

Научная статья

УДК 539.12

DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.16211>

МОДЕЛИ МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ ДЛЯ НАХОЖДЕНИЯ ЗНАЧЕНИЙ НЕНАБЛЮДАЕМЫХ ПАРАМЕТРОВ, ОПИСЫВАЮЩИХ ЦЕНТРАЛЬНОСТЬ, ПРИ СТОЛКНОВЕНИЯХ РАЗЛИЧНЫХ ЯДЕР В ЭНЕРГЕТИЧЕСКОМ ДИАПАЗОНЕ ОТ 40 ДО 200 ГэВ

А. А. Лобанов ✉, **А. Я. Бердников**, **М. М. Митранкова**

Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого,

Санкт-Петербург, Россия

✉ lobanov2.aa@edu.spbstu.ru

Аннотация. Данная работа продолжает исследования возможностей моделей машинного обучения, направленные на поиск оптимального пути предсказания значений ненаблюдаемых величин, характеризующих центральность, основываясь на экспериментальных данных для наблюдаемых величин: числа заряженных частиц и числа нейтронов, рождающихся во взаимодействии ультрарелятивистских ядер. Искомыми ненаблюдаемыми величинами были число раненых нуклонов, участвующих во взаимодействии, и число бинарных нуклон-нуклонных столкновений. В качестве моделей машинного обучения были протестированы дерево решений, случайный лес и многослойный перцептрон (МП). Точность предсказания моделей характеризовалась коэффициентом детерминации R^2 . Получены зависимости значений R^2 от начальных энергий (40 – 200 ГэВ) для разных систем сталкивающихся ядер. Установлено, что модель МП способна с хорошей точностью предсказывать значения искомых величин в широком диапазоне начальных энергий для различных систем ядерных взаимодействий.

Ключевые слова: машинное обучение, столкновение ядер, начальная энергия, коэффициент детерминации, многослойный перцептрон

Для цитирования: Лобанов А. А., Бердников А. Я., Митранкова М. М. Модели машинного обучения для нахождения значений ненаблюдаемых параметров, описывающих центральность, при столкновениях различных ядер в энергетическом диапазоне от 40 до 200 ГэВ // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2023. Т. 16. № 2. С. 121–131. DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.16211>

Статья открытого доступа, распространяемая по лицензии CC BY-NC 4.0 (<https://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/>)

Original article

DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.16211>

MACHINE LEARNING MODELS TO FIND UNOBSERVABLE CENTRALITY-RELATED PARAMETER VALUES IN COLLISIONS OF DIFFERENT NUCLEI IN THE INITIAL ENERGY RANGE FROM 40 TO 200 GeV

A. A. Lobanov ✉, **A. Ya. Berdnikov**, **M. M. Mitrunkova**

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University, St. Petersburg, Russia

✉ lobanov2.aa@edu.spbstu.ru

Abstract. This paper continues studies in machine learning models capabilities aimed to finding the best way to predict the values of unobservable quantities that characterize centrality, based on experimental data for observable quantities: the number of charged particles and the number of neutrons produced in ultrarelativistic nuclear interactions. The sought-for unobservable quantities were the number of wounded nucleons involved in the interaction and the number of binary nucleon-nucleon collisions. A decision tree, a random forest, and a multilayer perceptron (MP) were tested as machine learning models. The prediction accuracy of the models was characterized by the coefficient of determination R^2 . Dependences of R^2 values on initial energies (40 – 200 GeV) for different systems of colliding nuclei were obtained. The MP model was found to be able to predict the values of unknown quantities in a wide range of initial energies for different systems of nuclear interactions with good accuracy.

Keywords: machine learning, nuclei collisions, initial energy, R-squared, multilayer perceptron

For citation: Lobanov A. A., Berdnikov A. Ya., Mitrnkova M. M., Machine learning models to find unobservable centrality-related parameter values in collisions of different nuclei in the initial energy range from 40 to 200 GeV, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 16 (2) (2023) 121–131. DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.16211>

This is an open access article under the CC BY-NC 4.0 license (<https://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/>)

Введение

Алгоритмы на основе методов машинного обучения уже давно обеспечивают хорошие результаты в различных областях науки и техники и зачастую превосходят «стандартные» алгоритмы [1]. В связи с этим целесообразно рассмотреть применение машинного обучения к физике ультрарелятивистских столкновений ядер.

Данная статья продолжает исследования, представленные в работе [2], и нацелена на их развитие. В указанном исследовании рассмотрено применение методов машинного обучения для определения значений ненаблюдаемых на эксперименте величин от наблюдаемых. К первым относятся число бинарных нуклон-нуклонных столкновений N_{coll} в ядро-ядерном столкновении при заданной начальной энергии и число раненых нуклонов N_{part} при соударении ядер; ко вторым – число заряженных частиц N_{ch} и число нейтронов N_{neut} , рождающихся в каждом отдельном ядро-ядерном взаимодействии.

Нами было установлено, что три модели, а именно – дерево решений, случайный лес и многослойный перцептрон, способны с хорошей точностью предсказывать значения N_{coll} и N_{part} в широком диапазоне ядерных систем [2].

Однако указанное выше проведенное исследование ограничивалось рассмотрением применимости моделей только при заданной начальной энергии в системе центра масс на один нуклон $\sqrt{s_{NN}} = 200$ ГэВ.

Данная статья является следующим этапом наших исследований: необходимо выяснить возможность использования рассмотренных моделей при варьировании значений начальной энергии $\sqrt{s_{NN}}$. Дело в том, что значение начальной энергии при столкновении ядер может определять характер протекания процессов, обусловленных физикой взаимодействия ядер [3].

Настоящая работа посвящена применимости моделей машинного обучения, которые бы позволили предсказывать число раненых нуклонов N_{part} , участвующих во взаимодействии, и число бинарных нуклон-нуклонных столкновений N_{coll} (параметры, характеризующие центральность), при значениях начальной энергии в диапазоне 40 – 200 ГэВ.

Основой должны служить значения величин, наблюдаемых экспериментально: число заряженных частиц и число нейтронов, рождающихся в каждом отдельном ядро-ядерном взаимодействии, в различных системах сталкивающихся ядер.



Методика проведения расчетов

В качестве входных параметров моделей (дерево решений, случайный лес и многослойный перцептрон), выступают величины множественности заряженных частиц N_{ch} и нейтронов N_{neut} .

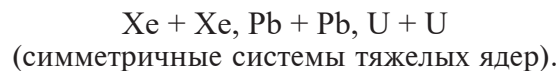
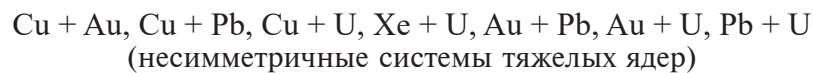
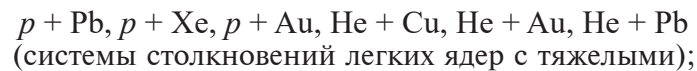
Множественность заряженных частиц была задана в интервале псевдобыстрот $3 < |\eta| < 4$, а число нейтральных частиц – в интервале псевдобыстрот $5 < |\eta| < 8$. Выбор указанных диапазонов был обусловлен экспериментальными данными [4]. Дополнительными входными параметрами моделей выступали число протонов и нейтронов в сталкивающихся ядрах и энергия в системе центра масс $\sqrt{s_{NN}}$ [5]. Использование данных параметров обеспечивает возможность моделировать столкновения ядер разной природы при различных начальных энергиях.

Рассмотрены события столкновения широкого набора ядер, использованных исследователями в большом числе самых разнообразных экспериментов [4]. Это ядра водорода H (протоны) p , гелия He, меди Cu, ксенона Xe, золота Au, свинца Pb и урана U.

Обучение моделей производилось на следующих бинарных системах, выбранных случайным образом из вышеперечисленных ядер:



Проверка предсказаний моделей производилась на следующих бинарных системах:



Выбранный ряд значений начальных энергий $\sqrt{s_{NN}}$ лежал в диапазоне от 40 до 200 ГэВ [4].

Обучение моделей выполнено при энергиях в диапазоне 40 – 200 ГэВ с шагом в 40 ГэВ, а их проверка проведена в расширенном энергетическом диапазоне 20 – 260 ГэВ с шагом 20 ГэВ. В таблицах далее приведена только часть полученных данных (не для всех выбранных значений начальной энергии) для экономии места.

Как и в работе [2], для проведения процедуры обучения и проверки точности предсказаний моделей было необходимо провести моделирование (генерацию) столкновений вышеперечисленных пар ядер, но уже при разных начальных энергиях, указанных выше. Для генерации столкновений использовался программный пакет PYTHIA8/Angantyr версии 8,307 [5]. Число сгенерированных событий составило 100 тыс. Из каждого события были получены числовые значения раненых нуклонов N_{part} и бинарных нуклон-нуклонных столкновений N_{coll} , а также множественностей заряженных частиц и нейтронов (эталонные значения).

В качестве моделей машинного обучения были рассмотрены дерево решений [6], случайный лес [7] и многослойный перцептрон [8], как и в предыдущей работе [2], где данные модели показали наилучшие результаты.

Подбор модельных параметров, которые программа не определяла в ходе обучения (гиперпараметров), осуществлялся с помощью алгоритма Tree Parzen Estimators [9] из библиотеки Optuna [10].

Перечислим подробности проведенного моделирования. Модель дерева решений имела глубину, равную 63. Модель случайного леса включала 37 оценщиков (estimators) с максимальной глубиной каждого, равной 84. Многослойный перцептрон состоял из 7 входных нейронов, 5 скрытых слоев по 512 нейронов в каждом, с активационной функцией ReLU и выходным слоем из двух нейронов с линейной функцией активации. Число эпох для обучения составляло 45, а оптимизатором градиентного спуска был выбран Adam [11].

Для характеристики качества предсказания моделями величин N_{coll} и N_{part} использова-

лись коэффициенты детерминации $R_{N_{coll}}^2$ и $R_{N_{part}}^2$ [12], которые определяются следующей формулой:

$$R^2 = 1 - \frac{\sum_{i=1}^N (y_i - \hat{y}_i)^2}{\sum_{i=1}^N y_i^2},$$

где R^2 включает $R_{N_{coll}}^2$ либо $R_{N_{part}}^2$; y_i – эталонные значения рассматриваемых величин; \hat{y}_i – значения, предсказанные моделью; N – число значений [2].

Точность предсказания значений параметров N_{coll} и N_{part} характеризовалась средним арифметическим \bar{R}^2 от $R_{N_{coll}}^2$ для N_{coll} и $R_{N_{part}}^2$ для N_{part} [13]:

$$\bar{R}^2 = \frac{R_{N_{coll}}^2 + R_{N_{part}}^2}{2}.$$

Чем ближе \bar{R}^2 к единице (максимальное значение), тем ближе значения, полученные расчетным путем, к эталонным.

Доверительные интервалы и погрешности коэффициента детерминации R^2 определялись с помощью метода бутстрэп [14].

Результаты расчетов и их обсуждение

В табл. 1 – 9 представлены расчетные результаты для коэффициентов детерминации в зависимости от начальной энергии сталкивающихся ядер для трех классов систем ядер, на которых производилась проверка.

Рассмотрены модели, которые дали наилучшие результаты (см. работу [2]): многослойного перцептрона, дерева решений и случайного леса.

Как следует из анализа данных, представленных в таблицах, при начальных энергиях 40, 80, 120, 160 и 200 ГэВ (при которых проводилось обучение) все использованные модели показали хорошие результаты для любых рассматриваемых систем сталкивающихся ядер, поскольку значения $\bar{R}^2 > 0,95$.

В связи с тем, что одной из целей работы был анализ результатов предсказаний моделей в точках, интерполированных и экстраполированных по энергии, в таблицах приведены коэффициенты детерминации при значениях энергии 20, 60, 180 и 220 ГэВ.

Таблица 1

Зависимость значений коэффициента детерминации модели многослойного перцептрона от начальных энергий $\sqrt{s_{NN}}$ для систем столкновений легких ядер с тяжелыми

$\sqrt{s_{NN}}$, ГэВ	Значение коэффициента детерминации \bar{R}^2 для системы ядер				
	$p + \text{Xe}$	$p + \text{Au}$	$p + \text{Pb}$	He + Au	He + U
20	0,742±0,019	0,706±0,023	0,789±0,024	0,902±0,023	0,895±0,022
40	0,954±0,022	0,956±0,025	0,954±0,028	0,984±0,023	0,988±0,025
60	0,967±0,025	0,965±0,025	0,932±0,025	0,983±0,025	0,983±0,023
80	0,951±0,026	0,967±0,028	0,969±0,024	0,987±0,026	0,988±0,026
160	0,957±0,025	0,957±0,021	0,965±0,027	0,989±0,025	0,989±0,026
180	0,957±0,027	0,960±0,026	0,961±0,026	0,989±0,024	0,990±0,024
200	0,955±0,029	0,948±0,026	0,959±0,026	0,987±0,027	0,990±0,024
220	0,952±0,027	0,949±0,023	0,951±0,029	0,983±0,025	0,988±0,030

Таблица 2

Зависимость значений коэффициента детерминации модели многослойного перцептрона от начальных энергий $\sqrt{s_{NN}}$ для несимметричных систем столкновений тяжелых ядер

$\sqrt{s_{NN}}$, ГэВ	Значение коэффициента детерминации \bar{R}^2 для системы ядер						
	Cu + Au	Cu + Pb	Xe + Pb	Xe + U	Au + Pb	Au + U	Pb + U
20	0,860± ±0,023	0,846± ±0,021	0,725± ±0,019	0,733± ±0,018	0,679± ±0,014	0,689± ±0,019	0,685± ±0,016
40	0,978± ±0,023	0,978± ±0,024	0,988± ±0,023	0,994± ±0,023	0,999± ±0,024	0,998± ±0,028	0,999± ±0,029
60	0,969± ±0,028	0,949± ±0,024	0,995± ±0,026	0,951± ±0,024	0,980± ±0,025	0,971± ±0,025	0,975± ±0,028
80	0,993± ±0,029	0,990± ±0,026	0,998± ±0,025	0,993± ±0,028	0,998± ±0,027	0,994± ±0,024	0,994± ±0,028
160	0,996± ±0,028	0,994± ±0,023	0,999± ±0,025	0,998± ±0,027	0,998± ±0,025	0,998± ±0,031	0,998± ±0,030
180	0,995± ±0,030	0,994± ±0,028	0,999± ±0,022	0,998± ±0,033	0,999± ±0,026	0,998± ±0,028	0,998± ±0,023
200	0,994± ±0,024	0,994± ±0,024	0,999± ±0,024	0,997± ±0,025	0,999± ±0,035	0,998± ±0,026	0,998± ±0,029
220	0,996± ±0,028	0,993± ±0,030	0,999± ±0,027	0,997± ±0,028	0,999± ±0,026	0,998± ±0,025	0,998± ±0,028

Таблица 3

Зависимость значений коэффициента детерминации модели многослойного перцептрона от начальных энергий $\sqrt{s_{NN}}$ для симметричных систем столкновений тяжелых ядер

$\sqrt{s_{NN}}$, ГэВ	Значение коэффициента детерминации \bar{R}^2 для системы ядер		
	Xe + Xe	Pb + Pb	U + U
20	0,840 ± 0,022	0,682 ± 0,020	0,627 ± 0,020
40	0,960 ± 0,028	0,998 ± 0,025	0,998 ± 0,023
60	0,899 ± 0,024	0,985 ± 0,026	0,972 ± 0,027
80	0,972 ± 0,026	0,998 ± 0,027	0,993 ± 0,028
160	0,992 ± 0,026	0,998±0,026	0,998 ± 0,028
180	0,993 ± 0,026	0,999 ± 0,032	0,998 ± 0,025
200	0,993 ± 0,029	0,999 ± 0,027	0,999 ± 0,028
220	0,992 ± 0,028	0,999 ± 0,029	0,999 ± 0,024

Таблица 4

Зависимость значений коэффициента детерминации модели дерева решений от начальных энергий $\sqrt{s_{NN}}$ для систем столкновений легких ядер с тяжелыми

$\sqrt{s_{NN}}$, ГэВ	Значение коэффициента детерминации \bar{R}^2 для системы ядер				
	$p + \text{Xe}$	$p + \text{Au}$	$p + \text{Pb}$	He + Au	He + U
20	0,399±0,009	0,151±0,004	0,251±0,007	0,228±0,006	0,328±0,008
40	0,978±0,025	0,978±0,027	0,986±0,025	0,975±0,028	0,983±0,029
60	0,577±0,014	0,672±0,019	0,454±0,014	0,502±0,013	0,611±0,019
80	0,969±0,034	0,973±0,026	0,964±0,023	0,972±0,025	0,970±0,027
160	0,985±0,026	0,995±0,028	0,988±0,027	0,983±0,030	0,997±0,024
180	0,971±0,024	0,983±0,024	0,985±0,026	0,964±0,026	0,980±0,036
200	0,982±0,027	0,980±0,029	0,989±0,029	0,966±0,028	0,969±0,030
220	0,993±0,028	0,988±0,031	0,980±0,027	0,974±0,026	0,953±0,029

Таблица 5

Зависимость значений коэффициента детерминации модели дерева решений от начальных энергий $\sqrt{s_{NN}}$ для несимметричных систем столкновений тяжелых ядер

$\sqrt{s_{NN}}$, ГэВ	Значение коэффициента детерминации \bar{R}^2 для системы ядер						
	Cu+Au	Cu+Pb	Xe+Pb	Xe+U	Au+Pb	Au+U	Pb+U
20	0,260± ±0,008	0,268± ±0,008	0,359± ±0,008	0,304± ±0,008	0,361± ±0,015	0,398± ±0,010	0,364± ±0,010
40	0,966± ±0,023	0,976± ±0,027	0,981± ±0,028	0,994± ±0,033	0,996± ±0,024	0,992± ±0,027	0,989± ±0,028
60	0,293± ±0,008	0,173± ±0,004	0,027± ±0,001	0,557± ±0,016	0,685± ±0,018	0,732± ±0,022	0,782± ±0,021
80	0,989± ±0,027	0,980± ±0,026	0,997± ±0,026	0,994± ±0,024	0,996± ±0,027	0,991± ±0,027	0,988± ±0,025
160	0,982± ±0,026	0,973± ±0,026	0,990± ±0,028	0,996± ±0,028	0,989± ±0,028	0,986± ±0,026	0,978± ±0,023
180	0,966± ±0,027	0,968± ±0,028	0,978± ±0,024	0,983± ±0,025	0,990± ±0,027	0,976± ±0,027	0,978± ±0,030
200	0,980± ±0,025	0,986± ±0,026	0,983± ±0,024	0,994± ±0,027	0,996± ±0,027	0,988± ±0,023	0,982± ±0,027
220	0,976± ±0,026	0,984± ±0,028	0,964± ±0,026	0,987± ±0,024	0,988± ±0,025	0,979± ±0,028	0,978± ±0,024

Таблица 6

Зависимость значений коэффициента детерминации модели дерева решений от начальных энергий $\sqrt{s_{NN}}$ для симметричных систем столкновений тяжелых ядер

$\sqrt{s_{NN}}$, ГэВ	Значение коэффициента детерминации \bar{R}^2 для системы ядер		
	Xe + Xe	Pb + Pb	U + U
20	0,275 ± 0,007	0,383 ± 0,010	0,329 ± 0,009
40	0,983 ± 0,025	0,996 ± 0,029	0,983 ± 0,027
60	0,169 ± 0,005	0,715 ± 0,020	0,757 ± 0,021
80	0,981 ± 0,027	0,994 ± 0,028	0,970 ± 0,025
160	0,965 ± 0,023	0,994 ± 0,026	0,965 ± 0,025
180	0,971 ± 0,025	0,984 ± 0,028	0,973 ± 0,027
200	0,978 ± 0,025	0,995 ± 0,023	0,978 ± 0,025
220	0,979 ± 0,023	0,989 ± 0,028	0,977 ± 0,028

Таблица 7

Зависимость значений коэффициента детерминации модели случайного леса от начальных энергий $\sqrt{s_{NN}}$ для систем столкновений легких ядер с тяжелыми

$\sqrt{s_{NN}}$, ГэВ	Значение коэффициента детерминации \bar{R}^2 для системы ядер				
	p + Xe	p + Au	p + Pb	He + Au	He + U
20	0,311±0,008	0,098±0,002	0,205±0,006	0,192±0,006	0,302±0,009
40	0,979±0,026	0,980±0,024	0,985±0,025	0,980±0,025	0,980±0,025
60	0,628±0,016	0,705±0,015	0,508±0,012	0,589±0,016	0,661±0,019
80	0,973±0,024	0,989±0,032	0,988±0,028	0,983±0,025	0,979±0,030
160	0,990±0,023	0,991±0,029	0,987±0,025	0,981±0,027	0,992±0,028
180	0,989±0,028	0,994±0,031	0,993±0,025	0,990±0,029	0,992±0,032
200	0,994±0,029	0,993±0,027	0,997±0,025	0,984±0,02	0,984±0,030
220	0,986±0,030	0,994±0,027	0,990±0,030	0,980±0,027	0,970±0,024

Таблица 8

Зависимость значений коэффициента детерминации модели случайного леса от начальных энергий $\sqrt{s_{NN}}$ для несимметричных систем столкновений тяжелых ядер

$\sqrt{s_{NN}}$, ГэВ	Значение коэффициента детерминации \bar{R}^2 для системы ядер						
	Cu+Au	Cu+Pb	Xe+Pb	Xe+U	Au+Pb	Au+U	Pb+U
20	0,270± ±0,007	0,274± ±0,007	0,343± ±0,012	0,290± ±0,007	0,338± ±0,010	0,378± ±0,010	0,352± ±0,008
40	0,983± ±0,027	0,986± ±0,026	0,992± ±0,029	0,995± ±0,027	0,994± ±0,024	0,972± ±0,025	0,967± ±0,028
60	0,501± ±0,012	0,393± ±0,011	0,282± ±0,007	0,709± ±0,018	0,754± ±0,020	0,793± ±0,021	0,806± ±0,020
80	0,988± ±0,025	0,984± ±0,028	0,997± ±0,026	0,994± ±0,028	0,992± ±0,031	0,974± ±0,025	0,968± ±0,025
160	0,988± ±0,031	0,987± ±0,024	0,996± ±0,033	0,998± ±0,025	0,995± ±0,028	0,985± ±0,031	0,981± ±0,026
180	0,985± ±0,027	0,984± ±0,027	0,983± ±0,026	0,995± ±0,023	0,992± ±0,025	0,984± ±0,027	0,983± ±0,027
200	0,986± ±0,025	0,988± ±0,025	0,983± ±0,024	0,997± ±0,028	0,993± ±0,028	0,987± ±0,024	0,983± ±0,029
220	0,977± ±0,026	0,980± ±0,024	0,962± ±0,026	0,987± ±0,026	0,984± ±0,027	0,976± ±0,028	0,975± ±0,023

Таблица 9

Зависимость значений коэффициента детерминации модели случайного леса от начальных энергий $\sqrt{s_{NN}}$ для симметричных систем столкновений тяжелых ядер

$\sqrt{s_{NN}}$, ГэВ	Значение коэффициента детерминации \bar{R}^2 для системы ядер		
	Xe + Xe	Pb + Pb	U + U
20	0,277 ± 0,008	0,379 ± 0,010	0,311 ± 0,008
40	0,986 ± 0,023	0,990 ± 0,029	0,947 ± 0,027
60	0,456 ± 0,014	0,759 ± 0,022	0,768 ± 0,022
80	0,977 ± 0,030	0,986 ± 0,030	0,952 ± 0,027
160	0,985 ± 0,026	0,995 ± 0,029	0,968 ± 0,027
180	0,986 ± 0,032	0,991 ± 0,028	0,977 ± 0,027
200	0,988 ± 0,027	0,992 ± 0,025	0,973 ± 0,025
220	0,978 ± 0,028	0,981 ± 0,029	0,971 ± 0,027

Из сравнения полученных данных следует, что при интерполированной начальной энергии 60 ГэВ модель многослойного перцептрона показала наилучшие результаты, по сравнению с остальными, так как для нее значения \bar{R}^2 ближе всех к единице. Отметим также, что величина \bar{R}^2 для моделей дерева решений и случайного леса заметно меньше единицы (в пределах ошибок, приведенных в таблицах).

В то же время анализ данных таблиц показывает, что при экстраполяции приведенных значений в сторону больших энергий (220 ГэВ) все модели показывают хорошие результаты ($\bar{R}^2 > 0,9$). Однако при энергиях, которые меньше обучаемых (20 ГэВ), все модели не способны в полной степени описать рассматриваемые зависимости. Коэффициент детерминации для всех трех моделей, рассмотренных в этой работе, много меньше единицы. Это обусловлено чересчур низкими значениями множественности заряженных частиц N_{ch} и нейтронов N_{neut} при начальной энергии 20 ГэВ. Вследствие сильных различий в значениях N_{ch} и N_{neut} при 20 ГэВ, а также при энергиях, на которых проводилось обучение, ни одна из моделей, как оказалось, не способна верно предсказывать требуемые значения N_{coll} и N_{part} .

Заключение

Исследования, проведенные в данной работе, позволили установить оптимальную модель машинного обучения, которая способна предсказывать ненаблюдаемые в эксперименте число раненых нуклонов N_{part} и число бинарных нуклонных столкновений N_{coll} , характеризующих центральность столкновения, на основе наблюдаемых в эксперименте значений множественности заряженных частиц N_{ch} и числа нейтронов N_{neut} , рожденных в столкновении, для широкого диапазона ядерных систем в интервале начальных энергий $\sqrt{s_{NN}}$ от 40 до 200 ГэВ.

При начальных условиях и выбранных параметрах (энергии и системы ядер, для которых проводилось обучение, а также энергии интерполированных и экстраполированных точек) в работе было установлено, что модель многослойного перцептрона дает наилучшие результаты, по сравнению с моделями дерева решений и случайного леса. Кроме того, многослойный перцептрон способен предсказывать с высокой точностью ($\bar{R}^2 > 0,9$) значения N_{coll} и N_{part} в столкновениях при более высоких (экстраполированных) значениях начальной энергии столкновения: 220, 240 и 260 ГэВ.

Для расчетов использовались процессор Intel® Core™ i9-9980XE, видеокарта NVIDIA GeForce RTX™ 2080 Ti и 64 Гб оперативной памяти.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Krizhevsky A., Sutskever I., Hinton G. E. Imagenet classification with deep convolutional neural networks // Communications of the ACM (Association for Computing Machinery). 2017. Vol. 60. No. 6. Pp. 84–90.
2. Лобанов А. А., Бердников Я. А., Митранков Ю. М. Модели машинного обучения для определения значений ненаблюдаемых параметров, связанных с центральностью, для широкого спектра ядерных систем при энергии 200 ГэВ // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2023. Т. 16. № 2. С. 111–120.
3. Esumi S. (STAR Collaboration). Results from beam energy scan program at RHIC-STAR // The International Conference on Critical Point and Onset of Deconfinement, CERN, 15–19 March 2021. Pp. 1–33.
4. Morrison D. P., Akiba Y., Alford O., et al. The PHENIX experiment at RHIC // Nuclear Physics A. 1998. Vol. 638. No. 1–2. Pp. 565c–569c.
5. Sjöstrand T., Mrenna S., Skands P. A brief introduction to PYTHIA 8.1 // Computer Physics Communications. 2008. Vol. 178. No. 11. Pp. 852–867.
6. Quinlan J. R. Induction of decision trees // Machine Learning. 1986. Vol. 1. No. 1. Pp. 81–106.
7. Ho T. K. Random decision forests // Proceedings of 3rd International Conference on Document Analysis and Recognition. Montreal, QC, Canada. 14–16 August, 1995. Vol. 1. Pp. 278–282.
8. Хайкин С. Нейронные сети. Полный курс. Пер. с англ. 2-е изд. М.: Изд-во «Вильямс», 2019. 1104 с.

9. **Bergstra J., Bardenet R., Bengio Y., Kégl B.** Algorithms for hyper-parameter optimization // *Advances in Neural Information Processing Systems 24 (NIPS 2011)*. Edited by J. Shawe-Taylor, R. Zemel, P. Bartlett, F. Pereira, K. Q. Weinberger. 2011. Vol. 24. Pp. 1–6.
10. **Akiba T., Sano S., Yanase T., Ohta T., Koyama M.** Optuna: A next-generation hyperparameter optimization framework // *Proceedings of the 25th ACM SIGKDD International Conference on Knowledge Discovery & Data Mining*. 2019. Pp. 2623–2631.
11. **Kingma D. P., Ba J.** Adam: A method for stochastic optimization // arXiv preprint arXiv:1412.6980. 2014.
12. **Barten A. P.** The coefficient of determination for regression without a constant term // Heijmans R., Neudecker H. (Eds.) *The practice of econometrics. International Studies in Economics and Econometrics*. Vol. 15. Dordrecht: Springer, 1987. Pp. 181–189.
13. **Mastelini S. M., Santana E. J., da Costa V. G. T., Barbon S.** Benchmarking multi-target regression methods // *Proceedings of the 7th Brazilian Conference on Intelligent Systems (BRACIS-2018)*, São Paulo, Brazil, October 22–25, 2018. Pp. 396–401.
14. **Efron B.** Bootstrap methods: Another look at the jackknife // *The Annals of Statistics*. 1979. Vol. 7. No. 1. Pp. 1–26.

REFERENCES

1. **Krizhevsky A., Sutskever I., Hinton G. E.**, Imagenet classification with deep convolutional neural networks, *Commun. ACM*. 60 (6) (2017) 84–90.
2. **Lobanov A. A., Berdnikov Ya. A., Mitrnikov Iu. M.**, Machine learning models to determine unobservable centrality-related parameter values for a wide range of nuclear systems at the energy of 200 GeV, *St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics*. 16 (2) (2023) 111–120.
3. **Esumi S.** (STAR Collaboration), Results from beam energy scan program at RHIC-STAR, *Proc. Int. Conf. on Critical Point and Onset of Deconfinement, CERN*, 15–19 Mar. 2021. (2021) 1–33.
4. **Morrison D. P., Akiba Y., Alford O., et al.**, The PHENIX experiment at RHIC, *Nucl. Phys. A*. 638 (1–2) (1998) 565c–569c.
5. **Sjöstrand T., Mrenna S., Skands P.**, A brief introduction to PYTHIA 8.1, *Comp. Phys. Commun.* 178 (11) (2008) 852–867.
6. **Quinlan J. R.**, Induction of decision trees, *Mach. Learn.* 1 (1) (1986) 81–106.
7. **Ho T. K.**, Random decision forests, *Proc. 3rd Int. Conf. Document Analysis and Recognition*, Montreal, QC, Canada, 14–16 Aug. 1995, *IEEE*. 1 (1995) 278–282.
8. **Haykin S.**, *Neural networks. A comprehensive foundation*. Prentice Hall, New Jersey, USA, 1998.
9. **Bergstra J., Bardenet R., Bengio Y., Kégl B.**, Algorithms for hyper-parameter optimization, In book: *Advances in Neural Information Processing Systems 24 (NIPS 2011)*. Edited by J. Shawe-Taylor, R. Zemel, P. Bartlett, F. Pereira, K. Q. Weinberger. 24 (2011) 1–6.
10. **Akiba T., Sano S., Yanase T., et al.**, Optuna: A next-generation hyperparameter optimization framework, *Proc. 25th ACM SIGKDD Int. Conf. Knowledge Discovery & Data Mining* (2019) 2623–2631.
11. **Kingma D. P., Ba J.**, Adam: A method for stochastic optimization, arXiv preprint arXiv:1412.6980. 2014.
12. **Barten A. P.**, The coefficient of determination for regression without a constant term, In book: *Heijmans R., Neudecker H. (Eds.) The practice of econometrics, (International Studies in Economics and Econometrics. Vol. 15)*. Springer, Dordrecht (1987) 181–189.
13. **Mastelini S. M., Santana E. J., da Costa V. G. T., Barbon S.**, Benchmarking multi-target regression methods, *Proc. 7th Brazilian Conf. on Intelligent Systems (BRACIS-2018)*, São Paulo, Brazil, Oct. 22–25, 2018. (2018) 396–401.
14. **Efron B.**, Bootstrap methods: Another look at the jackknife, *Ann. Stat.* 7 (1) (1979) 1–26.

**СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ**

ЛОБАНОВ Андрей Александрович – студент Физико-механического института Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
lobanov2.aa@edu.spbstu.ru
ORCID: 0000-0002-8910-4775

БЕРДНИКОВ Александр Ярославич – кандидат физико-математических наук, доцент Высшей школы фундаментальных физических исследований Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
alexber@phmf.spbstu.ru
ORCID: 0000-0002-0093-6875

МИТРАНКОВА Мария Максимовна – аспирантка Высшей школы фундаментальных физических исследований Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
mashalario@gmail.com
ORCID: 0000-0002-6798-6092

THE AUTHORS

LOBANOV Andrey A.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia
lobanov2.aa@edu.spbstu.ru
ORCID: 0000-0002-8910-4775

BERDNIKOV Alexander Ya.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia
alexber@phmf.spbstu.ru
ORCID: 0000-0002-0093-6875

MITRANKOVA Maria M.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia
mashalario@gmail.com
ORCID: 0000-0002-6798-6092

Статья поступила в редакцию 14.02.2023. Одобрена после рецензирования 22.02.2023. Принята 22.02.2023.

Received 14.02.2023. Approved after reviewing 22.02.2023. Accepted 22.02.2023.