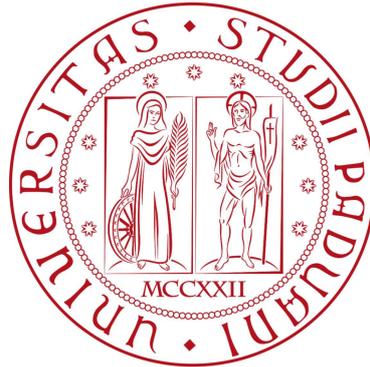


Università degli Studi di Padova  
Dipartimento di Scienze Statistiche

Corso di Laurea Magistrale in  
Scienze Statistiche



# **Uso della cattura $k$ nella tomografia muonica**

Relatore Dott. Tommaso Dorigo  
INFN, Sezione di Padova

Laureanda: Sara De Vidi  
Matricola N: 2054752

Anno Accademico 2023/2024



# Sommario

Un'esigenza comune a diversi settori quali l'archeologia, la geologia e la diagnosi medica è rappresentata dalla necessità di indagare la composizione interna di volumi incogniti. Qualora non sia possibile o non si voglia sezionare il materiale, per perseguire tale scopo si ha l'esigenza di ricostruire un'immagine del volume di interesse mediante l'utilizzo di metodologie non invasive. Questa tematica è ampiamente trattata con l'uso di diverse tecniche, diversificate a seconda del contesto di applicazione.

Il presente lavoro è pertanto finalizzato a sondare l'applicabilità di un possibile approccio di imaging mediante tomografia muonica, che sfrutta un processo fisico ad oggi poco approfondito per questo fine: la *cattura k*. Tale processo si verifica quando un muone negativo cade nel nucleo di un atomo, ove trasforma un protone in un neutrone, dando luogo ad un'emissione di fotoni. La dipendenza della fenomenologia dal tipo di atomo è allora utile ad estrarre informazioni sulla composizione del materiale interessato.

In primo luogo, ipotizzando di voler analizzare la composizione di un volume, si è realizzato un modello di simulazione volto ad ottenere dati generati dal fenomeno di *cattura k*, con l'obiettivo successivo di studiarne la composizione atomica.

Successivamente, si è ideata una metodologia statistica che sfrutta l'algoritmo EM, al fine di produrre una mappa tridimensionale della composizione elementare del volume. La metodologia suggerita fa uso, in particolare, delle energie dei fotoni prodotte quando il muone penetra nel nucleo.

Il metodo di imaging proposto, a differenza della classica tomografia muonica, ha la peculiarità di discriminare le diverse specie atomiche, con la possibilità di distinguere persino la loro composizione isotopica. Si tratta di una tecnica che potrebbe rivelarsi utile in un gran numero di settori, pur se con alcune limitazioni. Ad esempio, non sarebbe possibile applicarla efficacemente per studiare un materiale troppo spesso e/o denso, a causa della scarsa probabilità che i fotoni emessi nel processo riescano a fuoriuscire dal volume incognito ed essere rivelati. Al contrario, considerando la densità media del corpo umano, potrebbe rivelarsi una tecnica valida per la diagnosi medica, realizzando un passo in avanti nelle tecniche di imaging terapeutico.

Il codice che ha prodotto la simulazione, i risultati, l'inferenza e i grafici mostrati in questa tesi è stato scritto interamente nel linguaggio R (Venables, Smith e R Core Team 2023).

# Indice

<b>Indice</b>	<b>v</b>
<b>1 Introduzione</b>	<b>1</b>
1.1 Il muone . . . . .	1
1.1.1 Fonti di muoni . . . . .	2
1.2 La tomografia muonica . . . . .	3
1.3 Il problema di imaging e applicazioni mediche . . . . .	4
<b>LA CATTURA K COME STRUMENTO PER L'IMAGING</b>	<b>7</b>
<b>2 La cattura k</b>	<b>9</b>
2.1 Fenomenologia . . . . .	9
2.2 Potenziali osservabili . . . . .	10
<b>IL MODELLO DI SCANSIONE CON CATTURA K</b>	<b>13</b>
<b>3 Modello e Simulazione</b>	<b>15</b>
3.1 Ipotesi di lavoro e modellazione del volume incognito . . . . .	15
3.2 Simulazione e ottenimento dei dati . . . . .	17
<b>4 Risultati del Modello</b>	<b>31</b>
4.1 Distribuzioni all'interno del volume dei muoni incidenti e dei fotoni rivelati . . . . .	33
4.2 Distribuzioni rivelabili dell'energia dei fotoni dai diversi elementi .	39
<b>UN POSSIBILE APPROCCIO AL PROBLEMA INVERSO</b>	<b>41</b>
<b>5 Il problema inverso e la sua risoluzione</b>	<b>43</b>
5.1 Algoritmo EM . . . . .	44

<b>6</b>	<b>Applicazione dell'algoritmo EM per l'identificazione atomica</b>	<b>49</b>
6.1	Notazione . . . . .	49
6.2	Ipotesi sul processo generatore dei dati . . . . .	50
6.3	E-step . . . . .	53
6.4	M-step . . . . .	54
6.5	Scelta della distribuzione delle energie condizionate allo spessore di provenienza . . . . .	55
6.6	Scelta dei parametri legati alla profondità di stop del muone . . . . .	61
<b>7</b>	<b>Risultati su dati simulati</b>	<b>65</b>
	<b>FUTURI SVILUPPI</b>	<b>73</b>
<b>8</b>	<b>Miglioramenti possibili al modello</b>	<b>75</b>
8.1	Trattazione dettagliata della propagazione dei fotoni nel materiale .	75
8.2	Decadimento dei muoni . . . . .	75
8.3	Spettri dei fotoni . . . . .	76
8.4	Perdita di energia dei muoni nel materiale . . . . .	76
<b>9</b>	<b>Perfezionamento dell'algoritmo EM per l'identificazione atomica</b>	<b>79</b>
<b>10</b>	<b>Conclusioni</b>	<b>85</b>
	<b>Bibliografia</b>	<b>87</b>
	<b>APPENDICE</b>	<b>89</b>
<b>A</b>	<b>Risultati inferenza</b>	<b>91</b>
<b>B</b>	<b>Codice R</b>	<b>93</b>
B.1	Simulazione . . . . .	93
B.1.1	Creazione della geometria . . . . .	93
B.1.2	Processo <i>Cattura k</i> . . . . .	95
B.2	Inferenza . . . . .	99

# Elenco delle figure

1.1	Decadimento del muone nel vuoto. . . . .	2
2.1	Rappresentazione grafica del fenomeno cattura k. $E_1$ , $E_2$ e $E_3$ indicano i diversi livelli energetici. . . . .	10
2.2	Decadimento del muone in un nucleo per cattura k. . . . .	10
3.1	Rappresentazione grafica della geometria utilizzata nella simulazione. A sinistra viene posto il piano di rivelatore, a destra il volume incognito. Muoni e fotoni sono rappresentati, rispettivamente, dai vettori in rosso ( $\Rightarrow$ ) e azzurro ( $\Leftarrow$ ). . . . .	17
3.2	Sistema di coordinate sferiche. . . . .	21
3.3	Spettro di raggi X muonici simulato da un "uomo standard". Figura tratta da Rosen 1971. . . . .	23
3.4	Spettro di raggi X muonici ipotizzato nella simulazione per carbonio, silicio e ferro. . . . .	24
3.5	Sezione d'urto della produzione di coppie elettrone-positrone, dell'effetto fotoelettrico e dell'effetto Compton in funzione dell'energia su un bersaglio di rame. . . . .	25
3.6	Lunghezza di assorbimento $\lambda$ in funzione dell'energia dei fotoni $E_\gamma$ . La linea nera (—) rappresenta le funzioni stimate mediante regressione, i punti in grigio (•) i valori osservati ( <i>NIST: X-Ray Mass Attenuation Coefficients - Table 3 2004</i> ). . . . .	29
3.7	Lunghezza di assorbimento $\lambda$ in funzione dell'energia dei fotoni $E_\gamma$ . La linea verde (—) rappresenta la curva per il carbonio, la blu (—) per il silicio e la rossa (—) per il ferro. A sinistra sono riportati i valori originali osservati interpolati da semplici linee, a destra vengono mostrate le funzioni stimate su tali punti. . . . .	30
3.8	Esempio di uscita del fotone, rappresentato dal vettore in azzurro ( $\Leftarrow$ ), da un insieme di 8 voxels di carbonio, silicio e ferro. . . . .	30

4.1	Istogramma delle energie dei fotoni complessivamente rivelate dal piano di rivelatore. . . . .	32
4.6	Vengono rappresentate: la composizione atomica del volume (■ carbonio, ■ silicio, □ ferro); la quantità di muoni che si fermano nel volume incognito (si fa riferimento al totale dei muoni generati, e non solo quelli che sono stati visti dal detector); la quantità di fotoni rivelati provenienti da ciascun voxel. Tutte le rappresentazioni elencate vengono mostrate al variare degli strati del volume sull'asse z. . . . .	38
4.7	Istogrammi delle energie dei fotoni rivelate dal detector, provenienti da 4 voxels distinti affiancati lungo l'asse $x$ (informazioni note dalla simulazione). In rosso (—) si sovrappone la funzione di densità teorica da cui queste sono state generate. . . . .	40
4.8	Confronto fra funzione di ripartizione empirica (—) e teorica (—). La funzione di ripartizione empirica si è ottenuta con le energie dei fotoni rivelate dal detector provenienti da 4 voxels distinti affiancati lungo l'asse $x$ (informazioni note dalla simulazione); la funzione di ripartizione teorica è ricavata dalla funzione di densità teorica da cui le energie sono state generate. . . . .	40
5.1	Fascio di muoni incidenti nel volume, rappresentato dal vettore in rosso (→). I possibili voxels in cui i muoni possono essersi fermati sono mostrati in giallo (■). . . . .	44
7.1	Istogramma delle energie dei fotoni complessivamente rivelate dal piano di rivelatore. . . . .	66
7.2	Istogramma delle energie dei fotoni rivelate dal detector a seguito dell'incisione di un fascio di muoni su un materiale spesso 1 cm, composto da solo carbonio, silicio o ferro. In rosso (—) si sovrappone la funzione di densità parametrica scelta, rispettivamente, $f(E_i S_{ji} = 1; z_{1ij} = 1)$ , $f(E_i S_{ji} = 1; z_{2ij} = 1)$ o $f(E_i S_{ji} = 1; z_{3ij} = 1)$ . . . . .	69

7.3	Rappresentazione del volume al variare degli strati dello stesso sull'asse z. Viene mostrata la composizione atomica reale del volume (■ carbonio, ■ silicio, □ ferro) e, in rosso (□), i voxels per i quali l'algoritmo ha identificato un numero atomico differente da quello reale. . . . .	70
7.4	Istogramma delle energie realmente provenienti da un voxel di carbonio, locato allo spessore con coordinata centrale $x = 25.5$ . Si sovrappone la distribuzione teorica ottenuta per il carbonio (—) e quella ottenuta per il ferro (—). . . . .	70
7.5	Rappresentazione del volume al variare degli strati dello stesso sull'asse z. I valori in rosso mostrano la quantità di fotoni realmente provenienti da ciascun voxel. . . . .	71
9.1	Rappresentazione del volume al variare degli strati dello stesso sull'asse z. Viene mostrata la composizione atomica reale del volume (■ carbonio, ■ silicio, □ ferro) e, in rosso (□), i voxels per i quali l'algoritmo ha identificato un numero atomico differente da quello reale. . . . .	83

## Elenco delle tabelle

A.1	Stime ottenute con l'algoritmo EM secondo quanto descritto al Capitolo 7 per l'identificazione atomica del volume. . . . .	91
A.2	Stime ottenute con l'algoritmo EM secondo quanto descritto al Capitolo 7 per l'identificazione atomica del volume. . . . .	92

## Elenco dei codici

B.1	Creazione della geometria necessaria alla simulazione (Capitolo 3). . . . .	93
B.2	Simulazione del processo di <i>cattura k</i> mediante un fascio di muoni che incide in un volume (Capitolo 3). . . . .	95

B.3	Algoritmo EM per l'identificazione atomica di un volume incognito (Capitolo 7). . . . .	99
-----	--	----

Il presente capitolo ha l'obiettivo di fornire dei brevi cenni sulla teoria fisica alla base dei fenomeni trattati, per poter introdurre in seguito agevolmente l'argomento e gli scopi di questo elaborato. Si introducono quindi in primo luogo i muoni, particelle elementari sulla base delle quali tutto il lavoro di questa tesi è fondato. Si presentano successivamente diverse tecniche di tomografia muonica, dando un quadro generale dello stato dell'arte attuale. Infine, ciò che è stato in precedenza delineato, viene contestualizzato nell'ambito dell'imaging per eventuali applicazioni mediche, illustrando l'utilità del metodo proposto in tale circostanza.

## 1.1 Il muone

Il muone è una particella elementare simile all'elettrone. Sostanzialmente, è possibile pensare al muone come ad una replica pesante dell'elettrone, vista la sua massa circa 200 volte maggiore, pari a  $m = 105.6583755 \pm 0.0000023$  MeV (Workman 2022). È possibile distinguere tra muoni negativi ( $\mu^-$ ) e positivi ( $\mu^+$ ), con carica elettrica negativa e positiva rispettivamente.

I muoni non esistono nella materia ordinaria ma si creano nell'atmosfera a causa dei raggi cosmici: particelle cariche provenienti dal cosmo, in maggioranza protoni e nuclei di atomi leggeri, interagiscono con le molecole di ossigeno o azoto negli strati alti dell'atmosfera, formando così altre particelle secondarie (tipicamente pioni e kaoni). Queste decadono in volo producendo muoni e questi ultimi, grazie al loro potere penetrante, possono poi raggiungere il suolo. Tuttavia, è altresì possibile produrre muoni in laboratorio mediante collisioni energetiche, ad esempio si possono impiegare fasci di protoni incidenti su bersaglio fisso.

Il muone, a differenza dell'elettrone, è caratterizzato dal fatto di essere instabile con una vita breve: possiede una vita media, in un sistema di riferimento in cui il muone è a riposo, di 2.2 microsecondi. La sua instabilità fa sì che questo decada spontaneamente in un elettrone ( $e^-$ ), un neutrino muonico ( $\nu_\mu$ ) e un antineutrino elettronico ( $\bar{\nu}_e$ ), oppure, in un positrone ( $e^+$ ), un neutrino elettronico ( $\nu_e$ ) e un antineutrino muonico

( $\bar{\nu}_\mu$ ), a seconda che il muone abbia carica negativa o positiva, come mostrato in Figura 1.1, dove  $W$  è il bosone dell'interazione debole emesso dal muone.

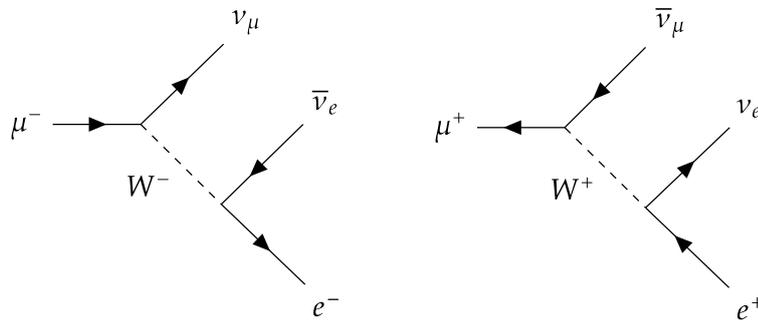


Figura 1.1: Decadimento del muone nel vuoto.

### 1.1.1 Fonti di muoni

La più semplice fonte di muoni a cui si può pensare è quella che semplicemente sfrutta i raggi cosmici, che possono essere impiegati per la scansione di zone molto vaste grazie alla presenza costante di muoni prodotti nell'atmosfera. Nello specifico, questa presenza è, a livello del mare, pari a un flusso di circa un muone per centimetro quadrato al minuto. L'utilizzo di questa fonte ha anche un notevole vantaggio: i muoni prodotti appartengono ad un intervallo di energie molto ampio, anche superiore a quello ottenibile con la tecnologia degli acceleratori di particelle (*Percorso Raggi Cosmici | OCRA 2020*).

I raggi cosmici però non sono l'unica possibilità. Infatti, è possibile produrre i muoni sfruttando collisioni energetiche. In particolare, un fascio di protoni, se fatto collidere verso un bersaglio, dà luogo alla produzione di due particelle: neutrini e pioni. I pioni successivamente decadono in breve tempo in muoni. I muoni prodotti possono poi essere accelerati, consentendo di gestirne l'energia con la quale questi poi verranno emessi (Hillier, Paul e Ishida 2016).

Ad oggi si stanno sviluppando acceleratori compatti di muoni, che permettono anche la produzione degli stessi mediante il meccanismo Bethe-Heitler (*Making Muons for Scientific Discovery, National Security 2022*). Il meccanismo Bethe-Heitler non utilizza i protoni come sopra menzionato, ma sfrutta l'annichilazione di positroni energetici con elettroni in un bersaglio per materializzare coppie di muoni positivi e negativi.

Questo è possibile solo se i positroni hanno un'energia incidente al di sopra di circa 40 GeV.

### Unità di misura dell'energia

L'unità di misura fondamentale dell'energia in fisica delle particelle è l'elettron-Volt (eV). Si tratta dell'energia cinetica che acquista un elettrone nell'attraversare, nel vuoto, una differenza di potenziale di 1 Volt.

Essendo l'elettron-Volt una quantità molto piccola, solitamente si fa uso dei suoi multipli, tra cui i più utilizzati sono:

- ▶ kiloelettronvolt:  $1 \text{ keV} = 10^3 \text{ eV}$ ;
- ▶ Megaelettronvolt:  $1 \text{ MeV} = 10^6 \text{ eV}$ ;
- ▶ Gigaelettronvolt:  $1 \text{ GeV} = 10^9 \text{ eV}$ ;
- ▶ Teraelettronvolt:  $1 \text{ TeV} = 10^{12} \text{ eV}$ .

## 1.2 La tomografia muonica

La tomografia comprende diverse tecniche che mirano alla ricostruzione di un'immagine tridimensionale, pertanto il suo utilizzo spazia negli ambiti più disparati, quali l'archeologia, la geologia e la diagnosi medica (per una recente panoramica in questo ambito si veda Bonechi, D'Alessandro e Giammanco (2020)). La tomografia muonica si differenzia per l'utilizzo di muoni, con l'obiettivo di riprodurre immagini di volumi incogniti sfruttando i raggi cosmici. I muoni provenienti dai raggi cosmici sono in grado di attraversare spessori notevoli di materiale, anche di alcuni chilometri, consentendo lo studio di molti aspetti ambientali in svariati settori. L'utilizzo dei raggi cosmici per scansionare aree di interesse estese è possibile grazie all'intensità di muoni che arrivano al suolo: circa un muone ogni centimetro quadrato al minuto.

L'idea alla base della tomografia muonica è lo sfruttamento della proprietà dei muoni di interazione con materiali densi. Ciò porta allo sviluppo di due tecniche, che mirano entrambe a ricostruire una mappa di densità dell'oggetto che si vuole analizzare: la tecnica di scattering e la tecnica di assorbimento.

La prima si basa sul fatto che quando i muoni attraversano un oggetto denso, deviano maggiormente rispetto a quando passano attraverso materiali meno densi. Questa proprietà permette di ricostruire un'immagine delle diverse densità nel volume

complessivo di interesse. Ciò viene effettuato utilizzando dei rivelatori posti sopra e sotto il volume, questi permettono la ricostruzione della direzione di ciascun muone proveniente dai raggi cosmici. Ricostruendo in un secondo momento l'angolo tra la direzione in entrata nel volume e la direzione in uscita, si è in grado di quantificare la deflessione del muone, che sarà informativa sulla densità della regione attraversata da questo. Indispensabile è l'alta energia dei muoni provenienti dai raggi cosmici che incidono nel volume incognito. Infatti, un'elevata energia consente che questi vengano visti da entrambi i rivelatori, senza essere assorbiti dal materiale.

La tecnica di assorbimento, invece, consiste nell'individuare quelle zone dell'oggetto sotto analisi in cui i muoni che lo attraversano vengono maggiormente fermati nella materia. Queste zone saranno quelle corrispondenti ad una maggiore densità del volume attraversato dai muoni. In questo caso, quindi, si necessita di un solo rivelatore di raggi cosmici, posto a lato o al di sotto dell'oggetto che si vuole analizzare mediante il flusso di muoni provenienti dalla parte opposta. Dunque le direzioni dei muoni rivelati sono informative sulle zone meno dense del volume che si sta analizzando (*Percorso Raggi Cosmici | OCRA 2020*).

### 1.3 Il problema di imaging e applicazioni mediche

La tomografia muonica fa uso dei muoni provenienti dai raggi cosmici, in quanto l'obiettivo finale negli ambiti di applicazione è generalmente la scansione di aree estese. Questo limita il campo di utilizzo, escludendo il settore medico, dove l'interesse è solitamente limitato all'analisi di poche decine di centimetri, dove il fine può essere quello di effettuare l'imaging di un tumore in modo del tutto non invasivo. In quest'ultimo caso si rende necessario l'utilizzo di appositi acceleratori di muoni che, regolando un'adeguata energia, consentano a questi di fermarsi nel volume scansionato. Infatti, l'utilizzo dei raggi cosmici per la scansione di volumi contenuti è limitante vista l'intensità del flusso di muoni, che risulta piuttosto debole se l'area di analisi è circoscritta a pochi centimetri.

La bassa densità del corpo umano e l'area ridotta da analizzare possono essere sfruttate positivamente prendendo in considerazione un fenomeno, diverso dallo scattering e dall'assorbimento, capace comunque, in linea di principio, di ricreare un'immagine tridimensionale di un volume: la *cattura k*.

La *cattura k*, descritta dettagliatamente nel Capitolo 2, diversamente dai fenomeni sfruttati nella classica tomografia muonica, permette di discriminare i diversi tipi di atomi che compongono un volume che è di interesse scansionare. Lo studio di questo processo permette quindi di andare oltre una semplice mappa di densità dei tessuti, rendendo il fenomeno utile nella medicina diagnostica e la ricerca fisiopatologica in condizioni come, ad esempio, l'osteoporosi, l'emocromatosi, la sindrome di Wilson o l'avvelenamento da metalli pesanti (Hosoi et al. 1995).

Un eventuale punto a favore dell'utilizzo della *cattura k* nella tomografia muonica è la possibilità di una minore dose di radiazione fornita al tessuto rispetto ad altre tecniche attualmente in uso. L'idea di irradiare il tessuto con un fascio di muoni per effettuare un'analisi della relativa composizione atomica risale al 1970 (Lundy 1970). Sono molte le argomentazioni a favore del metodo menzionate all'epoca utili in ambito medico. Principalmente viene evidenziato come, in teoria, tale tecnica permetta di ottenere, in vivo, precise analisi elementari della composizione del tessuto, vista la ridotta dose di radiazione assorbita dal paziente. Ciò nonostante, le tecnologie disponibili all'epoca limitarono lo sviluppo della tecnica.

Le metodologie terapeutiche e diagnostiche attuali si limitano all'utilizzo di particelle che rilasciano maggiore energia nel tessuto sano rispetto a quanto farebbero i muoni. Tuttavia, una comparazione dettagliata dell'uso di muoni rispetto a quello di ioni carbonio o protoni, oppure raggi gamma, non è al momento disponibile.

Va notato che la *cattura k* potrebbe essere particolarmente utile nel caso si riuscisse a sfruttare l'identificazione di specie nucleari particolari, che potrebbero essere assorbite dai tessuti che si ha interesse a mappare. Ad esempio, l'uso della PET (Tomografia a Emissione di Positroni) consiste nell'ottenere un'immagine tridimensionale che identifichi la zona tumorale mediante la somministrazione di una sostanza, scelta in modo tale da essere principalmente assorbita dal tumore. Questa sostanza è tuttavia marcata con una molecola radioattiva, in quanto la ricostruzione dell'immagine sfrutta proprio l'osservazione del decadimento di tale isotopo radioattivo, e si è in questo modo in grado di rilevare le zone in cui la sostanza iniettata è stata maggiormente assorbita. La *cattura k* potrebbe rivelarsi una valida alternativa qualora si identificasse una sostanza (non radioattiva), di un particolare numero atomico, che si accumuli prevalentemente nelle zone tumorali. Questo renderebbe possibile la mappatura della zona del tumore sottoponendo, probabilmente, il paziente ad una

minore dose di radiazioni. La quantificazione della quantità di radioattività emessa potrebbe essere rilevante per i soggetti maggiormente a rischio o che non possono sottoporsi a tali esami diagnostici, quali donne in gravidanza o allattamento, bambini e anziani.

**LA CATTURA K COME STRUMENTO PER  
L'IMAGING**



## 2.1 Fenomenologia

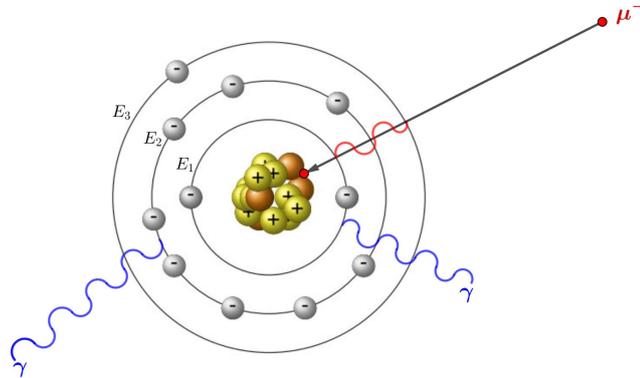
Come accennato nella Sezione 1.3, il fenomeno della *cattura k* permette di identificare i diversi tipi di atomi costituenti un volume che si è interessati ad analizzare. Questa Sezione spiega nel dettaglio il fenomeno, illustrando come questo possa essere sfruttato per ricavare un'immagine della composizione atomica di un dato volume.

Quando un muone entra in uno spessore di materia inizialmente perde energia per ionizzazione. Se l'energia viene esaurita mentre questo si trova ancora all'interno del materiale allora il muone si ferma e presto decade. Tuttavia, se esso ha carica negativa vi è una certa probabilità che, prima di decadere da particella libera, esso venga catturato dal nucleo di un atomo, ovvero che avvenga la *cattura k*. Questo fenomeno riguarda solamente i muoni con carica negativa, infatti, a differenza di un muone carico positivamente, questo è attratto dal nucleo di un atomo. Quindi ci entra: depositandosi nelle orbite attorno all'atomo, di volta in volta si posa in un'orbita sempre più vicina al nucleo fintanto che non cade dentro quest'ultimo. Una volta che si trova dentro al nucleo arriva ad interagire con uno dei protoni che lo compongono mediante una reazione beta inversa: il muone a questo punto scompare trasformandosi in un neutrino muonico ( $\nu_\mu$ ), mentre il protone ( $p$ ) viene sostituito da un neutrone ( $n$ ). Entrambi (il neutrino e il neutrone) escono dal nucleo, che si rompe, con energia cinetica pari a poche decine di MeV ciascuno.

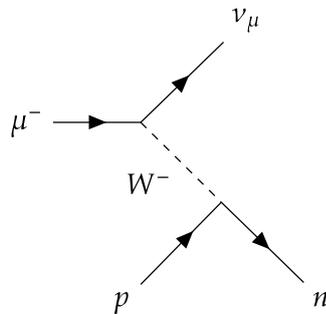
Il muone, depositandosi nelle orbite attorno all'atomo, prima che il decadimento avvenga, emette dei fotoni ( $\gamma$ ) di definita energia, determinata dai livelli energetici sui quali si muove. La Figura 2.1 illustra il fenomeno della *cattura k* in un atomo di sodio, mentre la Figura 2.2 mostra il decadimento del muone quando questo fenomeno avviene.

I muoni carichi positivamente non sono attratti dal nucleo dell'atomo, essendo anch'esso positivo. Pertanto, il muone positivo rimane nel materiale fino a quando non decade emettendo un positrone. Tuttavia, questo fenomeno non è oggetto di studio in questa tesi e non verrà ulteriormente discusso. Nel seguito si farà riferimento

solo a muoni con carica negativa, che ammettono quindi l'eventuale fenomeno di *cattura k*.



**Figura 2.1:** Rappresentazione grafica del fenomeno cattura k.  $E_1$ ,  $E_2$  e  $E_3$  indicano i diversi livelli energetici.



**Figura 2.2:** Decadimento del muone in un nucleo per cattura k.

## 2.2 Potenziali osservabili

Un muone che si ferma all'interno della materia potrebbe quindi essere catturato dal nucleo dell'atomo, dando luogo alla *cattura k*. In questo caso, il decadimento avviene con una vita media inferiore a quella che si osserva nel decadimento di un muone nel vuoto, a causa della coabitazione del muone con i nucleoni e della conseguente probabilità di interazione debole (Figura 2.2).

Sostanzialmente, ci sono due fattori osservabili che possono fornire informazioni sul numero atomico dell'atomo in cui la *cattura k* è avvenuta. Questi, in ordine di avvenimento, sono esposti di seguito.

### 1. I fotoni

Come esposto nella Sezione 2.1, durante la caduta del muone nel nucleo si ha un'emissione di fotoni (di energia corrispondente a diversi keV, quindi anche denominati raggi X). I raggi X che vengono emessi sono istantanei, ovvero li possiamo pensare come simultanei al tempo di entrata del muone che incide dando luogo all'emissione di fotoni a seguito della sua cattura nell'atomo. Si sottolinea, infatti, che il tempo necessario alla *cattura k* identifica il nucleo, ma questo tempo corrisponde al tempo di emissione del neutrone, mentre i raggi X vengono emessi appena la cattura inizia.

Le energie osservabili dei fotoni emessi possono essere sfruttate per determinare il tipo di materiale, cioè determinano qual è l'atomo che ha catturato il muone. Questo si rende possibile sfruttando la conoscenza delle distribuzioni di energia dei fotoni, che differiscono a seconda del numero atomico.

Disponendo di un rivelatore in grado di misurare le energie dei fotoni uscenti dal materiale che è di interesse analizzare, una volta associate le energie all'atomo di provenienza, è possibile risalire al numero atomico ignoto corrispondente. Questo è fattibile grazie ai raggi X emessi dal processo di cattura del muone, che si caratterizzano per un'energia elevata. L'elevata energia è dovuta alla massa maggiore del muone, se confrontata con elettrone. Pertanto, i salti di orbita che il muone effettua nel cadere nel nucleo sono più energetici. Il fatto menzionato rende possibile la rivelazione dei fotoni con l'utilizzo di un detector, in quanto le maggiori energie diminuiscono la probabilità che questi vengano assorbiti nel materiale, rendendo impossibile la rivelazione (Lundy 1970).

### 2. Il neutrone

Il tempo di decadimento nella *cattura k* è fortemente dipendente dal tipo di atomo in cui il fenomeno avviene. Pertanto, è possibile sfruttare il fenomeno del decadimento per discriminare i tipi di atomi in cui questo è avvenuto. Il tempo di uscita del neutrone dal volume è quindi informativo sul numero atomico dell'atomo da cui questo è stato emesso a seguito della *cattura k*. È necessario ottenere molteplici decadimenti di muoni nella materia, oltre alla disponibilità di un rivelatore in grado di misurare i tempi di arrivo dei neutroni emessi dal decadimento. Con queste premesse è possibile, associando i tempi di arrivo a ciascun atomo di provenienza, derivarne il numero atomico ignoto corrispondente stimando le vite medie di ciascun atomo facendo uso delle

misurazioni ottenute sui tempi.

In questo lavoro ci si concentra sul primo fattore: i fotoni.

I Capitoli che seguono hanno l'obiettivo di studiare, attraverso una simulazione, se e in che misura i fotoni emessi e rilevabili dal processo di *cattura k* risultano utili per determinare la composizione atomica di un volume incognito.

# **IL MODELLO DI SCANSIONE CON CATTURA K**



Per studiare il fenomeno e la fattibilità di una sua eventuale applicazione in problemi di analisi del materiale, in termini di composizione atomica, si è costruito un modello nello spazio tridimensionale che ha l'obiettivo di sondare quanto si potrebbe osservare in un caso reale.

Il fine del modello descritto dettagliatamente in questo capitolo è quello di ottenere dei dati simulati dal processo di *cattura k*, supponendo di avere a disposizione un acceleratore di muoni che incidono nel volume e un rivelatore, in grado di rilevare sia la posizione dei muoni entranti, sia energie e posizioni dei fotoni uscenti dal materiale.

## 3.1 Ipotesi di lavoro e modellazione del volume incognito

La costruzione del modello ha fatto uso di diverse semplificazioni, che hanno permesso di descrivere la fisica del processo nel modo meno ostico possibile, senza tuttavia perdere di concretezza. Ogni assunzione fatta è contestualmente indicata nella Sezione 3.2.

Si ipotizza che il volume da analizzare sia un cubo di dimensione  $10\text{ cm} \times 10\text{ cm} \times 10\text{ cm}$ , composto da soli 3 elementi chimici:

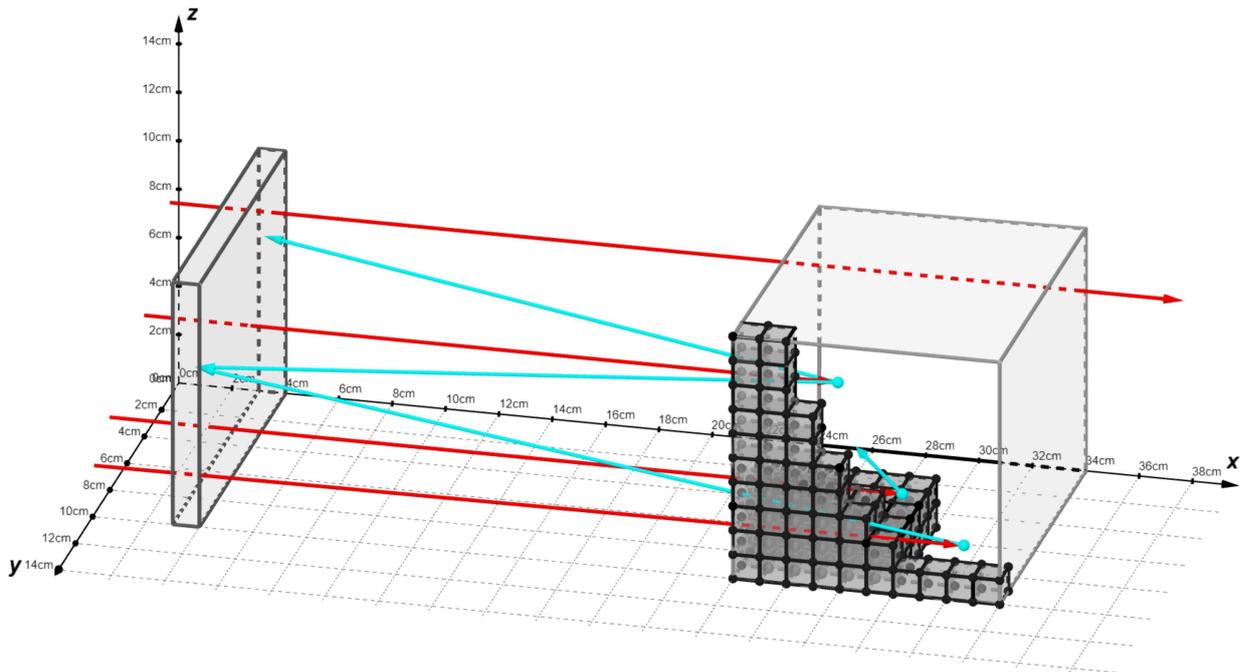
- ▶ carbonio ( $Z = 6$ );
- ▶ silicio ( $Z = 14$ );
- ▶ ferro ( $Z = 26$ ).

La dimensione e la scelta dei materiali è totalmente arbitraria, infatti il codice per la simulazione è predisposto all'utilizzo di ulteriori o differenti elementi chimici e ad una qualunque dimensione dell'oggetto. Il volume è suddiviso in singoli voxel di dimensione  $1\text{ cm} \times 1\text{ cm} \times 1\text{ cm}$ , dove ciascuno di questi è costituito di un solo elemento chimico tra i 3 considerati. Tali elementi vengono scelti utilizzando un campionamento casuale con reinserimento, dove la probabilità di selezione è analoga per ciascuno di questi.

Il piano di rivelatore viene posto a 20 centimetri di distanza dal volume, e ha la stessa superficie di quest'ultimo, mentre lo spessore è fissato a 1 centimetro. Si considera l'asse  $z$  come quell'asse che si estende perpendicolarmente al piano, mentre l'asse  $x$  e l'asse  $y$  giacciono sul piano.

Si assume di disporre di un acceleratore con fasci di muoni ben collimati, che incidono nel volume ortogonalmente all'asse  $z$  in  $x = 0$  cm, passando attraverso il detector. Nella generazione di ciascun muone, ognuno di questi ha un'uguale probabilità di essere emesso da un qualunque punto  $(x, y, z)$ , dove  $x = 0$  cm e le coordinate  $y$  e  $z$  appartengono al rivelatore, e dunque anche al volume stesso. In particolare, ogni coordinata  $y$  e  $z$  viene generata ad ogni iterazione da una distribuzione uniforme definita nell'intervallo  $[0, 10]$ . Ciò corrisponde all'effettuare una scansione uniforme della superficie con il fascio di muoni. Questa scelta è stata effettuata per permettere ai fotoni di uscire da tutti i voxel di cui il cubo è composto, in modo che sia possibile sondare tutta l'intera composizione interna del volume.

La Figura 3.1 rappresenta la geometria su cui si basa il codice di simulazione realizzato. Nello specifico si è posto il detector a  $x = 3.5$  cm, mentre il volume si trova tra  $x = 24$  cm e  $x = 34$  cm. I muoni e i fotoni sono raffigurati, rispettivamente, dai vettori in rosso e azzurro. Come si evince dalla rappresentazione, una volta che un muone si ferma nel materiale e viene catturato dal nucleo dell'atomo, uno o più fotoni vengono emessi dallo stesso punto in qualunque direzione, andando talvolta a colpire il rivelatore. È possibile notare che non sempre i muoni si fermano nel materiale dando luogo alla *cattura  $k$* , in quanto un'energia dei muoni particolarmente elevata potrebbe portare questi ad avere ancora energia disponibile una volta attraversato tutto il volume. Pertanto tali muoni non saranno informativi sulla composizione atomica.



**Figura 3.1:** Rappresentazione grafica della geometria utilizzata nella simulazione. A sinistra viene posto il piano di rivelatore, a destra il volume incognito. Muoni e fotoni sono rappresentati, rispettivamente, dai vettori in rosso ( $\Rightarrow$ ) e azzurro ( $\Leftarrow$ ).

## 3.2 Simulazione e ottenimento dei dati

L'impostazione geometrica e qualitativa sulla quale si basa il processo di simulazione effettuato si attiene a quanto delineato nella precedente Sezione 3.1. Nell'elenco che segue si approfondisce in ordine ciascuna parte del codice nel dettaglio, a partire dalla generazione dei muoni, concludendo con la rivelazione dei fotoni emessi.

### 1. Propagazione e cattura dei muoni

Inizialmente viene generata un'energia casuale,  $E$  (MeV), diversa per ciascun muone che verrà propagato fino al volume. Tale energia viene campionata da una distribuzione uniforme nell'intervallo  $[E_{min}, E_{max}]$ , dove  $E_{min}$  e  $E_{max}$  corrispondono, rispettivamente, all'energia minima e massima consentita. Questi valori devono essere regolati a seconda della geometria scelta; nel caso in esame si è constatato che l'intervallo  $[2, 90]$  MeV consente di ottenere una quantità sufficientemente omogenea di muoni in tutti gli strati del volume in  $x$ , limitando al contempo la perdita di muoni dovuta all'uscita di questi dal materiale.

Successivamente, vengono generate casualmente due coordinate  $y$  e  $z$  per un ipotetico muone che viene emesso sempre a  $x = 0$  cm, si procede poi alla

propagazione di questo nel piano tridimensionale.

Si suppone che il piano di rivelatore veda la posizione dei muoni in entrata con una risoluzione in  $(y, z)$  di 1 mm in termini di deviazione standard; ovvero le coordinate reali campionate  $y$  e  $z$  vengono variate sommando a queste un valore casuale generato da una distribuzione Gaussiana di media nulla e deviazione standard di 1 mm.

La scelta di un acceleratore con fasci di muoni ben collimati semplifica la quantificazione della perdita di energia del muone, mentre avanza nel materiale incognito. Infatti, la propagazione di ciascun muone è in questo modo perfettamente parallela al piano, dove  $y$  e  $z$  si mantengono costanti al punto di generazione ad ogni spostamento della particella in  $x$ : questo permette di definire una perdita media di energia fissa per ogni centimetro percorso in  $x$  nella direzione del volume. Tale perdita media dipende dal numero atomico  $Z$  del voxel attraversato ed è definita come (Groom e Klein 2000):

$$\frac{dE}{dx} = (2.35 - 0.28 \ln(Z)) \rho Y \text{ MeV/cm} . \quad (3.1)$$

Ciò significa che un muone, nell'attraversare  $Y$  centimetri di materiale con corrispondente numero atomico  $Z$  e densità  $\rho \text{ gr/cm}^3$ , perde una quantità di energia pari a  $\frac{dE}{dx} \text{ MeV}$ . Nel caso in esame, si calcola la perdita di energia sequenzialmente, per ogni voxel del volume attraversato dal muone. Pertanto, essendo i voxel di dimensione  $1 \text{ cm}^3$ , si fissa  $Y = 1$  nella (3.1).

Dunque, per gli elementi chimici utilizzati si ottiene:

- ▶  $\frac{dE_{Z=6}}{dx} = 4.16 \text{ MeV/cm}$ , con  $\rho = 2.25 \text{ gr/cm}^3$  ;
- ▶  $\frac{dE_{Z=14}}{dx} = 3.75 \text{ MeV/cm}$ , con  $\rho = 2.33 \text{ gr/cm}^3$  ;
- ▶  $\frac{dE_{Z=26}}{dx} = 11.31 \text{ MeV/cm}$ , con  $\rho = 7.87 \text{ gr/cm}^3$  .

Si effettua quindi un'iterazione voxel per voxel, nella quale, ad ogni centimetro percorso, si sottrae la perdita di energia  $\frac{dE}{dx}$  all'energia  $E$  iniziale del muone, calcolando ad ogni passo  $\Delta E = E - \frac{dE}{dx}$  (dove  $E$  viene aggiornato di volta in volta con la nuova energia ottenuta). Si procede fino a quando il valore  $\Delta E \leq 0$ . Se questo si verifica significa che il muone si è fermato nel volume. In questo caso il punto di coordinate  $(x, y, z)$  in cui avviene lo stop del muone nel materiale è individuato con la precisione di 1 millimetro.

Quando un muone negativo si ferma nel materiale ha due possibilità: decadere

da libero (come illustrato nella Sezione 1.1) o venire catturato da un atomo (e quindi decadere in un tempo più breve rispetto al tempo di decadimento del muone libero).

La probabilità che un muone fermo nel materiale venga catturato è stata calcolata utilizzando la relazione (Suzuki, Measday e Roalsvig 1987):

$$\Lambda_t = \Lambda_c + Q\Lambda_d, \quad (3.2)$$

dove

$$\Lambda_t = \frac{1}{\tau_{\mu^-}} \quad e \quad \Lambda_d = \frac{1}{\tau_{\mu^+}}. \quad (3.3)$$

$\Lambda_c$  denota il tasso di cattura,  $Q\Lambda_d$  è invece il tasso di decadimento, con  $Q$  che identifica il fattore di Huff.  $\Lambda_t$  è pertanto il tasso totale, che permette, insieme al tasso di decadimento, di derivare il tasso di cattura.  $\tau_{\mu^+}$  e  $\tau_{\mu^-}$  indicano la vita media del muone positivo e negativo. Si nota quindi come le probabilità di cattura e di decadimento da libero siano gestite, rispettivamente, da  $\Lambda_c$  e  $\frac{Q}{\tau_{\mu^+}}$ . Pertanto, per ogni muone che si ferma nel materiale, si genera un numero casuale da una distribuzione Bernoulliana con probabilità data da  $\frac{\Lambda_c}{\Lambda_t}$ . Se il valore risultante è pari a 1 allora si decide che il muone in questione è stato catturato, altrimenti si impone il decadimento da libero, che obbliga a considerare la generazione di un altro muone, scartando il precedente, che non può a questo punto, in alcun modo, dare origine al fenomeno della *cattura k*.

Per gli elementi considerati nella simulazione si sono ottenute le seguenti probabilità di cattura:

- ▶  $p_{Z=6} = 0.08$ ;
- ▶  $p_{Z=14} = 0.66$ ;
- ▶  $p_{Z=26} = 0.91$ .

Queste sono state calcolate facendo uso delle misurazioni del tasso di cattura e del tasso totale ottenute nel passato da diversi autori (Suzuki, Measday e Roalsvig 1987). Si sottolinea che i tassi possono differire a seconda del numero di massa dell'atomo corrispondente. Tuttavia, nei calcoli effettuati non si distinguono i diversi isotopi.

## 2. Generazione dei fotoni

### a) Direzionalità dei fotoni

Una volta che il muone si è fermato in un voxel, la *cattura k* fa sì che uno o più fotoni vengano emessi in qualunque direzione. Includere questo fenomeno nel codice avrebbe aumentato notevolmente la complessità computazionale, in quanto, vista la bassa probabilità di intersezione dei fotoni col detector, ne conseguirebbe la necessità di generare un numero altissimo di muoni per ottenere statistica sufficiente allo scopo finale del presente lavoro. Pertanto, si è scelto di forzare i fotoni emessi ad intersecare il piano di rivelatore, evitando così di scartare muoni e rendendo meno difficoltoso lo studio del fenomeno. Ciò non costituisce un problema in quanto non si specifica il flusso di muoni prodotto dall'acceleratore, e questa semplificazione ha l'unico effetto di aumentare la probabilità di osservare i fotoni dalla *cattura k*.

Inoltre, si ipotizza che i fotoni emessi possano variare da un minimo di 1 ad un massimo di 4. Per ogni muone per cui avviene la *cattura k*, il numero di fotoni emessi viene campionato da una distribuzione multinomiale con vettore di probabilità  $p = (0.1, 0.1, 0.3, 0.5)^T$ , corrispondente all'emissione di 1, 2, 3 o 4 fotoni rispettivamente. Le probabilità  $p$  sono totalmente arbitrarie, ma descrivono in maniera qualitativa le caratteristiche tipiche del fenomeno, che peraltro presenta grande varietà al variare delle specie nucleari coinvolte.

Nella generazione degli angoli che determinano la direzione dei fotoni, e nella loro successiva propagazione verso il rivelatore, si fa riferimento al sistema di coordinate sferiche. Vengono quindi generati due angoli,  $\theta$  e  $\phi$ , dove  $\theta \in [0, 2\pi]$  corrisponde all'angolo azimutale, mentre  $\phi \in [0, \pi]$  rappresenta l'angolo polare; infine,  $\rho \in [0, +\infty)$  determina la distanza radiale, ovvero la distanza euclidea tra l'origine  $O$  e il punto  $P$ , come rappresentato in Figura 3.2.

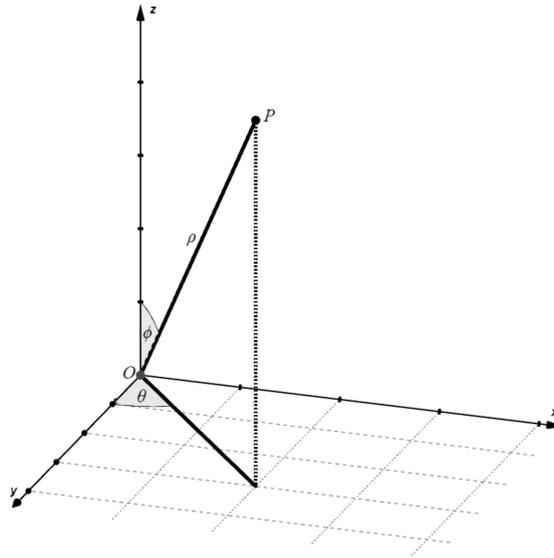
Per ciascun fotone in posizione  $(x_0, y_0, z_0)$  vengono pertanto generati solo angoli  $\theta$  e  $\phi$  in intervalli di valori tali da permettere l'intersezione col detector, dove questa generazione viene effettuata campionando da due distribuzioni uniformi definite in tali intervalli. Gli estremi degli intervalli si sono ricavati facendo uso delle formule inverse per ottenere gli angoli in funzione di un punto di partenza  $(x_0, y_0, z_0)$  e un punto di arrivo  $(x, y, z)$ :

$$\rho = \sqrt{(x - x_0)^2 + (y - y_0)^2 + (z - z_0)^2} \quad (3.4)$$

$$\phi = \arccos\left(\frac{z - z_0}{\rho}\right) \quad (3.5)$$

$$\theta = \arctan\left(\frac{y - y_0}{x - x_0}\right) + \pi, \quad (3.6)$$

dove  $(x, y, z)$  corrisponde al punto estremo sul rivelatore tale da consentire la massima e minima ampiezza degli angoli  $\theta$  e  $\phi$  per ciascun fotone.



**Figura 3.2:** Sistema di coordinate sferiche.

Raramente, in certi casi, il campionamento di  $\theta$  e  $\phi$  molto vicini agli estremi dell'intervallo può portare comunque alla mancata intersezione del fotone con il piano di rivelatore. In tale circostanza, si ricampionano nuovamente entrambi gli angoli, fintanto che questi non garantiscono l'intersezione con il detector.

Si noti che questa imposizione non priva il problema della sua generalità: infatti, costringendo tutti i fotoni emessi all'intersezione, si ha un numero maggiore di fotoni rivelati provenienti dagli strati in  $x$  più lontani dal rivelatore rispetto a quanto si osserverebbe in un caso reale, vista la minore divergenza possibile di questi rispetto a quelli posti negli strati in  $x$  più vicini al rivelatore. Tuttavia, per ottenere una situazione simile al caso

simulato, sarebbe sufficiente generare un maggior numero di muoni con energie più elevate, tali da consentire lo stop dei muoni negli strati in  $x$  più lontani dal detector. Una diversa distribuzione dell'energia dei muoni entranti potrebbe essere gestita in modo da comportare un minor numero di muoni che si fermano nei voxel più vicini in  $x$ , rispetto alla numerosità di muoni che si trattengono negli strati più lontani: ne conseguirebbe una quantità più elevata di fotoni rilevati provenienti da tali strati.

### b) Energie dei fotoni

Il tipo di atomo da cui il fotone proviene è strettamente legato all'energia  $E_\gamma$  di quest'ultimo. È necessario pertanto parametrizzare la densità di probabilità di vedere un fotone, in funzione della sua energia per i diversi numeri atomici.

In particolare, si sono modellati degli spettri continui con dei picchi che corrispondono a specifici "salti" dei fotoni fra orbite di definita energia. Nel determinare la forma parametrica si è tratta ispirazione dalla Figura 3.3 (Rosen 1971). Tale immagine mostra una simulazione dello spettro di energia dei raggi X per più elementi che dovrebbero emergere da un "uomo standard", dove i picchi vanno ad evidenziare i salti quantici dei fotoni.

Pertanto, la forma funzionale che si è utilizzata, riportata nella (3.7), è una mistura di  $n$  variabili casuali  $X_j$  continue: una densità esponenziale e diverse distribuzioni Gaussiane troncate tra  $(0, +\infty)$ .

$$\begin{aligned}\varphi(x) &= k_1 \cdot f_1(x) + k_2 \cdot f_2(x) + \dots + k_n \cdot f_n(x) \\ &= k_1 \cdot \delta e^{-\delta x} + \sum_{i=1}^{n-1} k_{i+1} \cdot \frac{\phi(x; \mu_i, \sigma_i)}{1 - \Phi\left(-\frac{\mu_i}{\sigma_i}\right)},\end{aligned}\quad (3.7)$$

dove  $\phi(x; \mu_i, \sigma_i)$  è la densità di una Gaussiana con parametro di media  $\mu_i$  e parametro di scala  $\sigma_i$ , mentre  $\Phi(x)$  è la funzione di ripartizione di una normale standard calcolata in  $x$ .  $k_i \geq 0 \quad \forall i = 1, 2, \dots, n$  e  $\sum_{j=1}^n k_j = 1$ .  $\varphi(x)$  risulta quindi essere una densità definita in  $\mathbb{R}^+$ .

Si sono ipotizzati dei valori per i parametri  $\delta, \sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_{n-1}, \mu_1, \mu_2, \dots, \mu_{n-1}, k_1, k_2, \dots, k_{n-1}$ , tali da definire tre distribuzioni diverse tra loro. Nello specifico a seconda dei diversi materiali si sono impostati i valori seguenti:

- ▶ carbonio:  $\delta = 1$ ,  $\sigma_1 = 0.05$ ,  $\sigma_2 = 0.05$ ,  $\mu_1 = 0.8$ ,  $\mu_2 = 3$ ,  $k_1 = 0.7$ ,  $k_2 = 0.2$ ,  $k_3 = 0.1$ ;
- ▶ silicio:  $\delta = 1$ ,  $\sigma_1 = 0.05$ ,  $\sigma_2 = 0.05$ ,  $\sigma_3 = 0.05$ ,  $\mu_1 = 1.5$ ,  $\mu_2 = 5$ ,  $\mu_3 = 7$ ,  $k_1 = 0.7$ ,  $k_2 = 0.1$ ,  $k_3 = 0.05$ ,  $k_4 = 0.15$ ;
- ▶ ferro:  $\delta = 1$ ,  $\sigma_1 = 0.05$ ,  $\sigma_2 = 0.05$ ,  $\sigma_3 = 0.05$ ,  $\mu_1 = 2$ ,  $\mu_2 = 6$ ,  $\mu_3 = 9.5$ ,  $k_1 = 0.7$ ,  $k_2 = 0.05$ ,  $k_3 = 0.07$ ,  $k_4 = 0.18$ .

Le distribuzioni di energia dei fotoni ottenute sono riportate unitamente in Figura 3.4.

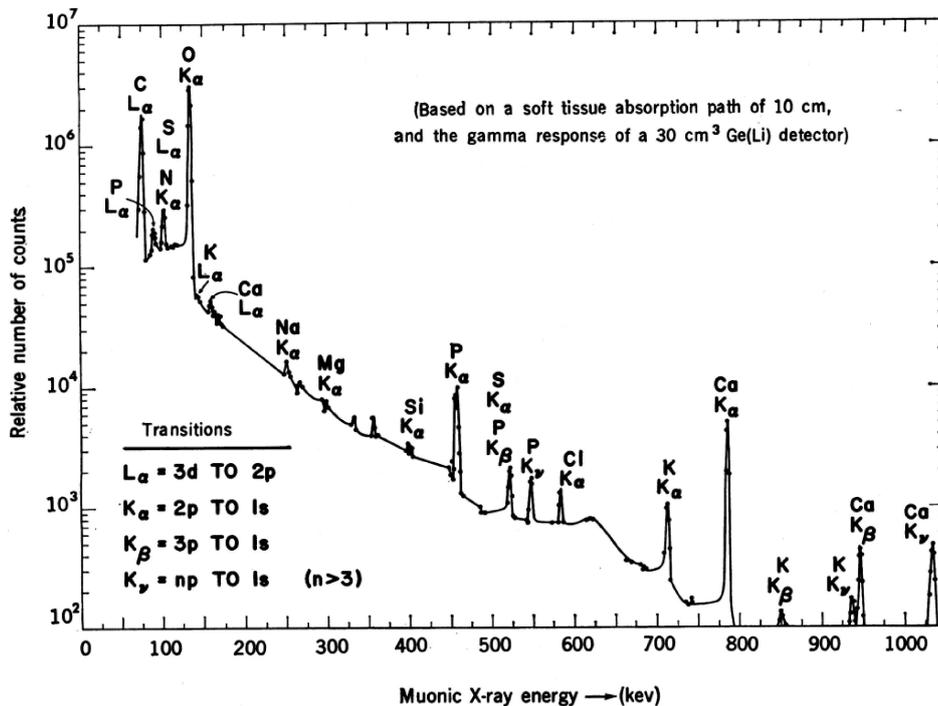
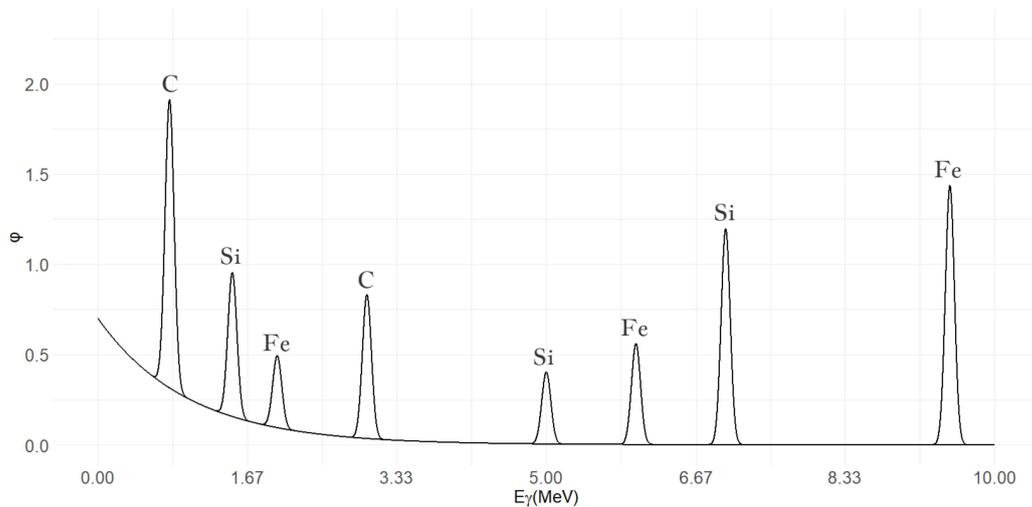


Figura 3.3: Spettro di raggi X muonici simulato da un "uomo standard". Figura tratta da Rosen 1971.

Per ricavare un'energia casuale per ciascun fotone che si ferma nel volume è necessario generare dalle densità  $\varphi(x)$  definite. Per campionare una data energia da  $\varphi(x)$  si è generato un valore  $i$  da una distribuzione multinomiale con vettore di probabilità  $(k_1, k_2, \dots, k_n)^T$  per i valori  $1, 2, \dots, n$ ; successivamente si è simulato un valore da  $f_i(x)$  utilizzando il metodo di inversione.

### 3. Propagazione dei fotoni e loro rivelazione

Una volta che il fotone viene emesso, questo si propaga nel materiale nella direzione del rivelatore. Man mano che avanza, ha una certa probabilità di essere assorbito, che dipende dall'elemento che attraversa e dallo spessore percorso in



**Figura 3.4:** Spettro di raggi X muonici ipotizzato nella simulazione per carbonio, silicio e ferro.

quest'ultimo. La probabilità di sopravvivenza viene pertanto calcolata di volta in volta, seguendo lo spostamento del fotone nei diversi elementi.

Per il calcolo di suddetta probabilità si necessita anche della lunghezza di assorbimento  $\lambda$ , dipendente dal materiale e dall'energia del fotone. In breve, la lunghezza di assorbimento rappresenta il percorso effettuato in media da un fotone prima di interagire con la materia. Infatti, quando un fascio di fotoni penetra in un materiale, a causa delle interazioni con lo stesso, la sua intensità decresce. Ciò è dovuto a diversi effetti che possono avere luogo nel mezzo attraversato; tra questi, i più rilevanti vengono brevemente descritti nell'elenco che segue. La Figura 3.5 integra la trattazione fornendo la sezione d'urto di tali processi.

► **Produzione di coppie elettrone-positrone**

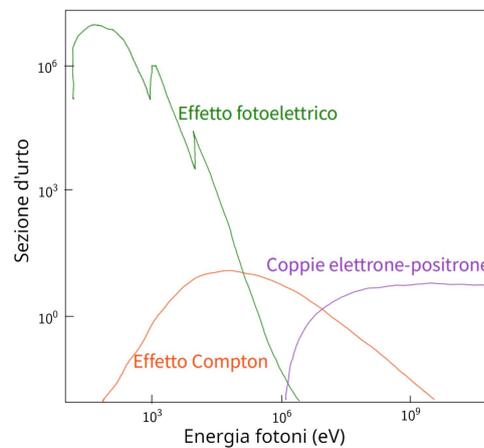
La produzione di coppie elettrone-positrone è un processo probabile ad alte energie. Affinché l'effetto sia rilevante sono necessarie energie di almeno 10 MeV. Se l'effetto si manifesta, il fotone sparisce, convertendo la sua energia nella massa di una coppia elettrone-positrone.

► **Effetto fotoelettrico**

L'effetto fotoelettrico è maggiormente rilevante per basse energie dei fotoni, inferiori a qualche centinaia di keV. Questo si verifica quando un fotone viene assorbito da un atomo, con la conseguente emissione di un elettrone. L'elettrone emesso acquista quasi tutta l'energia del fotone in questione.

► **Effetto Compton**

L'effetto Compton, a differenza della produzione di coppie elettrone-positrone e dell'effetto fotoelettrico, è probabile per valori di energie in tutta la regione di interesse per il fenomeno della *cattura k*. Pertanto, quest'ultimo è certamente maggiormente influente rispetto ai precedenti. Questo effetto consiste nell'assorbimento e riemissione di un fotone, dovuto all'urto di questo con un elettrone. Quando questo ha luogo, parte dell'energia del fotone viene assorbita dall'elettrone. Perciò si ha una variazione della lunghezza d'onda del fotone in questione, che cambia direzione e perde una quantità non indifferente di energia.



**Figura 3.5:** Sezione d'urto della produzione di coppie elettrone-positrone, dell'effetto fotoelettrico e dell'effetto Compton in funzione dell'energia su un bersaglio di rame.

I valori della lunghezza di assorbimento utilizzati in questo lavoro sono stati ricavati utilizzando le sezioni d'urto di vari effetti, tra questi i tre principali soprammenzionati. Per una trattazione più dettagliata delle interazioni considerate si rimanda a Groom e Klein (2000) e *NIST: X-Ray Mass Attenuation Coefficients - Section 2* (2004).

Con lo scopo di avere a disposizione una forma funzionale che restituisca il valore di  $\lambda$ , data l'energia del fotone in un dato materiale, si sono sfruttati i dati relativi al coefficiente di attenuazione di massa tra 1 keV e 10 MeV per i tre elementi considerati, che ha permesso di ottenere la lunghezza di assorbimento corrispondente (*NIST: X-Ray Mass Attenuation Coefficients - Table 3* 2004). I dati per il silicio e il ferro mostrano un diverso valore di  $\lambda$  in corrispondenza di uno stesso valore di energia del fotone  $E_\gamma$ , di conseguenza si è scelto di definire una funzione con un punto di discontinuità in  $x_0 = 0.0018$  per il silicio, e in

$x_0 = 0.007$  per il ferro. Le funzioni ottenute per i diversi elementi sono mostrate nell'intervallo di energie tra 1 keV e 10 MeV in Figura 3.6, dove si mette in evidenza la discontinuità modellata nel silicio e nel ferro. Tale risultato è stato ottenuto con una modellazione principalmente non parametrica mediante regressione Loess. Infatti, l'unica eccezione è stata fatta per le energie del silicio tra 1 keV e 1.839 keV, dove, con sole 3 osservazioni, si è utilizzata una modellazione parametrica polinomiale di grado 2 stimata ai minimi quadrati:

$$\widehat{\lambda}(E_\gamma) = \widehat{\beta}_0 + \widehat{\beta}_1 E_\gamma + \widehat{\beta}_2 E_\gamma^2 . \quad (3.8)$$

La regressione Loess si è ottenuta con un grado polinomiale pari a 2, nucleo tricubico e una percentuale di osservazioni per la stima pari al 20% per tutti gli elementi, con eccezione dei valori del ferro tra 1 keV e 7.112 keV, che corrispondono alla curva precedente la discontinuità, dove, visto il minor numero di osservazioni, si è utilizzata una percentuale del 70%.

In Figura 3.7 si mostra il confronto tra le linee ottenute semplicemente unendo i valori osservati e le funzioni corrispondenti stimate. Come si evince da questa, le funzioni stimate assumono un valore costante da 10 MeV in poi, e lo stesso accade per valori inferiori a 1 keV, dove i valori assunti restano costanti ad una misura molto piccola di  $\lambda$ . Dunque le funzioni ottenute sono definite su tutto l'asse reale positivo. Tale scelta è motivata dal fatto che, per energie superiori a 10 MeV, i dati mostrano valori osservati di  $\lambda$  pressoché costanti. Inoltre, il calcolo della lunghezza di assorbimento, nel contesto della simulazione in questione, ha l'unico fine di permettere il calcolo della probabilità di sopravvivenza del fotone, che risulta comunque nulla per valori di  $\lambda$  corrispondenti ad energie minori di 1 keV, pertanto il suo valore preciso non è di diretto interesse.

A questo punto è possibile specificare la funzione di sopravvivenza per un fotone che attraversa uno spessore  $d$  di un particolare voxel di numero atomico  $Z$ , con densità  $\rho$  e lunghezza di assorbimento  $\lambda$ , che è definita come:

$$S(d; \lambda) = \exp\left(-\frac{d\rho}{\lambda}\right) . \quad (3.9)$$

Ricavare la probabilità di sopravvivenza ogniqualvolta il fotone entra in un voxel di diverso numero atomico  $Z$  risulta complicato. Poiché questi vengono emessi in diverse direzioni, sarebbe necessario, noti gli angoli, effettuare un

controllo su ogni lato del voxel per individuare il voxel successivo in cui il fotone entra. Pertanto, si è effettuata una semplificazione: nel modellare l'uscita del fotone dal volume si considera lo spostamento di questo in  $x$  di 1 cm, fino a quando non raggiunge il bordo del volume, ovvero fino a  $x = 24$  cm. Per ogni spostamento in  $x$  si calcola la distanza  $d$  percorsa dal fotone:

$$d = (\sqrt{1 + \tan^2 \theta_z + \tan^2 \theta_y}) \cdot \Delta x \quad (3.10)$$

$$\theta_z = \phi \cos \theta \quad (3.11)$$

$$\theta_y = \phi \sin \theta, \quad (3.12)$$

dove  $\Delta x$  è la distanza in centimetri percorsa in  $x$  dalla particella, mentre  $\phi$  e  $\theta$  sono gli angoli che descrivono la reale direzione del fotone.

Dunque, ciò comporta che ad ogni  $x$  fissato si individuano le coordinate  $y$  e  $z$  che il fotone interseca, e si estrae il numero atomico  $Z$ , la densità  $\rho$  e la lunghezza di assorbimento  $\lambda$  del voxel corrispondente a tale intersezione.

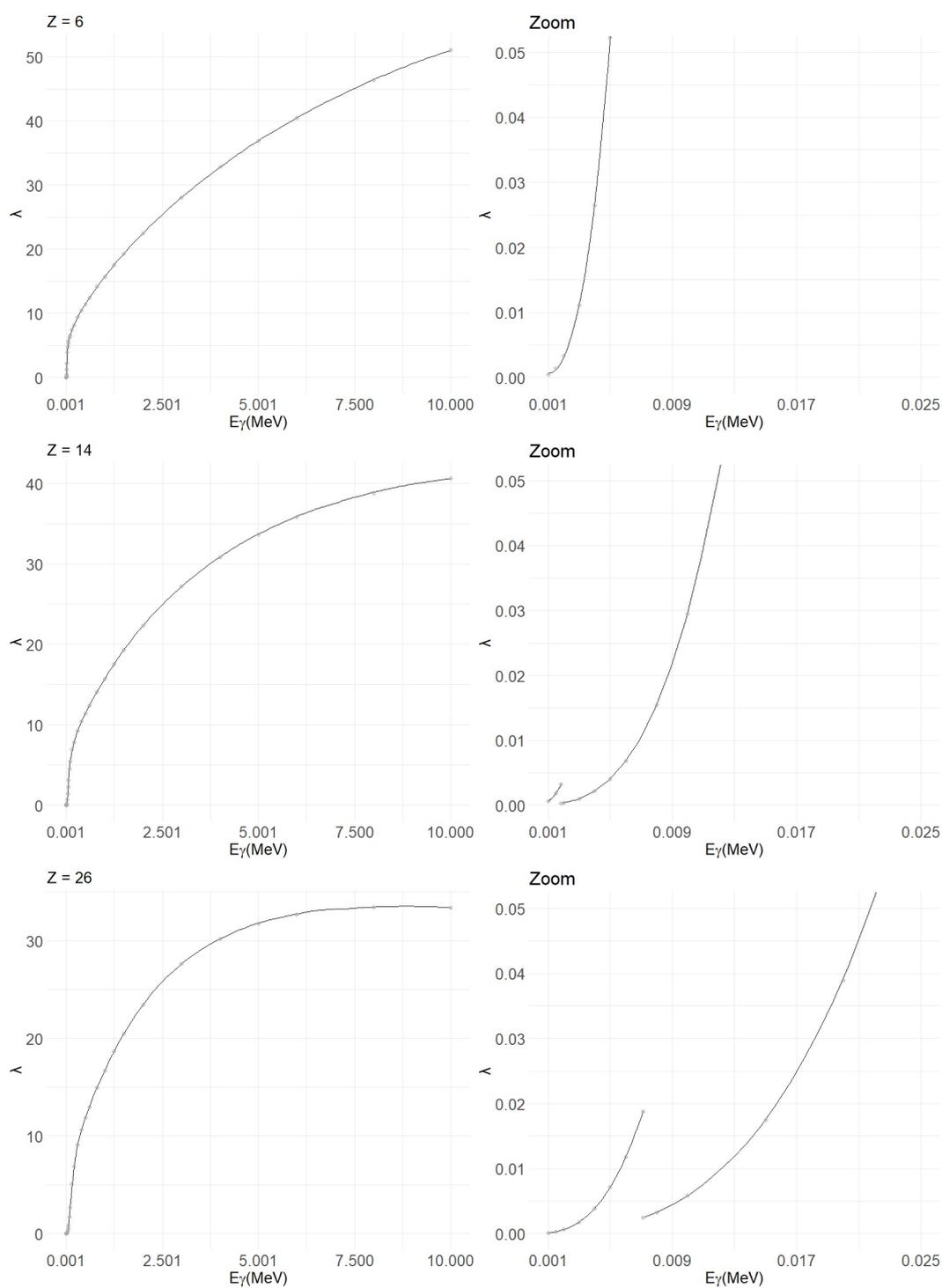
La Figura 3.8 illustra la semplificazione descritta: si mostra un semplice caso con soli 8 voxels di carbonio, silicio e ferro. Un ipotetico fotone che ci passa attraverso è rappresentato dal vettore azzurro. Inizialmente si calcola la distanza percorsa  $d$  quando questo passa dal punto  $x_0$  in cui viene emesso al punto  $x = 3$  cm, ottenendo  $\Delta x = x - x_0$  cm; la probabilità di sopravvivenza in questo caso viene calcolata correttamente facendo uso della densità del ferro, del suo numero atomico e della lunghezza di assorbimento corrispondente associata all'energia con cui questo viene emesso. Se il fotone sopravvive, al passo successivo lo si propaga fino a  $x = 2$  cm, e si ricavano le coordinate  $y$  e  $z$  a  $x = 2$  cm fissato, oltre alla distanza percorsa  $d$ , che da questo punto in poi utilizza  $\Delta x = 1$  cm. Tuttavia, la probabilità di sopravvivenza in quest'ultimo caso viene ricavata utilizzando il numero atomico, la densità e la lunghezza di assorbimento corrispondente al silicio, che coincide con il primo voxel che il fotone interseca in entrata. Si ignora dunque il fatto che questo abbia percorso solo una parte del tragitto nel silicio e la restante nel ferro. Il procedimento è analogo per ogni spostamento successivo in  $x$  di 1 cm del fotone.

Si valuta dunque, centimetro dopo centimetro in  $x$ , la probabilità che il fotone non venga assorbito; un numero casuale campionato da una Bernoulliana

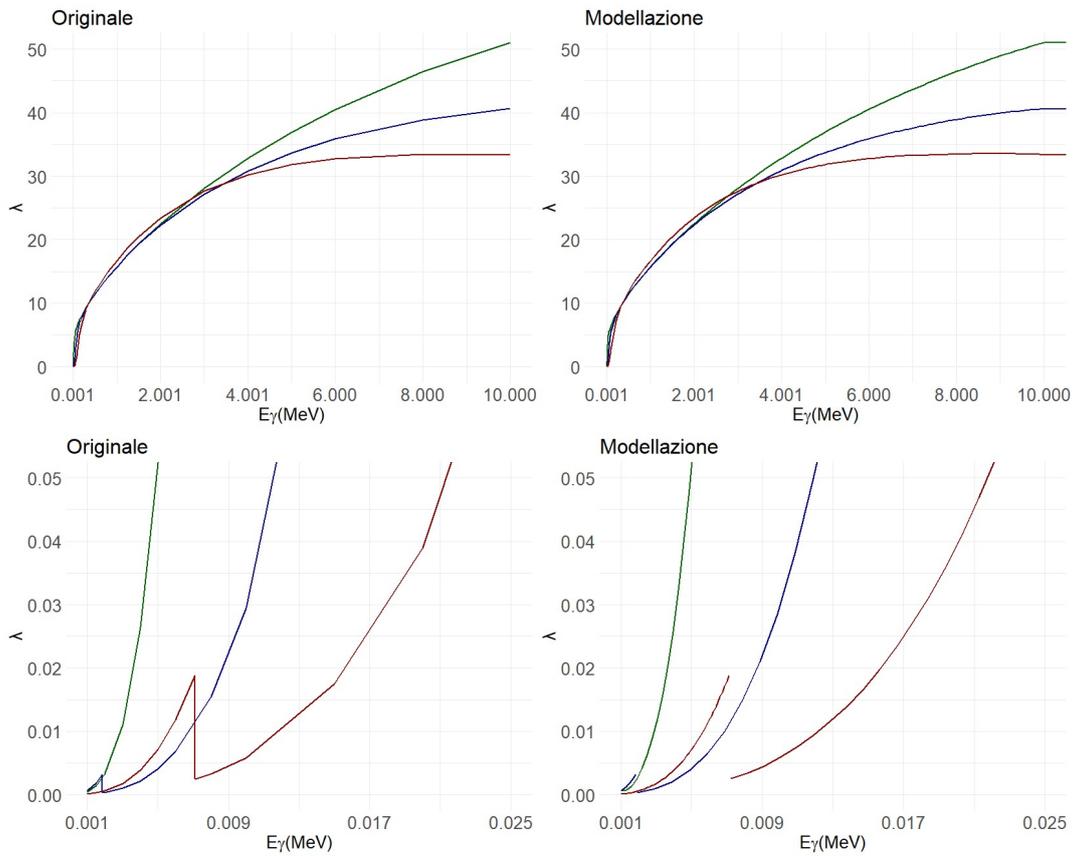
di probabilità  $S(d; \lambda)$  determina se questo sopravvive o viene assorbito dal materiale.

Se il fotone resta in vita fino al detector, questo è in grado di rivelarne l'energia e la posizione. Si è modellata pertanto la probabilità che il fotone venga visto dal rivelatore in funzione dell'energia del fotone  $E_\gamma$ : si decide se viene visto simulando da una Bernoulliana con probabilità  $p = 1$  se  $E_\gamma \geq 1$  MeV, e  $p = E_\gamma$  se  $E_\gamma < 1$  MeV.

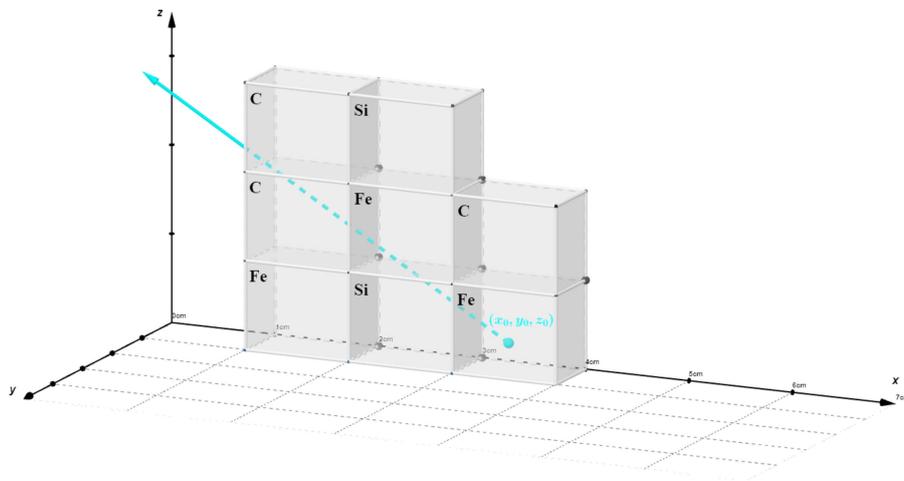
La posizione si assume misurata con la stessa risoluzione in  $(y, z)$  dei muoni incidenti nel volume incognito, mentre l'energia viene quantificata con la precisione di 1 keV, ovvero all'energia del fotone realmente campionata nella simulazione, si somma un valore casuale generato da una Gaussiana di media nulla e varianza 0.001 MeV.



**Figura 3.6:** Lunghezza di assorbimento  $\lambda$  in funzione dell'energia dei fotoni  $E_\gamma$ . La linea nera (—) rappresenta le funzioni stimate mediante regressione, i punti in grigio (•) i valori osservati (*NIST: X-Ray Mass Attenuation Coefficients - Table 3 2004*).



**Figura 3.7:** Lunghezza di assorbimento  $\lambda$  in funzione dell'energia dei fotoni  $E_\gamma$ . La linea verde (—) rappresenta la curva per il carbonio, la blu (—) per il silicio e la rossa (—) per il ferro. A sinistra sono riportati i valori originali osservati interpolati da semplici linee, a destra vengono mostrate le funzioni stimate su tali punti.



**Figura 3.8:** Esempio di uscita del fotone, rappresentato dal vettore in azzurro ( $\leftarrow$ ), da un insieme di 8 voxels di carbonio, silicio e ferro.

Si è utilizzato il codice descritto nel Capitolo 3 per simulare 24 000 000 di muoni che incidono nel volume incognito e studiarne i risultati. In questo capitolo si quantifica quanto ottenuto in termini di muoni per i quali avviene la *cattura k* e di fotoni effettivamente rivelati. Si mostrano inoltre quantità note dalla simulazione, che sarebbero incognite in un caso reale.

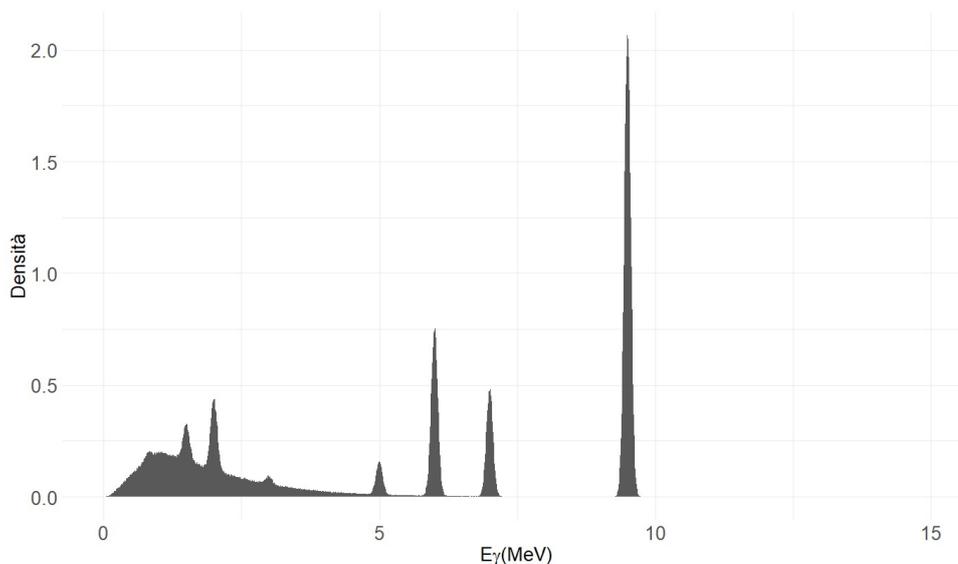
L'output della funzione che gestisce la simulazione restituisce, per ciascun muone, le seguenti quantità:

- ▶ una variabile indicatrice che vale 1 se il muone è uscito dal volume poiché ha ancora energia disponibile, 0 altrimenti;
- ▶ una variabile indicatrice che vale 1 se il muone si è fermato nel volume poiché ha esaurito la sua energia prima di attraversarlo completamente, 0 altrimenti;
- ▶ una variabile indicatrice che vale 1 se, una volta che il muone si è fermato nel volume, è avvenuta la *cattura k*, 0 altrimenti;
- ▶ le coordinate  $(y, z)$  del muone rilevate dal detector e la coordinata  $x$  fissata pari al valore scelto per il fascio di muoni in entrata. Si avranno dei valori mancanti per  $(y, z)$  se il rivelatore non vede il muone incidente;
- ▶ una variabile che identifica il voxel specifico del detector in cui il muone è entrato. Se il rivelatore non vede il muone incidente si avranno dei valori mancanti;
- ▶ l'energia iniziale del muone emesso dall'acceleratore (in MeV);
- ▶ le energie per ciascuno dei 4 fotoni rivelate dal detector (in MeV). Se nessuna di queste viene rivelata, se vengono emessi meno di 4 fotoni o se la *cattura k* non è avvenuta si avranno dei valori mancanti;
- ▶ le coordinate  $(y, z)$  per ciascuno dei 4 fotoni rilevate dal detector, e la coordinata  $x$  fissata pari al valore scelto per la posizione del piano di rivelatore. Se nessun fotone viene rivelato, se vengono emessi meno di 4 fotoni o se la *cattura k* non è avvenuta si avranno dei valori mancanti;
- ▶ una variabile che identifica, per ciascun fotone, il voxel specifico del detector in cui questi sono stati rivelati. Se nessun fotone viene rivelato, se vengono emessi meno di 4 fotoni o se la *cattura k* non è avvenuta si avranno dei valori mancanti;

- ▶ gli angoli reali ( $\theta$  e  $\phi$ ), noti dalla simulazione, per ciascuno dei 4 fotoni. Se vengono emessi meno di 4 fotoni o se la *cattura k* non è avvenuta si avranno dei valori mancanti. Inoltre, se l'energia campionata per il fotone è inferiore a 1 keV gli angoli non vengono riportati poiché in questo caso il fotone in questione viene subito assorbito e tali angoli non vengono nemmeno calcolati per ridurre al minimo l'onere computazionale;
- ▶ una variabile che identifica il voxel specifico del volume in cui il muone si è fermato. Se il muone è uscito dal volume si avranno dei valori mancanti.

Da una prima analisi esplorativa dei dati ottenuti si osserva che 17 071 243 muoni si sono fermati nel materiale, i restanti 6 928 757 risultano usciti dal volume. Per 11 834 674 muoni, tra i 17 071 243 che si arrestano nel volume, avviene la *cattura k*. La quantità di questi avvenimenti è dipendente dalle probabilità di cattura calcolate nel Capitolo 3 (Sezione 3.2).

In Figura 4.1 si mostra l'istogramma delle energie dei fotoni complessivamente rivelati dal detector. Come si evince dall'immagine, una semplice rappresentazione delle energie complessive permette di distinguere chiaramente i diversi materiali di cui il volume incognito è composto. Infatti, si vedono emergere nettamente i picchi distintivi dei tre elementi considerati nella simulazione, con eccezione di quelli a basse energie, che risultano meno evidenti.



**Figura 4.1:** Iistogramma delle energie dei fotoni complessivamente rivelate dal piano di rivelatore.

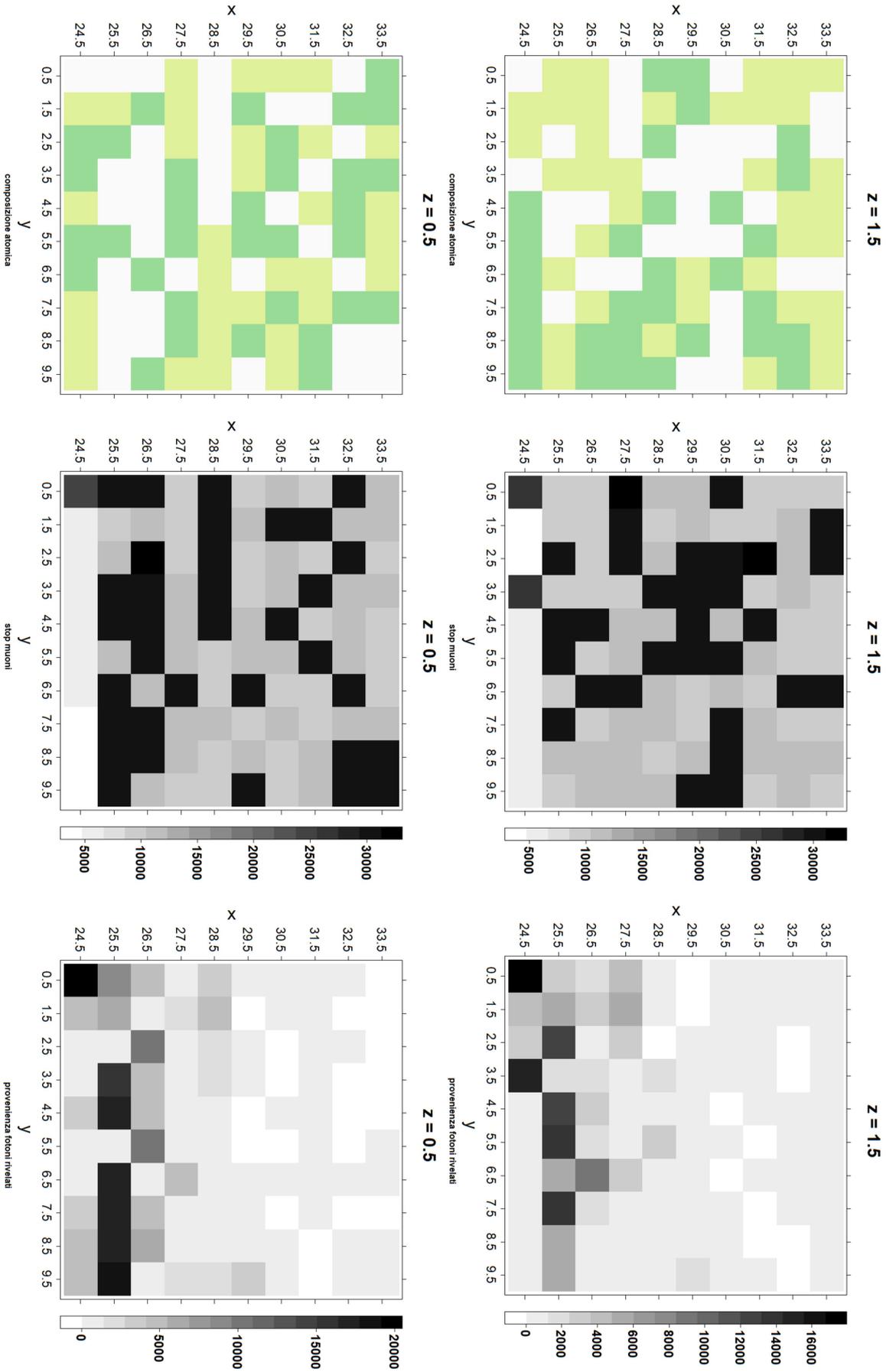
## 4.1 Distribuzioni all'interno del volume dei muoni incidenti e dei fotoni rivelati

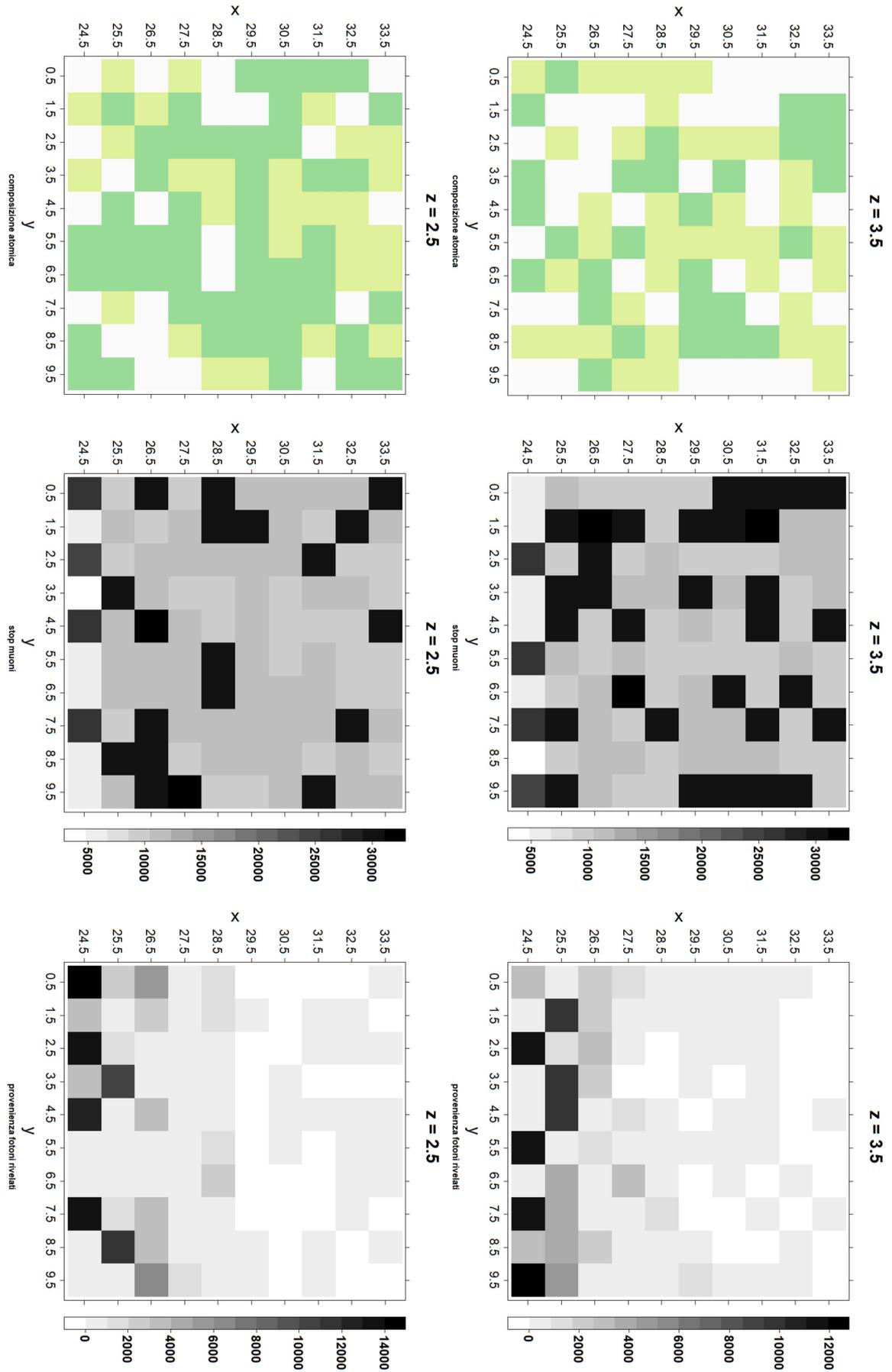
In Figura 4.6 si mostrano tre distribuzioni delle quantità ottenute dalla simulazione, utili a comprendere al meglio la situazione ottenuta. In particolare si presentano: la composizione atomica del volume, la quantità di muoni che si fermano nel materiale e la quantità di fotoni rivelati dal detector provenienti da ciascuno dei voxel del volume. Tutte queste distribuzioni sono rappresentate strato per strato in  $z$ .

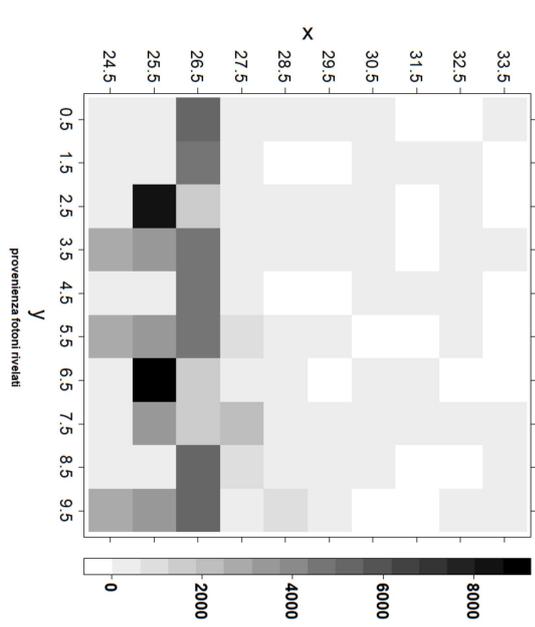
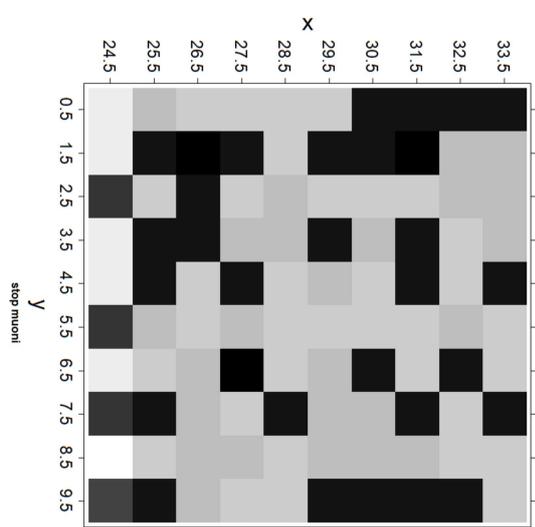
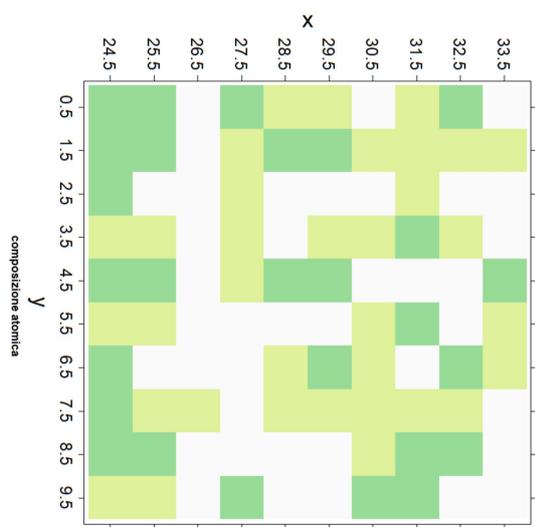
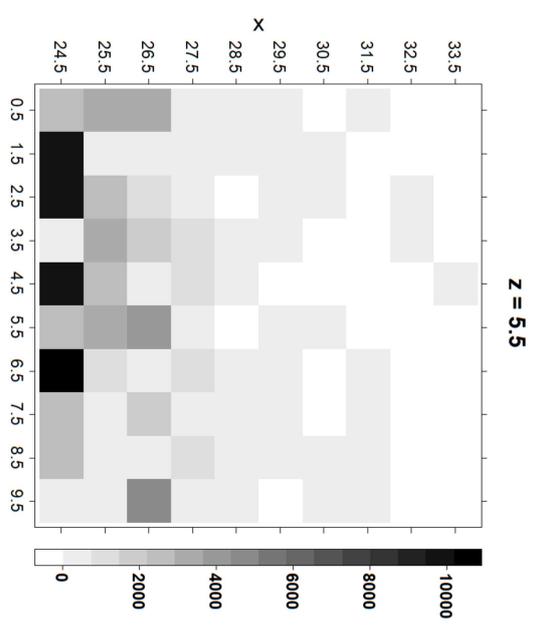
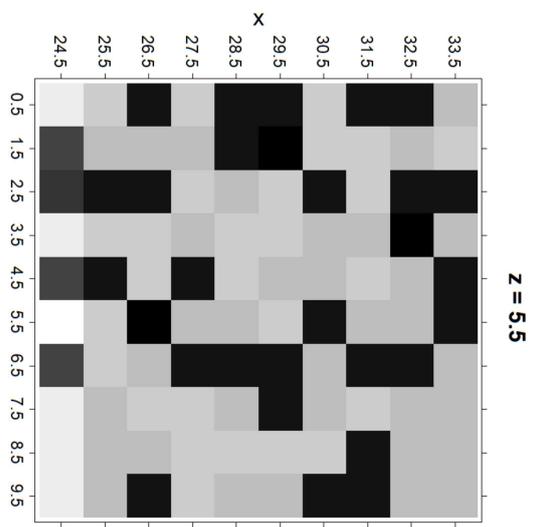
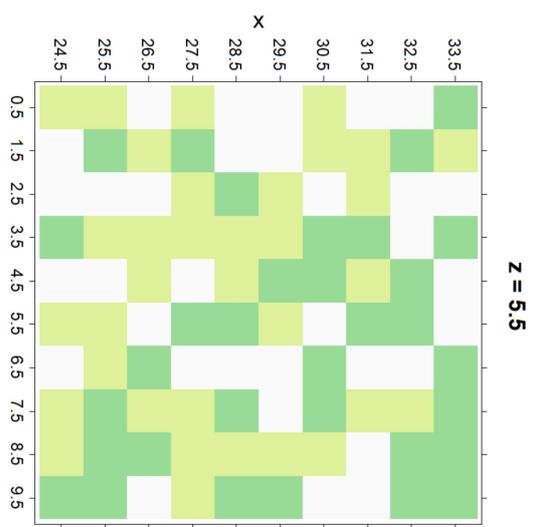
Si hanno quindi 10 strati quadrati di dimensione  $10\text{ cm} \times 10\text{ cm}$ , composti da 100 voxels ciascuno, dove le coordinate  $x$  e  $y$  sono rappresentate coerentemente con la geometria esposta in Figura 3.1. I valori indicati in  $x$ ,  $y$  e  $z$  fanno riferimento al centro di ciascun voxel.

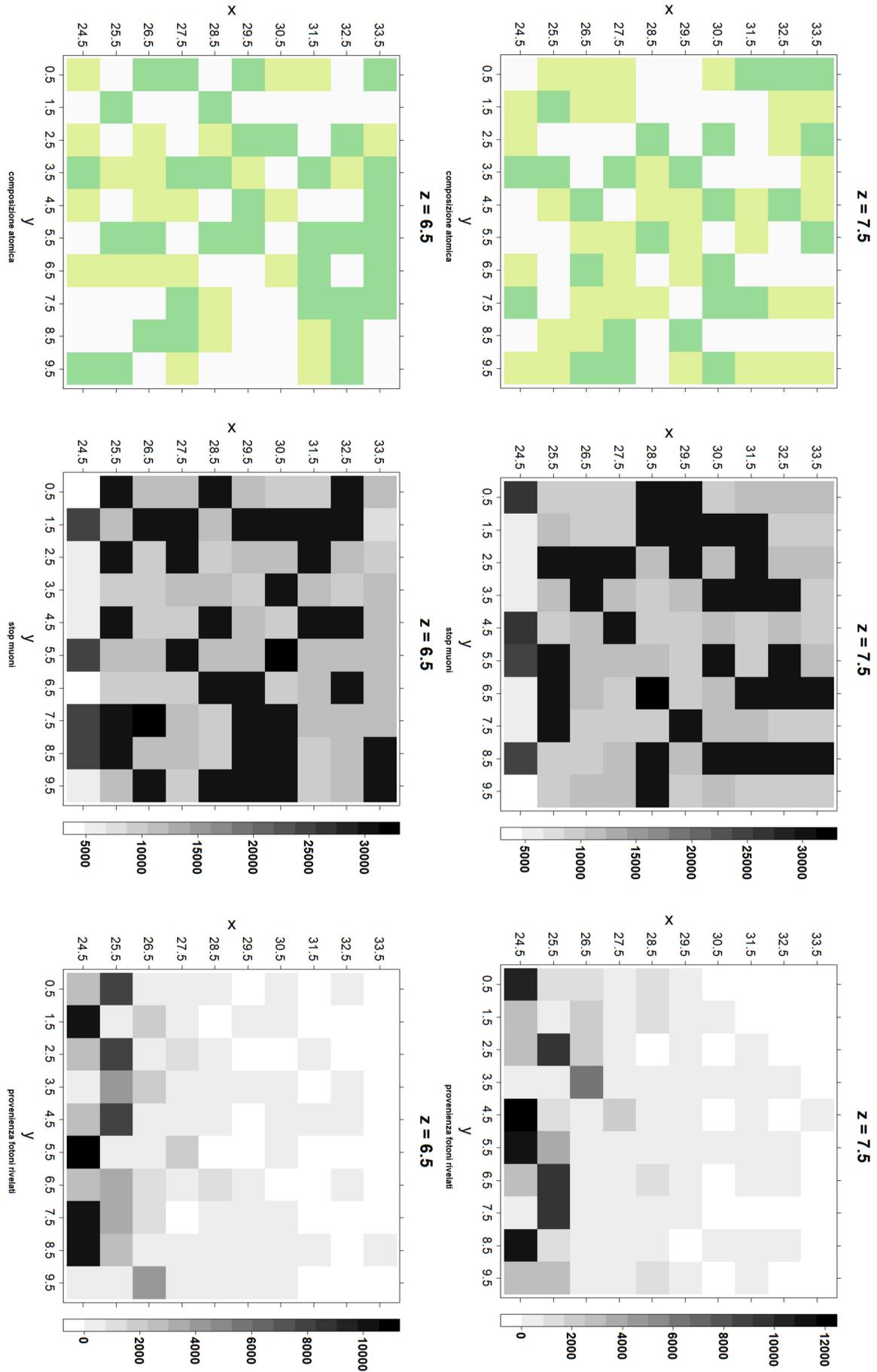
Le quantità di muoni che si fermano nel volume corrispondono alle numerosità effettive, note dalla simulazione, ovvero non si limitano a considerare solo quei muoni che sono stati visti dal detector. Si nota che si ha un numero non nullo di muoni che si fermano in ciascuno dei 1 000 voxels totali. Inoltre, emerge una distribuzione omogenea in termini di profondità sondata dai muoni, che è fortemente dipendente dalla specifica composizione atomica; infatti, non si osserva alcun particolare schema che faccia pensare alla necessità di specificare un diverso intervallo di energia dei muoni che incidono nel volume.

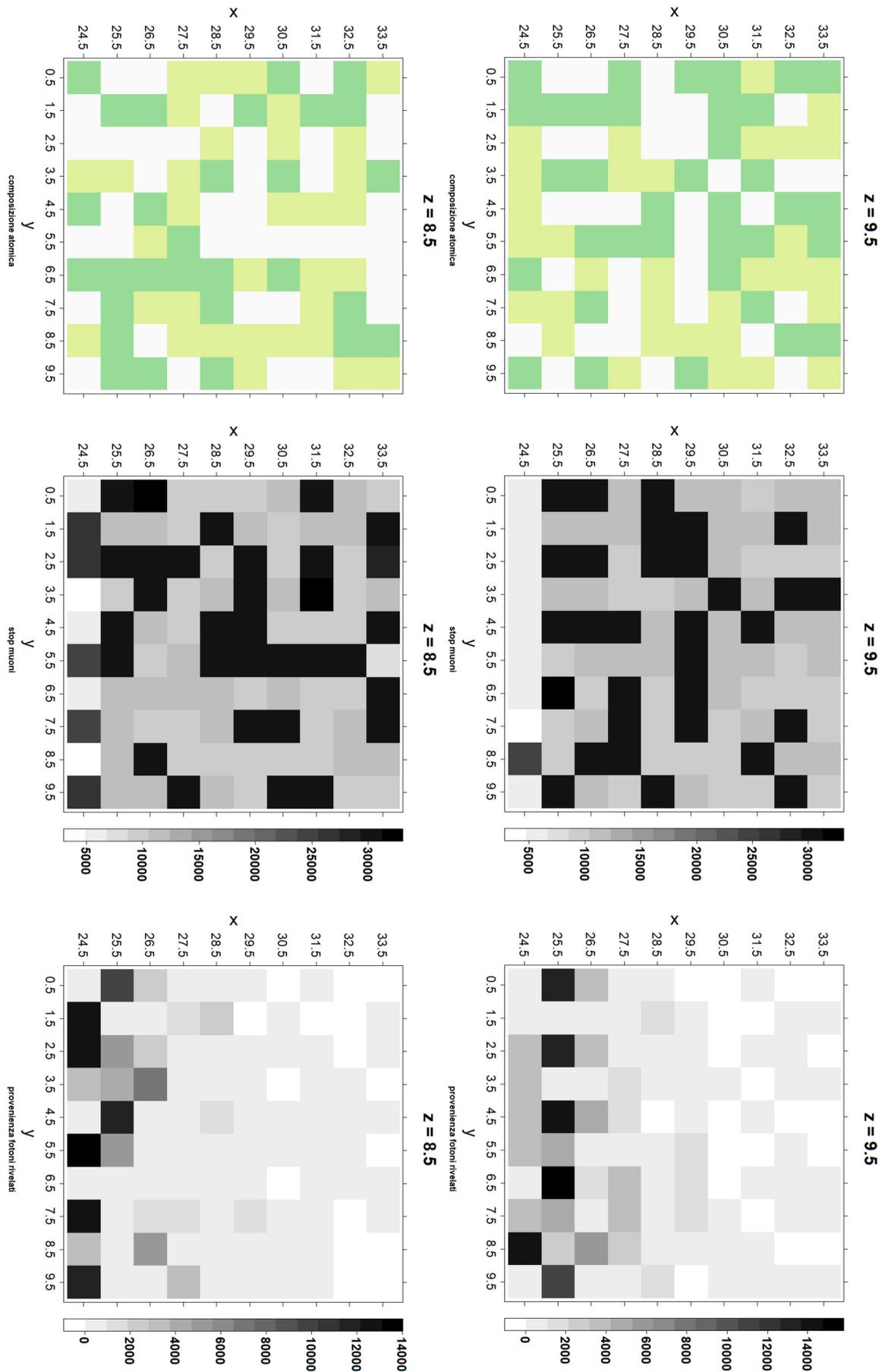
Per quanto riguarda la distribuzione, in termini di quantità, di fotoni rivelati dal detector provenienti da ciascuno dei voxels del volume, si osserva che i fotoni rivelati in totale sono 1 433 984. Questi provengono da 954 voxels distinti sui 1 000 totali. Com'è possibile notare dalla Figura 4.6, la maggioranza dei fotoni proviene dai voxels corrispondenti alle coordinate  $x$  più vicine al rivelatore, invece, dalle coordinate in  $x$  più lontane, raramente proviene qualche fotone. Ciò è consistente con il fatto che questi, dovendo attraversare più materiale, hanno una minore probabilità di sopravvivenza complessiva. Ne consegue, in generale, la necessità di emettere un numero elevato di muoni per riuscire ad ottenere una quantità di informazione sufficiente all'elaborazione statistica successiva che dovrà determinare la composizione atomica.











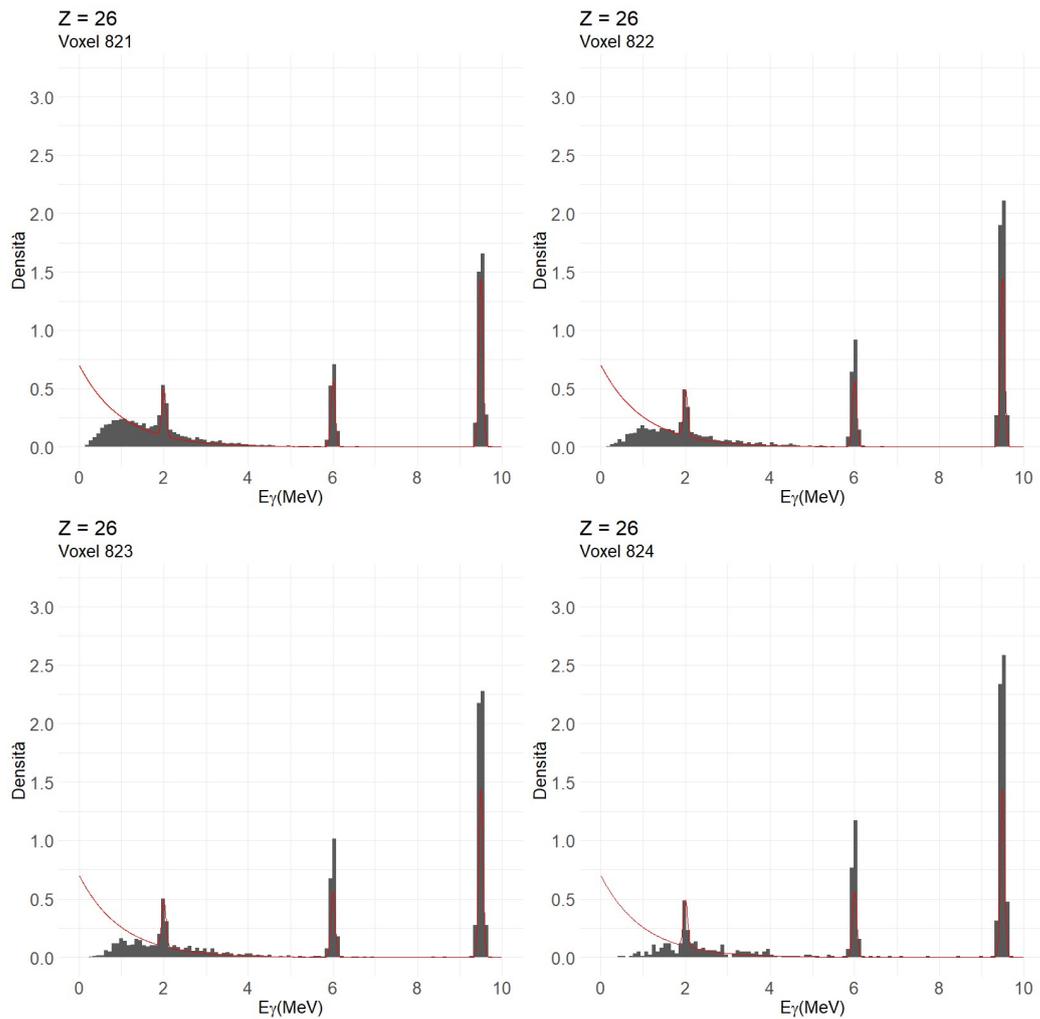
**Figura 4.6:** Vengono rappresentate: la composizione atomica del volume (■ carbonio, ■ silicio, □ ferro); la quantità di muoni che si fermano nel volume incognito (si fa riferimento al totale dei muoni generati, e non solo quelli che sono stati visti dal detector); la quantità di fotoni rivelati provenienti da ciascun voxel. Tutte le rappresentazioni elencate vengono mostrate al variare degli strati del volume sull'asse  $z$ .

## 4.2 Distribuzioni rivelabili dell'energia dei fotoni dai diversi elementi

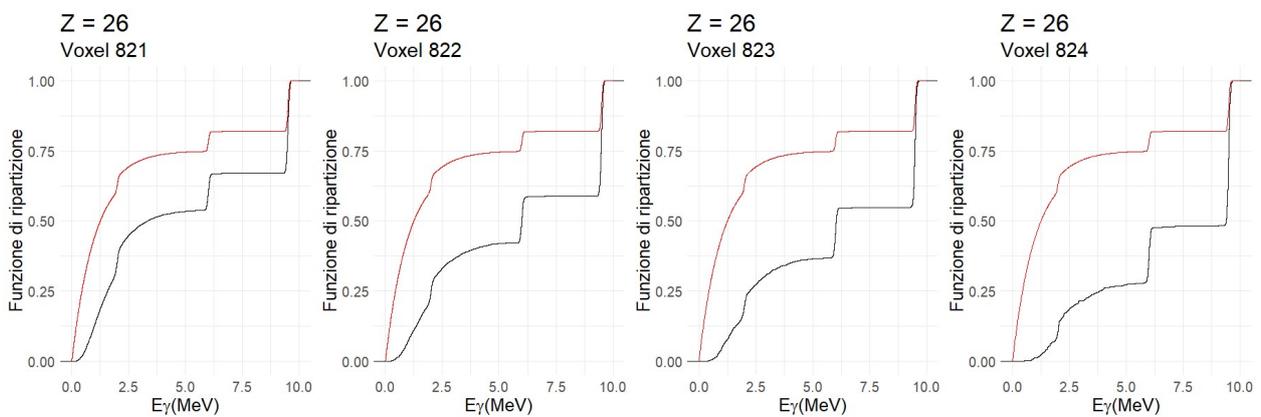
Le energie dei fotoni provenienti da un voxel sono informative sul numero atomico corrispondente. In Figura 4.7 si mostrano le distribuzioni empiriche delle energie rivelate in 4 voxels di uguale numero atomico, confrontate con la reale densità dalle quali tali energie sono state generate. I 4 voxels scelti hanno la peculiarità di essere affiancati lungo l'asse  $x$ . Questo mette in evidenza l'attenuazione dei fotoni emessi e la distorsione dello spettro delle energie, che diventa via via più importante man mano che si avanza nello spessore del volume.

Come si nota dall'immagine, le distribuzioni empiriche delle energie mantengono i picchi caratteristici della distribuzione del numero atomico corrispondente. Tuttavia, la distribuzione originale ha molta della massa di probabilità vicino allo zero, cosa che non viene rispecchiata dalla distribuzione empirica (coerentemente col fatto che energie basse implicano lunghezze di assorbimento inferiori e pertanto anche una bassa, se non nulla, probabilità di sopravvivenza del fotone). Quest'ultimo fatto viene maggiormente messo in evidenza dalla Figura 4.8, che mette a confronto le funzioni di ripartizioni empiriche e teoriche. Infatti, osservando le funzioni di ripartizioni empiriche è ancora più chiaro come energie provenienti da voxels più lontani lungo l'asse  $x$  rispetto al rivelatore, dovendo queste attraversare più materiale, abbiano densità sempre più differenti rispetto alla distribuzione che le ha generate. Più ci si allontana dal rivelatore e più la densità delle energie provenienti da un dato voxel avrà meno massa di probabilità nei picchi associati a basse energie, mentre aumenterà la massa di probabilità nei picchi corrispondenti ad energie maggiori.

Queste considerazioni, illustrate per il ferro, si estendono in modo analogo agli altri due materiali di cui il volume è composto.



**Figura 4.7:** Istogrammi delle energie dei fotoni rivelate dal detector, provenienti da 4 voxels distinti affiancati lungo l'asse  $x$  (informazioni note dalla simulazione). In rosso (—) si sovrappone la funzione di densità teorica da cui queste sono state generate.



**Figura 4.8:** Confronto fra funzione di ripartizione empirica (—) e teorica (—). La funzione di ripartizione empirica si è ottenuta con le energie dei fotoni rivelate dal detector provenienti da 4 voxels distinti affiancati lungo l'asse  $x$  (informazioni note dalla simulazione); la funzione di ripartizione teorica è ricavata dalla funzione di densità teorica da cui le energie sono state generate.

**UN POSSIBILE APPROCCIO AL PROBLEMA**

**INVERSO**



## Il problema inverso e la sua risoluzione

Nelle Sezioni precedenti si è trattato estesamente il problema diretto: nota la composizione atomica del volume si è ottenuto l'output derivante dall'emissione di un fascio di muoni incidente in quest'ultimo. Nelle successive Sezioni si vuole affrontare il problema opposto: dato l'output ottenuto dal problema diretto, si vuole determinare l'input che l'ha prodotto, quando questo non è supposto noto. L'obiettivo del problema inverso è dunque quello di determinare la composizione atomica del volume che ha prodotto i dati ottenuti dal detector.

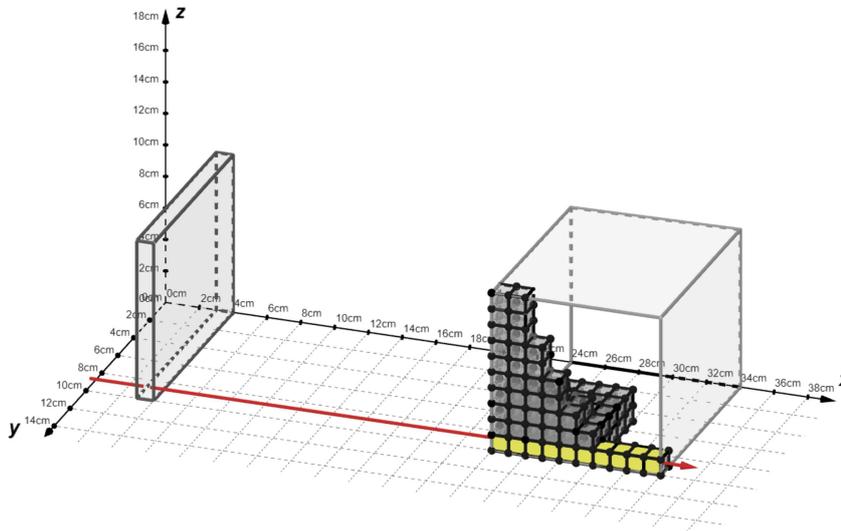
Ci si addentra pertanto nella situazione reale in cui si dispone soltanto dei dati forniti dal rivelatore. Energie e posizioni dei fotoni che incidono nel detector a seguito della *cattura k* sono note. Inoltre, anche l'energia e la posizione dei muoni incidenti associata ai fotoni che vengono successivamente rivelati è nota. L'energia dei muoni è completamente deterministica, in quanto dettata dal modo in cui si vuole impostare l'acceleratore. Questa considerazione non vale anche per la corrispondente posizione: si è assunto di misurare la posizione del muone incidente con lo stesso rivelatore utilizzato per la misurazione dei fotoni. Questo, in pratica, è perfettamente lecito e risulta una scelta obbligata nel caso in cui la sorgente di muoni a disposizione non consenta un fascio sufficientemente collimato, tale da permettere una più accurata conoscenza della posizione con la direzione nota impostata, che utilizzando la posizione letta da un detector. Ovviamente, nel caso in questione, avendo assunto una sorgente di muoni ben collimata, si sarebbe potuto in alternativa assumere le coordinate di entrata del muone note, pari alla direzione del fascio impostata nell'acceleratore.

Chiaramente, si conosce la geometria del volume da analizzare, che si decide di suddividere in voxels di  $1\text{ cm} \times 1\text{ cm} \times 1\text{ cm}$  per l'analisi inferenziale, rispecchiando la suddivisione utilizzata in fase di simulazione.

Ciò che è fondamentale alla ricostruzione della mappa della composizione atomica del volume è la distanza lungo l'asse  $x$  in cui il muone si è fermato all'interno del materiale. Infatti, essendo il fascio incidente ben collimato, si può assumere che questo si propaghi parallelamente all'asse  $x$ , andando ad individuare una sezione contigua di voxels, come rappresentato in Figura 5.1. Se fosse nota la distanza di stop del muone

lungo l'asse  $x$ , questa andrebbe ad individuare univocamente il voxel in cui la *cattura*  $k$  è avvenuta. Associando un insieme di energie dei fotoni al voxel corrispondente al punto di *cattura*  $k$  da cui queste sono state emesse, l'individuazione del numero atomico risulta di facile identificazione, visti i picchi di energie caratteristici dei diversi materiali.

Si può quindi ripensare il problema in un'ottica di dati mancanti e dati osservati, dove i dati mancanti coincidono con il punto di stop sull'asse  $x$  del muone che incide nel volume. Se si disponesse dei dati mancanti, oltre a quelli effettivamente osservati, risulterebbe naturale la formalizzazione del problema da un punto di vista inferenziale.



**Figura 5.1:** Fascio di muoni incidenti nel volume, rappresentato dal vettore in rosso ( $\rightarrow$ ). I possibili voxels in cui i muoni possono essersi fermati sono mostrati in giallo (■).

## 5.1 Algoritmo EM

L'algoritmo EM è un metodo iterativo utile per risolvere problemi inferenziali nei quali il problema si formalizza in maniera naturale in termini di dati mancanti ed osservati, dove l'eventuale osservazione dei primi faciliterebbe la risoluzione del problema. Risulta dunque giustificata l'applicazione di tale algoritmo in questo contesto.

La procedura dell'algoritmo consta di due passi che vengono iterati sequenzialmente: il primo passo consiste nel calcolo di un valore atteso (*Expectation step*), il secon-

do procede alla massimizzazione del valore atteso ottenuto al passo precedente (*Maximization step*).

Formalmente, dato un insieme di dati osservati  $\mathbf{x}$  provenienti dalla distribuzione  $g(\mathbf{x}; \theta)$ , l'algoritmo EM si avvale della seguente rappresentazione, che comprende i dati mancanti  $\mathbf{z}$  (Robert e Casella 2004; Robert e Casella 2010):

$$g(\mathbf{x}; \theta) = \int_{\mathbf{Z}} f(\mathbf{x}, \mathbf{z}; \theta) d\mathbf{z} . \quad (5.1)$$

Pertanto,  $f(\mathbf{x}, \mathbf{z}; \theta)$  corrisponde alla densità congiunta di  $(\mathbf{X}, \mathbf{Z})$ , con relativa verosimiglianza  $L^c(\theta; \mathbf{x}, \mathbf{z})$ , denominata *verosimiglianza per i dati completi*.

L'obiettivo è quello di ottenere la stima di massima verosimiglianza dei parametri in  $\theta$ ,  $\hat{\theta}$ , ovvero:

$$\hat{\theta} = \arg \max_{\theta} L(\theta; \mathbf{x}) , \quad (5.2)$$

dove  $L(\theta; \mathbf{x}) = g(\mathbf{x}; \theta)$  e  $L(\theta; \mathbf{x})$  viene denotata *verosimiglianza per i dati osservati*.

Si indica con  $k(\mathbf{z}|\mathbf{x}; \theta)$  la distribuzione dei dati mancanti  $\mathbf{z}$  condizionata ai dati osservati  $\mathbf{x}$ . Questa, per definizione di probabilità condizionata, può essere scritta come:

$$k(\mathbf{z}|\mathbf{x}; \theta) = \frac{f(\mathbf{x}, \mathbf{z}; \theta)}{g(\mathbf{x}; \theta)} . \quad (5.3)$$

Scrivendo la 5.3 in termini di verosimiglianza, e prendendo il logaritmo a destra e a sinistra dell'equazione, si ottiene:

$$\log L(\theta; \mathbf{x}) = \log L^c(\theta; \mathbf{x}, \mathbf{z}) - \log k(\mathbf{z}|\mathbf{x}; \theta) ; \quad (5.4)$$

applicando il valore atteso rispetto alla densità  $k(\mathbf{z}|\mathbf{x}; \theta_0)$  ad entrambi i lati della 5.4 si ricava, per ogni valore di  $\theta_0$ , la relazione:

$$\log L(\theta; \mathbf{x}) = E_{\mathbf{Z}|\mathbf{x}; \theta_0}[\log L^c(\theta; \mathbf{x}, \mathbf{Z})] - E_{\mathbf{Z}|\mathbf{x}; \theta_0}[\log k(\mathbf{Z}|\mathbf{x}; \theta)] . \quad (5.5)$$

Si nota infatti che vale la seguente uguaglianza:

$$\begin{aligned}
 E_{\mathbf{Z}|\mathbf{x};\theta_0}[\log L(\theta;\mathbf{x})] &= \int_Z \log L(\theta;\mathbf{x}) \cdot k(\mathbf{z}|\mathbf{x};\theta_0) d\mathbf{z} \\
 &= \int_Z \log L(\theta;\mathbf{x}) \cdot \frac{f(\mathbf{x},\mathbf{z};\theta_0)}{g(\mathbf{x};\theta_0)} d\mathbf{z} \\
 &= \frac{\log L(\theta;\mathbf{x})}{g(\mathbf{x};\theta_0)} \int_Z f(\mathbf{x},\mathbf{z};\theta_0) d\mathbf{z} \\
 &= \frac{\log L(\theta;\mathbf{x})}{g(\mathbf{x};\theta_0)} g(\mathbf{x};\theta_0) \\
 &= \log L(\theta;\mathbf{x}) .
 \end{aligned} \tag{5.6}$$

### Algoritmo EM

L'algoritmo EM ripete, per  $k \in \{0, 1, 2, \dots\}$ , i seguenti passi:

1. *Expectation step*: calcola  $E_{\mathbf{Z}|\mathbf{x};\hat{\theta}^{(k)}}[\log L^c(\theta;\mathbf{x},\mathbf{Z})]$ .
2. *Maximization step*: ottiene  $\hat{\theta}^{(k+1)} = \arg \max_{\theta} E_{\mathbf{Z}|\mathbf{x};\hat{\theta}^{(k)}}[\log L^c(\theta;\mathbf{x},\mathbf{Z})]$ .

$\hat{\theta}^{(0)}$  viene inizializzato ad un valore arbitrario. I due passi vengono iterati sequenzialmente fino a quando  $\|\hat{\theta}^{(k+1)} - \hat{\theta}^{(k)}\| \leq c$ , con  $c$  valore di tolleranza fissato e  $\|\cdot\|$  un'appropriata misura di distanza. Si ottiene così, passo dopo passo, la sequenza di stime  $\hat{\theta}^{(1)}, \hat{\theta}^{(2)}, \dots, \hat{\theta}^{(k)}, \hat{\theta}^{(k+1)}, \dots$

Il successo dell'algoritmo si basa sui due teoremi seguenti:

**Teorema 5.1.1** *La sequenza  $\hat{\theta}^{(1)}, \hat{\theta}^{(2)}, \dots, \hat{\theta}^{(k)}, \hat{\theta}^{(k+1)}, \dots$  ottenuta con l'algoritmo EM è tale che*

$$L(\hat{\theta}^{(k+1)};\mathbf{x}) \geq L(\hat{\theta}^{(k)};\mathbf{x}),$$

dove l'uguaglianza vale se e solo se

$$E_{\mathbf{Z}|\mathbf{x};\hat{\theta}^{(k)}}[\log L^c(\hat{\theta}^{(k+1)};\mathbf{x},\mathbf{Z})] = E_{\mathbf{Z}|\mathbf{x};\hat{\theta}^{(k)}}[\log L^c(\hat{\theta}^{(k)};\mathbf{x},\mathbf{Z})].$$

**Teorema 5.1.2** *Se il valore atteso della log-verosimiglianza per i dati completi,  $E_{\mathbf{Z}|\mathbf{x};\theta_0}[\log L^c(\theta;\mathbf{x},\mathbf{Z})]$ , è continuo in  $\theta$  e  $\theta_0$ , allora ogni punto limite di una sequenza ottenuta dall'EM  $(\hat{\theta}^{(1)}, \hat{\theta}^{(2)}, \dots, \hat{\theta}^{(k)}, \hat{\theta}^{(k+1)}, \dots)$  è un punto stazionario di  $L(\theta;\mathbf{x})$ , e  $L(\hat{\theta}^{(k)};\mathbf{x})$  converge monotonicamente a  $L(\hat{\theta};\mathbf{x})$  per qualche punto stazionario  $\hat{\theta}$ .*

Il Teorema 5.1.1 afferma che massimizzando  $E_{\mathbf{Z}|\mathbf{x};\hat{\theta}^{(k)}}[\log L^c(\theta;\mathbf{x},\mathbf{Z})]$  ad ogni passo, la verosimiglianza per i dati osservati  $L(\theta;\mathbf{x})$  incrementa ad ogni iterazione. Ne consegue che l'obiettivo di massimizzare  $\log L(\theta;\mathbf{x})$  viene portato avanti tralasciando il secondo termine sulla destra nell'equazione 5.5.

Il successivo Teorema 5.1.2 asserisce che l'algoritmo EM non dà alcuna garanzia di convergenza ad un massimo globale di  $L(\theta;\mathbf{x})$ . Infatti, la convergenza è garantita per un punto stazionario, perciò la stima finale ottenuta potrebbe essere un punto di massimo locale o un punto di sella.

Poiché la stima  $\hat{\theta}^{(k)}$ , ad ogni iterazione, si muove sempre verso la direzione in cui la funzione è più alta fintanto che non trova un punto stazionario, è facile incorrere in mode locali. Per ridurre la probabilità che ciò accada è opportuno provare diversi punti iniziali  $\hat{\theta}^{(0)}$  casuali e controllare la convergenza nei diversi casi.



# Applicazione dell'algoritmo EM per l'identificazione atomica

# 6

Sulla base di quanto evidenziato nel Capitolo 5, si propone lo sviluppo dell'algoritmo EM in maniera indipendente su ogni striscia di voxels possibile, identificata dal punto di entrata del muone. Nello specifico, per fare inferenza sui potenziali numeri atomici di un insieme di voxels contigui lungo l'asse  $x$ , che coprono tutta la larghezza del volume, si isolano le energie dei fotoni rivelate corrispondenti ai punti  $(x, y, z)$  di entrata del muone che vanno ad incidere su tali voxels. Ad esempio, con riferimento alla Figura 5.1, si selezionano tutti i muoni con coordinate tali da permettere l'intersezione con i voxels in giallo, e si estraggono tutte le energie dei fotoni rivelate corrispondenti. L'EM verrà dunque applicato solo a tali dati, con l'obiettivo di determinare la composizione atomica della striscia di voxels in giallo. Tale procedura viene quindi iterata per tutte le striscie di voxels possibili che vanno a comporre il volume.

Questo modo di procedere semplifica enormemente il problema, dovendo determinare la composizione atomica di un numero molto ridotto di voxels rispetto alla numerosità complessiva. Questo viene naturale dal momento che si dispone di un acceleratore, che permette di poter determinare a priori una quantità di coordinate possibili in cui i muoni hanno subito uno stop nel materiale, escludendo completamente tutte le coordinate che non rientrano in questo insieme.

## 6.1 Notazione

Data una striscia di voxels lungo l'asse  $x$  del volume incognito, si dispone delle seguenti quantità:

- ▶  $E = (E_1, E_2, \dots, E_i, \dots, E_I)^T$ , energie dei fotoni complessivamente rivelate su tutto il piano di rivelatore;
- ▶  $E_\mu = (E_{\mu_1}, E_{\mu_2}, \dots, E_{\mu_i}, \dots, E_{\mu_I})^T$  energie dei muoni incidenti nel materiale associate a ciascuna energia dei fotoni rivelati;

Nel seguito il pedice  $j$  indica uno dei voxel della striscia identificata,  $j = 1, 2, \dots, J$ , con  $J$  pari al numero di voxels totali nella striscia. Ovvero, poiché si è scelto di

fare inferenza sui voxels sezionando il materiale in cubi di  $1 \text{ cm} \times 1 \text{ cm} \times 1 \text{ cm}$ ,  $J$  corrisponde alla larghezza in centimetri del volume.

Si indica invece con  $T$  la quantità totale di diversi numeri atomici di cui il volume è composto, che viene assunta nota. Il pedice  $t$ , che scorre nell'insieme  $\{1, 2, \dots, T\}$ , individua uno dei possibili numeri atomici di cui un dato voxel è composto.

Si può notare che non si sono menzionate le posizioni delle energie dei fotoni rivelate dal detector. Tale informazione, sebbene possa essere nota come descritto nei capitoli precedenti, non risulta necessaria nello sviluppo dell' algoritmo formalizzato di seguito.

## 6.2 Ipotesi sul processo generatore dei dati

Si pensa ai dati completi,  $X_i = (E_i, S_i)$ , per  $i = 1, 2, \dots, I$ , come costituiti dai dati osservati ( $E_i$ ) e mancanti ( $S_i$ ). Ad ogni energia rivelata del fotone, è quindi associata una variabile casuale  $S_i$  che determina la profondità lungo l'asse  $x$  del voxel di provenienza dell'energia  $E_i$ .

Formalmente,

$$S_i \sim \text{Multinomiale}_J(1, \theta_i = (\theta_{1i}, \theta_{2i}, \dots, \theta_{ji}, \dots, \theta_{Ji})^T). \quad (6.1)$$

Dunque  $S_i$  è un vettore con  $J$  componenti,  $S_i = (S_{1i}, S_{2i}, \dots, S_{ji}, \dots, S_{Ji})^T$ , con distribuzione di probabilità data da:

$$\mathbb{P}(S_i = (S_{1i}, S_{2i}, \dots, S_{ji}, \dots, S_{Ji})^T; \theta_i) = \theta_{1i}^{S_{1i}} \cdot \theta_{2i}^{S_{2i}} \cdot \dots \cdot \theta_{ji}^{S_{ji}} \cdot \dots \cdot \theta_{Ji}^{S_{Ji}}, \quad (6.2)$$

dove  $\sum_{j=1}^J S_{ji} = 1$  e  $\sum_{j=1}^J \theta_{ji} = 1$ , con  $\theta_{ji} \in (0, 1)$ .

Perciò,  $S_{ji} = 1$  per un  $j$  in  $\{1, 2, \dots, J\}$  significa che l'energia  $E_i$  proviene dal voxel  $j$ .

Dunque si può scrivere  $j = 1 \cdot S_{1i} + 2 \cdot S_{2i} + \dots + J \cdot S_{Ji} = \sum_{j=1}^J j \cdot S_{ji}$ .

I parametri in  $\theta_i$  sono noti, e la loro definizione fa uso delle energie dei muoni  $E_{\mu_i}$ . In particolare  $\theta_{ji}$  indica la probabilità che l'energia  $i$ -esima provenga dal voxel  $j$ .

Ipotizzando in un primo momento di conoscere il dato mancante  $S_i$ , si può pensare di ottenere un valore  $T$ -dimensionale  $z_{ij}$ , generato dalla variabile casuale

$$Z_i|S_{ji} = 1 \sim \text{Multinomiale}_T(1, p_j = (p_{1j}, p_{2j}, \dots, p_{tj}, \dots, p_{Tj})^T), \quad (6.3)$$

per  $j = 1, 2, \dots, J$ , dove  $p_j$  è un vettore costituito dalle probabilità che il numero atomico del voxel  $j$  sia uno dei  $T$  materiali possibili.

$z_{ij}$ , analogamente al vettore  $S_i$ , lo si può scrivere come  $z_{ij} = (z_{1ij}, z_{2ij}, \dots, z_{tij}, \dots, z_{Tij})^T$ .

Utilizzando il valore ottenuto  $z_{ij}$ , è possibile ipotizzare una distribuzione per le energie dei fotoni condizionate allo spessore di provenienza  $j$ , determinato da  $S_i$ . Si assume dunque di conoscere la distribuzione:

$$E_i|S_{ji} = 1; z_{ij} \sim f(E_i|S_{ji} = 1; z_{ij}), \quad (6.4)$$

per un  $j \in \{1, 2, \dots, J\}$ .

Poiché il vettore  $z_{ij}$  non è direttamente osservabile, si vuole ottenere la distribuzione di  $E_i|S_{ji} = 1$ , eliminando la dipendenza dal valore di  $z_{ij}$ . Questa la si ottiene sfruttando il fatto che  $z_{ij}$  può assumere  $T$  configurazioni possibili. Pertanto, facendo uso della formula delle probabilità totali, si ottiene:

$$\begin{aligned} f(E_i|S_{ji} = 1) &= \sum_{t=1}^T \mathbb{P}(Z_{tij} = 1) \cdot f(E_i|S_{ji} = 1; z_{tij} = 1) \\ &= \sum_{t=1}^T p_{tj} \cdot f(E_i|S_{ji} = 1; z_{tij} = 1), \end{aligned} \quad (6.5)$$

per un  $j \in \{1, 2, \dots, J\}$ .

Si osserva come la densità di probabilità di osservare un'energia del fotone, condizionatamente al fatto che questa proviene dal voxel  $j$ , determinato da  $S_i$ , dipenda soltanto, in termini di parametri di interesse, dalle probabilità che il voxel  $j$  sia uno dei  $T$  materiali possibili.

A questo punto è possibile scrivere la funzione di verosimiglianza per i dati completi  $X_i = (E_i, S_i)$ , per  $i = 1, 2, \dots, I$ . Questa risulta essere:

$$\begin{aligned}
L(p; E, S) &= \prod_{i=1}^I [f(E_i, S_i)] \\
&= \prod_{i=1}^I [f(E_i|S_i) \cdot \mathbb{P}(S_i)] \\
&= \prod_{i=1}^I [f(E_i|S_i) \cdot \prod_{j=1}^J \theta_{ji}^{s_{ji}}] \\
&= \prod_{i=1}^I \left[ \sum_{j=1}^J s_{ji} \cdot f(E_i|s_{ji} = 1) \cdot \theta_{ji} \right], \tag{6.6}
\end{aligned}$$

dove  $p$  rappresenta il vettore dei parametri di interesse, ovvero  $p = (p_1^T, p_2^T, \dots, p_j^T, \dots, p_J^T)^T$ .

Dalla 6.6 è possibile ricavare la funzione di log-verosimiglianza associata:

$$\begin{aligned}
l(p; E, S) &= \sum_{i=1}^I \left[ \sum_{j=1}^J s_{ji} \cdot \log f(E_i|s_{ji} = 1) + \sum_{j=1}^J s_{ji} \cdot \log \theta_{ji} \right] \\
&= \sum_{i=1}^I \left[ \sum_{j=1}^{J-1} s_{ji} \cdot \log f(E_i|s_{ji} = 1) + \left(1 - \sum_{j=1}^{J-1} s_{ji}\right) \cdot \log f(E_i|s_{ji} = 1) + \right. \\
&\quad \left. + \sum_{j=1}^{J-1} s_{ji} \cdot \log \theta_{ji} + \left(1 - \sum_{j=1}^{J-1} s_{ji}\right) \cdot \log \theta_{ji} \right], \tag{6.7}
\end{aligned}$$

dove la quantità  $\sum_{j=1}^J s_{ji} \cdot \log \theta_{ji} = \sum_{j=1}^{J-1} s_{ji} \cdot \log \theta_{ji} + \left(1 - \sum_{j=1}^{J-1} s_{ji}\right) \cdot \log \theta_{ji}$  può essere ignorata in quanto indipendente dai parametri di interesse contenuti in  $p$ .

L'ultima uguaglianza nella 6.7 è dovuta al vincolo  $\sum_{j=1}^J s_{ji} = 1$ , dove si utilizza il fatto che  $s_{ji} = 1 - \sum_{j=1}^{J-1} s_{ji}$ .

Per completezza, in equazione 6.8, si riporta la funzione di verosimiglianza per i dati osservati.

$$\begin{aligned}
L(p; E) &= \prod_{i=1}^I f(E_i) \\
&= \prod_{i=1}^I \sum_{j=1}^J f(E_i | S_{ji} = 1) \mathbb{P}(S_{ji} = 1) \\
&= \prod_{i=1}^I \sum_{j=1}^J \left[ \sum_{t=1}^T p_{tj} f(E_i | S_{ji} = 1; z_{tij} = 1) \right] \theta_{ji}. \tag{6.8}
\end{aligned}$$

### 6.3 E-step

L'*expectation step* consiste nel calcolare il valore atteso della funzione di log-verosimiglianza dei dati completi, rispetto alla distribuzione dei dati mancanti condizionata ai valori osservati. Il presente valore atteso, ottenuto utilizzando la 6.7, risulta:

$$\begin{aligned}
E_{S|E; \hat{p}^{(k)}} [L(p; E, S)] &= \sum_{i=1}^I \left[ \sum_{j=1}^J E[S_{ji} | E_i; \hat{p}^{(k)}] \cdot \log f(E_i | s_{ji} = 1) \right] \\
&= \sum_{i=1}^I \left[ \sum_{j=1}^{J-1} E[S_{ji} | E_i; \hat{p}^{(k)}] \cdot \log f(E_i | s_{ji} = 1) + \right. \\
&\quad \left. + \left( 1 - \sum_{j=1}^{J-1} E[S_{ji} | E_i; \hat{p}^{(k)}] \right) \cdot \log f(E_i | s_{ji} = 1) \right] \\
&= \sum_{i=1}^I \left[ \sum_{j=1}^{J-1} E[S_{ji} | E_i; \hat{p}^{(k)}] \cdot \log \left( \sum_{t=1}^T p_{tj} \cdot f(E_i | S_{ji} = 1; z_{tij} = 1) \right) + \right. \\
&\quad \left. + \left( 1 - \sum_{j=1}^{J-1} E[S_{ji} | E_i; \hat{p}^{(k)}] \right) \cdot \log \left( \sum_{t=1}^T p_{tj} \cdot f(E_i | S_{ji} = 1; z_{tij} = 1) \right) \right]. \tag{6.9}
\end{aligned}$$

Sfruttando il calcolo delle probabilità, non è complicato ricavare i valori attesi condizionati  $E[S_{ji} | E_i; \hat{p}^{(k)}]$  necessari all'E-step. Infatti, è sufficiente osservare che ciascuna variabile  $S_{ji}$  per  $j \in \{1, 2, \dots, J\}$  può assumere solo due valori possibili, pari a 1 o 0, con probabilità  $\theta_{ji}$  e  $1 - \theta_{ji}$  rispettivamente. Sfruttando inoltre la formula delle probabilità condizionate e delle probabilità totali, si ottiene:

$$\begin{aligned}
E[S_{ji}|E_i; \widehat{p}^{(k)}] &= 1 \cdot \mathbb{P}(S_{ji} = 1|E_i; \widehat{p}^{(k)}) + 0 \cdot \mathbb{P}(S_{ji} = 0|E_i; \widehat{p}^{(k)}) \\
&= \mathbb{P}(S_{ji} = 1|E_i; \widehat{p}^{(k)}) \\
&= \frac{f(S_{ji} = 1, E_i; \widehat{p}^{(k)})}{f(E_i; \widehat{p}^{(k)})} \\
&= \frac{f(E_i|S_{ji} = 1; \widehat{p}^{(k)}) \cdot \mathbb{P}(S_{ji} = 1)}{\sum_{j=1}^J \mathbb{P}(S_{ji} = 1) \cdot f(E_i|S_{ji} = 1; \widehat{p}^{(k)})} \\
&= \frac{f(E_i|S_{ji} = 1; \widehat{p}^{(k)}) \cdot \theta_{ji}}{\sum_{j=1}^J \theta_{ji} \cdot f(E_i|S_{ji} = 1; \widehat{p}^{(k)})} \\
&= \frac{\theta_{ji} \sum_{t=1}^T \widehat{p}_{tj}^{(k)} \cdot f(E_i|S_{ji} = 1; z_{tij} = 1)}{\sum_{j=1}^J \theta_{ji} \sum_{t=1}^T \widehat{p}_{tj}^{(k)} \cdot f(E_i|S_{ji} = 1; z_{tij} = 1)}, \tag{6.10}
\end{aligned}$$

per  $j = 1, 2, \dots, J - 1$ .

## 6.4 M-step

La funzione da massimizzare rispetto ai parametri di interesse  $p$  nel *maximization step* si ottiene mettendo insieme le equazioni 6.9 e 6.10. Questa può essere riscritta nel seguente modo:

$$\begin{aligned}
E_{S|E; \widehat{p}^{(k)}}[l(p; E, S)] &= \sum_{i=1}^I \left[ \sum_{j=1}^{J-1} E[S_{ji}|E_i; \widehat{p}^{(k)}] \cdot \log\left(\sum_{t=1}^{T-1} p_{tj} \cdot f(E_i|S_{ji} = 1; z_{tij} = 1)\right) + \right. \\
&\quad \left. + \left(1 - \sum_{t=1}^{T-1} p_{tj}\right) \cdot f(E_i|S_{ji} = 1; z_{Tij} = 1)\right) + \\
&\quad \left. + \left(1 - \sum_{j=1}^{J-1} E[S_{ji}|E_i; \widehat{p}^{(k)}]\right) \cdot \log\left(\sum_{t=1}^{T-1} p_{tJ} \cdot f(E_i|S_{ji} = 1; z_{tij} = 1)\right) + \right. \\
&\quad \left. + \left(1 - \sum_{t=1}^{T-1} p_{tJ}\right) \cdot f(E_i|S_{ji} = 1; z_{Tij} = 1)\right) \Big], \tag{6.11}
\end{aligned}$$

dove le probabilità in  $p_j$  sono state riscritte in modo da rispettare il vincolo:  $\sum_{t=1}^T p_{tj} = 1$ . Dunque si è utilizzata la relazione  $p_{Tj} = 1 - \sum_{t=1}^{T-1} p_{tj}$ .

Dalla 6.11 si ricavano agevolmente tutte le derivate rispetto ai parametri di interesse contenuti in  $p_j$ . Si ottiene:

$$\frac{\partial E_{S|E;\widehat{p}^{(k)}}[l(p;E,S)]}{\partial p_{tj}} = \sum_{i=1}^I E[S_{ji}|E_i;\widehat{p}^{(k)}] \cdot \frac{[f(E_i|S_{ji}=1; z_{tij}=1) - f(E_i|S_{ji}=1; z_{Tij}=1)]}{\sum_{t=1}^{T-1} p_{tj} \cdot f(E_i|S_{ji}=1; z_{tij}=1) + (1 - \sum_{t=1}^{T-1} p_{tj}) \cdot f(E_i|S_{ji}=1; z_{Tij}=1)}, \quad (6.12)$$

per  $j = 1, 2, \dots, J-1$  e  $t = 1, 2, \dots, T-1$ .

$$\frac{\partial E_{S|E;\widehat{p}^{(k)}}[l(p;E,S)]}{\partial p_{tj}} = \sum_{i=1}^I (1 - \sum_{j=1}^{J-1} E[S_{ji}|E_i;\widehat{p}^{(k)}]) \cdot \frac{[f(E_i|S_{ji}=1; z_{tij}=1) - f(E_i|S_{ji}=1; z_{Tij}=1)]}{\sum_{t=1}^{T-1} p_{tj} \cdot f(E_i|S_{ji}=1; z_{tij}=1) + (1 - \sum_{t=1}^{T-1} p_{tj}) \cdot f(E_i|S_{ji}=1; z_{Tij}=1)}, \quad (6.13)$$

per  $t = 1, 2, \dots, T-1$ .

Le derivate ottenute, se uguagliate a 0, non portano ad una soluzione esplicita rispetto ai parametri  $p_{tj}$ , con  $t = 1, 2, \dots, T-1$  e  $j = 1, 2, \dots, J$ . Ovvero non è possibile ricavare in modo esplicito  $\widehat{p}^{(k+1)}$ . Tuttavia, è possibile massimizzare la 6.11 utilizzando metodi di massimizzazione numerica non lineare; mentre le derivate esplicite possono essere utilizzate per agevolare la massimizzazione.

## 6.5 Scelta della distribuzione delle energie condizionate allo spessore di provenienza

Nella precedente Sezione si è assunta nota la distribuzione in equazione 6.4. Questa permette di determinare a sua volta la distribuzione delle energie condizionate allo spessore di provenienza  $S_i$ , come mostrato in equazione 6.5.

Si vuole quindi identificare una forma parametrica opportuna per  $f(E_i|S_{ji}=1; z_{ij})$ . La scelta di questa densità può partire da considerazioni empiriche: come osservato in Figura 4.7, la massa di probabilità associata alle distribuzioni mistura che emerge dagli istogrammi, si sposta da sinistra verso destra man mano che ci si allontana dal rivelatore lungo l'asse  $x$ . Ci si attende che con l'aumentare della distanza, le prime distribuzioni della mistura continueranno ad attenuarsi fino a scomparire del tutto. Vista la forma analitica della probabilità di sopravvivenza di ciascun fotone

(equazione 3.9), ci si aspetta un'attenuazione maggiore all'aumentare della distanza attraversata, ponderata con il valore dell'energia del fotone, che più risulta elevata e più farà aumentare la probabilità di sopravvivenza, a parità di numero atomico e di spessore attraversato. Infatti, il coefficiente  $\lambda$  diminuisce con il diminuire dell'energia, e ciò si verifica per tutti gli elementi del volume. Tuttavia, la sopravvivenza dei fotoni è determinata anche dalla probabilità di interazione di questi con i diversi materiali attraversati e dalla loro corrispondente densità. Pertanto, derivare una misura dell'attenuazione dei fotoni si rivela complicato in mancanza dell'informazione sulla composizione atomica del volume. Ignorare i diversi materiali che i fotoni potrebbero aver attraversato nel loro percorso potrebbe portare ad una approssimazione poco accurata del fattore di assorbimento in molte configurazioni atomiche del volume. Perciò, si preferisce trascurare come queste distribuzioni si modifichino in funzione della distanza percorsa dai fotoni. Si decide dunque di mantenere una densità costante al variare dello spessore di provenienza del fotone, diversa solo a seconda del numero atomico di cui un ipotetico voxel è composto. Ovviamente, questa semplificazione comporta una minore accuratezza dell'algoritmo, in particolar modo per quanto riguarda l'identificazione di elementi per i quali corrisponde una distribuzione delle energie che ha molta della massa di probabilità in corrispondenza di picchi caratteristici di altri elementi e per la quale si ha, eventualmente, un numero inferiore di picchi che ne permettono la distinzione con altri materiali. In quest'ultimo caso la corretta identificazione dei voxels può risultare non ottimale.

Poiché le distribuzioni delle energie dei fotoni che si possono osservare per via sperimentale differiscono rispetto a quelle da cui sono state generate nel processo di simulazione, in particolar modo per la totale mancanza di massa per valori di energia prossimi allo zero, si decide di definire la densità  $f(E_i|S_{ji} = 1; z_{ij})$  come una mistura di una distribuzione gamma e diverse Gaussiane troncate tra  $(0, +\infty)$ . Infatti, come si nota più chiaramente dalla Figura 4.1, sembra ragionevole ipotizzare che la prima densità della mistura possa essere modellata da una distribuzione gamma, mentre le restanti densità possono essere definite in modo da rispecchiare le locazioni note dei picchi per un dato elemento.

Prima di riportare la forma analitica di  $f(E_i|S_{ji} = 1; z_{ij})$ , si introducono le quantità utilizzate per la sua definizione. In primo luogo è fondamentale l'identificazione degli elementi che compongono il volume per poter assegnare adeguatamente la

quantità di distribuzioni che compongono la mistura nei diversi casi: come emerge dalla Figura 4.1, un semplice istogramma delle energie complessivamente rivelate è sufficiente ad identificare i numeri atomici di cui il materiale è composto. Dunque il valore  $T$  viene agevolmente determinato. Si noti che l'importanza dei picchi in tale distribuzione dipende fortemente dalla composizione atomica reale ed ignota del volume (ad esempio, se solo gli ultimi strati in  $x$  sono formati dal ferro, allora, poiché energie non elevate hanno una bassa probabilità di attraversare una grossa quantità di materia, emergeranno distintamente gli ultimi picchi relativi alla distribuzione del ferro, mentre i primi saranno molto poco visibili o del tutto non presenti). Pertanto, per determinare i parametri di  $f(E_i|S_{ji} = 1; z_{ij})$  si utilizzano le distribuzioni delle energie nei diversi elementi ricavabili per via sperimentale. Queste sono ottenibili andando ad incidere con un fascio di muoni un materiale sufficientemente sottile composto da un solo elemento.

Sfruttando le conoscenze a priori sulla distribuzione delle energie dei fotoni per i materiali individuati, si imposta il valore  $N_{max} = \max \{N_1, N_2, \dots, N_t, \dots, N_T\}$ , dove  $N_t = N_{picchi,t} + 1$ ,  $t = 1, 2, \dots, T$ , con  $N_{picchi,t}$  corrispondente al numero totale di picchi che presenta la distribuzione relativa al numero atomico  $t$ -esimo. Si definiscono quindi i vettori:

- ▶  $\delta = (\delta_1, \delta_2, \dots, \delta_t, \dots, \delta_T)^T$ ;
- ▶  $\beta = (\beta_1, \beta_2, \dots, \beta_t, \dots, \beta_T)^T$ ;
- ▶  $\mu_l = (\mu_{1l}, \mu_{2l}, \dots, \mu_{tl}, \dots, \mu_{Tl})^T$  per  $l = 1, 2, \dots, N_{max} - 1$ ;
- ▶  $\sigma_l = (\sigma_{1l}, \sigma_{2l}, \dots, \sigma_{tl}, \dots, \sigma_{Tl})^T$  per  $l = 1, 2, \dots, N_{max} - 1$ ;
- ▶  $k_n = (k_{1n}, k_{2n}, \dots, k_{tn}, \dots, k_{Tn})^T$  per  $n = 1, 2, \dots, N_{max}$ ;

Quindi si definisce:

$$f(E_i|S_{ji} = 1; z_{ij}) = k_1^* \cdot \frac{z_{ij}^T \beta^{z_{ij}^T \delta}}{\Gamma(z_{ij}^T \delta)} E_i^{z_{ij}^T \delta - 1} e^{z_{ij}^T \beta E_i} + \sum_{m=2}^{N_{z_{ij}}} k_m^* \cdot \frac{\phi(E_i; z_{ij}^T \mu_{m-1}, z_{ij}^T \sigma_{m-1})}{1 - \Phi\left(-\frac{z_{ij}^T \mu_{m-1}}{z_{ij}^T \sigma_{m-1}}\right)}, \quad (6.14)$$

dove  $k_n^* = z_{ij}^T k_n$ , per  $n = 1, 2, \dots, N_{z_{ij}}$ .

Il vettore  $\delta$  contiene i parametri di forma della distribuzione gamma per ciascuno dei  $T$  elementi. Quindi, nella 6.14,  $z_{ij}^T \delta$  seleziona il parametro di forma della gamma per il numero atomico  $t$ -esimo. Allo stesso modo, il vettore  $\beta$  contiene i parametri di scala della stessa distribuzione per ciascuno dei  $T$  elementi. I vettori  $\mu_l$  e  $\sigma_l$  seguono la stessa logica, andando ad identificare le distribuzioni Gaussiane della miscela. Ciascuna densità normale corrisponde dunque ad uno specifico picco nella distribuzione di energia per un dato numero atomico. La locazione dei picchi e la relativa varianza, identificate rispettivamente da  $\mu_l$  e  $\sigma_l$ , sono ordinate per  $l = 1, 2, \dots, N_{max} - 1$  a partire dal picco locato ad energia più bassa, fino al picco corrispondente all' energia più elevata. Poiché non tutti gli elementi avranno necessariamente lo stesso numero di picchi, i valori interni ai vettori  $\mu_l$ ,  $\sigma_l$  e  $k_n$  per i quali non corrisponde alcun picco vengono impostati a zero. Vista la scelta effettuata, vale l' identità:  $N_{z_{ij}} = \sum_{n=1}^{N_{max}} I(z_{ij}^T k_n \neq 0)$ , dove il vettore  $k_n$  contiene il peso  $n$ -esimo della densità miscela delle energie dei fotoni per ognuno dei  $T$  elementi.

I parametri in  $\delta$ ,  $\beta$ ,  $\mu_l$ ,  $\sigma_l$ ,  $k_n$  sono considerati noti, e il loro valore viene ricavato dai dati sulle energie dei fotoni per ciascun elemento ottenibili per via sperimentale. Questi possono essere già disponibili o, eventualmente, facilmente ottenibili (Hillier, Paul e Ishida 2016). Nello specifico, si assume la distribuzione miscela in equazione 6.14 per tali dati e i relativi parametri vengono successivamente stimati mediante algoritmo EM. Quindi, in generale, fissato un ipotetico numero atomico  $t$ , l' equazione 6.14 prende la forma:

$$f(E_i | S_{ji} = 1; z_{tij} = 1) = k_{t1} \cdot \frac{\beta_t^{\delta_t}}{\Gamma(\delta_t)} E_i^{\delta_t - 1} e^{-\beta_t E_i} + \sum_{m=2}^{N_t} k_{tm} \cdot \frac{\phi(E_i; \mu_{t,m-1}, \sigma_{t,m-1})}{1 - \Phi\left(-\frac{\mu_{t,m-1}}{\sigma_{t,m-1}}\right)}. \quad (6.15)$$

L' obiettivo è la stima dei parametri  $k_{t1}, k_{t2}, \dots, k_{tN_t}, \delta_t, \beta_t, \mu_{t1}, \sigma_{t1}, \dots, \mu_{tN_t-1}, \sigma_{tN_t-1}$ . Come sopra menzionato, vista la complessità della funzione di log-verosimiglianza che si deriva assumendo per i dati la distribuzione 6.15, tale scopo viene raggiunto con l' utilizzo dell' algoritmo EM.

Per illustrare brevemente come si è ottenuta l' implementazione dell' algoritmo in questo contesto (Bilmes 1998), si riscrive l' equazione 6.15 in forma compatta:

$$p(x; \theta) = \alpha_1 \cdot p_1(x; \theta_1) + \alpha_2 \cdot p_2(x; \theta_2) + \dots + \alpha_M \cdot p_M(x; \theta_M). \quad (6.16)$$

La notazione viene in questo modo semplificata, dove ogni  $p_l(x; \theta_l)$  corrisponde alla  $l$ -esima densità della mistura parametrizzata da  $\theta_l$ , mentre  $x$  sono i dati osservati. I parametri che si vuole stimare sono  $\theta = (\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_M, \theta_1^T, \theta_2^T, \dots, \theta_M^T)^T$ ;  $\alpha_l$  sono i pesi della mistura, tali che  $\sum_{l=1}^M \alpha_l = 1$ .

La log-verosimiglianza per i dati osservati che ne risulta è:

$$l(\theta; x) = \sum_{i=1}^N \log \left( \sum_{l=1}^M \alpha_l p_l(x_i; \theta_l) \right), \quad (6.17)$$

con  $N$  pari alla numerosità di osservazioni.

Si introducono i dati mancanti  $z$ , i quali forniscono l'informazione su quale componente delle  $M$  possibili ha generato ciascun dato osservato. Dunque si introducono i dati  $\{z_i\}_{i=1}^N$ . Questi sono tali che  $z_i \in \{1, 2, \dots, M\} \forall i$ .

La log-verosimiglianza per i dati completi  $(x, z)$  diventa:

$$\begin{aligned} l(\theta; x, z) &= \sum_{i=1}^N \log \left( p(x_i | z_i; \theta) p(z_i; \theta) \right) \\ &= \sum_{i=1}^N \log \left( p_{z_i}(x_i; \theta_{z_i}) \alpha_{z_i} \right). \end{aligned} \quad (6.18)$$

Applicando il teorema di Bayes, si ottiene la relazione seguente per la generica  $i$ -esima osservazione:

$$p(z_i | x_i; \theta) = \frac{p_{z_i}(x_i; \theta_{z_i}) \alpha_{z_i}}{p(x_i; \theta)}. \quad (6.19)$$

A questo punto, ipotizzando una stima preliminare  $\widehat{\theta}^{(k)}$ , si ricava agevolmente la funzione da massimizzare nel *maximization step*:

$$\begin{aligned}
Q(\theta, \widehat{\theta}^{(k)}) &= E_{z|x, \widehat{\theta}^{(k)}} [l(\theta; x, z)] \\
&= \sum_{l=1}^M \sum_{i=1}^N \log(\alpha_l p_l(x_i; \theta_l)) p(z_i = l | x_i; \widehat{\theta}^{(k)}) \\
&= \sum_{l=1}^M \sum_{i=1}^N \log(\alpha_l) p(z_i = l | x_i; \widehat{\theta}^{(k)}) + \sum_{l=1}^M \sum_{i=1}^N \log(p_l(x_i; \theta_l)) p(z_i = l | x_i; \widehat{\theta}^{(k)}) .
\end{aligned} \tag{6.20}$$

Per massimizzare la funzione nella 6.20 rispetto ai pesi della mistura  $\alpha_l$  è sufficiente derivare rispetto a tali quantità il primo termine nella 6.20. Uguagliando a zero l'espressione ottenuta e includendo il vincolo di somma a 1 per tali pesi, si ottiene una forma analitica per il valore di  $\alpha_l$  che massimizza il valore atteso della log-verosimiglianza per i dati completi. Si ha:

$$\widehat{\alpha}_l^{(k+1)} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N p(z_i = l | x_i; \widehat{\theta}^{(k)}) . \tag{6.21}$$

La massimizzazione del valore atteso della log-verosimiglianza per i dati completi rispetto ai parametri  $\theta_l$ , invece, si ottiene con la massimizzazione del secondo termine in equazione 6.20. Questa può risultare più o meno complessa a seconda delle distribuzioni  $p_l(x; \theta_l)$  che compongono la mistura. Nel caso in esame, avendo assunto una distribuzione gamma e diverse Gaussiane troncate tra  $(0, +\infty)$ , giungere ad una forma analitica come in precedenza non è altrettanto semplice. Dunque, per ricavare ad ogni iterazione dell'algoritmo le stime per  $\theta_1, \theta_2, \dots, \theta_M$ , si procede con una massimizzazione numerica. Più nello specifico, con le densità assunte nella distribuzione mistura di interesse, la quantità da massimizzare ad ogni passo è:

$$\begin{aligned}
 H(\theta, \widehat{\theta}^{(k)}) &= \sum_{l=1}^M \sum_{i=1}^N \log(p_l(x_i; \theta_l)) p(z_i = l | x_i; \widehat{\theta}^{(k)}) \\
 &= \sum_{i=1}^N \left[ \delta_i \log(\beta_t) - \log(\Gamma(\delta_i)) + \delta_i \log(x_i) - \beta_t x_i \right] \cdot \frac{p_1(x_i; \widehat{\theta}_1^{(k)}) \widehat{k}_{t1}^{(k)}}{p(x_i; \widehat{\theta}^{(k)})} + \\
 &+ \sum_{l=2}^M \sum_{i=1}^N \left[ -0.5 \log(\sigma_{t,l-1}^2) - 0.5 \frac{x_i^2}{\sigma_{t,l-1}^2} + \frac{x_i \mu_{t,l-1}}{\sigma_{t,l-1}} - 0.5 \frac{\mu_{t,l-1}^2}{\sigma_{t,l-1}^2} - \right. \\
 &\left. + \log \left( 1 - \Phi \left( -\frac{\mu_{t,l-1}}{\sigma_{t,l-1}} \right) \right) \right] \cdot \frac{p_l(x_i; \widehat{\theta}_l^{(k)}) \widehat{k}_{tl}^{(k)}}{p(x_i; \widehat{\theta}^{(k)})} \quad (6.22)
 \end{aligned}$$

con  $\widehat{\theta}_1^{(k)} = (\widehat{\delta}_t^{(k)}, \widehat{\beta}_t^{(k)})$ ,  $\widehat{\theta}_l^{(k)} = (\widehat{\mu}_{t,l-1}^{(k)}, \widehat{\sigma}_{t,l-1}^{(k)})$  e  $\widehat{\theta}^{(k)} = (k_{t1}^{(k)}, \dots, k_{tM}^{(k)}, \widehat{\theta}_1^{(k)}, \dots, \widehat{\theta}_M^{(k)})$ .

Pertanto,

$$(\widehat{\theta}_1^{(k+1)}, \dots, \widehat{\theta}_M^{(k+1)})^T = \arg \max_{\theta_1, \dots, \theta_M} H(\theta, \widehat{\theta}^{(k)}) \quad (6.23)$$

$$\widehat{k}_{tl}^{(k+1)} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N p(z_i = l | x_i; \widehat{\theta}^{(k)}) \quad \forall l = 1, \dots, M. \quad (6.24)$$

## 6.6 Scelta dei parametri legati alla profondità di stop del muone

I parametri della distribuzione multinomiale  $S_i$  in equazione 6.1, descrivono la probabilità che una energia  $E_i$  provenga da una data profondità  $j$ -esima. Questo si può anche esprimere come la probabilità che il muone associato a tale energia si sia fermato a distanza  $j$ .

La probabilità che un muone si sia fermato a distanza  $j$  dipende dall'energia con cui questo viene introdotto nel volume ( $E_{\mu_i}$ ) e dagli atomi che questo attraversa prima di fermarsi, in quanto questi comportano di volta in volta una diversa perdita di energia dello stesso. Pertanto, le probabilità  $\theta_{ji}$  dipendono sia dalle note energie  $E_{\mu_i}$ , sia dai parametri ignoti  $p_{tj}$ . Per poterle calcolare si fa uso della perdita media di energia del muone, che è nota per ciascun numero atomico. Queste vengono ordinate dalla perdita media inferiore alla maggiore. Nel caso dei numeri atomici considerati nella simulazione al Capitolo 3, si ha:

1.  $\Delta E_1 = 3.75 \text{ MeV}$  (perdita media di energia nel silicio);
2.  $\Delta E_2 = 4.16 \text{ MeV}$  (perdita media di energia nel carbonio);
3.  $\Delta E_3 = 11.31 \text{ MeV}$  (perdita media di energia nel ferro).

Nel caso si assuma la presenza di soli questi elementi nel volume, ovvero  $T = 3$ , si definisce per  $j = 1$  la seguente quantità:

$$\begin{aligned} \theta_{1i}^* &= I(\Delta E_3 < E_{\mu_i}) \cdot 10^{-15} + I(\Delta E_2 < E_{\mu_i} \leq \Delta E_3) \cdot p_{31} + \\ &+ I(\Delta E_1 < E_{\mu_i} \leq \Delta E_2) \cdot (p_{31} + p_{11}) + I(E_{\mu_i} \leq \Delta E_1) \cdot (1 - 10^{-15}). \end{aligned} \quad (6.25)$$

Nella 6.25 le probabilità dei materiali sono state arbitrariamente ordinate come segue:

- ▶  $p_{1j}$  = probabilità che il voxel  $j$  sia composto da carbonio;
- ▶  $p_{2j}$  = probabilità che il voxel  $j$  sia composto da silicio;
- ▶  $p_{3j}$  = probabilità che il voxel  $j$  sia composto da ferro.

Pertanto  $p_j = (p_{1j}, p_{2j}, p_{3j})^T \forall j \in \{1, 2, \dots, J\}$ .

La 6.25 afferma che se l'energia del muone entrante è maggiore della perdita media massima che questo può incontrare al termine dell'attraversamento del primo voxel, allora la probabilità che sia fermato in  $j = 1$  è sostanzialmente nulla, ovvero pari a  $10^{-15}$ . Se invece l'energia del muone entrante è minore o uguale alla perdita media minima che questo può incontrare al termine dell'attraversamento del primo voxel, allora la probabilità che sia fermato in  $j = 1$  è pari a  $1 - 10^{-15}$ . Diversamente, i casi intermedi di energia del muone sono determinati dalla probabilità che il primo voxel sia ferro o carbonio, che sono gli unici casi che potrebbero dar luogo allo stop del muone nel primo voxel.

Con la stessa logica si ricavano i restanti valori  $\theta_{ji}^* \forall j \in \{2, \dots, J\}$ . Poiché questi sono calcolati considerando l'unione disgiunta degli eventi dati dalle probabilità che ciascun voxel fino al  $j$ -esimo sia uno soltanto dei  $T$  materiali considerati, senza quindi inglobare tutte le combinazioni possibili dei materiali fino al massimo voxel  $J$ -esimo, si ha che non necessariamente queste soddisfano il vincolo  $\sum_{j=1}^J \theta_{ji}^* = 1 \forall i \in \{1, 2, \dots, I\}$ . Pertanto si definisce la probabilità che un'energia del fotone  $E_i$  provenga dal voxel  $j$  come:

$$\begin{aligned}
\theta_{ji} &= \frac{\theta_{ji}^*}{\theta_{1i}^* + \dots + \theta_{ji}^* + \dots + \theta_{ji}^*} \\
&= \frac{\theta_{ji}^*}{\sum_{u=1}^J \theta_{ui}^*}
\end{aligned} \tag{6.26}$$

$\forall j \in \{1, 2, \dots, J\}$ . In questo modo i parametri  $\theta_{ji}$  sono tali da soddisfare il vincolo di somma a 1.

Con riferimento all'algoritmo EM, e in particolare modo all'*expectation step*, si può scrivere  $\theta_{ji} = \theta_{ji}(\widehat{p}_{ij}^{(k)})$  in equazione 6.10. Questa scrittura sottolinea la dipendenza del parametro  $\theta_{ji}$  da tutti i parametri  $\widehat{p}_{ij}^{(k)}$  stimati al precedente passo  $k$ -esimo dell'algoritmo.



Vista la trattazione teorica del Capitolo 6, si vuole applicare quanto descritto ad un insieme di dati simulati. Nello specifico la simulazione si basa su una configurazione geometrica scelta per il volume incognito pari a  $4 \times 4 \times 4$  voxels di  $1 \text{ cm} \times 1 \text{ cm} \times 1 \text{ cm}$  ciascuno. L'obiettivo è quello di determinare la composizione atomica dell'oggetto simulato, ottenuto facendo uso del processo di simulazione esposto nel Capitolo 3. Gli elementi di cui è composto il volume sono analoghi a quelli utilizzati al suddetto capitolo: carbonio, silicio e ferro. L'assegnazione del numero atomico a ciascun voxel è casuale.

Rispetto a quanto definito nel Capitolo 3, dedicato al modello di simulazione, si utilizzano delle diverse probabilità di cattura del muone. Questo non comporta alcuna perdita di generalità, in quanto queste determinano soltanto la quantità di fotoni uscenti da un dato voxel e non sono utilizzate nell'inferenza. Le probabilità di cattura utilizzate sono state aumentate in modo da agevolare il processo di ottenimento dei dati, implicando la generazione di un numero inferiore di muoni. Queste sono definite come segue:

- ▶  $p_{Z=6} = 0.90$ ;
- ▶  $p_{Z=14} = 0.85$ ;
- ▶  $p_{Z=26} = 0.98$ .

Si simulano 36 000 000 di muoni, per un totale di 1 931 055 fotoni rivelati. In Figura 7.1 si mostra l'istogramma delle energie complessivamente rivelate, dalla quale è evidente la distinzione dei 3 elementi di cui il volume è composto.

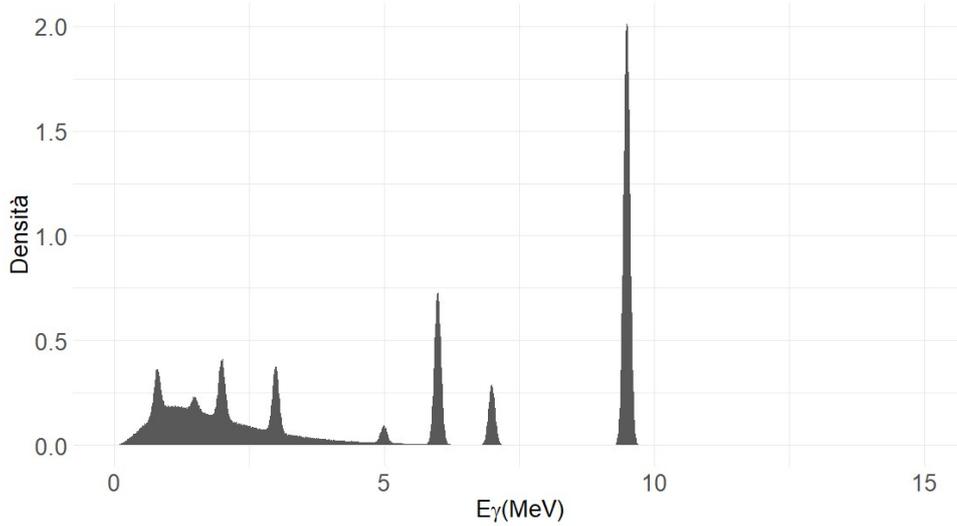
Rispetto al capitolo precedente, è quindi immediato impostare le quantità:

$I=1\ 931\ 055$ ,  $T=3$  e  $J=4$ . Le probabilità da stimare sono state definite come  $p_j = (p_{1j}, p_{2j}, p_{3j})^T \forall j \in \{1, 2, 3, 4\}$ , con:

- ▶  $p_{1j}$  = probabilità che il voxel  $j$  sia composto da carbonio;
- ▶  $p_{2j}$  = probabilità che il voxel  $j$  sia composto da silicio;
- ▶  $p_{3j}$  = probabilità che il voxel  $j$  sia composto da ferro.

Visto il vincolo di somma a 1 dei parametri in ciascun  $p_j$ ,  $\forall j \in \{1, 2, 3, 4\}$ , si hanno un totale di 8 parametri da stimare nell'EM applicato a ciascuna striscia

di voxels del volume. Si ricorda che il vettore completo dei parametri è definito come  $p = (p_1^T, p_2^T, p_3^T, p_4^T)^T$ , che grazie al vincolo di somma a 1 si riduce a  $p = (p_{11}, p_{21}, p_{12}, p_{22}, p_{13}, p_{23}, p_{14}, p_{24})^T$ .



**Figura 7.1:** Istogramma delle energie dei fotoni complessivamente rivelate dal piano di rivelatore.

I parametri che determinano la forma della mistura relativa alla densità dell'energia dei fotoni condizionata al numero atomico e allo spessore di provenienza sono stati scelti come delineato nella Sezione 6.5. Dunque, per imitare quanto si potrebbe ottenere sperimentalmente, si è fatto uso del modello di simulazione descritto nel Capitolo 3 per ricavare le distribuzioni delle energie dei fotoni per ciascuno dei 3 materiali. Si fanno incidere 10 000 muoni su un materiale pari a 1 cm di spessore, con lunghezza e altezza di 10 cm. Tutto il materiale in questione è composto di un solo numero atomico. Questo procedimento viene iterato per tutti e 3 gli elementi, dando luogo a 3 differenti istogrammi delle energie che raggiungono il rivelatore. Tali istogrammi sono riportati in Figura 7.2, a cui si sovrappone la curva della densità  $f(E_i|S_{ji} = 1; z_{tij} = 1)$  ottenuta con i parametri stimati a partire da tali dati. I parametri che definiscono le densità sono i seguenti:

- ▶  $\delta = (2.284, 2.255, 2.573)^T$ ;
- ▶  $\beta = (1.424, 1.403, 1.529)^T$ ;
- ▶  $\mu_1 = (0.807, 1.498, 2.000)^T$ ;
- ▶  $\mu_2 = (3.000, 5.001, 6.003)^T$ ;
- ▶  $\mu_3 = (0.000, 7.000, 9.501)^T$ ;
- ▶  $\sigma_1 = (0.063, 0.059, 0.050)^T$ ;
- ▶  $\sigma_2 = (0.000, 0.059, 0.059)^T$ ;

- ▶  $\sigma_3 = (0.000, 0.059, 0.059)^T$ ;
- ▶  $k_1 = (0.610, 0.532, 0.481)^T$ ;
- ▶  $k_2 = (0.232, 0.140, 0.068)^T$ ;
- ▶  $k_3 = (0.158, 0.082, 0.122)^T$ ;
- ▶  $k_4 = (0.000, 0.245, 0.328)^T$ .

Sempre dalla Figura 7.2, si determina rapidamente  $N_{max} = \max \{3, 4, 4\}$ .

Il *maximization step* dell'algoritmo EM prevede la massimizzazione della funzione in equazione 6.11 rispetto ai parametri in  $p$  per ottenere ad ogni iterazione  $k$ -esima una nuova stima dei parametri  $\hat{p}^{(k)}$ . Tale massimizzazione viene effettuata mediante un'ottimizzazione non lineare vincolata. Per farlo si è fatto uso del pacchetto *nlopt* del software R, al quale si sono fornite anche le derivate ricavate nelle equazioni 6.12 e 6.13. Il problema può essere sintetizzato nella seguente forma:

$$\hat{p}^{(k+1)} = \arg \min_{p \in \Omega} -E_{S|E; \hat{p}^{(k)}} [l(p; E, S)]$$

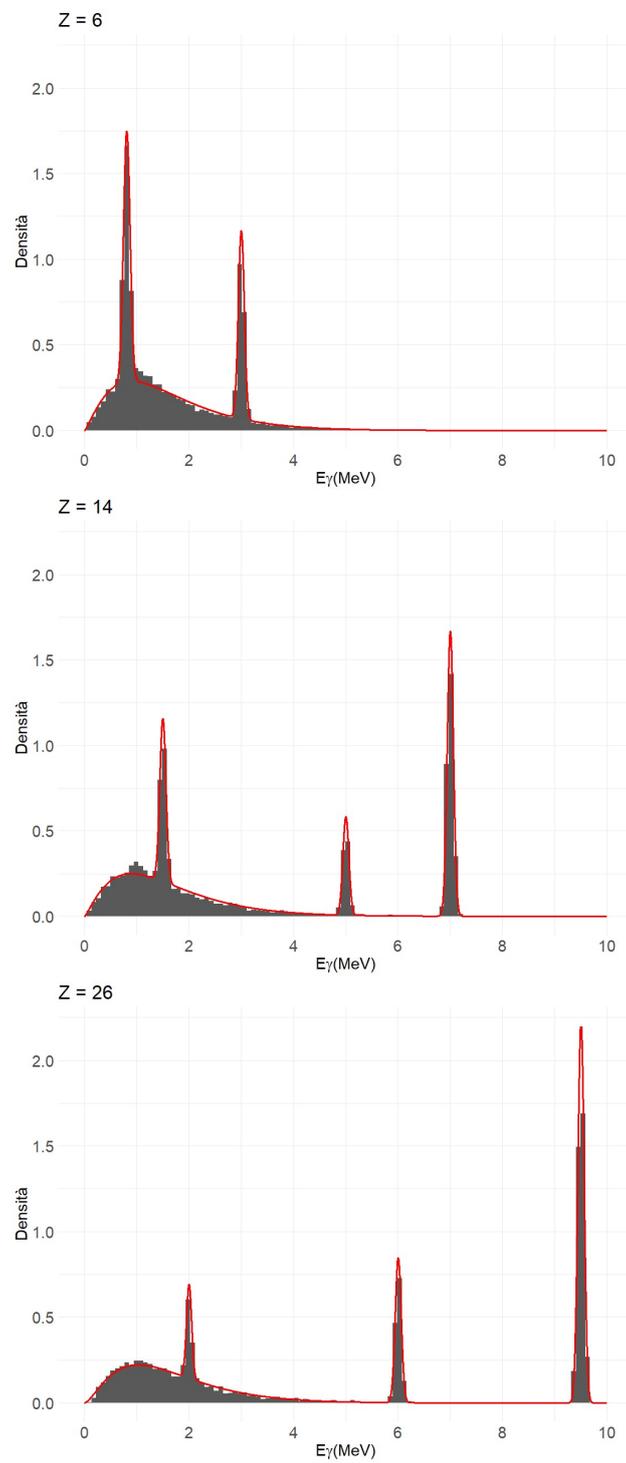
$$\text{con } \Omega = \{p : (1 - p_{1j} - p_{2j}) > 0 \text{ e } 0 < p_{tj} < 1 \quad \forall j \in \{1, 2, 3, 4\}, \forall t \in \{1, 2\}\} . \quad (7.1)$$

Le stime dei parametri ottenute per ciascuna delle 16 strisce di voxels possibili sono riportate in Appendice A (Tabella A.1, Tabella A.2). Queste sono state ricavate impostando un punto di partenza per l'algoritmo EM pari a  $\hat{p}^{(0)} = (\frac{1}{3}, \frac{1}{3}, \frac{1}{3}, \frac{1}{3}, \frac{1}{3}, \frac{1}{3}, \frac{1}{3}, \frac{1}{3})^T$ . Il  $\hat{p}^{(0)}$  scelto impone dunque, inizialmente, che ciascun voxel abbia un'uguale probabilità di essere uno dei 3 numeri atomici considerati. Come criterio di convergenza si decide di fermare le iterazioni quando il valore assoluto della differenza tra la stima corrente e la stima precedente è minore o uguale ad un valore di tolleranza  $c$  per tutti i parametri oggetto di stima. Ovvero, l'algoritmo raggiunge la convergenza quando  $\max(|p_{11}^k - p_{11}^{(k+1)}|, |p_{21}^k - p_{21}^{(k+1)}|, |p_{12}^k - p_{12}^{(k+1)}|, |p_{22}^k - p_{22}^{(k+1)}|, |p_{13}^k - p_{13}^{(k+1)}|, |p_{23}^k - p_{23}^{(k+1)}|, |p_{14}^k - p_{14}^{(k+1)}|, |p_{24}^k - p_{24}^{(k+1)}|) \leq c$ , con  $c = 0.001$ .

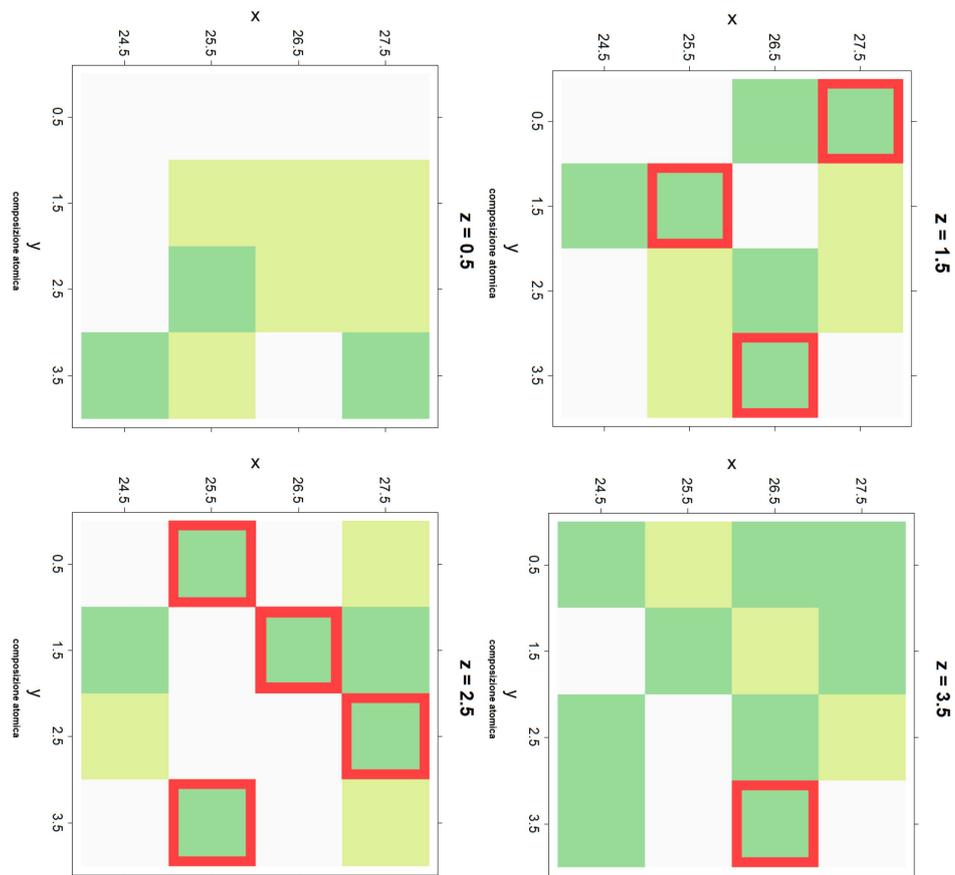
Per assegnare ciascun voxel ad uno dei 3 numeri atomici possibili si sceglie il materiale con la maggiore probabilità stimata per quel dato voxel. I risultati ottenuti sono sintetizzati in Figura 7.3, dove si evidenziano i voxels per i quali la procedura di stima ha identificato un numero atomico diverso da quello reale. Tale figura mostra il volume al variare degli strati sull'asse  $z$ , differenziando i diversi numeri atomici

reali di ciascun voxel noti dalla simulazione. È possibile notare come la procedura abbia classificato erroneamente 8 dei voxels sui 64 totali. In particolare si nota che tutti i voxels non correttamente assegnati sono corrispondenti ad atomi di carbonio. Ciò non sorprende se si osserva la distribuzione teorica ottenuta per il carbonio,  $f(E_i|S_{ji} = 1; z_{1ij} = 1)$ . Infatti, questa comprende solo 2 picchi che ne permettono la distinzione con gli altri elementi. Inoltre, molta della massa di probabilità di questa distribuzione è in corrispondenza dei picchi caratteristici di silicio e ferro. Per comprendere al meglio la situazione, in Figura 7.4 si mostra l'istogramma delle energie provenienti dal voxel 22 (coordinate del centro pari a  $(x, y, z) = (25.5, 1.5, 1.5)$ ), che risulta classificato come ferro sebbene sia un voxel di carbonio. A questo si sovrappone in rosso la distribuzione utilizzata nell'algoritmo per il ferro, mentre in blu si sovrappone quella per il carbonio. Come emerge dall'immagine, le distribuzioni parametriche non hanno più un buon adattamento ai dati in quanto si è evitato di modellare la distorsione dello spettro delle energie dei fotoni. La distorsione dello spettro per il carbonio è moderatamente rilevante, e tenerne conto avrebbe potuto portare ad una corretta classificazione, vista l'elevata quantità di energie provenienti dal voxel in questione. Infatti, non prendere in considerazione la distorsione della distribuzione delle energie significa non dare il giusto peso alle energie provenienti dal secondo picco del carbonio, che sono quelle presenti in maggiore quantità. Inoltre, si ritiene poco plausibile che l'errata classificazione dei voxels sia dovuta a massimi locali, in quanto per diversi punti iniziali dell'algoritmo non si hanno convergenze differenti a quelle ottenute.

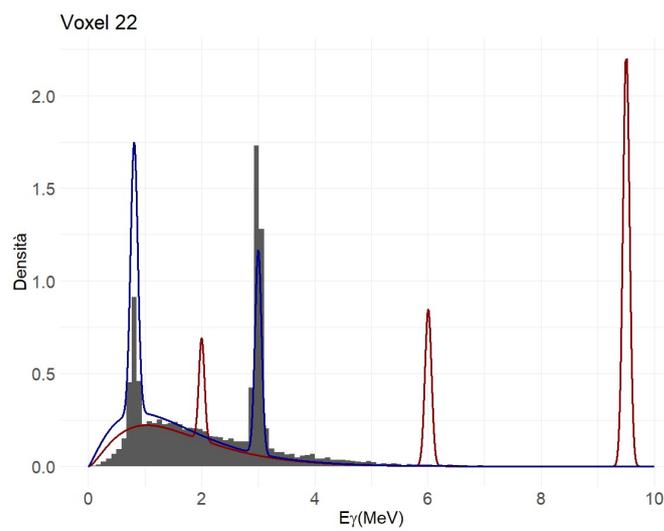
Per completezza, si riporta in Figura 7.5 la quantità di fotoni realmente provenienti da ciascun voxel. Questo permette di comprendere la rilevanza della quantità di informazione per una corretta assegnazione dei materiali. Come si nota, in alcuni casi, la numerosità dei dati è particolarmente bassa, e anche questo fatto può aver influito nella mancata corrispondenza dell'elemento corretto.



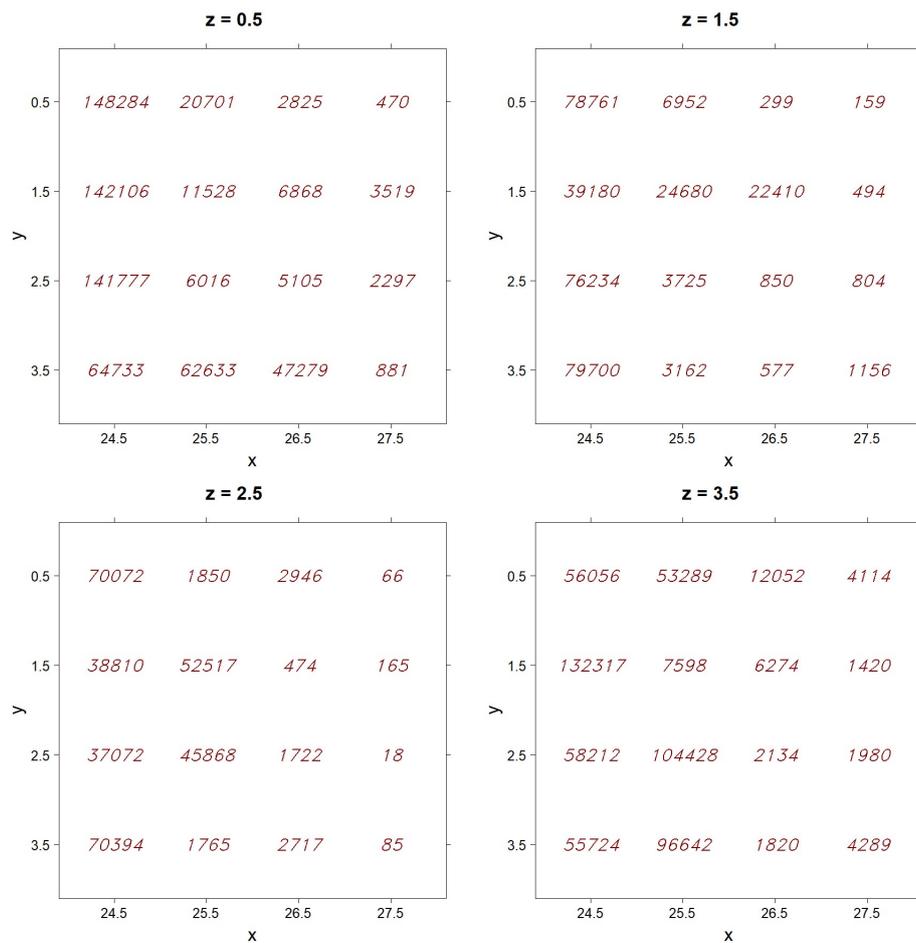
**Figura 7.2:** Istogramma delle energie dei fotoni rivelate dal detector a seguito dell'incisione di un fascio di muoni su un materiale spesso 1 cm, composto da solo carbonio, silicio o ferro. In rosso (—) si sovrappone la funzione di densità parametrica scelta, rispettivamente,  $f(E_i|S_{ji} = 1; z_{1ij} = 1)$ ,  $f(E_i|S_{ji} = 1; z_{2ij} = 1)$  o  $f(E_i|S_{ji} = 1; z_{3ij} = 1)$ .



**Figura 7.3:** Rappresentazione del volume al variare degli strati dello stesso sull'asse  $z$ . Viene mostrata la composizione atomica reale del volume (■ carbonio, ■ silicio, □ ferro) e, in rosso (□), i voxels per i quali l'algoritmo ha identificato un numero atomico differente da quello reale.



**Figura 7.4:** Istogramma delle energie realmente provenienti da un voxel di carbonio, locato allo spessore con coordinata centrale  $x = 25.5$ . Si sovrappone la distribuzione teorica ottenuta per il carbonio (—) e quella ottenuta per il ferro (—).



**Figura 7.5:** Rappresentazione del volume al variare degli strati dello stesso sull'asse  $z$ . I valori in rosso mostrano la quantità di fotoni realmente provenienti da ciascun voxel.



## **FUTURI SVILUPPI**



## Miglioramenti possibili al modello

Il modello di simulazione esposto al Capitolo 3 trascura alcuni aspetti della fisica che rendono il fenomeno della *cattura k* più articolato, rispetto a quanto è stato trattato nei capitoli precedenti. Nelle sezioni seguenti vengono illustrati questi aspetti in maniera più approfondita.

### 8.1 Trattazione dettagliata della propagazione dei fotoni nel materiale

Come illustrato nella Sezione 3.2, la propagazione di un fotone in un materiale può dare luogo a diversi effetti, che sono fortemente dipendenti dall'energia del fotone e dalla tipologia di materiale attraversato. Nel calcolo della probabilità di sopravvivenza del fotone si è tenuto conto dell'attenuazione del numero di fotoni uscenti dal volume incognito, dovuta ad alcune principali interazioni di questi con la materia attraversata. Gli effetti considerati, tra i quali l'effetto Compton, caratterizzano l'assorbimento di un fascio di fotoni nel loro passaggio all'interno della materia. Tuttavia, l'effetto Compton non determina soltanto l'assorbimento di un fotone nel materiale attraversato; il fotone, infatti, cambiando direzione e perdendo una quantità di energia, potrebbe riuscire comunque a non essere assorbito, colpendo il rivelatore in una direzione diversa da quella attesa e con un'energia differente. Questa possibilità non è stata considerata nel modello di simulazione, e la sua inclusione darebbe ovviamente luogo ad una maggiore distorsione nelle distribuzioni delle energie dei fotoni osservabili. Le errate informazioni sulla posizione ed energia sono parte di un fattore di confondimento concreto che, se preso in considerazione, renderebbe certamente più difficoltosa l'identificazione atomica.

### 8.2 Decadimento dei muoni

Nel modello di simulazione non si è trattato il decadimento in volo del muone, prima che questo raggiunga il rivelatore. Questo fatto non è particolarmente rilevante poiché

comporta soltanto una maggiore perdita di muoni, che andrebbe compensata con un più ingente flusso incidente di questi. Più rilevante è il decadimento del muone dopo che questo ha già raggiunto il rivelatore o, alternativamente, quando questo si ferma nel materiale senza che avvenga la *cattura k*. A seguito di ciò si avrebbe l'emissione di un elettrone, che potrebbe propagarsi all'indietro, fornendo un segnale al rivelatore. Questo ci porterebbe erroneamente ad assegnare tale risultato ad un fotone emesso a seguito della *cattura k*, portando ad una maggiore aleatorietà nei dati ottenibili.

### 8.3 Spettri dei fotoni

Nel modello di simulazione si sono utilizzate delle distribuzioni astratte per le energie dei fotoni nei diversi elementi. L'obiettivo del presente lavoro è, infatti, quello di sondare la fattibilità di un possibile utilizzo della *cattura k* come tecnica di imaging, senza che questa sia focalizzata su un particolare gruppo di elementi. Pertanto, la definizione esatta delle distribuzioni non è sostanziale allo scopo. Tuttavia, l'utilizzo di una corretta locazione dei picchi nelle distribuzioni, che si attenda a quanto è noto sperimentalmente, permetterebbe di capire quali elementi sono maggiormente identificabili, e quali invece difficilmente vengono riconosciuti correttamente. In questo modo sarebbe possibile esaminare più nel dettaglio i limiti della tecnica, cercando di coglierne le potenzialità ed eventuali perplessità che potrebbero sorgere riguardo la sua efficacia.

### 8.4 Perdita di energia dei muoni nel materiale

Il modello di simulazione implementato assume una perdita di energia, per i muoni incidenti che attraversano il materiale incognito, fissa, pari alla perdita media dato lo spessore attraversato, dove questa è funzione soltanto dell'elemento chimico. Il processo è però stocastico e la reale perdita di energia del muone possiede una variabilità intorno al valore utilizzato.

Questo ha ripercussioni anche sull'algoritmo EM realizzato per l'identificazione atomica. Infatti, nell'algoritmo la probabilità che il muone associato ad una energia del fotone rivelato si sia fermato su ciascuno dei voxels contigui viene calcolata facendo uso soltanto della perdita media di energia. Pertanto, se i dati fossero stati

ricavati da un modello che ingloba l'aleatorietà della perdita di energia del muone entrante, allora si avrebbe maggiore incertezza nel determinare il punto di stop del muone a posteriori. Ciò significa che i risultati sulla composizione atomica del volume ottenuti nel Capitolo 7 sono certamente più accurati rispetto a quelli che si avrebbero disponendo di dati reali. Questo è facilmente intuibile ricordando come si sono definite le probabilità che un muone associato ad un  $i$ -esimo fotone rivelato si sia fermato nel voxel  $j$ -esimo ( $\theta_{ji}$ ): con riferimento all'equazione 6.25, si ha che se il primo voxel è composto da carbonio, ma la perdita di energia del muone in tale voxel risulta pari, ad esempio, a 4.18, e quindi leggermente scostata rispetto alla perdita media, con un'energia del muone entrante pari a 4.17 MeV, allora la probabilità che il muone in questione si sia fermato nel primo voxel ( $\theta_{1i}$ ) è determinata dalla probabilità che il primo voxel sia ferro. Questo ovviamente porta, talvolta, a determinare con inesattezza la suddetta probabilità, in quanto il voxel in oggetto è in realtà, in questo esempio, composto da carbonio e non da ferro. Essendo la perdita di energia utilizzata una perdita media, questo non risulta in un problema sostanziale se si dispone di una considerevole quantità di dati.

Visto quanto enunciato sopra, emerge un altro fatto causato dalla variabilità della perdita di energia, per quanto questa possa essere minima: un muone che incide con un ipotetico valore di energia, si fermerà prevalentemente in un preciso voxel; tuttavia, potrebbe fermarsi, con minore probabilità, anche nei voxels adiacenti. Se le probabilità di cattura sono particolarmente differenti nei diversi elementi che il muone attraversa, allora basarsi soltanto sulla perdita media di energia per determinare le probabilità  $\theta_{ji}$  potrebbe portare a distorsioni non indifferenti di queste. Infatti, nel caso di perdita di energia fissa le probabilità di cattura sono irrilevanti, poiché, fissato un opportuno intervallo di energia, il punto di stop del muone è assolutamente deterministico e univoco, ovvero non è suddiviso in due o più voxels. Pertanto, un fotone, per il quale corrisponde un muone con energia in tale intervallo, è indubbio che provenga dal voxel individuato, a prescindere dalla probabilità di cattura corrispondente. Al contrario, una perdita di energia variabile fa sì che il muone abbia una probabilità non nulla di fermarsi in due voxels adiacenti, supponiamo, con una prevalenza nel secondo che incontra. Se questi voxels hanno una probabilità di cattura piuttosto differente, ipotizziamo dello 0.9 e 0.06 rispettivamente, allora, nonostante sulla base dell'energia e della sua perdita nei differenti materiali si direbbe maggiore la probabilità che il muone associato ad un ipotetico fotone, rilevato a seguito della

*cattura k*, si sia fermato nel secondo voxel, in realtà potrebbe risultare vero il contrario, visto il ridotto numero di muoni per i quali avviene la *cattura k* nel secondo voxel. Emerge in questo caso la necessità di un diverso approccio per caratterizzare i valori  $\theta_{ji}$ . Questo aspetto viene affrontato più nel dettaglio nel Capitolo 9.

# Perfezionamento dell'algoritmo EM per l'identificazione atomica

# 9

L'algoritmo EM ideato per l'identificazione atomica, descritto al Capitolo 6, ha fatto uso delle perdite medie di energia del muone nella materia per determinare le probabilità che un muone  $i$ -esimo, associato ad un  $i$ -esimo fotone rilevato, si sia fermato nel voxel  $j$ -esimo ( $\theta_{ji}$ ). Questo è stato concretizzato nel Capitolo 7 per un insieme di 4 voxels contigui e 3 elementi chimici. In quest'ultimo caso, vista la ridotta complessità del problema, le suddette probabilità sono state calcolate a mano, valutando ogni possibile combinazione delle perdite medie di energia che danno luogo a differenti intervalli di valori sui quali suddividere l'energia del muone  $i$ -esimo all'interno di ciascuna probabilità  $\theta_{ji}$ , al variare di  $j \in \{1, 2, \dots, J\}$ . Questo può risultare particolarmente oneroso qualora aumentasse la quantità di voxels e/o elementi chimici, con la necessità di automatizzare tale processo. Un'alternativa più automatica, che avrebbe portato sostanzialmente allo stesso risultato, consiste nell'effettuare una serie di simulazioni per tutte le possibili configurazioni atomiche della striscia di voxels in oggetto: simulando un fascio di muoni che incide su tali voxels, a differenti intervalli di energia, si ricava, voxel per voxel, la probabilità che un muone si fermi nel voxel  $j$  rapportando la quantità di muoni che si sono fermati nel dato voxel, con la quantità di muoni complessivamente emessi. Queste probabilità, una volta ricavate, possono essere utilizzate come costanti nella definizione di ciascun  $\theta_{ji}$ , dando luogo a probabilità differenti a seconda dell'energia del muone e della composizione atomica, determinata ad ogni passo dell'algoritmo EM grazie alle stime dei parametri  $p_{tj}$ . In questo modo, ancora una volta, le probabilità  $\theta_{ji}$  dipendono dalla composizione atomica del volume. Se la simulazione finalizzata all'ottenimento di tali probabilità prendesse in considerazione la variabilità della perdita di energia del muone attorno alla perdita media, allora quest'ultimo metodo risulterebbe più accurato (qualora dovesse essere applicato per determinare la composizione elementare di un volume utilizzando un insieme di dati reali o simulati da un algoritmo che includa questa variabilità) rispetto a quello utilizzato in questo lavoro, che di fatto non ne tiene conto.

Si nota che, sebbene quest'alternativa risulti in un metodo più automatico rispetto a quello descritto in questo elaborato, potrebbe comunque rivelarsi dispendioso per un elevato numero di voxels e/o elementi chimici. Infatti, ad esempio, per un volume con

spessore dato da 10 voxels e composto da 10 differenti numeri atomici, si avrebbero  $10^{10}$  differenti composizioni atomiche relative alla striscia di voxels analizzata. Ne conseguirebbe un numero elevatissimo di simulazioni necessarie all'ottenimento di tutte le probabilità per differenti valori di energia del muone. Tuttavia, si nota che questo consiste in uno sforzo computazionale precedente all'algoritmo EM, e non è dunque necessario che venga ripetuto ad ogni iterazione dell'algoritmo. D'altronde si può notare che, sulla base di quanto emerso nella Sezione 8.4, l'utilizzo di questo approccio di simulazione risulta necessario in presenza di dati reali (o comunque associati ad una perdita di energia variabile dei muoni nel materiale) derivanti dall'incisione di muoni su un volume composto da elementi con diversa probabilità di cattura. In questo caso, la simulazione di un fascio di muoni che incide sui voxels in esame, a differenti intervalli di energia, permette di ricavare, voxel per voxel, la probabilità che un muone associato ad un fotone rivelato si sia fermato nel voxel  $j$  rapportando la quantità di muoni che si sono fermati in tale voxel e per i quali è avvenuta la *cattura*  $k$ , con la quantità di muoni per i quali complessivamente questa è avvenuta. Impostando le corrette probabilità di cattura nel processo di simulazione finalizzato all'ottenimento delle sopraccitate probabilità, è semplice tenere conto anche di questo fenomeno, evitando mancate assegnazioni dei voxels che potrebbero insorgere.

Un altro aspetto rilevante che merita di essere evidenziato, e che fin qui non è stato affrontato, è la modellazione relativa alla distorsione dello spettro delle energie dei fotoni nei diversi materiali. Nello specifico, l'algoritmo EM sviluppato richiede la definizione della distribuzione in equazione 6.4. Attenendosi alla definizione della distribuzione, questa dovrebbe essere differente al variare dello spessore del volume da cui il fotone proviene e del numero atomico del voxel di provenienza, dove la variazione a seconda dello spessore del volume serve a modellare la distorsione dello spettro energetico che ne consegue. Tuttavia, lo sviluppo dell'algoritmo al Capitolo 7 viene portato avanti facendo differire tale distribuzione solo al variare del numero atomico, ignorando lo spessore del volume da cui il fotone proviene, come giustificato nella Sezione 6.5. Questa scelta non è ottimale, in quanto la distorsione dello spettro è considerevole in particolar modo per l'identificazione corretta degli ultimi strati del volume. Infatti, negli ultimi voxels di questo, quelli più distanti dal rivelatore, i primi picchi delle densità che caratterizzano le distribuzioni delle energie dei fotoni

nei diversi elementi chimici tendono a sparire, perciò si avranno meno picchi che permettono di discriminare i materiali; ne consegue la necessità di una modellazione che sia in grado di affrontare tale situazione. Chiaramente, questo aspetto è sempre meno marginale maggiore è lo spessore del volume.

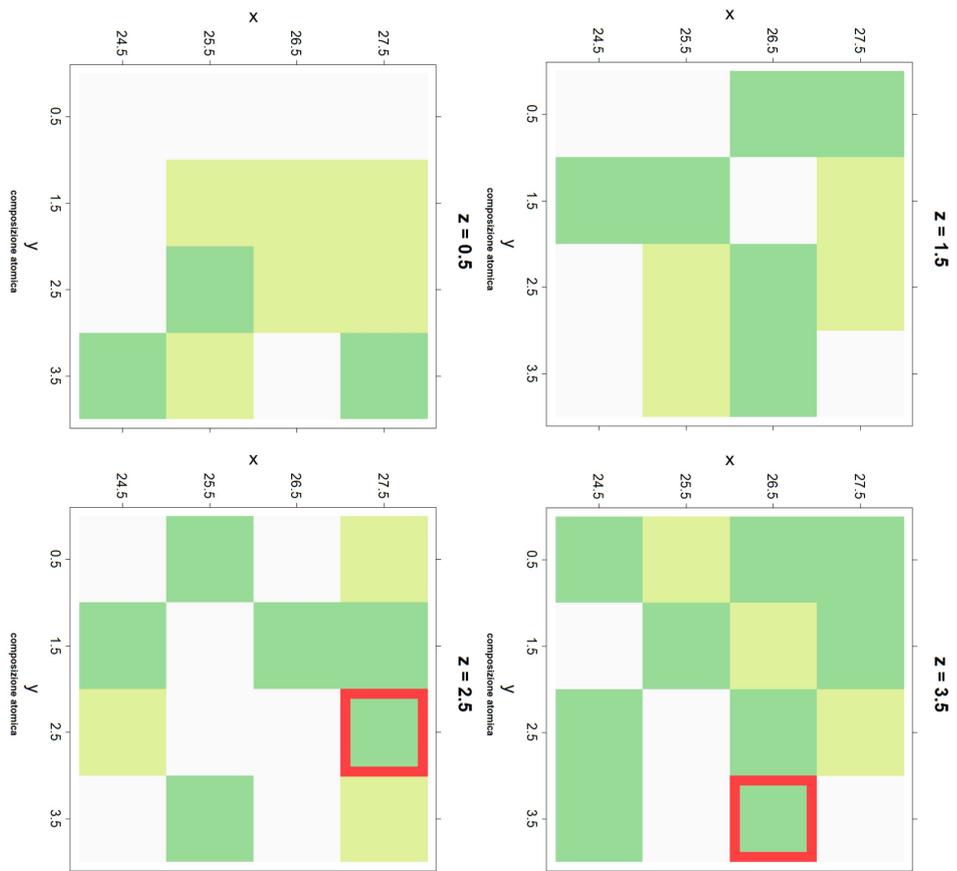
La questione principale per la quale non è semplice ricavare la distorsione dello spettro in questo frangente, è data dal fatto che questa è strettamente legata al materiale di cui il volume incognito è composto. Com'è stato delineato nei capitoli precedenti, la probabilità di sopravvivenza di un fascio di fotoni nel materiale è determinata dalle interazioni di questo con la materia attraversata. La decrescita dell'intensità del fascio è diversificata a seconda dei diversi elementi attraversati. Dunque, per ricavare le distribuzioni delle energie dei fotoni a diversi spessori del volume emerge la necessità di conoscere la composizione atomica di quest'ultimo; poiché inizialmente questa è totalmente ignota, una possibilità è quella di applicare in un primo momento l'algoritmo EM (come descritto e successivamente affrontato, rispettivamente, nei Capitoli 6 e 7). In seguito, è ragionevole sfruttare la composizione atomica ottenuta per ricavare le distribuzioni delle energie dei fotoni attenuate nei diversi spessori. Una volta che queste sono state determinate, è possibile inserirle nell'algoritmo EM, dove questo differirà rispetto a quello applicato in precedenza solo per le diverse definizioni delle suddette densità. L'algoritmo può quindi essere riapplicato nuovamente ai dati al fine di migliorare le precedenti stime.

L'interrogativo che sorge ora spontaneo riguarda il metodo da utilizzare per ricavare la definizione delle distribuzioni delle energie dei fotoni attenuate nei diversi spessori. Un modo per farlo è quello di sfruttare, ancora una volta, la simulazione: la prima applicazione dell'algoritmo EM fornisce una mappa della composizione atomica del volume incognito; simulando fasci di muoni incidenti in un volume così composto è immediato ottenere le energie dei fotoni associate a ciascun voxel. Essendo noti gli elementi di cui ciascun voxel è composto e la provenienza di ciascun fotone, è banale suddividere tutte le energie dei fotoni rilevati per numero atomico e spessore lungo l'asse  $x$ . Ciascuna suddivisione corrisponde ad un distinto insieme di dati che è possibile utilizzare per stimare i parametri delle distribuzioni mistura  $f(E_i|S_{ji} = 1; z_{tij} = 1)$  da inserire nell'algoritmo. Queste sono definite in equazione 9.1, dove si nota la dipendenza dei parametri dallo spessore  $j$ -esimo, aspetto che non era presente nella precedente equazione 6.15.

$$f(E_i | S_{ji} = 1; z_{tij} = 1) = k_{tj1} \cdot \frac{\beta_{tj}^{\delta_{tj}}}{\Gamma(\delta_{tj})} E_i^{\delta_{tj}-1} e^{\beta_{tj} E_i} + \sum_{m=2}^{N_t} k_{tjm} \cdot \frac{\phi(E_i; \mu_{tj,m-1}, \sigma_{tj,m-1})}{1 - \Phi\left(-\frac{\mu_{tj,m-1}}{\sigma_{tj,m-1}}\right)} \quad (9.1)$$

$\forall j = 1, 2, \dots, J$  e  $t = 1, 2, \dots, T$ .

Concludendo, la simulazione necessaria a determinare le distribuzioni che hanno subito una distorsione causata dalla materia attraversata si baserà quasi certamente su una composizione atomica parzialmente errata. Ciò nonostante ci si attende che questa non si discosti troppo dal vero, in particolare per quanto riguarda i primi strati del volume, che presenteranno un'accuratezza superiore rispetto agli ultimi. Questa considerazione si rivela sufficiente a far sì che la seconda applicazione dell'algoritmo ai dati porti ad una mappa del volume più accurata e con un errore ridotto. A conferma della precedente affermazione, si è messo in pratica quanto esposto a seguito dei risultati ottenuti nel Capitolo 7. Le stime dei parametri ricavate dalla seconda applicazione dell'algoritmo si mantengono vicine alle precedenti, eccetto quelle relative a parte dei voxels erroneamente classificati; in questi le stime si rivelano migliori se confrontate con le prime ottenute. Infatti, molti dei voxels che non presentavano una giusta assegnazione del materiale, con la seconda applicazione dell'algoritmo risultano correttamente assegnati. La Figura 9.1 illustra sinteticamente i risultati ottenuti, dove, in modo analogo alla Figura 7.3, si evidenziano i voxels per i quali la procedura di stima ha identificato un numero atomico diverso da quello reale.



**Figura 9.1:** Rappresentazione del volume al variare degli strati dello stesso sull'asse  $z$ . Viene mostrata la composizione atomica reale del volume (■ carbonio, ■ silicio, □ ferro) e, in rosso (□), i voxels per i quali l'algoritmo ha identificato un numero atomico differente da quello reale.



L'uso di muoni negativi, al fine di ricavare l'analisi elementare di un volume, è un'intuizione che risale a più di cinquant'anni fa. Si tratta di un'idea nata in un'epoca in cui, tuttavia, le tecnologie disponibili ne limitarono lo sviluppo.

Visti i recenti progressi tecnologici, in questo lavoro si è riconsiderato il problema dimostrando che, in linea di principio, è possibile sfruttare il fenomeno della *cattura k* allo scopo di analizzare un volume, producendo un'immagine tridimensionale della relativa composizione atomica. Questo fine è perseguibile nell'indagine di superfici non troppo profonde e a bassa densità. Per questa ragione, tessuti del corpo umano potrebbero essere facilmente analizzabili, rendendo la tecnica utile in eventuali applicazioni mediche.

Attraverso una semplificazione dei processi fisici coinvolti ed una modellazione delle parti più rilevanti di essi si è trattato, inizialmente, il problema diretto, ricavando l'output derivante dall'emissione di un fascio di muoni incidente nel volume indagato. Successivamente, si è mostrato come si possa risolvere il problema inverso, ricostruendo la mappa tridimensionale di tale volume utilizzando l'algoritmo EM. La scelta di questo approccio è stata favorita dal fatto che il problema affrontato è naturalmente scindibile in dati mancanti ed osservati, dove una conoscenza dei primi porterebbe ad un immediato sviluppo della verosimiglianza. Inoltre anche il valore atteso della log-verosimiglianza per i dati completi rispetto ai dati mancanti, condizionato ai valori osservati, si ricava agevolmente in forma esplicita, senza necessità di ricorrere ad approssimazioni Monte Carlo. Essendo questo valore atteso, insieme alla verosimiglianza per i dati completi, le uniche quantità necessarie allo sviluppo dell'algoritmo EM, si è favorito quest'ultimo rispetto alla stima di massima verosimiglianza, che avrebbe comportato una complessa massimizzazione.

Questo studio considera come sorgente fasci di muoni di energia regolabile ai valori di interesse per l'indagine delle strutture prese in considerazione. Si tratta di un presupposto che, ad oggi, può ritenersi del tutto lecito, vista la disponibilità recente di strumenti che lo rendono possibile.

Un aspetto non trascurabile da tenere in considerazione, inoltre, è il fatto che nello sviluppo di questa ricerca, le interazioni delle particelle nella materia giocano

un ruolo preponderante. Infatti, uno studio più dettagliato, che ipotizzi l'uso di software specifico consentirebbe di inglobare in modo più esauriente i fenomeni fisici che possono complicare la ricostruzione (Agostinelli et al. 2003), alcuni dei quali discussi nel Capitolo 8. Questo permetterebbe di giungere ad una ricostruzione più precisa, valutando al contempo le conseguenti potenzialità pratiche del metodo, eventualmente considerato in combinazione con lo sfruttamento di altri fenomeni come, ad esempio, la rivelazione di neutroni, che forniscono anch'essi informazioni sulla *cattura k*.

# Bibliografia

- Agostinelli, S. et al. (2003). «Geant4—a simulation toolkit». In: *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment* 506.3, pp. 250–303. DOI: [10.1016/S0168-9002\(03\)01368-8](https://doi.org/10.1016/S0168-9002(03)01368-8) (citato a pag. 86).
- Bilmes, Jeff A. (1998). «A Gentle Tutorial of the EM Algorithm and its Application to Parameter Estimation for Gaussian Mixture and Hidden Markov Models». In: *International Computer Science Institute* (citato a pag. 58).
- Bonechi, L., R. D'Alessandro e A. Giammanco (2020). «Atmospheric muons as an imaging tool». In: *Reviews in Physics* 5. DOI: [10.1016/j.revip.2020.100038](https://doi.org/10.1016/j.revip.2020.100038) (citato a pag. 3).
- Groom, D. E. e S. R. Klein (2000). «Passage of particles through matter». In: *The European Physical Journal C - Particles and Fields* 15.1, pp. 163–173. DOI: [10.1007/BF02683419](https://doi.org/10.1007/BF02683419) (citato a pagg. 18, 25).
- Hillier, A. D., D. McK. Paul e K. Ishida (2016). «Probing beneath the surface without a scratch — Bulk non-destructive elemental analysis using negative muons». In: *Microchemical Journal* 125, pp. 203–207. DOI: [10.1016/j.microc.2015.11.031](https://doi.org/10.1016/j.microc.2015.11.031) (citato a pagg. 2, 58).
- Hosoi, Y. et al. (1995). «Non-destructive elemental analysis of vertebral body trabecular bone using muonic X-rays». In: *British Journal of Radiology* 68.816, pp. 1325–1331. DOI: [10.1259/0007-1285-68-816-1325](https://doi.org/10.1259/0007-1285-68-816-1325) (citato a pag. 5).
- Lundy, A. S. (1970). *Proceedings of the Biomedical Sessions of the Fourth LAMPF Users Meeting, 30 to 31 October 1970*. p.41 (citato a pagg. 5, 11).
- Making Muons for Scientific Discovery, National Security* (2022). URL: <https://www.darpa.mil/news-events/2022-07-22> (citato a pag. 2).
- NIST: X-Ray Mass Attenuation Coefficients - Section 2* (2004). URL: <https://physics.nist.gov/PhysRefData/XrayMassCoef/chap2.html> (citato a pag. 25).
- NIST: X-Ray Mass Attenuation Coefficients - Table 3* (2004). URL: <https://physics.nist.gov/PhysRefData/XrayMassCoef/tab3.html> (citato a pagg. 25, 29).
- Percorso Raggi Cosmici | OCRA* (2020). URL: <https://web.infn.it/OCRA/category/percorso-raggi-cosmici/> (citato a pagg. 2, 4).

- Robert, C. e G. Casella (2004). *Monte Carlo Statistical Methods, second edition*. New York, NY: Springer-Verlag (citato a pag. 45).
- (2010). *Introducing Monte Carlo Methods with R*. New York, NY: Springer New York (citato a pag. 45).
- Rosen, L. (1971). «Relevance of Particle Accelerators to National Goals». In: *Science* 173.3996. Publisher: American Association for the Advancement of Science, pp. 490–497. doi: [10.1126/science.173.3996.490](https://doi.org/10.1126/science.173.3996.490) (citato a pagg. 22, 23).
- Suzuki, T., D. F. Measday e J. P. Roalsvig (1987). «Total nuclear capture rates for negative muons». In: *Physical Review C* 35.6, pp. 2212–2224. doi: [10.1103/PhysRevC.35.2212](https://doi.org/10.1103/PhysRevC.35.2212) (citato a pag. 19).
- Venables, W. N., D. M. Smith e R Core Team (2023). *An Introduction to R*. Notes on R: A Programming Environment for Data Analysis and Graphics Version 4.3.2 (2023-10-31) (citato a pag. iv).
- Workman, R.L. et al. (Particle Data Group) (2022). «Review of Particle Physics». In: *Progress of Theoretical and Experimental Physics*. 083C01. doi: [10.1093/ptep/ptac097](https://doi.org/10.1093/ptep/ptac097) (citato a pag. 1).

# APPENDICE



# A

## Risultati inferenza

**Tabella A.1:** Stime ottenute con l'algoritmo EM secondo quanto descritto al Capitolo 7 per l'identificazione atomica del volume.

	Centro voxel ( $x, y, z$ )	$\hat{p}_{1j}$	$\hat{p}_{2j}$
$j = 1$	(24.5,0.5,0.5)	0.000	0.001
$j = 2$	(25.5,0.5,0.5)	0.000	0.039
$j = 3$	(26.5,0.5,0.5)	0.000	0.001
$j = 4$	(27.5,0.5,0.5)	0.000	0.000
$j = 1$	(24.5,1.5,0.5)	0.000	0.000
$j = 2$	(25.5,1.5,0.5)	0.000	0.906
$j = 3$	(26.5,1.5,0.5)	0.000	0.928
$j = 4$	(27.5,1.5,0.5)	0.000	0.890
$j = 1$	(24.5,2.5,0.5)	0.000	0.014
$j = 2$	(25.5,2.5,0.5)	0.689	0.203
$j = 3$	(26.5,2.5,0.5)	0.000	0.978
$j = 4$	(27.5,2.5,0.5)	0.000	1.000
$j = 1$	(24.5,3.5,0.5)	0.907	0.001
$j = 2$	(25.5,3.5,0.5)	0.000	0.945
$j = 3$	(26.5,3.5,0.5)	0.000	0.000
$j = 4$	(27.5,3.5,0.5)	0.792	0.206
$j = 1$	(24.5,0.5,1.5)	0.000	0.000
$j = 2$	(25.5,0.5,1.5)	0.000	0.009
$j = 3$	(26.5,0.5,1.5)	0.708	0.000
$j = 4$	(27.5,0.5,1.5)	0.308	0.102
$j = 1$	(24.5,1.5,1.5)	0.852	0.004
$j = 2$	(25.5,1.5,1.5)	0.312	0.014
$j = 3$	(26.5,1.5,1.5)	0.000	0.147
$j = 4$	(27.5,1.5,1.5)	0.000	0.976
$j = 1$	(24.5,2.5,1.5)	0.000	0.018
$j = 2$	(25.5,2.5,1.5)	0.000	0.892
$j = 3$	(26.5,2.5,1.5)	0.539	0.189
$j = 4$	(27.5,2.5,1.5)	0.000	0.999
$j = 1$	(24.5,3.5,1.5)	0.000	0.011
$j = 2$	(25.5,3.5,1.5)	0.000	0.975
$j = 3$	(26.5,3.5,1.5)	0.206	0.014
$j = 4$	(27.5,3.5,1.5)	0.000	0.028
$j = 1$	(24.5,0.5,2.5)	0.000	0.017
$j = 2$	(25.5,0.5,2.5)	0.278	0.012
$j = 3$	(26.5,0.5,2.5)	0.000	0.003
$j = 4$	(27.5,0.5,2.5)	0.000	1.000

**Tabella A.2:** Stime ottenute con l'algoritmo EM secondo quanto descritto al Capitolo 7 per l'identificazione atomica del volume.

	Centro voxel ( $x, y, z$ )	$\hat{p}_{1j}$	$\hat{p}_{2j}$
$j = 1$	(24.5,1.5,2.5)	0.835	0.055
$j = 2$	(25.5,1.5,2.5)	0.000	0.000
$j = 3$	(26.5,1.5,2.5)	0.309	0.351
$j = 4$	(27.5,1.5,2.5)	1.000	0.000
$j = 1$	(24.5,2.5,2.5)	0.032	0.892
$j = 2$	(25.5,2.5,2.5)	0.000	0.004
$j = 3$	(26.5,2.5,2.5)	0.000	0.021
$j = 4$	(27.5,2.5,2.5)	0.273	0.715
$j = 1$	(24.5,3.5,2.5)	0.000	0.020
$j = 2$	(25.5,3.5,2.5)	0.255	0.039
$j = 3$	(26.5,3.5,2.5)	0.000	0.000
$j = 4$	(27.5,3.5,2.5)	0.000	1.000
$j = 1$	(24.5,0.5,3.5)	0.909	0.002
$j = 2$	(25.5,0.5,3.5)	0.000	0.949
$j = 3$	(26.5,0.5,3.5)	0.863	0.014
$j = 4$	(27.5,0.5,3.5)	0.510	0.151
$j = 1$	(24.5,1.5,3.5)	0.006	0.016
$j = 2$	(25.5,1.5,3.5)	0.811	0.020
$j = 3$	(26.5,1.5,3.5)	0.000	1.000
$j = 4$	(27.5,1.5,3.5)	0.852	0.148
$j = 1$	(24.5,2.5,3.5)	0.912	0.039
$j = 2$	(25.5,2.5,3.5)	0.000	0.000
$j = 3$	(26.5,2.5,3.5)	0.604	0.305
$j = 4$	(27.5,2.5,3.5)	0.000	0.961
$j = 1$	(24.5,3.5,3.5)	0.961	0.002
$j = 2$	(25.5,3.5,3.5)	0.000	0.000
$j = 3$	(26.5,3.5,3.5)	0.164	0.021
$j = 4$	(27.5,3.5,3.5)	0.000	0.014

# B

## Codice R

In questa appendice si riporta parte del codice R\* (<https://www.r-project.org/>) sviluppato per la modellazione della simulazione delineata nel Capitolo 3, con relativi risultati mostrati nel Capitolo 4. Anche parte rilevante del codice utilizzato per l'inferenza sulla composizione atomica, utilizzato nel Capitolo 7, viene presentato. L'intero codice R per riprodurre tutte le analisi e le immagini esposte all'interno di questa tesi sono disponibili online (<https://github.com/saradevidi/Uso-della-cattura-k-nella-tomografia-muonica.git>).

### B.1 Simulazione

#### B.1.1 Creazione della geometria

```
1
2 # DEFINIZIONE DEL VOLUME
3
4 coord.volume = function(coord,ang = c(24,0,0), alt = 10, lato1 = 10, lato2= 10) # cubo 10cm X 10cm X 10cm di default
5 { # restituisce una matrice di coordinate per il centro di ciascun voxel
6   nvox = lato1*lato2
7   coord.volume.out = matrix(NA, nvox, 3)
8   # definisco tutte le coordinate dei voxel nel primo strato
9   ncambi = lato1-1
10  narr = 1 # voxel 1
11  # narr tiene conto del numero del voxel di cui viene, di volta in volta, determinata la coordinata centrale
12  for(i in 1:lato2)
13  {
14    if(i == 1)
15    {
16      coord.volume.out[narr,] = coord,ang + 0.5
17      narr = narr + 1
18      if(ncambi>=1)
19      {
20        for(j in 1:ncambi)
21        {
22          coord.volume.out[narr,] = c(coord.volume.out[(narr-1),1] + 1, coord.volume.out[(narr-1),2], coord.volume.out[(narr-1),3])
23          narr = narr + 1
24        }
25      }
26    }
27  }
```

**Codice B.1:**  
Creazione della geometria necessaria alla simulazione (Capitolo 3).

\* RStudio Versione R-4.3.2

```

26 }else if(i != 1){
27   coord.volume.out[narr,] = c(coord.volume.out[1,1], coord.volume.out[1,2]+(i-1), coord.volume.out[1,3])
28   narr = narr + 1
29   if(ncambi>=1)
30     {
31       for(j in 1:ncambi)
32         {
33           coord.volume.out[narr,] = c(coord.volume.out[(narr-1),1] + 1, coord.volume.out[(narr-1),2], coord.volume.out[(narr
-1),3])
34           narr = narr + 1
35         }
36       }
37     }
38 }
39 for(str in 1:(alt-1))
40 {
41   strato.mat = cbind(coord.volume.out[1:(narr-1),1:2],coord.volume.out[1:(narr-1),3]+str)
42   coord.volume.out = rbind(coord.volume.out,strato.mat)
43 }
44 colnames(coord.volume.out) = c("x", "y", "z")
45 coord.volume.out
46 }
47
48 coord.volume.Extreme = function(coord.volume,matrix)
49 {
50   x_min = coord.volume.matrix[,colnames(coord.volume.matrix)=="x"] - 0.5
51   x_max = coord.volume.matrix[,colnames(coord.volume.matrix)=="x"] + 0.5
52   y_min = coord.volume.matrix[,colnames(coord.volume.matrix)=="y"] - 0.5
53   y_max = coord.volume.matrix[,colnames(coord.volume.matrix)=="y"] + 0.5
54   z_min = coord.volume.matrix[,colnames(coord.volume.matrix)=="z"] - 0.5
55   z_max = coord.volume.matrix[,colnames(coord.volume.matrix)=="z"] + 0.5
56   coord.volume.Extreme.out = cbind(coord.volume.matrix, x_min, x_max, y_min, y_max, z_min, z_max)
57   coord.volume.Extreme.out
58 }
59
60 coord.volume.Z = function(coord.volume.Extreme,matrix, atoms = c(6, 14, 26), seed_ = 123)
61 {
62   set.seed(seed_)
63   Z = sample(atoms, dim(coord.volume.Extreme.matrix)[1], replace = T)
64   coord.volume.Z.out = cbind(coord.volume.Extreme.matrix, Z)
65   coord.volume.Z.out = as.data.frame(coord.volume.Z.out)
66   coord.volume.Z.out
67 }
68
69
70 # DEFINIZIONE DEL PIANO DI RIVELATORE
71
72 coord.riv = function(x.coord = 3.5,
73                     coord.volume ,
74                     lato2 = 10,
75                     alt = 10)
76 {
77   coord.riv.out = matrix(NA, (lato2*alt),3)
78   x.ref = coord.volume[1,1]
79   mat.ref = coord.volume[coord.volume[,1]==x.ref,][,2:3]
80   coord.riv.out = cbind(rep(x.coord,dim(mat.ref)[1]),mat.ref)
81   colnames(coord.riv.out) = c("x", "y", "z")
82   x_min = coord.riv.out[,colnames(coord.riv.out)=="x"] - 0.5
83   x_max = coord.riv.out[,colnames(coord.riv.out)=="x"] + 0.5
84   y_min = coord.riv.out[,colnames(coord.riv.out)=="y"] - 0.5
85   y_max = coord.riv.out[,colnames(coord.riv.out)=="y"] + 0.5
86   z_min = coord.riv.out[,colnames(coord.riv.out)=="z"] - 0.5
87   z_max = coord.riv.out[,colnames(coord.riv.out)=="z"] + 0.5
88   coord.riv.out = cbind(coord.riv.out, x_min, x_max, y_min, y_max, z_min, z_max)
89   coord.riv.out = as.data.frame(coord.riv.out)

```

```

90 coord,riv,out
91 }

```

## B.1.2 Processo *Cattura k*

```

1
2 generate.kCapture = function(n.muon = 1000, # numero di muoni da generare
3     E.mu = c(2,105), # limiti minimo e massimo dell'energia in MeV per il fascio di muoni in entrata
4     coord.material, # coordinate dei voxel nel volume con i corrispondenti numeri atomici Z
5     coord.detector, # coordinate dei voxel del rivelatore
6     DeltaE.matrix, # perdita di energia del muone
7     kcapturePROB.matrix, # probabilita' di cattura k
8     lato1 = 10, # lato 1 del volume
9     x = 0, # coordinata x per il fascio di muoni in entrata
10    seed_ = 123) # per la riproducibilita'
11
12 {
13   x_partenza = x
14   output = matrix(NA, nrow = n.muon, ncol = 37)
15   colnames(output) = c("muon.exit",
16     "muon.stop",
17     "kcapture",
18     "x_muon", "y_muon", "z_muon",
19     "vox_detector_muon",
20     "E_muon",
21     "E_fot1", "E_fot2", "E_fot3", "E_fot4",
22     "x_fot1", "x_fot2", "x_fot3", "x_fot4",
23     "y_fot1", "y_fot2", "y_fot3", "y_fot4",
24     "z_fot1", "z_fot2", "z_fot3", "z_fot4",
25     "vox_detector_fot1", "vox_detector_fot2", "vox_detector_fot3", "vox_detector_fot4",
26     "theta_fot1", "phi_fot1",
27     "theta_fot2", "phi_fot2",
28     "theta_fot3", "phi_fot3",
29     "theta_fot4", "phi_fot4",
30     "vox_real"
31   )
32   set.seed(seed_)
33   for(i in 1:n.muon)
34   { # per ciascun muone emesso dal punto di coordinate x,y,z
35     if(i%%1000 == 0){ # per tutti i muoni i-esimi multipli di 1000
36       print(paste0("muone", sep=" ", i)) # ogni 1000 muoni stampo il punto a cui sono arrivata
37       # definisco casualmente y e z
38       y = runif(1, min = min(coord.material$y_min), max = max(coord.material$y_max)) # campio casualmente una coordinata y per
           il muone in entrata, tra le coordinate min e max dell'asse y in cui il volume e' definito
39       z = runif(1, min = min(coord.material$z_min), max = max(coord.material$z_max)) # campio casualmente una coordinata z per
           il muone in entrata, tra le coordinate min e max dell'asse z in cui il volume e' definito
40       # il punto di partenza del muone e' (x, y, z) .
41       E.mu.new = runif(1, min = E.mu[1], max = E.mu[2]) # energia di partenza del muone (prima dell'attraversamento del tessuto)
42       E.mu.forOutput = E.mu.new # mi serve per salvare l'energia del muone entrante da restituire nell'output
43       id.muon.exit = FALSE
44       id.muon.stop = FALSE
45       id.kcapture = 0
46       voxel.true = NA
47       direzioni.fotoni = matrix(NA, 4, 5)
48       colnames(direzioni.fotoni) = c("theta.true", "phi.true", "x.true", "y.true", "z.true")
49       rownames(direzioni.fotoni) = c("fotone 1", "fotone 2", "fotone 3", "fotone 4")
50       detector.coord.fotoni = matrix(NA, 4, 2)
51       colnames(detector.coord.fotoni) = c("y.detect.real", "z.detect.real")
52       rownames(detector.coord.fotoni) = c("fotone 1", "fotone 2", "fotone 3", "fotone 4")
53       energie.coord.fotoni = matrix(NA, 4, 5)
54       colnames(energie.coord.fotoni) = c("E.detect", "x.detect", "y.detect", "z.detect", "vox.detect")

```

**Codice B.2:**  
 Simulazione  
 del processo  
 di *cattura k*  
 mediante  
 un fascio di  
 muoni che  
 incide in  
 un volume  
 (Capitolo 3).

```

55 rownames(energie.coord.fotoni) = c("fotone 1", "fotone 2", "fotone 3", "fotone 4")
56 direzioni.fotoni = as.data.frame(direzioni.fotoni)
57 detector.coord.fotoni = as.data.frame(detector.coord.fotoni)
58 x.det = coord.detector[1,1]
59 for(j in 1:latol)
60 { # modello la propagazione del muone nel materiale
61
62   # 1. Identifico il voxel in cui entra il muone
63   x.vox = coord.material[j,1] # centro del voxel in x
64   nr.atomico.vox = coord.material$Z[((coord.material$x==x.vox) & (coord.material$y_min <= y) & (coord.material$y_max >= y)
65     & (coord.material$z_min <= z) & (coord.material$z_max >= z))]
66
67   # 2. Definisco la perdita di energia DeltaE del muone nell'attraversare tutto il voxel (x.vox, y, z).
68   E.mu.new = E.mu.new - DeltaE.matrix$loss.energy.Ycm[DeltaE.matrix$Z==nr.atomico.vox] # energia del muone dopo che ha
69     attraversato completamente il voxel in cui si trova
70
71   # 3. Se il muone ha esaurito la sua energia allora il muone si ferma nel voxel identificato dalle coordinate (x.vox, y, z
72     ) => puo' avvenire la cattura-k in quel voxel => simulo la cattura del muone
73   if(E.mu.new <= 0)
74   {
75     id.muon.stop = TRUE
76     E.iniziale = E.mu.new + DeltaE.matrix$loss.energy.Ycm[DeltaE.matrix$Z==nr.atomico.vox]
77     DeltaE.1mm = DeltaE.matrix$loss.energy.Ycm[DeltaE.matrix$Z==nr.atomico.vox]/10
78     x = coord.material$x_min[((coord.material$x==x.vox) & (coord.material$y_min <= y) & (coord.material$y_max >= y) & (
79       coord.material$z_min <= z) & (coord.material$z_max >= z))] # coordinata x di inizio voxel
80     for(l in 1:10)
81     { # da 1 mm a 10 mm attraversati
82       E.iniziale = E.iniziale - DeltaE.1mm
83       x = x + 0,1 # coordinata x nella quale il muone avanza -> si sposta di 1 mm ogni volta
84       if(E.iniziale <= 0)
85       { # se il muone ha esaurito la sua energia allora si e' fermato in quel mm, identificato dalla coordinata x calcolata
86         break
87       }
88     }
89     break
90   }
91 }
92 if((E.mu.new > 0) & (j == latol))
93 { # se il muone ha ancora energia e ha attraversato tutto il volume, allora genero un altro muone
94   id.muon.exit = TRUE
95 }
96
97 # 4. Se il muone si e' fermato in un voxel del volume allora simulo la cattura nel materiale, e quindi l'eventuale k-
98   capture nelle coordinate (x, y, z)
99 if((id.muon.stop == TRUE) & (id.muon.exit==FALSE))
100 { # se il muone si e' fermato in un voxel del volume
101   # salvo il valore del voxel in cui il muone si e' fermato
102   voxel.true = which(((coord.material$x==x.vox) & (coord.material$y_min <= y) & (coord.material$y_max >= y) & (coord.
103     material$z_min <= z) & (coord.material$z_max >= z)))
104   # il muone in quel voxel decade come particella libera o viene catturato dal nucleo ?
105   id.kcapture = rbinom(1,size=1,prob=kcapturePROB.matrix$prob_cattura[kcapturePROB.matrix$Z==nr.atomico.vox])
106   if(id.kcapture == 1)
107   { # se il muone viene catturato dal nucleo
108     n.fotoni = sample(c(1,2,3,4), size=1, prob = c(0,1, 0,1, 0,3, 0,5)) # decido quanti fotoni vengono emessi
109     ro.phi_min = sqrt( (coord.detector[1,1]-x)^2 + (max(coord.detector$z_max) - z)^2 )
110     phi_min = acos((max(coord.detector$z_max) - z)/ro.phi_min)
111     ro.phi_max = sqrt( (coord.detector[1,1]-x)^2 + (min(coord.detector$z_min) - z)^2 )
112     phi_max = acos((min(coord.detector$z_min) - z)/ro.phi_max)
113     th_min = atan( (max(coord.detector$y_max)-y)/(coord.detector[1,1]-x) ) + pi
114     th_max = atan( (min(coord.detector$y_min)-y)/(coord.detector[1,1]-x) ) + pi
115     name = pdf.fun$rfun.name[pdf.fun$Z==nr.atomico.vox] # nome della funzione che campiona l'energia del fotone
116     r.pdf = get(name)
117     for(fot in 1:n.fotoni)
118     { # per tutti i fotoni emessi

```

```

113     # campiono una energia per il fotone dalla pdf che fa riferimento al numero atomico Z del voxel in cui il fotone
viene emesso
114     E_foton = r.pdf(1)
115     if(E_foton >= 0.001)
116     { # se l'energia e' >=1KeV allora mi interessa generare 2 angoli per il fotone
117         t.indicator = 0
118         while(t.indicator == 0)
119             {# per ogni fotone emesso genero casualmente 2 angoli theta e phi che descrivono la sua traiettoria nello spazio 3-
dimensionale
120                 th.fotone = runif(1, min = th_min, max = th_max) # angolo theta
121                 phi.fotone = runif(1, min = phi_min, max = phi_max) # angolo phi
122                 ro = (x.det - x)/(sin(phi.fotone)*cos(th.fotone)) # rho
123                 y.det = y + (ro * sin(phi.fotone)*sin(th.fotone)) # vera coordinata y di arrivo del fotone nel rivelatore
124                 z.det = z + (ro * cos(phi.fotone)) # vera coordinata z di arrivo del fotone nel rivelatore
125                 # il fotone ha intersecato il rivelatore ?
126                 if( sum( (coord.detector$x==x.det) & (coord.detector$y_min <= y.det) & (coord.detector$y_max >= y.det) & (coord.
detector$z_min <= z.det) & (coord.detector$z_max >= z.det) ) == 1 )
127                 {
128                     t.indicator = 1 # salvo il fotone e non proseguo il ciclo while
129                     direzioni.fotoni[fot,] = c(th.fotone, phi.fotone, x, y, z)
130                     detector.coord.fotoni[fot,] = c(y.det, z.det)
131                 }
132             }
133             survival = NA
134             # coordinate effettivamente misurate nel rivelatore
135             y.det.misurata = detector.coord.fotoni$y.detect.real[fot] + rnorm(1, mean = 0, sd = 0.1)
136             z.det.misurata = detector.coord.fotoni$z.detect.real[fot] + rnorm(1, mean = 0, sd = 0.1)
137             if( sum( (coord.detector$x==x.det) & (coord.detector$y_min <= y.det.misurata) & (coord.detector$y_max >= y.det
.misurata) & (coord.detector$z_min <= z.det.misurata) & (coord.detector$z_max >= z.det.misurata) ) == 1 )
138             {
139                 # salvo il valore del voxel in cui il fotone ha incrociato il rivelatore (voxel misurato, non reale)
140                 voxel.detector = which(((coord.detector$x==x.det) & (coord.detector$y_min <= y.det.misurata) & (coord.
detector$y_max >= y.det.misurata) & (coord.detector$z_min <= z.det.misurata) & (coord.detector$z_max >= z.det.misurata)
)
141                 survival = TRUE # inizialmente il fotone e' vivo
142                 # Propago il fotone nei voxel del volume
143                 tot = which(coord.material$x==x.vox)[1] # mi dice di quanto devo retrocedere verso sinistra nell'asse x
in cui il volume e' definito per propagare il fotone fino al rivelatore
144                 # estraggo le coordinate da cui il fotone parte, e successivamente queste verranno aggiornate di volta in volta
145                 x.fotone = direzioni.fotoni$x.true[fot]
146                 y.fotone = direzioni.fotoni$y.true[fot]
147                 z.fotone = direzioni.fotoni$z.true[fot]
148                 x_min_voxel.true = coord.material$x_min[voxel.true]
149                 for(j2 in 1:tot)
150                 { # per ogni punto di coordinata x_min dal voxel in cui il fotone si trova fino a fine volume (cioe' da
destra verso sinistra)
151                     if(j2 > 1)
152                     {
153                         x.fotone = x_min_j2 - 0.1 # entro di 1 mm nel voxel successivo e, fissata questa x ottengo le
coordinate y e z corrispondenti
154                         ro = (x.fotone - direzioni.fotoni$x.true[fot])/sin(direzioni.fotoni$phi.true[fot])*cos(direzioni.
fotoni$theta.true[fot])
155                         y.fotone = direzioni.fotoni$y.true[fot] + (ro * sin(direzioni.fotoni$phi.true[fot]) * sin(direzioni.
fotoni$theta.true[fot]))
156                         z.fotone = direzioni.fotoni$z.true[fot] + (ro * cos(direzioni.fotoni$phi.true[fot]))
157                         x_min_j2 = x_min_voxel.true - (j2 -1)
158                     }else{
159                         x_min_j2 = x_min_voxel.true
160                     }
161                 }
162                 # I. calcolo la distanza percorsa dal fotone dal punto in cui si trova (x.fotone, y.fotone, z.fotone) fino alla
coordinata x_min del voxel in cui si trova di volta in volta.
163                 if(j2 == 1)
164                 {

```

```

165         Deltax = x.fotone - x_min_j2 # distanza percorsa in x dal fotone per arrivare a inizio voxel
    successivo
166         d = sqrt(1 + (tan(direzioni.fotoni$phi.true[fot]*cos(direzioni.fotoni$theta.true[fot]))^2 + (tan(
direzioni.fotoni$phi.true[fot]*sin(direzioni.fotoni$theta.true[fot]))^2) * Deltax # distanza percorsa dal fotone se
questo si sposta di una distanza Deltax in x.
167     }
168     if(j2 == 2)
169     {
170         d = sqrt(1 + (tan(direzioni.fotoni$phi.true[fot]*cos(direzioni.fotoni$theta.true[fot]))^2 + (tan(
direzioni.fotoni$phi.true[fot]*sin(direzioni.fotoni$theta.true[fot]))^2) # poiche' Deltax = 1
171     }
172
173     # II. identifico il voxel in cui il fotone si trova e dunque ne ricavo il numero atomico Z.
174     Z,j2 = coord.material$Z[((coord.material$x_min == x_min_j2) & (coord.material$y_min <= y.fotone) & (coord
.material$y_max >= y.fotone) & (coord.material$z_min <= z.fotone) & (coord.material$z_max >= z.fotone))]
175
176     # III. calcolo la probabilita' di sopravvivenza utilizzando la funzione di sopravvivenza, e decido se il fotone
sopravvive o meno.
177     # calcolo il lambda
178     name.fun.lambda = function(lambda$name[function.lambda$Z == Z,j2] # nome della funzione che mi serve per
estrarre il lambda data l'energia del fotone e il materiale in cui il fotone si trova
179     fun.lambda = get(name.fun.lambda)
180     lambda.j2 = fun.lambda(E_foton) # lambda corrispondente all'energia del fotone nel materiale in cui
attualmente si trova
181     # estraggo la densita' del materiale Z,j2
182     densita.j2 = DeltaE.matrix$density[DeltaE.matrix$Z == Z,j2]
183     # calcolo la probabilita' di sopravvivenza
184     prob.S = Survival.lambda(spessore = d, densita = densita.j2, lambda = lambda.j2)
185     # decido se il fotone viene assorbito o se passa allo strato di voxel successivo
186     if(rbinom(1, 1, prob.S) == 0)
187     {# se il fotone e' stato assorbito passo al fotone successivo
188         survival = FALSE
189         break
190     }
191 }
192 if(j2 == tot & survival == TRUE)
193 {# se il fotone e' sopravvissuto fino alla fine del volume allora modello la probabilita' che il fotone
venga rivelato dal tracker a seconda della sua energia: prob=1 se E>=1 MeV, P=E se E<1 MeV
194     if(E_foton>=1)
195     {
196         probabilita = 1
197     }else{
198         probabilita = E_foton
199     }
200     if(rbinom(1,1,prob = probabilita)==1)
201     {
202         energie.coord.fotoni[fot,1] = abs(E_foton + rnorm(1, mean=0, sd=sqrt(0.001)))
203         energie.coord.fotoni[fot,2:4] = c(x.det,y.det.misurata,z.det.misurata)
204         energie.coord.fotoni[fot,5] = voxel.detector
205     }
206 }
207 }
208 }
209 } # procedo col fotone successivo
210 }
211 }
212 # risoluzione della posizione del muone che incide nel materiale
213 y.muon.misurata = y + rnorm(1, mean = 0, sd = 0.1)
214 z.muon.misurata = z + rnorm(1, mean = 0, sd = 0.1)
215 # verifico se (y,z) sono compatibili con la geometria del detector
216 if( sum( (y.muon.misurata >= coord.detector$y_min) & (y.muon.misurata <= coord.detector$y_max) & (z.muon.misurata >= coord.
detector$z_min) & (z.muon.misurata<=coord.detector$z_max) ) == 1 )
217 { # se la coordinata del muone entrante misurata rientra nella geometria del rivelatore
218     voxel.muon.misurata = which(((coord.detector$x==x.det) & (coord.detector$y_min <= y.muon.misurata) & (coord.detector$y_
max >= y.muon.misurata) & (coord.detector$z_min <= z.muon.misurata) & (coord.detector$z_max >= z.muon.misurata)))

```

```

219 }else{
220   y.muon.misurata = NA
221   z.muon.misurata = NA
222   voxel.muon.misurata = NA
223 }
224 output[i,] = c(id.muon.exit, id.muon.stop, id.kcapture,
225               x_partenza, y.muon.misurata, z.muon.misurata,
226               voxel.muon.misurata,
227               E_mu, forOutput,
228               as.vector(energie.coord.fotoni[,1]),
229               as.vector(energie.coord.fotoni[,2]),
230               as.vector(energie.coord.fotoni[,3]),
231               as.vector(energie.coord.fotoni[,4]),
232               as.vector(energie.coord.fotoni[,5]),
233               as.numeric(direzioni.fotoni[1,1:2]),
234               as.numeric(direzioni.fotoni[2,1:2]),
235               as.numeric(direzioni.fotoni[3,1:2]),
236               as.numeric(direzioni.fotoni[4,1:2]),
237               voxel.true
238             )
239 }
240 as.data.frame(output)
241 }

```

## B.2 Inferenza

```

1
2 EM.depth.4cm = function(start, data, eps = 1e-5, max.iter = 100)
3 {
4   library('nloptr')
5   opts = list("algorithm" = "NLOPT_LD_MMA", "xtol_rel"=1.0e-8)
6   abs.e = 1
7   estimate = start # p11, p21, p12, p22, p13, p23, p14, p24
8   new.estimate = numeric(length(start))
9   iter = 0
10
11 # valore atteso della log-verosimiglianza per i dati completi: funzione da massimizzare nell'M-step
12 function,maximize = function(p, data, expectation) # p = (p11, p21, p12, p22, p13, p23, p14, p24)
13 {
14   -sum( expectation$Expectation_1 * log( p[1]*fE.cond_sz.Z6.S1 + p[2]*fE.cond_sz.Z14.S1 + (1-p[1]-p[2])*fE.cond_sz.Z26.S1 ) +
15         expectation$Expectation_2 * log( p[3]*fE.cond_sz.Z6.S2 + p[4]*fE.cond_sz.Z14.S2 + (1-p[3]-p[4])*fE.cond_sz.Z26.S2 ) )
16     +
17     expectation$Expectation_3 * log( p[5]*fE.cond_sz.Z6.S3 + p[6]*fE.cond_sz.Z14.S3 + (1-p[5]-p[6])*fE.cond_sz.Z26.S3 ) )
18     +
19     (1 - expectation$Expectation_1 - expectation$Expectation_2 - expectation$Expectation_3) * log( p[7]*fE.cond_sz.Z6.
20     S4 + p[8]*fE.cond_sz.Z14.S4 + (1-p[7]-p[8])*fE.cond_sz.Z26.S4 ) )
21   )
22 }
23
24 # gradiente della funzione da massimizzare nell'M-step
25 gradient = function(p, data, expectation)
26 {
27   c((-sum(expectation$Expectation_1*((fE.cond_sz.Z6.S1-fE.cond_sz.Z26.S1)/
28     (p[1]*fE.cond_sz.Z6.S1+p[2]*fE.cond_sz.Z14.S1+(1-p[1]-p[2])*fE.cond_sz.Z26.S1))),
29     (-sum(expectation$Expectation_1*((fE.cond_sz.Z14.S1-fE.cond_sz.Z26.S1)/
30     (p[1]*fE.cond_sz.Z6.S1+p[2]*fE.cond_sz.Z14.S1+(1-p[1]-p[2])*fE.cond_sz.Z26.S1))),
31     (-sum(expectation$Expectation_2*((fE.cond_sz.Z6.S2-fE.cond_sz.Z26.S2)/
32     (p[3]*fE.cond_sz.Z6.S2+p[4]*fE.cond_sz.Z14.S2+(1-p[3]-p[4])*fE.cond_sz.Z26.S2))),
33     (-sum(expectation$Expectation_2*((fE.cond_sz.Z14.S2-fE.cond_sz.Z26.S2)/
34     (p[3]*fE.cond_sz.Z6.S2+p[4]*fE.cond_sz.Z14.S2+(1-p[3]-p[4])*fE.cond_sz.Z26.S2))),

```

**Codice B.3:**  
 Algoritmo EM per l'identificazione atomica di un volume incognito (Capitolo 7).

```

32 (-sum(expectation$Expectation_3*((fE.cond_sz.Z6.S3-fE.cond_sz.Z26.S3)/
33 (p[5]*fE.cond_sz.Z6.S3+p[6]*fE.cond_sz.Z14.S3+(1-p[5]-p[6])*fE.cond_sz.Z26.S3))),
34 (-sum(expectation$Expectation_3*((fE.cond_sz.Z14.S3-fE.cond_sz.Z26.S3)/
35 (p[5]+fE.cond_sz.Z6.S3+p[6]*fE.cond_sz.Z14.S3+(1-p[5]-p[6])*fE.cond_sz.Z26.S3))),
36 (-sum((1-expectation$Expectation_1-expectation$Expectation_2-expectation$Expectation_3)*
37 ((fE.cond_sz.Z6.S4-fE.cond_sz.Z26.S4)/(p[7]*fE.cond_sz.Z6.S4+p[8]*fE.cond_sz.Z14.S4+
38 (1-p[7]-p[8])*fE.cond_sz.Z26.S4))),
39 (-sum((1-expectation$Expectation_1-expectation$Expectation_2-expectation$Expectation_3)*
40 ((fE.cond_sz.Z14.S4-fE.cond_sz.Z26.S4)/(p[7]+fE.cond_sz.Z6.S4+p[8]*fE.cond_sz.Z14.S4+(1-p[7]-p[8])*fE.cond_sz.Z26.S4)))
41 )
42 }
43
44 # funzione che determina i vincoli
45 eval_g0 = function(p, data, expectation){
46   c(p[1]+p[2]-1+1e-7, p[3]+p[4]-1+1e-7, p[5]+p[6]-1+1e-7, p[7]+p[8]-1+1e-7)
47 }
48
49 # jacobiano dei vincoli
50 eval_jac_g0 = function(p, data, expectation)
51 {
52   return( rbind( c( 1, 1, 0, 0, 0, 0, 0, 0),
53                  c( 0, 0, 1, 1, 0, 0, 0, 0),
54                  c( 0, 0, 0, 0, 1, 1, 0, 0),
55                  c( 0, 0, 0, 0, 0, 0, 1, 1) ) )
56 }
57
58 while ((abs.e > eps) & (iter < max.iter))
59 {
60   iter = iter + 1
61
62   # E-step
63   out = Expectation(estimate = estimate, data = data) # funzione che calcola i valori attesi per l'E-step
64
65   # M-step
66   new.estimate = nloptr( x0=estimate, eval_f=function.maximize, eval_grad_f=gradient, eval_g_ineq = eval_g0, eval_jac_g_ineq
67     = eval_jac_g0,
68     data=data, expectation = out, opts=opts,
69     lb = c(rep(1e-7,8)), ub=c(rep(1-1e-7,8)) )$solution
70
71   abs.e = max(abs(new.estimate - estimate))
72   estimate = new.estimate
73 }
74 if (iter == max.iter) warning("Maximum number of iteration reached")
75 p31 = 1-estimate[1]-estimate[2]
76 p32 = 1-estimate[3]-estimate[4]
77 p33 = 1-estimate[5]-estimate[6]
78 p34 = 1-estimate[7]-estimate[8]
79 estimate = c(estimate[1:2], p31, estimate[3:4], p32, estimate[5:6], p33, estimate[7:8], p34)
80 list(estimate = estimate, # restituisce (p11, p21, p31, p12, p22, p32, p13, p23, p33, p14, p24, p34)
81 iter = iter)

```