

# Prilagodba rezolucijske funkcije n\_TOF postrojenja primjenom strojnog učenja

Šimun Šopar

Mentor: doc. dr. sc. Petar Žugec

22. siječnja 2023.

## Sažetak

CERN-ovo n\_TOF postrojenje koristi se za proizvodnju neutrona i mjerenje udarnih presjeka neutronske reakcije metodom mjerenja vremena preleta neutrona. Eksperimentalni podatci pokazuju znatno šire rezonance u udarnom presjeku od očekivanog kao posljedicu stohastičkih procesa u nastanku neutronske snopne i mjerenju vremena preleta neutrona. Ovi procesi opisani su rezolucijskom funkcijom. Poznavanje rezolucijske funkcije ključno je za točnu analizu udarnih presjeka. U ovom radu pokušano je na temelju simuliranih podataka metodama strojnog učenja pronaći glatki oblik rezolucijske funkcije.

## 1 Opis postava

Poznavanje udarnih presjeka neutronske reakcije važan je alat u analizi tih reakcija. Iz rezonanci u udarnom presjeku mogu se iščitati nuklearna energetska stanja. Usto, udarni presjeci pomažu u opisu nuklearnih procesa u zvijezdama. Problem mjerenja udarnih presjeka jest što neutron nije nabijena čestica pa je teško detektirati njegovu energiju, što je ključno za izračun udarnog presjeka. Osnovna ideja CERN-ovog n\_TOF postrojenja je izmjeriti energije neutrona preko vremena  $t$  koje je neutronu potrebno da prođe neku fiksnu udaljenost  $L$ . Ovo vrijeme nazivamo vrijeme preleta. Energiju neutrona tada možemo dobiti kao:

$$E_{TOF} = mc^2 \left\{ \left[ 1 - \left( \frac{L}{ct} \right)^2 \right]^{-1/2} - 1 \right\}$$

Ovdje su  $m$  masa neutrona i  $c$  brzina svjetlosti.

Način na koji se vrijeme preleta mjeri u n\_TOF postrojenju je sljedeći: pucanjem protona na olovo nastaju spalacijski neutroni, oni zatim putuju do mete gdje prouzrokuju reakciju čije produkte mjerimo. Vrijeme koje je proteklo između dolaska protona na olovo i bilježenja produkta neutronske reakcije vrijeme je preleta koje tražimo.

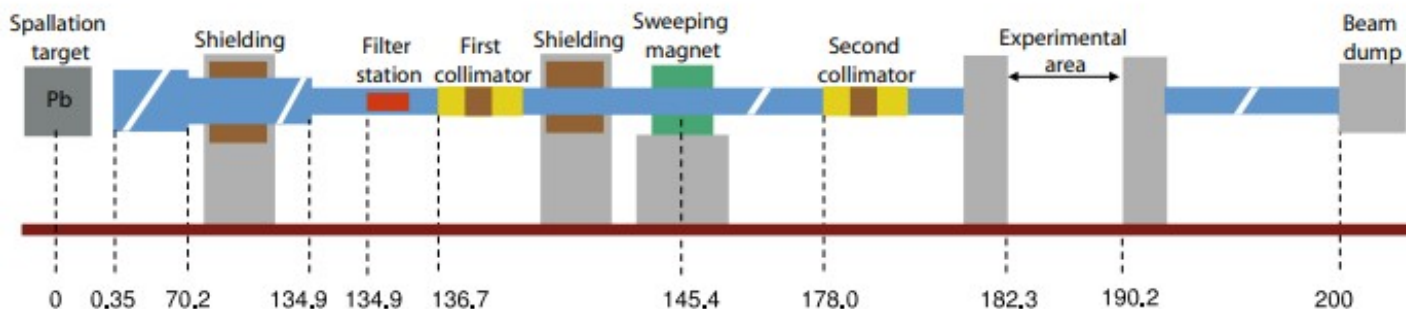
Postrojenje, prikazano na Slici 1, sastoji se od tri dijela: izvor na kojem se proizvode spalacijski neutroni, cijev kroz koju se neutroni propagiraju do mete i na kraju meta na koju pucamo neutronske snop. Protonski snop ispaljuje se svakih 1.2 sekunde i sastoji se od  $7 \cdot 10^{12}$  protona energije 20 GeV/c. On pada na cilindrični komad olova duljine 40 cm i promjera 60 cm u kojem u reakcijama jake nuklearne sile nastaju neutroni. Ispred olova nalazi se detektor koji opaža dolazak protonskog snopa i započinje mjerenje vremena. Oko olova nalazi se 1 cm deo sloj vode za hlađenje. Oko toga se nalazi 4 cm deo sloj vode obogaćene borom koji služi za usporavanje neutrona.

Neutroni izlaze iz olova usporavajući kroz slojeve vode, čime nastaje raspon neutronske energije od meV-a do GeV-a. Neutroni zatim izlaze na jedan od dva izlaza. Svaki od izlaza vodi do jedne od detektorskih prostorija, nazvanih EAR1 i EAR2 (od engl. **E**xperimental **A**rea). Put od olova do EAR1 iznosi 185 m, dok put do EAR2 iznosi 20 m. Neutroni putuju kao slobodne čestice do mete.

Na tom putu nalazi se magnet koji otklanja nabijene čestice iz snopa te dva kolimatora koji služe za dodatno sužavanje snopa.

Konačno, neutroni dolaze do mete gdje uzrokuju neku reakciju. Oko mete postavljeni su razni detektori na raznim kutevima koji mjere produkte reakcije. Kada je produkt reakcije zabilježen, mjerenje vremena se zaustavlja, proteklo vrijeme od dolaska protonskog snopa do detekcije produkta vrijeme je preleta.

Prednost n\_TOF postrojenja je velik tok neutrona - po jednom protonskom pulsu  $10^6$  neutrona doći će do mete - i široki raspon neutronske energije.



Slika 1. Shematski prikaz n\_TOF postrojenja  
Slika preuzeta iz [1]

## 2 Rezolucijska funkcija

Prilikom mjerenja udarnih presjeka određenih neutronske reakcije pomoću n\_TOF metode primjećeno je da su rezonance puno šire i pomaknute u energiji u odnosu na teorijska predviđanja. Razlog tome je što vrijeme preleta nije precizna mjera energije. Cijela pretpostavka metode je da se spalacijska reakcija događa instantno, da proton pada na olovo, trenutno nastaje neutron i odmah izlazi iz izvora s nekom energijom. Znamo vrijeme dolaska protona na metu, znamo vrijeme kada su detektirani produkti reakcije, razlika tih vremena je vrijeme preleta. No u stvarnosti se događaju još neki procesi koji utječu na nepoklapanje energije mjerene vremenom preleta i stvarne energije.

Protoni koji dolaze na olovo ne dolaze svi u istom trenu, već su raspodjeljeni po Gaussovoj raspodjeli s vremenskom varijancom od  $\sigma = 7$  ns, što znači da ne znamo točno vrijeme dolaska pojedinih protona na olovo, vrijeme koje mjerimo je prosječno vrijeme dolaska snopa. Zatim neutronu koji nastaje u olovu treba određeno vrijeme da proputuje kroz olovo prije nego izleti s nekom energijom  $E_n$ . To vrijeme ovisi o stohastičkim procesima raspršenja neutrona na jezgrama olova. Posljedica ovih efekata je da postoji raspodjela mogućih vremena preleta  $t$  za danu stvarnu energiju slobodnog neutrona u snopu  $E_n$ . Ta raspodjela naziva se rezolucijskom funkcijom  $R(E_n, t)$ . Ona je funkcija energije i vremena preleta i govori koja je vjerojatnost da neutron neke stvarne energije  $E_n$  ima zabilježeno vrijeme preleta  $t$ . U praksi se zbog jednostavnosti umjesto vremena preleta koristi ekvivalentna duljina:

$$\lambda = v_n \cdot t - L.$$

Ovdje je  $v_n$  stvarna brzina neutrona pri dolasku na metu, a  $L$  duljina puta preleta neutrona. U radu su korišteni podatci za EAR1 detektorsku prostoriju pa duljina puta iznosi  $L = 185$  m. Ekvivalentna duljina je matematičko pomagalo, no može se fizikalno shvatiti kao neka mjera duljine geometrijskog puta neutrona u olovu.

Poznavanje rezolucijske funkcije bitno je jer pomoću nje iz mjerenih udarnih spektara možemo dobiti stvarne udarne spektre sa točnim rezonancama. Rezolucijska funkcija ne može se direktno mjeriti, njezine vrijednosti generirane su pomoću Monte Carlo simulacije. Simulacije su se pokazale korisnima u određivanju svojstava neutronske snopa, kao što su tok neutrona, izgled snopa i

rezolucijska funkcija. Simulacija koja je korištena za generiranje podataka koje sam obradio zove se GEANT4 i pobliže je opisana u radovima [2] i [3].

### 3 Neuralne mreže

Cilj ovog rada je pronaći glatki opis rezolucijske funkcije. U radu [4] pokušano je direktnim metodama invertirati diskretnu rezolucijsku funkciju i iz mjerenih rezonanci dobiti rezonance kakve očekujemo. Pokazuje se da je ovakva metoda numerički nestabilna i vrlo podložna šumu u podacima. Prirodno se javlja potreba za glatkim oblikom rezolucijske funkcije koji bi umanjio efekte šuma. Želimo prilagoditi glatku funkciju na diskretan skup podataka, i to ćemo učiniti metodama strojnog učenja.

Strojno učenje naziv je za granu matematike i računalne znanosti koja se bavi prilagodbom matematičkog modela na zadani skup opaženih, znanih podataka te zaključivanjem o dosad neviđenim podacima, bilo interpolacijom, bilo ekstrapolacijom. Primjena strojnog učenja je široka, nas konkretno zanima korištenje strojnog učenja za prilagodbu funkcija.

Model koji je korišten zove se neuralna mreža. Prednost neuralnih mreže nad standardnim metodama regresijske prilagodbe funkcije je da ne moramo unaprijed zadati oblik funkcije koju prilagođavamo, već će mreža sama naučiti pogodan oblik. Glavni nedostatak je da nisu interpretabilne pa se ne preporuča korištenje neuralnih mreža kod postavljanja fizikalnih modela. No, za naše potrebe ne tražimo interpretabilnost, nego želimo koristiti neuralne mreže za prilagodbu funkcije. Proces prilagodbe funkcije neuralnim mrežama naziva se učenjem mreže.

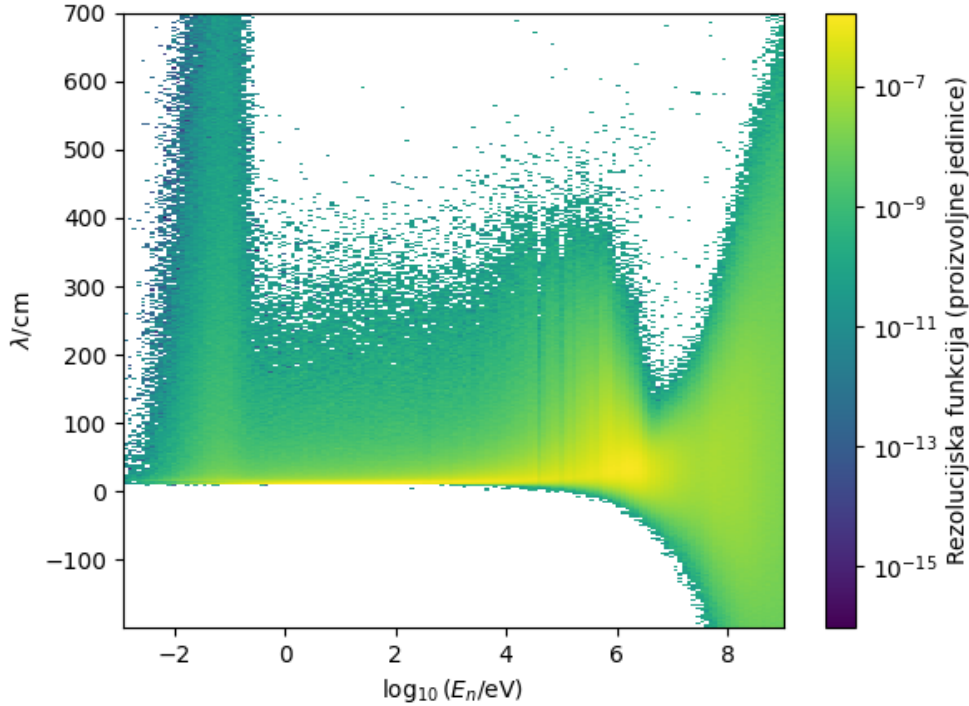
Mreža se sastoji od međusobno povezanih čvorova, zvanih neuroni, organiziranih u slojeve. Vrijednost neurona u sloju određena je vrijednostima neurona prethodnih slojeva. Na taj se način ulazne vrijednosti podataka propagiraju kroz mrežu i daju izlaznu vrijednost. Svaka mreža sadrži ulazni sloj, opcionalni broj skrivenih slojeva i izlazni sloj.

Oblik naših podataka takav je da će mreža imati dva neurona u ulaznom sloju, to su dvije ulazne varijable, energija neutrona i ekvivalentna duljina, i jedan neuron u izlaznom sloju koji odgovara vrijednosti rezolucijske funkcije. Broj skrivenih slojeva i broj neurona u tim slojevima sami određujemo. Skriveni slojevi određuju kompleksnost neuralne mreže. Mreža s premalim brojem skrivenih neurona neće biti u stanju u potpunosti opisati složenost rezolucijske funkcije, slično kao što pravac ne bi mogao dobro opisati krivulju trećeg reda. Ova pojava naziva se podučenosť (engl. *underfit*). S druge strane, mreža s previše skrivenih neurona previše će se prilagoditi šumu u podacima. Ovo se naziva prenaučenosť (engl. *overfit*). Traženje optimalne neuralne mreže sastoji se od traženja strukture skrivenih slojeva koja će dobro opisati dane podatke.

Za implementaciju i treniranje neuralnih mreža korišten je Pythonov paket TensorFlow 2.

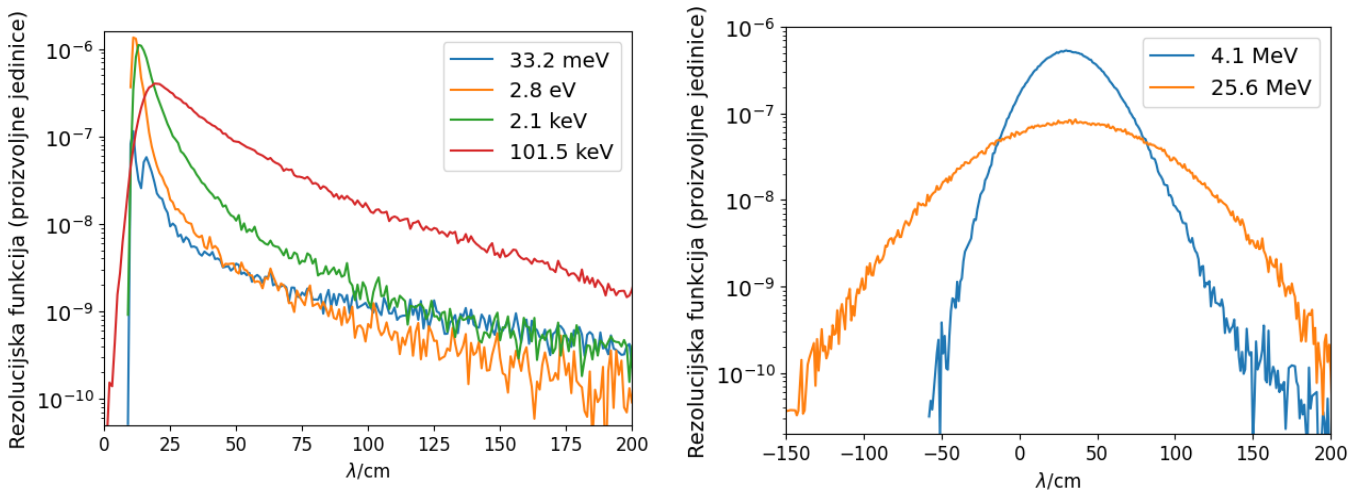
### 4 Rezultati

Rezolucijska funkcija u ovisnosti o energiji neutrona i ekvivalentnoj duljini prikazana je na Slici 2. Ona pokriva širok spektar energija, od meV-a do GeV-a. Ponašanje funkcije drugačije je na različitim energetskim skalama. Za izgled rezolucijske funkcije na malim energijama pretežno je zaslužno raspršenje neutrona u olovu, funkcija je izrazito ne-gaussijanska. Na energijama iznad 10 MeV funkcija poprima oblik Gaussove raspodjele. Njezin oblik na visokim energijama pretežno je određen Gaussovom distribucijom protonskog snopa.



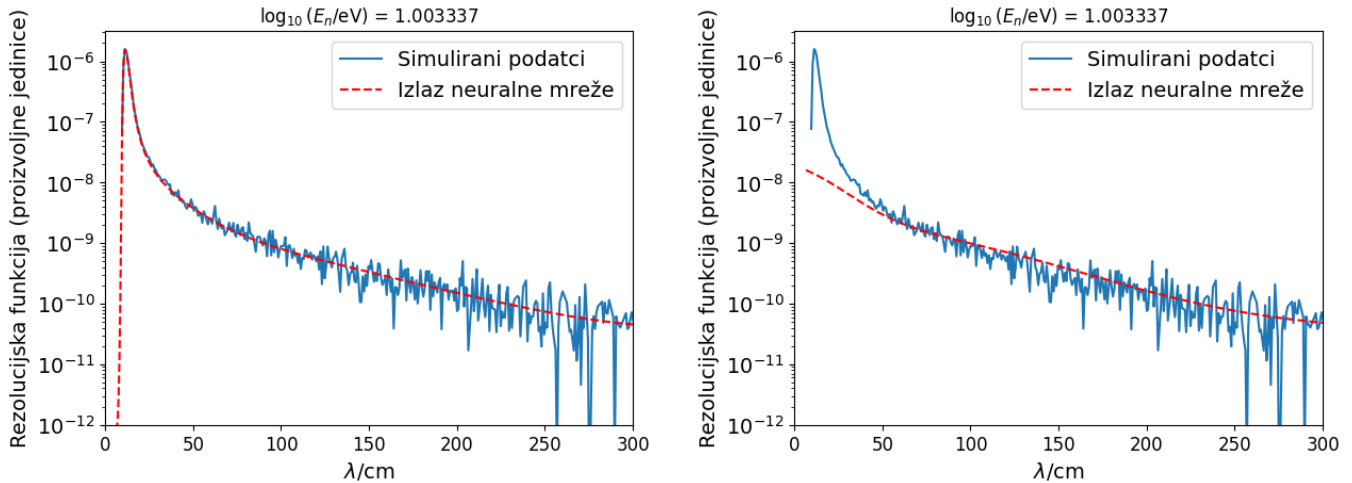
Slika 2. Rezolucijska funkcija u ovisnosti o ekvivalentnoj duljini i energiji neutrona

Slika 3. prikazuje ponašanje rezolucijske funkcije na različitim energetska skalama. Za energije u meV području vidljiva su dva vrha. Prelaskom u eV područje ta dva vrha stapaju se u jedan. S dodatnim povećanjem energije vrh rezolucijske funkcije pomiče se u desno. Funkcija ima nagli porast prema maksimumu distribucije te zatim sporiji pad. Kako se energija povećava, početni porast postaje manje strm i funkcija postaje simetričnija. Za energije iznad 1 MeV funkcija sve više nalikuje na Gaussovu raspodjelu, koja u logaritamskoj skali izgleda kao parabola. S dodatnim porastom energije prema GeV skali funkcija postaje sve šira.



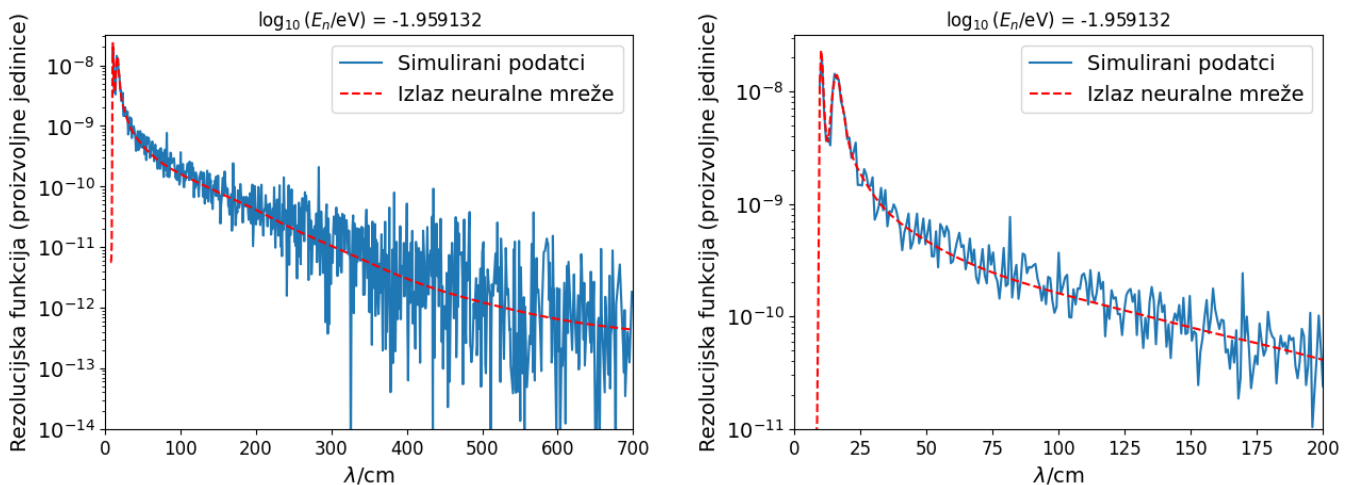
Slika 3. Izgled rezolucijske funkcije na različitim skalama energije neutrona  
Lijevi graf prikazuje funkciju za energije neutrona ispod 1 MeV, desni graf za energije iznad 1 MeV.

Iz diskretnih podataka simulacije naučena je neuralna mreža. Neuralna mreža naučena je na logaritme vrijednosti rezolucijske funkcije. Provjera točnosti mreže vršena je grafičkim putem, za svaku energiju neutrona iscertana je ovisnost rezolucijske funkcije o ekvivalentnoj duljini i provjereno prati li prilagođena funkcija generalni trend podataka i prilagođava li se pretjerano na šum. Slika 4. prikazuje jednu dobro i jednu loše prilagođenu neuralnu mrežu. Neuralna mreža desnog grafa loše opisuje funkciju zbog premalog broja skrivenih neurona koji ne mogu adekvatno opisati složenost funkcije, što dovodi do podnaučenosti, dok neuralna mreža lijevog grafa dobro opisuje ponašanje funkcije i adekvatno izgladuje šum.



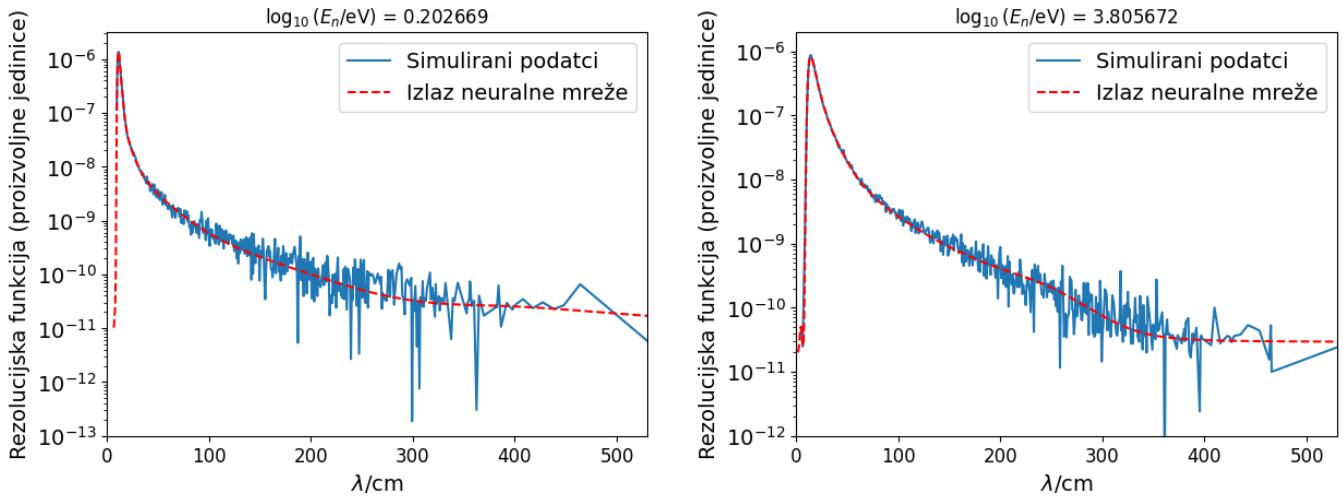
Slika 4. Primjer dobro (lijevo) i loše (desno) prilagođene neuralne mreže

Proces nalaženje pogodne glatke funkcije sastoji se od isprobavanja raznih neuralnih mreža dok se ne pronade zadovoljavajuća mreža. Mreža korištena u ostatku rada koja dobro opisuje rezolucijsku funkciju sastoji se od dva skrivena sloja, svaki sa po 100 neurona. Mreža s manje neurona po sloju neće biti u stanju opisati dva vrha vidljiva na niskim energijama, dok mreža s više neurona nedovoljno zaglađuje šum. Slika 5. prikazuje usporedbu diskretnih podataka rezolucijske funkcije i izlaza mreže na energiji neutrona u meV području. Mreža uspješno opisuje dva vrha funkcije.



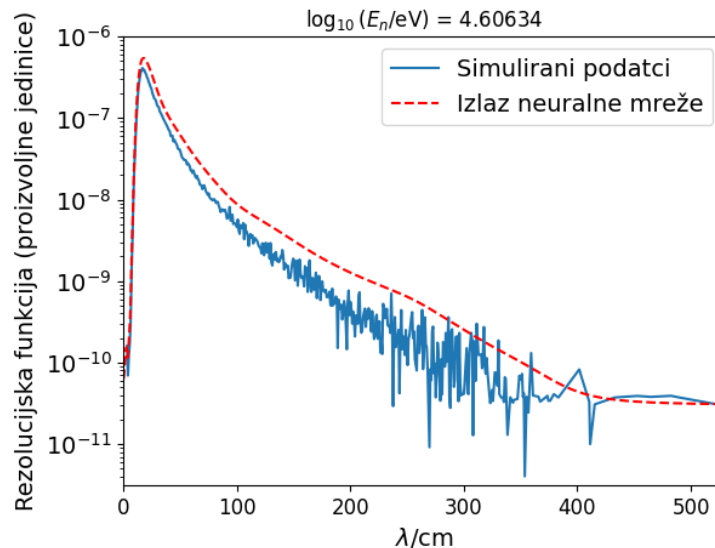
Slika 5. Usporedba rezolucijske funkcije i prilagođene neuralne mreže na energiji 11 meV  
Desna slika pobliže prikazuje područje ekvivalentne duljine između 0 i 200 cm.

Slika 6. prikazuje neuralnu mrežu za energije na skalama od nekoliko eV do nekoliko keV. Ponovo mreža dobro opisuje ponašanje podataka. Za desni graf u keV području vidljiv je nekakav brežuljak u funkciji oko  $\lambda = 250$  cm., što bi mogao biti potpis šuma. No, ovo odstupanje je maleno i vjerojatno ne bi znatno utjecalo na račun rezonanci.



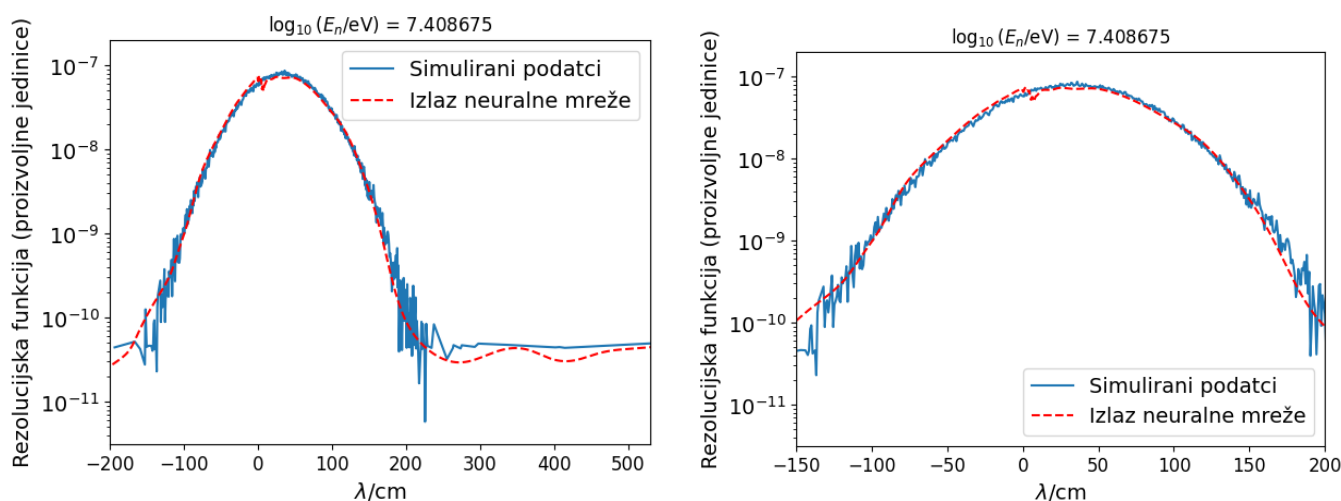
Slika 6. Usporedba rezolucijske funkcije i prilagođene neuralne mreže na energijama od 1.6 eV (lijeva slika) i 6.4 keV (desna slika)

Problemi s neuralnom mrežom krenu se stvarati oko energija od 10 keV. Izlaz neuralne mreže ne prati više toliko dobro stvarne vrijednosti, kao što je vidljivo na Slici 7. Javlja se problem na prijelazu iz ne-gaussovskog u gaussovski režim koji će biti vidljiv i na energijama iznad 1 MeV. Neuralna mreža na ovim energijama ne opisuje zadovoljavajuće dane podatke.



Slika 7. Usporedba rezolucijske funkcije i prilagođene neuralne mreže na energiji 40.4 keV

Usporedba ponašanja neuralne mreže i podataka za energije iznad 1 MeV prikazana je na Slici 8. Problem je da se mreža previše prilagođava šumu, što je vidljivo u području oko ekvivalentne duljine  $\lambda = 10$  cm.



Slika 8. Usporedba rezolucijske funkcije i prilagođene neuralne mreže na energiji 25.6 MeV  
Desna slika pobliže prikazuje područje ekvivalentne duljine između -150 i 200 cm.

Mreža na ovim energijama više ne pruža dovoljno dobar opis rezolucijske funkcije. Povećanje broja skrivenih neurona samo bi pogoršalo stvar jer bi se mreža još više prilagodila šumu, dok smanjenje broja neurona isto ne dolazi u obzir jer tako gubimo ispravan opis na nižim energijama. Dakle, nađena mreža radi dobro za energije ispod 10 keV, dok za više energije daje netočne vrijednosti. No, to nas ne bi trebalo previše zabrinjavati. Znamo da je oblik funkcije na višim energijama Gaussova raspodjela pa za više energije možemo napraviti zasebnu prilagodbu gausijana regresijom. Na taj način dobivamo dvije funkcije, neuralnu mrežu koja upisuje niže energije i gausijan koji opisuje više. Sve što preostaje je glatko spajanje te dvije funkcije i dobiva se kompletan opis rezolucijske funkcije.

Ovim vizualnim putem moguće je ustvrditi prati li dobro prilagođena funkcija stvarne podatke. No, ne možemo znati hoće li ova funkcija biti u mogućnosti reproducirati stvarne rezonance u udarnim presjecima. To možemo znati samo tako da funkciju isprobamo na nekim znanim rezonancama. Ako uspijemo iz pretpostavljenih rezonanci pomoću rezolucijske funkcije reproducirati eksperimentalno mjerene udarne spektra, opis rezolucijske funkcije je zadovoljavajuć. Ako ne uspijemo, potrebna su dodatna poboljšanja opisa funkcije, bilo u okviru metode s neuralnim mrežama, bilo u okviru nekog potpuno drugog postupka.

## 5 Zaključak

U sklopu rada pokazano je kako je neuralnim mrežama moguće pronaći glatki opis rezolucijske funkcije. Pritom je opaženo da ova metoda dobro funkcionira za energije ispod 10 keV, dok za više energije pokazuje odstupanje od stvarnih vrijednosti funkcije kao posljedica šuma. Jedno od mogućih rješenja je koristiti neuralnu mrežu za niske energije, a Gaussovu funkciju za više, no hoće li to djelovati ne možemo znati prije nego probamo na stvarnim rezonancama. Logičan sljedeći korak u analizi bio bi naći gausijan za više energije, spojiti ga s neuralnom mrežom na energijama prijelaza oko 10 keV te isprobati na nekoj rezonanci.

Iako nismo uspjeli pronaći dobar opis rezolucijske funkcije na cijelom energetsom rasponu, neuralna mreža dobro opisuje funkciju na rasponu od nekoliko meV do gotovo desetak keV, što je dobar pomak prema potpunom opisu funkcije i konačnom izračunu udarnih spektara.

## 6 Literatura

- [1] - C. Guerrero, et al., *Performance of the neutron time-of-flight facility n\_TOF at CERN*, Eur. Phys. J. A **49**, 27 (2013)
- [2] - S. Lo Meo, et al., *GEANT4 simulations of the n\_TOF spallation source and their benchmarking*, Eur. Phys. J. A **51**, 160 (2015)
- [3] - J. Leredegui-Marco, et al., *Geant4 simulation of the n\_TOF-EAR2 neutron beam: Characteristics and prospects*, Eur. Phys. J. A **52**, 100 (2016)
- [4] - P. Žugec, et al., *A direct method for unfolding the resolution function from measurements of neutron induced reactions*, Nuclear Inst. and Methods in Physics Research A, **875**, 41 - 50 (2017)
- [5] - V. Vlachoudis, et al., *On the resolution function of the n\_TOF facility: a comprehensive study and user guide*, CERN n\_TOF-PUB-2021-001, 16. travnja 2021.
- [6] - Michael Nielsen, *Neural Networks and Deep Learning*