

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
Федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего образования
«Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ»

УДК 53.01

ОТЧЕТ О НАУЧНО-ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКОЙ РАБОТЕ

Моделирование формы импульса при помощи
генеративно-состязательных нейронных сетей для
полукоаксиальных детекторов в эксперименте GERDA

Научный руководитель,
н.с. НИЦ «Курчатовский институт»

_____ А. Е. Черногоров

Выполнил

_____ Н. Д. Зарецкий

Москва 2021

Содержание

1	Физика нейтрино	3
1.1	Возможные расширения СМ	3
1.1.1	Массовые члены нейтрино	4
1.1.2	Безнейтринный двойной бета распад ($0\nu\beta\beta$)	6
1.2	Детектирование $0\nu\beta\beta$ на германиевых детекторах	7
2	Эксперимент GERDA	9
2.1	Германиевые детекторы	10
2.1.1	Взаимодействие частиц с материей	10
2.1.2	HPGe диоды	12
2.2	Данные с GERDA	13
2.3	Эксперимент LEGEND	14
3	Разделение по форме импульса для данных с эксперимента GERDA	15
3.1	PSD для BEGe детекторов	15
3.2	PSD для полукоаксиальных детекторов	17
4	Формы импульсов для полукоаксиальных детекторов	18
5	Калибровки	20
6	Принципы машинного обучения	21
6.1	Дерево решений и случайный лес	21
6.2	Принцип работы нейронной сети	22
6.3	Метрики качества в задаче классификации	23
7	Генеративно-сопоставительная сеть (GAN)	24
7.1	Minimax GAN	25
7.2	Wasserstein GAN	25
8	Моделирование формы импульса в эксперименте GERDA	27
8.1	Анализ калибровочных данных	28
8.2	Моделирование сигнальных и фоновых событий с помощью генеративно сопоставительных (GAN) сетей	30
8.2.1	Входные данные - импульсы заряда	31
8.2.2	Входные данные - импульсы тока	34
8.2.2.1	Изучение распределений параметров TimeAtHeightX синтетических данных	37

8.2.2.2	Обучение классификатора на синтетических данных и его применение к реальным данным для разделения сигнальных и фоновых событий	40
8.2.2.3	Разделение классификатором синтетических и реальных данных	42
	Заключение	45
	Список использованных источников	46

1. Физика нейтрино

Гипотеза о существовании нейтрино была выдвинута В.Паули в начале XX века в качестве объяснения нарушения закона сохранения энергии в β -распаде. В дальнейшем его существование было обосновано как теоретически, так и экспериментально. В настоящее время в Стандартной Модели (СМ) нейтрино - это безмассовые, электрически нейтральные частицы со спином $s = \frac{1}{2}$. Однако экспериментальное подтверждение нейтринных осцилляций (то есть превращений нейтрино одного поколения (μ, e, τ) в нейтрино другого поколения) говорит о наличии у нейтрино массы, что не согласуется с СМ.

1.1. Возможные расширения СМ

Материя состоит из фермионов (т.е. частиц со спином $s = \frac{1}{2}$), а с помощью калибровочных бозонов со спином $s = 1$ в СМ осуществляется взаимодействие фермионов. Фермионы, не участвующие в сильном взаимодействии, называются лептонами (с лептонным числом $L = 1$); а фермионы, которые участвуют в сильном взаимодействии, называются адронами (в состав которых входят кварки). Частицы в СМ показаны на рисунке 1.1. В СМ предусмотрено, что нейтрино не имеют массы и являются лептонами, поэтому участвуют только в слабом взаимодействии. Типичным слабым процессом является β -распад: $n \rightarrow p + e^- + \bar{\nu}_e$. Было также экспериментально выяснено, что антинейтрино являются правополяризованными (то есть их спин сонаправлен с направлением движения), а нейтрино являются левополяризованными (то есть их спин направлен против направления движения). Концепция спиральности не является Лоренц-инвариантной, так как для любой массивной частицы можно найти такую систему отсчета, в которой импульс будет направлен в противоположную сторону, то есть спиральность будет иметь другой знак. Таким образом, любая массивная частица будет суперпозицией левого и правого состояний.

Лагранжиан нейтрино, соответствующий СМ, может быть записан следующим образом:

$$\mathcal{L}_\nu^{SM} = \sum_{\alpha=\mu,e,\tau} \left[\bar{\nu}_{\alpha L} i \not{\partial} \nu_{\alpha L} + \frac{g}{\sqrt{2}} (W_\mu^+ \bar{\nu}_{\alpha L} \gamma^\mu l_{\alpha L} + h.c) + \frac{g}{2 \cos \theta_w} Z_\mu \bar{\nu}_{\alpha L} \gamma^\mu \nu_{\alpha L} \right] \quad (1.1)$$

Первое слагаемое является кинетическим членом, далее идут слагаемые, описывающие взаимодействие. Если у нейтрино есть масса, то в лагранжиан должен быть добавлен массовый член.

generation	I	II	III	
quarks				
	up	charm	top	
mass [MeV]	2.3	1275	173.21×10^3	
charge [e]	$\frac{2}{3}$	$\frac{2}{3}$	$\frac{2}{3}$	
	down	strange	bottom	
mass [MeV]	4.8	95	4180	
charge [e]	$-\frac{1}{3}$	$-\frac{1}{3}$	$-\frac{1}{3}$	
leptons				
	e	μ	τ	
mass [MeV]	0.511	105.7	1776.82	
charge	1	1	1	
	ν_e	ν_μ	ν_τ	
mass				
charge	0	0	0	
gauge bosons				
	Z⁰	W[±]	γ	gluons
mass [MeV]	91.19×10^3	80.39×10^3		
charge	0	± 1	0	0
Higg bosons				
	Higgs			
mass [MeV]	125.09×10^3			
charge	0			

Рисунок 1.1 – Частицы СМ

1.1.1. Массовые члены нейтрино

Для расширения СМ, с помощью которого можно было бы учесть наличие массы у нейтрино, в лагранжиан для нейтрино следует добавить массовую компоненту, которая по определению содержит волновую функцию правого нейтрино:

$$\mathcal{L}_m = m_D \bar{\psi} \psi = m_D (\bar{\psi}_L \psi_R + \bar{\psi}_R \psi_L) \quad (1.2)$$

Правополяризованного нейтрино не существует в СМ, поэтому есть два варианта решения этой проблемы:

- **Вариант Дирака** заключается в том, чтобы добавить в СМ правое нейтрино, которое не участвует в калибровочных взаимодействиях. Тогда массовая компонента будет записана так:

$$\mathcal{L}_m = m_D \bar{\nu} \nu = m_D (\bar{\nu}_L \nu_R + \bar{\nu}_R \nu_L) \quad (1.3)$$

Массы нейтрино тогда появляются за счет механизма Хиггса, как в Стандартной Модели. Этот механизм не объясняет малую величину массы нейтрино.

- **Вариант Майораны** заключается в предположении, что $\nu_R = (\nu_L)^c$, то есть нейтрино является своей собственной античастицей (такие частицы называются майорановскими частицами). Другими словами, различие между нейтрино и антинейтрино определяется только спиральностью, то есть превращение одного в другое можно осуществить переворотом спина. Тогда массовая компонента будет записана так:

$$\mathcal{L}_m = \frac{1}{2}m_L(\bar{\nu}_L^c\nu_L + \bar{\nu}_L\nu_L^c) + \frac{1}{2}m_R(\bar{\nu}_R^c\nu_R + \bar{\nu}_R\nu_R^c) \quad (1.4)$$

Этот механизм работает для истинно нейтральных частиц. Компонента $\bar{\nu}_L^c\nu_L$ запрещена в СМ. В этом случае также не сохраняется лептонное число [13].

Обычно рассматривают механизм **seesaw** образования массы нейтрино. В этом механизме используются оба массовых члена и вводится майорановское правое нейтрино, являющееся истинно нейтральной частицей, не испытывающей калибровочных взаимодействий. Для одного аромата массовый член теперь запишется в следующем виде:

$$\begin{aligned} \mathcal{L}_m = & m_D(\bar{\nu}_L\nu_R + \bar{\nu}_R\nu_L) + \\ & + \frac{1}{2}m_L(\bar{\nu}_L^c\nu_L + \bar{\nu}_L\nu_L^c) + \frac{1}{2}m_R(\bar{\nu}_R^c\nu_R + \bar{\nu}_R\nu_R^c) \end{aligned} \quad (1.5)$$

Новый базис, описывающий майорановские состояния, выглядит следующим образом (причем $N_L = (N_R)^c$):

$$\begin{cases} N_L = \frac{\nu_L + \nu_L^c}{\sqrt{2}} \\ N_R = \frac{\nu_R + \nu_R^c}{\sqrt{2}} \end{cases} \quad (1.6)$$

Тогда уравнение (1.5) можно записать в следующем виде:

$$\mathcal{L}_m = (\bar{N}_L \quad \bar{N}_R) \cdot \begin{pmatrix} m_L & m_D \\ m_D & m_R \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} N_L \\ N_R \end{pmatrix} \quad (1.7)$$

После диагонализации массовой матрицы (1.7) будет выглядеть следующим образом:

$$\mathcal{L}_m = (\bar{N}_1 \quad \bar{N}_2) \cdot \begin{pmatrix} m_1 & 0 \\ 0 & m_2 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} N_1 \\ N_2 \end{pmatrix} \quad (1.8)$$

В приближении $m_D \ll m_R$, $m_L = 0$, получим, что $m_1 = \frac{m_D^2}{m_R}$, $m_2 = m_R$. Таким образом, в механизме **seesaw** рождаются легкое и тяжелое нейтрино.

Получившийся массовый член является майорановским [13].

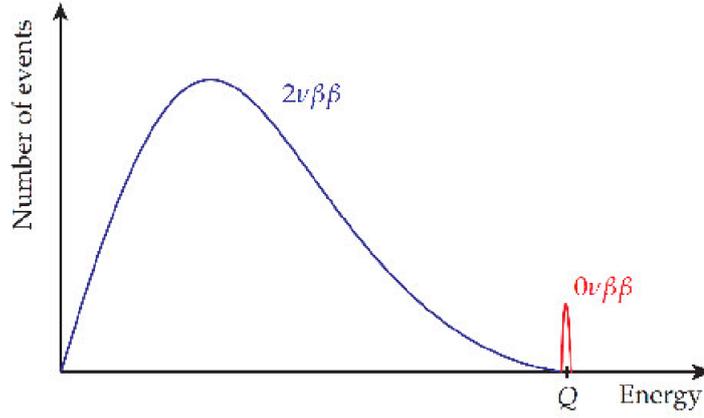


Рисунок 1.2 – Энергетический спектр двух электронов

1.1.2. Безнейтринный двойной бета распад ($0\nu\beta\beta$)

Для некоторых ядер с четными A и Z одиночный β^- -распад энергетически запрещен, если $m(A, Z) < m(A, Z + 1)$, или же подавлен при наличии большой разницы в угловых моментах начального и дочернего ядер. Это позволяет происходить так называемому двойному бета-распаду ($2\nu\beta\beta$), что может быть интерпретировано как два одновременно происходящих одиночных распада: $(A, Z) \rightarrow (A, Z + 2) + 2e^- + 2\bar{\nu}_e$. Пока найдено 35 элементов, способных испытывать $2\nu\beta\beta$. В случае же, если при двойном бета распаде не испускаются антинейтрино, он называется двойным безнейтринным бета распадом ($0\nu\beta\beta$): $(A, Z) \rightarrow (A, Z + 2) + 2e^-$. $0\nu\beta\beta$ запрещен в Стандартной Модели, так как нарушается закон сохранения лептонного числа ($\Delta L=2$). На рисунке 1.2 показаны спектры энергии двух электронов для $0\nu\beta\beta$ и $2\nu\beta\beta$. В $2\nu\beta\beta$ спектр продолжительный, так как энергия распада поделена между двумя электронами и двумя нейтрино. Нейтрино не детектируются и уносят энергию. В случае же $0\nu\beta\beta$, вся энергия распределяется на два электрона. Так как суммарная энергия электронов измеряется, то сигнал, указывающий на $0\nu\beta\beta$, есть линия постоянной энергии при значении Q распада.

Диаграмма $0\nu\beta\beta$ показана на рисунке 1.3. В стандартной интерпретации при $0\nu\beta\beta$ происходит обмен легким нейтрино майорановской природы. Тогда период полураспада для этого процесса будет выражаться следующим образом:

$$(T_{1/2}^{0\nu})^{-1} = \Gamma_{0\nu} = G_{0\nu} |M_{0\nu}|^2 \left(\frac{m_{0\nu}}{m_e}\right)^2 \quad (1.9)$$

В выражении (1.9) $G_{0\nu}$ - фазовый фактор, $|M_{0\nu}|$ - матричный элемент, $m_{0\nu}$ - эффективная майорановская масса нейтрино. $m_{0\nu} = \sum_{i=1}^3 U_i^2 m_i$, где U - матрица смешивания, m_i - массовые состояния. В отличие от дираковского нейтрино, где в матрице смешивания присутствует фаза δ , в случае майорановского нейтрино рассматривают 2 дополнительные фазы - α и β (они

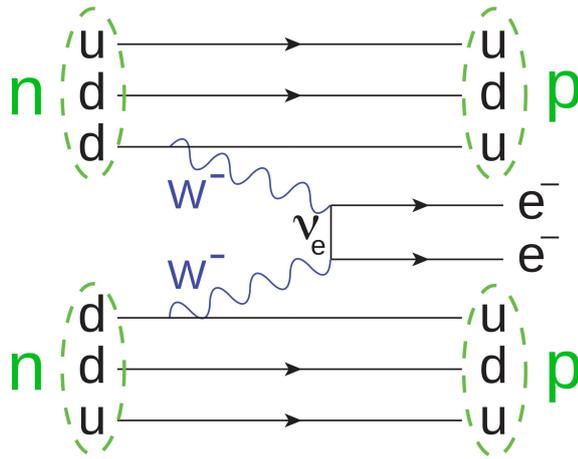


Рисунок 1.3 – Диаграмма $0\nu\beta\beta$

не влияют на осцилляции) [13]. Таким образом, по формуле (1.9) можно связать наблюдаемый период полураспада с эффективной майорановской массой нейтрино.

Итак, наличие $0\nu\beta\beta$ -распада опровергнет закон сохранения лептонного заряда, и следовательно, укажет на существование Новой физики за пределами СМ. Более того, в этом случае нейтрино будут являться частицами Майораны. Также обнаружение $0\nu\beta\beta$ может дать информацию о массах нейтрино и механизме их образования.

1.2. Детектирование $0\nu\beta\beta$ на германиевых детекторах

Экспериментально измеряется суммарная энергия двух электронов. Как было показано выше, указанием на $0\nu\beta\beta$ будет являться моноэнергетический пик при энергии распада Q .

Связь периода полураспада и количеством $0\nu\beta\beta$ -событий выражается следующей формулой:

$$T_{1/2}^{0\nu} = \frac{\ln 2 \cdot N_A \cdot a \cdot m \cdot T}{M \cdot N^{0\nu}} \quad (1.10)$$

В формуле 1.10 N_A - число Авогадро, a - обогащение $\beta\beta$ -изотопами, m - общая масса, t - время измерения, M - молярная масса, $N^{0\nu}$ - количество $0\nu\beta\beta$ -распадов.

Любой радиоактивный распад с энергией Q , большей, чем у $0\nu\beta\beta$, может выделять энергию в сигнальной области, и как следствие являться фоном. Так как ожидаемая доля распада меньше доли фоновой радиации, применяются техники уменьшения фона. Так, детекторы находятся глубоко под землей, чтобы обеспечить защиту от космической радиации: нейтронов, протонов и мюонов. Естественная радиоактивность детектируется от распада ^{40}K с соответствующей γ -линией на 1461 кэВ, а также

распадов ^{232}Th . От ^{208}Tl присутствует γ -линия при 2615 кэВ. Так как доля $2\nu\beta\beta$ выше доли $0\nu\beta\beta$, это считается неудаляемым фоном. В экспериментах по поиску $0\nu\beta\beta$ детекторы должны быть большими, содержать много $0\nu\beta\beta$ изотопов для обеспечения большого потока. Фон должен быть минимальным. Наиболее многообещающим изотопом для поиска $0\nu\beta\beta$ является ^{76}Ge , так как детекторы из сверхчистого германия (HPGe) являются одновременно и источниками, и детекторами [7].

В дальнейшем будут рассмотрены эксперименты GERDA и LEGEND, основанные на HPGe (high purity germanium) детекторах.

2. Эксперимент GERDA

Эксперимент GERDA вел поиск $0\nu\beta\beta$ на изотопе ^{76}Ge . Эксперимент протекал в две фазы, которые различаются используемыми детекторами. На заключительной стадии в GERDA измерялся 41 германиевый детектор общей массой 44,2 кг. Эксперимент расположен в Национальной Лаборатории Гран Сассо при INFN на глубине 1400 метров под землей, так как горная порода является защитой от космических лучей.

Эксперимент GERDA работает с массивом германиевых детекторов, размещенных в криостате из нержавеющей стали объемом 64м^3 . Криостат наполнен жидким аргоном (LAr), он служит для охлаждения детекторов до рабочей температуры ($\sim 90\text{K}$) и для экранирования от внешнего излучения. Внутренняя стенка криостата покрыта слоем из ультрачистой меди, что обеспечивает защиту от излучения стенами криостата, обусловленного радиоактивными примесями, содержащимися в нержавеющей стали. Криостат дополнительно окружен баком воды объемом 590м^3 , который используется в качестве активного мюонного вето и пассивной защиты от нейтронов, поступающих от окружающей эксперимент горной породы (рисунок 2.1).

В эксперименте применены различные техники по уменьшению фона. К ним относятся разделение по форме импульса (Pulse Shape Discrimination, PSD), система антисовпадений, а также мюонное вето, основанное на черенковском излучении и сцинтилляциях в жидком аргоне.

Отметим, что, как показано на рисунке 1.2, в случае отсутствия нейтрино при двойном бета распаде получается моноэнергетический пик при $Q_{\beta\beta} = 2039\text{кэВ}$ [7].

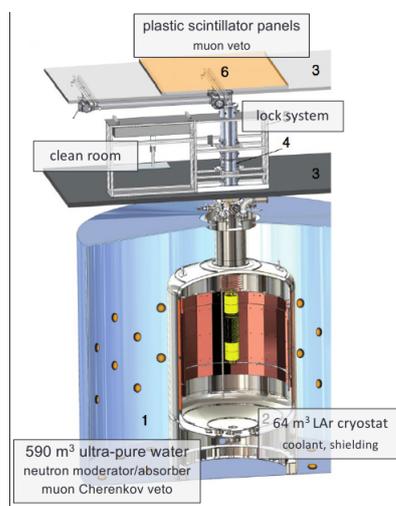


Рисунок 2.1 – Строение эксперимента GERDA

2.1. Германиевые детекторы

Германиевые детекторы к эксперименте GERDA используются по ряду причин. Во-первых, германий дает отличное спектрографическое представление с энергетическим разрешением 0.2% при энергии $Q_{\beta\beta} = 2039$ кэВ. Во-вторых, германий является практически радио-чистым. В-третьих, он является одновременно и элементом детектора, и источником (так как изотоп ^{76}Ge испытывает двойной бета-распад).

2.1.1. Взаимодействие частиц с материей

При прохождении частицы через p-n переход выделяется энергия и появляются электронно-дырочные пары, которые потом могут быть зарегистрированы полупроводниковым диодом. Частицы, в зависимости от их природы, показывают разные результаты взаимодействия и, следовательно, разное выделение энергии.

- **Тяжелые заряженные частицы**, как, например, α -частицы, испытывают в основном электромагнитное взаимодействие и теряют энергию в процессе ионизации и возбуждения атомов. Такие частицы часто взаимодействуют, поэтому потери энергии можно считать статистическим процессом. Частицы с энергией 1-10 МэВ могут пройти расстояние около 10 мкм.
- **Легкие заряженные частицы**, как, например, электроны или позитроны, ведут себя почти так же, как и тяжелые частицы, однако теряют меньше энергии. Так, электрон с энергией $Q_{\beta\beta} = 2039$ кэВ может пройти расстояние около 2.5 мм до полной остановки, что значительно больше, чем расстояние для тяжелых частиц.
- **Фотоны** испускаются, когда возбужденные ядерные состояния, вызванные распадом исходного нуклида, переходят на более низкие уровни. Дочернее ядро выходит из возбужденного состояния в свое устойчивое состояние после нескольких переходов между квантованными уровнями энергии, поэтому излученные фотоны обладают энергетическими характеристиками, свойственными конкретному изотопу. Взаимодействие с материей происходит по-разному в зависимости от энергии.
 - В случае низких энергий происходит фотоэлектрическое поглощение γ -квантов, которые взаимодействуют с атомами, отдавая всю энергию орбитальному электрону, вследствие чего появляется фотоэлектрон с кинетической энергией $T_e = h\nu - E_{bind}$, а атом ионизируется. Свободное место в электронной оболочке

атома сразу же занимает другой электрон вследствие перераспределения электронов, и лишняя энергия выделяется либо в виде излучения, либо в виде электрона Оже. В конце концов процесс фотоэлектрического поглощения заканчивается выходом фотоэлектронов и нескольких электронов с малой энергией. Если вся кинетическая энергия электронов полностью поглощается в детекторе, то соответствующий сигнал в зарегистрированном спектре будет показывать пик полной энергии (Full Energy Peak, FEP), равный энергии изначального фотона [7].

- При средних энергиях преимущественно происходит комптоновское рассеяние между фотоном и электроном, что сопровождается частичным переносом энергии. В детекторах возможно рассеяние на любой угол, поэтому появляется непрерывное распределение от нуля до известного максимума. Это явление называется комптоновской границей в энергетическом спектре. Зона между комптоновской границей и FEP может быть заполнена событиями от многочисленного комптоновского рассеяния.
- Появление пар возможно только в электрическом поле вблизи атомных ядер и приводит к исчезновению фотона, вследствие чего появляется электрон-позитронная пара с суммарной энергией покоя $2m_e c^2$. Поэтому у фотона должна быть энергия минимум 1022 кэВ, чтобы этот процесс был энергетически возможным. Излишняя энергия выше этого значения превращается в кинетическую энергию, распределенную между электроном и позитроном. Так как позитрон не является устойчивым, при уменьшении его кинетической энергии он аннигилирует с другим электроном, и в результате появляются 2 аннигиляционных γ -кванта, движущихся в различных направлениях, по 511 кэВ каждый. Важно рассмотреть 3 предельных случая:
 - * энергия двух γ -квантов поглощается в детекторе, тогда получается FEP
 - * один γ -квант поглощается, другой уходит без взаимодействия с материалом детектора, тогда получается одиночный пик выхода (Single Escape Peak, SEP), который лежит на 511 кэВ ниже FEP.
 - * оба γ -кванта покидают детектор без взаимодействия с веществом, тогда получается пик двойного вылета (Double Escape Peak, DEP). Такое событие считается одноточечным (Single-Site Event, SSE).

Спектр с изображениями DEP, FEP и SEP показан на рисунке 2.2.

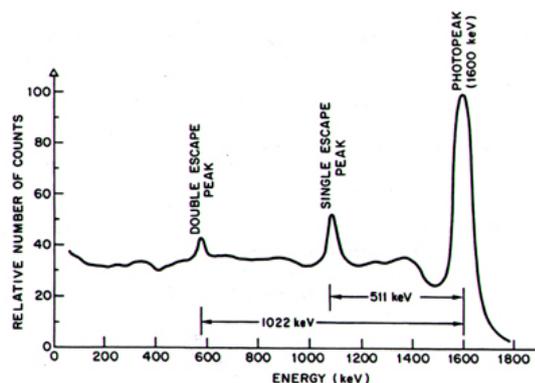


Рисунок 2.2 – Пример энергетического спектра

2.1.2. HPGe диоды

Для полупроводников р типа $n+$ слой с большой концентрацией доноров играет роль р-п перехода, он сделан с помощью внедрения в германий атомов лития путем диффузии в подходящие части детектора. Вследствие этого в детекторе появляется обедненная область при приложении отрицательного напряжения смещения. Сам $n+$ слой представляет собой площадь толщиной 1 мм, которая называется мертвым слоем. Основным преимуществом является то, что такой широкий электрод эффективно поглощает внешние воздействия от α , β или γ излучений с низкой энергией, так как их длина пробега существенно меньше. Контакт $p+$, на котором собираются дырки и который используется как считывающий электрод, получается внедрением атомов бора, его толщина порядка 0.1 мкм [7].

Для эксперимента GERDA применены две основные конфигурации: полукоаксиальная и BEGe.

Полукоаксиальная конфигурация: Из-за необходимости исследовать большие активные объемы вещества с управляемым напряжением смещения удобно использовать цилиндрические детекторы с отверстием в центре. Контакт $p+$ расположен внутри отверстия, контакт $n+$ расположен на боковой (внешней) поверхности. Контакты $p+$ и $n+$ отделены друг от друга специальной канавкой. Эти детекторы используются, в основном, в Фазе I. На рисунке 2.3 можно видеть схему этих детекторов с учетом поля. Видно, что значительную часть детектора занимает область, в которой и электроны, и дырки имеют весомый вклад в формирование сигнала.

BEGe конфигурация: Для увеличения активной массы были разработаны детекторы типа BEGe (broad energy germanium). Они в основном используются в Фазе II, хотя несколько детекторов присутствуют и в Фазе I. Эти детекторы чувствительны к широкому интервалу энергий. Контакт $p+$ представляет собой точку на основании цилиндра. Размеры детекторов в 2-3 раза меньше полукоаксиальных. Так как внутри детектора поле более неоднородно, то BEGe детекторы показывают лучшее PSD представ-

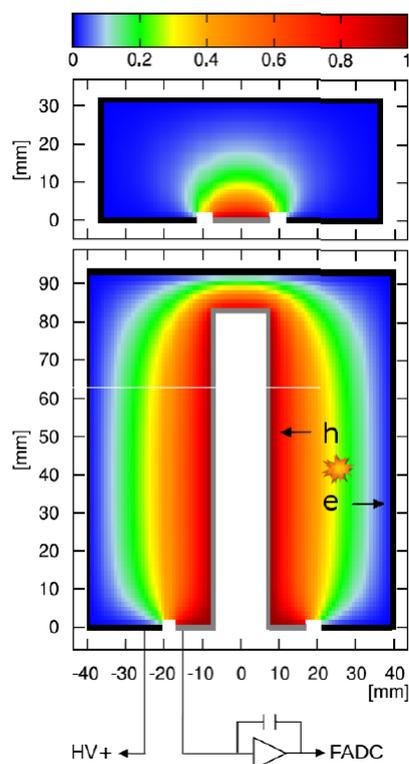


Рисунок 2.3 – Схема полукоаксиальных (снизу) и BEGe (сверху) детекторов

ление по сравнению с полукоаксиальными детекторами. Носители заряда перемещаются через область с резко меняющимся электрическим полем; электроны по пути к $n+$ электроду в основном перемещаются в области со слабым полем и практически не влияют на форму импульса, тогда как дырки перемещаются сквозь области с сильным полем по похожим траекториям вне зависимости от места выделения энергии. Из этого можно сделать вывод, что амплитуда A токового импульса примерно прямо пропорциональна выделившейся энергии, что удобно использовать при PSD анализе.

Схемы этих детекторов можно видеть на рисунке 2.3.

2.2. Данные с GERDA

Для анализа мы фокусируемся на возможном пике при энергии $Q_{\beta\beta}$; для ^{76}Ge это 2039 кэВ. Спектр энергии с эксперимента GERDA приведен на рисунке 2.4.

Выделяются ключевые особенности детектирования:

- При энергиях, меньших примерно 500 кэВ, спектр обусловлен распадом ^{39}Ar .
- В интервале энергии 500-1900 кэВ спектр обусловлен $2\nu\beta\beta$.

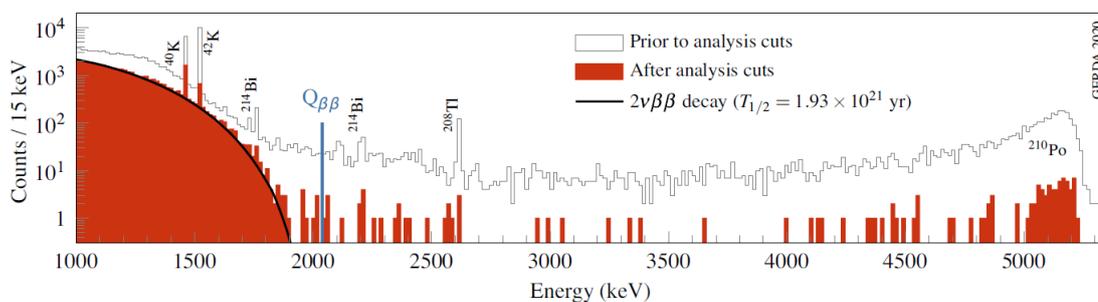


Рисунок 2.4 – Спектр энергии с эксперимента GERDA

- Различимы гамма-линии от нескольких изотопов, как, например, ^{40}K , ^{42}K , ^{208}Tl , ^{214}Bi , ^{60}Co , ^{214}Pb , ^{228}Ac .
- Для больших энергий появляются пики около 5 МэВ. Это обусловлено α -распадами ^{226}Ra , ^{222}Rn , ^{218}Po .

Для анализа используется интервал энергий 1930-2190 кэВ (ROI - region of interest) [3].

2.3. Эксперимент LEGEND

Эксперименты GERDA и MAJORANA закончили набор данных, и сейчас проектируется новый эксперимент на основе их технологий - LEGEND, который будет проведен в две фазы. Чувствительность на $T_{1/2}^{0\nu}$ для ^{76}Ge будет увеличена с 10^{26} лет (как в GERDA) до 10^{28} лет, также будет значительно уменьшен фон. Для LEGEND разработан новый вид детекторов: Inverted Coaxial Point Contact (ICPC) детектор. Он будет работать по аналогии с BEGe детекторами, но будет почти таким же массивным, как полукоаксиальные детекторы.

LEGEND будет запущен в 2021 году, он будет содержать детекторы общей массой до 200 кг в первой фазе. Чувствительность по $T_{1/2}^{0\nu}$ во время первой фазы будет $\sim 10^{27}$ лет. Вторая фаза будет работать с детекторами общей массой до 1000 кг, тогда чувствительность по $T_{1/2}^{0\nu}$ будет увеличена до $\sim 10^{28}$ лет.

В эксперименте LEGEND будут использоваться несколько типов германиевых детекторов: как ранее использовавшиеся полукоаксиальные, BEGe, PPC (MAJORANA), так и новые ICPC. [2].

3. Разделение по форме импульса для данных с эксперимента GERDA

Временная зависимость токового импульса детектора может быть использована для распознавания фоновых и сигнальных событий. Сигнальные события от $0\nu\beta\beta$ и $2\nu\beta\beta$ распада выделяют энергию в пределах небольшого объема, так как энергия распада передается двум электронам, имеющим малые длины пробега в германии, а нейтрино (в случае $2\nu\beta\beta$) практически не взаимодействуют с веществом. Такие события называются однотоочечными (Single-Site Event, SSE). Наоборот, в фоновых событиях от, например, фотонов, взаимодействующих через многочисленное комптоновское рассеяние, энергия часто выделяется в нескольких местах в детекторе на расстоянии нескольких сантиметров друг от друга. Такие события называются многотоочечными (Multi-Site Event, MSE). PSD применяется в энергетическом интервале в 1930-2190 кэВ, в котором проводится анализ по $0\nu\beta\beta$. Интервалы 2099-2109 кэВ (SEP от ^{208}Tl) и 2114-2124 кэВ (линия ^{214}Bi) исключаются из анализа по форме импульса. События в интервале энергии $Q_{\beta\beta} \pm 5\text{кэВ}$ (2034-2044 кэВ) также скрыты для анализа, так как в этой области находится потенциальная информация о $0\nu\beta\beta$ [10].

3.1. PSD для BEGE детекторов

Для этого типа детекторов сигнал формируется, когда дырки достигают считывающего электрода. Электроны вклада в сигнал почти не вносят, так как перемещаются в слабом поле (рисунок 2.3). Из распределения поля дырки достигают считывающего электрода по похожим траекториям вне зависимости от места выделения энергии. Для локализованного выделения энергии амплитуда импульса прямо пропорциональна энергии. Только события вблизи катода нарушают эту зависимость, так как в этом случае электроны тоже играют роль в формировании сигнала. Такое распределение поля делает удобным использование отношения А/Е для разделения по форме импульса, где А - амплитуда, а Е - энергия.

Для двойного бета-распада (это может быть как $0\nu\beta\beta$, так и $2\nu\beta\beta$) энергия выделяется в одном месте детектора (SSE). Для SSE ожидается почти гауссовское распределение параметра А/Е.

Для MSE (например, это может быть комптоновское многократное рассеяние фотонов) выделение энергии будет в разных местах детектора, то есть будет разное дрейфовое время дырок и электронов, соответственно, будут два или более разделённых во времени импульса. Для такой же энер-

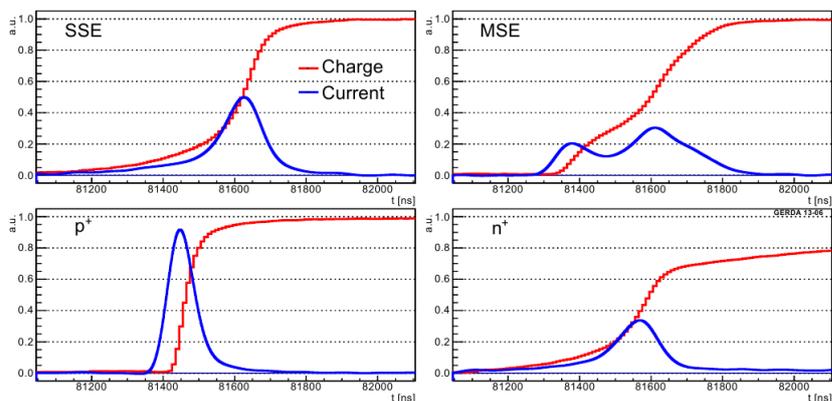


Рисунок 3.1 – Осциллограммы для MSE, SSE, событий вблизи n+ и событий вблизи p+ для BEGe детекторов

гии максимум амплитуды будет ниже.

Для поверхностных событий вблизи p+ электрода амплитуда тока и, соответственно, A/E , больше, и пики раньше по времени, чем в стандартном SSE. Эта особенность позволяет эффективно распознавать эти сигналы.

Для поверхностных событий вблизи n+ электрода время нарастания сигналов увеличивается из-за медленно протекающей диффузии дырок через мертвый слой по сравнению с дрейфом носителей заряда.

Примеры MSE и SSE, а также событий вблизи p+ и n+ электродов для BEGe детекторов можно видеть на рисунке 3.1.

Благодаря меньшей площади p+ контакта для BEGe детекторов происходит хорошее разделение по форме импульса. Параметр A/E является простой в разделении переменной с понятной физической интерпретацией. Был применен следующий критерий отбора: $0.965 < A/E < 1.09$. Этот критерий отбора принимает примерно 92% сигнальных событий и отсекает 33 событий из 40 в 400 кэВ-окрестности $Q_{\beta\beta}$ (исключая слепую зону). Пример применения критерия отбора по A/E показан на рисунке 3.2 [10].

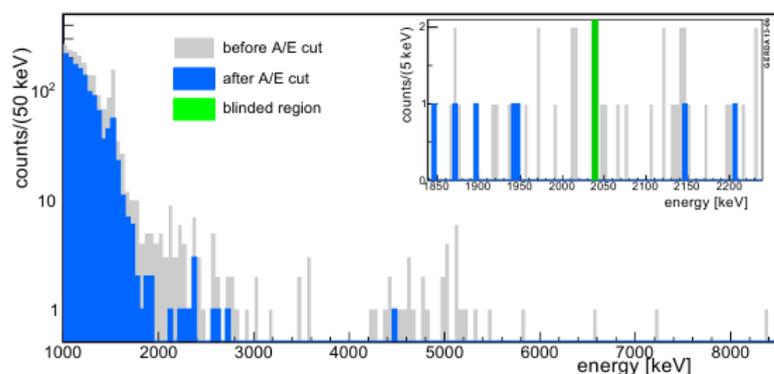


Рисунок 3.2 – Пример энергетического спектра до и после применения критерия отбора для BEGe

3.2. PSD для полукоаксиальных детекторов

В полукоаксиальных детекторах из-за распределения поля вклад в формирование сигнала вносят и электроны, и дырки. При выделении энергии вблизи поверхности $n+$ только дырки вносят вклад в сигнал. Напротив, для поверхностных событий на $p+$ максимумы тока достигаются раньше. Но в основном объеме детектора формы импульсов могут иметь различную форму, так как и электроны, и дырки вносят вклад в формирование сигнала. Следовательно, A/E не является эффективной для разделения переменной для полукоаксиальных детекторов. Вместо этого были представлены три принципиально разных метода. Первый использует нейросеть для распознавания одиночных событий, второй опирается на принцип правдоподобия для различения SSE и фоновых событий, третий метод основан на корреляции между A/E и асимметрией импульса. Метод, основанный на нейросети, используется для анализа $0\nu\beta\beta$. Пример спектра калибровок на ^{228}Th до и после отбора событий по форме импульса (с сохранением 90% сигнальных событий) можно видеть на рисунке 3.3. Стоит отметить, что эффективность такого метода несколько ниже, чем отбор событий для детекторов типа BEGe [10].

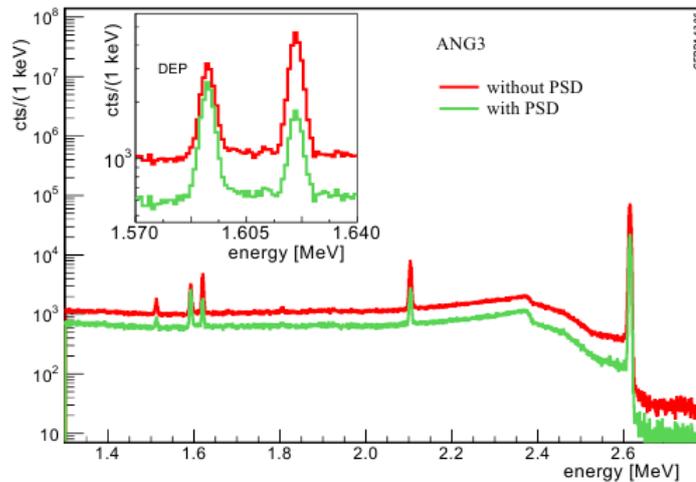


Рисунок 3.3 – Пример энергетического спектра до и после применения критерия отбора для полукоаксиальных детекторов. В качестве критерия для нейросети выбран критерий 90% выживаемости DEP событий

4. Формы импульсов для полукоаксиальных детекторов

На рисунке 4.1 представлены возможные формы импульсов в зависимости от места выделения энергии в полукоаксиальном детекторе. Исходя из распределения электрического поля в полукоаксиальных детекторах (рисунок 2.3), импульсы событий, отмеченных розовым, отличить друг от друга нельзя, хотя события произошли на расстоянии нескольких сантиметров друг от друга. В этой области сумма расстояний, который проходят электроны и дырки до электродов, постоянна. Время собирания заряда зависит как от электронов, так и от дырок. Так как скорость дрейфа дырок меньше скорости дрейфа электронов, наиболее быстрыми сигналами в этой области являются сигналы от события, которое отмечено коричневым цветом. Если событие произошло рядом с отверстием (оно показано синим и оранжевым цветом), то есть максимально близко к электродам, заряд соберется быстрее всего. Если событие произошло рядом с катодом (красный цвет), дырки достигают анода очень быстро, тогда как электроны перемещаются к аноду. В этом случае заряд собирается быстрее, чем в случае выделения энергии вдоль отверстия (зеленый цвет), но медленнее, чем в случае события, отмеченного синим цветом. События от альфа-частиц в канавке (болотный цвет) дают самое быстрое собирание заряда.

Таким образом, импульсы для полукоаксиальных детекторов имеют разнообразную форму, причем формы импульсов могут сильно различаться в зависимости от места выделения энергии в детекторе. Это обстоятельство усложняет разделение фоновых и сигнальных событий в полукоаксиальных детекторах [8].

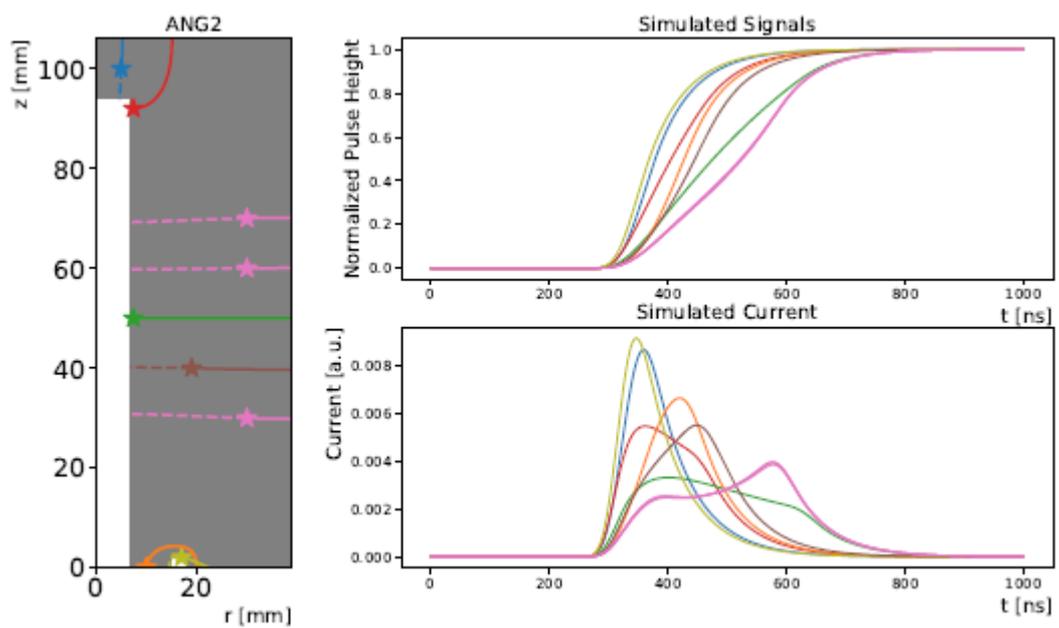


Рисунок 4.1 – Возможные формы импульсов для разных мест выделения энергии в полукоаксиальном детекторе. Звездочками обозначены события, пунктиром - траектории, вдоль которых перемещаются дырки, сплошной линией - траектории, вдоль которых перемещаются электроны

5. Калибровки

Общим для всех методов и для обоих видов детекторов является использование калибровочных данных, которые собирались раз в неделю для проверки и тренировки алгоритмов. Спектр калибровок на ^{228}Th (рисунок 5.1) содержит пик (FEP) на 2614.5 кэВ от распада ^{208}Tl . Пик двойного вылета (DEP, 1592.5 кэВ) от этого распада используется как указатель на одиночное событие (SSE), в то время как пик полной энергии (FEP, 1620.7 кэВ) от распада ^{212}Bi указывает на многократные события (MSE). Получаемые детекторами импульсы (DEP от распада ^{208}Tl и FEP от распада ^{212}Bi) являются данными для обучения нейросети. Отметим, что такие данные не являются чистыми из-за наличия комптоновских событий.

Недостатком является то, что DEP-события неравномерно распределены внутри детектора, как должно быть при $0\nu\beta\beta$. Из-за вылета двух фотонов с энергией 511 кэВ такие события происходят в основном близко к поверхности детектора. События, обусловленные комптоновским рассеянием, покрывают большой интервал энергий и содержат большую долю как SSE-событий, так и MSE-событий. События от $2\nu\beta\beta$ распределены равномерно, и это является дополнительной проверкой эффективности детектирования [10].

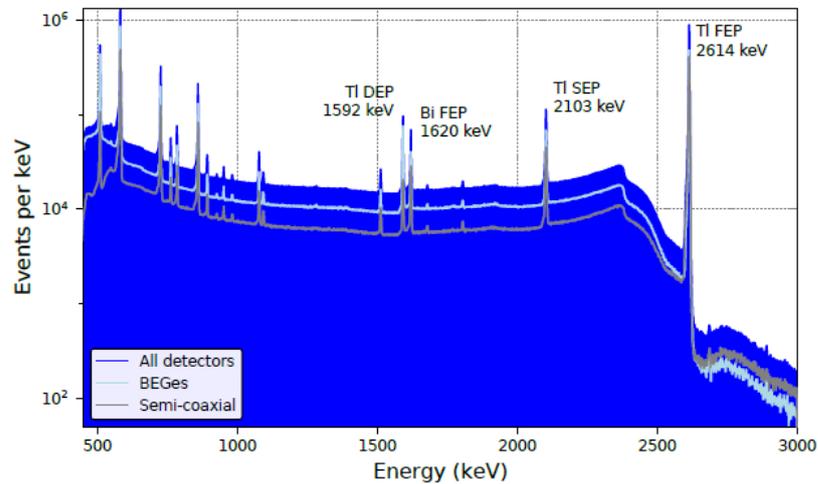


Рисунок 5.1 – Энергетический спектр ^{228}Th

6. Принципы машинного обучения

Машинное обучение - класс методов искусственного интеллекта, которые не решают саму задачу, а обучаются за счет применения решений совокупности похожих задач. Считается, что компьютерная программа обучается при решении задачи из класса T , если ее производительность улучшается при накоплении опыта E согласно метрике P . Под опытом E понимаются данные, используемые в анализе, о метриках P будет рассказано ниже (раздел 6.3). Среди задач из класса T могут выделяться следующие задачи машинного обучения: регрессия (прогнозирование количественного признака объекта на основе других признаков), классификация (отнесение объекта к отдельному классу на основании его признаков) и так далее [5]. В данном анализе мы работали над задачей бинарной классификации. К методам задачи классификации можно отнести, например, деревья решений и случайный лес. Также задача классификации может быть решена с помощью нейросетей.

6.1. Дерево решений и случайный лес

Дерево решений - инструмент анализа данных, представляющий собой иерархическую структуру вида "если ..., то ...". В основе построения дерева решений лежат "жадные" алгоритмы, ищущие оптимальные решения на каждом шаге, то есть на каждом шаге выбирается такой признак, при разделении по которому прирост информации оказывается наибольшим, а энтропия $S = - \sum_{i=1}^N p_i \log_2 p_i$ уменьшается. В данной формуле N - количество возможных состояний (в случае бинарной классификации $N = 2$), p_i - вероятности нахождения системы в состоянии i . Этот шаг повторяется рекурсивно, пока энтропия не станет близка к нулю. Таким образом, строится иерархическая структура, в которой делаются выводы о принадлежности событий к конкретному классу на основе имеющихся признаков [9].

К недостаткам деревьев решений относят склонность к переобучению. Поэтому для решения этой проблемы используют, например, метод отсечения ветвей, заключающийся в удалении нижних ветвей полного дерева на основе анализа относительной точности модели (отношение числа верно распознанных примеров к общему числу примеров) и абсолютной ошибки (число неверно классифицированных примеров).

Случайный лес (Random forest) - метод, заключающийся в использовании ансамбля решающих деревьев, каждое из которых дает невысокое качество классификации, но за счет их количества достигается лучший результат. Деревья ансамбля строятся с помощью бэггинга: генерируются

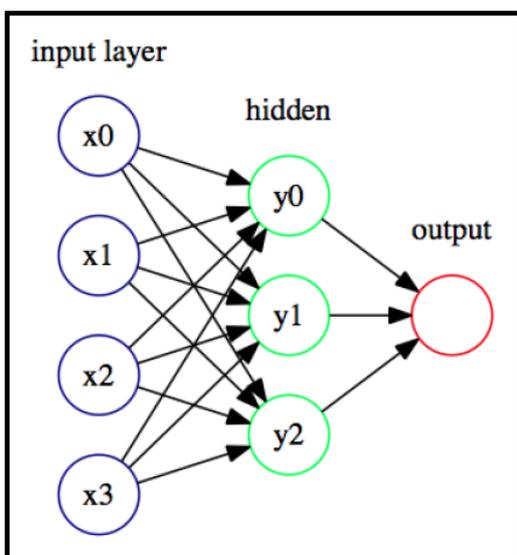


Рисунок 6.1 – Схема нейросети с одним скрытым слоем

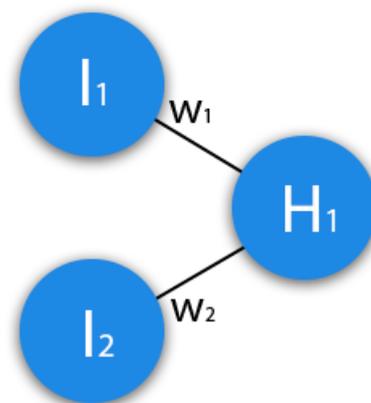


Рисунок 6.2 – Пример работы нейронной сети

случайные подвыборки из общей выборки, затем строятся решающие деревья, обучающиеся на основе данных подвыборок. Для построения деревьев используется в том числе критерий прироста информации, как было описано выше. Классификация объектов осуществляется методом голосования: каждое дерево ансамбля относит объект к какому-либо классу, "побеждает" класс, за который проголосовало большее количество деревьев.

В настоящем анализе для проверки работы модели использовались деревья решений и случайный лес.

6.2. Принцип работы нейронной сети

Нейронная сеть - математическая модель, построенная по принципу организации и функционирования сетей нервных клеток живого организма. На рисунке 6.1 представлена схема нейросети. Синим цветом обозначен входной слой (входные параметры), зеленым - скрытый слой и красным - выходной слой. Слоем называется совокупность нейронов (нейрон - вычислительная единица). В ходе тренировки нейросети входным параметрам присваиваются **случайные** веса w_i , и сумма входных параметров с учетом весов поступает на вход скрытому слою. Таким образом, входными данными для скрытого нейрона H_1 (рисунок 6.2) являются $H_{1input} = I_1 * w_1 + I_2 * w_2 + b$, где b - свободный параметр. Далее в скрытом слое на полученные данные действуют функцией активации для нормализации результата [11].

Получив результат, нейросеть вычисляет ошибку (различие между по-

лученным результатом и реальным) и затем начинает менять веса, минимизируя эту ошибку (например, методом градиентного спуска). Таким образом, меняя веса, нейросеть пропускает данные определенное количество раз через все слои и тем самым обучается.

По завершении процесса обучения в задаче бинарной классификации нейросеть выдает "вероятность" каждого события принадлежать к тому или иному классу (то есть к классу с меткой "1" или "0").

6.3. Метрики качества в задаче классификации

В роли метрик качества в задаче классификации могут использоваться следующие метрики:

1. accuracy = $\frac{TP + TN}{TP + TN + FP + FN}$ - доля правильных ответов алгоритма.
2. precision = $\frac{TP}{TP + FP}$ - точность, то есть доля объектов, отнесенных алгоритмом к классу с меткой "1", относительно всех объектов, отнесенных алгоритмом к классу "1".
3. recall = $\frac{TP}{TP + FN}$ - полнота, то есть доля обнаруженных алгоритмом объектов, принадлежащих классу "1", относительно всех объектов этого класса в выборке.
4. f1 = $2 \cdot \frac{\text{precision} \cdot \text{recall}}{\text{precision} + \text{recall}}$ - среднее гармоническое между precision и recall.
5. ROC-кривая. Кривая строится в координатах ($FPR = \frac{FP}{TN + FP}$ и $TPR = \frac{TP}{FN + TP}$). В идеальном случае, когда классификатор не делал ошибок, то есть $FPR = 0$ и $TPR = 1$, мы получим, что площадь под кривой равна 1. Каждая точка графика соответствует выбору порога принадлежности каждого события к конкретному классу.

В данных формулах использовались следующие обозначения:

- TP (true positive) - количество событий, верно отнесенных нейросетью к классу с меткой "1".
- TN (true negative) - количество событий, верно отнесенных нейросетью к классу с меткой "0".
- FP (false positive) - количество событий, ошибочно отнесенных нейросетью к классу с меткой "1" (ошибка 1 рода).
- FN (false negative) - количество событий, ошибочно отнесенных нейросетью к классу с меткой "0" (ошибка 2 рода).

7. Генеративно-сопязательная сеть (GAN)

Генеративно-сопязательные сети (Generative Adversarial Network, GAN) представляют собой подход к генеративному моделированию с использованием методов глубокого обучения. Они применяются для обнаружения закономерностей в распределении исходных данных, для того чтобы после процесса обучения сгенерировать новые примеры, которые могли бы правдоподобно присутствовать в оригинальном наборе данных.

Генеративно-сопязательные сети состоят из двух подмоделей: генератора и дискриминатора. Модель генератора получает на вход шум (случайный вектор определенной длины, взятый из нормального распределения) и в процессе обучения на исходных данных генерирует правдоподобные примеры, так называемые синтетические данные. Модель дискриминатора является обычным бинарным классификатором. Ее задача состоит в том, чтобы отличить синтетические данные от реальных.

В процессе обучения веса генератора подбираются таким образом, чтобы дискриминатору было сложнее отличить реальные данные от синтетических. В то же время модель дискриминатора подбирает веса так, чтобы лучше отличать одно от другого.

Таким образом, сопязательный процесс генератора и дискриминатора можно сформулировать в виде оптимизационной задачи: модель дискриминатора подбирает веса так, чтобы увеличить вероятность верной классификации реальных и синтетических данных (как в задаче бинарной классификации, где у реальных данных метка "1", а у синтетических - метка "0"), в то время как модель генератора подбирает веса так, чтобы вероятность классификации дискриминатором была минимальной. В идеальном случае, по окончании процесса обучения, генератор должен создавать неотличимые от реальных данных синтетические данные, а дискриминатор относит эти данные к тому или иному классу с вероятностью 50%. Во время обучения значение функции потерь (то есть разница между фактическим и прогнозируемым нейросетью значением) дискриминатора должно расти, в то время как для генератора значение функции потерь должно убывать. По этому критерию можно оценить состояние генеративно-сопязательной сети. Важно отметить, что добиться стабильного обучения обеих моделей в рамках сети GAN трудно.

7.1. MINIMAX GAN

Оптимизационная задача в таком подходе выглядит следующим образом:

$$\min_G \max_D \{ \log(D(x)) + \log(1 - D(G(z))) \}$$

В данных обозначениях $D(x)$ - вероятность, выданная дискриминатором в процессе классификации, $G(z)$ - данные, синтезированные генератором, z - шум, поданный на вход генератору. Модель дискриминатора предсказывает **вероятность** попадания события в класс синтезированных данных или в класс реальных данных.

Дискриминатор пытается максимизировать логарифм вероятности реальных данных и логарифм обратной вероятности синтетических данных: $\max_D \{ \log(D(x)) + \log(1 - D(G(z))) \}$.

Генератор, в свою очередь, пытается минимизировать логарифм обратной вероятности (полученной дискриминатором) синтетических данных: $\min_G \{ \log(1 - D(G(z))) \}$. Таким образом, генератор учится выдавать события с маленькой вероятностью быть распознанными дискриминатором как синтезированные.

На практике часто бывает так, что генератор обучается хуже дискриминатора. На ранних стадиях дискриминатор разделяет реальные данные от синтезированных очень легко, так как они сильно отличаются. Если дискриминатор обучился до оптимальных значений раньше генератора, то дискриминатор доходит до насыщения и перестает обучаться, что приводит к неудовлетворительным результатам генератора [4].

7.2. WASSERSTEIN GAN

Для стабилизации процесса обучения GAN моделей можно использовать метод Вассерштейна. Таким образом, решается оптимизационная задача следующего вида [1]:

$$\min_G \max_{D \in \mathfrak{D}} \{ D(x) - D(G(z)) \},$$

где \mathfrak{D} - класс функций 1-Липшица

$$(f \in \mathfrak{D}, \text{ если } \forall x, y \in \mathbb{R} \exists L : |f(x) - f(y)| < L \cdot |x - y|)$$

Модель дискриминатора обучается в несколько раз чаще генератора и уже **не** предсказывает вероятность попадания события в конкретный класс (как в задаче бинарной классификации), а "оценивает" событие по реальным меткам класса. Другими словами, выход модели дискриминатора не подвергается активации и поэтому интерпретируется не как вероятность, а как количественная оценка входных данных. Функция потерь теперь определена как расчет **среднего** прогнозируемого значения по реальным и сгенерированным данным.

Для того чтобы учесть условие, что дискриминатор должен принадлежать к классу функций Липшица, надо потребовать, чтобы веса дискриминатора были небольшими и находились в рамках какого-то интервала, который бы задавался гиперпараметрами [14].

Для еще большей стабилизации обучения генератора можно использовать *gradient penalty*. Метод заключается в дополнительном обучении модели генератора на интерполированных данных между реальными и сгенерированными данными и учет этого обучения в обновлении весов дискриминатора [6].

В настоящем анализе использовались оба подхода: *minimax GAN* и *Wasserstein(gradient penalty) GAN*.

8. Моделирование формы импульса в эксперименте GERDA

Целью работы было моделирование формы импульса для полукоаксиальных детекторов в эксперименте GERDA (phase II) с помощью генеративно-состязательных нейронных сетей и использование синтезированных импульсов для задачи разделения сигнальных и фоновых событий.

Был проведен анализ данных, полученных на полукоаксиальном детекторе ANG5 эксперимента GERDA. Были написаны модели генератора и дискриминатора на базе библиотеки PyTorch [12] для обучения генеративно-состязательной сети. Генератор и дискриминатор являются полносвязными нейросетями, состоящими из линейных слоев с разным количеством нейронов (перцептронами). Синтезированные в ходе обучения формы импульсов проверялись на соответствие реальным (калибровочным) данным с помощью алгоритмов дерева решений и случайного леса из 100 деревьев.

Проверка на соответствие проводилась по двум критериям:

1. При обучении классификатора (дерева решений и случайного леса) на сгенерированных данных и проверке обученной модели на калибровочных данных результат должен быть такой же, как при обучении классификатора на калибровочных данных и проверке на другой выборке из калибровочных данных.
2. Классификация сгенерированных данных и реальных (калибровочных данных) не должна работать (то есть доля верно классифицированных нейросетью событий должна быть порядка 50%). Фактически это означает, что синтетические данные невозможно отличить от реальных.

Отдельно стоит отметить, что в анализе используются 50 переменных TimeAtHeightX, то есть время на высоте 1%, 3%, 5%, .. 97%, 99% от максимальной высоты зарядового импульса. Импульсы нормированы таким образом, что первый временной момент равен 0, а последний равен 1 для всех импульсов, поэтому для нашего анализа использовались только 48 временных моментов (так как время нормировано на длительность импульса, то далее под "временем" имеется в виду безразмерное, нормированное время).

Основной мотивацией для данного анализа являлось отсутствие корректных Монте-Карло данных для полукоаксиальных детекторов. Имеющиеся Монте-Карло данные из-за проблем с моделированием поведения электроники не соответствовали реальным (рисунок 8.1), поэтому обуче-

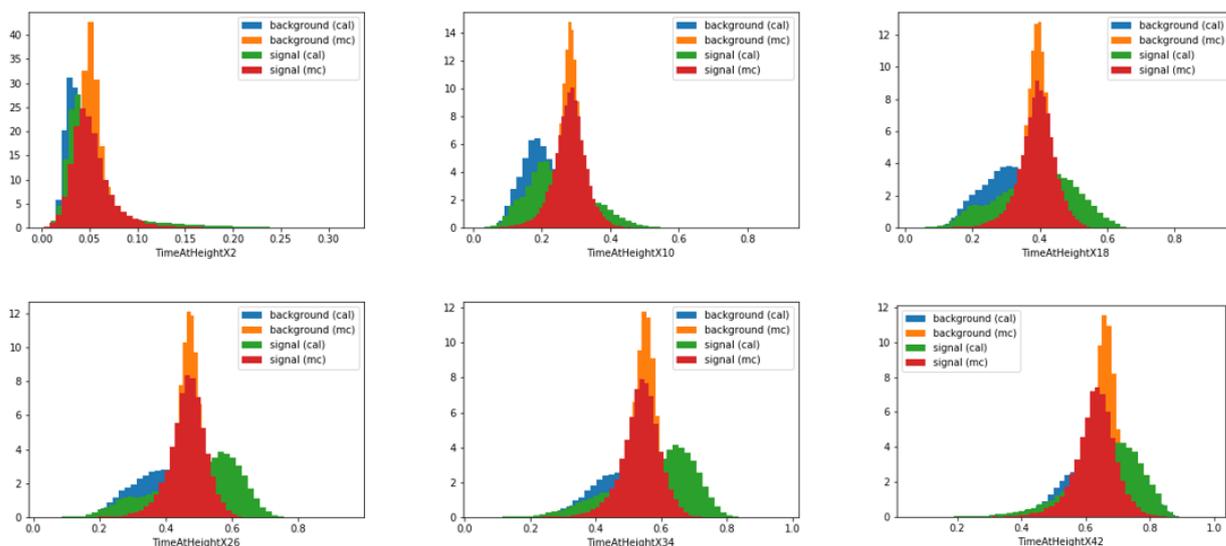


Рисунок 8.1 – Сравнение распределений некоторых параметров TimeAtHeightX для Монте-Карло и калибровочных данных для детектора ANG5

ние классификатора на существующих Монте-Карло данных не представляется возможным.

8.1. Анализ калибровочных данных

На основе калибровочных данных были построены формы всех импульсов для детектора ANG5 (рисунок 8.2).

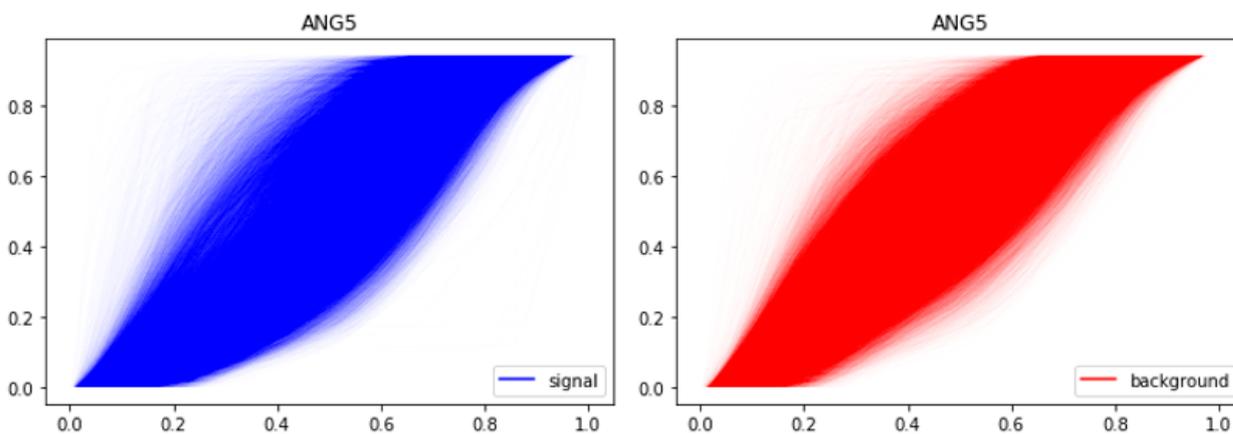


Рисунок 8.2 – Формы сигнальных и фоновых импульсов, полученные в эксперименте GERDA. По горизонтальной оси - время, нормированное на длительность импульса

Результаты разделения сигнальных и фоновых событий для калибровочных данных с помощью дерева решений и случайного леса представлены в таблице 8.1, а также на рисунках 8.3 и 8.4.

Таблица 8.1 – Результаты, полученные для детектора ANG5 при обучении и проверке классификаторов на калибровочных данных

	accuracy	roc_auc	f1
Decision Tree	0.64 ± 0.02	0.64 ± 0.02	0.52 ± 0.02
Random Forest	0.68 ± 0.02	0.68 ± 0.02	0.68 ± 0.02

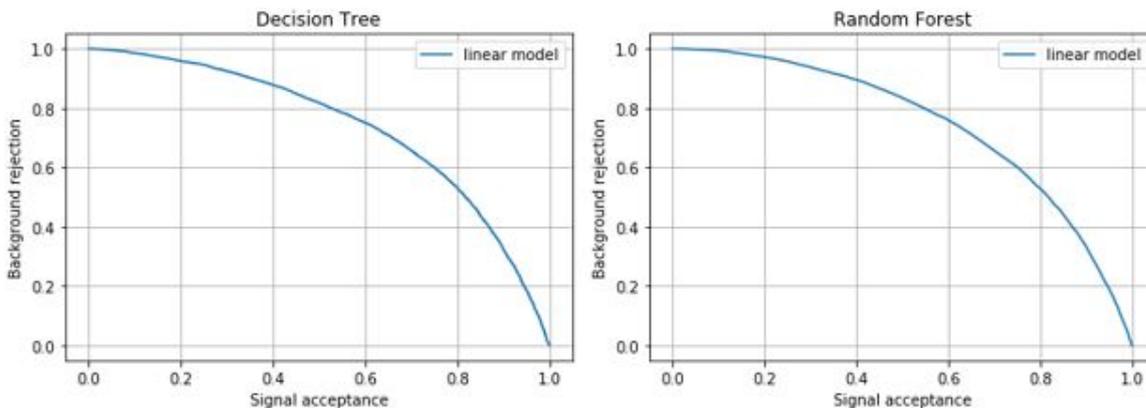


Рисунок 8.3 – ROC-кривые для детектора ANG5 при обучении и проверке классификаторов на калибровочных данных. Background rejection - TNR (1-FPR), signal efficiency - TPR

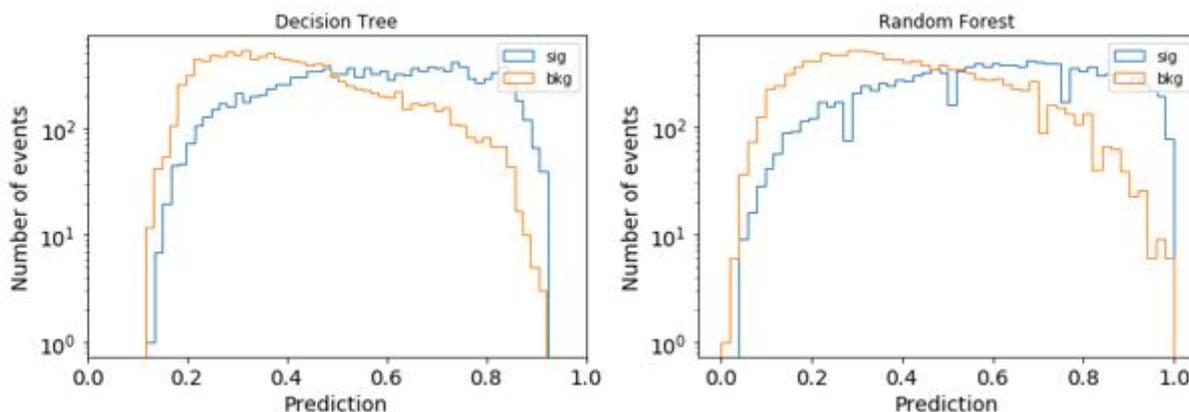


Рисунок 8.4 – Разделение сигнальных и фоновых событий для детектора ANG5 при обучении и проверке классификаторов на калибровочных данных

Эти результаты будут сравниваться с результатами обучения классификатора на синтезированных данных и его проверке на реальных данных.

8.2. Моделирование сигнальных и фоновых событий с помощью генеративно состязательных (GAN) сетей

В качестве входных параметров использовались формы импульсов для сигнала и фона (по отдельности) из калибровочных данных для полукосиального детектора ANG5 (рисунок 8.2). Пример форм импульсов для сигнальных и фоновых событий показан на рисунке 8.5.

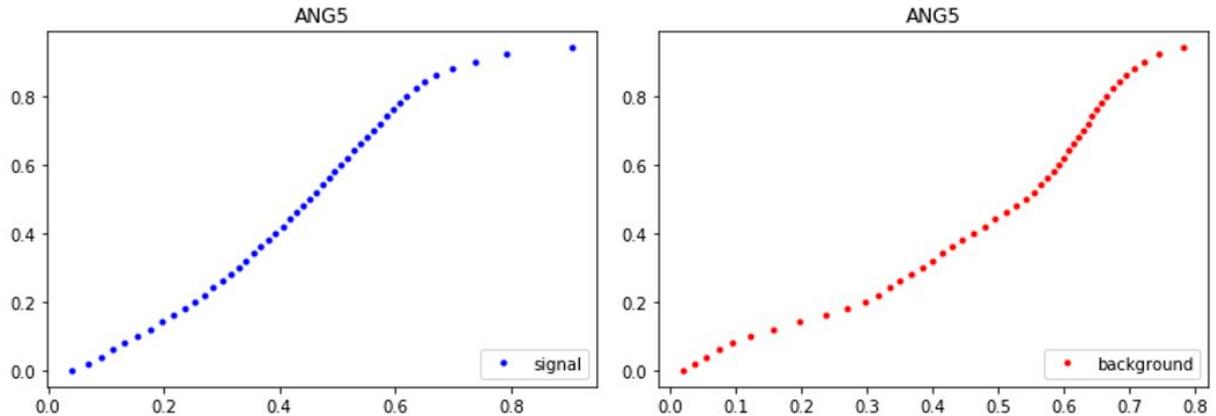


Рисунок 8.5 – Пример форм сигнальных и фоновых импульсов, полученных в эксперименте GERDA. По горизонтальной оси - время, нормированное на длительность импульса

После исследования различных вариантов архитектуры генератора и дискриминатора был сделан вывод, что самым эффективным вариантом является многослойный перцептрон, то есть полносвязная нейронная сеть.

Отдельно стоит отметить, что данные, используемые для обучения GAN, предварительно были приведены к стандартному виду таким образом, чтобы распределение каждого параметра было нормальным:

$$z = \frac{x - \mu}{\sigma},$$
$$\mu = \frac{1}{N} \sum_i^N x_i,$$
$$\sigma = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_i^N (x_i - \mu)^2},$$

где μ – среднее значение, σ – среднеквадратическое отклонение

Распределения параметров до и после стандартизации можно видеть на рисунке 8.6.

Это условие является необходимым для стабильной работы генератора.

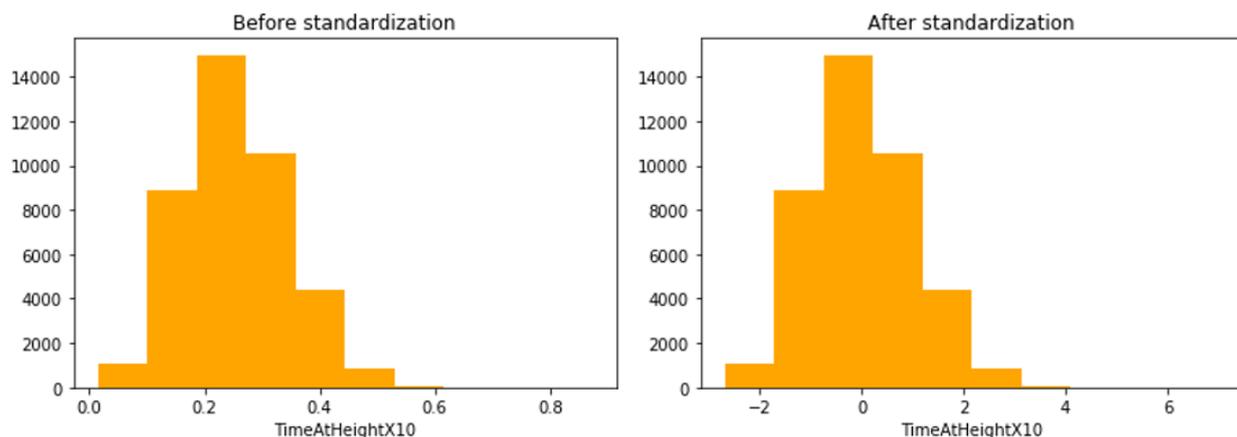


Рисунок 8.6 – Распределения параметра TimeAtHeightX10 для сигнальных импульсов до и после стандартизации

После процесса обучения синтезированные импульсы проходят обратное преобразование, чтобы соответствовать исходным формам импульсов.

Таким образом, в данной работе представлены результаты исследования Minimax GAN и Wasserstein GAN (gradient penalty). Генератор и дискриминатор являются многослойными перцептронами. Последний слой генератора не подвергается активации сигмоидой, последний слой дискриминатора в случае Minimax GAN подвергается активации сигмоидой, так как генератор должен выдавать вероятности (секция 7.1), а в случае Wasserstein GAN (gradient penalty) дискриминатор активации не подвергается (секция 7.2).

8.2.1. Входные данные - импульсы заряда

Для начала были исследованы сети, которым в качестве входных данных подавались зарядовые импульсы (рисунок 8.5).

Примеры сгенерированных в результате обучения моделей Minimax GAN и Wasserstein GAN импульсов показаны на рисунках 8.7, 8.9, формы сигнальных и фоновых импульсов показаны на рисунках 8.8, 8.10. По рисункам 8.7, 8.9 видно, что импульсы не являются гладкими, какими должны быть (рисунок 8.5). При обучении классификатора на этих данных и проверке его на калибровочных данных, сеть оказывается неспособной различить сигнальные и фоновые события, поэтому такие формы импульсов и такие модели GAN не являются удовлетворительными.

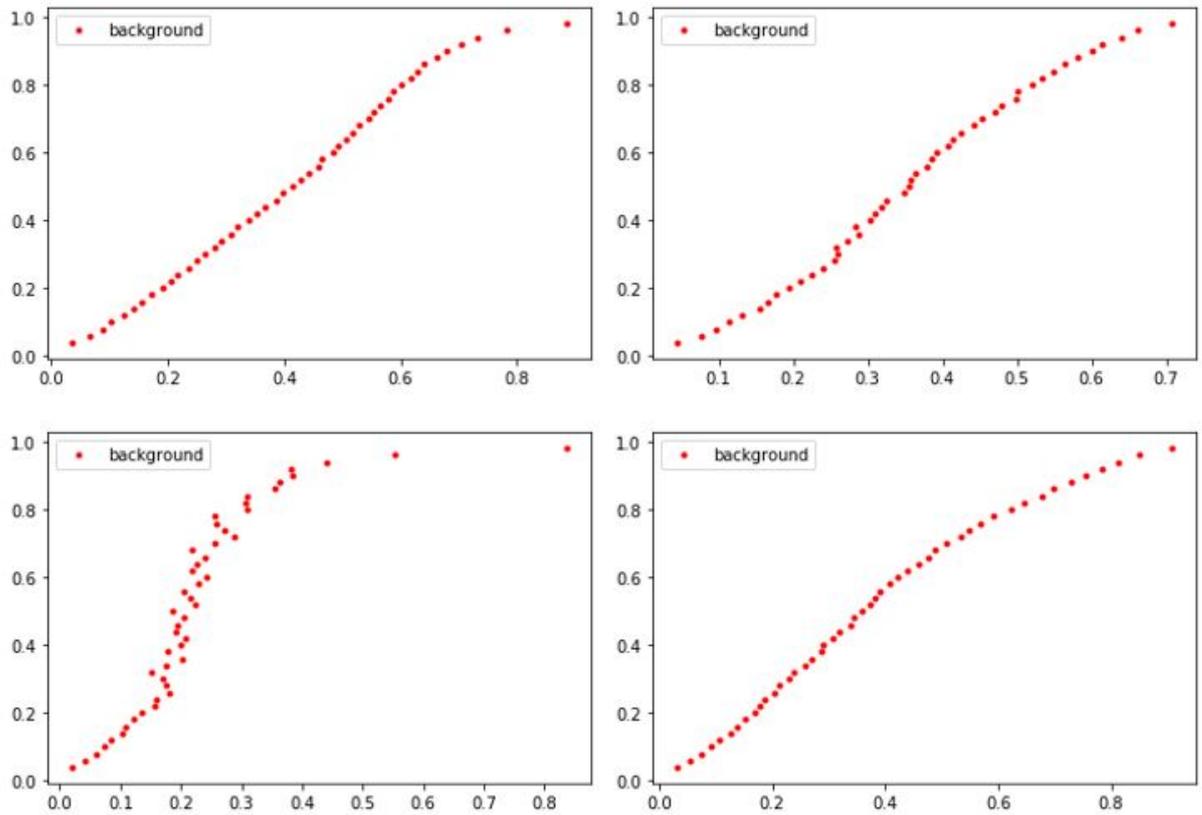


Рисунок 8.7 – Примеры синтезированных импульсов для детектора ANG5 (Wasserstein GAN). По горизонтальной оси - время, нормированное на длительность импульса

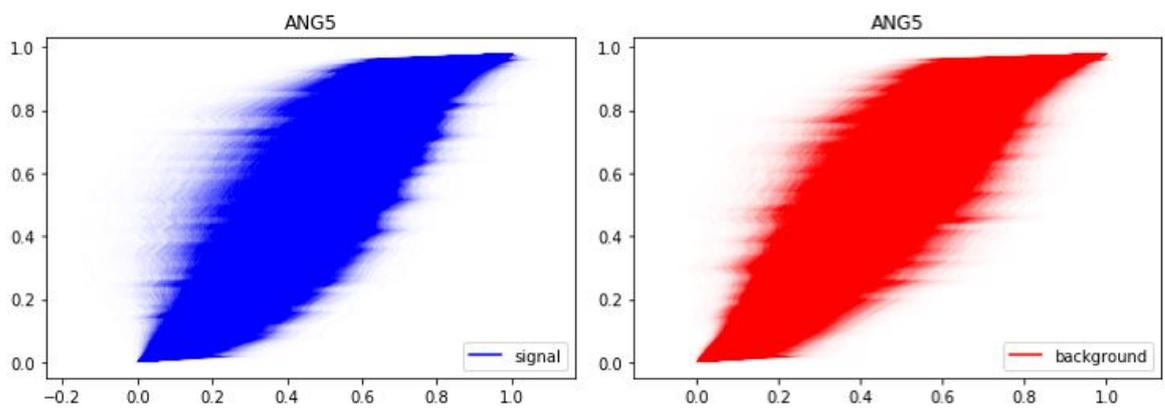


Рисунок 8.8 – Формы синтезированных импульсов для сигнала и фона для детектора ANG5 (Wasserstein GAN, 60000 событий). По горизонтальной оси - время, нормированное на длительность импульса

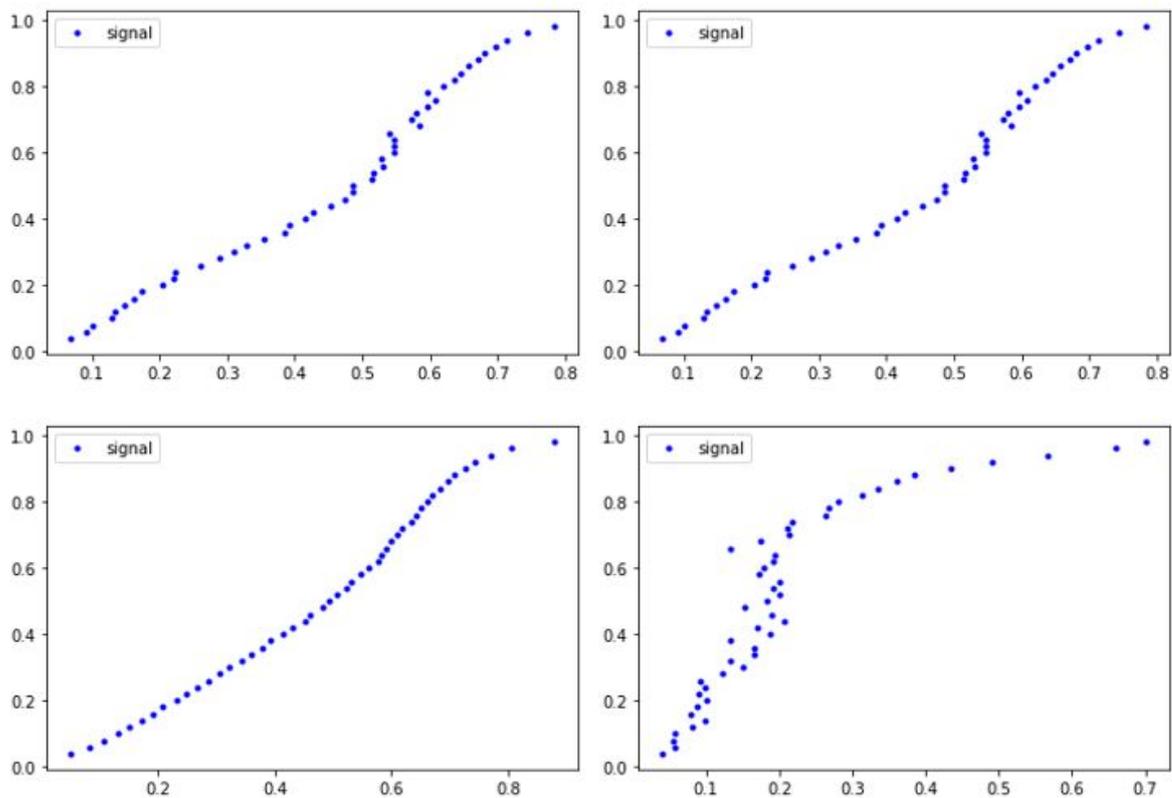


Рисунок 8.9 – Примеры синтезированных импульсов для детектора ANG5 (Minimax GAN). По горизонтальной оси - время, нормированное на длительность импульса

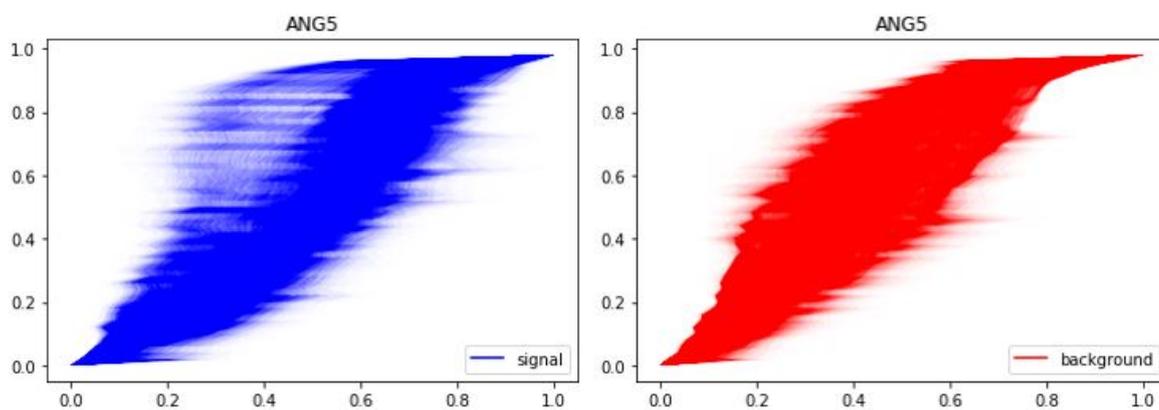


Рисунок 8.10 – Формы синтезированных импульсов для сигнала и фона для детектора ANG5 (Minimax GAN, 30000 событий). По горизонтальной оси - время, нормированное на длительность импульса

8.2.2. Входные данные - импульсы тока

Далее была предпринята попытка перехода от зарядовых импульсов к токовым. Так как по своей структуре входные данные - набор из 49 временных моментов ($TimeAtHeightX$ на высоте 1%, 3%, 5%, ..., 97%; на высоте 1% $TimeAtHeightX[0] = 0$), переход был совершен по следующей формуле:

$$current[i] = \frac{0.02}{TimeAtHeightX[i + 1] - TimeAtHeightX[i]}, \quad i = \overline{0, 47} \quad (8.1)$$

В итоге получим 48 значений для тока.

Таким образом, был совершен переход от зарядовых импульсов (рисунок 8.11) к импульсам тока (8.12).

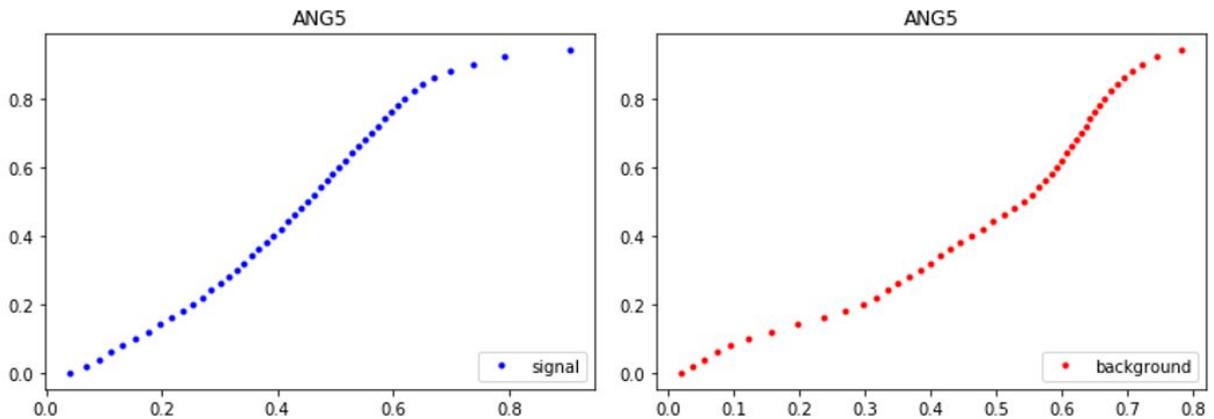


Рисунок 8.11 – Пример форм сигнальных и фоновых импульсов, полученных в эксперименте GERDA. По горизонтальной оси - время, нормированное на длительность импульса

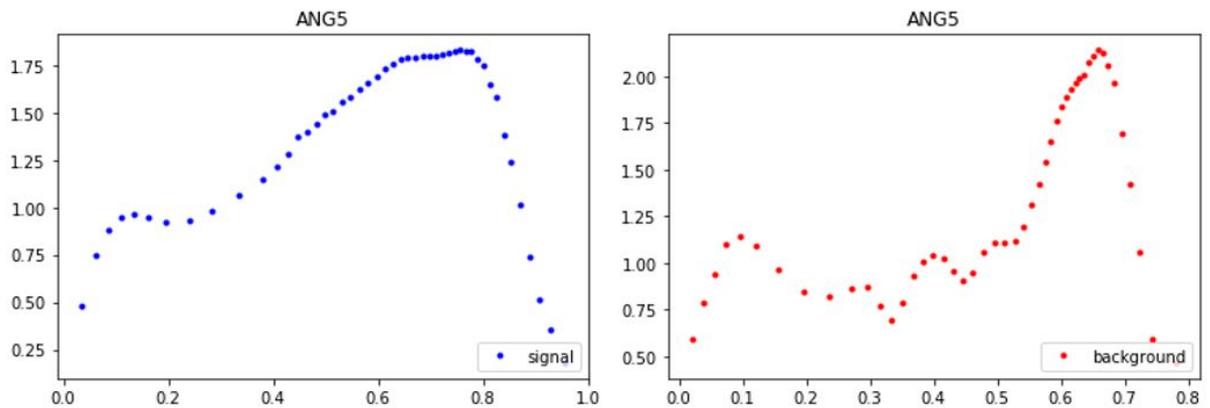


Рисунок 8.12 – Пример форм сигнальных и фоновых импульсов, полученных в эксперименте GERDA. По горизонтальной оси - время, нормированное на длительность импульса, по вертикальной оси - значения, полученные по формуле (8.1)

Этот шаг был мотивирован тем, что формы токовых импульсов являются более выпуклыми, что может увеличить стабильность обучения нейросети.

Таким образом, были исследованы Minimax GAN и Wasserstein GAN, которым на вход подавались токовые импульсы. После обучения нейросети и синтеза моделью-генератором токовых импульсов был совершен обратный переход по формуле:

$$TimeAtHeightX[i + 1] = \frac{0.02}{current[i]} + TimeAtHeightX[i], i = \overline{0, 47} \quad (8.2)$$

В формуле (8.2) надо учесть, что $TimeAtHeightX[0] = 0$, тогда мы получим 48 параметров $TimeAtHeightX$, как и нужно в анализе.

Результаты обучения после обратного перехода представлены на рисунках 8.13, 8.14, 8.15, 8.16.

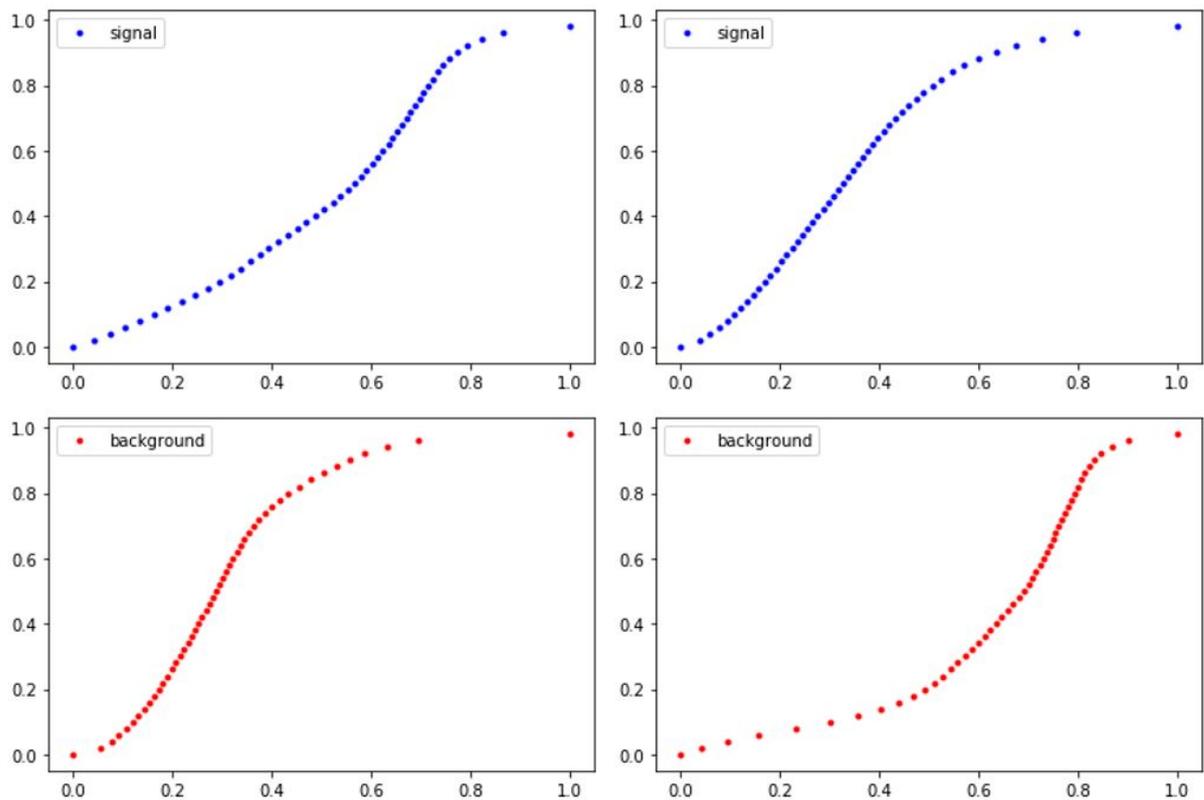


Рисунок 8.13 – Примеры синтезированных импульсов для детектора ANG5 (Wasserstein GAN). По горизонтальной оси - время, нормированное на длительность импульса

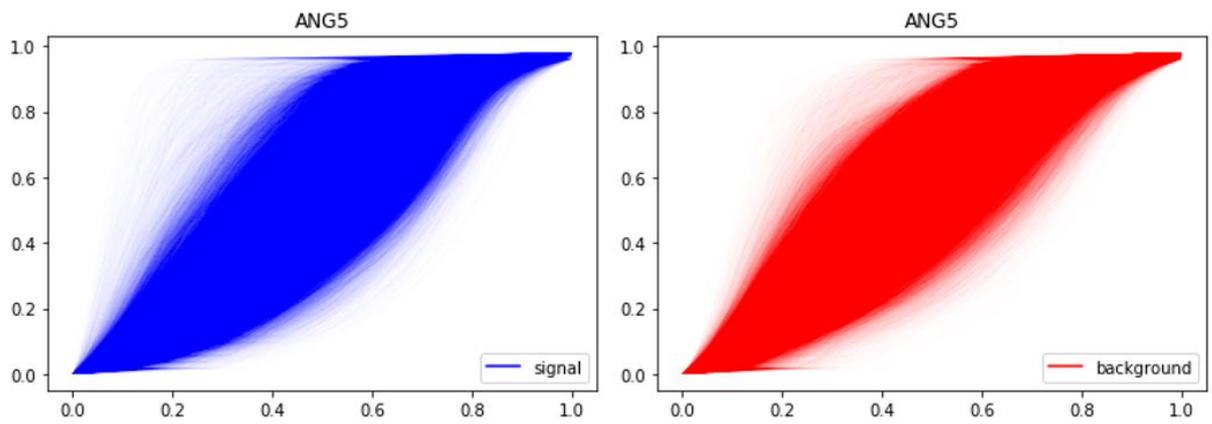


Рисунок 8.14 – Формы синтезированных импульсов для сигнала и фона для детектора ANG5 (Wasserstein GAN, 60000 событий). По горизонтальной оси - время, нормированное на длительность импульса

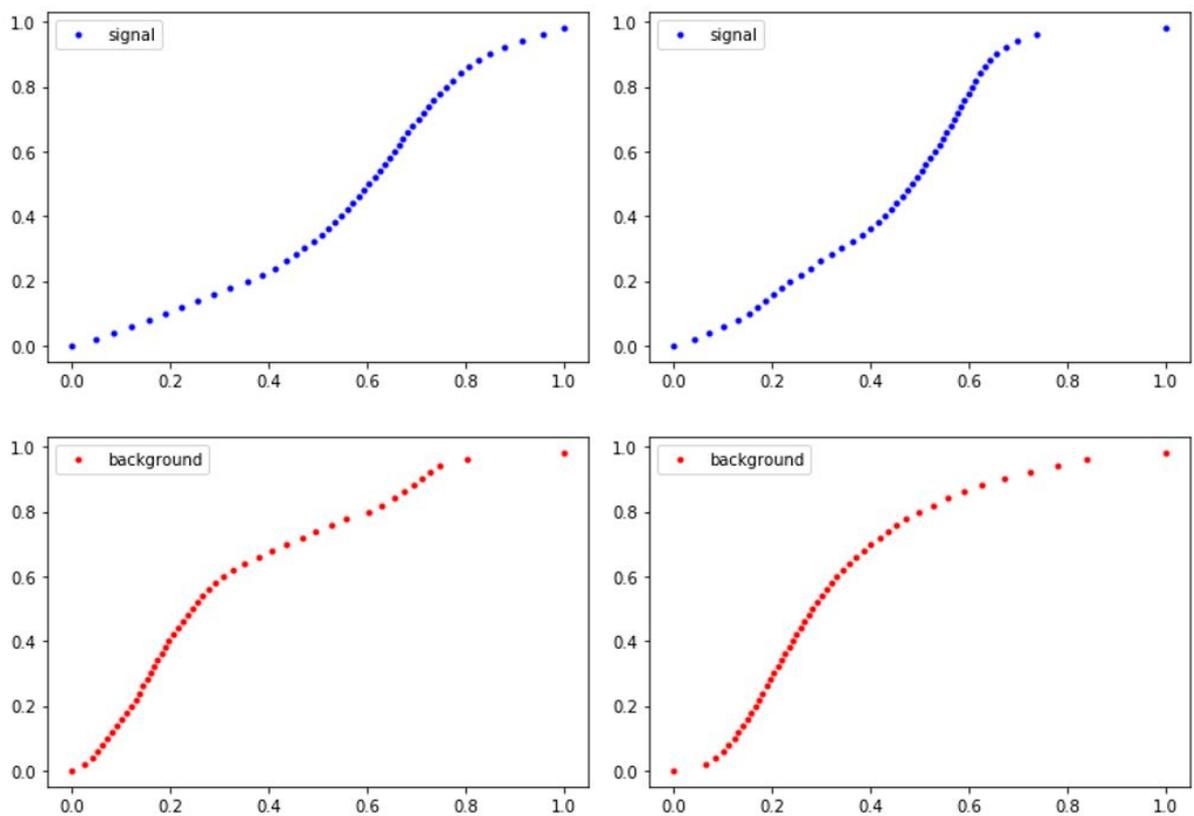


Рисунок 8.15 – Примеры синтезированных импульсов для детектора ANG5 (Minimax GAN). По горизонтальной оси - время, нормированное на длительность импульса

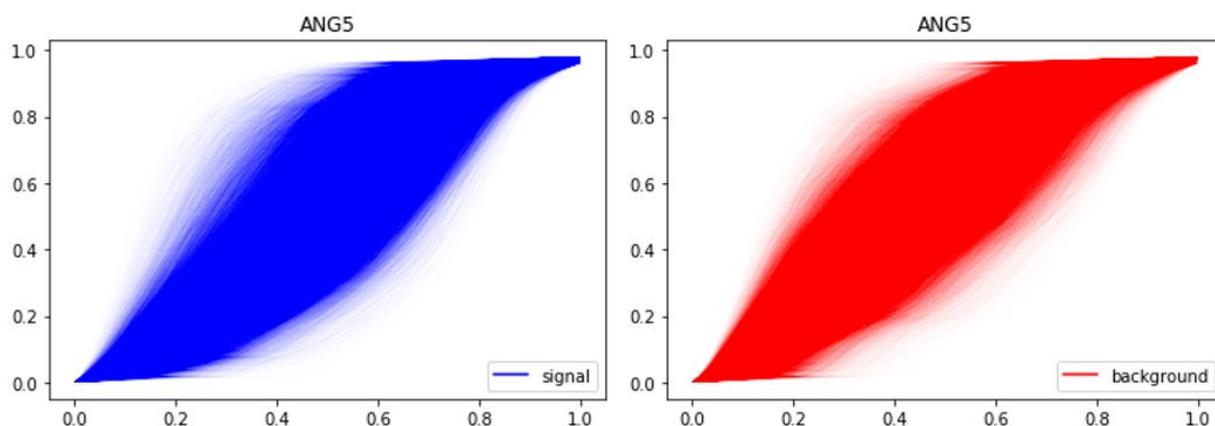


Рисунок 8.16 – Формы синтезированных импульсов для сигнала и фона для детектора ANG5 (Minimax GAN, 60000 событий). По горизонтальной оси - время, нормированное на длительность импульса

Отдельно стоит отметить, что к синтезированным данным (после обратного перехода) был применен критерий отбора из-за наличия небольшого числа выбросов. Критерий отбора состоял в том, что каждый следующий параметр `TimeAtHeightX` должен быть больше предыдущего. Таким образом было отсеяно порядка 7% синтезированных данных для сигнала и фона.

По рисункам 8.13, 8.15 видно, что полученные импульсы (после отбора) являются гладкими, как и должно быть. Рисунки 8.14, 8.16 визуально похожи на рисунок 8.2 для реальных импульсов.

8.2.2.1 Изучение распределений параметров `TimeAtHeightX` синтетических данных

На рисунках 8.17, 8.18, 8.19, 8.20 показаны распределения некоторых параметров `TimeAtHeightX` синтетических и калибровочных данных для моделей Wasserstein GAN и Minimax GAN.

Видно, что синтезированные данные лучше соотносятся с реальными данными, чем имеющиеся Монте-Карло данные (рисунок 8.1).

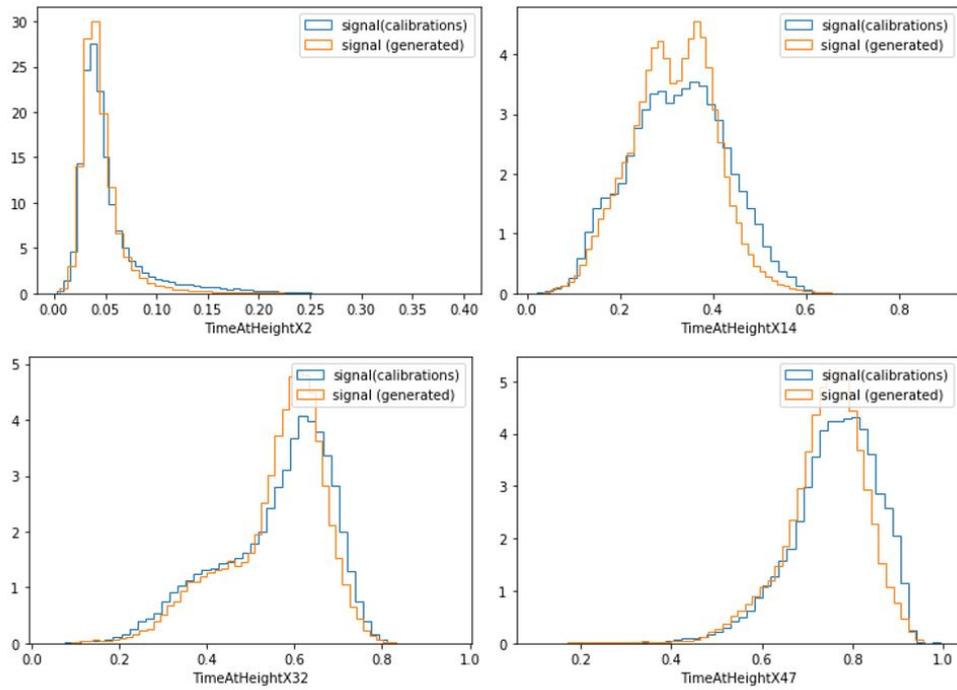


Рисунок 8.17 – Сравнение распределений некоторых параметров TimeAtHeightX для синтезированных (Wasserstein GAN) и калибровочных сигнальных событий для детектора ANG5

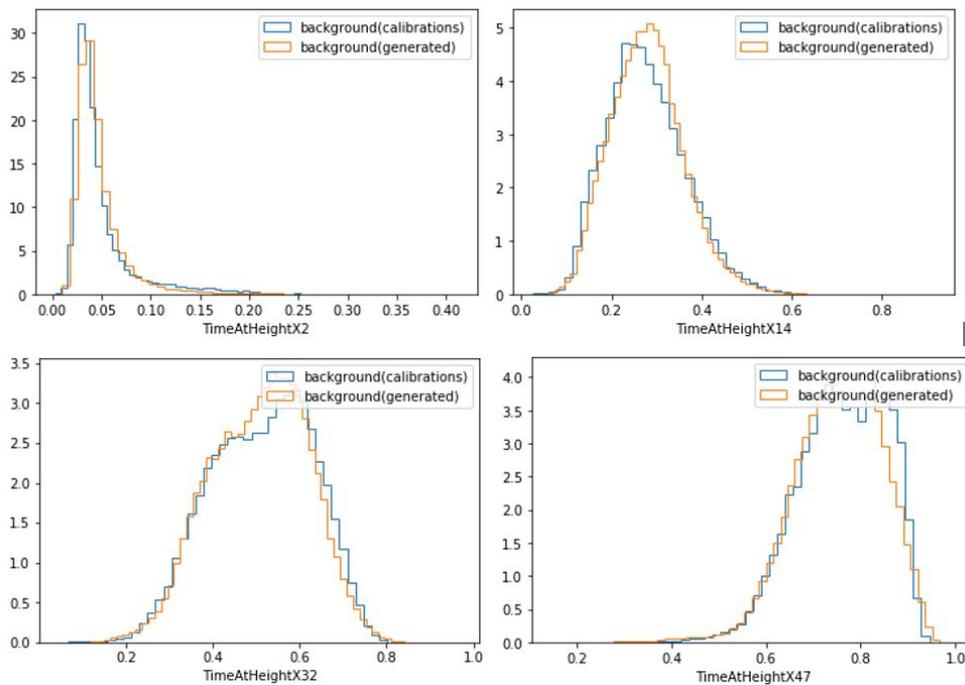


Рисунок 8.18 – Сравнение распределений некоторых параметров TimeAtHeightX для синтезированных (Wasserstein GAN) и калибровочных фоновых событий для детектора ANG5

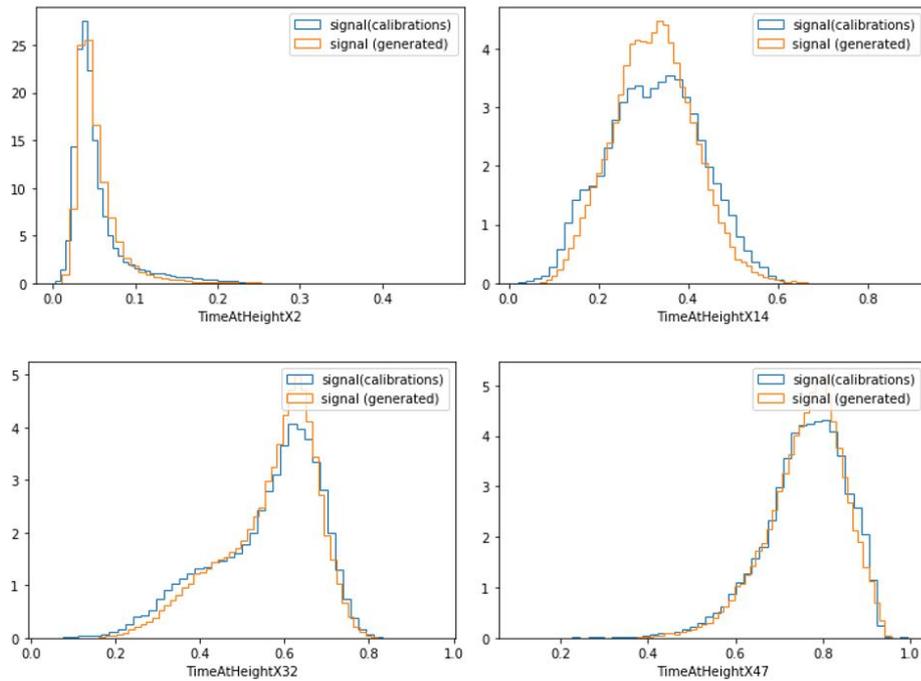


Рисунок 8.19 – Сравнение распределений некоторых параметров TimeAtHeightX для синтезированных (Minimax GAN) и калибровочных сигнальных событий для детектора ANG5

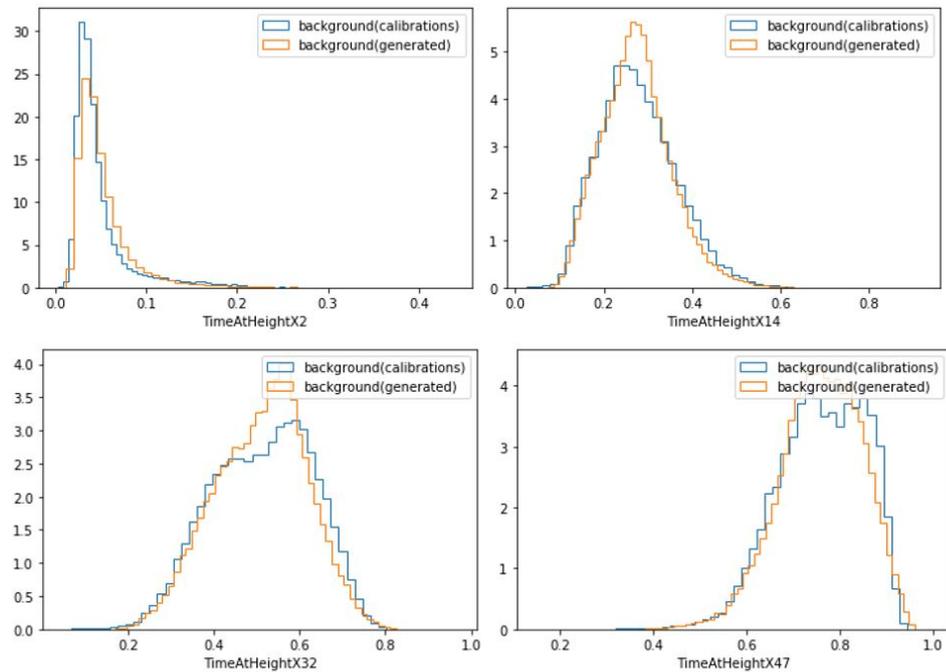


Рисунок 8.20 – Сравнение распределений некоторых параметров TimeAtHeightX для синтезированных (Minimax GAN) и калибровочных фоновых событий для детектора ANG5

8.2.2.2 Обучение классификатора на синтетических данных и его применение к реальным данным для разделения сигнальных и фоновых событий

Проверим синтезированные формы импульсов на соответствие реальным (калибровочным) данным. Для этого обучим бинарный классификатор на синтезированных данных и применим его к реальным (калибровочным) данным.

Результаты разделения сигнальных и фоновых событий для калибровочных данных классификатором (дерева решений и случайного леса), обученного на синтезированных с помощью Wasserstein GAN импульсах, представлены в таблице 8.2 и на рисунках 8.21 и 8.22.

Таблица 8.2 – Результаты, полученные для детектора ANG5 при обучении классификаторов на синтетических данных (Wasserstein GAN) и их проверке на калибровочных данных

	accuracy	roc_auc	f1
Decision Tree	0.65 ± 0.02	0.65 ± 0.02	0.64 ± 0.02
Random Forest	0.65 ± 0.02	0.65 ± 0.02	0.63 ± 0.02

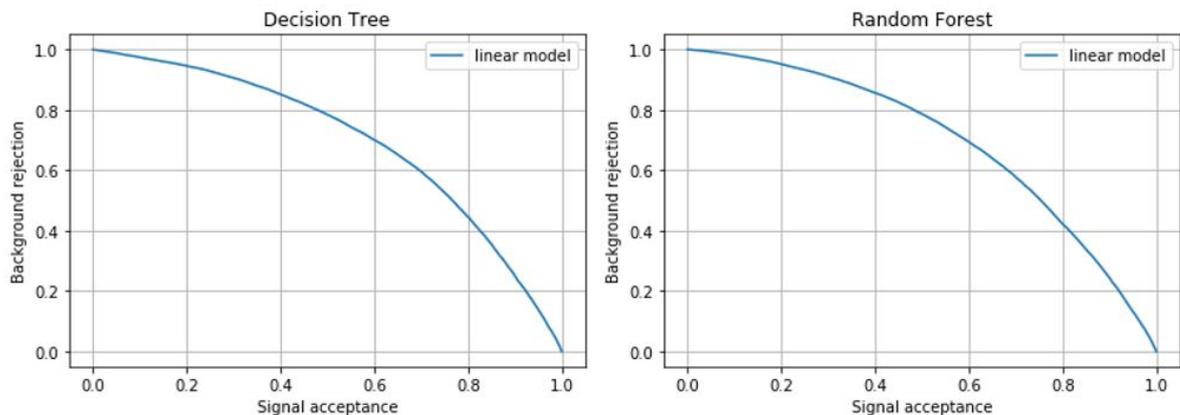


Рисунок 8.21 – ROC-кривые для детектора ANG5 при обучении классификаторов на синтетических данных (Wasserstein GAN) и их проверке на калибровочных данных. Background rejection - TNR (1-FPR), signal efficiency - TPR

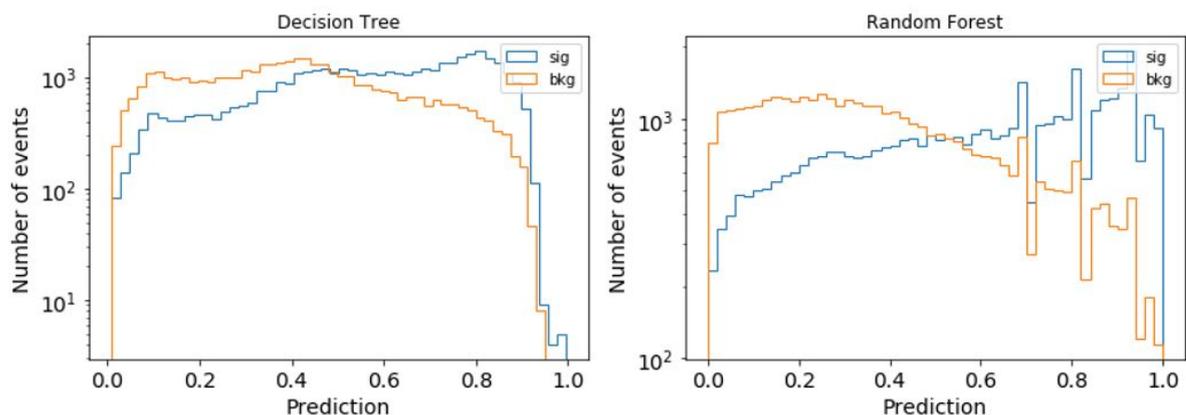


Рисунок 8.22 – Разделение сигнальных и фоновых событий для детектора ANG5 при обучении классификаторов на синтетических данных (Wasserstein GAN) и их проверке на калибровочных данных

Результаты разделения сигнальных и фоновых событий для калибровочных данных классификатором (дерева решений и случайного леса), обученного на синтезированных с помощью Minimax GAN импульсах, представлены в таблице 8.3 и на рисунках 8.23 и 8.24.

Таблица 8.3 – Результаты, полученные для детектора ANG5 при обучении классификаторов на синтетических данных (Minimax GAN) и их проверке на калибровочных данных

	accuracy	roc_auc	f1
Decision Tree	0.64 ± 0.02	0.64 ± 0.02	0.64 ± 0.02
Random Forest	0.64 ± 0.02	0.64 ± 0.02	0.64 ± 0.02

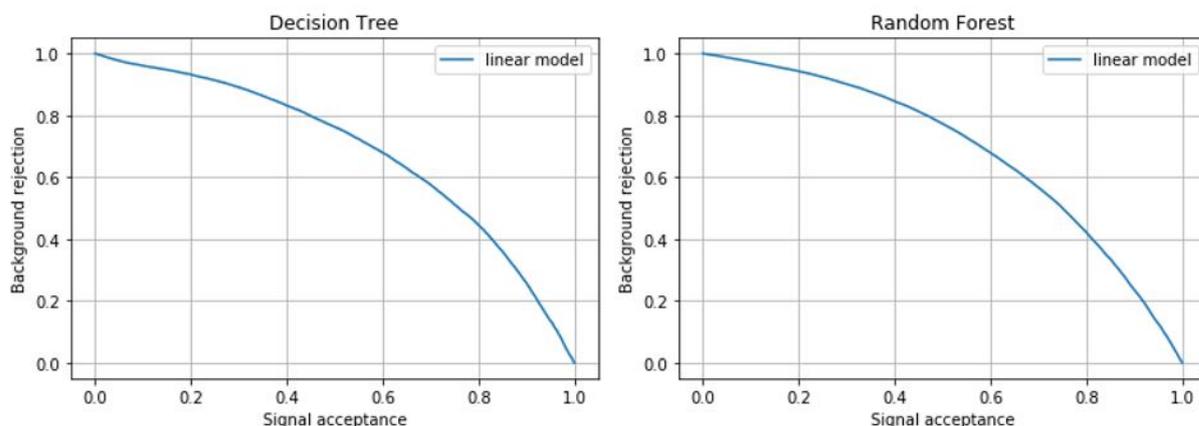


Рисунок 8.23 – ROC-кривые для детектора ANG5 при обучении классификаторов на синтетических данных (Minimax GAN) и их проверке на калибровочных данных. Background rejection - TNR (1-FPR), signal efficiency - TPR

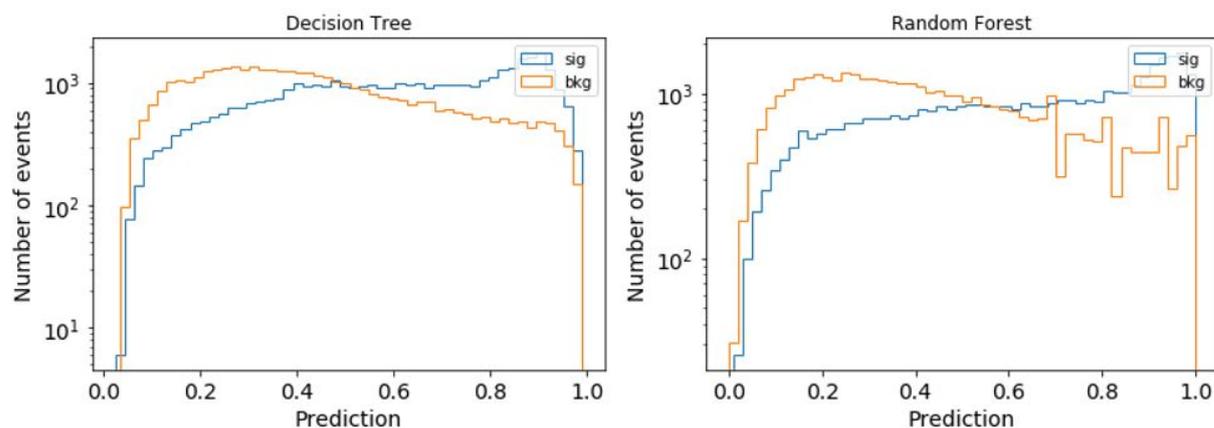


Рисунок 8.24 – Разделение сигнальных и фоновых событий для детектора ANG5 при обучении классификаторов на синтетических данных (Minimax GAN) и их проверке на калибровочных данных

Полученные результаты (особенно для Wasserstein GAN) хорошо коррелируют с результатами разделения сигнальных и фоновых событий для калибровочных данных при обучении классификаторов на другой выборке из калибровочных данных (таблица 8.1, рисунки 8.3 и 8.4). Однако пока нельзя однозначно сказать, что синтезированные нейросетями данные являются адекватными.

8.2.2.3 Разделение классификатором синтетических и реальных данных

На этом этапе проверке всем синтезированным событиям (и сигнальным, и фоновым) присвоена метка "0", а всем реальным событиям - метка "1". Модели-классификаторы обучаются на этих данных для разделения реальных данных от синтетических. В идеальном случае доля верно классифицированных событий должна быть порядка 50%, что означает, что синтезированные данные неотличимы от реальных. „Фраза“

Результаты разделения синтетических (Wasserstein GAN) и калибровочных данных классификатором (дерева решений и случайного леса) представлены в таблице 8.4 и на рисунках 8.25 и 8.26.

Таблица 8.4 – Результаты, полученные для детектора ANG5 при разделении синтетических (Wasserstein GAN) и реальных данных

	accuracy	roc_auc	f1
Decision Tree	0.64 ± 0.02	0.64 ± 0.02	0.60 ± 0.02
Random Forest	0.69 ± 0.02	0.69 ± 0.02	0.69 ± 0.02

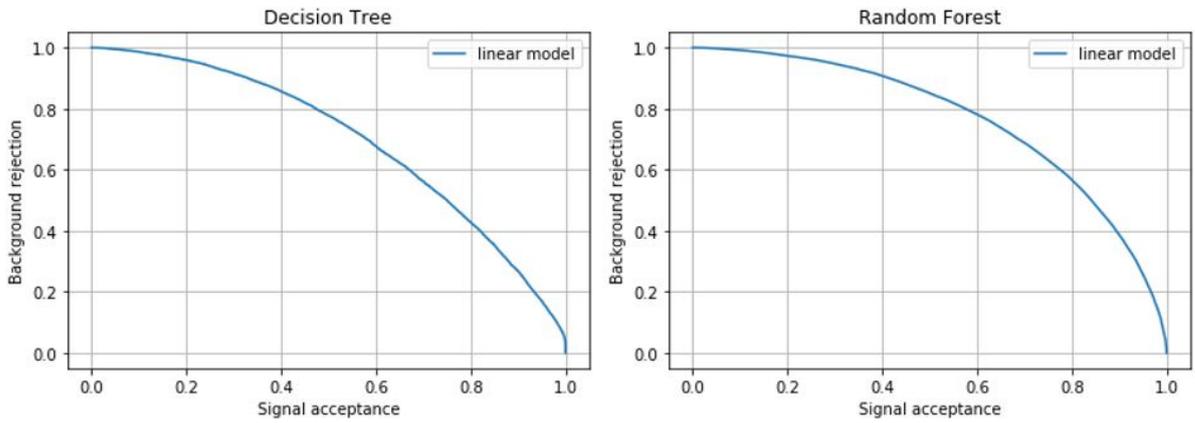


Рисунок 8.25 – ROC-кривые для детектора ANG5 при разделении синтетических (Wasserstein GAN) и реальных данных. Background rejection - TNR (1-FPR), signal efficiency - TPR

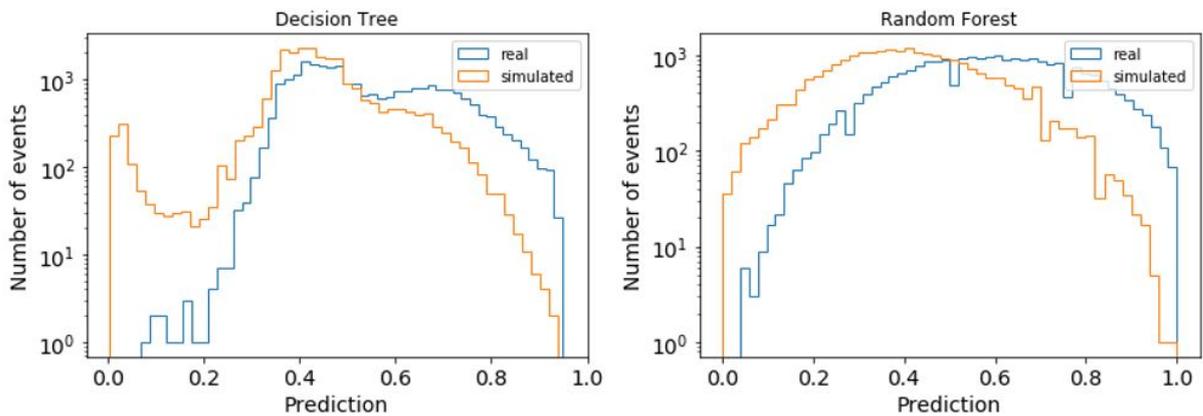


Рисунок 8.26 – Разделение сигнальных и фоновых событий для детектора ANG5 при разделении синтетических (Wasserstein GAN) и реальных данных

Результаты разделения синтетических (Minimax GAN) и калибровочных данных классификатором (дерева решений и случайного леса) представлены в таблице 8.5 и на рисунках 8.27 и 8.28.

Таблица 8.5 – Результаты, полученные для детектора ANG5 при разделении синтетических (Minimax GAN) и реальных данных

	accuracy	roc_auc	f1
Decision Tree	0.66 ± 0.02	0.66 ± 0.02	0.65 ± 0.02
Random Forest	0.76 ± 0.02	0.76 ± 0.02	0.76 ± 0.02

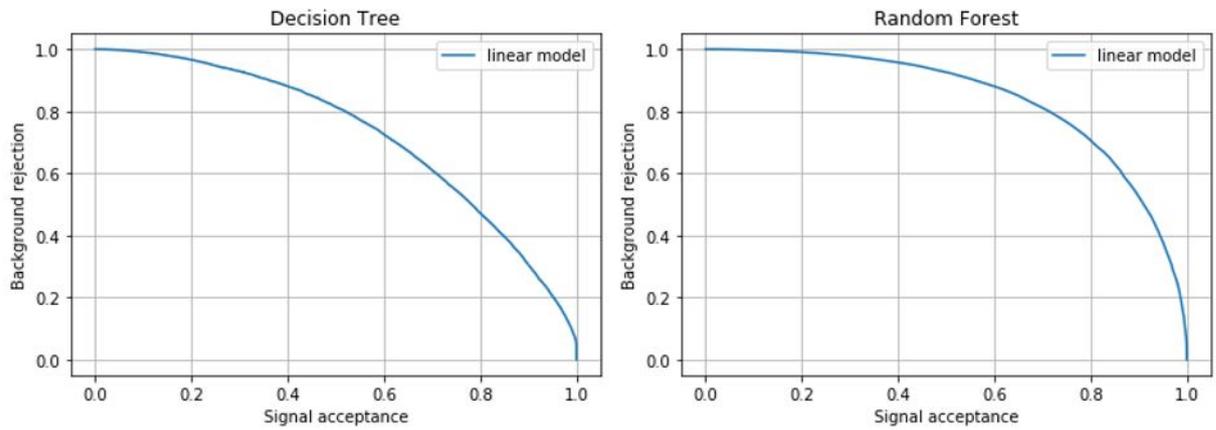


Рисунок 8.27 – ROC-кривые для детектора ANG5 при разделении синтетических (Minimax GAN) и реальных данных. Background rejection - TNR (1-FPR), signal efficiency - TPR

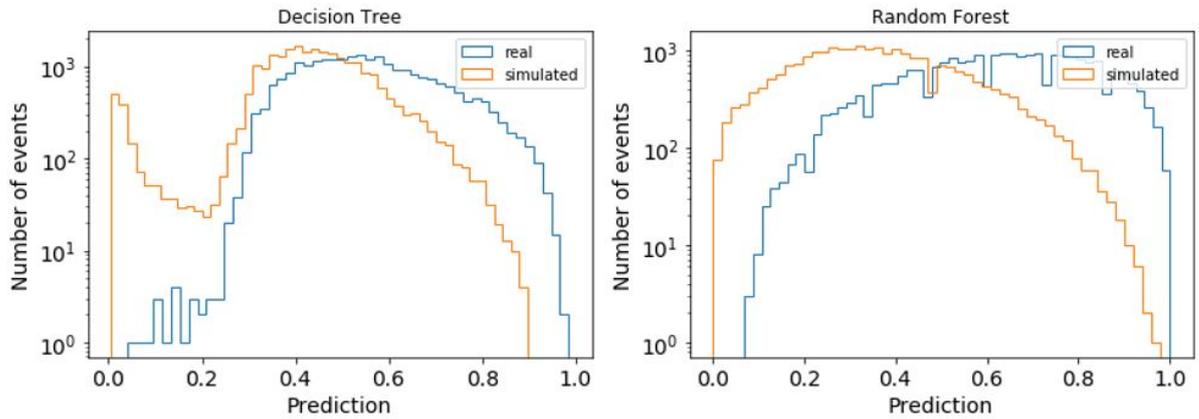


Рисунок 8.28 – Разделение сигнальных и фоновых событий для детектора ANG5 при разделении синтетических (Minimax GAN) и реальных данных

Полученные результаты выше ожидаемой доли верно классифицированных моделью событий (50%). Это говорит о том, что невозможно сделать однозначный вывод о соответствии синтетических данных реальным.

Заключение

В ходе работы было проведено моделирование форм импульсов для полукоаксиального детектора ANG5 с помощью генеративно-сопоставительных (GAN) сетей. Для этого были изучены различные подходы к обучению GAN-сетей, в анализе использовались подход Minimax и подход Вассерштейна. Для стабилизации обучения нейронных сетей было совершено переключение от зарядовых импульсов к токовым импульсам, что существенно улучшило представление сети-генератора.

Полученные формы импульсов были затем проверены на соответствие реальным (калибровочным) данным. Для этого модели-классификаторы были обучены на синтетических данных и затем применены для разделения сигнальных и фоновых событий в калибровочных данных. Результаты соответствуют результатам разделения сигнальных и фоновых событий при обучении и проверке модели-классификатора на калибровочных данных, и по этому критерию синтетические данные соответствуют реальным.

С другой стороны, при разделении синтетических и реальных данных моделями-классификаторами был получен неудовлетворительный результат, то есть по этому критерию соответствие реальных и синтетических данных достигнуто не было.

Таким образом, на данном этапе невозможно однозначно утверждать, что сконструированные генеративно-сопоставительные сети в процессе обучения выдают импульсы, соответствующие реальным данным. В дополнение к перечисленным доводам стоит отметить, что результаты разделения сигнальных и фоновых событий при обучении и проверке классификаторов на калибровочных данных, принятые нами за эталон, сами по себе являются неудовлетворительными, что вносит дополнительную сложность в оценку работы сети-генератора.

Впоследствии планируется распространить приведенный анализ на другие типы детекторов эксперимента LEGEND, а также исследовать работу генеративно-сопоставительных сетей при подаче им на вход не нормированных, состоящих из 50 точек, форм импульсов, как в данном анализе, а обычных осциллограмм.

СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ

1. *Arjovsky M., Chintala S., Bottou L.* Wasserstein GAN. — 2017.
2. *D'Andrea V.* Neutrinoless Double Beta Decay Search with ^{76}Ge : Status and Prospect with LEGEND // 54th Rencontres de Moriond on Electroweak Interactions and Unified Theories. — 05/2019.
3. Final Results of GERDA on the Search for Neutrinoless Double- β Decay / M. Agostini [et al.] // Phys. Rev. Lett. — 2020. — Dec. — Vol. 125, issue 25. — P. 252502.
4. Generative Adversarial Networks / I. J. Goodfellow [et al.]. — 2014.
5. *Goodfellow I., Bengio Y., Courville A.* Deep Learning. — MIT Press, 2016. — <http://www.deeplearningbook.org>.
6. Improved Training of Wasserstein GANs / I. Gulrajani [и др.]. — 2017.
7. *Kirsch A.* Search for the neutrinoless double beta-decay in Gerda Phase I using a Pulse Shape Discrimination technique. — 2014. — Jan.
8. *Lazzaro A.* Signal processing and event classification for a background free neutrinoless double beta decay search with the GERDA experiment. : PhD thesis / Lazzaro Andrea. — Munich, Tech. U., 2019.
9. Machine Learning / Data Science. — URL: <https://towardsdatascience.com>.
10. Pulse shape discrimination for GERDA Phase I data / M. Agostini [et al.] // Eur. Phys. J. C. — 2013. — Vol. 73, no. 10. — P. 2583.
11. Python Deep Learning / I. Vasilev [et al.]. — Packt Publishing, 2019. — P. 378.
12. PyTorch. — URL: <https://pytorch.org>.
13. *Wagner V.* Pulse Shape Analysis for the GERDA Experiment to Set a New Limit on the Half-life of Neutrinoless Double Beta Decay of Ge-76 : PhD thesis / Wagner Victoria. — 01/2017.
14. Wasserstein GAN. — URL: <https://jonathan-hui.medium.com>.