

Entrega 1. Proyecto XAI - INF473

Martín Abbott^{1, *}, Matías Peñaloza^{1, *}, Aaron Vargas^{1, *}, and Luis Navarro^{1, *}

¹ Departamento de Informática, Universidad Técnica Federico Santa María. Prof. Raquel Pezoa.

* martin.abbott@sansano.usm.cl, mpenaloz@usm.cl, aaron.vargas@sansano.usm.cl, luis.navarrof@usm.cl

1 Introducción

1.1 Área del problema

El problema se enmarca dentro de la Física de Astropartículas, específicamente en el estudio de los rayos cósmicos de alta energía. Éstas son las partículas más energéticas del universo, y su origen y composición aún son temas de investigación activa en la física moderna. La detección y análisis de las duchas de partículas secundarias (EAS¹), que se generan cuando un rayo cósmico interactúa con la atmósfera terrestre, son cruciales para inferir las propiedades de estas partículas primarias.

1.2 Contexto Específico

El proyecto se centra en el análisis de datos simulados a través del programa CORSIKA para el experimento del observatorio CONDOR (COmpact Network of Detectors with Orbital Range), un observatorio pensado para construirse en el Cerro Toco, Atacama; consistirá en un arreglo de detectores diseñado para estudiar EAS. La capacidad de identificar la naturaleza de la partícula primaria y de determinar con precisión su dirección de llegada es fundamental para avanzar en nuestra comprensión de las fuentes y mecanismos de aceleración de aquellos rayos cósmicos de altas energías. Los fotones y los núcleos atómicos (como los protones), al interactuar con la atmósfera terrestre, producen EAS con características ligeramente diferentes, y la distribución angular de los eventos observados puede proporcionar pistas sobre sus orígenes cósmicos.

1.3 Datos a utilizar

Como se mencionó anteriormente, trabajaremos con datos de simulación de EAS generados utilizando el software CORSIKA. Estos datos simulan las interacciones de rayos cósmicos primarios con la atmósfera a una energía y condiciones específicas. Los datos contienen información sobre las partículas secundarias que llegan al nivel del detector, incluyendo su posición (x, y) y sus respectivos tiempos de llegada (t). Los datos son de carácter privado ya que son simulaciones específicas para este tipo de estudios, sin embargo, el software como tal es de carácter público.

1.4 Preprocesamiento

Para que los datos puedan ser realistas y que además se adapten al tipo de modelos que queremos utilizar hay que aplicar una serie de pasos para que se procesen de manera adecuada.

1. Leer y traducir los archivos de simulación en formato DAT con la librería PANAMA.
2. Filtrar las partículas secundarias relevantes (quitar fotones o partículas sin carga que no podrán ser detectadas por el observatorio).
3. Filtrar las partículas que impactan en el área del detector CONDOR (truncar el espacio de la simulación al área hipotética de CONDOR de 122×113 metros aproximadamente).
4. Normalizar las coordenadas y el tiempo.
5. Organizar los datos en secuencias temporales de bins espacio-temporales, incluyendo características como la posición del bin (x_bin, y_bin), el bin de tiempo (t_bin) y el número de partículas (particle_count) en cada bin.

¹ Extensive Air Showers, su traducción como tal se refiere a cascadas atmosféricas pero también es común referirse a una EAS como una ducha o lluvia de partículas.

6. Balancear los datos por tipo de partícula y ángulo de incidencia para asegurar un entrenamiento equitativo del modelo.

2 Presentación del problema

El problema central que se aborda es la **clasificación de rayos cósmicos primarios** (fotones vs. protones) y la **reconstrucción de su ángulo de incidencia** a partir de los datos simulados de EAS detectadas por el experimento CONDOR.

2.1 Hipótesis

Es posible entrenar un modelo de Deep Learning para clasificar el tipo de rayo cósmico primario y reconstruir su ángulo de incidencia a partir de los datos espacio-temporales de las partículas secundarias detectadas.

2.2 Pregunta(s) de Investigación

1. ¿En qué medida una arquitectura de red neuronal puede lograr una clasificación de rayos cósmicos y una reconstrucción angular confiable a partir de datos simulados de EAS?
2. ¿Qué características de los datos de las lluvias de partículas son más relevantes para estas tareas, según el análisis de explicabilidad del modelo?

2.3 Objetivos

1. **Clasificación de rayos cósmicos.** Desarrollar un modelo de aprendizaje profundo capaz de clasificar rayos cósmicos primarios simulados como fotones (rayo gamma) o protones (rayo cósmico).
2. **Reconstrucción Angular.** Entrenar el modelo para reconstruir el ángulo de incidencia de los rayos cósmicos.
3. **Explicabilidad.** Aplicar técnicas de Inteligencia Artificial Explicable (XAI) para identificar y visualizar las características espacio-temporales de las lluvias de partículas que son más importantes para las decisiones de clasificación y reconstrucción angular del modelo.

3 Métodos ML y XAI

3.1 Método de ML

Se utilizará un modelo de red neuronal híbrido que combina

- **Capas Convolucionales (Conv1D).** Estas capas son efectivas para extraer patrones locales y relaciones espaciales dentro de las secuencias de datos.
- **Long Short-Term Memory (LSTM).** Las capas LSTM son adecuadas para modelar dependencias temporales a largo plazo en la secuencia de datos, capturando la evolución de la lluvia de partículas a lo largo del tiempo.

El modelo tendrá dos cabezales de salida: uno con una función de activación **sigmoide** para la tarea de **clasificación binaria** (fotón/protón) y otro con una función de activación lineal para la tarea de **regresión del ángulo de incidencia**. Se utilizarán funciones de pérdida adecuadas para cada tarea (binary cross-entropy para clasificación y error cuadrático medio para regresión) y métricas de evaluación como **F1-score** para clasificación y **error absoluto medio (MAE)** para regresión.

3.2 Métodos de Inteligencia Artificial Explicable (XAI)

Se aplicarán mapas de saliencia basados en gradientes para comprender qué características de los datos de entrada son más importantes para las predicciones del modelo. Específicamente, se utilizará la técnica de calcular el gradiente de la salida del modelo (con respecto a la clase predicha para la clasificación y al valor predicho para la regresión) con respecto a la entrada. La magnitud de estos gradientes indicará la sensibilidad del modelo a cada característica en cada paso de tiempo, revelando qué partes de la secuencia de datos influyeron más en la decisión final. Se generarán mapas de saliencia para instancias individuales y también se promediarán sobre múltiples instancias para obtener una visión global de la importancia de las características.