5 Spis treści

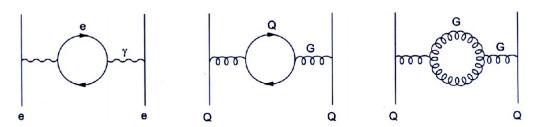
2	1	Fizyka dżetów cząstek							
3		1.1 Chromodynamika kwantowa	2						
4		1.2 Plazma kwarkowo-gluonowa	3						
5		1.3 Dżety	3						
6		1.4 Dżety b							
7		1.5 Eksperyment ALICE	5						
8	2	Uczenie maszynowe	9						
9		2.1 Wzmacniane drzewa decyzyjne	9						
10		2.2 Sieci neuronowe							
11		2.3 Dyskusja użycia dwóch algorytmów	15						
12	3	3 Dane							
13	4	Analiza	18						
14		4.1 Dobór metryki	18						
15		4.2 Wyniki dla zmiennych SV	21						
16		4.3 Wyniki dla zmiennych constit							

1 Fizyka dżetów cząstek

1.1 Chromodynamika kwantowa

Chromodynamika kwantowa (ang. Quantum Chromodynamics – QCD) to kwantowa teoria pola opisująca oddziaływania silne [1]. Wprowadza ona dla kwarków nową liczbę kwantową nazywaną kolorem lub ładunkiem kolorowym, który jest odpowiednikiem ładunku elektrycznego w elektrodynamice kwantowej (ang. Quantum Electrodynamics – QED), ale w przeciwieństwie do niego może przyjmować 3 różne wartości (i trzy antywartości dla antykwarków). Elementarne oddziaływania w obu teoriach przenoszone są przez bezmasowe bozony pośredniczące: w QED jest to elektrycznie obojętny foton a w QCD gluony, które występują w 8 odmianach i są kolorowo naładowane, przez co możliwe jest oddziaływanie zachodzące między dwoma gluonami.

Próżnia, w rozumieniu klasycznym będąca zupełnie pusta, w teoriach kwantowych wypełniona jest pojawiającymi i znikającymi wirtualnymi cząstkami. Cząstki te ekranują ładunek próbny umieszczony w kwantowej próżni, wywołując zjawisko polaryzacji próżni (analogiczne do polaryzacji dielektryków), które efektywnie zmniejsza pole wytwarzane przez ten ładunek. Siła tego efektu zależy od liczby ekranujących cząstek, czyli pośrednio od skali odległości. Skala ta wyznaczona jest przez długości fali próbkującej cząstki, zatem także jej energię (im większa energia, tym mniejsza długość fali i mniejsza ilość ekranujących cząstek obserwowanych w pobliżu rzeczywistego ładunku, zatem tym słabszy efekt ekranowania i większy efektywny ładunek). Prowadzi to do zależnej od energii stałej sprzężenia α , którą nazywamy efektywną lub biegnącą stałą sprzężenia (ang. $running\ coupling\ constant$).

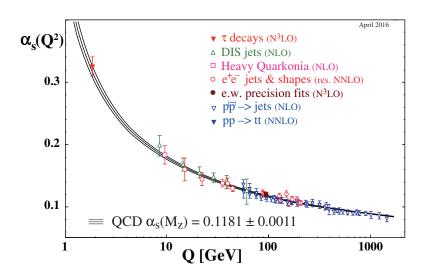


Rysunek 1: Diagramy Feynmana opisujące polaryzację próżni w QED (lewy) i QCD (środkowy i prawy). Rysunki lewy i środkowy są swoimi odpowiednikami w tych dwóch teoriach, natomiast prawy, w którym oddziałują jedynie bozony pośredniczące nie ma swojego odpowiednika w QED. Źródło: [1]

Zarówno pary elektron-pozyton jak i kwark-antykwark działają ekranująco na kolejno ładunek elektryczny i kolorowy. Jednak jak zostało to już wspomniane, w przypadku QCD możliwe jest także samooddziaływanie gluonów, przez co dopuszczalne są diagramy Feynmana jak ten przedstawiony na Rys. 1 po prawej. Pętle gluonowe działają anty-ekranująco – zwiększają efektywną wartość stałej sprzężenia, ponadto jest to efekt dominujący nad przyczynkiem od par kwark-antykwark, co sprawia że zależność biegnącej stałej sprzężenia w QCD jest odwrotna i dużo silniejsza niż w przypadku QED. Wartość α_{em} maleje od wartości $\frac{1}{128}$ przy energiach ok. 90 GeV do $\frac{1}{137}$ przy energii bliskiej zeru, co oznacza zmianę o kilka procent. Tymczasem α_S rośnie w miarę zbliżania się do niskich energii od wartości $\alpha_S \lesssim 0.1$ dla $E \gtrsim 100$ GeV do $\alpha_S > 1$ dla energii poniżej 200 MeV (por. Rys. 2). Prowadzi to do dwóch zjawisk charakterystycznych dla chromodynamiki kwantowej:

• asymptotyczna swoboda (ang. asymptotic freedom) [2], [3] – dla wysokich energii ($\gtrsim 100$ GeV) silna stała sprzężenia jest mała (w tym zakresie energii możliwe jest stosowanie rachunku perturbacyjnego) i kwarki wewnątrz hadronów zachowują się jak cząstki quasiswobodne.

• uwięzienie koloru (ang. colour confinement) – przy zwiększaniu odległości między partonami siła oddziaływania rośnie do nieskończoności, dlatego nigdy nie obserwuje się swobodnych cząstek obdarzonych ładunkiem kolorowym a jedynie związane w kolorowo obojętne hadrony.



Rysunek 2: Zależność silnej stałej sprzężenia od przekazu czteropędu. Źródło: [4].

1.2 Plazma kwarkowo-gluonowa

Odkrycie asymptotycznej swobody pozwoliło na sprawdzenie przewidywań QCD w warunkach bardzo wysokich temperatur oraz gęstości. Dla wystarczająco dużych gęstości hadrony zaczynają na siebie zachodzić, prowadząc do stworzenia stanu, w którym poszczególne hadrony przestają być odróżnialne [5]. Zasugerowane zostało także istnienie przejścia fazowego w temperaturze porównywalnej z masą pionów oraz w temperaturze niższej, ale przy odpowiednio dużych gęstościach [6]. Stan materii powstały po osiągnięciu, któregoś z tych warunków nazywany jest plazmą kwarkowo-gluonową (ang. quark-gluon plasma – QGP). Obecnie przewiduje się, że materia w takim stanie istniała w pierwszych ułamkach sekund po Wielkim Wybuchu [7] oraz, że może się znajdować w w jądrach gwiazd neutronowych [8].

Obecnie aby uzyskać dostęp do materii w stanie plazmy kwarkowo-gluonowej potrzebne są wysokoenergetyczne zderzenia cząstek. Powszechnie mówi się o niej w kontekście zderzeń ciężkich jonów, chociaż istnieją także prace doszukujące się obecności QGP w mniejszych systemach np. w zderzeniach proton-proton [9], [10].

Cechą charakterystyczną QGP jest obecność wolnych kwarków i gluonów (zbiorczo nazywanych partonami). Ze względu na uwięzienie koloru w każdym innym stanie materii są one zawsze związane i tworzą hadrony. Wolne kwarki i gluony powstające w zderzeniach muszą zatem przejść przez proces hadronizacji, w którym rekombinują one ze spontanicznie wytwarzanymi nowymi partonami, tworząc hadrony. W wyniku tego procesu, z każdego partonu obecnego w początkowym etapie zderzenia może powstać wiele cząstek poruszających się podobnym kierunku, tworząc stożek z wierzchołkiem blisko punktu interakcji wiązek. Taki stożek skolimowanych cząstek nazywany jest dżetem cząstek.

1.3 Dżety

Przedstawiona powyżej definicja dżetu nie jest precyzyjna z punktu widzenia pracy eksperymentalnej. W detektorze obserwuje się tylko cząstki w stanie końcowym, nie jest zatem możliwe

przyporządkowanie cząstki według jej pochodzenia. W związku z tym, konieczne jest użycie algorytmu klasteryzującego, dostającego na wejściu tylko obserwowalne eksperymentalnie cząstki. To jakie dżety zostaną zaobserwowane w danym zdarzeniu zależy od użytego algorytmu. Oznacza to, że precyzyjną definicję dżetu stanowi algorytm klasteryzujący wraz z zestawem parametrów. Obecnie najpowszechniej stosowanym algorytmem jest algorytm anti-kt [11].

Eksperymentalne ograniczenia związane z obserwacją tylko końcowego stanu oddziaływań nie występują w analizie danych z symulacji Monte Carlo (MC), gdzie ma się dostęp do pełnej informacji na temat historii każdej cząstki. Nie należy jednak używać jej do klasteryzacji dżetów, gdyż utracona zostałaby cecha odpowiedniości między obiektami nazywanymi dżetami w symulacji i w eksperymencie, która to cecha jest niewątpliwie jedną z podstawowych wymagań stawianych przed dobrą symulacją. Właściwym podejściem jest rekonstrukcja dżetów przy pomocy takiego samego algorytmu jak w przypadku danych eksperymentalnych.

Dżety wykorzystuje się w badaniach plazmy kwarkowo-gluonowej. Dają one pośredni wgląd we właściwości QGP na podstawie wpływu jaki wywiera na oddziałujące z nią partony. Przykładową obserwablą mierzoną w zderzeniach ciężkich jonów jest czynnik modyfikacji jądrowej R_{AA} (ang. nuclear modification factor), który jest miarą strat energii przez parton przechodzący przez medium. Jest to stosunek pędowych rozkładów dżetów cząstek zmierzonych w zderzeniach ciężkich jąder oraz w zderzeniach pp (przemnożonych przez liczbę binarnych zderzeń nukleon-nukleon przewidywanych przez model teoretyczny). Odchylenia od wartości 1 dla wysokich p_T są oznaką modyfikacji pędów dżetów przez gęste medium (w stosunku do zderzeń pp gdzie QGP nie powstaje), jest to tzw. tłumienie dżetów (ang. jet quenching). Rezultaty pomiarów R_{AA} w CMS: [12] i ALICE: [13].

Oprócz globalnego wpływu medium na dżety, analizuje się także różnice między dżetami pochodzącymi z gluonów oraz kwarków o różnych zapachach (ang. flavours). Modele teoretyczne przewidują między innymi większe straty energii w wyniku interakcji z QGP dla dżetów gluonowych niż kwarkowych [14] oraz zależność strat energii od masy partonu [15] – w tym przypadku precyzyjne pomiary rozróżniające typy dżetów pozwalają lepiej zrozumieć mechanizm odpowiadający za straty energii przez partony. Zagadnienie rozpoznania z jakiego rodzaju partonu powstał dany dżet, nazywane jest identyfikacją lub tagowaniem dżetu. Ważną rolę w studiowaniu tego problemu odgrywają symulacje MC, które pozwalają określić wydajności poszczególnych technik tagowania dżetów na podstawie znajomości kanału produkcji każdej symulowanej cząstki.

113 1.4 Dżety b

Właściwości

Poza badaniami właściwości QGP, szczególne znaczenie ma identyfikacja dżetów pochodzących z ciężkich kwarków: b i c. Są one ważnym elementem w poszukiwaniu łamania symetrii CP w rozpadach hadronów B i D oraz innych sygnatur tzw. Nowej Fizyki wykraczającej poza ramy Modelu Standardowego. Kwarki piękne pojawiają się także często w kanałach rozpadu cząstek takich jak bozon Higgsa i kwark t.

Identyfikacja dżetów b jest sporym wyzwaniem ze względu na zdecydowanie częściej występujące dżety lekkie, tj. powstałe z hadronizacji kwarków u,d,s lub gluonów. Rozpoznawanie dżetów b bazuje na charakterystycznych właściwościach hadronów zawierających kwark piękny: relatywnie długim czasie życia oraz (w mniejszym stopniu) na ich pół-leptonowym rozpadach o względnej częstości rozpadu w tym kanale (ang. $branching\ ratio$) na poziomie 10%.

Przegląd algorytmów używanych do identyfikacji dżetów b na LHC

Używane w eksperymentach na LHC: ATLAS, CMS i ALICE algorytmy można podzielić na trzy kategorie: wykorzystujące wtórne wierzchołki, informację o odległości najbliższego zbliżenia (parametrze zderzenia) cząstek tworzących dżet (ang. Distance of Closest Approach – DCA, Impact Parameter – IP) oraz identyfikujące produkty półleptonowych rozpadów pięknych lub powabnych hadronów. Dokładne opisy omawianych algorytmów można znaleźć w: [16], [17] (ATLAS), [18], [17] (CMS), [19], [20] (ALICE).

Najprostszym algorytmem jest dyskryminacja na podstawie istotności statystycznej (wynik pomiaru podzielony przez jego niepewność) odległości wtórnego wierzchołka od wierzchołka pierwotnego L. Jest to metoda wykorzystywana w każdym z trzech wymienionych eksperymentów (por. ATLAS: algorytm SV0, CMS: algorytm SSV, ALICE). Może być ona rozszerzona poprzez użycie dodatkowych zmiennych opisujących wtórny wierzchołek jak na przykład jego masa, ułamek niesionej przez niego całkowitej energii dżetu (por. ATLAS: SV1) lub użycie "pseudowierzchołków" (kombinacji dwóch cząstek o dużych DCA) w celu poprawienia wydajności detekcji o przypadki, w których wtórny wierzchołek nie został zrekonstruowany (por. CMS: CSV).

Algorytmy wykorzystujące informację o poszczególnych cząstkach mogą zasadniczo bazować albo na sumie logarytmów prawdopodobieństw pochodzenia każdej cząstki z pierwotnego wierzchołka (por. ATLAS: IP3D, CMS: JP) lub tym samym prawdopodobieństwie ale dla wybranej, np. drugiej lub trzeciej cząstki na liście posortowanej według malejącego *IP* (por. ALICE i CMS: TC). Bardziej złożonym podejściem, w którym cząstki nie są traktowane jako niezależne, jest użycie rekurencyjnych sieci neuronowych (por. ATLAS: RNNIP).

Do wykorzystania półleptonowego kanału rozpadu ciężkich hadronów do identyfikacji dżetów b w eksperymentach ATLAS (SMT) i CMS (SE, SM) użyto wzmacnianych drzew decyzyjnych trenowanych na kilku ręcznie zdefiniowanych w tym celu zmiennych takich jak pęd leptonu transwersalny względem osi dżetu.

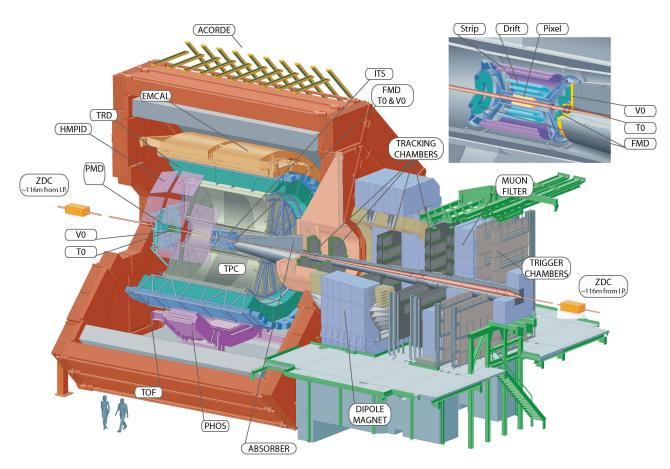
Znaczącą poprawę zdolności predykcyjnej można uzyskać łącząc kilka różnych modeli. Algorytm łączący może pobierać na wejściu albo tylko predykcje klasyfikatorów niższego poziomu (CMS: cMVAv2) lub dodatkowo także ich zmienne wejściowe (ATLAS: MV2, DL1). Do scalania używane są zwykle wzmacniane drzewa decyzyjne lub sieci neuronowe.

Przykład innego podejścia zaprezentowała współpraca przy eksperymencie LHCb, gdzie wykorzystano dwa zestawy wzmacnianych drzew decyzyjnych operujących na zmiennych związanych z wtórnymi wierzchołkami. Pierwszy zapewnia separację dżetów lekkich od ciężkich a drugi odróżnia dżety b od c. Do wyboru punktu pracy, zamiast jednowymiarowego rozkładu predykcji używany jest dwuwymiarowy rozkład wag przypisany przez oba klasyfikatory [21].

1.5 Eksperyment ALICE

Eksperyment ALICE [22], [23] jest jednym z czterech największych eksperymentów na LHC. Jest on dedykowany zderzeniom ciężkich jonów (w LHC są to jony ołowiu PbPb), ale mierzone są także mniejsze systemy, tj. proton-proton pp (głównie jako referencję dla pomiarów PbPb) oraz proton-ołów p+Pb, które dostarczają także okazji do badania asymetrycznych zderzeń. Cechą charakterystyczną pomiarów ciężkojonowych jest ich znacznie większa niż w przypadku zderzeń pp krotność, tj. liczba cząstek wyprodukowana w pojedynczym zderzeniu. W przypadku zderzeń PbPb może powstawać nawet do 8000 naładowanych cząstek na jednostkę pseudorapidity η (ang. pseudorapidity) ¹. Detektor ALICE został zoptymalizowany do mierzeniach takich przypadków, jak również pod kątem rekonstrukcji i identyfikacji cząstek o szerokim zakresie pędów (100 MeV – 100 GeV).

 $[\]frac{1}{\eta} = -\ln[\operatorname{tg}(\frac{\theta}{2})]$, gdzie θ jest kątem między wektorem pędu cząstki a osią wiązki



Rysunek 3: Schemat detectora ALICE. Źródło: [24]

Detektor ALICE jest urządzeniem złożonym z wielu subdetektorów, schematycznie przedstawionych na Rys. 3. Można je podzielić według pełnionej w pomiarach roli. ITS, TPC, TRD oraz TOF pokrywają pełen kąt azymutalny oraz zakres pseudopospieszności $|\eta| < 0.9$.

- Detektory śladowe mierzące trajektorie cząstek zakrzywiane w polu magnetycznym o wartości $B=0.5~\mathrm{T}.$
 - Inner Tracking System (ITS) zespół krzemowych detektorów śladowych znajdujący się najbliżej miejsca interakcji wiązek. Składa się on z 6 cylindrycznych warstw o promieniach od 4 do 43 cm, wykonanych w trzech różnych technologiach. Jego główną rolą jest rekonstrukcja pierwotnego oraz wtórnych wierzchołków. Bierze także udział w rekonstrukcji trajektorii i strat energetycznych cząstek, szczególnie tych niskopędowych, które nie docierają do dalej położonych detektorów.
 - Time Projection Chamber (TPC) długa na 5m i o takiej średnicy komora projekcji czasowej. Jest to główny detektor śladowy ALICE, wraz z ITS służy do wyznaczania trajektorii cząstek i na ich podstawie również wierzchołków zderzenia. Elektrony uwolnione ze zjonizowanego przez poruszające się w nim naładowane cząstki gazu dryfują wzdłuż kierunku wiązki w stronę końcowych elektrod. Następnie są tam zbierane dostarczając informacji o dwóch współrzędnych toru cząstki: odległości od wiązki i kącie azymutalnym. Trzecia składowa trajektorii jest otrzymywana na podstawie czasu dotarcia elektronów do elektrod. TPC jest najwolniejszym detektorem ALICE (ze względu na ograniczający czas dryfu elektronów wynoszący ~90 μs), użycie detektora tego typu podyktowane jest jego zdolnością do rozwikłania śladów tysięcy cząstek spodziewanych w centralnych zderzeniach PbPb.

Znajomość toru ruchu cząstki pozwala na wyznaczenie jej pędu. Oprócz dokładnej trajektorii każdej cząstki próbkowanej do 159 razy, TPC mierzy straty energii cząstek dE/dx. Pozwala to na ich identyfikacje na podstawie wzoru Bethego-Blocha, najwyższą zdolność rozdzielczą TPC osiąga dla cząstek o $p_T < 1$ GeV.

- detektory służące identyfikacji cząstek (ang. particle identification PID)
 - Transition Radiation Detector (TRD) detektor wykrywający promieniowanie przejścia, służy głównie do odróżniania wysokopędowych ($p_T > 1 \text{ GeV}$) elektronów od pionów. Promieniowanie przejścia emitowane jest podczas przechodzenia relatywistycznych cząstek przez granicę ośrodków, jego intensywność jest proporcjonalna do czynnika Lorentza γ , co pozwala na odróżnienie cząstek o tym samym pędzie na podstawie różnicy mas (elektrony są ponad 250 razy lżejsze od pionów). TRD oprócz identyfikacji elektronów uczestniczy także w rekonstrukcji śladów wysokopędowych cząstek i może być użyty w systemach wyzwalania (ang. trigger).
 - Time-Of-Flight (TOF) detektor czasu przelotu o zdolności rozdzielczej ~ 80 ps. Pozwala na separację pionów i kaonów o pędach do ok. 2.5 GeV i protonów do 4 GeV.
 - High-Momentum Particle Identification Detector (HMPID) detektor typu RICH (ang. ring-imaging Cherenkov), wykrywający fotony emitowane podczas przejścia przez ośrodek naładowanej cząstki o prędkości większej od prędkości fazowej światła w tym ośrodku (promieniowanie Cherenkowa). Na podstawie kąta pod jakim emitowane są fotony określana jest prędkość cząstki. HMPID pozwala na identyfikację pionów, kaonów i protonów o $p_T > 1$ GeV. Pokrywa przestrzeń kątów: $1.2^{\circ} < \phi < 58.8^{\circ}$ oraz $|\eta| < 0.6$ (5% akceptancji TPC).

• kalorymetry

- Photon Spectrometer (PHOS) elektromagnetyczny kalorymetr o wysokiej rozdzielczości energetycznej i przestrzennej (podzielony na kryształy o rozmiarze poprzecznym 2.2 x 2.2 cm, co odpowiada rozmiarowi w dziedzinie η , ϕ 0.004 x 0.004). Pokrywa zakres pseudopospieszności $|\eta| < 0.12$ i kąta azymutalnego równy 100°. PHOS ma za zadanie identyfikację i pomiar czteropędów fotonów, w szczególności tych niepochodzących z rozpadu innych cząstek (ang. direct photons) oraz lekkich mezonów neutralnych (np. π^0) przez dwufotonowy kanał rozpadu.
- Electromagnetic Calorimeter (EMCal) drugi elektromagnetyczny kalorytmetr ALICE o mniejszej ziarnistości ($\Delta\eta, \Delta\phi=0.014$ x 0.014), ale dużo większej akceptancji ($|eta|<0.7, \Delta\phi=107^\circ$). EMCal poprawia możliwości ALICE w zakresie pomiarów tłumienia dżetów, pozwalając na wyznaczanie neutralnej składowej energii dżetów (energii niesionej przez neutralne cząstki). Dzięki innej charakterystyce dla elektronów i hadronów (elektrony typowo deponują niemal całą energię a hadrony tylko niewielką część) pozwala je odróżnić na podstawie stosunku zmierzonej w nim energii do wyznaczonego wcześniej pędu E/p. EMCal może być użyty także w szybkim systemie wyzwalania, do selekcji przypadków z dżetami oraz wysokoenergetycznymi fotonami i elektronami.
- Muon spectrometer spektrometr mionowy, złożony z dwóch pasywnych absorberów, znajdujących się między nimi 10 warstw detektora śladowego oraz komór systemu wyzwalającego na końcu. Przedni absorber, gruby na 4 metry ($\sim 60X_0$) wykonany z betonu i grafitu, zatrzymuje hadrony oraz miony o niższych energiach (np. z rozpadów pionów

i kaonów). Jest on zoptymalizowany aby minimalizować rozpraszanie mionów i zapewnić ochronę pozostałych detektorów ALICE przed wtórnymi cząstkami powstałymi w jego materiale. Komory pozycjoczułe mają zdolność rozdzielczą ok. 100 μ m, co pozwala osiągnąć wysoką rozdzielczość przy wyznaczaniu masy niezmienniczej rzędu 100 MeV/ c^2 . Spektrometr mionowy służy głównie do mierzenia mezonów wektorowych (ω , ϕ , J/Ψ , Υ) rozpadających się w kanale $\mu^+\mu^-$.

• Detektory przednie, wyznaczające min. centralność zderzeń oraz płaszczyznę reakcji.

- ZDC zespół czterech kalorymetrów (po dwa do pomiaru protonów i neutronów, gdyż ich tory są rozdzielane przez pole magnetyczne) mierzących energię nukleonów nieuczestniczących w zderzeniu tzw. obserwatorów, co pozwala na określenie liczby nukleonów oddziałujących, tzw. uczestników. Znajdują się one 116 m od miejsca interakcji.
- PMD detektor mierzący krotności oraz rozkład przestrzenny fotonów
- FMD krzemowy detektor paskowy mierzący precyzyjnie liczbę naładowanych cząstek w zakresie pseudopospieszności wykraczającym poza akceptancję detektora ITS.
- V0 liczniki scyntylacyjne położone po obu stronach detektora, używane w systemie wyzwalania o minimalnym obciążeniu (ang. minimum bias trigger) wymóg obecności sygnału w obu detektorach pozwala na odrzucenie przypadków tła z oddziaływania wiązki protonów z resztkami gazu obecnymi w rurach próżniowych.
- T0 dostarcza dokładny czas interakcji potrzebny dla detektora TOF, pozwala także na śledzenie świetlności w czasie rzeczywistym.

2 Uczenie maszynowe

Uczenie maszynowe jest bardzo szerokim i obecnie dynamicznie się rozwijającym obszarem nauki. Występuje w wielu odmianach łącząc w sobie w zależności od wariantu wiele dziedzin takich jak matematyka (statystyka, algebra) informatyka (algorytmika, teoria informacji) a także elementy robotyki i sterowania. Dziedzinami, w których jest najczęściej wykorzystywane są min. widzenie maszynowe, przetwarzanie języka naturalnego, autonomiczne roboty i pojazdy, systemy decyzyjno - eksperckie, optymalizacyjne oraz rekomendacyjne.

W tej pracy wykorzystywana jest gałąź uczenia maszynowego nazywana uczeniem nadzorowanym lub "uczeniem z nauczycielem" (ang. supervised learning), gdzie uczenie występuje na podstawie poprawnie oznaczonych przykładów. Terminami bliskoznacznymi dla tak rozumianego uczenia maszynowego są uczenie statystyczne (ang. statistical learning) i rozpoznawanie wzorców (ang. patterm recognition).

Problem identyfikacji dżetów jest klasycznym przykładem zagadnienia klasyfikacji, gdzie poprawna odpowiedź jest jedną ze skończonej ilości opcji (klas) w przeciwieństwie do regresji, gdzie szukana odpowiedź algorytmu ma charakter ciągły.

Występuje wiele algorytmów uczenia maszynowego takich jak regresja liniowa i logistyczna, drzewa decyzyjne i ich wariacje, maszyny wektorów wspierających, sztuczne sieci neuronowe oraz wiele innych [25], [26]. Uczenie polega na znalezieniu pewnej funkcji dopasowującej do przyjmowanego na wejściu zestawu (wektora) cech (zmiennych, kolumn) pewną odpowiedź (predykcję), która minimalizuje zadaną funkcję straty. Jej rolę w przypadku regresji często pełni błąd średniokwadratowy a w przypadku klasyfikacji np. entropia krzyżowa (ang. crossentropy) ². Różne algorytmy szukają przy tym funkcji dopasowującej należącej do różnych klas funkcji: przykładowo klasyczne drzewa decyzyjne przeszukują tylko przestrzeń funkcji dających się opisać skończonym zbiorem reguł "jeśli – to" (ang. if - else).

W pracy wykorzystane zostały dwa rodzaje algorytmów: wzmacniane drzewa decyzyjne oraz sieci neuronowe.

2.1 Wzmacniane drzewa decyzyjne

Wzmacniane drzewa decyzyjne są jednym z rozwinięć klasycznego algorytmu drzewa decyzyjnego. Pojedyncze drzewo decyzyjne dzieli przestrzeń cech uczących przy pomocy prostopadłych cięć, na mniejsze/większe niż zadana wartość w przypadku zmiennej ciągłej lub na należące/nie należące do danej klasy w przypadku zmiennej kategorycznej. Każdy podział, nazywany węzłem, daje dwie gałęzie, które można dalej niezależnie dzielić aż do ostatniego poziomu (liści). Kolejne podziały wybierane są tak, aby zbiory przykładów wpadające do poszczególnych gałęzi były jak najbardziej jednorodne. Stosuje się różne miary nieporządku takie tak: indeks Gini G_L lub entropia S_L ³.

Drzewa decyzyjne są często łączone w komitety klasyfikatorów (ang. ensemble methods). Wiele "słabych" klasyfikatorów jest łączonych w jeden "silny" na dwa sposoby: workowania (ang. bagging) [27] oraz wzmacniania (ang. boosting) [28], które są często ze sobą porównywane.

Bagging – w zastosowaniu dla drzew decyzyjnych nazywany algorytmem lasów losowych (ang. $random\ forest$) - polega na wytrenowaniu wielu drzew, każdego na podstawie N przykładów losowo wylosowanych z powtórzeniami spośród N-licznego zbioru treningowego. Dodatko-

 $^{^2}J = -\frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} \left[y_i \log \hat{y_i} + (1 - y_i) \log (1 - \hat{y_i}) \right], \text{ gdzie } y_i \text{ to prawidłowa klasa } i\text{-tego przykładu a } \hat{y_i} \text{ to predykcja algorytmu}$

algorytmu ${}^3G_L=1-\sum_k p_k^2$ oraz $S_L=\sum_k -p_k\log p_k$, gdzie p_k to stosunek liczby przypadków klasy k do liczby wszystkich przypadków w liściu L

wo, do uczenia każdego drzewa używa się tylko podzbioru wszystkich cech uczących. Końcową predykcję algorytmu otrzymuje się poprzez "głosowanie" wszystkich drzew z odpowiednimi wagami.

Boosting – wzmacniane drzewa decyzyjne (ang. boosted decision trees) – jest metodą podobną do baggingu. Główną różnicą jest zwiększanie wag przykładom uczącym, które przez poprzednie drzewo zostały źle zaklasyfikowane – każde kolejne drzewo koncentruje się bardziej na poprawie błędów poprzednich drzew. Widać tu kolejną ważną cechę odróżniającą obie metody: boosting jest algorytmem sekwencyjnym podczas gdy bagging daje się trywialnie zrównoleglić (każde drzewo trenowane jest w osobnym wątku).

Parametry i sposób trenowania drzew decyzyjnych na analizowanych danych

W niniejszej pracy wykorzystano wzmacniane drzewa decyzyjne zaimplementowane w wydajnej bibliotece XGBoost [29]. Szybkość obliczeń jest bardzo ważna, gdyż oprócz komfortu pracy z algorytmem, przekłada się na jakość otrzymanych wyników – krótszy czas obliczeń oznacza możliwość przeprowadzenia większej ilości eksperymentów i lepsze dobranie parametrów oraz danych. Implementacja wzmacnianych drzew decyzyjnych w XGBoost wykorzystuje wszystkie rdzenie procesora, pomimo że sam algorytm ma charakter sekwencyjny – jest to możliwe dzięki paralelizacji procesu tworzenia każdego drzewa (przed każdym podziałem konieczne jest sprawdzenie pewnej ilości możliwych zmiennych i wartości progowych i ten proces jest wykonywany równolegle).

Dzięki szybkiemu uczeniu się algorytmu, możliwe było użycie kosztownego obliczeniowo automatycznego przeszukiwania przestrzeni parametrów przy pomocy przeszukiwania losowego (ang. random search), które jest zwykle preferowane nad przeszukiwanie sieciowe [30]. W tym celu cały zbiór danych dzielony był na dwie części: trenującą oraz testową (80/20%). Następnie algorytm był trenowany i oceniany z użyciem trzy- lub pięciokrotnej walidacji krzyżowej (ang. cross-validation) na zbiorze trenującym dla różnych zestawów parametrów. Model z najlepszym wynikiem uzyskanym w walidacji krzyżowej był sprawdzany na zbiorze testowym.

Parametry optymalizowane w opisanym procesie to:

- max_depth maksymalna głębokość każdego drzewa (niekoniecznie osiągana)
- $n_estimators$ liczba drzew

- learning_rate parametr szybkości uczenia, komplementarny do n_estimators, w praktyce można ustalić liczbę drzew i szukać optymalnej szybkości uczenia
- subsample, colsample_bytree, colsample_bylevel parametry regularyzacyjne określające ułamek kolejno: danych użytych do trenowania każdego drzewa, kolumn użytych w każdym drzewie (cechy losowane raz dla danego drzewa), kolumn użytych przy każdym podziale (cechy losowane przy każdym podziale)
- $\bullet \ \gamma$ minimalny zysk w postaci zmniejszenia wartości funkcji straty konieczny do wykonania podziału

2.2 Sieci neuronowe

Sieci neuronowe (ang. neural networks – NN) są szczególnym algorytmem uczenia maszynowego. Występują w bardzo wielu odmianach i są wykorzystywane w rozwiązywaniu szerokiej gamy problemów. Nawet bardzo pobieżny opis sieci neuronowych wymaga dużo więcej miejsca niż może być temu poświęcone w tej pracy. Wprowadzenia do sieci neuronowych od podstaw można znaleźć m.in. w [31] lub [32]. Tu przedstawione zostaną wyłącznie wybrane zagadnienia

mające ściślejszy związek z pracą. Używane mogą być terminy, których znaczenie wyjaśniane jest w podanych źródłach.

W niniejszej pracy, wykorzystane zostały dwa rodzaje sieci neuronowych: sieci w pełni połączone (ang. $fully\ connected\ NN-FC\ NN$), nazywane także wielowarstwowymi perceptronami (ang. multi-layer perceptron-MLP) oraz sieci konwolucyjne (ang. $convolutional\ NN-ConvNets,\ CNN$).

Sieci w pełni połączone

W nierekurencyjnych sieciach neuronowych (tylko takie są używane w tej pracy), informacja jest przekazywana kolejno od warstw wejściowych, poprzez warstwy ukryte aż do wyjściowej. W sieciach typu FC wszystkie warstwy składają się z identycznych neuronów – każdy neuron dostaje na wejściu wektor, natomiast zwraca skalar – wartość pewnej zadanej, nieliniowej funkcji, jako argument podając średnią ważoną z elementów wektora wejściowego. Wartości zwracane przez neurony w danej warstwie składają się na wektor wejściowy dla neuronów kolejnej warstwy. Wejściem dla pierwszej warstwy są natomiast kolejne przykłady ze zbioru uczącego. Trenowanie sieci neuronowych polega na zmienianiu wag (parametrów) w liczonej w każdym neuronie średniej, każdy neuron posiada własny, niezależny zestaw wag.

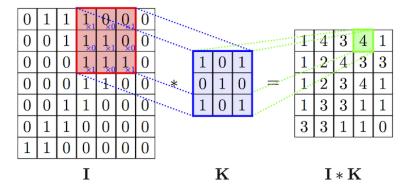
Istnieje twierdzenie o sieciach neuronowych jako uniwersalnych aproksymatorach funkcji (ang. universal approximation theorem) [33], mówiące, że już sieć neuronowa o jednej warstwie ukrytej jest zdolna do przybliżenia dowolnej funkcji z dowolną dokładnością. Twierdzenie to nie podaje niestety liczby potrzebnych neuronów a przede wszystkim – sposobu ich trenowania. Trenowanie jest prostsze w przypadku zastosowania wielu warstw, które odpowiadają kolejnym poziomą abstrakcji jednak nadal jest dużym wyzwaniem ze względu na fakt, że nawet stosunkowo niewielka sieć może posiadać bardzo dużą liczbę parametrów, przykładowo sieć o czterech warstwach, w każdej po 128 neuronów ma ich ponad 65 tysięcy.

367 Sieci konwolucyjne

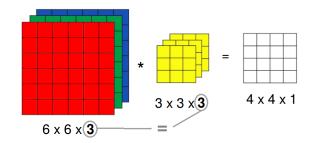
Jednym ze sposobów na ograniczenie liczby trenowanych parametrów jest użycie konwolucyjnych sieci neuronowych [34] (bardziej poprawną choć rzadko używaną nazwą w języku polskim jest sieć splotowa). Są one inspirowane połączeniami w korze wzrokowej zwierząt i wywodzą się z badań w obszarze widzenia komputerowego, gdzie liczby parametrów są szczególnie duże (wektor wejściowy ma wymiar równy liczbie pikseli w obrazie), na takim przykładzie również najłatwiej zrozumieć ich działanie.

Sieci konwolucyjne różnią się od sieci typu FC tym, że część wag połączeń między warstwami jest dzielona. Występuje w nich nowy rodzaj warstwy, nazywany warstwą konwolucyjną. Każda jednostka w warstwie konwolucyjnej (filtr) ma pewną stałą (niewielką) liczbę wag. Połączenie z dużym wejściem realizowane jest przez powielanie tych samych wag w połączeniach z kolejnymi fragmentami wektora wejściowego (por. Rys. 4). Rezultatem działania filtra na macierz jest wynik operacji splotu. Liczba parametrów przypadająca na każdy filtr jest równa jego rozmiarowi i nie zależy od wielkości wektora wejściowego.

W przypadku gdy zamiast wejścia dwuwymiarowego (jak np. obraz czarno-biały), mamy do czynienia z wejściem trójwymiarowym (np. trzeci wymiar to kolejne kolory w kodowaniu RGB), filtry również muszą mieć trzy wymiary, przy czym rozmiar w ostatnim wymiarze musi być równy rozmiarowi w tym kierunku wektora wejściowego. Wynik operacji splotu jest ponownie dwuwymiarowy, gdyż filtr przesuwany jest tylko w dwóch pierwszych wymiarach. Trzeci wymiar powstaje przez składanie kolejnych filtrów. Widać zatem, że również w przypadku gdy na wejścia podawany jest obraz czarno-biały, filtry w kolejnych warstwach konwolucyjnych (oprócz pierwszej) mają po trzy wymiary.



Rysunek 4: Schemat działania pojedynczego filtra z warstwy konwolucyjnej (operacja splotu). Źródło: [35].



12	20	30	0			
8	12	2	0	2×2 Max-Pool	20	30
34	70	37	4		112	37
112	100	25	12			

Rysunek 5: Działanie pojedynczego filtra (3D) na wejście o trzech wymiarach. Źródło: [36].

389

390

391

392

393

394

395

396

397

398

399

400

401

402

403

404

405

406

407

408

Rysunek 6: Działanie warstwy typu max-pool. Źródło: [35].

Oprócz warstw konwolucyjnych, w sieciach tego typu stosowane są także tzw. warstwy typu max-pooling. Zasada jej działania jest bardzo prosta: wykonuje funkcję maksimum na zadanym fragmencie obrazu (por. Rys. 6). Ich rolą jest zmniejszanie rozmiaru przekazywanej w sieci informacji.

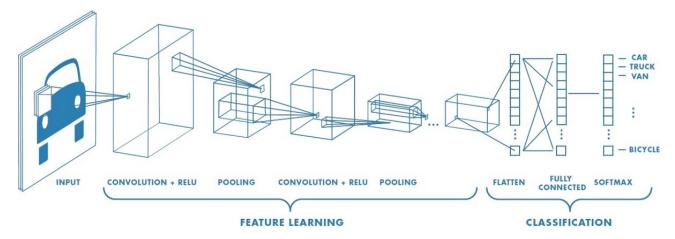
Typowa architektura stosowana w przypadku sieci konwolucyjnych jest następująca: najpierw warstwy konwolucyjne (pomiędzy nimi czasem warstwy typu max-pool), następnie wszystkie filtry są rozwijane i składane w długi jednowymiarowy wektor, który przekazywany jest do warstw typu FC. W przypadku problemu klasyfikacji, na końcu znajduje się jeszcze warstwa typu softmax normalizująca wyjście z sieci do jedynki (por. Rys. 7).

Sieci konwolucyjne posiadają dwie właściwości odróżniające je od MLP:

- niezmienniczość względem przesunięcia (ang. translation invariance) – głównie za sprawą dzielenia wag oraz obecności warstw typu max-pool, położenie danej cechy na obrazie jest niemal bez znaczenia (obraz po prawej stronie byłby rozpoznany jako twarz)
- lokalność połączeń filtry obejmują tylko kilka sąsiednich pikseli (tam zwykle występują najsilniejsze zależności) nie są w stanie dostrzec cechy rozciągniętej na obszar większy od rozmiaru filtra



Rysunek 8: Źródło: [38].



Rysunek 7: Typowa struktura stosowana w sieciach konwolucyjnych. Warstwy konwolucyjne mają za zadanie wydobywać cechy, na podstawie których późniejsze warstwy dokonują klasyfikacji. Widoczna jest charakterystyczna stopniowa zmiana rozmiaru przekazywanej macierzy: rozmiar poprzeczny maleje kosztem głębokości, co odpowiada rosnącej liczbie filtrów i malejącemu rozmiarowi obszaru po jakim są one przesuwane. Źródło: [37].

Hiperparametry i trenowanie sieci neuronowych na analizowanych danych

409

410

411

412

413

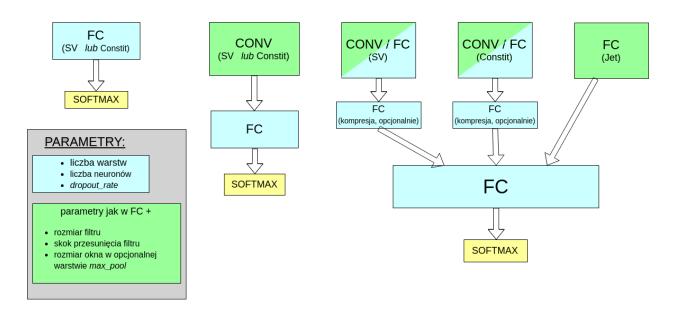
414

415

417

Parametry sieci, których wartości są określane przez projektanta sieci, takie jak liczba warstw ukrytych są nazywane hiperparametrami (dla odróżnienia od parametrów - wag połączeń).

Testowane były trzy architektury: sieci w pełni połączone, sieci konwolucyjne oraz sieć złożona z dwóch gałęzi, osobnych dla wtórnych wierzchołków i cząstek tworzących dżet (por. Rozdz. 3) przedstawione schematycznie na Rys. 9. Do trenowania sieci wykorzystano wysokopoziomową bibliotekę Keras [39] korzystającą z silnika obliczeniowego zaimplementowanego w TensorFlow [40].



Rysunek 9: Schematyczne przedstawienie trzech testowanych rodzin architektur sieci. Każdy blok odpowiada kilku warstwom danego typu. Bloki warstw
 typu FC i opisane jako "kompresja" składały się z kilku neuronów i miały za zadanie zredukować całą informację z danej gałęzi do wektora kilku liczb.

Zestaw hiperparametrów definiujący działanie sieci w pełni połaczonej:

• liczba warstw ukrytych

419

423

424

428

429

430

431

432

433

434

435

436

437

438

439

440

442

443

444

445

446

450

- liczba neuronów w każdej warstwie
- funkcja aktywacji nieliniowa funkcja aplikowana przed zwróceniem wartości w każdym neuronie, najpopularniejsze to $tanh, ReLU \ (f(x) = max(0, x))$ oraz funkcja sigmoidalna $(f(x) = \frac{1}{1 + exp(x)})$
 - algorytm optymalizacyjny spadek gradientowy lub jego wariacje
 - parametr szybkości uczenia i jego modyfikacje w trakcie uczenia
- liczba przykładów trenujących przetwarzanych w jednym kroku uczenia (ang. batch_size)

 im większy tym szybsze jest trenowanie sieci (dzięki wydajnym operacjom macierzowym), natomiast może się to odbywać kosztem precyzji
 - liczba epok uczenia ile razy będzie pokazywany sieci każdy przykład
 - opcjonalnie: warunki stopu (ang. early stopping) w razie osiągnięcia plateau (wysycenia procesu uczenia)
 - opcjonalnie: regularyzacja przy pomocy różnych technik (zwykle konieczna)
 - ponadto dla sieci konwolucyjnych:
 - liczba warstw konwolucyjnych i liczba filtrów w każdej warstwie
 - obecność lub brak warstw max-pool i rozmiar ich okna
 - rozmiar filtrów i długość skoku przy ich przesuwaniu

Same dwie pierwsze wielkości dają nieograniczoną liczbę konfiguracji. Czas trenowania sieci neuronowych jest rzędy wielkości większy niż drzew decyzyjnych, dlatego przyjęto szereg kroków mających na celu zmniejszenie przeszukiwanej przestrzeni hiperparametrów. Na podstawie wstępnych testów oraz różnych wskazówek dostępnych w literaturze przyjęto:

- batch_size zawsze równy 64 (inne testowane wartości: 16, 32, 128)
- za algorytm optymalizacyjny przyjęto algorytm o nazwie *Nadam* [41], tj. rozwinięcie algorytmu *Adam* [42] o parametr Nesterova (inne testowane to zwykły spadek gradientowy oraz *Adam*)
 - funkcję aktywacji: ReLU
 - liczba epok równa 50, 100 lub 200 (lub mniej do testów), zrezygnowano z early stopping
 - stałe w trakcie treningu wartości parametru szybkości uczenia
- spośród technik regularyzacyjnych testowano wyłącznie *dropout* [43] z prawdopodobieństwem odrzucenia równym 0.1, 0.2 lub 0.5
 - kilka wybranych kombinacji dla zestawu parametrów: rozmiar filtra, długość skoku i rozmiar okna w warstwach max-pool takie same w kolejnych warstwach
- liczby neuronów/filtrów w warstwach będące zawsze potęgami dwójki oraz stałą liczbę w kolejnych warstwach lub zmieniającą się o stały czynnik, np. 256-128-64, 128-128-128 lub 16-32-64

• liczba warstw FC: 2-8, konwolucyjnych 2-6

Nawet po przyjęciu powyższych uproszczeń nie sposób sprawdzić wszystkich możliwych zestawów hiperparametrów, dlatego sposób ich dobierania w kolejnych testach był mocno empiryczny. Dostępne dane dzielone były na trzy zbiory: trenujący, walidacyjny i testowy. Wobec braku warunków stopu, zbiór walidacyjny użyty był wyłącznie do porównywania różnych zestawów parametrów, tak aby wynik testowy pozostał nieobciążony.

Zgodnie z zasadą ortogonalizacji działań, proces doboru hiperparametrów dzielono na dwie części: najpierw starano się uzyskać jak najlepsze wyniki na zbiorze uczącym, a dopiero później zmusić algorytm do lepszej generalizacji na zbiorze testowym przez zwiększoną regularyzację i modyfikację parametru szybkości uczenia.

2.3 Dyskusja użycia dwóch algorytmów

Użycie więcej niż jednego algorytmu ma wiele zalet. Po pierwsze daje możliwość porównania wyników. Pozwala to na oszacowanie błędu *Bayesowskiego* (najniższego możliwego do osiągnięcia przez jakikolwiek algorytm błędu). Jest to bardzo ważne w sytuacji, gdy nie dysponuje się innym oszacowaniem tego błędu (w wielu problemach naturalnych dla człowieka jak rozpoznawanie obiektów na obrazkach jest nim błąd ludzki lub też błąd popełniany przez zespół ekspertów w bardziej zaawansowanych zastosowaniach).

Po drugie, wykorzystane zostały dwa algorytmy mocno różniące się w swojej naturze, co pozwala wykorzystać cechy każdego z nich w analizie: przykładowo sieci neuronowe dobrze radzą sobie z nieustrukturyzowanymi danymi – potrafią tworzyć wysoko poziomowe cechy na podstawie niskopoziomowego wejścia (np. położenia oka na zdjęciu twarzy na podstawie pixeli). Są natomiast trudne w interpretacji i często traktowane są jako tzw. "czarne skrzynki" (ang. black box). Oprócz tego, liczba możliwych konfiguracji sieci jest ogromna i przez to niemożliwe jest stwierdzenie czy wykorzystane zostały pełne ich możliwości.

Z kolei drzewa decyzyjne posiadają stosunkowo niewielką liczbę parametrów, a ich trenowanie jest bardzo szybkie co pozwala na ich ekstensywne przeszukiwanie i otrzymanie wyników, które można uznać za optymalne dla tego algorytmu. Ponadto, w przypadku drzew istnieją niewymagające dodatkowych obliczeń miary użyteczności poszczególnych zmiennych, co daje wgląd w działanie algorytmu i poprawia intuicyjne zrozumienie jego predykcji.

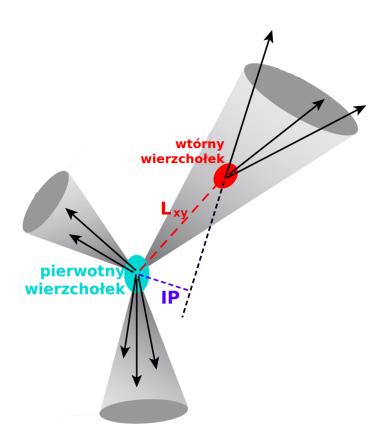
3 Dane

Dane użyte w analizie pochodzą z symulacji Monte Carlo zderzeń proton-proton przy energii w układzie środka masy równej $\sqrt{s} = 13$ TeV dostępnych na serwerach eksperymentu ALICE. Są to pełne symulacje detektora ALICE, wykorzystujące generator zderzeń Pythia8 [44] (tune: Pythia8Jets_Monash2013 [45]) oraz pakiet Geant3 [46] do transportu cząstek przez detektor.

Do rekonstrukcji dżetów wykorzystany został algorytm anti-kt z parametrem R=0.4 zaimplementowany w pakiecie FASTJET [47]. Dżetów poszukiwano wyłącznie wśród cząstek naładowanych (ang. $charged\ jets$) ze względu na słabe pokrycie przestrzeni fazowej przez kalorymetry w eksperymencie ALICE.

Do analizy wybrano dżety o p_T większym niż 15 GeV i mieszczących się w całości w akceptancji detektora TPC, tj. $|\eta| < 0.9$, co przy użytym parametrze rozmiaru dżetu R = 0.4, daje ograniczenie na pseudopospieszność $|\eta| < 0.5$ dla osi dżetu.

Dla każdego dżetu obliczony został szereg wielkości, które można podzielić na zmienne na poziomie dżetu, związane z wtórnymi wierzchołkami oraz cząstkami tworzącymi dżet. Za potencjalne wtórne wierzchołki uznaje się wszystkie kombinacje trzech cząstek spełniających pewne dosyć luźne kryteria jak $p_T > 0.15$ GeV (rozważane są wyłącznie trzy-cząstkowe wtórne wierzchołki), stąd ich liczba może być dużo większa od liczby cząstek tworzących dżet.



Rysunek 10: Rysunek ilustrujący znaczenie używanych wielkości: L_{xy} oraz parametru zderzenia IP. Źródło: [48].

Lista używanych zmiennych:

- Zmienne na poziomie dżetu:
 - $-\eta$, ϕ pseudopospieszność i kąt azymutalny

- $-p_T$ pęd poprzeczny dżetu
 - masa dżetu

504

505

507

508

509

510

511

512

513

514

515

516

517

518

519

520

521

522

523

524

525

526

527

- powierzchnia dżetu liczona w płaszczyźnie (η, ϕ) , do powierzchni dżetu zaliczany jest element w powierzchni w którym dodanie cząstki o nieskończenie małym pędzie poprzecznym sprawi, że zostanie ona zaliczona do tego dżetu [#REF https://arxiv.org/pdf/0707.1378.pdf]
 - gęstość tła (w danym zdarzeniu)
 - $-N_{SV}$ liczba wtórych wierzchołków
 - $-\ N_{Constit}$ liczba cząstek tworzących dżet
- Zmienne opisujące cząstki tworzące dżet:
 - $\eta,\,\phi$ pseudopospieszność i kąt azymutalny cząstki względem osi dżetu
 - $-p_T$ pęd poprzeczny cząstki
 - $-IP_D$ rzut na kierunek poprzeczny wektora parametru zderzenia
 - $-IP_Z$ rzut na oś z wektora parametru zderzenia
- Zmienne opisujące wtórne wierzchołki:
 - $-L_{xy}$ odległość między pierwotnym a wtórnym wierzchołkiem (ang. decay length)
 - $-\sigma_{Lxy}$ niepewność wyznaczenia L_{xy}
 - $-\sigma_{vertex} = \sqrt{d_1^2 + d_2^2 + d_3^2}$ rozrzut śladów (ang. tracks) wokół wtórnego wierzchołka, gdzie d_i to odległość najbliższego zbliżenia śladu / odległość najbliższego przelotu do wtórnego wierzchołka (ang. distance of closest approach DCA)
 - $M_{inv} = \sqrt{(E_1 + E_2 + E_3)^2 (\vec{p_1} + \vec{p_2} + \vec{p_3})^2}$ masa niezmiennicza wierzchołka, gdzie E_i, p_i to energia i pęd *i*-tej cząstki tworzącej wierzchołek
 - $-\chi^2/Ndf$ dopasowania wtórnego wierzchołka

TBD: tabelaryczna postać, liczba SV i Nconstit, jak posortowane, wypleniania zerami korespondencja miedzy uzytymi danymi a algorytmami z sec. "identyfikacja dżetów b"

4 Analiza

4.1 Dobór metryki

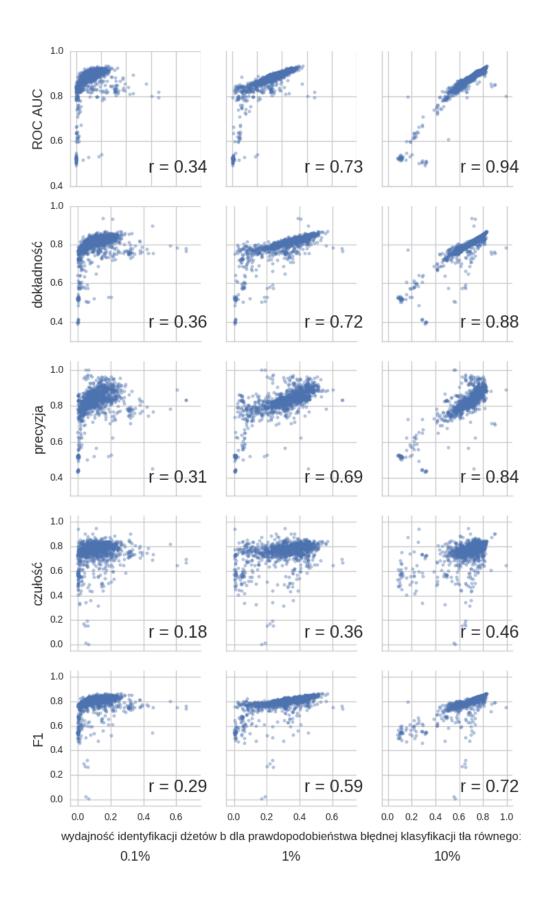
Bardzo ważnym elementem w trenowaniu algorytmów uczenia maszynowego jest dobór odpowiedniej metryki – klasycznym złym przykładem jest używanie dokładności (ang. accuracy) do oceniania klasyfikacji binarnej w przypadku dużego niezrównoważenia klas – algorytm przewidujący zawsze klasę większościową może osiągnąć dużą wartość dokładności będąc jednocześnie bardzo słabym modelem.

Kilka najczęściej używanych metryk wymieniono w Tab. ??. Używanie i porównywanie kilku miar efektywności jest często niepraktyczne dlatego dobrze jest wybrać jedną metrykę. Przy jej wyborze należy kierować się potencjalnymi zastosowaniami modelu. W tym przypadku są to analizy fizyczne, które mogą mieć różne wymagania dotyczące czystości i liczebności otrzymywanych próbek a co za tym idzie, preferować inne punkty pracy zdefiniowane jako pary liczb: wydajność poprawnej klasyfikacji dżetów b (ang. tagging efficiency = true positive rate = recall), i ułamek niepoprawnie zaklasyfikowanych przypadków tła (ang. mistagging rate = false positive rate).

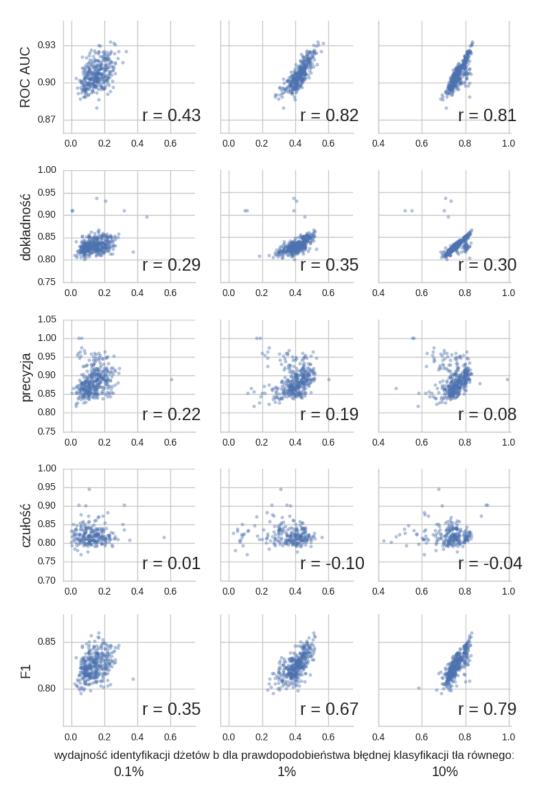
Naturalnym wyborem wydaje się pole pod powierzchnią krzywej ROC (ang. ROC Area Under Curve – ROC AUC) [49]. Potencjalną przeszkodą może być zakres rozsądnych wartości prawdopodobieństwa błędnej klasyfikacji przypadków tła: dżety b stanowią tylko kilka procent liczby wszystkich dżetów, zatem z punktu widzenia analizy dopuszczalne będą punkty pracy zapewniające wydajność identyfikacji dżetów b ok. 10 – 100 razy większą niż częstość niepoprawnego zaklasyfikowania przypadków tła. Oznacza to, że zdecydowana większość punktów pracy znajdujących się na krzywej ROC jest nie do zaakceptowania – interesujące są tylko te o najniższych częstościach.

Aby ilościowo porównywać różne algorytmy wprowadzone zostaną trzy punkty pracy: o prawdopodobieństwie błędnej klasyfikacji tła równej 0.1%, 1% oraz 10%. Na Rys. 15 przedstawione zostały zależności poszczególnych metryk od wydajności identyfikacji dzetów b w tych trzech punktach pracy. Każdy punkt odpowiada jednemu eksperymentowi (dla dowolnego algorytmu) przeprowadzonemu w trakcie przygotowywania analizy. Daje to pogląd, używanie której metryki zapewni jednocześnie wysokie wartości wydajności na identyfikację dzetów b w wybranych punktach pracy. Najwyższe korelacje występują dla punktu pracy o najwyższym prawdopodobieństwie błędnej klasyfikacji tła – jak będzie to pokazane później wyniki dla tego punktu pracy są najbardziej stabilne. Spośród analizowanych metryk najwyższe wartości współczynnika Pearsona otrzymano dla pola pod powierzchnią krzywej ROC, dosyć wysokie również dla dokładności i precyzji. Widać, że wartości czułości są najsłabiej skorelowane z wydajnością identyfikacji dzetów b – jest zrozumiałe, że są one dużo niższe niż dla precyzji: wartości czułości maleją gdy błędnie klasyfikowane są dżety b stanowiące sygnał, podczas gdy wartości precyzji maleją, gdy błędnie klasyfikowane są przypadki tła. Z tych dwóch błędów, drugi jest bardziej kosztowny, gdyż błedna klasyfikacja nawet niewielkiej cześci tła znacznie pogarsza czystość otrzymywanej próbki.

Na Rys. 12 przedstawiono te same wykresy, ale tym razem wybrano tylko 25% najlepszych wartości dla każdej metryki – te punkty są bardziej znaczące, gdyż ostatecznie modele z eksperymentów dających najlepsze wyniki będą używane. Dla tych wykresów otrzymano zdecydowaną dominację ROC AUC – wybór modeli dających najwyższe pole pod powierzchnią krzywej ROC zapewnia jednocześnie otrzymanie wysokich wartości wydajności identyfikacji dżetów b dla wybranych punktów pracy.

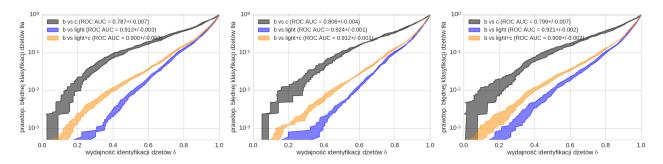


Rysunek 11: Zależność podstawowych metryk od wydajności identyfikacji dżetów b dla punktów pracy o prawdopodobieństwie błędnej klasyfikacji tła równej 0.1%, 1% oraz 10%. Dla każdego wykresu przedstawiono współczynnik korelacji r Pearsona.

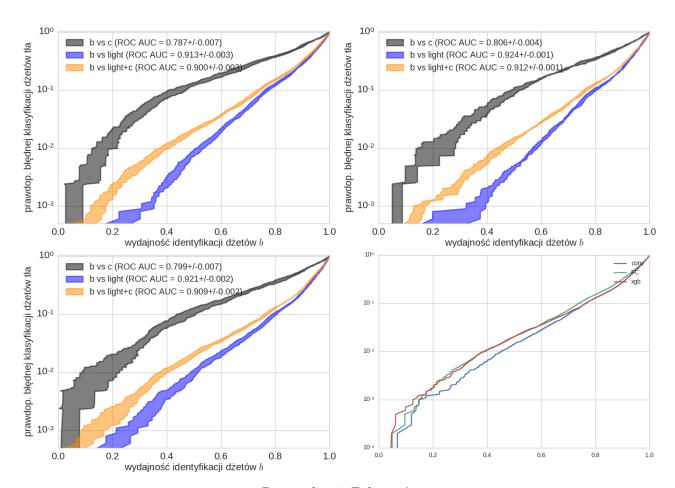


Rysunek 12: Rysunek podobny do Rys. 15, ale przedstawione zostały tylko punkty odpowiadające eksperymentom o wartościach metryki będących w górnym kwartylu wartości danej metryki dla wszystkich eksperymentów.

4.2 Wyniki dla zmiennych SV

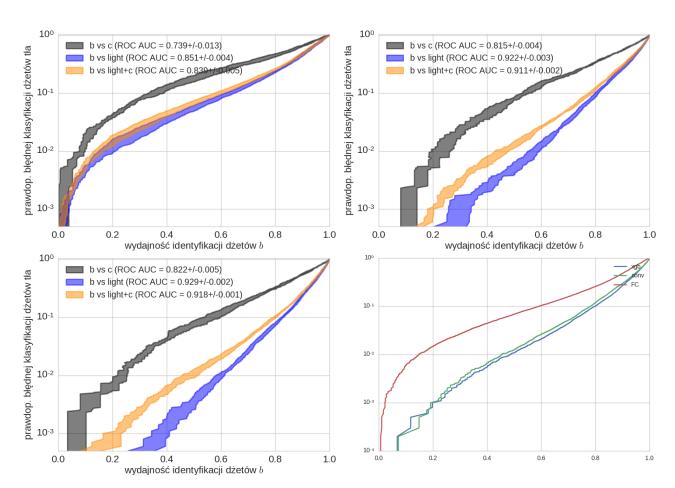


Rysunek 13: Zależności



Rysunek 14: Zależności

4.3 Wyniki dla zmiennych constit



Rysunek 15: Zależności

75 References

- 576 [1] Donald H. Perkins. "Oddziaływania międzykwarkowe i chromodynamika kwantowa". In:
 577 Wstęp do Fizyki Wysokich Energii. 2nd ed. PWN, 2005, 171–193.
- ⁵⁷⁸ [2] David J. Gross and Frank Wilczek. "Ultraviolet Behavior of Nonabelian Gauge Theories".

 ⁵⁷⁹ In: *Phys. Rev. Lett.* 30 (1973). [,271(1973)], pp. 1343–1346. DOI: 10.1103/PhysRevLett.

 ⁵⁸⁰ 30.1343.
- [3] H. David Politzer. "Reliable Perturbative Results for Strong Interactions?" In: *Phys. Rev. Lett.* 30 (1973). [,274(1973)], pp. 1346–1349. DOI: 10.1103/PhysRevLett.30.1346.
- ⁵⁸³ [4] C. Patrignani et al. "Review of Particle Physics". In: *Chin. Phys.* C40.10 (2016), p. 100001.

 DOI: 10.1088/1674-1137/40/10/100001.
- John C. Collins and M. J. Perry. "Superdense Matter: Neutrons Or Asymptotically Free Quarks?" In: *Phys. Rev. Lett.* 34 (1975), p. 1353. DOI: 10.1103/PhysRevLett.34.1353.
- ⁵⁸⁷ [6] N. Cabibbo and G. Parisi. "Exponential Hadronic Spectrum and Quark Liberation". In: ⁵⁸⁸ Phys. Lett. 59B (1975), pp. 67–69. DOI: 10.1016/0370-2693(75)90158-6.
- D. Boyanovsky, H. J. de Vega, and D. J. Schwarz. "Phase transitions in the early and the present universe". In: *Ann. Rev. Nucl. Part. Sci.* 56 (2006), pp. 441–500. DOI: 10.1146/annurev.nucl.56.080805.140539. arXiv: hep-ph/0602002 [hep-ph].
- Mark G. Alford and Kai Schwenzer. "What the Timing of Millisecond Pulsars Can Teach
 us about Their Interior". In: *Phys. Rev. Lett.* 113.25 (2014), p. 251102. DOI: 10.1103/
 PhysRevLett.113.251102. arXiv: 1310.3524 [astro-ph.HE].
- ⁵⁹⁵ [9] Vardan Khachatryan et al. "Evidence for collectivity in pp collisions at the LHC". In: ⁵⁹⁶ Phys. Lett. B765 (2017), pp. 193–220. DOI: 10.1016/j.physletb.2016.12.009. arXiv: ⁵⁹⁷ 1606.06198 [nucl-ex].
- Jaroslav Adam et al. "Enhanced production of multi-strange hadrons in high-multiplicity proton-proton collisions". In: *Nature Phys.* 13 (2017), pp. 535–539. DOI: 10.1038/nphys4111. arXiv: 1606.07424 [nucl-ex].
- 601 [11] Matteo Cacciari, Gavin P. Salam, and Gregory Soyez. "The Anti-k(t) jet clustering algorithm". In: *JHEP* 04 (2008), p. 063. DOI: 10.1088/1126-6708/2008/04/063. arXiv: 0802.1189 [hep-ph].
- Vardan Khachatryan et al. "Charged-particle nuclear modification factors in PbPb and pPb collisions at $\sqrt{s_{\mathrm{N}\,\mathrm{N}}}=5.02$ TeV". In: *JHEP* 04 (2017), p. 039. DOI: 10.1007/JHEP04(2017)039. arXiv: 1611.01664 [nucl-ex].
- Betty Abelev et al. "Centrality Dependence of Charged Particle Production at Large Transverse Momentum in Pb–Pb Collisions at $\sqrt{s_{\mathrm{NN}}}=2.76$ TeV". In: *Phys. Lett.* B720 (2013), pp. 52–62. DOI: 10.1016/j.physletb.2013.01.051. arXiv: 1208.2711 [hep-ex].
- 611 [14] Carlos A. Salgado and Urs Achim Wiedemann. "Calculating quenching weights". In: *Phys. Rev.* D68 (2003), p. 014008. DOI: 10.1103/PhysRevD.68.014008. arXiv: hep-ph/0302184 [hep-ph].
- [15] Yuri L. Dokshitzer and D. E. Kharzeev. "Heavy quark colorimetry of QCD matter". In: Phys. Lett. B519 (2001), pp. 199–206. DOI: 10.1016/S0370-2693(01)01130-3. arXiv: hep-ph/0106202 [hep-ph].

- 617 [16] Georges Aad et al. "Performance of b-Jet Identification in the ATLAS Experiment".
 618 In: JINST 11.04 (2016), P04008. DOI: 10.1088/1748-0221/11/04/P04008. arXiv: 1512.01094 [hep-ex].
- 620 [17] A. M. Sirunyan et al. "Identification of heavy-flavour jets with the CMS detector in pp collisions at 13 TeV". In: *JINST* 13.05 (2018), P05011. DOI: 10.1088/1748-0221/13/05/P05011. arXiv: 1712.07158 [physics.ins-det].
- [18] Serguei Chatrchyan et al. "Identification of b-quark jets with the CMS experiment". In: JINST 8 (2013), P04013. DOI: 10.1088/1748-0221/8/04/P04013. arXiv: 1211.4462 [hep-ex].
- [19] Linus Feldkamp. "Study of b-jet tagging performance in ALICE". In: *J. Phys. Conf. Ser.* 509 (2014), p. 012061. DOI: 10.1088/1742-6596/509/1/012061. arXiv: 1310.2817 [hep-ex].
- Rüdiger Haake. "Machine and deep learning techniques in heavy-ion collisions with ALI-CE". In: Proceedings, 2017 European Physical Society Conference on High Energy Physics (EPS-HEP 2017): Venice, Italy, July 5-12, 2017. Vol. EPS-HEP2017. 2017. DOI: 10.22323/1.314.0498. arXiv: 1709.08497 [physics.data-an]. URL: https://pos. sissa.it/314/498/pdf.
- 634 [21] Roel Aaij et al. "Identification of beauty and charm quark jets at LHCb". In: *JINST*635 10.06 (2015), P06013. DOI: 10.1088/1748-0221/10/06/P06013. arXiv: 1504.07670
 636 [hep-ex].
- [22] K. Aamodt et al. "The ALICE experiment at the CERN LHC". In: *JINST* 3 (2008), S08002. DOI: 10.1088/1748-0221/3/08/S08002.
- 639 [23] Betty Bezverkhny Abelev et al. "Performance of the ALICE Experiment at the CERN LHC". In: *Int. J. Mod. Phys.* A29 (2014), p. 1430044. DOI: 10.1142/S0217751X14300440. arXiv: 1402.4476 [nucl-ex].
- Wikimedia Commons. Schematics of the ALICE subdetectors. 2014. URL: https://commons.wikimedia.org/wiki/File:2012-Aug-02-ALICE_3D_v0_with_Text_643 (1)_2.jpg.
- Sotiris B Kotsiantis, I Zaharakis, and P Pintelas. "Supervised machine learning: A review of classification techniques". In: Emerging artificial intelligence applications in computer engineering 160 (2007), pp. 3–24.
- Marcin Wolter. "Metody analizy wielu zmiennych w fizyce wysokich energii". PhD thesis. IFJ PAN, 2012.
- ⁶⁵⁰ [27] Leo Breiman. "Bagging predictors". In: Machine learning 24.2 (1996), pp. 123–140.
- Yoav Freund and Robert E Schapire. "A decision-theoretic generalization of on-line learning and an application to boosting". In: *Journal of computer and system sciences* 55.1 (1997), pp. 119–139.
- Tianqi Chen and Carlos Guestrin. "XGBoost: A Scalable Tree Boosting System". In:

 Proceedings of the 22nd ACM SIGKDD International Conference on Knowledge Discovery
 and Data Mining. KDD '16. San Francisco, California, USA: ACM, 2016, pp. 785–794.

 ISBN: 978-1-4503-4232-2. DOI: 10.1145/2939672.2939785. URL: http://doi.acm.org/
 10.1145/2939672.2939785.
- [30] James Bergstra and Yoshua Bengio. "Random Search for Hyper-parameter Optimization". In: *J. Mach. Learn. Res.* 13 (Feb. 2012), pp. 281–305. ISSN: 1532-4435. URL: http://dl.acm.org/citation.cfm?id=2188385.2188395.

- Sandhya Samarasinghe. Neural networks for applied sciences and engineering: from fundamentals to complex pattern recognition. Auerbach publications, 2016.
- [32] Ian Goodfellow, Yoshua Bengio, and Aaron Courville. *Deep Learning*. http://www.deeplearningbook.org. MIT Press, 2016.
- [33] Kurt Hornik. "Approximation capabilities of multilayer feedforward networks". In: Neural Networks 4.2 (1991), pp. 251 -257. ISSN: 0893-6080. DOI: https://doi.org/10.1016/0893-6080(91)90009-T. URL: http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/089360809190009T.
- Alex Krizhevsky, Ilya Sutskever, and Geoffrey E Hinton. "Imagenet classification with deep convolutional neural networks". In: *Advances in neural information processing systems*. 2012, pp. 1097–1105.
- Petar Veličković. Deep learning for complete beginners: convolutional neural networks with keras. 2017. URL: https://cambridgespark.com/content/tutorials/convolutional-neural-networks-with-keras/index.html (visited on 07/15/2018).
- 676 [36] Andrew Ng. Convolutional Neural Networks. 2017. URL: https://www.coursera.org/677 learn/convolutional-neural-networks (visited on 07/15/2018).
- 678 [37] MathWorks. Convolutional Neural Network. URL: https://www.mathworks.com/solutions/ 679 deep-learning/convolutional-neural-network.html (visited on 07/15/2018).
- Kendrick Tan. Capsule Networks Explained. 2017. URL: https://kndrck.co/posts/capsule_networks_explained/ (visited on 07/15/2018).
- [39] François Chollet et al. Keras. https://keras.io. 2015.
- Martín Abadi et al. TensorFlow: Large-Scale Machine Learning on Heterogeneous Systems. Software available from tensorflow.org. 2015. URL: https://www.tensorflow.org/.
- Timothy Dozat. Incorporating Nesterov Momentum into Adam. 2015. URL: {http://cse cs229.stanford.edu/proj2015/054_report.pdf}.
- 687 [42] Diederik P. Kingma and Jimmy Ba. "Adam: A Method for Stochastic Optimization". In:
 688 CoRR abs/1412.6980 (2014). arXiv: 1412.6980. URL: http://arxiv.org/abs/1412.
 689 6980.
- 690 [43] Nitish Srivastava et al. "Dropout: A Simple Way to Prevent Neural Networks from Over-691 fitting". In: *J. Mach. Learn. Res.* 15.1 (Jan. 2014), pp. 1929–1958. ISSN: 1532-4435. URL: 692 http://dl.acm.org/citation.cfm?id=2627435.2670313.
- [44] Torbjorn Sjostrand, Stephen Mrenna, and Peter Z. Skands. "A Brief Introduction to PYTHIA 8.1". In: *Comput. Phys. Commun.* 178 (2008), pp. 852–867. DOI: 10.1016/j. cpc.2008.01.036. arXiv: 0710.3820 [hep-ph].
- [45] Peter Skands, Stefano Carrazza, and Juan Rojo. "Tuning PYTHIA 8.1: the Monash 2013
 Tune". In: Eur. Phys. J. C74.8 (2014), p. 3024. DOI: 10.1140/epjc/s10052-014-3024-y.
 arXiv: 1404.5630 [hep-ph].
- 699 [46] René Brun et al. "GEANT Detector Description and Simulation Tool". In: (1994). DOI: 10.17181/CERN.MUHF.DMJ1.
- Matteo Cacciari, Gavin P. Salam, and Gregory Soyez. "FastJet User Manual". In: Eur.
 Phys. J. C72 (2012), p. 1896. DOI: 10.1140/epjc/s10052-012-1896-2. arXiv: 1111.
 6097 [hep-ph].
- D0 Collaboration. Observation of Single Top Quark Production. 2009. URL: https://www-d0.fnal.gov/Run2Physics/top/singletop_observation/singletop_observation_updated.html (visited on 07/15/2018).

Andrew P Bradley. "The use of the area under the ROC curve in the evaluation of machine learning algorithms". In: $Pattern\ recognition\ 30.7\ (1997),\ pp.\ 1145-1159.$