

Warszawa 18 listopada 2024 r.

Dr hab. Marcin Konecki, prof. UW
Uniwersytet Warszawski, Wydział Fizyki

RECENZJA

rozprawy doktorskiej magistra Michała Mazurka zatytułowanej
„New simulation software and machine learning technologies in the LHCb experiment
to evaluate physics performance of Run 3”

Praca doktorska mgra Michała Mazurka dotyczy modernizacji oprogramowania eksperymentu LHCb przez utworzenie nowego środowiska symulacyjnego oraz zastosowanie nowych technologii komputerowych. Przy ocenie pracy należy wziąć pod uwagę, że współczesna fizyka cząstek jest wysoce zależna od symulacji komputerowych oraz efektywnego przetwarzania dużej ilości danych. Dlatego też rozprawa doktorska Michała Mazurka w pełni wpisuje się w potrzeby fizyki cząstek i może być zakwalifikowana jako praca z dyscypliny nauki fizyczne.

Głównym celem pracy, nakreślonym przez autora w streszczeniu, jest zbadanie nowych technologii oprogramowania oraz metod opartych na uczeniu maszynowym w celu poprawy wydajności przetwarzania danych w eksperymencie LHCb, ze szczególnym naciskiem na oprogramowanie do symulacji. Cel pracy jest jasno sformułowany a z rozprawy wynika, że jego realizacji doktorant podporządkował swoją działalność w zespole LHCb.

Rozprawa doktorska mgra Mazurka składa się z wprowadzenia, pięciu rozdziałów, bibliografii oraz czterech dodatków. Zasadnicza część pracy (do bibliografii) składa się z 85 stron i blisko 80 rysunków, podczas gdy dodatki zawierają krótko opisane dodatkowe rysunki. Całość to 130 stron i 139 rysunków. Należy podkreślić, że duża liczba rysunków jest niezbędna do zrozumienia treści pracy. Niestety praca nie zawiera podsumowania, w którym autor odniósłby się do realizacji postawionego celu oraz dalszych perspektyw rozwoju czy zastosowania przedstawionego oprogramowania.

Rozdział pierwszy pracy dotyczy symulacji w fizyce wysokich energii. Autor rozpoczyna bardzo krótkim opisem fizyki cząstek, któremu dedykuje jedynie jeden podrozdział „particles at high energies”. Tym podrozdziałem jestem bardzo rozczarowany. Wydawałoby się, że skoro praca nie dotyczy bezpośrednio analiz fizycznych autor powinien wykazać się znajomością fizyki cząstek elementarnych w inny sposób, np. przez rozbudowanie tego podrozdziału do dużego rozdziału, lub przynajmniej naszkicowanie konstrukcji modelu standardowego w dodatkach. W danym podrozdziale przeczytamy, że cząstki elementarne są bardzo małe i podróżują z dużymi prędkościami, a QFT jest unią mechaniki kwantowej i szczególnej teorii względności, ignorując fakt zupełnie innego opisu zjawisk przez te teorie. Autor bardzo pobieżnie podaje fundamentalne składniki materii, a fakt istnienia mezonów czy barionów, nie wspominając już o tetra- czy penta-kwarkach, jest pominięty. Nie dowiemy się nic o kolorze ani dlaczego masy antycząstek są takie same jak cząstek oraz nic poza ogólnikami o roli symetrii cechowania w konstrukcji lagranżjanu Modelu Standardowego. Samej cząstce Higgsa poświęcone są jedynie dwie linijki pracy, więc byłbym zainteresowany, aby doktorant w przedstawieniu pracy nieco rozwinął czym jest „[...] Higgs boson [...] responsible for particle masses”. Sam fakt doboru literatury do dyskutowanego podrozdziału jest też chaotyczny i mocno dyskusyjny. Jako referencje autor podaje tu wiodące podręczniki jak ref. 1 czy 3, artykuły z „CERN courier” oraz odnośniki do artykułów odkrywczych. Przy czym wspomniana ref. 3 sugeruje niestety, że jedynie M. Peskin jest autorem

słynnego podręcznika. W dalszej części rozdziału autor przedstawia typowy schemat eksperymentu, z punktu widzenia przepływu danych. Zestawione są dwa możliwe sposoby uzyskiwania danych – z eksperymentu i z symulacji, którym towarzyszy wspólne procesowanie danych i analiza. Dalej dyskutowane są działające oraz przyszłe akceleratory, przy czym autor nie wspomina o CEPC, który stanowi obecnie realną alternatywę do ILC czy CLIC. Mgr Mazurek przedstawia też zarys konstrukcji nowoczesnego eksperymentu, wspominając o istotności pomiaru śladów cząstek wokół punktu oddziaływania. Z konkretnych detektorów wymieniane są półprzewodnikowe i gazowe detektory śladowe, w tym komory TPC. Autor pobieżnie wspomina o kalorymetrach i detektorach RICH jako identyfikujących cząstki dzięki pomiarowi prędkości. Uzupełnieniem układu pomiarowego ma być układ mionowy umiejscowiony daleko od punktu oddziaływania. Oczywiście jest, że autor opisuje układ detekcyjny przez pryzmat detektora LHCb, nie wynika to jednak wprost z treści. Brak tu informacji o uciekających neutronach, które możemy zobaczyć dzięki detektorom dedykowanym czy czasem bilansowi energii. Autor nie wspomina też o utrudnieniach eksperymentalnych w postaci przebić (punchthrough) czy innych. Następnie zwraca uwagę na zagadnienia odczytu, wyzwalania oraz rekonstrukcji danych i konieczność symulacji niezbędnej do zrozumienia zbieranych danych oraz projektowania nowych eksperymentów. Dalej, w zgrabny sposób, w podrozdziale dotyczącym symulacji opisuje istotę metod Monte Carlo i ich rolę dla weryfikacji modeli. Doktorant przywołuje najważniejsze etapy generacji zdarzeń oraz przypomina najważniejsze wielozadaniowe generatory przypadków i narzędzi weryfikacyjnych. Ostatnia podsekcja rozdziału przeznaczona jest na dyskusję roli symulacji propagacji generowanych przypadków przez detektor. Wymienione są tu najważniejsze pakiety programistyczne oraz procesy fizyczne wpływające na detekcję cząstek.

W drugim rozdziale pracy doktorant przedstawia eksperyment LHCb, w jego wersji do Run-3 (trzeciego okresu działania LHC). Autor rozpoczyna ten rozdział opisem akceleratora LHC. Jako parametry akceleratora podaje te tablicowe a nie faktycznie osiągnięte (w szczególności liczbę paczek czy protonów w paczce), brak tu jednocześnie informacji o najważniejszym – świetności akceleratora. Dalej autor opisuje detektor LHCb, zaś jego koncepcję budowy jako jednoramiennego spektrometru słusznie uzasadnia głównym mechanizmem produkcji kwarków b : fuzji gluonowej. Zamieszczony jest ciekawy wykres przedstawiający obszar produkcji par $b\bar{b}$ z naniesionym pokryciem przestrzennym przez eksperyment LHCb oraz eksperymenty ogólnego przeznaczenia. Po informacjach ogólnych o LHCb omówiony jest układ eksperymentalny do Run-1 i Run-2, który niestety bez dedykowanego rysunku jest trudny do zrozumienia. Następnie omówiona i zilustrowana odpowiednim schematem jest modernizacja detektora do Run-3. Podkreślić należy elastyczność projektu detektora, która umożliwiła jego adaptację do coraz większych świetności, aż do $2 \times 10^{33} / \text{cm}^2 / \text{s}$, czyli o rząd wielkości większej niż nominalna świetność dla LHCb. Opis budowy detektora jest rozwijany w kolejnych podsekcjach dotyczących detektora śladowego, układu RICH, kalorymetrów i układu mionowego. Opis budowy detektora nie budzi większych zastrzeżeń, choć w sekcji dotyczącej infrastruktury, gdzie dyskutowane jest pole magnetyczne zabrakło wartości indukcji magnetycznej w części centralnej detektora (zamiast tego podana jest całkowita siła gięcia), a w części poświęconej detektorowi śladowemu brak jest informacji o osiągniętych rozdzielczościach czy niepewności spasowania (alignment). Czytelnika mógłby też zaciekawić opis algorytmu rekonstrukcji śladów i wierzchołków, którego niestety w tej sekcji zabrakło. W kolejnym podrozdziale przedstawiony jest program fizyczny LHCb. Autor podkreśla, że detektor zaprojektowany został do badania fizyki mezonów B , ale jego przeznaczenie zostało rozszerzone. W tej sekcji, przy informacji, iż LHC jest największą fabryką b nieco brakuje podania konkretnego przekroju czynnego oraz liczby par $b\bar{b}$ rocznie w zakresie akceptacji LHCb. Autor w ciekawy, choć bardzo skrócony sposób, opisuje łamanie symetrii CP przez macierz mieszania kwarków CKM oraz identyfikuje nieredukowalną zespoloność macierzy CKM z wierzchołkiem trójkąta unitarności. W dalszej części rozdziału opisane są wybrane pomiary eksperymentu LHCb w zakresie

pomiaru łamania CP, w tym analiza zależności czasowych asymetrii w $B_s^0 \rightarrow J/\psi \phi$ i innych oraz badanie łamania CP w systemie mezonów D . Dodatkowo autor podkreśla wagę pomiarów rzadkich procesów, jako źródło potencjalnych rozbieżności z Modelem Standardowym. W tym kontekście przywoływany jest historyczny pomiar $B_s^0 \rightarrow \mu^+ \mu^-$ oraz inne. Autor wylicza też badanie uniwersalności leptonowej, poszukiwanie hadronów wielokwarkowych a także pomiary MS i spoza MS w obszarze niedostępnym kinematycznie innym eksperymentom przy LHC. Jako recenzent pracy bardzo sobie cenię przegląd wyników LHCb, choć jego zaledwie dwuipółstronicowa objętość budzi pewien niedosyt.

Rozdział trzeci pracy dotyczy nowego oprogramowania symulacyjnego LHCb, którego doktorant jest głównym autorem. Oprogramowanie, w oparciu o które prowadzono symulacje do Run-1 i Run-2 nosi nazwę Gauss. Konieczne jest zwiększenie prędkości symulacji odpowiedzi detektora przez wsparcie wielowątkowości oraz przystosowanie oprogramowania do szybkich symulacji. Dla ulepszenia działania oprogramowania dokonano jego modularyzacji, w szczególności wydzielono część oprogramowania niezależną od konkretnego zastosowania jako środowisko symulacyjne Gaussino. W oparciu o nie utworzono nowe oprogramowanie Gauss, który obecnie nazwano Gauss-on-Gaussino. Jak autor podkreśla we wstępie doprowadzenie środowiska Gaussino oraz oprogramowania Gauss-on-Gaussino z etapu wstępnego do gotowego do zastosowania było jednym z celów pracy. W dyskutowanym rozdziale dokonano analizy czasu spędzanego w symulacji różnych komponentów LHCb, identyfikując symulację zdarzeń w kolorymetrach i RICH jako główne źródło konsumpcji CPU. Zbadano różne sposoby optymalizacji czasowej, w tym akcelerację sprzętową przez symulację kalorymetrii na GPU czy też wielokrotne użycie wygenerowanego pierwotnego oddziaływania pp . Testowano też szybkie odpowiedzi kalorymetru w oparciu o uczenie maszynowe, które wprowadziło wymagania odpowiedniej uniwersalności interfejsów w środowisku Gaussino. Autor w osobnych podrozdziałach opisał zagadnienia związane z generacją przypadku, transportem cząstek przez detektor, z opisem geometrii oraz z wizualizacją geometrii i zdarzeń. W ramach generacji zdarzeń omawiane są moduły: Production Tool, Decay Tool, Sample Generation Tool, Pile-Up and Beam Tool, Vertex Smearing Tool and Cut Tool. Autor omówił też sposoby wstrzykiwania konkretnych cząstek (ParticleGun) co jest użyteczne przy kalibracji detektora. Transport cząstki przez detektor jest możliwy bezpośrednio przez program Geant4, gdzie mamy do czynienia z symulacją detaliczną, opartą o właściwe zjawiska fizyczne albo przez odpowiednią parametryzację odpowiedzi. W celu komunikacji i przekazywania danych wprowadzono do Gaussino dedykowane interfejsy. Dodatkowo, dla rozszerzenia funkcjonalności o nowy opis geometrii detektora przez narzędzie DD4HEP, wprowadzono do Gaussino narzędzia do konwersji obiektów DD4HEP do natywnego formatu Geant4. Do Gaussino wprowadzono także nowy sposób dodawania, w czasie wykonywania programu, dodatkowej prostej geometrii przez wewnętrzny pakiet ExternalGeometry. Autor dyskutuje dwie opcje modelu szybkiej symulacji, które oferuje Gaussino – poprzez dodawanie pojedynczego hitu (trafienia) (ImmediateDeposit) oraz szeregu hitów (ShowerDeposit) przy przejściu cząstki przez aktywny poddetektor. Omawia też wsparcie przez Gaussino modeli szybkich symulacji, które wymagają treningu. Kolejnym dyskutowanym ulepszeniem jest wprowadzenie wsparcia dla równoległej geometrii, których wprowadzenie umożliwia Geant4. Przyznam tu, że nie znajduję konkretnego zastosowania fizycznego dla tej koncepcji. W kolejnym podrozdziale dyskutowana jest wizualizacja zapewniana przez Gaussino. Autor podaje liczne przypadki wizualizacji geometrii, symulowanych danych oraz pola magnetycznego. Wizualizacja opiera się o mechanizmy wspierane przez Geant4 oraz o zewnętrzny pakiet Phoenix, używany już wcześniej przez LHCb. Autor zaznacza, że ze względu na wielowątkowość implementacja wizualizacji w Gaussino stanowiła duży wysiłek programistyczny. Autor środowiska do symulacji zapewnił również integrację z pakietami umożliwiającymi automatyczną dokumentację kodów. W podsumowaniu tego rozdziału przyznać muszę, że momentami opis poszczególnych elementów programów był zbyt techniczny i w efekcie trudny do zrozumienia dla fizyka. Jednocześnie jednak samo zagadnienie dostarczenia

odpowiedniego środowiska programistycznego jest bardzo ważne i mam do wrażenie, że doktorant dobrze wywiązał się z tego zadania.

Rozdział czwarty dotyczy możliwości zastosowania uczenia maszynowego w symulacji próbek. Autor zauważa, że współcześnie generatywna sztuczna inteligencja (GenAI) dzięki nauczeniu konkretnych wzorców odpowiedzi z zachowanymi korelacjami, może zastąpić szczegółową symulację Geant4. Zgodnie z założeniem projektowym środowisko Gaussino umożliwia wprowadzenie metod uczenia maszynowego do symulacji. Autor najpierw dostarcza informacji o koniecznych interfejsach. Ich implementacja wymagała kolejnego wysiłku programistycznego, w wyniku którego przygotowano wsparcie dla dwóch z kilku dostępnych bibliotek, a w podrozdziale 4.1.3 przetestowano ich wydajność. Niestety brakuje tu komentarza do uzyskanych wyników. Następnie doktorant dyskutuje model CaloML+VAE, który umożliwia pominięcie kosztownego czasowo etapu symulacji kaskady przez Geant4. Autor nie komentuje zgodności osiągniętych rezultatów z symulacją pełną (rys. 4.10). Trudno też określić przyczynę poprawy zachowania między czystym modelem VAE a wersją zmodyfikowaną przez autora (rys 4.9 vs 4.6, przy czym rysunki te wbrew twierdzeniom autora, nie są chyba oparte o tę samą próbkę). Następnie autor zestawia uzyskane wyniki z danymi z pełnej symulacji osiągając zgodność rekonstruowanych energii na poziomie 1-4%. Autor podkreśla, że rozwinięta przez niego metoda symulacyjna jest gotowa do zastosowania w symulacji Gauss-on-Gaussino. Dodatkowo w kolejnym podrozdziale autor przedstawia możliwość użycia szybkiej metody rekonstrukcji klastrów w kalorymetrze, opartej o sieci neuronowe. W szczególności autor wprowadza środowisko YOLO dla rekonstrukcji klastrów, które porównuje z używanym przez LHCb algorytmem, w wyniku czego dostrzega też ograniczenia nowego algorytmu. Dyskutowany rozdział bezpośrednio dotyczy fizyki i niewątpliwie jest kluczowym rozdziałem pracy. Z punktu widzenia czytelnika-fizyka jest niestety napisany nieco chaotycznie, wprowadzanych jest wiele pojęć, które dla nie-eksperta od uczenia maszynowego wymagają dodatkowych wyjaśnień, których autor nie dostarcza.

Rozdział piąty jest rozdziałem uzupełniającym. Zawiera porównanie danych osiągniętych dzięki wprowadzeniu nowego oprogramowania Gauss-on-Gaussino i CaloML+VME z danymi uzyskanymi przy szczegółowej symulacji przez Geant4. Autor zastrzega, że niemożliwe było przeprowadzenie pełnej symulacji detektora LHCb, gdyż niektóre jego komponenty nie były jeszcze ujęte w symulacji. Dla przeprowadzenia porównania wybrano kanały: $B^+ \rightarrow J/\psi(\rightarrow e^+e^-)K^+$, $B_s^0 \rightarrow J/\psi(\rightarrow e^+e^-)\gamma$, $B_s^0 \rightarrow J/\psi(\rightarrow \mu^+\mu^-)\gamma$, $B^0 \rightarrow K^{*0}(\rightarrow K^+\pi^-)\gamma$. Wybór kanałów testowych podyktowany jest ich czułością na odpowiedź kalorymetru oraz istotnością dla badań LHCb. Dla badanych kanałów autor typowo pokazuje masę niezmienniczą mezonu B oraz rozkład pędu porzecznego elektronów lub fotonów. Początkowe konkluzje są takie, że spektra pędowa zgodne są między obiema metodami symulacji, zaś piki masy nieco poprzesuwane o 10-80 MeV. Odniosę się tu do jednego wyniku: autor nie komentuje, dlaczego rys. 5.6 pokazuje dużą niezgodność w masie. Miony procesowane były bezpośrednio przez Geant4 nie jest więc zaskoczeniem, że rozkłady mionów na rys. 5.7 określane są przez autora jako zgodne. Kolejny rysunek (5.8) pokazuje jednak równie dobrą zgodność dla rozkładów pędowych fotonów. Skąd więc różnice w masie? Wydaje się, że w takim wypadku celowe byłoby zbadanie mas niezmienniczych J/ψ w obu kanałach leptonowych. Tym niemniej autor przyznaje, że osiągnięte rezultaty były zaskoczeniem. Dlatego proponuje kalibrację rezultatów przez dodanie dodatkowych parametrów. Analizując względną różnicę między wynikami szczegółowej i szybkiej symulacji autor dokonuje dopasowania wprowadzonych parametrów. Po tym zabiegu dyskutowane wcześniej histogramy mas niezmienniczych są zgodne jeśli chodzi o wartość masy, natomiast część centralna pików jest widocznie wyższa dla przypadku szybkiej symulacji. Poza tą usterką autor osiąga dobrą zgodność obu metod. Na zakończenie rozdziału autor identyfikuje możliwe źródło niezgodności obu metod symulacyjnych jako zbyt małą częstość próbkowania, co potwierdza dedykowanym testem.

Rozdział 5 jest ważnym testem rozwiniętych metod w rozdz. 4. Nie jest dla mnie jasne jak oszacowano przesunięcia wartości mas niezmienniczych czy zgodność spektrów pędowych. Oczekiwałbym poparcia cytowanych wielkości dopasowaniami odpowiednich krzywych do danych, co mogłoby zmienić moje wrażenie, że porównania przeprowadzono „na oko”.

Praca jest uzupełniona 4 dodatkami, które dodatkowo dokumentują pracę doktoranta.

Niezależnie od wartości merytorycznej rozprawa nie jest wolna od usterek technicznych. Irytujące są rysunki pojawiające się w tekście zdecydowanie szybciej niż nawiązanie do nich (np. 2.2), do niektórych odwołania są nie po kolei (np. odwołanie do 3.5 przez 3.4), do niektórych zupełnie nie ma odnośników (3.19). Znaleźć można nakładające się podpisy pod rysunkami (np. 3.18), czy też brak podpisów osi (4.15). Wiele terminów technicznych nie jest opisanych w sposób wystarczający, np. opcja Truth, strona 39. Dużym minusem pracy jest brak solidnego wprowadzenia fizycznego do Modelu Standardowego i fizyki B, czy choćby dokładniejszego omówienia technik rekonstrukcyjnych stosowanych przy analizach LHCb. Uzupełnieniem pracy powinien być też dodatek dotyczący uczenia maszynowego – bez tego dla fizyka rozdział 4 jest niesłychanie ciężki do zrozumienia.

Te niedociągnięcia nie powinny jednak przesłonić walorów pracy, która w moim rozumieniu bardzo przyczyni się do poprawy wydajności symulacji eksperymentu LHCb. Najważniejsze osiągnięcia to – utworzenie nowego oprogramowania symulacyjnego, utworzenie i badanie nowych technik symulacji i zastosowanie ich do symulacji odpowiedzi kalorymetru oraz rekonstrukcji. Podjęte przez doktoranta wyzwania umożliwi kontynuację symulacji próbek do Run-3 i HL-LHC. Najlepszym pozytywnym podsumowaniem pracy jest zresztą to, że zaimplementowane oprogramowanie Gauss-on-Gaussino, którego mgr Mazurek jest głównym autorem, jest już używane przez eksperyment LHCb. Świadczy to, że cele pracy zostały osiągnięte.

Podsumowując uważam, że recenzowana rozprawa mgra Michała Mazurka spełnia wymagania stawiane przed rozprawami doktorskimi i wnoszę o dopuszczenie Autora do dalszych etapów przewodu doktorskiego.

Marcin Konecki