较低，目前有 KamLAND-



(a) 双中微子双贝塔衰变费曼图。

(b) 无中微子双贝塔衰变费曼图。

图 1.7 中微子双贝塔衰变费曼图^[46]。

Zen^[47-48], SNO+^[49]等实验使用。

1.4 基于液体闪烁体的中微子实验回顾与进展

与纯水作为探测介质的探测器相比，液体闪烁体最大的特点是其光产额远远超过切伦科夫光的光子数，约为 $10^3 \sim 10^4/\text{MeV}$ ，从而极大地降低了对中微子事例探测的能量阈值。液闪探测器使用有机液体闪烁体，其主要成分包括荧光物质、波长位移剂等。带电粒子在液体闪烁体中运动时，通过碰撞将能量传递给荧光物质使其激发，处于激发态的液闪分子随后退激，释放出各向同性的光子，并通过波长位移剂转化到波长更长的波段。从粒子沉积能量到释放出光子的过程中，光子的产生时刻称为发光时间（time profile）。JUNO 实验中电子的发光时间近似服从多个指数分布叠加而成的概率密度分布，指数的衰减项称为衰减时间，液闪中可以同时存在有多种衰减时间各异的成分。切伦科夫光在这个过程中依然存在，但难以从液闪光子中分离，因此粒子的初始方向信息几乎丢失。

液闪探测器拥有良好的顶点、能量分辨率，一些液闪探测器的参数如表1.4所示，其中能量分辨率定义为 $\sigma_E/\sqrt{E[\text{MeV}]}$ ， σ_E 为特定能量下的位于探测器中心的能量重建结果标准差。

1.4.1 Borexino

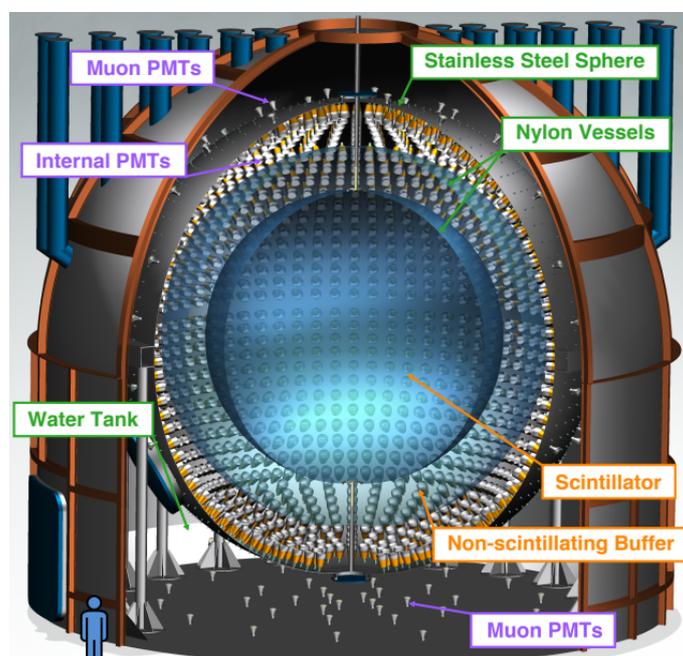
Borexino CTF 实验是 Borexino 的前身，其位于意大利的 Gran Sasso 实验室，包含4.3t的液闪，缓冲物质为厚达4.5m的纯水，用于屏蔽外来本底。其拥有 100 个 PMT，主要目的是实现对大质量超纯液闪探测器的运作、测量液闪放射性本底和

表 1.4 不同液闪实验的材料在1 MeV 时能量、顶点（中心）分辨率。

实验名称	中心物质	缓冲物质	全反射	能量分辨率	顶点分辨率
Borexino CTF	PC + PPO	水	有		
Borexino	PC + PPO	PC	无	5 %	$\sim 10 \text{ cm}^{[50]}$
KamLAND	十二烷 + 偏三甲苯	油	无	6.4 %	$\sim 12 \text{ cm}^{[51]}$
锦屏一吨原型机	LAB + PPO + bis-MSB	水	有	12 %	
JUNO	LAB + PPO + bis-MSB	水	有	3 %	$\sim 8 \text{ cm}^{[52]}$
TAO	LAB + PPO + bis-MSB	LAB	无	1.5 %	$\sim 1 \text{ cm}$

校准，同时积累工程经验。Borexino CTF 是第一个实现亚MeV 量级的大型探测器，其本底率极低，在 0.25-2.5MeV 范围内达到 $0.03/\text{kg}^{-1}\text{keV}^{-1}\text{yr}^{-1}$ ^[53]。

Borexino 的结构如图1.8所示，其中心包含300t 的液闪，成分为三甲苯（PC）和 $\sim 0.17\%$ 的 2,5-二苯基噁唑（PPO），考虑吸收和重发射后衰减时间约为5 ns。液闪位于直径为8.5 m 的球内，其有效体积为中心半径6 m，有效靶质量为100t。PMT 固定在直径为13.7 m 的钢架上。缓冲介质为纯 PC，保证了折射率密度与内部介质相似却无法发光^[53]。

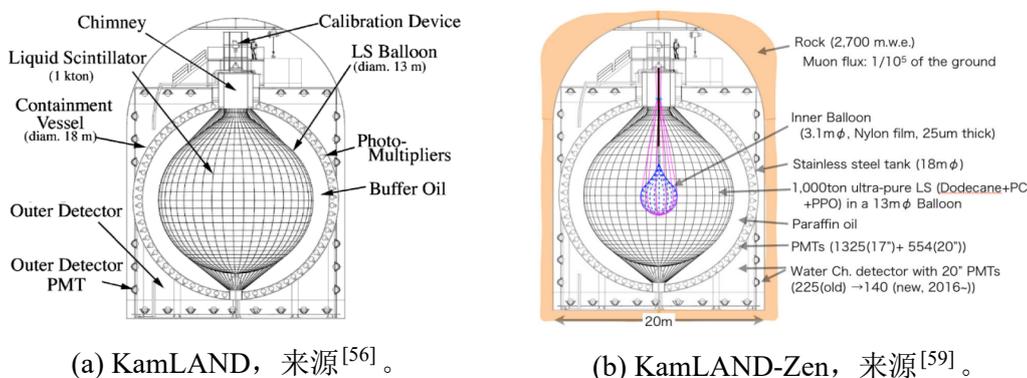
图 1.8 Borexino 结构示意图^[54]。

Borexino 可以达到 500 光电子 (PE)/MeV，能量分辨率约为 $5\%/\sqrt{E[\text{MeV}]}$ ^[50]。其对不同通量太阳中微子的测量结果可见表1.2，并首次观测到 CNO 中微子，以及第一次在液闪中观测到亚MeV 级太阳中微子的方向信息^[55]。

1.4.2 KamLAND 以及 KamLAND-Zen

KamLAND 位于神冈实验室，拥有1 000 m 的埋深，等效水深约为2 700 m，宇宙线通量为地平线的 10^{-5} 。其目标是测量反应堆中微子，距离核电站的平均基线长度约为180 km。KamLAND 探测器的结构如图1.9(a)所示。其中靶物质为1 kt 的超纯液闪，填充于直径13 m 的球内。外侧有 1879 个 20-inch 的 PMT 位于直径为18 m 的钢架上，PMT 覆盖率达34 %。中心采取油作为缓冲介质。其能量分辨率为 $6.4\%/\sqrt{E[\text{MeV}]}$ ，顶点分辨率为 $12 \text{ cm}/\sqrt{E[\text{MeV}]}$ ^[51]。

KamLAND 实验从 2002 年开始运行，首次观测到反应堆中微子的通量是无振荡假设的 $0.611 \pm 0.085 \pm 0.041$ ，是反应堆中微子振荡的直接证据^[56-57]。同时也对太阳中微子进行了测量，并给出了中微子振荡参数的限制范围^[58]。



(a) KamLAND, 来源^[56]。

(b) KamLAND-Zen, 来源^[59]。

图 1.9 KamLAND 及 KamLAND-zen 结构示意图。

2011 年起，KamLAND 升级为 KamLAND-Zen，旨在通过 ^{136}Xe 测量无中微子双贝塔衰变。主要改动为在探测器的中心加了液氙球，如图1.9(b)所示，最终给出无中微子双贝塔衰变的半衰期 $T_{1/2}^{0\nu} > 2.3 \times 10^{26}$ 年^[48]。同时在反应堆停止期间给出地球中微子的通量为 $(3.6 \pm 0.8) \times 10^6 \text{ cm}^{-2} \text{ s}^{-1}$ ^[60]。

1.4.3 锦屏中微子实验

锦屏中微子实验位于四川省的西昌市内中国锦屏地下实验室^[61]一期实验厅中，山体的最大埋深约为2 400 m，其物理目标包括对太阳、地球、超新星遗迹中微子的测量^[62]。其一吨原型机从 2017 年 5 月开始采数，不同时期探测器能标等参数可见于赵林等^[63]的工作。

一吨原型机最外侧为铅屏蔽层，内部由不锈钢桶包裹。钢桶中心为盛满液闪的亚克力球壳，以液闪中心为坐标系原点，球壳的半径为0.645 m，厚5 mm。在球壳上方有进/出水口结构，下方有支撑的底座。30 个 PMT 按照垂直方向绕 z 轴排为四排，数目分别为 5, 10, 10, 5，其高度分别为 $\pm 0.700 \text{ m}$, $\pm 0.245 \text{ m}$ 。PMT 中心位

于半径为0.832 m 的球面，光阴极与亚克力球壳外表面最小距离约为0.06 m^[64]。

锦屏中微子实验采用的液体闪烁体为慢液闪，为今后在液体闪烁体中区分闪烁光和切伦科夫光预研^[65]。该配方以线性烷基苯（LAB）作为溶剂，掺有 0.01g/L 的 PPO 作为荧光物质以及0.001 g/L 的 bis-MSB 作为波长位移剂。对于电子，可以达到 4200 光子/MeV 和 65 PE/MeV，探测器中心能量分辨率约为 $12\%/\sqrt{E[\text{MeV}]}$ 。

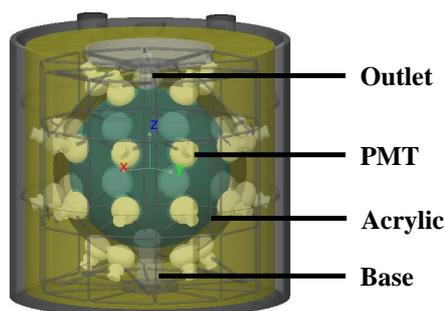


图 1.10 通过 GEANT4^[66]模拟的锦屏一吨探测器模型。

锦屏一吨原型机的光学性质与 JUNO 相似，本文将其视为 JUNO 的缩小版，在第4章用于研究探测器中以全反射为主的光学传播过程，并于4.3节讨论了不同光学传播过程对重建的影响。

1.4.4 台山反中微子实验

台山反中微子实验（Taishan Antineutrino Observatory, TAO）^[67]是 JUNO 计划中的卫星实验。其基线长度约为30 m，实验使用2.8 t 的掺钆液闪，外层由超过 4000 片量子效率大于50% 的硅光电放大器 (SiPM) 观测，覆盖率接近100%。最终可以实现4 500 PE/MeV。由于 SiPM 本底较高，其被固定在-50 度的铜面上。TAO 主要目的是为 JUNO 提供精确的反应堆参照能谱，预期可以实现 $1.5\%/\sqrt{E[\text{MeV}]}$ 的能量分辨率。

在本文中，TAO 作为顶点分辨率极高且没有全反射的理想探测器，用于验证多点源重建的可行性，可见于第6章。

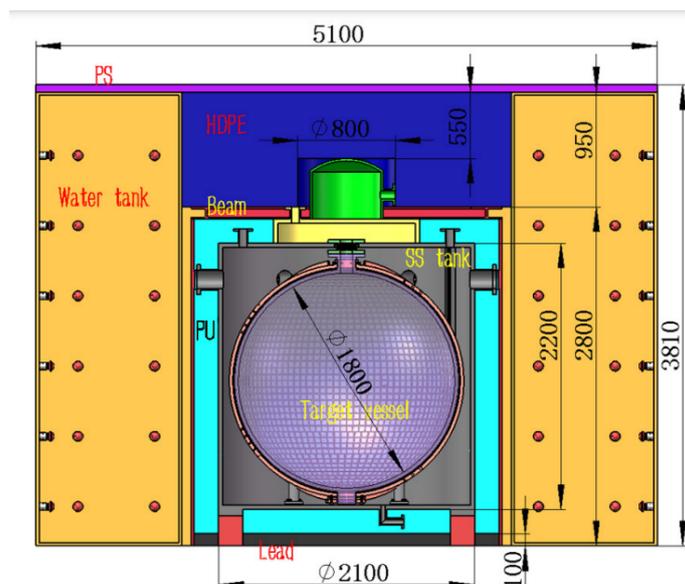


图 1.11 TAO 探测器结构示意图。

1.5 江门中微子实验

1.5.1 JUNO 中微子实验概况

江门中微子实验 (JUNO) 位于广东省江门市，主要目标为通过反应堆中微子测量中微子质量顺序^[8]。实验选址距离阳江核电站与台山核电站均为53 km，如图1.12所示，其埋深为700 m。JUNO 计划于 2023 年开始取数，在六年达到中微子质量顺序测量 3σ 的显著度。其对能量分辨率的要求为 $3\%/\sqrt{E[\text{MeV}]}$ 。

图 1.12 江门探测器位置^[8]。

JUNO 探测器的几何如图1.13所示：其整体为一圆柱，底面直径为43.5 m，高度为44 m。中心是半径为17.7 m 的亚克力球壳，填充了20 kt 的液体闪烁体。亚克力球壳外以水作为缓冲介质，被称为水池 (Water Pool)。水中有用于固定的钢架，共有 17612 个大 PMT 被安装在半径为19.4 m 的球面上，这些 PMT 分为滨松 (Hamamatsu) PMT 和北方夜视 (NNVT) PMT，直径为50.8 cm，覆盖率达75%。除此之外，JUNO 在大 PMT 缝隙中安装了 25600 个来自海南展创 (HZC) 的小 PMT，使得覆盖率提升至78%。水池的侧壁上也安装了 PMT，用于反符合外来 μ 事例。在探测器的顶

端有 top tracker, 可以用于估计 μ 入射方向^[68]。

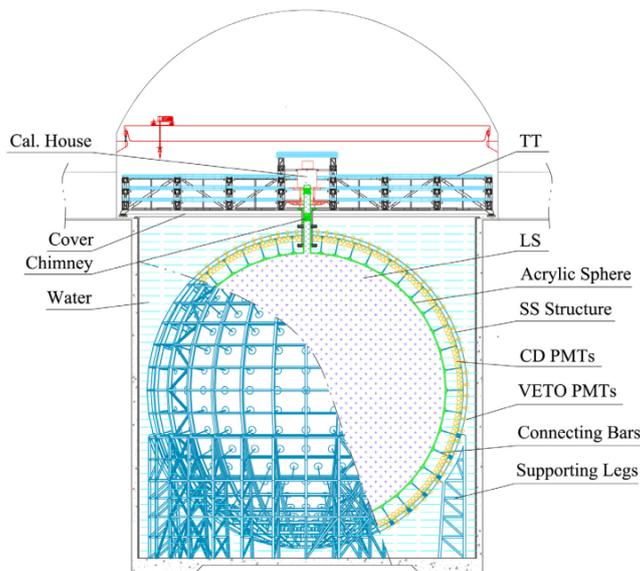


图 1.13 江门探测器几何^[41]。

探测器在亚克力的外表面共有 590 个锚结构（节点）连接着金属支撑杆，对应图1.13中的 Connecting Bars, 亚克力球壳的上方有进水口，对应 Chimney。这些结构都破坏了探测器的球对称性，我们将在第7章详细讨论节点对重建性能的影响。

1.5.2 信号与本底

实验的信号为 IBD, 如式 (1.16) 所示, 其主要本底^[8]其中包括

- ${}^9\text{Li}/{}^8\text{He}$: 由于 JUNO 埋深只有近700m, 其 μ 通量约为4Hz. ${}^{12}\text{C}$ 是液闪的主要元素之一, 被 μ 击中后可以产生多种原子序数小于 6 的宇生同位素, 其中 ${}^9\text{Li}$, ${}^8\text{He}$ 在发生 β 衰变同时放出中子的分支比约为50.5% 和 16%, 对应的半衰期分别为0.178 s 和0.119 s, 反应为



产物沉积能量过程与 IBD 相似, 难以区分。

- ${}^{13}\text{C}(\alpha, n){}^{16}\text{O}$: 由衰变产生的 α 可与 ${}^{13}\text{C}$ 发生反应, 产生 (α, n) 本底, 反应为



- 偶然符合: 由两个发生时间相近的单事例引起, 通过蒙卡模拟其事例率约为 410/天, 经过级联信号筛选条件后可降至 1.1/天。
- 快中子: μ 子打入探测器附近的岩石上或探测器边缘时, 产生的快中子进入

探测器后由于 nH 俘获产生 2.2 MeV 的 γ ，其事例率约为 $0.1/\text{天}$ 。

- 地球中微子：主要来自于 U/Th 衰变中，发生 IBD 反应，与信号完全相同。

其中点源状信号目前包括 e^-, α, e^+, γ 。根据 IBD 快、慢信号在时空中的关联性，筛选条件设置为

- 有效体积： $R < 17.2 \text{ m}$
- 快信号能量： $[0.7, 12] \text{ MeV}$
- 慢信号能量： $[1.9, 2.5] \text{ MeV}$
- 快慢信号时间差： 小于 1 ms
- 快慢信号距离差： 小于 1.5 m
- μ 反符合： 根据水池中的 PMT 与 top tracker 的重建效果，选取不同的位置、时间 cut 进行反符合。

如果能够进一步区分 α, e^-, e^+, γ ，则可极大的提升筛选效率。这些本底经筛选后如表 1.5 所示，数据来源于 2016 年的计算^[8]。在探测器建设过程中，最新的结果如最后一列所示^[69]，其中信号的统计量降低，将对 JUNO 预期采数时间带来影响。

表 1.5 JUNO 实验中的本底信号^[8]，数字为每天的事例数。

反应	快信号	慢信号	总事例数	筛选后数目	最新结果 ^[69]
$\bar{\nu}_e$ (IBD)	e^+	γ	83	60	47
偶然符合	点源状信号	点源状信号	$\sim 5.7 \times 10^4$	0.9	0.8
$^{13}\text{C}(\alpha, n)^{16}\text{O}$	α	γ	-	0.05	0.05
$^9\text{Li}/^8\text{He}$	e^-	γ	84	1.6	0.8
快中子	n	γ	-	0.1	0.1
地球中微子 (IBD)	e^+	γ	1.5	1.1	1.1
其他反应堆中微子	e^+	γ		0	1.0
大气中微子	点源状信号	γ		0	0.16

1.5.3 显著度计算

在中微子质量顺序的测量中，JUNO 使用由期望观测正序与反序能谱以最小二乘法构造 χ^2 ^[8]：

$$\chi^2 = \sum_{i=1}^{N_{\text{bins}}} \frac{[M_i - T_i(1 + \sum_k \alpha_{ik}\epsilon_k)]^2}{M_i} + \sum_k \frac{\epsilon_k^2}{\sigma_k^2}. \quad (1.29)$$

该式的能量区间从1.8 MeV 到8.0 MeV, 共 200 个区间。其中 M_i 是测量到的能谱, T_i 为该区间的预测的中微子振荡后的事例数量, ϵ_k 为 σ_k 引起的测量数据偏差, 称为 pull parameter, α_{ik} 为第 i 个区间里 ϵ_k 的比例, σ_k 为系统不确定度。正序和反序的卡方值 χ^2 依赖 $|\Delta m_{ee}^2|$, 中微子质量顺序的鉴别量 $\Delta\chi_{\text{MH}}^2$ 为正序和反序卡方值最小值之差, 即

$$\Delta\chi_{\text{MH}}^2 = |\chi_{\text{min}}^2(\text{NO}) - \chi_{\text{min}}^2(\text{IO})|. \quad (1.30)$$

能量分辨率及曝光量是影响显著度的重要参数。根据安丰鹏等人的计算^[8], JUNO 预期的中微子质量顺序鉴别量与能量分辨率及曝光量的关系如图1.14所示, 其中横坐标代表与曝光时间, 六年对应 1。纵坐标为能量分辨率。等高线的数值对应鉴别量 $\Delta\chi_{\text{MH}}^2$, 该数值为显著度的平方。

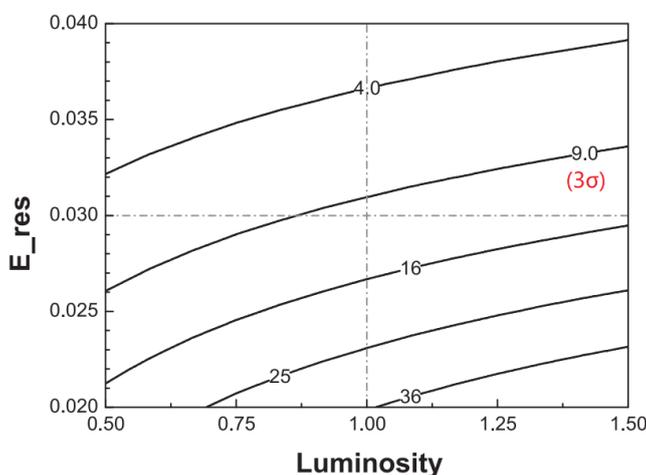


图 1.14 JUNO 预期的中微子质量顺序显著度和能量分辨率、曝光量的关系^[8]。

横坐标代表与曝光时间, 六年对应 1。纵坐标为能量分辨率。等高线的数值对应鉴别量 $\Delta\chi_{\text{MH}}^2$, 该数值为显著度的平方, 3σ 对应值为 9.0 的等高线。

1.5.4 JUNO 建设状态

实际建设过程中, JUNO 实验的条件主要有以下改动^[41]:

- 反应堆未达到预期功率, 曝光量变为原来的75%。
- JUNO 的埋深减少了约60 m, μ 数量增长了约 30%。
- PMT 的量子效率从预期的27% 变为 29%, 但是对单 PE 响应的弥散变差。

这些改动将会影响 JUNO 的能量分辨率和曝光量, 从而使图1.14中的显著度变差, 将会使 JUNO 的物理目标所需采数时间延长。本文致力于通过改进重建算法来提升能量分辨率, 希望使 JUNO 如期完成物理目标。

1.6 本文结构安排

本文首先回顾了中微子的发展历史及当前的开放问题，指出下一代中微子探测器的核心是大体积、高能量分辨率。液体闪烁体由于其出色的光产额、材料性质及价格得到众多实验的青睐。本文旨在通过改进重建算法为以 JUNO 为代表的下一代液闪探测器提升能量分辨率，并借助锦屏一吨原型机和 TAO 等小型探测器验证算法。

我们于第2章讨论了液闪探测器中能量分辨率的影响因素，并介绍了当前事例重建算法的进展。本文将从减少能量非线性、暗噪声甄别、堆积 (pile-up) 事例及正电子事例重建等方面全面提升能量分辨率，本文结构如下所示：

1. 精确的点源响应模型是本工作的核心，本文在第3–4章从数学建模、物理成因等方面进行了详细的介绍。第3章从数学上给出基于非齐次泊松过程的点源响应函数，并基于球对称假设使用函数基拟合，该方法可以推广至任意球形探测器中。第4章分析了液闪-水探测器中全反射、多次反射等光学过程，并基于半物理模型提升了拟合效果，同时讨论了这些光学过程对重建的影响。
2. 非齐次泊松过程可以自然地推广到多种成分：第5章将暗噪声与信号组合，实现了达到理论上限的暗噪声甄别技术；第6章将多个信号与暗噪声组合，给出了 pile-up 及正电子事例的重建。推广后的重建性能取决于点源响应模型的准确程度。
3. 在第7章我们对基于球对称假设的点源响应模型添加了非球对称性修正，有效地降低了 JUNO 探测器由支撑结构引起的能量非线性，与无修正模型相比挽回了3%的能量分辨率损失。
4. 本文着重于光学传播过程的建模与重建，第8章描述了与之匹配的波形重建方法，未来可和电子学重建对接，并对点源个数可变等重建问题进行了展望。

第 2 章 探测器的能量响应分析

粒子在液闪探测器中沉积能量，释放出闪烁光子，随后光子传播并被 PMT 以一定概率接收，形成光电子。光电子的计数依赖于粒子的初始能量、位置、类型、方向等。本章关注粒子能量重建分辨率，以 JUNO 探测器为例，我们理论推导了预期的能量分辨率，讨论了不同过程对能量分辨率的贡献，并借助 JUNO 离线模拟软件的研究了这些过程的具体影响数值，并与当前重建算法相比提出了本文对能量分辨率提升的突破点。

2.1 液闪探测器中事例的定义

图2.1是以水为缓冲物质的液闪探测器对一个点源事例的响应，本文以电子作为点源。其工作原理可概括为：假设一个电子在时刻 t_0 、位置 \mathbf{r} 处沉积能量，该位置称为**顶点**。沉积能量为 E ，并通过液闪释放出 N_{ph} 个光子。光子在探测器中传播，可以发生折射、反射、吸收、吸收重发射以及瑞利散射等。光子击中 PMT 后以概率 η 产生光电子 (PE)， η 为量子效率。PE 在 PMT 中传输的时间为渡越时间 (TT)，可近似为高斯分布，其弥散为 TTS。观测值为每个 PMT 上产生的 PE 数目 n_j 及其击中时间 t_{j_i} ，其中 $i \in \mathcal{N}$ 且 $i < n_j$ 。 n_j 服从泊松分布且 t_{j_i} 服从对应的概率密度分布 $\tilde{R}(t)$ ， $\tilde{R}(t)$ 为归一化的函数。顶点开始沉积能量到形成 PE 的过程对应探测器模拟，如果将 PMT 的量子效率解耦合，其本质为光学传播过程。

PE 在 PMT 中随着不断倍增至约 10^7 量级的电子，其电流通过负载后输出电压信号形成波形，当波形过阈记为该 PMT “点火”。当点火的 PMT 个数超过设置的数目后称为触发，此时探测器开始以波形的形式记录一定时间窗内的波形，这部分对应电子学模拟。

该过程中每一步都会积累不确定度，最终影响能量分辨率。本章将着重推导探测器模拟中引入的不确定度，并粗略估算电子学模拟引入的不确定度。该分析指出了本文工作对能量分辨率提升的突破点。

2.2 液体闪烁体的能量分辨率公式

假设在探测器中心有一理想点源，沉积能量为 E ，其用于发光的能量所占比例为 f_{nonlin} ，并且每 MeV 以光产额 Y 为期望光子数目。这些光子部分形成 PE，其总数为 N_{PE} 。重建的能量正比于 N_{PE} ，因此 N_{PE} 的方差直接影响到重建能量的方

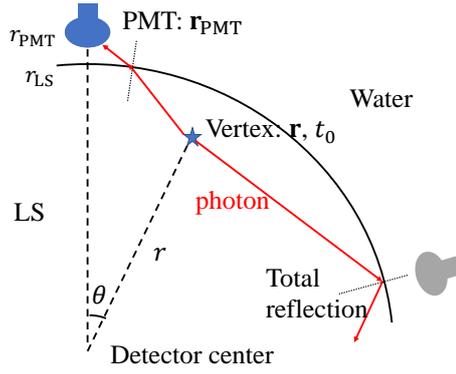


图 2.1 液体闪烁体探测器工作简图。

粒子在位置 \mathbf{r} 处时刻 t_0 开始沉积能量，沉积总能量为 E 。红线代表两条典型的光路，由于全反射，光子可以直接击中蓝色 PMT 而不能击中灰色 PMT。 r_{LS} 是液闪半径，第 j 个 PMT 的位置为 $\mathbf{r}_{PMT,j}$ ，每个 PMT 到探测器中心的距离均为 $r_{PMT,j}$ ，其中 $r_{PMT} = |\mathbf{r}_{PMT,j}|$ 。对于球形探测器，关于 $(\mathbf{r}, \mathbf{r}_{PMT,j})$ 的方程可以根据球对称性简化为 (r, θ) ，其中 $r = |\mathbf{r}|$ 且 θ 是顶点和 PMT 的中心角。

差。

首先计算光子数 N_{ph} 的期望与方差，其期望为

$$E[N_{ph}] = E[f_{nonlin}]EY. \quad (2.1)$$

其方差为

$$\begin{aligned} D[N_{ph}] &= E[EY]^2 D[f_{nonlin}] + D[E[N_{ph}]] \\ &= (EY)^2 D[f_{nonlin}] + E[f_{nonlin}]EY. \end{aligned} \quad (2.2)$$

综合考虑 PMT 立体角及量子效率等因素，每个光子转化成 PE 的概率为 η 。最终总 PE 个数 N_{PE} 是串级随机变量，第一级随机变量为光子的个数 N_{ph} ，第二级随机变量为光子转化为 PE 的结果为 η ，服从伯努利分布，根据串级随机变量的公式，可得其期望为

$$E[N_{PE}] = E[N_{ph}]E[\eta] = \eta f_{nonlin} EY. \quad (2.3)$$

其方差为

$$\begin{aligned} D[N_{PE}] &= (E[\eta])^2 \cdot D[N_{ph}] + E[N_{ph}] \cdot D[\eta] \\ &= (\eta^2 EY)^2 D[f_{nonlin}] + \eta^2 E[f_{nonlin}]EY + E[f_{nonlin}]EY\eta(1 - \eta) \\ &= (\eta EY)^2 D[f_{nonlin}] + E[f_{nonlin}]EY\eta. \end{aligned} \quad (2.4)$$

再考虑暗噪声的影响，假设暗噪声的数目 N_{DN} ，与 N_{PE} 之和为 N_{total} ，其期望

为

$$E[N_{\text{total}}] = \eta E[f_{\text{nonlin}}] EY + E[N_{\text{DN}}]. \quad (2.5)$$

其方差为

$$D[N_{\text{total}}] = (\eta EY)^2 D[f_{\text{nonlin}}] + E[f_{\text{nonlin}}] EY \eta + D[N_{\text{DN}}]. \quad (2.6)$$

若经过电子学后提取出的等效 PE 数为 N_{eff} ，最终的结果仍为串级随机变量，其第一级为 N_{total} ，第二级为每个 PE 经过电子学后通过重建算法计算的 PE 值 ξ ，如果 $E[\xi] = 1$ ，其期望为

$$E[N_{\text{eff}}] = E[N_{\text{total}}] E[\xi] = E[N_{\text{total}}]. \quad (2.7)$$

其方差为

$$\begin{aligned} D[N_{\text{eff}}] &= (E[\xi])^2 D[N_{\text{total}}] + E[N_{\text{total}}] D[\xi] \\ &= D[N_{\text{total}}] + E[N_{\text{total}}] D[\xi]. \end{aligned} \quad (2.8)$$

使用式 (2.5) 得到的能量重建结果 E_{rec} 为

$$E_{\text{rec}} = \frac{N_{\text{total}} - E[N_{\text{DN}}]}{\eta E[f_{\text{nonlin}}] Y}. \quad (2.9)$$

其均值为无偏估计

$$E[E_{\text{rec}}] = E. \quad (2.10)$$

其方差为

$$D[E_{\text{rec}}] = \frac{D[f_{\text{nonlin}}]}{(E[f_{\text{nonlin}}])^2} E^2 + (1 + D[\xi]) \left(\frac{1}{E[f_{\text{nonlin}}] Y \eta} \right) E + (D[\xi] E[N_{\text{DN}}] + D[N_{\text{DN}}]) \frac{1}{E^2}. \quad (2.11)$$

可以得到与 JUNO^[8] 以 a, b, c 参数化的能量不确定度的经验公式

$$\begin{aligned} \frac{\sigma_E}{E} &= \sqrt{\frac{D[f_{\text{nonlin}}]}{(E[f_{\text{nonlin}}])^2} + (1 + D[\xi]) \left(\frac{1}{E[f_{\text{nonlin}}] Y \eta} \right) \frac{1}{E} + (D[\xi] E[N_{\text{DN}}] + D[N_{\text{DN}}]) \frac{1}{E^2}} \\ &= \sqrt{\frac{a^2}{E} + b^2 + \frac{c^2}{E^2}}. \end{aligned} \quad (2.12)$$

其中 a, b, c 的影响因素将在 2.3 节中详细讨论。 a 对应 PE 的统计量， $E[f_{\text{nonlin}}] Y \eta$ 即为能量为 1 MeV 时的 $E[N_{\text{PE}}]$ 期望，并可按 $D[\xi] \approx 0$ 时近似估计为

$$a^2 = (1 + D[\xi]) \left(\frac{1}{E[f_{\text{nonlin}}] Y \eta} \right) \approx \frac{1}{E[N_{\text{PE}}]}. \quad (2.13)$$

b 对应能量的非线性，受切伦科夫效应、淬灭效应、位置重建分辨率、能量重建的

非均匀性等影响,

$$b^2 = \frac{D[f_{\text{nonlin}}]}{(E[f_{\text{nonlin}}])^2}. \quad (2.14)$$

c 对应暗噪声部分, 受暗噪声、正电子湮灭产物等因素的影响,

$$c^2 = D[\xi]E[N_{\text{DN}}] + D[N_{\text{DN}}] \approx D[N_{\text{DN}}]. \quad (2.15)$$

实际情况中还有微通道板 (MCP)PMT 单 PE 响应弥散等因素, 该过程属于电子学, 本章仅考虑光子传播过程中的不确定度, 其影响将在第8章讨论。

2.3 能量分辨率的影响因素

2.3.1 PE 统计量

PE 的统计量对应式 (2.13), 与液闪的性质相关, 如果仅考虑各向同性的闪烁光子, PMT 上接收到 PE 数目近似为泊松分布, 其期望为 λ 。若将探测器看做均匀介质且不考虑吸收重发射等因素, 可按如下公式近似^[70]为

$$\lambda_j = EY \exp\left(-\frac{\|\mathbf{r} - \mathbf{r}_{\text{PMT},j}\|}{L}\right) \frac{\Omega(\mathbf{r}, \mathbf{p}_j)}{4\pi} \eta_j. \quad (2.16)$$

符号定义见图2.1, 其中 L 为衰减长度, Ω 为 PMT 对顶点 \mathbf{r} 张开的立体角, 其计算过程为

$$\Omega(\mathbf{r}, \mathbf{p}_j) = 2\pi \left(1 - \frac{\|\mathbf{r} - \mathbf{r}_{\text{PMT},j}\|}{\sqrt{\|\mathbf{r} - \mathbf{r}_{\text{PMT},j}\|^2 + r_{\text{PMT}}^2 \cos^2 \beta_j}} \right). \quad (2.17)$$

相关符号定义在图2.1中。其中 β_j 为光子到 PMT 的入射角, 入射方向近似于顶点指向 PMT 的向量, 其计算过程为

$$\cos \beta_j = \frac{(\mathbf{r}_{\text{PMT},j} - \mathbf{r}) \cdot \mathbf{r}_{\text{PMT},j}}{\|\mathbf{r}_{\text{PMT},j} - \mathbf{r}\| \|\mathbf{r}_{\text{PMT},j}\|}. \quad (2.18)$$

对于探测器中心固定能量的事例, 其统计量和光产额、PMT 覆盖率及量子效率约成正比, 同时也依赖于光子在液闪中的衰减长度。一般来说, 在液闪-水探测器中 N_{PE} 会随着 r 增加先增加, 到全反射发生的临界区域时开始减少。

2.3.2 液体闪烁体的能量非线性

本小节对应式 (2.14), 主要包含如下效应:

2.3.2.1 淬灭效应

带电粒子的能量大部分通过碰撞转移给液闪分子，但是仍有少部分能量最终以晶格振动或以内能的形式耗散掉。通过 Birks 定律^[71]，带电粒子损失能量与其路径相关，其计算过程为

$$\frac{dE_{\text{vis}}}{dx} = \frac{\frac{dE}{dx}}{1 + k_b \frac{dE}{dx}}. \quad (2.19)$$

$\frac{dE}{dx}$ 为粒子的比能损失， k_b 为 Birks 常数。初始动能为 $1 \text{ MeV}e^-$ 与 $1 \text{ MeV}e^+$ 沉积能量比总能量的分布如图 2.2 所示。

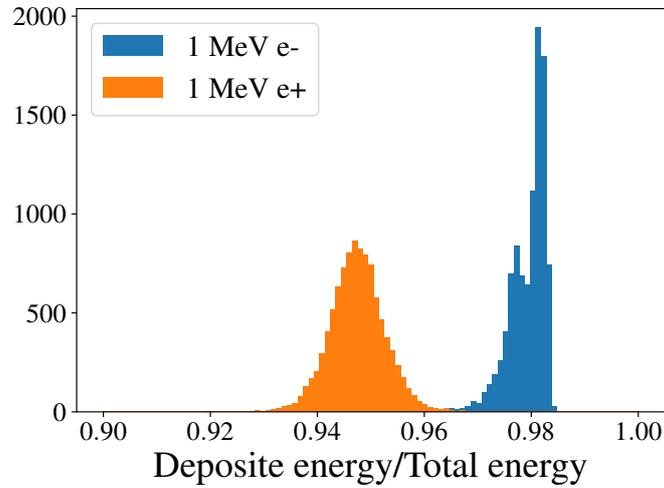


图 2.2 初始动能为 $1 \text{ MeV}e^-$ 与 $1 \text{ MeV}e^+$ 沉积能量比总能量的分布。

淬灭效应引入了能量非线性， e^+ 的湮灭产物损失的能量更高。

2.3.2.2 切伦科夫光

尽管在液闪中闪烁光占主导，但是切伦科夫光仍然存在。当带电粒子在介质中运动的速度大于介质中的光速时，将会沿着粒子运动的方向释放出锥形的辐射，其夹角 θ_C 满足

$$\cos \theta_C = \frac{1}{n(\lambda)\beta}. \quad (2.20)$$

其中 λ 为光子波长， n 为介质的折射率， β 为粒子速度与真空中光速的比值。最终切伦科夫光子数 N_{ch} 可以由 Frank - Tamm 公式^[72]表示为

$$\frac{d^2 N_{\text{ch}}}{dE dx} = \frac{\alpha z^2}{\hbar c} \left(1 - \frac{1}{\beta^2 n^2} \right). \quad (2.21)$$

其中 α 为精细结构常数。以电子为例，在水中和液闪中产生切伦科夫光子的阈值约为 0.775 MeV 以及 0.686 MeV 。在版本为 J21v1r0-Pre1 的 JUNO 离线模拟软件，液闪和水的折射率谱如图 2.3 所示。对于探测器中心 1 MeV 的电子， N_{ch} 的期望

约为 60。如图 2.5 所示，我们选取了在探测器中心模拟的 5000 个 1 MeV e^- 事例，初始动量方向随机。图 2.4(a) 绘制了切伦科夫光和闪烁光 PE 的时间分布，切伦科夫光集中于靠前的位置，且其总量远远小于闪烁光。图 2.4(b) 选取了第一个 PE 产生后 2 ns 内的闪烁光和切伦科夫光分布，此时靠近动量方向的切伦科夫光分布稍多一些。但由于 JUNO 的吸收重发射极其严重，切伦科夫光子重发射的比例约 90%。本工作中尚未对切伦科夫光子做精确研究，暂时将其忽略。

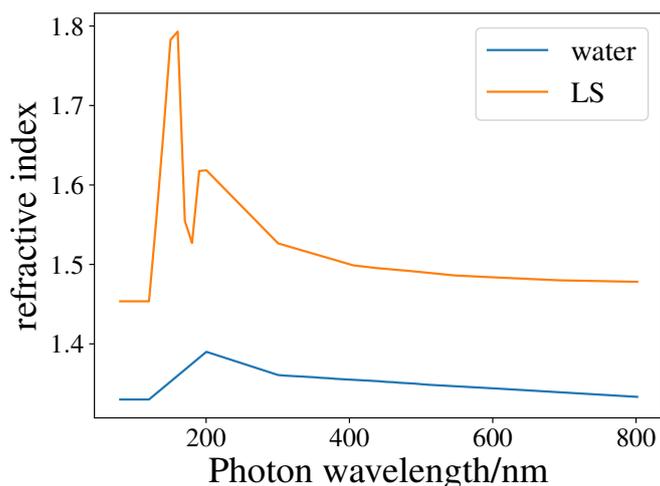
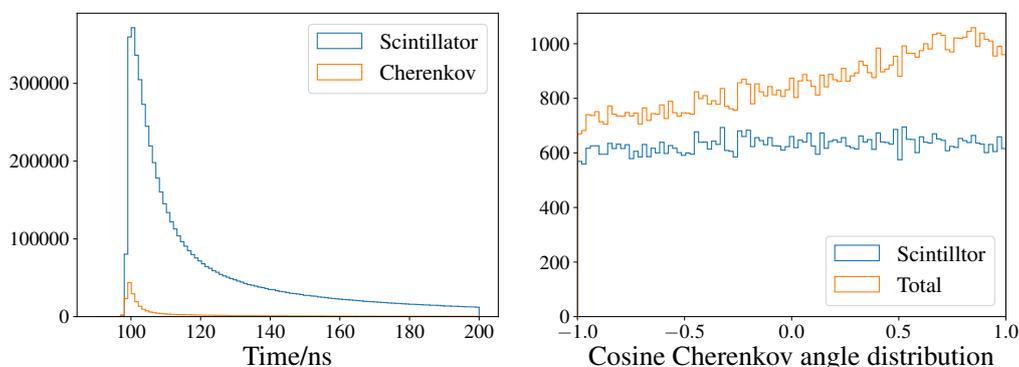


图 2.3 JUNO 离线模拟软件中液闪和水的折射率谱，版本为 J21v1r0-Pre1。



(a) 不同类型 PE 的时间分布。

(b) 不同类型 PE 的角分布。

图 2.4 事例位于探测器中心时的不同类型光子的分布。

图 2.5 模拟事例位于探测器中心，起始时刻为 0 ns。第一击中约为 96 ns。Cherenkov 代表切伦科夫光 PE，Scintillator 代表闪烁光 PE，Total 代表同时包含两者。(a) 为 5000 个事例切伦科夫光和闪烁光 PE 的时间分布。(b) 中利用粒子位置、出射方向和 PMT 位置计算了 PE 的角分布，其中切伦科夫光为 total 与闪烁光之差，在 $\cos \theta \approx 0.8$ 处有一个峰。

除此之外，如果重建位置有偏，也会带来能量非线性，因此其不确定度贡献也体现在式 (2.14) 中。能量重建的均值会随位置依赖，称为能量的空间非均匀性，也是能量非线性的来源之一。

2.3.3 暗噪声项

暗噪声是指 PMT 未经光子击中却输出了信号，一般是由光阴极和打拿级在室温下发射热电子，光阴极上产生的热电子等效于一个 PE 产生的情况。一般来说 PMT 的暗噪声率是常数，暗噪声出现在时间窗的位置为均匀分布。暗噪声的总数 N_{DN} 服从泊松分布，有 $E[N_{\text{DN}}] = D[N_{\text{DN}}]$ 。

除此之外，由于 PMT 中存在残余气体，其电离的正离子还有可能打到光阴极上释放出电子，产生后脉冲，其延迟约为几十 ns 到几 ms，其比例相对较小。

本文将正电子视为多点源，仅关注正电子动能，因此湮灭产生的 γ 也等效于暗噪声项。

2.3.4 波形重建

PMT 上最终输出为波形，波形的形成过程可写为卷积过程。假设 PE 击中时间为 t_i ，每一个冲击写作 $q_i\delta(t)$ 。单光子响应为 $V(t)$ ，最终形成的波形 $w(t)$ 为

$$w(t) = \sum_j q_j \delta(t_j) \otimes V(t) + \epsilon(t) = \sum_j q_j V(t - t_j) + \epsilon(t) + C. \quad (2.22)$$

其中 $\epsilon(t)$ 为高斯白噪声， C 为基线，基线算法一般可以通过对没有信号区域的波形取平均得到，下面讨论已经默认扣掉基线。波形重建通常返回波形的总电荷，用于估计 N_{PE} 的个数，并给出第一个 PE 的到达时间。对于打拿级 PMT，主要的波形重建方法有：

- 积分法：积分法是一种通用的波形重建方法，最终通常会给出总电荷及第一个 PE 的到达时间。其主要思路首先是根据预设的过阈电压，判断是否过阈并记录过阈时间，再选取合适的时间窗积分得到电荷。时间信息一般利用寻峰算法寻找峰值时间，并利用过阈时间做拟合，选择特定比例（如10%）的上升沿作为击中时间，上升沿的比例可能随电荷量改变。
- 退卷积法：典型的方法如 Lucy-Richardson 迭代法^[73-74]。该方法首先需要已知卷积核的形式，即单光电子在波形中的响应。输入为一时间序列，最终返回结果为这个时间序列中每一处的值。虽然其可以获得不止一个 PE 击中的时间，但输出的结果往往并非整数，一个 PE 将会变成几个小数的组合。由于迭代过程中要求每一步的结果恒大于 0，否则提升到设置的阈值，从而引入了非线性，导致最终的电荷积分结果有偏。徐大成等^[75]按照迭代初始输入对结果重新缩放后可以显著减少总电荷估计的偏差。
- 机器学习：卷积神经网络 (CNN) 中热门的方法之一。CNN 的主要思路是将波形作为输入，主要由多个卷积层，池化层，全连接层构成的前馈神经网络，

并最终通过指定的损失函数连接到输出层。不同长度的卷积核可以提取处输入的信息，并不断将维度降低，根据输出层的结果和真值的比较，通过损失函数计算其梯度并反向传播，达到更新整个网络参数的目的。CNN 由于其强大的性能能对衡量总 PE 数和初始时刻 t_0 有良好估计^[75]，一旦训练完成后有较大的计算速度优势。但如果 PE 的长度可变，对 CNN 固定的网络结构有极大的挑战。除 CNN 外，随机森林等算法通过对参数的预处理可以作为输入信息，如分位数值，波形的峰高等等，比起神经网络可以唯象的表示出参数的重要程度，就总 PE 数和初始时刻 t_0 而言，结果也表现出强大的竞争力。若输出为每个 PE 对应的时间信息时，神经网络由于结构固定难以实现。

微通道板 PMT 的响应更为复杂，本文暂时不考虑电子学，但是完整的事例重建需要从波形出发。为了得到精确的点源响应模型，需要波形重建输出所有可能长度的 PE 序列。在这种需求下，本文调研了能够从打拿级、微通道板 PMT 的波形返回含后验概率的不同 PE 序列的波形重建方法，与其对接将在第8章中介绍。

2.3.5 基于模拟的能量分辨率影响计算

我们使用 JUNO 离线模拟软件 J21v1r0-Pre1 版本在探测器中心对 $1\text{ MeV } e^-$ 进行模拟，通过开关淬灭、切伦科夫过程，可以得到以闪烁光和切伦科夫光作为信号的 PE 个数 N_{PE} 的期望 $E[N_{\text{PE}}]$ 和方差 $D[N_{\text{PE}}]$ ，其中能量分辨率按照 $\sqrt{D[N_{\text{PE}}]}/E[N_{\text{PE}}]$ 估算。

无切伦科夫无淬灭的纯闪烁光发光过程几乎是泊松分布，设其为能量分辨率的基线，计算经过不同过程能量分辨率与基线之差并以 3% 计算的相对值。表 2.1 中前三列为探测器模拟，后两列为数值估算。暗噪声的 N_{DN} 以泊松分布按照 $350\text{ ns} \times 17\,600\text{ PMT} \times 30\text{ kHz}$ 估算。假设单 PE 响应的电荷弥散标准差为 0.3，即式 (2.13) – (2.15) 中 $D[\xi] = 0.09$ 。

表 2.1 不同物理过程导致能量分辨率损失。

	无切伦科夫无淬灭	无切伦科夫	切伦科夫 + 淬灭	暗噪声	波形重建
$E[N_{\text{PE}}]$	1548	1507	1569	1569	1569
$D[N_{\text{PE}}]$	1560	1667	1941	2076	2227
分辨率	2.55 %	2.70 %	2.80 %	2.90 %	3.01 %
分辨率损失		5.0 %	8.3 %	11.7 %	15.3 %

在本文中，能量分辨率的提升和降低均为以 3% 为除数的相对值。

2.4 使用重建算法提升能量分辨率

2.4.1 经典重建算法介绍

事例重建需要根据观测值反推粒子的位置、能量，是后续物理分析的基础。粒子沉积能量 PE 数直接相关，且强依赖于顶点。故重建时能量与顶点耦合，需要同时重建或先获得顶点再估计能量。此外还有机器学习等算法^[76]，本文不做详细讨论。

2.4.1.1 重心法

重心法是用于快速估计顶点位置的算法。将 PMT 上接收到的 PE 个数 n_j 为权重加到 PMT 位置上，结果为

$$\mathbf{r}_{\text{recon}} = \frac{3}{2} \frac{\sum_j n_j \mathbf{r}_{\text{PMT},j}}{\sum_j n_j}. \quad (2.23)$$

假设 PMT 的排布对任一维度都可近似为 $[-r_{\text{PMT}}, r_{\text{PMT}}]$ 的均匀分布，若顶点在探测器中心， $E[n_j] = \lambda_j = \lambda$ 可看做多个带权重的独立同分布泊松分布叠加，表示为

$$x = \frac{3}{2} \sum_j \frac{x_j}{\sum_j \lambda_j} \lambda_j = \frac{3}{2} \sum_j \frac{x_j}{E[N_{\text{PE}}]} \lambda. \quad (2.24)$$

N_{PE} 为总 PE 数，此时的均值为

$$\mu_x = \frac{3}{2} \frac{\sum_j x_j}{E[N_{\text{PE}}]} \lambda \approx \frac{3}{2} \frac{\int_{-r_{\text{PMT}}}^{r_{\text{PMT}}} x dx}{E[N_{\text{PE}}]} \lambda \frac{N_{\text{PMT}}}{2r_{\text{PMT}}} = 0. \quad (2.25)$$

N_{PMT} 为总 PMT 数，方差^[77]为

$$\sigma_x^2 = \frac{9}{4} \frac{\sum_j x_j^2}{(E[N_{\text{PE}}])^2} \lambda \approx \frac{9}{4} \frac{\int_{-r_{\text{PMT}}}^{r_{\text{PMT}}} x^2 dx}{(E[N_{\text{PE}}])^2} \lambda \frac{N_{\text{PMT}}}{2r_{\text{PMT}}} = \frac{3r_{\text{PMT}}^2}{4N_{\text{PE}}^2} \lambda N_{\text{PMT}}. \quad (2.26)$$

而 $E[N_{\text{PE}}] = \lambda N_{\text{PMT}}$ ，故

$$\sigma_x = \frac{\sqrt{3}}{2} \frac{r_{\text{PMT}}}{\sqrt{N_{\text{PE}}}}. \quad (2.27)$$

全反射、PMT 的不够致密以及探测器并非球形等因素均会使顶点重建结果有偏^[52,78]。重心法没有重建能量的能力，只能使用 N_{PE} 乘一个因子作为估计。如果 1 MeV 期望产生 PE 数为 \bar{N}_{PE} ，则能量估算为 $\sqrt{N_{\text{PE}}/\bar{N}_{\text{PE}}}$ ，其能量分辨率为 $\sqrt{N/\bar{N}_{\text{PE}}}$ 。

2.4.1.2 极大似然估计

极大似然估计 (MLE) 需要对探测器响应精确建模, 对给定顶点, 需要估算出每个 PMT 上的 PE 数的期望 λ , 及其击中时间的概率密度函数。

PE 的预测 PE 信息为每个 PMT 上的 PE 个数, 可以通过式 (2.16) 直接估算, 如 Double CHOOZ^[70] 实验。若缓冲物质为水, 该方法对于探测器中心的事例仍可以近似。但是在全反射区域完全无法建模。考虑到光的折射及 PMT 的实际大小, 解析计算是困难的。

对于 JUNO 探测器, 大部分重建方法是对图 2.1 中 (r, θ) 的二维分布选取不同格点得到其 PE 期望, 称为 **map**。吴文杰等^[79]通过 z 轴上顶点利用球对称性扩展到整个探测器。其使用顶点的真值仅考虑能量重建, 指出由于节点的存在球对称性被破坏。李紫源等^[52]指出式 (2.16) 在大探测器中由于吸收重发射、全反射等因素难以计算, 在全反射区域使用 PE 随 (r, θ) 关系作 **map**, 提升了位置重建性能, 但是未讨论能量重建。黄桂鸿等^[80]考虑了节点的影响, 利用其绕 z 轴的排布规律, 不同顶点位置的顶点天顶角 θ_v 受到节点的影响不同, 因此将模型扩展, 称为 3D-n PE **map**, 模型的输入为顶点的 r, θ_v , 以及 PMT 对顶点的天顶角 θ 。球对称模型中相同 θ 的 PMT 期望 PE 数相同。 θ_v 有效地考虑了不同位置节点的平均影响, 减少了能量非线性的影响, 但是对于单个 PMT 上 PE 的精确估计仍未实现。

在指定顶点模拟大量事例, 如果 PMT 上的接收的分布为泊松分布, 则其期望近似为所有事例的平均。如果格点足够致密, 该方法即为理论上限。但这种方法在大探测器中需要巨大的自由度, 因此该方法一般适用于研究特定点源响应。

时间的预测 时间信息为每个 PE 的时间, 计算其服从的分布 $\tilde{R}(t)$ 是顶点重建的关键。从 PE 形成的物理图像来看, 其主要包含事例的起始时刻 t_0 、液闪的发光时间 t_p 、光子的飞行时间 TOF、以及 PMT 中的渡越时间 TT。TT 的弥散为 TTS, 本文中以标准差而非半高全宽表示。其中 TT 的均值只与单个 PMT 的位置有关, 可以提前扣除。TOF 与飞行时间有关, 该项与顶点位置直接相关, 需要准确估计。TT、TOF 和 t_0 对时间的概率密度函数是平移不变项。该函数几乎仅由 t_p 和 TTS 决定, 实际中还会有光的色散、吸收重发射、以及多次反射时无法精确估计 TOF 带来的误差等, 方法可见于^[52]。

如果用击中时间减去 TT 均值、TOF 和 t_0 , 得到的结果称为时间残差 t_{res} 。若 TT 服从标准差为 σ_{TTS} 的高斯分布, 则 $\tilde{R}(t)$ 近似为该分布与液闪发光时间 $\psi(t)$ 的卷积:

$$\tilde{R}(t) = \psi(t) \otimes \text{Gaus}(t, \sigma_{\text{TTS}}) \quad (2.28)$$

该问题的难点在于估算 TOF, 其值可由 PMT 位置和顶点坐标按照直线传播粗

略估算。但由于折射率的差异，光线在两种介质交界处会发生折射，且传播速度不同，因此解析计算需要判断光线从亚克力进入水层的位置，该点的计算是高次方程且存在多解情况。除此之外，光子传播过程中还会出现节点的影响以及多次反射等情况，使得 TOF 的计算按照不同概率存在多个分立的值，这些都将成为 TOF 估算的不确定度，并全部贡献到 $\tilde{R}(t)$ 中。

综上， $\tilde{R}(t)$ 并非是严格平移不变的，拟合 $\tilde{R}(t)$ 使该问题的自由度急剧增加，黄桂鸿等^[80]使用插值方法估计。目前的时间重建算法受限于波形重建，往往只利用每个 PMT 上的第一个击中的 PE，虽然可由 $\tilde{R}(t)$ 解析表达，但损失了精度且增加了计算量。

2.4.2 位置及能量分辨率的理论计算

由时间信息推导的位置不确定度可进行如下粗略近似：对于衰减时间较短的液闪，如果 $\psi(t)$ 也可以视作高斯分布，那么 $\tilde{R}(t)$ 也是高斯分布，若其等效的标准差为 σ_p ， c 为光速， n_f 为折射率，则有

$$\sigma_x = \sqrt{\frac{3}{N_{\text{PE}}} \frac{c\sigma_p}{n_f}}. \quad (2.29)$$

根据 PE 信息在探测器中心的不确定度^[81]为：

$$\sigma_x = \left(-\frac{\partial^2 \ln \mathcal{L}}{\partial x^2} \right)^{-1/2} = \frac{\sqrt{3}R}{2\sqrt{N_{\text{PE}}}}. \quad (2.30)$$

忽略时间与 PE 的相关项，联立可得联合信息重建的不确定度^[81]为

$$\sigma_x = \left(\frac{N_{\text{PE}}n_f^2}{3c^2\sigma_p^2} + \frac{4N_{\text{PE}}}{3r_{\text{PMT}}^2} \right)^{-1/2}. \quad (2.31)$$

可知在大探测器中，时间信息对位置分辨率更为重要，小探测器中，PE 信息更重要。

根据 PE 信息在重建中的似然函数，其中观测值为 n ，期望值为 λ ，则有

$$\mathcal{L} = \prod_i \exp(-\lambda_j) \frac{\lambda_j^{n_j}}{n_j!}. \quad (2.32)$$

由 PE 信息可得 E 的无偏估计，若 $\lambda_j = \bar{\lambda}_j E$ ，则有

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathcal{L}}{E} &= -\bar{\lambda}_j + n_j \frac{1}{E} \\ \Rightarrow \hat{E} &= \frac{\sum_j n_j}{\sum_j \bar{\lambda}_j}. \end{aligned} \quad (2.33)$$

若 E 单位为 MeV，则 $\bar{\lambda}$ 代表了 1 MeV 时 PMT 上接收到的 PE 期望。 E 的不确

定度为

$$\sigma_E = \left(-\frac{\partial^2 \ln \mathcal{L}}{\partial E^2} \right)^{-1/2} = \left(\frac{1}{\sum_j n_j E^2} \right)^{-1/2} = \frac{E}{\sqrt{N_{\text{PE}}}}. \quad (2.34)$$

2.4.3 本工作对重建算法的突破点

本文结构于1.6节中指出，突破点和对应章节可总结如表2.2。

表 2.2 影响能量分辨率的要素。

章节	问题	物理过程	式 (2.12) 贡献
3, 4	能量非线性	探测器	<i>b</i>
5	暗噪声	电子学	<i>c</i>
6	e^+ 湮灭产物	探测器	<i>c</i>
7	能量非均匀性	探测器	<i>b</i>
8	波形重建	电子学	<i>a, c</i>

其中第3–6章的研究可以推广至任意球形液闪探测器，第7介绍了以 JUNO 几何为例的非球对称修正，因探测器而异，第8章为未来与波形重建对接的展望。

第3章 球对称假设下点源响应模型 (Probe) 研究

事例重建的核心是获得精确的点源响应模型，即需要对探测器中任意一个点源，可以获得映射到任意位置 PMT 上含时的期望 PE 数变化关系。这个关系可用非齐次泊松过程的平均函数 (Average function of Inhomogeneous Poisson Process) 描述，在本文中以探针函数 (Probe) 指代。Probe 可以直接应用于顶点、能量重建，目前绝大部分重建方法利用 PE 信息等价于使用 Probe 的边缘分布，利用时间信息等价于使用 Probe 的条件分布。本章着重介绍使用 Probe 的数学模型，并给出一套基于函数基拟合方法的流程。不同拟合模型的拟合优度根据测试集给出，最后我们分析了当前拟合的瓶颈。

3.1 基于非齐次泊松过程的似然函数表示

点源的定义可见图2.1，给定点源 $\{E, \mathbf{r}, t_0\}$ ，第 j 个 PMT 上接受到的期望 PE 数服从非齐次泊松过程，是一个含时间的高维函数。若其他参数固定，则表示该条件下随时间变化的期望 PE 数，该映射被命名为 Probe 的条件分布，记作

$$R_j(t; E, \mathbf{r}, t_0), \quad (3.1)$$

下简记为 $R_j(t)$ 。

与传统的顶点重建算法相比，Probe 对时间的积分形式即为 PE 的估计 λ ，记为 Probe 的边缘分布。其归一化形式即为时间信息服从的概率密度函数 $\tilde{R}(t)$ 。即

$$\lambda_j = \int R_j(t; E, \mathbf{r}, t_0) dt, \quad (3.2)$$

$$\tilde{R}_j(t) = \frac{R_j(t; E, \mathbf{r}, t_0)}{\lambda_j}. \quad (3.3)$$

Probe 的形式自然地将时间和 PE 信息结合起来。其中每一单位时间 dt 内的 PE 数均服从泊松分布。将所有 bin 的似然函数 \mathcal{L} 写出，对于第 k 个 bin，对应的

时间为 t_k ，宽度为 Δt 落入该 bin 的观测数为 N_k ，其期望值 $\lambda_k = R_j(t_k)\Delta t$ ，可得

$$\begin{aligned}\mathcal{L} &= \prod_{k=0}^N \exp(-\lambda_k) \frac{\lambda_k^{N_k}}{N_k!} \\ &= \prod_{k=0}^N \exp(-\lambda_k) \prod_{k=0}^N \frac{\lambda_k^{N_k}}{N_k!} = \exp(-\lambda) \prod_{k=0}^N \frac{\lambda_k^{N_k}}{N_k!} \\ &= \exp(-\lambda) \prod_{k=0}^N \frac{[R_j(t_k)\Delta t]^{N_k}}{N_k!}.\end{aligned}\quad (3.4)$$

式 (3.4) 即为 Probe 函数下的极大似然函数。当 Δt 足够小时， N_k 的取值为 0 或 1，若为 0 时可以忽略，如果使用归一化的 $\tilde{R}(t)$ ，则有

$$\begin{aligned}\mathcal{L} &= \exp(-\lambda) \prod_{k=0}^N (\lambda \Delta t)^{N_k} \frac{\tilde{R}_j(t_k)^{N_k}}{N_k!} \\ &\propto \exp(-\lambda) \lambda^N \prod_{k=0}^N \tilde{R}_j(t_k).\end{aligned}\quad (3.5)$$

式 (3.5) 形式上与传统的 PE、时间似然函数等价。前半部分为泊松分布的形式，描述了 PE 的概率，后半部分为时间的概率。PE 和时间作为两个独立的概念，需要分别建模。如果两个过程中引入了独立的误差，最终组合成的似然函数就会有偏：如第一击中时间和时间窗等。

在本章我们对 Probe 做如下简化：对于能量线性系统，有

$$R_j(t; E, \mathbf{r}, t_0) = ER_j(t; \mathbf{r}'). \quad (3.6)$$

如果探测器为球形，根据图2.1所示的球对称性进一步简化模型。方程 (3.6) 等价于：

$$ER_j(t; \mathbf{r}, t_0) = ER_j(t; r, \theta_j, t_0). \quad (3.7)$$

其中 θ_j 为顶点和 PMT 的中心角， r 即为顶点 \mathbf{r} 的模长。

考虑到 JUNO 实验中大 PMT 的尺寸相同，为了将 R_j 中的下标 PMT 编号 j 解耦合，如量子效率等， R_j 可写作 $\eta_j R$ ，此时暂不考虑 TTS 等电子学过程引入的效应，未来可根据卷积过程获得。因此虽然实际的输入数据为 PE 信息，但拟合的 $R(t)$ 是光子的 Probe 而非 PE 的 Probe，是光学传播过程。通过 $R(t)$ ，可将 PE 和时

间的整合到式 (3.8) 的对数似然函数中:

$$\begin{aligned}
 \ln \mathcal{L} &\propto \ln \left\{ \left[\prod_j \exp(-\lambda_j) \prod_i R(t_{j_i}; r, \theta_{j_i}) \right] \right\} \\
 &= \sum_j \lambda_j + \sum_i \ln R(t_{j_i}; r, \theta_{j_i}) \\
 &= \overbrace{E \sum_j \eta_j \int R(t; r, \theta_j) dt}^{\text{nonhit}} + \overbrace{\sum_i \ln R(t_{j_i}; r, \theta_{j_i})}^{\text{hit}} + \text{Const.}
 \end{aligned} \tag{3.8}$$

可以根据式3.8定义 nonhit 和 nonhit 项。其中 nonhit 项与所有 PMT 有关, hit 项与所有击中 PE 有关, 量子效率固定时在 hit 项中作为常数可省略。对 PE 和时间的建模问题转化为获取 $R(t)$ 。同时, Probe 依赖所有击中 PE 并非第一击中 PE, 对波形重建提出了更高的要求。

3.2 函数基拟合 Probe 的理论推导

本节将拟合式 (3.8)。类似量子效率, 多个事例能量不同时也可与事例编号解耦合。此时的对数似然函数根据式 (3.8) 重写为

$$\ln \mathcal{L} = E \overbrace{\sum_j \eta_j \int R(t; r, \theta_j) dt}^{\text{nonhit}} + \overbrace{\sum_i \ln R(t_{j_i}; r, \theta_{j_i})}^{\text{hit}}. \tag{3.9}$$

E 由于被 hit 项中的对数处理为常数, 故舍去。

函数基拟合即使用合适的基底对 Probe 函数分解, 如式 (3.10), 使用了勒让德多项式 P_m 和 Zernike 多项式^[82] Z_n , 使得

$$R(t; r, \theta_j) \leftarrow \sum_{m,n} a_{mn} Z_n(r, \theta_j) P_m(t). \tag{3.10}$$

其中 m, n 为阶数。Zernike 函数适合描述单位圆盘内的函数, 勒让德函数为一维函数, 可以拟合 Probe 时间维度的分布。由于这两组函数基底均为完备正交基, 故可以推广至任意球形探测器。值得注意的是, 函数基拟合的目的是得到点源响应模型, 减少传统 map 方法带来的自由度, 其选择形式并不唯一, 目前我们选择勒让德多项式和 Zernike 多项式的组合, 着重介绍拟合的优化过程。

注意到 Probe 函数的非负性, 可以使用连接函数 (link function), 其反函数将式 (3.10) 从左边映射到右边。对数和平方根函数是两种有效的连接函数, 我们将讨论其各自的优劣势。

3.2.1 对数连接函数

对数连接函数本质是泊松回归, 等价于拟合 Probe 的对数形式

$$R(t; r, \theta_j) = \exp [a_{mn} Z_n(r, \theta_j) P_m(t)]. \quad (3.11)$$

该式可以写为矩阵形式加快计算, 对于 hit 项而言, m, n 分别为勒让德多项式阶数, Zernike 多项式阶数^[82-83], a^{mn} 为系数矩阵, 大小为 $M \times N$, P_m 为勒让德基底矩阵, Z_n 为 Zernike 基底矩阵。

Zernike 函数中的 θ 的取值范围为 $[0, 2\pi]$, 实际中由于对称性只需考虑 $[0, \pi]$ 即可, 因此仅使用偶 Zernike 多项式, 可以表示为

$$Z_n^m(r, \theta) = \mathfrak{R}_n^m(r) \cos(m\phi). \quad (3.12)$$

其中

$$\mathfrak{R}_n^m(r) = \sum_{k=0}^{\frac{n-m}{2}} \frac{(-1)^k (n-k)!}{k! (\frac{n+m}{2} - k)! (\frac{n-m}{2} - k)!} r^{n-2k}. \quad (3.13)$$

使用中将 m, n 按照一维处理后记为 n 。

该连接函数的形式可以极大的简化 hit 项计算:

$$\begin{aligned} & \sum_j \ln R(t_j; r, \theta_j) \\ &= \sum_j \left\{ a_{mn} Z_n(r, \theta_j) P_m(t_j) \right\} \\ &= a_{mn} \left\{ \sum_j Z_n(r, \theta_j) P_m(t_j) \right\}. \end{aligned} \quad (3.14)$$

因此 hit 项可看做系数矩阵点乘固定的矩阵, 该矩阵仅依赖输入, 可预先算好。

对于 nonhit 项的积分使用数值积分求解。若原始问题的时间窗范围设为 $[\bar{\tau}, \underline{\tau}]$, 则需要首先将区间映射在 $[-1, 1]$ 上才能使用勒让德函数对其进行分解, 考虑如下 $t \rightarrow t'$ 的映射

$$t' = 2 \frac{t - \bar{\tau}}{\underline{\tau} - \bar{\tau}} - 1. \quad (3.15)$$

可知 $dt = \frac{\bar{\tau} - \underline{\tau}}{2} dt'$, 是在 t' 域运算时乘以的因子。若数值积分的采样值对应 t_k , 此时的 nonhit 部分变为

$$\begin{aligned} & \frac{\bar{\tau} - \underline{\tau}}{2} \int \exp \left[\sum_{m,n} a^{mn} P_m(t') Z_n(r, \theta_j) \right] dt' \\ & \approx \frac{\bar{\tau} - \underline{\tau}}{2} \Delta t \sum_{t'_k} \exp \left[\sum_{m,n} a^{mn} P_m(t'_k) Z_n(r, \theta_j) \right]. \end{aligned} \quad (3.16)$$

可在 t 域取时间间隔为 1 ns 忽略 Δt 。

为了保证尽可能的覆盖时间谱，我们取 $-20\text{ ns} \sim 600\text{ ns}$ 作为时间窗的上下限。在构造 probe 时没有考虑暗噪声，因此实际接收到的 PE 击中时间谱在第一击中 PE 后迅速上升，随后近似按照液闪的发光曲线缓慢下降。由于飞行时间的限制，第一击中 PE 前时间窗内没有观测数据。时间窗的选取也会使尾部也有一定 PE 会被舍弃，其数量小于 1% ，可忽略不计。

拟合过程中有两大难点。第一点是阶跃函数的拟合，在时间维度第一击中 PE 来时几乎是阶跃函数，使用低阶的勒让德多项式会欠拟合，高阶则会有强烈的吉布斯效应。经过尝试发现， τ 的值越接近阶跃点其拟合效果越好，但是实际中必须在前部留有足够的时间窗，以覆盖顶点位置不同等因素造成的平移，因此对 PE 的时间分布做飞行时间修正是必须的。

第二点是数值积分，为了防止欠拟合现象，增大阶数时积分项的计算量极大。而数值积分不可能遍历整个 t 域，若选定分 bin 点做数值积分，则拟合值可以在这些点上表现良好，但在点的空隙间不受式 (3.16) 约束。随着阶数的增加可能会出现剧烈的起伏。这个振荡主要在于前部没有 hit 信息的区域中，一旦重建时由于顶点偏差导致时间落入这些区域，返回的结果将不可信。

3.2.2 平方根连接函数

为了解决对数连接函数中的积分，参考量子力学中波函数的性质建立连接函数。考虑到波函数的平方为概率密度函数且积分为 1，选其作为基底则最终的积分即为系数平方和。此时 Probe 的分解形式为

$$R(t; r, \theta_j) = \left\{ \sum_{m,n} a_{mn} Z_n(r, \theta_j) P_m(t) \right\}^2. \quad (3.17)$$

其积分为

$$\begin{aligned}
 & \int_{\underline{\tau}}^{\bar{\tau}} R\left(2\frac{t' - \tau}{\bar{\tau} - \tau} - 1; r, \theta_j\right) d\tau \\
 &= \frac{\bar{\tau} - \tau}{2} \int_{-1}^1 \left(\sum_{m,n} a_{mn} P_m(t) Z_n(r, \theta_j) \right)^2 dt \\
 &= \frac{\bar{\tau} - \tau}{2} \int_{-1}^1 \sum_{m,n} a_{mn} P_m(t) Z_n(r, \theta_j) \sum_{p,q} a_{pq} P_p(t) Z_q(r, \theta_j) dt \\
 &= \frac{\bar{\tau} - \tau}{2} \sum_{m,n} a_{mn} Z_n(r, \theta_j) \delta_{mp} \sum_{p,q} a_{pq} Z_q(r, \theta_j) \\
 &= \frac{\bar{\tau} - \tau}{2} \sum_{m,n} \sum_{p,q} \delta_{mp} a_{mn} a_{pq} Z_n(r, \theta_j) Z_q(r, \theta_j).
 \end{aligned} \tag{3.18}$$

积分项可以直接通过矩阵相乘计算得到。同时注意到 R 的量纲为 T^{-1} , a_{mn} 的量纲为 $T^{1/2}$ 。hit 项无法预先计算, 此时

$$\begin{aligned}
 & \sum_i \ln R(t_{j_i}; r, \theta_j) \\
 &= 2 \sum_i \ln \left\{ a_{mn} Z_n(r, \theta_j) P_m(t'_{j_i}) \right\}.
 \end{aligned} \tag{3.19}$$

该过程计算量远大于对数形式的 (3.14), 但考虑到积分的复杂性, 目前使用平方根作为连接函数构造 Probe。

3.3 基于模拟数据的 Probe 拟合

本工作使用的训练集为 JUNO 离线模拟的 J21v1r0-Pre1 版本, 粒子为 e^- , 顶点均匀分布在液闪空间内。能量设置为 0.1 MeV, 光产额设置为 1.152×10^8 光子每 MeV, 是默认设置的 10000 倍。由于淬灭效应, 单个事例平均总 PE 数约为默认值的 730 倍, 此发光过程几乎是完美的点源且无切伦科夫光。为解决拟合过程中数据量过大的问题, 主要通过给给定先验修正、基于海森矩阵的置信域方法 (trust region method)、利用子集迭代求解等方面进行优化。

3.3.1 给定先验修正拟合 Probe

为了提升 Probe 的拟合精度, 可以通过给定物理先验作为修正, 以下介绍两种思路。

第一种基于 r_{PMT}^2 , 考虑 PMT 接收 PE 对不同距离下立体角的修正。期望 PE 数与 PMT 的立体角成正比, 即与点源到 PMT 的距离平方成反比。对于时间信息, 可以通过减去飞行时间 TOF 来修正。这些估计不需要足够准确, 但是极大地减少了待拟合的特征, 因此更容易实现。拟合可化为

$$R(t; r, \theta_j) = \frac{f}{r_{\text{PMT}}^2} [a_{mn} Z_n(r, \theta_j) P_m(t - t_f)]^2. \quad (3.20)$$

此处 f 为一个常数因子, 可以通过拟合也可以直接指定。

第二种为先拟合 Probe 的边缘分布。 r_{PMT}^2 修正在全反射区域有较大偏差, 因此希望使用更加好的估计来作为先验信息。对于期望 PE 数可以考虑先拟合 Probe 的边缘分布, 该过程可通过泊松回归^[84]实现, 公式为

$$E \left[\int R(t; r, \theta_j) dt \right] = \exp \left[\sum_n b_n Z_n(r, \theta_j) \right]. \quad (3.21)$$

对于时间信息需要近似拟合时间平移项, 可使用分位数回归^[85], 选择 Probe 条件分布中分位数对应 0.1 的位置, 公式为

$$E_\tau \left[R(t_j; r, \theta_j) \right] = \sum_n a_n Z_n(r, \theta_j). \quad (3.22)$$

最终拟合的 Probe 的形式为

$$R(t; r, \theta_j) = \frac{1}{f(r, \theta_j)} [a_{mn} Z_n(r, \theta_j) P_m(t - g(r, \theta_j))]^2. \quad (3.23)$$

以上两种回归将在第4章中详细介绍, 本章中暂时采用 r_{PMT}^2 修正。

3.3.2 基于置信域法的拟合过程优化

由于数据量大, 对于凸问题可使用基于梯度和海森矩阵 (Hessian matrix) 的置信域方法 (trust region method)^[86-87]加速。为方便, 记基底 $B_m^n(r, \theta, t) = Z_n(r, \theta) P_m(t)$, 并将下标记为一维的 n , 对数似然函数方程可写为

$$\begin{aligned} \ln \mathcal{L} &= \sum_i \ln [R(t_j; r, \theta_j)] - \frac{\bar{\tau} - \tau}{2} E \sum_j \eta_j \int R(t; r, \theta_j) dt \\ &= 2 \sum_i \ln \left[\sum_{m,n} a_m^n B_m^n(r, \theta_j, t_j) \right] - \frac{\bar{\tau} - \tau}{2} E \sum_j \eta_j \int \left[\sum_{m,n} a_m^n B_m^n(t, r, \theta_j) \right]^2 dt. \end{aligned} \quad (3.24)$$

对系数的一阶导为

$$\frac{\partial \ln \mathcal{L}}{\partial a_\mu} = 2 \sum_i \frac{B_\mu(r, \theta_j, t_j)}{\left[\sum_{m,n} a_m^n B_m^n(r, \theta_j, t_j) \right]} - \frac{\bar{\tau} - \tau}{2} E \sum_j \eta_j \int 2 B_\mu(t, r, \theta_j) \left[\sum_{m,n} a_m^n B_m^n(t, r, \theta_j) \right] dt. \quad (3.25)$$

对系数的二阶导为

$$\frac{\partial^2 \ln \mathcal{L}}{\partial a_\mu \partial a_\nu} = 2 \sum_i \frac{B_\mu(r, \theta_j, t_{j_i}) B_\nu(r, \theta_j, t_{j_i})}{\left[\sum_{m,n} a_m^n B_m^n(r, \theta_j, t_{j_i}) \right]^2} - \frac{\bar{\tau} - \tau}{2} E \sum_j \eta_j \int 4 B_\mu(t, r, \theta_j) B_\nu(t, r, \theta_j) dt. \quad (3.26)$$

该式形如 $AA^T + BB^T$, 半正定, 因此优化问题为凸问题。

将 $\{r_k, \theta_k\}$ 分为若干非交子集, k 为考虑不同顶点位置下遍历 r, θ 子集的索引。记做 $\text{Bin}_{(r,\theta)}$ 。若每个子集测度近似相等且元素个数足够多, 对应于高光产额下同位置发射的光子足够多, 则有

$$\begin{aligned} \because P([t, t + dt]) &= R(t; r, \theta) dt \\ \therefore \sum_k \sum_{t_k \in \text{Bin}_{(r_k, \theta_k)}} &\frac{P_m(t_k) Z_n(r_k, \theta_k) P_p(t_k) Z_q(r_k, \theta_k)}{R(t_k; r_k, \theta_k)} \\ &\approx \sum_k \int_{-1}^1 \frac{P_m(t) Z_n(r_k, \theta_k) P_p(t) Z_q(r_k, \theta_k)}{R(t; r_k, \theta_k)} R(t; r_k, \theta_k) dt \\ &= \sum_k \delta_{mp} Z_n(r_k, \theta_k) Z_q(r_k, \theta_k). \end{aligned} \quad (3.27)$$

因此式 (3.26) 近似为

$$\frac{-\partial^2 \ln \mathcal{L}}{\partial a_{mn} \partial a_{pq}} \approx 2 \sum_{i=1}^{N_{\text{PE}}} \delta_{mp} Z_n(r, \theta_i) Z_q(r, \theta_i) + (\bar{\tau} - \tau) \sum_{j=1}^{N_{\text{PMT}}} \delta_{mp} Z_n(r, \theta_j) Z_q(r, \theta_j). \quad (3.28)$$

相比 (3.26) 可以大幅减少计算量。

3.3.3 使用子集迭代拟合 Probe

对 N 个不同数据集使用相同阶数的多项式进行拟合, 得到 N 个 Probe。每个 Probe 对应一组多项式拟合系数 \mathbf{a}_i ($i = 1, 2, \dots, N$)。对于每个 Probe, 假设任意一组同等维数的系数 \mathbf{a} 服从均值为 \mathbf{a}_i 的高斯分布, 因此直接对多组数据取其平均值作为新的结果。

训练集包含顶点在球内随机分布且能量相同的 20 万组事例。实际处理中将数据按照 PMT 序号分类, 考虑到最上面的两圈和最下面的两圈 PMT 受到进出水口的影响, 共 40 个 PMT 的数据被去掉。对约 17500 个子集分别拟合其 Probe, 将得到的所有系数取平均后作为下一次迭代初值的输入。以上 Probe 的预处理、迭代优化流程如图 3.1 所示。

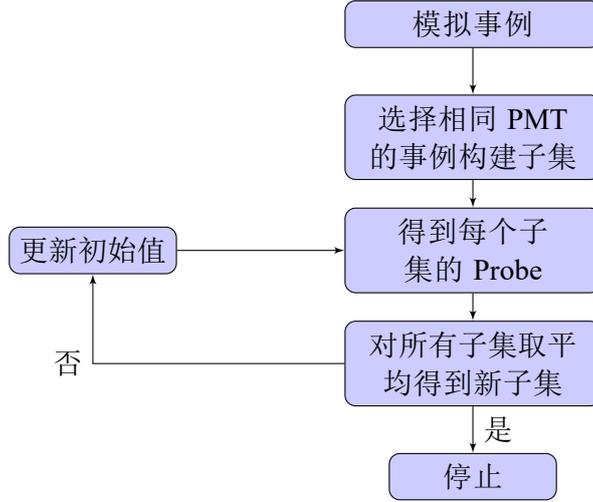


图 3.1 使用迭代拟合 Probe 流程图。

3.4 Probe 的拟合优度分析

3.4.1 使用蒙特卡洛方法获得 Probe

对训练集的输入数据在 r, θ, t 维度上分 bin 可以直观地表示其分布。如果统计量足够大，等价于直接使用蒙特卡洛方法使用三维直方图对 Probe 近似。本工作中拟合输入为 20 万个事例，单个事例 PE 数接近正常值的百倍，可以达到统计量的要求。若统计量足够大，该结果可直接作为拟合结果的上限。其优势在于准确反映全反射、多次反射、发光时间谱上升沿等在 Probe 中接近阶跃函数的部分。但实际上无法达到如此高的统计量。本文将蒙卡方法得到的 Probe 视为 Probe 性能的上限，称为**蒙卡 Probe**，并基于此研究 Probe 中需要优化的细节。

使用蒙卡方法获得 Probe 的过程相当于得到 Probe 函数的 map，由于 3.1 节中 Probe 的定义故其本质与传统 map 不同。假设 Probe 具有良好的球对称性，可以根据 r, θ, t 将数据划分为大量足够小的三维区间，每个区间内的期望 PE 数近似相同，可直接由落入该 bin 内的观测数据获得。与拟合相比，其结果不会受限于多项式的阶数和形式，但是引入了巨大的自由度。

其计算过程如下所示：欲得到某一时刻 $R(t; r, \theta)$ 的数值，首先选取该三维区间内符合条件的顶点和 PMT 的 r, θ ，即为式 (3.9) 中 nonhit 项中的数据，个数为 N_{nonhit} 。符合条件的所有 PE 对应 hit 项，其个数为 N_{hit} ，根据多个泊松分布的可叠加性，有

$$N_{\text{hit}} \sim \text{Pois} \left(R(t; r, \theta) \sum_i^{\text{nonhit}} \eta_i \right) \Rightarrow \hat{R}(t; r, \theta) = \frac{N_{\text{hit}}}{\sum_i^{\text{nonhit}} \eta_i}. \quad (3.29)$$

N_{hit} 可由 hit 项对 r, θ, t 做三维直方图得到， N_{nonhit} 项可由 nonhit 项对 r, θ 做二

维直方图得到。将该方法扩展到所有区间后,得到的结果即为使用蒙卡方法得到的 Probe, 记为 $R_{MC}(t; r, \theta)$ 。统计量足够大时,对不同的 r, θ, t 使用插值可得到全空间的响应。按照 θ 分 bin 可以在近端 $\theta \sim 0$ 和远端 $\theta \sim \pi$ 更精细的响应。区间划分策略为按照 r^3, θ, t 分为 500, 1500, 600 个区间, 选取的数据中时间从 0 ns 到 600 ns。

图3.2是蒙卡 Probe 利用有节点和无节点的 JUNO 几何模拟得到的结果, 其中节点的定义见1.5小节。Probe 的边缘分布显示了期望 PE 随 r, θ 的变化。两幅图中均显示出全反射、多次反射等效应引入的复杂结构, 本文将在第4章详细讨论光路成因。宏观上看两图差异不大, 节点结构为 JUNO 实验特有, 引入了更加复杂的光学过程, 第7章将详细讨论节点的影响。

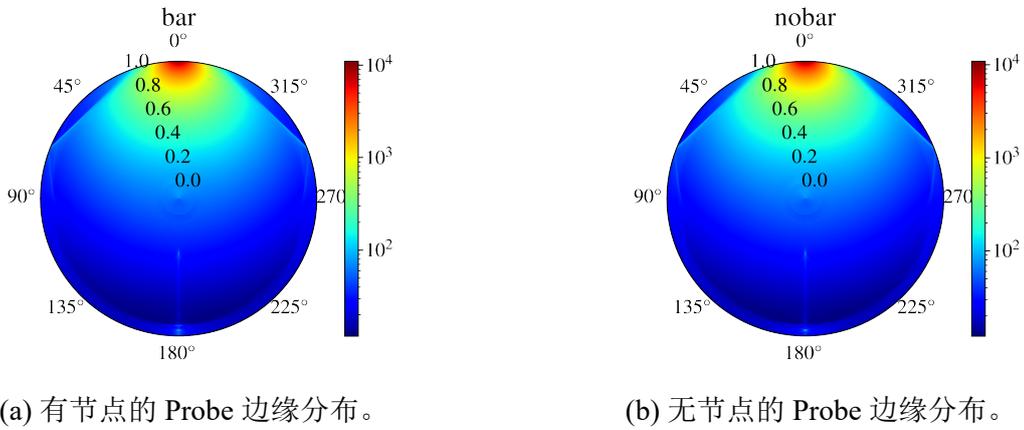


图 3.2 使用蒙卡 Probe 得到的边缘分布 (即期望 PE) 随 r, θ 变化图, 其中节点的定义见1.5小节。边缘分布可以看作 PMT 位于 0 度, 顶点及 PMT 的相对位置可以转化为 r, θ , 图中颜色表示不同顶点对该 PMT 期望 PE 的贡献。

3.4.2 Probe 边缘分布与条件分布的拟合效果

为了直观的检查 Probe 的拟合效果, 我们绘制了 Probe 的边缘分布及选定七个位置的条件分布, 使用拟合 Probe 与蒙卡 Probe 对比。

为比较效果我们额外使用了相同条件下的1000 个文件作为测试集, 首先将所有事例根据顶点和 PMT 的位置关系映射到 r, θ , 并在选定的顶点附近选择所有 $0.05r_{LS}$ 的范围内的事例。给出的拟合结果为该区域内所有顶点的拟合 Probe 的结果叠加取平均, 可以防止分 bin 的影响, 即

$$\frac{1}{K} \sum_k^K R(t; r^k, \theta_j^k). \quad (3.30)$$

其中 k 为事例索引, 拟合结果如图3.3所示。

以上结果可以看出函数基 Probe 完成了对宏观结构的拟合, (b)中边缘分布与真值之比接近于 1, 其主要偏差在全反射区域的分界面上, 用函数基拟合阶跃结构引入了吉布斯效应, 无法看到全反射区域和内部锐利的边缘。除此之外, 在 $\theta \approx \pi$

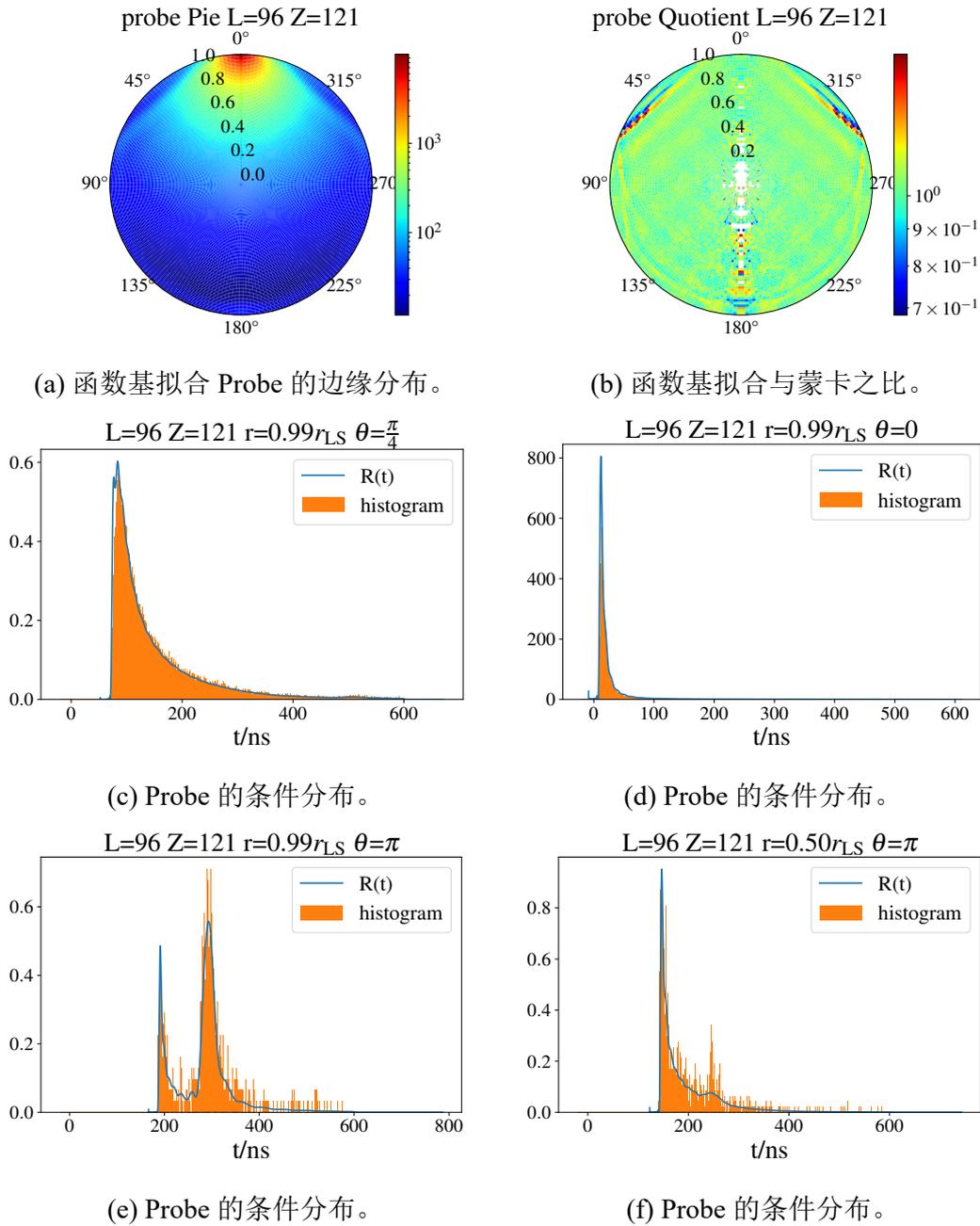


图 3.3 对 JUNO 探测器 (含节点) 的 Probe 拟合结果。

(a)–(b)展示了 Probe 边缘分布的函数基拟合效果及其与蒙卡 Probe 的比值,此时蒙卡 Probe 的输入数据为测试集中的一个子集。边缘分布可以看作 PMT 位于 0 度,顶点及 PMT 的相对位置可以转化为 r, θ , 图中颜色表示不同顶点对该 PMT 期望 PE 的贡献,条件分布展示了指定顶点对该 PMT 贡献的 PE 强度随时间的变化。由于球对称性,顶点和 PMT 的位置均可由该图经过旋转得到。(c)–(f)中蓝线展示了不同 r, θ 下 Probe 条件分布的拟合结果,其中 histogram 为蒙卡 Probe 的结果。其位置分别代表全反射区域、近端、远端、聚焦点。

处函数基也显著偏低。在整个中心区域,可以看到比值变化呈现周期性结构,这是由于 Zernike 多项式阶数不够引入的。(c) – (f)是函数基 Probe 对条件分布的拟合,从宏观结构看拟较为准确,但在某些位置欠拟合。除此之外,在勒让德多项式的端点处,超高阶数会产生非物理的尖锐的峰,而阶跃函数也会由于吉布斯效应产生震荡结构。关于全反射、聚焦点、远端等效效应我们将在第4章详细讨论。

3.4.3 基于验证集的最优模型选择

验证集的函数与拟合过程中相同,使用式 (3.31) 返回的似然函数值可作为该模型的分值,更高的分值表明拟合优度更好。评分函数为

$$\ln \mathcal{L} = - \overbrace{\frac{\bar{\tau} - \tau}{2} \sum_j^{N_{\text{PMT}}} \int \eta_j R(t; r, \theta_j) dt}^{\text{nonhit}} + \overbrace{\sum_{i=1}^{N_{\text{PE}}} \ln [R(t_i; r_i, \theta_{j_i})]}^{\text{hit}}. \quad (3.31)$$

在 hit 项中 η_j 固定为常数,未在式中考考虑。综上,在整个画图 and 验证集中,不需要出现每个 PE 对应的 QE,只需要记录每个顶点和 PMT 对应的 QE,极大地减少了数据存储量。我们分别将蒙卡 Probe 和不同拟合轮数的结果代入,得分如图3.4所示。通过测试集可以证明该操作使评分提高,其评分逐步上升。当阶数固定时,随着迭代次数增加其结果趋于收敛。当增加多项式的阶数时,可以看到该数值有显著提升,足够多的阶数可使其达到最佳值。当前阶数距离蒙卡数据的结果仍有差异。

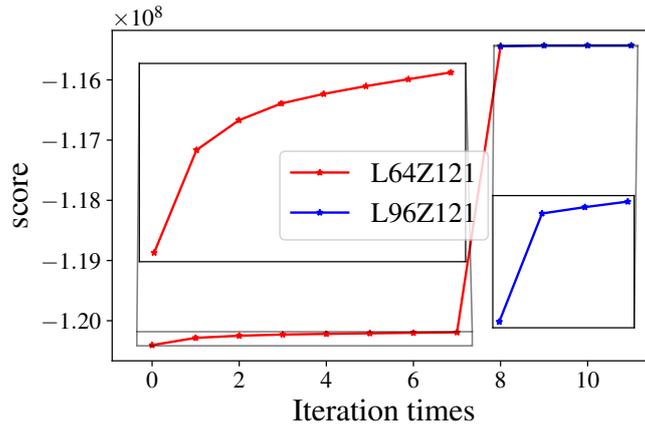
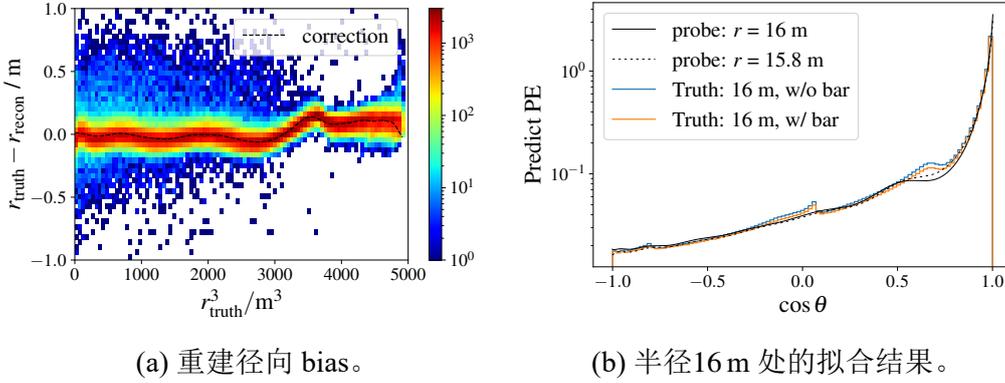


图 3.4 使用测试集对不同迭代轮数、不同阶数的系数进行评分。

分数越高代表拟合效果越好。其中 Z 后的数字代表 Zernike 多项式的阶数, L 后的数字代表勒让德多项式的阶数。前面 8 轮以 121 × 64 组合的多项式作为基底。随后将迭代结果作为初值输入到 121 × 96 的系数中。

受限于数据量和阶数,拟合 Probe 的结果在全反射区域有较大偏差。如果直接

用于顶点重建, 重建偏差随顶点半径的分布如图3.5(a)所示。以 $r = 16\text{ m}$ 为例, 其重建值为 15.8 m 。图3.5(b)展示了半径为 16 m 模拟数据中期望 PE 数随 θ 的变化, 以及 16 m 和 15.8 m Probe 的拟合效果, 实际数据在 16 m 的结果与预测值的 15.8 m 更吻合。该半径处刚发生全反射, 函数基拟合处于欠拟合, 故引入了偏差。



(a) 重建径向 bias。

(b) 半径 16 m 处的拟合结果。

图 3.5 函数基拟合 Probe 顶点重建偏差。

(a)为顶点重建结果, 径向偏差在全反射即将发生临界区域接近 0.2 m 。(b)展示了半径 16 m 处的拟合效果, 有无节点差异不大, 但是 Probe 处于欠拟合。

虽然可以通过位置修正可以减小顶点偏差带来的能量非线性, 但与我们目标得到精确的点源响应相左, 修正后的能量分辨率一定差于精确建模的结果。

3.5 本章小结

本章引入了非齐次泊松过程来描述点源响应模型。相比于传统方法分别对 PE 和时间信息建模, 该方法从统计学上将两个概念统一起来, 并基于该模型给出了单个事例同时包含 PE 和时间的似然函数, 可直接用于事例重建。

我们首先根据球对称性把点源响应模型 Probe 的自由度简化到 r, θ, t , 采用函数基拟合, 在空间上利用 Zernike 多项式, 在时间上利用勒让德多项式, 组合成三维多项式。为达到更好的拟合效果, 我们使用基于飞行时间和立体角的物理模型作为先验进行修正, 并利用梯度信息和海森矩阵加速优化。为解决数据量大的问题, 我们使用多个子集的结果取平均并反复迭代, 最终基本达到了指定阶数下的拟合效果上限。该方法可推广至任意数据量、任意材料的球形探测器。

为评价拟合优度, 我们使用测试集对不同阶数的模型做出评价, 并以蒙特卡罗方法获得的 Probe 作为上限, 比较了函数基拟合目前存在的不足。虽然其在宏观结构上差异不大, 但全反射区域由于 Probe 接近阶跃函数导致欠拟合, 还存在周期性振荡结构。在时间维度存在吉布斯效应, 多峰结构无法准确刻画。Probe 的偏差将传递至能量重建而使能量分辨率变差, 从而影响最终物理目标。

本文于第5和6章对 Probe 推广的核心是获得精确的点源响应模型 Probe, 故本文于第4章详细讨论探测器中复杂的光学过程及如何提升 Probe 的精度。当该模型实际应用于 JUNO 几何时, 我们在第7章考虑了非球对称修正以进一步提升 Probe 的精度。

第4章 模型中全反射和多次反射的影响研究

第3章使用三维多项式拟合 Probe，该过程可推广至任意球对称探测器。但在局部细节需要更高阶数拟合，受限于当前计算水平难以实现。本章着重解决两个问题：其一是如何通过优化拟合过程提升模型的准确性；其二是基于模拟研究高阶成分是如何由光学过程引入的，并以此为依据改进模型使拟合更准确。最后研究了这些光学过程对重建的潜在影响。

本章着重于以液闪为探测介质、水为缓冲物质的组合的探测器。由于折射率的差异引入全反射效应：对于确定 PMT，探测器中某些顶点发出的光将几乎不会被探测到，除非发生散射、吸收重发射等过程，如图2.1所示。除此之外，探测器中的多次反射使得探测器中的光路也无法忽略。以上过程可推广至不同尺度的液闪-水探测器。

4.1 使用变系数分解法拟合 Probe

为了回避庞大的数据量，本节选择锦屏一吨原型机进行研究，详细几何见1.4.3小节。其半径为0.65 m，PMT 共30个。其中心为液闪，缓冲物质为水，因此也存在全反射、多次反射等效应。相比于 JUNO，其光子的衰减长度、吸收重发射等效应将会减弱。同时其几何结构除出、入水口外几乎是完美的球对称，且无 JUNO 中节点的影响。因此可以将锦屏一吨原型机近似为理想的缩小版 JUNO。

本章采用变系数分解法^[88]。其主要流程为拟合一个高维函数某个变量的条件分布，得到 m 阶系数。然后将每个系数作为第二个变量的条件分布，返回 $m \times n$ 阶系数，重复该过程直至遍历所有变量，最终返回 $m \times n \times \dots$ 的系数作为总的系数，可以极大突破拟合中内存的限制。

4.1.1 一维多项式的拟合结果

2.4.2节指出在小探测器中 PE 信息主导了重建的分辨率。在小探测器中不同位置的 $\tilde{R}(t; r, \theta)$ 几乎满足平移不变性，因此本节忽略时间分布的形状差异，将 Probe 退化到 Probe 的边缘分布，维度仅包含 (r, θ) 。

拟合边缘 Probe 的策略是先拟合 θ 再拟合 r ，每次拟合的数据拥有相同的 r ，然后将得到的系数作为 r 的条件分布再对 r 拟合。借助图2.1中的符号定义，对于 PE

信息，其观测值服从泊松分布，采用泊松回归^[84]，即

$$\ln E [n_j] = \ln \lambda_j = \sum_l c_l^\lambda(r) P_l(\cos \theta_j) + \mu_j. \quad (4.1)$$

μ_j 正比于 PMT 的量子效率以及事例的能量，即

$$\begin{aligned} \lambda_j(E, \mathbf{r}, \eta_j) &= E \eta_j \lambda_j(\mathbf{r}) \\ \Rightarrow \ln \lambda_j(E, \mathbf{r}, \eta_j) &= \ln E + \ln \eta_j + \ln \lambda_j(\mathbf{r}). \end{aligned} \quad (4.2)$$

在模拟中若将 PMT 的性质设为全同，并且用于建模的事例能量均相等，此时的 μ_j 是一个常数，并在回归分析中贡献到 0 阶的系数中。 $c_l^\lambda(r)$ 可根据下式得到。

$$\begin{aligned} \ln \mathcal{L}(c_l^\lambda(r)) \\ &= \ln \prod_j \exp(-\lambda_j) \frac{\lambda_j^{n_j}}{n_j!} \\ &= \sum_j (-\lambda_j + n_j \ln \lambda_j) + \text{Const}. \end{aligned} \quad (4.3)$$

类似地，可以对 $\tilde{R}(t)$ 中时间平移项进行拟合，称为**期望时间**。此处的期望定义为一个分布的指定分位数而非传统意义的期望，回归方式为分位数回归^[85]。该方法是一个鲁棒的估计，发光时间的长尾影响将被抑制。期望时间 T_j 的数学表达式为

$$E_\tau[t_{j_i}] = T_j = \arg \min_c \left[\sum_j \mathcal{R}_\tau(t_{j_i} - c) \right] = \sum_l c_l^T(r) P_l(\cos \theta_j) + U_j. \quad (4.4)$$

$\mathcal{R}_\tau(t)$ 为分位数回归中的损失函数，定义为

$$\mathcal{R}_\tau(t) = -(1 - \tau) \sum_{t < 0} t + \tau \sum_{t \geq 0} t. \quad (4.5)$$

U_j 与 PMT 的渡越时间以及每个事例的起始时间相关，是一个常数并在回归分析中贡献到 0 阶的系数中。

寻找损失函数 \mathcal{R}_τ 的最小值等价于寻找 $\mathcal{L} \propto \exp(-\mathcal{R}_\tau/t_s)$ 的最大值。 t_s 是一个大于 0 的正数，定义为时间尺度因子。欲求其对应的概率密度函数，需要对 $\exp(-\mathcal{R}_\tau/t_s)$ 归一化，可得

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-\frac{\mathcal{R}_\tau}{t_s}\right) dt &= \int_{-\infty}^{T_j} \exp\left[-(1 - \tau) \frac{T_j - t}{t_s}\right] dt + \int_{T_j}^{\infty} \exp\left[-\tau \frac{t - T_j}{t_s}\right] dt \\ &= \frac{t_s}{1 - \tau} + \frac{t_s}{\tau} = \frac{t_s}{\tau(1 - \tau)}. \end{aligned} \quad (4.6)$$

因此使用分位数回归等价于使用式 (4.7) 的概率密度函数。其与蒙卡真值的

PDF 及累积分布函数 (CDF) 比较如图 4.1 所示。即使发光时间有较长的尾巴，分位数回归都可以做一个鲁棒的估计。本研究中侧重于使用分位数回归逼近时间的概率密度函数，未来可应用于取合适的分位数拟合飞行时间。

$$\tilde{R}(t) = \frac{t_s}{\tau(1-\tau)} \exp\left(-\frac{R_\tau}{t_s}\right). \quad (4.7)$$

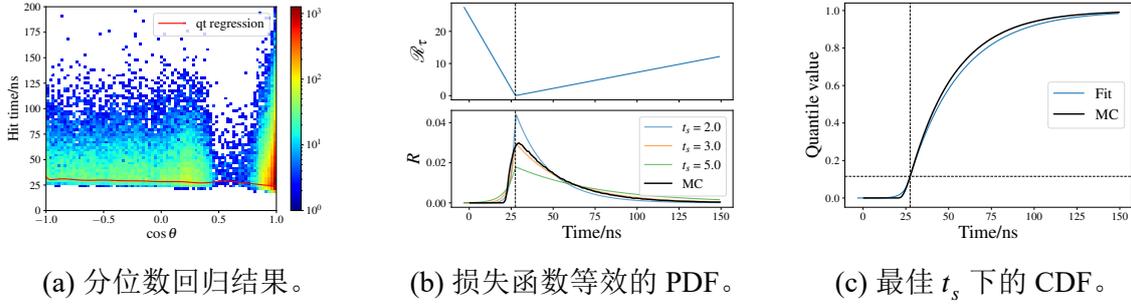


图 4.1 分位数回归的效果展示。

(a)展示了 $r \approx 0.98r_{LS}$ 时的分位数回归结果，(b)中上图展示了分位数回归的损失函数，下图展示了不同 t_s 下分位数回归等效的时间的概率密度函数。有蒙特卡洛得到的真值为黑色实线。(c)展示了 $\tau = 0.1$ 时的 CDF 与真值的对比。

训练集中将 PMT 的 TT 的均值设为 0，TTS 相同，并且每个事例均在 0 时刻触发，能量均相同，PMT 量子效率都相同，该处理不失一般性。每一个 r 可以拟合得到一组合 c_l^λ 与 c_l^T ，首先将 r 归一化，为使 r 在 0 处导数为 0，仅使用偶对称的多项式拟合，实际操作中仍使用勒让德多项式，分解为

$$c_l^\lambda = \sum_{m \geq 0} c_{l,2m}^\lambda P_{2m}(r/r_{LS}), \quad (4.8)$$

$$c_l^T = \sum_{m \geq 0} c_{l,2m}^T P_{2m}(r/r_{LS}). \quad (4.9)$$

回归中限定每组 r 相同，在整个探测器内均匀分布的事例无法满足这种要求。而由于 PMT 个数有限，采用定点模拟将会使 θ 的取值不能覆盖所有情况。实际中训练集的模拟条件如下所示：

1. 训练集中按照半径分成不同的子集，每个子集中的事例中的顶点拥有相同的 r ，顶点在以 r 为半径的球面上均匀分布。
2. 半径在非全反射区域的 r 从 0 mm 到 550 mm，步长为 10 mm。在全反射区域的 r 从 550 mm 到 644 mm，步长为 2 mm。
3. 每个子集模拟 5000 个事例。在全反射区域附近实际触发的事例会受触发条件的影响。

最终回归分析得到的 $c_l^\lambda(r)$ 和 $c_l^T(r)$ 随 r 变化如图 4.2 所示。通过低维的函数以直积

组合成高维形式，可以提升模型的精度，有效地可视化点源响应并理解探测器中的光学模型，如全反射，聚焦等。

4.1.2 二维多项式的拟合结果

也可以直接以 r, θ 为输入的二维多项式作为基底进行拟合，如 Zernike 多项式：

$$E_{\tau}[t_{j_i}] = T_j = \sum_m \sum_n T_n^m Z_n^m(r/r_{LS}, \theta_j). \quad (4.10)$$

此时分解形式为

$$\ln E[n_j] = \ln \lambda_j = \sum_m \sum_n \lambda_n^m Z_n^m(r/r_{LS}, \theta_j). \quad (4.11)$$

其形式见式 (3.12)。也可以使用两个勒让德函数的直积作为新的基底，即

$$B_{mn}(r, \cos \theta) = P_m(r/r_{LS}) \times P_n(\cos \theta). \quad (4.12)$$

使用 $B_{mn}(r, \cos \theta)$ 替换 $Z_l(r, \theta_j)$ 可以得到相似的分解方式。

测试集使用球内均匀分布的数据，评分按照式4.3似然函数，不同分数的模型如图 4.3所示。

拟合过程中，图4.3(b)显示变系数分解法可获得更高的自由度和更高的评分，内存占用和运行时间均缩减为 $\sim 1/100$ 量级，二维多项式运算时内存占用极高。

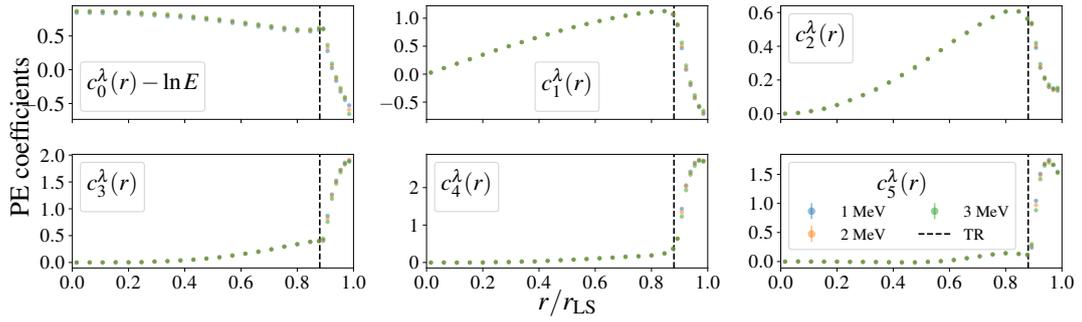
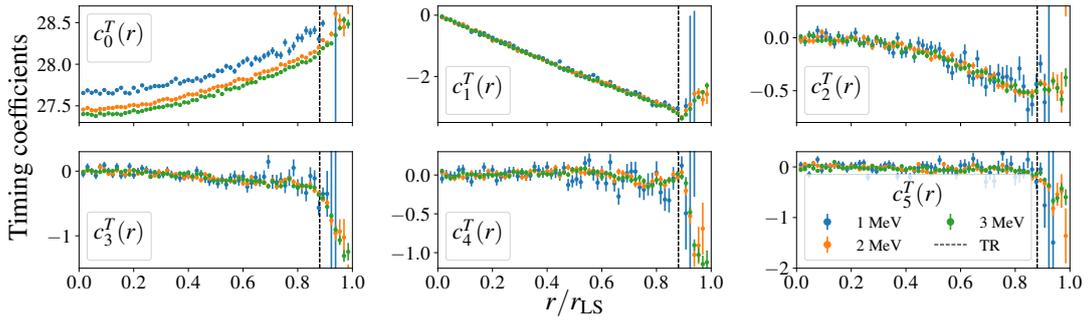
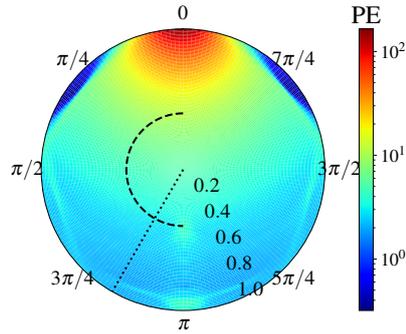
本节实现了从二维到一维的优化，时间平移不变性破坏时尚未考虑。目前第3章中的拟合自由度量级在10000 附近，而变系数分解法可以作为启发优化其拟合流程，我们在4.2节讨论。

4.2 基于光学传播模型的 Probe 条件分布拟合

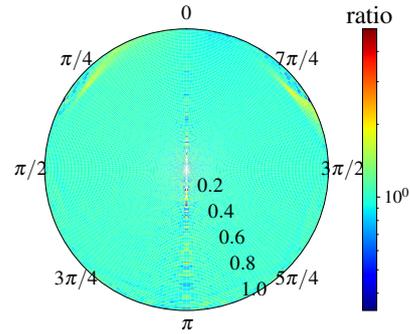
本章将用两种方式拟合 Probe 的条件分布：首先使用泛化性能较好的勒让德多项式，另一种是基于几何光学的光学传播模型拟合 Probe。以变系数分解法为启发，本节的目标是将时间维度的条件分布选择合适的形式进行参数化，然后将拟合的系数视作 r, θ 的函数，从而做到准确且尽可能简化自由度。

4.2.1 勒让德多项式拟合

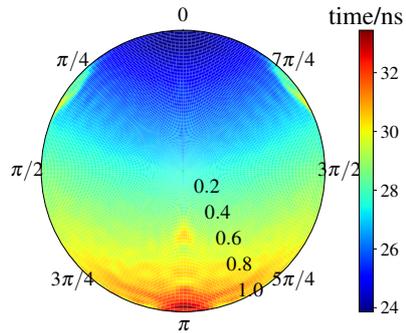
勒让德多项式是正交完备的基底，泛化性能较好。但在 Probe 中阶跃函数的拟合可能会引入吉布斯效应，与第3章中的函数基拟合相比，为减少振荡结构，选择阶跃函数的起始点作为勒让德多项式的左边界，并对特定 r, θ 下 Probe 的条件分布


 (a) 不同能量下 $c_l^\lambda(r)$ 的前六阶系数。

 (b) 不同能量下 $c_l^T(r)$ 的前六阶系数。


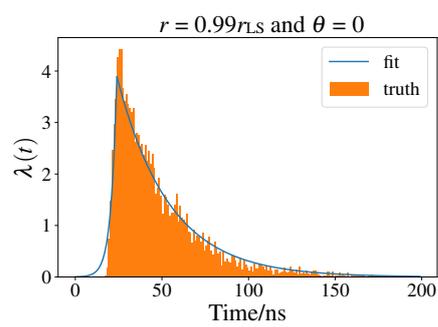
(c) 期望 PE 拟合效果。



(d) 期望 PE 拟合与真值之比。



(e) 期望时间拟合效果。



(f) 非齐次泊松过程。

图 4.2 变系数分解法的拟合结果。

(a)与(b)分别为不同能量下 PE 和时间的拟合结果。虚线 $0.88r_{\text{LS}}$ 对应全反射临界区域，误差棒为一倍标准差。(c) – (f)展示了 $2 \text{ MeV } e^-$ 的变系数分解法结果。(c)和(e)分别为拟合的 PE 和时间信息。(c)中 $r = 0.4r_{\text{LS}}$ 和 $\theta = 5\pi/6$ 两个结构将会在4.3.4节讨论。(d)为 PE 拟合值与真值之比。(f)是 $r = 0.99r_{\text{LS}}$ 且 $\theta = 0$ 处拟合的非齐次泊松过程与蒙卡的比较。

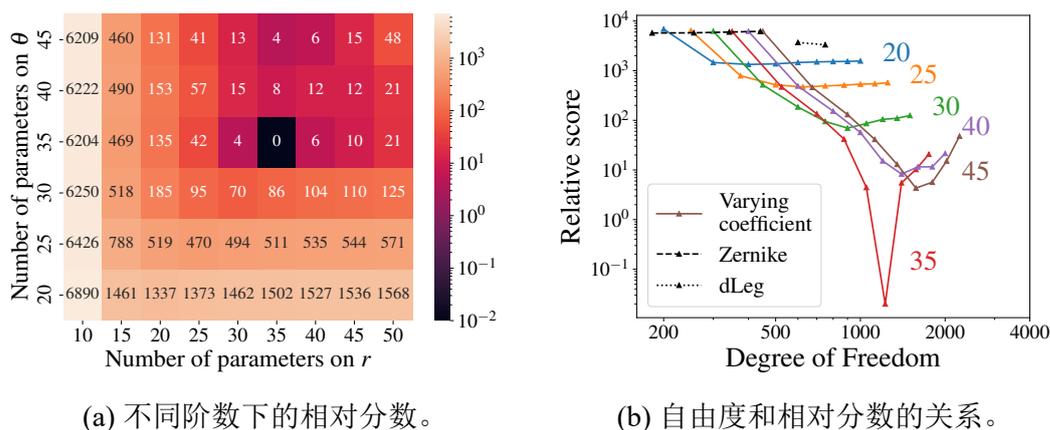


图 4.3 不同阶数下与最佳模型的相对分数。

相对分数指不同模型的评分与其中最高评分的差距。(a)显示 (θ, r) 使用 35×35 阶可达最佳效果。(b)考虑了 Zernike 和双勒让德 (dLeg) 组合多项式。数字代表第一次拟合使用的参数个数，横轴代表两次拟合所有的系数。

使用 32, 64, 96 三种阶数进行拟合。连接函数为平方形式，即拟合

$$R(t; r, \theta) = \left[\sum_m a_m P_m(t') \right]^2. \quad (4.13)$$

其海森矩阵半正定。数据量充足的情况下 $\sum_m a_m P_m(t')$ 必定恒正或恒负，其平方值一旦为 0 在极大似然法中意味着无穷大。恒为负情况可以加负号变为恒正，以下仅讨论恒正情况。但是数据量不足的情况下则可能出现 $\sum_m a_m P_m(t')$ 不满足恒正要求，从而出现零点。这组解与恒正的结果相比是局域极值，导致部分系数出现巨大波动，因此变系数分解法会由于高阶系数的剧烈震荡在此处无法推广。

图4.4展示了拟合的结果。图4.4(a)展示了 Probe 的条件分布 $R(t; r, \theta)$ 与蒙卡 Probe 在此处的比较，数字代表拟合使用的阶数。图4.4(b)展示了使用连接函数前的拟合结果。由于统计量不足，该值并非恒正，导致零点存在。

t 增大时，击中时间的理想分布应遵循近似多个指数成分的叠加，即多个指数分布的混合模型，而勒让德多项式引入了一系列的振荡结构都与物理模型无关，这些非物理的结构都会引入潜在的局域极值和偏差。且不利于时间窗的延拓，需要重复整个流程。

由此可见，勒让德多项式拟合有如下缺点：拟合阶跃函数存在吉布斯效应；指数拟合引入非物理结构；统计量不足会出现零点。如果将所有事例同时拟合，在邻域的观测值会极大的限制零点的出现，且减少非物理的振荡结构，但相当于回到了第3章中的函数基拟合方法，故勒让德多项式不适合条件分布的拟合。

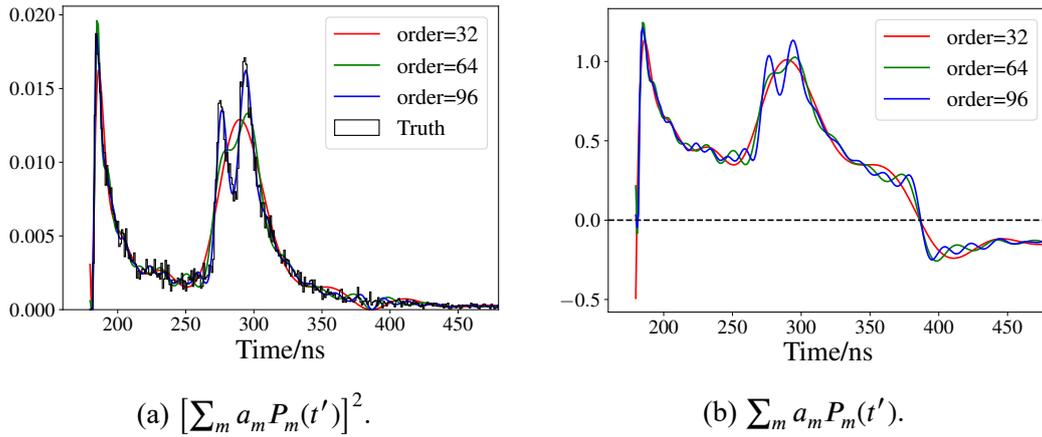


图 4.4 使用勒让德多项式对 Probe 的条件分布进行拟合。不同颜色代表了拟合时不同的阶数，仅有 96 阶系数对三峰拟合成功。(b)为左图平方之前的形式，有零点。

4.2.2 光学传播模型的研究

本小节利用探测器模拟中的光学过程研究 Probe 拟合中高阶分量产生的原因。顶点到 PMT 可能存在多条光路。在非全反射区域，顶点的光子可以直达 PMT。在临近全反射区域，即使反射率接近 1，多次反射之后透射率仍不可忽略。使得光子会先经过亚克力反射再到达 PMT。以图 4.5 为例，借助软件^[89]，顶点位于 $r \sim 0.8r_{LS}$ ，且 $\theta \sim 5\pi/6$ 时，共有四种类型的光路可以击中指定 PMT。其中直入射所占的比例较高，是图中最亮的一条。光路 2, 3 均为经过一次亚克力反射后被击中的光路，由于透射率较高，导致反射的光线强度小于直入射情形。光路 4 为先击中 PMT 的反方向，然后再反射回 PMT 的位置。这种光路的透射率最高，反射光强度最小，因此在图中颜色最暗淡，几乎无法看清。实际的光子发射是各向同性的，问题中的光路 1 的立体角最小，光路 2, 3 次之，光路 4 最大。

在 JUNO 探测器中，当顶点位于 $(0, 0, 17000)$ mm 且 θ 接近 π 时，图 4.6 绘制了击中 PMT 的可能光路，其中颜色的深浅代表强度。在图中，随着 θ 增大，多次反射的成分比重增加且更难以忽略。顺时针和逆时针的光路分别正比于 θ 以及 $2\pi - \theta$ 。当 $\theta \sim \pi$ 时，顺时针、逆时针的光路对称，等价于同一条光路，因此峰的强度远超过附近区域，称为**聚焦效应**，此时第二个峰的强度甚至会超过直入射分量。

多次反射效应的叠加使经过反射的 PE 高于直入射分量，如果使用第一个 PE 击中时间将损失这些信息。因此精确的 Probe 将会给顶点、能量重建提供更多的信息，但是描述这些结构极具挑战。

由于一次反射，从反方向反射的成分较弱，本工作中暂时忽略。使用三个分量分别对应直入射、顺时针、逆时针来描述可以预测 Probe 的条件分布。当固定 r 时，在不同的 θ 下时间分布如图 4.7 所示。

根据 $\frac{\pi r_{LS}}{v} \frac{\theta}{\pi}$ 和 $\frac{\pi r_{LS}}{v} \frac{2\pi - \theta}{\pi}$ 作为初值，在 $\theta \in [0.75, 0.9]\pi$ 范围内，以初值前后



图 4.5 击中同一个 PMT 的不同光路示意图

光子从顶点 (Vertex) 出发, 至少有 4 种光路可以击中 PMT。其中光路 1 为直入射光线, 光路 2、3、4 均经过液闪和水分界面反射一次后再击中 PMT。光强从大到小依次对应光路 1、2、3、4。

$[-30, 30]$ ns 内寻峰并拟合出两条直线, 呈现出 t 和 θ 是一次函数的关系。当 r 减小时这些效应减弱, 因此使用三个峰拟合的假设是合理的。

若从模拟的角度研究 Probe 条件分布的成因, 主要包含液闪的发光时间和 PE 的飞行时间。在 JUNO 模拟中, 电子的发光时间服从四个指数分布^[90]的混合模型, 公式为

$$p(t) = \sum_{i=1}^4 \alpha_i \frac{1}{\tau_i} \exp\left(-\frac{t}{\tau_i}\right). \quad (4.14)$$

其比例为

表 4.1 JUNO 液闪中的衰减成分。

i	1	2	3	4
α_i	70.7 %	20.5 %	6 %	2.8 %
τ_i	4.6	15.1	76.1	397

由此可见, 单一的指数分布无法拟合实际情况。在模拟中提取出的时间发光谱如图4.8所示。

PE 的飞行时间可以通过 PE 被 PMT 接收到减去模拟中的发光时间, 即使剔除了吸收重发射的 PE, 由于色散、多次反射等过程, 该分布并非单个狄拉克分布或者几个简单的狄拉克分布叠加。选取了四个典型的位置如图4.9所示。即使在探测器中心, 粒子会由于上述效应产生“长尾效应”, 这个效应是非高斯且难以拟合。在其他的多峰结构中, 几个统计较高的峰显示不发生吸收重发射的量远超吸收重

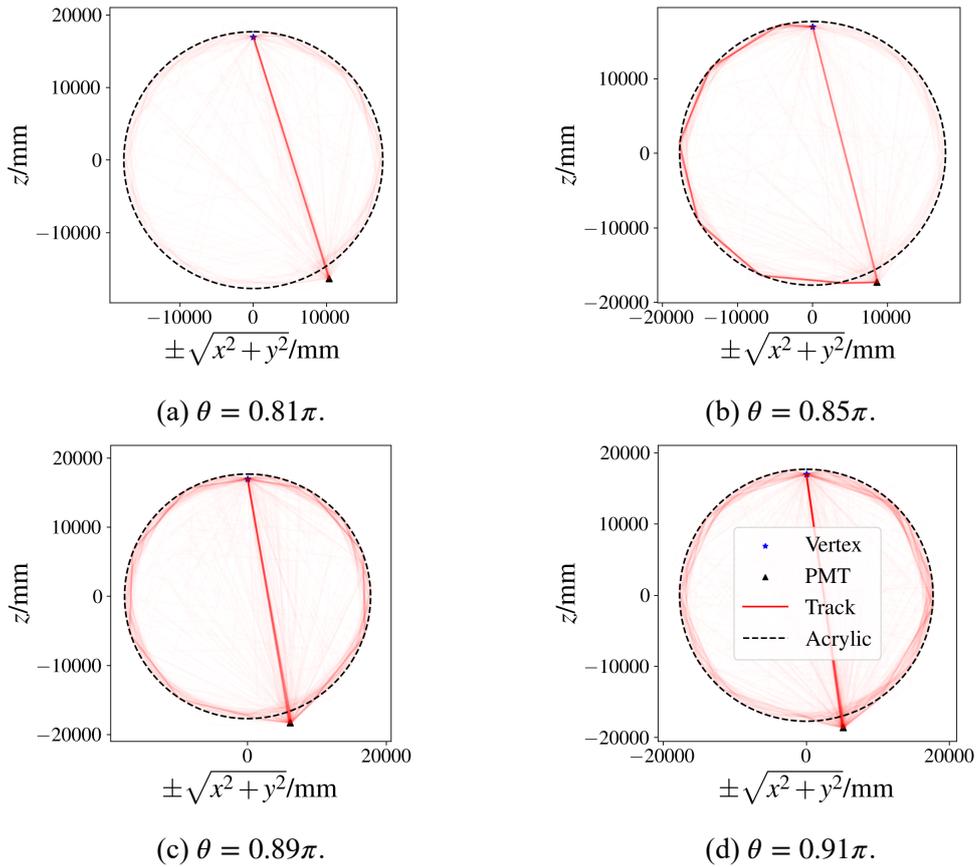
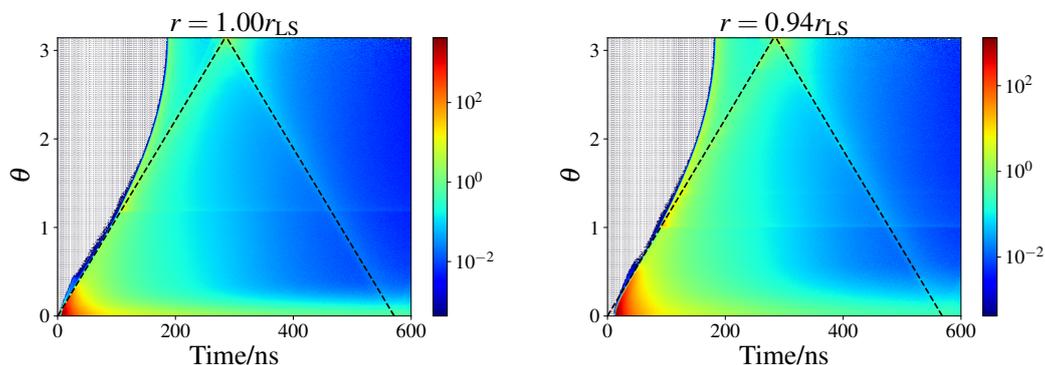
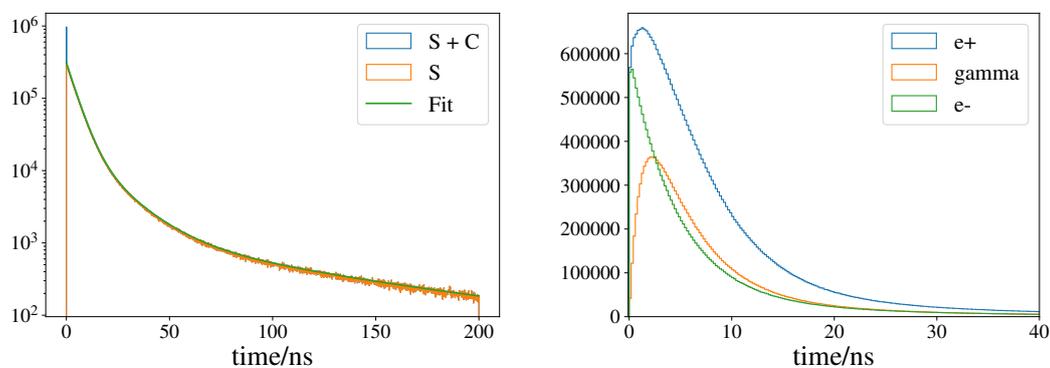


图 4.6 JUNO 探测器中的光路。

顶点 (Vertex) 位于 $(0, 0, 17000)$ mm, 选取不同 θ 下击中 PMT 的光路。大部分光路处于圆心-顶点-PMT 所在平面内, 光路超过亚克力球壳半周为逆时针, 否则为顺时针。其时针方向具体按如下方法判断: 取向量圆心-顶点和圆心-PMT 的叉乘方向作为正方向, 然后计算圆心-顶点与每一路径中点的方向。若其同号则规定为顺时针, 异号则规定为逆时针。随着 θ 的增大, 多次反射的路径比重增加。 $\theta = 0.85\pi$ 显示逆时针方向首先出现多次反射。随着 θ 的进一步增大, 顺、逆时针的成分均增加。顺时针的路径约正比于 θ , 逆时针的路径约正比于 $2\pi - \theta$, 均为 θ 的一次函数。


 图 4.7 给定 r 下的时间分布与 θ 的关系。

固定 $r = r_{LS}$ 与 $r = 0.94r_{LS}$ ，扫描不同的 θ 可以得到 Probe 的条件分布，将该半径下所有 θ 拼接而成即可。事例起始时刻为 0 ns。图中左侧由于飞行时间限制没有 PE 击中，右侧两条黑色虚线显示了击中时间和 θ 存在一次函数关系的结构，印证了图 4.6 的结构。左侧虚线为顺时针光路，右侧虚线为逆时针光路。



(a) JUNO 模拟中电子发光时间谱。

(b) JUNO 模拟中不同粒子发光时间谱。

图 4.8 JUNO 模拟中不同粒子在液闪中的发光时间谱。

(a)是模拟中对 e^+, e^- 在液闪中的发光时间采用的数据，限制在 $[0, 200]$ ns。其中 S 和 C 为从模拟中提取的不同类型的 PE。S 代表闪烁光，与 4 指数衰减相符。C 代表切伦科夫光，几乎在瞬间释放。在 J21v1r0-Pre1 版本中其总量约为闪烁光的 6%。Fit 由模拟中使用的四个成分参数叠加而成，参数见表 4.1。(b)模拟了初始动能为 1 MeV 的 e^-, e^+, γ 的发光时间谱，限制在 $[0, 40]$ ns。与 e^- 相比， γ 需要经过康普顿散射后才能沉积能量随后发光。 e^+ 首先迅速沉积能量，表现与 e^- 相同，随后湮灭出 γ 经过康普顿散射效应后通过次级电子发光。因此 e^+ 相当于是多个 e^- 的叠加，其初始动能越高表现越接近 e^- 。

发射，其余时刻强度基本保持相当。这些复杂的光学效应增加了建模的困难。

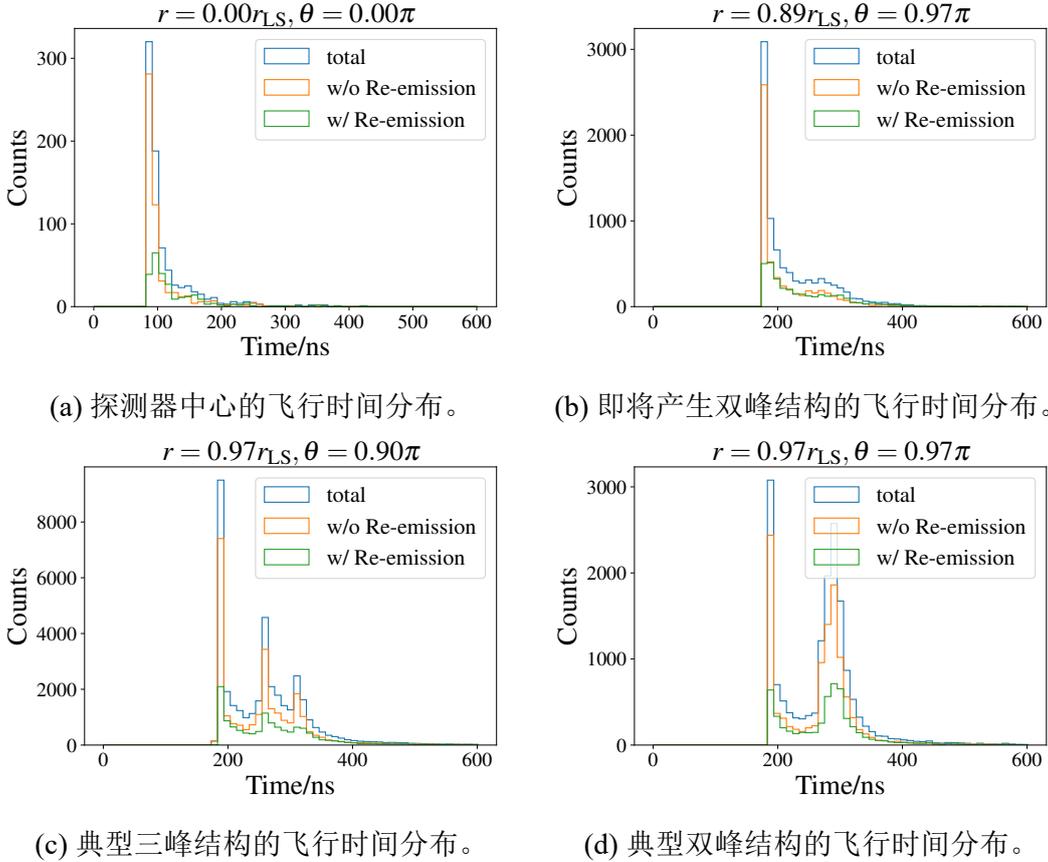


图 4.9 不同位置的飞行时间分布。

提取 PE 的飞行时间，部分 PE 经过吸收重发射。w/o Re-emission 表示不含吸收重发射的 PE，w/ Re-emission 表示吸收重发射的 PE，total 为二者之和，代表所有 PE。

若把发光时间看做对飞行时间的卷积，仅仅对飞行时间建模也会受粒子的吸收重发射、多次反射、色散等因素影响，其行为依然难以用简单的指数衰减形容刻画。

4.2.3 基于光学传播模型的多峰拟合

不考虑 TTS，电子在发光时间的起始时刻近乎阶跃函数。其典型的峰个数一般小于等于 3。本工作采用三个含有一个上升时间和两个衰减时间的多指数函数拟合 Probe 的条件分布，我们将其命名为“三指数分布”，如式 (4.15) 所示。

$$R(t) = \sum_{i=1}^3 A_i \left[\frac{\alpha_i(\tau_{i,3} + \tau_{i,1})}{\tau_{i,1}^2} + \frac{(1 - \alpha_i)(\tau_{i,3} + \tau_{i,2})}{\tau_{i,2}^2} \right] \left[\alpha_i \exp\left(-\frac{t - t_i}{\tau_{i,1}}\right) + (1 - \alpha_i) \exp\left(-\frac{t - t_i}{\tau_{i,2}}\right) \right] \left[1 - \exp\left(-\frac{t - t_i}{\tau_{i,3}}\right) \right] (t > t_i). \quad (4.15)$$

与勒让德多项式相比，式 (4.15) 中各个参数有着较为明确的物理意义。其中 A_i 代表 PE 的强度， $\tau_{i,1}$ 和 $\tau_{i,2}$ 代表两种衰减成分的衰减时间， $\tau_{i,3}$ 代表上升时间。 α_i 代表两种衰减成分的比例，范围在 $[0, 1]$ 之间， t_i 为平移不变项。注意到该拟合选择的基底并不正交，两种衰减成分完全等效， α 可以代表任意一种衰减成分。除此之外三个峰的函数形式也完全等价，因此系数之间存在极强的相关性，最终拟合结果强烈依赖于初值。为简单起见，损失函数定义为拟合结果与蒙卡 Probe 的残差平方和，拟合形式为

$$\mathcal{L} = \sum_t [R(t; r, \theta) - R_{MC}(t; r, \theta)]^2. \quad (4.16)$$

其中 $R(t; r, \theta)$ 的形式如式 (4.15) 所示，通过最小化 \mathcal{L} 来拟合所有参数，该式不正交，使得拟合结果对初值敏感：三个时间平移不变项直接影响了峰的位置。其中第一项按照整个分布的 0.01 分位数选取。后两项的光程近似等于 θ 和 $2\pi - \theta$ 对应的亚克力球圆弧长度，因此在不同 r 下几乎一致。当 θ 减小时，第二项将会在某个 θ 超出第一项的范围，此时暂时将第二项舍弃。为提高数值稳定性，第三个峰限制在 $\theta > 0.4\pi$ 及 $r > 0.88r_{LS}$ ，其余情况为 0，即只进行双峰拟合。观察到第二项较强时其峰大约在 250 ns 左右，第一项 PE 强度由前 210 ns 的数据给出，后两项则置于 0 附近。参考 JUNO 的液闪发光时间设置。第一项的两个衰减时间设置为 5 ns 及 20 ns，第二、三项设置为 10 ns 和 30 ns。上升时间分别设置为 1 ns, 5 ns, 5 ns。

其中时间平移项的位置和第一个峰的 PE 数是较为重要的参数。峰的形状由两种衰减成分拟合，但并不清楚其比例，在第一次拟合中，两种成分的比例初值从 0.1 到 0.9，步长 0.1 并选取最佳的结果。此时的结果数值不稳定，在随后的迭代中，选择 θ 相邻区间的拟合结果作为初值，如果返回结果更优则更新系数，循环这个过程直至收敛。

当 r 较大且 θ 接近于 0 时，多次反射可以忽略，Probe 的条件分布只有一个峰，但受发光时间中四个衰减成分中较慢的两个影响，使用单个峰逼近会出现欠拟合。考虑到第二个峰对应的顺时针光路强度几乎为 0，我们使用第二个峰来拟合第一个峰中的慢成分。每个 r, θ 都可以返回一组拟合的系数，然后根据 r, θ 格点选择周

围 5×5 的方格的均值作为初值，重复拟合继续更新系数直至收敛。最终的拟合效果如下图所示：

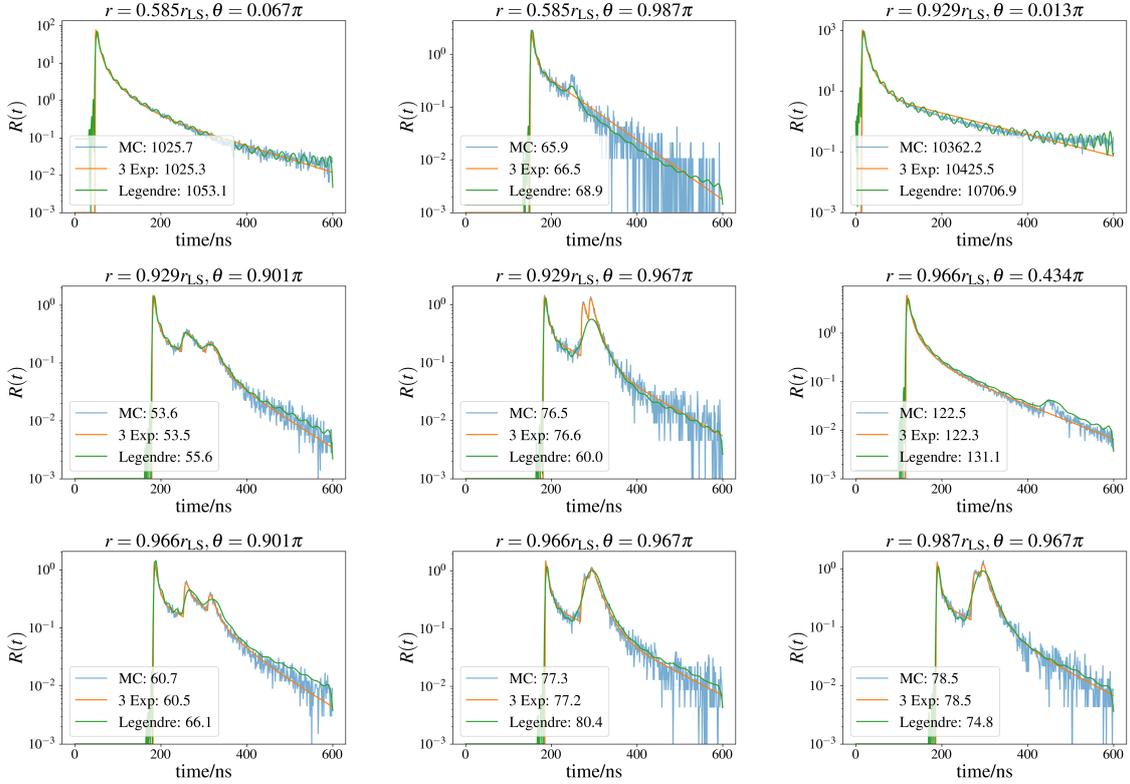


图 4.10 探测器中特定位置使用三指数分布与 Zernike \times 勒让德函数基 (121×96) 的比较结果，数字为期望 PE，对应不同形状的积分。

其中 MC 代表蒙卡方法得到的 Probe，可视作拟合的真值。3 Exp 代表使用三指数分布拟合结果，Legendre 代表第3中的函数基拟合方法。后面的数字代表了各自图中使用不同方法对 t 的积分，即期望 PE 数，使用函数基拟合的期望 PE 数偏差往往大于三指数分布拟合结果。

由此可见，PE 时间 ≈ 600 ns 时使用三指数拟合更接近指数衰减，可以适应时间窗的拓展，与物理模型更吻合。在 $\theta \sim \pi$ 时，多峰结构拟合使用三指数分布几乎与蒙卡方法吻合，优于函数基拟合。当顶点位于近点 ($r \approx r_{LS}$ 及 $\theta \approx 0$) 时，三指数的拟合仍有差距，由于参数间的相关性，尾部的衰减与蒙卡方法的吻合程度可能劣于函数基拟合方法。总体来看，使用半物理模型的三指数分布要优于函数基，考虑到勒让德多项式至少需要 64 阶拟合，该方法至少将自由度缩减至约 1/4。

4.2.4 使用验证集评选最优模型

我们沿用第3章中的验证集比较不同拟合方法的结果。函数基拟合使用 121 阶 Zernike 和 96 阶勒让德多项式的组合作为基线，而蒙卡方法的结果近似为上限。类似于变系数分解法，三指数分布拟合了时间维度的形状，即 Probe 的条件分布，每

次返回 18 个系数。每个系数都可看做 r, θ 的函数，其中系数 A 代表三个峰的幅值，显示了不同峰对应的 PE 数，其拟合结果如图 4.11 所示：

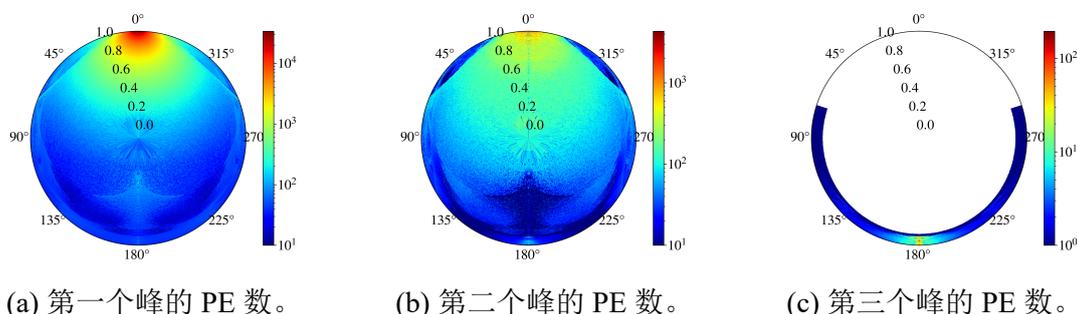


图 4.11 三指数分布拟合中三个峰 PE 数的 r, θ map。

拟合式 (4.15) 中不同 r, θ 下 A_1, A_2, A_3 的结果。为提高拟合成功率，第三个峰限制在 $\theta > 0.4\pi$ 及 $r > 0.88r_{LS}$ ，其余情况为 0，即只进行双峰拟合。

根据传统的变系数分解法，三维的问题需要依次拟合其边缘分布，最终简化为一维问题。但此时的系数之间相关性极强，有较大的不确定度，为减少高阶分量的引入，本文暂时只考虑降时间维度，将得到的系数作为 map 在 r, θ 维度插值。与蒙卡 Probe 相比，本工作对 θ 划分的区间从 1500 缩减 300，该分区间方式对应的新的蒙卡 Probe 在表 4.2 中对应蒙卡（子集），是变系数分解法拟合 Probe 的上限。表 4.2 显示比起函数基拟合，使用三指数分布后再使用变系数分解法可以获得更好的效果，与理论拟合上限的差距从 5.7×10^5 缩减至 1.6×10^5 ，极大地提升了拟合精度。

表 4.2 不同方法得到的 Probe 与理论上限的差距。

类型	函数基拟合	变系数分解法	蒙卡（子集）	蒙卡
分数差/1E4	-57	-47	-31	0

4.3 光学传播模型对重建的影响

一旦重建函数非凸，输入不同初置的顶点有几率返回不同重建结果，则意味着该问题是多解问题。当统计量足够多时，重建结果可能出现多峰结构。若 Probe 足够准确，给定某顶点，其真值附近一定为一个解，当峰的个数超过一个，意味着其他解将位于其他区域。当重建顶点位于其他区域，则无法判断其真值是否在这个区域附近，这种情况称为重建的简并问题。

简并问题主要由点源响应的非凸结构引起的，其可能由于拟合过程中引入，也可能来源于探测器本身。本章将讨论由探测器引入的局域极值，主要由全反射和多

次反射导致。若无全反射效应，探测器中 PMT 接收到的 PE 个数约与顶点到 PMT 的距离平方成反比。在探测器的中心区域，使用重心法重建的位置与真实位置基本是线性的。然而全反射使近处的 PMT 可能接收到较少的光子，在全反射区域重心法出现巨大的向内的偏差，意味着全反射区域与内部简并。

如果将以上方法改为极大似然估计，在 JUNO 探测器中可以回避大多数局域极值，得益于 JUNO 中的 PMT 排布足够致密，且大探测器中时间信息主导位置分辨率。我们着重关注尺度小、PMT 排布稀疏的情况，本节的重建基于锦屏一吨原型机，其几何信息见1.4.3小节。

对此本小结做了三层近似：从包含全部 PMT 的重建的似然函数到不包含观测涨落的余弦距离、再到仅使用 3 个 PMT 的余弦距离、再转化为相邻两个 PMT 的期望 PE 比值。我们将讨论每层近似的合理性，最终将重建中的简并问题简化为两个 PMT 的数量关系。

4.3.1 使用余弦距离近似重建似然函数

根据时间和 PE 的似然函数 (4.3) 及 (4.4)，重建方程可写为

$$\ln \mathcal{L}(\mathbf{r}, E, t_0) \sim \overbrace{\sum_i \sum_j \frac{\mathcal{R}_\tau(t_{ij} - T_i - t_0)}{t_s}}^{\text{timing part}} + \overbrace{\sum_i \left(-\frac{E\lambda_i}{E_0} + n_i \ln \frac{E\lambda_i}{E_0} \right)}^{\text{PE part}}. \quad (4.17)$$

其中 PE 信息在小探测器中主导，时间信息被忽略。如果顶点 \mathbf{r}_1 和 \mathbf{r}_2 均为方程的解且 $\mathbf{r}_1 \neq \mathbf{r}_2$ ，则必有 $\Lambda(\mathbf{r}_1) = \alpha \Lambda(\mathbf{r}_2)$ ， α 是自由参数。为了衡量不考虑能量两个点的期望 PE 的相似程度，我们定义余弦距离为

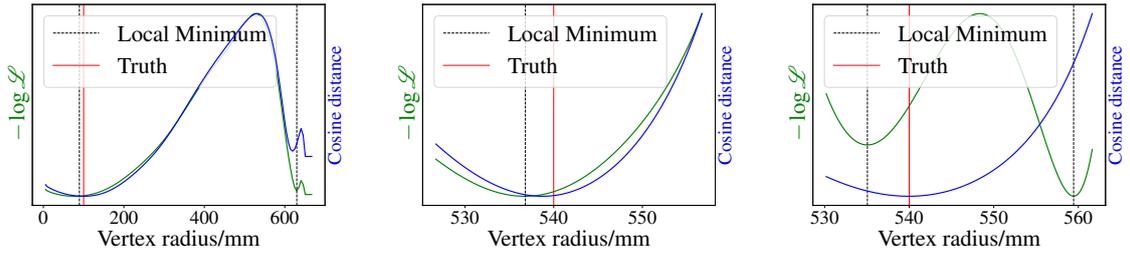
$$d_{\cos} [\Lambda(\mathbf{r}_1) | \Lambda(\mathbf{r}_2)] = 1 - \frac{\Lambda(\mathbf{r}_1) \cdot \Lambda(\mathbf{r}_2)}{\|\Lambda(\mathbf{r}_1)\| \|\Lambda(\mathbf{r}_2)\|}. \quad (4.18)$$

若顶点 \mathbf{r}_1 和 \mathbf{r}_2 ，则其余弦距离为 0。其中 Λ 为 PE 在 PMT 空间张成的向量，有

$$\Lambda = \{\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_{N_{\text{PMT}}}\}. \quad (4.19)$$

N_{PMT} 代表 PMT 的个数。余弦距离可以忽略能量的影响，且回避了事例中观测值的涨落，是衡量两个点相似的度量。图4.12选择了不同位置几个典型的事例，并对比似然函数值与余弦距离。在绝大多数情况下，余弦距离几乎等价于似然函数。

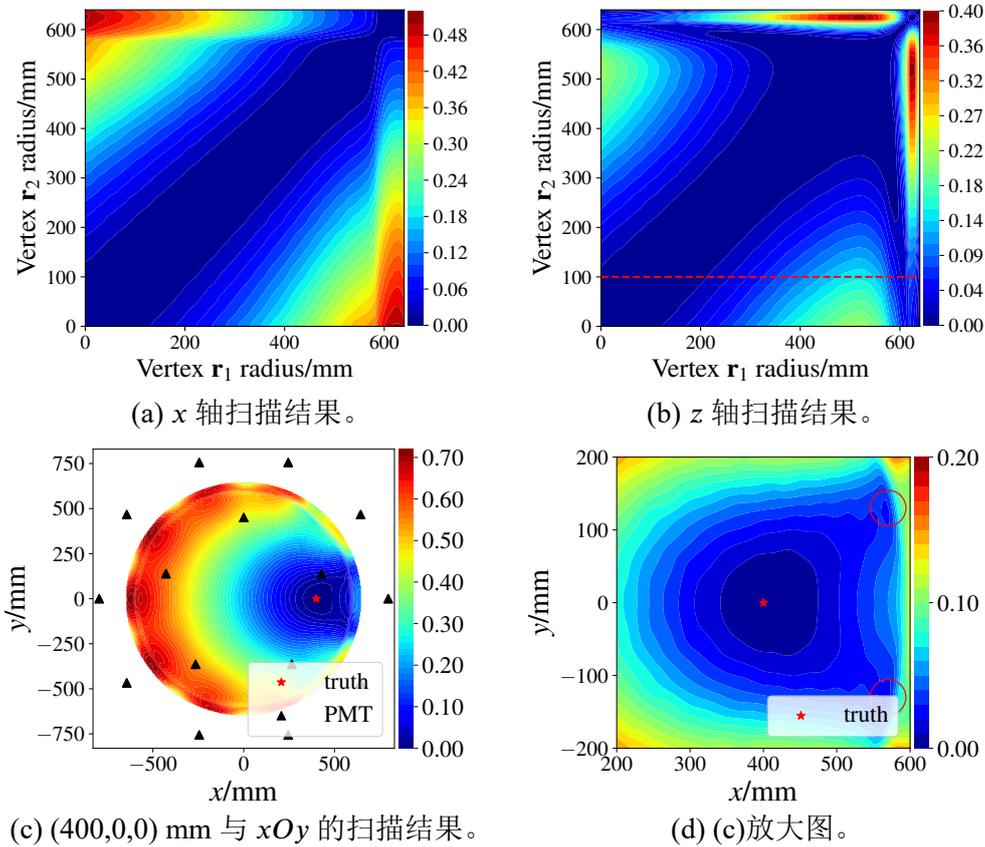
通过余弦距离可以快速的找出探测器中的简并区域，如图4.13所示。简并的区域主要包含两个：探测器的中心和 z 轴靠近靠近亚克力球壳时简并；在某些轴上（如 x 轴）半径350 mm~550 mm 整个区域内简并。这些简并情况都经过重建得以证实，如图4.14所示。



(a) 顶点位于 $(0, 0, 100)$ mm。 (b) 顶点位于 $(540, 0, 0)$ mm。 (c) 顶点位于 $(540, 0, 0)$ mm。

图 4.12 d_{\cos} 与 $-\ln \mathcal{L}$ 的对比。

所有位于 $(0, 0, 100)$ mm 的事例与 z 轴 $r = 600$ mm 附近简并。(a)展示了这种情况，黑线对应多解，红线为真值。扫描两解之间的 $-\ln \mathcal{L}$ (绿线) 和 d_{\cos} (蓝线) 都与多解吻合。(b)和(c)中真值位于 $(540, 0, 0)$ mm，分别对应单解和多解两个事例。然而在此处 d_{\cos} 始终为单解与涨落无关。在(c)中的多解问题不足 1%。



(a) x 轴扫描结果。

(b) z 轴扫描结果。

(c) $(400, 0, 0)$ mm 与 xOy 的扫描结果。

(d) (c)放大图。

图 4.13 不同情况下的余弦距离。

颜色代表了 $d_{\cos}[A(\mathbf{r}_1) | A(\mathbf{r}_2)]$ 的数值。(a)中 \mathbf{r}_1 和 \mathbf{r}_2 均位于 x 轴。(b)中 \mathbf{r}_1 和 \mathbf{r}_2 均位于 z 轴。红色虚线显示探测器中心和 z 轴 600 mm 简并。(c)中 \mathbf{r}_1 固定在 $(400, 0, 0)$ mm, \mathbf{r}_2 扫描了 xOy 平面。(d)是(c)的放大图，图中红色五角星区域与红色圆圈区域简并。

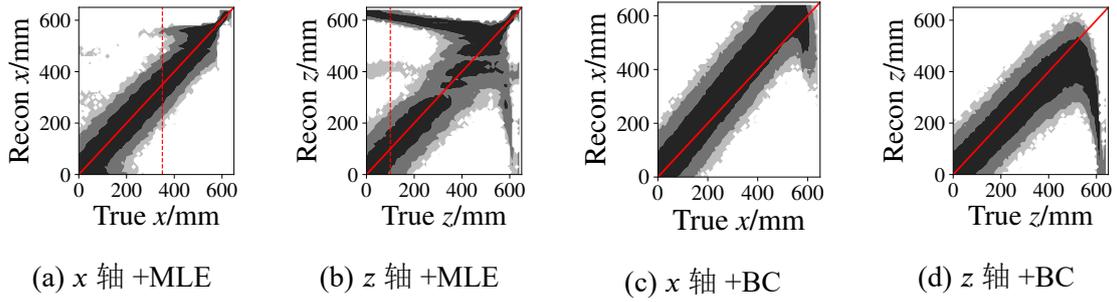


图 4.14 顶点重建结果。

MLE 代表基于极大似然估计的重建，BC 代表重心法。(a)中 $x = 350 \text{ mm}$ 与 580 mm 简并，对应 4.13(c)。(b)指出中心和边缘简并，对应图 4.13(b)。(c)–(d)说明全反射区域的存在使重心法重建在全反射区域有巨大偏差，形成更严重的简并情况。

4.3.2 使用 3-PMT 模型简化余弦距离

实际应用中很难遍历空间中的所有点，故进一步简化模型。由于接收的 PE 遵循距离平方反比定律，可仅使用距离顶点最近的三个 PMT 重建，假设其为似然方程中权重最大的三项。此时顶点将会由于对称性限制在图 4.15 阴影区域内。定义等高线函数为

$$C_{1i}(\mathbf{r}) = \frac{\lambda_1(\mathbf{r})}{\lambda_i(\mathbf{r})}, \quad (4.20)$$

其中 $\lambda_1(\mathbf{r})$ 是距顶点最近 PMT 上的期望 PE 数， $\lambda_i(\mathbf{r})$ 可根据索引 i 代表第 i 邻近的 PMT。在二维平面下， $C_{1i}(\mathbf{r})$ 等于定值的点的集合为一条线，定义该线为等比线。如果 C_{12} 中一条等比线与 C_{13} 中的一条有超过两个交点，则其余弦距离 $d_{\cos}[\Lambda(\mathbf{r}_1) | \Lambda(\mathbf{r}_2)] \approx 0$ ，因为三个权重最大的 PMT 满足 $\lambda_1(\mathbf{r}_1) : \lambda_2(\mathbf{r}_1) : \lambda_3(\mathbf{r}_1) = \lambda_1(\mathbf{r}_2) : \lambda_2(\mathbf{r}_2) : \lambda_3(\mathbf{r}_2)$ 。因此多解问题的关键是寻找 C_{12} 与 C_{13} 中任意等比线的交点个数是否超过 1。

为确认该效应由全反射引入，故使用参照假设不含全反射的两个理想探测器模型。第一种 PE 响应为

$$\lambda_i(\mathbf{r}) \propto \Omega_i(\mathbf{r}) \propto \frac{1}{\|\mathbf{r} - \mathbf{r}_{\text{PMT},i}\|_2^2} \cos \beta_i, \quad (4.21)$$

其中 \mathbf{r} , $\mathbf{r}_{\text{PMT},i}$ 由图 2.1 定义。 β 为 PE 从顶点到 PMT 的入射角。方程 (4.21) 几乎与装备有 SiPM 的 TAO^[67] 和装备有平面光阴极 R10789 PMTs^[91] 的 XMASS^[92] 探测器吻合。为排除入射角的影响，我们引入第二种 PE 响应：

$$\lambda_i(\mathbf{r}) \propto \Omega_i(\mathbf{r}) \propto \frac{1}{\|\mathbf{r} - \mathbf{r}_{\text{PMT},i}\|_2^2}. \quad (4.22)$$

令 $r_{\text{PMT}} = r_{\text{LS}}$ ，即不使用缓冲物质，三个 PMT 位于 $0, 2\pi/3$ 和 $4\pi/3$ ，序号分别为

1, 2, 3。 C_{12} 和 C_{13} 对称。图 4.15(b)对应包含入射角，图 4.15(a)对应不包含入射角。图 4.15(b)圈出了两个交点，证明入射角导致了简并。

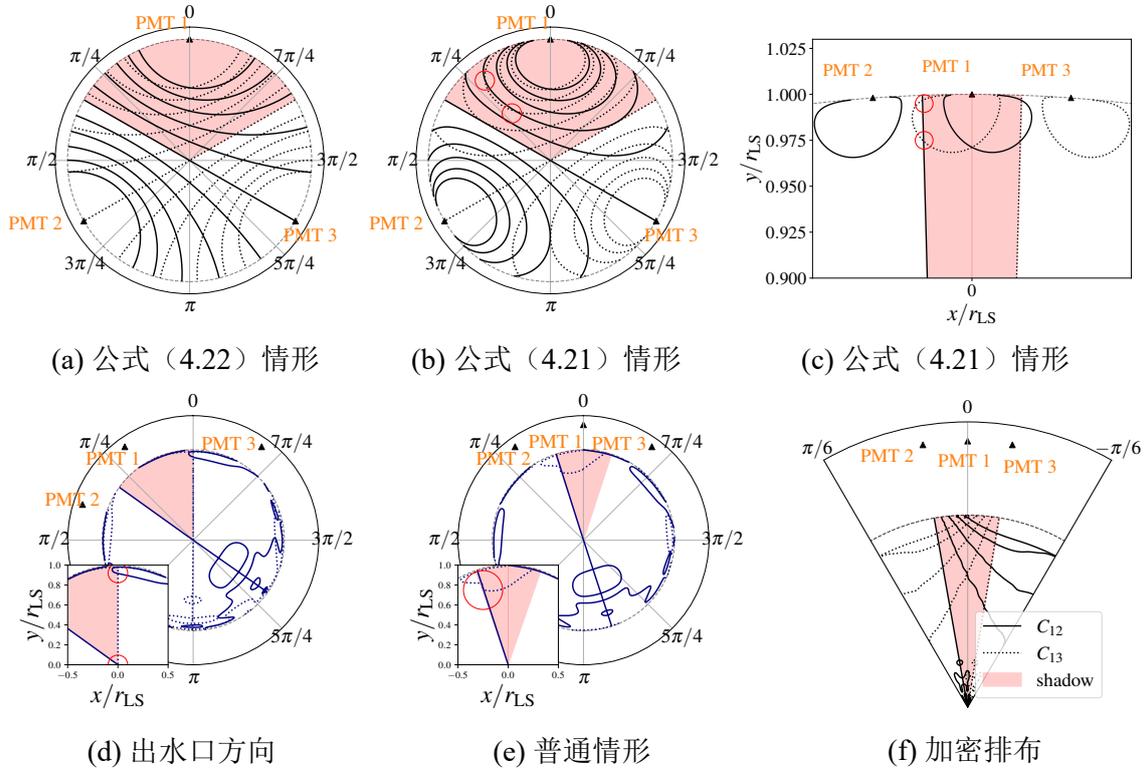


图 4.15 不同点源响应模型下的等比线。

PMT 为黑色的三角。(a)–(c)无缓冲介质。(a)和(b)中 PMT 放置于 $0, 2\pi/3, 4\pi/3$ ，(c)中 PMT 放置在 $0, \pm\pi/100$ 。(d)–(f)是液闪和水组合包含全反射的探测器，点源响应为图 4.2(c)中结果。出水口方向 PMT 排布在 $2\pi/5$ 和 $\pm\pi/5$ 如(d)所示，在 0 处缺失。 $C_{12} = 1$ 和 $C_{13} = 1$ 在中心和顶端有两个交点。(e)是普通方向，PMTs 排布在 0 和 $\pm\pi/5$ 。 $C_{12} = 1$ 和 $C_{13} = 4.5$ 在 350 mm 到 550 mm 区域内不止一个交点。当加密 PMT 排布在 $0, \pm\pi/18$ 如图(f)所示，此时不再有交点。所有子图中顶点均限制在阴影区域内。在(b), (c), (d)和(e)中均存在简并。

为了排除是 PMT 稀疏带来的影响，如果按照图 4.15(c)加密 PMT 简并现象依然存在。无论 PMT 如何排布，两个 PMT 的垂直平分线都是一条等比线，该线与 PMT 所在半径的交点一定存在简并。由于入射角较大，最近的 PMT 几乎无法接收到 PE。这种效应扭曲了距离平方反比的关系，因此使用缓冲物质是必要的。

考虑全反射后的 Probe 边缘分布由拟合给出。对锦屏一吨原型机来说，全反射区域使光路变得极其复杂，等比线出现分段情况。根据原型机中 PMT 的排布密度选择三个 PMT 的位置：在普通方向下按照 $(0, \pm\pi/5)$ 如图 4.15(e)摆放，350 mm 与 550 mm 间存在简并，与图 4.13(d)匹配。另一种情况为出水口方向，出水口占据了一个 PMT 的位置，故按照 $(\pm\pi/5, 2\pi/5)$ 如图 4.15(d)摆放，顶点位于中心和 $z = 600$ mm 简并，结果与图 4.13(b)匹配。因此 3 PMT 模型是余弦距离的有效近似。

4.3.3 防止重建简并的判据推导

关于等比线的性质研究指出入射角和全反射均打破了 PE 遵循的平方反比定律，它们使得距离顶点较近的 PMT 有几率接收不到 PE，扭曲了图 4.15(f)中理想情况的等比线，而理想平方反比探测器永远不会出现简并。为了排除全反射区域进入 3 PMT 模型的近似光学性质极其复杂，极易引入简并。因此避免该情况发生的方法是加密 PMT，使得相邻两个 PMT 不会落在彼此的全反射区域中。沿用式 (4.20) 中 λ_1 和 λ_2 的定义。图 4.15(b)和 4.15(c)中通过增加缓冲介质等价于降低了 λ_1 ，图 4.15(d)和 4.15(e)通过增加 PMT 的密度等价于提升了 λ_2 。本研究中经验性的使用判据 $\lambda_1/\lambda_2 < 10$ 统一全反射和入射角的影响。

为满足该判据，选择顶点位于中心和 PMT 的连线上，半径位于液闪的边缘，如图 4.16(a)所示，需要保证该点 $\lambda_1/\lambda_2 < 10$ 。但仅使用该点的信息是所有情况的必要条件，当 PMT 空隙过大时全反射区域可以位于最近和次近的 PMT 之间，为排除这种情况需要补充第二近邻的 PMT 不在最近 PMT 的全反射区域内。而 λ_1 和 λ_2 与 r_{LS} , r_{PMT} , N_{PMT} 和缓冲物质的折射率相关。

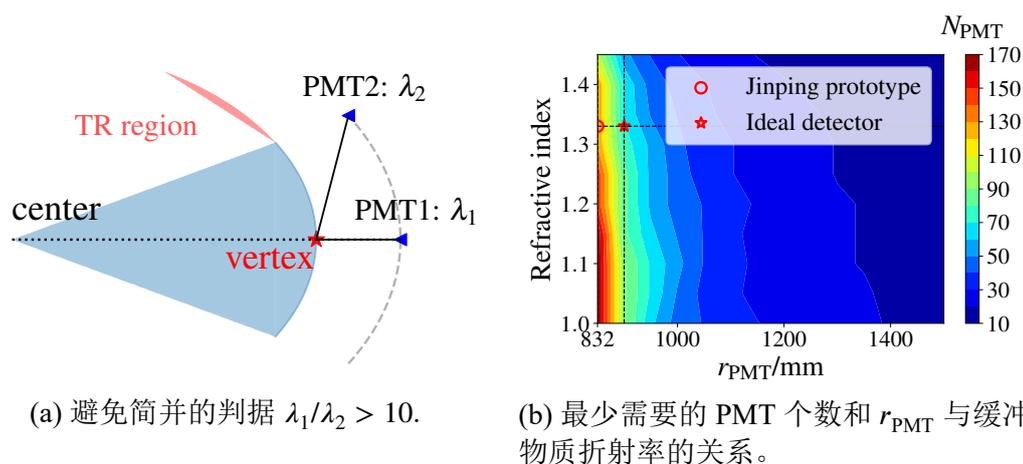


图 4.16 避免简并的判据及最少需要的 PMT 个数

(a)展示了避免简并的判据。 $\lambda_1/\lambda_2 < 10$ 且全反射区域应该排除在外。(b)展示了最少需要的 PMT 个数。 r_{LS} 固定为 645 mm。对锦屏一吨原型机，缓冲物质水的平均折射率为 1.33 且 r_{PMT} 为 832 mm，因此至少 120 个 PMT 才能消除简并情形。红色五星是假想的理想探测器，对应图 4.15(f)，此时 r_{PMT} 被推到 900 mm，约需要 90 个 PMT，可以消除简并状态。消除简并需要 r_{PMT} 越大、缓冲物质折射率越高以及 PMT 个数更多。

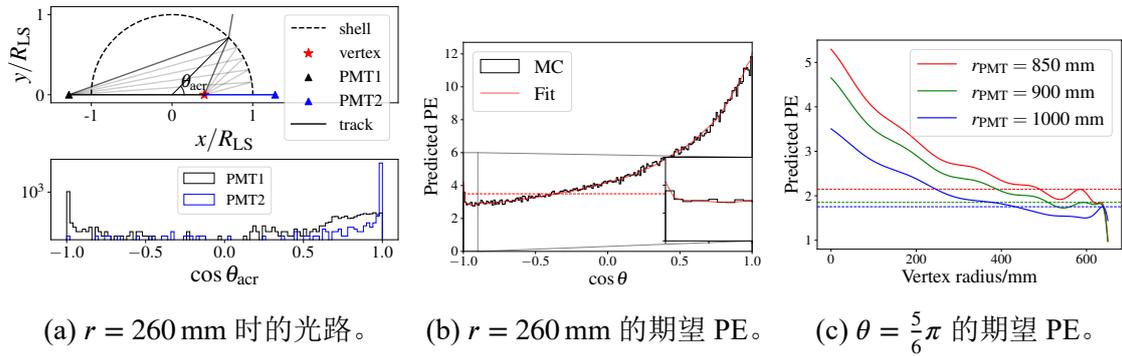
推广到三维情形时，PMT 间的距离保持一致，其数目转换约有如下关系 $N_{PMT,3D} \approx N_{PMT,2D}^2/3$ 。固定 $r_{LS} = 650$ mm，根据判据，图 4.16(b)展示了不同 r_{PMT} 和缓冲物质折射率下最少需要的 PMT 个数。给定 N_{PMT} 时，越大的 r_{PMT} 和缓冲物质折射率对简并的排除效果越好。对 $r_{PMT} = 832$ mm 且缓冲物质折射率为 1.33 时，至少需要 120 个 PMT 才能消除简并。如果使用 8-英寸的 PMT，通过

$N_{\text{PMT}} \times (10\text{mm})^2 / 4r_{\text{PMT}}^2$ 计算得到的光阴极覆盖率应该超过 40%。而 r_{PMT} 越大 PMT 覆盖率越低, 因此 r_{PMT} 应该尽可能接近图 4.16(b) 中的下限。

4.3.4 其他反射对重建的影响研究

在 4.3.2 节选择最近的 3 个 PMT, 因为其在似然函数中权重越高, 主要是由于距离平方反比关系的存在, 导致位置的梯度在这些 PMT 远大于其他 PMT, 但是其他反射打破了这个规律。

当顶点位于 $r/r_{\text{LS}} \in [0.4, 0.5]$, 图 4.17(a) 中上图展示了亚克力的聚焦效应可使光子聚集到 $\cos \theta \simeq -1$ 。通过记录了光子第一次击中亚克力的位置, 以顶点、圆心为参考定义该位置的中心角 θ_{acr} 。当击中蓝色 PMT $\theta \simeq 0$ 和黑色 PMT $\theta \simeq \pi$, θ_{acr} 的分布有显著区别。从图 4.17(a) (bottom) 看出, 大多数光子按照直线传播直接击中蓝色 PMT, 但不少光子击中黑色 PMT 需要亚克力的反射。称这种现象为**聚焦效应**。如图 4.17(b) 所示, 当 $r = 0.4r_{\text{LS}}$ 时 $\cos \theta \simeq -1$ 处由于聚焦效应形成了一个峰, 导致了 PE 在此附近简并, 并定义在 $\cos \theta \simeq -1$ 附近水平虚线覆盖的范围为**简并区域**。这个峰同样被 Borexino CTF^[93] 观测到。



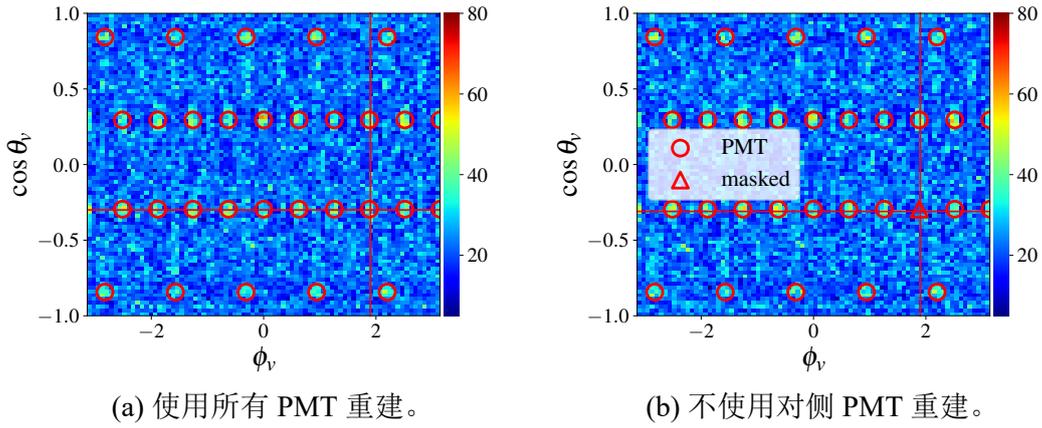
(a) $r = 260$ mm 时的光路。 (b) $r = 260$ mm 的期望 PE。 (c) $\theta = \frac{5}{6}\pi$ 的期望 PE。

图 4.17 不同光学过程下 PE 数目的简并。

聚焦效应位于 $r = 0.4r_{\text{LS}} = 260$ mm, (a) 为光路示意图。其上图定义了 θ_{acr} , 下图显示了击中黑色、蓝色 PMT 的 $\cos \theta_{\text{acr}}$ 分布。(b) 是图 4.2(c) 中 $r = 0.4r_{\text{LS}}$ 的情形。MC 代表模拟数据的结果, Fit 为拟合结果, 在 $\cos \theta = -1$ 处由于聚焦效应形成了峰。(c) 是 $\theta = 5\pi/6$ 下的期望 PE, 虚线显示了不同 r_{PMT} 下的简并区域。

由于聚焦效应, 对侧的 PMT 在 $r \sim 260$ mm 时有着重大的影响。图 4.18(a) 是半径为 260 mm 的模拟数据重建结果。重建的顶点天顶角 θ_{v} 和方位角 ϕ_{v} 与对侧 PMT 的方向吻合。当重建时忽略掉对侧 PMT 的贡献, 结果如图 4.18(b) 所示, 证明该结构由对侧 PMT 引起。

当 $r > 0.8r_{\text{LS}}$ 光子可以发生**多次反射**效应, 图 4.17(c) 展示了 $\theta = 5\pi/6$ 下 PE 随 r 变化的趋势。由于多个峰叠加导致 $r > 0.8r_{\text{LS}}$ 处简并。图 4.12(c) 中的多解由于该效应引起。与图 4.18(b) 不同, 该区域几乎无法通过理论计算去掉某个 PMT 就可


 图 4.18 $r = 260 \text{ mm}$ 处的顶点重建结果。

颜色代表了顶点分布的统计量。(a)显示顶点在球坐标中的 θ_v - ϕ_v 分布与对侧 PMT 的方向相关。(b)中关掉了三角形的 PMT，显示顶点重建的结构消失。

以消除简并。

一般地，在液闪-水组合的探测器中简并是不可避免的。在似然函数中，每一个 PMT 都可能提供提供简并区域，并且不同 PMT 的可以不同。顶点位于 $r = 0.5r_{\text{LS}}$ 会既和全反射区域简并又和聚焦效应区域简并，其概率与观测值的涨落相关。但如果简并区域的尺度远小于位置分辨率，则认为是单解问题。对于指定顶点，单个 PMT 的覆盖率至关重要。如果其距离越近则代表它对位置越敏感，就可以减少多次反射叠加的影响。另一方面它也可以提高位置、能量分辨率，因此推荐 r_{PMT} 需要尽可能接近图 4.16(b)中的下限。

4.3.5 含时间信息的推广

如果考虑了时间信息，余弦距离可以做如下推广：

$$d_{\cos} [\{R_j(t; \mathbf{r}_1)\} | \{R_j(t; \mathbf{r}_2)\}] = 1 - \frac{\sum_j \int R_j(t; \mathbf{r}_1) R_j(t; \mathbf{r}_2) dt}{\sqrt{\sum_j \int [R_j(t; \mathbf{r}_1)]^2 dt} \sqrt{\sum_j \int [R_j(t; \mathbf{r}_2)]^2 dt}} \quad (4.23)$$

其中 $\{R_j(t; \mathbf{r}_1)\}$ 是所有 PMT 响应的集合。时间信息在较远的区域对位置的敏感程度大于平方反比的 PE，因此大探测器中由探测器设计引入的局域极值将大量减少。随着能量降低到 keV，大部分 PMT 将不会发光，可视为 PMT 缺失，此时可以将 PMT 稀疏的情形推广。以 JUNO 为例，尽管 JUNO 的小 PMT 有 25600 个，模拟显示 $1 \text{ MeV}e^-$ 仅有 40 PE/event，仅使用小 PMT 重建有产生大量局域极值的风险，可对 JUNO 实验重建超低能 ($\sim \text{keV}$) 事例提供参考。

4.4 本章小结

本章讨论了以液体闪烁体为探测介质、水为缓冲介质引入的复杂的光学模型，从物理上解释了 Probe 拟合的难点，同时提出了优化方案。

本章首先介绍了变系数分解法，可以通过优化拟合过程获得更精确的 Probe。该算法在理想小探测器（锦屏一吨原型机）的 Probe 边缘分布拟合中得到验证，将 (r, θ) 二维拟合成功改为两个一维拟合的组合。最终结果显示在绝大部分区域，拟合与真值之比接近 1。变系数回归法在准确性、计算时间、计算内存占用均好于二维的直接拟合，为处理高维且数据量大的拟合提供了一种可行方案。

变系数分解法可以推广至 JUNO 探测器对 Probe 的条件分布拟合。与直接使用三维函数基模型对比，变系数分解法借助模拟确定了探测器的大部分区域至多有三个峰及这些峰的位置先验。

- $r > 0.8r_{LS}$ 且 θ 较大时，由于多次反射效应形成三个峰。
- $\theta \approx \pi$ 附近的区域里，后两个峰由于光路几乎等价而合并，形成两个峰。

此时基于三个峰拟合的 Probe 的条件分布好于函数基拟合，同时自由度缩减至少 1/4。得到的系数是 r, θ 的条件分布，直接作为 map 对系数插值的效果可以超越函数基拟合。由于参数之间相关性较强， r, θ map 的自由度未来还有优化空间。

全反射、聚焦、多次反射等区域在 PMT 密度较低时可能使重建结果简并。通过四层合理简化：从包括全部 PMT 的似然函数到余弦距离，再到 3 PMT 模型，最后简化为到特定点最近的两个 PMT 的 PE 比值。该理论成功解释了锦屏一吨原型机中主要由全反射引入的重建简并的宏观结构。同时本文给出了探测器的设计指标：为防止重建简并，对任意顶点，距离最近的两个 PMT 接收到的 PE 期望比值不超过 10。该判据可为下一代液闪探测器，尤其是小型原型机的设计提供参考。

第 5 章 基于非齐次泊松过程的暗噪声甄别研究

5.1 扩展的非齐次泊松过程

第3章给出了点源的非齐次泊松过程的定义。实际的探测器的事例中可能有多个成分同时释放光子，因此最终的观测值来源于所有成分的贡献。由于非齐次泊松过程的可叠加性，相比于单点源的似然函数

$$\ln \mathcal{L}(E, \mathbf{r}; t_{j_i}) = \overbrace{- \sum_j E \int R_j(t; \mathbf{r}) dt}^{\text{nonhit}} + \overbrace{\sum_i \ln ER_j(t_{j_i}; \mathbf{r})}^{\text{hit}}. \quad (5.1)$$

前面为 nonhit 部分，后面为 hit 部分。现在将其改写为多点源的似然函数，有

$$R_j(t; \mathbf{r}) = \sum_{k=1}^K R_j(t; \mathbf{r}_k). \quad (5.2)$$

其中 k 为对应的种类，共 K 类。故 nonhit 部分可以写作

$$- \sum_k \sum_j E_k \int R_j(t; \mathbf{r}_k) dt. \quad (5.3)$$

hit 部分可写作

$$\sum_i \ln \sum_k E_k R_j(t_{j_i}; \mathbf{r}_k). \quad (5.4)$$

该混合模型可以应用于如下几种问题：

闪烁光-闪烁光 如果两个点源均释放出闪烁光，PMT 上的响应函数差异由粒子类型、粒子位置、粒子沉积能量的时刻决定，主要有 Pile-up 事例和 e^+ 与 γ 事例。Pile-up 事例指在探测器中同一时间窗内发生了两个事例。假设其位置在探测器中均为均匀分布，如果位置离得越远，则其 Probe 差异越明显，则越容易区分。

对于 IBD 事例中我们关注仅正电子的动能。正电子能量时首先迅速损失动能，然后湮灭释放出两个 511 keV 的 γ ， γ 在探测器中沉积能量是通过多次康普顿散射释放出电子，其自由程大约为 10 cm 量级。这些电子及初始的正电子在短时间内同时发光，可以视作多个点源。因此这些点源之间的 Probe 十分接近，区分程度依赖于探测器的位置分辨率等因素。

闪烁光-切伦科夫光 实际点源沉积能量的过程中，切伦科夫光和闪烁光是独立发出的，但是切伦科夫光统计量低，且不是各向同性，如果能够将切伦科夫光闪烁光区分，则有潜力使得能量分辨率变高。在 JUNO 探测器中，切伦科夫光的吸收重发射十分严重，粒子的初始方向也很难确定，因此对切伦科夫光建模极其困难。

同时，切伦科夫光和闪烁光还存在一定的相关性。

闪烁光-暗噪声 暗噪声可被看做广义的点源。不同的 PMT 根据校准数据有各自的暗噪声率，暗噪声的分布与能量无关，始终固定，无需重建，因此仅重建闪烁光事例即可。暗噪声的分布与闪烁光的响应相差较大，便于识别。在此过程中可以计算每个 PE 属于暗噪声的后验概率，从而达到筛选暗噪声并重建能量的目的。

但是需要拟合的参数增长为原来的 K 倍，共包含 $E_1, \dots, E_K, \mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_K$ ，这里的 \mathbf{r} 是广义顶点，包含 x, y, z, t_0 ，由于维度过高，极大的增加了拟合的难度。

5.2 混合模型与期望最大化算法

5.2.1 混合模型问题

故如果探测器中在一个时间窗内实际探测到的数据是由 K 个点源贡献，则需要拟合的参数增长为原来的 K 倍，共包含 $E_1, \dots, E_K, \mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_K$ ，而观测值仍然为 PMT 上接收的 hit 信息。此时缺失的信息为光子到达 PMT 上其所属的顶点，属于混合模型问题。在概率学中，混合模型指一个模型包含多个子模型，但是最终的观测值缺失了每一次观测来源于哪一个子模型。在 PMT 的观测中，PE 可能来源闪烁光、切伦科夫光、暗噪声或者是不同的粒子发光，但最终在 PMT 上无法得知每一个 PE 的归属。因此可借鉴混合模型并根据 Probe 的似然函数如式 (3.8) 对其推广。

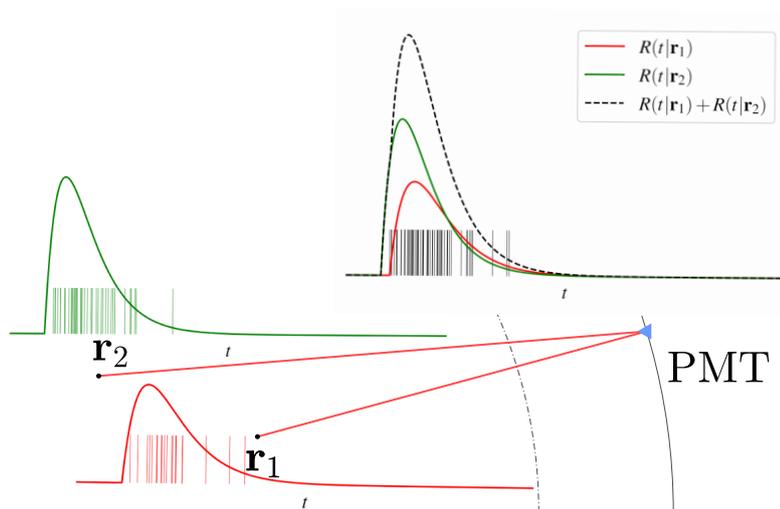


图 5.1 混合模型示意图。

图中假设有两个顶点，其各自的点源响应为 $R(t|\mathbf{r}_1)$ 及 $R(t|\mathbf{r}_2)$ ，最终 PMT 上观测到的强度流即为两个顶点的叠加。图中黑色的竖线对应每一个 PE，我们无法判断其来源于哪个顶点。

使用混合模型得到的极大似然方程和非齐次泊松过程完全等价, 证明如下: 整个事例的概率为 $p(t_{j_i}, n_j; E_k, \mathbf{r}_k)$, 记为 $p(t_{j_i}, n_j; \Theta)$, 因此:

$$\begin{aligned}
 \mathcal{L}(\Theta; t_{j_i}, n_j) &= p(t_{j_i}, n_j; \Theta) = p(t_{j_i}; n_j, \Theta)p(n_j; \Theta) \\
 &= \prod_i \frac{\sum_k E_k R_j(t_{j_i}; \mathbf{r}_k)}{\sum_{k'} E_{k'} \int R_j(t; \mathbf{r}_{k'}) dt} \\
 &\prod_j \frac{\{\sum_{k'} E_{k'} \int R_j(t; \mathbf{r}_{k'}) dt\}^{n_j}}{n_j!} \cdot \exp \left[- \sum_{k'} E_{k'} \int R_j(t; \mathbf{r}_{k'}) dt \right] \quad (5.5) \\
 &\propto \prod_i \sum_k E_k R_j(t_{j_i}; \mathbf{r}_k) \prod_j \exp \left[- \sum_{k'} E_{k'} \int R_j(t; \mathbf{r}_{k'}) dt \right] \\
 &= \prod_i \sum_k E_k R_j(t_{j_i}; \mathbf{r}_k) \cdot \exp \left[- \sum_{k'} \sum_j E_{k'} \int R_j(t; \mathbf{r}_{k'}) dt \right]
 \end{aligned}$$

将该式取对数即为方程 (5.3) 以及 (5.4) 之和, 得证。

5.2.2 期望最大化算法

但是注意到式 (5.4) 中 hit 项为先求和再取对数, 对 \mathbf{r}_k 求偏导时候所有的参数都耦合导致难以优化。在数学中, 该问题属于混合模型, 一般作为缺失数据的方式处理。期望最大化 (EM) 是一个有效的办法^[94]: 其核心思路是弥补缺失数据, 一般为待拟合参数属于不同类别的后验概率, 并依据后验概率写出新的似然函数, 是原始问题的一个下界。其中估算后验概率的步骤为 E-step, 寻找新的似然函数最优值的步骤为 M-step。通过迭代两个步骤, 在 E-step 中下界被不断提高, M-step 中优化到该下界, 最终达到解决原始问题的目的。

EM 算法的流程图为:

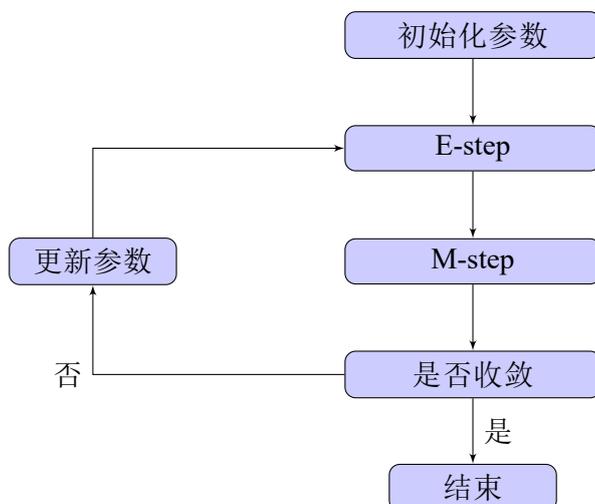


图 5.2 EM 算法流程图。

EM 算法的原理图为:

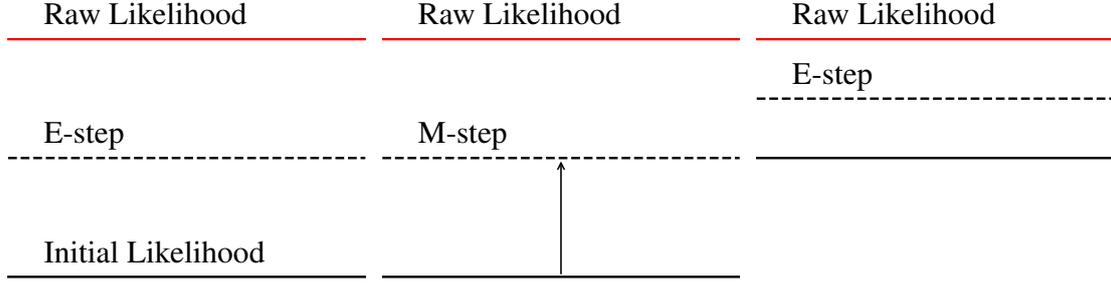


图 5.3 EM 算法原理图。

红色实线为原始似然函数的最佳值，黑色实线为初值，E-step 计算原始似然函数的一个下界，为黑色虚线，并在 M-step 达到该值。通过 M-step 更新的参数，又可以进行新一轮下界估计，以此类推，直到最终收敛。

在本问题中，缺失数据即为每个 PE 所属的顶点。

5.2.3 E-step 下混合模型的优化

E-step 本质上给出每个 PE 属于不同顶点的后验概率，证明如下：

记 $\Delta = \prod_i \sum_k E_k R_j(t_{j_i}; \mathbf{r}_k)$ ，则有

$$\begin{aligned}
 \ln \Delta &= \sum_i \ln \sum_k E_k R_j(t_{j_i}; \mathbf{r}_k) \\
 &= \sum_i \ln \sum_k Q_{i,k} \frac{E_k R_j(t_{j_i}; \mathbf{r}_k)}{Q_{i,k}} \\
 &\geq \sum_i \sum_k Q_{i,k} \ln \frac{E_k R_j(t_{j_i}; \mathbf{r}_k)}{Q_{i,k}} = \sum_k \sum_i Q_{i,k} \ln \frac{E_k R_j(t_{j_i}; \mathbf{r}_k)}{Q_{i,k}}.
 \end{aligned} \tag{5.6}$$

其中 $Q_{i,k}$ 满足 $\sum_{k'} Q_{j_i k'} = 1$ ，根据琴生不等式，对于上凸函数 $\phi(x)$ ，有

$$\phi \left(\frac{\sum_i a_i x_i}{\sum_i a_i} \right) \geq \frac{\sum_i a_i \phi(x_i)}{\sum_i a_i}. \tag{5.7}$$

等式成立当且仅当对于任意 k ， $\frac{E_k R_j(t_{j_i}; \mathbf{r}_k)}{Q_{i,k}}$ 为与 k 无关的常数。因此

$$Q_{i,k} = \frac{E_k R_j(t_{j_i}; \mathbf{r}_k)}{\sum_{k'} E_{k'} R_j(t_{j_i}; \mathbf{r}_{k'})}. \tag{5.8}$$

此即第 i 个 PE 属于第 k 个顶点的后验概率。

5.2.4 M-step 下混合模型的优化

此时 $Q_{i,k}$ 已经根据 E-step 计算完毕, 其中 $Q_{i,k} \ln Q_{i,k}$ 与优化无关可以舍去。似然函数可以写作

$$\begin{aligned} \ln \mathcal{L} &= - \sum_k \sum_j E_k \int R_j(t; \mathbf{r}_k) dt + \sum_k \sum_i Q_{i,k} \ln E_k R_j(t_{j_i}; \mathbf{r}_k) \\ &= \sum_k \left\{ - \sum_j E_k \int R_j(t; \mathbf{r}_k) dt + \sum_i Q_{i,k} \ln E_k R_j(t_{j_i}; \mathbf{r}_k) \right\}. \end{aligned} \quad (5.9)$$

可以看做是在后验概率加权下的 k 个单点源重建, 对于优化器是友好的。此时 E_k 的无偏估计为:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \ln \mathcal{L}}{\partial E} &= 0 \\ \sum_j \int R_j(t; \mathbf{r}_k) dt &= \sum_i Q_{i,k} \frac{1}{\hat{E}_k} \\ \hat{E}_k &= \frac{\sum_i Q_{i,k}}{\sum_j \int R_j(t; \mathbf{r}_k) dt}. \end{aligned} \quad (5.10)$$

可以解析计算, 从而在基于梯度的优化器通过减少待拟合参数维度从而节省了运行时间。

因为 E-step 和 M-step 中其似然函数值都在提升, 且原始问题的似然函数值即为上界, 因此 EM 算法一定会收敛。但是基于梯度优化的 EM 算法仍然是寻找一个局域最优解, 并不能保证全局最优解。

5.3 含有暗噪声的重建公式推导

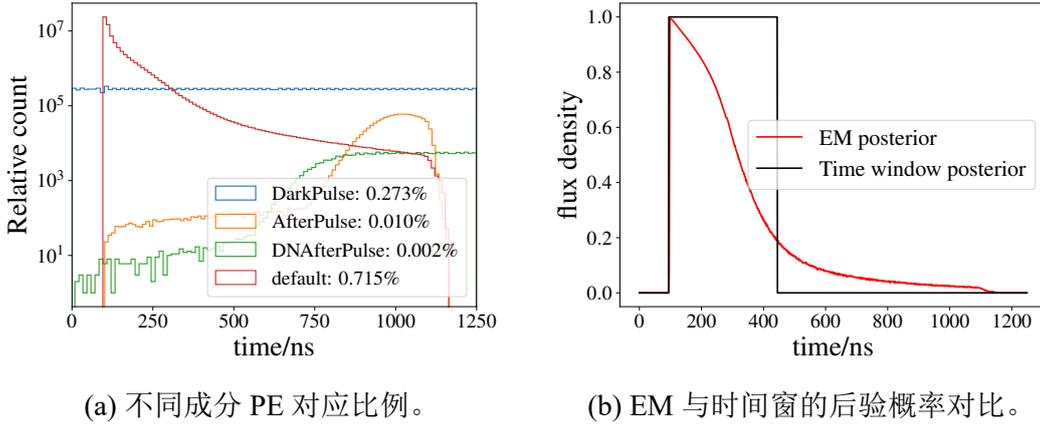
对于暗噪声情形, 假设每个 PMT 上的暗噪声率 (齐次泊松过程) 为 $R_{DN,j} = b_j$, 则有

$$\ln \mathcal{L}(E, \mathbf{r}; t_{j_i}) = - \sum_j E \int [R_j(t; \mathbf{r}) + b_j] dt + \sum_i \ln [E R_j(t_{j_i}) + b_j]; \mathbf{r}. \quad (5.11)$$

此时的能量无法得到解析的无偏估计, 暗噪声的筛选和顶点位置耦合在一起, 因此是一个依赖于顶点重建的暗噪声甄别技术。该式可以直接计算, 但是引入了能量的维度, 使用 EM 算法根据每一个 PE 是属于闪烁光的后验概率 $Q_{i,S}$ 进行无偏的能量重建。

在 E-step 估算每个 PE 属于闪烁光的后验概率:

$$p(t_j) = \frac{E \lambda(t_j)}{E \lambda(t_j) + b_j}. \quad (5.12)$$



(a) 不同成分 PE 对应比例。

(b) EM 与时间窗的后验概率对比。

图 5.4 使用 EM 算法计算得到探测器中心的闪烁光的后验概率。

(a)使用 JUNO 离线模拟中给出不同类型的 PE, 模拟位置位于探测器中心, 起始时刻为0 ns。default 代表探测器模拟中的 PE, darkpulse 为暗噪声, AfterPulse 为各自的后脉冲, 其对后验概率影响极小, 在本研究中忽略。(b)展示了使用 EM 和时间窗计算的不同时刻 PE 属于信号的后验概率。

根据 M-step, 仅需要使用闪烁光 PE 进行重建, 其能量重建的无偏估计参考式 (5.10), 视闪烁光 PE 为第一个顶点, 更新能量:

$$E^{[\text{new}]} = \frac{\sum_j p(t_j)}{\sum_j \int R_j(t; \mathbf{r}) dt}. \quad (5.13)$$

视暗噪声 PE 为第二个顶点, 由于参数全部已知, 无需拟合。然后对 E-step 和 M-step 进行迭代直至收敛。

蒙卡 Probe 的部分区间统计量为 0。使用蒙卡 Probe 进行重建时, 如果在这些区间内出现观测值, 其概率值为 0, 导致似然函数为负无穷。引入暗噪声后非齐次泊松过程的强度恒大于 0, 从而自然地解决了数值计算的问题。在 EM 的计算中, 虽然将 PE 按照闪烁光类别计算可能出现负无穷, 但其权重为 0, 故不会出现无效数字影响优化。

5.4 暗噪声重建结果

本节比较使用 EM 和时间窗对暗噪声分别进行重建的结果。传统的时间窗方法首先选定时间信息的区间, 仅利用区间内的信息进行重建。以后验概率来看, 其等价于在时间窗内后验概率为 1, 在时间窗外概率为 0。虽然目前有随能量变化的时间窗等, 但无法达到 EM 方法给出的上限。

顶点位于探测器中心时各个 PMT 响应相同, 假设 1 MeV 产生的闪烁光总 PE

数为 N_{PE} ，总暗噪声为 N_{DN} ，总 PE 数为 N_{total} ，重建能量 \hat{E} 可按照下式估计：

$$\hat{E} = \frac{N_{\text{total}} - E[N_{\text{DN}}]}{E[N_{\text{PE}}]}. \quad (5.14)$$

能量重建的不确定度与总暗噪声数的 N_{total} 方差直接相关。表 5.1 对应探测器中心 $1 \text{ MeV}e^-$ 于 0 ns 时刻产生时，不同时间窗下有、无暗噪声的能量分辨率估计，第一击中 PE 约为 95 ns 。

表 5.1 探测器中心不同时间窗有无暗噪声的能量分辨率（事例发生时刻为 0 ns ）。

时间窗	$E[N_{\text{PE}}]$	$E[N_{\text{DN}}]$	能量分辨率 w/o DN	能量分辨率 w/ DN
[0, 1250] ns	1471	586	2.903%	3.371%
[0, 350] ns	1434	164	2.938%	3.066%
[95, 450] ns	1451	164	2.922%	3.045%
EM	1471	586	2.903%	3.014%

虽然时间窗的选取极大的提升了能量分辨率，但也带来了 PE 数的损失，该数值约导致了 1% 的能量分辨率损失。若使用 EM 算法，则至少可以提升 1%。该提升仅适用于探测器中心，当顶点位置发生变化时，时间窗将发生移动，为了保证最近的粒子也在时间窗范围内，我们取时间窗为 $[0, 420] \text{ ns}$ ，使用蒙卡模拟的真值作为顶点，能量重建公式为

$$E = \frac{N_{\text{total,tw}} - E[N_{\text{DN,tw}}]}{E[N_{\text{PE,tw}}(r)]}. \quad (5.15)$$

其中 tw 代表仅筛选时间窗内的光子，此时由于暗噪声带来的能量损失约为 3%。

本章对 JUNO 的点源响应模型已经考虑了第 7 章中的节点修正。含暗噪声的位置重建结果有轻微偏差，主要是由于节点修正部分只对 PE 做了修正，时间维度仍使用球对称模型，此时对暗噪声的估计必定有偏，引入了轻微的能量非线性。

5.5 小结

本章是非齐次泊松过程的自然推广，将顶点位置、能量、PMT 暗噪声率等相关信息自然地结合起来，从似然方程看该方法必定给出含暗噪声重建的上限。与传统的时间窗方法不同，该方法无需使用各种依赖于能量等因素的阈值判断条件，不会由于闪烁光 PE 的损失而影响能量分辨率。从 1 MeV 的结果来看，若取时间窗为固定的 $0 \text{ ns} \sim 420 \text{ ns}$ ，其能量分辨率损失约为 1%。若该时间窗不考虑顶点位置，选择固定的时间窗，则能提升 3%。

同时我们引入了混合模型来描述探测器中不同成分同时贡献的过程。混合模

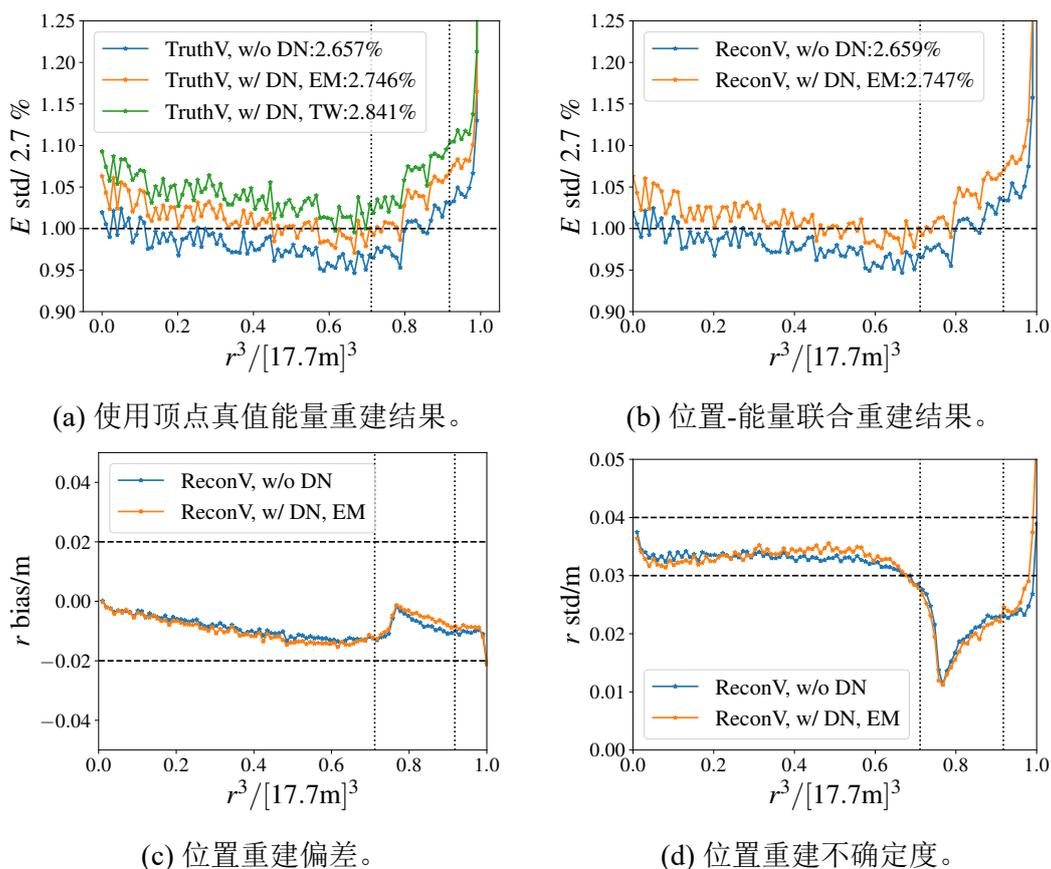


图 5.5 含暗噪声的重建结果。

有无暗噪声下的重建结果对比，其中 TruthV, ReconV 分别代表顶点是否使用真值，EM 指使用 EM 算法重建，TW 指使用时间窗方法重建。垂直的黑色虚线从小到对应全反射半径和有效体积半径。

型可以应用于点源响应与暗噪声的混合模型中，未来也可以推广到闪烁光与切伦科夫光的混合、多个点源的混合模型，其核心仍然是获取不同成分的精确的 Probe。

第 6 章 探测器中的多点源重建研究

在第 5 章中将 Probe 自然地扩展到含暗噪声的情况，在本章将扩展到多个点源。在传统方法中，如果同一时间窗内发生两个事例，往往需要两个事例在时间上有明显差异，然后取 cut 截断为两个子事例分别拟合。而非齐次泊松过程可自然地写为两个事例的叠加，可以在时空中任意组合。

当两个事例在时空上完全重合时，则其必然是不可分的，因此本章首先推导了 EM 算法中以能量为例的相关性，讨论了时空距离对最终重建效果的影响。其次以 TAO 作为理想的探测器上，验证了多点源重建的可行性。最后将这一算法应用于大探测器上，并使用 MCEM (Monte Carlo Expectation-Maximization) 算法进行加速。

6.1 EM 算法的相关性研究

多点源重建中点源之间的参数不独立，以双点源中能量为例，由方程 (5.5) 可求得每个粒子能量 E_k 的海森矩阵取负是 E_k 多元分布的精度矩阵为

$$\begin{aligned} \Sigma_0^{-1} &= -\frac{\partial^2 \ln \mathcal{L}}{\partial E_k \partial E_l} \\ &= \sum_i \frac{1}{\left[\sum_{k'=0}^2 E_{k'} R_j(t_{j_i} | \mathbf{r}_{k'}) \right]^2} \\ &\quad \begin{pmatrix} R_j(t_{j_i} | \mathbf{r}_0) R_j(t_{j_i} | \mathbf{r}_0) & R_j(t_{j_i} | \mathbf{r}_0) R_j(t_{j_i} | \mathbf{r}_1) & \cdots & R_j(t_{j_i} | \mathbf{r}_0) R_j(t_{j_i} | \mathbf{r}_K) \\ R_j(t_{j_i} | \mathbf{r}_1) R_j(t_{j_i} | \mathbf{r}_0) & R_j(t_{j_i} | \mathbf{r}_1) R_j(t_{j_i} | \mathbf{r}_1) & \cdots & R_j(t_{j_i} | \mathbf{r}_1) R_j(t_{j_i} | \mathbf{r}_K) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ R_j(t_{j_i} | \mathbf{r}_K) R_j(t_{j_i} | \mathbf{r}_0) & R_j(t_{j_i} | \mathbf{r}_K) R_j(t_{j_i} | \mathbf{r}_1) & \cdots & R_j(t_{j_i} | \mathbf{r}_K) R_j(t_{j_i} | \mathbf{r}_K) \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (6.1)$$

记

$$\begin{aligned} e_k^2 &= \sum_i \frac{R_j(t_{j_i} | \mathbf{r}_k) R_j(t_{j_i} | \mathbf{r}_k)}{\left[\sum_{k'=0}^K E_{k'} R_j(t_{j_i} | \mathbf{r}_{k'}) \right]^2}, \\ \eta_{kl} e_k e_l &= \sum_i \frac{R_j(t_{j_i} | \mathbf{r}_k) R_j(t_{j_i} | \mathbf{r}_l)}{\left[\sum_{k'=0}^K E_{k'} R_j(t_{j_i} | \mathbf{r}_{k'}) \right]^2}. \end{aligned} \quad (6.2)$$

假设统计量足够大，考虑双点源情况：

$$\begin{aligned}
 \overline{\eta_{kl}e_k e_l} &= \lim_{N_{PE} \rightarrow \infty} \sum_i \frac{R_j(t_{i_j} | \mathbf{r}_k) R_j(t_{i_j} | \mathbf{r}_l)}{\left[\sum_{k'=0}^K E_{k'} R_j(t_{i_j} | \mathbf{r}_{k'}) \right]^2} \\
 &= \sum_j \int dt \sum_{k'=0}^K E_{k'} R_j(t | \mathbf{r}_{k'}) \frac{R_j(t_{i_j} | \mathbf{r}_k) R_j(t_{i_j} | \mathbf{r}_l)}{\left[\sum_{k'=0}^K E_{k'} R_j(t | \mathbf{r}_{k'}) \right]^2} \quad (6.3) \\
 &= \sum_j \int dt \frac{R_j(t | \mathbf{r}_k) R_j(t | \mathbf{r}_l)}{\sum_{k'=0}^K E_{k'} R_j(t | \mathbf{r}_{k'})}.
 \end{aligned}$$

当两个点的点源响应越接近，分子项越大，则相关性越强，完全重合时 η_{kl} 计算结果为 1，表明完全不可区分。

6.2 理想探测器 TAO 中的余弦距离计算

探测器中的位置分辨率越高，则越容易对多个点源进行区分。TAO 探测器中 SiPM 覆盖率接近 100%。其使用 LAB 作为缓冲物质，没有全反射，建模较为简单。其光产额极高，几乎可达 12000 光子/MeV 或 5000 PE/MeV，在中心位置分辨率可达 1 cm。期望 PE 数 λ 可按照光传播方程进行估计：

$$\lambda(r, \theta_j, E) = \alpha E Y \frac{\Omega_j}{4\pi} \exp\left(-\frac{d_j}{L}\right) \eta. \quad (6.4)$$

α 为待拟合的修正因子，其中 E 为能量， Y 为光产额， Ω 为 SiPM 相对于顶点的立体角， d 为顶点到 SiPM 中心的距离， L 为拟合的衰减长度， η 为 SiPM 的探测效率。

并使用勒让德多项式拟合液闪的发光时间谱，并乘以 PE 的估计值组成非齐次泊松过程的平均值。

$$R_j(t, r, \theta_j, E) = \eta_j \lambda(r, \theta_j, E) \exp \left[\sum_m a_m P_m \left(t - \frac{dn}{c} \right) \right]. \quad (6.5)$$

其中 $P_m(t)$ 为 m 阶的勒让德多项式，时间经过平移后选择 $[-10, 400]$ ns 作为时间窗并映射到 $[-1, 1]$ ， n 为折射率， c 为光速，使用 40 阶勒让德多项式对 Probe 拟合结果如图 6.1 所示。

我们选择起始时刻相同的两个事例，将时间序列和击中 PMT 编号合并作为人工合成的一次事例。图 6.2 是一个合成事例的示意图，两个事例均为 $1 \text{ MeV} e^-$ 。在时间维度看两者几乎完全重合，但是 PE 的空间分布呈现出可区分的潜力。

若将两个顶点均固定在 x 正半轴上，此时最近的 PMT 相同，PE 信息也难以

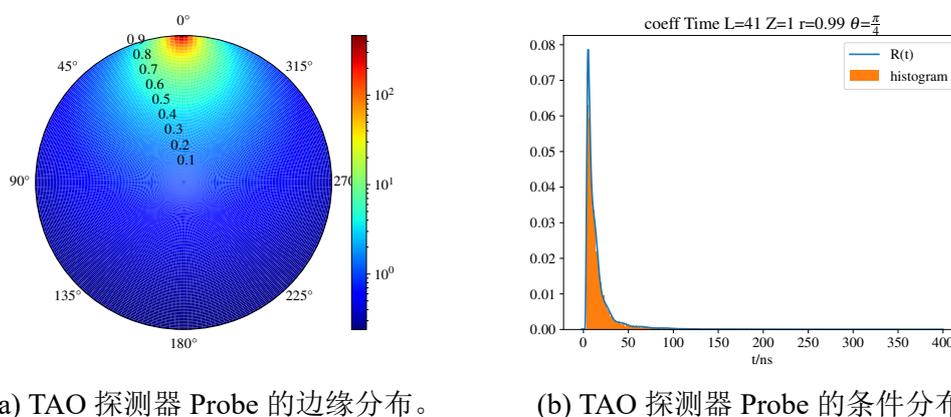


图 6.1 TAO 探测器 Probe 的拟合效果。其中边缘分布对应期望 PE 数，由解析计算得到。条件分布对应击中时间的非齐次泊松过程，假设该分布形状固定，并由 40 阶勒让德多项式拟合得到。不同位置假设仅有时间平移项不同，该项由解析计算得到。

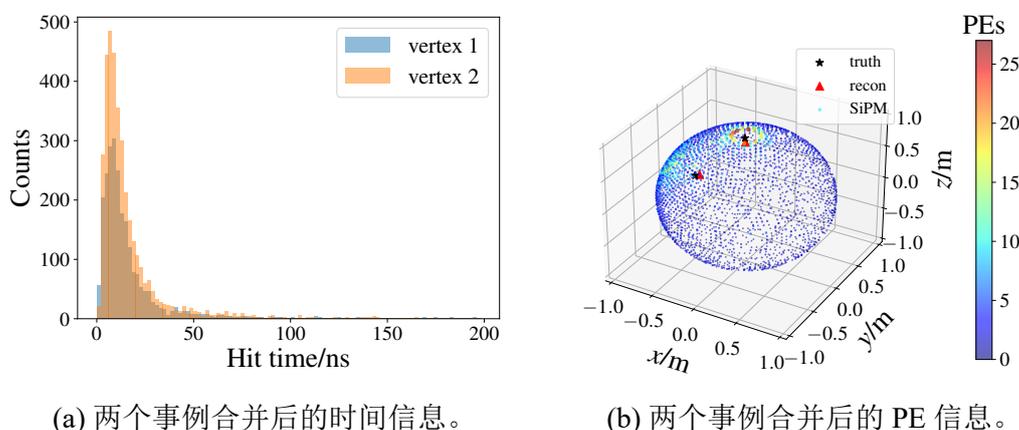


图 6.2 将两个 1 MeV^- 事例合并成一个事例的结果。

(a)为合并后所有 PE 的产生时间，在小探测器中飞行时间的差异远小于液闪发光时间的尺度，在时间窗上无法有效使用一个阈值将两点区分。(b)是 PE 数目信息，其中每个圆点对应 SiPM 的位置，其颜色和大小展示了 SiPM 上的 PE 数目。黑色三角形代表真实位置，靠近真实位置的 PMT 接收到的 PE 更多，从 PE 的分布情况可以看出两个顶点的趋势。红色五角星代表重建位置，与黑色三角形距离几乎重合，证实了双点源重建的有效性。

直观的看出空间分布。模拟中依次将顶点设置为 $[0,0.9]\text{m}$ ，间隔 0.1m 。为研究两个点混合情况下的重建性能，取两个点的中心向内向外 1cm 作为拟合初值，并迭代 1000 步，足以保证结果收敛。在合成两个事例时，一种方法是同时产生，另一种方法是在内侧点加两点距离除以介质中光速的时间平移，称为飞行时间差，其位置、能量重建结果如图6.3所示。

从图中可以看出，两个事例的能量比值真值应为 1 ，但距离越近，重建能量比值偏差越大，距离越远结果越接近 1 ，而且该比值依赖于两个点的位置。当拟合初始值为真值，位置重建也呈现出有规律的偏差。下两图展示了位置重建结果，横纵坐标代表两个点的位置，且 $x_1 > x_2$ ，关于对角线对称的两个格点代表了两个点的组合，其中左上角、右下角的数值代表 x_2 与 x_1 的结果。当两点仅有 0.1m 的距离时，结果为两条次对角线。外部的 x_1 的会向内偏差，而内部的 x_2 会向外偏差，两个值之差接近 0.1m ，也即重建结果混在一起完全无法区分，但这一效应在靠近探测器边缘时会减弱。标准差也呈现出类似的规律，在两点相距极远时其每个点的性能接近于单点源重建效果。加入飞行时间差后，双点源原本在 0.1m 和 0.3m 无法区分的点区分效率增加，其他位置也有提升。

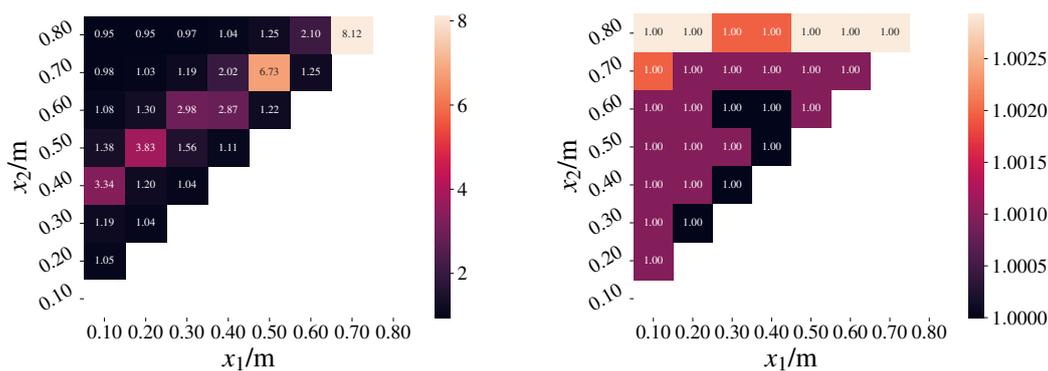
选取单个事例检查重建效果。假设两个顶点 y, z 均为 0 ， x_1 和 x_2 扫描 x 轴并返回似然函数值，如下图所示。图中红色的五角星代表真值，不同的等高线代表不同的位置的似然函数值与最优值的差。固定能量为 $1:1$ ，其中一个顶点为 0.1m ，当另一个顶点为 0.2m 时，最优的似然函数值位于 $x_1 = x_2$ 附近，即无法区分。当另一个顶点为 0.5m 时，结果表现出一定的区分能力，但是最优值的位置显示有严重的偏差。当另一个顶点为 0.7m 时，结果偏差进一步减小。受能量相关性影响，本图并非能量最优平面。

当两个点时空完全重合时则完全不可区分，因此其区分能力和时空距离密切相关，可使用 (4.23) 式中的余弦距离衡量：

$$d_{\cos} [\{R_j(t; \mathbf{r}_1)\} | \{R_j(t; \mathbf{r}_2)\}] = 1 - \frac{\sum_j \int R_j(t; \mathbf{r}_1) R_j(t; \mathbf{r}_2) dt}{\sqrt{\sum_j \int [R_j(t; \mathbf{r}_1)]^2 dt} \sqrt{\sum_j \int [R_j(t; \mathbf{r}_2)]^2 dt}} \quad (6.6)$$

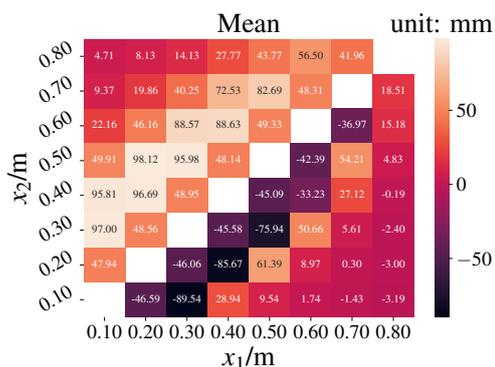
当两个点时空完全重合时其值为 0 。越接近 1 则表明两点越不相关，区分能力越强。该式代表高统计量下的理论上限，如果能量越小、观测涨落会使该式远小于上限。以上模型均假想两个事例完全在同一时刻发生，如果按照 γ 利用康普顿散射沉积能量模型，且粒子在靠外的 x_1 处沉积能量再到 x_2 沉积能量，需要在两个事例中加入飞行时间差，是否考虑飞行时间差的余弦距离如图6.5所示。

该值越接近 1 说明差异越大。与重建结果对比，当其为 0.01 时重建是不可分

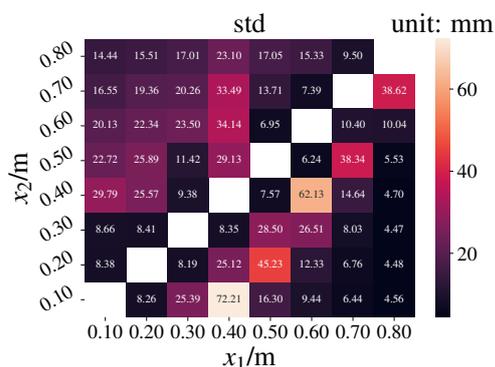


(a) 无飞行时间差重建能量比值。

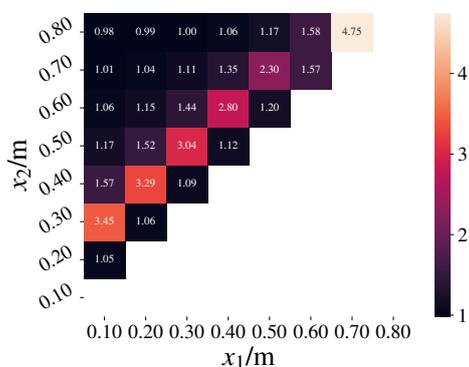
(b) 无飞行时间差重建总能量比真值。



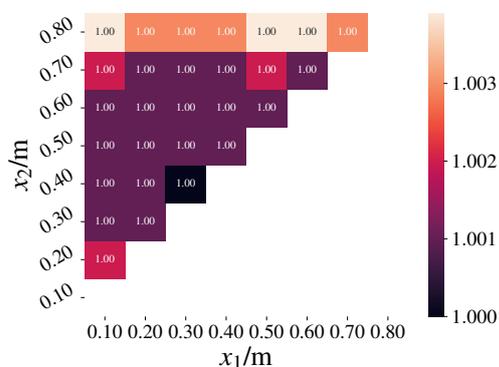
(c) 无飞行时间差顶点重建均值。



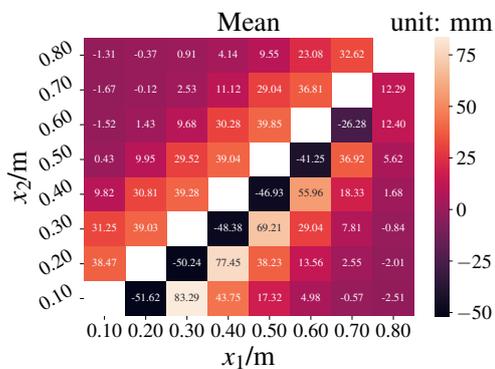
(d) 无飞行时间差顶点重建标准差。



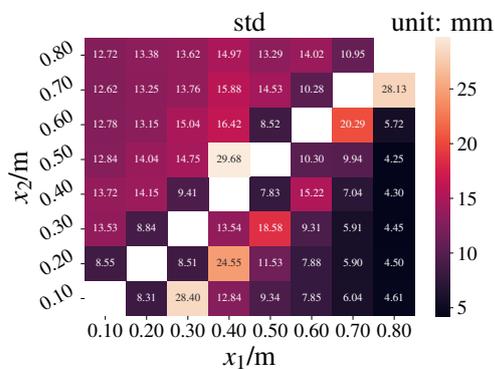
(e) 有飞行时间差重建能量比值。



(f) 有飞行时间差重建总能量比真值。



(g) 有飞行时间差重建位置均值。



(h) 有飞行时间差重建位置标准差。

图 6.3 双点源情况下顶点、能量重建结果。

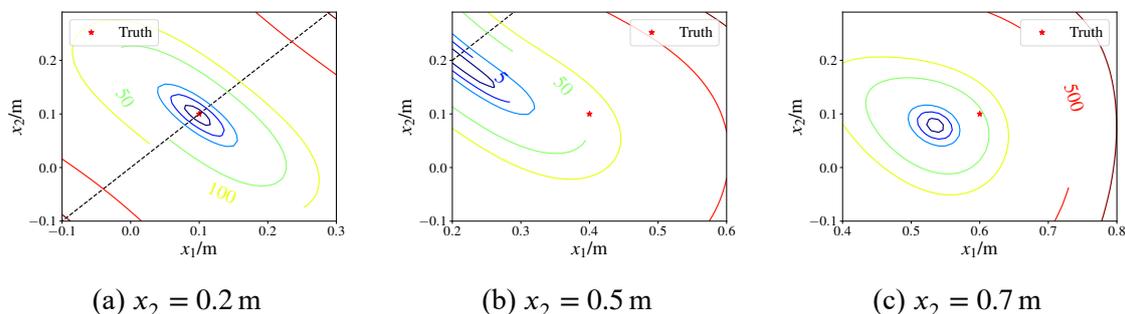


图 6.4 固定 E, y, z, t 为真值对似然函数的扫描结果。

$x_1 = 0.1 \text{ m}$ 。红色的五角星对应真值，虚线对应 $x_1 = x_2$ ，即两点重合。每条等高线的数值代表该处似然函数值与最优似然函数值的差异。当顶点较近时，似然函数显示最佳结果位于 $x_1 = x_2$ 处。当顶点离开一定距离，该平面的最优结果距离真值有较大偏差。当顶点距离继续增大，此时的偏差减小，在外侧的点分辨率接近单点源重建。该图的结果与统计量大的情况不完全相符，因为能量和时间也有较强的相关性，图中展示的平台并非是重建最优平面。

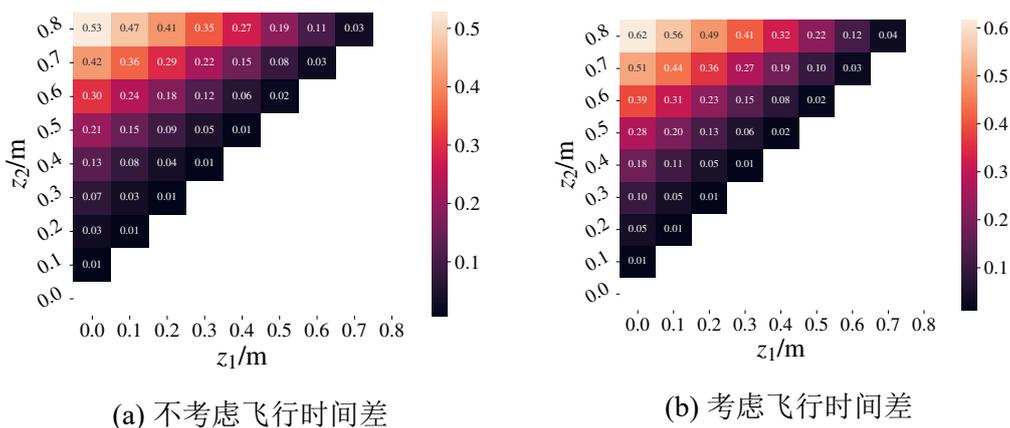


图 6.5 TAO 探测器中不同位置之间的余弦距离。

两个顶点均位于 z 轴上，两点距离越近其余弦距离越接近 0。相同距离下，探测器外部两点间的余弦距离大于探测器内部。

的, 为 0.04 时有一定的区分能力, 但是两个点源的结果有很强的相关性, 为 > 0.2 时几乎接近单点源的分辨率。即使相关性很强时, 其总能量重建几乎无偏。

6.3 JUNO 中的双点源重建

当两个顶点均发出闪烁光时, 其分辨能力与两个顶点间的距离及顶点所处的半径有关。本节工作着重于两点距离为 1 m 内的重建, 并将其扩展到多点源重建。

JUNO 探测器中存在节点, 其修正将在第 7 章中介绍, 利用带节点修正的蒙卡 $\text{Probe}R_{\text{MC,node}}$, 我们与不加修正的 R_{MC} 作比较: 对前 600 ns 间隔 1 ns 做数值积分, 可得 JUNO 中两点间的余弦距离如图 6.6 所示。考虑节点修正后其区分程度将有轻微提升, 在全反射区域更加明显。注意节点修正在时间维度尚未达到上限, 意味着多点源事例的重建效率还有提升空间。若保守地以 0.1 作为鉴别阈值, 意味着相距 0.5 m 同时发生的事例必须在 $r > 12.5$ m 范围内才能鉴别。

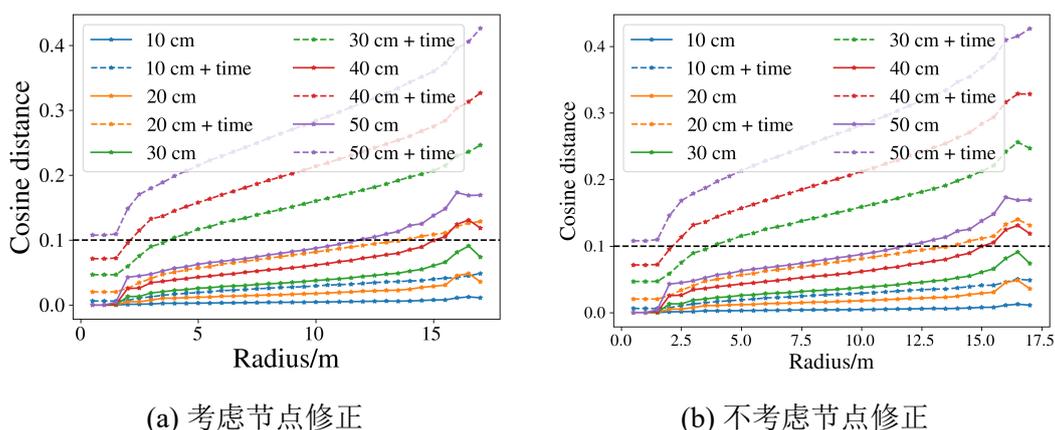


图 6.6 JUNO 探测器中两点的余弦距离。

两个顶点位于 x 轴, 相距 10 cm ~ 50 cm。横坐标是其中 r 较小的顶点的位置。图例中无 +time 意味着两个事例同时发生, +time 意味着内侧的点人为加两点距离除以介质中光速的飞行时间修正, 加时间修正后相关性明显减弱。(a) 没有考虑节点修正, (b) 有节点修正, 节点修正在全反射区域可以进一步轻微的减弱相关性。若以余弦距离 0.1 为鉴别阈值, 意味着相距 0.5 m 同时发生的事例必须在 $r > 12.5$ m 范围内才能鉴别。

6.3.1 基于 MCEM 算法的改进

若使用基于梯度的优化器利用 EM 算法进行重建, 将会困扰于初值、局域极值和收敛速度慢三个问题: 如果多点源重建中给的初值位置完全一样, 每个成分中相同参数的梯度将完全一样, 其移动始终保持一致而无法区分, 因此需要额外的寻找多点源初值的算法。其参数个数将按照 4 倍的成分个数迅速增加, 极大的增加了拟合难度。由于 Probe 中时间的双峰结构、全反射区域等因素都会形成天然的局域极值, 而蒙卡 Probe 插值也引入了更多潜在的局域极值, 因此拟合过程极容

易收敛于局域极值，当初值不准确时该结果将会更差。除此之外，EM 算法的收敛完全依赖于点源响应的相似程度。若两个点源距离很近，其顶点之间相关性极强，在两点之间的区域内梯度很小，使 E-step 与 M-step 每次更新的步长也极小。每一步迭代相当于做多次单点源重建，而 EM 的收敛次数过多则极大的增加了运行时间。

为此我们借助 MCEM^[95] 算法的思路改写基于梯度的 EM 算法。其主要思路保留 E-step, 在 M-step 改用 MCMC 采样算法。本文的采样算法选择 Hybrid MCMC^[96], 与 Gibbs^[97] 的框架相同, 但采样时使用 Metropolis 方法^[98], 即利用接收-拒绝采样。给多点源中的一个或某几个维度进行随机游走, 然后计算其与上一步采样结果的后验概率比值作为接收的概率。以双点源为例, 其主要流程为:

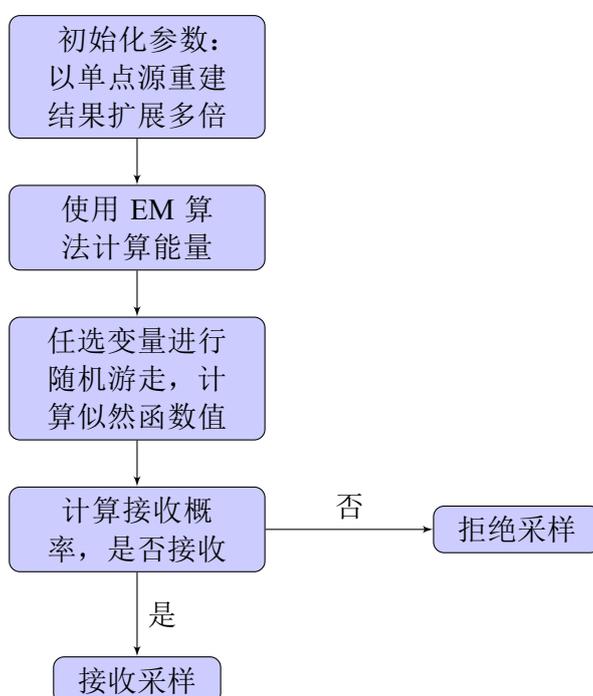


图 6.7 多点源重建中 MCEM 算法流程图。

具体操作时，能量初值设为 1:1，根据 EM 算法更新能量，并计算两个顶点的似然函数值，需要注意加上 5.2.4 节中的 $Q_{ik} \ln Q_{ik}$ 项。然后将 N 个顶点分为 N 个空间坐标（3 维）和 N 个时间坐标（1 维），每次任选一个变量随机游走，其中空间为一个三维互相独立的高斯分布，标准差在不同维度均为 1 cm，时间为标准差为 0.1 ns 的高斯分布。位置移动后重新根据 EM 算法更新能量，并计算新的对数似然函数值，与根据极大似然函数的定义，对初始的对数似然函数值做差取指数作为概率。最后从 [0,1] 的均匀分布中选取随机数，若该概率大于此随机数，则接收新的采样，否则拒绝。采样后初值更新为采样后的结果，当采样数目达到预设数目后停止，此时采样空间内的参数分布近似为该参数的后验概率。

使用该方法可以完美解决基于梯度优化算法引起的三个问题。每次计算 5000 步，取后 3000 步的均值作为结果，接受率在 60% 以上。而基于梯度的收敛很难在一百次迭代内收敛，其中每步需要迭代上百次，因此时间消耗远远超过 MCEM。该流程中保留了 EM 算法对能量的估计，因此可以减少采样维度，进一步缩短程序运行的时间。

与使用 TAO 探测器进行双点源重建相比，使用 JUNO 几何中添加了暗噪声，流程和暗噪声几乎一致，唯一注意的是需要加上暗噪声的似然函数。MCEM 中仅需要关注于采样前后对数似然函数的差，因此只有

$$\sum_i Q_{i,\text{DN}} \ln R_{\text{DN},i} - \sum_i Q_{i,\text{DN}} \ln Q_{i,\text{DN}} \quad (6.7)$$

起作用，需要注意 $R_{\text{DN},i}$ 为第 i 个 PMT 的齐次泊松过程的平均值， $Q_{i,\text{DN}}$ 为第 i 个 PE 属于暗噪声的后验概率。

6.3.2 堆积事例重建结果

目前 JUNO 中重建^[99] 我们选择同时发生的两个事例加暗噪声合成一个堆积 (pile-up) 事例，本质上是三个成分的重建。顶点重建比较多个顶点能量加权的位置，记为**位置重心**，能量重建考虑顶点的总能量。而单点源重建的结果与之直接对应。本节考虑三种情形：

- 两个点沿着 x 轴设置距离分别为 500 mm，初始能量均为 1 MeV，其重建结果如图 6.8 所示。
- 两个点沿着 x 轴设置距离分别为 1 000 mm，初始能量均为 1 MeV，其重建结果如图 6.9 所示。
- 两个点沿着 x 轴设置距离分别为 1 000 mm，靠内的点初始能量为 1 MeV，靠外的点初始能量为 0.1 MeV。其重建结果如图 6.10 所示。

图 6.8–6.10 中，左边的三张图分别代表了不同位置的顶点重建结果，颜色代表了该顶点重建的能量与总能量的比值。相同距离下，在探测器外部的双点源更容易区分，其中图 6.8(a) 中重建结果集中在两个点源中心，意味着此时的性能几乎等价于单点源重建，而图 6.9(a) 显示相距 1 m 时在探测器中心效率几乎也可达到 100%。因此未来还需考虑单点源、多点源区分的效率。

从左往右、从上往下排序，第二张图均为重建的位置重心偏差，multi site 代表双点源重建结果，single site 代表单点源重建结果，图中展示了重建的偏差，误差棒为其一倍标准差。第四张图为重建能量的均值，误差棒为结果的一倍标准差。其中总不确定度估计仅选择图中的点的不确定度取平均，未考虑能量非线性。当能量比为 1:1 时，多点源重建比单点源重建分辨率有提升，此时还未考虑单点源重建

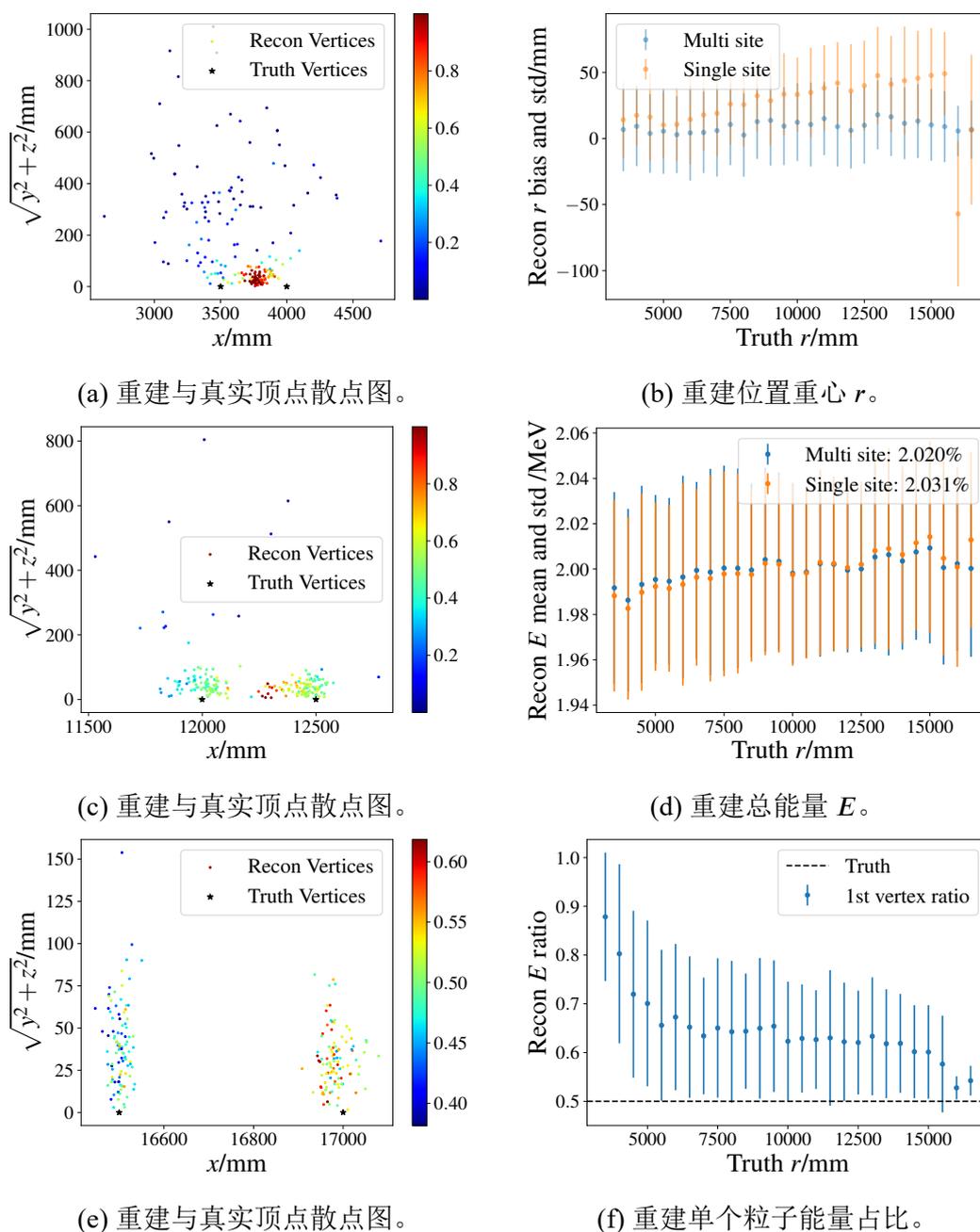


图 6.8 相距500 mm，初始能量均为1 MeV 的双点源重建效果。

(a), (c), (e)分别代表了不同位置的顶点重建结果。(b)为重建的位置重心偏差，multi site 代表双点源重建结果，single site 代表单点源重建结果。(d)为总能量的重建以及粗略估计的所有位置的能量不确定度。(f)为能量重建较大的顶点所占总能量比例的不确定度。

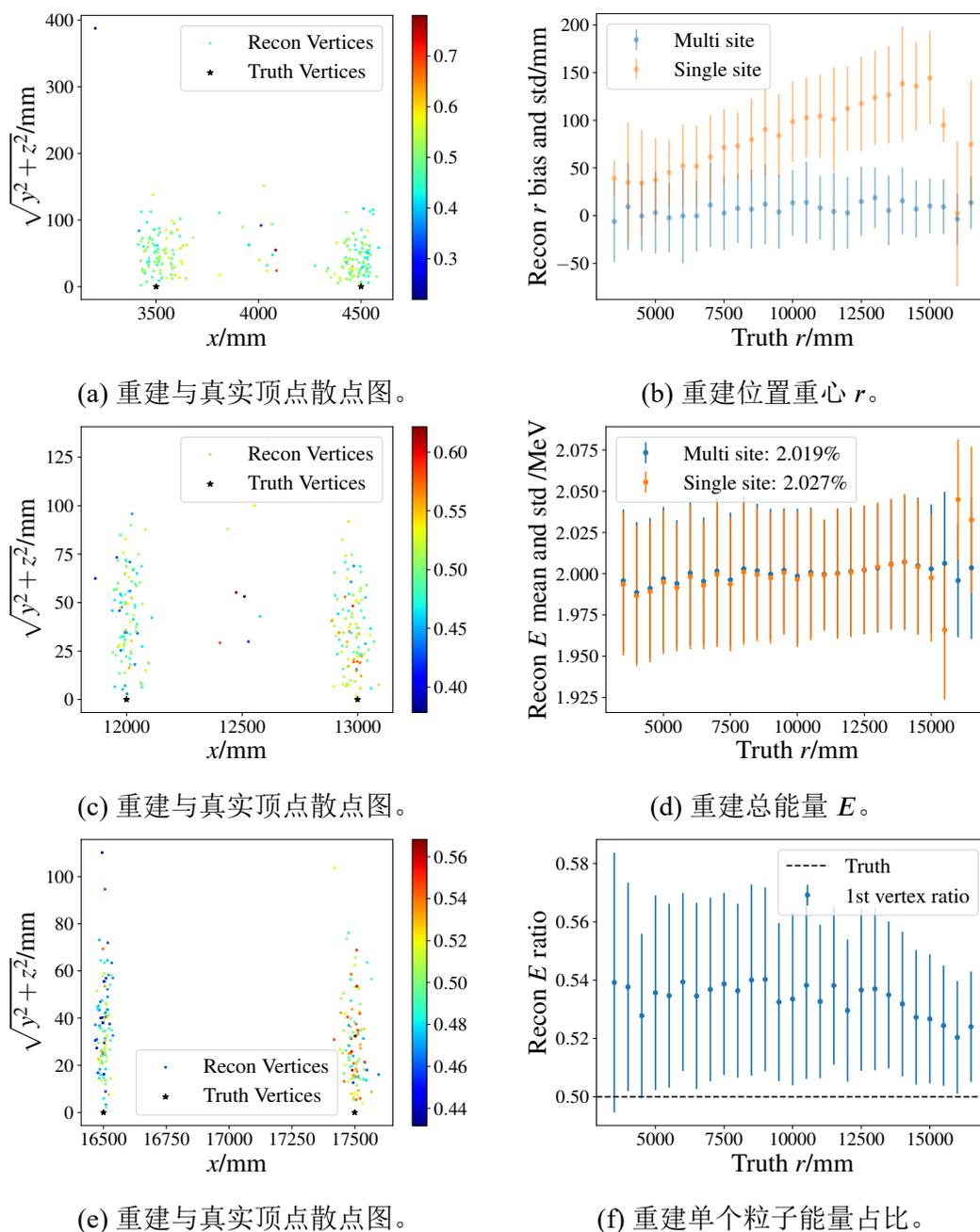


图 6.9 相距 1000 mm, 初始能量均为 1 MeV 的双点源重建效果。

(a), (c), (e) 分别代表了不同位置的顶点重建结果。(b) 为重建的位置重心偏差, multi site 代表双点源重建结果, single site 代表单点源重建结果。(d) 为总能量的重建以及粗略估计的所有位置的能量不确定度。(f) 为能量重建较大的顶点的能量所占总能量比例的不确定度。

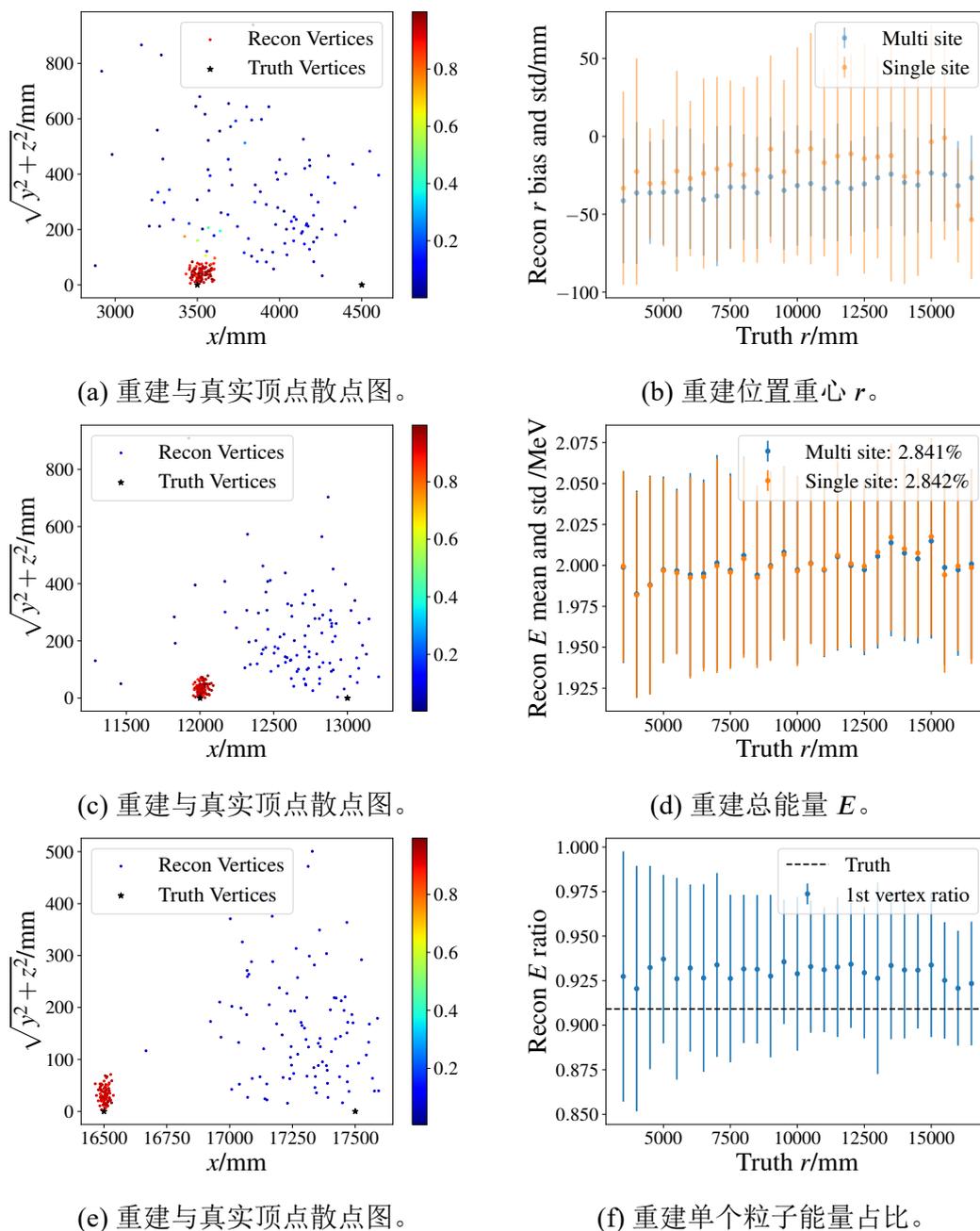


图 6.10 相距1000 mm, 初始能量为1 MeV 和0.1 MeV 的双点源重建效果

(a), (c), (e)分别代表了不同位置的顶点重建结果。(b)为重建的位置重心偏差, multi site 代表双点源重建结果, single site 代表单点源重建结果。(d)为总能量的重建以及粗略估计的所有位置的能量不确定度。(f)为能量重建较大的顶点所占总能量比例的不确定度。

位置偏差对能量非线性。第六张图为能量重建较大的顶点的能量所占总能量比例，误差棒使用重建能量的标准差除以总能量后确定。总体来看，不同位置的相关性引入了巨大的非线性，在全反射区域相关性减弱，因此多点源重建在全反射区域顶点、能量重建性能有较大提升。如果一个顶点刚好位于全反射区域而另一个在中心，此时两者的 Probe 相差巨大，对该区域使用多点源重建最有潜力。

图6.10(d)显示能量分辨率的提升极其有限，但是选择其中能量较大的一个点源，其能量占总能量的比例如图6.10(f)所示。虽然由于相关性其不确定度变大且有偏，但对于 pile-up 信号中仅关心其中能量较大的信号是极大的提升。但当距离较近时，图6.8(f)显示在探测器中心单点源能量不确定度极大。本工作暂不讨论其偏差的修正，因此保守的估计是 JUNO 可以对同时发生1 m 内的 pile-up 信号同时重建。

6.3.3 正电子重建结果

正电子事例可以视作一个具有初始动能的电子和由于康普顿散射产生的多个电子沉积能量的叠加。其沉积能量过程如图1.5(b)所示。

在 JUNO 的模拟中，以粒子的发光时刻为例，可以看到电子、正电子与 γ 的区别，如图4.8(b)所示。目前 JUNO 的策略是使用负电子和 γ 叠加组合为正电子，但该图展示的是多个事例的平均效应。

如果以 γ 作为最小单元建模将会时康普顿散射过程中的能量非线性全部转移到正电子能量的估算中。康普顿散射的距离可能不足50 cm，且其个数难以确定，能量极低。在当前探测器下精确重建出所有康普顿电子位置难度极高。考虑到全反射区域 Probe 对位置最敏感，因此本小节策略为使用双点源降低位置弥散引起的能量非线性。

输入数据为1 MeV e^+ 含暗噪声，共 5 万个事例。其结果如下图所示。

图6.11(d)显示位置重心的不确定度在全反射区域变小，使得(b)中能量分辨率提升，由于可视能量约为2 MeV，该提升需要乘 $\sqrt{2}$ 的因子，相比单点源模型最终提升约0.5%的能量分辨率。该方法是首次使用纯负电子模型描述正电子模型，对于减少正电子湮灭产物沉积能量的不确定度有着重要的意义。

6.4 本章小结

本章将非齐次泊松过程推广到更一般的情形：包含多个点源和暗噪声的任意组合。从 EM 的数学公式出发，我们以能量为例推导出两个点源参数之间的相关系数。为验证双点源分析的可行性，首先在位置分辨率极高的 TAO 探测器上进行

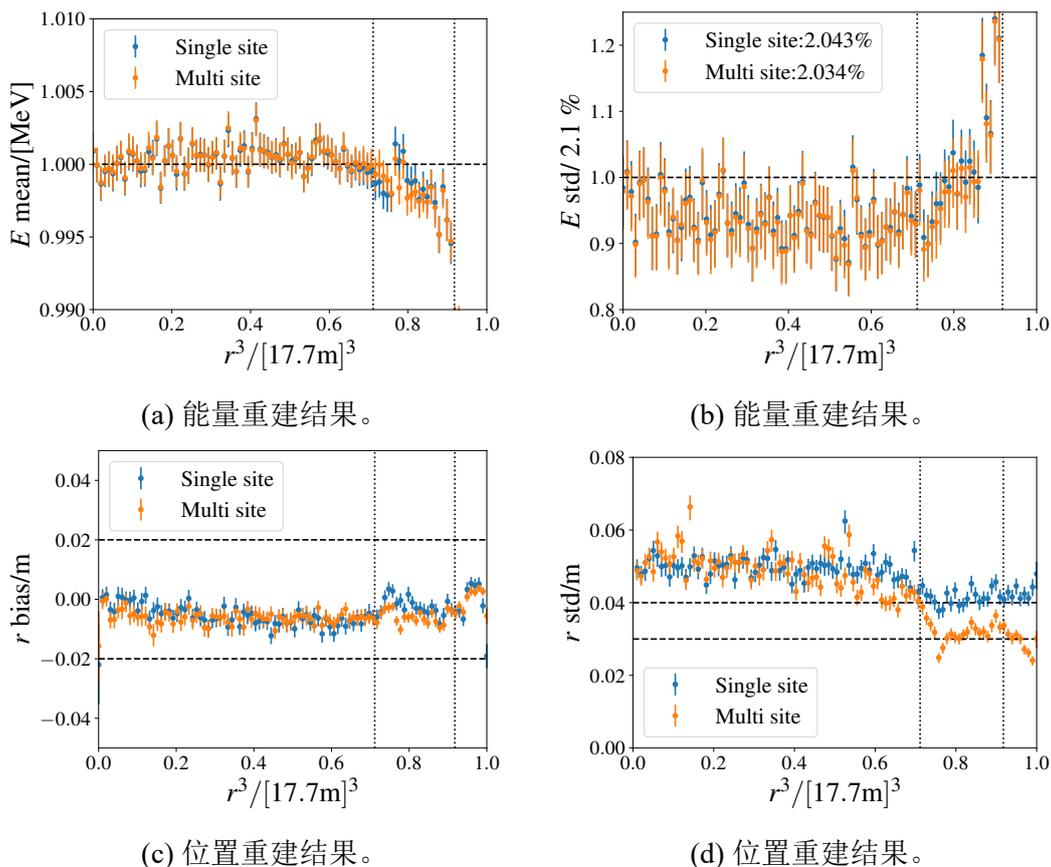


图 6.11 使用电子模型重建正电子结果。

single site 代表单点源重建，multi site 代表多点源重建，均使用了节点修正。(a), (b) 分别为能量重建的均值与标准差。(c), (d) 分别为位置重心重建的偏差和标准差。

实验，证明了同时发生的事例可以被区分。其能否区分则依赖于两个顶点的初始位置和能量，对于 TAO 探测器，需要两点间距 20 cm 以上。这个方法突破了在时间窗中取 cut 进行区分的局限。

当应用于 JUNO 探测器时，考察了两个电子加暗噪声组成的 pile-up 事例，比起单点源重建，其位置和能量分辨率均有提升，尤其是在全反射区域。

当待重建事例为正电子和暗噪声时，我们仍用双点源来减少康普顿散射带来的能量非线性，在全反射区域仍有提升。这是第一次在重建中以纯负电子的模型来描述正电子模型。正电子湮灭产物的弥散大约在 50 cm 内，能够区分该距离尺度下的多个电子需要极其精确的 Probe，得益于第 7 章中有效的节点修正。如果能够得到完美的 Probe，节点的存在将极大的提升全反射区域多点源重建的成功率。

目前本算法应用于 CPU，计算速度还有提升的潜力。即使通过 MCEM 加速后，一个双点源事例仍需要两分钟左右，而三点源需要十分钟以上。如能突破当前计算速度的瓶颈，该方法的应用前景更为广阔。目前策略为可以通过其他快速算法对筛选出感兴趣的事例，然后以本方法对单个事例进行精确分析。

第7章 对非球对称修正的研究

在第3、4章中 Probe 利用球对称性减少了 ϕ 方向的自由度，但实际探测器中的支撑结构将会破坏球对称性。而大探测器需要更多的支撑结构，如 JUNO 中的节点结构等，这些结构可能使到达 PMT 的光路增加或减少，如果建模不准确会引起巨大的能量非均匀性。

利用顶点真值可以通过 Probe 的边缘分布估计出 PMT 上的 PE 数，再通过式 (2.9) 得到能量重建结果。相同能量下，不同位置能量重建的平均值保持一致，否则将贡献到第2章中的能量非线性。我们对有节点和无节点的情形使用蒙卡 Probe 得到能量重建，并考察了不同顶点所在的天顶角 θ_v 和 r 下的能量重建均值，如图7.1所示。无节点时均值几乎一致，能量非均匀性可忽略，有节点时则引入巨大的能量非均匀性，最终使能量分辨率在 $1 \text{ MeV } e^-$ 情形下变差约3%。

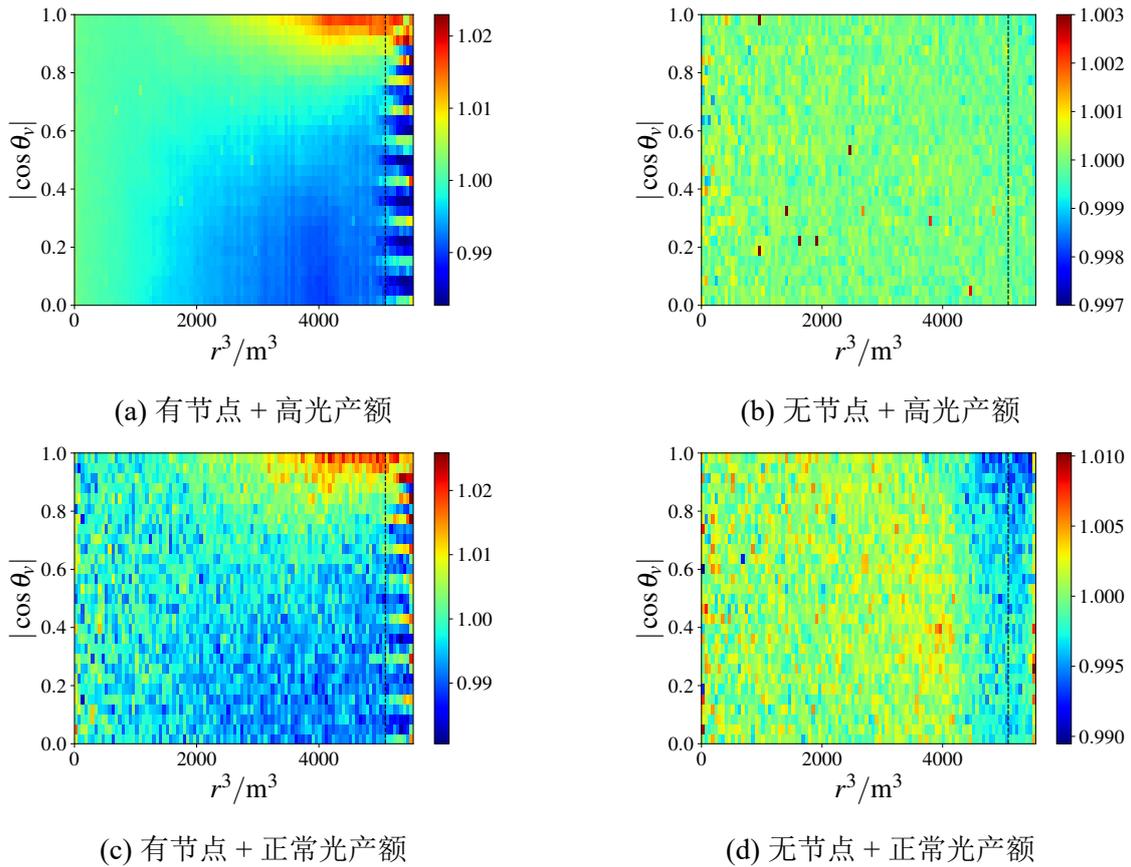


图 7.1 有无节点在不同光产额下的能量重建均值。

θ_v 为顶点在球坐标系下的天顶角，事例为 $1 \text{ MeV } e^-$ ，高光产额事例为第3章中的训练集。

因此 Probe 务必考虑节点的影响。节点的排布并非球对称，其整体沿着球坐标

呈现出一定周期性，如图7.3。本章将介绍将球对称的 Probe 通过非球对称修正推广到实际探测器中。

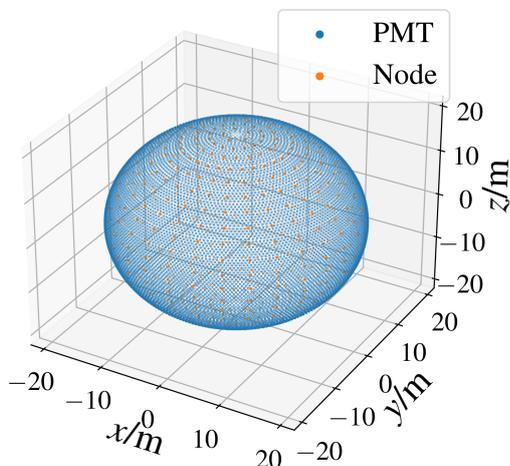
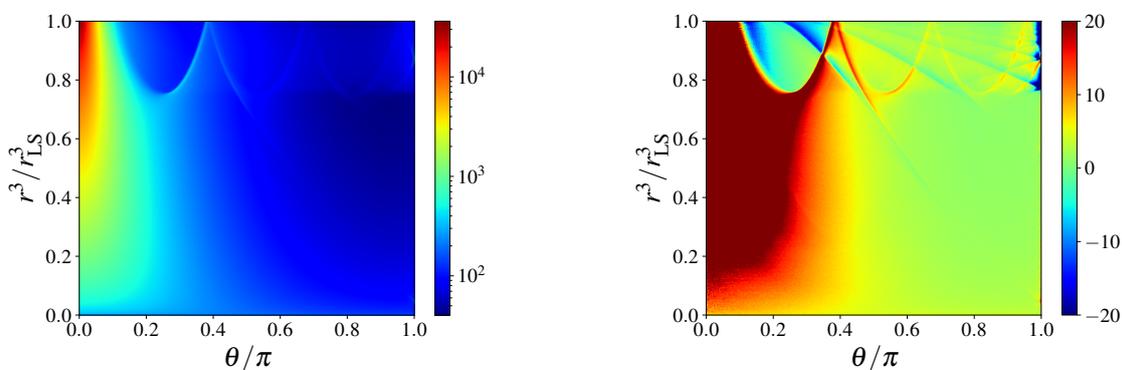


图 7.2 节点分布示意图。

图 7.3 蓝色的点对应 PMT 的位置，橙色的点对应节点的位置，处于 PMT 的缝隙中。

通过对比有无节点的蒙卡 Probe 可以单独研究节点的影响。其中无节点的效应主要在第4章中讨论。取两者的边缘分布，通过有节点情形减去无节点情形，最终得到结果如图7.4所示，与图3.2(b)相比，本图以直角坐标表示用于放大差异。



(a) 无节点下的 Probe 边缘分布。

(b) 有无节点 Probe 边缘分布之差。

图 7.4 节点对 Probe 边缘分布的影响。

图7.4显示出如下信息：

- $\theta < 0.1$ 时，由于节点导致大部分 r 下的 PE 数将会减少。
- $\theta \sim 0.3\pi$ 且 $r/r_{LS} \approx 1$ 时，此处为全反射区域。无节点时光子尽可能通过吸收重发射击中 PMT。但是节点的存在额外引入了可能的光路。
- $(r/r_{LS})^3 > 0.8$ 的位置有节点时引入了更多的结构。

7.1 球对称性破坏的光学成因研究

7.1.1 出、入水口对光路的影响

出、入水口处亚克力的形状出现突变，球对称性在此处无法推广，光子到达入水口后入射角一般大于全反射的临界角，因此光子的传输路径被限制到出水口中。如果光子到达 PMT 途径出入水口，则该 PMT 上接收到的 PE 变少，直接表现为在靠近亚克力球壳边界 z 轴和其他轴总 PE 不同。

7.1.2 JUNO 中节点对光路的影响

JUNO 中的节点的剖面图如图 7.5 所示。

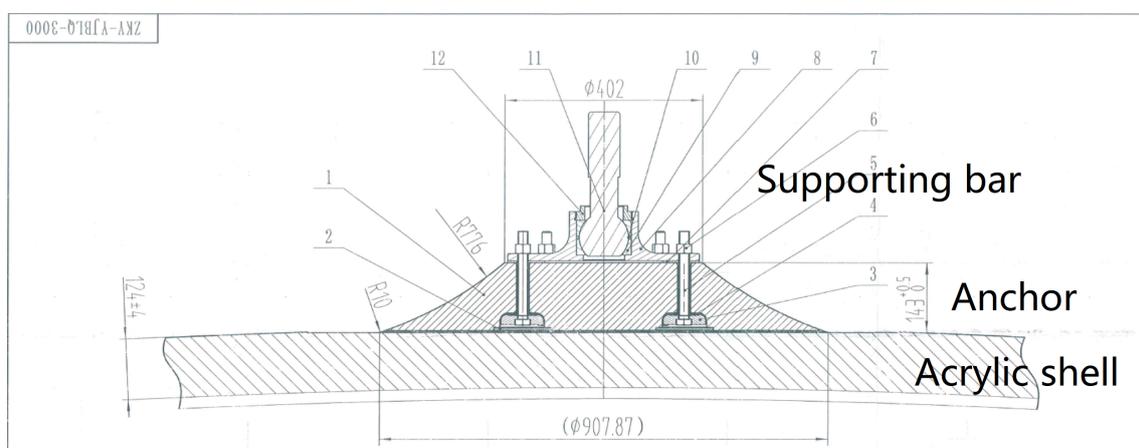


图 7.5 节点剖面图。

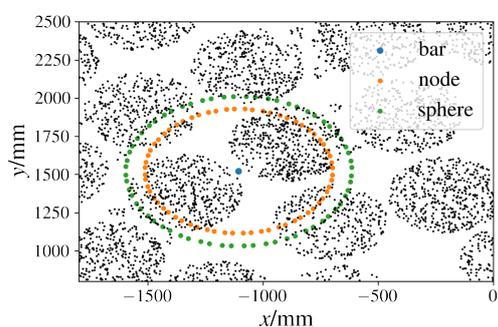
图中从上到下依次为金属支撑杆、锚、探测器的亚克力球壳，在本文中节点包含支撑杆和锚。支撑杆为不透明结构，锚与亚克力球壳的材料相同，并集成到球壳上，对光线透明。锚近似为球台，斜面可以改变光线的入射角。

中间部分为金属，属于不透明结构，底面的亚克力与亚克力球壳的材料相同，并集成到球壳上。通过几何光学可以预测出顶点在探测器中心和全反射区域时的光路，最终将会导致多种效应：

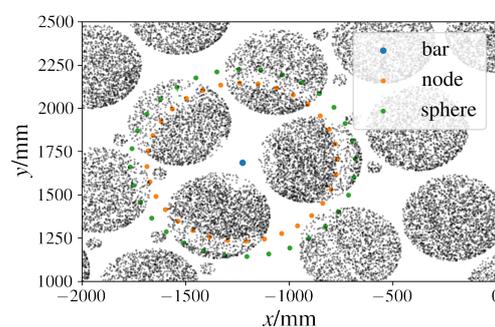
1. 在探测器中心发射的光子与亚克力球壳距离较远，此时光线可近似认为平行光，亚克力球壳被视作平面。光子打到金属时被吸收，在 PMT 平面上形成阴影。打到斜面时则会改变光路，由于入射角的改变影响了透射率。几何在斜面和平面的交界处一阶导不连续，因此光线的折射方向不一致，在两束光线的中心形成一个暗环。在实际模拟中通过提取光子击中 PMT 的位置，可以看到明暗相间的四个环结构，该效应称为节点的**遮挡**效应。
2. 在斜入射时，如果没有节点，可以根据光线与探测器中心确定光线传播的平面，问题简化为二维情形。在节点上也可以找到处于该平面的两个临界点，

根据距离光源的距离称为**近点**和**远点**。近点入射角变大，容易发生全反射，远点入射角变小，增大了透射率。节点中间某处为发生全反射的临界点，因此只有一个扇形区域且不包含节点阴影是透明的。且各处透射率不相等，呈现一个颜色渐变的心形的形状。

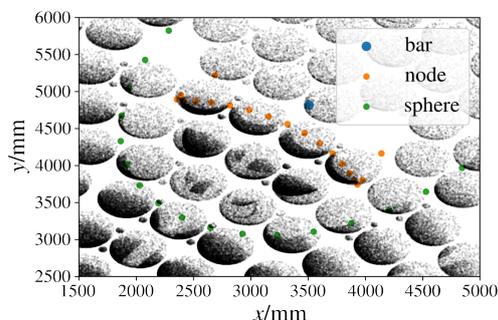
- 对于入射角大于或接近全反射临界角的光子，在到达亚克力-水界面时反射率极高，在近点和正常情况均无法出射。但是远点对应的入射角依然有可能小于临界角。表现为 PMT 对于位于全反射区域的顶点可接收到远超出预期的光子，光子透过节点的区域仍近似是一个扇形区域。该现象定义为节点的**泄露效应**。模拟显示由于泄露导致的 PE 可达增加接近 5 倍。



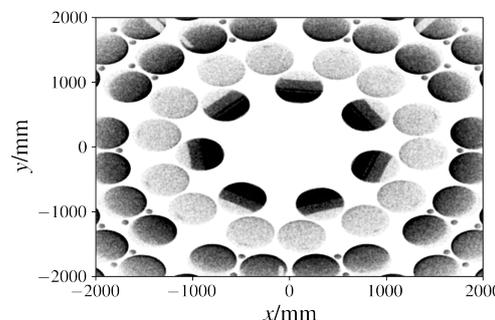
(a) 顶点位于中心处的部分光子击中 PMT 的位置。



(b) 顶点位于 (0,0,10) m 处部分光子击中 PMT 的位置。



(c) 顶点位于 (0,0,17) m 处部分光子击中 PMT 的位置。



(d) 顶点位于 (0,0,17) m 处部分光子击中入水口附近 PMT 的位置。

图 7.6 不同顶点半径下光子击中 PMT 表面的位置。

顶点位于 z 轴，提取了模拟中光子被 PMT 光阴极吸收的位置，绘制了这些位置在 xy 平面的投影。其中(a)对应顶点位于中心区域，在亚克力外表面，大多数光线入射角接近于 0。其中(b)对应顶点位于 (0,0,10) m，部分光线入射角变大。(c)对应顶点位于 (0,0,17)m，属于全反射区域。其中蓝色的点 (bar) 代表该顶点下的节点与支撑杆连接处的中心在 PMT 平面所成的像，橙色的点 (node) 是亚克力球面和节点斜面的交点以斜面为入射面所成的像，共选取了 32 个特征点。绿色的点 (sphere) 是亚克力球面和斜面的交点以球面为入射面所成的像。两个圆间的光子数少于预期，大多数来源于吸收重发射。(d)为入水口附近击中 PMT 的位置，由于入水口改变了光路，离中心最近的两圈 PMT 的期望 PE 数少于预期。

借助工具^[89]中的模拟，对球面做平面近似，下面为折射率高的物质，在金属

所在区域设置了遮光板，在最上方也设置了遮光板模拟 PMT 所在的平面，可以直观的表现光线在该平面的累积。

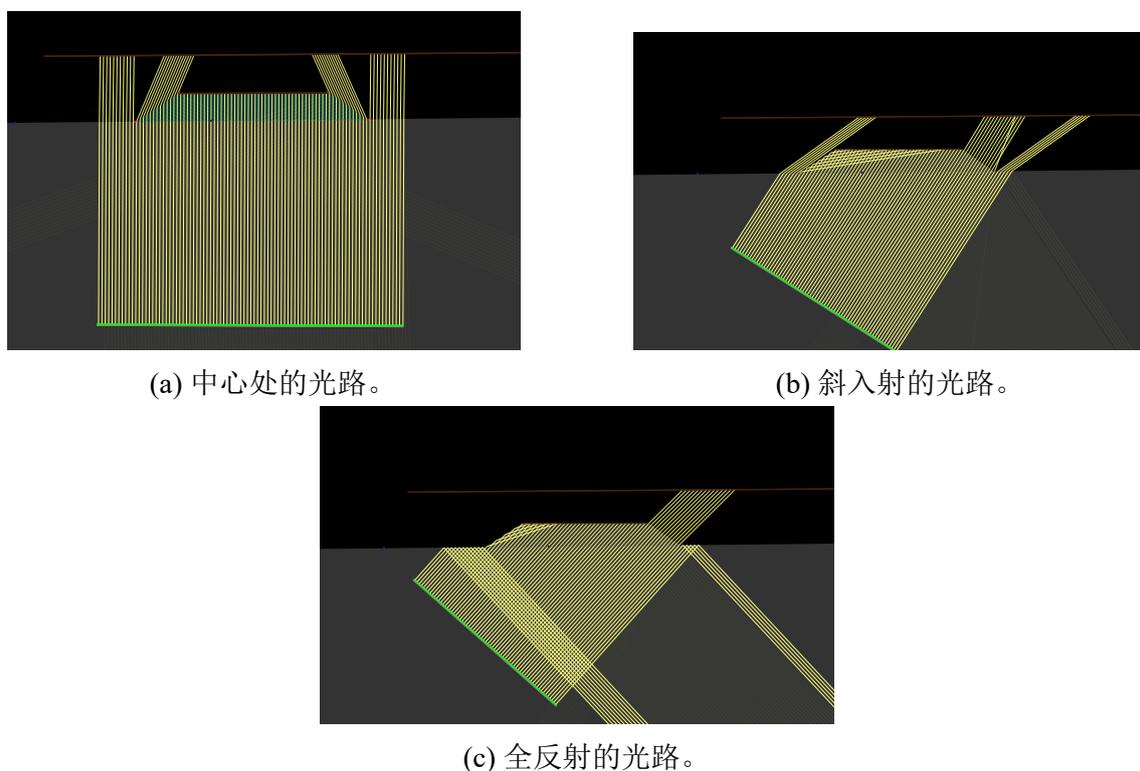


图 7.7 节点对光路遮挡及泄露效应的模拟。

其中梯形结构的左下角为近点，右下角为远点。

由于节点的尺度为几十厘米，如果顶点位置偏移几十厘米点源响应将出现巨大区别，尤其在全反射区域。如果忽略该效应，则会对顶点重建的精度造成损失。而全反射区域 PE 数较少，时间信息贡献的权重低相对弥补了 PE 信息重建的偏差。JUNO 当前的方法主要是通过时间和 PE 信息重建得到较为理想的顶点位置，随后通过顶点在球坐标中的天顶角与节点平均效应建模，计算出总 PE 个数再根据顶点在球坐标中方位角进行修正。这个精细结构给准确建模带来挑战，也可能带来如下机遇：如果两个点源的距离为几十厘米，则有机会通过节点的特殊光路进行分辨，如 γ 在探测器中沉积能量的过程。我们期望能够构造无偏的点源响应模型作为更精确的顶点重建信息，从而达到更高的能量分辨率。

7.2 基于几何光学的非球对称修正

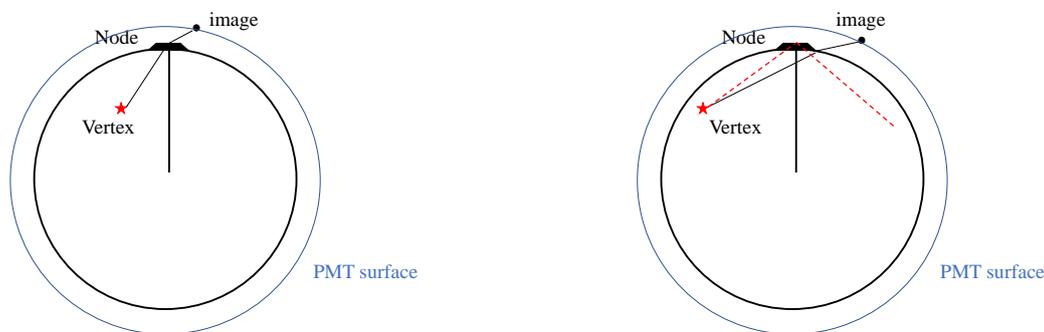
本节主要利用顶点和节点的位置，视顶点为光源，通过解析计算预测出节点所成的像的位置。像在非全反射区域体现为遮挡，在全反射区域体现为泄露。粗略近似中认为给定顶点情况下节点和像一一对应，可通过光学关系对节点的位置

映射。受影响的 PMT 大部分击中在以像为圆心的区域内，可以直观预测被影响的 PMT 并做出修正。

7.2.1 节点所成的像的计算

通过光的起点（顶点位置）和终点（击中 PMT 的位置）来反推光在何处从亚克力进入水是困难的，这是高次方程，会出现多解情况。在探测器中心可以近似认为光线直线传播，通过直接连接顶点与 PMT 的直线得到与亚克力球面的交点，查看该交点与节点的位置从而判断该 PMT 是否受遮挡。但是当顶点偏移到 10 m 时，考虑折射之后该方法预测会产生巨大的偏差。如果按照正向传播则会简化计算，考虑顶点位置及入射到亚克力球壳上的位置，可以根据菲涅尔定律写出出射光线的方程，预测光线与 PMT 所在平面的交点。

该过程的输入为光线的入射向量以及入射点 (x, y, z) 所在的法向量，给出出射方向向量。若入射点在球面上，法向量按照球面计算，即 (x, y, z) 。若入射点在节点侧面上，该点的两条切线为圆台的母线和圆形的切线，这两条线确定了该点所在的平面，其叉乘可得该平面的法向量。在节点与球面的交界处法线方向发生阶跃，意味着出射光线在此处不连续。



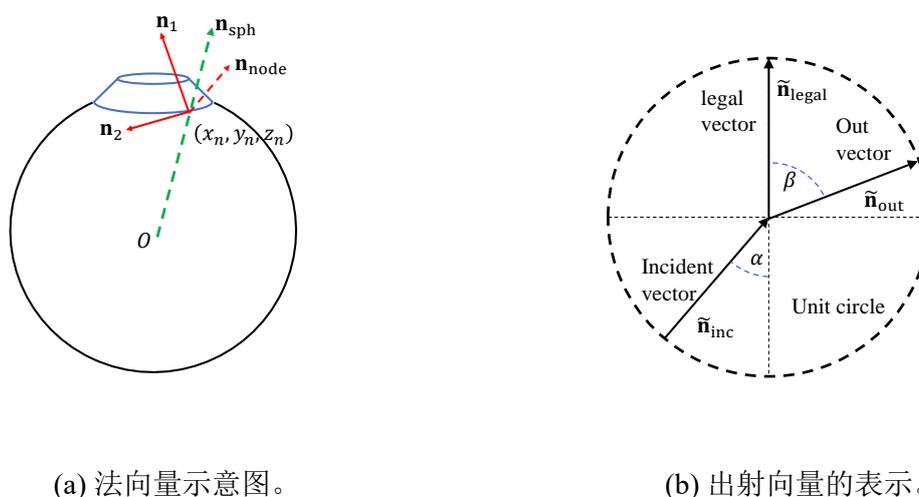
(a) 非全反射区域示意图。

(b) 全反射区域示意图。

图 7.8 节点所成的像。

给定顶点作为光源，若节点在非全反射区域，则计算支撑杆在该点下所成的像的位置，可由菲涅尔定律直接计算出。若节点位于全反射区域，选择节点斜面与球面的交线中的远点，寻找入射角最大的位置计算其以斜面为入射面的像。在绝大多数区域节点和像可以一一对应。

出射向量一定与入射向量与法线共面，因此可以直接用两个向量线性组合表示，该过程可以用菲涅尔定律结合几何关系表达出。为防止多解，保持入射向量和法线夹角为钝角，然后通过入射点与出射向量计算与 PMT 所在平面的交点。该



(a) 法向量示意图。

(b) 出射向量的表示。

图 7.9 出射光路计算示意图。

(a)展示了法向量选取。当出射点位于球面上时，其法向量方向即从球心指向球壳，对应图中的绿线。当出射点位于节点的侧面时，其法向量可根据斜面的母线和沿着圆台的切线又乘得到，对应图中的红线。(b)展示了使用菲涅尔定律用入射向量和法线表示出射向量，这两个向量易于得到且出射向量在这两个向量的平面内，因此可以表示为两者的线性组合。

交点的计算是二次方程，几何关系显示需要舍弃与出射向量反向的解。

选取节点的中心位置为特征点，其法向量按照球面计算。节点与球壳交界处等间隔的取 32 个点，其法向量按照球面和节点各计算一次。图7.6(a)–图7.6(c)是部分实际观测结果与预测图。在中心区域 ($<15.8\text{ m}$) 主要是遮挡效应，该计算过程较为简单，几乎可以完美预测各种结构的边缘信息。由于吸收重发射以及色散等作用，即使预测为 0 的地方也可能被光子击中。在近端这些边缘更加清晰。但是全反射区域的预测存在一定偏差，由于透射率等缘故，预测值很难和泄露效应的边缘完美吻合，但是透射率最大的点基本上处于泄露效应的区域中。鉴于预测的目的是为了找到一一对应的映射，因此在探测器中心选择节点中心的像，如果发生全反射无像则选取节点透射率最大的地方所成的像。

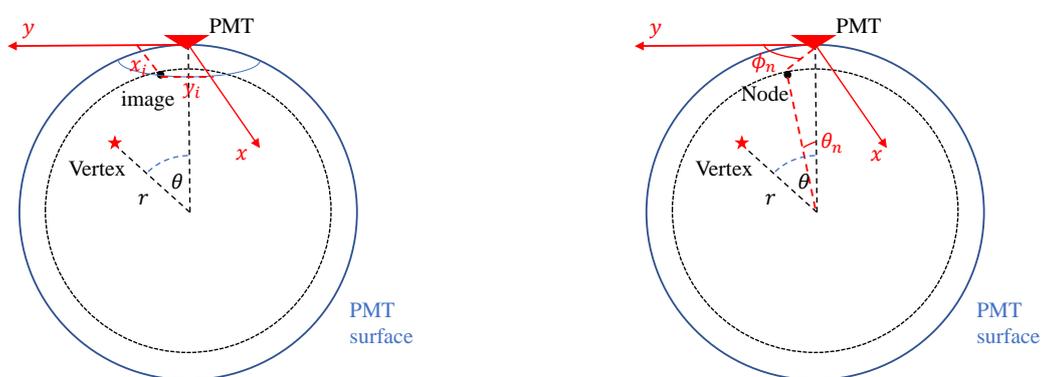
7.2.2 单节点修正模型研究

本小节讨论如何描述顶点、节点/节点的像以及 PMT 三者的位置关系。顶点和 PMT 的相对位置关系可以用两个自由度 r, θ 表示。将节点在此基础上扩展：由于节点所在的半径是固定的，故其与 PMT 的相对位置也仅由 θ 即可描述，另外还需要方位角描述与顶点-PMT-球心所在平面，故共需要四个自由度。本节从以下两种思路来建模：

- 由于相邻节点间的距离较大，在探测器的绝大部分区域内，每个 PMT 可以认为至多只受单个节点影响（顶点的半径小于 17 m ）。假设每个 PMT 受到距

离最近的像的影响，以 PMT 为坐标原点，在 PMT 与顶点确定的平面内，以顶点方向的切线为 y 轴，以垂直纸面向外为 x 轴，该像近似处于 xOy 平面内，然后计算其到 x, y 轴的距离近似为在投影在坐标中的位置，对 x_i, y_i 做直方图可以直接看出单个节点的影响范围以及各种遮挡/泄露效应。

- 计算节点投影需要一定的计算量。如果直接计算 PMT 与节点的位置关系将会节省不少时间，尽管可以限制有影响的节点在某个范围，但该范围内会有多个节点。我们把影响写为多个节点效应的叠加，并期望大部分情况下只有一个节点有影响。



(a) 使用节点的像扩展自由度。

(b) 使用节点扩展自由度。

图 7.10 对球对称模型的扩展。

以上为两种对球对称模型扩展自由度的思路。考虑节点之后，(a)通过寻找节点所成的像和 PMT 之间的关系来扩展自由度。(b)通过寻找节点和 PMT 之间的关系来扩展自由度。两图中灰色的虚线代表亚克力球壳所在平面，蓝色的线代表 PMT 所在的平面，图中的平面由顶点、探测器原点、PMT 确定，节点 (Node) 可以在该平面外。

PMT 的响应依赖于 4 个自由度，即 (r, θ, x_i, y_i) 。由于节点的对称性使得 x_i 是偶对称的，以下用 $|x_i|$ 代替。若给定四个值，假设其附近区间内 PE 和时间的期望相同。实际操作中，四个维度为别为

- $(r/r_{LS})^3$ ，范围 $[0,1]$ ，共 300 个区间。
- (z/r) ，范围 $[0,1]$ ，共 600 个区间。
- $|x_i|$ ，范围 $[0,10]$ ，共 100 个区间。
- y_i ，范围 $[-10,10]$ ，共 200 个区间。

为简化计算量，每给定一个 r 和 θ 的索引，便筛选出符合条件的顶点-PMT 对。对于某个 (r, θ, x_i, y_i) 的区间内，以 k 作为顶点-PMT 对的索引，观测到的 PE 数为 n_k ， k 可按 PMT 编号 j 重新索引为 k_j 或按照事例编号 i 重新索引为 k_i 。对应的能

量为 E_{k_i} 、量子效率为 η_{k_j} 。为将量子效率与能量解耦合，假设 $\bar{\lambda}$ 为 1 MeV 下未经 PMT 响应前击中 PMT 的期望光子数。由泊松分布的叠加性可知

$$\begin{aligned}\sum_k n_k &= \sum_k E_{k_i} \eta_{k_j} \bar{\lambda} \\ \Rightarrow \bar{\lambda} &= \frac{\sum_k n_k}{\sum_k E_{k_i} \eta_{k_j}}.\end{aligned}\quad (7.1)$$

实际 PE 数可由 $E_{k_i} \eta_{k_j} \bar{\lambda}$ 计算。该直方图可以扩展到时间维度，形式为

$$\bar{\lambda}(t) = \frac{\sum_k n_k(t)}{\sum_k E_{k_i} \eta_{k_j}}.\quad (7.2)$$

图7.11展示了部分修正结果。在中心处可以看到亮-暗-亮结构。随着半径增大，节点使光路发生折射和反射效应增强，部分位置的光强增加而另一部分位置减少。在 y 轴正半轴还可以看到支撑杆的遮挡。当进入全反射区域后，遮挡效应不再存在，而泄露效应使中心的观测值要远超其他平均值，这个信息有助于提升全反射区域的位置、能量分辨率。当靠近探测器边缘时，单个节点的影响范围从 $\sim 3\text{ m}$ 变为 $\sim 8\text{ m}$ 。空白的部分表示没有该位置对应关系的顶点-PMT-节点组合。从已有信息来看，这些近端的 PMT 往往在重建中权重较大，体现了节点修正的必要性。最后两个例子已经超出了有效体积范围，但对今后潜在的信号与 PMT 本底偶然符合的去掉同样有重要作用。

图7.11中左侧中间图显示了节点的泄露效应。在除中心外的区域其接收的 PE 都较低，而中心由于泄露效应 PE 通量大约是平均值的 5 倍左右。由于泄露效应导致光子直接到达 PMT 的比例增加，中心处的时间分布将会与周围有显著区别。选取中心的格点和中心向右平移 5 的格点，记为有节点影响和无节点影响，其分布如图7.12所示，验证了我们的猜想。

如果没有节点，该处顶点将会经过亚克力球壳中蓝色点的区域然后击中 PMT，但此处为全反射区域，大部分光子需要吸收重发射后才能被 PMT 接收。如果增加节点后，部分 PE 可以直接出射，因此极大的增加了 PMT 快速接收到 PE 的比例。在右图中，可以看到有节点时时间分布是一个尖锐的峰，其形状接近于发光时间谱，但无节点时 PMT 的峰值显著降低。

7.3 多节点修正模型研究

上述方法假设了单一节点的影响。在顶点靠近探测器边界 ($r > 17\text{ m}$) 的位置，有可能出现多个节点同时影响单个 PMT 的情况。以两个节点为例，其中每个节点

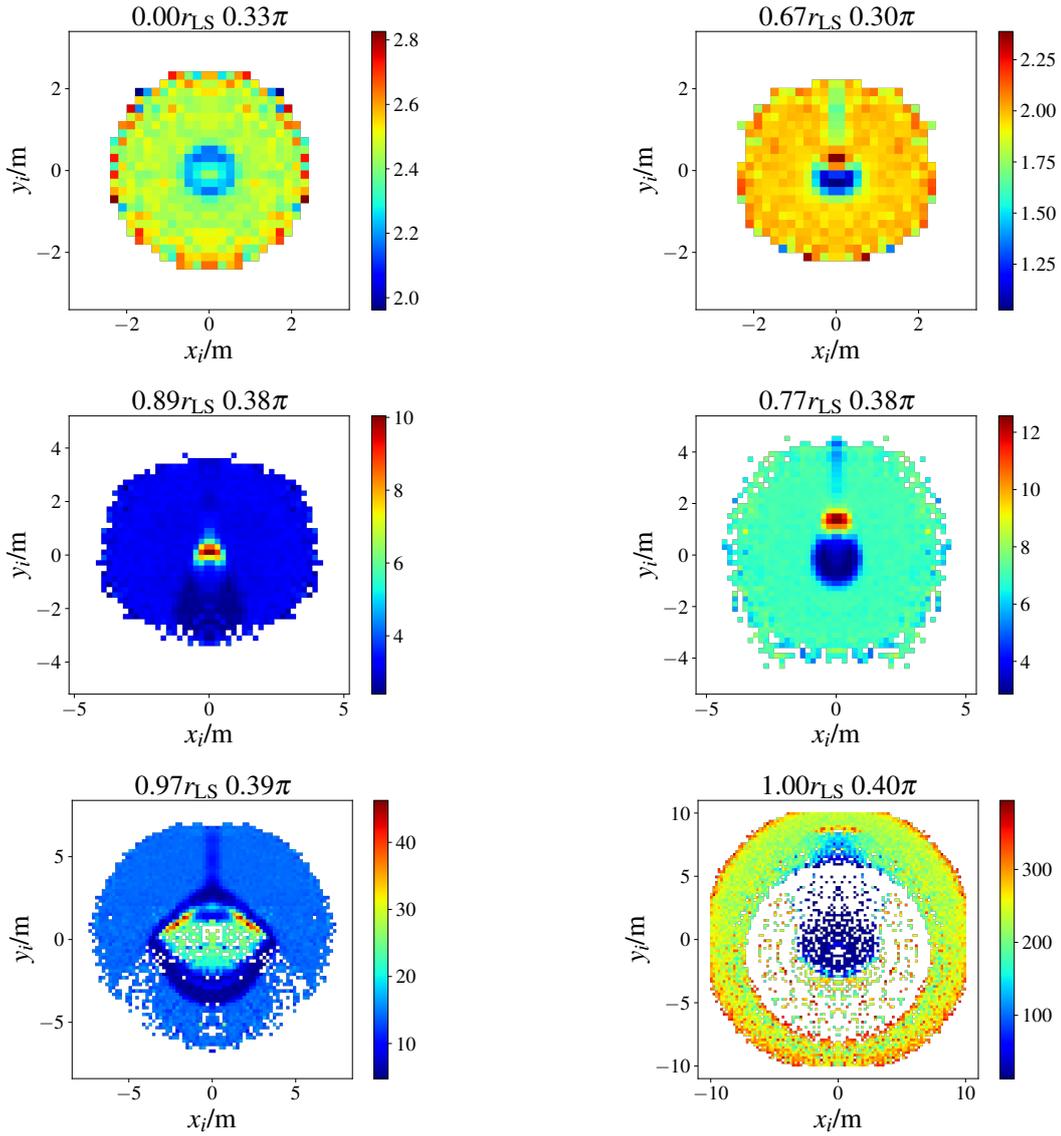


图 7.11 典型位置的节点修正示意图。

图片标题中分别为顶点和 PMT 位置计算出的 r, θ ，图中每一个像素位置代表该 r, θ 下的 x_i, y_i ，颜色代表期望光子数。可直接使用所有 r, θ 的结果作为四维插值函数用于重建。

遮挡或泄露了部分光线，可以引入 θ, ϕ 描述节点和 PMT 之间的相对关系。如果采用简单的加减法则使预测值丧失了非负约束，易受涨落影响。本工作采用平方修正项保证非负，假设修正项为 $f(\theta_n, \phi_n; r, \theta)$ ，则 PMT 上 PE 预测结果为

$$\lambda = \left[f(r, \theta) + \sum_i g(\theta_{n,i}, \phi_{n,i}; r, \theta) \right]^2. \quad (7.3)$$

由于 $f(r, \theta)$ 的结构复杂，使用回归方法会依赖基底的选择。本工作直接对 $g(\theta_n, \phi_n; r, \theta)$ 的直方图拟合，将得到的结果用于插值。其中

- θ_n : $[0, 0.45]$, 100 个区间

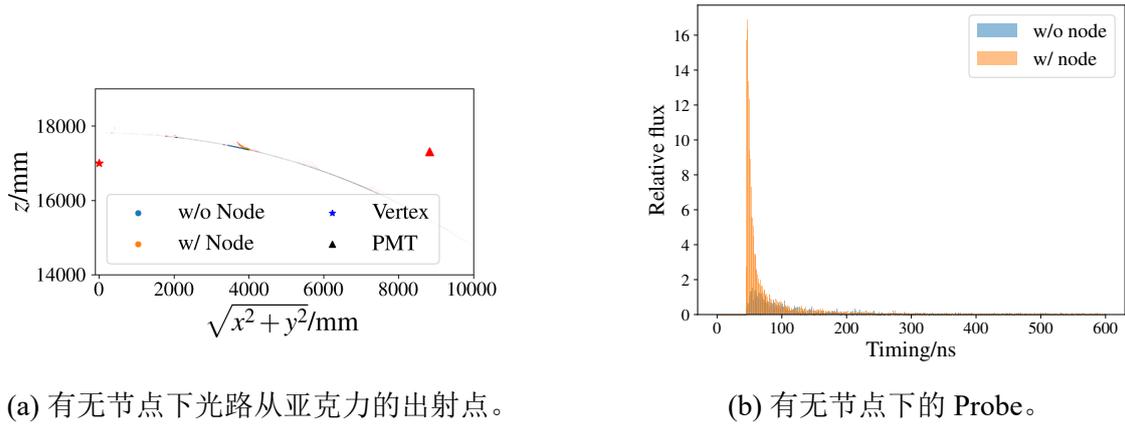


图 7.12 光子击中 PMT 的光路。

图(a)为从顶点（红色五角）到 PMT（红色三角）的光路。从 GEANT4 中提取光子位置的每一个 step，并记录了其经过亚克力外表面时候的位置。有无节点时分别对应橙色和蓝色的点。蓝色的点对应亚克力球壳，橙色的点有一个明显的弧形，对应了节点的表面。图(b)选定了有节点影响无节点影响的两个 PMT，其与顶点的相对位置关系即为图(a)所示，其击中时间的分布显示两者有显著差别。

- ϕ_n : [0, 0.3], 50 个区间

除此之外 $f(r, \theta)$ 也作为拟合参数，其平方可近似认为是无节点时期望 PE 数，因此共拟合 5001 个参数。实际操作中将所有 bin 的期望值和观测值使用泊松回归写为似然函数进行优化。初值选取 $f(r, \theta)$ 为无节点情况的平均值的平方根结果，所有的修正初始均为 0。该泊松回归的海森矩阵半正定，可以通过二阶矩信息进行凸优化加速。

实际上筛选出的 PMT 事例数可能远小于参数个数，实际中修正区间大部分为 0，问题的本质是稀疏回归。LASSO 是一种使用 1 范数正则化使回归结果稀疏的方法，目前大部分数值计算库都支持线性回归，但是对于广义线性回归模型还不够成熟。考虑到本工作中使用的光产额较高，统计量较大，因此将泊松回归在预处理时先近似为线性模型，LASSO 中正则化的系数设置为平均值的 1/1000。在某个 bin 中，当符合条件的顶点-PMT-节点较多时， $(r, \theta, \theta_n, \phi_n)$ 有足够的观测结果，可以减少约 60% 的参数。由于按照 θ 分 bin 可使近端远端模型更准确，但在三维球空间中会导致符合条件的顶点-PMT-节点事例数过少，统计量严重不足。除此之外，由于参数空间内可能有多个节点，拟合无法判断出哪个节点起作用时似然函数更好，并使得解严重依赖于涨落，导致稀疏回归无法返回正确的节点。事例在远端时，可以通过解析计算预测的节点可以对参数空间进行进一步约束，从而提升优化结果。

图 7.14 是 $r \approx 17\text{ m}$ 的高光产额事例。观测值已除以 PMT 各异的探测效率。如果使用球对称模型，PMT 的预测值仅和 θ 有关，但是单节点和多节点修正均一定程度预测了离群值。在预测值/真值的直方图中，大部分 PMT 的比值接近为 1，但

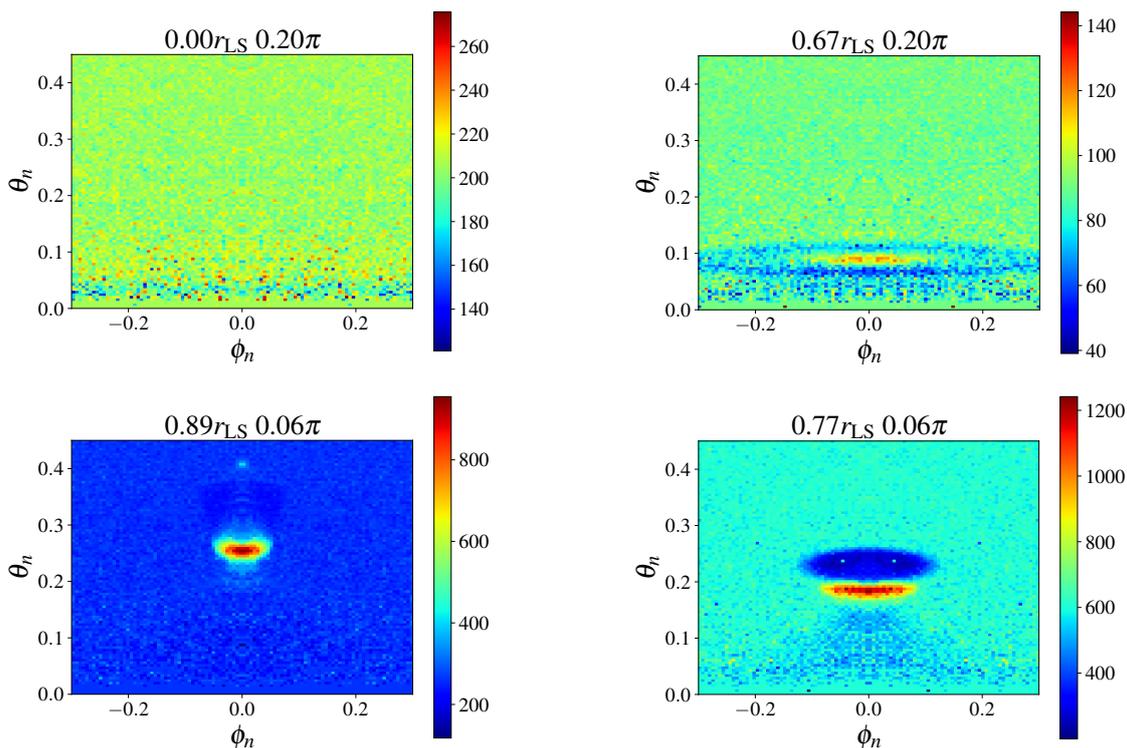
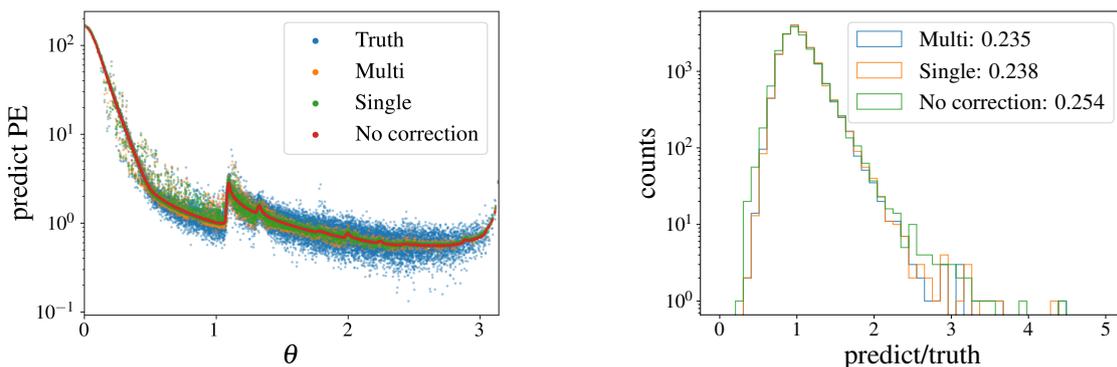


图 7.13 典型位置的多节点修正示意图。

图片标题中分别为顶点和 PMT 位置计算出的 r, θ ，图中每一个像素位置代表该 r, θ 下的 θ_n, ϕ_n ，颜色代表期望光子数。可直接使用所有 r, θ 的结果作为四维插值函数用于重建。

是少量 PMT 的偏差可达 6 倍左右。右图图例中的数字为该分布的不确定度。多节点与单节点相当，两者均好于无修正结果，但多节点在该事例稍好一点。在实际应用中，在部分位置的近端 $\theta \approx 0$ 会由于过于稀疏出现较大误差。



(a) 不同 θ 下 PMT 接收到的 PE 数。

(b) 预测 PE 除以真值的分布。

图 7.14 单个事例的修正结果。

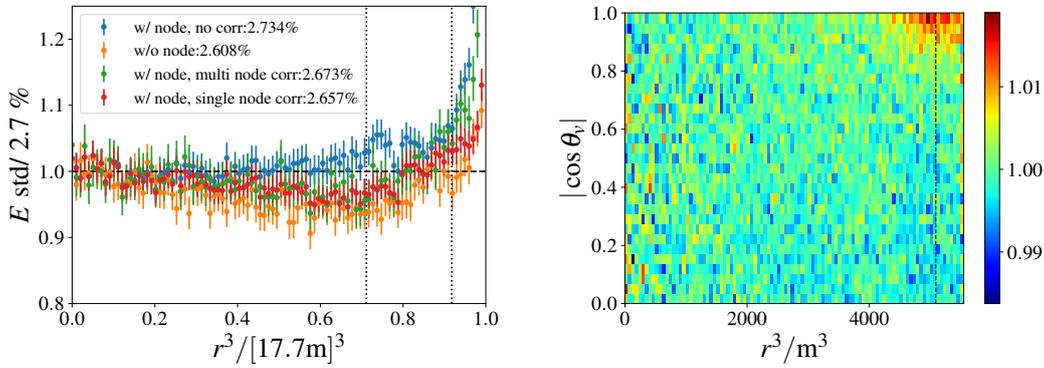
Multi 代表多节点修正结果，Single 代表单节点修正结果，No Correction 代表使用球对称模型得到的结果。(b)显示了预测 PE 除以真值的分布，其中的数字为一倍标准差，该事例中多节点修正效果更好。

由于全反射区域存在潜在的多个节点影响同一个 PMT 的情况，单节点模型等

价于多节点修正模型的零阶近似。多节点模型未来可以通过更准确的几何光学约束参数空间，从而减少选定范围内无效节点过多的干扰。

7.4 基于非球对称修正的重建结果提升

目前对 Probe 有球对称假设下的函数基拟合模型、蒙卡模型以及单节点、多节点修正模型。为检测其重建性能，本章分为单节点和多节点修正两种重建方法。为排除顶点不确定度的影响，首先仅使用顶点真值仅进行能量重建，结果如图 7.15(a) 所示，不加节点修正的能量分辨率为 2.74%，单节点和多节点分别为 2.66% 和 2.67%，故本章的重建结果使用单节点修正模型，其随顶点天顶角变化的重建效果如图 7.15(b) 所示，极大的减小了能量非均匀性。



(a) 不同节点修正方法的能量分辨率。

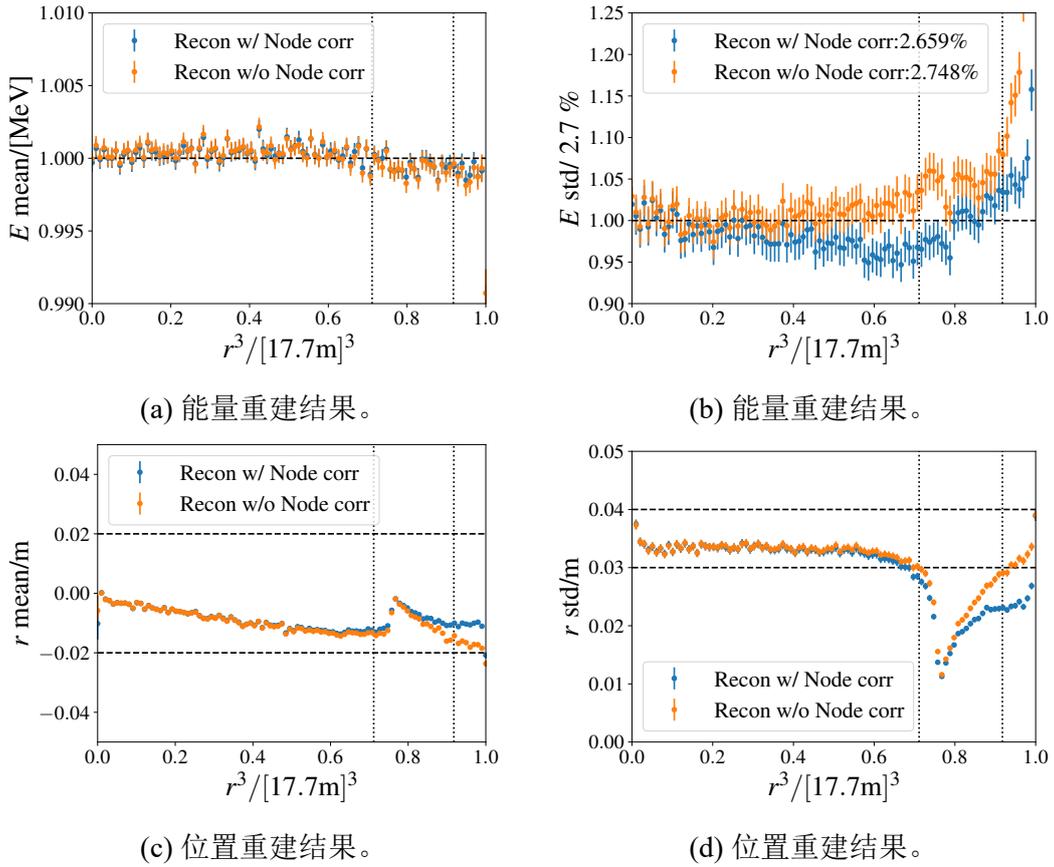
(b) 单节点修正的能量重建结果。

图 7.15 使用节点修正方法下的能量重建。

单节点修正的 PE 和仍使用球对称假设得到的时间信息组合，可以得到带有节点修正的 Probe 为 $R_{MC,node}$ ，可用于重建。联合重建需要给出三维的位置、起始时刻以及能量五个参数。在具体的优化中，能量可直接无偏估计从而减少一个维度。本研究中将位置约束在球壳内，并将时间限制在时间窗内 $([-1000, 1000])ns$ ，使用 SLSQP 算法^[100]进行带约束的优化。

在 JUNO 探测器中，时间信息对顶点不确定度的贡献最大。虽然 4 维修正可以获得每个位置的非齐次泊松强度流，但当前的数据量无法保证 4 维修正下时间维度的统计量，因此时间信息仍采用二维的结果作为平均效应。具体操作为将非齐次泊松强度流归一化获得时间维度的概率密度函数，然后乘修正的 PE 后作为 4 维修正的泊松强度流。

使用 $R_{MC,node}$ 重建的顶点几乎不会损失能量分辨率。以上算法由于复杂度有区别，计算速度为二维修正最快，四维修正最慢，因此可以采用不同层次的算法以适应快速重建和精确重建等不同阶段的需求。可以使用二维重建得到的顶点再独


 图 7.16 使用 $R_{MC,node}$ 的顶点、能量重建结果。

立进行一次能量重建。

目前 JUNO 使用的重建算法基于 J22 版本，其考虑了节点平均效应的修正，本文使用的版本简记为 J21。对于 1 MeV 电子，J22 版本探测器中心约有 1 660 PE/MeV，而 J21 为 1 470 PE/MeV。考虑到粒子类型差异导致的物理过程不同，我们选择不同版本均在探测器中心模拟 25000 个事例，并计算其 PE 数的标准差和均值，能量分辨率按照标准差除以均值估计。本文使用 J21 对 1 MeV e^- 的能量分辨率为 2.89%，而 J22 对 0 MeV e^+ 为 2.75%。假设能量分辨率的差异在探测器各个位置相当，我们以 3% 为基准，则两版本的相对能量分辨率差异在 5% 左右。本文对 1 MeV e^- 的能量分辨率为 2.66%，JUNO 目前给出对 0 MeV e^+ 结果约为 2.71%，相差约为 2%。 e^- 和 e^+ 的沉积能量比约为 1 : 0.9，粗略估算此处可能有约 7% 的能量分辨率提升空间，该工作的确认正在进行中。

7.5 本章小结

本章是通过非球对称修正对基于球对称模型推广的具体实例，讨论了 JUNO 探测器中节点的影响。如果不采取修正，能量分辨率约损失 3%。

视顶点为光源，基于菲涅尔定律，我们检查了节点对光路的影响主要包含“遮挡”和“泄露”效应，计算结果与模拟吻合。为了确定受影响的 PMT，我们计算了节点所成的像，建立起顶点-PMT-节点的相对位置关系，将 Probe 扩展到四维，并通过可视化模型证明与物理预期吻合，该模型为单节点修正。在此基础上，我们还将单节点影响的假设推广到数学上更严谨的多节点，但受限于实际数据分布，重建效果劣于单节点修正。单节点修正效果接近理论上限的 $\sim 3\%$ 。

在不考虑 TTS，初始粒子为电子的情形下，考虑节点修正的 Probe 在全反射区域的位置重建不确定度接近 1 cm。由于节点的存在，Probe 对全反射区域的顶点位置极其敏感。本文后续章节均使用 $R_{MC,node}$ 的 Probe 模型。得益于节点修正，第6章中在全反射区域对多点源重建的效果有显著提升。

第 8 章 对扩展到电子学过程的展望

在 JUNO 探测器中, PMT 是最重要的光学器件。共有 17612 个 20 英尺的大 PMT^[101], 包括 5000 个滨松生产的打拿级 PMT 和北方夜视生产的微通道板 (MCP-PMT), 使得覆盖率达到 75%。另外还有 25600 个 3 英寸的 PMT, 将覆盖率提升到 78%。三种 PMT 最大的不同体现在电子学部分, 基于探测器模拟的 Probe 形式上十分接近, 大 PMT 的 Probe 模型可以共享。本章介绍未来如何应用于不同电子学模型的 PMT。

8.1 PMT 原理简述

PMT 是用于将微弱的光子转化为电信号的光学器件, 其通用的设计思路如下: 光子击中光阴极后, 通过光电效应转化为 PE, 该过程的概率与光阴极的材料有关, 称为量子效率。随后 PE 在电场中加速, 进入到电子倍增的结构, 该过程也有一定概率, 称为收集效率。两者乘积为探测效率。这些结构可以将一个电子转化为多个电子。通过多次放大后形成可观的电子数目, 最终被阳极接收, 通过负载输出电压信号。

滨松生产的打拿级 PMT 的倍增部分由多个打拿级构成, 其工作原理如图所示。为了优化电场, PE 在倍增前需要经过栅网, 因此损失了一定的收集效率。北方夜视生产的 MCP-PMT 称为微通道板 PMT, 其放大的器件为一个圆盘状的玻璃布满大量毛细玻璃管, 表面涂有倍增材料。其工作原理如图所示。实际中使用两块圆盘串联使性能更好^[102]。

与打拿级 PMT 相比, 为了提升 PE 收集效率, 最新工艺将 PMT 中的微通道 (MCP) 上表面镀上电子反射层, 使得原本被上壁吸收的 PE 激发反射层生成 2-5 个次级电子, 称为 MCP 电子 (MCP e^-), 如图 8.1(a)。其收集效率更高, 由于通道板的距离较小, 因此其渡越时间更短, 其弥散 (TTS) 更小。但实际测量中存在单个 PE 电荷分布的“长尾畸形”^[103]。

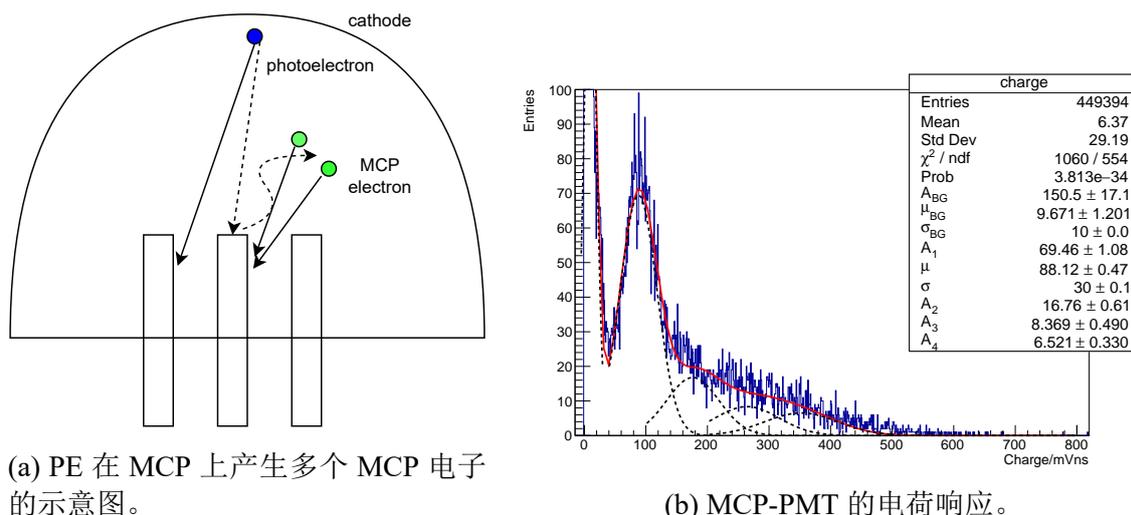
该“长尾畸形”的可能原因为: 圆盘中内壁和表面均可以倍增电子, 当电子未能直接打到毛细玻璃管中, 有几率打到表面直接进行倍增, 随后经过电场进入玻璃管或者继续倍增, 如图 8.1(a) 所示。当一个 PE 反射的多个 MCP e^- 都被收集, PMT 的会同时出现多倍单电子被放大的信号, 给出几倍的电荷量。图 8.1(b) 用四高

斯混合模型拟合了长尾电荷分布^[104], 拟合公式为

$$f(q) = \sum_i A_i \varphi\left(\frac{q - i\mu_q}{\sqrt{i}\sigma_q}\right) \quad (8.1)$$

$$\sum_i A_i = 1.$$

描述, 其中 $\varphi(\cdot)$ 是标准正态分布的概率密度函数。



(a) PE 在 MCP 上产生多个 MCP 电子的示意图。

(b) MCP-PMT 的电荷响应。

图 8.1 MCP-PMT 的原理及其电荷响应。

(a)中蓝色点为 PE, 绿色点为可能产生的多个 MCP 电子。(b)MCP-PMT 的长尾电荷分布图与式 (8.1) 的参数拟合结果, $A_{BG}, \mu_{BG}, \sigma_{BG}$ 描述波形基线暗噪声积分产生的高斯项, A_i, μ, σ 为混合高斯分布的参数。

本章对 MCP-PMT 的分析将基于该假设建立物理模型。

8.2 与小 PMT 电子学的对接

小 PMT 是打拿级 PMT, 不输出波形, 只输出波形积分的总电荷 q_j 和第一个 PE 的击中时间 t_j , 故需要改写当 PE 数大于 1 时形式需要改写 Probe 为第一个击中 PE 的概率模型。考虑共 n_j 个 PE, 在 $(-\infty, t_j)$ 内 PE 数为 0, 在 $(T_j, t_j + \Delta t)$ 内 PE 数为 1, 以及在 $(t_j + \Delta t, +\infty)$ 内 PE 数为有 $n_j - 1$, 用 Probe 改写其概率为:

$$\begin{aligned}
 p(n_j, t_j) &= \exp\left(-\int_{-\infty}^{t_j} R(t)dt\right) \times \exp(-R(t_j)\Delta t) R(t_j)\Delta t \\
 &\quad \times \frac{\exp\left(-\int_{t_j+\Delta t}^{+\infty} R(t)dt\right) \left[\int_{t_j}^{+\infty} R(t)dt\right]^{n_j-1}}{(n_j-1)!} \\
 &= \frac{\exp\left(-\int_{-\infty}^{+\infty} R(t)dt\right) R(t_j) \left[\int_{t_j}^{+\infty} R(t)dt\right]^{n_j-1}}{(n_j-1)!} \Delta t.
 \end{aligned} \tag{8.2}$$

对于某个事例, 如果已知第 j 个 PMT 的第一个 PE 时间 t_j 和 PE 数 N_j , 其对数似然函数改写如下:

$$\begin{aligned}
 \ln \mathcal{L} &\propto \ln \prod_j p(n_j, t_j) \\
 &= \sum_j \left\{ -\int_{-\infty}^{+\infty} R_j(t; r_j, \theta_j) dt + \ln R(t_j; r_j, \theta_j) + (n_j - 1) \ln \left[\int_{t_j}^{+\infty} R(t; r_j, \theta_j) dt \right] \right\}.
 \end{aligned} \tag{8.3}$$

以 t_j 为下界的积分按如下方式求解: 使用 `numpy` 中多项式模块中的勒让德函数类下的 `legmul` 函数首先将两个勒让德函数的乘积用一个表示, 然后用 `legint` 函数进行积分。

假设第 j 个 SPMT 的电荷 q_j 和 PE 数 n_j 之间服从如下高斯分布:

$$p(q_j | n_j) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_{n_j}} \exp\left[-\frac{1}{2} \left(\frac{q_j - Q_{n_j}}{\sigma_{n_j}}\right)^2\right]. \tag{8.4}$$

则利用全概率公式, 有

$$p(q_j, t_j) = \sum_{n_j} p(q_j | n_j) p(n_j, t_j). \tag{8.5}$$

可以得到基于电荷和第一击中 PE 的极大似然方程。该式形如对数内求和形式复杂, 一般计算有限的 n_j 就可以逼近结果。

8.3 与大 PMT 的电子学的对接

本文中的 Probe 基于所有 PE，因此要求波形重建的输入是时间序列向量 \mathbf{w} ，输出是时间序列 $\mathbf{z} := \{t_1, t_2, \dots, t_N\} \in T^N$ ， N 为 PE 数， $T \subseteq \mathbb{R}$ 。若为 MCP-PMT，则还需要返回每个时刻 PE 的个数，即 $\{(t_1, e_1), (t_2, e_2), \dots, (t_N, e_N)\}$ 。

8.3.1 打拿级 PMT 波形重建

为了更好的表示顶点重建的性能，我们使用如下过程：设 PMT 接收到的光强曲线为 $\mu\phi(t - t_0)$ ，通过 t_0 和 μ 来表征 \mathbf{z} 的重建效果^[75]。

$$\begin{aligned} p(\mathbf{w}|\mu, t_0) &= \sum_{\mathbf{z}} p(\mathbf{w}|\mathbf{z})p(\mathbf{z}|\mu, t_0) \\ &= p(\mathbf{w}|\emptyset)p(\emptyset|\mu, t_0) + \sum_{N=1}^{\infty} \int_{\mathbf{z} \in T^N} p(\mathbf{w}|\mathbf{z})p(\mathbf{z}|\mu, t_0)d\mathbf{z}. \end{aligned} \quad (8.6)$$

问题转化为已知波形重建 t_0 和 μ 并对隐变量 \mathbf{z} 进行采样。采样基于 MCMC 方法，以 Markov 链构造一组服从

$$p(\mathbf{z})d\mathbf{z} \propto p(\mathbf{w}|\mathbf{z})q(\mathbf{z})d\mathbf{z}. \quad (8.7)$$

分布的样本 $S = (s_1, s_2, \dots, s_M)$ 。其中 $q(\mathbf{z})d\mathbf{z}$ 是某个预先给定的分布，如其他波形重建方法给出的结果。

获得一组采样 S 的核心思路如下：设当前的状态为 N_i 个 PE 处于 s_i 上，定义产生、湮灭和移动三种操作各占 $Q, Q, 1 - 2Q$ 的概率。在产生操作中，待选的状态 X 是 $N_i \rightarrow N_i + 1$ 和 $s_i \rightarrow s_i \cup (\tau)$ 。在湮灭操作中，动作恰好与产生操作相反，以等概率 $1/N_i$ 去掉 s_i 中的某个元素 t_d 。在移动操作中，保持 s_i 的长度不变，以等概率选择一个 s_i 中的元素 t_d ，加上一个位移 $\Delta t \sim \mathcal{N}(0, 1)$ 。其概率计算较为复杂，可见附录 A.1 节。

若一个操作被接受，新状态成为 s_{i+1} ，否则 $s_{i+1} = s_i$ ，这样就获得了一次采样 $S = (s_1, s_2, \dots, s_M)$ 。多次采样后，以带有后验概率的所有击中 PE 时间序列采样输入到本文关注的重建中。

8.3.2 MCP-PMT 波形重建

MCP 将额外增加**复制**，**减少**两个操作，复制和减少代表 MCP e-的数目加一或减一。MCP PE 数目的转化概率 $p(e_{i'} \rightarrow e'_{i'})$ 为

$$\begin{array}{c}
 e_{i'} \rightarrow e'_{i'} \\
 1 \\
 2 \\
 3 \\
 4
 \end{array}
 \begin{array}{c}
 0(-\text{PE}) \\
 1 \\
 2 \\
 3 \\
 4 \\
 5(+\text{PE})
 \end{array}
 \begin{pmatrix}
 0.5 & \leftrightarrow & 0.5 \frac{A_2}{A_1} & & & 0.5 \left[1 - \frac{A_2}{A_1} \right] \\
 & 0.5 & \leftrightarrow & 0.5 \frac{A_3}{A_2} & & 0.5 \left[1 - \frac{A_3}{A_2} \right] \\
 & & 0.5 & \leftrightarrow & 0.5 \frac{A_4}{A_3} & 0.5 \left[1 - \frac{A_4}{A_3} \right] \\
 & & & 0.5 & \leftrightarrow & 0.5
 \end{pmatrix}. \quad (8.8)$$

其中 A 根据 (8.1) 得到。由于多高斯拟合的边界为 4，超过 4 时视为新产生一个 PE，此时与打拿级 PMT 的产生操作统一。该方法与传统的电荷积分法相比，单 PE 下估计的平均值可提升 10%^[104]。

8.3.3 Probe 与波形重建结果对接

如果将 Probe 和以上波形重建对接，根据全概率公式，有

$$p(w|x) = \sum_{t_j, n_j} p(w|t_j, n_j) p(t_j, n_j | \mathbf{r}). \quad (8.9)$$

将探测器部分和电子学部分分开建模是合理的。最终合成后一切位置 PE、time 等信息可以作为隐变量不在出现。如果使用 MCMC，整个流程中的概念都将成为带有后验概率的分布。本文未考虑渡越时间弥散 TTS，未来关注于不同 PMT 使用各异的 TTS 重建。

第9章 总结与展望

9.1 总结

为精确测量中微子的物理性质，液体闪烁体探测器可以满足下一代中微子探测器对更大的体积和更高的能量分辨率的需求。本文旨在通过研究新的重建算法提升液体闪烁体探测器中能量分辨率，可以应用于 JUNO 或类似实验。主要工作如下：

1. 根据电子事例的顶点特征建立了点源响应模型。为描述光子在探测介质中传播的非齐次泊松过程，该模型对这个过程采用 Zernike 和勒让德组合的多项式逼近。为了提高逼近的准确性，我们输入基于立体角和飞行时间作为先验信息。当用于训练的数据集较大时，可将数据集分成多个子集迭代求解。该逼近过程属于凸优化问题，可以利用基于海森矩阵的置信域法加速，最终可使逼近效果接近上限。以上优化方式可逼近任意尺寸的球形探测器中的点源响应模型。本文使用测试集对不同阶数下的逼近方式给出评价，也基于蒙特卡洛方法指出复杂的光学过程会使该逼近存在局限。为此，本文利用 GEANT4 模拟了液体闪烁体以外以水为屏蔽介质时的光学传播过程，研究了光子在全反射、多次反射等效应下的传播路径，指出不同顶点位置时主要存在的光路。对不同路径光子的传播分别用多指数函数描述，改进了光学传播过程的多项式逼近方法，实现了对优化流程的加速并提升模型精度。通过研究不同光学过程对顶点重建简并的影响，给出了下一代探测器避免出现重建简并的设计指标：探测器中距离任意顶点最近两个 PMT 的期望光电子比值不应大于 10。

2. 基于点源模型我们描述了多点源事例。中微子信号与任意本底混合包括了暗噪声、堆积和正电子事例，光子传播仍是非齐次泊松过程。通过构造基于该模型的似然函数，采用期望最大化算法以迭代形式重建了信号及其本底的能量和位置，该流程并未引入额外的复杂度。为研究信号与不同本底的重建性能极限，本文推导了不同时空距离下信号与本底的相关性，指出信号需与本底的余弦距离大于 0.1 才可分辨。该重建结果为理论上限：与时间窗法相比，我们发现在 JUNO 中该模型有助于剥离暗噪声对能量测量的贡献，由此相对提升了 1% 的能量分辨率。此外，对于堆积事例和正电子事例可借助该模型通过多点源的分辨能力提升 0.5%，是首次仅使用电子响应模型在重建层面描述正电子响应模型。

3. 把该模型进一步用于处理 JUNO 实验中内部支撑结构（节点）的影响，并基于其几何特征对模型添加了非球对称修正。通过研究节点对光子传播过程中方

向的改变，解释了基于球对称假设的点源响应对光电子数目预测的偏差。本文利用菲涅尔定律预测了受节点影响的光子范围，计算了节点在光学过程中所成的像。通过建立顶点-像-PMT 的相对位置关系定量研究了不同关系下的光学过程，以修正基于球对称假设的点源响应模型。修正后的模型可以精确预测节点影响下的 PE 数期望，用于重建可以提升3%的能量分辨率。

9.2 展望

综上所述，本文可将 JUNO 能量分辨率提升约2.5%~3%，可以减少 JUNO 约一年的采数时间。而第8章中精确的波形重建方法，尤其是对 MCP-PMT 的处理，有望进一步提升3%的能量分辨率，共计可减少 JUNO 约两年采数时间。

本文从模拟数据出发建立了精确的点源响应模型，着重于探测器模拟，得益于足够的统计量，本文研究了水-液闪探测器中复杂的光学传播过程、节点等结构对光路的改变等。未来需要考虑在校准数据的应用，主要有以下挑战：

- 校准数据统计量远小于本工作中蒙卡 Probe 的输入，如果继续在 r, θ, t 维度采用相同分区间的策略会使得大部分区间没有事例落入，使重建时受数值精度影响严重。基于此本文提出了“三指数”函数的拟合方法，该方法对今后的点源响应模型具有启发性。
- 校准数据的顶点难以在球探测器中均匀采样，顶点-PMT-节点的相对关系有限，对考虑节点修正的 Probe 建模提出巨大的挑战。
- 实际的校准源包含 e^+ 、激光等，本文提出的多点源重建方法可以从数学上将不同点源统一，但由于顶点分辨率等内禀性质，对于 e^+ 沉积能量的空间尺度 ($\sim 20\text{ cm}$) 难以区分，因此得到 e^- 的点源响应模型充满挑战。

本文希望通过探测器模拟与波形分析直接对接，最终目标是从波形出发，利用暗噪声甄别、多点源重建等技术，通过迭代直接得到探测器的点源响应函数。考虑到蒙卡数据与真实数据的不同，可以利用模拟数据作为先验，仅使用修正项拟合差异，有望满足实际数据的需求。修正项反应了蒙卡数据的偏差，有望反馈到模拟中有助于其提升精度。

受波形重建算法启发，混合模型中的点源数目也可以按照产生、湮灭操作发生变化，从而实现变点源个数的重建。该方法可以解决 e^+ 湮灭产物数量不固定的困难，其自由度可根据赤池信息量准则^[105]作为约束。如果能够区分负电子和正电子，将会进一步提升 IBD 的本底筛选效率。如果未来能够在多点源重建中通过相关性分析彻底剥离湮灭产物的影响而重建出正电子动能，能量分辨率将会显著提升。

参考文献

- [1] Pauli W. Pauli letter collection: letter to lise meitner[R]. 1930.
- [2] Fermi E. Versuch einer theorie der β -strahlen. i[J]. Zeitschrift für Physik, 1934, 88(3): 161-177.
- [3] Wang K C. A suggestion on the detection of the neutrino[J]. Physical Review, 1942, 61(1-2): 97.
- [4] Davis Jr R. Nuclear recoil following neutrino emission from beryllium 7[J]. Physical Review, 1952, 86(6): 976.
- [5] Cowan Jr C L, Reines F, Harrison F, et al. Detection of the free neutrino: a confirmation[J]. Science, 1956, 124(3212): 103-104.
- [6] Danby G, Gaillard J M, Goulianos K, et al. Observation of high-energy neutrino reactions and the existence of two kinds of neutrinos[J]. Physical Review Letters, 1962, 9(1): 36.
- [7] Kodama K, Saoulidou N, Tzanakos G, et al. Detection and analysis of tau–neutrino interactions in donut emulsion target[J]. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment, 2002, 493(1-2): 45-66.
- [8] An F, et al. Neutrino Physics with JUNO[J/OL]. Journal of Physics G: Nuclear and Particle Physics, 2016, 43(3): 030401. DOI: 10.1088/0954-3899/43/3/030401.
- [9] NuFIT. Neutrino fit values[EB/OL]. <http://www.nu-fit.org/>.
- [10] Redchuk M. Solar neutrino analysis with the borexino detector[C]//Journal of Physics: Conference Series: volume 1056. IOP Publishing, 2018: 012050.
- [11] Esteban I, Gonzalez-Garcia M, Maltoni M, et al. Updated fit to three neutrino mixing: exploring the accelerator-reactor complementarity[J]. Journal of High Energy Physics, 2017, 2017(1): 1-31.
- [12] Cleveland B T, Daily T, Davis R, Jr., et al. Measurement of the solar electron neutrino flux with the Homestake chlorine detector[J/OL]. Astrophys. J., 1998, 496: 505-526. DOI: 10.1086/305343.
- [13] Abdurashitov J N, Gavrin V N, Girin S V, et al. The russian-american gallium experiment (sage) cr neutrino source measurement[J/OL]. Phys. Rev. Lett., 1996, 77: 4708-4711. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.77.4708>.
- [14] Hampel W, et al. GALLEX solar neutrino observations: Results for GALLEX IV[J/OL]. Phys. Lett. B, 1999, 447: 127-133. DOI: 10.1016/S0370-2693(98)01579-2.
- [15] Altmann M, et al. Complete results for five years of GNO solar neutrino observations[J/OL]. Phys. Lett. B, 2005, 616: 174-190. DOI: 10.1016/j.physletb.2005.04.068.
- [16] Suzuki Y. Kamiokande solar neutrino results[J/OL]. Nucl. Phys. B Proc. Suppl., 1995, 38: 54-59. DOI: 10.1016/0920-5632(94)00733-C.
- [17] Abe K, Hagi Y, Hayato Y, et al. Solar neutrino measurements in super-kamiokande-iv[J/OL]. Phys. Rev. D, 2016, 94: 052010. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevD.94.052010>.

-
- [18] Aharmim B, Ahmed S, Anthony A, et al. Combined analysis of all three phases of solar neutrino data from the sudbury neutrino observatory[J]. *Physical Review C*, 2013, 88(2): 025501.
- [19] Ahmad Q R, Allen R, Andersen T, et al. Direct evidence for neutrino flavor transformation from neutral-current interactions in the sudbury neutrino observatory[J]. *Physical review letters*, 2002, 89(1): 011301.
- [20] Aharmim B, et al. Electron energy spectra, fluxes, and day-night asymmetries of B-8 solar neutrinos from measurements with NaCl dissolved in the heavy-water detector at the Sudbury Neutrino Observatory[J/OL]. *Phys. Rev. C*, 2005, 72: 055502. DOI: 10.1103/PhysRevC.72.055502.
- [21] Birks J B. *The Theory and practice of scintillation counting*[M]. 1964.
- [22] Alimonti G, Arpesella C, Back H, et al. Science and technology of Borexino: a real-time detector for low energy solar neutrinos[J/OL]. *Astroparticle Physics*, 2002, 16(3): 205-234. DOI: 10.1016/S0927-6505(01)00110-4.
- [23] Abe S. Precision Measurement of Neutrino Oscillation Parameters with KamLAND[J/OL]. *Phys. Rev. Lett.*, 2008, 100: 221803. DOI: 10.1103/PhysRevLett.100.221803.
- [24] Abdurashitov J N, Gavrin V N, Gorbachev V V, et al. Measurement of the solar neutrino capture rate with gallium metal. iii. results for the 2002–2007 data-taking period[J/OL]. *Phys. Rev. C*, 2009, 80: 015807. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevC.80.015807>.
- [25] Fukuda Y, Hayakawa T, Inoue K, et al. Solar neutrino data covering solar cycle 22[J/OL]. *Phys. Rev. Lett.*, 1996, 77: 1683-1686. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.77.1683>.
- [26] Kumaran S, Ludhova L, Penek Ö, et al. Borexino results on neutrinos from the sun and earth [J]. *Universe*, 2021, 7(7): 231.
- [27] Gando A, Gando Y, Hanakago H, et al. Be 7 solar neutrino measurement with kamland[J]. *Physical Review C*, 2015, 92(5): 055808.
- [28] Abe S, Furuno K, Gando A, et al. Measurement of the 8 b solar neutrino flux with the kamland liquid scintillator detector[J]. *Physical Review C*, 2011, 84(3): 035804.
- [29] Hayes A C, Vogel P. Reactor Neutrino Spectra[J/OL]. *Ann. Rev. Nucl. Part. Sci.*, 2016, 66: 219-244. DOI: 10.1146/annurev-nucl-102115-044826.
- [30] DeBenedetti S, Siegel R T. The three-photon annihilation of positrons and electrons[J/OL]. *Phys. Rev.*, 1954, 94: 955-959. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.94.955>.
- [31] Abe Y, Aberle C, Akiri T, et al. Indication of reactor $\bar{\nu}_e$ disappearance in the double chooz experiment[J/OL]. *Phys. Rev. Lett.*, 2012, 108: 131801. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.108.131801>.
- [32] Bak G, Choi J H, Jang H I, et al. Measurement of reactor antineutrino oscillation amplitude and frequency at reno[J/OL]. *Phys. Rev. Lett.*, 2018, 121: 201801. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.121.201801>.
- [33] An F P, et al. New measurement of θ_{13} via neutron capture on hydrogen at Daya Bay[J/OL]. *Phys. Rev. D*, 2016, 93(7): 072011. DOI: 10.1103/PhysRevD.93.072011.

-
- [34] Fukuda Y, Hayakawa T, Ichihara E, et al. Evidence for oscillation of atmospheric neutrinos [J/OL]. Phys. Rev. Lett., 1998, 81: 1562-1567. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.81.1562>.
- [35] Ahn M, Aliu E, Andringa S, et al. Measurement of neutrino oscillation by the k2k experiment [J]. Physical Review D, 2006, 74(7): 072003.
- [36] Adamson P, Anghel I, Aurisano A, et al. Combined analysis of ν_μ disappearance and $\nu_\mu \rightarrow \nu_e$ appearance in minos using accelerator and atmospheric neutrinos[J/OL]. Phys. Rev. Lett., 2014, 112: 191801. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.112.191801>.
- [37] Abe K, Akhlaq N, Akutsu R, et al. T2k measurements of muon neutrino and antineutrino disappearance using 3.13×10^{21} protons on target[J/OL]. Phys. Rev. D, 2021, 103: L011101. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevD.103.L011101>.
- [38] Adamson P, Aliaga L, Ambrose D, et al. Constraints on oscillation parameters from ν_e appearance and ν_μ disappearance in nova[J/OL]. Phys. Rev. Lett., 2017, 118: 231801. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.118.231801>.
- [39] Agafonova N, Alexandrov A, Anokhina A, et al. Final results of the opera experiment on ν_τ appearance in the cngs neutrino beam[J/OL]. Phys. Rev. Lett., 2018, 120: 211801. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.120.211801>.
- [40] Gariazzo S, et al. Neutrino mass and mass ordering: no conclusive evidence for normal ordering [J/OL]. JCAP, 2022, 10: 010. DOI: 10.1088/1475-7516/2022/10/010.
- [41] Abusleme A, et al. JUNO physics and detector[J/OL]. Progress in Particle and Nuclear Physics, 2022, 123: 103927. DOI: 10.1016/j.pnpnp.2021.103927.
- [42] Abe K, Akutsu R, Ali A, et al. Search for CP violation in neutrino and antineutrino oscillations by the t2k experiment with 2.2×10^{21} protons on target[J/OL]. Phys. Rev. Lett., 2018, 121: 171802. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.121.171802>.
- [43] Acero M A, Adamson P, Aliaga L, et al. First measurement of neutrino oscillation parameters using neutrinos and antineutrinos by nova[J/OL]. Phys. Rev. Lett., 2019, 123: 151803. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.123.151803>.
- [44] Yokoyama M. The Hyper-Kamiokande Experiment[C]//Prospects in Neutrino Physics. 2017.
- [45] Abi B, et al. Long-baseline neutrino oscillation physics potential of the DUNE experiment [J/OL]. Eur. Phys. J. C, 2020, 80(10): 978. DOI: 10.1140/epjc/s10052-020-08456-z.
- [46] Giuliani A, Cadenas J, Pascoli S, et al. Double beta decay appec committee report[J]. arXiv preprint arXiv:1910.04688, 2019.
- [47] Gando A, et al. Search for Majorana Neutrinos near the Inverted Mass Hierarchy Region with KamLAND-Zen[J/OL]. Phys. Rev. Lett., 2016, 117(8): 082503. DOI: 10.1103/PhysRevLett.117.082503.
- [48] Abe S, et al. First Search for the Majorana Nature of Neutrinos in the Inverted Mass Ordering Region with KamLAND-Zen[J]. 2022.
- [49] Albanese V, et al. The SNO+ experiment[J/OL]. JINST, 2021, 16(08): P08059. DOI: 10.1088/1748-0221/16/08/P08059.

- [50] Smirnov O Y, Agostini M, Appel S, et al. Measurement of neutrino flux from the primary proton–proton fusion process in the sun with borexino detector[J]. *Physics of Particles and Nuclei*, 2016, 47(6): 995-1002.
- [51] Decowski M, Collaboration K, et al. Kamland’s precision neutrino oscillation measurements [J]. *Nuclear Physics B*, 2016, 908: 52-61.
- [52] Li Z, Zhang Y, Cao G, et al. Event vertex and time reconstruction in large-volume liquid scintillator detectors[J/OL]. *Nuclear Science and Techniques*, 2021, 32(5): 1-12. DOI: 10.1007/s41365-021-00885-z.
- [53] Alimonti G, Arpesella C, Back H, et al. Science and technology of borexino: a real-time detector for low energy solar neutrinos[J]. *Astroparticle Physics*, 2002, 16(3): 205-234.
- [54] Settanta G, Agostini M, Altenmüller K, et al. First detection of cno neutrinos with borexino[J]. arXiv preprint arXiv:2105.09211, 2021.
- [55] Agostini M, Altenmüller K, Appel S, et al. First directional measurement of sub-mev solar neutrinos with borexino[J/OL]. *Phys. Rev. Lett.*, 2022, 128: 091803. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.128.091803>.
- [56] Eguchi K, Enomoto S, Furuno K, et al. First results from kamland: evidence for reactor antineutrino disappearance[J]. *Physical Review Letters*, 2003, 90(2): 021802.
- [57] Araki T, Eguchi K, Enomoto S, et al. Measurement of neutrino oscillation with kamland: Evidence of spectral distortion[J]. *Physical Review Letters*, 2005, 94(8): 081801.
- [58] Gando A, Gando Y, Ichimura K, et al. Constraints on θ_{13} from a three-flavor oscillation analysis of reactor antineutrinos at kamland[J]. *Physical Review D*, 2011, 83(5): 052002.
- [59] Shirai J, Collaboration K Z, et al. Results and future plans for the kamland-zen experiment[C]// *Journal of Physics: Conference Series: volume 888*. IOP Publishing, 2017: 012031.
- [60] Gando A, Gando Y, Hanakago H, et al. Reactor on-off antineutrino measurement with kamland [J]. *Physical Review D*, 2013, 88(3): 033001.
- [61] Cheng J P, et al. The China Jinping Underground Laboratory and its Early Science[J/OL]. *Ann. Rev. Nucl. Part. Sci.*, 2017, 67: 231-251. DOI: 10.1146/annurev-nucl-102115-044842.
- [62] Beacom J F, Chen S, Cheng J, et al. Letter of Intent: Jinping Neutrino Experiment[J/OL]. *Chinese Phys. C*, 2017, 41(2): 023002. DOI: 10.1088/1674-1137/41/2/023002.
- [63] Zhao L, et al. Measurement of muon-induced neutron production at China Jinping Underground Laboratory[J/OL]. *Chinese Physics C*, 2022. DOI: 10.1088/1674-1137/ac66cc.
- [64] Wang Z, Wang Y, Wang Z, et al. Design and analysis of a 1-ton prototype of the Jinping Neutrino Experiment[J/OL]. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment*, 2017, 855: 81-87. DOI: 10.1016/j.nima.2017.03.007.
- [65] Guo Z, Yeh M, Zhang R, et al. Slow liquid scintillator candidates for MeV-scale neutrino experiments[J/OL]. *Astroparticle Physics*, 2019, 109: 33-40. DOI: 10.1016/j.astropartphys.2019.02.001.

- [66] Agostinelli S, Allison J, Amako K, et al. Geant4—a simulation toolkit[J/OL]. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment, 2003, 506(3): 250-303. <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0168900203013688>. DOI: [https://doi.org/10.1016/S0168-9002\(03\)01368-8](https://doi.org/10.1016/S0168-9002(03)01368-8).
- [67] Abusleme A, et al. TAO Conceptual Design Report: A Precision Measurement of the Reactor Antineutrino Spectrum with Sub-percent Energy Resolution[J/OL]. 2020. DOI: 10.48550/arXiv.2005.08745.
- [68] Djurcic Z, et al. JUNO Conceptual Design Report[J]. 2015.
- [69] Abusleme A, et al. Sub-percent Precision Measurement of Neutrino Oscillation Parameters with JUNO[J]. 2022.
- [70] Apollonio M, et al. Search for neutrino oscillations on a long baseline at the CHOOZ nuclear power station[J/OL]. Eur. Phys. J. C, 2003, 27: 331-374. DOI: 10.1140/epjc/s2002-01127-9.
- [71] Birks J B. Scintillations from Organic Crystals: Specific Fluorescence and Relative Response to Different Radiations[J/OL]. Proc. Phys. Soc. A, 1951, 64: 874-877. DOI: 10.1088/0370-1298/64/10/303.
- [72] Čerenkov P A. Visible radiation produced by electrons moving in a medium with velocities exceeding that of light[J/OL]. Phys. Rev., 1937, 52: 378-379. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.52.378>.
- [73] Richardson W H. Bayesian-based iterative method of image restoration*[J/OL]. J. Opt. Soc. Am., 1972, 62(1): 55-59. <https://opg.optica.org/abstract.cfm?URI=josa-62-1-55>. DOI: 10.1364/JOSA.62.000055.
- [74] Lucy L B. An iterative technique for the rectification of observed distributions[J/OL]. Astron. J., 1974, 79: 745-754. DOI: 10.1086/111605.
- [75] Xu D C, Xu B D, Bao E J, et al. Towards the ultimate PMT waveform analysis for neutrino and dark matter experiments[J/OL]. Journal of Instrumentation, 2022, 17(06): P06040. DOI: 10.1088/1748-0221/17/06/p06040.
- [76] Qian Z, Belavin V, Bokov V, et al. Vertex and energy reconstruction in JUNO with machine learning methods[J/OL]. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment, 2021: 165527. DOI: 10.1016/j.nima.2021.165527.
- [77] Bohm G, Zech G. Statistics of weighted Poisson events and its applications[J/OL]. Nucl. Instrum. Meth. A, 2014, 748: 1-6. DOI: 10.1016/j.nima.2014.02.021.
- [78] Kim H S. Finding an Event Vertex by Using a Weighting Method at RENO[J/OL]. New Phys. Sae Mulli, 2012, 62(6): 631-635. DOI: 10.3938/NPSM.62.631.
- [79] Wu W, He M, Zhou X, et al. A new method of energy reconstruction for large spherical liquid scintillator detectors[J/OL]. JINST, 2019, 14(03): P03009. DOI: 10.1088/1748-0221/14/03/P03009.
- [80] Huang G, Wang Y, Luo W, et al. Improving the energy uniformity for large liquid scintillator detectors[J/OL]. Nucl. Instrum. Meth. A, 2021, 1001: 165287. DOI: 10.1016/j.nima.2021.165287.

-
- [81] Galbiati C, McCarty K. Time and space reconstruction in optical, non-imaging, scintillator-based particle detectors[J/OL]. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment*, 2006, 568(2): 700-709. DOI: 10.1016/j.nima.2006.07.058.
- [82] Noll R J. Zernike polynomials and atmospheric turbulence[J/OL]. *JOSA*, 1976, 66(3): 207-211. DOI: 10.1364/JOSA.66.000207.
- [83] Antonello J. Zernike polynomials[EB/OL]. <https://github.com/jacopoantonello/zernike>.
- [84] Nelder J A, Wedderburn R W M. Generalized linear models[J/OL]. *Journal of the Royal Statistical Society. Series A (General)*, 1972, 135(3): 370-384[2022-09-01]. <http://www.jstor.org/stable/2344614>.
- [85] Davino C, Furno M, Vistocco D. Quantile regression: Theory and applications[M/OL]. Wiley, 2013. <https://books.google.de/books?id=PaMLAQAAQBAJ>.
- [86] Gould N I, Lucidi S, Roma M, et al. Solving the trust-region subproblem using the lanczos method[J]. *SIAM Journal on Optimization*, 1999, 9(2): 504-525.
- [87] Lenders F, Kirches C, Potschka A. trlib: A vector-free implementation of the gltr method for iterative solution of the trust region problem[J]. *Optimization Methods and Software*, 2018, 33(3): 420-449.
- [88] Hastie T, Tibshirani R, Friedman J. The elements of statistical learning: Data mining, inference, and prediction[M/OL]. Springer New York, 2013. <https://books.google.de/books?id=yPfZBwAAQBAJ>.
- [89] Tu Y. Optic simulation[EB/OL]. <https://ricktu288.github.io/ray-optics/simulator/>.
- [90] Stock M R. Measuring the fluorescence time profile of the juno liquid scintillator using gamma radiation and a pulsed neutron beam[EB/OL]. https://juno.ihep.ac.cn/Dev_DocDB/0058/005801/004/TUMPosterNeutrino2020.pdf.
- [91] Abe K, Hiraide K, Ichimura K, et al. Development of low radioactivity photomultiplier tubes for the XMASS-I detector[J]. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment*, 2019, 922: 171-176.
- [92] Abe, et al. XMASS detector[J/OL]. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment*, 2013, 716: 78-85. DOI: 10.1016/j.nima.2013.03.059.
- [93] Alimonti G, et al. Light propagation in a large volume liquid scintillator[J/OL]. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment*, 2000, 440(2): 360-371. DOI: 10.1016/S0168-9002(99)00961-4.
- [94] Bishop C M, Nasrabadi N M. Pattern recognition and machine learning: volume 4[M]. Springer, 2006.
- [95] Wei G C G, Tanner M A. A monte carlo implementation of the em algorithm and the poor man's data augmentation algorithms[J/OL]. *Journal of the American Statistical Association*, 1990, 85(411): 699-704[2022-10-18]. <http://www.jstor.org/stable/2290005>.
- [96] Tierney L. Markov chains for exploring posterior distributions[J]. *the Annals of Statistics*, 1994: 1701-1728.

-
- [97] Geman S, Geman D. Stochastic relaxation, gibbs distributions, and the bayesian restoration of images[J/OL]. IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence, 1984, PAMI-6(6): 721-741. DOI: 10.1109/TPAMI.1984.4767596.
- [98] Hastings W K. Monte Carlo sampling methods using Markov chains and their applications [J/OL]. Biometrika, 1970, 57(1): 97-109. <https://doi.org/10.1093/biomet/57.1.97>.
- [99] Kampmann P, Ludhova L. Reduction of the 14c-background in the jun0 experiment[J]. Hyperfine interactions, 2019, 240(1): 1-4.
- [100] Kraft D. A software package for sequential quadratic programming[M]. Tech Rep DFVLR-FB 88-28, 1988.
- [101] Abusleme A, et al. Mass Testing and Characterization of 20-inch PMTs for JUNO[J]. 2022.
- [102] Hamamatsu. Photomultiplier tubes[EB/OL]. https://www.hamamatsu.com/content/dam/hamamatsu-photonics/sites/documents/99_SALES_LIBRARY/etd/PMT_handbook_v3aE.pdf.
- [103] Zhang H Q, et al. Gain and charge response of 20" MCP and dynode PMTs[J/OL]. JINST, 2021, 16(08): T08009. DOI: 10.1088/1748-0221/16/08/T08009.
- [104] Zhang A. Waveform analysis for 8 inch mcp-pmt using gibbs mcmc[EB/OL]. <https://indico.kps.or.kr/event/30/contributions/558/#preview:1223>.
- [105] Akaike H. A new look at the statistical model identification[J/OL]. IEEE Transactions on Automatic Control, 1974, 19(6): 716-723. DOI: 10.1109/TAC.1974.1100705.
- [106] Schniter P, Potter L C, Ziniel J. Fast bayesian matching pursuit[C/OL]//2008 Information Theory and Applications Workshop. 2008: 326-333. <https://ieeexplore.ieee.org/document/4601068>. DOI: 10.1109/ITA.2008.4601068.

附录 A 附录

A.1 波形重建方法

设 PMT 接收到的光强曲线为 $\mu\phi(t - t_0)$ ，光电子 (photoelectron, PE) 数为 N ，各光电子时间为 $\mathbf{z} := (t_1, t_2, \dots, t_N) \in T^N$ ， $T \subseteq \mathbb{R}$ ，波形 \mathbf{w} 是时间序列向量。那么，

$$\begin{aligned} p(\mathbf{w}|t_0, \mu) &= \widetilde{\sum}_{\mathbf{z}} p(\mathbf{w}|\mathbf{z})p(\mathbf{z}|t_0, \mu) \\ &= p(\mathbf{w}|\emptyset)p(\emptyset|t_0, \mu) + \sum_{N=1}^{\infty} \int_{\mathbf{z} \in T^N} p(\mathbf{w}|\mathbf{z})p(\mathbf{z}|t_0, \mu)d\mathbf{z}. \end{aligned} \quad (\text{A.1})$$

其中的 $\widetilde{\sum}$ 是一种不严格的跨维度的“加和”， $d\mathbf{z} = dt_1 dt_2 \dots dt_N$ 。每一个 \mathbf{z} 都是光电子电荷的一种模型。我们无法穷尽 \mathbf{z} 的所有可能。Schniter^[106] 在 Fast Bayesian Matching Pursuit (FBMP) 中取一个典型集 Ω ，包含大多数使 $p(\mathbf{w}|\mathbf{z})p(\mathbf{z}|t_0, \mu)$ 较大的 \mathbf{z} ，从而

$$p(\mathbf{w}|t_0, \mu) \approx \widetilde{\sum}_{\mathbf{z} \in \Omega} p(\mathbf{w}|\mathbf{z})p(\mathbf{z}|t_0, \mu). \quad (\text{A.2})$$

但是只要 Ω 不够完美，就会出现 μ 估计的偏差。

在本文中，我们尝试使用 Metropolis-Hastings 方法，以 Markov 链构造一组服从

$$p(\mathbf{z})d\mathbf{z} \propto p(\mathbf{w}|\mathbf{z})q(\mathbf{z})d\mathbf{z} \quad (\text{A.3})$$

分布的样本 $S = (s_1, s_2, \dots, s_M)$ 。其中 $q(\mathbf{z})d\mathbf{z}$ 是某个预先给定的分布，它可以是由我们事先猜出的 μ_0 和 t_{00} 给出的 $p(\mathbf{z}|\mu_0, t_{00})d\mathbf{z}$ 。但为了防止 $p(\mathbf{z}|\mu_0, t_{00}) = 0$ 的值影响 (A.4) 式的计算，也可以取 t_0 均匀的 $q(\mathbf{z}|\mu_0)d\mathbf{z} = \frac{e^{-\mu_0} \mu_0^N}{N!} \frac{d\mathbf{z}}{\lambda(T)^N}$ ，其中 $\lambda(T)$ 是 T 的测度。

$p(\mathbf{w}|t_0, \mu)$ 可以由

$$\begin{aligned} p(\mathbf{w}|t_0, \mu) &= \widetilde{\sum}_{\mathbf{z}} p(\mathbf{w}|\mathbf{z})q(\mathbf{z}) \frac{p(\mathbf{z}|t_0, \mu)}{q(\mathbf{z})} \\ &= C E_{\mathbf{z}} \left[\frac{p(\mathbf{z}|t_0, \mu)}{q(\mathbf{z})} \right] \\ &\approx C \frac{1}{M} \sum_{i=1}^M \frac{p(s_i|t_0, \mu)}{q(s_i)} \end{aligned} \quad (\text{A.4})$$

估算。其中 C 是一个与 μ 和 t_0 无关的常数。 μ 和 t_0 的估计量为

$$(\hat{t}_0, \hat{\mu}) = \arg \max_{(t_0, \mu)} p(\mathbf{w}|t_0, \mu). \quad (\text{A.5})$$

下面我们讨论如何使用 Metropolis-Hastings 方法取得一组 \mathbf{z} 的采样 \mathcal{S} 。设当前的状态为 N_i 个 PE 处于 \mathbf{s}_i 上，定义“产生”、“湮灭”和“移动”三种操作，各占 $Q, Q, 1 - 2Q$ 的概率。

在产生操作中，待选的状态 X 是 $N_i \rightarrow N_i + 1$ 和 $\mathbf{s}_i \rightarrow \mathbf{s}_i \cup (\tau)$ 。 τ 是新产生 PE 的位置，服从 $h(\tau)d\tau$ 的分布。以

$$\min \left\{ 1, \frac{p(\mathbf{s}_i \cup (\tau)) \frac{1}{N_i+1}}{p(\mathbf{s}_i) h(\tau)} \right\} \quad (\text{A.6})$$

的概率选择 X 。其中 $p(\mathbf{s}_i)$ 由 (A.3) 式取为 $p(\mathbf{w}|\mathbf{s}_i)p(\mathbf{s}_i|\mu_0, t_{00})$ 。

在湮灭操作中，动作恰好与产生操作相反，以等概率 $1/N_i$ 去掉 \mathbf{s}_i 中的某个元素 t_d 。以

$$\min \left\{ 1, \frac{p(\mathbf{s}_i \setminus (t_d)) h(t_d)}{p(\mathbf{s}_i) \frac{1}{N_i}} \right\} \quad (\text{A.7})$$

概率接受该操作。

在移动操作中，保持 \mathbf{s}_i 的长度不变，以等概率选择一个 \mathbf{s}_i 中的元素 t_d ，加上一个位移 $\Delta t \sim \mathcal{N}(0, 1)$ 。以

$$\min \left\{ 1, \frac{p(\mathbf{s}_i \setminus (t_d) \cup (t_d + \Delta t))}{p(\mathbf{s}_i)} \right\} \quad (\text{A.8})$$

概率接受该操作。

若一个操作被接受，新状态成为 \mathbf{s}_{i+1} ，否则 $\mathbf{s}_{i+1} = \mathbf{s}_i$ 。这样我们就获得了一个可用于 (A.4) 式计算的 Markov 链 $\mathcal{S} = (\mathbf{s}_1, \mathbf{s}_2, \dots, \mathbf{s}_M)$ 。

致 谢

衷心感谢陈少敏教授、续本达教授和王喆教授对本人的悉心指导。他们将我引入中微子的大门，让我领略到物理的魅力，并能把自己热衷的算法研究应用其中。在研究过程中，他们鼓励我在发散思维的同时也要保持严谨。同时对我严格要求，让我极大的改正了自己浮躁和“不求甚解”的工作方式。这些课题充满了趣味和挑战，让我在解决问题中获得了成就感，没有虚度自己的博士生活。

同时感谢周建锋教授的指导，他扩展了我思维的广度，言传身教使我受益终身。

波形重建的研究由续本达教授、王宇逸、武益阳、张爱强、徐大成等同学主导。制作 Probe 的过程中刘学伟协助模拟并论证了立体角和飞行时间修正、并研究了小 PMT 重建算法等，武益阳协助推导了海森矩阵，王宇逸进行了 GPU 的加速。

感谢万林焱、郭子溢、郭磊对 JSAP 模拟软件的开发。感谢 JUNO 合作组中模拟软件的开发人员，以及为我答疑解惑的罗武鸣老师、黄桂鸿师兄、于淼、蒋炜、张豪森等同学。感谢上海交大黄俊挺教授、Akira Takenaka 师兄和我的讨论。

感谢张凌老师、万林焱师姐、郭磊师兄、郭子溢师兄、李进京师兄、骆文泰师兄、赵林师兄、梁晔、邵文辉、王宇逸、翁俊、武益阳、徐彤、杨玉梓、张爱强、张彬等老师同学的帮助，感谢实验室的全体老师和同学的帮助和支持！

感谢侯钦瀚，刘仲智，周诗伟，余泽等同学在我失落的时候对我的鼓励。感谢张宗煜同学对科学计算的指导和服务器的维护。

再次感谢续本达老师，自指导我本科毕设相识已六年有余，带我学习使用参数回归并在此基础上提出了 Probe 模型，成为我的核心工作。在随时可进行的讨论中他引导我将多点源重建的灵感落实到严格的数学模型，启发我完成了重建简并和节点修正的研究。多年来不断帮我协调和升级计算资源、加速程序，让我能快速验证算法。他充满热情的工作方式极大地鼓舞了我。同时也感谢李文娟师姐对我的关照。

感谢家人和女朋友对我的鼓励和支持，让我有信心挑战难题。

本课题承蒙国家自然科学基金资助，特此致谢。

声 明

本人郑重声明：所提交的学位论文，是本人在导师指导下，独立进行研究工作所取得的成果。尽我所知，除文中已经注明引用的内容外，本学位论文的研究成果不包含任何他人享有著作权的内容。对本论文所涉及的研究工作做出贡献的其他个人和集体，均已在文中以明确方式标明。

签 名： 突威 日 期： 2022.10.25

个人简历、在学期间完成的相关学术成果

个人简历

1994年10月30日出生于内蒙古自治区土默特右旗。

2013年9月考入清华大学工程物理系，2017年7月本科毕业并获得工学学士学位。

2017年9月免试进入清华大学工程物理系攻读核科学与技术博士至今。

在学期间完成的相关学术成果

学术论文：

[1] 无

专利：

[2] 无

指导教师学术评语

中微子探测器大都采用液体闪烁体探测器技术，而且为了屏蔽来自探测器外部本底，在其外部会包裹一层较厚的液体屏蔽层。这种结构导致了中微子反应产生的信号通过液体闪烁体、屏蔽层，然后达到光电倍增管阴极表面这一过程中，涉及了较为复杂的光学过程，对反应事例的能量测量有直接的影响。论文针对这个问题展开深入研究，根据中微子反应产生末态电子的事例特征，利用回归方法建立了探测器的点源响应模型，给出了事例重建的一种新方法。论文还借助蒙特卡罗方法，研究了水-液闪探测器内复杂的光学传播过程及其特点。这对于提高球形中微子探测器的事例重建精度具有重要的意义。

论文主要工作涉及的算法研究比较多，尤其是同时研究信号与本底的效应，以及探测器非对称结构的对均匀性的影响，等等。这些对于能量测量精度在百分之几的情况下尤其重要。预期该论文的成果对于将液体闪烁体中微子探测器研究具有很好的应用价值。

这些工作具有较好的创新性，我认为达到了清华大学博士论文的水平。

答辩委员会决议书

论文提出了……

论文取得的主要创新性成果包括：

1. ……

2. ……

3. ……

论文工作表明作者在 ××××× 具有 ××××× 知识，具有 ×××× 能力，论文 ××××，
答辩 ××××。

答辩委员会表决，（× 票/一致）同意通过论文答辩，并建议授予 ×××（姓名）
×××（门类）学博士/硕士学位。