



中国科学院
CHINESE ACADEMY OF SCIENCES



爱因斯坦探针
einstein probe

X射线能谱分析简介

程华清

EP卫星科学中心/国家天文台

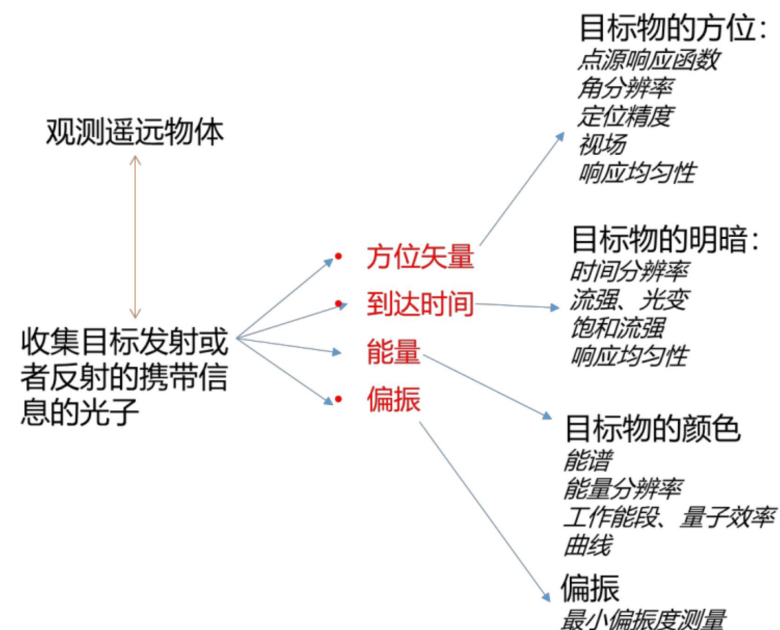
2025.8.20

提纲

- ★ 能谱拟合基本公式
- ★ 原理：前向拟合（Forward fitting）
- ★ 能谱模型
- ★ 最佳拟合：寻求模型实测差异的最小化
- ★ 统计量选取
- ★ 能谱拟合软件
- ★ 分析步骤

能谱分析与相关文件

- ★ X射线能谱分析作为X射线数据处理的主要任务之一，是理解和认识高能天体物理中的物质相互作用、辐射过程的基础
- ★ 能谱分析主要是指对X射线光子分布能谱，使用**唯象**（phenomenological）/物理机制出发（physically motivated）模型，进行拟合的过程
- X射线光子为**逐光子事例**。对于天体源的入射光子，探测器响应的光子信号（即探测能谱）依赖于**有效面积**（收集光子的能力）以及**探测器能量分辨率**（区分不同能量光子的能力）。因此一个成像X射线望远镜的能谱分析通常包括几个基本文件
 - 1) 包含源区域光子的能谱文件src.pha
 - 2) 包含背景区域光子的能谱文件bk.pha
 - 3) 包含有效面积信息的响应文件src.arf
 - 4) 包含探测器分辨光子能力的响应矩阵文件src.rmf



高能望远镜的探测流程
(from 张臣)

能谱拟合基本公式

$$C(PI) = T \int \text{RMF}(PI, E) \cdot \text{ARF}(E) \cdot S(E) \cdot dE$$
$$\approx T \sum_j R_{ij} A_j S_j$$

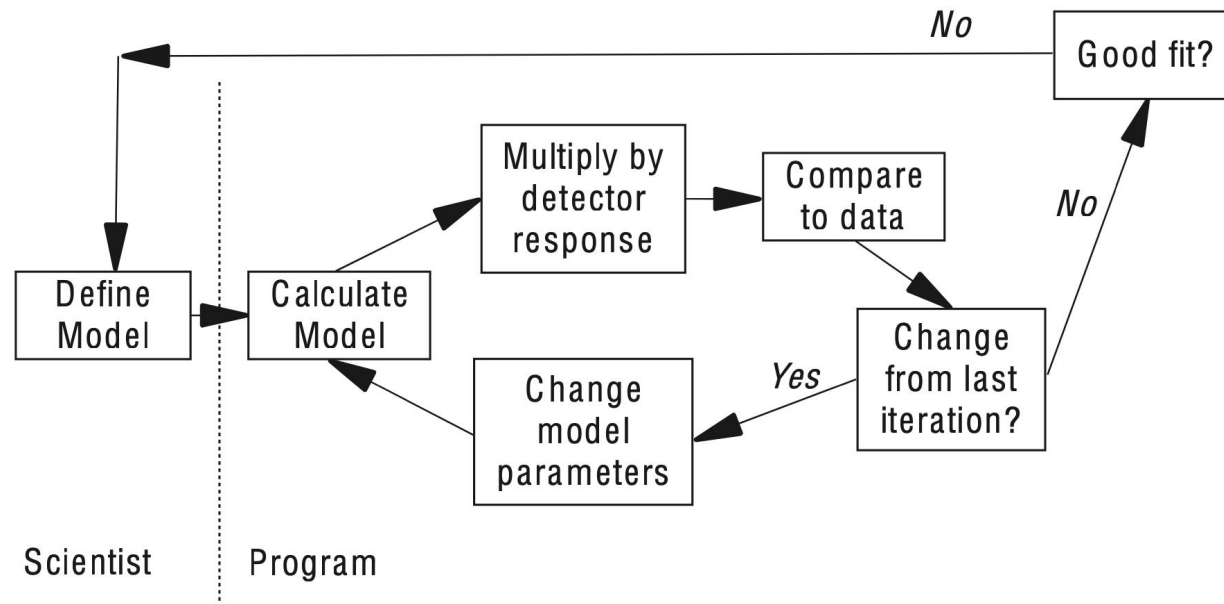
- * $C(PI)$: 探测器能道 (PI) 中的**观测光子数** (提取能谱)
- * T : 观测时间 (单位秒)
- * $\text{ARF}(E)$: 依赖于光子能量的**有效面积**曲线 (卫星提供/数据分析软件生成)
- * $\text{RMF}(PI, E)$: 探测器**能量响应矩阵**, 表征能量为 E 的光子在 PI 能道中**被观测到的概率** (卫星提供/数据分析软件生成)

前向拟合 (Forward fitting)

- 响应过程是**非线性的**（第一类弗雷德霍姆积分方程）。它难以通过直接反解响应矩阵来轻松求解出源光谱 $S(E)$ 。
- 前向/正向拟合：
 - 定义能谱模型 $S(E)$ ：powerlaw, diskbb, apec, bbody，一般从物理过程出发
 - 能谱模型**卷积**有效面积ARF和能量响应矩阵RMF，得到不同PI能道内预测的计数率，并与观测的计数进行比较，**计算统计量**
 - 调整模型参数，使**统计量**（chisquare, C-stat, wstat）**减小并趋向最佳拟合值**（e.g. reduced-chisquare~1）
 - 如果统计量无法趋向理想值，通常伴随能谱中的**残差**结构。可能需要**引入新的模型或参数（重新定义模型）**，然后重新拟合

$$C(PI) = T \int \text{RMF}(PI, E) \cdot \text{ARF}(E) \cdot S(E) \cdot dE$$
$$\approx T \sum_j R_{ij} A_j S_j$$

$$S^2 = \sum_i^N \frac{(X_i - M_i)^2}{\sigma_i^2}$$



能谱模型

- * X射线光谱模型由各个模型成分构建而成：
 - ★ 加性模型 (Additive): 一个发射分量，例如黑体或谱线。
 - ★ 乘性模型 (Multiplicative): 修改光谱的东西，例如吸收边或吸收线，只依赖于能量
 - ★ 卷积模型 (Convolution)：常用例如 cflux、gsmooth等
 - ★ 混合模型 (Mixing)
 - ★ 光子堆积模型 (pileup)
- * 一个例子
 - ★ $\text{Tbabs} \text{【乘性】} * \text{cflux} \text{【卷积】} * (\text{powerlaw} \text{【加性】} + \text{bbbody} \text{【加性】})$

Table 5.1 *Physical processes and XSPEC models*

Physical process	XSPEC models ¹
Equilibrium collisional plasma	(b)(v)apec, (z)(v)bremss, c6(p)(vm me)kl, ce(vm me)kl, equil, (v)meka(l), (v)raymond, smaug (v)(g)nei, (v)(n)pshock, (v)sedov
Non-equilibrium collisional plasma	
Photoionized plasma	absori, redge, swind1, xion, zxipcf
Power-law	bkn2pow, bknpower, cutoffpl, pegpwrlw, plcabs, (z)powerlaw
Blackbody	(z)bbbody, bbbodyrad
Emission line	(z)gaussian, diskline, kerrdisk, laor(2), lorentz
Compton scattering	bmc, cabs, comp(LS PS ST TT bb), nthComp, simpl
Accretion disk	disk(bb ir m o pbb pn), ezdiskbb, grad, hreft, kdblur(2), kerr(bb d conv), rdblur, sirf, xion
Reflection	(b p)exr(a i)v, (i)reflect, refsch
Neutron-star atmosphere	nsa(grav atmos), nsmax
Cooling flow	(mk)(vm)cflow
Gamma-ray burst	grbm
Pair plasma	ntea
Positronium continuum	posm
Synchrotron	sreut, sresc
Photoelectric absorption	absori, edge, partcov, pcfabs, (v)phabs, pwab, smedge, swind1, tb(var)abs, tbgrain, varabs, wndabs, zvfeabs, zxipcf
Cyclotron absorption	cyclabs
Dust scattering	dust
Reddening	redcen, uvred, zdust, zsmdust

较常用的一些模型

★ 加性模型：

- ★ 恒星耀发：**apec**（单温等离子体热辐射）
- ★ 吸积系统（X射线双星、AGN）：中子星/软X射线超出（**bbody**, **bbodyrad**）吸积盘（**diskbb**, **diskpbb**, **diskpn**, **diskir**）+幂律谱（**powerlaw**、**nthcomp**、**comptt**等），反射谱（**pexrav**, **pexriv**, **relxill**, **xillver**等）
- ★ GRB：幂律谱（**powerlaw**, **cutoffpl**等），band function（**grbm**）
- ★ 发射线（**gaussian**），回旋吸收线（**gabs**）

★ 乘性模型：

- ★ 光电吸收（**tbabs**、**wabs**、**phabs**等）

★ 卷积模型

- ★ 计算流量及误差（**cflux..**）

最佳拟合：寻求模型实测的差异最小化

- ★ 核心问题：最小化观测数据与预测结果之间的差异
- ★ 方法：调整模型参数，使拟合统计量（chisquare, cstat...）趋向理想值（ ~ 1 ），同时不同能量处残差趋向于0
- ★ 算法大多利用当前参数附近的局部信息（例如，统计量相对于各个参数的导数）来选择新的模型参数，被称为**局部最优化方法 (local minimization methods)**，但容易陷入局部最小值问题。最终能否找到合理的解，依赖于初值的选取（经验）

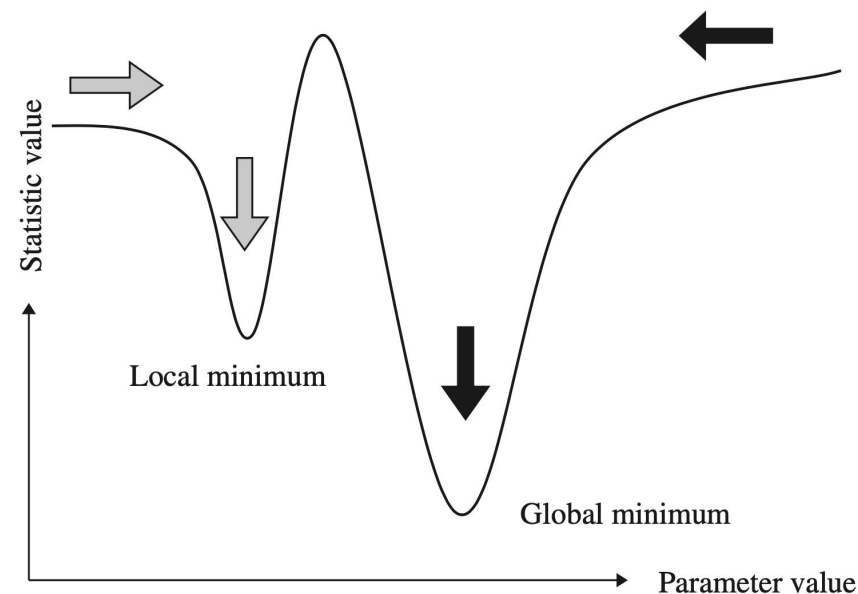


Fig. 5.3 The problem with local minimization. If the fit starts at the right it finds the true minimum but if it starts on the left then it gets stuck in a false minimum

最佳拟合：寻求拟合统计量最小化

- * 经验法则 (rule of thumb) 是：模型越复杂，参数之间的相关性越高，算法就越可能无法找到全局最小值。此外，某些特定类型的模型也可能引入问题。例如，考虑一个窄发射线的情况，当计算拟合统计量相对于谱线能量的导数时会发生什么。该导数的估计是通过将谱线能量改变一个很小的量并重新计算拟合统计量来实现的。**如果当前模型谱线能量距离观测值足够远，那么这个导数将为零，因此拟合过程将永远不会改变谱线能量。**这种情况下一个可能的解决方案是人为选择一个较宽的谱线，直到拟合锁定到正确的能量，然后再允许谱线变窄
- * 如果拟合确实被卡在局部最小值中，在估计置信区间时，有可能**偶然发现**一个新的、更好的拟合结果。这个结果可以作为新拟合的起点。这种通过不断估计新最佳拟合的置信区间来进行迭代的粗略技术有时有效，但可能非常耗时

全局最优解

- ★ 局部最优化方法存在的问题（指**易陷入局部最小值**）已在众多领域广为人知多年，如何确保优化过程是全局的：
 - **模拟退火法 (Simulated annealing)** 允许**在迭代过程中偶尔接受使拟合统计量增加**的步骤，从而提供了跳出局部最小值的可能性。这种接受统计量增加步骤的概率会在拟合过程中逐渐降低——这类比于金属在缓慢冷却过程中退火达到其最低能量状态的方式（例如 Press 等人，2007）。
 - **遗传算法 (Genetic algorithms)** 则基于显而易见的生物进化原理，它操作于一组**参数值种群**。那些提供最佳拟合的参数组合会进行“**繁衍 (breed)**”以产生下一代。这些方法需要比局部方法多得多的**函数评估次数**，因此**速度慢得多**，并且仍然不能保证找到全局最小值。

全局最优解：MCMC

- ★ 最有前途且日益流行的方法是**马尔可夫链蒙特卡洛法** (Markov Chain Monte Carlo, MCMC)。该方法与模拟退火有相似之处，但具有一个主要优势：它可以**同时用于搜索最佳拟合和确定置信区间**。因此，尽管搜索最佳拟合所需的时间比局部最优化方法长，但其中一部分时间被节省了下来，因为不再需要运行冗长的专门程序来获取置信区间。

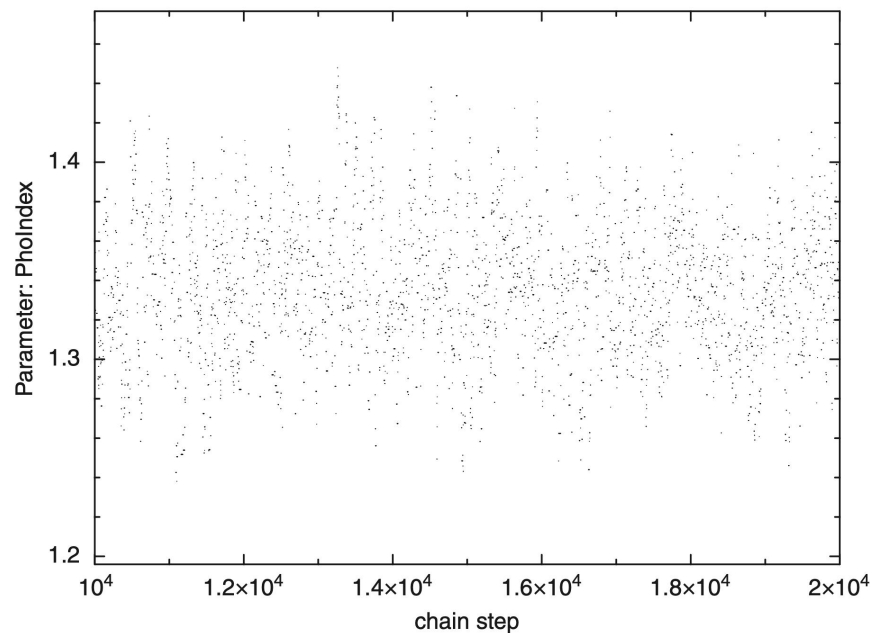


Fig. 5.4 An example use of MCMC. 10 000 steps in a chain showing the power-law index in a fit to an absorbed power-law model

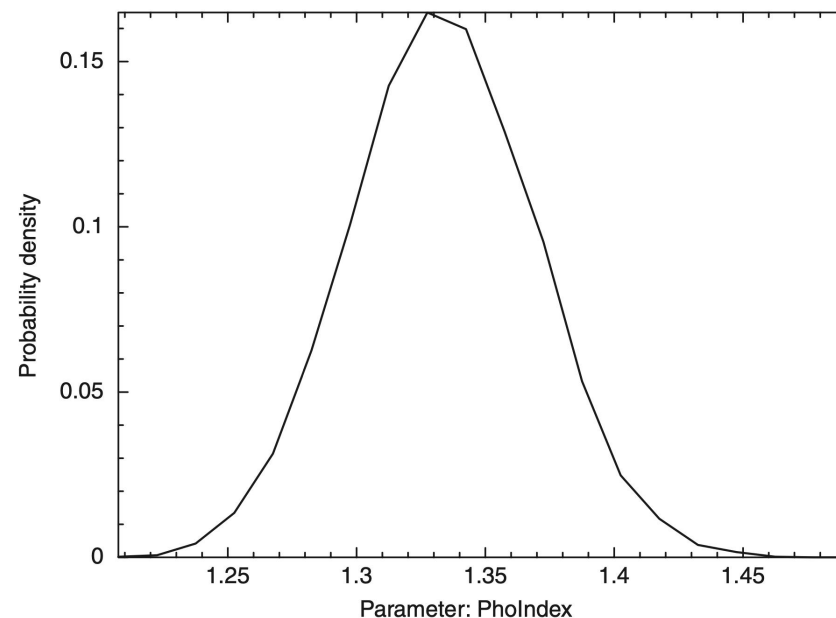
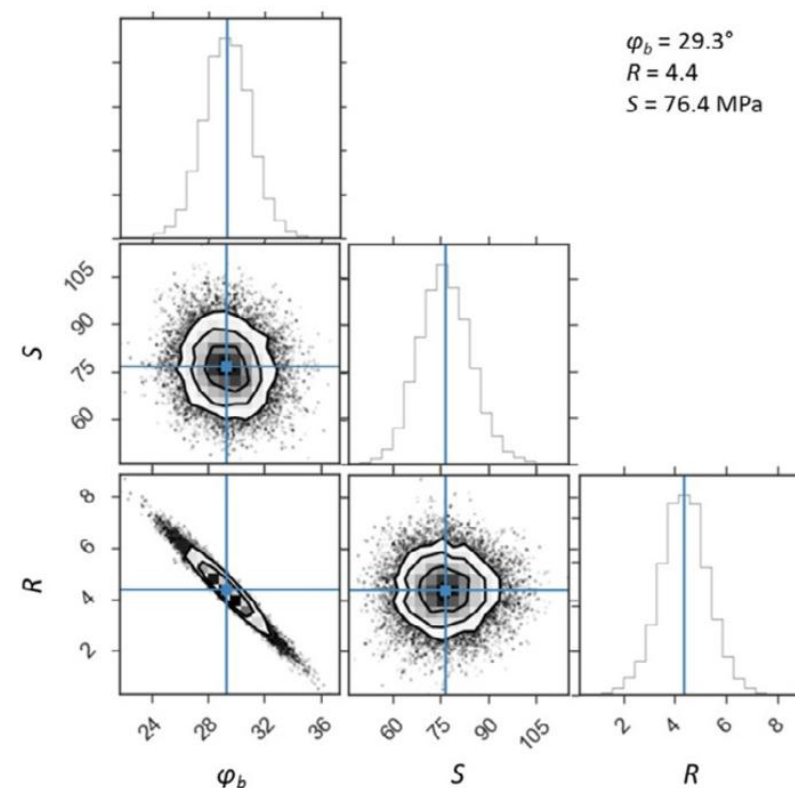


Fig. 5.5 The probability distribution for the power-law index derived from the MCMC chain shown in Figure 5.4

马尔可夫链蒙特卡洛法 (Markov Chain Monte Carlo, MCMC)

- ✧ XSPEC
- ✧ <https://heasarc.gsfc.nasa.gov/xanadu/xspec/manual/node43.html>
- ✧ 计算参数**置信区间**，以及不同自由**拟合参数之间的相关性**Corner图

- ✧ Python, emcee
- ✧ <https://emcee.readthedocs.io/en/stable/>



统计量选取

Confidence	Parameters		
	1	2	3
0.68	1.00	2.30	3.50
0.90	2.71	4.61	6.25
0.99	6.63	9.21	11.30

- ★ 常见的两种情形

- ★ 源很亮

- ★ 光子数较多，单个能道bin中存在很多光子 (>25)

$$S^2 = \sum_i^N \frac{(X_i - M_i)^2}{\sigma_i^2}$$

- ★ Chi-square(χ^2), reduced-chisquare($\frac{\chi^2}{d.o.f}$)统计量,

- ★ 判断额外模型成分是否显著时, 可以选用F-test命令 (比较不同自由度下的chi2大小)

- ★ 源较弱

- ★ 光子数较少，单个能道bin中光子数较少 (几个~十几个)，符合泊松分布

- ★ 使用C统计量

- ★ F-test命令也不再适用

$$C = 2 \sum_i^N (M_i - X_i \ln M_i)$$

低光子数情形：统计量选取

- 在低光子数的情况下，使用chi-square是有问题的，会导致错误的拟合结果
- 右图的情形是：数据点被重新取bin以便生成更好看的图表。然而，在**原始计算中使用的却是未取bin的数据，且许多能道的计数为零或只有几个计数**。所使用的拟合统计量是 $(X_i - M_i)^2 / X_i$ ，其中 X_i 是观测计数， M_i 是模型预测计数。分母中存在 X_i 意味着：对于 $X_i < M_i$ 的通道，其权重大于 $X_i > M_i$ 的通道，这会驱使模型预测值偏低。在这种情况下，拟合统计量的值也往往会异常偏低。
- 由于数据服从泊松分布 (Poisson)，应使用的正确统计量是 C 统计量 (C-stat)。

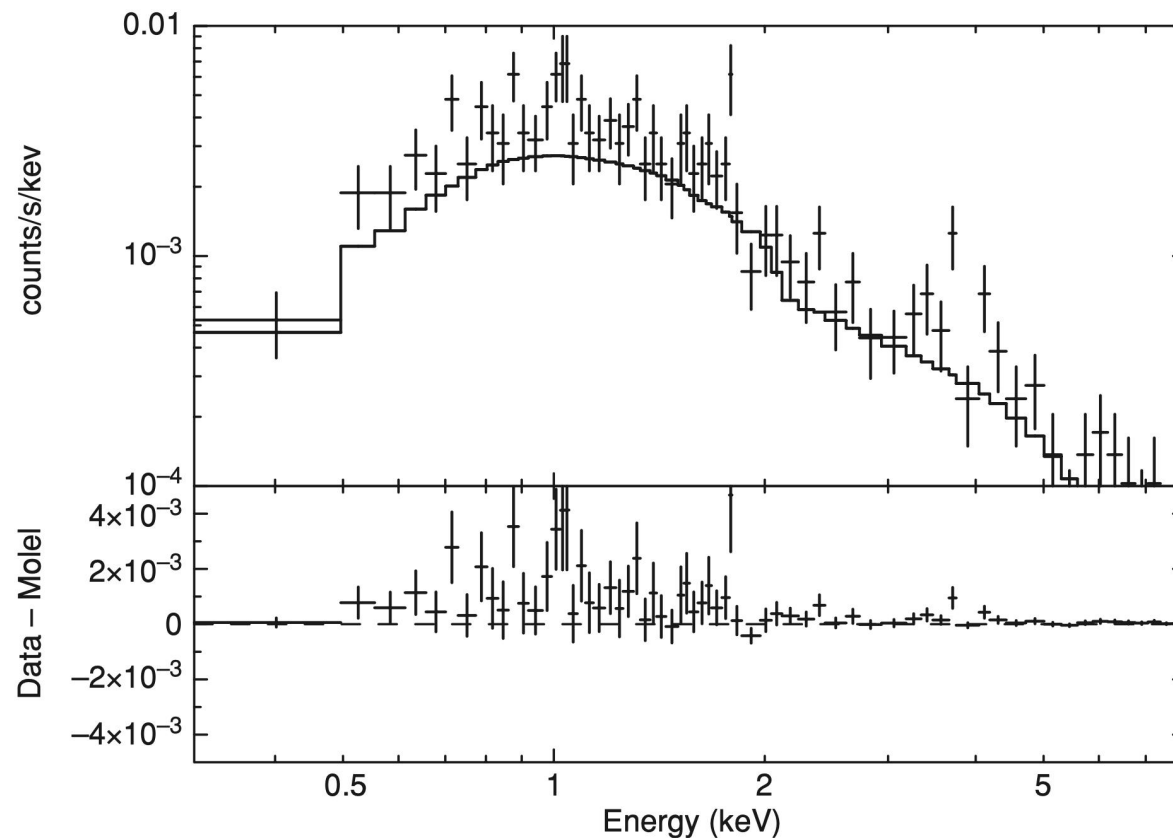


Fig. 5.6 An example showing typical behaviour when $\sum (X_i - M_i)^2 / X_i$ is incorrectly used as the fit statistic. The top panel shows the data as points with error bars and the best-fit model as the solid line. The bottom panel shows the differences between the data and the model. The model is systematically below the data

X射线能谱拟合软件

- * Xspec (HEASARC, 最通用)
- * <https://heasarc.gsfc.nasa.gov/xanadu/xspec/>
- * Python版本: Pyxspec
- * <https://heasarc.gsfc.nasa.gov/docs/xanadu/xspec/python/html/index.html>

- * Sherpa (Chandra/CIAO)
- * <https://cxc.cfa.harvard.edu/sherpa/>
- * ISIS (Chandra, HETG group): 高分辨率X射线光谱拟合
- * <https://space.mit.edu/cxc/isis/>
- * SPEX (SRON)
- * <http://var.sron.nl/SPEX-doc/>

- * 其他...

能谱拟合前的一些准备工作

★ 能道合并

➤ 常用命令:

✧ grppha:

https://heasarc.gsfc.nasa.gov/docs/heasarc/caldb/docs/memos/cal_sw_93_010/cal_sw_93_010.pdf

✧ ftgrouppha: <https://heasarc.gsfc.nasa.gov/lheasoft/help/ftgrouppha.html>

✓ 作用

- ✧ 将能谱取bin（光子数多时， $\text{bin} \geq 25$ ，使用chisquare；光子数少时， $\text{bin} \sim 2-20$ ，使用CSTAT）
- ✧ 将能谱拟合中需要的其他参数，例如背景文件、有效面积文件、响应矩阵文件写入到src.pha文件头中，避免在xspec中多次输入

XSPEC能谱拟合常用步骤

* 一个拟合通常包含的步骤

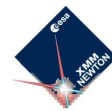
- ★ 读入数据 (**read** xxx, 能谱数据src.pha、背景数据back.pha、有效面积响应文件arf, 探测器能量响应文件.rmf)
- ★ 选取合适的能段 (**ignore** bad, ignore ** -0.5, 10. - **, **notice**...)
- ★ 设置显示格式, **setplot** en (原始为channel)
- ★ 设置输出设备 (**cpd** /xs, 启动一个图形界面)
- ★ 画出能谱 (**plot** data, 可以取log, 例如plot ldata)
- ★ 载入模型 **model**... (根据实际物理图景选取, 最普遍的是powerlaw)
- ★ 设置模型参数 (根据具体情况, 可能要固定某些参数, 例如吸收柱密度、光子能量指数、黑体/热等离子体温度; 有可能要绑定/关联某些参数, **newpar**, **freeze**, **thaw**, **tie**, **untie**...)
- ★ 重新归一化参数**renorm**, 使拟合参数快速趋向于最佳值
- ★ 拟合 (**fit** 10000, 可以加一个数字, 代表最多迭代多少次)
- ★ plot查看能谱拟合结果 (特别是查看残差等, 结合统计量判断是否应该调整参数设置、增减模型等)
- ★ 计算参数的置信区间 (**error** param, **steppar**, mcmc **chain**等命令)
- ★ 计算流量、光度等 (**flux**, **lumi**)
- ★ 输出能谱拟合参数、能谱模型结果 (**setplot** comm wdata等)
- ★ 保存能谱拟合脚本 (**save** all xxx.tcl/xxx.xcm等)

其他常见能谱分析

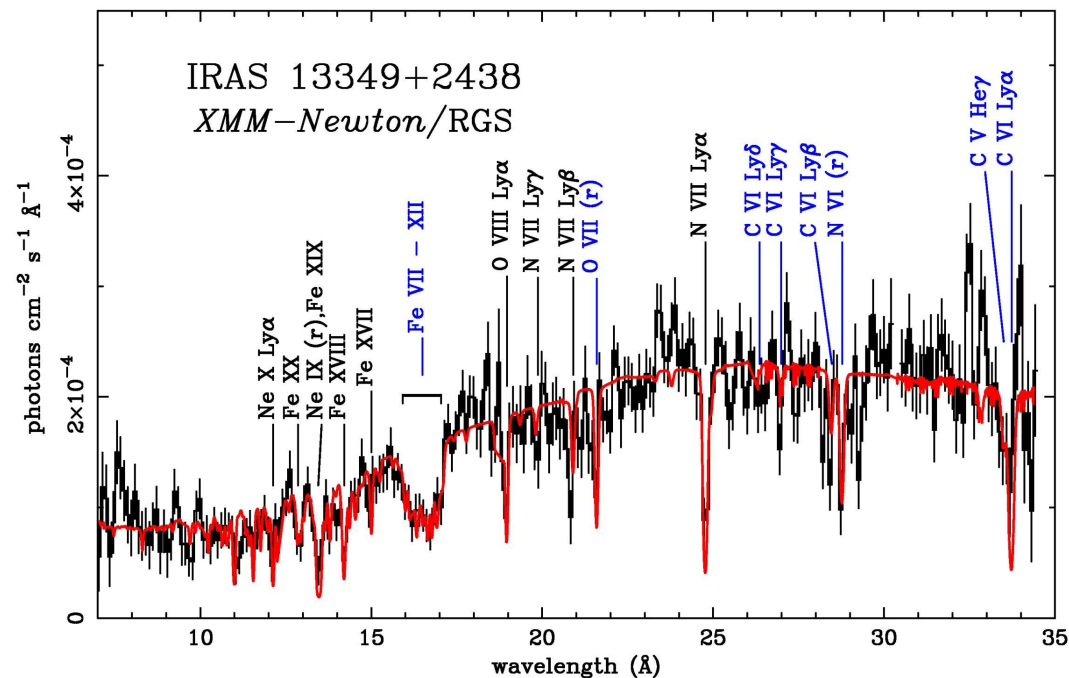
- ★ 不同数据的相同模型拟合，数据分组
 - ★ 同一次观测的不同探测器情形（如EP-FXT, FXTA/FXTB，或者NuSTAR的FPMA/FPMB），通常需要引入const模型参数，用于表征不同探测器标定性能上的差异
 - ★ 不同时刻的观测，默认参数为绑定，如果需要解绑参数（例如）需要用untie等命令
- ★ 使用不同模型同时拟合不同数据
 - ★ 例如展源/弥散源，不同区域的PSF之间相互有覆盖
 - ★ 需要单独拟合本底（例如存在粒子本底等）
 - ★ 通常需要对源和背景分别引入模型、响应文件等
- ★ 模拟能谱
 - ★ fakeit命令，提供模型参数、能谱响应（arf和rmf文件）、曝光时间等，产生模拟能谱
 - ★ 观测提案中，用于估计源的计数率、是否可以被探测到（需要多少曝光时间）
 - ★ 判定某些能谱成分（例如发射线等是否可能是连续谱光子涨落引起）

高分辨率X射线能谱拟合

- ★ 超新星遗迹、吸积流中的内/外流成分等
- ★ 高分辨率光栅数据
 - ★ XMM/Newton RGS
 - ★ Chandra/HETG
- ★ 发射线、吸收线拟合
- ★ 不做过多介绍，请查阅相关文献



XMM-NEWTON SCIENCE RESULTS



总结

- ✧ X射线能谱分析是X射线数据分析的重要组成部分之一
- ✧ 拟合原理为**前向拟合**，即给定初始模型，通过卷积RMF文件和ARF文件，得到“预言”的计数率能谱，并与观测能谱进行比较，获得统计量。通过调整模型中的参数，使预测值与观测值趋近，统计量趋向理想值（如chisquare趋向于1）。当拟合不理想时，调整参数、模型
- ✧ 根据数据类型**选择合适的统计量**
- ✧ 避免落入局域最小值：参数**初值选取**（可能需要经验）、MCMC方法
- ✧ 常用能谱拟合软件
- ✧ 常用步骤等（实际操作）