



Universität Hamburg

DER FORSCHUNG | DER LEHRE | DER BILDUNG

BACHELORTHESES

Klassifikation atmosphärischer Neutrino-Signale in JUNO mit Hilfe von aggregierten Features

Christian-Max Sammoray

Fakultät: Mathematik, Informatik und Naturwissenschaften

Studiengang: Physik B.Sc.

Matrikelnummer: 7279462

Erstgutachter: Dr. Daniel Bick

Zweitgutachter: Prof. Dr. Peter Schleper

vorgelegt am 02.09.2023

Zusammenfassung

Das Jiangmen Underground Neutrino Observatory (JUNO) ist ein 20-kton Flüssigszintillationsdetektor mit dem primären Ziel, die in der Natur realisierte Massenordnung der Neutrinos zu bestimmen. Als primäre Neutrinoquelle werden dazu Reaktor-neutrinos verwendet. Nach 6-jähriger Laufzeit wird erwartet, die Massenordnung mit einer Signifikanz von 3σ zu bestimmen. Atmosphärische Neutrinos, die ebenfalls von JUNO detektiert werden können, sind auch zur Bestimmung der Massenordnung geeignet. Dafür ist unter anderem eine Rekonstruktion der Neutrinoenergie nötig. Da Neutrinos in NC-Interaktionen nur einen geringen Anteil ihrer Energie im Detektor verlieren, kann ihre Energie nicht vollständig rekonstruiert werden. Aus diesem Grund ist es notwendig, atmosphärische Neutrino-Signale vor der Energierekonstruktion in NC- und CC-Ereignisse zu klassifizieren. In dieser Bachelorarbeit wird dafür die Verwendung von neuronalen Netzen (NN), die mit Hilfe von aggregierten Features trainiert werden, untersucht. Für das Training der NN werden Ereignisse mit Energien zwischen 1 GeV und 15 GeV aus Monte-Carlo-Simulationen verwendet. Insgesamt werden drei NN auf unterschiedlichen Energiebereichen trainiert. Das erste deckt den Energiebereich zwischen 1 GeV und 3 GeV ab, das zweite den Energiebereich zwischen 3 GeV und 15 GeV und das letzte den kompletten Energiebereich. Das NN, welches auf dem kompletten Energiebereich trainiert wurde, erreicht eine Reinheit von 90.87 % bei einer Genauigkeit von 81.60 %. Das erste und zweite NN erreichen eine Reinheit von 94.52 % bzw. 94.77 % und eine Genauigkeit von 90.94 % bzw. 84.68 %.

Abstract

The Jiangmen Underground Neutrino Observatory (JUNO) is a 20-kton liquid scintillator detector with the primary goal of determining the neutrino mass ordering. Reactor neutrinos are used as the primary neutrino source. After 6 years of data taking, JUNO expects to determine the mass ordering with a significance of 3σ . Atmospheric neutrinos, which can also be detected by JUNO, are also suitable for determining the mass ordering. This requires the reconstruction of the neutrino energy. Since neutrinos in NC interactions only lose a small fraction of their energy in the detector, their energy cannot be fully reconstructed. Thus, it is necessary to classify atmospheric neutrino signals into NC- and CC-Events before energy reconstruction. In this bachelor thesis, the use of neural networks (NN) trained with aggregated features is investigated. Monte Carlo simulations of events with energies between 1 GeV and 15 GeV are used to train the NN. In total, three NN are trained on different energy ranges. The first covers the energy range between 1 GeV and 3 GeV, the second the energy range between 3 GeV and 15 GeV, and the last the entire energy range. The NN trained on the entire energy range achieves a purity of 90.87% with an accuracy of 81.60%. The first and second NN achieve a purity of 94.52% and 94.77%, respectively, and an accuracy of 90.94% and 84.68%, respectively.

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
2	Neutrinoophysik	3
2.1	Neutrinos im Standardmodell	3
2.2	Schwache Wechselwirkung	5
2.2.1	Parität	6
2.2.2	Ladungskonjugation	8
2.2.3	CP-Verletzung	9
2.3	Neutrinooszillationen	9
2.3.1	Im Vakuum	9
2.3.2	In Materie	12
2.4	Massenordnung	12
2.5	Neutrinoquellen	13
3	Jiangmen Underground Neutrino Observatory	17
3.1	Physikalische Ziele	17
3.2	Detektionsmechanismus	19
3.2.1	Szintillation	20
3.2.2	Cherenkov-Strahlung	21
3.3	Interaktionskanäle	22
3.4	Detektoraufbau	23
3.4.1	Central Detector	23
3.4.2	Myon-Veto-System	24
4	Einführung in Neuronale Netze	25
4.1	Neuronen	25
4.2	Aufbau	27
4.3	Training	28
4.3.1	Überwachtes Lernen	29
4.3.2	Backpropagation	30
4.3.3	Overfitting	32

4.4	Evaluation	33
4.4.1	ROC-Kurve	35
4.4.2	Konfusionsmatrix	36
4.5	Bayes'sche Optimierung	37
5	Simulation und Daten	41
5.1	Simulierte Daten	41
5.2	Selektion der simulierten Daten	45
5.3	Aggregierte Features	47
5.3.1	FHT-Features	48
5.3.2	npe-Features	50
5.3.3	npe-Zeit-Histogramm-Features	55
5.4	Normierung der Features	57
5.5	Klassifikationsfähigkeit eines Features	58
6	Training und Evaluation der Neuronalen Netze	59
6.1	Implementierung	59
6.2	Training und Optimierung	59
6.2.1	Bayes'sche Optimierung	60
6.2.2	Selektion der aggregierten Features	61
6.2.3	Finale Modellarchitekturen	63
6.3	Evaluation	64
6.3.1	Modellvorhersagen	64
6.3.2	Schwellenwertoptimierung und Klassifikationsqualität	65
6.3.3	Missklassifizierte Ereignisse	67
7	Zusammenfassung und Ausblick	73
	Appendix	75
	Abkürzungsverzeichnis	81
	Abbildungsverzeichnis	82
	Tabellenverzeichnis	83
	Literaturverzeichnis	87

Kapitel 1

Einleitung

Das Standardmodell der Teilchenphysik (SM) ist eine sehr erfolgreiche Theorie, die die Beschreibung der Materie und ihrer Wechselwirkungen auf subatomarer Ebene ermöglicht. Eine Vielzahl von Experimenten, wie z. B. die am Large Hadron Collider am CERN, bestätigen die Vorhersagen des SM. Dennoch hat die Forschung in den vergangenen Jahrzehnten ebenfalls gezeigt, dass das SM nicht vollständig ist und eine Erweiterung benötigt. Ein Grund dafür sind Neutrinos, die durch das SM als masselos vorhergesagt werden. Neutrinos sind elementare Teilchen, die aufgrund fehlender Ladung nur schwach wechselwirken und daher sehr schwer zu beobachten sind. In den 1990er Jahren wurde durch den Nachweis von Neutrinooszillationen gezeigt, dass Neutrinos entgegen der Vorhersage des SM eine Masse besitzen. Die absoluten Massendifferenzen der Neutrinos konnten bereits ermittelt werden, die Massenhierarchie der Neutrinos selbst ist jedoch weiterhin unbekannt und Gegenstand der heutigen Forschung. Es gibt zwei mögliche Massenordnungen, von denen nur eine in der Natur realisiert ist. Ein vollständiges Verständnis der Neutrinos ermöglicht aufgrund ihrer geringen Wechselwirkungswahrscheinlichkeit unter anderem tiefere Einblicke und ein besseres Verständnis in die Kernfusionsprozesse der Sonne und in den Ablauf von Supernovae. Die physikalischen Grundlagen der Neutrinophysik werden in Kapitel 2 erläutert.

Das Jiangmen Underground Neutrino Observatory (JUNO) ist ein 20-kton Flüssigszintillationsdetektor in Jiangmen, China. Das primäre Ziel des JUNO-Detektors ist, die in der Natur realisierte Massenordnung zu bestimmen. Darüber hinaus sollen einige Oszillationsparameter genauer gemessen werden. Dazu werden hauptsächlich Reaktor-neutrinos aus zwei in etwa 53 km entfernten Kernkraftwerken detektiert. Momentan befindet sich der Aufbau des Detektors in der Endphase und die ersten Messungen sind für Ende 2024 geplant. Nach 6-jähriger Laufzeit wird erwartet, die Massenordnung mit einer Signifikanz von 3σ zu bestimmen. JUNO kann neben den Reaktor-neutrinos auch Neutrinos aus anderen Quellen detektieren. Zu diesen zählen atmosphärische Neutrinos,

die durch die Wechselwirkung der kosmischen Strahlung mit der Erdatmosphäre entstehen. Atmosphärische Neutrinos können zur Bestimmung der Massenordnung beitragen. Dazu werden nur solche atmosphärischen Neutrinos verwendet, die nicht direkt oberhalb des JUNO-Detektors entstanden sind. Diese erfahren beim Durchgang durch die Erde den Michejew-Smirnow-Wolfenstein-Effekt, der dafür sorgt, dass sich die Übergangswahrscheinlichkeiten von Neutrinos im Energiebereich von $E_\nu \approx 3 - 10 \text{ GeV}$ für die beiden möglichen Massenordnungen deutlich unterscheiden. Eine genauere Einführung in JUNO und die Verwendung von atmosphärischen Neutrinos ist in Kapitel 3 zu finden.

Um atmosphärische Neutrinos zur Bestimmung der Massenordnung verwenden zu können, ist eine Rekonstruktion ihrer Energie erforderlich. Da Neutrinos in NC-Interaktionen erhalten bleiben, verlieren sie nur einen geringen Teil ihrer Energie im Detektor. Dementsprechend können solche Ereignisse nicht verwendet werden. Aus diesem Grund ist es notwendig, Ereignisse vor der Energierekonstruktion in NC und CC zu klassifizieren. In dieser Bachelorarbeit wird dazu die Verwendung von aggregierten Features zum Training von Neuronalen Netzen (NN) untersucht. Für das Training der NN werden dabei Daten aus Monte-Carlo-Simulationen verwendet. Der Datensatz setzt sich aus ν_e -, $\bar{\nu}_e$ -, ν_μ - und $\bar{\nu}_\mu$ -Ereignissen im Energiebereich zwischen 1 GeV und 15 GeV zusammen. Das Ziel ist es, möglichst viele CC-Ereignisse richtig zu klassifizieren und gleichzeitig eine hohe Genauigkeit der NN beizubehalten. Die Verwendung von aggregierten Features im Zusammenhang mit vollständig verbundenen NN haben gegenüber komplexeren Methoden des maschinellen Lernens, wie den „Convolutional Neural Networks“, den Vorteil, dass das Training und die Optimierung deutlich weniger rechenintensiv sind. Die Grundlagen und Evaluationsmethoden von NN sind in Kapitel 4 beschrieben. Im anschließenden Kapitel 5 werden die verwendeten simulierten Daten und die für das Training der NN bestimmten Features eingeführt. Das Training und die Klassifikationsergebnisse der NN werden im Kapitel 6 vorgestellt. Im Kapitel 7 werden abschließend die Ergebnisse zusammengefasst und mögliche Verbesserungen diskutiert.

Kapitel 2

Neutrinoophysik

Dieses Kapitel befasst sich mit den physikalischen Grundlagen der Neutrinoophysik. Zu Beginn wird das Standardmodell und die schwache Wechselwirkung eingeführt, wonach eine Diskussion über die Neutrinooszillationen und die Massenordnung folgt. Am Ende des Kapitels wird eine Übersicht über verschiedene Neutrinoquellen gegeben. Dieses Kapitel basiert zum Großteil auf [1]. Bezieht sich ein Abschnitt auf andere Referenzen, werden diese zu Beginn genannt.

2.1 Neutrinos im Standardmodell

Das Standardmodell der Teilchenphysik (SM) beschreibt die grundlegenden Bausteine der Materie und wie sie miteinander wechselwirken. Dabei berücksichtigt es nur drei der vier fundamentalen Wechselwirkungen, die elektromagnetische, die schwache und die starke Wechselwirkung. Die Gravitation konnte nicht ins SM integriert werden. Die fundamentalen Teilchen des SM, auch Elementarteilchen genannt, lassen sich grundsätzlich in zwei Gruppen einteilen: Fermionen und Bosonen. Diese unterscheiden sich dadurch, dass Fermionen einen ganzzahligen und Bosonen einen halbzahligen Spin besitzen und damit der Fermi-Dirac- bzw. der Bose-Einstein-Statistik unterliegen. Alle Teilchen, die durch das SM beschrieben werden, sind in Abbildung 2.1 mit ihren Ruhemassen, Spins und elektrischen Ladungen dargestellt.

Zu den Fermionen zählen die Leptonen und Quarks, die zusammen die Materie bilden. Beide lassen sich jeweils in 3 Generation unterteilen, wobei jede Generation aus einem Teilchenpaar besteht. Jedes dieser Lepton-Paare besteht aus einem elektrisch negativ geladenen Teilchen (e , μ und τ) und dem zugehörigen Neutrino-Flavour $\nu_{e,\mu,\tau}$, welches elektrisch neutral ist. Die Generationen der Quarks setzen sich zusammen aus Up- und Down-Quark, Charm- und Strange-Quark sowie Top- und Bottom-Quark. Up-, Charm- und Top-Quark haben jeweils eine elektrische Ladung von $2/3$ und das Down-, Strange-

und Bottom-Quark eine elektrische Ladung von $-1/3$. In Abbildung 2.1 sind die Leptonen mit der Farbe Grün und die Quarks mit Lila gekennzeichnet. Zu jedem Lepton und Quark gibt es ein zugehöriges Anti-Teilchen, welches sich durch eine umgekehrte Ladung vom Teilchen unterscheidet.

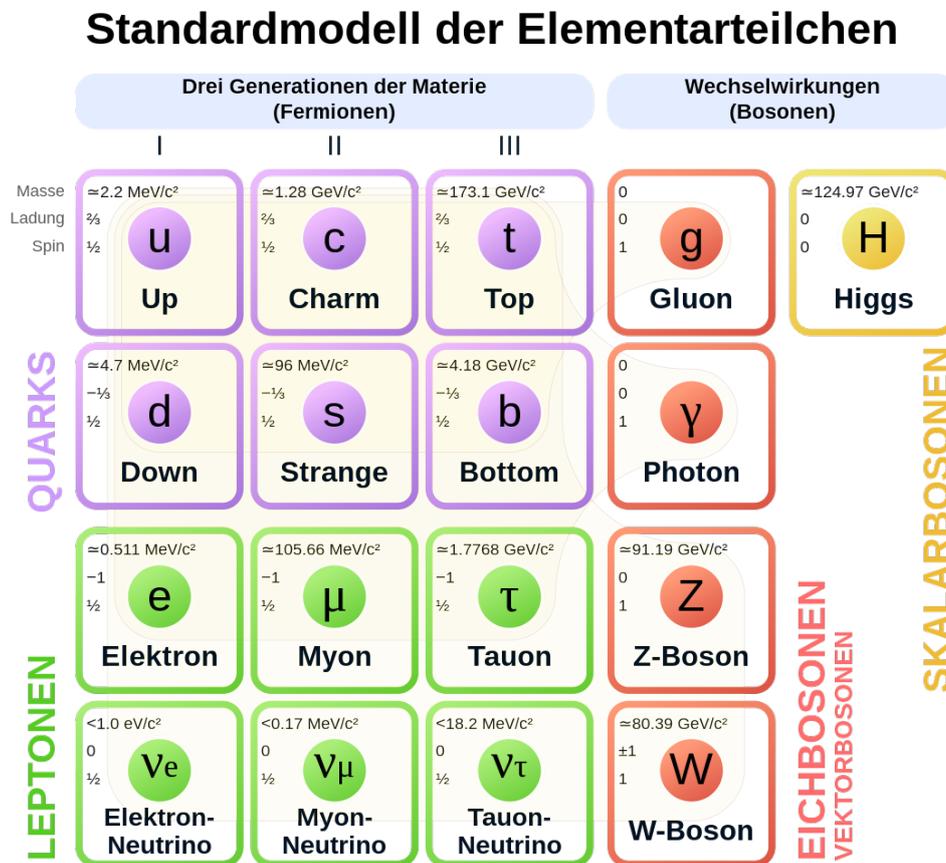


Abbildung 2.1: Überblick über die Teilchen des Standardmodells. Farblich sind sie unterteilt in Quarks (lila), Leptonen (grün), Eichbosonen (rot) und das Higgs-Boson (gelb). Zu jedem Teilchen sind die Massen, die elektrische Ladung und der Spin angegeben. [2]

Die Wechselwirkungen werden jeweils durch den Austausch von Bosonen vermittelt, welche in Abbildung 2.1 in Orange dargestellt sind. Das Austauschteilchen der elektromagnetischen Wechselwirkung ist das Photon γ , bei der starken Wechselwirkung sind es die Gluonen g und die schwache Wechselwirkung (SWW) wird entweder durch das Z-Boson Z^0 oder eines der beiden W-Bosonen W^\pm vermittelt. Sowohl das Photon, die Gluonen als auch das Z-Boson sind elektrisch neutral. Nur die beiden W-Bosonen tragen elektrische Ladung. Das W^+ ist positiv und das W^- negativ geladen.

Der Schwerpunkt dieser Bachelorarbeit liegt auf den Neutrinos. Neutrinos sind Spin- $1/2$ Teilchen, welche weder elektrische noch Farbladung tragen. Aus diesem Grund wechselwirken sie nur gravitativ und schwach. Im SM werden sie zwar als masselos

angenommen, aber aufgrund der Neutrinooszillationen, die in Abschnitt 2.3 diskutiert werden, ist bekannt, dass Neutrinos nicht masselos sind. Daher sind in Abbildung 2.1 für die Neutrinos Massenobergrenzen angegeben, die von KATRIN im Jahre 2019 gesetzt wurden [3].

2.2 Schwache Wechselwirkung

Mit einer Reichweite unterhalb eines Protonradius ist die SWW die fundamentale Wechselwirkung mit der geringsten Reichweite. Dies ist die Folge der relativ großen Ruhemassen der Eichbosonen (siehe Abbildung 2.1). Nach der Heisenberg'schen Unschärferelation können massive Teilchen keine lange Lebensdauer haben und so können die W- und Z-Bosonen nur sehr kurz existieren, bevor sie in andere Teilchen zerfallen. Infolgedessen spielt die SWW nur auf subatomarer Ebene eine bedeutende Rolle. Die SWW wird grundsätzlich in zwei Arten unterteilt. Wenn bei einer Wechselwirkung ein Z-Boson als Austauscheteilchen agiert, wird dies als neutraler Strom (engl. „Neutral Current“, NC) bezeichnet. Wenn die Wechselwirkung jedoch durch eines der W-Bosonen vermittelt wird, spricht man vom geladenen Strom (engl. „Charged Current“, CC). An der SWW können sowohl alle Leptonen als auch alle Quarks teilnehmen. Beispiele für CC- und NC-Prozesse sind in Abbildung 2.2 als Feynman-Diagramme dargestellt.

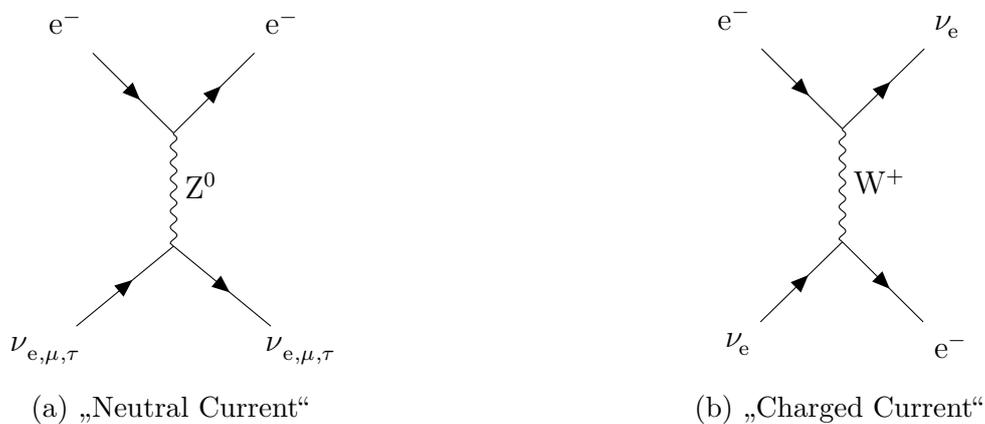


Abbildung 2.2: Beispiel-Feynman-Diagramme der schwachen Wechselwirkung. Links ist die elastische Streuung zwischen einem Elektron und einem beliebigen Neutrino unter Austausch eines Z-Bosons dargestellt. Ein- und auslaufende Teilchen sind hier dieselben. Das rechte Feynman-Diagramm zeigt die quasi-elastische Streuung zwischen einem Elektron und einem ν_e , durch den Austausch eines virtuellen W-Bosons. Im Gegensatz zur elastischen Streuung wandeln sich die wechselwirkenden Teilchen bei der quasi-elastischen Streuung um. Das Elektron geht über in ein Elektron-Neutrino und vice versa.

In Abbildung 2.2a ist die elastische Streuung zwischen einem Elektron und einem beliebigen Neutrino abgebildet. Das Feynman-Diagramm in Abbildung 2.2b zeigt die quasi-elastische Streuung eines ν_e mit einem Elektron. Es fällt auf, dass bei der elastischen Streuung

die beteiligten Teilchen erhalten bleiben, während sie bei der quasi-elastischen Streuung umgewandelt werden. Im Beispiel aus Abbildung 2.2b geht das Elektron in ein ν_e und das ν_e in Elektron über.

Die SWW ist die einzige fundamentale Wechselwirkung, die die Parität, die Ladungskonjugation und die CP-Invarianz verletzt.

2.2.1 Parität

Dieser Abschnitt basiert auf [4] und [5]. Unter der Parität versteht man die Symmetrie eines Systems nach einer räumlichen Spiegelung. Der Paritätsoperator P spiegelt also nur die räumlichen Koordinaten (x, y, z) eines Orts-Vierervektors, nicht aber die Zeit t , wie es in Gleichung 2.2.1 gezeigt ist

$$P : \begin{pmatrix} t \\ x \\ y \\ z \end{pmatrix} \mapsto \begin{pmatrix} t \\ -x \\ -y \\ -z \end{pmatrix}. \quad (2.2.1)$$

In einem Experiment aus dem Jahr 1956 zeigten C.S. Wu et al. zum ersten Mal mit Hilfe des Zerfalls von ^{60}Co -Atomen, dass die Parität in der SWW verletzt ist [6]. Der Grund für die Verletzung ist die Chiralität der Fermion bzw. Anti-Fermionen, denn das W-Boson koppelt nur an Fermionen mit links- und Anti-Fermionen mit rechtshändiger Chiralität. Ähnlich wie der Spin ist die Chiralität eine intrinsische Eigenschaft eines Teilchens. Im Folgenden wird sie anhand eines Beispiels erläutert. Jedes Fermion, das durch das SM beschrieben wird, ist ein Dirac-Fermion, da sie alle Spin-1/2 Teilchen sind, die sich von ihrem Anti-Teilchen unterscheiden. Freie Dirac-Fermionen lassen sich durch die Dirac-Gleichung beschreiben, deren Lösung Spinoren ψ sind

$$\psi = \begin{pmatrix} \phi_1 \\ \phi_2 \\ \chi_1 \\ \chi_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \phi \\ \chi \end{pmatrix}. \quad (2.2.2)$$

Hierbei beschreibt ϕ das Fermion und χ das Anti-Fermion. Beide besitzen zwei Komponenten, da es zwei unterschiedliche Spin-Zustände gibt. Die Komponenten ϕ_1 und χ_2 gehören zum Spin-Up-Zustand und die anderen beiden zum Spin-Down-Zustand. Mit Hilfe der Chiralitätsprojektoren P_L und P_R

$$P_L = \frac{1}{2}(1 - \gamma^5) \quad \text{und} \quad P_R = \frac{1}{2}(1 + \gamma^5) \quad (2.2.3)$$

lässt sich der Spinor aus Gleichung 2.2.2 in seine links- und rechtshändige Komponente ψ_L, ψ_R aufteilen

$$\psi = P_L \psi + P_R \psi = \psi_L + \psi_R. \quad (2.2.4)$$

Dabei ist $\gamma^5 = i\gamma^0\gamma^1\gamma^2\gamma^3 = \begin{pmatrix} 0 & I_2 \\ I_2 & 0 \end{pmatrix}$ und I_2 die 2×2 -Einheitsmatrix. Aus Gleichung 2.2.4 ist somit ersichtlich, dass jeder Spinor in seine links- und rechtshändige Komponente aufgeteilt werden kann. Im Allgemeinen besitzt ein Teilchen daher sowohl eine links- als auch eine rechtshändige Chiralitätskomponente. Betrachtet man ein Fermion im Spin-Up-Zustand, welches sich in z-Richtung mit Impuls $\vec{p} = (0, 0, p_z)$, Energie E und Masse m bewegt, ist eine mögliche Lösung der Dirac-Gleichung gegeben durch

$$u(p_z) = N \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \frac{p_z}{E+m} \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (2.2.5)$$

wobei N eine Normierungskonstante ist. Wendet man nun die Projektoren aus Gleichung 2.2.3 auf diesen Spinor an, erhält man die links- bzw. rechtshändige Komponente

$$u_L = P_L u(p_z) = \frac{N}{2} \left(1 - \frac{p_z}{E+m}\right) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (2.2.6)$$

$$u_R = P_R u(p_z) = \frac{N}{2} \left(1 + \frac{p_z}{E+m}\right) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Handelt es sich in der obigen Betrachtung um ein Neutrino, ist es aufgrund seiner im Vergleich zur Energie geringen Masse möglich, den ultra-relativistischen Grenzfall zu betrachten ($E \gg m, E \approx |\vec{p}|$)

$$u_L \longrightarrow 0 \quad u_R \longrightarrow u(p_z). \quad (2.2.7)$$

Wie aus Gleichung 2.2.7 hervorgeht, verschwindet im Grenzfall der linkshändige Anteil für das Beispiel aus Gleichung 2.2.5 komplett und $u(p_z)$ wird vollständig durch u_R beschrieben. Aus diesem Beispiel wird deutlich, dass Neutrinos aufgrund ihrer im Vergleich zur Energie geringen Masse fast ausschließlich durch eine der beiden Chiralitätskomponenten beschrieben werden.

Die Verletzung der Parität wird häufig über die Helizität erklärt. Die Helizität $\hat{\lambda}$ ist definiert als die Projektion des Spin \vec{S} auf die Bewegungsrichtung des Teilchens

$$\hat{\lambda} = \frac{\vec{S} \cdot \vec{p}}{|\vec{S}||\vec{p}|} = \frac{1}{2|\vec{S}||\vec{p}|} \begin{pmatrix} \vec{\sigma} \vec{p} & 0 \\ 0 & \vec{\sigma} \vec{p} \end{pmatrix} \quad \text{mit} \quad \vec{S} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \vec{\sigma} & 0 \\ 0 & \vec{\sigma} \end{pmatrix}. \quad (2.2.8)$$

Hierbei ist $\vec{\sigma}$ ein Vektor mit den drei Pauli-Matrizen und \vec{p} der Impuls des Teilchens. Propagiert das Teilchen in z-Richtung, vereinfacht sich der Helizitätsoperator zu

$$\hat{\lambda}_z = \text{diag}(1, -1, 1, -1). \quad (2.2.9)$$

Wendet man nun $\hat{\lambda}_z$ auf den Spinor aus Gleichung 2.2.5 an, erhält man

$$\hat{\lambda}_z u(\vec{p}_z) = +u(\vec{p}_z). \quad (2.2.10)$$

Es zeigt sich, dass der Spinor ein Eigenzustand des Helizitätsoperators zum Eigenwert +1 ist. Dies ist immer dann der Fall, wenn Spin und Impuls eines Teilchens in dieselbe Richtung zeigen. Solche Teilchen besitzen eine positive Helizität. Zeigen Spin und Impuls in entgegengesetzte Richtung, ist der Eigenwert -1 und das Teilchen hat eine negative Helizität. Für masselose Teilchen stimmen damit aufgrund von Gleichung 2.2.7 rechtshändige Chiralität und positive Helizität bzw. linkshändige Chiralität und negative Helizität überein. Die Verallgemeinerung auf massebehaftete Teilchen ist jedoch nicht korrekt, weil die Helizität vom Bezugssystem abhängt. Neutrinos haben aufgrund ihrer geringen Masse eine Geschwindigkeit nahe der Lichtgeschwindigkeit. Daher werden Neutrinos mit positiver Helizität fast ausschließlich durch ihre rechtshändige und Neutrinos mit negativer Helizität fast ausschließlich durch ihre linkshändige Komponente beschrieben. Betrachtet man eine CC-Interaktion der SWW, an der ein Neutrino teilnimmt und wendet den Paritätsoperator aus Gleichung 2.2.1 an, so wird aus dem dominierenden linkshändigen Anteil des Neutrinos ein dominierender rechtshändiger, woran das W-Boson aber nicht koppelt. Als Folge ist dieser Prozess stark unterdrückt.

2.2.2 Ladungskonjugation

Die Ladungskonjugation, welche auch C-Parität genannt wird, ist erhalten, wenn in einem Prozess jedes Teilchen durch sein zugehöriges Anti-Teilchen ausgetauscht werden kann und vice versa. Dass die SWW die C-Parität verletzt, ist ebenfalls eine Folge aus der Chiralität eines Teilchens. Bei der Ladungskonjugation wird aus einem linkshändigem Fermion ein linkshändiges Anti-Fermion, was nicht mehr mit dem W-Boson wechselwirken kann.

2.2.3 CP-Verletzung

Wenn sowohl die Parität als auch die Ladungskonjugation in einem physikalischen Prozess erhalten bleiben, spricht man von der CP-Invarianz. Die Verletzung der CP-Invarianz in der SWW wurde erstmals 1964 bei Zerfallsprozessen neutraler Kaonen K^0 beobachtet [7]. Bisher wurde die CP-Verletzung ausschließlich im Quark-Sektor beobachtet. Ob eine solche Verletzung auch im leptonischen Sektor auftritt, ist bisher unbekannt und Gegenstand aktueller Forschung. Eine mögliche CP-Verletzung im leptonischen Sektor könnte dazu beitragen, die Asymmetrie zwischen Materie und Antimaterie in unserem Universum zu erklären. Zu den Experimenten, die die CP-Verletzung im leptonischen Sektor untersuchen, zählen unter anderem NOvA [8] und T2K [9].

2.3 Neutrinooszillationen

Dieser Abschnitt basiert auf [10]. Neutrinooszillationen beschreiben die periodische Umwandlung der Neutrino-Flavour ineinander beim Propagieren durch den Raum. Die ersten Hinweise auf Neutrinooszillationen gab es bereits 1968 als der Fluss von solaren Neutrinos vom Homestake-Experiment gemessen wurde. Der Vergleich des gemessenen Neutrinoflusses mit der theoretischen Vorhersage zeigte, dass dieser viel zu klein war [11]. Der erste Nachweis von Neutrinooszillationen wurde am Super-Kamiokande-Detektor im Jahr 1998 mit atmo-sphärischen Neutrinos erbracht [12].

2.3.1 Im Vakuum

Theoretisch lassen sich Neutrinooszillationen dadurch beschreiben, dass sich wechselwirkende Neutrinos in einem der drei Flavour-Eigenzustände $|\nu_\alpha\rangle$ mit $\alpha \in \{e, \mu, \tau\}$ befinden. Zusätzlich gibt es allerdings noch drei Massen-Eigenzustände $|\nu_i\rangle$ mit den zugehörigen Massen m_i , die sich von den Flavour-Eigenzuständen unterscheiden und die Neutrinos während der Propagation durch den Raum beschreiben. Mit Hilfe der sogenannten Pontecorvo-Maki-Nakagawa-Sakata-Matrix U_{PMNS} (PMNS-Matrix) können die Flavour-Eigenzustände als Linearkombination aus den Massen-Eigenzuständen gebildet werden

$$|\nu_\alpha\rangle = \sum_{i=1}^3 U_{\alpha i} |\nu_i\rangle, \quad (2.3.1)$$

wobei $U_{\alpha i}$ der (αi) -te Eintrag der PMNS-Matrix ist.

Die PMNS-Matrix ist eine unitäre Matrix ($U^\dagger U = 1$) und ist gegeben durch

$$U_{\text{PMNS}} = \begin{pmatrix} c_{12}c_{13} & s_{12}c_{13} & s_{13}e^{-i\delta} \\ -s_{12}c_{23} - c_{12}s_{13}s_{23}e^{i\delta} & c_{12}c_{23} - s_{12}s_{13}s_{23}e^{i\delta} & c_{13}s_{23} \\ s_{12}s_{23} - c_{12}s_{13}c_{23}e^{i\delta} & -c_{12}s_{23} - s_{12}s_{13}c_{23}e^{i\delta} & c_{13}c_{23} \end{pmatrix}. \quad (2.3.2)$$

Die in Gleichung 2.3.2 eingeführte Phase δ beschreibt die mögliche CP-Verletzung. c_{ij} und s_{ij} stehen für $\cos \theta_{ij}$ bzw. $\sin \theta_{ij}$ mit den Mischwinkeln θ_{ij} . Die zeitliche Entwicklung der Massen-Eigenzustände ist gegeben durch

$$|\nu_i(t)\rangle = e^{-iE_i t} |\nu_i(0)\rangle \quad (2.3.3)$$

mit der zugehörigen Energie $E_i = \sqrt{\vec{p}_i^2 + m_i^2}$ und dem Impuls \vec{p}_i . Setzt man Gleichung 2.3.3 in Gleichung 2.3.1 ein, erhält man

$$|\nu_\alpha(t)\rangle = \sum_{i=1}^3 U_{\alpha i} e^{-iE_i t} |\nu_i(0)\rangle. \quad (2.3.4)$$

Mit der Annahme, dass die Masse m_i jedes Massen-Eigenzustands verschieden ist, kann die Summe aus Gleichung 2.3.4 nicht so vereinfacht werden, dass ein gemeinsamer Phasenfaktor entsteht. Die Übergangswahrscheinlichkeit $P(\nu_\alpha \rightarrow \nu_\beta)$ von einem Flavour-Eigenzustand $|\nu_\alpha(t)\rangle$ in einen davon verschiedenen Flavour-Eigenzustand $|\nu_\beta\rangle$ berechnet sich in der Quantenmechanik über das Quadrat der zugehörigen Amplituden

$$P(\nu_\alpha \rightarrow \nu_\beta) = |\langle \nu_\beta | \nu_\alpha(t) \rangle|^2 = \left| \sum_{i,j=1}^3 U_{\beta j}^\dagger U_{\alpha i} e^{-iE_i t} \langle \nu_j | \nu_i \rangle \right|^2. \quad (2.3.5)$$

Für die orthonormalen Flavour-Eigenzustände gilt $\langle \nu_j | \nu_i \rangle = \delta_{ij}$, womit eine der beiden Summen wegfällt. Um Gleichung 2.3.5 zu vereinfachen, kann die Energie durch eine Taylor-Entwicklung genähert werden. Dies ist möglich, weil Neutrinos ultra-relativistische Teilchen sind ($E_i \gg m_i$ und $E_i \approx |\vec{p}_i|$)

$$E_i = |\vec{p}_i| \sqrt{1 + \left(\frac{m_i}{|\vec{p}_i}\right)^2} \approx |\vec{p}_i| + \frac{m_i^2}{2|\vec{p}_i|} + \mathcal{O}\left[\left(\frac{1}{|\vec{p}_i}\right)^2\right]. \quad (2.3.6)$$

Mit Hilfe von Gleichung 2.3.6 und der Orthonormalitätsbedingung vereinfacht sich die Übergangswahrscheinlichkeit aus Gleichung 2.3.5 zu

$$P(\nu_\alpha \rightarrow \nu_\beta) = \sum_{i,j=1}^3 U_{\beta i}^\dagger U_{\alpha i} U_{\beta j} U_{\alpha j}^\dagger \exp\left(-i \frac{\Delta m_{ij}^2}{2E_i} t\right), \quad (2.3.7)$$

wobei $\Delta m_{ij}^2 = m_i^2 - m_j^2$ ist.

Für ultra-relativistische Teilchen gilt darüber hinaus, dass die zurückgelegte Strecke $L \approx ct = t$ ist, weil im verwendeten Einheitensystem $c = 1$ gilt

$$P(\nu_\alpha \rightarrow \nu_\beta) = \sum_{i,j=1}^3 U_{\beta i}^\dagger U_{\alpha i} U_{\beta j} U_{\alpha j}^\dagger \exp\left(-i \frac{\Delta m_{ij}^2}{2E_i} L\right). \quad (2.3.8)$$

Anhand von Gleichung 2.3.8 ist deutlich zu erkennen, dass die Übergangswahrscheinlichkeit von der quadratischen Massendifferenz Δm_{ij}^2 abhängt. Oszillationen zwischen den drei Neutrino-Flavours sind demnach nur dann möglich, wenn sich alle Massen-Eigenzustände voneinander unterscheiden und mindestens zwei von null verschieden sind.

In Abbildung 2.3 ist die Wahrscheinlichkeit im Vakuum ein bestimmtes Neutrino in einer Entfernung L zu detektieren, beispielhaft an einem eingehenden ν_e dargestellt, wobei die NO angenommen wurde. Die blaue Linie zeigt die Wahrscheinlichkeit ein ν_μ zu detektieren, die rote wiederum ein ν_τ und die schwarze zeigt die Wahrscheinlichkeit dafür, dass ein ν_e detektiert wird. Es ist gut zu erkennen, dass die Überlebenswahrscheinlichkeit des ν_e periodisch ab- und wieder zunimmt, während die Übergangswahrscheinlichkeiten in ν_μ bzw. ν_τ periodisch immer dann zunehmen, wenn die Überlebenswahrscheinlichkeit des ν_e abfällt.

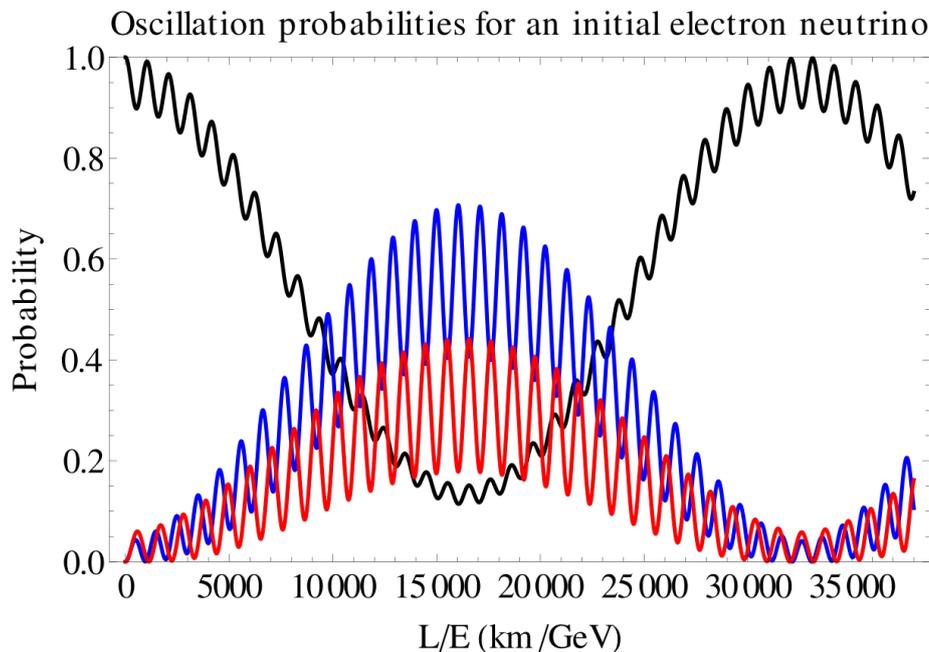


Abbildung 2.3: Die Übergangswahrscheinlichkeit eines ν_e (schwarz) in ein ν_μ (blau) bzw. ν_τ (rot) als Funktion der Distanz-Energie-Relation L/E im Vakuum unter der Annahme der NO. [13]

2.3.2 In Materie

Bisher wurde in dieser Bachelorarbeit angenommen, dass Neutrinos freie Teilchen sind und nicht mit der Materie wechselwirken. Dies spiegelt sich dadurch wider, dass in Gleichung 2.3.4 die Energie-Impuls-Beziehung für freie Teilchen genutzt wird. Da sich gewöhnliche Materie aus Protonen, Neutronen und Elektronen zusammensetzt, die alle schwach wechselwirken, ist diese Annahme nicht korrekt. Neutrinos können sowohl elastisch (NC) als auch inelastisch (CC) mit ihnen wechselwirken. Während NC-Interaktionen für alle Neutrino-Flavour möglich sind, können nur ν_e und $\bar{\nu}_e$ über die W-Boson mit gewöhnlicher Materie wechselwirken. Dies liegt daran, dass in gewöhnlicher Materie keine Myonen und Taus vorhanden sind und die Wirkungsquerschnitte von CC-Interaktion, bei denen sich der Neutrino-Flavour ändert, so klein sind, dass solche Prozesse eigentlich nicht stattfinden. ν_e und $\bar{\nu}_e$ sind dadurch beim Durchgang durch Materie im Gegensatz zu den anderen beiden Neutrinos einem zusätzlichen Potential ausgesetzt, was die Phase der ν_e und $\bar{\nu}_e$ in Gleichung 2.3.4 verändert. Dieser Effekt wurde zuerst im Jahr 1978 von Lincoln Wolfenstein [14] beschrieben. Weitere wichtige Erkenntnisse lieferten Stanislaw Mischejew und Alexei Smirnow im Jahr 1986 [15], sodass der Effekt heute auch MSW-Effekt genannt wird. Der MSW-Effekt ist stark von der Elektronendichte N_e abhängig und somit z. B. bei der Betrachtung von atmosphärischen Neutrinos von Bedeutung (siehe Abschnitt 3.1).

2.4 Massenordnung

Wie aus Gleichung 2.3.8 hervorgeht, hängt die Übergangswahrscheinlichkeit eines Flavour-Eigenzustands in einen anderen von der quadratischen Massendifferenzen $\Delta m_{ij}^2 = m_i^2 - m_j^2$ ab. Demzufolge ist es möglich, mit Hilfe von Neutrinooszillationen die quadratischen Massendifferenzen zu messen. Obwohl es drei mögliche Massendifferenzen (Δm_{21}^2 , Δm_{31}^2 und Δm_{32}^2) gibt, sind nur zwei dieser Parameter frei, da sich der dritte aus den anderen beiden ergibt. Dass das Vorzeichen von Δm_{21}^2 positiv ist, ist bereits aufgrund des MSW-Effekts bei solaren Neutrinos bekannt. Für Δm_{31}^2 ist das Vorzeichen bisher nicht bekannt. Aus dieser Unkenntnis folgen zwei mögliche Massenordnungen, die in Abbildung 2.4 dargestellt sind. Auf der linken Seite ist die normale Ordnung (NO) abgebildet, für die $m_1 < m_2 < m_3$ mit $\Delta m_{31}^2 > 0$ gilt. Auf der rechten Seite ist die invertierte Ordnung (IO) dargestellt. Der Unterschied zur NO liegt darin, dass der Massen-Eigenzustand ν_3 in der IO leichter ist als der Massen-Eigenzustand ν_1 . Es gilt also $m_3 < m_1 < m_2$ mit $\Delta m_{31}^2 < 0$. Die Abstände der Massen-Eigenzustände entsprechen den Beträgen der quadratischen Massendifferenzen.

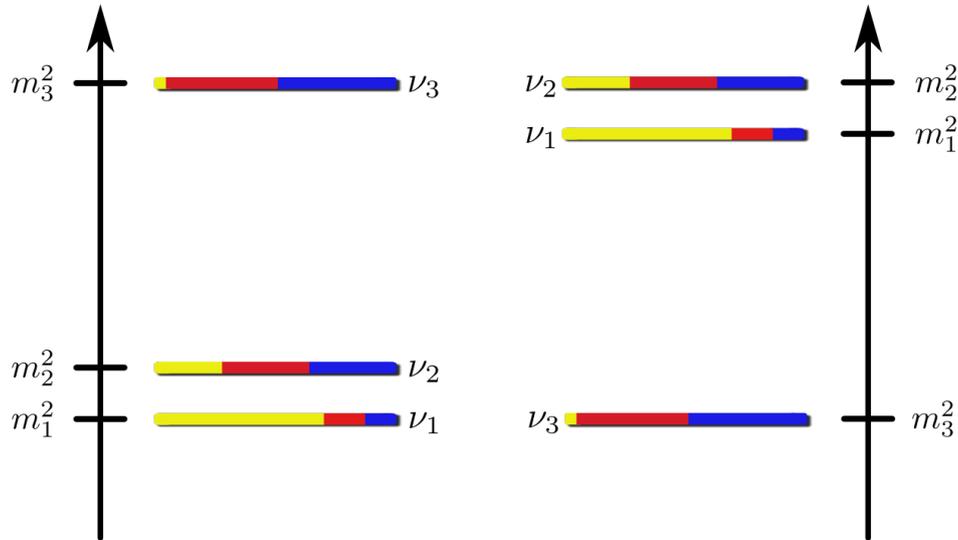


Abbildung 2.4: Schematische Darstellung der beiden Massenordnungen. Links ist die NO und rechts die IO abgebildet. Die Farben zeigen die jeweiligen Anteile der Neutrino-Flavour an den Massen-Eigenzuständen. Hierbei ist das Elektron-Neutrino in Gelb, das Myon-Neutrino in Rot und das Tau-Neutrino in Blau abgebildet. [16]

Die Bestimmung der in der Natur realisierten Massenordnung ist ein wichtiger Schritt, um andere Oszillationsparameter wie z. B. die CP-Phase δ genauer bestimmen zu können. Darüber hinaus würde die Feststellung der Massenordnung das Verständnis von Supernovae verbessern [17]. Zu den Experimenten, die die Massenordnung bestimmen wollen, zählt JUNO, welches im Kapitel 3 eingeführt wird.

2.5 Neutrinoquellen

Dieser Abschnitt beruht auf [18]. Es gibt sowohl natürliche als auch künstliche Neutrinoquellen, die in der Forschung genutzt werden. In Abbildung 2.5 sind für einige Neutrinoquellen die Flüsse auf der Erde in Abhängigkeit der Energie dargestellt. Die Energie reicht von einigen μeV bis hin zu EeV und der Fluss von $10^{-28} \text{ cm}^{-2} \text{ s}^{-1} \text{ sr}^{-1} \text{ MeV}^{-1}$ bis zu $10^{24} \text{ cm}^{-2} \text{ s}^{-1} \text{ sr}^{-1} \text{ MeV}^{-1}$. Fünf häufig genutzten Quellen werden im Folgenden eingeführt.

Solare Neutrinos

Durch Kernfusionsprozesse in der Sonne entstehen ν_e , die als solare Neutrinos bezeichnet werden. Der dominierende Prozess in der Sonne ist der Proton-Proton-Zyklus ($4p \rightarrow {}^4\text{He} + 2e^+ + 2\nu_e + 26.73 \text{ MeV}$). Dieser sorgt auch für das Maximum des Neutrinoflusses der solaren Neutrinos (gelb) bei ca. $10^{-10} \text{ cm}^{-2} \text{ s}^{-1} \text{ sr}^{-1} \text{ MeV}^{-1}$ in Abbildung 2.5. Die solaren Neutrinos haben Energien von einigen keV bis zu 15 MeV.

Atmosphärische Neutrinos

Kosmische Strahlung, die zum Großteil aus Protonen und Heliumkernen besteht, wechselwirkt mit den Molekülen in der Erdatmosphäre. Dabei entstehen unter anderem positiv und negativ geladene Pionen und Kaonen, welche beim Zerfall Neutrinos erzeugen. Das negativ geladene Pion zerfällt fast ausschließlich in Myonen und $\bar{\nu}_\mu$ ($\pi^- \rightarrow \mu^- + \bar{\nu}_\mu$). Das Myon kann seinerseits in ein Elektron, $\bar{\nu}_e$ und ν_μ zerfallen ($\mu^- \rightarrow e^- + \bar{\nu}_e + \nu_\mu$). Analoges gilt für das positiv geladene Pion, wenn bei den Zerfällen die Ladungskonjugation angewendet wird. In der Atmosphäre entstehen also $\nu_e, \bar{\nu}_e, \nu_\mu$ und $\bar{\nu}_\mu$. Die atmosphärischen Neutrinos decken einen großen Energiebereich von ~ 0.1 GeV bis über TeV ab. Wie aus Abbildung 2.5 hervorgeht, nimmt der Neutrinofluss (dunkelgrün) allerdings nach dem Maximum bei einigen MeV mit steigender Energie stark ab.

Supernova Neutrinos

Sterne erzeugen rund 10^{58} Neutrinos aller drei Flavours, wenn sie am Ende ihrer Lebenszeit in einer Supernova explodieren. Bislang gelang es nur ein Mal, Supernova Neutrinos zu detektieren. Sie stammten von der Supernova 1987A, die in einer Entfernung von etwa 55 kpc in der Großen Magellanschen Wolke stattfand. Die Neutrinos hatten bei der Ankunft auf der Erde noch Energien von einigen zehn MeV. Der gemessene Neutrinofluss ist in Abbildung 2.5 in Rot dargestellt.

Reaktor-Neutrinos

Kernkraftwerke gewinnen Energie durch die Kernspaltung radioaktiver Isotope, vor allem die Isotope ^{235}U , ^{238}U , ^{239}Pu und ^{241}Pu . Die dabei entstehenden Spaltprodukte sind instabil und zerfallen über den β^- -Zerfall ($n \rightarrow p + e^- + \bar{\nu}_e$) bis ein stabiles Element erreicht ist. Im Durchschnitt sind dafür 6 β^- -Zerfälle nötig. Dementsprechend werden bei einer Kernspaltung im Mittel 6 $\bar{\nu}_e$ erzeugt und ca. 200 MeV an Energie frei. Ein Kernkraftwerk mit einer thermischen Leistung von 1 GW_{th} produziert demnach etwa $2 \cdot 10^{20} \bar{\nu}_e/\text{s}$. Der Energiebereich der Reaktor-Neutrinos erstreckt sich von ca. 1.8 MeV bis etwa 9 MeV. Der zugehörige Neutrinofluss ist in Abbildung 2.5 in Lila dargestellt.

Beschleuniger-Neutrinos

Beschleuniger-Neutrinos entstehen dadurch, dass hochenergetische Protonen auf ein Ziel geschossen werden, wodurch geladene Pionen und Kaonen entstehen. Über ein Magnetfeld werden die Pionen bzw. Kaonen mit der gewollten Ladung in einen Bereich fokussiert, in dem sie zerfallen sollen. Beim Zerfall entstehen hauptsächlich ν_μ bzw. $\bar{\nu}_\mu$, aber auch geringe Anteile an ν_e bzw. $\bar{\nu}_e$ (siehe atmosphärische Neutrinos).

Alle Teilchen, die nicht in diesem Bereich zerfallen, werden durch einen Absorber oder im Gestein gestoppt. Die meisten Beschleuniger erzeugen Neutrinos mit Energien zwischen 0.5 GeV und 500 GeV.

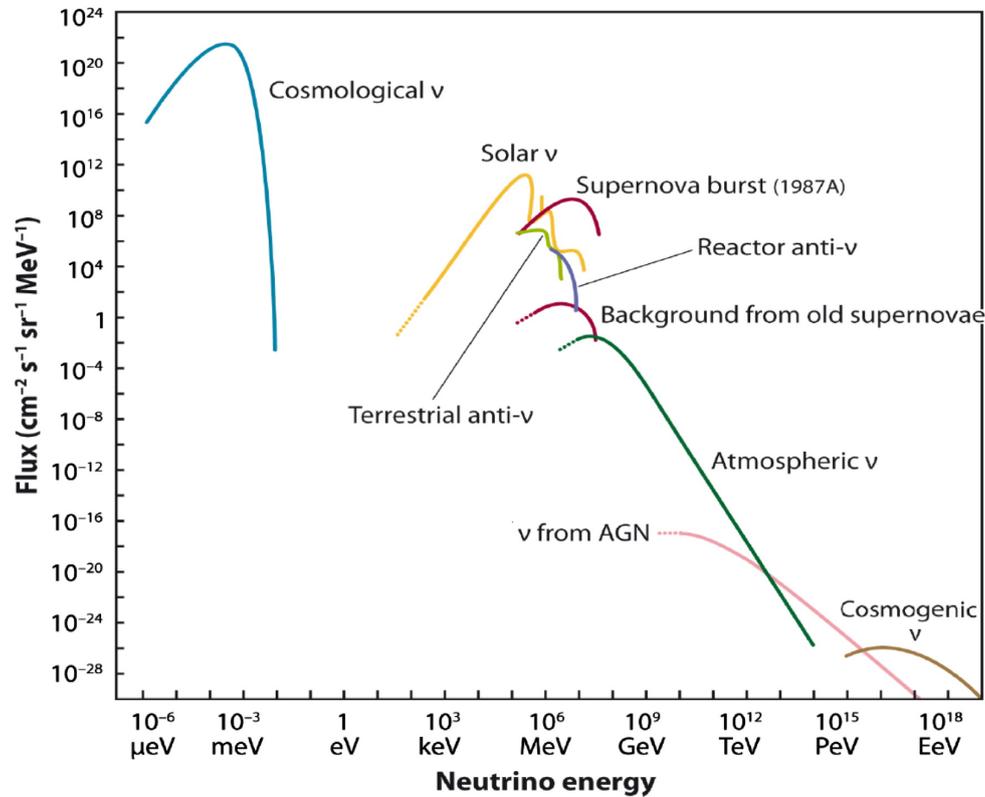


Abbildung 2.5: Neutrinofluss auf der Erde für unterschiedliche Quellen in Abhängigkeit der Neutrinoenergie. [19]

Kapitel 3

Jiangmen Underground Neutrino Observatory

Dieses Kapitel befasst sich mit dem Jiangmen Underground Neutrino Observatory (JUNO), einem 20-kton Flüssigszintillationsdetektor zur Untersuchung von Neutrinos in Jiangmen, China. Zunächst werden die physikalischen Ziele des Experiments aufgeführt. Daraufhin erfolgt eine Erläuterung des Detektionsmechanismus und eine Einführung der dominanten Interaktionen zwischen den Neutrinos und dem Detektor. Abschließend wird der Aufbau des Detektors beschrieben.

3.1 Physikalische Ziele

Dieser Abschnitt beruht auf [17]. Das primäre Ziel des JUNO-Experiments ist die Feststellung der in der Natur realisierten Massenordnung. Sowohl Δm_{21}^2 als auch $|\Delta m_{31}^2|$ bzw. $|\Delta m_{32}^2|$ sind bereits gut bekannt [20], weshalb zur vollständigen Beschreibung nur noch das Vorzeichen von Δm_{31}^2 fehlt. Es bleibt also die Frage zu beantworten, ob der Massen-Eigenzustand ν_3 leichter oder schwerer als der Massen-Eigenzustand ν_1 ist. Dazu werden in JUNO vor allem $\bar{\nu}_e$ aus den Kernkraftwerken Yangjiang und Taishan detektiert, aber auch atmosphärische Neutrinos können für dieses Ziel genutzt werden. Neutrinos, die nicht in der Atmosphäre oberhalb des Detektors erzeugt werden, müssen bis zu $\sim 13\,000$ km der Erde durchdringen, bis sie den Detektor erreichen. Wegen der großen Entfernung und der relativ hohen Dichte der Erde, vor allem des Erdkerns, muss bei der Berechnung der Übergangswahrscheinlichkeiten $P(\nu_\alpha \rightarrow \nu_\beta)$ der MSW-Effekt (siehe Abschnitt 2.3.2) berücksichtigt werden. Unter der bereits bekannten Voraussetzung, dass $\Delta m_{21}^2 \ll |\Delta m_{31}^2|$ gilt [20], ergeben sich so folgende Übergangswahrscheinlichkeiten für die NO:

$$P(\nu_e \rightarrow \nu_e) \approx 1 - \sin^2 2\theta_{13}^m \sin^2 \left[1.27(\Delta m_{31}^2)^m \frac{L}{E_\nu} \right] \quad (3.1.1)$$

$$P(\nu_e \rightarrow \nu_\mu) \approx P(\nu_\mu \rightarrow \nu_e) \approx \sin^2 \theta_{23} \sin^2 2\theta_{13}^m \sin^2 \left[1.27(\Delta m_{31}^2)^m \frac{L}{E_\nu} \right] \quad (3.1.2)$$

$$\begin{aligned} P(\nu_\mu \rightarrow \nu_\mu) \approx & 1 - \cos^2 \theta_{13}^m \sin^2 2\theta_{23} \sin^2 \left[1.27 \frac{\Delta m_{31}^2 + A + (\Delta m_{31}^2)^m}{2} \frac{L}{E_\nu} \right] \\ & - \sin^2 \theta_{13}^m \sin^2 2\theta_{23} \sin^2 \left[1.27 \frac{\Delta m_{31}^2 + A - (\Delta m_{31}^2)^m}{2} \frac{L}{E_\nu} \right] \\ & - \sin^4 \theta_{23} \sin^2 2\theta_{13}^m \sin^2 \left[1.27(\Delta m_{31}^2)^m \frac{L}{E_\nu} \right] \end{aligned} \quad (3.1.3)$$

Hierbei ist $A = 2\sqrt{2}G_F N_e E_\nu$ mit der Fermi-Konstante G_F , der Elektronendichte N_e und der Neutrinoenergie E_ν . Die Einheiten von L , E_ν und Δm_{31}^2 sind km, GeV und eV^2 . Die effektive quadratische Massendifferenz $(\Delta m_{31}^2)^m$ und der effektive Mischwinkel $\sin^2 2\theta_{13}^m$ sind die durch den MSW-Effekt beeinflussten Größen. Sie sind definiert als

$$(\Delta m_{31}^2)^m = \Delta m_{31}^2 \sqrt{(\cos 2\theta_{13} - A/\Delta m_{31}^2)^2 + \sin^2 2\theta_{13}} \quad (3.1.4)$$

$$\sin^2 2\theta_{13}^m = \frac{\sin^2 2\theta_{13}}{(\cos 2\theta_{13} - A/\Delta m_{31}^2)^2 + \sin^2 2\theta_{13}}. \quad (3.1.5)$$

Die Gleichungen 3.1.1-3.1.3 sind nur im Fall $L/E_\nu \ll 13\,263 \text{ km/GeV}$ erfüllt. Die Übergangswahrscheinlichkeiten für Anti-Neutrinos erhält man, wenn in den Gleichungen 3.1.1-3.1.5 A mit $-A$ ersetzt wird. Für den Wechsel zur IO muss ebenfalls das Vorzeichen von Δm_{31}^2 geändert werden. Deshalb verhalten sich Neutrinos in der NO genauso wie Anti-Neutrinos in der IO und vice versa

$$P_{\text{NO}}(\nu_\alpha \rightarrow \nu_\beta) = P_{\text{IO}}(\bar{\nu}_\alpha \rightarrow \bar{\nu}_\beta) \quad \text{und} \quad P_{\text{NO}}(\bar{\nu}_\alpha \rightarrow \bar{\nu}_\beta) = P_{\text{IO}}(\nu_\alpha \rightarrow \nu_\beta). \quad (3.1.6)$$

Für Neutrinos in der NO und Anti-Neutrinos in der IO kann der effektive Mischwinkel aus Gleichung 3.1.5 maximal werden ($\sin^2 2\theta_{13}^m \rightarrow 1$), wenn $A \rightarrow \Delta m_{31}^2 \cos 2\theta_{13}$. Dies wird auch als MSW-Resonanz bezeichnet und ist auf der Erde für den Energiebereich $E_\nu \approx 3 - 10 \text{ GeV}$ der Fall. Die Gleichungen 3.1.1-3.1.3 zeigen in diesem Fall deutliche Unterschiede zwischen den beiden möglichen Massenordnungen, welche in Oszillogrammen der Übergangswahrscheinlichkeit $P(\nu_\alpha \rightarrow \nu_\beta)$ sichtbar werden, in derer die Übergangswahrscheinlichkeit in Abhängigkeit des Zenith-Winkels θ und der Neutrinoenergie E_ν dargestellt wird. In Abbildung 3.1 sind beispielhaft Oszillogramme der Überlebenswahrscheinlichkeit von ν_e und $\bar{\nu}_e$ unter der Annahme der NO abgebildet. In beiden Oszillogrammen fällt auf, dass bei $\cos \theta = -0.82$ ein energieunabhängiger Sprung in der Überlebenswahrscheinlichkeit auftaucht. Dieser resultiert daraus, dass Neutrinos mit

$\cos \theta \leq -0.82$ den dichten Erdkern durchdringen. Auch die Auswirkung der MSW-Resonanz ist gut zu erkennen. Während die Überlebenswahrscheinlichkeit für $\bar{\nu}_e$ oberhalb von 1 GeV θ -unabhängig nahe 1 liegt, verhält sich die Überlebenswahrscheinlichkeit für ν_e im Energiebereich von $E_\nu \approx 3 - 10$ GeV deutlich anders. Vor allem ν_e mit etwa 6 GeV und $0.4 \leq \cos \theta \leq -0.8$ haben eine Überlebenswahrscheinlichkeit nahe 0. In der IO würden sich die Oszillogramme wegen Gleichung 3.1.6 genau andersherum verhalten, sodass die in der Natur realisierte Massenordnung über solche Oszillogramme bestimmt werden kann. Hierfür ist es erforderlich, sowohl festzustellen, ob es sich um eine Wechselwirkung mit einem Neutrino oder Anti-Neutrino handelt, als auch eine Rekonstruktion der Energie und Richtung vorzunehmen.

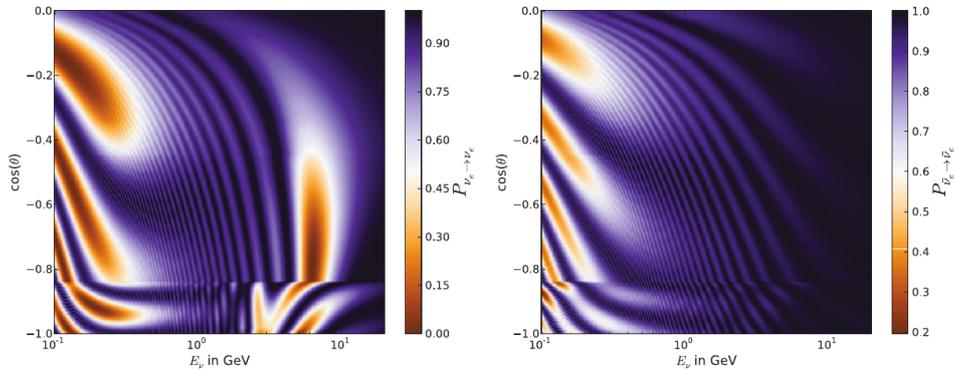


Abbildung 3.1: Oszillogramme der Überlebenswahrscheinlichkeit der ν_e (links) und $\bar{\nu}_e$ (rechts) unter der Annahme der NO. Die MSW-Resonanz wird vor allem dadurch deutlich, dass ν_e mit etwa 6 GeV und $0.4 \leq \cos \theta \leq -0.8$ eine Überlebenswahrscheinlichkeit nahe 0 haben, während die Überlebenswahrscheinlichkeit bei den $\bar{\nu}_e$ nahe 1 liegt. [17]

Atmosphärische Neutrinos sind darüber hinaus auch bei der Bestimmung der CP-Phase δ und bei der Bestimmung des richtigen Oktanten des Mischwinkels θ_{23} ($\theta_{23} < 45^\circ$ oder $\theta_{23} > 45^\circ$) hilfreich.

3.2 Detektionsmechanismus

JUNO ist ein Flüssigszintillationsdetektor. Da Neutrinos keine elektrische Ladung tragen, können sie mit einem solchen Detektor nicht direkt detektiert werden. Stattdessen werden die bei der SWW entstandenen geladenen Teilchen detektiert. Wie geladene Teilchen durch Szintillations- und Cherenkov-Detektoren nachgewiesen werden können, wird im folgenden Abschnitt beschrieben.

3.2.1 Szintillation

Dieser Abschnitt beruht auf [21]. Szintillation ist die Eigenschaft eines Materials, Licht freizusetzen, wenn geladene Teilchen oder Photonen das Material durchdringen. Die geladenen Teilchen geben beim Durchfliegen Energie über verschiedene Interaktionen an die Moleküle des Materials ab. Hierbei ist es wichtig zwischen Elektronen bzw. Positronen und schwereren Teilchen zu unterscheiden.

Aufgrund ihrer geringen Masse dominiert bei Elektronen und Positronen die Bremsstrahlung den Energieverlust in Materie. Unter Bremsstrahlung versteht man die Abstrahlung von Photonen durch Teilchen bzw. Anti-Teilchen, wenn diese durch das Coulomb-Feld von Atomen oder Molekülen beschleunigt werden.

Die schweren Teilchen übertragen vor allem den Elektronen der Atome bzw. Moleküle des Materials durch elastische und inelastische Stöße Energie, wodurch sie angeregt oder ionisiert werden. Die angeregten Atome bzw. Moleküle geben die übertragene Energie in Form von Photonen nach einer kurzen Zeit wieder ab. Bei dem Großteil der Stöße ist der Energieverlust mit weniger als 100 eV gering. Der maximale Energietransfer W_{max} während eines Stoßes an ein Elektron ist gegeben durch

$$W_{max} = \frac{2m_e c^2 \beta^2 \gamma^2}{1 + 2\gamma m_e/M + (m_e/M)^2}. \quad (3.2.1)$$

Der mittlere Energieverlust $\langle -\frac{dE}{dx} \rangle$ kann für Teilchen, die $0.1 \lesssim \beta\gamma \lesssim 1000$ erfüllen, gut durch die Bethe-Bloch-Formel beschrieben werden

$$\left\langle -\frac{dE}{dx} \right\rangle = K z^2 \frac{Z}{A} \frac{1}{\beta^2} \left[\frac{1}{2} \ln \left(\frac{2m_e c^2 \beta^2 \gamma^2 W_{max}}{I^2} \right) - \beta^2 - \frac{\delta(\beta\gamma)}{2} \right]. \quad (3.2.2)$$

Die Größen aus den Gleichung 3.2.1 und 3.2.2 sind in der Tabelle 3.1 benannt.

Tabelle 3.1: Definition der Größen für die Gleichungen 3.2.1 und 3.2.2.

Symbol	Definition	Symbol	Definition
M	Teilchenmasse	A	Atommasse des Materials
m_e	Elektronenmasse	I	Mittlere Energie für Ionisation
β	v/c	$\delta(\beta\gamma)$	Dichte-Effekt-Korrektur
γ	Lorentzfaktor $1/\sqrt{1-\beta^2}$	K	$4\pi N_A r_e^2 m_e c^2$
z	Ladungszahl des Teilchens	N_A	Avogadro-Konstante
Z	Ladungszahl des Materials	r_e	klassischer Elektronenradius

Die durch die Bremsstrahlung oder durch Stöße mit den Atomen bzw. Molekülen des Materials entstandenen Photonen können mit „Photomultiplier Tubes“ (PMTs) detektiert werden. Da die Menge an Szintillationsphotonen in erster Näherung proportional zur deponierten Energie des geladenen Teilchens ist, ermöglichen Szintillationsdetektoren eine Energierekonstruktion.

3.2.2 Cherenkov-Strahlung

Dieser Abschnitt beruht auf [4]. Ist die Phasengeschwindigkeit des Lichts v_p innerhalb eines Mediums geringer als die Lichtgeschwindigkeit c im Vakuum, ist es für ein Teilchen möglich, in diesem Medium eine größere Geschwindigkeit v als die Phasengeschwindigkeit des Lichts zu haben. In diesem Fall kommt es bei geladenen Teilchen in dielektrischen Medien zur sogenannten Cherenkov-Strahlung. Entlang des Pfads polarisieren die geladenen Teilchen die Atome bzw. Moleküle des Mediums, welche dadurch angeregt werden. Durch die Abgabe elektromagnetischer Wellen regen sich diese wieder ab. Aufgrund der hohen Geschwindigkeit des Teilchens überlagern sich die entstandenen elektromagnetischen Wellen konstruktiv und bilden eine gemeinsame charakteristische Kegelwellenfront aus. Die Bedingung für Cherenkov-Strahlung ist gegeben durch

$$v > v_p = \frac{c}{n}, \quad (3.2.3)$$

wobei n der Brechungsindex des Mediums ist. Wasser eignet sich aufgrund eines Brechungsindex von $n = 1.33$ gut als Medium eines Cherenkov-Detektors. Der Öffnungswinkel der Wellenfront, der in Abbildung 3.2 schematisch dargestellt ist, berechnet sich über

$$\cos \theta = \frac{1}{n\beta}. \quad (3.2.4)$$

In Abbildung 3.2 sind beispielhaft sieben beliebige Punkte entlang der Bewegungsrichtung eines Teilchens (rot) gewählt, an denen sich Atome bzw. Moleküle durch die Abgabe von elektromagnetischen Wellen (blau) abregen. Diese bilden die Kegelwellenfront aus, die ebenfalls in Blau dargestellt ist. In einem Detektor können Querschnitte dieser Wellenfront mit Hilfe von PMTs gemessen werden. Die Querschnitte sind ellipsenförmig und werden als Cherenkov-Ringe bezeichnet. Bewegt sich ein Teilchen in Richtung der PMTs, können immer kleiner werdende Cherenkov-Ringe beobachtet werden. Mit Hilfe dieser Information können Rückschlüsse auf die Trajektorie des Teilchens gezogen werden.

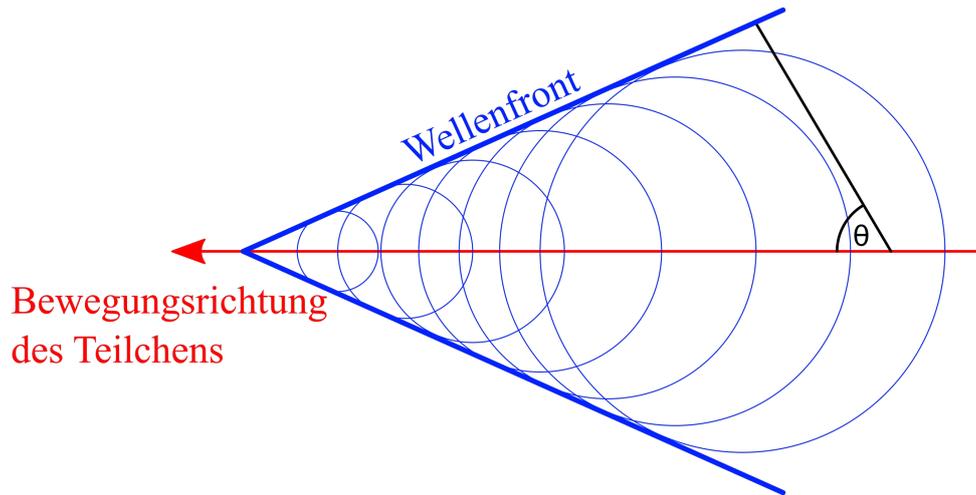


Abbildung 3.2: Schematische Darstellung der Cherenkov-Strahlung. Ein geladenes Teilchen mit $v > v_p$ bewegt sich in Richtung des roten Pfeils. Entlang des Pfades werden Atome bzw. Moleküle des Mediums polarisiert. Beim Abregen setzen sie elektromagnetische Wellen frei, die eine kegelförmige Wellenfront bilden, die hier in Blau dargestellt ist. Der Winkel θ beschreibt, wie weit der Kegel geöffnet ist.

3.3 Interaktionskanäle

Dieser Abschnitt beruht auf [22]. Im Energiebereich von 1 GeV bis 15 GeV gibt es drei dominante Wechselwirkungen zwischen den atmosphärischen Neutrinos und dem Szintillator, die als Neutrino-Nukleus-Interaktionen zusammengefasst werden. Zu ihnen zählen sowohl CC- als auch NC-Interaktionen. Während bei einer CC-Interaktion das Neutrino in das zugehörige geladene Lepton übergeht, bleibt es bei einer NC-Interaktion erhalten. Im Folgenden werden die dominanten Interaktionen eingeführt.

Quasi-elastische Streuung (QEL) $\nu_\ell + p/n \rightarrow \ell + p/n$

QEL ist eine reine CC-Interaktion, bei der ein Neutrino mit einem Nukleon wechselwirkt, wodurch es in das zugehörige geladene Lepton umgewandelt wird. Das Nukleon wird ebenfalls umgewandelt, d. h. das Neutron geht über in ein Proton oder vice versa. Für Neutrinoenergien unterhalb von ~ 2 GeV ist die Wechselwirkung zwischen Neutrinos und Hadronen überwiegend quasi-elastisch.

Resonanzproduktion (RES) $\nu_\ell + p/n \rightarrow \nu_\ell/\ell + N^* \rightarrow \nu_\ell/\ell + p/n + m$

Hat ein Neutrino genug Energie, ist es in der Lage ein Nukleon durch einen Stoß in einen Resonanzzustand N^* anzuregen, welcher jedoch schnell wieder in ein Nukleon und ein Meson m zerfällt. Beim Meson handelt es sich meistens um ein Pion. RES tritt vor allem bei Neutrinos mit Energien zwischen 1 – 10 GeV auf.

Tief-inelastische Streuung (DIS) $\nu + p/n \rightarrow \nu/\ell + X$

DIS bezeichnet die Wechselwirkung eines Neutrinos mit einem Quark eines Nukleons. Infolgedessen bricht das Nukleon auseinander und es entsteht ein hadronischer Schauer. Für DIS sind Neutrinoenergien von mindestens 1 GeV nötig und ab etwa 10 GeV ist es der dominante Prozess.

3.4 Detektoraufbau

Dieser Abschnitt beruht auf [23]. JUNO befindet sich in Jiangmen, einer Stadt in der chinesischen Provinz Guangdong. Der Standort wurde so gewählt, dass der Detektor jeweils etwa 53 km von den Kernkraftwerken Yangjiang und Taishan entfernt steht. Der JUNO-Detektor setzt sich aus drei Detektoren zusammen, dem „Central Detector“ (CD), dem Cherenkov-Detektor und dem „Top-Tracker“ (TT). In Abbildung 3.3 ist der Detektor schematisch dargestellt.

3.4.1 Central Detector

Der CD ist eine Acryl-Kugel mit einem Durchmesser von 35.4 m. Als Szintillationsflüssigkeit wird Linearalkylbenzol (LAB) genutzt, was sich unter anderem aufgrund der hervorragenden Transparenz und einer guten Lichtausbeute eignet. Zum LAB werden noch 2.5 g/L 2,5-Diphenyloxazol (PPO) als Fluor und 3 mg/L p-Bis(o-methylstyryl)benzol (bis-MSB) als Wellenlängenschieber beigemischt. PPO und bis-MSB verschieben zusammen die Wellenlänge des emittierten Photons zu einer Wellenlänge von etwa 430 nm. Dadurch erreicht JUNO eine Absorptionslänge von rund 25 m. Außerdem ist die Quanteneffizienz der verwendeten PMTs in diesem Wellenlängenbereich am größten. Diese sind auf der Innenseite einer Stahlkonstruktion angebracht, die den CD komplett umschließt. Insgesamt sind es 17 612 20-inch PMTs (LPMTs) mit einer mittleren Photon-Detektionseffizienz von 29.1 % und 25 600 3-inch PMTs (SPMTs), die eine mittlere Photon-Detektionseffizienz von $\sim 24\%$ aufweisen. Die SPMTs sind in den Zwischenräumen der LPMTs platziert, sodass sie zusammen 77.9 % des CD abdecken. Um JUNOs primäres Ziel zu erreichen, ist eine Energieauflösung von $3\%/\sqrt{E[\text{MeV}]}$ nötig [24]. Simulationen ergaben für den CD eine Lichtausbeute von 1345 Photoelektronen pro MeV und eine Energieauflösung von $3.02\%/\sqrt{E[\text{MeV}]}$.

3.4.2 Myon-Veto-System

Das Myon-Veto-System ist dafür zuständig, den von den kosmischen Myonen verursachten Untergrund größtmöglich zu minimieren. Es setzt sich aus einem Cherenkov-Detektor und dem TT zusammen. Der Cherenkov-Detektor ist ein zylindrischer Tank mit einem Durchmesser von 43.5 m und eine Höhe von 44 m, worin sich der CD befindet. Als Medium wird ultrareines Wasser genutzt. An der Außenwand der Stahlkonstruktion des CD sind 2400 20-inch PMTs angebracht, die die Cherenkov-Strahlung detektieren. Die primäre Aufgabe des Cherenkov-Detektors ist die Messung von kosmischen Myonen. Ein Großteil der kosmischen Myonen erreicht den CD aufgrund der Tiefe von rund 700 m nicht. Dennoch ist die Myonenrate auf Höhe des Detektors noch ca. 0.004 Hz/m^2 . Die durchschnittliche Energie dieser Myonen liegt bei etwa 207 GeV. Der Wassertank schützt den CD gleichzeitig auch noch vor den radioaktiven Quellen des umliegenden Gesteins. Oberhalb des CD befindet sich der TT, dessen Aufgabe die genaue Messung der Flugrichtung der kosmischen Myonen ist. Der TT stammt aus dem OPERA-Experiment und besteht aus 62 Plastik-Szintillationswänden jeweils mit einer sensitiven Fläche von $6.7 \times 6.7 \text{ m}^2$. Insgesamt decken die Wände mehr als 25 % der Oberfläche des Wassertanks ab.

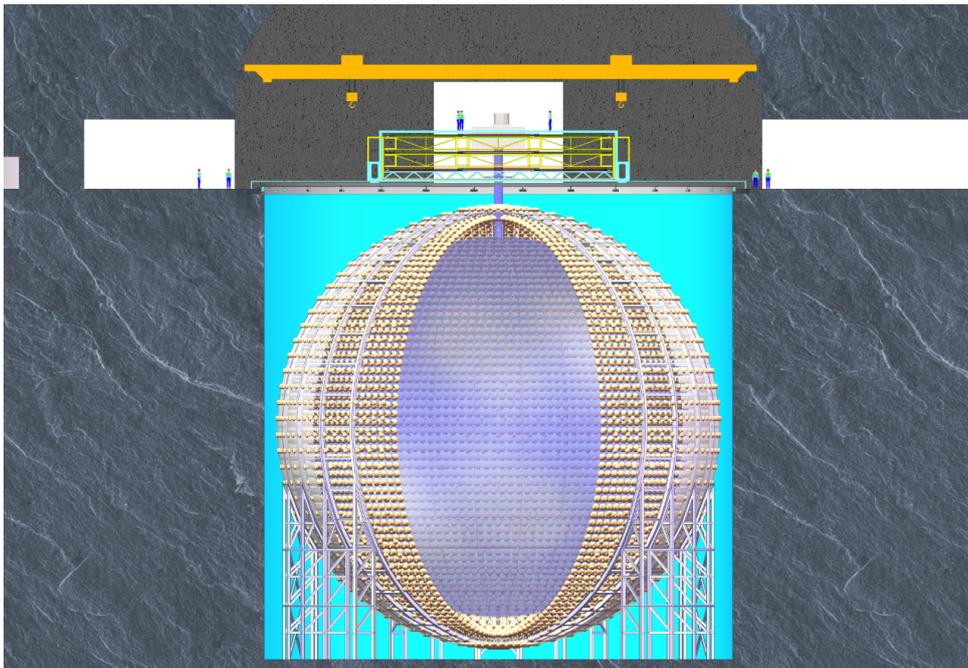


Abbildung 3.3: Schematische Darstellung des JUNO-Dektors. In der Mitte der Abbildung befindet sich der CD mit einem Durchmesser von 35.4 m. Die Szintillationsflüssigkeit ist in Dunkelblau dargestellt. Auf der Innenseite der Stahlkonstruktion sind die 17 612 LPMTs als gelbe Birnen abgebildet. Die 25 600 SMPTs sind in dieser Darstellung nicht zu sehen. Die gelben Birnen auf der Außenseite der Stahlkonstruktion stellen die 2400 20-inch PMTs und die hellblaue Flüssigkeit das Wasser des Cherenkov-Detektors dar. Der TT befindet sich oberhalb des Cherenkov-Detektors auf einer gelben Konstruktion.

Kapitel 4

Einführung in Neuronale Netze

Das Nervensystem des Menschen besteht aus unzähligen Zellen, die Neuronen genannt werden und über Synapsen miteinander verbunden sind. Lernen führt zur Stärkung bestimmter Verbindungen, während nicht mehr benötigte Verbindung getrennt werden. Künstliche Neuronale Netze sind angelehnt an das Nervensystem des Menschen. Sie bestehen ebenfalls aus Neuronen, die miteinander verbunden sind. Die Stärke einer Verbindung ist durch das zugehörige Gewicht bestimmt. Künstliche Neuronale Netze, die im Folgenden nur noch als Neuronale Netze (NN) bezeichnet werden, eignen sich hervorragend dafür, Muster in Datensätzen zu erkennen. Daher werden sie unter anderem für Klassifikationsaufgaben genutzt. Dieses Kapitel dient als Einführung in NN. Dazu wird zunächst der grundlegende Aufbau eines NN erläutert. Anschließend werden das Training und die Evaluation eines NN behandelt. Dieses Kapitel basiert zum Großteil auf [25]. Bezieht sich ein Abschnitt auf andere Referenzen, werden diese zu Beginn genannt.

4.1 Neuronen

Im Allgemeinen bilden mehrere Neuronen eines NN eine Schicht. Während die Neuronen unterschiedlicher Schichten miteinander verbunden sind, bestehen zwischen Neuronen derselben Schicht keine Verbindungen. Das j -te Neuron aus der l -ten Schicht berechnet zunächst die gewichtete Summe aller Parameter $a_0^{(l-1)}, \dots, a_n^{(l-1)}$, die es aus der vorherigen Schicht erhalten hat und addiert zu dieser den sogenannten Bias b

$$z_j^{(l)} = \sum_{k=0}^n w_{jk}^{(l)} a_k^{(l-1)} + b_j^{(l)} \quad \text{für } l > 0. \quad (4.1.1)$$

Hierbei ist $w_{jk}^{(l)}$ das Gewicht der Verbindung zwischen dem j -ten Neuron aus der l -ten Schicht und dem k -ten Neuron aus der $(l-1)$ -ten Schicht. Ein n -schichtiges NN, welches an jedem Neuron nur die lineare Regression aus Gleichung 4.1.1 durchführt, kann auch durch ein NN mit nur einer einzigen Schicht beschrieben werden. Außerdem kann ein

solches lineares NN keine nicht-linearen Zusammenhänge in Daten erfassen. Deshalb wird auf das Ergebnis aus Gleichung 4.1.1 eine nicht-lineare Aktivierungsfunktion Φ angewendet

$$a_j^{(l)} = \Phi(z_j^{(l)}) . \quad (4.1.2)$$

$a_j^{(l)}$ wird im Folgenden als Aktivierungslevel des j -ten Neurons aus der l -ten Schicht bezeichnet. Die bekanntesten Aktivierungsfunktionen sind die Sigmoid-Funktion, der Tangens hyperbolicus (tanh) und „Rectified Linear Unit“ (ReLU). Der Verlauf dieser Funktionen ist in Abbildung 4.1 dargestellt.

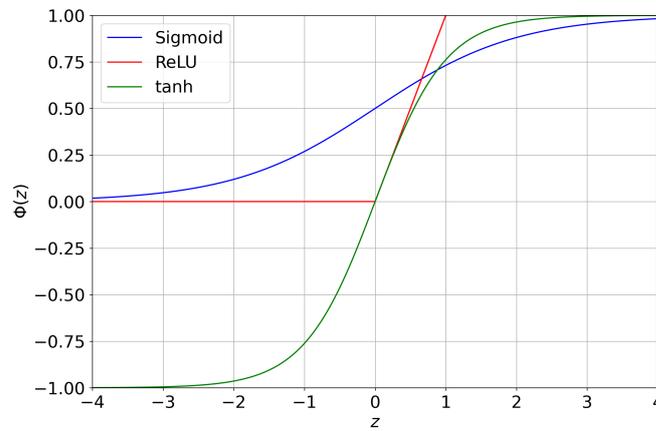


Abbildung 4.1: Verlauf der Sigmoid- und ReLU-Funktion sowie des Tangens hyperbolicus.

Der blaue Verlauf entspricht der Sigmoid-Funktion S , die kleine negative Werte auf 0 abbildet und dann stetig ansteigt, bis sie schließlich große positive Werte auf 1 abbildet

$$S(z) = \frac{1}{1 + \exp(-z)} . \quad (4.1.3)$$

Sie eignet sich aufgrund des Wertebereichs vor allem dann, wenn das Ergebnis als Wahrscheinlichkeit interpretiert werden soll. Der Verlauf des tanh (grün) ähnelt dem der Sigmoid-Funktion, mit dem Unterschied, dass der tanh kleine negative Werte auf -1 anstatt auf 0 abbildet

$$\tanh(z) = \frac{\exp(2z) - 1}{\exp(2z) + 1} . \quad (4.1.4)$$

Der tanh hat gegenüber der Sigmoid-Funktion den Vorteil, dass auch negative Werte als Ergebnisse möglich sind. Außerdem bildet der tanh Werte nahe 0 auf Werte nahe 0 ab, was das Training eines NN vereinfacht. Die meistgenutzte Aktivierungsfunktion in NN ist die ReLU-Funktion

$$\text{ReLU}(z) = \max(0, z) . \quad (4.1.5)$$

Der Verlauf der ReLU-Funktion ist in Abbildung 4.1 in Rot dargestellt. Sie bildet alle negativen Werte auf 0 ab und geht für positive Werte in die Identitätsfunktion über.

In Abbildung 4.2 ist die Funktionsweise eines Neurons schematisch anhand eines NN mit einer Eingabe- und einer Ausgabeschicht dargestellt. Die Eingabeschicht besteht aus drei Neuronen mit den Eingabeparametern $a_0^{(0)}$, $a_1^{(0)}$ und $a_2^{(0)}$, die alle mit dem Neuron aus der Ausgabeschicht verbunden sind. Das Neuron der Ausgabeschicht berechnet zunächst die gewichtete Summe aus Gleichung 4.1.1, was durch das Σ symbolisiert wird. Anschließend wird eine Aktivierungsfunktion Φ auf das Ergebnis angewendet, sodass die Ausgabe des Neurons das Aktivierungslevel $a_0^{(1)}$ ist.

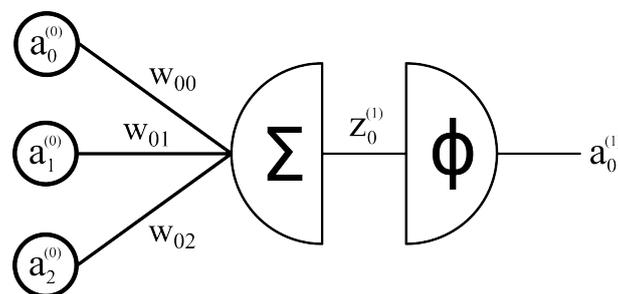


Abbildung 4.2: Schematische Darstellung der Funktionsweise eines Neurons. Das Neuron aus der Ausgabeschicht erhält die Parameter der Eingabeschicht und bildet die gewichtete Summe aus Gleichung 4.1.1, was durch das Σ symbolisiert wird. Daraufhin wird auf das Ergebnis $z_0^{(1)}$ eine Aktivierungsfunktion Φ angewendet.

4.2 Aufbau

Im Allgemeinen besteht ein NN aus n -Schichten, einer Eingabe-, $(n - 1)$ verborgenen und einer Ausgabeschicht. Die Anzahl der Neuronen in der Eingabeschicht hängt von der Menge an Parametern ab, die dem Netz mitgegeben werden, denn jedes Neuron in der Eingabeschicht entspricht einem Eingabeparameter. Die Eingabeparameter eines NN werden häufig auch als Features bezeichnet. Jedes Neuron der Eingabeschicht gibt jedes Feature, ohne Berechnungen durchzuführen, an die Neuronen der ersten verborgenen Schicht weiter. Daher wird bei der Angabe der Anzahl an Schichten eines NN die Eingabeschicht häufig nicht berücksichtigt. Die Anzahl an Neuronen in verborgenen Schichten und die Menge an verborgenen Schichten hängen von der Komplexität des Problems ab. Je komplexer ein Problem ist, desto komplexer muss auch das NN sein und die Komplexität des Netzes nimmt mit der Anzahl an verborgenen Schichten und Neuronen zu. Die Menge an Neuronen in der Ausgabeschicht hängt davon ab, wie viele Ausgabeparameter benötigt werden, denn genau wie in der Eingabeschicht entspricht ein Neuron in der Ausgabeschicht einem Ausgabeparameter. Alle Neuronen der verborgenen und der Ausgabeschicht führen

die Berechnungen des vorherigen Abschnitts 4.1 durch. Ein NN, bei dem alle Neuronen einer Schicht mit allen Neuronen aus der vorherigen Schicht verbunden sind, bezeichnet man als vollständig verbundenes NN (engl. „Fully Connected Neural Network“ FCNN). Ein Beispiel eines zweischichtigen FCNN ist in Abbildung 4.3 dargestellt. Es setzt sich aus zwei Neuronen in der Eingabe-, fünf in der verborgenen und einem Neuron in Ausgabeschicht zusammen.

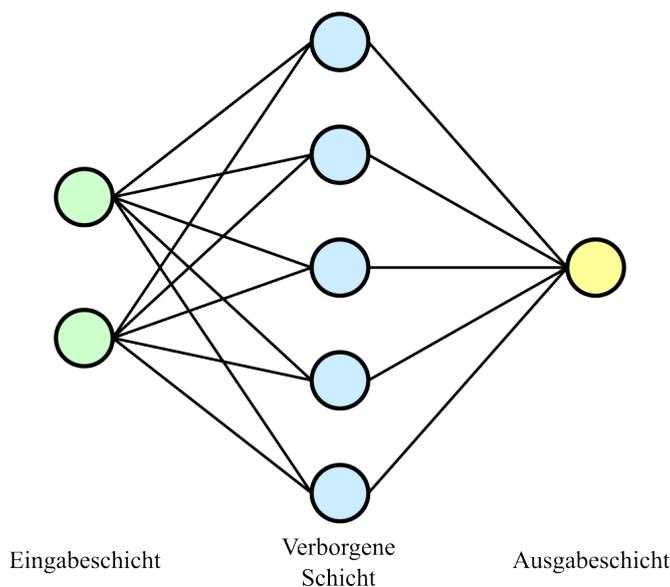


Abbildung 4.3: Schematische Darstellung eines zweischichtigen FCNN. Die Eingabeschicht besteht aus zwei, die verborgene Schicht aus fünf und die Ausgabeschicht aus einem Neuron. [26]

4.3 Training

Das Ergebnis der Ausgabeparameter eines NN ist offensichtlich primär von den Gewichten und Biases abhängig. Zu Beginn hat ein NN keinerlei Informationen über die zu untersuchenden Daten. Daher werden alle Gewichte und Biases zunächst zufällig gewählt, wodurch das Netz anfangs keine Muster in Daten erkennen kann. Das Ziel beim Training eines NN besteht also darin, im Verlauf die Gewichte und Biases so anzupassen, dass das Netz schließlich in der Lage ist, Muster in den Datensätzen zu erkennen. Die Trainingsmethode, die in dieser Bachelorarbeit genutzt wird, nennt sich überwachtes Lernen.

4.3.1 Überwachtes Lernen

Überwachtes Lernen zeichnet sich dadurch aus, dass die richtigen Ausgabewerte der Ausgabeschicht bereits bekannt sind. Der zu untersuchende Datensatz besteht also nicht nur aus den Features, sondern auch aus den richtigen Zielwerten. Bevor das Training beginnt, wird der Datensatz in einen Trainings- und einen Testdatensatz aufgeteilt. Typischerweise werden 75 – 80 % der Daten für den Trainings- und 20 – 25 % für den Testdatensatz verwendet. Bekäme ein NN die Daten eines großen Datensatzes auf einmal, wäre die Berechnungszeit viel zu lang. Außerdem könnte es sich nur selten an die Daten anpassen. Daher werden sowohl der Trainings- als auch der Testdatensatz in Batches der Größe N unterteilt. Im Verlauf des Trainings erhält das NN nach und nach die einzelnen Batches. Hat es alle Batches ein Mal erhalten, spricht man davon, dass es eine Epoche lang trainiert wurde. Für das Training ist noch eine Funktion C nötig, die den durch das Netz vorhergesagten Wert mit dem Zielwert vergleicht. Eine solche Funktion wird als Verlustfunktion bezeichnet. Ist die Vorhersage des NN schlecht, soll sie einen großen Wert annehmen und für eine gute Vorhersage einen Wert nahe 0. Im Falle einer binären Klassifikationsaufgabe wird häufig die „Binary Cross-Entropy Loss“-Funktion (BCELoss) genutzt

$$C = -\frac{1}{N} \sum_{i=0}^N \alpha_i [y_i \log(\hat{y}_i) + (1 - y_i) \log(1 - \hat{y}_i)] . \quad (4.3.1)$$

Hierbei ist N die Batchgröße, α_i das Gewicht der jeweiligen Klasse, y_i die Zielwerte und \hat{y}_i die Vorhersagen des NN. Der Zielwert y_i ist entweder 0 für die erste oder 1 für die zweite Klasse. Die Gewichte α_i werden bei unausgewogenen Datensätzen benötigt, bei denen der Anteil einer Klasse größer ist als der Anteil der anderen Klasse. Ohne die Gewichtung würde ein NN die Muster der überrepräsentierten Klasse deutlich besser erkennen als die der unterrepräsentierten. Infolgedessen wäre die Vorhersagekraft des NN unbrauchbar. Es gibt unterschiedliche Formeln, mit denen Gewichte berechnen werden können, die dies verhindern. In dieser Bachelorarbeit wird die folgende genutzt

$$\alpha = \frac{N_{total}}{2N_{class}} . \quad (4.3.2)$$

N_{total} ist hier die Gesamtzahl an Daten des Datensatzes und N_{class} der Anteil einer Klasse. Die Gewichte und Biases sollen nun so angepasst werden, dass die Verlustfunktion minimiert wird. Dazu wird der Backpropagation-Algorithmus verwendet.

4.3.2 Backpropagation

Dieser Abschnitt basiert auf [27]. Mit Hilfe der Backpropagation möchte man verstehen, wie die Gewichte und Biases angepasst werden müssen, um die Verlustfunktion zu minimieren. Das Ziel der Backpropagation ist somit die Bestimmung der partiellen Ableitung der Verlustfunktion nach einem beliebigen Gewicht $\partial C/\partial w_{jk}^{(l)}$ oder Bias $\partial C/\partial b_j^{(l)}$ aus einer beliebigen Schicht l . Dazu führt man die Hilfsgröße $\delta_j^{(l)}$ ein, die als Fehler des j -ten Neurons aus der l -ten Schicht bezeichnet wird

$$\delta_j^{(l)} \equiv \frac{\partial C}{\partial z_j^{(l)}}. \quad (4.3.3)$$

Zunächst werden die Fehler für die Neuronen der Ausgangsschicht L mit Hilfe der Kettenregel berechnet, um die Fehler aus den vorherigen Schichten rekursiv bestimmen zu können

$$\delta_j^{(L)} = \sum_k \frac{\partial C}{\partial a_k^{(L)}} \frac{\partial a_k^{(L)}}{\partial z_j^{(L)}}. \quad (4.3.4)$$

Die obige Summe läuft über alle Neuronen in der Ausgangsschicht. Unter der Annahme, dass das Aktivierungslevel $a_k^{(L)}$ nur von $z_j^{(L)}$ mit $j = k$ abhängig ist, vereinfacht sich die Summe zu

$$\delta_j^{(L)} = \frac{\partial C}{\partial a_j^{(L)}} \Phi'(z_j^{(L)}), \quad (4.3.5)$$

wobei $\Phi'(z_j^{(l)}) = \partial a_j^{(L)} / \partial z_j^{(L)}$ gilt. Diese Annahme erfüllen alle Aktivierungsfunktionen aus den Gleichungen 4.1.3 bis 4.1.5. Als Nächstes wird eine Gleichung benötigt, die beschreibt, wie der Fehler des k -ten Neurons aus der l -ten Schicht von den Fehlern der Neuronen aus der $(l + 1)$ -Schicht abhängt. Auch hierfür ist die Kettenregel hilfreich

$$\begin{aligned} \delta_j^{(l)} &= \sum_k \frac{\partial C}{\partial z_k^{(l+1)}} \frac{\partial z_k^{(l+1)}}{\partial z_j^{(l)}} \\ &= \sum_k \frac{\partial z_k^{(l+1)}}{\partial z_j^{(l)}} \delta_k^{(l+1)}. \end{aligned} \quad (4.3.6)$$

In der letzten Zeile wurde $\partial C/\partial z_k^{(l+1)}$ durch $\delta_k^{(l+1)}$ ersetzt, da dies der Definition aus Gleichung 4.3.3 entspricht. Mit Hilfe von Gleichung 4.1.1 vereinfacht sich Gleichung 4.3.6 zu

$$\delta_j^{(l)} = \sum_k w_{kj}^{(l+1)} \delta_k^{(l+1)} \Phi'(z_j^{(l)}). \quad (4.3.7)$$

Mit den Gleichungen 4.3.5 und 4.3.7 lassen sich die Fehler aller Neuronen eines NN berechnen. Außerdem können darüber auch $\partial C/\partial w_{jk}^{(l)}$ und $\partial C/\partial b_j^{(l)}$ bestimmt werden

$$\begin{aligned}\frac{\partial C}{\partial w_{jk}^{(l)}} &= \sum_k \frac{\partial C}{\partial z_k^{(l)}} \frac{\partial z_k^{(l)}}{\partial w_{jk}^{(l)}} \\ &= \delta_j^{(l)} a_k^{(l-1)}\end{aligned}\quad (4.3.8)$$

$$\begin{aligned}\frac{\partial C}{\partial b_j^{(l)}} &= \sum_k \frac{\partial C}{\partial z_k^{(l)}} \frac{\partial z_k^{(l)}}{\partial b_j^{(l)}} \\ &= \delta_j^{(l)}.\end{aligned}\quad (4.3.9)$$

Um auf die Gleichungen 4.3.8 und 4.3.9 zu kommen, wurde erneut die Definition aus Gleichung 4.3.3 genutzt. Die Ableitung konnten aufgrund von Gleichung 4.1.1 explizit berechnet werden.

Der Backpropagation-Algorithmus kann schließlich in fünf Schritte unterteilt werden. Zur besseren Übersicht werden die Gleichungen in Matrixform angegeben. Dazu werden die Gewichte, die die $(l-1)$ -te Schicht mit der l -ten Schicht verbinden, so in der Matrix $W^{(l)}$ zusammengefasst, dass $w_{jk}^{(l)}$ der Eintrag der j -ten Zeile und der k -ten Spalte ist. Außerdem werden die Aktivierungslevel, Biases und Fehler der Neuronen aus der l -ten Schicht in den Vektor $a^{(l)}$, $b^{(l)}$ und $\delta^{(l)}$ zusammengefasst. Für die Darstellung in Matrixform ist das Hadamard-Produkt nötig. Für zwei Matrizen s und t gleicher Dimension $m \times n$ ist das Hadamard-Produkt $s \odot t$ als elementweise Multiplikation $(s \odot t)_{ij} = s_{ij}t_{ij}$ definiert.

1. Berechne $z^{(l)} = W^{(l)}a^{(l-1)} + b^{(l)}$ und $a^{(l)} = \Phi(z^{(l)})$ für $l = 1, 2, \dots, L$.
2. Berechne die Fehler der Neuronen der Ausgabeschicht: $\delta^{(L)} = \nabla_a C \odot \Phi'(z^{(L)})$.
3. Berechne die Fehler der Neuronen der Schichten $l = L-1, \dots, 1$:

$$\delta^{(l)} = ((W^{(l+1)})^T \delta^{(l+1)}) \odot \Phi'(z^{(l)})$$
4. Berechne $\frac{\partial C}{\partial w_{jk}^{(l)}} = \delta_j^{(l)} a_k^{(l-1)}$ und $\frac{\partial C}{\partial b_j^{(l)}} = \delta_j^{(l)}$ für $l = 1, 2, \dots, L$.
5. Passe die Gewichte und Biases nach jedem Batch an:

$$w_{jk}^{(l)} \leftarrow w_{jk}^{(l)} - \frac{\eta}{N} \sum_{i=1}^N \frac{\partial L_i}{\partial w_{jk}^{(l)}} \quad \text{und} \quad b_j^{(l)} \leftarrow b_j^{(l)} - \frac{\eta}{N} \sum_{i=1}^N \frac{\partial L_i}{\partial b_j^{(l)}}$$

Der im fünften Schritt eingeführte Parameter η ist die Lernrate des NN. Sie kann Werte zwischen 0 und 1 annehmen und bestimmt die Schrittgröße, mit der die Gewichte und Biases angepasst werden.

4.3.3 Overfitting

Overfitting beschreibt das Problem, bei dem ein NN auf einem Trainingsdatensatz bessere Ergebnisse erzielt als auf einem Testdatensatz. Dies tritt vor allem dann auf, wenn das NN komplex, d. h. aus vielen Neuronen und Schichten besteht, und der Datensatz im Vergleich dazu klein ist. In solchen Fällen neigt das NN dazu, die Daten des Trainingsdatensatzes auswendig zu lernen, anstatt allgemeine Muster in ihnen zu erkennen. Dadurch fehlt dem NN die Fähigkeit, das Gelernte auf neue, unbekannte Daten zu übertragen. Es ist daher wichtig, während des Trainings immer darauf zu achten, dass das NN sich nicht überanpasst. Dazu erhält es in jeder Trainingsepoche neben den Trainingsdaten auch den Testdatensatz, ohne aber die richtigen Zielwerte zu kennen. Mit dem Testdatensatz werden keine Gewichte und Biases angepasst, sondern nur die Vorhersagen des NN berechnet. Anschließend werden die mittleren Verluste der Trainings- und Testdaten miteinander verglichen. Bleibt der mittlere Verlust des Testdatensatzes über mehrere Epochen oberhalb des mittleren Trainingsverlusts, hat sich das NN überangepasst. Overfitting wird gut ersichtlich, wenn der mittlere Verlust in Abhängigkeit der Epochen dargestellt wird, wie beispielhaft in Abbildung 4.4. Zunächst fallen beide Graphen rapide ab, allerdings wächst der mittlere Verlust des Testdatensatzes (rot), der in der Abbildung als Validierung bezeichnet wird, nach einigen Epochen wieder an, während der mittlere Verlust des Trainingsdatensatzes (blau) immer kleiner wird.

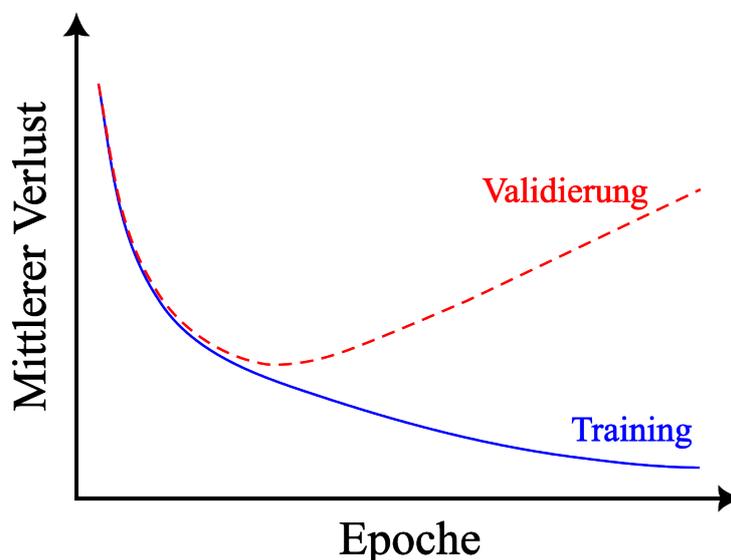


Abbildung 4.4: Beispielhafter Verlauf des mittleren Verlusts eines NN während des Trainings bzw. der Validierung in Abhängigkeit der Epoche. Zu Beginn liegen beide Graphen übereinander, doch nach einigen Epochen erzielt das NN bessere Ergebnisse auf dem Trainings- als auf dem Testdatensatz. Es kommt zum Overfitting.

Die einfachsten Möglichkeiten Overfitting vorzubeugen sind ein größerer Trainingsdatensatz oder die Reduktion der Anzahl an Schichten und Neuronen. Häufig stehen aber keine weiteren Daten mehr zur Verfügung und die Reduktion des NN birgt die Gefahr, dass es keine komplexeren Beziehungen mehr in den Daten erfasst. Deshalb gibt es noch weitere Möglichkeiten, Overfitting vorzubeugen. In dieser Bachelorarbeit werden vier Methoden verwendet.

Anpassung der Lernrate

Sobald der mittlere Verlust des Testdatensatzes schlechter als der des Trainingsdatensatzes ist, wird die Lernrate verringert. Die kleinere Lernrate sorgt dafür, dass jedes einzelne folgende Batch weniger Einfluss auf die Anpassung der Gewichte und Biases hat. Das NN kann sich somit schwerer an die einzelnen Trainingsdaten anpassen. Gleichzeitig besteht die Möglichkeit, dass es die Daten genauer abstrahieren kann.

Batch-Normalisierung

Die Batch-Normalisierung normiert die Aktivierungslevel der Neuronen einer Schicht während eines Batches so, dass der Mittelwert und die Standardabweichung dieser in jeder Schicht gleich ist. Dadurch, dass sich die Zusammensetzung eines Batches in jeder Epoche ändert, ist das Aktivierungslevel eines Neurons in jeder Epoche unterschiedlich. Dem NN wird es so erschwert, die Daten auswendig zu lernen. [28]

Dropout

Dropout bezeichnet eine Methode, bei der während des Trainings Neuronen der verborgenen Schichten mit einer bestimmten Wahrscheinlichkeit, die üblicherweise zwischen 10 % und 50 % liegt, deaktiviert werden. Diese Deaktivierung erfolgt zufällig für jedes Batch. Durch Dropout wird sichergestellt, dass das NN nicht zu stark von einzelnen Neuronen abhängig ist.

Vorzeitiger Trainingsstopp

Das Training des NN wird vorzeitig beendet, sobald der mittlere Verlust des Testdatensatzes über zwei Epochen größer als der mittlere Verlust des Trainingsdatensatzes ist. Durch das frühzeitige Stoppen wird verhindert, dass das NN sich zu stark an die Trainingsdaten anpasst, was die Vorhersage des Testdatensatzes weiter verschlechtern würde.

4.4 Evaluation

Der mittlere Verlust der letzten Trainingsepoche gibt einem bereits Aufschluss darüber, wie gut die Vorhersagekraft eines NN ist. Je näher der Wert an der 0 liegt, desto besser ist die Vorhersagekraft. Für Klassifikatoren, also NN, welche Daten in Klassen einteilt, reicht allein

der mittlere Verlust nicht für die Evaluation aus, da dieser noch keinen Aufschluss darüber gibt, wie gut die Vorhersage der einzelnen Klassen ist. Zwei mögliche Evaluationsmethoden für binäre Klassifikationen sind die „Receiver Operating Characteristic“-Kurve (ROC-Kurve) und die Konfusionsmatrix. Bevor die beiden Methoden eingeführt werden, ist es sinnvoll sich die Vorhersage eines binären Klassifikators genauer anzuschauen.

Ein binärer Klassifikator benötigt nur ein Ausgabeneuron, das idealerweise die Ausgabe 0 für ein Ereignis der Klasse A und 1 für ein Ereignis der Klasse B ausgibt. Ein Ereignis bezieht sich hierbei und im weiteren Verlauf auf einen Satz an Eingabeparameter. Im Allgemeinen ist die Ausgabe jedoch ein Wert zwischen 0 und 1. Je größer der Ausgabewert ist, desto sicherer ist das NN, dass es sich um ein Ereignis der Klasse B handelt. Die Vorhersagen der jeweiligen Klassen können mit Hilfe von Histogrammen miteinander verglichen werden. In Abbildung 4.5 werden drei charakteristische Fälle betrachtet. Die Histogramme aus Abbildung 4.5a liegen vollständig übereinander, d. h., dass der Klassifikator nicht zwischen den Klassen A und B unterscheiden kann. Der andere Grenzfall, in dem das NN alle Ereignisse der richtigen Klasse zu ordnen kann, ist in Abbildung 4.5c dargestellt. In diesem Fall überlagern sich die Histogramme der Vorhersagen beider Klassen nicht. Abbildung 4.5b entspricht den Vorhersagen eines Klassifikators, der den Großteil der Daten einer der beiden Klassen eindeutig zuordnen kann. Es gibt aber auch Vorhersagen, die weder der einen noch der anderen Klasse eindeutig zugeordnet werden können, da sich die Histogramme teilweise überlagern.

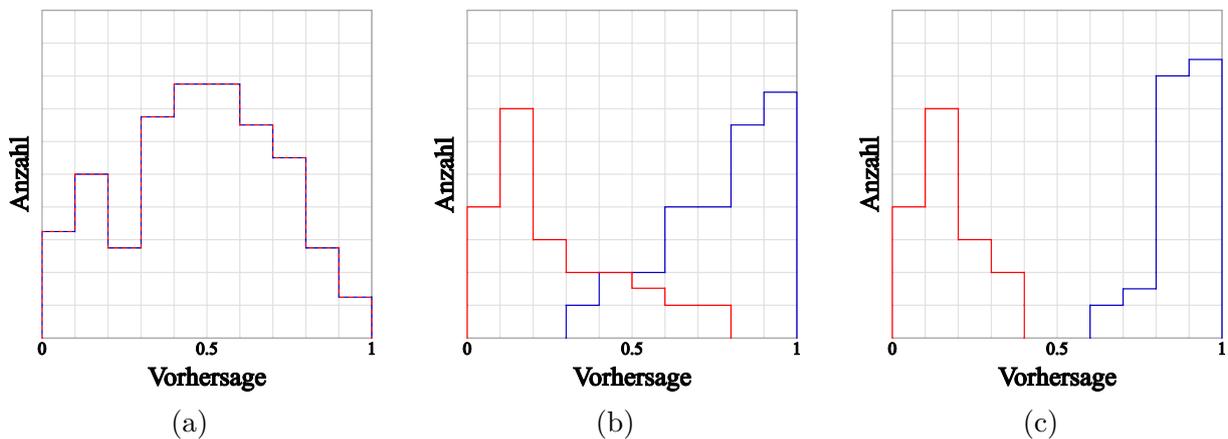


Abbildung 4.5: Beispielhistogramme für die Vorhersagen eines binären Klassifikators. Die roten Histogramme entsprechen jeweils der Vorhersage für Ereignisse der Klasse A und die blauen für Ereignisse der Klasse B. Die linke Abbildung zeigt die Vorhersage eines Klassifikators, der nicht zwischen den Klassen A und B unterscheiden kann. In der Mitte ist ein Klassifikator dargestellt, welcher Daten den Klassen A und B größtenteils richtig zuordnen kann. Wegen der teilweisen Überlagerung der Histogramme können einige Daten jedoch nicht eindeutig einer Klasse zugeordnet werden. Die Histogramme in der rechten Abbildung gehören zu einem Klassifikator, der alle Daten der jeweiligen Klasse korrekt zuordnet, da sich die Vorhersagen der Klasse A und B nicht überlappen.

4.4.1 ROC-Kurve

Wie aus den Histogrammen aus Abbildung 4.5 hervorgeht, hängt die Klassifikationsqualität der Klassen A und B von der Wahl des Schwellenwerts ab, der festlegt, wann eine Ausgabe der Klasse A oder B zugeordnet wird. Alle Ausgabewerte, die kleiner als der Schwellenwert sind, werden der Klasse A zugeordnet, während alle Werte, die mindestens dem Schwellenwert entsprechen, der Klasse B zugeordnet werden. Mit Hilfe der ROC-Kurve können verschiedene Schwellenwerte miteinander verglichen werden, indem die richtig-positiv-Rate (TPR) in Abhängigkeit der richtig-negativ-Rate (TNR) für verschiedene Schwellenwerte aufgetragen wird. Die TNR bezeichnet hier den Anteil der Daten der Klasse A, der durch das NN auch korrekt als Klasse A identifiziert wurde, während die TPR den Anteil der Daten der Klasse B darstellt, der durch das NN korrekt als Klasse B erkannt wurde. In Abbildung 4.6 sind ROC-Kurven für die Fälle aus Abbildung 4.5 dargestellt. Die rote ROC-Kurve gehört zu einem binären Klassifikator, der nicht zwischen den Klassen A und B unterscheiden kann. Anhand der Histogramme aus Abbildung 4.5a wird ersichtlich, dass je nach Schwellenwert, immer so viele Ereignisse der Klasse A und B richtig klassifiziert werden, dass $TNR + TPR = 1$ gilt, was zu einem linearen Verhalten und keiner Klassifikation führt. Die grüne ROC-Kurve stellt den Fall aus 4.5c dar, bei dem alle Ereignisse durch das NN richtig klassifiziert werden können. In diesem Fall gibt es mindestens einen Schwellenwert, bei dem $TNR = TPR = 1$ gilt, weil sich die Histogramme der Vorhersagen beider Klassen nicht überlagern. Die blaue ROC-Curve beschreibt einen binären Klassifikator mit der Vorhersage aus 4.5b. Bei einer solchen Vorhersage ist die Wahl des Schwellenwerts vom Optimierungsziel abhängig.

Aus Abbildung 4.6 wird ersichtlich, dass ein binärer Klassifikator umso besser ist, je näher sich seine ROC-Curve dem grünen Verlauf angleicht. Mathematisch kann dies über die Fläche unterhalb der ROC-Kurve (AUC) beschrieben werden. Die AUC kann im Allgemeinen Werte zwischen 0 und 1 annehmen und je größer die AUC ist, desto besser ist der Klassifikator. Für die grüne ROC-Curve aus Abbildung 4.6 ist die AUC 1.0, für die blaue etwa 0.75 und für die rote 0.5.

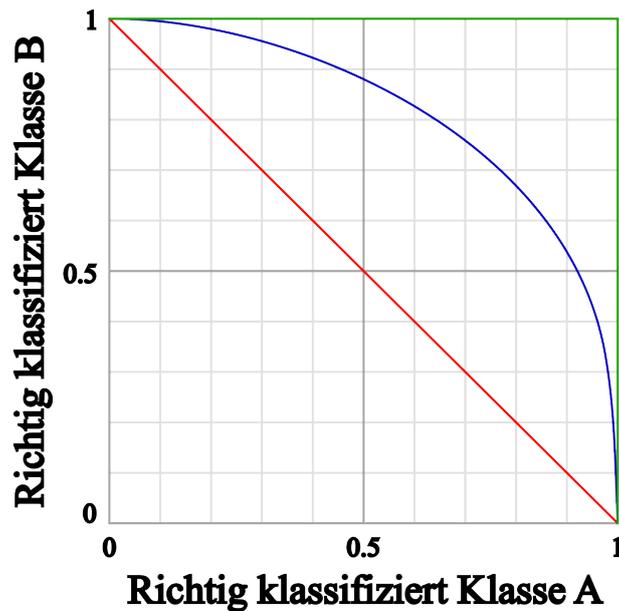


Abbildung 4.6: Beispielhafte Verläufe der ROC-Kurve. Die rote Kurve entspricht einem NN, das nicht zwischen den Klassen A und B unterscheiden kann. Der ideale Fall, bei dem alle Daten richtig zugeordnet werden können, gehört zur grünen Kurve und die ROC-Kurve eines NN, welches Daten größtenteils richtig klassifiziert, ist in Blau dargestellt.

4.4.2 Konfusionsmatrix

Hat man sich für einen Schwellenwert entschieden, kann man die TPR und TNR an der ROC-Kurve ablesen. Anschaulicher ist es aber, die TPR und TNR zusammen mit der FPR und FNR in einer Konfusionsmatrix darzustellen. Die falsch-positiv-Rate (FPR) und die falsch-negativ-Rate (FNR) sind hierbei die Anteile der Daten der Klasse A bzw. B, die fälschlicherweise der Klasse B bzw. Klasse A zugeordnet wurden. Es gilt $TNR + FPR = 1$ und $FNR + TPR = 1$. Die schematische Darstellung einer Konfusionsmatrix ist in Abbildung 4.7 abgebildet. Auf den Diagonaleinträgen werden die TNR und TPR aufgetragen, während auf den nicht-diagonalen Einträgen die FPR und FNR aufgetragen sind. Ein Klassifikator ist offensichtlich umso besser, je näher die Diagonaleinträge an der 1 und die nicht-diagonalen Einträge an der 0 sind.

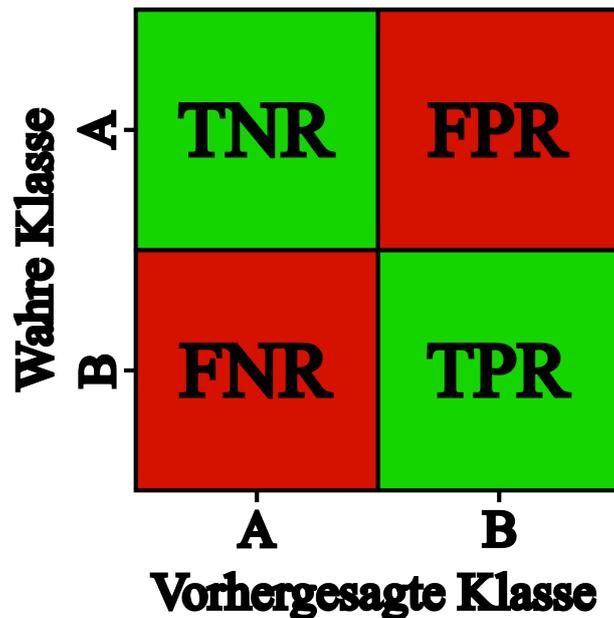


Abbildung 4.7: Schematische Darstellung einer Konfusionsmatrix. Auf der Diagonalen befinden sich die TNR und TPR, also der Anteil der Daten, der richtig klassifiziert wurde. Auf den nicht-diagonalen Einträgen sind die FPR und FNR aufgetragen. Dies sind der Anteil der Daten, der falsch klassifiziert wurde.

4.5 Bayes'sche Optimierung

Dieser Abschnitt basiert auf [29]. Die Leistung eines NN hängt von einer Vielzahl von Parametern ab, die als Hyperparameter bezeichnet werden. Hyperparameter werden vor dem Training festgelegt, bleiben im Verlauf des Trainings für gewöhnlich unverändert und bestimmen die Struktur und das Verhalten des NN. Dadurch haben sie erheblichen Einfluss auf die AUC eines NN und sollten optimiert werden, um die größtmögliche AUC zu erreichen. In dieser Bachelorarbeit werden sechs Hyperparameter betrachtet:

- Lernrate
- Batchgröße
- Anzahl der Epochen
- Dropout Wahrscheinlichkeit
- Anzahl an verborgenen Schichten
- Anzahl an Neuronen in den verborgenen Schichten

Die Berechnung der AUC kann als eine Blackbox-Funktion f betrachtet werden, die einen Satz an Hyperparametern erhält, ein NN, wie in Abschnitt 4.3 beschrieben, trainiert und schließlich die AUC ausgibt. Über die Funktion selbst sind nur die Eingabewerte und der Ausgabewert bekannt. Die Funktionsvorschrift und der Verlauf von f sind dementsprechend nicht bekannt. Die Optimierung einer solchen Funktion, die gleichbedeutend mit der

Bestimmung des globalen Extremums ist, ist analytisch nicht möglich. Darüber hinaus ist jeder Berechnungsvorgang der Funktion f rechenintensiv. Daher können Verfahren, wie z. B. die Rastersuche, bei der die Funktion für hunderte Sätze an Hyperparametern ausgewertet wird, um das Maximum zu finden, nicht genutzt werden. Eine Möglichkeit, das Maximum einer solchen Funktion dennoch zu bestimmen, ist die Bayes'sche Optimierung. Im Folgenden wird nur das Konzept der Bayes'schen Optimierung eingeführt. Eine ausführlichere Beschreibung ist zum Beispiel in [29] zu finden.

Die grundlegende Idee der Bayes'schen Optimierung ist die Annäherung der rechenintensiven Funktion f durch eine Ersatzfunktion \hat{f} . Dazu wird f zunächst einige Male mit zufälligen Sätzen an Hyperparametern ausgewertet und die Ersatzfunktion \hat{f} anschließend so gewählt, dass sie durch diese Punkte verläuft. Es gibt natürlich mehrere Funktionen, die diese Bedingung erfüllen. Deswegen werden die potentiellen Funktionen gemittelt und die mittlere Funktion als Ersatzfunktion verwendet. Die Standardabweichung der Funktionen gibt einem dabei Auskunft darüber, welche Funktionsabschnitte bereits gut mit der Funktion f übereinstimmen und welche Abschnitte noch nicht ausreichend untersucht worden sind. Im nächsten Schritt wird f ein weiteres Mal mit einem Satz an Hyperparametern ausgewertet, um \hat{f} weiter anzupassen. Bei der Wahl des nächsten Satzes an Hyperparametern ist ein Kompromiss zwischen Ausnutzung und Erkundung zu finden. Mit Ausnutzung ist gemeint, dass ein Satz an Hyperparametern genutzt wird, der sich in einem Bereich befindet, in dem f bereits gut durch \hat{f} beschrieben wird und Erkundung bezieht sich darauf, dass ein Bereich gewählt wird, der bisher noch kaum ausgewertet wurde. Die Ausnutzung sorgt dafür, dass bereits bekannte und vielversprechende Funktionsabschnitte untersucht werden, während die Erkundung gewährleistet, dass kein potentielles globales Maximum unentdeckt bleibt. Mathematisch wird dies mit Hilfe von Erfassungsfunktionen erreicht. Die Ersatzfunktion \hat{f} wird so lange angepasst, bis eine Abbruchbedingung erreicht ist. Typische Abbruchbedingungen sind eine vorher festgelegte Anzahl an Anpassungsschritten der Ersatzfunktion \hat{f} oder das Erreichen eines vorher festgelegten Maximums.

In Abbildung 4.8 ist die Bayes'sche Optimierung anhand einer Beispielfunktion f dargestellt, die nur von einem Hyperparameter θ abhängt. Die Funktion f , deren Verlauf der gestrichelten schwarzen Linie entspricht, wurde einige Male für unterschiedliche θ -Werte ausgewertet. Die zugehörigen Funktionswerte (rot) wurden genutzt, um die Ersatzfunktion \hat{f} zu bilden. Der blaue Graph entspricht dem Verlauf von \hat{f} und ihre 2σ -Umgebung ist blau-schattiert dargestellt. Es ist gut zu erkennen, dass Funktionsabschnitte, die bereits mehrfach ausgewertet worden sind, gut durch die Ersatzfunktion beschrieben werden, während bisher noch nicht untersuchte Bereiche schlecht beschrieben werden und daher eine größere Unsicherheit aufweisen.

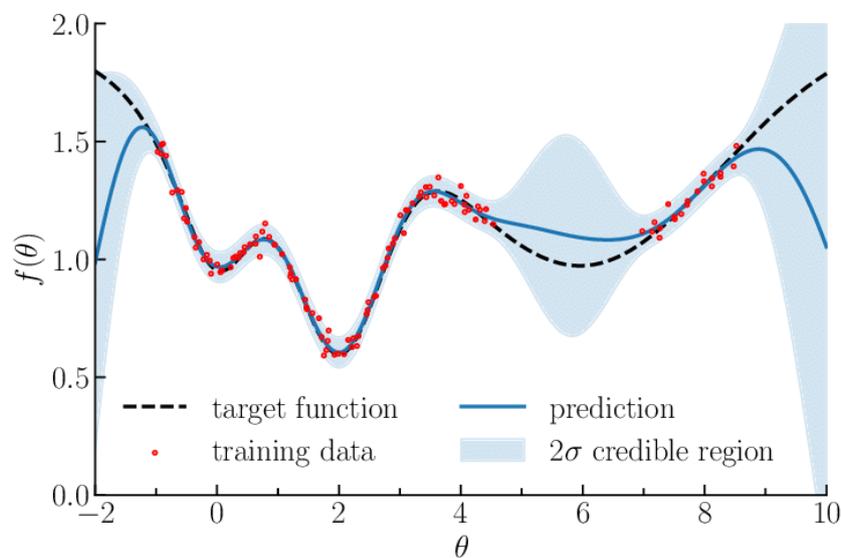


Abbildung 4.8: Beispiel einer Bayes'schen Optimierung für eine Funktion f , die nur von einem Hyperparameter θ abhängt. Die roten Punkte sind Funktionswerte von f , an denen sie für unterschiedliche θ -Werte ausgewertet wurde. Der blaue Verlauf stellt die Ersatzfunktion \hat{f} dar, die diese Punkte am besten beschreibt. Ihre 2σ -Umgebung ist blau-schattiert dargestellt. Die Unsicherheit ist in Bereichen am größten, in denen f noch nicht ausreichend untersucht wurde. [30]

Kapitel 5

Simulation und Daten

JUNO erwartet, die in der Natur realisierte Massenordnung mit Hilfe von Reaktorneutrinos nach einer 6-jährigen Laufzeit mit einer Signifikanz von 3σ zu bestimmen [23]. Die ebenfalls mit JUNO detektierten atmosphärischen Neutrinos können zur Bestimmung der Massenordnung beitragen. In Kapitel 3 wurde bereits eingeführt, wie atmosphärische Neutrinos genutzt werden, um die korrekte Massenordnung zu bestimmen. Da die Übergangswahrscheinlichkeiten aus den Gleichungen 3.1.1-3.1.3 von der Energie der Neutrinos abhängen, ist es notwendig, die Energie der detektierten atmosphärischen Neutrinos zu rekonstruieren. Die Rekonstruktion der Energie erfolgt über die im CD deponierte Energie der in der Wechselwirkung mit dem Flüssigszintillator entstandenen sekundären Teilchen. Bei einer NC-Interaktion bleibt das Neutrino im Gegensatz zur CC-Interaktion erhalten (siehe Abbildung 2.2), was dazu führt, dass es nur einen Teil seiner Energie durch die Wechselwirkung verliert. Aus diesem Grund kann die Energie eines solchen atmosphärischen Neutrinos nicht vollständig rekonstruiert werden. Für die Bestimmung der Massenordnung mit Hilfe von atmosphärischen Neutrinos eignen sich daher nur CC-Interaktionen. Es ist deshalb notwendig, eine Methodik zu entwickeln, die zwischen einer NC- und einer CC-Interaktion unterscheiden kann. In dieser Bachelorarbeit werden hierzu NN unter der Verwendung von aggregierten Features trainiert. In diesem Kapitel werden die für das Training der NN benötigten Daten und die Methode der aggregierten Features beschrieben. Darüber hinaus werden die verwendeten Features eingeführt.

5.1 Simulierte Daten

Für das Training der NN werden für jedes Ereignis die Information über die Art der Interaktion, d. h., ob es sich um eine NC- oder CC-Interaktion handelt, benötigt. Weil diese Information nicht aus realen Messdaten hervorgeht, werden simulierte Daten für das Training verwendet. Darüber hinaus befindet sich der JUNO-Detektor noch im Aufbau und soll erst 2024 fertiggestellt werden. Somit hat er noch keine atmosphärischen

Neutrinos detektieren können. Außerdem werden nur einige hundert atmosphärische Neutrinoereignisse pro Jahr erwartet [23], wodurch selbst die Kenntnis über die Art der Interaktion nicht ausreichen würde, einen hinreichend großen Datensatz für das Training zu erhalten. Da atmosphärische Neutrinos nicht die primäre Neutrinoquelle JUNOs sind, werden während der Laufzeit des Detektors nicht alle möglichen Informationen solcher Neutrinoereignisse gespeichert. Für das Training der NN sollten deswegen auch nur die voraussichtlich gespeicherten Informationen genutzt werden. Nach dem jetzigen Stand werden für jedes atmosphärische Neutrinoereignis nur die „First Hit Time“ (FHT) und die „Number of Photoelectrons“ (npe) jedes LMPT sowieso ein Histogramm, bei dem die Summe aller in den LPMTs erzeugten Photoelektronen in Abhängigkeit der Zeit dargestellt wird, verwendet. Dieses Histogramm wird im Folgenden als npe-Zeit-Histogramm bezeichnet. Die FHT eines PMTs ist die Zeit, die das Szintillationslicht benötigt, um das jeweilige PMT zum ersten Mal zu erreichen. Mit npe wird die Anzahl an Photoelektronen bezeichnet, die in einem PMT während eines Ereignisses erzeugt werden. Die Information der SPMTs wird momentan noch nicht verwendet, könnte allerdings in der Zukunft inkludiert werden.

Die in dieser Bachelorarbeit verwendeten Daten stammen aus Monte-Carlo Simulationen der JUNO-Simulationssoftware [31]. Die simulierten Ereignisse bestehen sowohl aus den Wechselwirkungen zwischen den atmosphärischen Neutrinos und dem Szintillator als auch aus den Wechselwirkungen der sekundären Teilchen mit dem Szintillator. Bei der Simulation wurden die Wirkungsquerschnitte der möglichen Wechselwirkungen berücksichtigt, sodass die im Abschnitt 3.3 eingeführten Interaktionskanäle die dominierenden im Datensatz sind. Insgesamt besteht der Datensatz aus 60 000 Ereignissen, was einer Laufzeit von rund 55 Jahren entspricht. Simuliert wurden ν_e , $\bar{\nu}_e$, ν_μ und $\bar{\nu}_\mu$ im Energiebereich von 1 GeV bis 15 GeV. In dieser Bachelorarbeit werden nur die Informationen der LPMTs aus dem ersten Auslesefenster verwendet, welches 1250 ns lang ist. Über die LPMTs sind darüber hinaus noch die Positionen in kartesischen Koordinaten bekannt. Hierbei ist der Ursprung des Koordinatensystems im Mittelpunkt des CD. Zusätzlich ist zu jedem Ereignis die Energie des Neutrinos, die Art der Interaktion und der Abstand R_{Vertex} bekannt, welcher der Entfernung zwischen dem Zentrum des CD und dem Ort entspricht, an dem das am weitesten vom Zentrum entfernte sekundäre Teilchen seine letzte Wechselwirkung erfahren hat.

In Abbildung 5.1 sind die npe- und FHT-Verteilung der LPMTs exemplarisch für ein Ereignis des simulierten Datensatzes dargestellt. Es handelt sich um eine CC-Interaktion eines ν_e mit einer Energie von 9.5 GeV. Die Verteilung der FHT in Abbildung 5.1a und der npe in Abbildung 5.1b sind jeweils durch eine Heatmap dargestellt. Dazu wurde die Kugeloberfläche des CD, auf dessen Innenseite die LPMTs angebracht sind, mit Hilfe des HEALPix-Algorithmus in flächenmäßig gleich große Pixel unterteilt, sodass mehrere LPMTs durch ein Pixel beschrieben werden. Anschließend wurde die Kugeloberfläche des CD unter Verwendung der Mollweide-Projektion als Ellipse dargestellt. Die Farbcodierung der FHT-Heatmap gibt an, welche LPMTs am frühesten gefeuert haben. Je dunkler das einzelne Pixel ist, desto früher haben die LPMTs in diesem gefeuert, wobei immer die kleinste FHT aller LPMTs eines Pixels dargestellt ist. Bei der Simulation wurden Rauscheffekte der LPMTs berücksichtigt, sodass ein LPMT auch feuern kann, bevor er überhaupt vom Szintillationslicht getroffen wurde. Daher finden sich vereinzelt Pixel, die deutlich früher feuern als die umliegenden. In der Heatmap der npe-Verteilung spricht ein dunkles Pixel dafür, dass die LPMTs wenig Photoelektronen erzeugt haben, denn dargestellt ist immer die Summe aller npe innerhalb des Pixels. Folglich traf wenig Szintillationslicht auf die LPMTs, weshalb die Interaktion nicht in der näheren Umgebung dieser PMTs stattfand.



Abbildung 5.1: Heatmap der FHT- und npe-Verteilung der LPMTs einer CC-Interaktion eines ν_e mit einer Energie von 9.5 GeV. Für beide Heatmaps wurde der HEALPix-Algorithmus und darauffolgend die Mollweide-Projektion verwendet. Je heller das Pixel in der FHT-Verteilung ist, desto später haben die LPMTs in diesem gefeuert. In der npe-Verteilung bedeutet ein helleres Pixel, dass in den LPMTs dieses Pixels viele npe erzeugt wurden. Die Interaktion fand dementsprechend in der Nähe der LPMTs statt, bei denen die Pixel in der FHT-Heatmap dunkel und in der npe-Heatmap hell sind.

Das zum obigen Ereignis gehörende npe-Zeit-Histogramm ist in Abbildung 5.2 dargestellt. Die für das Histogramm benötigten Daten wurden in 100 Bins mit einer Breite von jeweils 14 ns unterteilt. Die Höhe des jeweiligen Bins entspricht der Summe der npe, die während des Zeitintervalls in den LPMTs erzeugt wurden. Da das erste Auslesefenster des Detektors 1250 ns lang ist, sind die Bins oberhalb von 1250 ns leer. Den Großteil der Energie des Neutrinos erhält das bei der Interaktion erzeugte Elektron, welches seine Energie wiederum

relativ linear durch Bremsstrahlung im Szintillator verliert. Dabei verliert es zu Beginn den größten Anteil, weshalb in dieser Zeit auch die meisten npe erzeugt werden. Nach dem Maximum fällt das npe-Zeit-Histogramm zunächst langsam ab, weil das Elektron durch den CD propagiert und auf dem Weg weiterhin Energie im Detektor deponiert. Nach etwa 160 ns wurde das Elektron von einem Atom des Szintillators eingefangen. Das im CD befindliche Licht kann auf dem Weg zu den PMTs absorbiert und re-emittiert sowie gestreut werden, sodass auch einige hundert Nanosekunden nach dem Einfang npe erzeugt werden. Ab etwa 900 ns wächst das npe-Zeit-Histogramm wieder leicht an, bis es nach einem lokalen Maximum bei rund 1000 ns auf nur noch einige wenige Photoelektronen pro Bin abfällt. Der leichte Anstieg am Ende des ersten Auslesefensters ist die Folge von Afterpulsen in den LPMTs und der Grund, warum das Histogramm am Ende nicht auf 0 npe abfällt, ist das Grundrauschen der LPMTs.

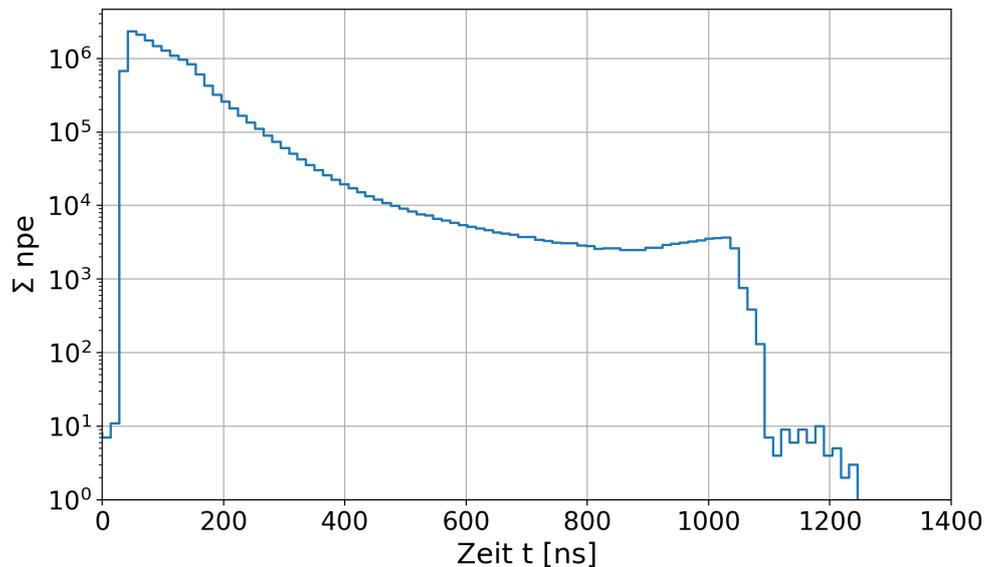


Abbildung 5.2: npe-Zeit-Histogramm einer CC-Interaktion eines ν_e mit einer Energie von 9.5 GeV. Das Elektron verliert innerhalb der ersten ca. 160 ns seine Energie und wird danach von einem Atom des Szintillators gefangen. Anschließend befindet sich nur noch Licht im Detektor, welches absorbiert und re-emittiert sowie gestreut werden kann. Infolgedessen fällt das npe-Zeit-Histogramm immer weiter ab, weil keine weiteren Photonen erzeugt werden. Nach etwa 900 ns steigt das npe-Zeit-Histogramm aufgrund von Afterpulsen wieder leicht an, bis es am Ende des ersten Auslesefensters auf das Grundrauschen der LPMTs abfällt.

5.2 Selektion der simulierten Daten

Obwohl zu jedem Ereignis des simulierten Datensatzes die Art der Interaktion bekannt ist, können diese Daten noch nicht für das Training der NN verwendet werden. Dies liegt daran, dass für die bestmöglich Rekonstruktion der Neutrinoenergie alle sekundären Teilchen ihre Energie innerhalb des CD verlieren müssen. Ereignisse, die diese Bedingung erfüllen, werden als vollständig enthalten (engl. „Fully Contained“, FC) bezeichnet. Momentan besteht der Datensatz aber auch aus Ereignissen, bei denen sekundäre Teilchen ihre letzte Wechselwirkung in einem Abstand R_{Vertex} haben, der größer als der Durchmesser des CD ist. Sie verlieren demnach einen Teil der Energie außerhalb des CD. Solche Ereignisse werden als teilweise enthalten (engl. „Partially Contained“, PC) bezeichnet. Um einen Datensatz mit ausschließlich FC-Ereignissen zu erhalten, werden keine Ereignisse mehr berücksichtigt, die einen Abstand $R_{\text{Vertex}} \geq 16.5$ m haben.

Tabelle 5.1: Zusammensetzung des simulierten Datensatzes vor und nach der Einschränkung des Abstands R_{Vertex} . Angegeben sind immer die Anzahl der NC-Ereignisse und in der Klammer die Anzahl der CC-Ereignisse.

	Vorher	Nachher
$\nu_e/\bar{\nu}_e$	6799 (23 401)	5217 (17 272)
$\nu_\mu/\bar{\nu}_\mu$	6857 (22 943)	5336 (5349)
Σ	13 656 (46 344)	10 553 (22 621)

Wie aus der Tabelle 5.1 hervorgeht, trifft diese Einschränkung mehr als die Hälfte aller CC-Interaktion. Im Vergleich dazu entfallen weniger als 1/4 aller NC-Interaktionen. Der Grund hierfür liegt darin, dass ein Neutrino in einer NC-Interaktion den Großteil seiner Energie behält. Die bei der Wechselwirkung entstandenen sekundären Teilchen haben daher wenig Energie und können so, keine weiten Strecken zurücklegen. Bei CC-Interaktionen sind vor allem ν_μ und $\bar{\nu}_\mu$ betroffen. Insgesamt werden mehr als 3/4 aller CC-Interaktion von ν_μ und $\bar{\nu}_\mu$ nicht mehr berücksichtigt. Bei den ν_e und $\bar{\nu}_e$ sind es nur rund 1/4. Dies liegt daran, dass Elektronen und Positronen ihre Energie im Szintillator relativ schnell über Bremsstrahlung verlieren, sodass sie den CD in der Regel nicht verlassen. Die Bremsstrahlung spielt für ν_μ und $\bar{\nu}_\mu$ aufgrund ihrer deutlich größeren Massen keine signifikante Rolle. Stattdessen verlieren sie ihre Energie vor allem über elastische und inelastische Stöße mit Atomen und Molekülen des Szintillators (siehe Abschnitt 3.2.1). Sie verlieren ihre Energie daher viel langsamer und können deshalb weitere Strecken zurücklegen. In Abbildung 5.3 ist gut zu erkennen, dass die Anzahl der ν_μ - und $\bar{\nu}_\mu$ -Ereignisse (blau gestrichelt) nach der Einschränkung des Abstands R_{Vertex} mit steigender Energie immer weiter abnimmt und schon ab ~ 5 GeV auf unter 200 Ereignisse abfällt, während die Anzahl der ν_e - und $\bar{\nu}_e$ -Ereignisse (orange gestrichelt) nahezu gleich bleibt.

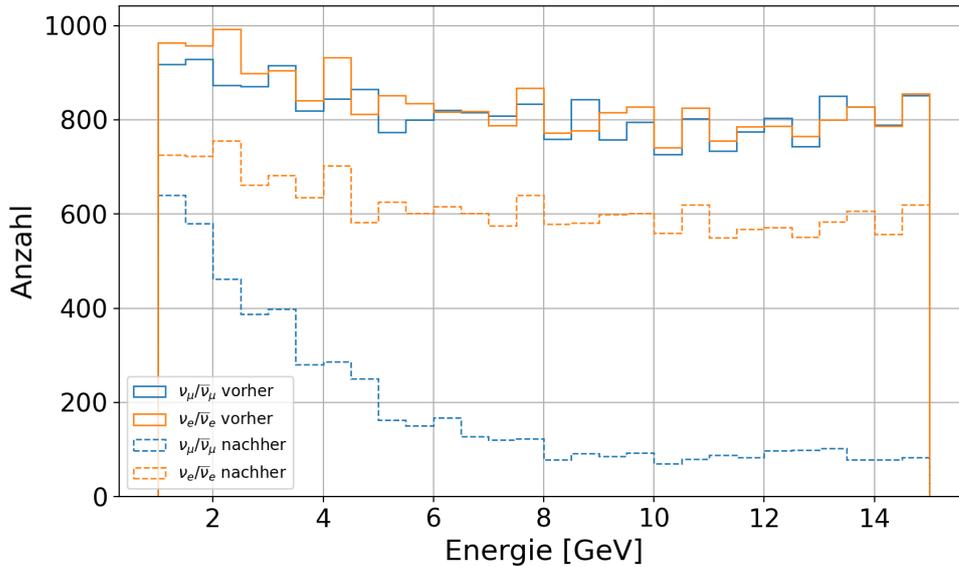


Abbildung 5.3: Vergleich der Energieverteilung der CC-Interaktionen vor und nach der Einschränkung des Abstands R_{Vertex} . Dargestellt sind ν_μ - und $\bar{\nu}_\mu$ -Ereignisse in Blau sowie ν_e - und $\bar{\nu}_e$ -Ereignisse in Orange, wobei die gestrichelten Histogramme den Energieverteilungen nach der Einschränkung entsprechen. Durch die Einschränkung gehen sowohl $\nu_e/\bar{\nu}_e$ -Ereignisse als auch $\nu_\mu/\bar{\nu}_\mu$ -Ereignisse verloren, aber letztere sind deutlich stärker betroffen. Dies liegt daran, dass Myonen und Anti-Myonen ihre Energie über weitere Strecken als Elektronen und Positronen verlieren.

In dieser Bachelorarbeit erfolgt das Training von drei NN, die als Modell 1, 2 und 3 bezeichnet werden. Dabei unterscheiden sich die Datensätze, mit denen diese Modelle trainiert werden, nur im abgedeckten Energiebereich. Das erste Modell wird mit Ereignissen trainiert, die Energien zwischen 1 GeV und 3 GeV aufweisen, während das zweite Modell Daten im Energiebereich von 3 GeV bis 15 GeV nutzt. Dadurch deckt das erste Modell den Energiebereich vor dem Auftreten der MSW-Resonanz (siehe Abschnitt 3.1) und das zweite Modell den Bereich, in dem die MSW-Resonanz auftritt, ab. Das dritte Modell verwendet den kompletten Datensatz, der den Energiebereich zwischen 1 GeV und 15 GeV abdeckt. Seine Zusammensetzung lässt sich bereits der Tabelle 5.1 entnehmen. Die Datensätze aller drei Modelle, deren Zusammensetzung in der Tabelle 5.2 aufgeführt ist, werden jeweils so unterteilt, dass 80% der Daten für das Training und 20% für die Validierung verwendet werden.

Tabelle 5.2: Zusammensetzung der Datensätze für die drei zu trainierenden NN. Angegeben sind immer die Anzahl der NC-Ereignisse und in der Klammer die Anzahl der CC-Ereignisse.

	Modell 1	Modell 2	Modell 2
Energie [GeV]	1 – 3	3 – 15	1 – 15
$\nu_e/\bar{\nu}_e$	847 (2865)	4370 (14 407)	5217 (17 272)
$\nu_\mu/\bar{\nu}_\mu$	891 (2069)	4445 (3280)	5336 (5349)
Σ	1738 (4934)	8815 (17 687)	10 553 (22 621)

5.3 Aggregierte Features

Zu jedem simulierten Ereignis ist von jedem LPMT die FHT und die npe bekannt. Dies sind pro Ereignis bereits 35 224 Zahlenwerte. Hinzu kommen noch die 100 Zahlenwerte des zugehörigen npe-Zeit-Histogramms. Bekäme ein NN diese Zahlenwerte als Features, hätte es insgesamt 35 324 Eingabeneuronen. Ein solches NN zu trainieren, würde zu viel Rechenleistung benötigen. Außerdem würde sich dieses NN innerhalb kürzester Zeit überanpassen, weil es deutlich mehr Parameter hat, die es anpassen kann, als der Trainingsdatensatz Ereignisse. In der Regel sollte ein NN 2 – 3 mal mehr Trainingsdaten erhalten als es anzupassende Parameter hat [25]. Daher müssen die simulierten Daten aufbereitet werden, wofür es verschiedene Ansätze gibt. Eine Möglichkeit ist es, zu jedem Ereignis Heatmaps wie aus den Abbildungen 5.1a und 5.1b und das npe-Zeit-Histogramm wie aus Abbildung 5.2 zu erstellen, um in diesen Abbildungen mit Hilfe von NN Muster zu erkennen. Dafür werden sogenannte „Convolutional Neural Networks“ (CNN) verwendet. CNN sind aufgrund ihrer Anwendungsbereiche wesentlich komplexer als NN, die im Kapitel 4 eingeführt worden sind. Zum einen sind die Eingabedaten nicht eindimensional, denn ein farbiges Bild wird durch drei Dimensionen (Höhe, Breite und Farbkanal) beschrieben. Zum anderen werden mathematisch komplexere Berechnungen wie z. B. die Faltung (engl. „Convolution“) durchgeführt. Die genaue Funktionsweise von CNN wird hier nicht weiter erläutert, kann allerdings z. B. in der Publikation [32] nachgelesen werden. Aufgrund der Komplexität ist die Verwendung von CNN sehr rechenintensiv. Deshalb wird in dieser Bachelorarbeit die Methode der aggregierten Features untersucht, die deutlich weniger Rechenzeit benötigt. Bei dieser Methode werden die simulierten Daten zunächst analysiert, um Merkmale in Form von Zahlenwerten herauszuarbeiten, die die beiden Klassen unterscheiden können. Diese Zahlenwerte dienen dann als Features eines NN. Dadurch verringert sich die Anzahl der Eingabeparameter von 35 324 auf die Anzahl an aggregierten Features. Im Folgenden werden potenzielle, für die Klassifikation hilfreiche Features eingeführt.

5.3.1 FHT-Features

Um Features aus den FHT-Daten herauszuarbeiten, ist es sinnvoll, die FHT-Verteilung der NC- und CC-Ereignisse miteinander zu vergleichen. Dafür ist in Abbildung 5.4 die FHT der LPMTs für alle NC- (orange) und alle CC-Ereignisse (blau) des simulierten Datensatzes dargestellt. Die Histogramme beider Klassen sind hier und in den folgenden Abbildungen dieses Kapitels so normiert, dass die Fläche unterhalb des Histogramms eins ist. Dies sorgt für eine bessere Vergleichbarkeit der Klassen, da der Datensatz aus unterschiedlich vielen NC- und CC-Ereignissen besteht. Die Höhe h_i des i -ten Bin eines Histogramms entspricht dadurch nicht mehr der Anzahl der Ereignisse, die in dieses Bin fallen, sondern einem Anteil an der gesamten Anzahl an Ereignissen, der sich wie folgt berechnet

$$h_i^{\text{norm}} = \frac{h_i}{b_i \sum_j h_j}. \quad (5.3.1)$$

Hierbei ist b_i die Breite des Bins vor der Normierung und h_i^{norm} die Höhe des normierten Bins.

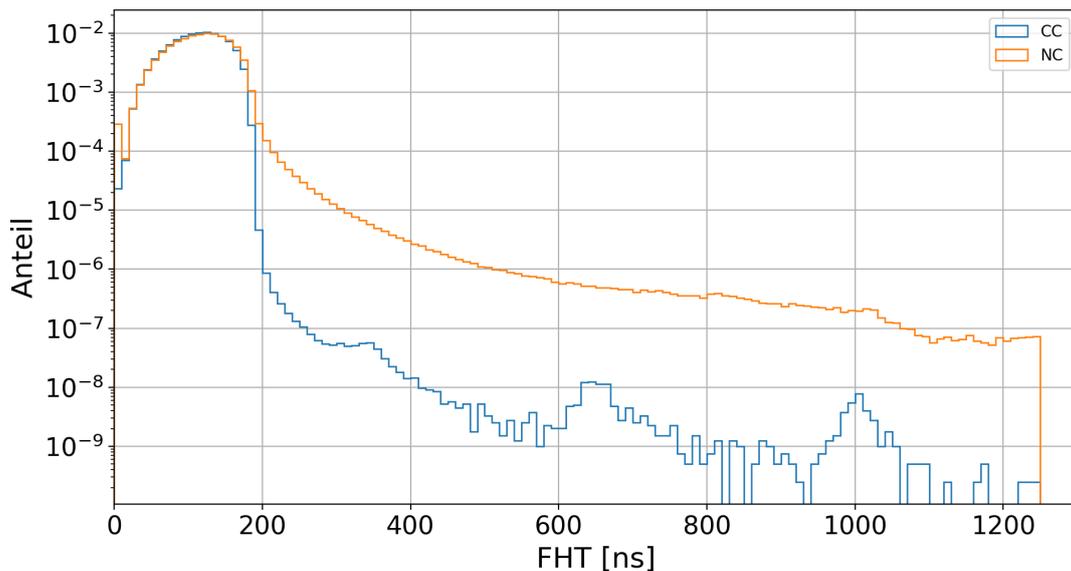


Abbildung 5.4: FHT-Verteilung aller NC- und CC-Ereignisse des simulierten Datensatzes. Für beide Klassen ist der Anteil an gefeuerten LPMTs innerhalb der ersten 200 ns am größten. Allerdings unterscheiden sich NC- und CC-Ereignisse darin, wie viele LPMTs erst nach 200 ns zum ersten Mal feuern, denn dies trifft nur auf etwa 2 % aller CC-Ereignisse zu. Bei den NC-Ereignissen sind es ca. 38 %. Ein weiterer Unterschied ist der Anteil der Daten, der ins erste Bin fällt. Der Grund hierfür ist, dass es mehr NC-Ereignisse gibt, bei denen mindestens ein LPMT im ersten Auslesefenster nicht feuert als CC-Ereignisse.

In Abbildung 5.4 fällt auf, dass für beide Klassen die LPMTs am häufigsten innerhalb der ersten 200 ns zum ersten Mal feuern. Der Anteil an NC-Ereignissen, bei denen LPMTs erst nach den ersten 200 ns feuern, ist jedoch wesentlich größer als bei CC-Ereignissen.

Insgesamt feuern bei 22 251 CC-Ereignissen alle LPMTs während der ersten 200 ns, was rund 98 % der CC-Ereignisse entspricht. Bei NC-Interaktionen sind es 6506 Ereignisse, was nur etwa 62 % aller NC-Ereignisse sind. Dieser Unterschied kann mit der Anzahl n_{200} der LPMTs, die innerhalb der ersten 200 ns feuern, beschrieben werden. Ein weiteres Feature, welches diesen Unterschied beschreiben kann, ist die größte FHT FHT_{\max} aller LPMTs während eines Ereignisses. Beide Features werden auf ihre Auswirkung auf die Klassifikationsfähigkeit der NN untersucht.

Der Anteil an Ereignissen im ersten Bin ist in Abbildung 5.4 für NC-Ereignisse größer als für CC-Ereignisse. Das liegt jedoch nicht daran, dass bei den NC-Interaktionen mehr LPMTs innerhalb der ersten 10 ns feuern als bei den CC-Interaktionen, sondern daran, dass im ersten Bin auch alle LPMTs enthalten sind, die während eines Ereignisses im ersten Auslesefenster überhaupt nicht feuern. In Abbildung 5.5 ist deswegen für alle NC- (orange) und alle CC-Ereignisse (blau) die kleinste FHT FHT_{\min} der LPMTs dargestellt. Feuert bei einem Ereignis ein LPMT nicht, wird die FHT dieses LPMTs auf 0 ns gesetzt und als kleinste FHT betrachtet. Der Vergleich zeigt, dass in beiden Fällen beim Großteil der Ereignisse alle LPMTs im ersten Auslesefenster feuern. Dennoch feuert bei 21 % der NC-Ereignisse mindestens ein LPMT im ersten Auslesefenster überhaupt nicht. Bei den CC-Ereignissen sind es weniger als 1 %. FHT_{\min} kann daher ca. 21 % der NC-Ereignisse richtig klassifizieren und wird deshalb als potentielles Feature verwendet.

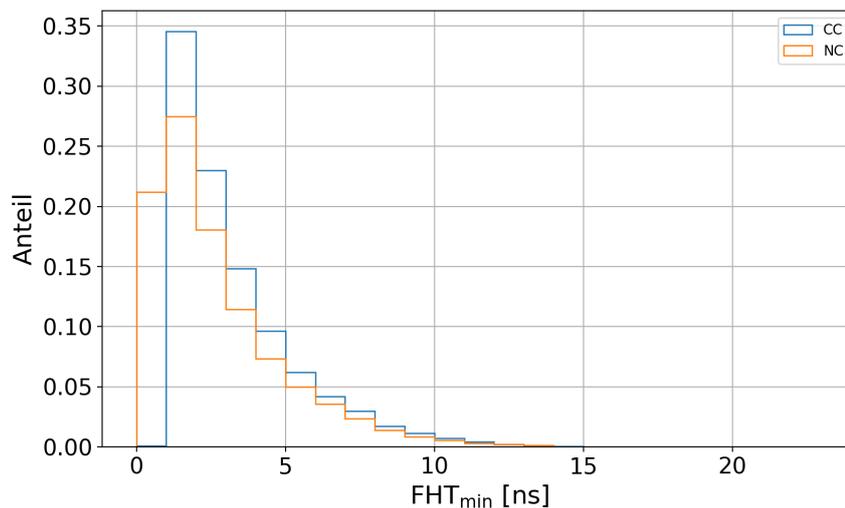


Abbildung 5.5: Kleinste FHT FHT_{\min} der LPMTs für alle NC- und alle CC-Ereignisse des simulierten Datensatzes. Die Histogramme der NC- und CC-Ereignisse unterscheiden sich vor allem dadurch, dass der Anteil der CC-Ereignisse mit $FHT_{\min} = 0$ ns verschwindend gering ist. Im Gegensatz dazu liegt der Anteil der NC-Ereignisse bei 21 %. Der Grund hierfür ist, dass in 21 % der NC-Ereignisse mindestens ein LPMT nicht feuert. Bei den CC-Ereignissen sind es weniger als 1 %.

5.3.2 npe-Features

Da ein Neutrino mit einer bestimmten Energie in der Regel bei einer NC-Interaktion viel weniger Energie im CD deponiert als bei einer CC-Interaktion, werden bei NC-Interaktionen auch weniger Photoelektronen in den LPMTs erzeugt als bei CC-Interaktionen. Die Summe Σnpe aller durch die LPMTs während eines Ereignisses erzeugten Photoelektronen eignet sich deshalb als Feature für die Klassifikation. In Abbildung 5.6 ist die Verteilung des Features Σnpe für die NC- und CC-Ereignisse des simulierten Datensatzes dargestellt. Wie erwartet liegen die NC-Ereignisse (orange) im Vergleich zu den CC-Ereignissen (blau) überwiegend bei kleinen Σnpe -Werten. Nur in etwa 7% der NC-Ereignisse wurden mehr als $0.25 \cdot 10^7$ Photoelektronen erzeugt. Bei den CC-Ereignissen sind es 95%.

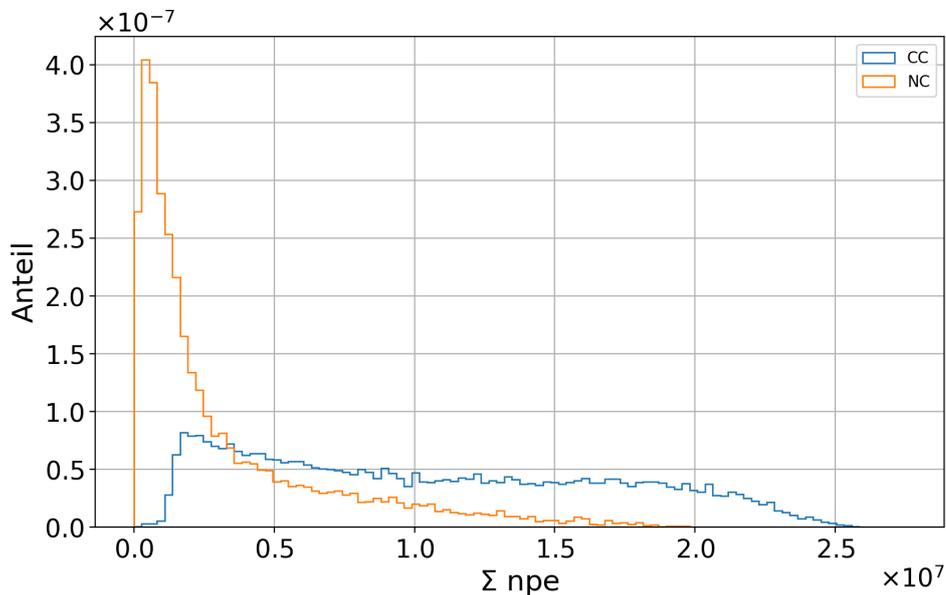


Abbildung 5.6: Verteilung des Features Σnpe für alle NC- und CC-Ereignisse des simulierten Datensatzes. In NC-Interaktionen werden in der Regel viel weniger npe erzeugt als in CC-Ereignissen. Daher ist der Anteil an NC-Ereignissen bei kleinen Σnpe -Werten am größten. Nur in etwa 7% der NC-Ereignisse wurden mehr als $0.25 \cdot 10^7$ Photoelektronen erzeugt. Im Gegensatz dazu sind es 95% aller CC-Ereignisse, auf die dies zutrifft.

Die aggregierte Features Methode wurde im Kontext von JUNO unter anderem bereits für die Energierekonstruktion von Reaktor-neutrinos in [33] verwendet. Eines der Features, welches dort genutzt wurde, ist der Ladungsschwerpunkt \vec{R}_{cc} (engl. „Center of Charge“, CoC)

$$\vec{R}_{\text{cc}} = \frac{\sum_i \vec{r}_{\text{PMT},i} \cdot \text{npe}_i}{\sum_i \text{npe}_i}. \quad (5.3.2)$$

Hierbei ist $\vec{r}_{\text{PMT},i}$ die Position des i -ten PMTs und npe_i die Anzahl der im PMT erzeugten Photoelektronen. Beide Summen laufen über alle für die Berechnung betrachteten PMTs. Der CoC wurde in der Energierekonstruktion als Feature verwendet, weil er in grober

Näherung mit der Position des Vertex übereinstimmt, an dem das Neutrino mit dem Szintillator wechselwirkt. Diese Information ist für die Energierekonstruktion wichtig, da die Entfernung des Ereignisses zum Zentrum des Detektors die Anzahl der erzeugten Photoelektronen beeinflusst. Die Anzahl an Photoelektronen nimmt zunächst mit wachsendem Abstand zum Zentrum zu, da die Photonen einen kleineren Weg zu den PMTs zurücklegen müssen. Ab einem Abstand von etwa 16 m zum Zentrum nimmt die Anzahl an Photoelektronen allerdings wieder ab. Der Grund hierfür sind Totalreflexion von Photonen mit großem Einfallswinkel. Im weiteren Verlauf dieser Bachelorarbeit wird untersucht, ob der CoC auch bei der Klassifikation in NC- und CC-Ereignisse hilfreich ist. Die Position, an der eine NC- oder CC-Interaktionen stattfindet, ist zwar im gesamten CD gleich wahrscheinlich, aber die Einschränkung auf ausschließlich FC-Ereignisse sorgt dafür, dass am Rand des Detektors mehr NC- als CC-Ereignisse stattfinden, da die sekundären Teilchen einer NC-Interaktion eine kleinere Reichweite haben. Die Anzahl der NC-Ereignisse ist also im Vergleich zur Anzahl an CC-Ereignissen am Rand des Detektors größer. Obwohl der CoC nur eine grobe Näherung der Position der Wechselwirkung ist, wird der Unterschied durch den Betrag des CoC R_{cc} bereits erkennbar. In Abbildung 5.7 ist dieser für alle NC- (orange) und alle CC-Ereignisse (blau) dargestellt. Der Anteil an NC- und CC-Ereignissen stimmen bis zu $R_{cc} \sim 11$ m nahezu überein. Danach nimmt der Anteil der NC-Ereignisse jedoch stärker zu als der für CC-Ereignisse. Der ungefähre Abstand der Wechselwirkung kann sich darüber hinaus in Kombination mit anderen Features ebenfalls als hilfreich herausstellen.

NC- und CC-Ereignisse unterscheiden sich aufgrund der Reichweite der sekundären Teilchen auch dadurch, wie das Licht im CD verteilt wird. Wegen der größeren Reichweite der sekundären Teilchen aus CC-Interaktionen werden Photonen bei CC-Ereignissen über weitere Strecken entlang der Teilchentrajektorie emittiert. Infolgedessen sind die npe-Verteilungen im CD für CC-Interaktionen eher spurenförmig. Die npe-Verteilungen von NC-Interaktionen sind dagegen eher punktförmig. Der CoC entspricht aufgrund seiner Definition (siehe Gleichung 5.3.2) in etwa dem Zentrum der npe-Verteilung. Aus diesem Grund kann ein potenzielles Maß für die Ausbreitung der Ereignisse über den Abstand zwischen dem CoC und den Positionen der LPMTs bestimmt werden. Dazu wird der mittlere Abstand \bar{R} zwischen diesen beiden berechnet, wobei jeder Abstand mit der im LPMT erzeugten npe gewichtet wird

$$\bar{R} = \frac{\sum_i R_i \cdot \text{npe}_i}{\sum_i \text{npe}_i} \quad \text{mit} \quad R_i = |\vec{R}_{cc} - \vec{r}_{\text{PMT},i}|. \quad (5.3.3)$$

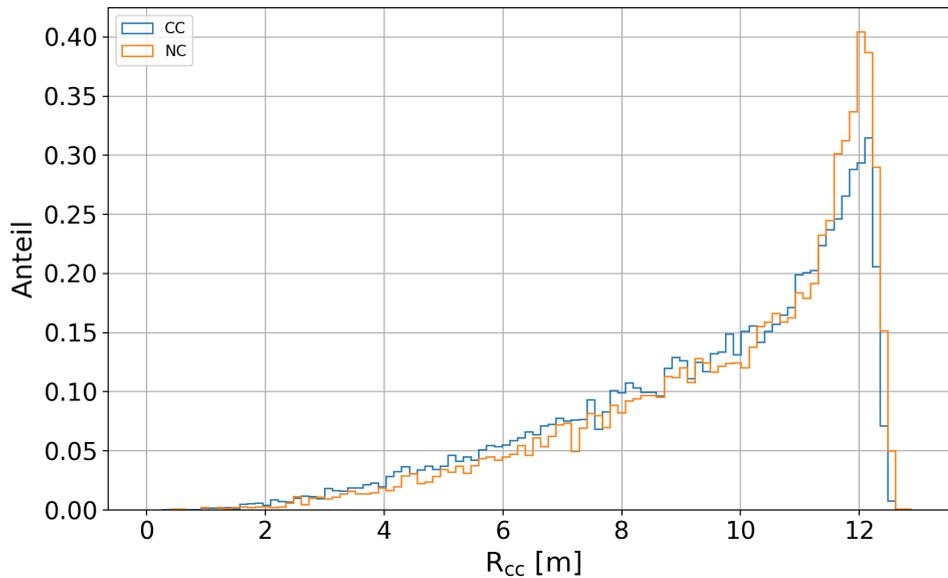


Abbildung 5.7: Verteilung des CoC für alle NC- und CC-Ereignisse des simulierten Datensatzes. Bis $R_{cc} \approx 11$ m liegt der Anteil der CC-Ereignisse leicht oberhalb des Anteils der NC-Ereignisse. Danach nimmt der Anteil der NC-Ereignisse jedoch stärker zu als der für CC-Ereignisse, weil wegen der Einschränkung von R_{Vertex} am Rand des CD mehr NC-Ereignisse stattfinden.

Mit diesem gewichteten Mittelwert kann jetzt die mit npe gewichtete Standardabweichung $\sigma(R)$ berechnet werden

$$\sigma(R) = \sqrt{\frac{\sum_i (R_i - \bar{R})^2 \cdot npe_i}{\sum_i npe_i}}. \quad (5.3.4)$$

Sowohl die Summen aus Gleichung 5.3.3 als auch aus 5.3.4 laufen über alle LPMTs. Die gewichtete Standardabweichung ist für punktförmige Ereignisse kleiner als für spurenförmigen Ereignissen, weil bei punktförmigen Ereignissen die LPMT mit vielen npe alle nah beieinander liegen, wodurch die Abweichung vom mittleren Abstand gering ist. Im Gegensatz dazu sind die LPMT mit vielen npe bei spurenförmigen Ereignissen entlang der Teilchentrajektorie verteilt. Dadurch ist die gewichtete Standardabweichung für solche Ereignisse größer. In Abbildung 5.8 sind die gewichtete Standardabweichungen für die NC- (orange) und CC-Ereignisse des simulierten Datensatzes dargestellt. Wider erwartend verhalten sich NC- und CC-Ereignisse weitestgehend gleich. Erst ab einer Standardabweichung von ca. 5 m ist der Anteil der CC-Ereignisse für etwa einen halben Meter größer als der Anteil der NC-Ereignisse. Danach wächst der Anteil an NC-Ereignissen jedoch stärker an als der der CC-Ereignisse.

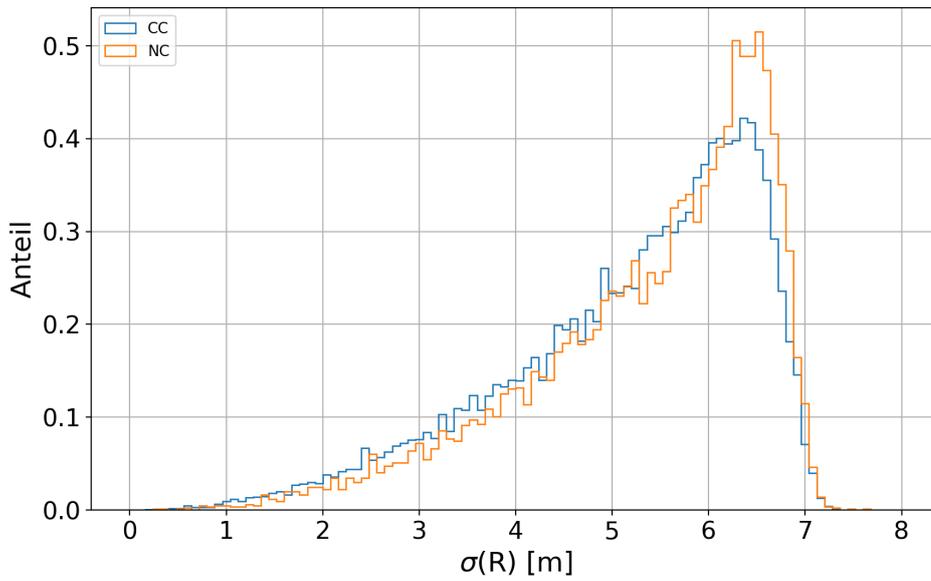


Abbildung 5.8: Verteilung der Standardabweichung $\sigma(R)$ des Abstands R für alle NC- und CC-Ereignisse des simulierten Datensatzes. Die Anteile beider Klassen stimmen über einen weiten Bereich nahezu überein, bis der Anteil der NC-Ereignisse ab $\sigma(R) \approx 6$ m stärker anwächst als der Anteil der CC-Ereignisse.

Der generelle Verlauf der Standardabweichungen beider Klassen ähnelt stark den Verteilungen des CoC aus Abbildung 5.7. Auch dort stimmen die Histogramme für die NC- und CC-Ereignisse bis zu einem bestimmten Abstand nahezu überein und wachsen danach unterschiedlich stark an. Der Vergleich der beiden potenziellen Features R_{cc} und $\sigma(R)$ in Abbildung 5.9 zeigt, dass zwischen diesen beiden Größen bis zu den Abständen, ab denen die Anteile der NC-Ereignisse stärker zunehmen, vor allem für die NC-Ereignisse ein nahezu linearer Zusammenhang besteht. Auch die CC-Ereignisse weisen hier einen linearen Zusammenhang auf, der jedoch mit wachsendem R_{cc} und $\sigma(R)$ verschmiert. Außerdem weichen oberhalb von $R_{cc} \approx 11$ m und $\sigma(R) \approx 6$ m einige der NC- und CC-Ereignisse vom linearen Trend ab. In $\sigma(R)$ könnte also weitere Information stecken, die die Klassifikation verbessern könnte.

In [34] wurde gezeigt, dass es für einige Methoden des maschinellen Lernens wie z. B. NN hilfreich sein kann, aus der Kombination bereits herausgearbeiteter Features weitere Features zu bestimmen. $R \cdot npe$ ist ein solches Feature, welches sich unter anderem aus dem Betrag des CoC R_{cc} und Σnpe zusammensetzt

$$R \cdot npe = \frac{\sum_i (R_i \cdot npe_i)^2}{(\sum_i npe_i) \cdot nPMTs}. \quad (5.3.5)$$

Hierbei ist nPMTs die Anzahl an LPMTs, die im CD verbaut sind.

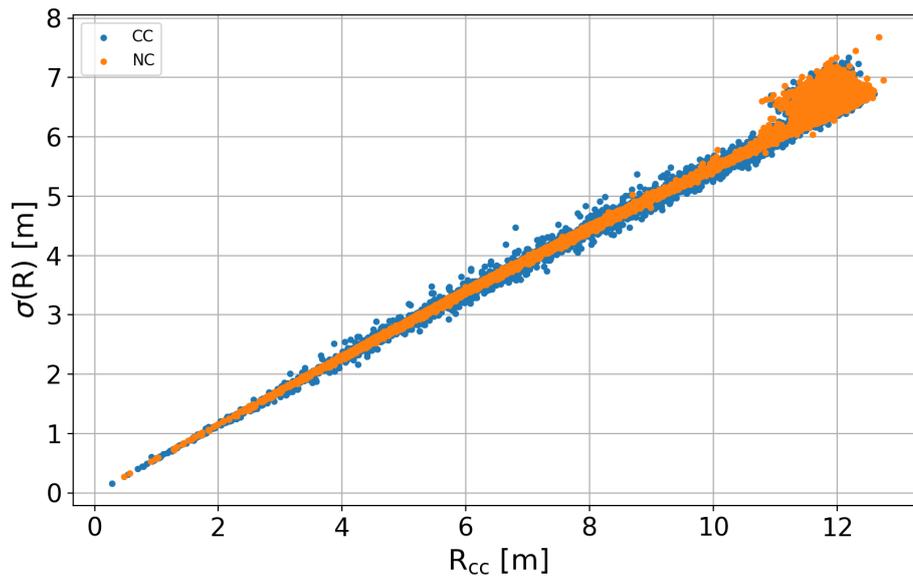


Abbildung 5.9: Vergleich der Feature $\sigma(R)$ und R_{cc} zur Untersuchung der Abhängigkeit $\sigma(R)$ von R_{cc} . Jeder orange Punkt entspricht hier einem NC- und jeder blaue Punkt einem CC-Ereignis des simulierten Datensatzes. Bis zu $R_{cc} \approx 11$ m und $\sigma(R) \approx 6$ m weisen beide Klassen einen linearen Verlauf auf, wobei der Verlauf der CC-Ereignisse mit wachsendem R_{cc} und $\sigma(R)$ verschmiert. Oberhalb davon gibt es einige NC- und CC-Ereignisse, die nicht dem linearen Trend folgen. $\sigma(R)$ ist somit stark von R_{cc} abhängig, enthält aber für einige Ereignisse zusätzliche Information.

$R \cdot npe$ ist aufgrund seiner Definition stark von dem Feature Σnpe abhängig. Dies ist auch in Abbildung 5.10 zu erkennen, in der für alle NC- und CC-Ereignisse $R \cdot npe$ in Abhängigkeit von Σnpe dargestellt ist. Jeder orange Punkt entspricht dabei einem NC- und jeder blaue einem CC-Ereignis. Die Mehrheit der Ereignisse beider Klassen folgt einem linearen Verlauf. Würden alle Ereignisse diesen Verlauf folgen, hätte $R \cdot npe$ keine Information, die nicht bereits in Σnpe steckt. Da dieser lineare Verlauf aber sowohl für die NC- als auch CC-Ereignisse mit wachsendem $R \cdot npe$ und Σnpe verschmiert, beinhaltet $R \cdot npe$ zusätzliche Informationen, die die Klassifikation verbessern könnte. Deshalb wird seine Auswirkung auf die Klassifikationsfähigkeit der NN untersucht.

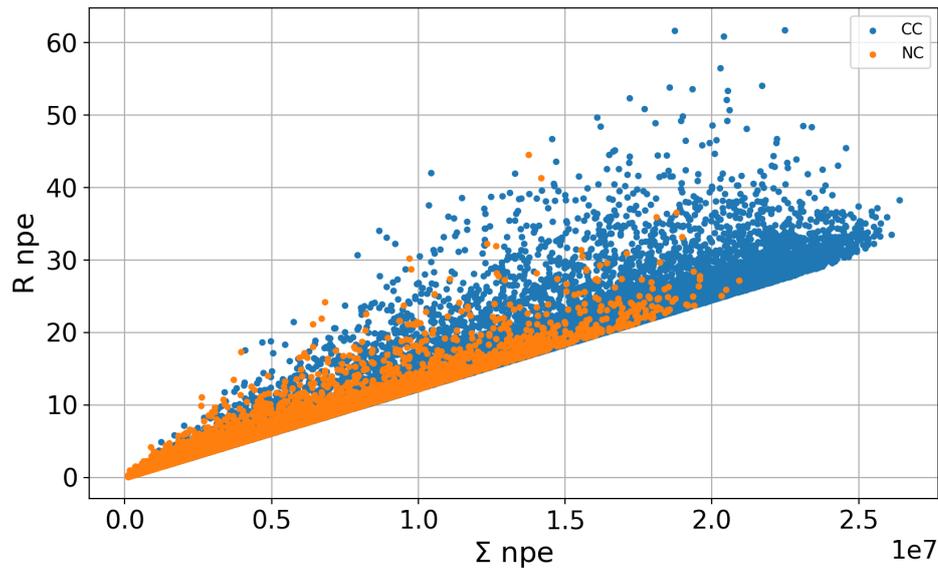


Abbildung 5.10: Vergleich der Feature $R \cdot npe$ und Σnpe zur Untersuchung der Abhängigkeit $R \cdot npe$ von Σnpe . Jeder orange Punkt entspricht hier einem NC- und jeder blaue Punkt einem CC-Ereignis des simulierten Datensatzes. Für einen Großteil der NC- und CC-Ereignisse ist die Abhängigkeit zwischen diesen beiden Features linear, was bedeuten würde, dass $R \cdot npe$ keine zusätzliche Information besitzt. Da es jedoch sowohl NC- als auch CC-Ereignisse gibt, die nicht dem linearen Trend folgen, enthält $R \cdot npe$ für diese Ereignisse zusätzliche Information.

5.3.3 npe-Zeit-Histogramm-Features

Die npe-Zeit-Histogramme liefern zusätzlich zu den FHT der LPMTs eine weitere zeitliche Information zu den Ereignissen, die für die Klassifikation genutzt werden kann. Dadurch, dass die npe-Zeit-Histogramme alle aus 100 Bins mit einer Breite von je 14 ns bestehen, beträgt die Zeitauflösung 14 ns. In Abbildung 5.11 sind die Zeitpunkte t_{\max} , an denen die npe-Zeit-Histogramme der NC- (orange) und CC-Ereignisse (blau) des simulierten Datensatzes ihre globalen Maxima aufweisen, dargestellt. Für beide Klassen wird das globale Maximum immer innerhalb der ersten 160 ns erreicht. Auch die generelle Verteilung von t_{\max} ist für NC-Ereignisse und CC-Ereignisse ähnlich. Allerdings tritt das Maximum für NC-Ereignisse im Vergleich zu den CC-Ereignissen tendenziell früher auf. 69 % der NC-Ereignisse weisen ein Maximum innerhalb der ersten 56 ns auf. Bei den CC-Ereignissen sind es nur 60 %. t_{\max} könnte daher potenziell dazu beitragen, die Klassifikationsfähigkeit zu verbessern. Für das Training wird t_{\max} so definiert, dass es dem Zeitpunkt zu Beginn des Bins entspricht.

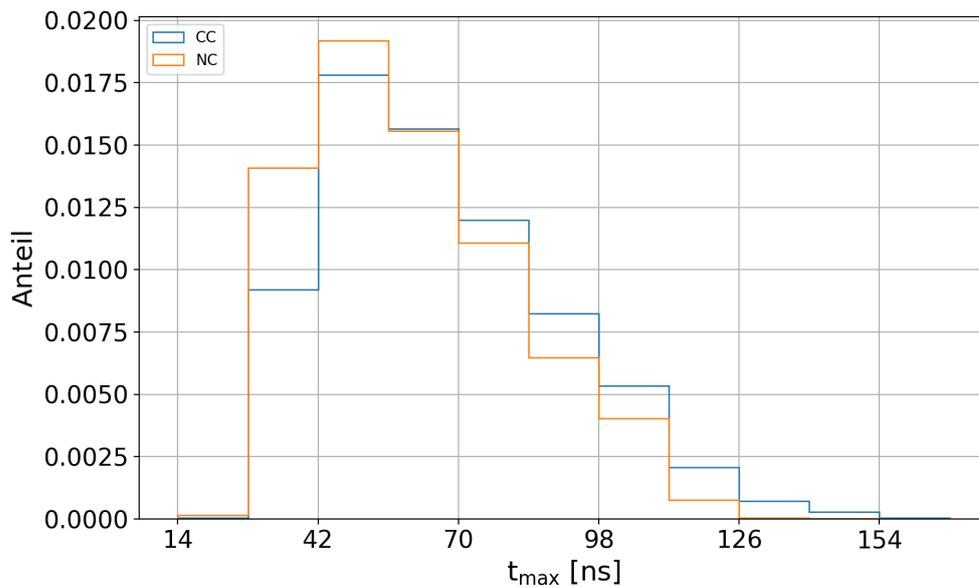


Abbildung 5.11: Zeitpunkte t_{\max} , zu denen die globalen Maxima der npe-Zeit-Histogramme aller NC- und CC-Ereignisse des simulierten Datensatzes auftreten. Die globalen Maxima werden in den NC-Ereignissen tendenziell früher erreicht als in den CC-Ereignissen. 69 % der NC-Ereignisse weisen ein Maximum innerhalb der ersten 56 ns auf. Bei den CC-Ereignissen sind es nur 60 %.

Einige NC- und CC-npe-Zeit-Histogramme weisen zusätzlich zu dem anfänglichen und dem durch die Afterpulse resultierenden Maximum weitere Maxima dazwischen auf. Diese entstehen zum Beispiel durch das beim Zerfall eines Myons entstandene Michel-Elektronen oder durch die Abregung von zuvor durch sekundäre Teilchen angeregten Atomen. In Tabelle 5.3 sind die prozentualen Anteile der simulierten NC- und CC-Ereignisse angegeben, die zwischen 160 ns und 900 ns keinen, einen, zwei oder drei zusätzliche Maxima aufweisen. Die zeitliche Einschränkung schließt das globale Maximum zu Beginn des Auslesefensters und das Maximum durch die Afterpulse aus. Im Großteil der Ereignisse weisen sowohl die NC- als auch die CC-Ereignisse keine weiteren Maxima auf. Dennoch sind es rund 7 Prozentpunkte mehr CC-Ereignisse mit zusätzlichen Maxima. Von denen haben die meisten ein weiteres Maximum. Bei den NC-Ereignissen sind es 11.5 % und bei den CC-Ereignissen 16.6 %. Nur 1.3 % der NC- und nur 2.1 % der CC-Ereignisse haben zwei oder mehr zusätzliche Maxima. CC-Ereignisse weisen also häufiger zusätzliche Maxima auf als NC-Ereignisse. Ob diese Information der Klassifikation helfen kann, wird mit Hilfe des Features nPeaks untersucht. nPeaks entspricht hierbei der Anzahl an zusätzliche Maxima, die ein Ereignis aufweist. Außerdem werden die Zeitpunkte, an denen diese Maxima auftreten, verwendet. Sie werden als t_1 , t_2 und t_3 bezeichnet. Genau wie beim Feature t_{\max} werden die Zeitpunkte zu Beginn des Bins genutzt. Tritt kein weiteres Maximum auf, sind t_1 , t_2 und t_3 0 ns.

Tabelle 5.3: Prozentuale Anteile der simulierten Ereignisse, die zwischen 160 ns und 900 ns weitere Maxima aufweisen. Die Daten sind unterteilt in Ereignisse, bei denen kein, ein, zwei oder drei weitere Maxima existieren. Angegeben sind jeweils der Anteil der NC-Ereignisse und in Klammern der Anteil der CC-Ereignisse.

Anzahl der Maxima	0	1	2	3
prozentualer Anteil	87.2 (81.3)	11.5 (16.6)	1.2 (1.9)	0.1 (0.2)

Für Verteilungen wie die npe-Zeit-Histogramme, die am Rand in einem kleinen Bereich große Werte und im Vergleich dazu über einen größeren Bereich kleinere Werte aufweisen, ist eine häufig verwendete Methode das Kopf-zu-Schwanz-Verhältnis. Diese Methode berechnet das Verhältnis zwischen der Summe der Höhe der Bins, die zum Kopf einer Verteilung gehören und der Summe der Höhe der Bins, die zum Schwanz der Verteilung gehören. Der Kopf einer Verteilung ist dabei der Bereich, in dem sich die großen Werte befinden und als Schwanz wird der Bereich mit den kleinen Werten bezeichnet. Die genaue Abgrenzung ist vom jeweiligen Problem abhängig. Für viele Ereignisse, wie z. B. das aus Abbildung 5.2, fallen die npe-Zeit-Histogramme nach dem globalen Maximum nicht direkt ab, sondern halten sich noch über einige zehn Nanosekunden auf einer ähnlichen Höhe. Um diese Bins dem Kopf zuschreiben zu können, werden für die npe-Zeit-Histogramme die ersten 15 Bins als Kopf definiert, was den ersten 210 ns entspricht. Im Folgenden wird dieses Feature als 15/85 bezeichnet und berechnet sich über

$$15/85 = \frac{\sum_{i \leq 15} h_i}{\sum_{i > 15} h_i}, \quad (5.3.6)$$

wobei h_i die Höhe des jeweiligen Bins ist.

5.4 Normierung der Features

Die Größenordnung der eingeführten Features variiert teilweise sehr stark. Vor allem das Feature Σnpe ist mit einem mittleren Wert von $\sim 10^7$ um mehrere Größenordnungen größer als die anderen Features. Dadurch würde dieses eine Feature die gewichtete Summe, die jedes Neuron berechnet (siehe Gleichung 4.1.1), dominieren, wodurch alle anderen Feature vernachlässigbar wären. Das NN könnte infolgedessen nicht richtig trainiert werden. Daher werden die Features zwischen 0 und 1 normiert. Dazu wird in dieser Bachelorarbeit die Min-Max-Norm verwendet

$$x_i^{\text{norm}} = \frac{x_i - \min(x)}{\max(x) - \min(x)}. \quad (5.4.1)$$

Hierbei ist x die Menge eines Features und damit x_i das zu einem Ereignis gehörende Feature der Menge x . Dementsprechend ist x_i^{norm} das zum selben Ereignis gehörende normierte Feature.

5.5 Klassifikationsfähigkeit eines Features

Bevor ein NN mit den Features aus den vorherigen Abschnitten trainiert wird, kann mit Hilfe der AUC, die im Abschnitt 4.6 eingeführt wurde, bestimmt werden, wie gut jedes Feature die simulierten Ereignisse alleinstehend klassifizieren kann. Dazu werden statt der Vorhersagen des NN die Verteilungen der Features für die beiden Klassen miteinander verglichen.

Tabelle 5.4: Vergleich der Klassifikationsfähigkeit jedes aggregierten Features mit Hilfe der AUC

Feature	n200	FHT _{min}	FHT _{max}	Σ npe	R_{cc}	$\sigma(R)$	$R \cdot \text{npe}$	15/85	t_{max}	nPeaks	t_1	t_2	t_3
AUC	0.6856	0.6060	0.2779	0.8606	0.4509	0.4518	0.8561	0.6634	0.5687	0.5294	0.5300	0.5036	0.5004

In Tabelle 5.4 ist die AUC für alle in dieser Bachelorarbeit eingeführten Features aufgelistet. Ein Teil der Features ist bereits in der Lage, die simulierten Ereignisse teilweise richtig den Klassen NC und CC zuzuordnen. Das beste Ergebnis zeigt Σ npe mit einer AUC von 0.8606. Somit ist Σ npe das Feature, das isoliert die beste Klassifikationsfähigkeit aufweist. Weil $R \cdot \text{npe}$ stark von Σ npe abhängt, ist die AUC mit 0.8561 ähnlich groß. Die Features FHT_{max}, R_{cc} und $\sigma(R)$ haben alle eine AUC, die kleiner als 0.5 ist. Dies liegt daran, dass ihre Werte für NC-Ereignisse oft größer sind als für CC-Ereignisse, was zu Fehlklassifikationen führt, da generell davon ausgegangen wird, dass große Werte für CC-Ereignisse sprechen. Für NN ist dies jedoch kein Problem, weil auch negative Gewichte möglich sind. Einige Features, wie z. B. die Zeitpunkte t_1 , t_2 und t_3 , an denen die lokalen Maxima in den npe-Zeit-Histogrammen auftauchen, haben eine AUC nahe 0.5. Solche Features sind allein nicht in der Lage, die Ereignisse den beiden Klassen zuzuordnen. Dennoch können sie in Kombination mit anderen Features eine wichtige Rolle spielen. Stellt sich jedoch heraus, dass sie keinen Einfluss auf die Klassifikationsfähigkeit der NN haben, werden diese Features nicht mehr verwendet, weil sie sonst nur für unerwünschtes Rauschen sorgen, was die Klassifikationsfähigkeit ggf. verschlechtert.

Kapitel 6

Training und Evaluation der Neuronalen Netze

Das Ziel dieser Bachelorarbeit ist, die bestmögliche Klassifikation von atmosphärischen Neutrino-Signalen unter Verwendung der aggregierten Features-Methode zu erreichen. Wie die dafür verwendeten NN trainiert und welche Klassifikationsqualitäten erreicht wurden, werden im folgenden Kapitel beschrieben.

6.1 Implementierung

Das komplette Training der NN ist in Python3 geschrieben. Als Framework wurde hierbei PyTorch [35] verwendet. Dies ist eine umfangreiche Bibliothek, die die Konstruktion von NN ermöglicht. Dazu beinhaltet sie unter anderem bereits vorgefertigte Schichten und verschiedene Aktivierungs- und Verlustfunktionen. Außerdem vereinfacht PyTorch wegen der Möglichkeit von Tensorberechnungen und der Verwendung des Autograd-Systems das Training von NN. Das Autograd-System speichert alle Operationen, die beim Durchgang von Daten durch ein NN ausgeführt werden, in einem Berechnungsgraphen. Dieser kann seinerseits wiederum für die Backpropagation verwendet werden, welche auch von PyTorch übernommen werden kann.

6.2 Training und Optimierung

Die bestmögliche Klassifikationsfähigkeit eines NN ist zum einen von den aggregierten Features und zum anderen von der Wahl der Hyperparameter abhängig. Die aus den simulierten Daten aggregierten Features wurden bereits im vorherigen Kapitel 5 eingeführt. Der beste Satz an Hyperparametern wird im Folgenden mit Hilfe der Bayes'schen Optimierung bestimmt.

6.2.1 Bayes'sche Optimierung

Das Konzept hinter der Bayes'schen Optimierung ist im Abschnitt 4.5 eingeführt worden. Sie optimiert eine Blackbox-Funktion, von der nur die Eingabewerte und der Ausgabewert bekannt sind. Die Klassifikationsfähigkeit eines NN ist umso besser, je näher die AUC seiner ROC-Kurve an der 1 liegt. Dementsprechend wird hier eine Funktion optimiert, die einen Satz an Hyperparametern erhält, ein NN, wie in Abschnitt 4.3 beschrieben, trainiert und schließlich die AUC ausgibt. Für das Training der NN werden die jeweiligen Trainingsdatensätze und für die Berechnung der AUC die Testdatensätze verwendet. Die Trainingsdatensätze aller drei Modelle weisen eine Ungleichheit in der Menge an NC- zu CC-Ereignissen auf. Diese Ungleichheit zugunsten der CC-Ereignisse wird beim Training durch die Einführung der Gewichte in der Verlustfunktion berücksichtigt (siehe Abschnitt 4.3.1). Die Bayes'sche Optimierung ist ein iterativer Prozess, bei dem in jedem Anpassungsschritt ein neues NN trainiert wird. Da dies sehr rechenintensiv ist, wird die Optimierung auf 500 Anpassungsschritte begrenzt. Zusätzlich werden die potenziellen Hyperparameter-Werte im Vorfeld auf bestimmte Intervalle beschränkt, die in der Tabelle 6.1 aufgelistet sind. Für den Großteil der Hyperparameter werden für alle drei Modelle die gleichen Intervalle verwendet. Aufgrund der geringen Menge an Ereignissen mit Energien zwischen 1 GeV und 3 GeV werden allerdings die Intervalle für die Batchgröße und die Anzahl an Neuronen in den verborgenen Schichten für das erste Modell verkleinert. Dadurch wird die mögliche Komplexität des NN eingeschränkt, um frühzeitiges Overfitting zu verhindern.

Tabelle 6.1: Intervalle an möglichen Hyperparameter-Werten für die Bayes'sche Optimierung. Zusätzlich sind zu jedem Intervall der Zahlenbereich angegeben, aus denen die Werte stammen.

Hyperparameter	Zahlenbereich	Modell 1	Modell 2 & 3
Lernrate	\mathbb{R}	$[10^{-6}, 0.1]$	$[10^{-6}, 0.1]$
Batchgröße	\mathbb{N}	$[20, 500]$	$[100, 1000]$
Anzahl der Epochen	\mathbb{N}	$[5, 100]$	$[5, 100]$
Dropout Wahrscheinlichkeit	\mathbb{R}	$[0.1, 0.5]$	$[0.1, 0.5]$
Anzahl an verborgenen Schichten	\mathbb{N}	$[2, 50]$	$[2, 50]$
Anzahl an Neuronen in den verborgenen Schichten	\mathbb{N}	$[10, 100]$	$[10, 300]$

Die mittels Bayes'scher Optimierung trainierten Modelle 1, 2 und 3 variieren lediglich in ihrer inneren Struktur, denn die Anzahl der Neuronen in der Eingabe- und der Ausgabeschicht sind bereits im Voraus festgelegt. Die Anzahl der Eingabeneuronen ist durch die Menge an aggregierten Features bestimmt und beträgt somit für alle Modelle 13. Die Anzahl der Ausgabeneuronen hingegen wird durch die spezifische Aufgabe der NN bestimmt. Da es sich um binäre Klassifikatoren handelt, ist hier jeweils nur ein Neuron erforderlich. Auch die Aktivierungsfunktionen sind vor dem Training bereits festgelegt. Für jedes Neuron einer verborgenen Schicht wird die ReLU-Funktion und für

das Ausgabeneuron die Sigmoid-Funktion verwendet. Die Verwendung der ReLU-Funktion gewährleistet, dass die Ausgabewerte der verborgenen Neuronen stets positiv sind, während die Sigmoid-Funktion dafür sorgt, dass die abschließende Ausgabe der Modelle im Bereich zwischen 0 und 1 liegt. Die Werte, die mit Hilfe der Bayes'schen Optimierung als optimale Hyperparameter ermittelt wurden, sind in Tabelle 6.2 aufgelistet. Außerdem ist zu jedem Modell die Epoche angegeben, nach der das Training wegen Overfitting abgebrochen wurde. Die Modelle 1, 2 und 3 erreichen mit diesen Sätzen an Hyperparametern eine AUC von 0.9570, 0.9463 bzw. 0.9023.

Tabelle 6.2: Bester Satz an Hyperparametern für die Modelle 1, 2 und 3 nach der Bayes'schen Optimierung unter Verwendung aller 13 Features. Bei der Anzahl der Epochen ist in der Klammer jeweils die Epoche angegeben, nach der das Training aufgrund von Overfitting abgebrochen wurde.

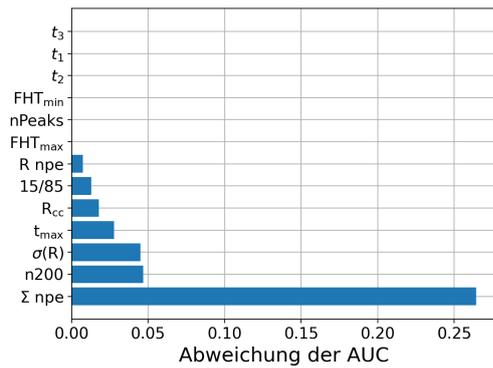
Hyperparameter	Modell 1	Modell 2	Modell 3
Lernrate	10^{-2}	$7 \cdot 10^{-3}$	$6 \cdot 10^{-4}$
Batchgröße	294	100	100
Anzahl der Epochen	100 (✓)	100 (15)	100 (10)
Dropout Wahrscheinlichkeit	0.28	0.1	0.1
Anzahl an verborgenen Schichten	2	2	5
Anzahl an Neuronen in den verborgenen Schichten	10	214	227

6.2.2 Selektion der aggregierten Features

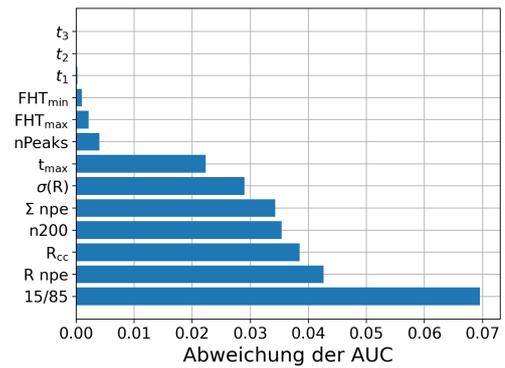
Obwohl die Modelle 1, 2 und 3 mit allen 13 aggregierten Features trainiert wurden, trägt nicht jedes dieser Features gleichermaßen zur Klassifikationsfähigkeit bei. Features, die keinen oder nur einen sehr geringen Einfluss auf die Ausgabe der Modelle haben, können die Klassifikationsfähigkeit ggf. sogar verschlechtern, weil sie für unerwünschtes Rauschen sorgen. Solche Features sollten daher identifiziert und im Folgenden nicht mehr berücksichtigt werden. Die Bestimmung des individuellen Einflusses eines Features auf die Ausgabe eines NN ist jedoch nicht ohne Weiteres möglich, da die Neuronen eines NN die Features auf unterschiedliche Weisen kombinieren und darüber hinaus noch miteinander interagieren. Daraus ergibt sich eine Komplexität, die es erschwert, die Ausgabe des NN eindeutig auf den Einfluss eines einzelnen Features zurückzuführen. Um dennoch die Bedeutung der verschiedenen aggregierten Features für die Modelle 1, 2 und 3 zu ermitteln, wird die Feature-Ablation-Methode (FA-Methode) verwendet. Bei der FA-Methode wird die Leistung eines NN anhand einer bestimmten Metrik, in diesem Fall der AUC, vor und nach der Missachtung eines Features verglichen. Dazu werden nacheinander die Zahlenwerte eines Features im Testdatensatz für jedes Ereignis auf 0 gesetzt, sodass die Modelle zwar mit allen Features trainiert werden, für die Berechnung der AUC jedoch

nicht auf die Information des jeweiligen Features zugreifen können. Dadurch ergibt sich, dass bei einflussreichen Features die Abweichung zwischen der AUC, die das Modell mit allen vorhandenen Features erreicht, und der AUC, die das Modell nach Entfernen eines spezifischen Features erreicht, größer ist als bei Features, die das Modell nur geringfügig oder gar nicht berücksichtigt.

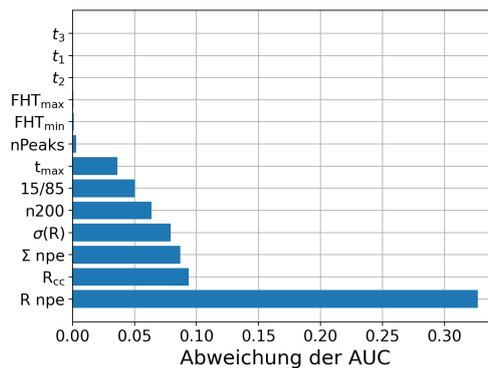
Die Ergebnisse der FA-Methode sind für alle drei Modelle in Abbildung 6.1 dargestellt. Hierbei sind die Features jeweils absteigend nach ihrem Einfluss auf die Modellvorhersage sortiert. Die einflussreichsten Features der Modelle 1, 2 und 3 sind Σ npe, 15/85 bzw. $R \cdot$ npe. Wie erwartet sind dies entweder Features, die stark von Σ npe abhängen oder Σ npe selbst, da Σ npe alleinstehend die beste Klassifikationsfähigkeit aufweist. Trotzdem haben auch Features wie z. B. R_{cc} oder $\sigma(R)$, die allein betrachtet kaum Klassifikationsfähigkeit aufweisen, einen Einfluss auf die Ausgabe der drei Modelle. Den geringsten Einfluss auf alle drei Modelle haben die Zeitpunkte t_1 , t_2 und t_3 . Auch die Features FHT_{\min} und FHT_{\max} sowie nPeaks haben bei jedem Modell eine Abweichung der AUC von einem Prozent oder weniger. Mit Ausnahme des Features nPeaks haben sich alle diese Features somit als nicht förderlich für die Klassifikation erwiesen. Interessanterweise zeigen die Modelle 2 und 3 ohne die Einbeziehung von nPeaks eine verschlechterte Klassifikationsqualität. Aufgrund dessen wird nPeaks trotz seines geringfügigen Einflusses erneut in das Training der Modelle 2 und 3 integriert. Folglich werden die Modelle 2 und 3 mit den acht einflussreichsten Features erneut trainiert, während Modell 1 nur die sieben einflussreichsten Features verwendet.



(a) Modell 1



(b) Modell 2



(c) Modell 3

Abbildung 6.1: Abweichung der AUC durch die FA-Methode für die Modelle 1, 2 und 3. Die Balkendiagramme sind alle absteigend nach der Abweichung sortiert, sodass das einflussreichste Feature ganz unten ist. Dies sind für die Modelle 1, 2 und 3 jeweils Σ npe, 15/85 und R npe. Die Zeitpunkte t_1 , t_2 und t_3 üben den geringsten Einfluss auf alle drei Modelle aus. Gleichermäßen zeigen auch die Features FHT_{\min} , FHT_{\max} sowie nPeaks in jedem Modell lediglich eine Abweichung der AUC von einem Prozent oder weniger.

6.2.3 Finale Modellarchitekturen

Für das erneute Training der Modelle 1, 2 und 3 sind die Hyperparameter-Werte, die mittels Bayes'scher Optimierung in Abschnitt 6.2.1 ermittelt wurden, aufgrund der reduzierten Anzahl an Eingabeneuronen nicht mehr optimal. Um die bestmöglichen Klassifikationsfähigkeiten zu erreichen, wird die Bayes'sche Optimierung deshalb erneut mit 500 Anpassungsschritten und der Einschränkung auf die Intervalle aus Tabelle 6.1 durchgeführt. Die daraus ermittelten besten Hyperparameter-Werte sind in Tabelle 6.3 aufgeführt. Zusätzlich sind in den Klammern die Epochen angegeben, nach der die Trainings aufgrund von Overfitting abgebrochen wurden. Die neu trainierten Modelle 1, 2 und 3 erreichen eine AUC von 0.9573, 0.9464 bzw. 0.9049. Dies bestätigt die Beobachtung aus dem vorherigen Abschnitt 6.2.2, dass die missachteten Features für die Klassifikationsfähigkeit keine Rolle gespielt haben, denn in keinem Fall hat sich die AUC verschlechtert. Tatsächlich hat sich die Klassifikationsfähigkeit aller Modelle sogar minimal verbessert.

Tabelle 6.3: Finaler Satz an Hyperparametern für die Modelle 1, 2 und 3 nach der Bayes'schen Optimierung. Bei der Anzahl der Epochen ist in der Klammer jeweils die Epoche angegeben, zu der das Training aufgrund von Overfitting abgebrochen wurde.

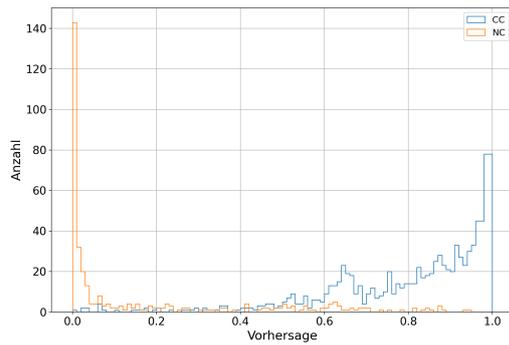
Hyperparameter	Modell 1	Modell 2	Modell 3
Lernrate	$3 \cdot 10^{-3}$	$2 \cdot 10^{-3}$	10^{-3}
Batchgröße	89	1000	641
Anzahl der Epochen	85 (✓)	48 (24)	100 (33)
Dropout Wahrscheinlichkeit	0.22	0.39	0.38
Anzahl an verborgenen Schichten	2	2	3
Anzahl an Neuronen in den verborgenen Schichten	10	300	197

6.3 Evaluation

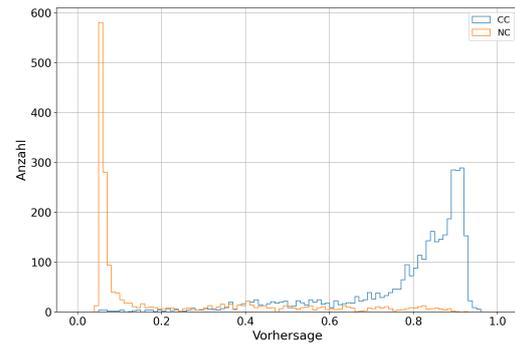
Die AUC-Werte allein liefern noch keine präzise Einsicht darüber, inwieweit die Modelle Ereignisse in die Klassen NC und CC unterteilen können, da dies von der Wahl des Schwellenwerts abhängt. Diese ist wiederum davon abhängig, wie gut sich die Vorhersagen der beiden Klassen voneinander unterscheiden.

6.3.1 Modellvorhersagen

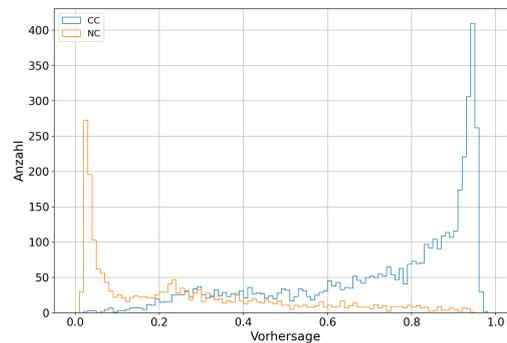
Die Vorhersagen der Modelle werden für die Ereignisse des jeweiligen Testdatensatzes getroffen. Die Zahlenwerte der Vorhersagen können als Wahrscheinlichkeit interpretiert werden, mit der die Modelle davon ausgehen, dass es sich bei einem Ereignis um eine CC-Interaktion handelt. In Abbildung 6.2 sind die Ergebnisse der drei Modelle dargestellt, wobei die Vorhersagen jeweils in NC- (orange) und CC-Ereignisse (blau) unterteilt sind. Die ungleiche Verteilung an Vorhersagen für NC- und CC-Ereignissen ist der Ungleichheit in den Testdatensätzen geschuldet. Das erste Modell hat aufgrund der geringen Menge an Ereignissen zwischen 1 GeV und 3 GeV im Vergleich zu den Modellen 2 und 3 im Gesamten deutlich weniger Vorhersagen getroffen. Wie aus den AUC-Werten von über 0.9 hervorgeht, kann jedes der drei Modelle die NC- und CC-Vorhersagen gut trennen. Sie ordnen dem Großteil der NC-Ereignisse Zahlenwerte nahe der 0 und CC-Ereignissen Zahlenwerte nahe der 1 zu. Allerdings sind die NC-Vorhersagen im Vergleich zu CC-Ereignissen weniger stark verschmiert. Die Modelle sind demnach sicherer in Klassifikation von NC- als in der Klassifikation von CC-Ereignissen. Das erste Modell weist in der CC-Vorhersage zwischen 0.6 und 0.7 ein weiteres lokales Maximum auf. Der Grund des Auftretens dieses Maximums konnte mit den zur Verfügung stehenden Information über diese Ereignisse nicht bestimmt werden.



(a) Modell 1



(b) Modell 2



(c) Modell 3

Abbildung 6.2: Vorhersagen der Modelle 1, 2 und 3, die für die Testdaten getroffen worden sind. Alle drei Modelle ordnen dem Großteil der NC-Ereignisse Zahlenwerte nahe der 0 und dem Großteil der CC-Ereignisse Zahlenwerte nahe der 1 zu. Das erste Modell zeigt in der CC-Vorhersage ein zusätzliches lokales Maximum im Bereich von 0.6 bis 0.7. Die genaue Ursache für das Erscheinen dieses Maximums konnte anhand der verfügbaren Informationen zu diesen Ereignissen nicht ermittelt werden.

6.3.2 Schwellenwertoptimierung und Klassifikationsqualität

Das Ziel besteht darin, für jedes Modell einen Schwellenwert zu ermitteln, durch welchen möglichst viele CC-Ereignisse richtig klassifiziert werden, während gleichzeitig die Genauigkeit der Modelle größtmöglich bleibt. Zur Ermittlung des optimalen Schwellenwerts werden die Genauigkeit und die Reinheit der Modelle benötigt. Die Genauigkeit entspricht dem Anteil an richtig klassifizierten NC- und CC-Ereignissen des Testdatensatzes. Die Reinheit hingegen wird ausschließlich auf den als CC klassifizierten Ereignissen berechnet und gibt den Anteil richtig klassifizierter CC-Ereignisse in dieser Teilmenge wieder. Diese beiden Größen werden für alle Schwellenwerte zwischen 0 und 1 mit einer Schrittgröße von 0,01 berechnet. Der optimale Schwellenwert ist dann der, bei dem die Summe am größten ist.

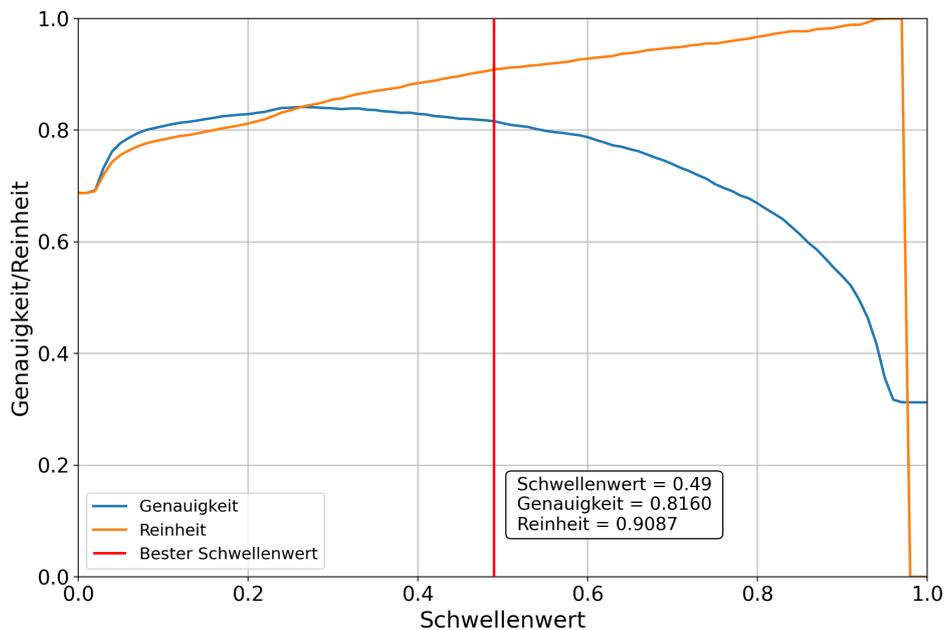


Abbildung 6.3: Schwellenwertoptimierung des dritten Modells. Als optimaler Schwellenwert wird der Wert verwendet, bei dem die Reinheit und die Genauigkeit größtmöglich sind. Beide Größen stimmen bei einem Schwellenwert von 0 überein und betragen ca. 0.7. Danach wachsen sie zunächst stark an, weil der Großteil der NC-Ereignisse kleine Modellvorhersagen aufweist und somit bereits bei kleinen Schwellenwerten der Großteil richtig klassifiziert wird. Während die Reinheit immer weiter ansteigt, fällt die Genauigkeit ab einem Schwellenwert von etwa 0.25 wieder ab, weil mit steigendem Schwellenwert zu viele CC-Ereignisse falsch klassifiziert werden. Ab einem Schwellenwert von 0.98 fällt die Reinheit auf 0 ab, da das dritte Modell keine CC-Vorhersage hat, die oberhalb dieses Wertes liegt. Somit werden alle Ereignisse als NC klassifiziert. Der optimale Schwellenwert ist hier durch eine rote vertikale Linie gekennzeichnet und beträgt 0.49. Mit diesem Schwellenwert wird eine Reinheit von 90.87 % und eine Genauigkeit von 81.60 % erreicht.

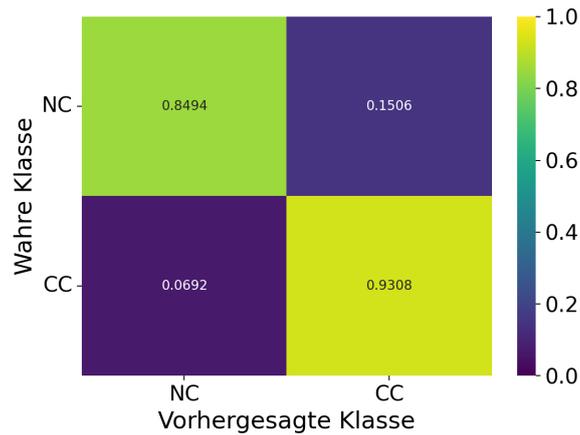
In Abbildung 6.3 ist der Verlauf der Genauigkeit und der Reinheit exemplarisch für das dritte Modell dargestellt. Die Genauigkeit und die Reinheit, die in Blau bzw. Orange dargestellt sind, stimmen aufgrund ihrer Definition bei einem Schwellenwert von 0 überein, da bei diesem alle NC-Ereignisse missklassifiziert werden. Für das dritte Modell beträgt dieser Wert etwa 0.7, was dem Anteil an CC-Ereignissen im Testdatensatz entspricht. Dadurch, dass der Großteil der NC-Vorhersagen nahe der 0 liegt, werden bereits bei kleinen Schwellenwerten der Großteil der NC-Ereignisse richtig klassifiziert. Deshalb wachsen sowohl die Genauigkeit als auch die Reinheit zunächst mit steigendem Schwellenwert stark an. Nach dem starken Anstieg steigt die Reinheit weiterhin an, allerdings mit einer geringeren Steigung, da die Menge der NC-Ereignisse mit hohen Vorhersage-Werten abnimmt. Aber auch die Menge an richtig klassifizierten CC-Ereignissen wird immer weniger. Ab einem Schwellenwert von 0.98 werden alle Ereignisse durch das Modell als NC

klassifiziert, weil oberhalb dieses Schwellenwertes keine Modellvorhersagen mehr existieren. Folglich fällt die Reinheit auf 0 ab. Die Genauigkeit nimmt nach dem zu Beginn starken Anstieg zunächst ebenfalls zu, fällt aber nach einem Schwellenwert von rund 0.25 wieder ab, weil mit steigendem Schwellenwert zu viele CC- als NC-Ereignisse klassifiziert werden. Bei einem Schwellenwert von 1 werden alle Ereignisse als NC klassifiziert, weshalb die Genauigkeit bei diesem Schwellenwert dem Anteil der NC-Ereignisse im Testdatensatz entspricht, was etwa 30 % sind.

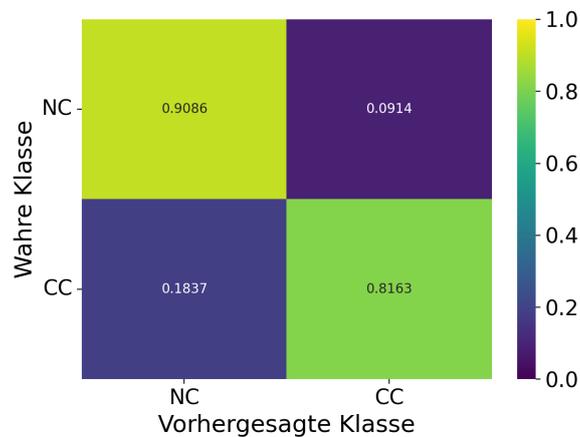
Der optimale Schwellenwert des dritten Modells beträgt 0.49 und ist in Abbildung 6.3 durch die rote vertikale Linie gekennzeichnet. Mit diesem erreicht das dritte Modell eine Reinheit von 90.87 % bei einer Genauigkeit von 81.60 %. Die besten Schwellenwerte der Modelle 1 und 2 sind 0.51 bzw. 0.66, womit eine Reinheit von 94.52 % bzw. 94.77 % und eine Genauigkeit von 90.94 % bzw. 84.68 % erreicht wird. Der Testdatensatz des ersten Modells hat allerdings nur etwa 1300 Ereignisse, wovon nur 340 NC-Interaktionen sind. Diese geringe Menge an Ereignissen, besonders der NC-Ereignisse, ist deshalb bei der Interpretation der Genauigkeit und Reinheit des ersten Modells zu berücksichtigen.

6.3.3 Missklassifizierte Ereignisse

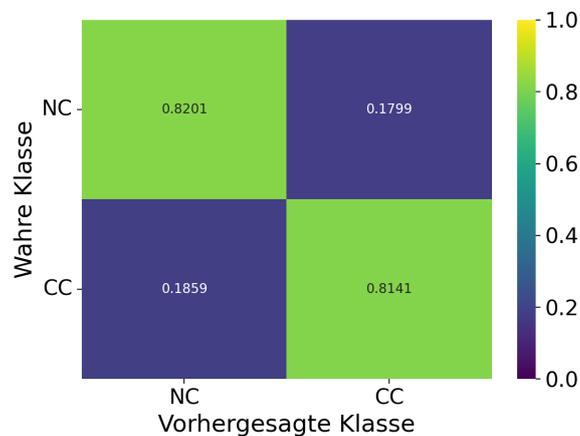
Die Genauigkeit der Modelle geben einem zwar Auskunft darüber, wie viele Ereignisse der Testdatensätze falsch klassifiziert worden sind, aber nicht, wie sich dies auf die beiden Klassen verteilt. Darüber hinaus wird aus der Reinheit nicht ersichtlich, wie groß der Anteil an richtig klassifizierten CC-Ereignissen am gesamten Testdatensatz ist. Eine übersichtliche Darstellung dieser Information liefern Konfusionsmatrizen, die im Abschnitt 4.4.2 eingeführt wurden und in Abbildung 6.4 für die drei Modelle dargestellt sind. Das erste Modell weist mit einer TPR von 93.08 % nur einen minimal schlechteren Wert als seine Reinheit auf. Bei den Modellen 2 und 3 ist dieser Unterschied mit einer Differenz von jeweils rund 10 % größer. Die TPR beträgt bei diesen Modellen 81.63 % bzw. 81.41 %. Die beste Klassifikation von NC-Ereignissen erreicht das zweite Modell, welches eine TNR von 90.86 % hat. Das dritte Modell klassifiziert in etwa genau so viele NC- wie CC-Ereignisse richtig. Die TNR ist für dieses Modell 82.01 %. Das erste Modell wiederum ist das einzige Modell, welches deutlich schlechter darin ist, die NC-Ereignisse zu klassifizieren. Es erreicht eine TNR von 84.94 %. Die Modelle 1, 2 und 3 klassifizieren somit 15.06 %, 9.14 % bzw. 17.99 % der NC-Ereignisse und 6.92 %, 18.37 % bzw. 18.59 % der CC-Ereignisse falsch.



(a) Modell 1



(b) Modell 2



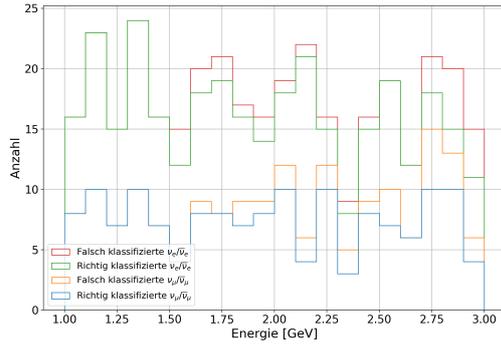
(c) Modell 3

Abbildung 6.4: Konfusionsmatrizen der Modelle 1, 2 und 3. Das erste Modell kann von den drei Modellen den größten Anteil an CC-Ereignissen seines Testdatensatzes richtig klassifizieren. Es erreicht eine TPR von 93.08 %. Bei den Modellen 2 und 3 beträgt die TPR nur 81.63 % bzw. 81.41 %. Das zweite Modell ist dagegen besser in der Klassifikation von NC-Ereignissen als das erste Modell. Es hat eine TNR von 90.86 %. Das erste Modell erreicht nur eine TNR von 84.94 % und das dritte Modell eine TNR von 82.01 %. Das erste Modell ist zwar minimal besser in der Klassifikation von NC-Ereignissen als das dritte Modell, aber es ist das einzige Modell, welches NC-Ereignisse deutlich schlechter klassifizieren kann als CC-Ereignisse. Die Modelle 1, 2 und 3 klassifizieren somit 15.06 %, 9.14 % bzw. 17.99 % der NC-Ereignisse und 6.92 %, 18.37 % bzw. 18.59 % der CC-Ereignisse falsch.

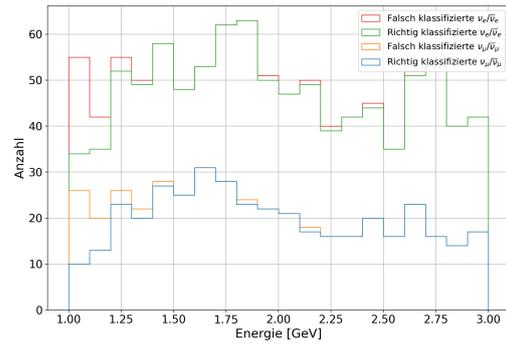
Zusätzlich zu den Fehlklassifizierungsanteilen von NC- und CC-Ereignissen ist es hilfreich, auch die Neutrino-Flavour und Energien der fehlerhaft klassifizierten Ereignisse zu kennen. Diese Informationen ermöglichen gezielte Verbesserungen der Modelle vorzunehmen, indem weitere Features identifiziert werden, die für eine präzisere Klassifikation in den kritischen Energiebereichen und für bestimmte Neutrino-Flavours entscheidend sind.

In Abbildung 6.5 sind deshalb die Klassifikationsergebnisse der drei Modelle in Abhängigkeit der Neutrinoenergie dargestellt, wobei die NC- und CC-Ereignisse jeweils getrennt abgebildet sind. Die NC- und CC-Ereignisse sind ihrerseits wiederum in richtig klassifizierte $\nu_e/\bar{\nu}_e$ (grün) bzw. $\nu_\mu/\bar{\nu}_\mu$ (blau) und falsch klassifizierte $\nu_e/\bar{\nu}_e$ (rot) bzw. $\nu_\mu/\bar{\nu}_\mu$ (orange) unterteilt. Bei den Abbildungen handelt es sich um gestapelte Histogramme, sodass sich die Höhe eines Bins aus den einzelnen Beiträgen der vier Kategorien zusammensetzt. Die Anzahl an falsch klassifizierten ν_e - und $\bar{\nu}_e$ -Ereignissen sowie ν_μ - und $\bar{\nu}_\mu$ -Ereignissen ist über den jeweiligen Energiebereich der Modelle sowohl für die NC- als auch für die CC-Ereignisse ähnlich. Dementsprechend können die Modelle ν_e - und $\bar{\nu}_e$ -Ereignisse genauso gut klassifizieren wie ν_μ - und $\bar{\nu}_\mu$ -Ereignisse. Es ist allerdings zu erkennen, dass für alle drei Modelle die Anzahl an missklassifizierten Ereignissen sowohl bei den NC- als auch bei den CC-Ereignissen von der Energie abhängig ist. Das erste Modell, dessen Ergebnisse in Abbildung 6.5a und 6.5b dargestellt sind, klassifiziert oberhalb von 1.3 GeV nahezu alle CC-Ereignisse korrekt. Unterhalb dieser Energie wächst die Anzahl an Missklassifikationen mit sinkender Energie. Die NC-Ergebnisse weisen in der Anzahl der Ereignisse aufgrund der geringen Menge an NC-Ereignissen zwischen 1 GeV und 3 GeV starke Schwankungen auf. Für ein besseres Verständnis der Klassifikationsfähigkeit von NC-Ereignissen dieses Modells sind daher mehr simulierte Daten nötig. Dennoch ist ein gewisser Trend zu erkennen. Alle Ereignisse bis zu einer Energie von 1.5 GeV werden vom ersten Modell richtig klassifiziert. Danach nimmt die Anzahl der falsch klassifizierten Ereignissen mit steigender Energie zu. Die Modelle 2 und 3 weisen wegen ihres nahezu gleichen Energiebereichs ähnliche Klassifikationsergebnisse auf. Das zweite Modell kann nahezu alle CC-Ereignisse oberhalb von 10 GeV richtig klassifizieren und beim dritten Modell sind es sogar fast alle oberhalb von 8 GeV. Mit fallender Energie wächst für beide Modelle der Anteil an falsch klassifizierten CC-Ereignissen. Unterhalb von 2 GeV klassifiziert das dritte Modell mehr ν_e - und $\bar{\nu}_e$ -Ereignisse sowie ν_μ - und $\bar{\nu}_\mu$ -Ereignisse falsch als richtig. Die NC-Ereignisse kann vor allem das zweite Modell gut klassifizieren. Bis zu einer Energie von 5.5 GeV werden alle Ereignisse richtig als NC klassifiziert. Darüber hinaus kann das zweite Modell die Ereignisse zwischen 5.5 GeV und 15 GeV größtenteils richtig klassifizieren. Beim dritten Modell ist dies ein wenig schlechter. Hier wächst die Anzahl der falsch klassifizierten Ereignisse mit steigender Energie. Dennoch klassifiziert auch dieses Modell über den gesamten Energiebereich mehr Ereignisse richtig als falsch.

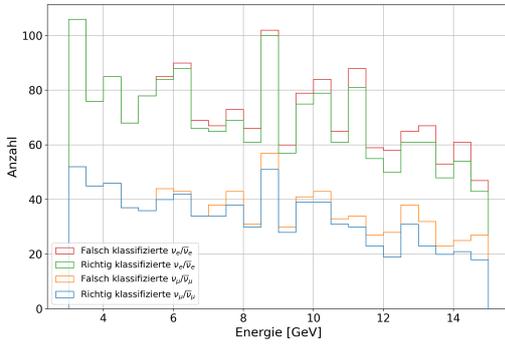
Alle drei Modelle weisen somit einen generellen Trend auf, bei dem die Anzahl der falsch klassifizierten Ereignisse bei den NC-Ergebnissen mit steigender und bei den CC-Ergebnissen mit fallender Energie zunimmt. Dies spricht dafür, dass vor allem die Features, die von Σnpe abhängig sind und Σnpe selbst die Ausgabe der Modelle am stärksten beeinflussen. Eine Verbesserung der Klassifikationsfähigkeit ist dementsprechend dadurch möglich, weitere Features zu bestimmen, die unabhängig von Σnpe sind. Bisher verwenden die Modelle nur ein Feature, welches aus den FHT-Daten gewonnen wurde. Eine weiterführende Untersuchung der FHT-Daten könnte sich deshalb als hilfreich herausstellen.



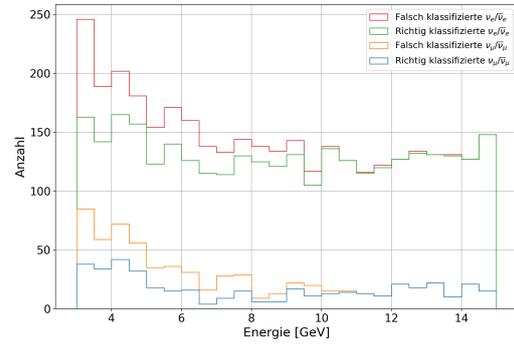
(a) Modell 1 (NC)



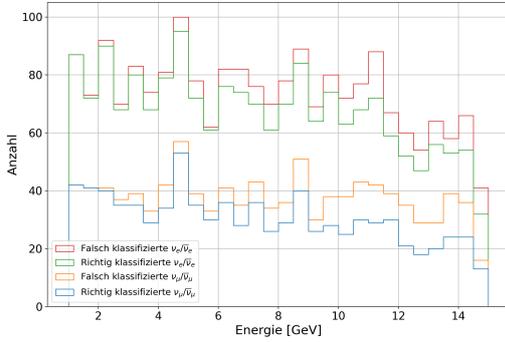
(b) Modell 1 (CC)



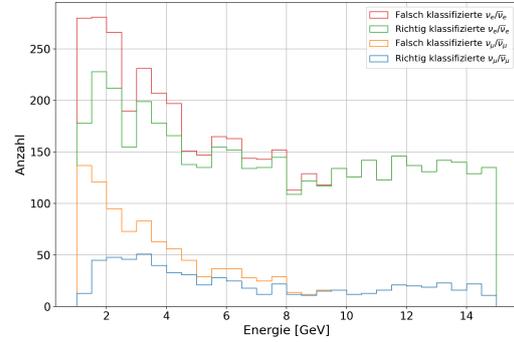
(c) Modell 2 (NC)



(d) Modell 2 (CC)



(e) Modell 3 (NC)



(f) Modell 3 (CC)

Abbildung 6.5: Klassifikationsergebnisse der Modelle 1, 2 und 3 in Abhängigkeit der Neutrinoenergie. Die Ergebnisse sind jeweils in NC- und CC-Ereignisse unterteilt. Diese sind wiederum in richtig klassifizierte $\nu_e/\bar{\nu}_e$ bzw. $\nu_\mu/\bar{\nu}_\mu$ und falsch klassifizierte $\nu_e/\bar{\nu}_e$ bzw. $\nu_\mu/\bar{\nu}_\mu$ unterteilt. Bei den dargestellten Abbildungen handelt es sich um gestapelte Histogramme, bei denen die Höhe eines Bins durch die individuellen Beiträge der vier Kategorien bestimmt wird. Die Anzahl der falsch zugeordneten ν_e - und $\bar{\nu}_e$ -Ereignisse sowie ν_μ - und $\bar{\nu}_\mu$ -Ereignisse ist sowohl in den NC- als auch in den CC-Ergebnissen über den jeweiligen Energiebereich der Modelle ähnlich. Die Modelle können also ν_e - und $\bar{\nu}_e$ -Ereignisse genauso gut klassifizieren wie ν_μ - und $\bar{\nu}_\mu$ -Ereignisse. Allerdings zeigt sich bei allen drei Modellen deutlich, dass die Anzahl der fehlerhaft zugeordneten Ereignisse sowohl bei den NC- als auch bei den CC-Ereignissen von der Energie abhängig ist. Die Anzahl der falsch klassifizierten Ereignisse nimmt bei den NC-Ergebnissen mit steigender und bei den CC-Ergebnissen mit fallender Energie zu. Dies spricht dafür, dass vor allem die Features, die von Σ_{npe} abhängig sind und Σ_{npe} selbst die Ausgabe der Modelle am stärksten beeinflussen.

Kapitel 7

Zusammenfassung und Ausblick

In dieser Bachelorarbeit wurde die Verwendung aggregierter Features zum Training von NN zur Klassifikation atmosphärischer Neutrino-Signale in JUNO untersucht. Dabei war das Ziel, möglichst viele CC-Ereignisse richtig zu klassifizieren, während die Genauigkeit der Modelle bestmöglich bleibt. Die für das Training und die Optimierung der NN verwendeten Daten, stammen dabei aus Monte-Carlo-Simulationen der JUNO-Simulationssoftware. Sie setzen sich aus ν_e -, $\bar{\nu}_e$ -, ν_μ - und $\bar{\nu}_\mu$ -Ereignissen im Energiebereich zwischen 1 GeV und 15 GeV zusammen. Insgesamt wurden drei verschiedene FCNN auf unterschiedlichen Energiebereichen trainiert und optimiert. Das erste Modell wurde mit Ereignissen trainiert, die Energien zwischen 1 GeV und 3 GeV aufweisen, während das zweite Modell Daten im Energiebereich von 3 GeV bis 15 GeV nutzte. Dadurch deckt das erste Modell den Energiebereich vor dem Auftreten der MSW-Resonanz und das zweite Modell den Bereich, in dem die MSW-Resonanz auftritt, ab. Das dritte Modell wurde mit dem kompletten Datensatz trainiert.

Für das Training der NN stand zu jedem Ereignis die FHT und die npe aller LPMTs sowie ein npe-Zeit-Histogramm zur Verfügung. Aus diesen Daten konnten für jedes simulierte Ereignis 13 Features bestimmt werden. Mit Hilfe der FA-Methode wurde anschließend die Nützlichkeit der Features für die Klassifikationsfähigkeit der NN untersucht. Dadurch konnte gezeigt werden, dass 5 dieser Features nicht zur Klassifikationsfähigkeit beitragen.

Mit den restlichen Features wurden die drei Modelle mit Hilfe der Bayes'schen Optimierung optimiert. Das erste Modell erreicht nach der Optimierung auf seinem Testdatensatz eine Reinheit von 94.52 % bei einer Genauigkeit von 90.94 %. Hierbei ist jedoch anzumerken, dass diese Ergebnisse mit einer geringen Datenmenge berechnet wurden, da der Datensatz nur wenig simulierte Ereignisse zwischen 1 GeV und 3 GeV enthält. Vor allem die Menge an NC-Ereignissen ist im Testdatensatz des ersten Modells sehr gering. Die Reinheit und die Genauigkeit ermöglichen daher möglicherweise keine umfassende und repräsentative

Bewertung der Leistungsfähigkeit dieses Modells. Eine bessere Beurteilung könnte erst nach der Anwendung auf einen umfangreicheren Datensatz vorgenommen werden. Für die anderen beiden Modelle sind im simulierten Datensatz genügend Ereignisse für eine Bewertung der Leistungsfähigkeit vorhanden. Das zweite und dritte Modell erreichen auf ihren Testdatensätzen eine Reinheit von 94.77 % bzw. 90.87 % und eine Genauigkeit von 84.68 % bzw. 81.60 %. Beide Modelle sind auf den ganzen Testdatensatz betrachtet, ähnlich gut darin, CC-Ereignisse zu klassifizieren. Ihre TPR beträgt 81.63 % bzw. 81.41 %. Der Unterschied in der Reinheit ist dementsprechend auf die Klassifikationsfähigkeit der NC-Ereignisse zurückzuführen. Das zweite Modell erreicht eine TNR von 90.86 %, während das dritte Modell nur 82.01 % erreicht.

Um herauszufinden, wie die drei Modelle eine bessere Klassifikationsfähigkeit erreichen können, wurden abschließend die falsch klassifizierten Ereignisse untersucht. Dabei hat sich herausgestellt, dass alle drei Modelle ν_e - und $\bar{\nu}_e$ -Ereignisse genauso so gut klassifizieren können wie ν_μ - und $\bar{\nu}_\mu$ -Ereignisse. Im Vergleich der Anzahl der fehlerhaft zugeordneten Ereignisse in Abhängigkeit der Energie hat sich jedoch sowohl bei den NC- als auch bei den CC-Ereignissen eine Energieabhängigkeit gezeigt. Bei den NC-Ereignissen steigt die Anzahl der falsch klassifizierten Ereignisse mit zunehmender Energie, während bei den CC-Ereignissen eine Zunahme der Energie zu einer Abnahme der falsch klassifizierten Ereignisse führt. Dies lässt darauf schließen, dass insbesondere die Features, die von Σn_{pe} abhängig sind und Σn_{pe} selbst den größten Einfluss auf die Ausgabe der Modelle haben. Es besteht daher die Möglichkeit, die Klassifikationsfähigkeit der Modelle zu verbessern, indem weitere Features identifiziert werden, die unabhängig von Σn_{pe} sind. Alle drei Modelle verwenden momentan nur ein FHT-Feature. Eine weiterführende Untersuchung der FHT-Daten könnte deshalb potenziell neue Features hervorbringen, die die Klassifikationsfähigkeit verbessern.

Appendix

Verlustfunktion

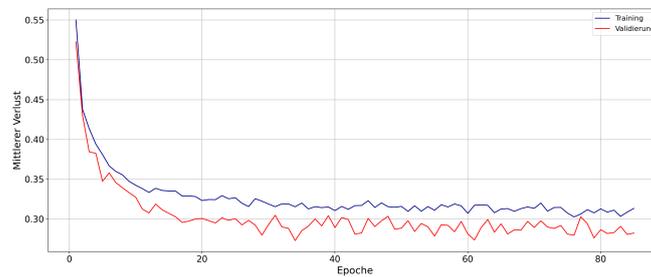


Abbildung 7.1: Mittlerer Verlust des ersten Modells während des Trainings bzw. der Validierung in Abhängigkeit der Epoche

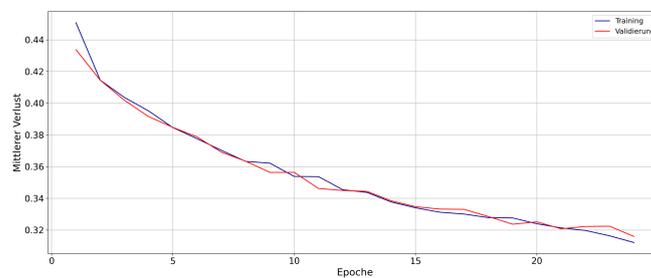


Abbildung 7.2: Mittlerer Verlust des zweiten Modells während des Trainings bzw. der Validierung in Abhängigkeit der Epoche

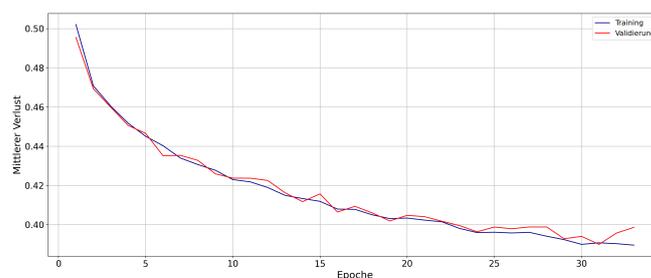


Abbildung 7.3: Mittlerer Verlust des dritten Modells während des Trainings bzw. der Validierung in Abhängigkeit der Epoche

ROC-Kurven

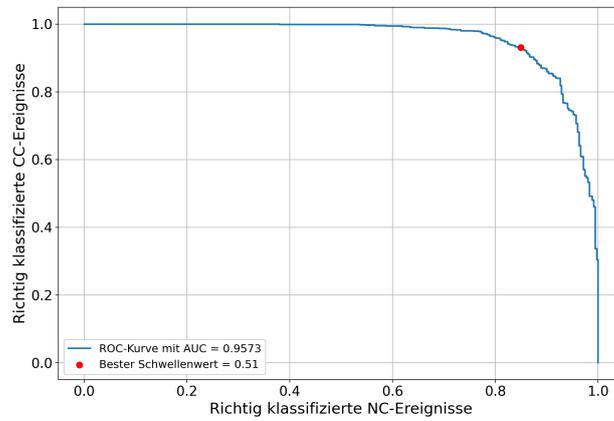


Abbildung 7.4: ROC-Kurve des ersten Modells

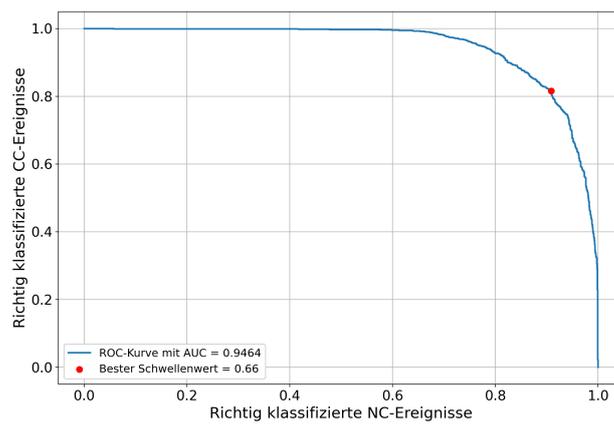


Abbildung 7.5: ROC-Kurve des zweiten Modells

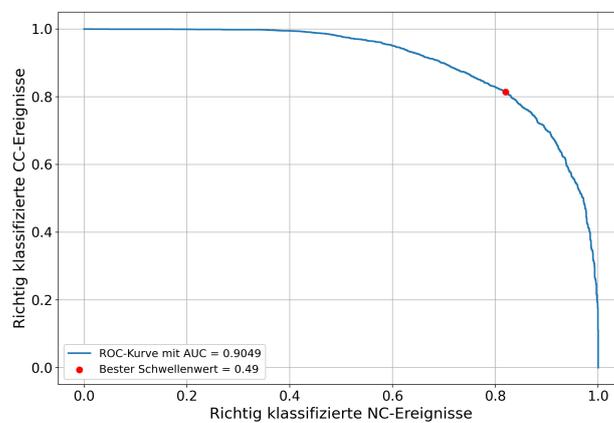


Abbildung 7.6: ROC-Kurve des dritten Modells

Schwellenwertoptimierung

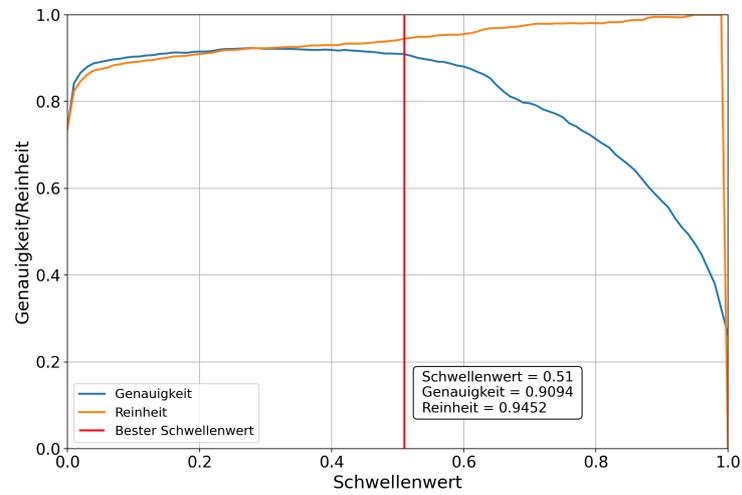


Abbildung 7.7: Schwellenwertoptimierung des ersten Modells

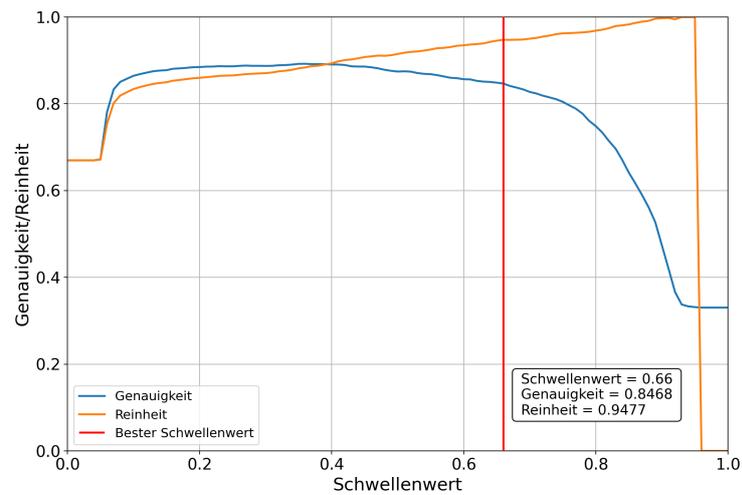


Abbildung 7.8: Schwellenwertoptimierung des zweiten Modells

Abkürzungsverzeichnis

AUC	Area Under the Curve
BCELoss	Binary Cross-Entropy Loss
bis-MSB	p-Bis(o-methylstyryl)benzol
CC	Charged Current
CD	Central Detector
CNN	Convolutional Neural Network
CoC	Center of Charge
DIS	Tief-inelastische Streuung
FA	Feature-Ablation
FC	Fully Contained
FCNN	Fully Connected Neural Network
FHT	First Hit Time
IO	Invertierte Ordnung
JUNO	Jiangmen Underground Neutrino Observatory
LPMT	Large PMT
MSW	Michejew-Smirnow-Wolfenstein
NC	Neutral Current
NN	Neuronale Netze
NO	Normale Ordnung
npe	Number of Photoelectrons

PC	Partially Contained
PMNS	Pontecorvo-Maki-Nakagawa-Sakata
PMT	Photomultiplier Tube
PPO	2,5-Diphenyloxazol
QEL	Quasi-elastische Streuung
ReLU	Rectified Linear Unit
RES	Resonanzproduktion
ROC	Receiver Operating Characteristic
SM	Standardmodell der Teilchenphysik
SPMT	Small PMT
SWW	Schwache Wechselwirkung
tanh	Tangens hyperbolicus
TT	Top-Tracker

Abbildungsverzeichnis

2.1	Überblick über die Teilchen des Standardmodells	4
2.2	Beispiel-Feynman-Diagramme der schwachen Wechselwirkung	5
2.3	Vergleich der Übergangswahrscheinlichkeiten von Neutrinos in der NO . . .	11
2.4	Schematische Darstellung der beiden Massenordnungen	13
2.5	Fluss von unterschiedlichen Neutrinoquellen in Abhängigkeit der Energie .	15
3.1	Oszillogramme der Überlebenswahrscheinlichkeiten der ν_e und $\bar{\nu}_e$ unter der Annahme der NO	19
3.2	Schematische Darstellung der Cherenkov-Strahlung	22
3.3	Schematische Darstellung des JUNO-Detektors	24
4.1	Verlauf der Sigmoid- und ReLU-Funktion sowie des Tangens hyperbolicus.	26
4.2	Schematische Darstellung der Funktionsweise eines Neurons	27
4.3	Schematische Darstellung eines zweischichtigen FCNN	28
4.4	Beispielhafter Verlauf des mittleren Verlusts eines NN während des Trainings bzw. der Validierung in Abhängigkeit der Epoche	32
4.5	Beispielhistogramme für die Vorhersagen eines binären Klassifikators . . .	34
4.6	Beispielhafte Verläufe der ROC-Kurve	36
4.7	Schematische Darstellung einer Konfusionsmatrix	37
4.8	Beispiel einer Bayes'schen Optimierung für eine Funktion mit nur einem Hyperparameter	39
5.1	Heatmap der npe- und FHT-Verteilung der LPMTs eines Beispiereignisses	43
5.2	npe-Zeit-Histogramm eines Beispiereignisses	44
5.3	Vergleich der Energieverteilung der CC-Interaktionen vor und nach der Einschränkung des Abstands R_{Vertex}	46
5.4	FHT-Verteilung aller NC- und CC-Ereignisse des simulierten Datensatzes .	48
5.5	Kleinste FHT FHT_{min} der LPMTs für alle NC- und alle CC-Ereignisse des simulierten Datensatzes	49
5.6	Verteilung des Features Σnpe für alle NC- und CC-Ereignisse des simulierten Datensatzes.	50

5.7	Verteilung des CoC für alle NC- und CC-Ereignisse des simulierten Datensatzes	52
5.8	Verteilung der Standardabweichung $\sigma(R)$ des Abstands R für alle NC- und CC-Ereignisse des simulierten Datensatzes.	53
5.9	Vergleich der Feature $\sigma(R)$ und R_{cc}	54
5.10	Vergleich der Feature $R \cdot npe$ und Σnpe	55
5.11	Zeitpunkte t_{max} , zu denen die globalen Maxima der npe-Zeit-Histogramme aller NC- und CC-Ereignisse des simulierten Datensatzes auftreten.	56
6.1	Abweichung der AUC durch die FA-Methode für die Modelle 1, 2 und 3	63
6.2	Vorhersagen der Modelle 1, 2 und 3	65
6.3	Schwellenwertoptimierung des dritten Modells	66
6.4	Konfusionmatrizen der Modelle 1, 2 und 3	68
6.5	Klassifikationsergebnisse der Modelle 1, 2 und 3	71

Tabellenverzeichnis

3.1	Definiton der Größen für die Gleichungen 3.2.1 und 3.2.2.	20
5.1	Zusammensetzung des simulierten Datensatzes vor und nach der Einschränkung des Abstands R_{Vertex}	45
5.2	Zusammensetzung der Datensätze für die drei zu trainierenden NN	47
5.3	Prozentuale Anteile der simulierten Ereignisse, die zwischen 160 ns und 900 ns weitere Maxima aufweisen	57
5.4	Vergleich der Klassifikationsfähigkeit jedes aggregierten Features mit Hilfe der AUC	58
6.1	Intervalle an möglichen Hyperparameter-Werten für die Bayes'sche Optimierung	60
6.2	Bester Satz an Hyperparametern für die Modelle 1, 2 und 3 nach der Bayes'schen Optimierung unter Verwendung aller 13 Features	61
6.3	Finaler Satz an Hyperparametern für die Modelle 1, 2 und 3 nach der Bayes'schen Optimierung	64

Literaturverzeichnis

- [1] Peter Schleper and Christian Schwanenberger. Physik V: Kernphysik und Elementarteilchenphysik Skript. WiSe 21/22.
- [2] Wikimedia Commons. Standard Model of Elementary Particles-de. https://commons.wikimedia.org/w/index.php?title=File:Standard_Model_of_Elementary_Particles-de.svg&oldid=693628512, 2022.
- [3] M. Aker, K. Altenmüller, M. Arenz, M. Babutzka, J. Barrett, et al. Improved Upper Limit on the Neutrino Mass from a Direct Kinematic Method by KATRIN. *Physical Review Letters*, 123(22), Nov 2019.
- [4] Alessandro Bettini. *Introduction to Elementary Particle Physics*. Cambridge University Press, 2008.
- [5] Roman Kogler, Alexander Schmidt, Christian Sander, and Peter Schleper. Advanced Particle Physics Lecture Notes. WiSe 16/17.
- [6] C. S. Wu, E. Ambler, R. W. Hayward, D. D. Hoppes, and R. P. Hudson. Experimental Test of Parity Conservation in Beta Decay. *Phys. Rev.*, 105:1413–1415, Feb 1957.
- [7] J. H. Christenson, J. W. Cronin, V. L. Fitch, and R. Turlay. Evidence for the 2π Decay of the K_2^0 Meson. *Phys. Rev. Lett.*, 13:138–140, Jul 1964.
- [8] P. Adamson, C. Ader, M. Andrews, N. Anfimov, I. Anghel, et al. First measurement of muon-neutrino disappearance in NOvA. *Phys. Rev. D*, 93:051104, Mar 2016.
- [9] K. Abe, N. Abgrall, H. Aihara, Y. Ajima, J.B. Albert, et al. The T2K experiment. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment*, 659(1):106–135, 2011.
- [10] Frank F Deppisch. *A Modern Introduction to Neutrino Physics*. 2053-2571. Morgan and Claypool Publishers, 2019.
- [11] Raymond Davis, Don S. Harmer, and Kenneth C. Hoffman. Search for Neutrinos from the Sun. *Phys. Rev. Lett.*, 20:1205–1209, May 1968.

- [12] Y. Fukuda, T. Hayakawa, E. Ichihara, K. Inoue, K. Ishihara, et al. Evidence for Oscillation of Atmospheric Neutrinos. *Phys. Rev. Lett.*, 81:1562–1567, Aug 1998.
- [13] Wikimedia Commons. Oscillations electron long. https://commons.wikimedia.org/w/index.php?title=File:Oscillations_electron_long.svg&oldid=732568906, 2023.
- [14] L. Wolfenstein. Neutrino oscillations in matter. *Phys. Rev. D*, 17:2369–2374, May 1978.
- [15] S. P. Mikheyev and A. Yu. Smirnov. Resonant amplification of ν oscillations in matter and solar-neutrino spectroscopy. *Il Nuovo Cimento C*, 9(1):17–26, Jan 1986.
- [16] Wikimedia Commons. Neutrino Hierarchy. <https://commons.wikimedia.org/w/index.php?title=File:NeutrinoHierarchy.svg&oldid=438209043>, 2020.
- [17] Fengpeng An, Guangpeng An, Qi An, Vito Antonelli, Eric Baussan, et al. Neutrino physics with JUNO. *Journal of Physics G: Nuclear and Particle Physics*, 43(3):030401, Feb 2016.
- [18] M. Sajjad Athar, Steven W. Barwick, Thomas Brunner, Jun Cao, Mikhail Danilov, et al. Status and perspectives of neutrino physics. *Progress in Particle and Nuclear Physics*, 124:103947, 2022.
- [19] U.F. Katz and Ch. Spiering. High-energy neutrino astrophysics: Status and perspectives. *Progress in Particle and Nuclear Physics*, 67(3):651–704, Jul 2012.
- [20] Ivan Esteban, M.C. Gonzalez-Garcia, Michele Maltoni, Thomas Schwetz, and Albert Zhou. The fate of hints: updated global analysis of three-flavor neutrino oscillations. *Journal of High Energy Physics*, 2020(9), Sep 2020.
- [21] Particle Data Group, R L Workman, V D Burkert, V Crede, E Klempt, U Thoma, et al. Review of Particle Physics. *Progress of Theoretical and Experimental Physics*, 2022(8), Aug 2022. 083C01.
- [22] J. A. Formaggio and G. P. Zeller. From eV to EeV: Neutrino cross sections across energy scales. *Reviews of Modern Physics*, 84(3):1307–1341, Sep 2012.
- [23] JUNO Physics and Detector. *Progress in Particle and Nuclear Physics*, 123:103927, Mar 2022.
- [24] T. Adam, F. An, G. An, Q. An, N. Anfimov, et al. JUNO Conceptual Design Report, 2015.

-
- [25] Charu C. Aggarwal. *Neural Networks and Deep Learning*. Springer, Cham, 2018.
- [26] Wikimedia Commons. Neural Network. https://commons.wikimedia.org/w/index.php?title=File:Neural_network.svg&oldid=745745616, 2006.
- [27] Michael A. Nielsen. *Neural Networks and Deep Learning*. Determination Press, 2015.
- [28] Randall Balestriero and Richard G. Baraniuk. Batch Normalization Explained, 2022.
- [29] Peter I. Frazier. A Tutorial on Bayesian Optimization, 2018.
- [30] Florent Leclercq. Bayesian optimization for likelihood-free cosmological inference. *Physical Review D*, 98, 09 2018.
- [31] Tao Lin, Yuxiang Hu, Miao Yu, Haosen Zhang, Simon Charles Blyth, et al. Simulation Software of the JUNO Experiment. *The European Physical Journal C*, 83(5):382, May 2023.
- [32] Keiron O’Shea and Ryan Nash. An Introduction to Convolutional Neural Networks, 2015.
- [33] Arsenii Gavrikov, Yury Malyshkin, and Fedor Ratnikov. Energy reconstruction for large liquid scintillator detectors with machine learning techniques: aggregated features approach. *The European Physical Journal C*, 82(11), nov 2022.
- [34] Jeff Heaton. An Empirical Analysis of Feature Engineering for Predictive Modeling. In *SoutheastCon 2016*. IEEE, mar 2016.
- [35] Adam Paszke, Sam Gross, Francisco Massa, Adam Lerer, James Bradbury, et al. Pytorch: An imperative style, high-performance deep learning library. In *Advances in Neural Information Processing Systems 32*, pages 8024–8035. Curran Associates, Inc., 2019.

Danksagung

Als Erstes möchte ich mich bei Prof. Dr. Caren Hagner dafür bedanken, dass ich diese Bachelorarbeit in ihrer Arbeitsgruppe schreiben durfte. Darüber hinaus gebührt mein Dank Dr. Daniel Bick und Prof. Dr. Peter Schleper für die Übernahme des Erst- bzw. Zweitgutachtens. Mein Dank gilt ebenfalls Rosmarie Wirth für die Betreuung und das zur Verfügung stellen des Themas sowie das Korrekturlesen dieser Bachelorarbeit. Danken möchte ich auch Malte Stender für Beantwortung vieler Fragen und das Korrekturlesen meiner Bachelorarbeit. Weiterhin möchte ich allen weiteren Mitgliedern der Arbeitsgruppe für die Fragen und Anmerkungen in den Gruppenmeetings danken. Abschließend möchte ich mich bei meiner Familie und meinen Freunden bedanken, die mich über das gesamte Studium immer unterstützt haben.

