

Universidade de São Paulo
Instituto de Física

Estudo da reação de breakup ${}^4\text{He}({}^{17}\text{F}, {}^{16}\text{O}+p){}^4\text{He}$
usando o alvo ativo pAT-TPC: uma abordagem
usando técnicas de Machine Learning

Guilherme Ferrari Fortino

Orientador: Prof. Dr. Valdir Guimarães _____

Coorientador: Dr. Juan Carlos Zamora Cardona _____

Dissertação de mestrado apresentada ao Instituto de
Física da Universidade de São Paulo, como requisito
parcial para a obtenção do título de Mestre(a) em Ciências.

Banca Examinadora:

Prof(a). Dr(a). Nome do(a) Professor(a) - Orientador (instituição de trabalho)

Prof(a). Dr(a). Nome do(a) Professor(a) (instituição de trabalho)

Prof(a). Dr(a). Nome do(a) Professor(a) (instituição de trabalho)

São Paulo
2022

Resumo

Nesse trabalho estudamos a reação de breakup ${}^4\text{He}({}^{17}\text{F}, {}^{16}\text{O}+p){}^4\text{He}$, usando técnicas de machine learning. As medidas do sistema ${}^{17}\text{F} + {}^4\text{He}$ foram feitas usando o alvo ativo pAT-TPC, localizado na University of Notre Dame, Estados Unidos. O feixe ${}^{17}\text{F}$ foi produzido pelo sistema TWINSOL, também localizado na University of Notre Dame, com energia de 51 MeV. O feixe incidiu no alvo ativo com energia de 34.76 MeV.

Na primeira parte da análise, foi feita a reconstrução tridimensional dos eventos através da análise dos pulsos gerados pelo plano detector micromegas. O micromegas é um detector multipixelado, onde cada pixel (com coordenadas x e y fixas) é um canal detector com eletrônica independente, que gerou centenas de milhões de histogramas que correspondem à projeção dos eventos no tempo. Foram criadas três e treinadas redes neurais supervisionadas, uma para calcular o sinal de fundo, outra para fazer a deconvolução do sinal sem o fundo e outra para identificar os centroides no sinal resultante, que correspondem à coordenada z projetada no tempo.

Já com as nuvens de pontos reconstruídas, as trajetórias das partículas foram identificadas, usando algoritmos de clustering e estimadores robustos. A partir das propriedades geométricas das trajetórias, foi calculado o vértice de reação de cada evento para enfim poder calcular ângulos de espalhamento da reação. Seguimos então com a identificação de partículas, onde foram aplicadas condições lógicas para identificar o canal de breakup nos eventos. Identificado o canal de breakup, as distribuições angulares (breakup inclusivo e exclusivo) foram construídas. Por fim, as distribuições angulares foram analisadas e comparadas com resultados anteriores envolvendo o breakup do ${}^{17}\text{F}$ em outros núcleos.

Abstract

In this work we study the breakup reaction ${}^4\text{He}({}^{17}\text{F}, {}^{16}\text{O}+p){}^4\text{He}$, using machine learning techniques. The ${}^{17}\text{F} + {}^4\text{He}$ system measurements were made using the pAT-TPC active target, located at the University of Notre Dame, United States. The ${}^{17}\text{F}$ beam was produced by the TWINSOL system, also located at the University of Notre Dame, with an energy of 51 MeV. The beam was incident on the active target with an energy of 34.76 MeV.

In the first part of the analysis, a three-dimensional reconstruction of the events was performed through the analysis of the pulses generated by the micromegas pad plane. The micromegas is a multipixelated detector, where each pad (with fixed x and y coordinates) is a detector channel with independent electronics, which generated hundreds of millions of histograms that correspond to the projection of events in time. Three supervised neural networks were created and trained, one to calculate the background signal, another to deconvolve the signal without the background and another to identify the centroids in the resulting signal, which correspond to the z coordinate projected in time.

With the point clouds reconstructed, the particle trajectories were identified, using clustering algorithms and robust estimators. From the geometric properties of the trajectories, the reaction vertex of each event was calculated in order to finally be able to calculate the scattering angles of the reaction. We then proceed with the identification of particles, where logical conditions were applied to identify the breakup channel in the events. Once the breakup channel was identified, the angular distributions (inclusive and exclusive breakup) were built. Finally, the angular distributions were analyzed and compared with previous results involving the breakup of ${}^{17}\text{F}$ in other nuclei.

Sumário

1	Introdução	12
2	O experimento	15
2.1	Produção do feixe secundário ^{17}F usando o sistema TWINSOL	15
2.2	O alvo ativo pAT-TPC	19
3	Desenvolvimento de ferramentas de <i>machine learning</i> para análise de dados	25
3.1	Tipos de redes neurais	26
3.2	Estrutura da rede neural	30
3.3	Sistemas de <i>machine learning</i>	33
4	Reconstrução de nuvens de pontos a partir de algoritmos de <i>machine learning</i>	35
4.1	Construção do banco de dados para as redes neurais	36
4.1.1	Estimativa do fundo	38
4.1.2	Deconvolução do sinal	40
4.2	Análise dos pulsos com <i>machine learning</i>	42
4.2.1	Rede neural para o fundo	42
4.2.2	Rede neural para a deconvolução	45
4.2.3	Identificação de picos	48
4.2.4	Acoplando as redes neurais	51
5	Análise das nuvens de pontos	54
5.1	Identificação de trajetórias	54
5.2	Abordagens alternativas	60
5.2.1	Identificação de eventos com <i>machine learning</i>	60
5.2.2	Identificação de <i>outliers</i>	63
6	Resultados	65
6.1	A cinemática da reação	65

6.1.1	Reconstrução do vértice da reação	65
6.1.2	Reconstrução da energia das partículas	67
6.1.3	Determinação dos ângulos de reação	68
6.2	Identificação do canal de reação de breakup	68
6.3	Construção das distribuições angulares	74
6.4	Análise e comparação dos resultados	80
7	Conclusões	85
A	Aplicações de machine learning na física nuclear	87
A.1	Análise de espectros para identificação de partículas (<i>particle identification</i> , PID)	87
A.2	Estimativa de raios e massas nucleares	88
A.3	Decaimento β e processo r	90
A.4	Alvos ativos	91

Listas de figuras

1.1	Tabela de nuclídeos para elementos leves, indicando a energia de separação de um próton em MeV. O núcleo estudado nesse trabalho é o ^{17}F (destacado pelo quadrado em cor azul), com $S_p = 600$ keV. [3]	13
2.1	Desenho do TWINSOL à esquerda e do pAT-TPC à direita. O feixe estável de ^{16}O entra à esquerda do TWINSOL, produzindo no alvo de produção o feixe secundário ^{17}F que irá ser conduzido até o alvo ativo pAT-TPC. Todo o sistema está localizado na University of Notre Dame.	16
2.2	Simulação computacional do sistema RIBRAS, onde as partículas carregadas em laranja surgem do ponto à direita da figura e passam pelos dois solenoides em verde, para então serem focalizada em um ponto do plano focal em vermelho. A parte em preto dos solenoides corresponde aos limites físicos da bobina [18].	17
2.3	Valor do campo magnético B em tesla em função da posição em z em centímetro da bobina. A linha vertical tracejada preta indica o limite físico da bobina. O campo foi calculado à uma distância de 8 cm do eixo do solenoide. É possível ver claramente o efeito de borda que há em um solenoide finito [22].	17
2.4	Espectro biparamétrico $\Delta E - E$ de identificação de partículas. Nele é possível identificar que o feixe possui a presença de ^{17}F , ^{16}O e uma pequena parte de ^{17}O	18
2.5	Figura esquemática do pAT-TPC e o detector micromegas[13].	20
2.6	Design do plano detector. A densidade de pads é maior na região central. Com o zoom em um dos vértices da parte hexagonal é possível ver o formato triangular dos pads.	21
2.7	Gráfico de velocidade de deriva dos elétrons a cada run. O tempo de duração de cada run foi de aproximadamente uma hora.	22

2.8	Plano do micromegas com a esquematização das thick gems. Os elétrons quando passam para um campo elétrico mais intenso ionizam o gás, produzindo ainda mais elétrons (evento chamado de avalanche de elétrons). Cada canal da eletrônica de saída produz um pulso como mostrado na parte de baixo da figura.	23
2.9	Evento reconstruído a partir da análise dos pulsos gerados pelo micromegas. A cor representa a carga integrada de cada ponto de interação com o gás.	24
3.1	Exemplo de FFNN. A camada de entrada na esquerda propaga a informação para a direita (camada de saída). Todos os neurônios entre camadas estão conectados entre si.	27
3.2	Processo de convolução entre sinal azul em cima e o filtro em verde, resultando no sinal azul embaixo. A multiplicação é feita ponto a ponto e está indicada na caixa azul-clara.	28
3.3	Processo de convolução entre o sinal azul em cima e o filtro em verde, resultando no sinal azul embaixo. Agora são acrescentados zeros no inicio e no final do vetor para que o vetor saída tenha o mesmo tamanho do vetor de entrada (nesse caso 9).	29
3.4	Funções de ativação e seus respectivos gráficos.	31
4.1	Exemplos de sinais produzidos pelos canais do detector. Em 4.1a o sinal possui apenas um pulso, enquanto em 4.1b há vários pulsos em sobreposição, formando um único pulso com largura maior que em 4.1a.	36
4.2	Ilustração que mostra a variação no formato da carga coletada a partir da passagem de uma partícula carregada dentro do TPC, onde o plano do detector está embaixo. No lado esquerdo de cada imagem, a distribuição do sinal coletado por um único pad (escuro) do plano de coleta é mostrado (o canal eletrônico de leitura é representado pela seta cinza em negrito). No caso de uma trajetória quase horizontal em relação ao plano do detector (a), o sinal é uma distribuição estreita, enquanto para uma trajetória próxima a uma direção vertical (ou perpendicular) em relação ao detector (b), a distribuição deve ser muito mais ampla (vários pontos de interação da partícula com o gás devem ser extraídos desse sinal). A última imagem ilustra o caso em mais de uma trajetória de partículas contribui para o sinal [12].	37

4.3	Histogramas com as respectivas baselines (linhas tracejadas) estimadas pelo método da convolução. O espectro resultante (sem o fundo) está em verde.	39
4.4	Histogramas com as respectivas baselines (linhas tracejadas) calculadas pelo TSpectrum.	40
4.5	Histogramas sem as baselines antes (em azul) e depois da deconvolução (em vermelho). Os picos (em verde) e o limiar (linha tracejada preta) de identificação também estão indicados.	41
4.6	Arquitetura da rede neural que faz a inferência do fundo. O vetor de entrada deve ter dimensionalidade 512 x 1. Todas as partes com convolução não possuem o parâmetro bias.	43
4.7	Resultados do treino da rede neural representada na figura 4.6. A rede atingiu seu melhor resultado a partir da epoch 20.	44
4.8	Exemplos da rede neural dada pela figura 4.6 em comparação com a saída do TSpectrum.	45
4.9	Arquitetura da rede neural que faz a inferência da deconvolução do espectro. O vetor de entrada deve ter dimensionalidade 512 x 1. Todas as partes com convolução não possuem o parâmetro bias.	47
4.10	Resultados do treino da rede neural dada pela figura 4.6.	47
4.11	Exemplos de deconvolução da rede neural dada pela figura 4.6.	48
4.12	Sinal após a deconvolução que mostra o pico identificado mais os pontos adicionais que irão facilitar o trabalho da rede neural (evitar o desbalanço de classe). Foram acrescentados 2 pontos à esquerda e à direita.	49
4.13	Arquitetura da rede neural que faz o recorte das regiões com picos. O vetor de entrada deve ter dimensionalidade 512 x 1.	50
4.14	Resultados do treino da rede neural dada pela figura 4.13.	50
4.15	Exemplos de identificação de picos usando a rede neural, em comparação com a identificação feita pelo algoritmo presente no SciPy, mostrada na figura 4.13. Os centroides identificados pela rede neural estão em vermelho, e os centroides identificados pelo SciPy estão em verde. Em azul está o espectro sem fundo após a deconvolução, resultantes	51
4.16	Arquitetura da rede neural que faz a inferência da baseline, em seguida faz a deconvolução do espectro sem o fundo e por fim faz a segmentação do sinal. O resultado da segmentação e da deconvolução são concatenados na parte final da rede neural. O vetor de entrada deve ter dimensionalidade 512 x 1.	52

4.17	Exemplos de eventos reconstruídos através da análise dos sinais com machine learning. A seta vermelha indica o sentido do feixe.	53
5.1	Sequência de análise de um evento. Em 5.1a temos o evento que é recebido para ser analisado, em 5.1b temos o mesmo evento após o HDB-SCAN (antes da correção) e 5.1c mostra depois da correção. As cores das retas são arbitrárias e servem apenas para a diferenciação.	56
5.2	Evento em que não foi identificado o feixe, apenas a partícula espalhada. O triângulo azul é o local calculo do vértice de reação dado pela equação 5.6.	58
5.3	Arquitetura da PointNet. A rede de classificação tem o <i>input</i> com n pontos com 3 coordenadas, onde são aplicadas sequencias de transformação que são agregadas por uma camada de max pooling. O <i>output</i> é a classificação para k classes possíveis. A rede de segmentação é uma extensão da rede de classificação, classificando ponto a ponto a nuvem de pontos, em m classes possíveis. Mais detalhes sobre a arquitetura podem ser encontrados na Ref. [69]	61
5.4	Nuvem de pontos que possui 3 trajetórias para serem identificadas e a rede neural de classificação calculou que haviam 3 trajetórias, o que indica um resultado correto do algoritmo.	63
5.5	Identificação de outliers com a rede neural de segmentação. A rede neural foi capaz de identificar os <i>outliers</i> desse evento com 95% de acurácia.	64
6.1	Exemplos de reações nucleares com as trajetórias identificadas. O vértice de reação é indicado por um X , em preto. As cores servem apenas para a diferenciação.	66
6.2	Alcance (mm) em função da energia (MeV) para o ^{17}F , ^{16}O e próton. A grande diferença está no próton que tem um alcance muito maior que os outros núcleos.	67
6.3	Histograma de comprimento de <i>track</i> no eixo y e ângulo de espalhamento no eixo x	69
6.4	Evento onde há a trajetória originada por um próton (trajetória em amarelo), onde percebe-se que seu comprimento vai até o limite geométrico da câmara (cilindro cinza transparente). O feixe está em azul e o ^{16}O originou a trajetória em verde.	70
6.5	Processo de aplicação do primeiro gate para identificar as trajetórias de reação de breakup. O resultado é o espectro da figura 6.5c.	71

6.6	Processo de aplicação do segundo gate para identificar os prótons. O resultado é um espectro da figura 6.6b.	73
6.7	Histograma bidimensional do comprimento (mm) em função do ângulo de espalhamento (graus) para eventos com coincidência. Nele é possível identificar os prótons (trajetórias que não param no gás) e o ^{16}O , que possui trajetórias com ângulos mais dianteiros e comprimentos menores.	74
6.8	Gráfico que mostra a seção de choque σ em função da energia no referencial do centro de massa. Os pontos de cor preta correspondem à seção de choque do breakup inclusivo e os pontos de cor vermelha correspondem à seção de choque do breakup exclusivo.	76
6.9	Distribuições angulares de breakup do ^{17}F em ^4He em função do ângulo de espalhamento do próton θ_p no referencial do laboratório. As energias estão acima da barreira de Coulomb da reação (4.2 MeV).	77
6.10	Distribuições angulares de breakup do ^{17}F em ^4He em função do ângulo de espalhamento do próton θ_p no referencial do laboratório. As energias estão próximas da barreira de Coulomb da reação (4.2 MeV).	78
6.11	Distribuições angulares de breakup do ^{17}F em ^4He em função do ângulo de espalhamento do próton θ_p no referencial do laboratório. As energias estão abaixo da barreira de Coulomb da reação (4.2 MeV).	80
6.12	Distribuições angulares do breakup exclusivo para (a) $^{17}\text{F} + ^{58}\text{Ni}$ e (b) $^{17}\text{F} + ^{208}\text{Pb}$. As linhas tracejadas representam previsões teóricas para a dissociação de Coulomb a partir da teoria de perturbação em primeira ordem, onde Pt-E1 corresponde à transição E1, Pt-E2 à transição E2 e Pt-Sum é a soma das transições E1 e E2. Mais detalhes podem ser encontrados na Ref. [78].	81
6.13	Cálculos de CDCC para as contribuições da seção de choque de breakup exclusiva. A linha tracejada é o calculo da contribuição nuclear, a linha ponto-tracejada é o cálculo para a contribuição de Coulomb. A linha sólida preta é o cálculo de CDCC incluindo tanto a contribuição nuclear e de Coulomb. Mais detalhes podem ser encontrados em [5].	83

6.14 Distribuições angulares do breakup inclusivo (ponto amarelo) e exclusivo (estrela vermelha) para a reação de breakup $^{17}\text{F} + ^{58}\text{Ni}$ com energias próximas da barreira de Coulomb. A linha ponto-tracejada são cálculos de CDCC para o breakup elástico (EBU), a linha tracejada é o calculo de CDCC para o breakup não elástico (NEB) e a linha sólida é a soma de ambas (TBU). As energias em cada figura estão no referencial do laboratório. Mais detalhes podem ser encontrados na Ref. [80].	84
A.1 Espectros biparamétricos $\Delta E \times E$, em A.1a o espectro cru com uma pré marcação das partículas, e em A.1b os conjuntos identificados usando <i>machine learning</i>	88
A.2 Histograma de identificação de partículas, a partir do conjunto 1 identificado na figura A.1b. Em a temos o primeiro pico que corresponde ao estamos fundamental do ^{14}N e em b temos o primeiro estado excitado do ^{14}N	88
A.3 Painel acima mostra a localização dos núcleos usados para o treino da rede neural. No painel de baixo temos o erro entre a previsão e o valor experimental da energia de ligação do núcleo para os núcleos usados como dados de validação. σ é o erro quadrático médio da rede neural.	89
A.4 Previsões para o raio de carga para isótopos do chumbo ($Z = 82$) para diferentes modelos teóricos ou que usam redes neurais. A previsão que contém barras de erro é a que foi brevemente descrita no texto.	90
A.5 Meias-vidas de decaimento β para isótonos com $N = 126$. A região hachurada verde mostra as previsões de uma rede neural. A região hachurada em azul mostra os resultados da mesma rede neural, porém seus dados de aprendizado são estendidos para incluir três meias-vidas extras de decaimento β para cada isótopo (indicado por círculos abertos) em direção à <i>drip-line</i> de nêutrons [85].	91
A.6 Projeções no plano xy de partículas dentro do alvo ativo, onde quanto mais escura for a cor, mais carga tem o ponto, e quanto mais clara a cor, menos carga tem o ponto. O objetivo da rede neural pode ser classificar corretamente se a imagem à direita corresponde à uma trajetória de um próton, carbono ou outra partícula, ou pode ser uma rede neural para classificação binária caso seja necessário classificar apenas entre próton ou carbono [86].	92

Capítulo 1

Introdução

Um dos principais objetivos das investigações realizadas na área de física nuclear é entender a estrutura do núcleo. Apesar do sucesso de vários modelos, tais como modelo de camadas, para explicar as estruturas de núcleos estáveis, os núcleos instáveis ou exóticos, ricos ou pobres em nêutrons, continuam sendo um grande desafio para nossa compreensão.

Os núcleos leves radioativos são de grande interesse para a astrofísica nuclear [1], onde processos de captura rápida de nêutrons e prótons (que ocorrem em eventos explosivos de novas ou supernovas) envolvem os núcleos radioativos longe da região de estabilidade. Conhecer as propriedades desses núcleos, como massa, probabilidades de decaimento, seções de choque de captura e de breakup é fundamental para o entendimento da vários eventos astrofísicos [1, 2]. A figura 1.1 mostra parte da tabela de nuclídeos, onde é mostrado núcleos longe da região de estabilidade, com a informação da energia de separação do próton (S_p).

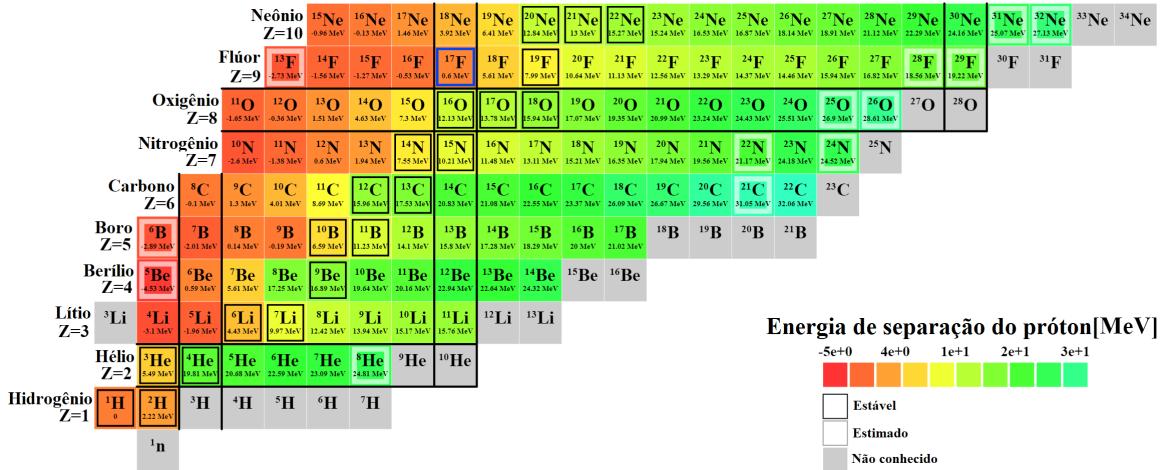


Figura 1.1: Tabela de nuclídeos para elementos leves, indicando a energia de separação de um próton em MeV. O núcleo estudado nesse trabalho é o ^{17}F (destacado pelo quadrado em cor azul), com $S_p = 600$ keV. [3]

Para investigar a estrutura de núcleos ricos em prótons ou em nêutrons, pode-se usar reações nucleares como o espalhamento elástico, transferência ou breakup [4]. Em particular, a reação de breakup é de grande importância para o estudo da estrutura dos núcleos radioativos ricos em prótons ou em nêutrons que possuem uma forte estrutura de cluster do tipo caroço + partículas de valência, onde as partículas de valência são fracamente ligadas [4, 5]. Quando a energia de ligação dessas partículas de valência é muito baixa, da ordem de centenas de keV até poucos MeVs, elas podem orbitar o caroço a grandes distâncias, formando uma configuração conhecida como "estrutura halo". A reação estudada nessa dissertação é a reação de breakup $^4\text{He}(^{17}\text{F}, ^{16}\text{O}+p)^4\text{He}$, onde o ^{17}F é um núcleo rico em prótons que forma uma estrutura halo formada por um núcleo que pode ser descrito como um núcleo de ^{16}O mais um próton fracamente ligado ($S_p = 600$ keV) [5].

Para melhor caracterizar o mecanismo de uma reação de breakup, a identificação e detecção de ambos fragmentos da dissociação é muito importante. Para tanto equipamentos e sistemas de detecção complexos e sofisticados tem sido desenvolvidos. Um desses equipamentos é o Alvo Ativo. Conforme está explicado com detalhes ao longo dessa dissertação, o alvo ativo é um aparato que funciona tanto como alvo como sistema de detecção. O alvo ativo permite o uso de um gás específico que serve tanto quanto alvo quanto meio detector. Isso permite a detecção de múltiplas reações nucleares ao mesmo tempo, com a capacidade de medidas completas da cinemática das reações [6, 7, 8]. Com o alvo ativo é possível determinar as trajetórias tridimensionais das partículas envolvidas numa reação nuclear e reconstruir o respectivo vértice (posição da reação).

Nos últimos anos, alvos ativos envolvendo câmaras de projeção no tempo, ative-target time projection chambers (AT-TPCs), se tornaram importantes e relevantes para o estudo

de núcleos exóticos em física nuclear [6]. Diversos desses tipos de equipamentos foram desenvolvidos em diferentes laboratórios de física nuclear pelo mundo [8, 9, 10].

O sistema de detecção de TPCs, usualmente, é baseado na ideia de se detectar os elétrons provenientes da ionização do gás. Para tanto, foi desenvolvido um dispositivo que combina o micromegas (Micro-MEsh Gaseous Structures) [11] e o GEM (Gas Electron Multiplier) [12]. Esse dispositivo possui uma alta granularidade do plano detector, da ordem de 10^3 a 10^4 canais [6]. Com isso, experimentos que envolvem TPCs produzem enormes quantidades de dados [8, 13]. Por exemplo, o experimento analisado neste trabalho gerou cerca de 3 TB de dados crus em alguns dias de medida. Devido à grande quantidade de dados produzidos, a análise precisa ser dividida em diversas etapas, de modo que a eficiência e tempo computacional têm papel fundamental no processo. Nesse sentido, o uso de algoritmos como de machine learning pode trazer vantagens significativas para a análise. Esses algoritmos, por serem muito mais rápidos do que análise baseadas em algoritmos de programação convencional, podem viabilizar a análise dessa quantidade de dados num tempo razoável. Um dos objetivos desse trabalho foi exatamente o de desenvolver esse tipo de técnica para análise de dados obtidos de experimentos com alvos ativos. Alguns desses códigos e parte da análise desta dissertação já foram publicados em revistas indexadas internacionais [6, 14].

A utilização de técnicas de machine learning já está sendo amplamente utilizada nas mais diversas áreas de nossa vida cotidiana (softwares de detecção de spam, sistemas de recomendação, marcação em fotos de redes sociais, assistentes pessoais ativados por voz, carros autônomos, smartphones com reconhecimento facial e muito mais). Essas técnicas estão agora sendo desenvolvidas e aplicadas para análise de dados obtidos de experiências científicas.

A dissertação está esquematizada da seguinte forma: no capítulo 2 está feita a descrição do experimento cujos dados foram analisados; no capítulo 3 está feita uma breve descrição do que é machine learning com exemplos de algoritmos e métodos utilizados; O capítulo 4 foi dedicado para a análise dos sinais (pulsos) gerados no experimento; No capítulo 5 está descrita a análise das nuvens de pontos reconstruídas a partir dos sinais; No capítulo 6 foi feita a construção das distribuições angulares bem como a análise e comparação com experimentos anteriores relacionados; Por fim, no capítulo 7 está a conclusão do trabalho.

Capítulo 2

O experimento

Esse trabalho corresponde a análise de dados obtidos da experiência onde foi medida a reação de breakup para o sistema $^{17}\text{F} + ^4\text{He}$. Nessa experiência utilizamos um feixe de ^{17}F , que é um núcleo radioativo com tempo de vida média de 64.37 segundos, incidindo sobre um alvo gasoso de ^4He . A experiência foi realizada em outubro de 2019 na University of Notre Dame, Estados Unidos. O feixe radioativo de ^{17}F foi obtido com o sistema de produção chamado TWINSOL [15] e conduzido até o alvo ativo pAT-TPC (prototype Active Target - Time Projection Chamber) [13]. Neste capítulo está descrito como o feixe radioativo ^{17}F foi obtido e como os produtos da reação de breakup foram medidos.

2.1 Produção do feixe secundário ^{17}F usando o sistema TWINSOL

O feixe radioativo ^{17}F foi produzido em voo usando o sistema TWINSOL [16, 17]. Um feixe primário de ^{16}O foi acelerado a uma energia de 70 MeV e conduzido até a câmara de produção com uma intensidade da ordem de 200 nA. O alvo de produção consiste de uma célula gasosa, preenchida com gás de deutério à uma pressão de 1 atm. A partir da reação de transferência de um próton ou um nêutron do feixe primário (^{16}O) com o alvo de produção (deutério), partículas como ^{17}F e ^{17}O foram produzidas [16, 15]. Essas partículas são selecionadas pelo sistema de duplo solenoides formando um feixe com essas partículas [15, 18]. A figura 2.1 mostra o desenho do sistema TWINSOL acoplado com o pAT-TPC.

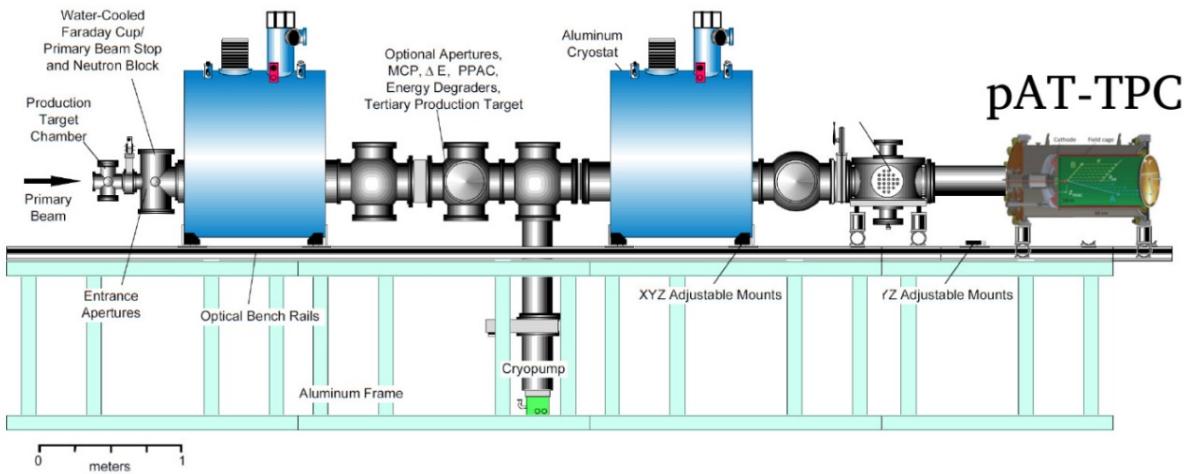


Figura 2.1: Desenho do TWINSOL à esquerda e do pAT-TPC à direita. O feixe estável de ^{16}O entra à esquerda do TWINSOL, produzindo no alvo de produção o feixe secundário ^{17}F que irá ser conduzido até o alvo ativo pAT-TPC. Todo o sistema está localizado na University of Notre Dame.

O TWINSOL é um sistema de produção de feixes radioativos em voo que possui dois solenoides supercondutores alinhados que são usados para produzir, coletar, transportar, focar e selecionar feixes estáveis e radioativos. O sistema se baseia na seleção de partículas a partir da sua rigidez magnética ($B\rho$) [15, 18, 19]. Cada solenoide possui 15 cm de raio interno e 1 m de comprimento [15]. O fato de ser um solenoide finito faz com que surjam efeitos de borda na componente radial do campo magnético do solenoide, cujo efeito é fazer com que o solenoide seja capaz de selecionar e focalizar partículas [18]. Para entender melhor o efeito de borda no campo magnético, e consequentemente o funcionamento do TWINSOL, simulações computacionais usando a biblioteca GEANT4 [20] foram feitas usando a geometria do sistema “irmão” do TWINSOL, o Radioactive Ion Beams in Brasil (RIBRAS), que também possui dois solenoides supercondutores alinhados [18, 21]. A figura 2.2 mostra a geometria usada na simulação, onde os solenoides são de cor verde focalizando as partículas de cor laranja em um ponto do plano focal em vermelho. O campo magnético usado na simulação é função da posição do eixo, de cada solenoide, e está mostrado na figura 2.3.

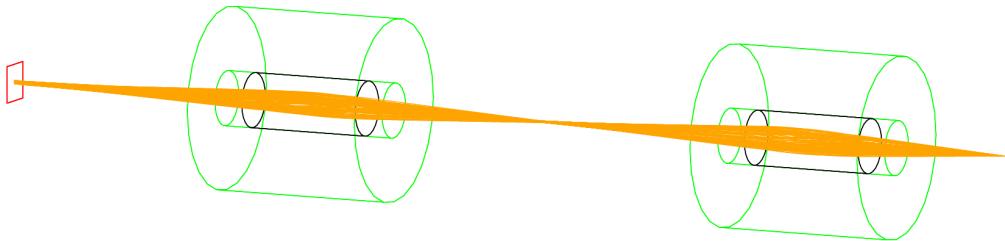


Figura 2.2: Simulação computacional do sistema RIBRAS, onde as partículas carregadas em laranja surgem do ponto à direita da figura e passam pelos dois solenoides em verde, para então serem focalizada em um ponto do plano focal em vermelho. A parte em preto dos solenoides corresponde aos limites físicos da bobina [18].

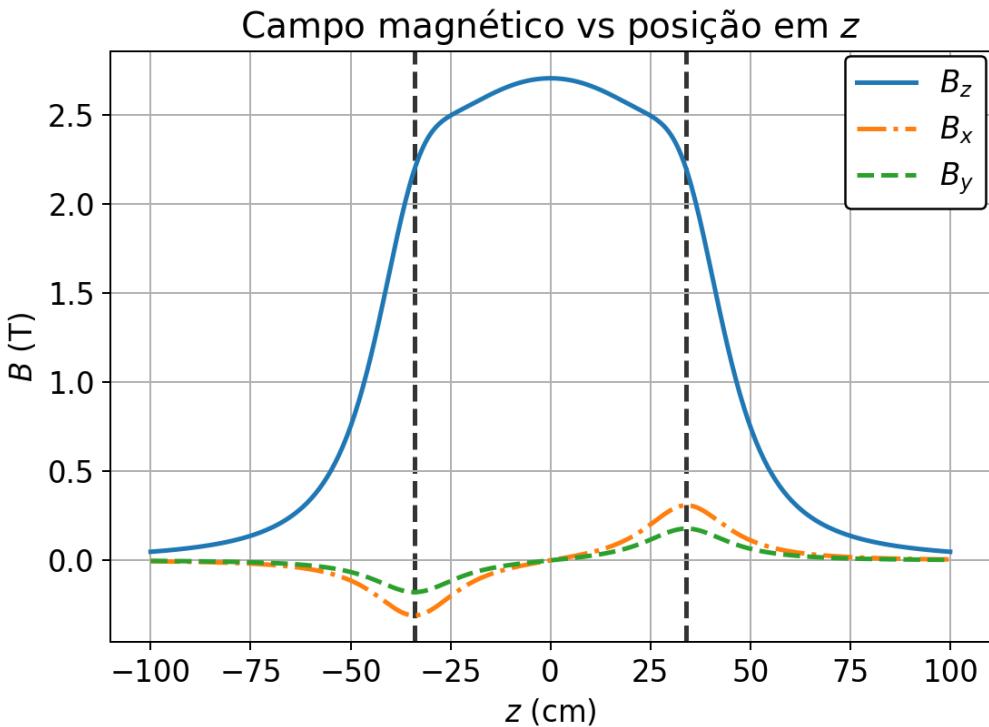


Figura 2.3: Valor do campo magnético B em tesla em função da posição em z em centímetro da bobina. A linha vertical tracejada preta indica o limite físico da bobina. O campo foi calculado à uma distância de 8 cm do eixo do solenoide. É possível ver claramente o efeito de borda que há em um solenoide finito [22].

Apesar de não ser evidente na figura 2.2, a trajetória das partículas dentro do solenoide são helicoidais devido à força de Lorentz e possuem uma determinada frequência de ciclotrônio [18]. Além disso, cada solenoide se comporta como uma lente grossa usada para focalizar os feixes. Em uma aproximação de um solenoide como uma lente grossa, o foco depende da rigidez magnética da partícula através da relação [16, 19]:

$$\frac{1}{f} = \frac{B_z^2}{(B\rho)^2}, \quad (2.1)$$

onde f é o ponto focal, B_z a componente z do campo magnético, e $B\rho$ é dado por:

$$B\rho = \frac{mv}{q} = \frac{\sqrt{2mE}}{q}, \quad (2.2)$$

onde E é a energia, m sua massa e q seu estado de carga.

No experimento, os campos magnéticos dos solenoides foram ajustados para focalizar o feixe de ^{17}F dentro do pAT-TPC, com energia de 51 MeV e intensidade da ordem de $10^2 \sim 10^3$ partículas por segundo. No entanto, partículas com energias e massas diferentes mas com o mesmo $B\rho$ (ou valores próximos) do feixe de interesse poderiam ser também selecionadas pelos solenoides. Isso faz com que não seja possível obter um feixe de ^{17}F com 100% de pureza, e sim um coquetel de partículas [19]. O coquetel de feixe produzido nesse experimento tinha 54% de ^{17}F , 41% de ^{16}O e cerca de 5% de ^{17}O . A figura 2.4 mostra o espectro biparamétrico de identificação de partículas obtido durante o experimento, onde é possível identificar as partículas que estão presentes no feixe (coquetel de partículas). Por fim, o feixe produzido pelo TWINSOL foi conduzido até o pAT-TPC.

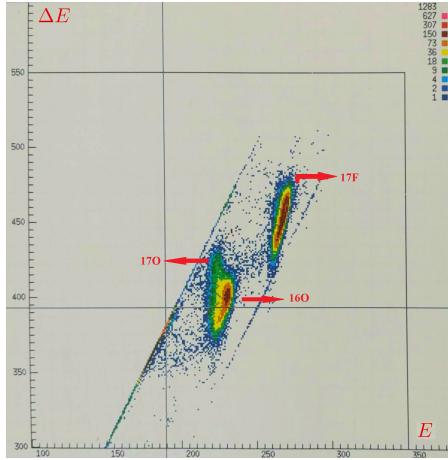


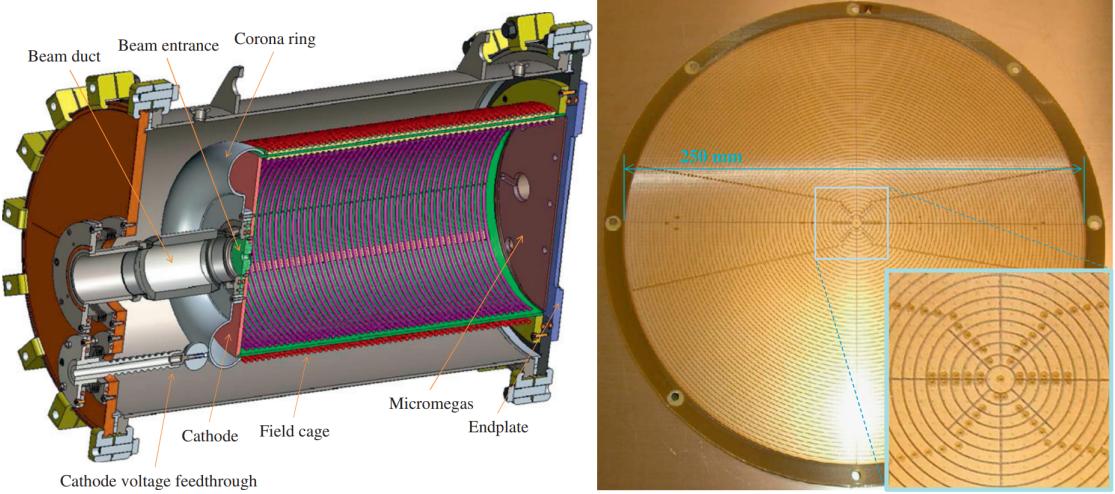
Figura 2.4: Espectro biparamétrico ΔE - E de identificação de partículas. Nele é possível identificar que o feixe possui a presença de ^{17}F , ^{16}O e uma pequena parte de ^{17}O .

Para identificar essas partículas do coquetel de feixe um sistema de detectores, formando um telescópio E - E_{residual} , foi posicionado à 50 cm da janela do pAT-TPC, em zero graus com relação ao eixo z da câmara. Uma vez preparado o feixe, ele foi removido. O espectro biparamétrico formado pela combinação dos sinais ΔE versus $E_{\text{total}} = \Delta E + E_{\text{residual}}$, permite a identificação das partículas.

2.2 O alvo ativo pAT-TPC

O sistema de detecção utilizado nessa experiência foi o alvo ativo do tipo pAT-TPC. Alvos ativos vêm sendo cada vez mais utilizados em experimentos para investigações de reações nucleares [6], dentre os diversos laboratórios que utilizam alvos ativos podemos citar o TexAT [10] e o ACTAR [23]. A principal razão é que esses alvos funcionam também como detectores permitindo uma total identificação das partículas e de suas trajetórias dentro do alvo.

A figura 2.5a mostra o desenho esquemático do pAT-TPC, que foi o alvo ativo utilizado no experimento. O detector possui uma cela cilíndrica de 50 cm de comprimento e 28 cm de diâmetro, onde o seu eixo (direção z) é alinhado com o eixo do feixe [13], que passa pela câmara de íons no duto central. Para que o gás (utilizado como alvo) seja confinado dentro dessa câmara, utilizamos janelas finas o bastante para permitir a passagem do feixe, mas grossas o suficiente para o confinamento do gás. O feixe de ^{17}F , com energia inicial de 51 MeV, entra na câmara passando pela janela. O feixe radioativo de ^{17}F , com energia inicial de 51 MeV, perde energia durante a passagem pela janela (feita de PPTA - p-phenylene terephthalamide - com $12\ \mu\text{m}$ de espessura) do pAT-TPC ficando com 34.76 MeV. Nesse experimento, a câmara foi preenchida com ^4He gasoso puro à uma pressão de 350 Torr que serve tanto como alvo para as reações nucleares, quanto para a própria medição e detecção dos produtos da reação [13, 24]. Tanto o feixe quanto as partículas originadas pelas reações que possam ocorrer ionizam o gás e os elétrons que surgem dessa ionização são conduzidos por um campo elétrico de 1 kV/cm perpendicular ao eixo da câmara até o plano detector (*pad plane*), o *micromegas* [11], localizado no final da câmara, mostrado na figura 2.5b.



(a) Visão transversal do pAT-TPC. O gás é preenchido dentro da cela que possui um campo elétrico perpendicular ao plano do micromegas, à direita da figura. O feixe incide na câmara entrando pelo duto de feixe à esquerda da figura.

(b) Foto do micromegas. O detector é multi-pixelado com uma maior densidade no centro, parte destacada na imagem. O *pad* central tem diâmetro de 5 mm enquanto que as faixas coaxiais possuem passo de 2mm [8, 7].

Figura 2.5: Figura esquemática do pAT-TPC e o detector micromegas[13].

O micromegas é um dispositivo de amplificação de elétrons, que consiste em um plano detector com 2048 canais (pads) triangulares (ver o design do plano detector na figura 2.6 com eletrônica independente, que usa o Generic Electronics for TPCs (GET) [12]. Detalhes sobre a eletrônica podem ser encontrados nas Refs. [12, 7]. Cada pad do micromegas possui uma posição (x, y) fixa e a terceira coordenada z é determinada a partir do tempo de deriva dos elétrons no gás [13, 24, 8, 7]. Isso só é possível pois a velocidade de deriva (drift) dos elétrons é constante [25], portanto a posição em z da partícula é diretamente proporcional ao tempo de deriva. Esse princípio que deu origem ao nome de Time Projection Chamber, pois o evento é projetado no tempo de deriva dos elétrons no gás.

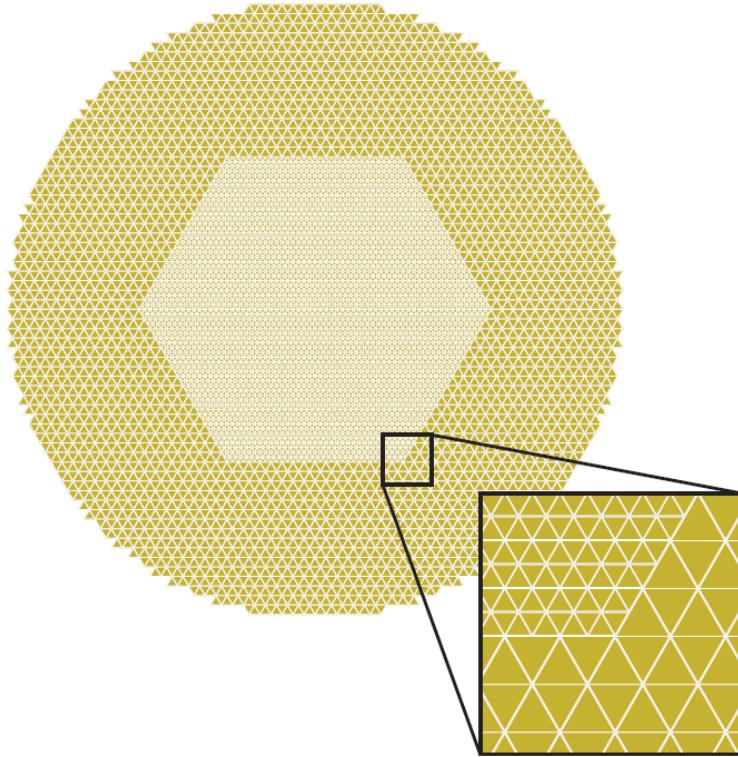


Figura 2.6: Design do plano detector. A densidade de pads é maior na região central. Com o zoom em um dos vértices da parte hexagonal é possível ver o formato triangular dos pads.

A coordenada z depende da velocidade de deriva (drift velocity) dos elétrons no gás. A equação 2.3 (equação de Langevin) descreve o movimento de um elétron com massa m e carga e sujeito a um campo elétrico e magnético [25]

$$m \frac{d\vec{v}}{dt} = e (\vec{E} + \vec{v} \times \vec{B}) - \frac{m}{\tau} \vec{v}, \quad (2.3)$$

onde \vec{E} é o vetor campo elétrico, \vec{B} o vetor campo magnético, \vec{v} é o vetor de velocidade do elétron e τ é o tempo de colisão médio, que depende das propriedades termodinâmicas do gás. No caso deste experimento, \vec{B} é zero e a solução estacionária para a velocidade de drift do elétron é

$$\vec{v} = \frac{\tau}{m} e \vec{E}. \quad (2.4)$$

A velocidade de deriva depende das propriedades termodinâmicas do gás (temperatura, pressão) e também de sua condutividade elétrica [25]. Isso significa que a calibração da velocidade não depende só do campo elétrico, mas também das propriedades do gás dentro do alvo ativo [13, 25]. Para acharmos a coordenada z , basta integrar a equação 2.4 para obter

$$z = \frac{\tau}{m} e \vec{E}(t - t_0), \quad (2.5)$$

onde no tempo $t_0 = 0$ o elétron está no plano do detector ($z = 0$).

A velocidade de deriva do elétron no gás de ${}^4\text{He}$ puro deveria ser sempre constante, se as condições permanecessem as mesmas durante toda o experimento. No entanto, nas medidas desse experimento, essa velocidade variou um pouco a cada run (conjunto de eventos para serem analisados). A figura 2.7 mostra a velocidade de deriva obtida para cada run (~ 1 h) do experimento.

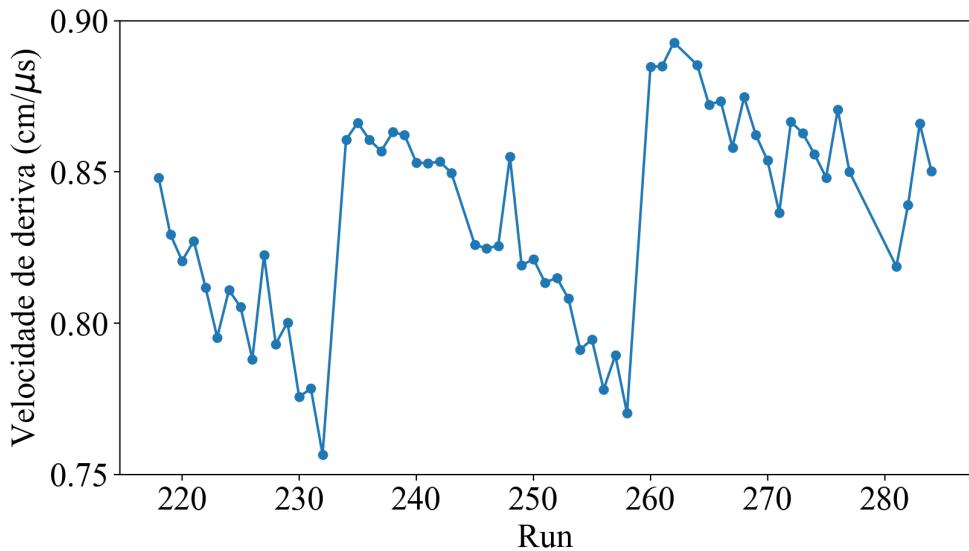


Figura 2.7: Gráfico de velocidade de deriva dos elétrons a cada run. O tempo de duração de cada run foi de aproximadamente uma hora.

Pela figura 2.7 é perceptível que a velocidade de deriva dos elétrons no gás teve uma variação por volta do 10% durante o experimento. A queda na velocidade ocorre, por exemplo, por problemas relacionados à impurezas no gás devido à filtragens de ar dentro do gás (ou outgassing) de alguns materiais dentro do alvo. Foi necessário corrigir os dados experimentais run por run a partir desses valores de velocidade de deriva.

Para o run 218, a velocidade de deriva dos elétrons foi aproximadamente de $0.85 \text{ cm}/\mu\text{s}$. Isso significa que os elétrons produzidos próximo na janela de entrada do detector percorrem os 50 cm da câmara em cerca de $59 \mu\text{s}$. Dividindo esse tempo pelos 512 canais (largura de cada bin dos pulsos gerados), tem-se que cada canal (time bucket) possui cerca de 115 ns de largura.

O pAT-TPC conta com uma camada extra de thick gems acoplada ao detector micromegas. Thick gems usam do fato de que, no momento em que o elétron passa para uma região de campo elétrico ordens de grandeza maior que de sua origem, ocorre a

ionização secundária (quando o elétron ioniza o gás). Isso provoca o que é chamado de avalanche de elétrons, amplificando a intensidade do sinal recebido [12]. A camada com thick gems fica por volta de $100 \sim 120 \mu\text{m}$ do pad plane, com um campo elétrico 10 vezes maior que o campo elétrico da câmara. A figura 2.8 mostra a esquematização do micromegas, onde na eletrônica de saída é produzido um sinal em função do tempo.

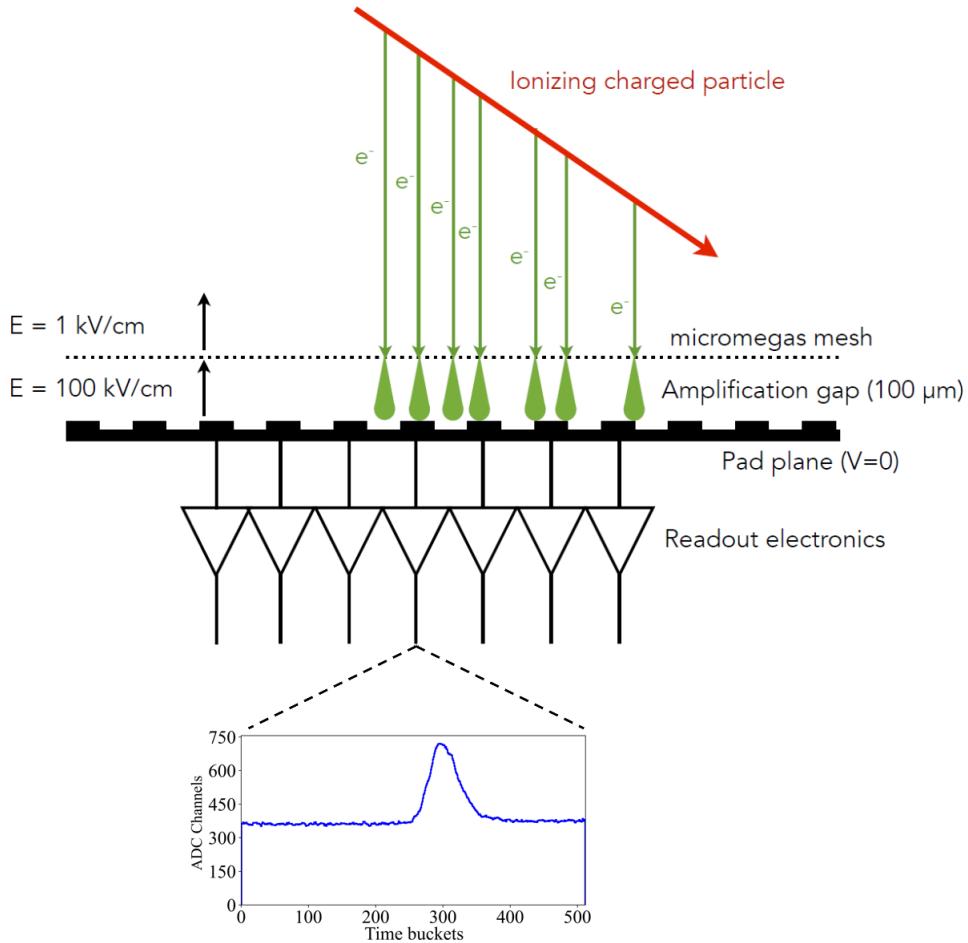


Figura 2.8: Plano do micromegas com a esquematização das thick gems. Os elétrons quando passam para um campo elétrico mais intenso ionizam o gás, produzindo ainda mais elétrons (evento chamado de avalanche de elétrons). Cada canal da eletrônica de saída produz um pulso como mostrado na parte de baixo da figura.

Cada interação de uma partícula carregada com o gás (liberação de elétrons por ionização do gás) é detectada como um pulso eletrônico, onde o centroide corresponde ao tempo de deriva. A carga acumulada Q dessa interação é a área do pulso associado ao centroide. Cada centroide então representa um ponto no espaço (x, y, t, Q) . Um exemplo de evento reconstruído está na figura 2.9.

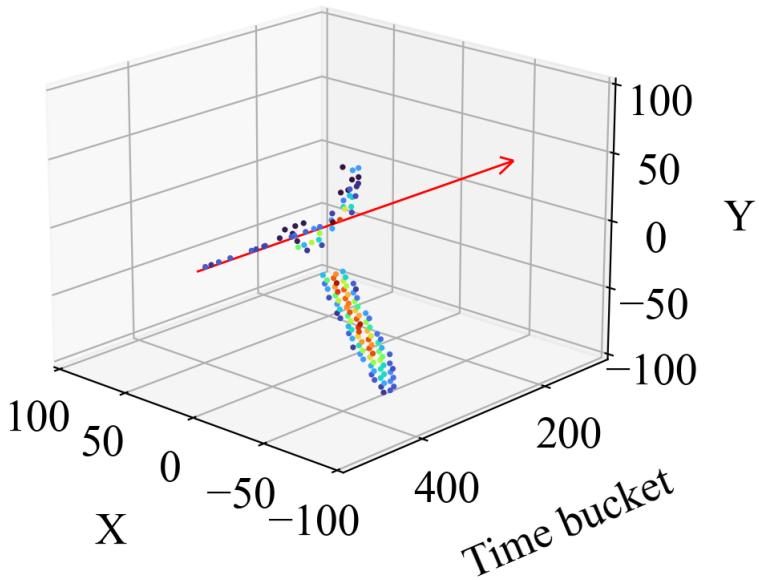


Figura 2.9: Evento reconstruído a partir da análise dos pulsos gerados pelo micromegas. A cor representa a carga integrada de cada ponto de interação com o gás.

Cada evento produz cerca de 300 pulsos. Para que fosse possível reconstruir as trajetórias das partículas, foi preciso analisar cada um desses 300 pulsos de todos os eventos da trajetória. No entanto, o número de evento reconstruídos é da ordem de milhões, portanto a quantidade de sinais que precisam ser analisados é gigantesca, em comparação com experimentos em física nuclear onde apenas alguns canais de detecção são utilizados, gerando um evento por canal. É essa quantidade gigantesca de dados que criou a necessidade de desenvolvimento de algoritmos com alta eficiência em tempo para que a análise seja muito mais rápida. Para a análise completa do nosso experimento foram seguidas as seguintes etapas:

- Análise dos pulsos de cada interação das partículas com o gás. Isso envolve remover o fundo, localizar os picos e obter os tempos e carga integrada de cada caso;
- Reconstruir eventos (trajetória das partículas) em 3D (nuvens de pontos) a partir da análise de sinais. As nuvens de pontos precisam ser analisadas com algoritmos de reconhecimento de padrões que permitem ajustar as trajetórias das partículas em 3D;
- Reconstruir a cinemática das partículas com as trajetórias e energia depositada no gás. Isto permite obter as distribuições angulares.

A descrição completa da análise dos pulsos, reconstituição de eventos, reconstrução da cinemática, gráficos das distribuições angulares e resultados são apresentadas nos próximos capítulos.

Capítulo 3

Desenvolvimento de ferramentas de *machine learning* para análise de dados

Uma das possibilidades para que possamos analisar a grande quantidade de dados gerados em experimentos com alvo ativo é a utilização de técnicas de machine learning. Nesse capítulo explicamos a metodologia usada para a implementação dessas ferramentas para a análise dos dados obtidos na experiência realizada com $^{17}\text{F}+{}^4\text{He}$. O apêndice A mostra algumas aplicações extras de machine learning na física nuclear.

Basicamente, machine learning é a utilização de algoritmos para extrair informações de uma grande quantidade de dados brutos e representá-los através de algum tipo de modelo matemático. Machine learning é, portanto, uma técnica onde os algoritmos (baseados em redes neurais) analisam os dados aprendendo (ou sendo ensinado) com eles, sem que tivessem sido explicitamente programados para isso [26]. A ideia de machine learning não é nova e surgiu na década de 50 [27, 26]. No entanto, somente nos dias de hoje, com a possibilidade de processamento paralelos de CPU é que ela pode ser aplicada. Essa ideia de processamento foi também inspirada no funcionamento da rede neural biológica, onde os neurônios interagem enviando sinais através de conexões que se desenvolvem com treinamento. Aqui as interações seriam os sinais na forma de funções matemáticas enviadas ou trocadas entre as camadas, que poderiam ser associados aos neurônios. Aqui então, uma rede neural seria uma sucessão de camadas interligadas por operações e funções matemáticas. Isso inspirou o uso do modelo matemático simples de uma função linear nos parâmetros para um neurônio artificial ou camada [27]:

$$y = f \left(\sum_{i=1}^n \omega_i x_i + b \right) = f(z), \quad (3.1)$$

onde y é o resultado da função matemática da interação entre os neurônios (camadas),

dada pela função de ativação f . Essa função f é dada pela soma ponderada da variável de entrada x_i (fornecida pelos outros n neurônios) com um peso w_i . O termo b_i corresponde ao parâmetro bias. A ideia é fazer um neurônio receber a informação de todos os outros neurônios da camada anterior, fazendo uma média ponderada (onde o peso que será estimado pelo algoritmo de machine learning) e somando com um termo independente (bias, que também é estimado). Os parâmetros ω_i e b_i serão estimados através de um determinado procedimento, chamado de minimização (ou treino da rede neural).

3.1 Tipos de redes neurais

Como mencionamos, a ideia do machine learning é baseado na ideia da utilização de redes neurais. Uma rede neural artificial, Artificial Neural Network (ANN), é um modelo computacional que consiste de camadas de neurônios. ANNs foram desenvolvidas para o estudo de inteligência artificial [26, 28]. ANNs consistem principalmente numa camada de entrada (input layer), uma camada de saída (output layer) e eventuais camadas entre essas duas, chamadas de camadas ocultas (hidden layers). Os tipos mais comuns de redes neurais aplicadas a análise de dados são:

Feed-Forward Neural Networks

A Feed-forward neural networks (FFNN) é a primeira e mais simples rede neural desenvolvida [29, 30]. Nessa rede a informação se move apenas para frente através de camadas (da camada de entrada até a camada de saída). A figura 3.1 mostra uma representação de rede, onde os neurônios são representados por círculos, enquanto que as linhas mostram as conexões entre os neurônios. Cada neurônio recebe informação de todos os neurônios da camada anterior, portanto a rede é chamada de totalmente conectada, fully-connected (FC), FFNN.

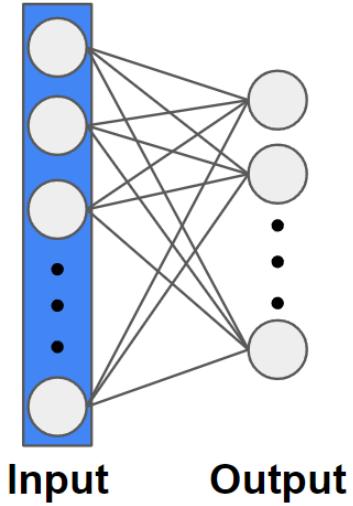


Figura 3.1: Exemplo de FFNN. A camada de entrada na esquerda propaga a informação para a direita (camada de saída). Todos os neurônios entre camadas estão conectados entre si.

Convolutional Neural Network

Uma variante da FFNN é a chamada de rede neural convolucional, convolutional neural network (CNN). Essa rede consiste em utilizar duas funções convoluídas.

A convolução de uma função $f(t)$ por uma função $g(t)$ é dada por $(f * g)(t)$ e definida como:

$$(f * g)(t) \equiv \int_{-\infty}^{\infty} f(\tau)g(t - \tau)d\tau. \quad (3.2)$$

Para o caso discreto, com g sendo uma função resposta finita de tamanho $2M$ (M é um valor inteiro maior que zero), temos

$$(f * g)[n] = \sum_{m=-M}^{M} f[n - m]g[m]. \quad (3.3)$$

Convoluções são invariantes sobre operações de rotação e translação, portanto são muito utilizadas para processamento de sinais e imagens [31]. Além disso, a convolução pode ser aplicada de forma discretizada sobre um vetor, se transformando numa forma de filtro. Para ilustrar o que significa isso, no caso discreto e unidimensional, a figura 3.2 mostra o processo de convolução de um vetor de tamanho 9 com um filtro de tamanho 3.

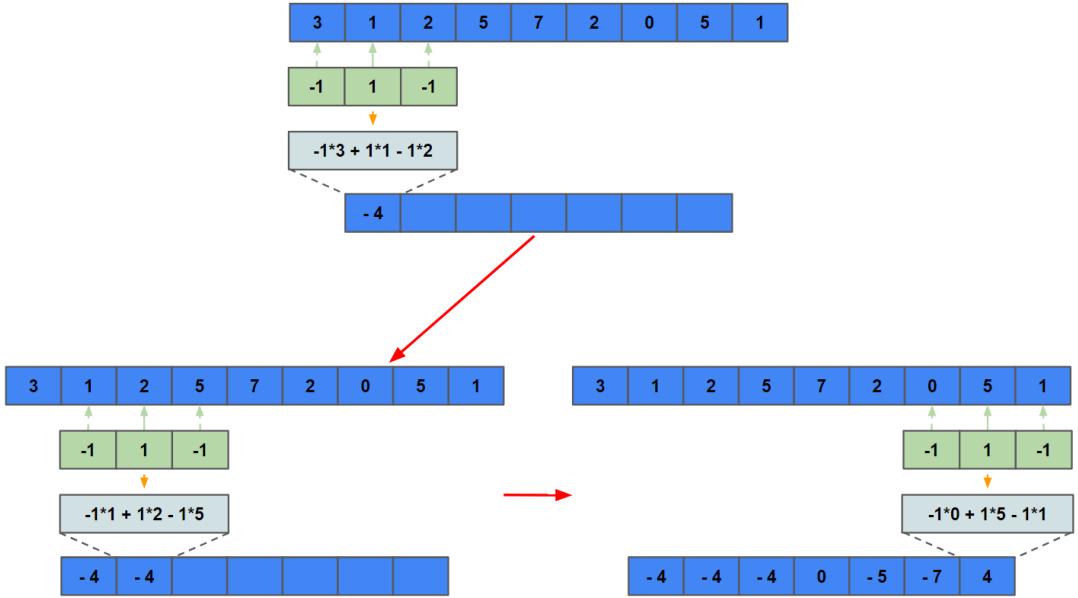


Figura 3.2: Processo de convolução entre sinal azul em cima e o filtro em verde, resultando no sinal azul embaixo. A multiplicação é feita ponto a ponto e está indicada na caixa azul-clara.

Percebe-se que o sinal resultante tem dimensão menor que o sinal original. O filtro (também chamado de kernel) atua em pontos que possuam vizinhos tais que o filtro possa fazer a multiplicação ponto a ponto. Esse tipo de convolução tem o que chamamos de emparelhamento válido ou em inglês “valid padding”. O tamanho n_2 resultante do vetor de saída é

$$n_2 = n_1 - m + 1, \quad (3.4)$$

onde n_1 é o tamanho do vetor de entrada e m o tamanho do filtro (kernel size). Uma alternativa para que o vetor de saída tenha o mesmo tamanho do vetor de entrada é acrescentar zeros em torno da entrada, de forma que o vetor de saída tenha o mesmo tamanho que o vetor de entrada. Nesse caso dizemos que o emparelhamento é igual ou “same padding”. A figura 3.3 ilustra esse processo.

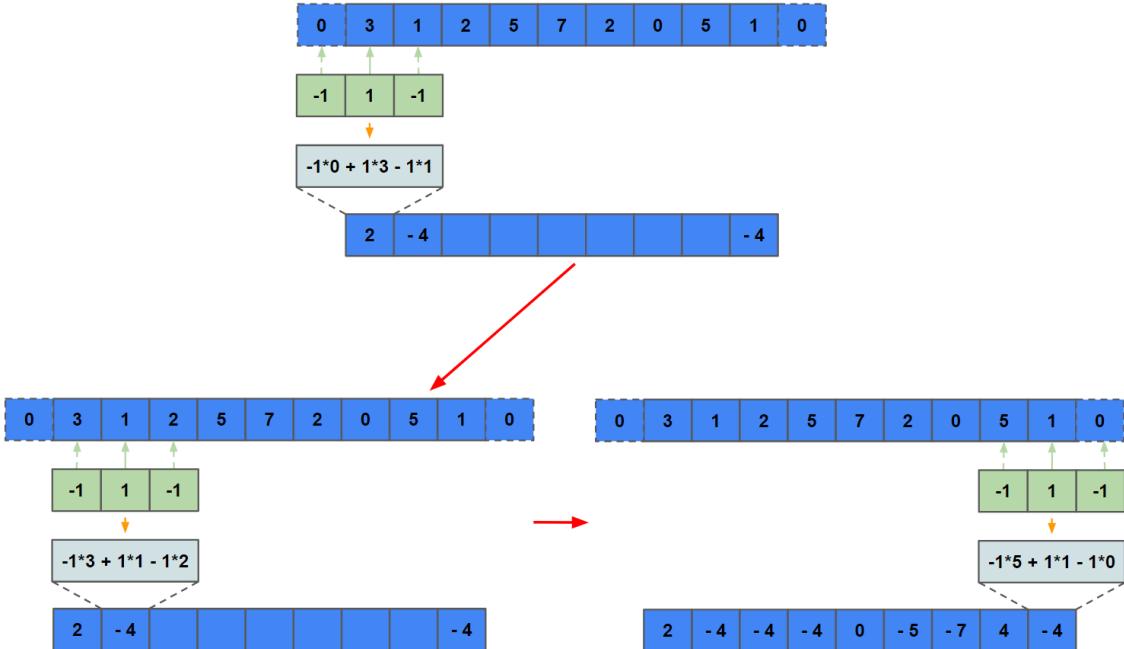


Figura 3.3: Processo de convolução entre o sinal azul em cima e o filtro em verde, resultando no sinal azul embaixo. Agora são acrescentados zeros no inicio e no final do vetor para que o vetor saída tenha o mesmo tamanho do vetor de entrada (nesse caso 9).

No contexto de machine learning (inteligência artificial), não sabemos, a priori, quais os valores dos filtros devem ser utilizados. Temos informações apenas de seus tamanhos e como devem agir. No entanto, podemos estimar os valores dos filtros através do treino da rede neural, para obter o resultado final. Esse treino fornece então os valores dos filtros a serem aplicados que fornecem o resultado esperado.

Cada filtro aplicado gera um mapa característico (feature map), que é o resultado da atuação do filtro em um vetor. Usualmente, em uma CNN se escolhe o tamanho do filtro, padding (valid ou same) e quantos filtros serão aplicados (para saber quantos feature maps serão gerados). Como temos vários mapas gerados por cada filtro, isso acarreta em um aumento de dimensionalidade. Para selecionar (ou filtrar) os mapas são utilizados critérios, como por exemplo o de selecionar valores máximos dos mapas gerados dada uma janela de atuação, ou seja, de quantos mapas serão comparados para a seleção do valor máximo. O Max-Pooling¹ faz isso, selecionando valores máximos para uma determinada quantidade de mapas sendo comparados (pool size).

Existem disponíveis na literatura várias outras arquiteturas de redes neurais que não serão discutidas aqui. Uma descrição dessas arquiteturas podem ser encontradas nas referências [32, 33].

¹O Max-Pooling máximo é um processo de discretização baseado em amostras. O objetivo é reduzir a amostragem de uma representação de entrada, selecionando amostras pelos seus valores máximos.

3.2 Estrutura da rede neural

Em nosso trabalho vamos utilizar uma rede neural supervisionada, que será discutida em mais detalhes nas próximas seções. Mas de uma forma geral, para a construção de uma rede neural é preciso definir sua estrutura. A estrutura da rede neural possui camadas e cada camada pode possuir uma função de ativação. No geral, tanto a camada input quanto a output possuem dimensão fixa. Para cada camada da arquitetura devemos escolher sua função de ativação que dependem dos parâmetros escolhidos. Tanto FNNNs quanto CNNs podem possuir funções de ativação (função f da equação 3.1) para melhorar o treino com dados que não possuem uma dependência linear. Dentre muitas funções de ativação podemos citar a Rectified Linear Units (ReLU)[34], sigmoide [35], linear e tangente hiperbólica [36]. A figura 3.4 mostra os gráficos dessas funções de ativação, onde no eixo x é o argumento e no eixo y o resultado da função.

Funções de ativação

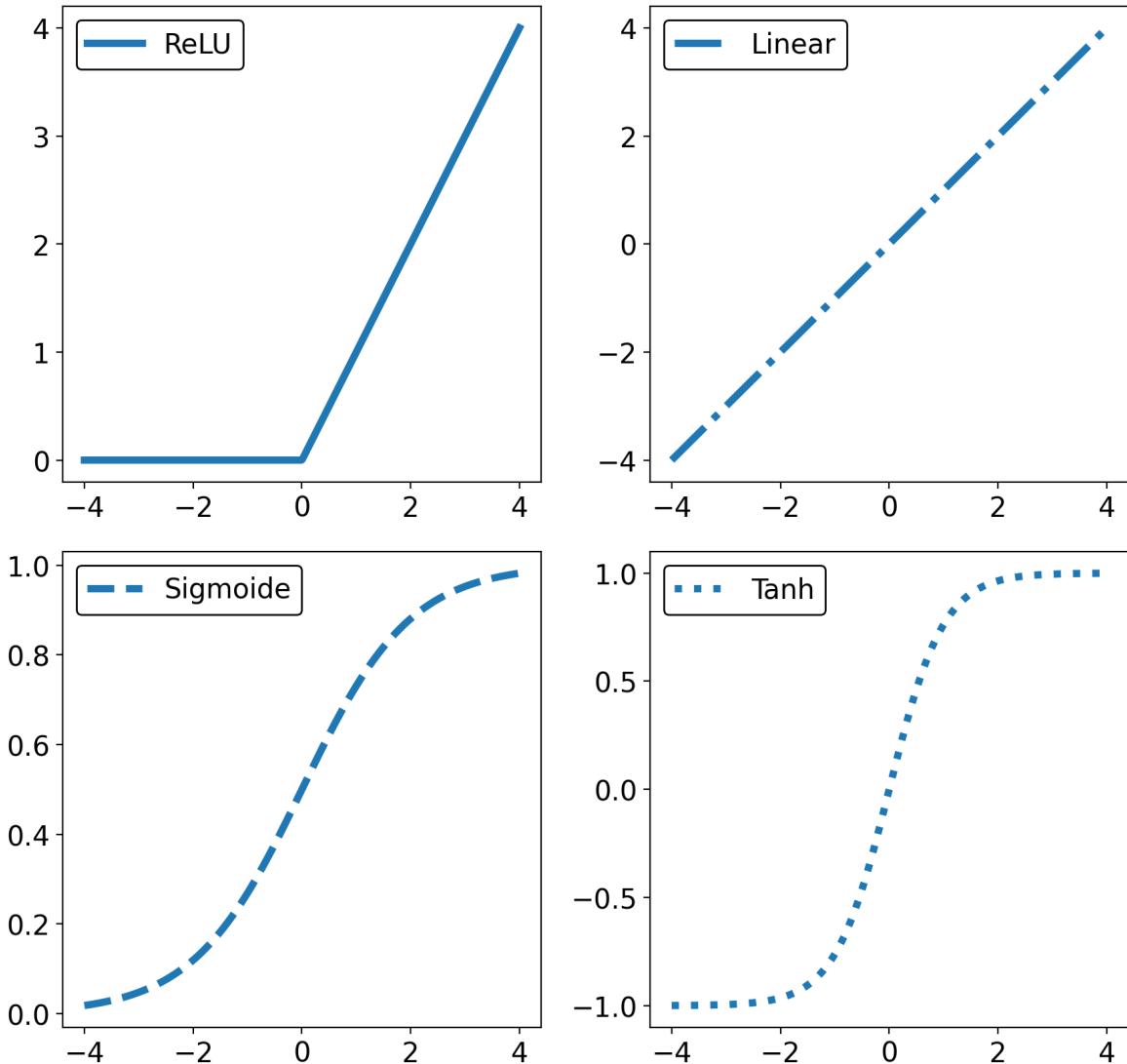


Figura 3.4: Funções de ativação e seus respectivos gráficos.

O próximo passo é definir funções corretivas chamadas função custo (algumas vezes também chamada de função loss) e o otimizador. A função custo tem o papel de retornar valores altos para previsões erradas e valores baixos para previsões corretas. Por exemplo, se queremos treinar uma rede neural para classificação binária (que prevê duas saídas possíveis), devemos usar a função custo chamada de binary cross-entropy dada por [37]

$$C(p(y_i)) = -\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N y_i \log(p(y_i)) + (1 - y_i) \log(1 - p(y_i)), \quad (3.5)$$

onde y_i é o rótulo (label), $p(y_i)$ é a probabilidade do ponto y_i ser 1 e N é o número de pontos. O objetivo da rede neural é achar o mínimo da função $C(p(y_i))$, o que implica

diretamente na melhor solução para o conjunto de dados. Isso é feito pelo método de retropropagação do erro (backpropagation [38]) por um otimizador. Outros exemplos de loss são o erro quadrático médio ou categorical cross-entropy [39].

O otimizador, por sua vez, tem o objetivo de otimizar os parâmetros presentes na rede neural, buscando o mínimo global da função custo, o que nem sempre acontece, pois a minimização pode parar em um mínimo local da função. Existem diversos otimizadores disponíveis na literatura, como por exemplo o Stochastic Gradient Descent (SGD), ADAM, ADAMAX [40], entre outros [41]. Para o SGD, utilizado nesse trabalho, temos que a atualização de parâmetros é dada por

$$\theta_j = \theta_j - \alpha \frac{\partial}{\partial \theta_j} C(\theta), \quad (3.6)$$

onde θ_j é o parâmetro a ser atualizado, α é a learning rate e $C(\theta)$ é a loss que depende dos parâmetros θ .

Para enfim treinar a rede neural, devemos escolher o tamanho das amostras (batch size) que será usada para o treino, por iteração em cada rodada de treino. Por exemplo, se usamos 1000 dados para o treino, e o batch size é 500, cada rodada de treino terá duas iterações. No geral, usamos batch sizes pequenos, pois o consumo de memória é mais eficiente.

Para avaliação da rede neural devemos ainda utilizar dados de validação, que servem para verificar o comportamento da rede neural que está sendo treinada. Esse conjunto de dados usados não é usado para o treino, são usados apenas para verificar possíveis problemas como o overfit. O overfit ocorre quando a rede neural começa a se adequar perfeitamente aos dados de treino, perdendo a capacidade de previsão em dados que não estão sendo usados no treino pela rede neural.

Além dos dados de validação, podemos escolher métricas que auxiliam a visualização do comportamento da rede neural durante o treino e nos retornam informações importantes sobre sua qualidade. Exemplos importantes de métricas são: acurácia binária, erro médio absoluto e acurácia categórica [42]. Por exemplo, caso seja necessário verificar se uma rede neural está fazendo previsões certas em um problema cuja classificação é binária, então a métrica deve ser a acurácia binária. Tudo depende do objetivo da rede neural. Em nosso trabalho utilizamos o erro médio absoluto e acurácia binária.

3.3 Sistemas de *machine learning*

As redes neurais e os procedimentos de validação e treino formam os sistemas de machine learning. Podemos dividir os sistemas de machine learning em quatro tipos:

Aprendizado Supervisionado

Aprendizado supervisionado é quando fornecemos para a rede neural um conjunto de dados para o treino com a solução desejada (chamados de labels). Um uso típico desse tipo de sistema é para problemas de classificação de imagens (identificação de figuras), previsão de valores numéricos etc [26]. Exemplos de algoritmos supervisionados são:

- k-Nearest Neighbors (é necessário saber o número de aglomerados a priori) [43]
- Regressão linear
- Support Vector Machines (SVMs)
- Decision Trees and Random Forests
- Redes neurais

Aprendizado não supervisionado

Aprendizado não supervisionado é quando fornecemos o conjunto de dados sem rótulos ou características a priori. Nesse caso, o sistema deve aprender a realizar uma determinada tarefa sem supervisão. Um problema comum, por exemplo, é quando queremos identificar aglomerados em um conjunto de dados (clustering) [44, 45], ou remover ruído com estruturas chamadas autoencoder¹ [46].

Aprendizado semi supervisionado

Temos ainda o aprendizado semi supervisionado, quando apenas parte do conjunto de dados para o treino possui labels. Isso é comum quando se obtém conjuntos de dados diferentes e apenas parte deles foi classificado [47].

¹Autoencoder é uma técnica de aprendizado não supervisionado para redes neurais aprenderem a compressir e codificar dados de modo eficiente.

Aprendizado por reforço

Aprendizado por reforço é quando um sistema, chamado de *agente*, aprende através do ambiente, realizando ações que maximizam sua recompensa. Por exemplo, caso o sistema realize uma ação incorreta, ele recebe uma penalidade, fazendo com que procure outra maneira de realizar a ação, se essa maneira for a correta o sistema é recompensado [48]. Esse tipo de sistema é muito usado, por exemplo, em automatização robótica, como carros que pilotam sozinhos, robôs que aprendem a andar etc [49].

Alguns usos de machine learning em física nuclear são apresentados no apêndice A.

Em nosso trabalho vamos utilizar técnicas de machine learning para analisar dados de reações nucleares obtidos de medidas com um instrumento específico, alvo ativo.

Capítulo 4

Reconstrução de nuvens de pontos a partir de algoritmos de *machine learning*

Nesse capítulo vamos descrever o procedimento usado para criar as nuvens de pontos (pointclouds) a partir dos pulsos gerados por cada pixel do micromegas, usando algoritmos de machine learning supervisionado.

Algoritmos baseados em CNNs vem sendo usados com relativo sucesso para o processamento e análise de sinais [6], como por exemplo para discriminação de pulsos [50]. CNNs possuem a capacidade de fazer ajustes multidimensionais e aprender padrões complexos. Além disso, CNNs são mais eficientes em tempo para a análise de grandes quantidades de dados em comparação com algoritmos comuns [6].

Para que possamos obter dados de posição, trajetória e energia das partículas nas medidas com alvo ativo precisamos realizar análise dos pulsos medidos. A quantidade de pulsos gerados nesse experimento é da ordem de centenas de milhões. Para a análise completa dos pulsos, são necessárias diferentes etapas que envolvem processos que muitas vezes precisam ser refeitos por causa de algum erro no processo análise. Notar algum erro no processo, ou ter que mudar algum parâmetro da análise, significaria ter que analisar novamente os dados, sendo um processo muito custoso em tempo.

O uso de algoritmos de CNNs tem o objetivo de diminuir o tempo consumido para a análise dos pulsos. As redes neurais criadas são treinadas uma única vez e podem ser utilizadas de modo separado e/ou acoplado [6], como está mostrado na sequencia do capítulo.

Os pixels do micromega geram pulsos que são digitalizados. Esses pulsos digitalizados formam espectros temporais que possuem picos sobre um fundo. A análise desses es-

pectros temporais (evolução do pulso com o tempo) foi dividida em três etapas: correção do fundo, deconvolução do sinal e identificação de picos. As redes neurais criadas foram supervisionadas, o que significa que foi preciso determinar a entrada (input) e a saída (output) das redes. Para isso foi feito um grande banco de dados, para utilizar no treinamento das redes neurais, que se beneficiam da grande quantidade de dados usada para o treino [26].

Na seção 4.1, está mostrado como o banco de dados para o treino das redes neurais desenvolvidas foi criado, e a construção das redes neurais está na seção 4.2.

4.1 Construção do banco de dados para as redes neurais

Cada um dos pixels do detector micromegas possui uma eletrônica independente que gera pulsos digitais como os mostrados na 4.1. Centenas de sinais como esses são produzidas em cada um dos eventos.

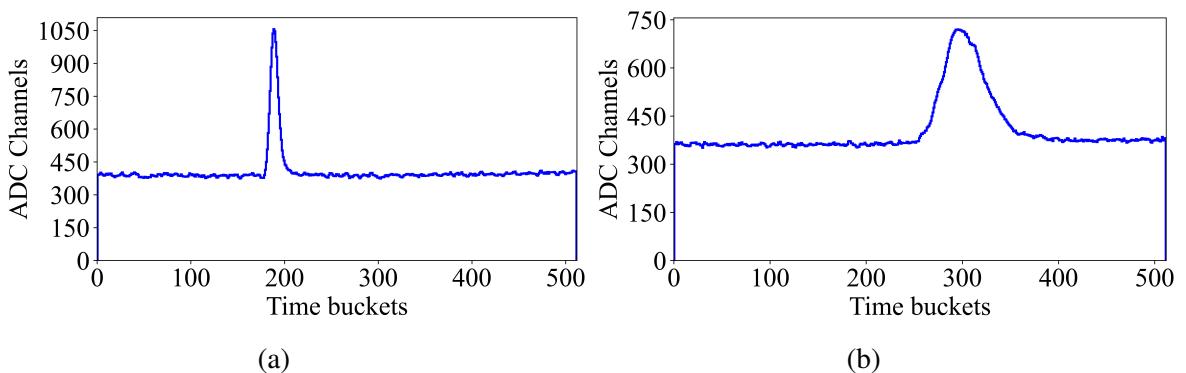


Figura 4.1: Exemplos de sinais produzidos pelos canais do detector. Em 4.1a o sinal possui apenas um pulso, enquanto em 4.1b há vários pulsos em sobreposição, formando um único pulso com largura maior que em 4.1a.

No eixo x , cada um dos 512 time buckets possui largura de cerca de 115 ns . No eixo y tem-se o canal de ADC para cada time bucket. Na figura 4.1a há um sinal com um pedestal (fundo ou baseline) com altura entre 300 e 450, e um pulso estreito em cima. Como mostrado na seção 2, os elétrons que surgiram da ionização do gás foram conduzidos perpendicularmente pelo campo elétrico até o detector. A interação da partícula com o gás é evidenciada justamente pelo pulso presente em 4.1a. O centroide de cada pulso está relacionado ao tempo de deriva dos elétrons (em unidade de time buckets) que é usado para determinar a coordenada z da interação da partícula com o gás. A energia depositada no gás é obtida a partir da área do pulso sem fundo.

Para a figura 4.1a tem-se apenas um pulso estreito, o que corresponde à uma partícula incidindo paralelamente ao plano do detector (perpendicular ao campo elétrico). No caso da figura 4.1b, há uma distribuição ampla do sinal do tempo, o que corresponde à uma partícula incidindo perpendicularmente ao plano do detector. A ilustração desse processo está na figura 4.2, que mostra o processo da passagem de uma partícula carregada e como o sinal é gerado a partir disso.

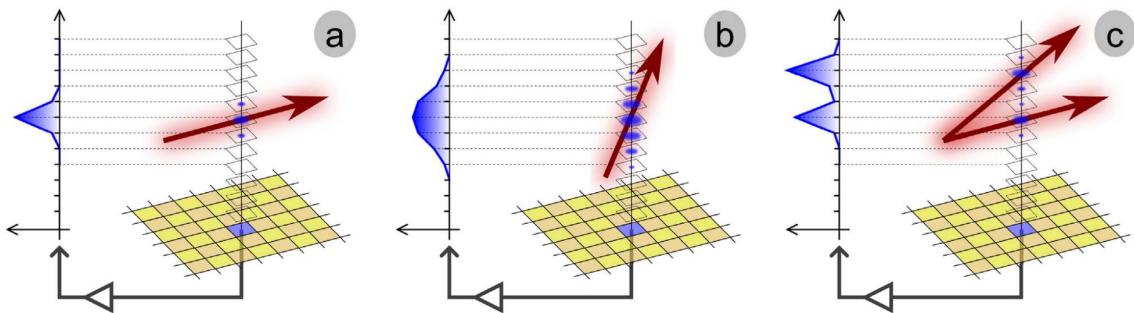


Figura 4.2: Ilustração que mostra a variação no formato da carga coletada a partir da passagem de uma partícula carregada dentro do TPC, onde o plano do detector está embaixo. No lado esquerdo de cada imagem, a distribuição do sinal coletado por um único pad (escuro) do plano de coleta é mostrado (o canal eletrônico de leitura é representado pela seta cinza em negrito). No caso de uma trajetória quase horizontal em relação ao plano do detector (a), o sinal é uma distribuição estreita, enquanto para uma trajetória próxima a uma direção vertical (ou perpendicular) em relação ao detector (b), a distribuição deve ser muito mais ampla (vários pontos de interação da partícula com o gás devem ser extraídos desse sinal). A última imagem ilustra o caso em mais de uma trajetória de partículas contribui para o sinal [12].

Para analisar os pulsos deve-se primeiro remover o fundo (pedestal ou baseline) dos sinais. O sinal de fundo é complexo e pode variar em função do canal e também por evento. O sinal pode ser alterado por flutuações causadas pelo circuito eletrônico e por efeitos sistemáticos gerados pela memória de buffer circular, podendo o tornar não analítico [6, 12]. Após a eliminação do fundo, os sinais foram tratados realizando uma deconvolução, aumentando a resolução dos pico em várias gaussianas com centróides que correspondem a informação temporal do sinal. Essas gaussianas são então usadas para a reconstrução da nuvem de pontos da trajetória das partículas no alvo gasoso. Todo esse processo foi realizado nesse trabalho com algoritmos de machine learning supervisionado que desenvolvemos [6]. Para isso, foi criado um banco de dados que serviu de output e/ou input para o treino das redes neurais.

O processo de criação dos dados para o treino das redes neurais está descrito na seção 4.1.1, enquanto o processo de criação das redes neurais é descrito na seção 4.2.

4.1.1 Estimativa do fundo

Para que pudéssemos realizar a análise dos pulsos temporais, era necessário a eliminação do fundo. A primeira tentativa para estimarmos o sinal sem o fundo foi desenvolvida utilizando-se uma transformada de Fourier e um filtro passa-baixa, que nada mais é do que a função resposta do detector fornecida na Ref. [12]. Para explicarmos o procedimento, vamos primeiramente considerar uma função $f(t)$ qualquer, sua transformada de Fourier é dada por

$$\hat{f}(\nu) = \mathcal{F}[f(t)] = \int_{-\infty}^{\infty} f(t)e^{-2\pi i \nu t} dt. \quad (4.1)$$

Primeiro calculamos a transformada de Fourier $\hat{f}(\nu)$ do sinal, em seguida o multiplicamos pela função resposta do detector $h(\nu)$ dada por [12]

$$h(\nu) = A * \exp(\nu\tau) (\nu\tau)^3 \sin(\nu\tau), \quad (4.2)$$

onde A está relacionado com o ganho de amplificação e τ é o tempo de pico (peaking time), que é o tempo de modelagem da cadeia de amplificação [12]. Do teorema da convolução, temos que [51]

$$\mathcal{F}^{-1}[\hat{f}(\nu)\hat{g}(\nu)] = (f * g)(t) = \int_{-\infty}^{\infty} f(\tau)g(t - \tau)d\tau, \quad (4.3)$$

onde $(f * g)(t)$ é a convolução entre $f(t)$ e $g(t)$. Multiplicar o sinal transformado por $h(\nu)$ e depois inverter a transformação é o mesmo que convoluir o sinal original com a transformação inversa de $h(\nu)$, o que resulta no sinal sem o fundo [7, 12]. Resultados desse procedimento estão na figura 4.3.

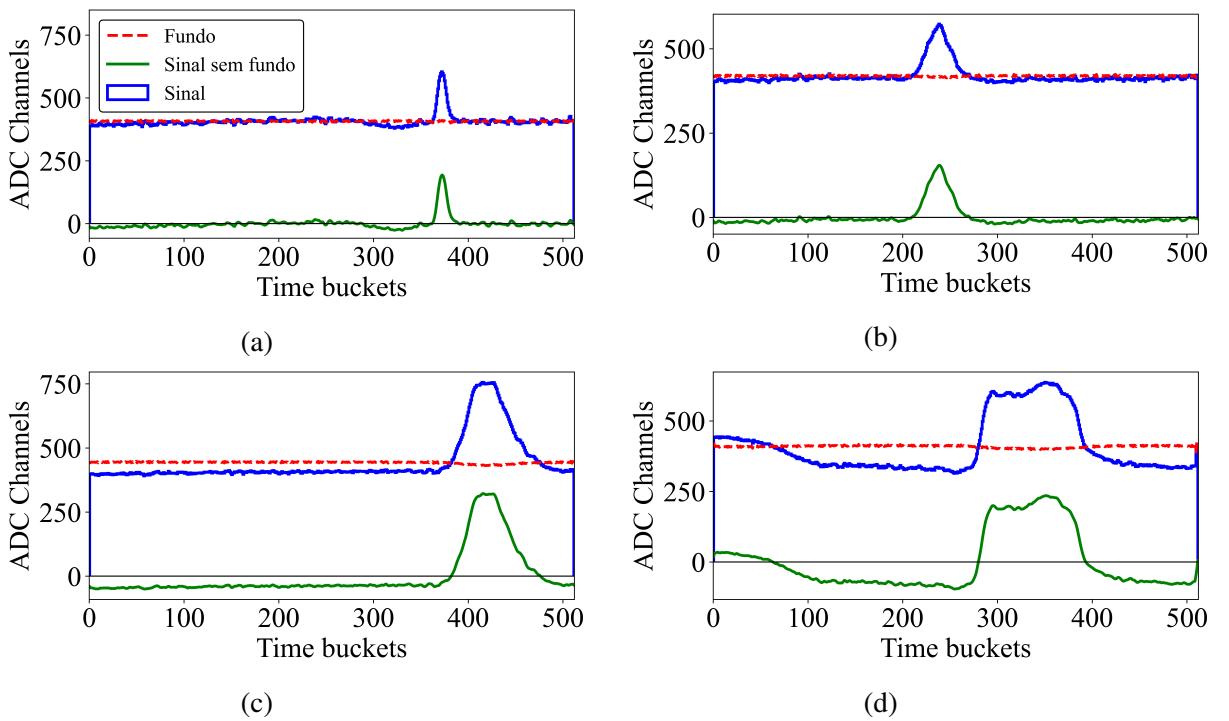


Figura 4.3: Histogramas com as respectivas baselines (linhas tracejadas) estimadas pelo método da convolução. O espectro resultante (sem o fundo) está em verde.

Fica claro que visualmente, por exemplo na figura 4.3d, que o filtro utilizado não é a melhor função resposta do detector. Poderia-se estimar essa função resposta empiricamente, porém os canais auxiliares chamados de Fixed Pattern Noise (FPN) [12] usados para esta estimativa não foram armazenados. Portanto, a estimativa do fundo foi feita sinal por sinal [6, 12]. Para isso, o fundo foi determinado usando o algoritmo `background removal` da biblioteca TSpectrum do ROOT [52]. A função tem a capacidade de separar o fundo dos picos presentes no espectro [53, 54, 55]. Exemplos de estimativa do fundo estão na figura 4.4.

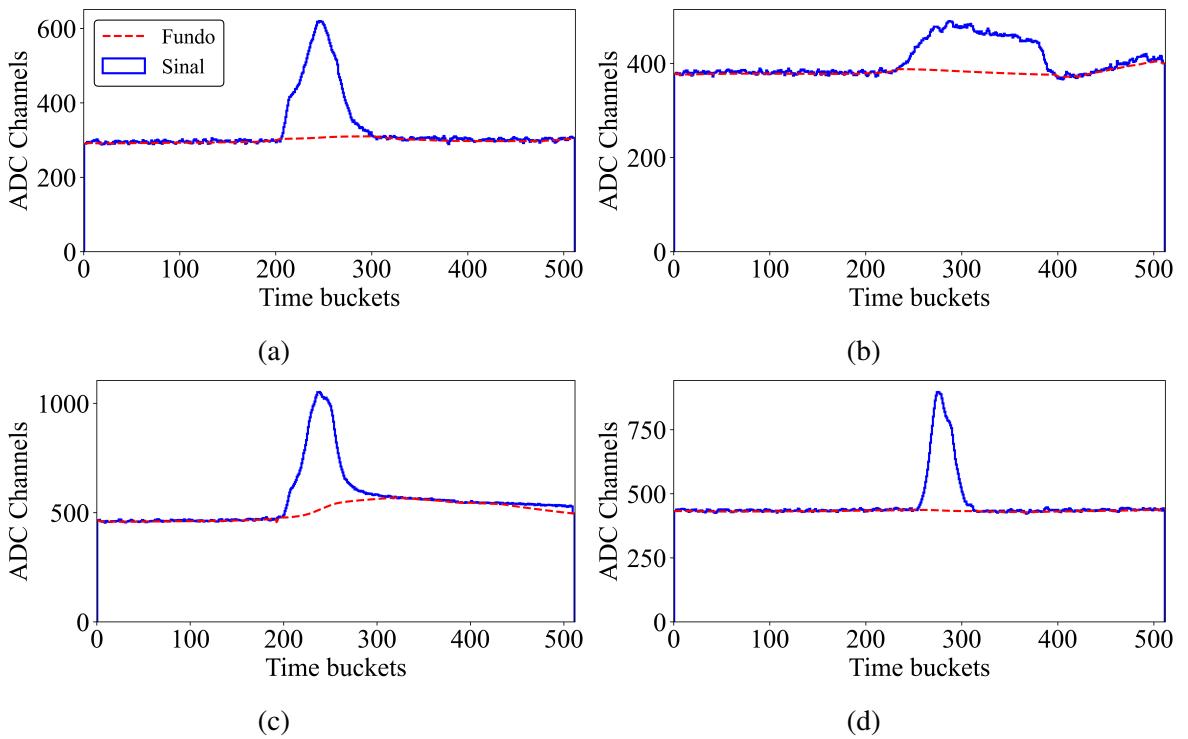


Figura 4.4: Histogramas com as respectivas baselines (linhas tracejadas) calculadas pelo TSpectrum.

Os resultados dos cálculos para o ruído de fundo de cada sinal foram armazenados e usados na etapa seguinte de análise dos mesmos. Nessa próxima etapa a deconvolução dos sinais é realizada com os sinais tendo o ruído de fundo devidamente subtraído. Para diminuir as possíveis flutuações numéricas após a remoção do fundo, o valor mínimo do sinal sem o fundo deve ser zero. Uma vez eliminado o fundo o código busca e identifica os picos e as correspondentes cargas do sinal. Para os picos compostos é então realizada a deconvolução, conforme descrita na seção seguinte.

4.1.2 Deconvolução do sinal

Em geral os picos obtidos são uma composição de vários picos estreitos. Precisamos então deconvolver os picos em suas componentes. Para tanto utilizamos o algoritmo `gold_deconvolution` presente na biblioteca TSpectrum do ROOT [56]. O algoritmo tem como objetivo fazer a deconvolução do espectro, gerando uma função (nesse caso um pulso gaussiano) resposta de acordo com o desvio padrão esperado para os pulsos. O sinal resposta corresponde ao espectro com as gaussianas não sobrepostas. Isso significa que foi necessário determinar qual o valor da largura dos pulsos para buscar a função resposta.

A largura dos pulsos foi determinada fazendo a análise de sinais que possuem apenas 1 pico, fazendo um ajuste pelo método dos mínimos quadrados (MMQ) de uma gaussiana. Para buscar espectros com apenas um pico, foi usado o algoritmo de identificação de picos `peak_finder`, presente na biblioteca do `scipy` [57], e para o ajuste da gaussiana foi usada o pacote `lmfit` [58]. O valor do desvio padrão encontrado foi de 4.09 (17) time buckets.

A largura escolhida foi ligeiramente maior pois, verificando empiricamente, em alguns casos o algoritmo separava o que deveria ser uma única gaussiana em duas. O valor do desvio padrão usado na deconvolução foi de 4.30 time buckets. Foi determinado também o número de iterações do algoritmo de deconvolução. O número de iterações escolhido foi de 700, menos que isso o algoritmo não estava separando totalmente picos sobrepostos. O limiar para a escolha de um ponto como um pico foi definido como ter altura maior que 20% do valor máximo do sinal. Resultados da deconvolução estão na figura 4.5.

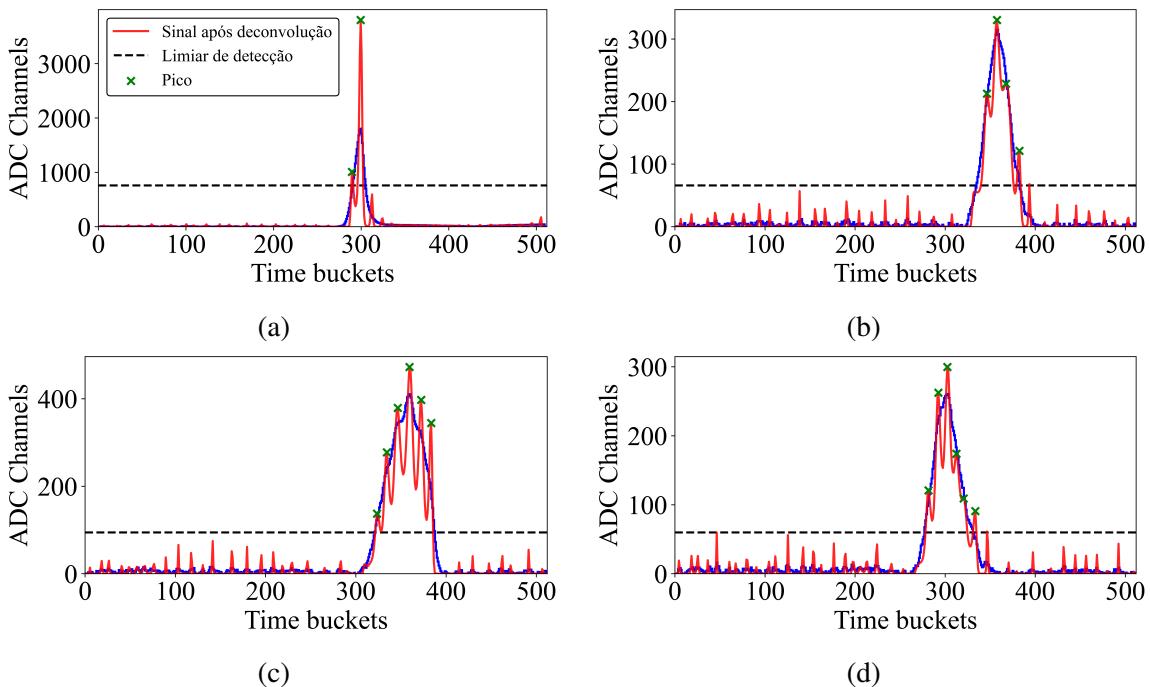


Figura 4.5: Histogramas sem as baselines antes (em azul) e depois da deconvolução (em vermelho). Os picos (em verde) e o limiar (linha tracejada preta) de identificação também estão indicados.

O algoritmo de deconvolução também determina a posição dos centroides encontrados, que indica a localização de um pico. Os mesmos picos podem ser obtidos com o `peak_finder`, com a vantagem de que o algoritmo possui muitos parâmetros diferentes para calibração, melhorando a identificação em comparação com os picos identifi-

cados pelo algoritmo do TSpectrum. A execução de 200.000 sinais, desde a estimativa e remoção do fundo, até a identificação dos centroides, demora cerca de 23.25 minutos, usando o processador Ryzen 5 3600X.

Para determinar a carga acumulada Q de cada ponto, é necessário calcular a área do centroide do pico identificado. A área do sinal antes e depois da deconvolução é a mesma, portanto pode-se analisar diretamente o sinal após a deconvolução. Para determinar a área do pulso consideramos a integral simples gaussiana usando a largura de cada pico após a deconvolução. O desvio padrão (largura) dos picos após a deconvolução foi $\sigma_{dd} = 1.1543$ (44) time buckets. Considerando esse desvio, a carga integrada (acumulada) para cada ponto é dada por:

$$Q = \int_{-\infty}^{\infty} Ae^{-(t' - t_i)^2 / 2\sigma_{dd}^2} dt' = A |\sigma_{dd}| \sqrt{2\pi}, \quad (4.4)$$

onde A é a amplitude do ponto com centroide t_i e desvio padrão após a deconvolução σ_{dd} .

Com o banco de dados para a deconvolução e também para a identificação de picos, basta criar as redes neurais, que serão descritas na seção 4.2.

4.2 Análise dos pulsos com *machine learning*

Com machine learning tem-se a possibilidade de criar algoritmos de alta complexidade sem definir operações explícitas. Usando os resultados das seções anteriores foram desenvolvidas três redes neurais, com o objetivo de: estimar o fundo (subseção 4.2.1), fazer a deconvolução (4.2.2) e por fim identificar os picos (subseção 4.2.3).

4.2.1 Rede neural para o fundo

O objetivo foi criar uma rede neural que reproduza o comportamento do algoritmo `background removal` que estima o fundo do sinal, discutido na seção 4.1.1. A rede neural é supervisionada, onde os dados de entrada são os sinais brutos e as saídas devem ser os fundos de cada sinal. A arquitetura dessa rede neural é apresentada esquematicamente na figura 4.6.

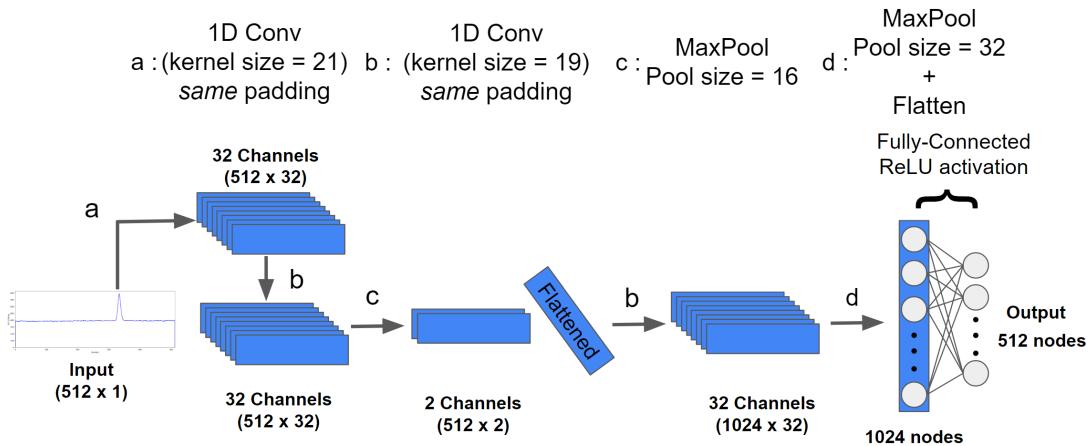


Figura 4.6: Arquitetura da rede neural que faz a inferência do fundo. O vetor de entrada deve ter dimensionalidade 512×1 . Todas as partes com convolução não possuem o parâmetro bias.

A entrada da rede é o sinal “cru” com dimensionalidade 512×1 . A seguir realizamos duas convoluções (passagens a e b) com padding same e uma camada com Max pooling. Os dois canais restantes sofrem uma planificação (ou flat), diminuindo sua dimensionalidade, para então passar por mais uma convolução com padding same e filtros de tamanho 19 seguido de uma camada Max pooling e uma camada Fully Connected com função de ativação ReLU. Toda a rede neural foi construída usando o TensorFlow 2 e possui um total de 545.536 parâmetros, todos treináveis. O tamanho dos filtros das convoluções levam em conta a largura do pulso, sendo no mínimo um valor maior que a largura, a fim de que cada kernel atue em um pulso completo na convolução [6].

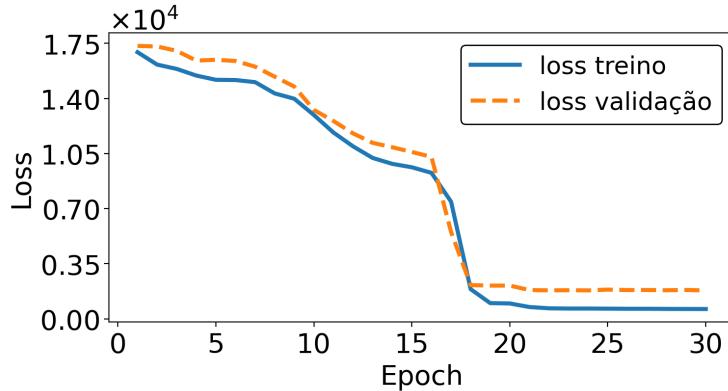
A camada final com função de ativação ReLU garante o valor mínimo de saída em 0 e, principalmente, pelo fato de não causar problemas à minimização do gradiente [59]. Foram testadas diversas combinações e a que está sendo mostrada na figura 4.6 é a que obteve os melhores resultados [6].

Para o treino foram usados 160.000 sinais e 40.000 para validação. O loss foi escolhido como sendo o erro quadrático médio (equação 4.5), o otimizador foi o ADAMAX [40], com learning rate de 0.0005, e métrica para avaliação foi o erro médio absoluto, dado por

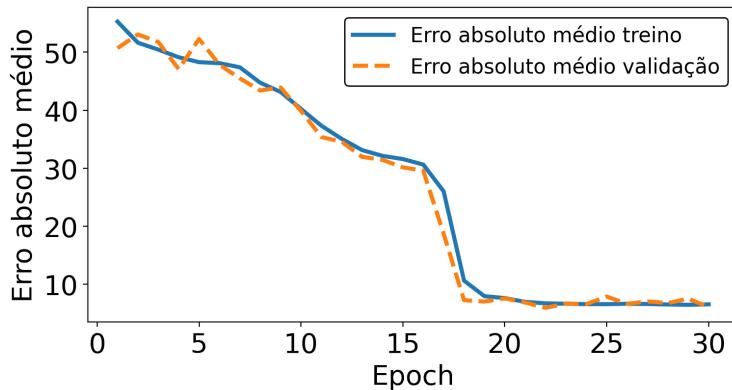
$$E = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N |x_i - \hat{x}_i|, \quad (4.5)$$

onde E é o erro absoluto médio, N é o número de pontos e x_i o ponto da saída da rede para ser comparado com o ponto original \hat{x}_i . Utilizamos 30 epochs e adotamos um batch size de 8. O treino foi realizado no Google Colaboratory [60] usando a GPU (graphics

processing unit) NVIDIA Tesla P100 e durou cerca de 34 minutos. Os resultados do treino são mostrados na figura 4.7. Como podemos ver na figura, os treinos são bem validados a partir da epoch 20, quando começa um platô no Loss.



(a) Loss dos dados de treino (linha contínua) e dos dados de validação (linha tracejada) em função da epoch no treino da rede dada pela figura 4.6.



(b) Erro absoluto médio dos dados de treino (linha contínua) e dos dados de validação (linha tracejada) em função da epoch no treino da rede dada pela figura 4.6.

Figura 4.7: Resultados do treino da rede neural representada na figura 4.6. A rede atingiu seu melhor resultado a partir da epoch 20.

A arquitetura da figura 4.6 (assim como as próximas desse capítulo) foi determinada de forma empírica. Uma arquitetura com menos passagens e/ou menos parâmetros fornece resultados menos adequados em comparação com a arquitetura apresentada. No caso de mais parâmetros e /ou passagens (consequentemente com aumento no tempo de execução), a rede neural não demonstrou melhora substancial.

Exemplos de resultados de previsões da rede neural estão na figura 4.8. A previsão do fundo possui um erro absoluto nos dados de treino de 6.5315 ADC Channels e nos dados de validação de 6.0783 ADC Channels. O sinal cru é subtraído do fundo, colocando o valor mínimo da subtração em 0. O erro médio absoluto de 200.000 sinais sem o respectivo fundo (resultante do algoritmo do TSpectrum) foi estimado em apenas 4.5

ADC Channels.

Rede neurais convolucionais têm a vantagem de usarem poucas variáveis e serem facilmente paralelizadas em sua execução [26]. Uma vantagem de redes neurais é o seu tempo de execução. Empiricamente a rede neural pode processar 200.000 sinais em apenas 8s (ou 25.000 sinais por segundo), sendo muito eficiente em tempo.

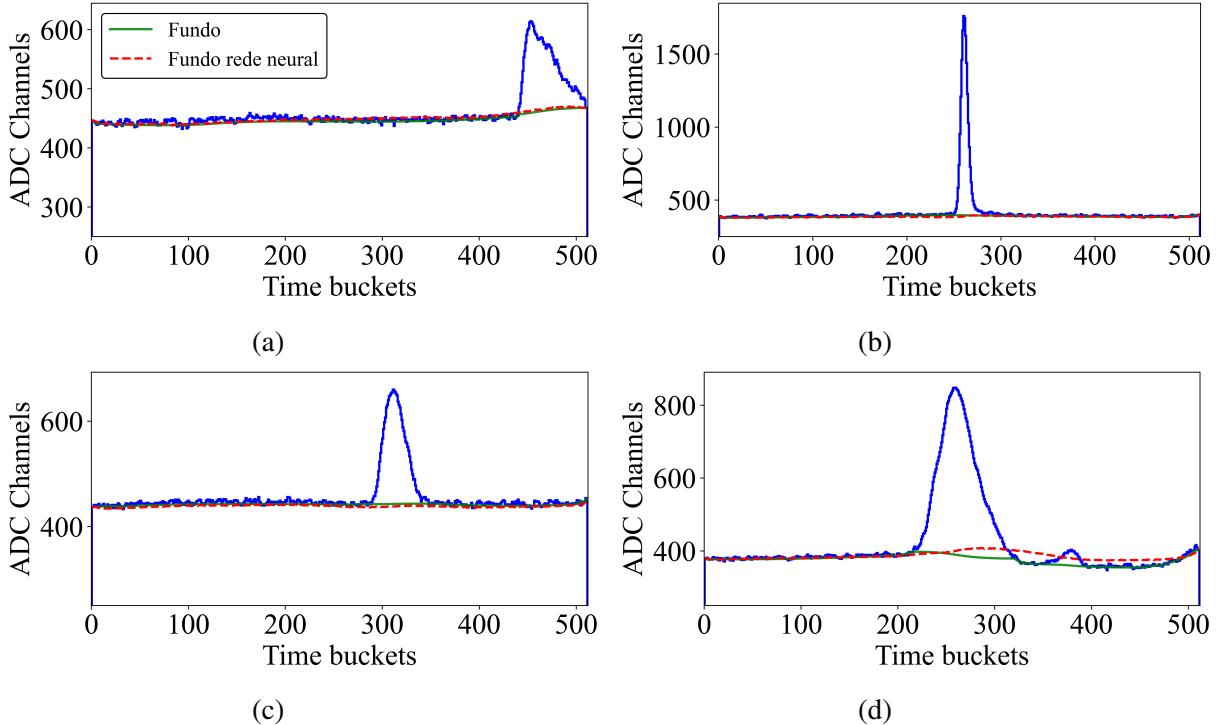


Figura 4.8: Exemplos da rede neural dada pela figura 4.6 em comparação com a saída do TSpectrum.

Nos exemplos mostrados nas figuras 4.8a, 4.8b e 4.8c os fundos dos sinais possuem grande flutuação e a rede neural se mostrou eficaz na previsão. No exemplo 4.8d a baseline do sinal é relativamente complexa pois o sinal do canal 300 a 500, varia em cerca de 50 unidades em y . Apesar da rede neural determinar o fundo, para esse caso, acima do fundo original, ao subtrair o espectro do fundo e colocar o valor mínimo em 0, o pulso presente entre os canais 200 e 300 é praticamente inalterado.

Com os resultados obtidos pela rede neural para a determinação do fundo, o próximo passo foi criar a rede neural que faz a deconvolução do espectro sem a baseline.

4.2.2 Rede neural para a deconvolução

Considerando a mesma abordagem da rede neural anterior criamos uma rede neural para realizar uma sequencia de convoluções e por fim uma camada fully connected com

função de ativação ReLU, pois precisamos ter o valor mínimo do espectro em 0. Os filtros das convoluções precisam ter tamanho mínimo de duas vezes o sigma das gaussianas para atuarem sobre cada pulso do espectro. A entrada da rede é o sinal com o fundo subtraído e com mínimo em 0. A saída é o sinal após deconvolução dada pelo algoritmo `gold deconvolution` na biblioteca TSpectrum do ROOT, já mostrado na subseção 4.1.2. A figura 4.9 mostra a arquitetura da rede de deconvolução.

A rede é a sequência de duas convoluções com 32 filtros, valid padding e kernels de tamanho 19 e 17, respectivamente, seguida de uma camada Max pooling com pool size igual à 16. No final há o flat na camada para seguir com uma camada fully connected com função de ativação ReLU. O valid padding se mostrou mais eficiente para a convergência da rede. Toda a rede foi construída usando o TensorFlow 2, possuindo 508.000 parâmetros treináveis [6].

Assim como na rede anterior, foram usados 160.000 sinais para treino e 40.000 para validação. O loss foi escolhido como sendo o erro quadrático médio, o otimizador foi o ADAM, com learning rate de 0.0005 porém com o parâmetro clipnorm igual a 0.45. A métrica para avaliação foi o erro médio absoluto. Foram 75 epochs e o batch-size foi 8. Os resultados do treino estão na figura 4.10.

Alterar a norma do gradiente (usar o parâmetro `clipnorm = 0.45`) significa que, caso a norma do vetor do gradiente exceda 0.45, então o valor da norma é reajustado para o limiar (threshold) escolhido (0.45) [6]. Isso faz com que não ocorra problemas comuns como o gradiente sumir [59, 40], um dos problemas que teve que ser resolvido nessa rede.

O treino foi realizado no Google Colaboratory [60] usando a GPU NVIDIA Tesla P100 e demorou cerca de 54 minutos. Os resultados do treino estão na figura 4.7, onde eles indicam que, visualmente, a rede neural consegue distinguir muito bem diferentes centroides presentes no pulso. Empiricamente, a rede é capaz de executar 200.000 sinais em 5.4 segundos (ou 37.000 sinais por segundo).

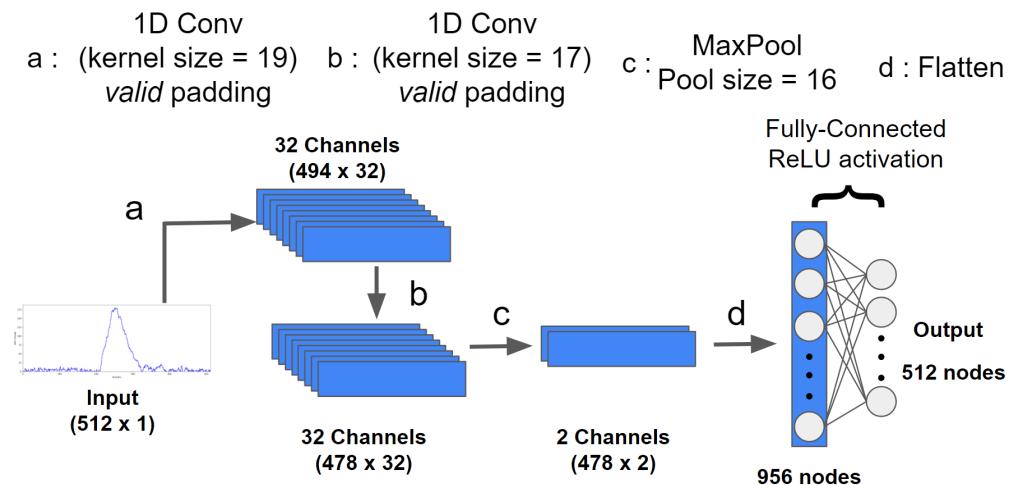


Figura 4.9: Arquitetura da rede neural que faz a inferência da deconvolução do espectro. O vetor de entrada deve ter dimensionalidade 512×1 . Todas as partes com convolução não possuem o parâmetro bias.

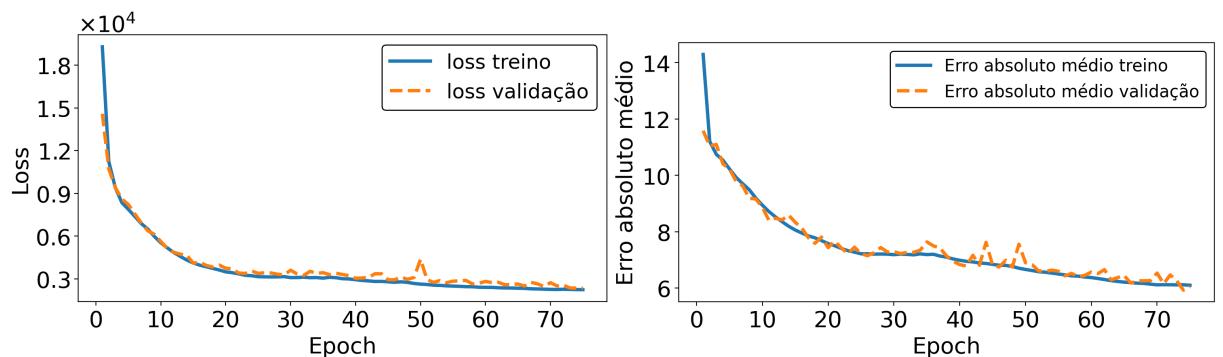


Figura 4.10: Resultados do treino da rede neural dada pela figura 4.6.

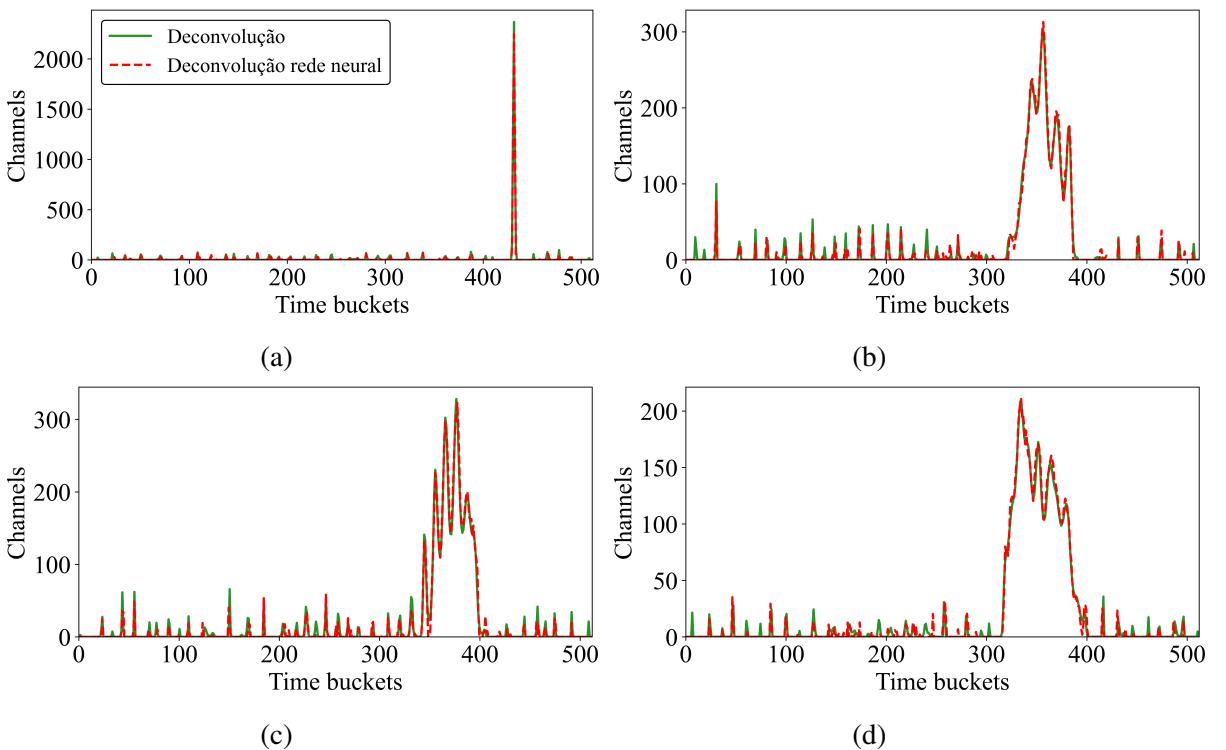


Figura 4.11: Exemplos de deconvolução da rede neural dada pela figura 4.6.

Com a rede neural para a deconvolução feita, a última etapa é a construção de uma rede neural para a identificação de picos, mostrada na 4.2.3.

4.2.3 Identificação de picos

A última etapa dessa análise com machine learning foi analisar possíveis soluções para a identificação de picos. Esse é um problema muito complexo, pois há uma variação muito grande na quantidade de picos por sinal e também há um desbalanço muito grande na quantidade de pontos comuns (aqueles que não são picos) e pontos que são picos. Por exemplo, caso haja um sinal que possui apenas um pico, deve-se identificar uma posição, dar o valor de saída como 1, por exemplo, dentre 512 pontos, onde 511 terão o valor de saída como 0. Caso a rede determine que todos os pontos não são picos, ainda assim a acurácia binária seria maior que 99%. Isso é conhecido como desbalanço de classe [61].

Para corrigir esse desbalanço, foram acrescentados pontos simetricamente em torno do pulso, de forma que a somatória das amplitudes das regiões é equivalente a carga Q acumulada no ponto. Isso faz com que não seja preciso identificar um único ponto, mas sim uma região em torno do pico. Com isso podemos nos basear na ideia de segmentar o sinal para destacar regiões de interesse [62]. Segmentar significa ter uma rede neural com a saída com o mesmo tamanho do vetor de entrada (512) e saída com valores entre 0 e 1,

onde 1 indica uma região com um pico e 0 não. A figura 4.12 mostra um exemplo de um sinal após a deconvolução onde há os picos identificados com o algoritmo `peak_finder` e os pontos acrescentados simetricamente em torno dos picos para representar as regiões dos pulsos.

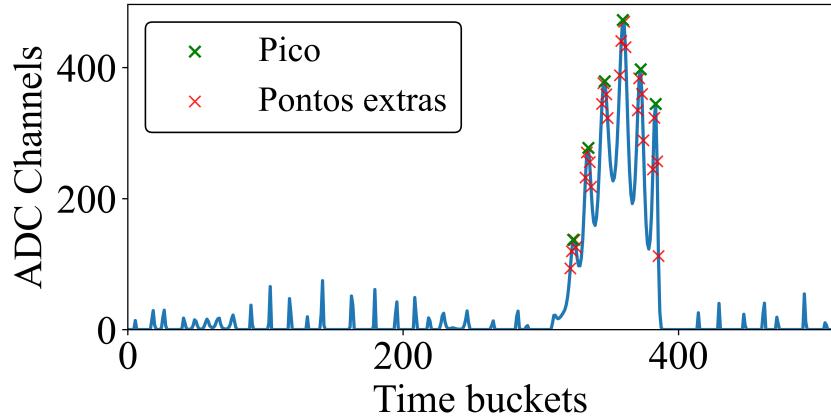


Figura 4.12: Sinal após a deconvolução que mostra o pico identificado mais os pontos adicionais que irão facilitar o trabalho da rede neural (evitar o desbalanço de classe). Foram acrescentados 2 pontos à esquerda e à direita.

A rede construída é a sequência de uma convolução com kernel de tamanho 13 e same padding seguida de Max-Pooling e uma fully-connected com função de ativação sigmoide, possuindo um total de 263.104 parâmetros treináveis. Para o treino foram usados sinais que possuíam entre 1 e 6 picos resultantes da saída do algoritmo `peak_finder` do SciPy, o que resultou em 120.024 de dados para o treino e 30.006 para validação. A escolha pelos picos identificados pelo `peak_finder` ao invés do algoritmo de identificação do TSpectrum é pela maior flexibilidade de ajuste fino do algoritmo, tornando a identificação de picos muito melhor[6]. A função custo escolhida foi a binary cross-entropy (dada pela equação 3.5), o otimizador o ADAM com learning rate de 0.001. A métrica utilizada foi a acurácia binária. O treino também foi realizado por uma GPU NVIDIA Tesla P100 e durou cerca de 8 minutos com 12 epochs. A arquitetura da rede está na figura 4.13 e os resultados do treino estão na figura 4.14.

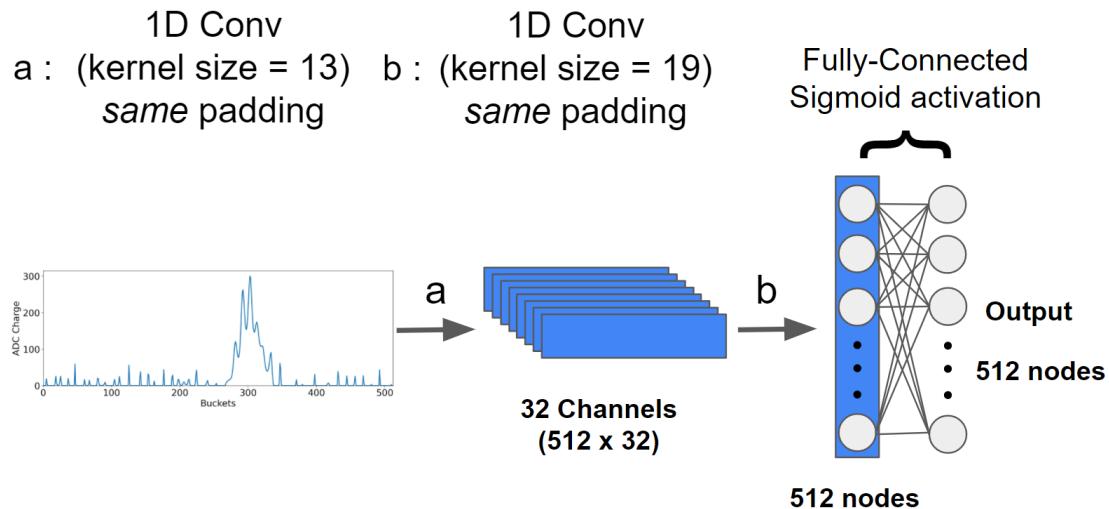
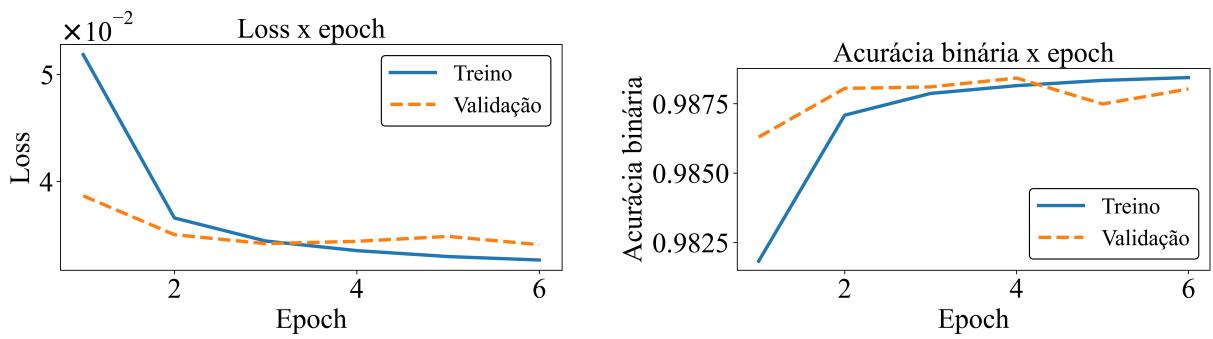


Figura 4.13: Arquitetura da rede neural que faz o recorte das regiões com picos. O vetor de entrada deve ter dimensionalidade 512×1 .



(a) Loss dos dados de treino (linha contínua) e dos dados de validação (linha tracejada) em função da epoch.

(b) Acurácia binária dos dados de treino (linha contínua) e dos dados de validação (linha tracejada) em função da epoch.

Figura 4.14: Resultados do treino da rede neural dada pela figura 4.13.

A saída da rede neural é um vetor de tamanho 512 com valores entre 0 e 1, onde valores maiores que 0.5 são considerados como pertencentes à um pulso. Com as regiões identificadas podemos fazer uma média ponderada com o espectro de entrada para achar o centroide. O tempo de processamento da rede neural é de 150.030 sinais em cerca de 4.11 segundos (aproximadamente 36.500 sinais por segundo). Para determinar os picos a partir da saída da rede neural, o tempo é de aproximadamente 4.3 segundos, onde o algoritmo pode ser ainda mais rápido se for paralelizado. Resultados para picos identificados pela rede neural em comparação com o algoritmo *peak-finder* estão na figura 4.15.

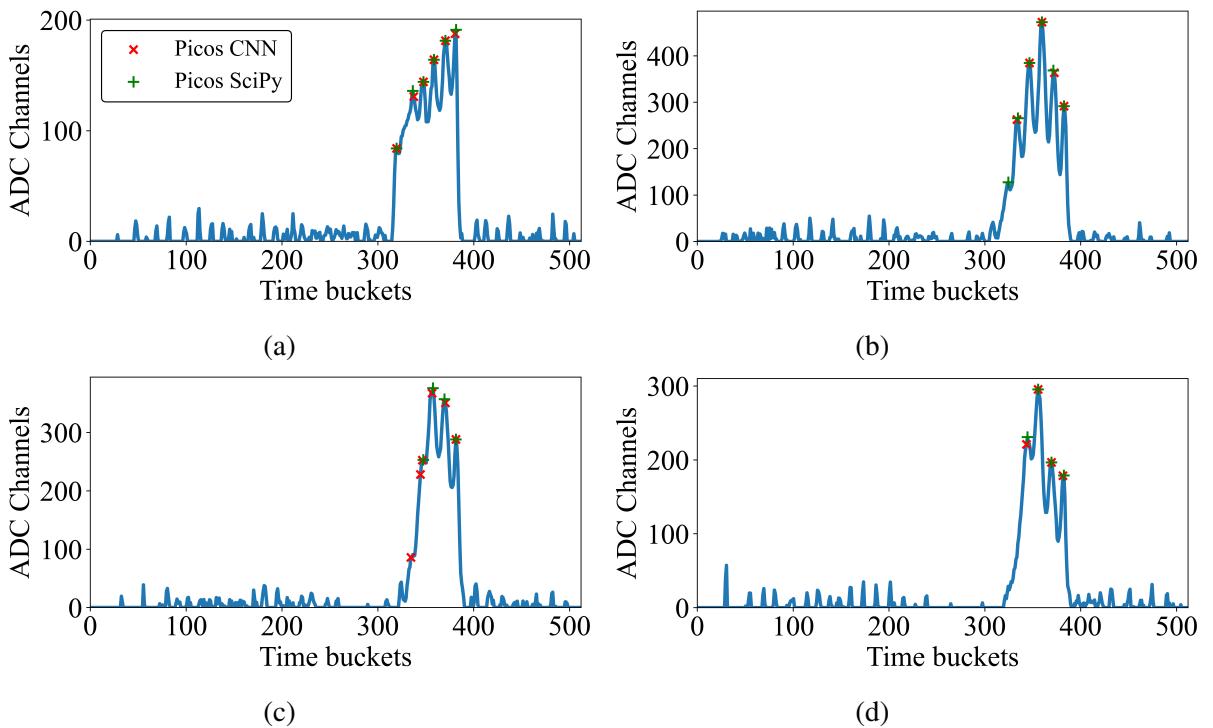


Figura 4.15: Exemplos de identificação de picos usando a rede neural, em comparação com a identificação feita pelo algoritmo presente no SciPy, mostrada na figura 4.13. Os centroides identificados pela rede neural estão em vermelho, e os centroides identificados pelo SciPy estão em verde. Em azul está o espectro sem fundo após a deconvolução, resultantes

Para determinar carga acumulada Q_i de cada ponto associado à cada centroide i , foi usada a relação

$$Q_i = \sum_{i=2}^{i+2} f(t_i) \alpha_\sigma, \quad (4.6)$$

onde $f(t_i)$ é a amplitude do espectro no *time bucket* t da posição i e α_σ é uma constante real para calibrar o valor da área em função do sigma dos pulsos, que foi determinado empiricamente como $\alpha_\sigma = 1.2$.

Com as três redes neurais criadas, é necessário verificar o acoplamento das redes, a fim de analisar a qualidade dos algoritmos e verificar os tempos de execução, para comparar com os algoritmos discutidos nas subseções 4.1.1 e 4.1.2.

4.2.4 Acoplando as redes neurais

Usando novamente o TensorFlow 2 pode-se carregar as redes neurais discutidas nas subseções 4.2.1, 4.2.2 e 4.2.3, já treinadas e usar como se fosse uma única rede neural.

Acoplando as três arquiteturas, temos a nova arquitetura mostrada na figura 4.16. O input da rede é o sinal cru o output da rede neural é o um vetor de tamanho 1024, que possui a segmentação e o sinal após a deconvolução, pois as duas informações são necessárias para determinar os centroides.

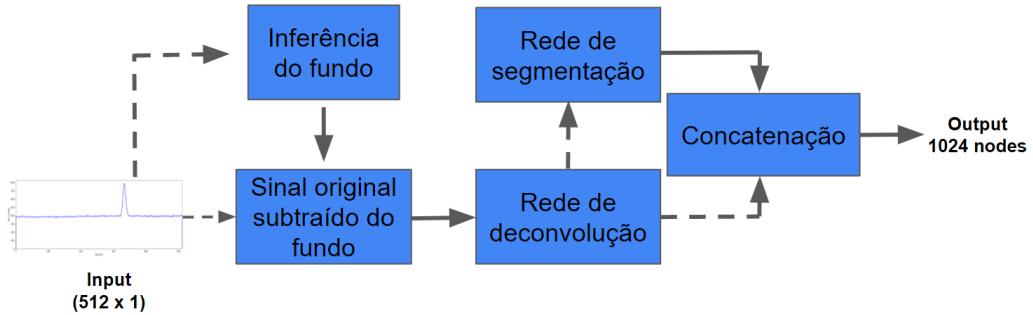


Figura 4.16: Arquitetura da rede neural que faz a inferência da baseline, em seguida faz a deconvolução do espectro sem o fundo e por fim faz a segmentação do sinal. O resultado da segmentação e da deconvolução são concatenados na parte final da rede neural. O vetor de entrada deve ter dimensionalidade 512 x 1.

A rede é apenas a sequencia das redes anteriores, ou seja, o espectro passa pelo cálculo da baseline, então o espectro original é subtraído dessa baseline (colocando o valor mínimo em 0) para passar pela etapa da deconvolução e em seguida o sinal é segmentado. Na etapa final, o resultado da segmentação e da deconvolução são concatenados em um único vetor, para assim determinar os centroides. Pelo fato de cada parte ser treinada de modo separado não há necessidade de treinar a rede unificada, apenas carregar as variáveis das redes neurais treinadas de cada parte. A rede unificada possui 1.316.640 de parâmetros.

Foi comparada a saída da rede acoplada para o espectro após a deconvolução, com a saída de referência, que é o espectro após a deconvolução mostrado na subseção 4.1.2. Podemos usar novamente o erro médio absoluto para fins de comparação. O erro médio absoluto, para os 200.000 sinais, é de 7.45 ADC Channels. Com relação à incerteza, ela foi estimada como o desvio padrão da diferença de cada time bucket do sinal tido como referência e o sinal após a rede neural acoplada. A incerteza é da ordem de 6% da amplitude do sinal no ponto.

Com relação a eficiência em tempo, a rede neural da figura 4.16 processa 200.000 sinais em 12 segundos, usando a GPU NVIDIA Tesla P100. Somando esse tempo com a determinação dos centroides, que é de aproximadamente 4.3 segundos, o tempo total para processar 200 mil sinais é de cerca de 16.3 segundos, cerca de 90 vezes mais rápido que os métodos mostrados na seção 4.1. Exemplos da reconstrução das nuvens de pontos usando a rede neural da figura 4.16 são apresentados na figura 4.17d.

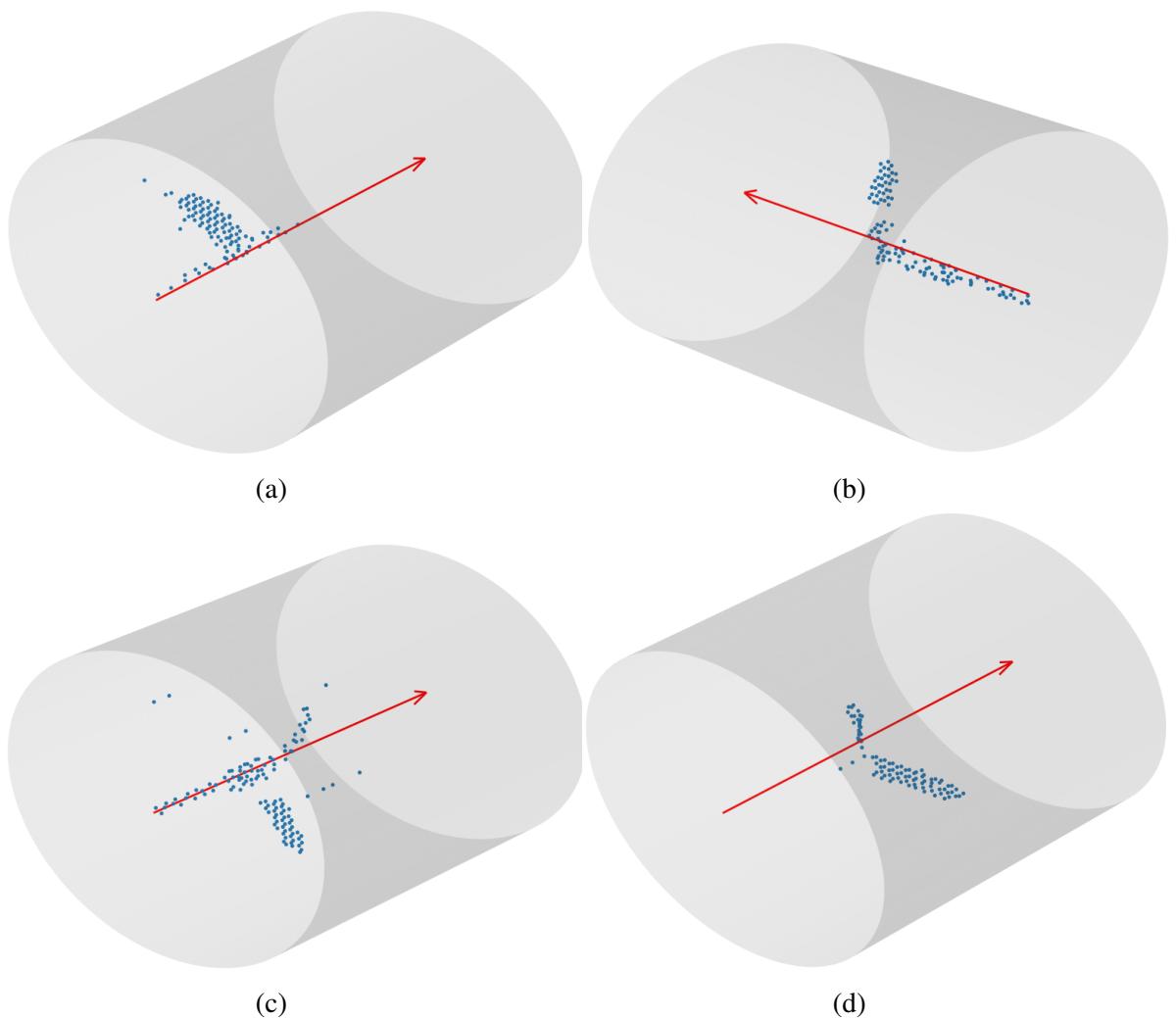


Figura 4.17: Exemplos de eventos reconstruídos através da análise dos sinais com machine learning. A seta vermelha indica o sentido do feixe.

Com as redes neurais desenvolvidas, o consumo de tempo para o processamento dos pulsos diminuiu em cerca de 90 vezes em relação à algoritmos com programação tradicional mostrados na seção 4.1, abrindo possibilidades para a análise em tempo real de um experimento com alvo ativo usando grande granularidade (milhares de canais). Com as nuvens de pontos reconstruídas, pode-se extrair propriedades físicas dos eventos, processo que está descrito no capítulo 5.

Capítulo 5

Análise das nuvens de pontos

As nuvens de pontos representam eventos de reações nucleares dentro do alvo ativo. O objetivo desta etapa, do ponto de vista computacional, foi de identificar *clusters* (aglomerados) tridimensionais, que no caso do pAT-TPC sem a presença de campo magnético, possuem estruturas em forma de linha reta. Já do ponto de vista físico, o objetivo é extrair as informações físicas (energia E , momento \vec{p} e comprimento L) a partir das trajetórias das partículas. Com isso, foi possível distinguir cada trajetória identificada e determinar o vértice da reação. Após a identificação, foram selecionados os eventos correspondentes ao canal de reação do breakup.

Assim como no capítulo 4, esse capítulo descreve o uso de algoritmos de machine learning para a análise, desta vez para as nuvens de pontos. Os algoritmos usados foram tanto não supervisionados (algoritmos de clustering) e supervisionados (redes neurais), com diferentes objetivos.

Na seção 5.1 está mostrado o processo de identificação de trajetórias (tracking) com algoritmo de machine learning não supervisionados. Na seção 5.2.1 estão mostradas alternativas com outros algoritmos de machine learning, porém que não foram utilizadas para a análise dos dados, mas abrem um grande leque de possibilidades para estudos futuros.

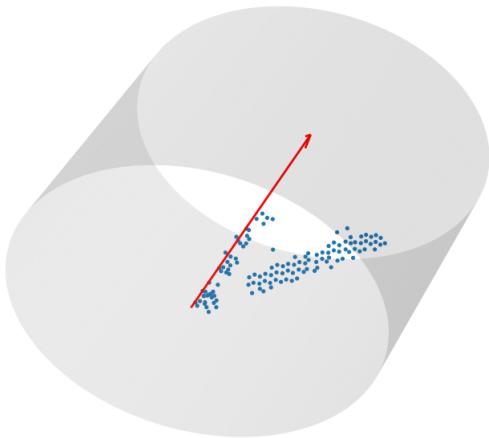
5.1 Identificação de trajetórias

Uma vez reconstruídas as nuvens de pontos de cada evento, é necessário classificar cada uma das trajetórias (tracks) das partículas dentro do gás. A figura 5.1a mostra um exemplo de uma nuvem de pontos. A classificação de tracks pode ser realizada a partir de algoritmos de machine learning não supervisionados. Nessa figura é notável ao olho humano que os pontos formam estruturas de aglomerados. Pode-se associar uma reta a essas estruturas que corresponderiam a trajetória das partículas dentro do alvo gasoso. Essa

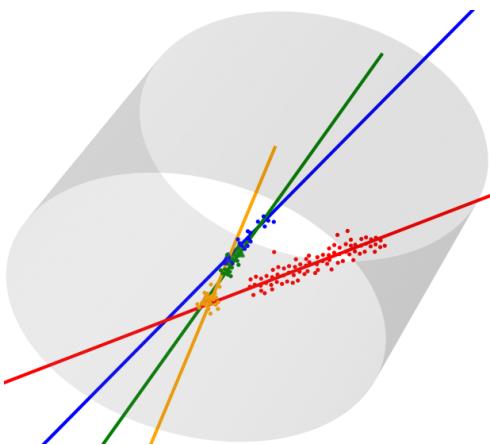
retas foram identificadas com algoritmos de clustering, pelo fato da estrutura aparente dos dados e por não existir um tamanho fixo das nuvens de pontos. O número de pontos pode variar de 30 até cerca de 200, não considerando pontos outliers (não pertencem a nenhum aglomerado).

Para diminuir a quantidade de *outliers*, foram usados dois filtros. O primeiro filtro exclui pontos baseado na sua carga, colocando um limiar onde pontos com carga $Q < 110$ são descartados. O segundo filtro, chamado de outlier removal, elimina pontos considerados outliers globais, de modo que, caso um ponto não possua um número mínimo de vizinhos $n_{or} = 4$ em um raio de distância tridimensional $d_{or} = 12$ mm, então ele é descartado. O outlier removal está presente na biblioteca Open3D [63] no Python e funciona excluindo pontos muito isolados uns dos outros.

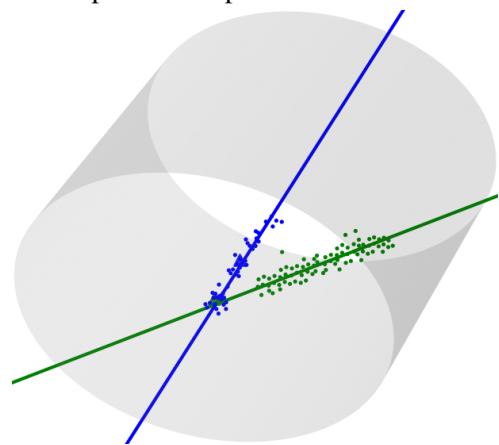
Existem diversas opções de algoritmos de clustering, como o Density-based spatial clustering of applications with noise (DBSCAN) [64], porém a escolha deve levar em conta a performance em tempo. Portanto, o algoritmo usado foi o Hierarchical DBSCAN (HDBSCAN) [65, 66]. O algoritmo tem como entrada a nuvem de pontos e parâmetros esperados para a densidade dos clusters presentes no conjunto de pontos. O algoritmo retorna os diferentes clusters identificados. Os clusters passam por um ajuste por mínimos quadrados para determinar o versor e um ponto arbitrário que determinam a reta tridimensional. A figura 5.1b mostra o resultado da aplicação do HDBSCAN na nuvem de pontos mostrada na figura 5.1a. As nuvens de pontos reconstruídas não possuem, em certos casos, densidade de pontos o suficiente para resultar em 100% de acurácia do evento.



(a) Exemplo de evento analisado. Os pontos em azul são das partículas detectadas pelo TPC, a seta vermelha indicando o sentido do feixe e o TPC está representado pelo cilindro cinza.



(b) Evento com as identificações sem a correção. As três retas de cores amarela, verde e azul são de um único cluster.



(c) Evento corrigido. Agora o evento possui as duas retas corretas, a azul e a verde.

Figura 5.1: Sequência de análise de um evento. Em 5.1a temos o evento que é recebido para ser analisado, em 5.1b temos o mesmo evento após o HDBSCAN (antes da correção) e 5.1c mostra depois da correção. As cores das retas são arbitrárias e servem apenas para a diferenciação.

O HDBSCAN apresenta falhas no seu resultado, como visto na figura 5.1b, em que, por exemplo, um único cluster acaba sendo dividido em três clusters muito próximos. A próxima etapa foi de correção da saída do clustering. A ideia é comparar em pares todos os clusters resultantes do algoritmo e unificar os clusters muito semelhantes [14]. Do ponto de vista computacional, esse problema é abordado avaliando a semelhança entre dois clusters usando métricas, como a distância de Jaccard [67] e o coeficiente de silhueta [68]. A correção feita se dá em duas etapas: primeiro comparando os versores entre duas retas e depois verificando se a condição da equação 5.1 é satisfeita.

Caso a diferença absoluta entre os ângulos com relação ao versor $(0, 0, 1)$ (direção do feixe de ${}^{17}\text{F}$) seja menor que 9° (determinado empiricamente), então as duas retas serão

combinadas se obedecerem a condição dada por

$$\sum_{i=0}^{N_1} \frac{d_{i2}}{N_1} < \alpha d_{min}, \quad (5.1)$$

onde N_1 é o número de pontos da reta 1, d_{i2} a distância do ponto i da reta 1 em relação à reta 2, α é um parâmetro com valor a ser escolhido e d_{min} é a distância mínima do ponto a reta. Os valores foram determinados empiricamente, tais que $\alpha = 1.75$ e $d_{min} = 15$ mm. A figura 5.1c mostra o resultado da correção baseada nesses critérios no resultado anterior mostrado na figura 5.1b.

Após a correção, é necessário classificar cada reta como sendo ou o feixe, ou uma partícula originada de uma reação nuclear. O feixe incide na câmara com um ângulo muito pequeno com relação ao versor $(0, 0, 1)$, que é o versor de incidência do feixe. Além disso, mesmo se o ângulo for pequeno, a reta do feixe cruza o plano da janela do TPC próximo do ponto mais provável da entrada o feixe. O ponto mais provável foi calculado usando a posição média da projeção dos pontos de um conjunto de eventos no plano $x-y$. Disso obtemos que a posição inicial mais provável do feixe é tal que $x_f = -3.4$ (6.7) mm e $y_f = -0.9$ (6.3) mm. A incerteza é alta devido às dimensões do feixe (aproximadamente 5 mm).

Portanto, se o ângulo entre o versor \hat{v}_i de uma reta r_i for menor que 5° (determinado de modo empírico novamente) e a distância d entre o ponto P_i que intercepta o plano e o ponto $(x_f, y_f, 0)$ for menor que 15 mm (pouco mais que duas vezes a incerteza de cada ponto), então a reta foi considerada como o feixe do evento. No caso de não satisfazer essas condições, então ela foi classificada como uma possível partícula originada da reação do feixe com o gás.

Importante notar que há eventos que não possuem projétil ou ejétil (^{17}F por exemplo), como mostrado na figura 5.2. Neste caso, foi necessário assumir as propriedades da reta mais provável para o feixe, ou seja, precisa passar pelo ponto $(x_f, y_f, 0)$ e ter versor $(0, 0, 1)$.

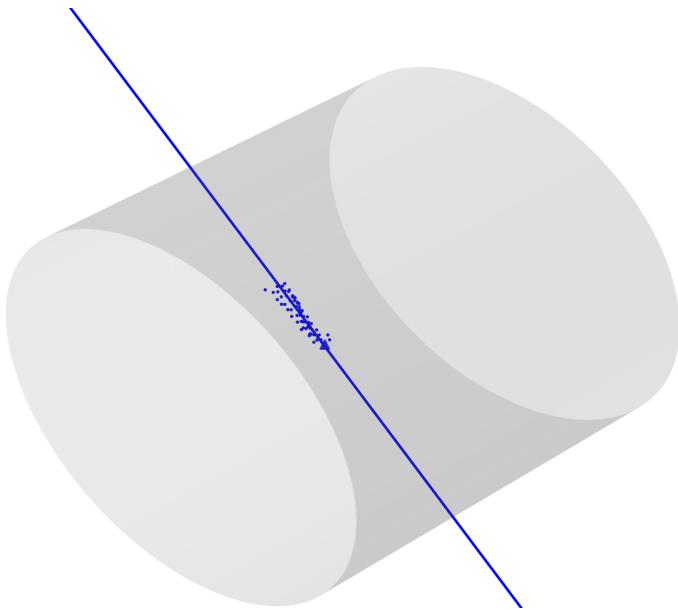


Figura 5.2: Evento em que não foi identificado o feixe, apenas a partícula espalhada. O triângulo azul é o local calculo do vértice de reação dado pela equação 5.6.

Para completar a cinemática do evento, foi necessário calcular o vértice de reação, para cada evento, entre o track da partícula e a direção do feixe. O vértice de reação é o ponto médio do segmento de reta que conecta a trajetória da partícula espalhada e o feixe, no ponto de menor distância entre as retas. O vértice é de grande importância para a reconstrução da reação nuclear.

Para deduzir a equação do vértice de reação, primeiro temos as seguintes equações das retas \vec{P}_1 e \vec{P}_2 como vetores:

$$\begin{aligned}\vec{P}_1 &= \vec{A}_1 + \vec{V}_1 * t_1 \\ \vec{P}_2 &= \vec{A}_2 + \vec{V}_2 * t_2,\end{aligned}\tag{5.2}$$

onde \vec{A}_1 e \vec{A}_2 são pontos arbitrários que pertencem as retas 1 e 2, respectivamente, \vec{V}_1 e \vec{V}_2 são os versores, t_1 e t_2 são os hiperparâmetros das retas.

A reta que conecta a menor distância possui versor

$$\vec{V}_c = \frac{\vec{V}_1 \times \vec{V}_2}{|\vec{V}_1 \times \vec{V}_2|}.\tag{5.3}$$

Podemos então construir uma reta \vec{P}_3 que conecta \vec{P}_1 e \vec{P}_2 . Essa reta deve começar no ponto de menor distância da reta 1 e terminar no ponto de menor distância da reta 2. Ou seja, tem-se o seguinte sistema linear:

$$\vec{A}_2 + \vec{V}_2 * \tilde{t}_2 = \vec{A}_1 + \vec{V}_1 * \tilde{t}_1 + \vec{V}_c * \tilde{t}_3.$$

Rearranjando temos que

$$\vec{V}_1 * \tilde{t}_1 - \vec{V}_2 * \tilde{t}_2 + \vec{V}_c * \tilde{t}_3 = \vec{A}_2 - \vec{A}_1, \quad (5.4)$$

onde \tilde{t}_1 , \tilde{t}_2 e \tilde{t}_3 são os hiperparâmetros a serem determinados. Caso \vec{V}_1 seja paralelo à \vec{V}_2 , então não há solução (não há vértice de reação, ou seja, não há uma reação nuclear em comum entre a partícula e o feixe analisado). Com a solução do sistema pode-se obter os pontos de menor distância nas duas retas:

$$\begin{aligned} \vec{P}_1 &= \vec{A}_1 + \vec{V}_1 * \tilde{t}_1 \\ \vec{P}_2 &= \vec{A}_2 + \vec{V}_2 * \tilde{t}_2. \end{aligned} \quad (5.5)$$

Com isso, é possível determinar que o vértice de reação \vec{V}_r é dado por

$$\vec{V}_r = \frac{1}{2}(\vec{P}_1 + \vec{P}_2). \quad (5.6)$$

Com isso pode-se definir a distância de máxima aproximação d_{max} das retas, dada pela equação 5.7.

$$d_{max} = |\vec{P}_1 - \vec{P}_2|. \quad (5.7)$$

Da equação 5.7 foi estabelecido um limite superior para d_{max} tal que valores maiores que esse limite indicam uma reação nuclear em comum entre a partícula e o feixe. O valor foi determinado empiricamente e foi definido como $d_{max}^{sup} = 25$ mm. Trajetórias cuja distância máxima de aproximação excedia d_{max}^{sup} , então a trajetória é descartada. A última condição para garantir que houve uma reação nuclear, é garantir que o vértice de reação está dentro da câmara, cujos limites são $|x| < 140$ mm, $|y| < 140$ mm e $|t| < 512$.

Para completar essa etapa, foi necessário determinar a energia E e o comprimento L da trajetória. A energia E é definida como

$$E = \sum_{i=1}^N Q_i, \quad (5.8)$$

onde Q_i é a carga acumulada do i-ésimo ponto de um conjunto com N pontos. O comprimento é definido como

$$L = \max d_{i,\vec{V}_r}, \quad (5.9)$$

onde d_{i,\vec{V}_r} é distância entre o ponto i pertencente a trajetória até o vértice de reação \vec{V}_r .

Essa não foi a única abordagem utilizada no trabalho. Na seção 5.2 foram mostradas alternativas para se buscar, com as nuvens de pontos crua, eventos específicos que ocorreram no experimento, sem ter que previamente buscar trajetórias e também outros usos de *machine learning* para a análise.

5.2 Abordagens alternativas

O objetivo da análise das nuvens de pontos foi buscar eventos que possuíam três trajetórias, uma sendo o feixe, e as outras duas de partículas que surgiram da reação nuclear do feixe com o gás.

5.2.1 Identificação de eventos com *machine learning*

Para evitar o processo de *clustering* de nuvens de pontos que não possuem eventos de interesse (como o *breakup*), é possível usar redes neurais supervisionadas capazes de processar nuvens de pontos tridimensionais. A rede neural usada para esse processo chama-se PointNet [69] e a arquitetura está na figura 5.3.

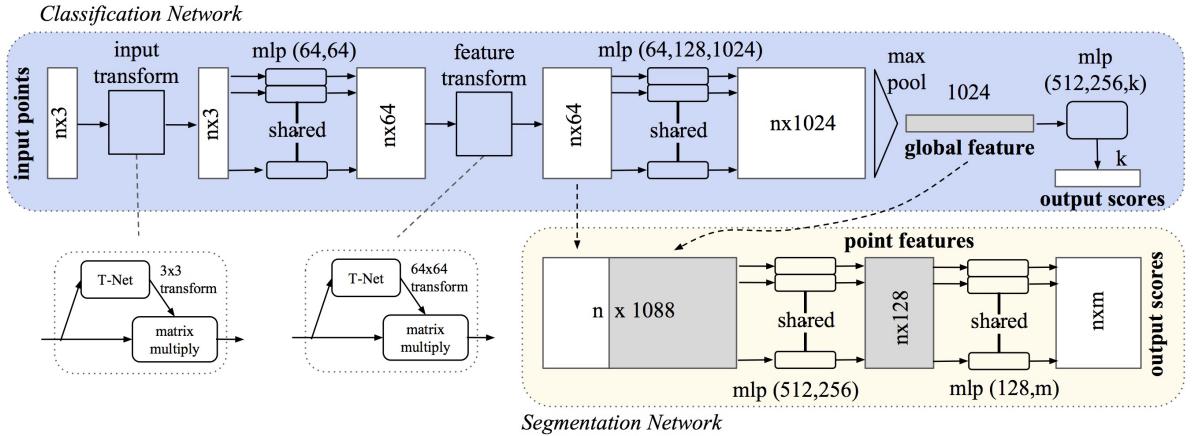


Figura 5.3: Arquitetura da PointNet. A rede de classificação tem o *input* com n pontos com 3 coordenadas, onde são aplicadas sequências de transformação que são agregadas por uma camada de max pooling. O *output* é a classificação para k classes possíveis. A rede de segmentação é uma extensão da rede de classificação, classificando ponto a ponto a nuvem de pontos, em m classes possíveis. Mais detalhes sobre a arquitetura podem ser encontrados na Ref. [69]

A PointNet é uma rede neural capaz de processar *pointclouds*, entendendo que a estrutura dos dados é invariante à troca de pontos e invariante sobre transformações (rotação e translação) [70], pode ser usada tanto para classificação quanto segmentação semântica de nuvens de pontos [69]. A classificação é realizada para a *pointcloud* como um todo, já a segmentação semântica é a classificação ponto a ponto da nuvem de pontos [69].

Para o uso da PointNet para classificação, foi criado um banco de dados para o treino da rede neural que tem como *input* a nuvem de pontos e como *output* o número de trajetórias presentes no evento. Um dos pontos negativos da PointNet é seu tamanho fixo nos dados de entrada [69], pois no caso dos dados desse trabalho, o número de pontos por evento não é fixo. Para resolver isso, foi selecionado um tamanho fixo $n = 300$ pontos para todas as nuvens de pontos. Eventos com menos pontos eram preenchidos com pontos repetidos da mesma nuvem para completar até o tamanho n . Eventos com menos do que 100 pontos e mais que 300 pontos foram descartados pois geralmente são ruídos e a saturação do detector devido à faísca.

Para determinar o número de trajetórias nos eventos para o treino da rede neural, foi utilizado o estimador robusto que chamei de prototype-RANSAC (RANdom SAmple Consensus), que é uma variação do RANSAC [71, 14]. A escolha dele no lugar do HDBSCAN é pela melhor acurácia na identificação de trajetórias, apesar de ser cerca de 4 vezes mais lento. As nuvens de pontos (sem o acréscimo de pontos para a PointNet) ainda passam pelos dois filtros e critérios de correção mostrados na seção 5.1. O algo-

ritmo 1 mostra o funcionamento do p-RANSAC. O algoritmo seleciona dois pontos de modo aleatório (*Random Sampling*) e determina o versor \hat{v} e o ponto P_b que descrevem a única reta r que passa pelos dois pontos. A reta é selecionada caso tenha um número mínimo de pontos $N_{min} = 24$ que pertencem à reta (chamado de *inliers*) e tenha o mínimo (com relação aos outros conjunto de pontos) da estimativa C dada por [14]

$$C = \sum_{i=0}^N \frac{d_i^2}{N}, \quad (5.10)$$

onde N é o número total de pontos de uma reta e d_i é a distância do i-ésimo ponto à reta. O número de iterações do algoritmo foi determinado como sendo 700.

Algoritmo 1: p-RANSAC

Dados: pointcloud, N , d_{min} , N_{min}

- 1 **para** cada iteração $i = 1, 2, \dots, N$ **faca**
 - 2 Seleciona dois pontos da *pointcloud* de modo aleatório (*Random Sampling*);
 - 3 Estima versor v e um ponto P_b que passe pela reta r formada pelos dois pontos;
 - 4 **para** cada ponto P **faca**
 - 5 Calcula a distância d do ponto à reta r ;
 - 6 **se** $d < d_{min}$ **então**
 - 7 Guarda P como pertencente à r ;
 - 8 **se** Número de pontos de $r > N_{min}$ **então**
 - 9 Guarda v , P_b e C ;
 - 10 Ordena as retas do menor para o maior C ;
 - 11 **para** cada reta r ordenada **faca**
 - 12 **se** Número de pontos de $r > N_{min}$ **então**
 - 13 Guarda v , P_b e pontos $P \in r$;
 - 14 **retorna** Retas r selecionadas na última etapa;
-

Para o *output* foram escolhidos eventos que possuem de 0 até 5 trajetórias. Com o *output* construído, a rede para classificação foi treinada, onde a função custo foi a *categorical cross entropy* [39] e o otimizador o ADAM [40]. A métrica utilizada foi a acurácia categórica e foi de 70% quando concluído o treino. Exemplo do resultado da aplicação da rede neural em nuvens de pontos está na figura 5.4.

Trajetórias = 3. Resultado PointNet = 3

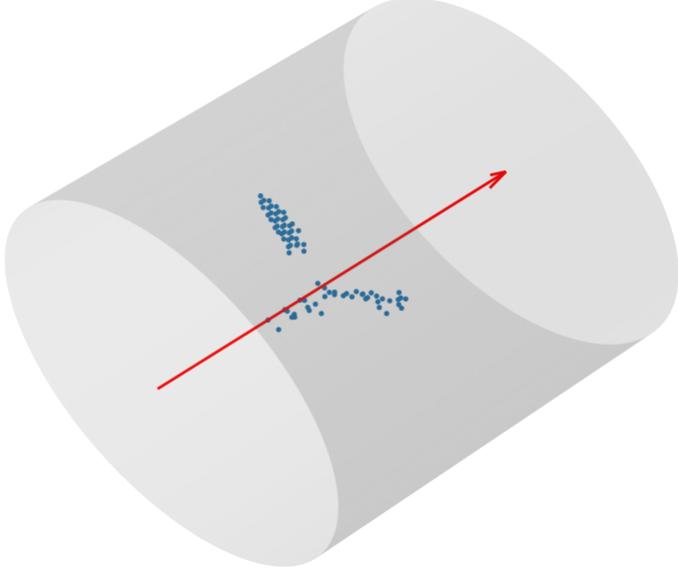


Figura 5.4: Nuvem de pontos que possui 3 trajetórias para serem identificadas e a rede neural de classificação calculou que haviam 3 trajetórias, o que indica um resultado correto do algoritmo.

Eventos com 4 ou 5 trajetórias ocorrem com uma frequência muito menor (menos que 5% do total de dados) que eventos de 1 e 2 trajetórias (cerca de 85% do total de dados), caracterizando o banco de dados com o problema de desbalanço de classe, o que pode ter prejudicado o treino para identificar eventos mais incomuns. No dados do experimento desse trabalho não foi necessário utilizar essa rede neural, pois a etapa de identificação de trajetórias é rápida em comparação com a mesma etapa usando dados gerados com um alvo de maiores dimensões como o AT-TPC [8, 6].

5.2.2 Identificação de *outliers*

Um possível uso para a rede de segmentação semântica é para classificar pontos como *inliers* ou *outliers*, semelhante ao uso do algoritmo *outlier removal* da biblioteca Open3D [63]. A diferença é que com a PointNet pode-se incluir *outliers* locais [70], não apenas os globais para serem identificados.

Para o *output* da rede neural, os pontos classificados como *outliers* globais ou locais possuem valor 0 e pontos que são *inliers* (pertencem à alguma trajetória) possuem valor 1. A rede de segmentação foi treinada, com a função custo sendo a *binary cross entropy* e a métrica a acurácia binária. A acurácia da rede foi de aproximadamente 93%, se mostrando uma boa alternativa para eliminação de ruído nos eventos. A figura 5.5 mostra o resultado da aplicação da rede de segmentação em uma nuvem de pontos.

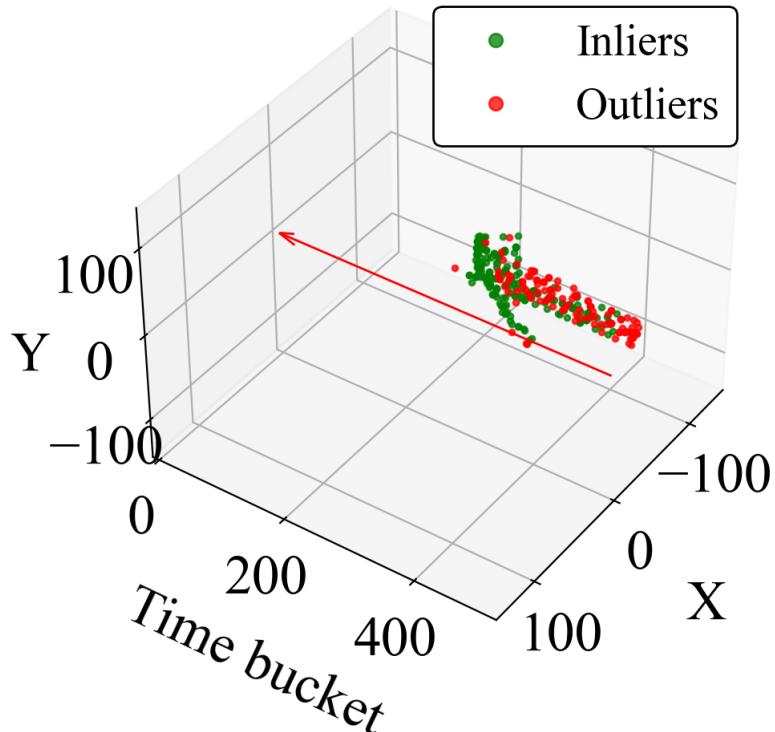


Figura 5.5: Identificação de outliers com a rede neural de segmentação. A rede neural foi capaz de identificar os *outliers* desse evento com 95% de acurácia.

Existem outras redes neurais que são capazes de lidar com *pointclouds*, como a PointNet++ [72] e Dynamic Graph CNN [73]. Para a abordagem de identificação de trajetórias de forma direta, uma opção é utilizar a rede neural ContrastNet [74], pois a rede é capaz de fazer *clustering* nos dados, retornando os diferentes *clusters* existentes nos dados. Num futuro, estamos pensando em utilizar esses tipos de ferramentas para realizar *clustering* em nuvens de pontos em outros experimentos usando múltiplos canais de reação. No entanto, esse projeto esta além dos objetivos desta dissertação.

A classificação e ajuste de trajetórias apresentados no presente capítulo permitem obter informação da cinemática das reações nucleares e extrair as respectivas distribuições angulares. Essa análise é discutida no próximo capítulo.

Capítulo 6

Resultados

Esse capítulo mostra a reconstrução das distribuições angulares da reação de breakup do ^{17}F a partir da análise das nuvens de pontos, como foi apresentado no capítulo 5.

6.1 A cinemática da reação

O processo de reconstrução de reações nucleares no alvo ativo é complexo e envolve várias etapas como: identificação de trajetórias e multiplicidade, determinação do vértice de reação, identificação de partículas e reconstrução da energia e ângulos da reação. As subseções a seguir descrevem essas etapas.

6.1.1 Reconstrução do vértice da reação

Como foi descrito no capítulo 5, para analisar as nuvens de pontos (reações nucleares) é necessário identificar as trajetórias das partículas dentro do gás que formam linhas retas originadas num determinado vértice. Isso é feito com estimadores robustos, como o algoritmo p-RANSAC (algoritmo 1, apresentado na subseção 5.2.1 e também na referência [14]), que é capaz de identificar os diferentes aglomerados mesmo na presença de outliers.

Após a identificação e ajuste das trajetórias, é preciso determinar o vértice da reação para cada evento. O vértice é o ponto no espaço no qual ocorre a reação nuclear e pode ser determinado pela extrapolação das trajetórias na região central do alvo ativo. Para isso, é calculado o ponto de interseção (ou mais próximo) entre duas retas, como mostra a equação 5.6. O feixe incide na parte central pelo eixo axial do alvo, região cujo ganho do micromegas é baixo para evitar a saturação dos sinais (devido à passagem do feixe). Portanto, para calcular o vértice de reação, é necessário extrapolar as trajetórias na região central. A partir do vértice, então, é possível calcular o comprimento L da trajetória (dado

pela equação 5.9), mesmo com a ausência de informação na região central.

Para alguns eventos foi possível observar a trajetórias do feixe e partículas produto da reação saindo de um mesmo vértice (ver figura 6.1a). Neste caso, o vértice corresponde ao ponto médio da interseção dessas trajetórias. Porém, na maioria dos casos não foi possível observar a trajetória do feixe por causa do baixo ganho nos pixels centrais do detector. Por exemplo, a figura 6.1b mostra só dois produtos de reação saindo do mesmo vértice. Neste caso, o vértice pode ser reconstruído pela extrapolação das retas ajustadas às trajetórias das partículas. Por fim, o caso mais complicado é quando apenas foi identificada uma trajetória (ver figura 6.1c). Para reconstruir o vértice com apenas uma trajetória, é necessário assumir uma direção para a partícula do feixe. Assim como foi mencionado no capítulo 5, se assume que o feixe tem direção $(0,0,1)$ e ponto de corte $(-3.4,-0.9,0)$ que foi calculado usando a posição média da projeção dos pontos de um conjunto de eventos no plano $x-y$. Portanto, o vértice corresponde ao ponto mais próximo da trajetória partícula com a trajetória assumida para o feixe.

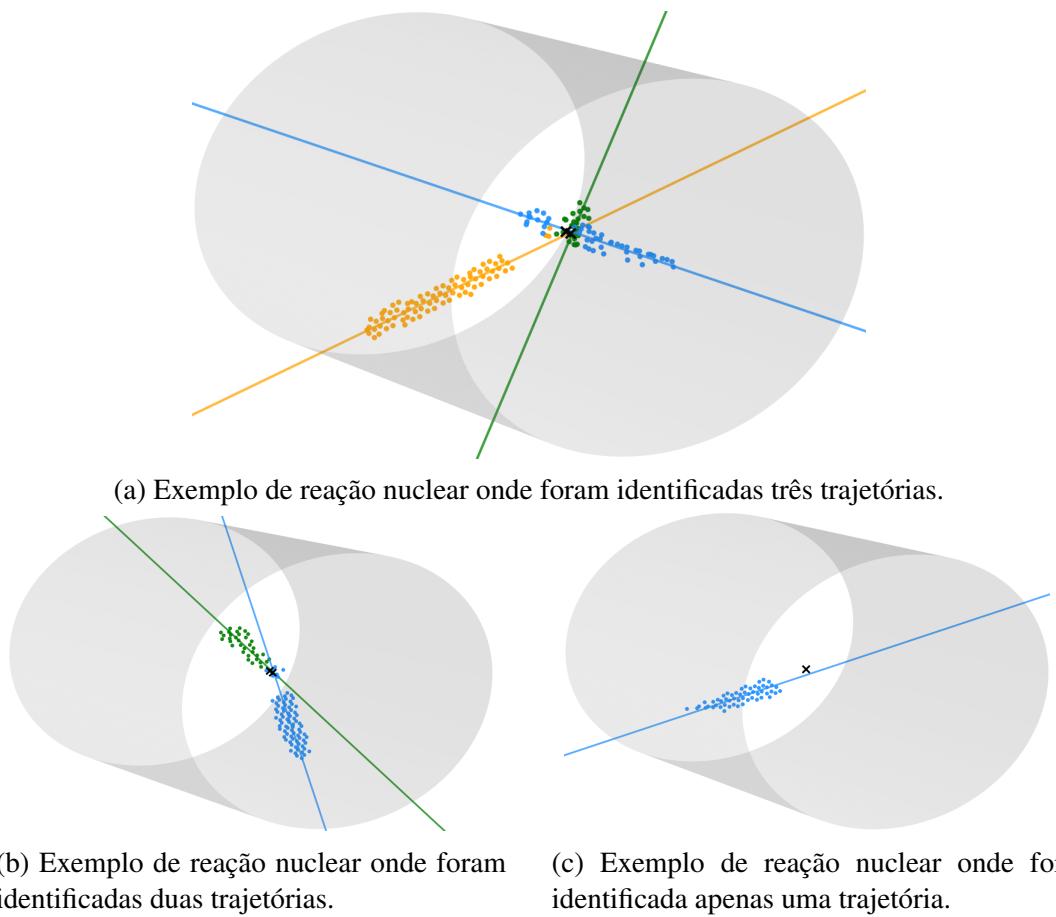


Figura 6.1: Exemplos de reações nucleares com as trajetórias identificadas. O vértice de reação é indicado por um X, em preto. As cores servem apenas para a diferenciação.

6.1.2 Reconstrução da energia das partículas

Numa primeira aproximação, a energia da trajetória pode ser estimada a partir da equação 5.8, onde são somadas todas as cargas acumuladas dos pontos da trajetória. Porém, a eficiência de detecção depende da energia depositada pela partícula no gás. Da mesma forma, alguns pontos das trajetórias das partículas podem estar ausentes devido ao processamento eletrônico ou mesmo na reconstrução das nuvens de pontos. Outra forma de reconstruir a energia da partícula é a partir do comprimento da trajetória usando o respetivo poder de freamento (stopping power). O stopping power depende principalmente da carga da partícula incidente e das propriedades do gás, como a pressão e temperatura. O stopping power foi calculado usando o programa LISE++[75] e os respectivos comprimentos das trajetórias associadas a partículas como ^{16}O , alfas e prótons num gás de ^4He à uma pressão de 350 Torr. A figura 6.2 mostra o alcance em função da energia do ^{17}F , ^{16}O e próton, onde é possível ver a diferença de alcance das partículas dentro gás, especialmente entre as partículas pesadas (^{17}F , ^{16}O) e o próton.

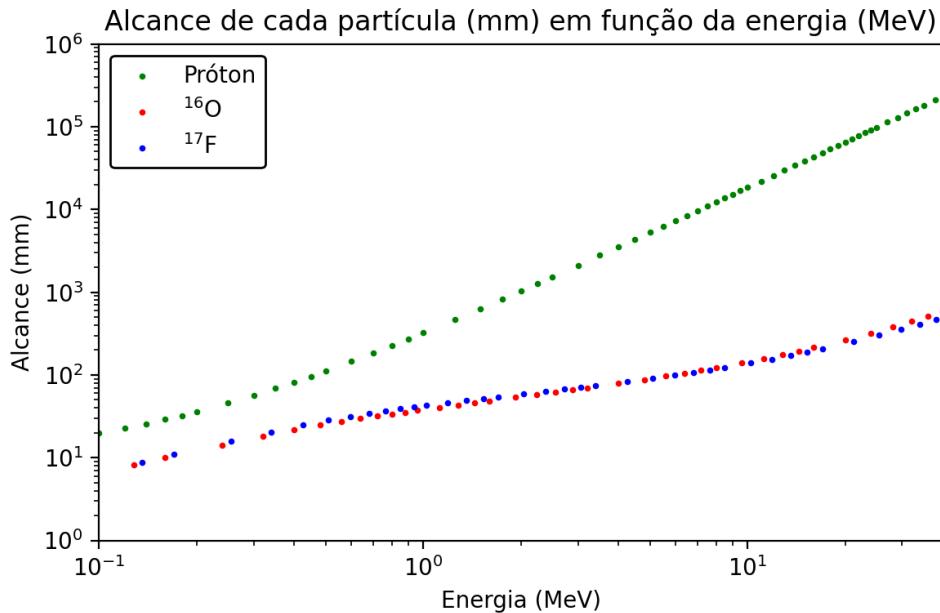


Figura 6.2: Alcance (mm) em função da energia (MeV) para o ^{17}F , ^{16}O e próton. A grande diferença está no próton que tem um alcance muito maior que os outros núcleos.

Portanto, cada tipo de partícula tem um alcance diferente dentro do mesmo gás que depende da energia incidente. Por exemplo, para determinar a energia cinética do ^{17}F antes da reação nuclear, pode se usar a distância entre a janela do detector e o vértice da reação. Para isso, o espaço no eixo z foi discretizado, a fim de calcular a energia na posição da reação. O feixe, ao entrar no gás, possui energia inicial $E_i = 34.76$ MeV, e

perde energia ao atravessar o gás. A energia de reação E_r é dada por

$$E_r = E_i - E_{loss}, \quad (6.1)$$

onde E_{loss} é a energia do ^{17}F depositada no gás que é calculada a partir da distância L até o vértice da reação. O comprimento L é transformado em energia cinética usando uma tabela de *stopping power*. Similarmente, a energia de outras partículas (e.g. alfa), que param completamente no gás, é calculado com o alcance da partícula (relativo ao vértice) e a sua respetiva tabela de *stopping power*.

6.1.3 Determinação dos ângulos de reação

Para determinar os ângulos azimutal e axial (em coordenadas esféricas), foram feitos os ajustes tridimensionais dos aglomerados identificados (usando estimadores robustos ou algoritmos de clustering, como discutido no capítulo 5).

O ângulo de reação, para cada trajetória identificada, depende da determinação do versor de cada uma das trajetórias e também do versor do feixe. A partir das propriedades geométricas das trajetórias (versores das retas), são calculados os ângulos azimutal e axial com relação à direção em que o feixe incide na câmara (veja que a direção do feixe não necessariamente coincide com o eixo simétrico do TPC).

Para cada trajetória (reta) i , o ângulo azimutal ϕ_i é dado por

$$\phi_i = \text{atan2} \left(\frac{y_i}{x_i} \right), \quad (6.2)$$

onde atan2 é o arco-tangente calculado entre $-\pi$ e π , y_i e x_i são componentes x e y do versor da reta i . Para o ângulo polar θ , ele é calculado a partir do produto interno entre o versor da reta e o versor do feixe, ou seja:

$$\theta = \arccos \left(\frac{\vec{V}_i \cdot \vec{V}_f}{|\vec{V}_i| |\vec{V}_f|} \right), \quad (6.3)$$

onde \vec{V}_i é o versor da reta i e \vec{V}_f é o versor do feixe.

6.2 Identificação do canal de reação de breakup

Com o alvo ativo, é possível medir diversos canais de reação num mesmo experimento. Isso fica evidente ao olhar para a figura 6.3, que mostra um histograma bidimensional do comprimento da trajetória da partícula em função do ângulo de espalhamento

(polar) no referencial de laboratório. Eventos de espalhamento em ângulos menores que 5 graus e reações na janela de entrada foram previamente removidos neste histograma.

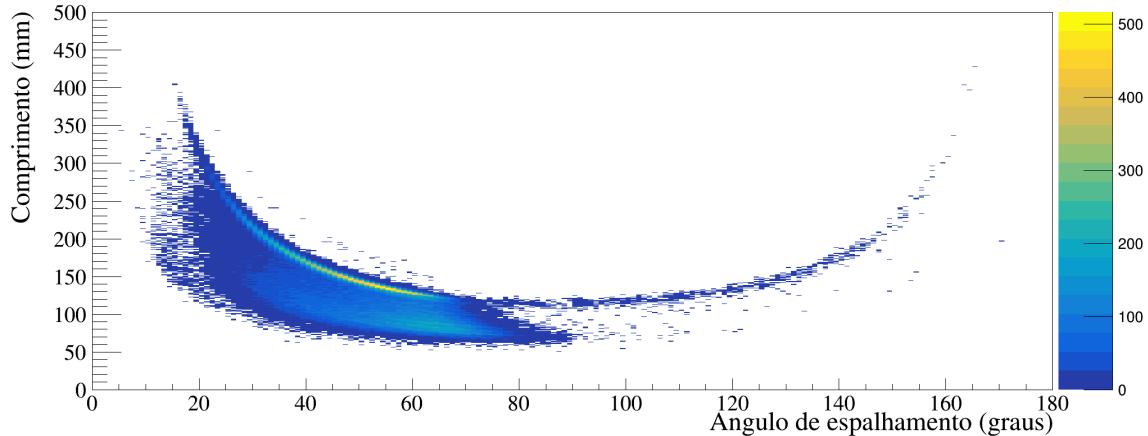


Figura 6.3: Histograma de comprimento de *track* no eixo *y* e ângulo de espalhamento no eixo *x*.

Pela figura 6.3, é possível perceber dois aspectos importantes sobre os dados. O primeiro é que o canal de reação elástico e inelástico é predominante no espectro. Esse é um dos motivos pela assimetria com relação ao ângulo de espalhamento. Devido a que o experimento foi realizado em cinemática inversa, o ângulo de espalhamento da partícula de recuo depende do valor do Q da reação. Por exemplo, partículas alfa espalhadas elasticamente são detectadas em ângulos dianteiros menores que 90 graus. Os ângulos maiores que 90 graus neste caso correspondem a reações com $Q > 0$, por exemplo a reação (α, p) . O segundo aspecto é a ausência de eventos na parte inferior da figura 6.3. Essa ausência ocorre devido ao baixo ganho da região central do detector micromegas que limita a detecção de tracks menores do que 60 mm. Da mesma forma, a ausência de eventos na parte superior do histograma corresponde a limitação geométrica do TPC que possui um raio de 150 mm e comprimento de 500 mm.

A fim de obter o canal de breakup $\alpha(^{17}\text{F}, ^{16}\text{O} + p)$, é necessário identificar os eventos com prótons. A figura 6.4 mostra um exemplo de breakup de ^{17}F em ^4He observado no experimento.

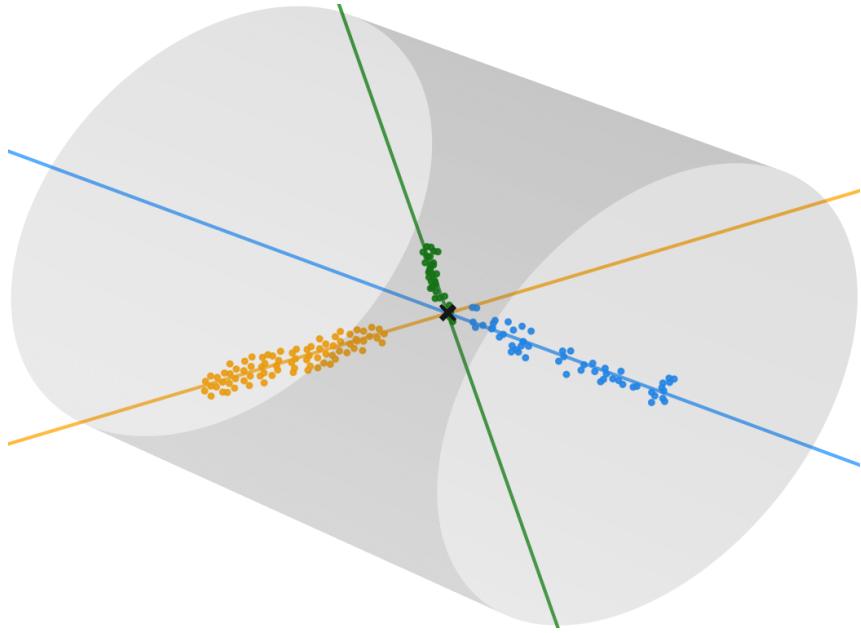


Figura 6.4: Evento onde há a trajetória originada por um próton (trajetória em amarelo), onde percebe-se que seu comprimento vai até o limite geométrico da câmara (cilindro cinza transparente). O feixe está em azul e o ^{16}O originou a trajetória em verde.

A seleção de eventos é feita aplicando vários gates (condições lógicas) para identificar os eventos com prótons. Isto pode ser feito num histograma de carga do track em função de seu comprimento. A relação entre essas duas variáveis se dá por meio do stopping power, onde o termo dominante da equação de Bethe Block [76] em baixas energias pode ser aproximado a

$$\frac{dE}{dx} \propto -\frac{4\pi Z^2 e^4 N_e}{m_e v^2}, \quad (6.4)$$

onde E é a energia da partícula com carga Ze (e é a carga do elétron) e velocidade v ao atravessar um gás com N_e elétrons por unidade de volume. Sabendo que $2E = Mv^2$, onde M é a massa da partícula, segue que

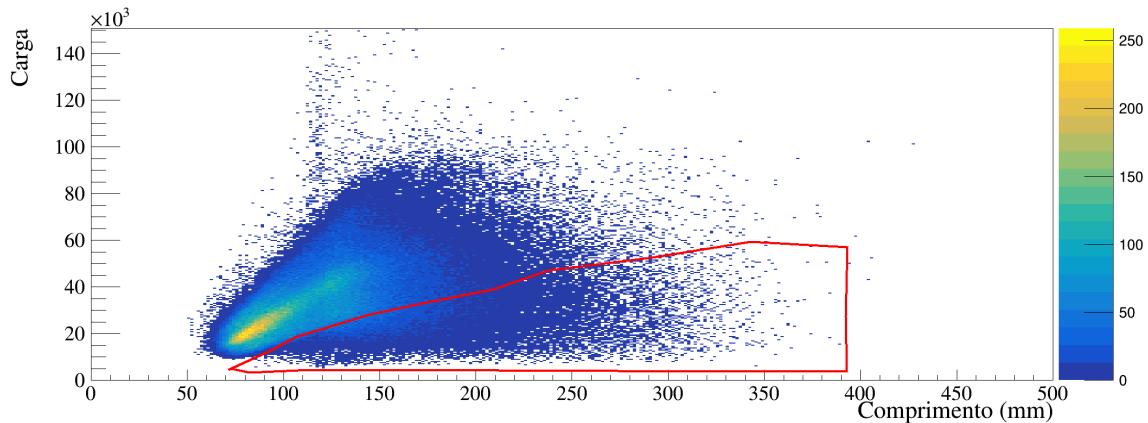
$$\int_0^E |2E' dE'| \propto \int_0^L \frac{4\pi Z^2 e^4 N_e M}{m_e} dx, \quad (6.5)$$

integral que resulta em

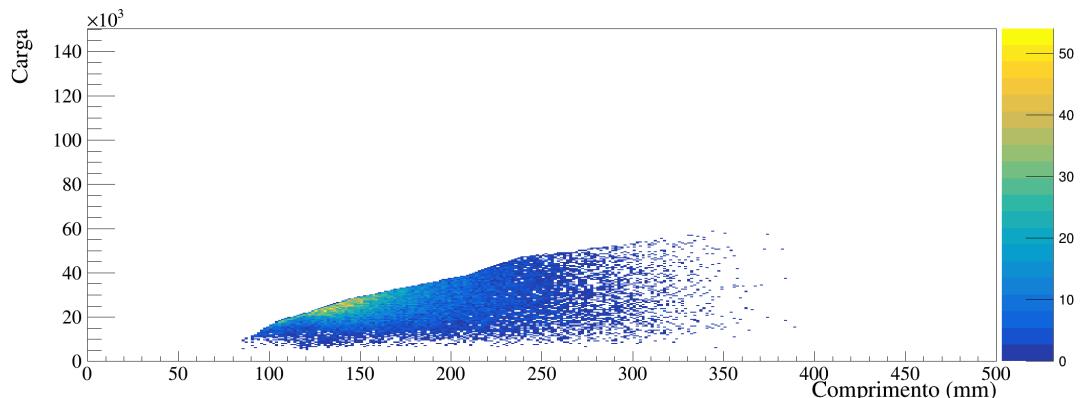
$$E^2 \propto (LM) \frac{4\pi Z^2 e^4 N_e}{m_e}. \quad (6.6)$$

Portanto, existe uma relação do quadrado da energia (ou carga depositada) com o comprimento da trajetória. O termo M mostra que quanto maior a massa M (e também o Z) da partícula, maior é a carga depositada. Dessa forma, os prótons podem ser identificados num histograma de carga em função do comprimento do track (proporcional à energia

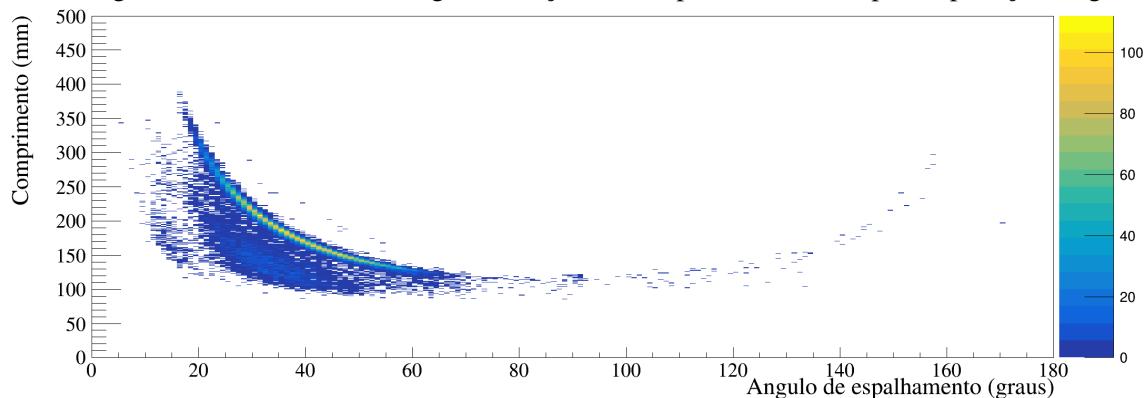
depositada) como a região inferior à faixa das alfas, assim como mostrado na figura 6.5a. O resultado da aplicação do gate para o espectro de comprimento em função do ângulo de espalhamento (ver figura 6.3) está na figura 6.5c.



(a) Histograma bidimensional da carga em função do comprimento (mm). A linha vermelha indica o gate, onde pontos (trajetórias) fora da região foram descartados.



(b) Histograma bidimensional da carga em função do comprimento (mm) após a aplicação do gate.

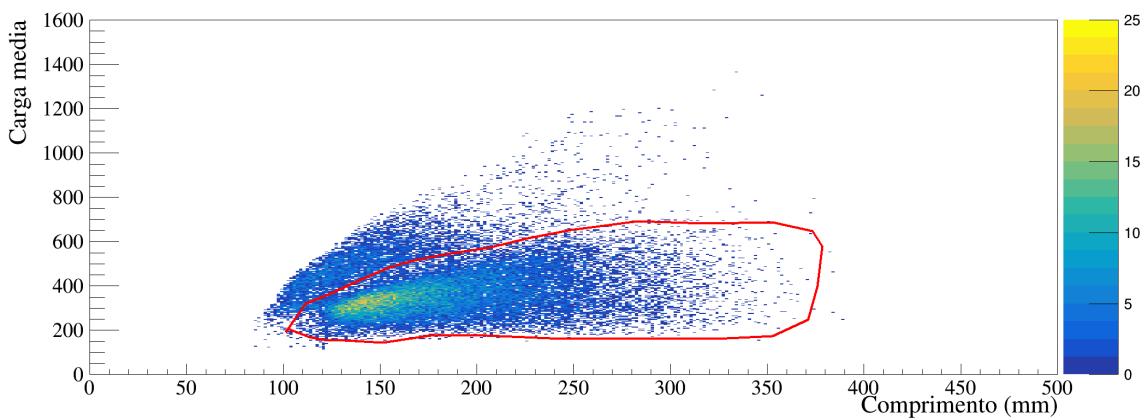


(c) Histograma bidimensional do comprimento (mm) em função do ângulo de espalhamento (graus) no referencial do laboratório após o gate.

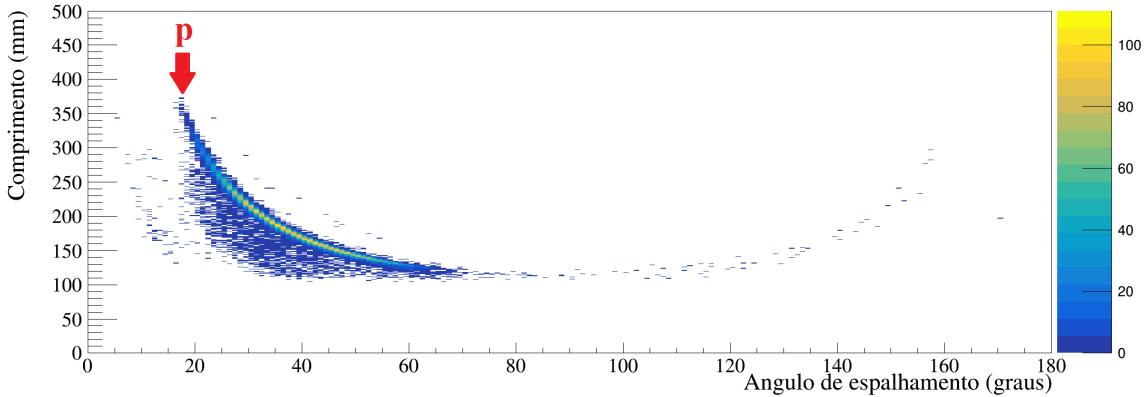
Figura 6.5: Processo de aplicação do primeiro gate para identificar as trajetórias de reação de breakup. O resultado é o espectro da figura 6.5c.

Como pode-se perceber, o gate removeu quase todos os eventos de espalhamento elástico e inelástico de alfas. Somente sobraram duas faixas que correspondem às partículas que não param completamente no gás e partículas espalhadas em ângulos maiores que 20 graus que param no gás. A primeira faixa corresponderia principalmente aos prótons e alfas, pois com apenas 1 MeV de energia cinética atravessam o gás (ver figura 6.2). A segunda faixa (no caso um aglomerado) seriam partículas alfa que pararam perto do limite geométrico do alvo ativo..

O gate anterior precisa ainda ser refinado pois ainda há a contribuição de partículas alfa no espectro. Devido a que as partículas alfa depositam maior energia num menor comprimento do que os prótons, a carga média permite visualizar essa diferença. A carga média é definida como a carga total depositada pela partícula dividida pelo número total de pontos no track. O espectro da figura 6.6a mostra a carga média em função do comprimento do track usando o gate da figura 6.6. Pode-se perceber que tem dois aglomerados, um na parte inferior com maior densidade (prótons) e outro na parte superior, logo acima da linha vermelha na imagem, onde há partículas alfa, onde suas trajetórias possuem uma carga média maior que a dos prótons. Ao excluir trajetórias fora da região delimitada pela linha vermelha na figura 6.6a, é possível identificar os prótons no espectro de comprimento em função do ângulo de espalhamento, mostrado na figura 6.6b.



(a) Histograma bidimensional da carga média em função do comprimento (mm). A linha vermelha indica o segundo gate, onde eventos com trajetórias fora da região foram descartados.



(b) Histograma bidimensional do comprimento (mm) em função do ângulo de espalhamento (graus) após a aplicação do gate mostrado na figura 6.6a. Com esse gate, é possível identificar as trajetórias do próton, indicadas na figura.

Figura 6.6: Processo de aplicação do segundo gate para identificar os prótons. O resultado é um espectro da figura 6.6b.

Para identificar eventos de breakup (ou o canal de breakup), podendo identificar agora os prótons, basta aplicar a condição tal que sejam identificadas duas trajetórias coincidentes (tais que não sejam a do feixe), ou seja, que possuem o mesmo vértice de reação. O canal de breakup é identificado aplicando as condições anteriores com a condições de coincidência, que são eventos com duas trajetórias com o mesmo vértice de reação. Essa condição elimina outros canais de reação, como o canal de fusão. Aplicadas essas condições, tem-se o espectro do comprimento em função do ângulo de espalhamento para eventos com duas trajetórias coincidentes, mostrado na figura 6.7.

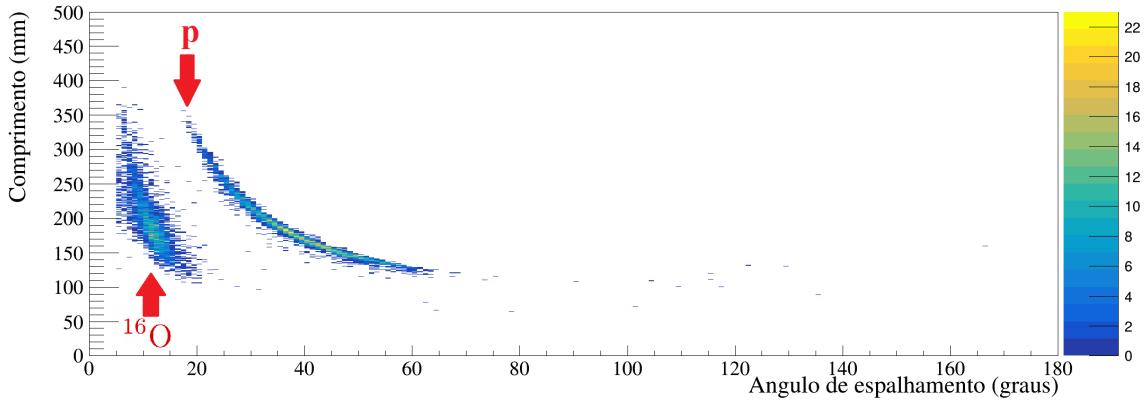


Figura 6.7: Histograma bidimensional do comprimento (mm) em função do ângulo de espalhamento (graus) para eventos com coincidência. Nele é possível identificar os prótons (trajetórias que não param no gás) e o ^{16}O , que possui trajetórias com ângulos mais dianteiros e comprimentos menores.

Identificados o canal de breakup nos eventos, foi possível construir as distribuições angulares da reação de breakup do ^{17}F em ^4He .

6.3 Construção das distribuições angulares

Identificado o canal de breakup, foi possível construir as distribuições angulares. As medidas nas quais foram identificadas uma única partícula, no caso o próton, são chamadas de breakup inclusivo. Quando há coincidência, ou seja, a medida coincidente do próton e do ^{16}O , é chamada de breakup exclusivo.

Com o alvo ativo é possível medir reações em diversos ângulos e energias. Portanto, é preciso primeiro discretizar (colocar em bins) os ângulos de espalhamento θ_p (ângulos de espalhamento dos prótons no referencial do laboratório). Cada bin θ_{bin} de θ_p possui largura de 4° , escolhida de modo a não prejudicar o espectro por problemas de binning ou flutuações estatísticas. A incerteza sobre essa escolha é de aproximadamente 1° . A seção de choque diferencial $\frac{d\sigma}{d\Omega}(\theta_p)$ é dada por [19]

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}(\theta_p) = \frac{Y}{N_b N_t \Delta\Omega(\theta_p)} \times 10^{27} \text{ mb/sr}. \quad (6.7)$$

Os termos dessa expressão são:

- Y

É o número de contagens dos eventos de interesse. Esse valor é obtido a partir de contagens de eventos em que foi identificada coincidência, para o breakup exclusivo, ou foi identificado apenas o próton, para o breakup inclusivo.

- N_t

É o número total de partículas no alvo gasoso por unidade de área (perpendicular ao feixe). Esse número é obtido a partir da equação dos gases ideais [77], onde chega-se em:

$$N_t = \frac{PdN_A}{RT} \text{ part./cm}^2, \quad (6.8)$$

onde P é a pressão do alvo gasoso, d é o comprimento da câmara, N_A é o número de Avogrado, R a constante universal dos gases ideais e T a temperatura. Para $P = 350$ Torr e $T = 300$ K, $N_t = 5.63 \times 10^{20}$ part./cm².

- N_b

É o número de partículas do projétil que estão incidindo no alvo gasoso, determinado a partir de medidas de espalhamento elástico feitas com o próprio alvo gasoso ⁴He. O espalhamento elástico obtido experimentalmente (calculado pela equação 6.7) é comparado ao valor teórico para assim obter o número médio de partículas que estão incidindo no alvo:

$$N_b = \left(\frac{Y}{N_t \Delta\Omega} \right)_{\text{alvo}} \left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right)^{-1}_{\text{Ruth}}. \quad (6.9)$$

- $\Delta\Omega(\theta_p)$

Ângulo sólido obtido através do ângulo θ_p , dado por:

$$\Delta\Omega(\theta_p) = 2\pi \int_{\theta_p}^{\theta_p + \theta_{bin}} \sin(\theta) d\theta. \quad (6.10)$$

A incerteza $\partial \left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right)$ da seção choque é dada por

$$\partial \left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right) = \left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right) \left[\left(\frac{\partial Y}{Y} \right)^2 + \left(\frac{\partial N_b}{N_b} \right)^2 + \left(\frac{\partial N_t}{N_t} \right)^2 + \left(\frac{\partial (\Delta\Omega)}{(\Delta\Omega)} \right)^2 \right]^{1/2}, \quad (6.11)$$

onde ∂x é a incerteza da respectiva variável x .

A normalização deve ser obtida a partir da análise do canal elástico do experimento. Até o momento da escrita dessa dissertação, o valor da normalização é preliminar e vale 0.243 (56), onde a luminosidade integrada L é

$$L = 0.243 \times 10^{27} \text{ cm}^{-2} = 2.4 \times 10^{26} \text{ cm}^2. \quad (6.12)$$

A energia do feixe também foi discretizada para obter as distribuições angulares. O tamanho da bin da energia foi escolhido de forma a evitar flutuações estatísticas, como poucas contagens em certas energias. Como a energia do feixe depende da posição em z do vértice de reação, ela foi discretizada a cada 10 mm, o que resulta em bins de aproximadamente 1.2 MeV (no referencial do laboratório) de largura. A partir dessas bins, foi calculada a energia do feixe. A figura 6.8 mostra o espectro da seção de choque em função da energia no referencial do centro de massa. As distribuições angulares estão mostradas nas figuras 6.9, 6.10 e 6.11.

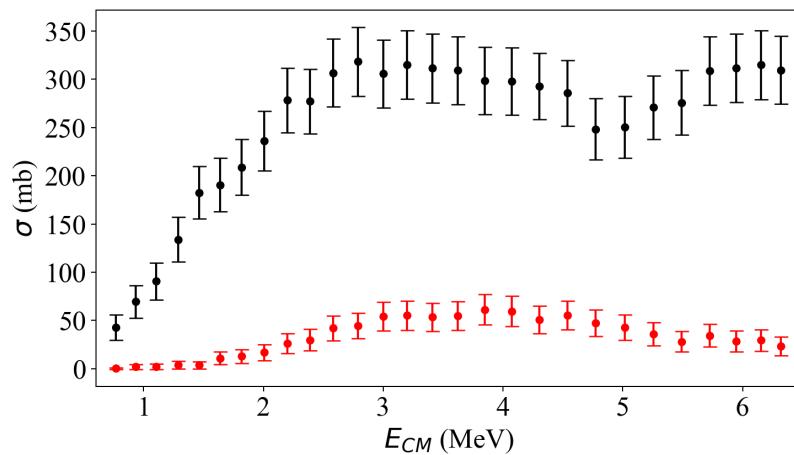


Figura 6.8: Gráfico que mostra a seção de choque σ em função da energia no referencial do centro de massa. Os pontos de cor preta correspondem à seção de choque do breakup inclusivo e os pontos de cor vermelha correspondem à seção de choque do breakup exclusivo.

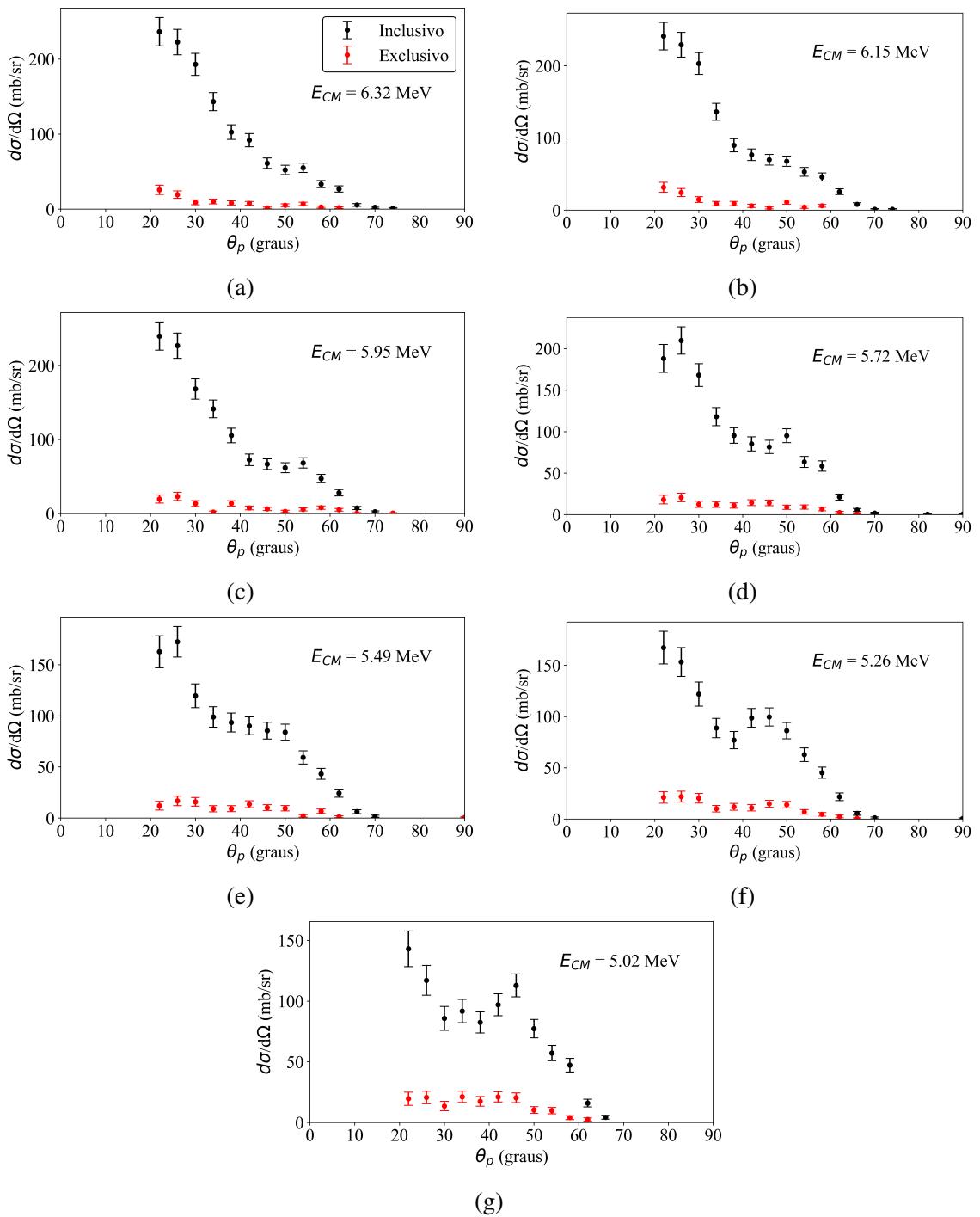


Figura 6.9: Distribuições angulares de breakup do ^{17}F em ^4He em função do ângulo de espalhamento do próton θ_p no referencial do laboratório. As energias estão acima da barreira de Coulomb da reação (4.2 MeV).

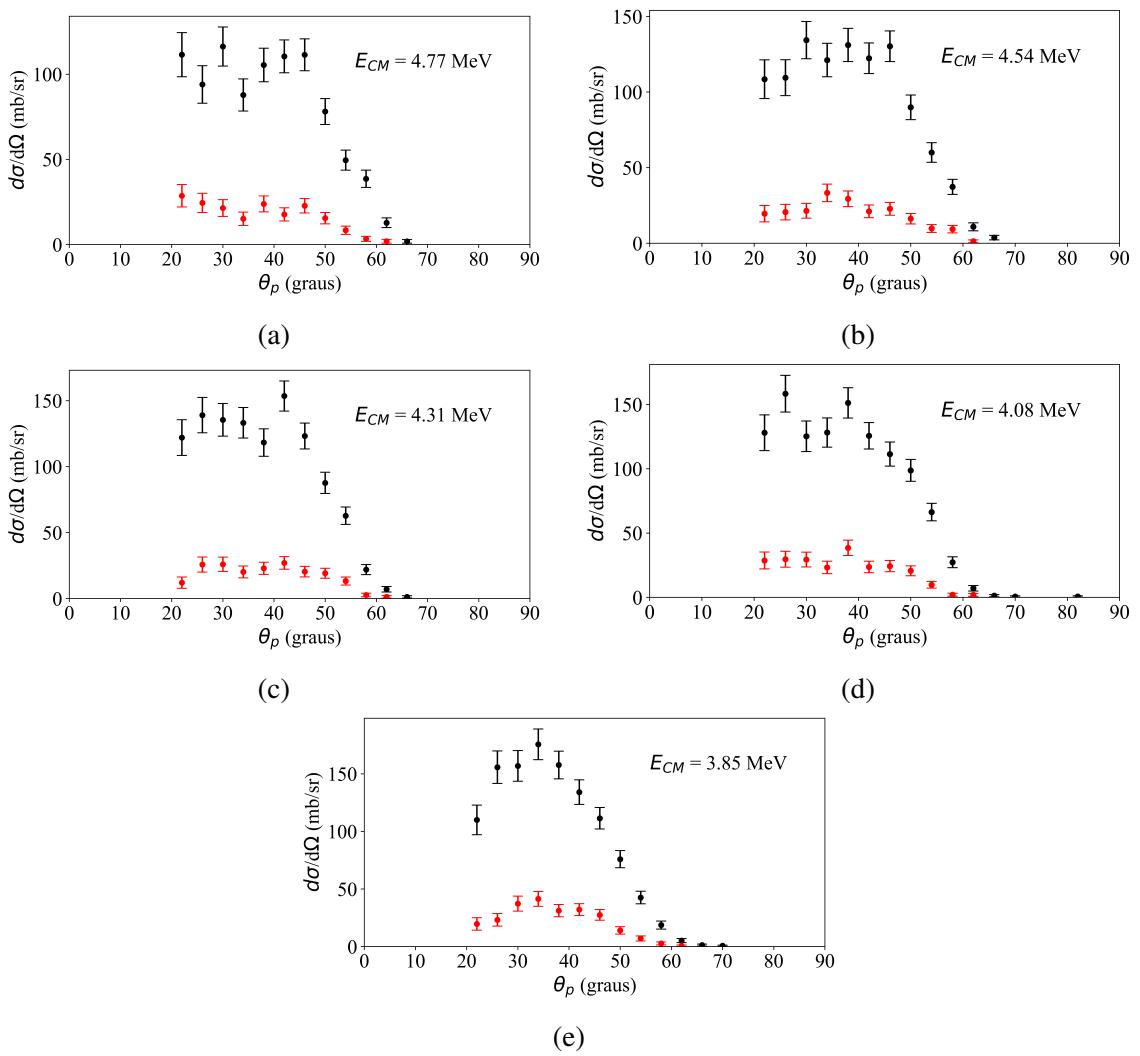
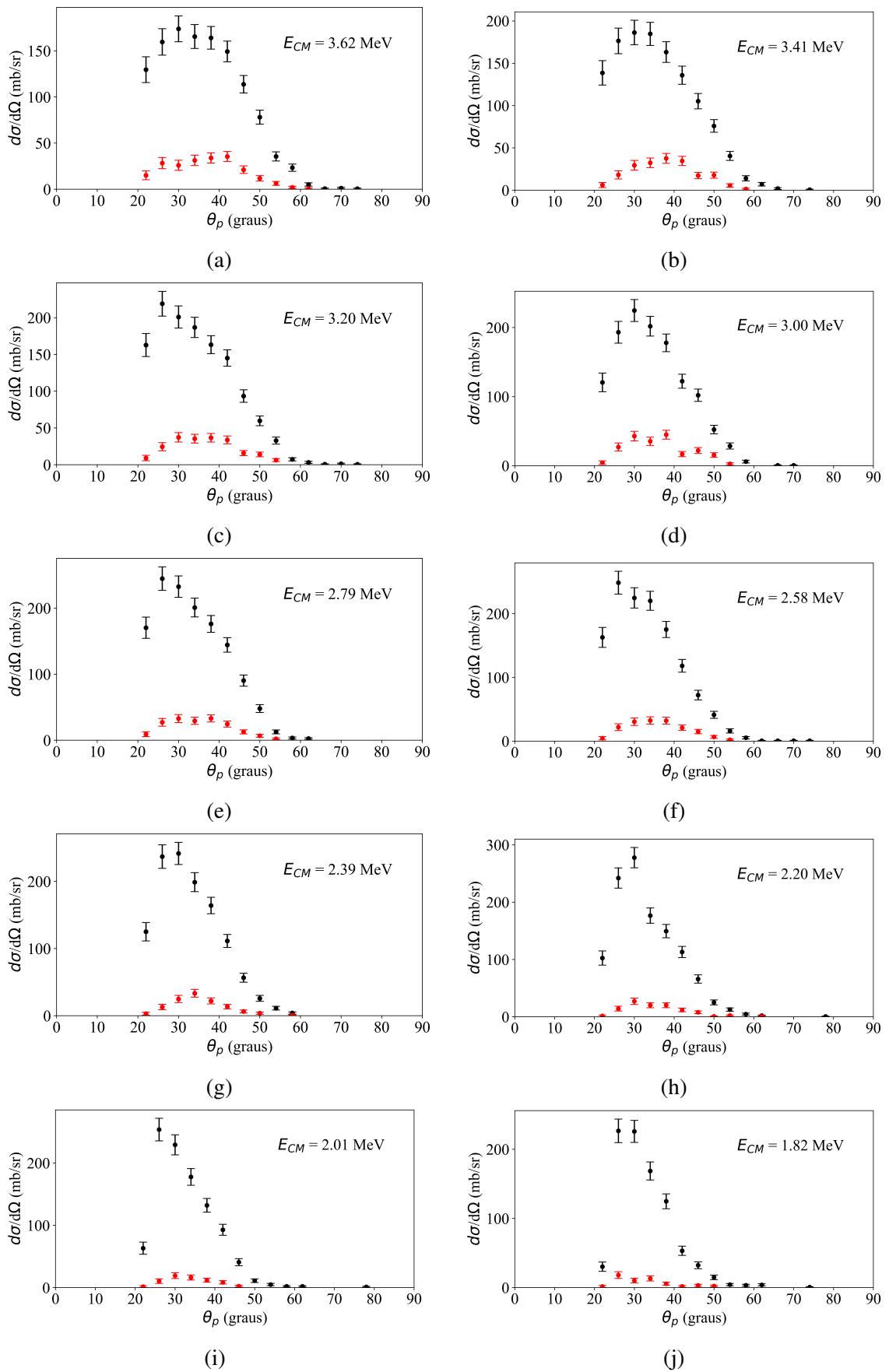


Figura 6.10: Distribuições angulares de breakup do ^{17}F em ^4He em função do ângulo de espalhamento do próton θ_p no referencial do laboratório. As energias estão próximas da barreira de Coulomb da reação (4.2 MeV).



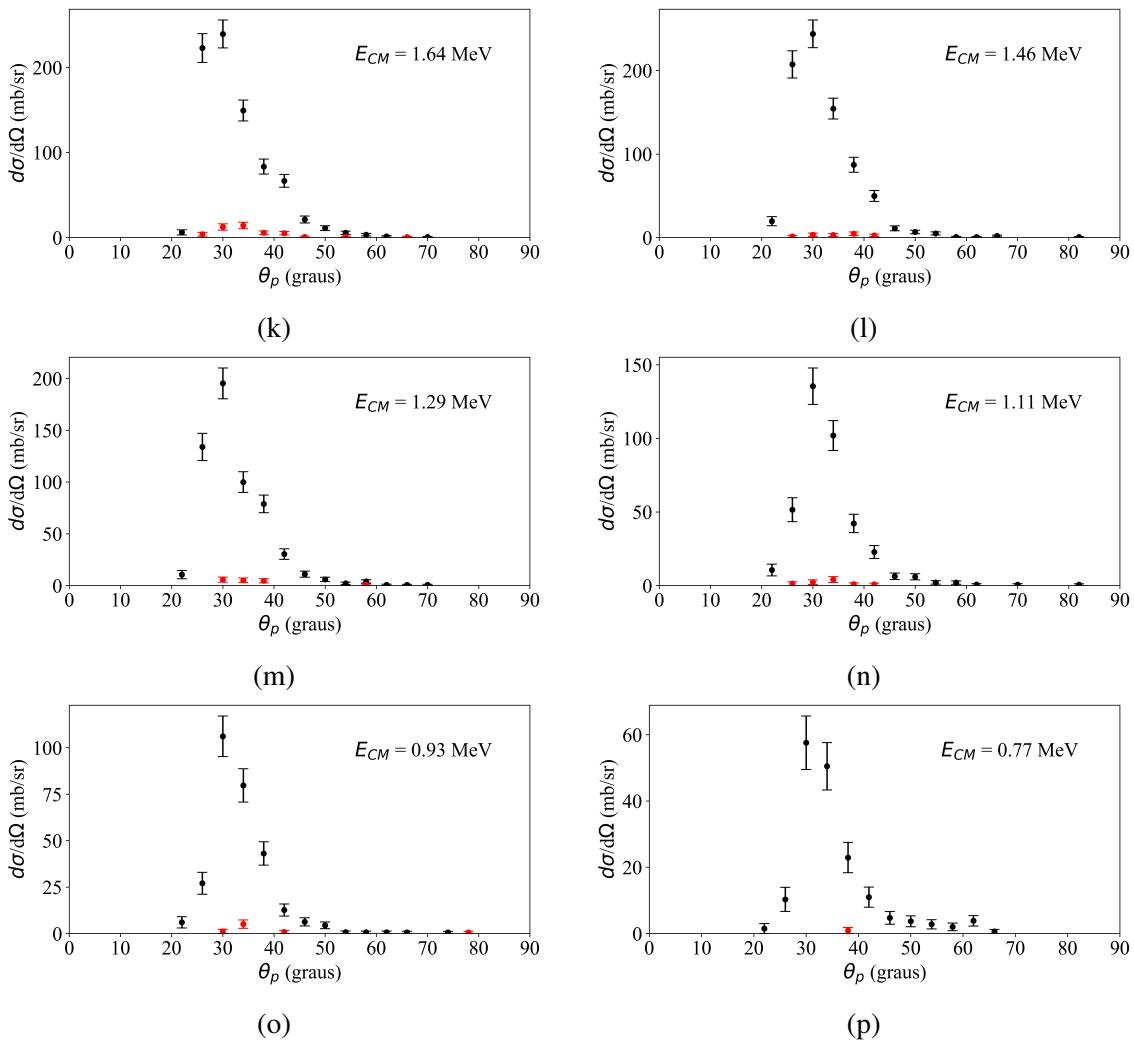


Figura 6.11: Distribuições angulares de breakup do ^{17}F em ^4He em função do ângulo de espalhamento do próton θ_p no referencial do laboratório. As energias estão abaixo da barreira de Coulomb da reação (4.2 MeV).

6.4 Análise e comparação dos resultados

Os resultados das figuras 6.9, 6.10 e 6.11 mostram distribuições com energias acima (figura 6.9), próximas (figura 6.10) e abaixo (figura 6.11) da barreira de Coulomb da reação ($V_B = 4.2$ MeV). As distribuições entre 3.63 MeV e 4.77 MeV se distribuem de modo horizontal em ângulos entre 20° e 50° . Distribuições acima da barreira possuem valores maiores em ângulos mais dianteiros (de 20° à 30°). Embaixo da barreira as distribuições são mais estreitas e parecem ter um valor máximo em 30° .

Para analisar reações de breakup (dissociação de Coulomb), usualmente se usa teoria de perturbação em primeira ordem, que demonstra resultados satisfatórios para os casos de breakup de núcleos ricos em nêutrons fracamente ligados. Para o breakup de núcleos

ricos em prótons fracamente ligados, como o caso do ^{17}F , são sugeridos outros métodos para o cálculo da seção de choque [78, 79].

Experimentos para o estudo do breakup do ^{17}F em ^{58}Ni e em ^{208}Pb acima da barreira de Coulomb (energia da barreira de 39.13 MeV para a reação $^{17}\text{F} + ^{58}\text{Ni}$ e 88.03 MeV para a reação $^{17}\text{F} + ^{208}\text{Pb}$) foram feitos no passado em cinemática direta [78]. Os experimentos foram realizados acelerando um feixe de ^{17}F a uma energia de 170 MeV, no referencial do laboratório, incidindo em um alvo de ^{58}Ni ($E_{CM} = 131.47$ MeV) e também em um alvo de ^{208}Pb ($E_{CM} = 157.16$ MeV). As distribuições angulares para cada reação estão na figura 6.12. O que naturalmente se esperava para os resultados do experimento, é de que o breakup do ^{17}F em ^{208}Pb fosse maior que o breakup do ^{17}F em ^{58}Ni , pois $Z = 82$ para o ^{208}Pb contra $Z = 28$ do ^{58}Ni , possuindo maior contribuição Coulombiana no breakup, porém o oposto foi observado. A seção de choque de choque do ^{17}F em ^{208}Pb foi menor que do ^{17}F em ^{58}Ni , resultado que indicou uma possível interação entre as contribuições de Coulomb e nuclear para o breakup [78, 5]. Levar para um caso com Z ainda menor, como o caso desse trabalho, onde $Z = 2$, pode ajudar a compreender melhor o mecanismo de breakup, melhorando o entendimento das contribuições, pois a interação de Coulomb é ordens de grandeza menor que os casos anteriores, favorecendo o estudo da contribuição da parte nuclear e também possíveis efeitos de interferência.

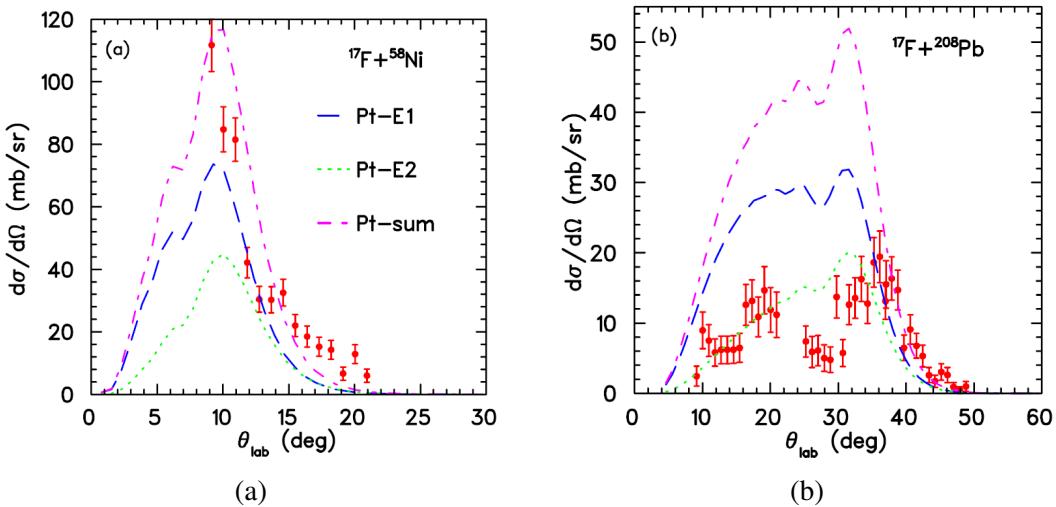


Figura 6.12: Distribuições angulares do breakup exclusivo para (a) $^{17}\text{F} + ^{58}\text{Ni}$ e (b) $^{17}\text{F} + ^{208}\text{Pb}$. As linhas tracejadas representam previsões teóricas para a dissociação de Coulomb a partir da teoria de perturbação em primeira ordem, onde Pt-E1 corresponde à transição E1, Pt-E2 à transição E2 e Pt-Sum é a soma das transições E1 e E2. Mais detalhes podem ser encontrados na Ref. [78].

Em comparação com os resultados mostrados na figura 6.9, as formas das distribuições com energias acima da barreira de Coulomb são semelhantes ao da figura 6.12a, onde

há a predominância de pontos com ângulos dianteiros, porém as respectivas seções de choque são maiores em ^4He que em ^{58}Ni . Para energias próximas da barreira de Coulomb (entre 3.63 MeV e 4.77 MeV, figura 6.10), a distribuição apresentada na figura 6.12b é mais semelhante, onde não há um platô para ângulos entre 5° e 10° . O resultado importante é que as seções de choque em ^4He para energias acima da barreira são maiores que as seções de choque em ^{58}Ni e em ^{208}Pb . Cálculos de CDCC (Continuum-Discretized Coupled-Channels), onde são acrescentados estados do contínuo além dos estados ligados do ^{17}F , para os dados apresentados na figura 6.12, realizados na Ref. [5], mostram que há interações (interferências construtivas ou destrutivas) entre as diferentes contribuições para o breakup (contribuição de Coulomb e nuclear). A figura 6.13 mostra os cálculos das contribuições nuclear e de Coulomb para a seção de choque bem como o cálculo de CDCC com ambas as contribuições, onde é possível ver que o método descreve melhor os dados que o método anterior (teoria de perturbação em primeira ordem).

Outro experimento do breakup do ^{17}F em ^{58}Ni , realizado recentemente [80], porém com energias próximas da barreira de Coulomb, cujas distribuições angulares estão na figura 6.14, também indicaram que novos cálculos (diferentes do método perturbativo) são necessários para a análise das seções de choque [80, 4]. Cálculos de CDCC indicaram novamente que há efeitos de interferência entre a contribuição de Coulomb e a contribuição nuclear para o breakup. No caso de energias próximas da barreira, a seção de choque diminui em cerca de 20%, algo notado nas distribuições com energias próximas da barreira, mostradas na figura 6.10.

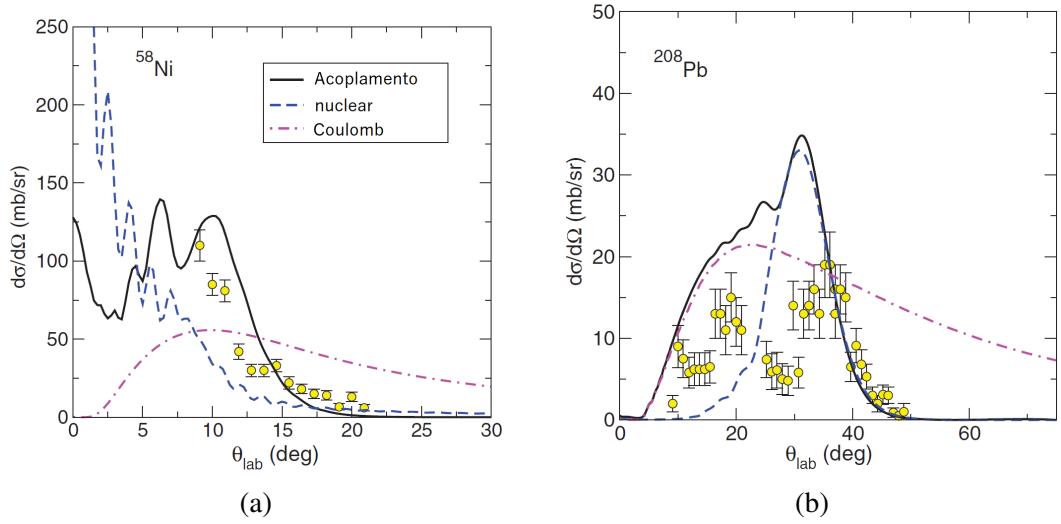


Figura 6.13: Cálculos de CDCC para as contribuições da seção de choque de breakup exclusiva. A linha tracejada é o cálculo da contribuição nuclear, a linha ponto-tracejada é o cálculo para a contribuição de Coulomb. A linha sólida preta é o cálculo de CDCC incluindo tanto a contribuição nuclear e de Coulomb. Mais detalhes podem ser encontrados em [5].

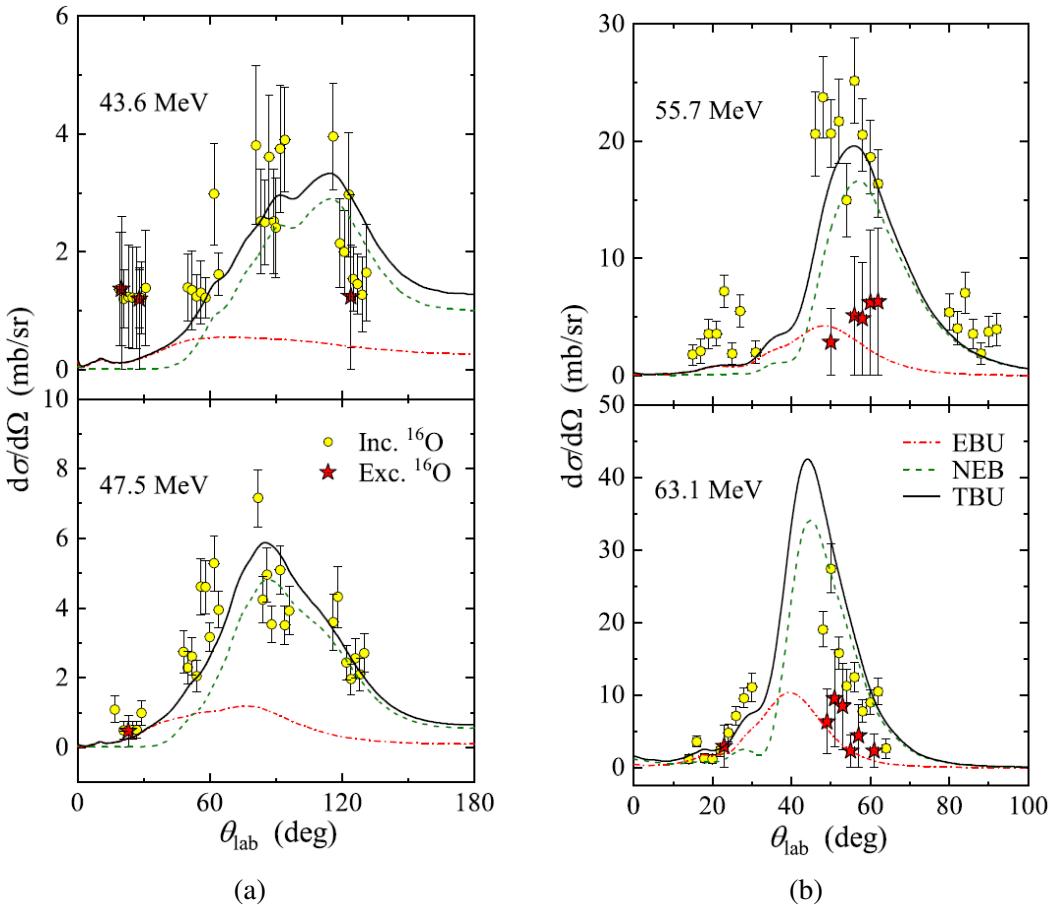


Figura 6.14: Distribuições angulares do breakup inclusivo (ponto amarelo) e exclusivo (estrela vermelha) para a reação de breakup $^{17}\text{F} + ^{58}\text{Ni}$ com energias próximas da barreira de Coulomb. A linha ponto-tracejada são cálculos de CDCC para o breakup elástico (EBU), a linha tracejada é o calculo de CDCC para o breakup não elástico (NEB) e a linha sólida é a soma de ambas (TBU). As energias em cada figura estão no referencial do laboratório. Mais detalhes podem ser encontrados na Ref. [80].

Os resultados dos cálculos de CDCC nos dados experimentais apresentados, mostram que existem interferências destrutivas e construtivas nas contribuições de Coulomb e nuclear do breakup. A contribuição parece ter uma relevância bem maior em núcleos com Z menor. Em núcleos com Z grande, como o caso do ^{208}Pb , os cálculos teóricos indicam que a interferência entre as interações nuclear e Coulombiana reduzem consideravelmente a seção de choque [4, 5]. Para o caso de energias próximas da barreira de Coulomb, a seção de choque é ainda menor, corroborando com os dados obtidos com o experimento desse trabalho. Com esses resultados, será possível entender melhor a natureza do breakup, qual relevância de cada contribuição, como os efeitos de interferência acontecem, em diversas regiões de energia (acima, próxima e abaixo da barreira de Coulomb).

Capítulo 7

Conclusões

Este trabalho abordou o estudo da reação de breakup ${}^4\text{He}({}^{17}\text{F}, {}^{16}\text{O}+p){}^4\text{He}$. O experimento foi realizado com o alvo ativo pAT-TPC junto com o sistema TWINSOL (University of Notre Dame, Estados Unidos). A reação foi medida em cinemática inversa usando um feixe secundário de ${}^{17}\text{F}$ com energia de 34.46 MeV interagindo com um alvo gasoso de hélio puro.

Com esse sistema foi possível fazer a reconstrução tridimensional dos eventos (nuvens de pontos) a partir de milhões de sinais digitais geradas pelo detector. Neste trabalho, algoritmos baseados em Machine Learning foram desenvolvidos para a reconstrução e análise das nuvens de pontos. A reconstrução foi dividida em três etapas: remoção do fundo, deconvolução dos pulsos e identificação de picos. Para cada etapa foi construído um banco de dados para as redes convolucionais usando pulsos crus de entrada e a respetiva saída desejada para cada sinal. Isso permitiu que os algoritmos aprendessem de forma supervisionada os padrões dos dados experimentais. Os resultados das redes neurais tem a mesma qualidade do que algoritmos tradicionais usados para essas análises, mas o tempo de cálculo é 90 vezes mais rápido com a técnica desenvolvida neste trabalho.

Para a análise das nuvens de pontos foi necessário identificar as trajetórias tridimensionais das partículas dentro do gás. Isso foi feito através de algoritmos de clustering e estimadores robustos (pRANSAC) [14] que permitem identificar aglomerados mesmo na presença de ruído (outliers). Algumas alternativas para a análise de nuvens de pontos, como o PointNet [69], foram investigadas usando redes neurais. A rede neural PointNet pode ser usada tanto para a classificação global da nuvem de pontos, quanto para a segmentação semântica (classificação ponto a ponto). A rede foi testada para identificar quantas trajetórias existem nas nuvens de pontos e demonstrou bons resultados (boa acurácia). A segmentação semântica também foi utilizada para a identificação de outliers (globais e locais), mostrando resultados satisfatórios. Para uma abordagem mais direta

ao problema, foi sugerido o uso da rede neural ConstrastNet [74] para estudar clustering usando métodos supervisionados como continuação deste trabalho. A rede será capaz de fazer o clustering nos dados, retornando as trajetórias de cada partícula num mesmo evento.

A partir da análise das nuvens de pontos foi possível reconstruir as reações nucleares dentro do gás. Em particular, neste trabalho foi estudada a reação de breakup $^{17}\text{F}(^{4}\text{He}, ^{16}\text{O}+p)^{4}\text{He}$. O canal de breakup foi identificado a partir dos prótons produzidos pela interação do feixe ^{17}F em ^{4}He ($V_B = 4.2$ MeV). As distribuições angulares foram obtidas em energias de centro de massa entre 0.77 MeV e 6.32 MeV. Os resultados foram comparados com experimentos realizados anteriormente usando alvos de ^{58}Ni e ^{208}Pb .

Os resultados preliminares deste trabalho mostram que a seção de choque em ^{4}He , próxima a barreira Coulombiana, é maior do que em ^{58}Ni e ^{208}Pb . Isto seria uma possível indicação de interferência entre as interações nuclear e Coulombiana que reduz o valor da seção de choque de breakup. Junto com colaboradores teóricos, serão realizados cálculos para entender os resultados apresentados neste trabalho.

Apêndice A

Aplicações de machine learning na física nuclear

Em física nuclear, o uso de técnicas de machine learning tem se mostrado cada vez mais importante. Na continuação são citados alguns exemplos.

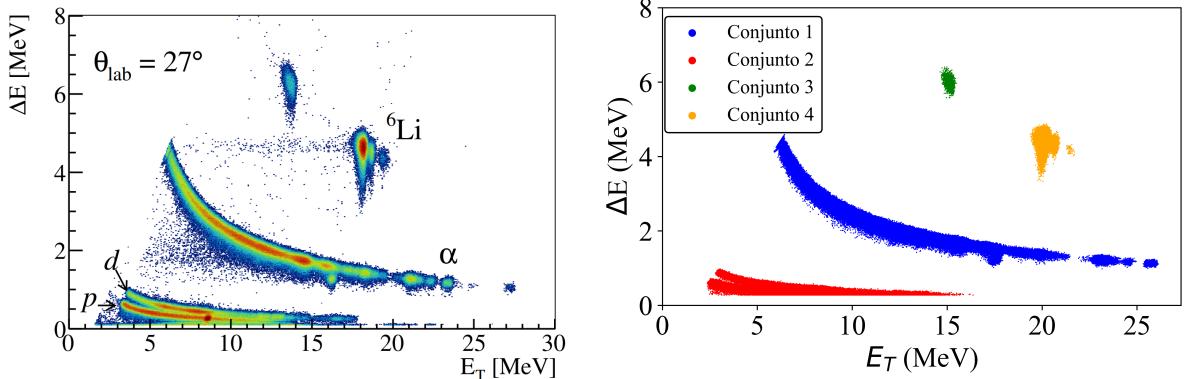
A.1 Análise de espectros para identificação de partículas (*particle identification, PID*)

O uso de técnicas de aprendizado não supervisionado pode ser usado para a identificar de partículas em espectros $\Delta E - E$. Neste tipo de espectros, as partículas são identificadas e separadas por regiões que facilmente podem ser identificadas visualmente [81]. No entanto, a identificação visual desses espectros com os sistemas de detecção com milhares de canais é inviável de forma manual. Assim, ferramentas de machine learning (ou inteligencia artificial) são de grande relevância para esse tipo de analise.

Os resultados apresentados nessa seção foram obtidos na etapa inicial desta dissertação. Para o presente estudo, o espectro biparamétrico ($\Delta E-E$) mostrado na Figura A.1a foi analisado. Os dados correspondem a reação de espalhamento e transferência no sistema ${}^6\text{Li} + {}^{12}\text{C}$.

O objetivo é identificar conjuntos (ou *clusters*) diferentes a partir do espectro. É claro para o olho humano que existem conjuntos diferentes, e eles podem ser identificados usando algoritmos de aprendizado não supervisionado, como por exemplo o *density-based spatial clustering of applications with noise* (DBSCAN) [64]. O DBSCAN consegue identificar *clusters* apenas com as informações características de densidade existente pelos conjuntos que existem nos dados. O resultado da aplicação do algoritmo está na figura

A.1b, onde é mostrado que o espectro agora está separado por diferentes conjuntos.



(a) Espectro biparamétrico $\Delta E \times E$ (energia no referencial do centro de massa).

(b) Espectro biparamétrico $\Delta E \times E$ (energia no referencial do centro de massa) com os conjuntos identificados com o uso do DBSCAN.

Figura A.1: Espectros biparamétricos $\Delta E \times E$, em A.1a o espectro cru com uma pré marcação das partículas, e em A.1b os conjuntos identificados usando *machine learning*.

Usando o conjunto 1, por exemplo, é possível criar o histograma de identificação de partículas dado pela figura A.2.

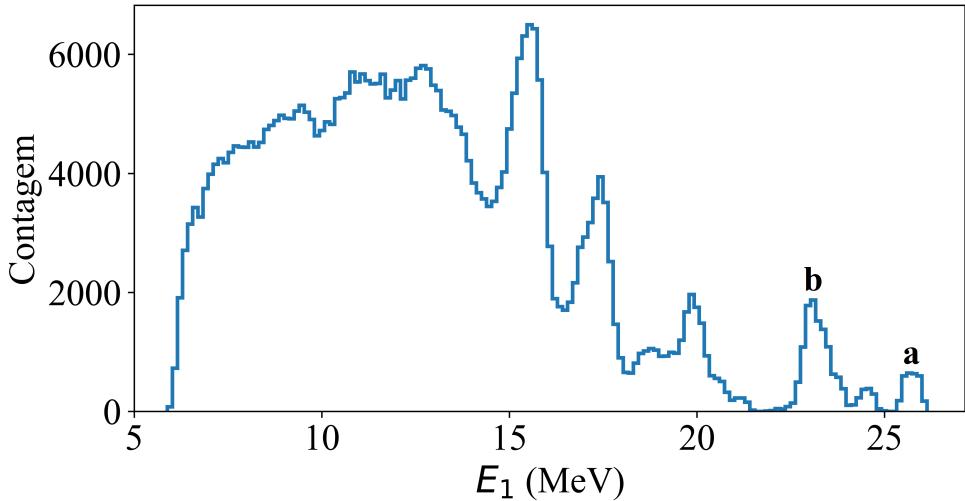


Figura A.2: Histograma de identificação de partículas, a partir do conjunto 1 identificado na figura A.1b. Em **a** temos o primeiro pico que corresponde ao estado fundamental do ^{14}N e em **b** temos o primeiro estado excitado do ^{14}N .

A.2 Estimativa de raios e massas nucleares

Frequentemente é necessário calcular com alta precisão observáveis que ainda não foram medidos, para contribuir com dados já existentes. É possível estimar propriedades

de núcleos usando modelos e dados experimentais já existentes em conjunto com técnicas de *machine learning*.

É possível usar redes neurais que façam previsão de massa nucleares com informações de massa já disponíveis. Isso foi feito usando o algoritmo *Light Gradient Boosting Machine* (LightGBM) [82]. O algoritmo é uma rede neural cujo aprendizado é supervisionado e minimiza o erro entre a energia de ligação teórica e a energia de ligação experimental dos núcleos (essa diferença é chamada de resíduo), usando 10 quantidades físicas como dados de entrada (*input*) [83]. O desvio quadrático médio para a massa dos núcleos é de 0.234 ± 0.022 MeV, valor melhor que muitos modelos físicos de massa nuclear. A figura A.3 mostra os resíduos calculados entre a energia de ligação calculada pelo rede neural e a energia de ligação determinada experimentalmente.

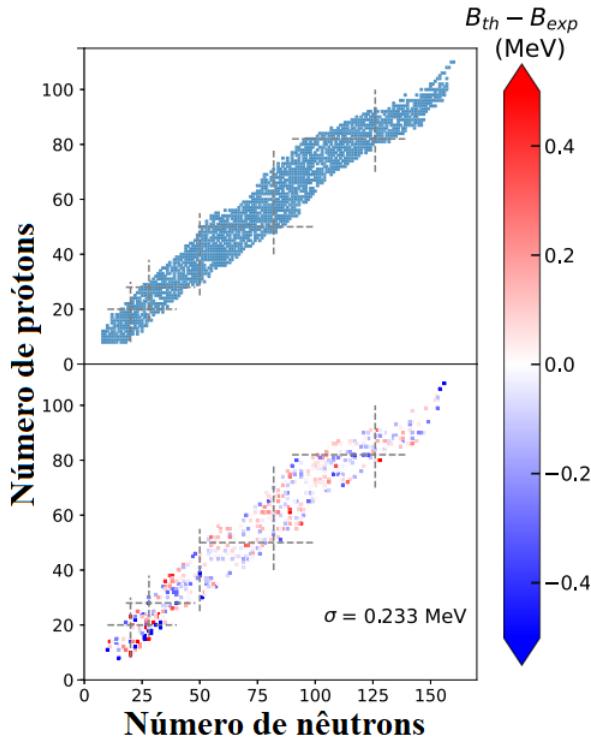


Figura A.3: Painel acima mostra a localização dos núcleos usados para o treino da rede neural. No painel de baixo temos o erro entre a previsão e o valor experimental da energia de ligação do núcleo para os núcleos usados como dados de validação. σ é o erro quadrático médio da rede neural.

Outro exemplo de uso é para a estimativa de raio de carga nuclear. Usando uma rede neural (chamada de *Bayesian neural network extended liquid drop* - BNN-ELD) FC com duas variáveis de entrada, o número de prótons Z e o número de massa A , com a condição de que $Z \geq 20$ e $A \geq 40$. A rede é supervisionada e usa 722 núcleos para dados de treino e 98 núcleos como validação. Resultados para o desvio quadrático médio do raio de carga

são de cerca de 0.02 fm para os 820 núcleos utilizados. A figura A.4 mostra a diferença entre o raio de carga calculado teoricamente e o determinado experimentalmente para isótopos do chumbo, usando diferentes neurais e modelos teóricos. Mais detalhes podem ser encontrados na Ref. [84].

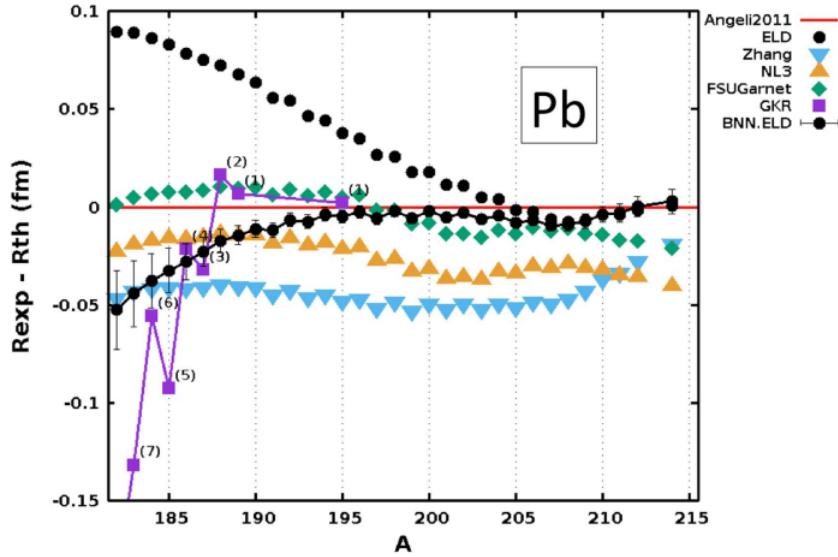


Figura A.4: Previsões para o raio de carga para isótopos do chumbo ($Z = 82$) para diferentes modelos teóricos ou que usam redes neurais. A previsão que contém barras de erro é a que foi brevemente descrita no texto.

A.3 Decaimento β e processo r

O decaimento β é fundamental para entender a origem dos elementos pesados. Prever o tempo de meia vida do decaimento β é de grande importância para simulações do processo r (captura rápida de nêutrons). Com redes neurais é possível fazer previsões que levam em conta a física do problema, como visto na Ref. [85]. O modelo de inteligência artificial leva em conta a teoria de Fermi para o decaimento beta, onde a função f que é minimizada (função custo) é dada por

$$f = \log_{10}(T_{1/2}^a/T_{1/2}^b), \quad (\text{A.1})$$

onde $T_{1/2}^a$ é o tempo de meia vida do decaimento beta medido experimentalmente e $T_{1/2}^b$ é o tempo de meia vida do decaimento beta determinado teoricamente. As variáveis de entrada são o número de prótons Z , o número de nêutrons N , a energia total do decaimento beta e o parâmetro de paridade $\delta = 1, 0, -1$, para núcleos par-par, ímpar-par e ímpar-ímpar, respectivamente.

A figura A.5 mostra a previsão do tempo de meia vida ($T_{1/2}$) do decaimento β (em segundos) para isótonos com número de nêutrons $N = 126$ usando redes neurais.

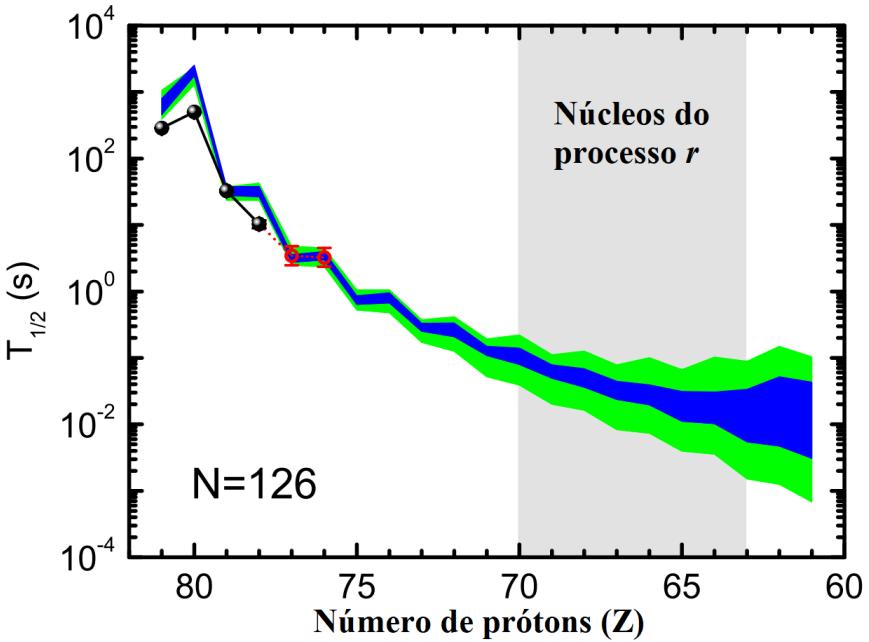


Figura A.5: Meias-vidas de decaimento β para isótonos com $N = 126$. A região hachurada verde mostra as previsões de uma rede neural. A região hachurada em azul mostra os resultados da mesma rede neural, porém seus dados de aprendizado são estendidos para incluir três meias-vidas extras de decaimento β para cada isótopo (indicado por círculos abertos) em direção à *drip-line* de nêutrons [85].

A.4 Alvos ativos

Experimentos com alvos ativos geram enormes quantidades de dados. Uma semana de experimento pode gerar até 10Tb de dados [86], o que gera a necessidade do uso de algoritmos de *machine learning* para diminuir o consumo de tempo da análise desses dados.

A análise dos dados envolve a reconstrução tridimensional dos eventos e posteriormente a reconstrução da cinemática, com a identificação de partículas e de reações nucleares. O uso de técnicas de *machine learning* pode diminuir o consumo de tempo dessas etapas.

O uso de CNNs em imagens feitas a partir das projeções de eventos pode ser útil para a classificação de eventos, sem a necessidade de reconstruir a cinemática em uma etapa anterior. A figura A.6 mostra exemplos de projeções de trajetórias de partículas dentro do alvo ativo, onde a partir da projeção no plano xy é possível identificar a partícula que a originou.

Primeiro, com o objetivo de classificar as projeções entre próton ou carbono, é possível construir uma rede neural para a classificação binária. Para isso foi usada uma arquitetura com camadas convolucionais seguidas de *max-pooling* e por fim uma camada FC [86]. A função a ser minimizada é a dada pela equação 3.5 e a métrica para entender o comportamento da rede neural é a acurácia binária.

Caso o objetivo seja classificar entre três ou mais possibilidades (como por exemplo próton, carbono e outros), então a classificação não será binária, passará a ser categórica, pois será necessário classificar a imagem em alguma categoria. A função custo passará a ser a *categorical cross-entropy* e a métrica será a acurácia categórica.

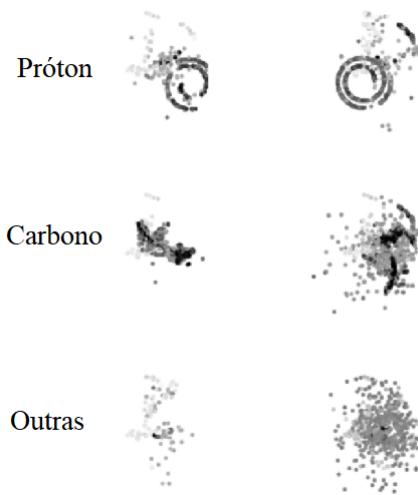


Figura A.6: Projeções no plano xy de partículas dentro do alvo ativo, onde quanto mais escura for a cor, mais carga tem o ponto, e quanto mais clara a cor, menos carga tem o ponto. O objetivo da rede neural pode ser classificar corretamente se a imagem à direita corresponde à uma trajetória de um próton, carbono ou outra partícula, ou pode ser uma rede neural para classificação binária caso seja necessário classificar apenas entre próton ou carbono [86].

A rede criada para a classificação binária (entre próton e carbono) atingiu cerca de 90% de acurácia. Somado ao fato de que redes neurais são muito eficientes em tempo, isso mostra uma possibilidade de que seja possível utilizar redes neurais como essa para o processamento em tempo real dos dados, com pouca supervisão humana durante o processo [86].

Outro problema que pode ser resolvido com técnicas de *machine learning* é a remoção de ruído de eventos. Para isso, pode ser usado o algoritmo não supervisionado *Hough transform* [87], que é capaz de identificar padrões de interesse nos dados e evitar regiões ou pontos que não seguem o padrão desejado.

Referências

- [1] D.W. Bardayan et al. “Determining the $^{14}\text{O}(\alpha,\text{p})^{17}\text{F}$ astrophysical rate from Measurements at TwinSol”. In: *Physics Procedia* 90 (2017). Conference on the Application of Accelerators in Research and Industry, CAARI 2016, 30 October – 4 November 2016, Ft. Worth, TX, USA, pp. 415–420. ISSN: 1875-3892. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.phpro.2017.09.043>. URL: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S187538921730202X>.
- [2] George Abud Scotton. “Produção de feixes radioativos ricos em nêutrons na região de massa $A = 10$ a 15 .” MA thesis. University of Sao Paulo, Brazil, 2017.
- [3] *The colourful nuclide chart beta*. URL: <https://people.physics.anu.edu.au/~ecs103/chart-beta/>.
- [4] J. J. Kolata, V. Guimarães, and E. F. Aguilera. “Elastic scattering, fusion, and breakup of light exotic nuclei”. In: *The European Physical Journal A* 52.5 (2016), p. 123. ISSN: 1434-601X. DOI: [10.1140/epja/i2016-16123-1](https://doi.org/10.1140/epja/i2016-16123-1). URL: <https://doi.org/10.1140/epja/i2016-16123-1>.
- [5] Y. Kucuk and A. M. Moro. “Exclusive breakup of ^{17}F on ^{58}Ni and ^{208}Pb within the continuum-discretized coupled-channels method”. In: *Phys. Rev. C* 86 (3 2012), p. 034601. DOI: [10.1103/PhysRevC.86.034601](https://doi.org/10.1103/PhysRevC.86.034601). URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevC.86.034601>.
- [6] G.F. Fortino et al. “Digital signal analysis based on convolutional neural networks for active target time projection chambers”. In: *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment* 1031 (2022), p. 166497. ISSN: 0168-9002. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.nima.2022.166497>. URL: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S016890022200119X>.
- [7] J. W. Bradt. “Measurement of isobaric analogue resonances of ^{47}Ar with the Active-Target Time Projection Chamber”. PhD thesis. Michigan State University, USA,

2017. URL: https://publications.nscl.msu.edu/thesis/%20Brandt_2017_5279.pdf.
- [8] J. Bradt et al. “Commissioning of the Active-Target Time Projection Chamber”. In: *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment* 875 (2017), pp. 65–79. ISSN: 0168-9002. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.nima.2017.09.013>. URL: <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0168900217309683>.
 - [9] T. Furuno et al. “Performance test of the MAIKo active target”. In: *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment* 908 (2018), pp. 215–224. ISSN: 0168-9002. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.nima.2018.08.042>. URL: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0168900218309951>.
 - [10] E. Koshchiiy et al. “Texas Active Target (TexAT) detector for experiments with rare isotope beams”. In: *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment* 957 (2020), p. 163398. ISSN: 0168-9002. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.nima.2020.163398>. URL: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0168900220300073>.
 - [11] Y. Giomataris et al. “MICROMEGAS: a high-granularity position-sensitive gaseous detector for high particle-flux environments”. In: *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment* 376.1 (1996), pp. 29–35. ISSN: 0168-9002. DOI: [https://doi.org/10.1016/0168-9002\(96\)00175-1](https://doi.org/10.1016/0168-9002(96)00175-1). URL: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0168900296001751>.
 - [12] J. Giovinazzo et al. “GET electronics samples data analysis”. In: *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment* 840 (2016), pp. 15–27. ISSN: 0168-9002. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.nima.2016.09.018>. URL: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0168900216309408>.
 - [13] D. Suzuki et al. “Prototype AT-TPC: Toward a new generation active target time projection chamber for radioactive beam experiments”. In: *Nuclear Instruments*

and Methods in Physics Research Section A Accelerators Spectrometers Detectors and Associated Equipment 691 (Nov. 2012), p. 39. DOI: 10.1016/j.nima.2012.06.050.

- [14] J.C. Zamora and G.F. Fortino. “Tracking algorithms for TPCs using consensus-based robust estimators”. In: *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment* (2020), p. 164899. ISSN: 0168-9002. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.nima.2020.164899>. URL: <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0168900220312961>.
- [15] F.D. Becchetti et al. “The TwinSol low-energy radioactive nuclear beam apparatus: status and recent results”. In: *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment* 505.1 (2003). Proceedings of the tenth Symposium on Radiation Measurements and Applications, pp. 377 –380. ISSN: 0168-9002. DOI: [https://doi.org/10.1016/S0168-9002\(03\)01101-X](https://doi.org/10.1016/S0168-9002(03)01101-X). URL: <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S016890020301101X>.
- [16] J.J. Kolata et al. “A radioactive beam facility using a large superconducting solenoid”. In: *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms* 40-41 (1989), pp. 503–506. ISSN: 0168-583X. DOI: [https://doi.org/10.1016/0168-583X\(89\)91032-X](https://doi.org/10.1016/0168-583X(89)91032-X). URL: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0168583X8991032X>.
- [17] Panagiotis Gastis et al. “Improved phenomenological description of equilibrium charge state distributions for Ni, Co, and Cu ions in Mo based on new experimental data at 2 MeV/u”. In: (Sept. 2015).
- [18] L. E. Tamayose et al. “Simulation of the RIBRAS Facility with GEANT4”. In: *Brazilian Journal of Physics* 52.3 (2022), p. 89. ISSN: 1678-4448. DOI: 10.1007/s13538-022-01090-y. URL: <https://doi.org/10.1007/s13538-022-01090-y>.
- [19] J.C. Zamora. “Estudo do espalhamento elástico dos isótopos ${}^7\text{Be}$, ${}^9\text{Be}$ e ${}^{10}\text{Be}$ em alvo de ${}^{12}\text{C}$ ”. MA thesis. University of Sao Paulo, Brazil, 2011. DOI: 10.11606/D.43.2011.tde-30092011-132427.

- [20] S. Agostinelli et al. “Geant4—a simulation toolkit”. In: *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment* 506.3 (2003), pp. 250–303. ISSN: 0168-9002. DOI: [https://doi.org/10.1016/S0168-9002\(03\)01368-8](https://doi.org/10.1016/S0168-9002(03)01368-8). URL: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0168900203013688>.
- [21] R. Lichtenthäler et al. “Radioactive ion beams in Brasil (RIBRAS)”. en. In: *Brazilian Journal of Physics* 33 (June 2003), pp. 294 –296. ISSN: 0103-9733. URL: http://www.scielo.br/scielo.php?script=sci_arttext&pid=S0103-97332003000200025&nrm=iso.
- [22] Sérgio R. Muniz, Vanderlei S. Bagnato, and M. Bhattacharya. “Analysis of off-axis solenoid fields using the magnetic scalar potential: An application to a Zeeman-slower for cold atoms”. In: *American Journal of Physics* 83.6 (2015), pp. 513–517. DOI: 10.1119/1.4906516. URL: <https://doi.org/10.1119%2F1.4906516>.
- [23] B. Mauss et al. “Commissioning of the ACTive TARget and Time Projection Chamber (ACTAR TPC)”. In: *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment* 940 (2019), pp. 498–504. ISSN: 0168-9002. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.nima.2019.06.067>. URL: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S016890021930912X>.
- [24] J.S. Randhawa et al. “Beam-induced space-charge effects in time projection chambers in low-energy nuclear physics experiments”. In: *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment* 948 (2019), p. 162830. ISSN: 0168-9002. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.nima.2019.162830>. URL: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0168900219312641>.
- [25] Thomas Lohse and Werner Witzeling. “The Time Projection Chamber”. In: *Instrumentation in High Energy Physics*, pp. 81–155. DOI: 10.1142/9789814360333_0002. eprint: https://www.worldscientific.com/doi/pdf/10.1142/9789814360333_0002. URL: https://www.worldscientific.com/doi/abs/10.1142/9789814360333_0002.

- [26] A. Geron. *Hands-on machine learning with Scikit-Learn, Keras and TensorFlow: concepts, tools, and techniques to build intelligent systems*. 2nd ed. O'Reilly, 2019. ISBN: 9781492032649.
- [27] *Machine Learning and Data Analysis for Nuclear Physics*. 2020. URL: <https://ectstar.fbk.eu/node/4472>.
- [28] Maryam M. Najafabadi et al. “Deep learning applications and challenges in big data analytics”. In: *Journal of Big Data* 2.1 (2015), p. 1. ISSN: 2196-1115. DOI: 10.1186/s40537-014-0007-7. URL: <https://doi.org/10.1186/s40537-014-0007-7>.
- [29] Morten Hjorth-Jensen. *Data Analysis and Machine Learning: Neural networks, from the simple perceptron to deep learning*. 2020. URL: <https://nucleartalent.github.io/MachineLearningECT/doc/pub/Day4/pdf/Day4.pdf> (visited on 08/2020).
- [30] C.M. Bishop. *Pattern Recognition and Machine Learning*. Information Science and Statistics. Springer New York, 2016. ISBN: 9781493938438. URL: <https://books.google.com.br/books?id=kOXDtAEACAAJ>.
- [31] Steven B. Damelin and Willard Miller Jr. *The Mathematics of Signal Processing*. Cambridge Texts in Applied Mathematics. Cambridge University Press, 2011. DOI: 10.1017/CBO9781139003896.
- [32] K.-L Du and M.N.S Swamy. “Radial Basis Function Networks”. In: Dec. 2014, pp. 299–335. ISBN: 978-1-4471-5570-6. DOI: 10.1007/978-1-4471-5571-3_10.
- [33] Alex Sherstinsky. “Fundamentals of Recurrent Neural Network (RNN) and Long Short-Term Memory (LSTM) network”. In: *Physica D: Nonlinear Phenomena* 404 (2020), p. 132306. ISSN: 0167-2789. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.physd.2019.132306>. URL: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0167278919305974>.
- [34] Abien Fred Agarap. “Deep Learning using Rectified Linear Units (ReLU)”. In: *arXiv e-prints*, arXiv:1803.08375 (2018), arXiv:1803.08375. arXiv: 1803.08375 [cs.NE].
- [35] Moraga C. Han J. “The influence of the sigmoid function parameters on the speed of backpropagation learning”. In: *Lecture Notes in Computer Science* 930 (1995). DOI: https://doi.org/10.1007/3-540-59497-3_175.

- [36] Tomasz Szandała. *Review and Comparison of Commonly Used Activation Functions for Deep Neural Networks*. Oct. 2020. DOI: https://doi.org/10.1007/978-981-15-5495-7_11.
- [37] Ian Goodfellow, Yoshua Bengio, and Aaron Courville. *Deep Learning*. <http://www.deeplearningbook.org>. MIT Press, 2016.
- [38] Hecht-Nielsen. “Theory of the backpropagation neural network”. In: *International 1989 Joint Conference on Neural Networks*. 1989, 593–605 vol.1. DOI: [10.1109/IJCNN.1989.118638](https://doi.org/10.1109/IJCNN.1989.118638).
- [39] Douglas Kline and Victor Berardi. “Revisiting squared-error and cross-entropy functions for training neural network classifiers”. In: *Neural Computing and Applications* 14 (Dec. 2005), pp. 310–318. DOI: [10.1007/s00521-005-0467-y](https://doi.org/10.1007/s00521-005-0467-y).
- [40] Diederik P. Kingma and Jimmy Ba. “Adam: A Method for Stochastic Optimization”. In: (2014). DOI: [10.48550/ARXIV.1412.6980](https://doi.org/10.48550/ARXIV.1412.6980). URL: <https://arxiv.org/abs/1412.6980>.
- [41] Sebastian Ruder. “An overview of gradient descent optimization algorithms”. In: *ArXiv abs/1609.04747* (2016).
- [42] Mohammad Hossin and Sulaiman M.N. “A Review on Evaluation Metrics for Data Classification Evaluations”. In: *International Journal of Data Mining & Knowledge Management Process* 5 (Mar. 2015), pp. 01–11. DOI: [10.5121/ijdkp.2015.5201](https://doi.org/10.5121/ijdkp.2015.5201).
- [43] N. S. Altman. “An Introduction to Kernel and Nearest-Neighbor Nonparametric Regression”. In: *The American Statistician* 46.3 (1992), pp. 175–185. DOI: [10.1080/00031305.1992.10475879](https://doi.org/10.1080/00031305.1992.10475879). eprint: <https://doi.org/10.1080/00031305.1992.10475879>. URL: <https://www.tandfonline.com/doi/abs/10.1080/00031305.1992.10475879>.
- [44] Angela Serra and Roberto Tagliaferri. “Unsupervised Learning: Clustering”. In: Jan. 2018. ISBN: 9780128096338. DOI: [10.1016/B978-0-12-809633-8.20487-1](https://doi.org/10.1016/B978-0-12-809633-8.20487-1).
- [45] Kristina Sinaga and Miin-Shen Yang. “Unsupervised K-Means Clustering Algorithm”. In: *IEEE Access* PP (Apr. 2020), pp. 1–1. DOI: [10.1109/ACCESS.2020.2988796](https://doi.org/10.1109/ACCESS.2020.2988796).

- [46] Niago Moreira Nobre Leite et al. “Deep Convolutional Autoencoder for EEG Noise Filtering”. In: *2018 IEEE International Conference on Bioinformatics and Biomedicine (BIBM)*. 2018, pp. 2605–2612. DOI: [10.1109/BIBM.2018.8621080](https://doi.org/10.1109/BIBM.2018.8621080).
- [47] Y Reddy, Viswanath Pulabaigari, and Eswara B. “Semi-supervised learning: a brief review”. In: *International Journal of Engineering & Technology* 7 (Feb. 2018), p. 81. DOI: [10.14419/ijet.v7i1.8.9977](https://doi.org/10.14419/ijet.v7i1.8.9977).
- [48] Michael L Littman Leslie Pack Kaelbling and Andrew W Moore. “Reinforcement learning: A survey”. In: *Journal of artificial intelligence research* (1996), 237–285. DOI: <https://doi.org/10.1613/jair.301>.
- [49] Kim D et al. “Review of machine learning methods in soft robotics”. In: *PLoS ONE* (2021). DOI: <https://doi.org/10.1371/journal.pone.0246102>.
- [50] P. Holl et al. “Deep learning based pulse shape discrimination for germanium detectors”. In: *The European Physical Journal C* 79.6 (2019), p. 450. ISSN: 1434-6052. DOI: [10.1140/epjc/s10052-019-6869-2](https://doi.org/10.1140/epjc/s10052-019-6869-2). URL: <https://doi.org/10.1140/epjc/s10052-019-6869-2>.
- [51] Edmundo Capelas de Oliveira and José Emilío Maiorino. *Introdução aos métodos da matemática aplicada*. 3rd ed. Editora UNICAMP, 2010. ISBN: 9788526809062.
- [52] *ROOT Data Analysis Framework*. 2021. URL: <https://root.cern.ch/>.
- [53] C.G. Ryan et al. “SNIP, a statistics-sensitive background treatment for the quantitative analysis of PIXE spectra in geoscience applications”. In: *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms* 34.3 (1988), pp. 396–402. ISSN: 0168-583X. DOI: [https://doi.org/10.1016/0168-583X\(88\)90063-8](https://doi.org/10.1016/0168-583X(88)90063-8). URL: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0168583X88900638>.
- [54] Miroslav Morháč et al. “Background elimination methods for multidimensional coincidence γ -ray spectra”. In: *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment* 401.1 (1997), pp. 113–132. ISSN: 0168-9002. DOI: [https://doi.org/10.1016/S0168-9002\(97\)01023-1](https://doi.org/10.1016/S0168-9002(97)01023-1). URL: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0168900297010231>.
- [55] Donald D. Burgess and Richard J. Tervo. “Background estimation for gamma-ray spectrometry”. In: *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research* 214.2 (1983), pp. 431–434. ISSN: 0167-5087. DOI: <https://doi.org/10.1016/>

- 0167-5087 (83) 90612-9. URL: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0167508783906129>.
- [56] Miroslav Morháč et al. “Identification of peaks in multidimensional coincidence γ -ray spectra”. In: *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment* 443.1 (2000), pp. 108–125. ISSN: 0168-9002. DOI: [https://doi.org/10.1016/S0168-9002\(99\)01005-0](https://doi.org/10.1016/S0168-9002(99)01005-0). URL: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0168900299010050>.
- [57] Pauli Virtanen et al. “SciPy 1.0: Fundamental Algorithms for Scientific Computing in Python”. In: *Nature Methods* 17 (2020), pp. 261–272. DOI: [10.1038/s41592-019-0686-2](https://doi.org/10.1038/s41592-019-0686-2).
- [58] Matt Newville et al. *lmfit/lmfit-py 1.0.2*. Version 1.0.2. Feb. 2021. DOI: [10.5281/zenodo.4516651](https://doi.org/10.5281/zenodo.4516651). URL: <https://doi.org/10.5281/zenodo.4516651>.
- [59] Xavier Glorot and Y. Bengio. “Understanding the difficulty of training deep feed-forward neural networks”. In: *Journal of Machine Learning Research - Proceedings Track 9* (Jan. 2010), pp. 249–256.
- [60] Ekaba Bisong. “Google Colaboratory”. In: *Building Machine Learning and Deep Learning Models on Google Cloud Platform: A Comprehensive Guide for Beginners*. Berkeley, CA: Apress, 2019, pp. 59–64. ISBN: 978-1-4842-4470-8. DOI: [10.1007/978-1-4842-4470-8_7](https://doi.org/10.1007/978-1-4842-4470-8_7). URL: https://doi.org/10.1007/978-1-4842-4470-8_7.
- [61] Andrea Dal Pozzolo et al. “Calibrating Probability with Undersampling for Unbalanced Classification”. In: Dec. 2015. DOI: [10.1109/SSCI.2015.33](https://doi.org/10.1109/SSCI.2015.33).
- [62] Ashraf A Aly, Safaai Bin Deris, and Nazar Zaki. “Research review for digital image segmentation techniques”. In: *Int. J. Comput. Sci. Inf. Technol. Res.* 3.5 (2011), p. 99.
- [63] Qian-Yi Zhou, Jaesik Park, and Vladlen Koltun. “Open3D: A Modern Library for 3D Data Processing”. In: *arXiv:1801.09847* (2018).
- [64] Erich Schubert et al. “DBSCAN Revisited, Revisited: Why and How You Should (Still) Use DBSCAN”. In: *ACM Trans. Database Syst.* 42.3 (2017). ISSN: 0362-5915. DOI: [10.1145/3068335](https://doi.org/10.1145/3068335). URL: <https://doi.org/10.1145/3068335>.

- [65] Leland McInnes, John Healy, and Steve Astels. “hdbscan: Hierarchical density based clustering”. In: *The Journal of Open Source Software* 2.11 (2017), p. 205.
- [66] Leland McInnes and John Healy. “Accelerated Hierarchical Density Based Clustering”. In: *Data Mining Workshops (ICDMW), 2017 IEEE International Conference on*. IEEE. 2017, pp. 33–42.
- [67] Sam Fletcher and Md Islam. “Comparing sets of patterns with the Jaccard index”. In: *Australasian Journal of Information Systems* 22 (Mar. 2018). DOI: 10.3127/ajis.v22i0.1538.
- [68] Peter J. Rousseeuw. “Silhouettes: A graphical aid to the interpretation and validation of cluster analysis”. In: *Journal of Computational and Applied Mathematics* 20 (1987), pp. 53 –65. ISSN: 0377-0427. DOI: [https://doi.org/10.1016/0377-0427\(87\)90125-7](https://doi.org/10.1016/0377-0427(87)90125-7). URL: <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0377042787901257>.
- [69] Charles R Qi et al. “PointNet: Deep Learning on Point Sets for 3D Classification and Segmentation”. In: *arXiv preprint arXiv:1612.00593* (2016).
- [70] JMaosheng Tang. “Semantic Classification of 3D Point Cloud by Random Forest-based Feature Learning”. MA thesis. Technische Universität Berlin, Germany, 2019.
- [71] Yassid Ayyad et al. “Novel particle tracking algorithm based on the Random Sample Consensus Model for the Active Target Time Projection Chamber (AT-TPC)”. In: *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment* 880 (2018), pp. 166 – 173. ISSN: 0168-9002. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.nima.2017.10.090>. URL: <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0168900217311798>.
- [72] Charles R Qi et al. “PointNet++: Deep Hierarchical Feature Learning on Point Sets in a Metric Space”. In: *arXiv preprint arXiv:1706.02413* (2017).
- [73] Yue Wang et al. *Dynamic Graph CNN for Learning on Point Clouds*. 2018. DOI: 10.48550/ARXIV.1801.07829. URL: <https://arxiv.org/abs/1801.07829>.
- [74] Ling Zhang and Zhigang Zhu. *Unsupervised Feature Learning for Point Cloud by Contrasting and Clustering With Graph Convolutional Neural Network*. 2019. DOI: 10.48550/ARXIV.1904.12359. URL: <https://arxiv.org/abs/1904.12359>.

- [75] MP Kuchera et al. “LISE++ Software Updates and Future Plans”. In: *Journal of Physics: Conference Series* 664.7 (2015), p. 072029. DOI: 10.1088/1742-6596/664/7/072029. URL: <https://doi.org/10.1088/1742-6596/664/7/072029>.
- [76] William R Leo. “Techniques for nuclear and particle physics experiments”. In: *Nucl Instrum Methods Phys Res* 834 (1988), p. 290.
- [77] Mário José de Oliveira. *Termodinâmica*. Livraria da Física, 2005.
- [78] J.F. Liang et al. “Dynamic polarization in the Coulomb breakup of loosely bound 17F”. In: *Physics Letters B* 681.1 (2009), pp. 22–25. ISSN: 0370-2693. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.physletb.2009.09.055>. URL: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0370269309011472>.
- [79] C.A Bertulani and P Danielewicz. “Breakup of the weakly bound 17F nucleus”. In: *Nuclear Physics A* 717.3 (2003), pp. 199–213. ISSN: 0375-9474. DOI: [https://doi.org/10.1016/S0375-9474\(03\)00640-7](https://doi.org/10.1016/S0375-9474(03)00640-7). URL: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0375947403006407>.
- [80] L. Yang et al. “Insight into the reaction dynamics of proton drip-line nuclear system 17F+58Ni at near-barrier energies”. In: *Physics Letters B* 813 (2021), p. 136045. ISSN: 0370-2693. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.physletb.2020.136045>. URL: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0370269320308480>.
- [81] Stefano Carboni et al. “Particle identification using the (DELTA)E-E technique and pulse shape discrimination with the silicon detectors of the FAZIA project”. In: *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment* 664 (Feb. 2012), 251–263. DOI: 10.1016/j.nima.2011.10.061.
- [82] Guolin Ke et al. “LightGBM: A Highly Efficient Gradient Boosting Decision Tree”. In: *Proceedings of the 31st International Conference on Neural Information Processing Systems*. NIPS’17. Long Beach, California, USA: Curran Associates Inc., 2017, 3149–3157. ISBN: 9781510860964.
- [83] Ze-Peng Gao et al. “Machine learning the nuclear mass”. In: *Nuclear Science and Techniques* 32.10 (2021), p. 109. ISSN: 2210-3147. DOI: 10.1007/s41365-021-00956-1. URL: <https://doi.org/10.1007/s41365-021-00956-1>.

- [84] R Utama, Wei-Chia Chen, and J Piekarewicz. “Nuclear charge radii: density functional theory meets Bayesian neural networks”. In: *Journal of Physics G: Nuclear and Particle Physics* 43.11 (2016), p. 114002. DOI: 10.1088/0954-3899/43/11/114002. URL: <https://doi.org/10.1088/0954-3899/43/11/114002>.
- [85] Z. M. Niu et al. “Predictions of nuclear β -decay half-lives with machine learning and their impact on r-process nucleosynthesis”. In: *Phys. Rev. C* 99 (6 2019), p. 064307. DOI: 10.1103/PhysRevC.99.064307. URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevC.99.064307>.
- [86] M.P. Kuchera et al. “Machine learning methods for track classification in the AT-TPC”. In: *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment* 940 (2019), pp. 156–167. ISSN: 0168-9002. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.nima.2019.05.097>. URL: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0168900219308046>.
- [87] Christoph Dalitz, Tilman Schramke, and Manuel Jeltsch. “Iterative Hough Transform for Line Detection in 3D Point Clouds”. In: *Image Processing On Line* 7 (2017). <https://doi.org/10.5201/ipol.2017.208>, pp. 184–196.