

# Desarrollo de una red neuronal para rechazar eventos de fondo en el detector de materia oscura DEAP-3600

## Development of a neural network to reject background events in the dark matter detector DEAP-3600

Íñaki Rodríguez García\*  
*Universidad Complutense de Madrid*

Directores: Miguel Cárdenas-Montes\*\* y Roberto Santorelli\*\*\*  
*CIEMAT (Centro de Investigaciones Energéticas, Medioambientales y Tecnológicas)*  
(Dated: 9 de septiembre de 2019)

Los detectores de búsqueda directa de materia oscura requieren poder rechazar, tanto como sea posible, las distintas contribuciones de fondo. En el experimento DEAP-3600 una de las contribuciones más relevantes al fondo son las partículas  $\alpha$  producidas en el cuello del detector fuera del volumen fiducial. Este tipo de eventos producen una señal lumínica en el rango del ultravioleta muy similar a la esperada para los retrocesos nucleares entre WIMPs y núcleos de Argón. Actualmente, para reducir esta contribución se utiliza una selección de eventos muy restrictiva, que consigue rechazar el 97.4% de los eventos del cuello. Sin embargo, la aceptación conseguida es muy baja, solamente el 18.5% de los retrocesos nucleares son seleccionados. En este trabajo se propone una mejora en la aceptación a través de la implementación de una red neuronal. Entrenada sobre eventos de Monte Carlo de retrocesos nucleares y eventos del cuello, la red consigue duplicar la aceptación para todas las arquitecturas probadas. Como resultado del trabajo se ha alcanzado una aceptación del 45% para un nivel de rechazo del 99.9%.

### CONTENIDO

I. Introducción	1
II. Búsqueda directa de materia oscura	2
A. Interacción WIMP – Argón	2
B. Aspectos experimentales	3
III. Experimento DEAP-3600	3
A. Descripción del detector	3
B. Fondo de partículas $\alpha$ del cuello	4
IV. Redes Neuronales	6
A. Fundamentos	6
B. Métricas	6
C. Diseño de la red neuronal	7
V. Resultados y análisis	8
A. Aplicación sobre datos de Argón-39	9
VI. Conclusiones y trabajo futuro	10
Agradecimientos	10
Referencias	10

### I. INTRODUCCIÓN

La materia oscura fue introducida por primera vez por el astrónomo suizo Zwicky a partir de sus estudios sobre el cúmulo de Coma [1, 2]. Aplicando el teorema del virial, encontró que la mayor componente de masa del sistema debía venir dada por una “materia oscura” que no se podía observar porque, no interactuaba con la radiación electromagnética. Esta materia oscura sería 400 veces superior a la visible.

Hoy en día, la materia oscura es una parte fundamental del Modelo Cosmológico Estándar ( $\Lambda$ CDM). Una de las evidencias fundamentales son las huellas en las anisotropías del Fondo Cósmico de Microondas (CMB), gracias a las cuales se puede medir su abundancia actual en el Universo. Los últimos resultados de la misión PLANCK indican que la la materia oscura representa el 26.1% de toda la densidad energética del Universo y, además, el 83.7% de toda la materia presente [3].

Para explicar las evidencias, las hipótesis indican que la materia oscura está distribuida en halos alrededor de los centros de la galaxia.

Existen alternativas a la materia oscura, como son las teorías de gravedad modificada, en las cuales la aceleración gravitatoria dependería de la velocidad o los Objetos Astronómicos de Halo Compacto (MACHOs). Sin embargo, estas teorías no explicarían todas las evidencias observadas, como por ejemplo, el cúmulo de la Bala [4]. Este cúmulo es el fruto de la colisión de dos cúmulos de galaxias. A partir de lentes gravitatorias, se ha podido observar como las componentes de materia oscura han atravesado la colisión sin apenas interactuar entre sí, mientras que las componentes de materia bariónica se

\* inaki@ucm.es

\*\* miguel.cardenas@ciemat.es

\*\*\* roberto.santorelli@ciemat.es

han visto frenadas.

Aunque la naturaleza de la materia oscura todavía resulta desconocida, se conocen distintas propiedades gracias a las evidencias observacionales. Así, ésta debe estar compuesta por partículas eléctricamente neutras con el fin de no interactuar con la radiación electromagnética. Estas partículas interactuarían débilmente con la materia bariónica y deben ser pesadas para poder explicar la alta abundancia en el Universo. Las partículas que cumplen lo anterior se denominan WIMPs, o *Weakly Interacting Massive Particles* y dentro del Modelo Estándar no hay candidatos posibles. Fuera del Modelo Estándar existen candidatos como neutrinos estériles, axiones o partículas supersimétricas [6]. La partícula supersimétrica más ligera (LSP) tiene que ser estable, neutra y pesada, lo cual la convierte en uno de los candidatos más plausibles para ser un WIMP [7].

Los detectores de búsqueda directa de materia oscura esperan observar la interacción entre un WIMP del halo galáctico, cuando éste atraviesa la Tierra, con un núcleo del blanco del detector. En las últimas generaciones de detectores destaca el empleo de gases nobles, ejemplos son los detectores XENON1T [8], ArDM [9] o DarkSide 50K (ver Sección II).

De este tipo es DEAP-3600, un experimento de búsqueda directa de materia oscura, situado en el Laboratorio Subterráneo de Sudbury (SNOLAB) en Ontario (Canadá). Su detector está constituido por una esfera de acrílico que contiene 3.6 toneladas de Argón líquido [10]. Encima de la esfera se sitúa un cuello que sirve para el sistema de refrigeración del Argón. En este cuello se produce uno de los fondos más contaminantes a bajas energías, que son partículas  $\alpha$  generadas en las superficies de sus guías de flujo [11]. Estas partículas generan luz ultravioleta que en el detector se asemeja a la señal esperada para un retroceso nuclear de baja energía (ver Sección III).

En este trabajo se propone y diseña una red neuronal para rechazar los eventos producidos por las partículas  $\alpha$  como alternativa a la metodología empleada actualmente basada en variables reconstruidas. El empleo de redes neuronales, así como otras técnicas de Aprendizaje Automático, han experimentado un auge en los últimos años [15] usándose en diversos campos como, la Medicina o el análisis bancario. Incluso existe un uso actual en experimentos de materia oscura, como son los experimentos XENON1T o ArDM [8, 9] (ver Secciones IV y V).

## II. BÚSQUEDA DIRECTA DE MATERIA OSCURA

Los experimentos encaminados a la búsqueda de materia oscura se clasifican en tres tipos: búsqueda en aceleradores, búsqueda indirecta y directa. Los experimentos de búsqueda indirecta esperan observar un exceso del flujo de partículas del Modelo Estándar como resultado de la aniquilación entre dos WIMPs en la galaxia. Experimentos

de este tipo son los satélites AMS-02 [12] o DAMPE [13]. El segundo tipo son las búsquedas en aceleradores, donde las partículas supersimétricas podrían ser producidas como resultado de las colisiones de altas energías entre partículas del Modelo Estándar. En este sentido se realizan búsquedas en el LHC [14].

El último tipo son los experimentos de búsqueda directa, en los cuales se espera detectar el paso de un WIMP cuando atraviesa la Tierra e interactúa con un núcleo que actúa como blanco. Existen diversas técnicas, como el empleo de cristales (ANAIS, CDMS), cámaras de burbujas (PICASSO, SIMPLE) o detectores de gases nobles en estado líquido como ArDM, XENON1T o DEAP-3600 [5, 11].

El empleo de gases nobles como Xenón o Argón se debe a sus excelentes propiedades como centelladores y a la capacidad de recolección de carga de ionización. Además, dado que el Argón es el tercer elemento más común en la atmósfera, su bajo coste permite construir detectores cada vez con un volumen de detección mayor. En particular, en los detectores de Argón se puede desarrollar la técnica de discriminación por forma de pulso (PSD) para la identificación de partículas y el rechazo del fondo.

### A. Interacción WIMP – Argón

La interacción en los experimentos de búsqueda directa es un choque elástico entre el WIMP y un núcleo del elemento que se use como detector. Cuando se produce este choque, el núcleo, que inicialmente está en reposo, adquiere una energía de retroceso  $E_R$  [16] que dependerá del ángulo de *scattering*  $\theta$  y de las masas de las dos partículas:

$$E_R = \frac{4M_W M_N}{(M_N + M_W)^2} \frac{(1 - \cos \theta)}{2} E_0 \quad (1)$$

donde  $M_W$  y  $E_0$  son la masa y la energía cinética del WIMP, él cual se considera no relativista, y  $M_N$  la masa del núcleo, en el caso de DEAP-3600 es Argón. La energía esperada para estos retrocesos nucleares es inferior a los 100 keV [11]. Dado que son sucesos de baja energía, su detección es un gran desafío por la aparición de otras señales de fondo.

La interacción entre un WIMP y un núcleo se puede separar en dos contribuciones, una dependiente del spin del núcleo y otra independiente. En los detectores de Argón solo se puede observar esta última, puesto que su spin es nulo, ya que tiene los dos números cuánticos pares ( $A=18$ ,  $Z=40$ ). La sección eficaz para el canal independiente del spin (SI) se expresa como:

$$\sigma_0^{SI} = \frac{4\mu^2}{\pi} \{Zf_p + (A - Z)f_n\} \quad (2)$$

Donde las  $f_i$  son las funciones de acoplamiento de los WIMPs a los nucleones,  $Z$  y  $A$  son los números atómico y másico del blanco y  $\mu$  la masa reducida del sistema

WIMP-blanco. Dado que la sección eficaz depende linealmente con los números cuánticos de los núcleos, ésta será mayor cuanto más pesado sea el núcleo.

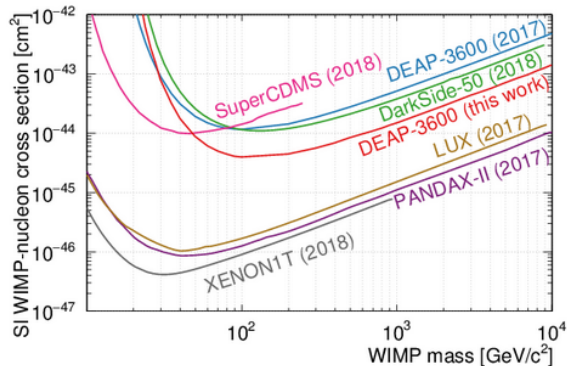


Figura 1. Límites superiores para la sección eficaz en el canal independiente de spin obtenidos a través de varios experimentos. Gráfica obtenida de [11]

Hoy en día, no hay evidencias sólidas de WIMPs en la búsqueda directa. En la Figura 1 se muestran los últimos resultados para distintos experimentos de materia oscura. Estas curvas experimentales excluyen los parámetros por encima de ellas, pues no se han observado ninguna señal en esa región. Los resultados más recientes de DEAP-3600 imponen un límite superior de  $1.5 \cdot 10^{-44} \text{ cm}^2$  para un WIMP cuya masa sea de 100 GeV[11].

### B. Aspectos experimentales

La energía adquirida por el núcleo de Argón tras la interacción (Ecuación 1), proporciona un movimiento al núcleo. Debido al movimiento se pueden excitar o ionizar otros átomos cercanos conduciendo a la formación de estados moleculares. Cuando la molécula excitada decae a dos átomos, se emite un fotón con una energía de 9.8 eV, inferior a la necesaria para ionizar el Argón (15.76 eV), lo cual implica que el Argón sea transparente a su propia luz de centelleo [5].

El Argón atmosférico presenta una contaminación natural del isótopo radiactivo Argón-39, formado por la acción de rayos cósmicos sobre el Argón-40. Este isótopo presenta decaimientos  $\beta$  con una actividad de  $(0.95 \pm 0.05) \text{ Bq/kg}$  [11]. Los electrones emitidos impactan contra los núcleos de  $^{40}\text{Ar}$  generando retrocesos electrónicos. Para distinguirlos de los retrocesos nucleares generados por WIMPs o neutrones, se utiliza la técnica de discriminación por forma de pulso (PSD). Para ello se define el parámetro  $F_{prompt}$  como la fracción de carga de un evento registrada en una pequeña ventana de tiempo sobre el total de la carga del evento. Los eventos nucleares suelen presentar valores altos por encima de 0.6, mientras que los retrocesos electrónicos tienen valores por debajo de 0.3.

Además, los detectores de Argón presentan otras fuentes de fondo que incluyen neutrones, electrones, rayos  $\gamma$  o partículas  $\alpha$ . Aunque algunas de ellas provienen de fuera del detector, como los rayos cósmicos o muones externos, otras se deben a la existencia de isótopos radiactivos de las cadenas del Uranio-238 y el Torio-232 en los materiales del detector, así como de la contaminación ambiente.

## III. EXPERIMENTO DEAP-3600

El experimento DEAP-3600 (*Dark Matter Experiment using Argon PulseShape Discrimination*) es un detector de materia oscura con más de tres toneladas de Argón líquido como volumen activo. El detector está alojado en el laboratorio SNOLAB. Dado que este laboratorio se encuentra enclavado a unos dos kilómetros bajo una montaña rocosa, le otorga al detector una protección de unos 6000 m.w.e frente los rayos cósmicos (metros equivalentes de agua).

### A. Descripción del detector

En la Figura 2 se muestra un corte transversal del detector. Este consiste en un recipiente esférico de acrílico (PMMA) de 5 cm de grosor y 85 cm de radio que alberga en su interior 3600 kg de Argón. De los 3600 kg que podría contener el detector, sólo  $(3279 \pm 96) \text{ kg}$  se encuentran como Argón líquido. Existe una interfase líquido-gas a 55 cm sobre el ecuador de la esfera. [11] Fuera de la esfera de acrílico hay alojados 255 fotomultiplicadores o PMTs para registrar la luz emitida por los eventos del interior. Sin embargo, dado que estos trabajan a temperaturas cercanas a la ambiente mientras que el Argón debe estar a temperaturas criogénicas, los PMTs se encuentran separados de la esfera por guías de luz de 55 cm. Entre ambos hay capas alternas de poliestireno y polietileno que además sirven de blindaje frente a neutrones. Los PMTs no son sensibles a la radiación de 128 nm de centelleo del Argón. Por ello, la superficie interna del acrílico se encuentra recubierta de 1,1,4,4-tetraphenyl-1,3-butadiene o TPB ( $\text{C}_{28}\text{H}_{22}$ ) [10]. Este compuesto se excita a la longitud de onda de 128 nm y tras su desexcitación emite en torno a 420 nm, una longitud que es visible para los PMTs.

Para mantener en temperaturas criogénicas el Argón, se instaló un cuello en la parte superior donde un serpentín relleno de nitrógeno líquido condensa Argón gaseoso. Una vez convertido en Argón líquido es conducido a la parte alta del detector mediante dos líneas de flujo.

Finalmente, todo el detector está recubierto de un blindaje de acero y después sumergido en un tanque de 1490  $\text{m}^3$  de agua pura. El blindaje de acero sirve de soporte para 48 PMTs, que junto con el agua forman un veto ante muones externos. Además, el tanque de agua contribuye a reducir el flujo de neutrones y rayos  $\gamma$  procedentes del exterior.

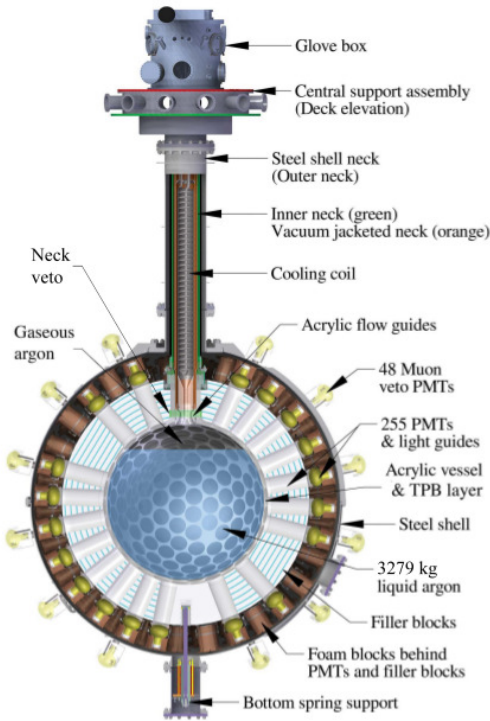


Figura 2. Vista del interior del detector de DEAP-3600, donde se pueden observar las distintas partes que lo componen. La zona sombreada en azul representa el volumen ocupado por el Argón líquido. Figura obtenida de [11]

### B. Fondo de partículas $\alpha$ del cuello

La presencia de Argón gas en la parte superior del detector implica que no se pueda utilizar esta zona para la búsqueda de WIMPs. Así, la región fiducial resulta ser menor. Este volumen fiducial se define por los eventos reconstruidos por debajo de la interfase, es decir, con  $Z_{rec} < 55$  cm, además de que el radio debe cumplir  $R_{rec} < 63$  cm. Se imponen también dos cortes fiduciales basados en la luz recolectada en dos conjuntos de 10 y 15 PMTs de las zonas más superior e inferior respectivamente del detector. Se eliminan los eventos donde el primer conjunto tenga una luz recogida superior al 4% del total y aquellos donde la luz en el segundo sea superior al 10%. Esto implica que la masa total de Argón líquido destinada a la búsqueda activa de WIMPs sea de  $(824 \pm 25)$  kg [11]. En el volumen fiducial se define la región de interés para la búsqueda de WIMPs como aquellos eventos cuya energía recogida por los PMTs esté comprendida entre los 95 y 200 fotoelectrones (PE).

Dentro del volumen fiducial, la mayor contribución al fondo son eventos generados por partículas  $\alpha$  cuyo origen es el cuello del detector. Este origen son las superficies de las guías de flujo, tanto las superficies interna y externa de la guía interna (IFG-IS e IFG-OS), como la superficie interna de la guía externa (OFG-IS) como se observa en la Figura 3. Estas superficies contienen isótopos ra-

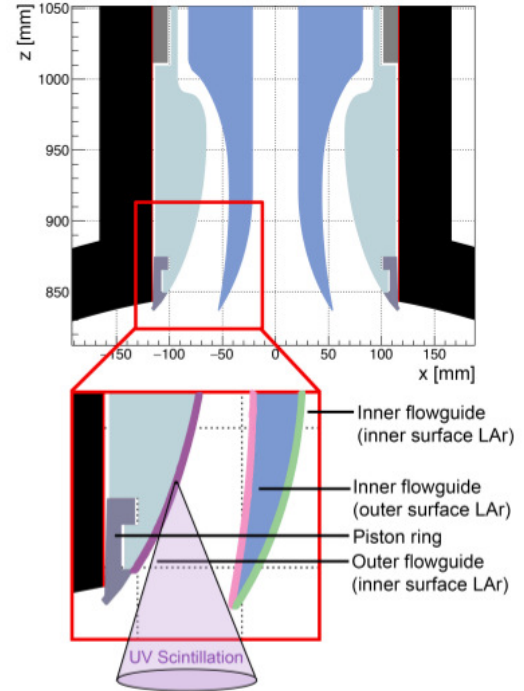


Figura 3. Interior del cuello del detector donde se observa las dos guías de luz internas donde se originan los decaimientos  $\alpha$ . Figura obtenida de [11]

diactivos provenientes de la cadena del Radón como el Polonio-210. Este isótopo emite partículas  $\alpha$  que al contacto con el Argón condensado que rodea las superficies de las guías emiten radiación ultravioleta. Cuando esta emisión ultravioleta alcanza el detector, la señal recogida es muy similar a la esperada para los retrocesos nucleares.

Debido a esta similitud es necesario conseguir un buen algoritmo que rechace todo el fondo posible manteniendo una alta selección de señales buenas. Antes de analizar la solución implementada con redes neuronales, es necesario evaluar el estado actual de la selección basada en cortes, para después establecer una comparación.

Entre los cortes que componen la selección actual de eventos de DEAP-3600, destacan cinco de ellos, que tienen especial relevancia para los eventos de cuello, detallándolos a continuación:

- Carga en los diez PMTs de la parte superior; la luz procedente del cuello puede verse reflejada en la superficie de la interfase líquido gas, implicando que una parte de ella alcanzase los PMTs superiores. Así se rechaza un evento si la carga recogida en este conjunto es superior al 4% de la carga total del evento.
- Carga en los quince PMTs de la parte inferior; este corte también está diseñado para rechazar eventos de partículas  $\alpha$ , eliminándolos siempre que la carga recolectada en este conjunto sea mayor que el 10%

del total.

- Pulsos tempranos en gas; la cercanía de la interfase líquido-gas al cuello, junto con que la luz viaja más rápido en el gas, hace que la luz que se refleje en ella alcance antes los PMTs que subtienden la zona gaseosa. Esto sugiere eliminar aquellos eventos donde los tres primeros pulsos han sido detectados por fotomultiplicadores situados en zona gaseosa. Aunque este corte esta correlacionado con el segundo, deben ser aplicados juntos para poder alcanzar un alto nivel de rechazo.
- Existen dos algoritmos para la reconstrucción de la posición de los eventos del detector. Uno basado solo en la carga de cada PMT y otro basado en el tiempo que tardan en llegar los fotones al fotomultiplicador. El primero asigna posiciones más bajas que el segundo para los eventos de cuello. Se establecen así dos cortes, el primero de ellos, consiste en eliminar los eventos donde la diferencia entre las coordenadas Z reconstruidas de ambos algoritmos sean superiores al 90 % a lo esperado para los retrocesos nucleares. Mientras que el segundo corte selecciona aquellos eventos donde la diferencia entre los radios reconstruidos sea menor del 85 % de lo esperado en los retrocesos nucleares.

La eficacia de los cortes es evaluada mediante el poder de rechazo, definido como la unidad menos la ratio entre el número de eventos de fondo que pasan los cortes ( $N_{bg,s}$ ), sobre el total de eventos de fondo ( $N_{bg}$ ):

$$R_f = 1 - \frac{N_{bg;s}}{N_{bg}} \quad (3)$$

También se define la aceptancia como la ratio de eventos de señal seleccionados:

$$A = \frac{N_{sg,s}}{N_{sg}} \quad (4)$$

donde  $N_{sg}$  es el número de todos los datos de la señal y  $N_{sg,s}$  corresponde a los eventos que pasan el corte. Para evaluar los cortes se dispone de un conjunto de casi 14000 eventos Monte Carlo, a los cuales se les aplica la misma preselección que presentan los datos disponibles para Aprendizaje Automático de la siguiente Sección. En la Tabla I se muestra la distribución de los eventos usados para evaluar los cortes antes y después de aplicar la preselección. Esta preselección consiste en establecer los eventos en la región de interés, así presentan el corte en energía y los dos primeros cortes fiduciales. También hay impuestos cortes de calidad como que solo se haya registrado un evento en la ventana de tiempo o que un solo PMT no haya recogido más del 40 % de la energía. Otro corte que está preaplicado establece  $F_{prompt} < 0.8$  el cual sirve para evitar eventos que producen luz de Cherenkov en las guías de luz.

Una vez aplica la preselección, se evalúan los cortes descritos sobre los eventos de retrocesos nucleares y de las

Origen	Ret.nucleares	IFG-IS	IFG-OS	OFG-IS
Sin preselección	8611	1226	1494	3108
Con preselección	7962	1074	1337	2488

Tabla I. Eventos antes y después de aplicar la misma preselección que a los datos disponibles para Aprendizaje Automático y clasificados según sea su origen.

tres superficies del cuello. En las Tablas II y III se presentan el poder de rechazo y la aceptancia correspondiente a cada corte y al final de ellas, los valores correspondientes a combinar todos los cortes.

Corte	Poder de		Rechazo ( $R_f$ )
	IFG-IS	IFG-OS	OFG-IS
10 PMTs superiores	0.534	0.532	0.467
15 PMTs inferiores	0.348	0.097	0.018
Pulsos tempranos en gas	0.822	0.821	0.810
Coincidencia en $Z_{rec}$	0.732	0.736	0.642
Coincidencia en $R_{rec}$	0.829	0.892	0.873
Acumulativo	0.974	0.976	0.975

Tabla II. Valores del poder de rechazo individual de cada corte y el acumulativo sobre eventos simulados de cada una de las tres superficies del cuello.

Corte	Aceptancia (A)
10 PMTs superiores	0.721
15 PMTs inferiores	0.898
Pulsos tempranos en gas	0.466
Coincidencia en $Z_{rec}$	0.808
Coincidencia en $R_{rec}$	0.538
Acumulativa	0.185

Tabla III. Valores de la aceptancia individual de cada corte y el acumulativo para los eventos simulados de retrocesos nucleares en Argón.

Cuanto mayor es el poder de rechazo de un corte más baja es la aceptancia, implicando que para conseguir menos contaminación se deba perder una gran parte de la señal. Finalmente combinando el número de eventos de cuello supervivientes entre los totales para las tres superficies se obtiene el siguiente poder de rechazo:

$$R_f = 1 - \frac{30 + 34 + 62}{2488 + 1337 + 1074} = 0.974 \quad (5)$$

Los cortes resultan ser excelentes eliminando el fondo de partículas  $\alpha$  del cuello, pero a cambio, rechazan más del 80 % de los eventos de retrocesos nucleares. Esto ha implicado que la colaboración del experimento buscase otras alternativas basadas en Aprendizaje Automático, entre las que se incluye la propuesta con redes neuronales de este trabajo.

## IV. REDES NEURONALES

Las redes neuronales son uno de los algoritmos más populares de Aprendizaje Automático, pues han demostrado excelentes resultados en campos tan amplios como la Medicina o las Finanzas [15]. Una red neuronal artificial es el conjunto de varias unidades de cómputo denominadas neuronas, porque sus estructuras están inspiradas en las neuronas humanas [15].

### A. Fundamentos

Una neurona es una unidad de cómputo que evalúa una función de activación  $h(z)$  sobre el producto escalar entre un vector de entrada por un vector de pesos  $\vec{\theta}$  más un término independiente  $\theta^0$  que es la ordenada en el origen. Así, la salida de una neurona es:

$$a = h \left( \theta^0 + \sum_{i=1}^m \theta^i x^i \right) \quad (6)$$

donde  $i$  es el índice de variables de entrada y  $m$  el número de éstas. Como una red neuronal es el conjunto de varias neuronas agrupadas en capas, la entrada de una capa  $c$  es la salida de la capa anterior  $\vec{x}_c = \vec{a}_{c-1}$ , la Ecuación 6 se puede escribir como:

$$a_c^j = h \left( \theta_c^{j,0} + \sum_{i=1}^m \theta_c^{j,i} a_{c-1}^i \right) \quad (7)$$

donde  $j$  es el índice de la neurona en la capa  $c$ .

La primera capa de la red se denomina de lectura y presenta el mismo número de neuronas que variables presenten los datos. La última capa es la capa de salida y su valor es el resultado final de la red para un ejemplo de entrada. Las capas intermedias se denominan ocultas.

La función de activación en la capa de salida de la red depende del problema para el cual se use. Así, en problemas de regresión numérica se suele usar una función lineal. Mientras que en problemas de regresión logística o clasificaciones categóricas se emplea la función sigmoide por estar comprendida su salida entre 0 y 1, ó bien una generalización (llamada *softmax*) para más categorías.

Los pesos óptimos de la red neuronal se obtienen a través de la minimización de una función de coste  $J$ , cuya elección también depende del tipo de problema a resolver. En problemas de regresión numérica es frecuente el uso del error medio, mientras que en los problemas de clasificación binaria destaca el uso de la entropía cruzada, cuya expresión es:

$$J = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N y_i \log(y_{i,pred}) + (1 - y_i) \log(1 - y_{i,pred}) \quad (8)$$

donde  $y_i, y_{i,pred}$  son los valores original y predicho por la red neuronal para cada ejemplo  $i$  y  $N$  el número total

de ejemplos usados para entrenar la red. Los pesos de la red  $\theta$  se ajustan mediante algoritmos de propagación hacia atrás que derivan del gradiente descendente, denominados optimizadores. Se evalúan las derivadas de la función de coste respecto de los pesos de cada neurona empezando por la capa de salida hacia atrás en la red hasta llegar a la primera capa oculta. Evaluadas todas las derivadas, los pesos se corrigen mediante la resta entre el valor actual y la derivada:

$$\theta_c^{j,i} = \theta_c^{j,i} - \alpha \frac{dJ(\Theta)}{d\theta_c^{j,i}} \quad (9)$$

donde  $\alpha$  es el factor de aprendizaje o *learning rate* y está relacionado con la velocidad con la que el entrenamiento se acerca al mínimo de la función de coste. Existen actualmente optimizadores más eficaces, como AdaBoost o Adam.

Cada vez que la red recorre todos los datos del entrenamiento se completa una época. Sin embargo, los pesos se han podido ajustar varias veces en la misma época. El número que lo determina es el tamaño del *batch* o lote e indica cada cuantos ejemplos los pesos se ajustan. Cuanto más alto sea, menos ajustes por época se realizan siendo las épocas más rápidas. Sin embargo, exigen un mayor número de épocas de entrenamiento.

Los números que definen la estructura o arquitectura de la red, como el número de capas, la cantidad de neuronas, el tamaño del *batch* o los parámetros de los optimizadores reciben el nombre de hiperparámetros. Optimizar la red es la búsqueda del conjunto óptimo de pesos y de hiperparámetros para un problema dado.

### B. Métricas

Para evaluar los distintos modelos de Aprendizaje Automático se utilizan funciones denominadas métricas. En los problemas de clasificación destaca la matriz de confusión definida en la Tabla IV.

	Positivos predichos	Negativos predichos
Positivos reales	TP	FN
Negativos reales	FP	TN

Tabla IV. Matriz de confusión para un problema binario.

Esta matriz recoge el conteo de los eventos según éstos han sido clasificados, enfrentando las predicciones de la red con los valores reales de los datos. Así, los elementos en la diagonal son los verdaderos positivos y negativos (TP y TN), pues corresponden con las predicciones correctas de la red; mientras que los términos no diagonales muestran las predicciones erróneas de la red hacia una clase o la otra. Estos números se denominan falsos positivos o negativos (FP o FN).

Cuánto más altos sean TP y TN y más pequeños los otros, dos mejor será el algoritmo. A partir de los elementos de la matriz de confusión, se definen dos métri-

cas, denominadas ratios de verdaderos positivos (TPR) y falsos positivos (FPR):

$$TPR = \frac{TP}{TP + FN} \quad (10)$$

$$FPR = \frac{FP}{FP + TN} \quad (11)$$

La primera corresponde con la ratio de positivos acertados sobre el total de éstos, mientras que la segunda variable es la tasa entre los negativos reales que son seleccionados como positivos sobre el total de negativos. Dado que se consideran a los retrocesos nucleares como eventos de la clase positiva, se pueden establecer la siguiente relación entre la aceptación y el poder de rechazo con estas métricas:

$$A = TPR \quad (12)$$

$$R_f = 1 - FPR \quad (13)$$

La función de activación en la capa de salida de la red es la sigmoide, por lo cual el valor de la red estará comprendido entre 0 y 1 para cada ejemplo. Esto implica definir un umbral  $u$  a partir del cual todos los eventos con un valor por encima se clasifique como retrocesos nucleares y por debajo como eventos de cuello. Aunque es frecuente tomar  $u = 0.5$  es posible que éste no sea el más eficaz y para buscarlo se define la curva ROC (Receiver Operating Characteristic), donde se representa la evolución de la aceptación según aumenta el poder de rechazo. En la Figura 4 se muestra un ejemplo de curva ROC en azul mientras que, la línea roja corresponde con el caso de un mal clasificador cuya salida es completamente aleatoria. De esta forma un algoritmo es bueno si su curva ROC se sitúa por encima de la línea roja. Idealmente el mejor clasificador es aquel que alcanza el punto (1,1) donde la aceptación y el poder de rechazo son máximos.

También se puede evaluar el algoritmo sin necesitar de establecer un umbral, para ello se define otra métrica como el área bajo la curva ROC. Esta siempre será inferior a la unidad, salvo en el caso perfecto. Entonces un algoritmo es mejor que otro cuanto más cercana sea el área bajo la curva a la unidad. Para el caso cuya salida es aleatoria el área bajo la curva es igual a 0.5.

### C. Diseño de la red neuronal

Para el entrenamiento y la evaluación de las redes neuronales se han usado 190020 datos Monte Carlo generados en DEAP-3600. Los datos presentan la preselección que los sitúa en la región de interés introducida en la sección III B. Este conjunto está compuesto por 95010 eventos de retrocesos nucleares y 31760 eventos de cada una de las tres superficie del cuello. Los datos están balanceados para tener la misma cantidad de ejemplos de cada clase y así, evitar que la red se adecúe a uno de los casos.

Este conjunto se divide en dos subconjuntos menores, sirviendo el primero para entrenar las redes mientras que

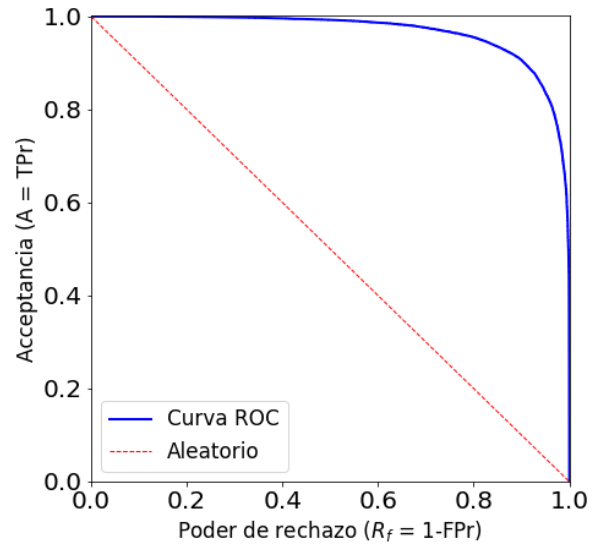


Figura 4. En azul ejemplo de curva ROC estándar mientras que en rojo se muestra la correspondiente a un mal clasificador que actúa de forma aleatoria.

el segundo se utiliza para evaluarlas después del entrenamiento. La división se realiza para tener un conjunto que la red no haya visto antes y poder detectar casos donde las redes están sobreentrenadas. En este trabajo, se ha utilizado el 75 % de los datos para los entrenamientos y el 25 % restante para las evaluaciones, mostrándose en la Tabla V la composición de cada conjunto según la procedencia de los eventos.

Origen	Entrenamiento	Evaluación
Superficie <i>IFG-IS</i>	23965	7725
Superficie <i>IFG-OS</i>	23835	7925
Superficie <i>OFG-IS</i>	23869	7891
Total cuello	71349	23661
Retrocesos nucleares	71116	23894

Tabla V. Distribución de los 190020 eventos entre los conjuntos de entrenamiento y evaluación según su procedencia.

La capa de entrada de la red neuronal consta de 255 neuronas de lectura, una por cada PMT del detector. Los valores de entrada son la carga recolectada por cada uno de ellos, normalizada a la carga total del evento:

$$\overline{q_{PE;i}} = \frac{q_{PE;i}}{\sum_i q_{PE;i}} \quad (14)$$

donde  $q_{PE;i}$  es la luz en fotoelectrones recolectada en el  $i$ -ésimo PMT y  $\overline{q_{PE;i}}$  el valor normalizado. La normalización se impone para conseguir que la red aprenda patrones de luz y no tenga que depender de las cargas absolutas.

La capa de salida se compone de una neurona con la sigmoide como función de activación para permitir hacer la clasificación binaria. El número de capas intermedias, así como la composición de neuronas de éstas, y sus funciones de activación, han sido el objeto de búsqueda de

este trabajo. También el resto de hiperparámetros como son el número de épocas y el tamaño del *batch*.

La optimización de los hiperparámetros se realizó buscando maximizar la aceptación correspondiente a un factor de rechazo del 0.999, pues es el objetivo marcado por la colaboración del experimento. Para ello, el procedimiento seguido consistió en realizar una búsqueda codiciosa. Primero se dejan todos los hiperparámetros fijos salvo uno, que se modifica entre varios valores hasta lograr el que mayor aceptación consigue. Éste ya se fija definitivamente y se procede con el resto.

El trabajo se ha realizado mediante dos librerías de Python, una especializada en redes neuronales, como `keras` [18] y una segunda en Aprendizaje Automático como `scikit-learn` [19]. Además, dado que los cálculos necesitan de un gran volumen de operaciones y datos, se han utilizado dos tarjetas gráficas NVIDIA PASCAL 100.

De esta forma, se encontró que las mejores redes estaban compuestas por dos capas ocultas. Sobre las funciones de activación, se observó que la función sigmoide era más lenta que la tangente hiperbólica y ésta a su vez más lenta que la función `relu` ( $h(z) = \max(0, z)$ ). También se probaron varios optimizadores, siendo el optimizador Adam el mejor de ellos, dejando los valores predeterminados para sus hiperparámetros. Como ejemplo de la búsqueda codiciosa se muestra en la Figura 5 la dependencia de la aceptación deseada cuando varían el número de neuronas en dos capas ocultas.

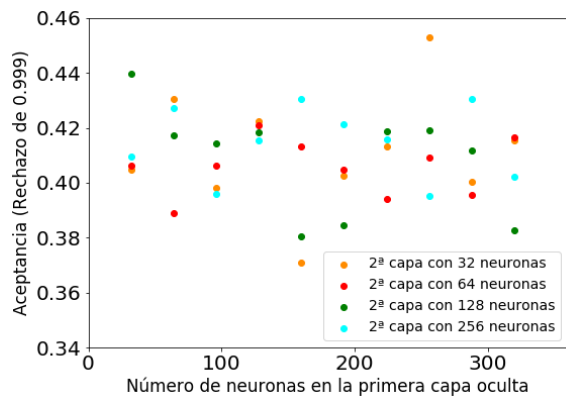


Figura 5. Aceptancia correspondiente a un factor de rechazo del 0.974 en función del número de neuronas en la primera capa para varios casos de neuronas en la segunda. Estas redes presentan un *batch* de 32 y fueron entrenadas 10 épocas.

Se concluye mostrando las mejores cuatro arquitecturas en la siguiente Tabla VI. Finalmente se eligió la primera red de la tabla como la definitiva, por ser la red que mayor aceptación presenta para un rechazo del 0.999; además también es la red que consigue el mayor área bajo la curva ROC.

Primera capa	Segunda capa	<i>Batch</i>	Aceptancia	Área ROC
256	32	32	0.4531	0.9660
224	32	12	0.4497	0.9657
96	32	64	0.4493	0.9632
160	32	16	0.4477	0.9646

Tabla VI. Arquitecturas que logran la mejor aceptación cuando el rechazo es 0.999. Estas cuatro fueron entrenadas 10 épocas.

## V. RESULTADOS Y ANÁLISIS

En la Figura 6 se muestran las distribuciones con la salida de la red neuronal para los eventos de evaluación de cuello (naranja) y los de retrocesos nucleares (azul). Se puede observar cómo ambas distribuciones presentan máximos en sus etiquetas correspondientes aunque las colas evidencian la presencia de pérdidas.

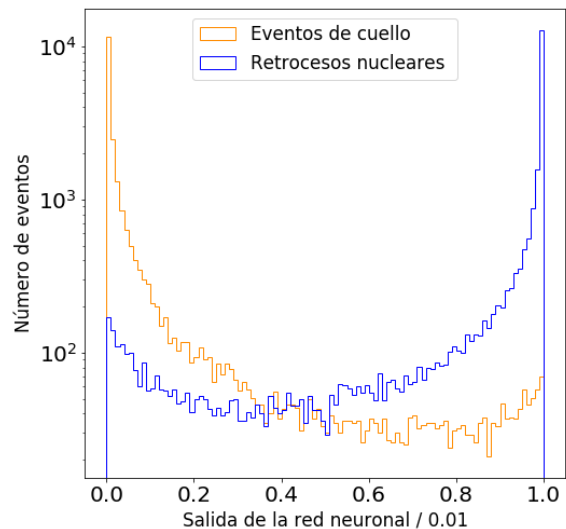


Figura 6. Distribución del resultado de la red para las poblaciones de retrocesos nucleares y eventos de cuello que forman el conjunto de test.

En la Figura 7 se muestra la curva ROC correspondiente a la red neuronal sobre el mismo conjunto de evaluación. Sobre la curva se han representado los casos correspondientes al rechazo anterior de  $R_f = 0.974$  (rojo) y al rechazo pedido de  $R_f = 0.999$  (azul), junto con las aceptancias y los umbrales correspondientes. Si se mantiene el mismo nivel de rechazo que antes, la aceptación usando la red neuronal mejoraría hasta ser cuatro veces mayor, siendo 0.768. Mientras que para el nivel de rechazo pedido la aceptación conseguida dobla el valor actual alcanzando el 45% de retrocesos nucleares bien seleccionados.

Estos dos casos se recogen en la Tabla VI junto con el caso de usar el umbral común de  $u = 0.500$  y con el caso que haría lograr la aceptación anterior ( $A=0.185$ ).

Al evaluar la dependencia de la clasificación con otras variables reconstruidas, se ha encontrado que guarda cier-



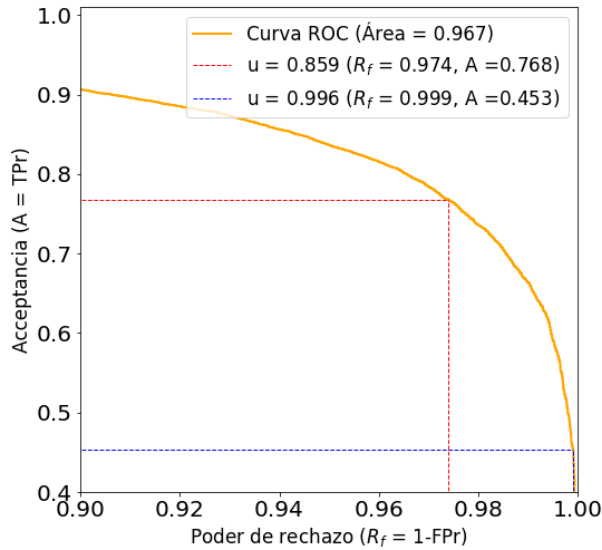


Figura 7. Curva ROC correspondiente a la red optimizada, se señalan los casos correspondientes a rechazos del 97.4 % (rojo) y del 99.9 % (azul).

Poder de rechazo ( $R_f$ )	Aceptancia(A)	Umbral $\alpha$
0.9249	0.8800	0.5000
0.9740	0.7679	0.8590
0.9990	0.4531	0.9958
0.9998	0.185	0.9998

Tabla VII. Comparación entre rechazo y aceptación entre cuatro casos distintos, un clasificador con 0.5 de umbral, el poder de rechazo análogo a los cortes, el valor pedido y la aceptación con los cortes.

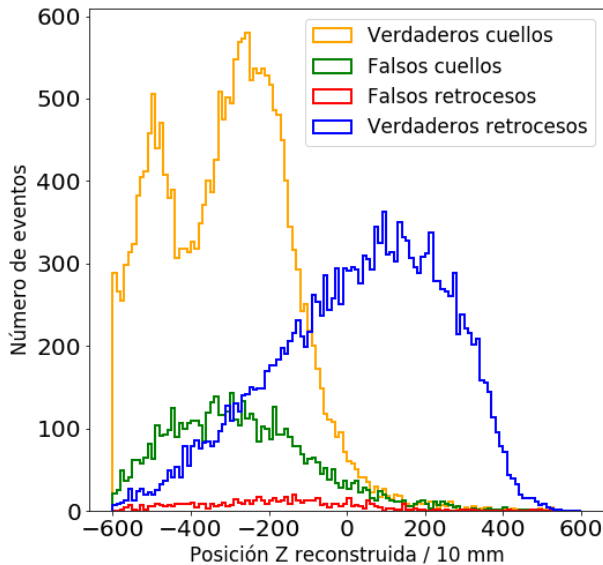


Figura 8. Distribuciones en la posición Z reconstruida tras clasificar los eventos con un umbral de  $\alpha = 0.8646$ , correspondiente a un porcentaje de rechazo del 97.4 %.

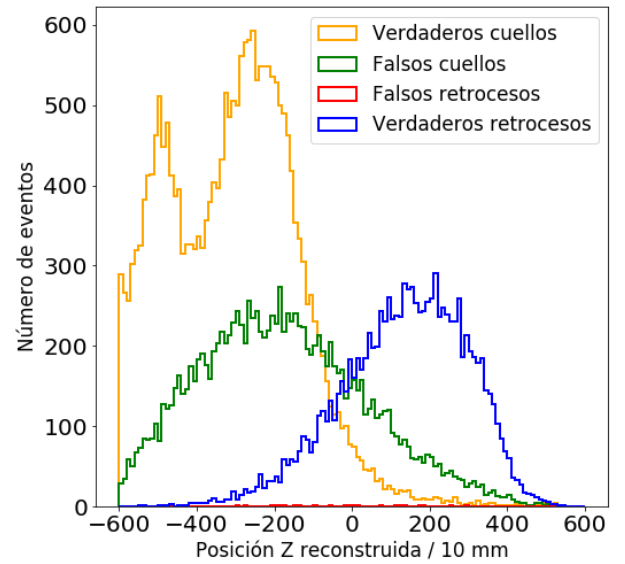


Figura 9. Distribuciones en la posición Z reconstruida tras clasificar los eventos con un umbral de  $\alpha = 0.9960$ , a un porcentaje de rechazo del 99.9 %.

ta relación con la posición reconstruida, en concreto con la altura. En las Figuras 8 y 9 se presentan las distribuciones de esta variable según han sido clasificados los eventos, en la primera para un rechazo del 97.4 % y en la segunda para el deseado de 99.9 %. A partir de ambas, se aprecia como, cuanto más exigente es la selección (más alto es  $u$ ) se pierden más retrocesos nucleares de la parte baja.

#### A. Aplicación sobre datos de Argón-39

Los retrocesos electrónicos que se generan a partir del isótopo Argón-39, un emisor  $\beta$  presente de forma natural en el Argón, son usados para calibrar la respuesta del detector [11]. Los datos reales que se han medido de estos retrocesos electrónicos constituyen una prueba única para validar los modelos de Aprendizaje Automático.

La prueba de validación consiste en analizar el comportamiento de la red neuronal sobre los datos de retrocesos electrónicos y simulaciones de éstos. Aunque la red no está entrenada para trabajar con eventos de Argón-39, se espera que la salida sea la misma para eventos reales y simulados, lo cual implicaría que la red no distingue la realidad sobre las simulaciones. Si, por el contrario, la red tuviera un comportamiento distinto, evidenciaría que no podría ser implementada para el análisis de datos reales, ya que su comportamiento no sería como se ha predicho. El conjunto de datos disponibles de Argón-39 está compuesto por 100874 eventos de datos reales del detector y 17260 eventos simulados.

Como se muestra en la Figura 10 las distribuciones normalizadas para datos reales y simulados son muy similares entre ellas, lo cual implica que la red no distingue

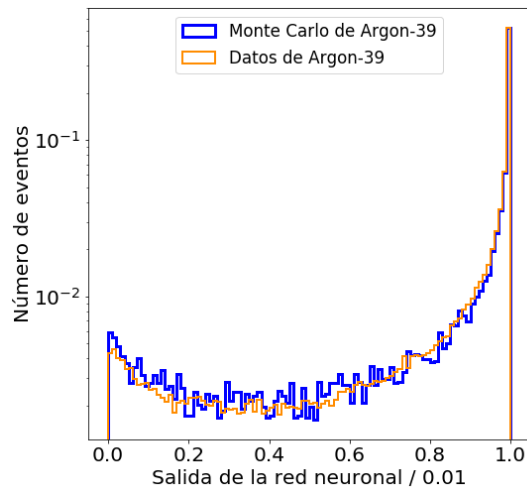


Figura 10. Aplicación de la mejor red sobre datos y simulaciones de retrocesos electrónicos producidos por  $^{39}\text{Ar}$ . En ambos se observa una concordancia entre datos y simulaciones.

entre realidad y simulación. Finalmente se puede evaluar la aceptación de eventos de Argón-39, resultando ser del 44.08% para eventos reales y 44.10% para eventos simulados, ambas cercanas a la aceptación conseguida para retrocesos nucleares.

## VI. CONCLUSIONES Y TRABAJO FUTURO

En este trabajo se presenta una solución para mejorar la selección de eventos en el detector de materia oscura DEAP-3600. Uno de los fondos más problemáticos es la aparición de partículas  $\alpha$  en el cuello de éste, generando

señales similares a las esperables para los WIMPs.

Tras estudiar con eventos de Monte Carlo la selección actual, se ha visto como ésta permite obtener un rechazo del 97.4% pero a cambio, la aceptación resulta ser solamente del 18%, implicando la pérdida de la mayor parte de los retrocesos nucleares.

La solución propuesta consiste en una red neuronal artificial que solo depende del patrón de luz recogido por los fotomultiplicadores. Después de haber sido optimizada mediante una búsqueda codiciosa, la red consigue que la aceptación aumente hasta el 76.42% para el mismo nivel de rechazo que antes.

Incluso permite obtener mejores aceptancias para niveles superiores de rechazo. Así, para el objetivo deseado de un rechazo del 99.9%, la aceptación resultante es del 45%, más del doble del valor actual. Finalmente, la red ha sido validada mediante eventos reales de Argón-39, demostrando la misma aceptación calculada con los datos de Monte Carlo.

Se prevé que los desarrollos de este proyecto se implementen en el código de reconstrucción de eventos de DEAP-3600. Además, como una posible línea de trabajo futuro, se propone la mejora de la reconstrucción de la posición mediante redes neuronales.

## AGRADECIMIENTOS

Finalmente, quería agradecer a los tutores la dirección durante todo el trabajo como al resto del grupo entero de Materia Oscura del CIEMAT. También a la colaboración del experimento DEAP-3600 por permitirme la integración en sus grupos de trabajo y el uso de los datos para este trabajo.

- 
- [1] F. Zwicky. *Helvetica Physica Acta* **6**: 110-127. (1933).
  - [2] F. Zwicky. *Astrophysical Journal* **86**: 217 (1937).
  - [3] N. Aghanim et al. (Planck Collaboration). *Planck 2018 Results. VI. Cosmological parameters*. Submitted to A&A. arXiv:1807.06209 (2018).
  - [4] M. Markevitch et al. *ApJ* **606**, 819 (2004).
  - [5] B. Montes Núñez. PhD thesis *Analysis of the first underground run and background studies of the Argon Dark Matter experiment*. UCM, (2016).
  - [6] G. Bertone, D. Hooper and J. Silk, *Phys. Rept.* **405**, 279 (2005).
  - [7] K. Griest and M. Kamionkowski, *Phys. Rept.* **333-334**, 167-182 (2000).
  - [8] E. Aprile et al. (XENON Collaboration), *Phys. Rev. Lett.* **121**, 111302 (2018)
  - [9] M. Cárdenas-Montes, B. Montes, R. Santorelli and L. Romero, *Evaluation of Decision Trees Algorithms for Position Reconstruction in Argon Dark Matter Experiment*. HAIS 2016: 575-587
  - [10] P.-A. Amaudruz et al. (DEAP-3600 Collaboration), *Astropart. Phys* **108**, 1 (2019).
  - [11] R. Ajaj et al. (DEAP Collaboration) *Phys. Rev. D* **100**, 022004 (2019).
  - [12] M. Aguilar et al. (AMS Collaboration), *Phys. Rev. Lett* **122**, 0401102 (2019).
  - [13] G. Ambrosi et al. (DAMPE collaboration), *Nature*, **552**, 63-66 (2017).
  - [14] The CMS collaboration, Sirunyan, A.M., Tumasyan, A. et al. *J. High Energ. Phys.* **3** 160 (2018).
  - [15] J. Torres *Deep Learning: Introducción práctica con Keras* (2018). Versión online en <http://torres.ai>
  - [16] J. D. Lewin and P. F. Smith, *Astropart. Phys.* **6**, 87-112 (1996).
  - [17] Goodfellow, I. Bengio, Y. Courville, A. : *Deep Learning*. MIT Press (2016).
  - [18] F. Chollet et al. *Keras*. <https://keras.io> (2015).
  - [19] Pedregosa et al. *Scikit-learn: Machine Learning in Python*, *JMLR* **12**, pp. 2825-2830 (2011).