

## Neurale netværk til determinering af eksistens af elementærpartikler.

I projektet undersøges de forudsigende evner af et selvskabt neuralt netværk til bestemmelsen af eksistens af Higgs bosonen med udgangspunkt i datasættet fra CERN-konkurrencen i 2014. Det diskuteres desuden, hvordan netværket kan generaliseres til andre elementærpartikler ved brug af transfer learning samt hvordan metoden sammenligner med andre. Netværket findes at kunne klassificere eksistensen af Higgs-partiklen med 99.94% sandsynlighed efter 5 positive prædiktioner.

Standardmodellen er en af de vigtigste modeller i partikelfysik og forudsiger interaktionerne mellem elementærpartikler samt deres eksistens. For validering af modellen, opsøges empiri for de teoretiske forudsigelser. Dette bliver gjort ved kollision af partikler ved høj hastighed i en partikel accelerator. Ved målingen af kollisionerne vil der optræde en mængde baggrundsstøj, i form af henfald til andre partikler end den søgte. Disse målinger skal frasorteres. Frasorteringen kan foregå på flere måder. En metode er at lade eksperter definere en algoritme, der kan segmentere støj fra signalet. Denne metode er ikke ideel, da det er tidskrævende at finde en brugbar algoritme, og algoritmen vil ofte opnå komparativt dårlige resultater for problemer med mange svagt korrelerede variabler.

En anden metode er at benytte machine learning til at finde en algoritme, der kan separere støjen fra signalet. Ved konkurrencen afholdt af CERN, fandtes den løsning der bedst kunne separere støjen at være en random forest ensemble model. Denne metode løser problemerne af de tidligere nævnte metoder, men kræver, at en ny model udvikles og trænes, hvis en anden partikel skal findes, idet den ikke kan benytte heuristikkerne fra den eksisterende model. En måde at opnå genbrugelighed er ved brug af dybe neurale netværk med "transfer learning" teknikken.

Dette projekt undersøger brugen af neurale netværk til klassificering af elementærpartikler, og diskuterer transfer learnings brugbarhed til at generalisering af modellen til flere partikler. Projektet afgrænses, grundet data tilgængelighed, til klassifikationen af Higgs bosonens eksistens. Dette leder til følgende problemformulering:

*Hvorledes kan brugen af neurale netværk styrke og effektivisere klassifikation af Higgs partiklens eksistens?*

Neurale netværk kan beskrives ved en række neuroner med vægte placeret i flere lag. Vægtene kan beskrives på matriceform, hvor neuronerne i lag  $k$  er tilkoblet alle neuroner i lag  $k - 1$ , med vægte beskrevet af matricen  $\theta^{(k)}$ . Ved inferens gennemføres følgende indtil det sidste lag som er hypotesen.

$$z^{(k)} = \theta^{(k)} a^{(k-1)}, \quad a^{(k)} = g(z^{(k)}), \quad a_0^{(k)} := 1 \text{ [indsæt bias]}$$

Hvor  $z$  er en vilkårlig element-baseret ikke-lineær funktion, her brugt ReLU og sigmoid funktionerne. Og hvor  $a^{(0)}$  er inputdatamatricen. Målet med netværket er at finde  $\theta^{(k)}$  værdier, således netværkets hypotese,  $a^{(L)}(x)$ , hvor  $L$  er antallet af lag i netværket, tilnærmer sig den sande distribution. Til opdatering af vægtene kan en gradientnedstigningsprocedure bruges. I den simpleste form kan denne beskrives ved følgende, dog er der i projektet blevet brugt en mere avanceret model:

$$\theta_{ij} := \theta_{ij} + \alpha \cdot \frac{\partial E}{\partial \theta_{ij}}$$

Hvor  $E$  er en elementbaseret fejlfunktion, her brugt binær krydsentropi. Generelt om  $E$  gælder:

$$E = \frac{1}{m} \sum_{x \in X} E(x)$$

Hvor  $m$  er antallet af eksempler i  $X$ ; et rangordnet sæt af eksempler. Til at finde hver vægts,  $\theta_{ij}$ , influens på fejlfunktionen,  $E$ , findes,  $\delta^{(k)}$ , via kædereglen:

$$\delta^{(k)} = \begin{cases} \nabla_a^{(L)} \odot g'(z^{(L)}) & \text{hvis } k = L \\ (\theta^{(k+1)})^T \delta^{(k+1)} \odot g'(z^{(k)}) & \text{Ellers} \end{cases}$$

Herved kan  $\frac{\partial E}{\partial \theta_{ij}}$  findes ved følgende, hvorefter gradientnedstigningsproceduren kan foregå:

$$\frac{\partial E}{\partial \theta_{ij}^{(k)}} = a_j^{(k-1)} \delta_i^{(k)}$$

Ved "transfer learning" ignoreres de sidste lag af basisnetværket, og et nyt netværk opstilles, hvorved input til dette er hypotesen af basisnetværket. Dette gøres under antagelsen, at de tidligere lag modellerer en fælles distribution, her en fælles støjprofil, som ikke skal genlæres. Teknikken sparer tid og data. At "transfer learning" er brugbart i projektet, kan sandsynliggøres ved at proton-proton kollisionerne henfalder til mange ting, som udgør støj. Denne støj er tilnærmelsesvist ens mellem flere eksotiske partikler, hvorfor der ikke er brug for at genlære denne støj. Brugbarheden af "transfer learning" bliver yderligere styrket ved den lave varians, som set ved den lave difference mellem trænings- og test-fejlmængden ( $\Delta = -0.01$ ), af det dybe netværk før regulering, hvad vidner om en god generaliseringsevne. Dog er det ikke muligt endegyldigt at verificere teknikens validitet for dette problem, da et tilsvarende datasæt ikke er tilgængeligt.

I projektet er, efter databehandlingen, et baseline neuralt netværk med udgangspunkt i datasættet fra 2014 konkurrencen opstillet. Med udgangspunkt i et relativt simpelt netværk med 1 skjult lag af 32 neuroner, med ReLU aktiveringen, og et output lag med 1 neuron med sigmoid aktiveringen idet der er tale om en binær klassifikation. Baseline modellen er herefter videreudviklet.

En måde at vurdere modellens duelighed på er at analysere, hvor god modellen er til at finde evidens for Higgs bosonen eksistens. Generelt ses det, at 83% af netværkets hypoteser er korrekte, men dette kan være forskudt af hyppigheden af forekomster i datasættet, hvor positive hændelser kun udgør ca. 30%. Det ses dog ved  $F_1 = 0.774$ , at netværket ikke udelukkende gætter på negative hændelser. Herudover ses, at præcisionen er større end genkaldelsen, hvad er at foretrække til klassifikation af eksistens. Hvis det antages, at fejlmarginerne fra valideringssættet er repræsentativt for de eksperimentelle data, kan andelen af falske positive bruges til at bestemme sandsynligheden for Higgs bosonen eksistens findes på baggrund af modellens fremsigelser ved:

$$p(\text{Higgs} | h(x) = 1) = 1 - (p(\text{FP} | h(x) = 1))^n$$

Hvor  $p(\text{Higgs})$  er sandsynligheden for, at Higgs bosonen eksisterer.  $h(x) = 1$  betyder, at netværket tror, baseret på dets inputdata, at der er tale om en Higgs partikel, så  $p(\text{Higgs} | h(x) = 1)$  er sandsynligheden for, at Higgs partiklen eksisterer, givet at netværket siger, at den eksisterer.  $p(\text{FP} | h(x) = 1)$  er sandsynligheden for, at netværket tager fejl, når den gætter positivt, og  $n$  er hvor mange gange netværket har gættet positivt. Det ses, at netværket gætter en falsk positiv 22.85% af alle positive prædiktions. Da det antages, at evalueringssættet er repræsentativt, fremgår det at sandsynligheden for, at Higgs bosonen eksisterer, når netværket har gættet på det 5 gange:

$$p(\text{Higgs} | h(x) = 1 | n = 5) = 1 - (0.2285)^5 = 0.9994 = 99.94\%$$

Endeligt er baseline modellen vurderet bedre end en baseline random forest model med  $p = 0$ . I projektet er et neuralt netværk undersøgt til klassificering af Higgs partiklen, hvor det fandtes, at et relativt simpelt netværk kan med 99.94% sandsynlighed konfirmere eksistensen efter 5 positive prædiktions. Herudover er muligheden for at genbruge støj-profilen ved "transfer learning" diskuteret.