

Guión das prácticas no IGFAE

Prácticas optativas de Grao · Curso 24-25
Universidade de Santiago de Compostela

Índice

1. Presentación	1
1.1. Obxectivos	1
1.2. Motivación	1
2. Principios físicos	2
2.1. Un detector gasoso	2
2.2. Perdas de enerxía na materia	3
2.3. Detectores de silicio	3
2.4. Incertezas experimentais	4
2.5. Cinemática	4
3. Para comezar	5
3.1. Instalación de paquetes	5
3.2. Github	5
4. Plan de traballo	5
4.1. Primeira semana	6
4.2. Segunda semana	7
4.3. Terceira semana	8

1. Presentación

1.1. Obxectivos

O obxectivo destas prácticas vai ser de introducir técnicas de *machine learning* na análise de datos do detector *Active TARget and Time Projection Chamber* (ACTAR TPC). Máis concretamente, centrarémonos en identificar as partículas de alta enerxía que superan dous muros de silicio. Trátase dunha técnica novel que nunca se implementou neste tipo de dispositivos, polo que non está garantido que funcione... Pero merece a pena probar e pode ofrecer unha formación moi interesante.

Abarcaremos varias áreas:

- **Programación:** Afondaremos na programación con python, utilizando módulos de *ML* como `tensorflow` ou `scikit-learn`. Melloraremos os coñecementos de `pandas` e `matplotlib`, así como unha introdución aos **histogramas** con `hist`.
- **Detectores:** ACTAR TPC é un detector gasoso moi recente que abre todo unha nova ventá de posibilidades no eido das reaccións nucleares. Introduciremos os conceptos básicos dun detector gasoso e complementarémolos cos de detectores de silicio, esenciais neste experimento.
- **Teoría:** Expoñeremos as leis básicas da cinemática que rixen calquera reacción entre partículas e introduciremos os fundamentos da interacción radiación-materia, básicos neste experimento.

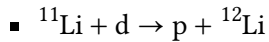
Comezaremos estudando os fundamentos teóricos e implmentándoos manualmente para asegurar que se entenden ben. A segunda parte abarcará a parte computacional en si mesma, tentando chegar ao obxectivo final de identificar as partículas.

1.2. Motivación

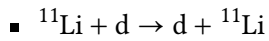
Neste ano levarase a cabo un experimento para estudar reaccións de transferencia co ^{11}Li , de xeito que se poda facer un estudo pormenorizado da súa estrutura nuclear. Estudos coma este son moi importantes, posto que o *modelo de capas nuclear* (moi parecido ao seu análogo atómico) sábese que falla a medida que nos afastamos

da estabilidade e pasamos a outros máis exóticos ($N/Z \gg 1$), e faise necesario postular modelos teóricos máis amplos, válidos de forma xenérica.

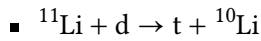
As reaccións que imos estudar son:



É unha reacción de engádegas dun neutrón.



É a difusión elástica ($E_x = 0$) ou inelástica ($E_x > 0$).



Aquí, ao contrario, eliminamos un neutrón.

Todo isto é posíbel grazas á seguinte configuración do detector:

- **Gas:** O gas que encherá ACTAR TPC será unha mestura de D_2 e CF_4 (90 % e 10 %, respectivamente) a unha presión de 900 mbar. Será o D_2 o que provea os d da reacción.
- **Feixe:** O ^{11}Li terá unha enerxía de 7,5 AMeV (é dicir, 82,5 MeV), e será producido no acelerador ISAC de TRIUMF, en Canadá.

2. Principios físicos

2.1. Un detector gasoso

ACTAR TPC segue os principios de funcionamento dunha *time projection chamber*: as partículas ao pasaren polo gas ionizan os átomos, liberando electróns que **derivan** baixo aplicación dun campo eléctrico. Esta carga é recollida nun sensor amplamente fragmentado (), permitindo *seguir* as partículas no seu traspaso dentro do medio en 2D.

Pero é máis: pódese engadir a terceira coordenada coñecendo o tempo que lle leva aos electróns chegar ao *pad plane*, pois a **velocidade de deriva** é constante. Deste xeito, o seguimento das partículas faise en 3D.

Finalmente, o principio de *active target* engade a vantaxe de ser o gas o propio albo da reacción: este actúa como medio de reacción e de detección. O seguinte esquema ilustra este modo de funcionamento.

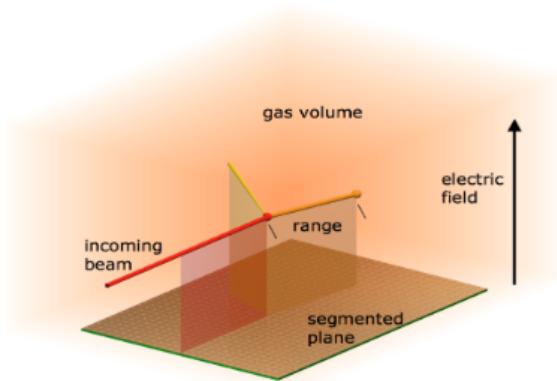


Figura 1: Esquema de funcionamento dunha TPC.

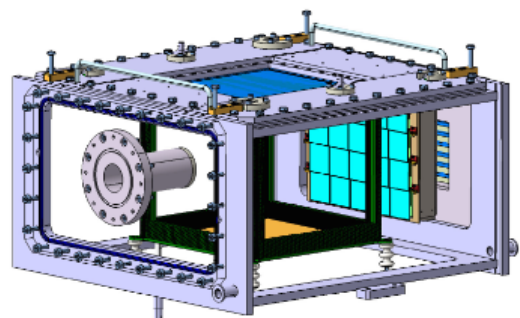


Figura 2: Deseño do detector ACTAR TPC. A rexión de detección é a parte negra interna.

Os datos que vas analizar proveñen dunha simulación na cal se implementaron os seguintes parámetros:

- O tamaño da zona de detección (Figura 2) é de $256 \times 256 \times 255 \text{ mm}^3$.

- O criterio de dimensións é que o beam vai no eixo X, e a dimensión vertical é Z.
- Os detectores auxiliares poden poñerse arredor desta zona nos diferentes lados. Nós usaremos algo parecido ao da figura, cos detectores de Si (como os azuis) cara adiante.
- Teremos dous muros de silicio, un tras do outro. O primeiro está a 10 cm do *pad plane* e o segundo está separado do primeiro 3 cm. Cada muro constitúese de 12 unidades de tamaño $80 \times 50 \times 1,5 \text{ mm}^3$.

A disposición xeométrica é a que se amosa a continuación.

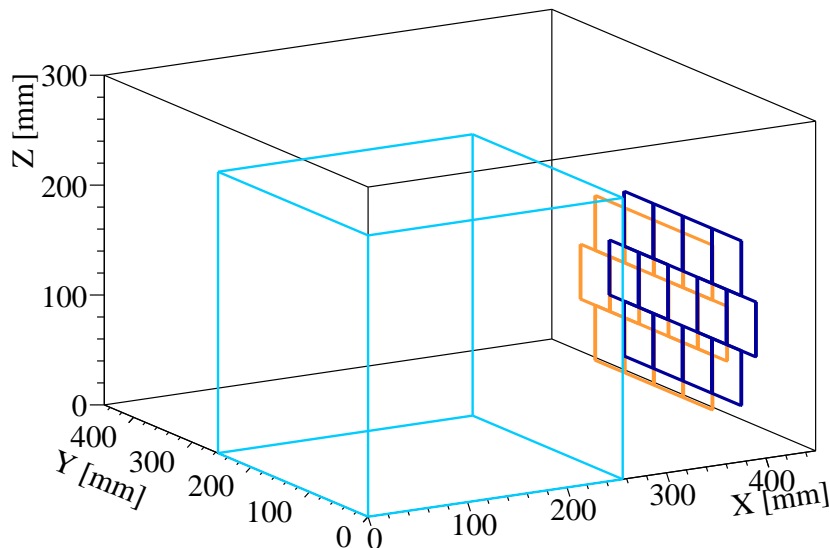


Figura 3: O código de cores é o seguinte: ACTAR TPC en azul, en escuro a primeira capa de silicios e en laranxa o segundo.

2.2. Perdas de enerxía na materia

As partículas ao propagarse a través do gas interaccionarán co campo de Coulomb dos átomos deste, perdendo enerxía e liberando electróns. Esta perda de enerxía en cada interacción é moi pequena, pero como é moi elevado o número de colisións no gas (é, polo tanto, un proceso estocástico), chega a ser moi importante. Nunha aproximación continua, está dada pola **ecuación de Bethe-Bloch**:

$$-\frac{dE}{dx} \cong \frac{4\pi e^4}{m_e} \left(\rho \frac{N_A}{M} \right) \frac{z^2 Z}{v^2} \ln \frac{2m_e v^2}{I}$$

Depende esencialmente da partícula a considerar (Z e A) e do gas (a través de ρ). É interesante definir:

- Rango (R): É o camiño percorrido por unha partícula ata que *case* se detén. É función da enerxía inicial e do material a atravesar. Existe unha **relación unívoca** $E \iff R$ que imos utilizar para estimar a perda da enerxía en función da distancia percorrida pola partícula.
- *Straggling*: Como a perda de enerxía é un **proceso estatístico**, dúas partículas coa mesma enerxía inicial non van depositar a mesma ΔE . O *straggling* mide, dalgunha forma, a σ desta distribución.

Esta información está tabulada nun programa que se coñece como **SRIM** e que foi empregado para obter os datos que se analizarán. Non obstante, vas familiarizarte con el para entender ben os conceptos da interacción radiación-materia explicados máis arriba.

2.3. Detectores de silicio

Vas estudar os seus principios de funcionamento o próximo curso en *Electrónica Física*, pero aquí tes unhas nocións básicas sobre o seu funcionamento. Cada silicio funciona como unha **unión PN**, na cal se algúns átomos da rede cristalina de Si se substituíron por outros: na rexión *P*, por átomos deficientes en electróns (hai máis ocos), mentres que na *N* por outros ricos en e^- . Ao xuntalos créase unha zona interna de campo eléctrico pola diferenza de cargas, o que se coñece como *zona de baleirado* ou de *carga espacial*, e que ten un tamaño típico de μm .

Baixo a aplicación dun potencial apropiado, nunha configuración que se coñece como *polarización inversa*, esta zona de baleirado faise moi grande. E isto é o que nos interesa: as partículas cargadas, ao atravesar esta rexión, ionizan o medio liberando electróns. Grazas ao campo eléctrico interno da unión PN podemos recollelos e medilos como corrente eléctrica. O sinal recollido é proporcional ao número de electróns liberados na ionización e, polo tanto, á enerxía incidente da partícula.

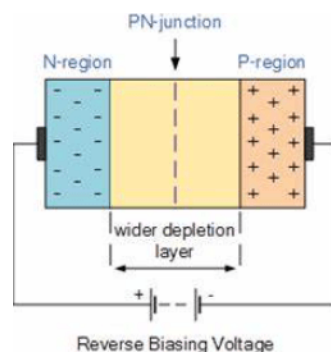


Figura 4: Esquema dunha unión PN polarizada en inversa

2.4. Incertezas experimentais

Como xa comentamos, os datos que se analizarán non proveñen dun experimento real senón dunha simulación. Non obstante, esta ten en conta os defectos experimentais implementables nun computador e que son determinantes en moitos casos do éxito ou non dun experimento. Aquí unha lista:

- O *straggling* en enerxía da partícula ao propagarse no gas.
- O mesmo pero ao propagarse no silicio.
- A **resolución** dos detectores de silicio. Na Sección anterior comentamos que a corrente medida é proporcional ao número de electróns de ionización xerados no proceso. Non obstante, a estatística gaussiana asígnalle unha incerteza $u = \sqrt{N_e}$, o cal quere dicir que unha partícula coas mesmas características que atravesa o Si non vai necesariamente rexistrar a mesma ΔE . Experimentalmente mídese e estímase en 50 keV de incerteza a unha enerxía incidente de 5,5 MeV.

2.5. Cinemática

Todo proceso de interacción entre partículas podes escribirse en termos de variables cinemáticas (enerxías e ángulos) usando as **leis de conservación** de enerxía e de momento. Esta pode ser descrita no sistema LAB ou no CM (mediante unha transformación Lorentz a un sistema con 3-momento nulo en ambas canles de entrada e saída) do seguinte xeito:

$$\begin{aligned} \text{No LAB: } p_1 &= (E_1, \mathbf{p}_1); \quad p_2 = (m_2, \mathbf{0}); \quad p_3 = (E_3, \mathbf{p}_3); \quad p_4 = (E_4, \mathbf{p}_4) \\ \text{No CM: } p'_1 &= (E'_1, \mathbf{p}'_1); \quad p'_2 = (E'_2, -\mathbf{p}'_1); \quad p'_3 = (E'_3, \mathbf{p}'_3); \quad p'_4 = (E'_4, -\mathbf{p}'_3) \end{aligned}$$

É estándar asumir unha partícula *target* (a 2) en repouso. Aínda que a simulación xa está feito, penso que é interesante que comprendas como se xeran os eventos. Para iso, vas resolver as ecuacións de cinemática para obter a representación T vs θ da partícula 3 que mediremos nós. Para iso:

- Partiremos da enerxía cinética T_1 do feixe (1) no LAB.
- Calcularás a transformación Lorentz da canle de entrada ao CM.
- Repartiremos a E_{CM} (enerxía total no centro de masas) entre as partículas de saída en función de θ_{CM} e ϕ_{CM} .
- Finalmente, recuperaremos as enerxías de saída de ambas partículas no LAB coa transformación inversa.

- Tamén necesitaremos os ángulos no laboratorio, θ_{Lab} e $\phi_{Lab} = \phi_{CM}$.

Algunhas fórmulas que che poden ser interesantes para unha transformación Lorentz en X (o feixe móvese nesa dirección; é un convenio):

$$\begin{aligned} E' &= \gamma(E - \beta p_x), & p'_x &= \gamma(p_x - \beta E) \\ E &= \gamma(E' + \beta p'_x), & p_x &= \gamma(p'_x + \beta E') \end{aligned}$$

Onde as variables primadas indican que son no CM. Cando transformes ao final do CM ao LAB terás en conta θ_{CM} : $p'_{3,x} = |\mathbf{p}'_3| \cdot \cos(\theta_{CM})$. O ángulo ϕ_{CM} non aparece de momento posto que é transversal á transformación.

3. Para comezar

3.1. Instalación de paquetes

Para poder realizar esta análise imos necesitar unha serie de paquetes de *python*:

1. Crea un entorno virtual para esta análise, así non modificaremos nada da túa instalación actual. Segue as instrucións de [aquí](#).
2. Unha vez dentro do teu *venv*, instala os paquetes básicos: *numpy*, *matplotlib*, *pandas*
3. Instala *uproot*. É un paquete que nos vai permitir ler os ficheiros de simulación creados en formato *.root*
4. Instala o paquete *PyPhysics* que che ofrecerá moitas clases de interese (cinemática e perdas de enerxía). Clona o repositorio e modifica o teu *PYTHONPATH*.

3.2. Github

Git é unha ferramenta de control de versións que che permitirá manter un historial do teu código, podendo volver atrás cando sexa necesario. Github é unha web para almacenar repositorios Git. Vamos utilizala para manter o código seguro nun servidor e volver cara atrás cando sexa necesario.

Para iso, o primeiro é ter unha conta en www.github.com. Tras unha configuración inicial un pouco tediosa, o plan de traballo é o seguinte, que se debe executar cando fagas cambios importantes ou cando remates a túa sesión de traballo:

1. `git add .` vai engadir todos os cambios dende o anterior *commit*
2. `git commit` abrirá un editor de texto no que crear unha mensaxe para informar dos cambios. Péchase con `Ctrl+S`, `Ctrl+X`
3. `git push` envía os cambios á nube

Para o paquete *PyPhysics*, probablemente teremos que actualizalo ao longo das prácticas. Para recibir os cambios do servidor, vai á carpeta na que está descargado e executa `git pull`. Desta forma terás o paquete actualizado.

4. Plan de traballo

Este é o plan de traballo das próximas semanas.

- **Primeira semana:** Instalación de paquetes e familiarización co entorno. Representación de todas as variables da simulación e das súas correlacións. Estudo da cinemática e das perdas de enerxía.
- **Segunda semana:** Preparación dos datos para entrenar unha rede neuronal. Comprensión do funcionamento destas e implementación dunha simple.

- **Terceira semana:** Engédegas da rede neuronal convolucional 1D á anterior para analizar os perfís de carga. Ver se isto mellora os resultados. *Fine-tuning* dos hiperparámetros.
- **Cuarta semana:** Análises complementarias e propostas doutras solucións en caso de que non funcione. Redacción da memoria de prácticas.

4.1. Primeira semana

Os obxectivos son os seguintes:

Cinemática

Resolverás as ecuacións de cinemática para obter as enerxías cinéticas e ángulos no LAB das dúas partículas finais, aínda que presentando máis atención á pesada. Faino de forma xeral, tal e como está escrito na Sección correspondente. O criterio de números é o seguinte: $1 + 2 \rightarrow 3 + 4$.

Na simulación, as variables que teremos que introducir nas fórmulas serán as masas, a enerxía do feixe e o ángulo θ_{CM} (que será aleatorio, como veremos).

Macros iniciais

Quero que fagas dous macros onde me representes as seguintes cousas, usando a axuda do repositorio de Github:

1. Representacións **cinemáticas**: Creas un `TCanvas` con 3 *pads* e representas a cinemática para estas tres reaccións distintas: $^{11}\text{Li}(d, p)^{12}\text{Li}$, $^{11}\text{Li}(d, d)^{11}\text{Li}$ e $^{11}\text{Li}(d, t)^{10}\text{Li}$. Usa a mesma enerxía do feixe para todas de 7,5 AMeV.

A clase que vai facer iso é `ActPhysics::Kinematics`. O criterio que debes usar para chamar ao constructor é o seguinte: ("`feixe`", "`target`", "`lixreira`", "`pesada`", `Tbeam`), que configura a equivalencia coas fórmulas matemáticas do seguinte xeito:

$$1(\text{feixe}) + 2(\text{target}) \rightarrow 3(\text{lixreira}) + 4(\text{pesada})$$

Ademais, `GetKinematicLine3()` darache a representación T_3 vs $\theta_{Lab,3}$ (polo tanto, da partícula marcada como *lixreira*) e `GetKinematicLine4()` o mesmo pero da 4, a pesada. Representa ambas no mesmo *pad*.

Vas ver como as formas son moi diferentes, o que forza a deseñar experimentos moi distintos en función da reacción a medir (ou un que sexa capaz de medir todas as canles de reacción).

2. **Sampleado** de variables: Para a simulación vamos necesitar samplear variables gaussianas e uniformes. Crea un macro con 3 histogramas (que vas representar en 3 *pads*) distintos nos que samplees as seguintes distribucións (podes xogar cos parámetros como queiras);

- Gaussiana: `gRandom->Gaus(mean, sigma)`
- Uniforme: `gRandom->Uniform(x0, x1)`
- O ángulo polar θ é especial se queres obter unha **distribución uniforme**:

$$\theta = \arccos(\text{gRandom->Uniform}(-1, 1))$$

Nota que este ángulo vai estar en radiáns. Para converter a graos, debes multiplicar polo factor de conversión correspondente. Se non o queres escribir, podes usar `TMath::RadToDeg()` (a inversa é `TMath::DegToRad()`) de ROOT.

4.2. Segunda semana

Representación gráfica da perda de enerxía

Na carpeta **SRIM** do repositorio tes táboas de perda de enerxía calculadas con SRIM. Se abres unha vas ver toda a información que conteñen:

- Información do material no que se calculou a perda.
- O mesmo sobre a partícula que o vai atravesar.
- Múltiples columnas coa E , o rango, o *straggling* en rango e o dE/dx .

Para ler e traballar con esta clase vas utilizar a clase **ActPhysics::SRIM**, tal e como tes no macro de exemplo (**Macros/srim.cxx**). As funcións básicas que necesitas son estas:

- **EvalDirect()**: obtén o rango para unha enerxía dada.
- **EvalInverse()**: enerxía para un rango dado.
- **Slow()**: para unha enerxía inicial, calcula a enerxía final tras atravesar un espesor de material a especificar. Tamén lle podes dar un ángulo, de xeito que a lonxitude efectiva é: $l_{\text{eff}} = l / \cos \theta$. O ángulo debe especificarse en radiáns.
- **EvalInitialEnergy()**: cos mesmos argumentos que a anterior función, fai o proceso inverso: calcula a enerxía inicial dada unha enerxía final, lonxitude e opcionalmente ángulo.

En todas as funcións o primeiro argumento é unha *string* que especifica a táboa a usar, anteriormente lida con **ReadTable()**.

O que quero que fagas é que plotees a perda de enerxía no gas en función da distancia. Para iso, escolle unha táboa (por exemplo, ^{11}Li no gas) e asume unha enerxía inicial. Calcula o rango da partícula a esa enerxía.

Despois, discretiza esa distancia nun intervalo suficientemente pequeno e nun bucle *for*, utilizando a función **Slow**, calculas a perda de enerxía (como a diferenza entre as iteracións). Representa iso en dous **TGraphs**: un de perda de enerxía vs distancia e outro de perda de enerxía vs enerxía.

Vas ver unha característica moi importante no gráfico: a medida que a partícula se para, a perda de enerxía aumenta: é o que se coñece como **pico de Bragg**. Estas dúas características (o perfil de perda de carga e o pico de Bragg) permiten identificar as partículas nun detector, xa que son unha pegada única de cada partícula!

Valicación da cinemática

Crea un macro sinxelo no que definas as funcións necesarias para calcular a cinemática. Mira o exemplo **Macros/funcs.cxx** para ver como podes devolver varios parámetros nunha función e escolle a forma que máis che guste.

Unha vez fagas isto, no propio macro vas validar que todo funcione ben. Escolle a reacción $^{11}\text{Li}(d,t)^{10}\text{Li}$ a 7,5 AMeV e segue os seguintes pasos:

- Crea un **TGraph**.
- Nun bucle *for*, vas percorrer unha variable $\theta_{CM} \in [0, 180]^\circ$.
- Utiliza as túas funcións para calcular $T_4, \theta_{Lab,4}$.
- Enche o gráfico.

Representa isto nun **TCanvas** e **superimpón** a cinemática de **ActPhysics::Kinematics::GetKinematicLine4()**, tal e como aprendiches a facer na anterior semana. Debería quedar exactamente igual!

4.3. Terceira semana

Comezo da simulación

Unha vez aprendido o básico, vamos comezar co macro de simulación. O primeiro é adaptar o que acabas de aprender de sampleado:

1. Define o tamaño de ACTAR ao comezo do macro en mm. Tes os tamaños ao principio deste guión. En cada iteración, nunha variable tipo **XYZPoint** garda:
 - X: uniforme na dirección do feixe.
 - Y e Z: gaussianas de media o centro do detector e de σ uns 5 mm. Os feixes de partículas creados nos aceleradores non son perfectos e teñen unha determinada anchura espacial. De momento, asumimos un caso sinxelo de dispersión gaussiana dun feixe ben centrado no detector.

Podes crear puntos e vectores no espazo coas clases definidas en `#include "Math/Point3D.h"` e `#include "Math/Vector3D.h"`. Podes acceder a elas como `ROOT::Math::XYZPoint` ou `ROOT::Math::XYZVector`.

Valida que todo vai ben: crea dous histogramas 2D para representar isto:

- Un onde representes Y vs X.
 - Outro no que representes Z vs Y.
2. Fai o mesmo para os ángulos no CM: samplea e crea histogramas para representalos.
 3. O seguinte será usar a clase de **cinemática** que creaches para obter as variables da partícula pesada. Cos ángulos sampleados e coa enerxía do feixe, calcula T_4 e θ_4 .

Representa nun histograma 2D que todo vai ben: nun plot de enerxía fronte a ángulo deberías reproducir a cinemática teórica.

4. A continuación, vamos implementar a xeometría do silicio que vai medir esta partícula pesada. Na variable de tipo `ActSim::Geometry` está implementada a xeometría do detector, tal e como se ve na seguinte [Figura 5](#).

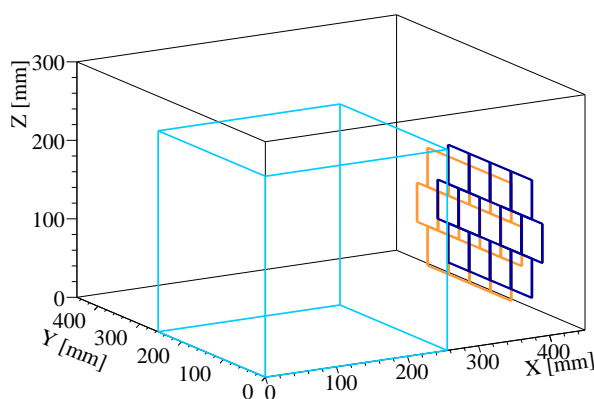


Figura 5: Esquema da xeometría: en azul, a TPC; en vermello, o silicio.

Esta clase contén todos os tamaños necesarios para simular a xeometría, cos seguintes valores

- Os tamaños da TPC normal
- Os do Si, de $80 \times 50 \times 1,5 \text{ mm}^3$
- Unha distancia de 10,4 cm

A función que imos utilizar é `PropagateTrackToSiliconArray()`. Os argumentos que necesitas son uns cantos:

- O **vértice**, tal e como `sampleaches`.
- A **dirección** da partícula. Debes definila do seguinte xeito:


```
ROOT::Math::XYZVector direction {TMath::Cos(theta4), TMath::Sin(theta4) * TMath::Sin(phi4),
                                  TMath::Sin(theta4) * TMath::Cos(phi4)};
```
- O índice do muro de silicions, xa que pode haber varios. Como só hai un, pasa un 0.
- Os seguintes argumentos van **devolver** o resultado da operación, e deberás pasar as variables obrigatoriamente:
 - Un **bool** co lado. Ignoraremos isto de momento.
 - A distancia dende o vertice ao punto de impacto, en **cm**. Debes convertela a mm. É a variable máis importante.
 - O tipo de silicio. Só hai un, así que ignorarémoslo.
 - O índice do silicio. Moi importante tamén: se a partícula non chega ao silicon, vale -1.
 - Un **XYZPoint** co punto de impacto. Ignorarémoslo.

Deste xeito, só os eventos que cheguen xeometricamente ao silicio terán un valor de `silIndex != -1`, e o máis importante, terás a distancia que teñen que viaxar para chegar alí.

A primeira vez que necesites usar a xeometría debes creala. Hai un macro na carpeta `Geo/Build.cxx` que tes que executar só unha vez. Isto vai crear un ficheiro `.root` cos parámetros necesarios que despois lerás como: `geo.ReadGeometry("./Geo/", "simple")`;

5. Finalmente, para os eventos que chegan, representa a enerxía T_4 na entrada do silicio: é dicir, usa a variable de tipo **SRIM** para reducir a perda de enerxía no gas. Representaa respecto do ángulo nun histograma 2D.

Para iso, terás que usar a táboa de enerxía correspondente. O que che recomendo é ler a táboa do ^{12}Li e que a chames *heavy*, para non evitar malentendidos despois, posto que usaremos as táboas de varias partículas.

6. Remata calculando a ΔE da partícula nos silicios. Deberás ter en conta o ángulo coa normal ao chamar a función **SRIM**: `Slow`. Para iso, computa o θ entre o vector dirección anteriormente calculado e a normal `ROOT::Math::XYZVector normal {1, 0, 0}`.

Deberás usar unha táboa de enerxía distinta! A correspondente da partícula no silicio. Recomendóche que a chames *heavySil* para diferenciala da *heavy* no gas.

Implementación dos defectos experimentais

Froito das incertezas estatísticas do proceso de perda de enerxía e das limitacións de contrución e electrónicas do detector, as liñas cinemáticas non son unha *liña* senón unha distribución de valores.

O obxectivo da simulación é ver como, en función da configuración do detector, se dispersas estas liñas e como iso nos afecta na extracción de resultados. Dúas son as que imos implementar:

1. **Straggling en enerxía**: Segue o exposto na [Subsección 2.2](#) para implementalo. Deberás crear unha función que substitúa á **SRIM**: `Slow`, de forma que pasándolle o obxecto **SRIM**, unha enerxía inicial T_{ini} e unha distacia d devolva o valor reducido e aleatorizado convenientemente.
2. **Resolución dos Si**: como viches na ??, os silicios teñen unha incerteza na determinación da enerxía. Dispersa o valor de ΔE obtido neles creando unha función que aplique a fórmula.