



# 机器学习在相对论重离子碰撞中的应用

周蒙, 罗逸群, 宋慧超\*

北京大学物理学院, 核物理与核技术国家重点实验室, 北京 100871

\*联系人, E-mail: [huichaosong@pku.edu.cn](mailto:huichaosong@pku.edu.cn)

收稿日期: 2021-11-19; 接受日期: 2022-01-28; 网络出版日期: 2022-04-15

国家自然科学基金(编号: 12075007, 11675004)资助项目

**摘要** 近年来机器学习领域在硬件和算法上均有长足的发展, 并作为一种大数据分析方法获得了广泛的应用. 其中, 机器学习在物理学方面的应用也逐渐热门起来. 本文综述了机器学习的各类模型在相对论重离子碰撞物理研究中的应用, 包括碰撞参数预测、核形变参数预测、相变分类、流体演化模拟等. 其中涉及的机器学习模型既包括集成学习、主成分分析等经典机器学习模型, 也包括卷积神经网络、点云网络等深度学习模型. 由于机器学习出色的性能和运算效率, 它在相对论重离子碰撞物理中的应用将获得越来越多的关注.

**关键词** 机器学习, 深度学习, 相对论重离子碰撞物理

**PACS:** 21.65.Qr, 25.75.-q, 25.75.Ag, 25.75.Ld, 25.75.Nq

## 1 引言

相对论重离子碰撞实验的主要目的是在极端条件下制造夸克胶子等离子体(QGP), 研究其性质并探索强相互作用相图<sup>[1-31]</sup>. 相对论重离子碰撞的过程包括初态、流体演化、强子化和末态散射. 通过实验观测和模型模拟所得到的大量末态粒子数据中包含了丰富的信息, 为机器学习的应用提供了广阔的舞台.

机器学习是人工智能领域的一个分支, 它是一类直接从数据中学习的算法. 近年来, 机器学习在硬件和算法两个方面都有了长足的进步. 其中, 逐渐兴起的深度学习以其强大的表达能力与泛化能力(Generalization Ability)在学术研究与工业应用中有了广泛的应用. 例如, 基于深度学习的AlphaGo<sup>[32,33]</sup>在围棋领域中击败了人类, 展现出了机器学习的巨大潜

力. 随着推荐算法、机器翻译、人脸识别、自动驾驶等应用的完善与推广, 机器学习逐渐成为了人们日常生活的一部分.

机器学习的任务通常可以分为三类, 监督式学习、非监督式学习与强化学习<sup>[34-37]</sup>. 监督式学习的训练集是带标签的数据集, 并利用标签评估模型的效果. 非监督式学习所使用的数据集是没有标签的, 常见的应用场景包括降维和聚类, 人们通常用它们来做数据可视化和预处理. 强化学习则通过对机器学习模型在不同决策下与环境互动的结果进行奖励或者惩罚, 从而获得最优决策.

在相对论重离子碰撞领域中, 实验上很难获得大量带标签的数据. 但是, 利用成熟的数值模拟程序, 通过调节参数, 我们可以获得很多带标签的数据集. 根据标签的分布特征, 可以将这些应用任务分为分类任务

**引用格式:** 周蒙, 罗逸群, 宋慧超. 机器学习在相对论重离子碰撞中的应用. 中国科学: 物理学 力学 天文学, 2022, 52: 252002  
Zhou M, Luo Y Q, Song H C. Applications of machine learning in relativistic heavy ion physics (in Chinese). Sci Sin-Phys Mech Astron, 2022, 52: 252002, doi: [10.1360/SSPMA-2021-0321](https://doi.org/10.1360/SSPMA-2021-0321)

和回归任务,来对应地尝试不同的机器学习模型.总体而言,相对论重离子碰撞的相关实验和数值模拟为我们提供了充足的粒子数据,这些数据包含了很多我们感兴趣的物理信息,适合采用机器学习的方法进行训练和特征提取.在大数据中自动发现隐藏的模式是机器学习优于其他传统计算机程序的地方,所以相对论重离子碰撞的信息提取也成为了机器学习的一个很好的应用场景.

本文综述了常见的机器学习算法以及它们在相对论重离子碰撞中的应用,并对这些算法的特点与变化趋势进行了总结.第2节分类介绍了在相对论重离子碰撞物理中常用的机器学习算法,第3节对应地分类概括了这些机器学习算法在相对论重离子碰撞中的应用.第4节是总结和展望.

## 2 机器学习简介

机器学习是一个非常广阔的领域,包含了众多的模型和算法,并且还在蓬勃发展.但在相对论重离子碰撞领域中,由于应用场景的局限并且相关探索尚未成熟,常见的机器学习方法并不多.本节介绍了在相对论重离子碰撞中应用较多的几类机器学习方法,如图1所示,包括集成学习、深度学习、贝叶斯方法和降维等.

### 2.1 监督式学习

监督式学习是机器学习最重要也是应用最成功的一个方向.在工业界,人们有时会通过大量人工标注获得带标签的数据集,这些数据集也构成了机器学习应用的基础.本节介绍了在相对论重离子碰撞物理中应用时最常见的监督式学习方法:集成学习、深度学习以及贝叶斯方法.如果需要兼顾建模效率与表达能力,

人们通常使用集成学习;如果这些学习任务需要模型具有强大的表达能力,那么深度学习就成了更好的选择;如果期望在得到模型预测的同时,获得对应的误差,那么可以选择贝叶斯方法.

#### 2.1.1 集成学习

集成学习是一种将多个弱分类器的预测结合起来形成一个强分类器的方法.其中,弱分类器也被称为基分类器,最常使用的是决策树.决策树是一种利用树形结构分类或回归的模型,也是众多集成学习模型实现的基础.常见的集成学习方法包括装袋(Bagging)<sup>[38-40]</sup>和提高(Boosting)<sup>[41-43]</sup>.

(1) 对于装袋的方法,假设我们要处理一个带标签的数据集,那么装袋方法会并行训练多个弱分类器,每个弱分类器训练使用的样本与特征都是从整个数据集中随机采样得到的一部分.训练完成后,集成模型的最终分类取决于这些弱分类器的投票表决.装袋方法优化了模型的方差(Variance),增强了模型对样本变化的适应能力,从而有了更好的泛化能力.装袋方法的一个典型例子是随机森林,即利用众多决策树并行地对样本进行学习和预测<sup>[39,40]</sup>.

(2) 对于提高的方法,我们会逐个训练基分类器,每个基分类器学习已有的模型预测与真实值之间的残差,从而最终优化了模型的偏差(Bias),典型例子是梯度提升树GBDT (Gradient Boosting Decision Tree)<sup>[44,45]</sup>.GBDT通过优化上一轮基学习器的误差的梯度,来间接实现对残差的优化.直接优化残差对损失函数的形式有严格要求,并且一般只适用于回归问题,而GBDT适用于任何可以求梯度的损失函数,所以可以有更广泛的应用.提高的方法比较容易出现过拟合,所以需要配合一些防止过拟合的技巧,比如在损失

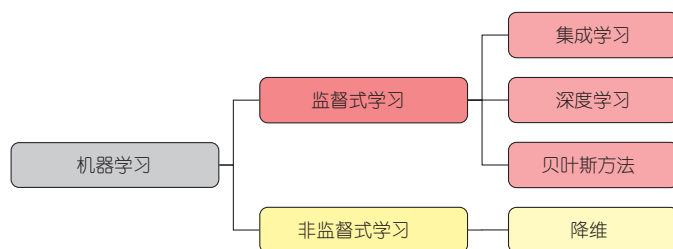


图1 (网络版彩图)相对论重离子碰撞中常见的机器学习方法分类

Figure 1 (Color online) Classification of machine learning methods in relativistic heavy ion collisions.

函数中加入树复杂度的惩罚项, 限制树的深度等.

在最基本的GBDT的基础上, 人们还探索采用不同的实现以优化它的效果. GBDT的一个杰出的工程实现就是陈天奇在2014年发表的XGBoost, 这个模型在Kaggle的希格斯信号识别竞赛中获得了广泛关注<sup>[46]</sup>. XGBoost全称是eXtreme Gradient Boosting, 指一个经过优化的分布式梯度提升库. 这种实现方法通过对损失函数进行二阶泰勒展开, 获得了更高的效率和精度. 此外它在正则化、缺失值处理、并行化等方面相比传统的GBDT都有优势, 在大数据科学比赛中常常位居前列. 这种方法后续在高能物理实验中也有了应用, 常常作为分类或回归任务的基准线<sup>[47-49]</sup>.

另一种实现GBDT的框架是LightGBM (Light Gradient Boosting Machine)<sup>[50]</sup>. 这种方法采用了单边梯度下降(Gradient-based One-Side Sampling), 减少了梯度较小的样本, 只在梯度较大的样本上进行优化, 从而大大减少了计算时间和空间的消耗. LightGBM的另一个重要优化是互斥特征捆绑(Exclusive Feature Bundling), 将互斥的特征绑定, 从而大大降低了特征维度. 同时, 与XGBoost等大多数基于GBDT的方法相比, LightGBM的一个更大的不同是LightGBM算法中树的生长方式. 在对决策树训练时, XGBoost采取的是按层生长, LightGBM采用的是按叶生长. 为了防止过拟合, 通常需要进行提前停止(Early Stopping), 此时按叶生长的方式更加高效. 得益于这些特点, 有时LightGBM可以在提升效果的前提下, 比XGBoost节省大量的计算时间<sup>[51]</sup>.

相比较决策树, 集成学习在提升模型的整体效果与模型的表达能力的同时, 也使模型更加复杂, 损失了部分可解释性. 比如在XGBoost中, 我们无法像逻辑回归一样得知某个特征对某个类别的贡献是正向还是负向, 只能通过分析决策树分裂时的信息增益情况, 获得特征重要性. 虽然可解释性较差, 但集成学习与后文将要提到的深度神经网络仍然凭借着出色的性能和效率, 成为高能物理中最常见的方法.

### 2.1.2 深度学习

尽管深度学习只是机器学习的一个分支, 但它促成了人工智能的第三波浪潮, 其表达能力远超其他传

统的机器学习算法<sup>[52,53]</sup>. 深度学习是一种端到端的算法. 给定输入 $x$ , 可以直接得到输出 $y$ , 中间过程则是一个难以拆解的黑盒子, 其中 $x$ 往往是仅经过简单预处理的原始数据. 可以将这个映射用函数表达为 $y = f(x, \theta)$ , 这里 $\theta$ 是指神经网络中的待调节参数,  $y$ 是模型预测的标签. 这个映射通常不是线性的, 其中包含的大量非线性函数被称为激活函数. 在初始状态时, 人们需要选取一种随机的初始化方法, 赋予这些参数一些随机的值. 模型预测与真实标签的距离就定义为损失函数<sup>[54]</sup>. 例如, 对于回归的任务, 我们通常会使用均方差(MSE)作为损失函数, 均方差建立在输出的不确定性符合高斯分布的先验假设上; 而对于分类的任务, 则使用交叉熵作为损失函数, 用于衡量两个分布之间的差别. 损失函数可以看作参数 $\theta$ 的函数 $l(\theta)$ , 而优化目标就是最小化损失函数. 通过梯度下降算法, 即 $\theta = \theta - \lambda \partial l / \partial \theta$ , 不断更新参数, 最终使损失函数逐渐收敛到某个局部极小值中. 由于深度学习的中间过程是一个黑盒子, 其与集成学习一样, 虽然失去了一些可解释性, 但也获得了更强大的表达能力, 其表达能力来自于非线性的激活函数以及大量的参数. 虽然大量的参数也带来了过拟合的风险, 但实践表明, 当数据集较大时, 深度网络相比浅层网络以及经典机器学习方法会带来更好的泛化能力<sup>[55-57]</sup>.

深度学习的模型层出不穷, 本节主要介绍相对论重离子碰撞研究中最常用的两种深度学习模型: 卷积神经网络(CNN)和点云网络.

CNN是计算机视觉领域的一种高效且准确的模型<sup>[58,59]</sup>, 它可以有效地提取图片特征, 在图片分类、检测、自然语言处理、语音识别等领域都有着广泛的应用. CNN近似地模拟了人类视觉系统, 具有稀疏连接和权重共享的特点<sup>[59]</sup>: 稀疏连接是指每个隐藏层神经元都只与前一层某个窗口内的神经元连接, 这种局域连接就构成了一个滤波器; 而权重共享是指该滤波器对该层所有神经元是相同的, 可以理解为一个滤波器只提取一类特定的局部特征. 卷积的网络结构既大大减少了参数量, 同时还引入了平移不变性. 此外, CNN还是一种具有层级结构的特征提取方法. 虽然稀疏连接导致浅层神经元的感受野(Receptive Field)有限, 但图片以及文本语音等信息都存在局部与整体的关系, 浅层网络加工低层次的特征, 深层网络将这些特征组成高层次的特征, 同时保留了空间相关性. 浅层与

深层神经元共同协作,从而得到了该样本的有效表示.

点云网络可以很好地利用对撞机领域的数据类型,因为我们直接处理的原始数据通常以点云的方式存在.点云数据是空间中一组坐标向量的点的集合<sup>[60,61]</sup>.使用深度学习的一个优势就是可以依赖深度网络强大的特征提取能力,直接处理较为原始的数据.但在点云数据上,应用深度学习面临着很多挑战<sup>[62]</sup>,大致可以总结为点云数据的无规律性、无结构性、无序性等.无规律性是指样本点在整个空间中的分布密度非常不均匀;无结构性是指样本点出现的位置是随机的,并不是出现在固定的格点上;无序性是指点云数据集中的样本点存在交换对称性,改变顺序不会影响点云数据集记录的场景.最早人们将点云数据预处理为分布图,将无序的点云转化为有结构的格点,或者使用多视角投影的方法将三维格点转化为二维图片数据,然后使用发展成熟的深度神经网络模型(DNN)或CNN进行分类或回归.但是,DNN,CNN等模型无法从根本上解决上述的点云数据带来的挑战,直到点云网络模型的出现<sup>[63]</sup>.在点云网络中,每个粒子都处于独立且同等的地位,在所有粒子都通过神经网络编码后,会经过一个全局的最大池化(Maxpooling),这个操作是交换对称的,也是这个方法的关键之处.同时为了考虑旋转不变性,通常还需要学习一个旋转矩阵.最后只需要再通过一个全连接,接下游任务即可.为了进一步考虑局部信息,也有工作在点云网络的基础上进行了改进<sup>[64-66]</sup>.

深度学习的可解释性是一个很大的挑战.上述的深度模型凭借着强大的表达能力在计算机视觉、自然语言语音处理等很多领域都达到了很好的效果,但是任何事物都有两面性:深度学习相比逻辑回归、决策树等简单模型而言,一个很大的缺陷就是缺乏可解释性.可解释性可以帮助我们确定模型在某些样本上为什么失效,从而帮助进行问题定位,并让人们AI有更强的信心.人们在过去探索出了一些可以在某种程度上获得特征重要性的方法<sup>[67-79]</sup>.例如,对某个样本使用遮盖、扰动、梯度等方法,利用训练好的深度模型,可以得到对该样本进行分类时对分类决策最重要的特征区域分布,但这些方法的鲁棒性(Robustness)受到很多质疑<sup>[80-84]</sup>:这些可解释性方法很容易面临对抗样本的攻击.即对于任意一张图片,我们都可以产生一张几乎与原图相同,并且神经网络预

测标签也相同,但是使用可解释方法得到的解释却大相径庭.这些可解释方法面临的问题与深度学习本身非常类似,因为深度学习面临的质疑之一就是它很容易面临对抗样本的攻击<sup>[85-87]</sup>.一个直观的解释是深度网络特征空间的决策边界十分复杂,只要我们对输入进行一个很小的扰动,就可以使边界发生巨大变化.很多可解释方法依赖于梯度,而梯度是垂直于边界的,所以也会相应变化.此外,人们甚至发现,已有的可解释方法之所以有效很大程度上仅仅是来自于人类的偏见<sup>[88]</sup>,因而如何量化、自动化衡量可解释方法的有效性也是一个热门的话题.总之,可解释机器学习的领域远远没有达到成熟,很多开放性的问题仍然有待探索.

### 2.1.3 贝叶斯方法

在统计推断中,人们需要利用观测数据的分布反推模型参数.在这个场景下,贝叶斯方法是一个常见的选择<sup>[89-91]</sup>.从联合概率分布 $P(x, y) = P(y|x)P(x) = P(x|y)P(y)$ 出发,我们可以得到

$$P(y|x) = \frac{P(x|y)P(y)}{P(x)}, \quad (1)$$

这里 $x$ 是指数据集, $y$ 是指模型参数. $P(y)$ 称为先验分布,也就是我们对模型参数的最初猜测,而 $P(x|y)$ 就是似然函数,衡量了数据集 $x$ 与模型参数为 $y$ 时模型输出结果的相似程度,在这里,我们可以利用已有的数据集更新模型参数的分布,最终得到 $P(y|x)$ ,也就是后验分布.贝叶斯方法从目标预测的先验分布出发,使用训练集来更新这些分布.但由于分母 $P(x)$ 通常需要高维积分,很难直接计算,所以通常使用Metropolis重要性采样来获得目标分布.

在相对论重离子碰撞领域中应用贝叶斯方法时,有时需要构建一个概率分布模型,要求该模型能够在参数空间的任意点处进行快速预测,高斯过程就是这样的一个理想的模型<sup>[92-94]</sup>.高斯过程适用于任何高维空间,并且很自然地量化了预测的不确定性.尤其是在计算量较大的参数估计任务中,高斯过程是一个很好的选择.高斯过程是一种随机过程,即一系列随机变量的集合.高斯过程中的每一个随机变量都符合联合高斯分布:

$$y \sim \mathcal{N}(\mu, \Sigma), \quad (2)$$

这里 $\mu$ 是均值, $\Sigma$ 是协方差矩阵,也可以称为核函数.核

函数的一个常见的选择是

$$\Sigma(y_i, y_j) = k(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) = \exp\left(-\frac{|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j|^2}{2l^2}\right) + \sigma_n^2 \delta_{ij}, \quad (3)$$

第一项是一个高斯型函数<sup>1)</sup>, 引入第二项是考虑到训练数据可能含有噪声:  $y = f(\mathbf{x}) + \epsilon$ , 假设 $\epsilon$ 是一个方差为 $\sigma_n^2$ 的高斯噪声, 就得到了第二项. 协方差矩阵描述了不同模型输出 $y$ 之间的相似程度, 但它实际上是模型输入 $\mathbf{x}$ 的函数. 这意味着当输入的样本非常接近时, 输出就会有强关联, 但如果输入相距较远, 输出就没有关联; 标志远近的特征尺度是 $l$ . 在这样的协方差的约束下, 得到的函数通常比较光滑, 有很好的性质; 这里的光滑性可以用特征尺度来控制. 当然, 也可以结合具体问题构造更加复杂的协方差函数, 比如可以将两个高斯函数相加, 使样本点在某个小的尺度和某个大的尺度都有一定关联结构. 协方差矩阵定义好后, 就可以通过训练数据进行新的样本点的输出预测, 包括均值和协方差.

当高斯模型定义完成后, 假设训练数据的输入输出为 $(X_t, y_t)$ , 在测试集的 $X_p$ 处做预测时, 可以得到模型的输出为

$$y_p \sim \mathcal{N}(\mu, \sigma^2), \quad (4)$$

$$\mu = \Sigma_{pt} \Sigma_{tt}^{-1} y_t, \quad (5)$$

$$\sigma^2 = \Sigma_{pp} - \Sigma_{pt} \Sigma_{tt}^{-1} \Sigma_{tp}, \quad (6)$$

这里将 $\Sigma(y_i, y_j)$ 简记为 $\Sigma_{ij}$ . 从中可以看到, 预测值 $y_p$ 是所有训练集 $y_t$ 的线性组合, 而权重就依赖于两点之间的协方差函数. 方差则包含了 $x_p$ 的协方差函数, 第二项则是由于训练集带来的额外信息, 减少了本来的方差.

## 2.2 非监督式学习之降维

当数据没有标签或者标签很难获得时, 我们会采用非监督式学习的方法进行数据处理, 这通常包括聚类、降维等. 非监督式学习的主要目的是对现有的数据信息进行压缩, 同时尽可能保证信息损失较小, 从而找到数据中隐藏的模式. 非监督式学习的常见思路是通过衡量样本之间的相似性进行聚类, 或者将高维的样本特征向低维投影, 或者对数据的生成建立隐变量模型, 并学习该模型参数. 典型的非监督式学习模型

包括 $k$ 均值聚类<sup>[95]</sup>、主成分分析(PCA)<sup>[96,97]</sup>、奇异值分解(SVD)<sup>[98]</sup>、自编码器(Autoencoder)<sup>[99]</sup>、概率图模型<sup>[100]</sup>等.

降维的算法假设样本的实际特征自由度要小于数据集的特征数. 原始的高维数据很难分析样本的实际位置, 并且面临着“维度诅咒”: 大量的特征使得训练缓慢且难以优化, 容易过拟合. 通过降维既可以更好地表示样本之间的关系, 提供低维可视化的可能, 又去除大量噪声以及无关节点, 使得训练更加容易.

PCA是最常用的降维方法之一, 同时也可以探索数据集的隐藏特征<sup>[101]</sup>. PCA的主要思想是在把原始数据每个特征均值归零之后, 将数据集在某个方向上的方差视为信息含量, 挑选出信息含量最大且互相垂直的方向, 然后把这些方向按照信息含量由高到低进行排序, 即为主成分. 假设原数据集为 $\mathbf{x}$ , 均值为 $\mu$ , 那么协方差矩阵是

$$\Sigma = E[(\mathbf{x} - \mu)(\mathbf{x} - \mu)^T], \quad (7)$$

可以证明, 第 $k$ 主成分的方差等于按 $\Sigma$ 由大到小排序的第 $k$ 个特征值.

如果主成分的数量小于原始的特征数量, 将原始数据投影到这些主成分方向上, 那么就在保留了足够多信息的情况下达到了降维的效果. 例如, 将第一主成分作为新特征表示数据, 就将原高维空间数据压缩为一维空间的数据. 另一方面, 作为线性方法, 它的假设是原数据集的特征之间是线性相关的, 通过正交变换, 可以转换为线性无关的变量. 所以PCA分解也可以用于分析原始特征以及它们之间的关系.

PCA通常要求原始数据分布符合多维高斯分布, 非高斯分布的数据有时可以通过非线性变化将它变得近似高斯分布. 另一方面, 作为一种线性方法, PCA可以识别变量之间的线性关联, 但对于非线性关联则无能为力. 在使用PCA之前, 需要考察数据集是否满足这些要求.

与PCA类似的线性降维方法包括奇异值分解<sup>[98]</sup>、独立成分分析<sup>[102,103]</sup>、因子分析<sup>[104]</sup>、非负矩阵分解<sup>[105,106]</sup>等. 而如果数据集包含非线性结构, 那么就需要引入非线性的降维方法, 包括核PCA<sup>[107]</sup>、自编码器<sup>[99]</sup>、t-SNE<sup>[108]</sup>等. 非线性方法通常具有更强大的

1) 注意这个高斯分布形式不是必须的, “高斯过程”指的是随机变量符合高斯分布, 而不是指此处的协方差矩阵符合高斯分布.

特征提取能力,但更容易过拟合,在可解释性、计算消耗等方面也有劣势.所以具体使用哪种方法取决于具体问题.

### 3 机器学习在相对论重离子碰撞中的应用

对撞机物理的数据量大、特征维度高,难以解析,这些特点构成了机器学习在其中广泛应用的基础.集成学习与深度学习是对撞机物理研究中使用最广泛的方法,它们在表达能力、可解释性等方面有很多不同,需要结合具体任务来决定使用哪一种更有效.

#### 3.1 集成学习与深度学习在碰撞参数、状态方程与流体演化中的应用

集成学习模型训练、部署都比较简单灵活,在很多任务中都作为比较基准.例如, Li等人<sup>[109]</sup>分别使用了集成学习LightGBM与深度学习CNN,逐事件地分析了碰撞参数,并对这两种方法进行比较.他们用二维的横动量-快度质子谱作为输入,使用UrQMD (Ultra Relativistic Quantum Molecular Dynamics)输运模型产生了50000个金-金碰撞事件作为训练数据,发现使用CNN和LightGBM预测的碰撞参数与实际碰撞参数相比平均差别分别为 $\Delta b = 0.16$  fm和 $\Delta b = 0.08$  fm, LightGBM方法比CNN的表现更好;结合可视化方法,我们还可以获得特征重要性分布图,这对于分析理解碰撞参数很有帮助,但CNN却很难做到.状态方程描述了压强随能量密度和净重子化学势的变化,对于理解高能核反应非常重要. Pang等人<sup>[110]</sup>考虑了对一级相变和连续过渡(Crossover)这两种状态方程的分类,使用的机器学习方法包括集成学习与深度学习.结合末态动量空间的粒子谱 $\rho(p_T, \phi)$ ,这个问题可以转化为图片识别的监督式学习任务.他们发现,在QGP冻结(Freeze Out)成强子后,相变的信息没有完全损失,用机器学习进行分类是可行的.为了验证机器学习模型的泛化能力,他们使用的训练数据来自初始状态为AMPT (A Multi-Phase Transport)模型的CLVisc (The CCNU-LBNL-viscous hydrodynamic)模型,而测试数据考虑了两种不同的混合模型:初始状态为IP-Glasma (The Impact Parameter dependent Glasma)模型的CLVisc模型,以及初始状态为MC-Glauber (The Monte Carlo Glauber)的IEBE-

VISHNU (Event-By-Event Viscous Israel Stewart Hydrodynamics and UrQMD)模型.可以发现,深度学习有更好的泛化能力,平均意义上取得了接近95%的准确率,而集成学习方法,如随机森林、梯度提升树等,准确率不超过80%.可以看到这个任务中,集成学习的泛化能力比深度学习更弱.

在相对论重离子碰撞的领域,我们接触到的原始数据属于所谓的“点云”数据,一个样本就是一次对撞事件,每个样本包括多个粒子,每个粒子包括四动量、质量、电荷等基本特征.在实际应用时,点云数据集通常被定义为粒子信息列表,如 $(E, p_x, p_y, p_z)$ 或者 $(E, p_T, \eta, \phi)$ .处理这种点云数据通常有两种思路,一种是先将它转化为更标准的数据格式,另一种是使用对应点云构建的网络结构,直接使用原始数据集.

为了尽可能利用成熟的CNN网络结构,可以将原始数据集转化为标准的图片数据集.这个思路的工作有很多,例如, Bass等人<sup>[111]</sup>将粒子信息处理为 $(p_T, p_z)$ 的二维分布作为输入,将碰撞参数作为输出,定义了一个回归问题,发现使用相对简单的网络结构就可以较为准确地完成对碰撞参数的预测.类似的应用还有Pang等人<sup>[112]</sup>的工作,他们使用了产生于相对论流体程序CLVisc的训练数据,并同时使用了两种不同的状态方程:连续过渡和一级相变.他们发现经过训练的CNN对QCD状态方程的分类结果非常具有鲁棒性,对于不同的初态、输运系数、冻结温度以及不同的流体或初态模型, CNN的预测都能达到接近95%的准确度.他们还发现,对于来自与训练集同一个混合模型的测试集,即CLVisc+AMPT,使用不到50%的训练数据就能达到99%的精度;对于来自与训练集不同混合模型的测试集,即IEBE-VISHNU+MC-Glauber和CLVisc+IP-Glasma,随着训练集增大, CNN表现也变得更好;如果使用完整的训练集, CNN可以取得95%的准确率.这些结果足以说明CNN强大的泛化能力.对该问题更一般的讨论详见文献<sup>[113]</sup>.

本团队对用CNN进行图像处理方面也进行了研究,并成功地将其应用到了流体演化模拟上.在相对论重离子碰撞中,为了模拟相对论流体系统的演化,通常要求解能动量守恒和流守恒方程.流体模型不仅很好地描述以及预测了相对论重离子碰撞中QGP相关的实验数据,而且也成为了本

文涉及的大部分机器学习应用的重要基础. 但是这个流体模拟的程序通常是非常耗时的. Huang等人<sup>[114]</sup>使用的stacked U-net (sU-net)网络结构实现了对流体演化的模拟. U-net是CNN的一种, 最初被用于生物医学上的图片分割<sup>[115]</sup>. Huang等人使用的sU-net由4个U-net块构成, 这些U-net块之间使用了残差连接. 在这个工作中, 数据集来自于VISH2+1 (Viscous Israel-Stewart Hydrodynamics in 2 + 1 Space-Time Dimensions), 初态用MC-Glauber, MC-KLN (Kharzeev-Levin-Nardi), AMPT和TRENTo (The Reduced Thickness Event-By-Event Nuclear Topology)等初态模型产生, 但训练集只使用了MC-Glauber, 这么做的目的是测试深度学习的泛化能力. 令人印象深刻的是, 即使是在不同初态的测试集上, 深度学习预测的末态分布也可以很好地与实际分布吻合, 并且相对于传统流体方程, 深度学习的计算时间大大缩短.

如果希望直接处理点云这样的原始数据, 需要使用更加特殊的网络结构, 如果需要进一步考虑局域关联, 网络结构通常会变得更加复杂. 但由于这个方法充分利用了原始数据, 未来可能会有更多的工作在这个方向上进行探索. 从这个思路出发, Steinheimer等人<sup>[116]</sup>分别使用CNN和点云网络(PCN)来辨认一级相变的相空间特征, 尝试了亚稳态与麦克斯韦两种状态方程的逐事件二分类. 该工作发现如果使用坐标空间的重子密度分布, 那么即使是最简单的网络都可以达到95%的准确率. 但是从坐标空间到动量空间的状态转换是非平庸的, 在动量空间, 亚稳态的特征几乎完全丢失. 该工作发现CNN的效果仅仅比随机猜测好一点, 而PCN的表现明显更加出色.

很多机器学习方法, 包括浅层神经网络以及传统机器学习方法都曾经被用来进行碰撞参数的预测<sup>[109,111,117–119]</sup>, 但都没有使用原始的点云数据. Kuttan等人<sup>[120]</sup>开始使用点云网络来预测碰撞参数. 传统的方法很难逐事件地分析碰撞参数, 并且只能对特定的中心度对应的碰撞参数分布有一个理论上的估计. 但使用点云网络模型, 可以对碰撞参数进行准确、快速的逐事件预测, 对于2–14 fm的碰撞参数, 点云网络模型的预测平均误差仅为–0.33–0.22 fm.

原始的点云网络的局限性在于难以捕捉粒子之间的局部关联, 但通常末态粒子之间往往存在着复杂的关联, 所以还需要考虑更加复杂的局部网络结构.

Huang等人<sup>[121]</sup>在点云网络的基础上加入了动态边卷积(Dynamical Edge Convolution)操作, 并将其用于辨认含有临界涨落的事件. 他们使用JAM模型产生了没有临界涨落的数据, 并借助CMC (Critical Monte-Carlo)模型加入临界涨落. 对于其中5% JAM粒子替换为关联临界粒子的测试集, 这个方法获得了82.1%的精度, 远超纯粹的点云网络. 该工作展示了深度学习强大的粒子特征提取能力, 为后人用数据驱动的方式探索临界涨落提供了启示.

在科学研究领域, 可解释性显得尤为重要, 但人们在这方面的探索还处于初步阶段. Pang等人<sup>[112]</sup>利用预测差异分析方法(Prediction Difference Analysis Method)分析了 $p_T-\phi$ 重要性分布图, 发现了分类EoS所涉及的重要区域. 在另一个工作中, Pang等人<sup>[122]</sup>通过另一种可解释方法: RAM (Regression Attention Mask)算法, 结合训练好的CNN模型, 找到了对核形变参数 $\beta_2$ 最敏感的参数分布区域. 这些分布又被称为特征重要性, 对于理解机器学习模型决策非常重要. 但正如上文所述, 目前的可解释性方法虽然可以应用于深度学习这样的黑盒子模型, 但同时其本身也是一个黑盒子, 故而其有效性还有待验证.

### 3.2 贝叶斯方法在提取QGP性质方面的应用

在相对论重离子碰撞理论模型中, 人们需要确定大量的模型参数, 这些参数会影响到每一个可观测量, 同时确定如此多的参数非常困难, 但贝叶斯方法的引入可以很好地解决这一问题. 此外, 由于相对论重离子碰撞过程涉及的物理量无法直接测量, 需要通过模型模拟与实验数据比较的方法来推断, 而这与贝叶斯方法的思路恰好一致. 通过贝叶斯方法结合流体模型, 可以对模型参数做一个有效的约束.

贝叶斯方法可以用来推定QGP状态方程的参数. Pratt等人<sup>[123]</sup>在将状态方程参数化的基础上, 利用贝叶斯方法, 通过假定高斯分布(详见2.1.3), 利用LHC和RHIC的数据, 确定了包括状态方程两个参数及模型的其他参数在内的14个参数的后验概率, 在误差范围内对状态方程施加了限制. 从结果可以看出, 施加了限制后的状态方程及观测量对于格点QCD的计算结果或实验结果的偏移要明显优于未施加限制之前.

贝叶斯方法可以推断相对论重离子碰撞混合模型包括输运系数在内的各个参数. 从2015年开始, Bernhard等人<sup>[124-126]</sup>在系列文章中, 借助TRENTO等模型, 利用马尔可夫链蒙特卡罗采样, 对一组参数同时进行了半定量或定量的限制, 给出了其分布, 同时定量给出了比剪切黏滞系数(Specific Shear Viscosity)  $\eta/s$ 和比体黏滞系数(Specific Bulk Viscosity)  $\zeta/s$ 的温度依赖. 进一步地, 系列文章将利用贝叶斯推断所得的参数预测的一些统计量对实验的平均偏离控制在5.1%的水平以内, 进一步说明了贝叶斯方法的可靠性. 此外, 系列文章还实证了参数的模型依赖, 并说明了带电荷粒子和可识别粒子对推断结果的影响. Everett等人<sup>[127]</sup>采用新的综合性的相对论重离子碰撞模型框架, 在之前若干应用贝叶斯方法的基础上, 更系统地将贝叶斯推断应用在相对论重离子碰撞中. 该工作强调了先验分布对贝叶斯推断结果的影响, 揭示了不同模型参数对推断结果的模型依赖有大有小, 而其中 $\eta/s$ 及 $\zeta/s$ 的推断结果对不同模型较为敏感. 此外, 这个工作第一次在和数据比较前进行了利用贝叶斯推断重新获得已知的模型参数并与已知的模型参数比较的封闭检验(Closure Tests).

该工作也存在一些有待完善之处, 例如推断结果依赖于模型的选择, 一些参量如体弛豫时间(Bulk Relaxation Time)的不确定度过大, 未考虑状态方程的不确定性等. 在此基础上, Everett等人<sup>[128]</sup>还进一步考虑了实验与模型的不确定性, 引入了模型平均, 获得了更可靠的参数限制. 除了输运系数等模型参数之外, 也有利用贝叶斯方法推断其他参数的工作. Xu等人<sup>[129]</sup>基于郎之万模型, 将贝叶斯方法应用到提取重夸克的扩散系数, 获得的后验分布与带不确定度的格点QCD及其他模型的结果相合. He等人<sup>[120]</sup>利用贝叶斯方法, 借助实验数据, 提取出了不同系统中介质影响的喷注能量损失分布, 发现能量损失分布较宽, 同时平均能量损失随真空喷注能量的增加略快于对数形式, 且结果与线性玻尔兹曼输运模型模拟相合.

### 3.3 非监督式学习PCA在集体流研究中的应用

PCA是非常有效的数据分析的方法, 在相对论重离子碰撞领域中有较多的应用.

在相对论重离子碰撞中, 末态的各阶流是研究其

性质的重要统计量, 而PCA的应用给人们提供了寻找各个流成分及初态响应的主导特征, 并在此基础上成为窥探背后物理图像的强有力的工具. Bhalerao等人<sup>[130]</sup>研究了椭圆流、三角流等的主成分 $v_n^{(\alpha)}$ , 包括其作为横动量、赝快度的函数的主成分; 并在此基础上讨论了利用近似展开描述因子化破缺(Factorization Breaking)的泊松关联系数(Pearson Correlation Coefficient)  $r$ 的条件, 提供了物理上直观的结果. Mazeliauskas等人<sup>[131,132]</sup>在用PCA分解流信号的基础上, 通过PCA研究了二粒子关联的协方差矩阵, 更详细地研究了 $v_n$ 谱, 并发现二粒子关联主要贡献在于前两个主成分. 鉴于不同主成分代表了不同的对初始条件统计无关的响应机制, 总的来说, 领头的成分全局地表示人们引入 $v_n$ 的动机, 次领头的成分影响因子化破缺. 此外, 这个工作还探讨了中心度和 $\eta/s$ 对主成分的影响. 和传统的方法相比, PCA可以方便地考虑所有二粒子角向关联的信息以及逐事件涨落(Event-By-Event Fluctuation). 此外, Bożek等人<sup>[133]</sup>还利用PCA研究了不同微分流之间的非线性耦合. 该工作考察了关于横动量的微分流之间的多种关联, 对于不同阶的微分流的关联, 发现了微分流关联矩阵的分块结构. 此工作只研究了关于横动量的微分流 $v_n(p_T)$ , 但相关方法也可应用于研究对赝快度微分的流.

本团队也在相关研究中应用了非监督式学习. Liu等人<sup>[134]</sup>使用PCA研究了大量VISH2+1流体模拟碰撞事件得到的单粒子分布, 发现PCA可以独自重新发现各阶流. 同时, PCA发现的流与传统的傅里叶分解产生的流有较好的对应关系, 它们相近但不完全相同. 此外, 对于对称累积量(Symmetric Cumulants)的研究发现相比传统方法, 通过PCA获得的彼此正交的流可以减少模式间的耦合效应. Liu等人<sup>[135]</sup>还进一步讨论了PCA方法得到的各阶模式的稳定性. 此前PCA在相对论重离子碰撞中的应用大多都是在傅里叶分解的基础上进行的, Liu等人使用PCA直接处理单粒子分布, 减少了人类的偏见(Bias).

## 4 总结

本文总结了机器学习在相对论重离子碰撞领域的应用. 这些应用利用的数据来自各种物理耦合模型的数值模拟以及对撞机实验数据. 应用的场景包括碰撞

参数、状态方程、喷注、流体模型参数等. 而使用的机器学习主要集中于监督式学习, 其中回归和分类是最常见的学习任务.

经典的集成学习、贝叶斯方法、PCA等模型以及一些深度学习模型包括DNN, CNN等已经在高能物理领域有了较多应用. 但从对这些相关工作的总结、分析中, 可以发现, 绝大多数的应用都停留在较为早期的原型模型中, 这些模型普适性很好, 但通常与实际的物理场景需求并非完全一致, 所以数据处理过程中也不可避免地含有人为的偏见, 但往往端到端才能最大程度上利用深度学习强大的特征提取能力. 这不仅需要物理学家针对性地定义问题, 也需要充分利用机器学习前沿的研究成果. 随着深度学习的发展, 各种新颖的网络结构层出不穷, 这些模型通常具有更强的表达能力或者在某些场景下表现更加优越. 虽然它们在相对论重离子碰撞中应用还很少, 但可以给我们一定的启发, 例如由于对撞机物理的特殊性, 需要结合点云数据

的特点以及粒子之间关联进行更多网络结构的创新. 在这个大数据的时代, 这些模型已经开始逐渐取代传统方法.

随着机器学习在相对论重离子碰撞领域中的应用快速增多, 也需要考虑这些应用可能面临的问题与争议. 首先, 作为一个交叉学科, 相关研究与计算机科学家之间的合作还比较少, 未能充分利用已经成熟的问题解决方案, 如何促进双方的高效合作是未来需要考虑的问题. 其次, 机器学习模型是完全数据驱动的黑盒子, 虽然它做到了传统方法做不到或者做得不够好的事情, 但这很难促进对物理本质的理解. 这样的模型预测要让物理学家广泛接受还有一定难度. 这个问题一方面需要物理学家们关注可解释机器学习的最新进展, 另一方面, 正如机器学习在工业界的多个领域取代传统程序一样, 随着机器学习在物理中的应用变得难以替代, 物理学家们也会逐渐用新的视角审视这些应用的意义.

## 参考文献

- Adams J, Aggarwal M M, Ahammed Z. Experimental and theoretical challenges in the search for the quark-gluon plasma: The STAR Collaboration's critical assessment of the evidence from RHIC collisions. *Nucl Phys A*, 2005, 757: 102–183
- Adcox K, Adler S S, Afanasiev S. Formation of dense partonic matter in relativistic nucleus-nucleus collisions at RHIC: Experimental evaluation by the PHENIX Collaboration. *Nucl Phys A*, 2005, 757: 184–283
- Song H, Bass S A, Heinz U. 200 A GeV Au + Au collisions serve a nearly perfect quark-gluon liquid. *Phys Rev Lett*, 2011, 106: 192301
- Schenke B, Jeon S, Gale C. Elliptic and triangular flow in event-by-event  $D=3+1$  viscous hydrodynamics. *Phys Rev Lett*, 2011, 106: 042301
- Müller B, Nagle J L. Results from the relativistic heavy ion collider. *Annu Rev Nucl Part Sci*, 2006, 56: 93–135
- Heinz U, Snellings R. Collective flow and viscosity in relativistic heavy-ion collisions. *Annu Rev Nucl Part Sci*, 2013, 63: 123–151
- Gale C, Jeon S, Schenke B. Hydrodynamic modeling of heavy-ion collisions. *Int J Mod Phys A*, 2013, 28: 1340011
- Qin G Y. Theory of jet quenching in ultra-relativistic nuclear collisions. *Nucl Phys A*, 2014, 931: 165–175
- Qin G Y, Wang X N. Jet quenching in high-energy heavy-ion collisions. *Int J Mod Phys E*, 2015, 24: 1530014
- Karsch F, Bazavov A, Ding H T. Conserved charge fluctuations from lattice QCD and the beam energy scan. *Nucl Phys A*, 2016, 956: 352–355
- Xu H, Li Z, Song H. High-order flow harmonics of identified hadrons in 2.76 A TeV Pb + Pb collisions. *Phys Rev C*, 2016, 93: 064905
- Zhu X, Zhou Y, Xu H. Correlations of flow harmonics in 2.76 A TeV Pb-Pb collisions. *Phys Rev C*, 2017, 95: 044902
- Chang N B, Cao S, Qin G Y. Probing medium-induced jet splitting and energy loss in heavy-ion collisions. *Phys Lett B*, 2018, 781: 423–432
- Song H, Zhou Y, Gajdošová K. Collective flow and hydrodynamics in large and small systems at the LHC. *Nucl Sci Tech*, 2017, 28: 99
- Zhao W, Xu H, Song H. Collective flow in 2.76 and 5.02 A TeV Pb + Pb collisions. *Eur Phys J C*, 2017, 77: 645
- Zhu C-L, Zhao Y-Y, Pan X. High cumulants of conserved charges and their statistical uncertainties. *Chin Phys C*, 2017, 41: 104103
- Luo X, Xu N. Search for the QCD critical point with fluctuations of conserved quantities in relativistic heavy-ion collisions at RHIC: An overview. *Nucl Sci Tech*, 2017, 28: 112
- Tachibana Y, Chang N B, Qin G Y. Full jet in quark-gluon plasma with hydrodynamic medium response. *Phys Rev C*, 2017, 95: 044909
- Fan W, Luo X, Zong H. Probing the QCD phase structure with higher order baryon number susceptibilities within the NJL model. *Chin Phys C*, 2019, 43: 033103
- He Y, Pang L G, Wang X N. Bayesian extraction of jet energy loss distributions in heavy-ion collisions. *Phys Rev Lett*, 2019, 122: 252302

- 21 Zhou Y, Zhao W, Murase K. One fluid might not rule them all. *Nucl Phys A*, 2021, 1005: 121908
- 22 Qin S X, Chang L, Chen H. Phase diagram and critical end point for strongly interacting quarks. *Phys Rev Lett*, 2011, 106: 172301
- 23 Gao F, Chen J, Liu Y X. Phase diagram and thermal properties of strong-interaction matter. *Phys Rev D*, 2016, 93: 094019
- 24 Isserstedt P, Buballa M, Fischer C S. Baryon number fluctuations in the QCD phase diagram from Dyson-Schwinger equations. *Phys Rev D*, 2019, 100: 074011
- 25 The STAR Collaboration. Measurement of the mass difference and the binding energy of the hypertriton and antihypertriton, doi: 10.1038/s41567-020-0799-7
- 26 Gao F, Pawłowski J M. QCD phase structure from functional methods. *Phys Rev D*, 2020, 102: 034027
- 27 Ke W, Wang X N. QGP modification to single inclusive jets in a calibrated transport model. *J. High Energ. Phys*, 2021, 2021: 41
- 28 Cao S, Wang X N. Jet quenching and medium response in high-energy heavy-ion collisions: A review. *Rep Prog Phys*, 2021, 84: 024301
- 29 Zhao W, Ke W, Chen W, et al. From hydro to jet quenching, coalescence and hadron cascade: A coupled approach to solving the  $R_{AA} \otimes v_2$  puzzle, *Phys Rev Lett*, 2022, 128: 022302
- 30 Fu W, Luo X, Pawłowski J M. Hyper-order baryon number fluctuations at finite temperature and density. *Phys Rev D*, 2021, 104: 094047
- 31 Ding H T, Li S T, Shi Q. Fluctuations and correlations of net baryon number, electric charge and strangeness in a background magnetic field. *Eur. Phys J. A*, 2021, 57: 202
- 32 Silver D, Huang A, Maddison C J. Mastering the game of Go with deep neural networks and tree search. *Nature*, 2016, 529: 484–489
- 33 Silver D, Schrittwieser J, Simonyan K. Mastering the game of Go without human knowledge. *Nature*, 2017, 550: 354–359
- 34 Sutton R S, Mcallester D A, Singh S P, et al. Policy gradient methods for reinforcement learning with function approximation. In: *Advances in Neural Information Processing Systems*. Cambridge: MIT Press, 2000. 1057–1063
- 35 Sutton R S, Barto A G. *Reinforcement Learning: An Introduction*. Cambridge: MIT Press, 2018
- 36 Mnih V, Kavukcuoglu K, Silver D. Human-level control through deep reinforcement learning. *Nature*, 2015, 518: 529–533
- 37 Lillicrap T P, Hunt J J, Pritzel A, et al. Continuous control with deep reinforcement learning. arXiv: 1509.02971
- 38 Breiman L. Bagging predictors. *Mach Learn*, 1996, 24: 123–140
- 39 Breiman L. Random forests. *Mach Learn*, 2001, 45: 5–32
- 40 Liaw A, Wiener M. Classification and regression by randomForest. *R News*, 2002, 2: 18–22
- 41 Schapire R E. The boosting approach to machine learning: An overview. In: Denison D D, Hansen M H, Holmes C C, et al., eds. *Nonlinear Estimation and Classification. Lecture Notes in Statistics*, vol 171. New York: Springer, 2003. 149–171
- 42 Freund Y, Schapire R E. Experiments with a new boosting algorithm. In: *Machine Learning: Proceedings of the Thirteenth International Conference 1996*. 148–156
- 43 Drucker H, Cortes C. Boosting decision trees. In: *Advances in Neural Information Processing Systems*. Denver, 1996. 479–485
- 44 Friedman J H. Greedy function approximation: A gradient boosting machine. *Ann Statist*, 2001, 29: 1189–1232
- 45 Elith J, Leathwick J R, Hastie T. A working guide to boosted regression trees. *J Anim Ecol*, 2008, 77: 802–813
- 46 Chen T, Guestrin C. XGBoost: A Scalable Tree Boosting System. In: *KDD '16: Proceedings of the 22nd ACM SIGKDD International Conference on Knowledge Discovery and Data*. New York: ACM, 2016
- 47 Baldi P, Sadowski P, Whiteson D. Searching for exotic particles in high-energy physics with deep learning. *Nat Commun*, 2014, 5: 4308
- 48 ATLAS Collaboration. Measurement of Higgs boson production in association with a  $t\bar{t}$  pair in the diphoton decay channel using 139 fb<sup>-1</sup> of LHC data collected at  $\sqrt{s} = 13$  TeV by the ATLAS experiment. In: *54th Rencontres de Moriond on Electroweak Interactions and Unified Theories*. La Thuile, 2019
- 49 Belayneh D, Carminati F, Farbin A. Calorimetry with deep learning: Particle simulation and reconstruction for collider physics. *Eur Phys J C*, 2020, 80: 688
- 50 Ke G, Meng Q, Finley T, et al. Lightgbm: A highly efficient gradient boosting decision tree. *Adv Neural Inf Proc Syst*, 2017, 30: 3146–3154
- 51 Al Daoud E. Comparison between XGBoost, LightGBM and CatBoost using a home credit dataset. *Int J Comput Inf Eng*, 2019, 13: 610
- 52 Bengio Y, Delalleau O. On the expressive power of deep architectures. In: *International Conference on Algorithmic Learning Theory*. Berlin: Springer, 2011. 18–36
- 53 Lu Z, Pu H, Wang F, et al. The expressive power of neural networks: A view from the width. In: *Proceedings of the 31st International Conference on Neural Information Processing Systems*. 2017. 6232–6240
- 54 Janocha K, Czarnecki W. On loss functions for deep neural networks in classification. arXiv: 1702.05659
- 55 Liang S, Srikant R. Why deep neural networks for function approximation? arXiv: 1610.04161
- 56 Mhaskar H, Liao Q, Poggio T. When and why are deep networks better than shallow ones? In: *Proceedings of the AAAI Conference on Artificial*

- Intelligence. Palo Alto: AAAI Press, 2017
- 57 Poggio T, Mhaskar H, Rosasco L. Why and when can deep-but not shallow-networks avoid the curse of dimensionality: A review. [Int J Autom Comput](#), 2017, 14: 503–519
  - 58 Krizhevsky A, Sutskever I, Hinton G E. ImageNet classification with deep convolutional neural networks. In: Advances in Neural Information Processing Systems 25 (NIPS 2012). New York: ACM, 2012. 1097–1105
  - 59 Teuwen J, Moriakov N. Chapter 20-Convolutional neural networks. In: Zhou S K, Rueckert D, Fichtinger G. The Elsevier and MICCAI Society Book Series. Handbook of Medical Image Computing and Computer Assisted Intervention. New York: Academic Press, 2020. 481–501
  - 60 Gumhold S, Wang X, Macleod R S. Feature extraction from point clouds. In: Proceedings of the 10th International Meshing Roundtable. Newport Beach, 2001. 293–305
  - 61 Wang Q, Kim M K. Applications of 3D point cloud data in the construction industry: A fifteen-year review from 2004 to 2018. [Adv Eng Inf](#), 2019, 39: 306–319
  - 62 Bello S A, Yu S, Wang C. Review: Deep learning on 3D point clouds. [Remote Sens](#), 2020, 12: 1729
  - 63 Qi C R, Su H, Mo K, et al. Pointnet: Deep learning on point sets for 3D classification and segmentation. In: Proceedings of the IEEE conference on computer vision and pattern recognition. New York: IEEE, 2017. 652–660
  - 64 Qi C R, Yi L, Su H, et al. Pointnet++: Deep hierarchical feature learning on point sets in a metric space. arXiv: [1706.02413](#)
  - 65 Wang Y, Sun Y, Liu Z. Dynamic graph CNN for learning on point clouds. [ACM Trans Graph](#), 2019, 38: 1–12
  - 66 Zhang Z, Hua B-S, Yeung S-K. Shellnet: Efficient point cloud convolutional neural networks using concentric shells statistics. In: Proceedings of the IEEE/CVF International Conference on Computer Vision. New York: IEEE, 2019. 1607–1616
  - 67 Simonyan K, Vedaldi A, Zisserman A. Deep inside convolutional networks: Visualising image classification models and saliency maps. In: Workshop at International Conference on Learning Representations. Banff, 2014
  - 68 Bach S, Binder A, Montavon G. On pixel-wise explanations for non-linear classifier decisions by layer-wise relevance propagation. [PLoS ONE](#), 2015, 10: e0130140
  - 69 Zhou B, Khosla A, Lapedriza A, et al. Learning deep features for discriminative localization. In: Proceedings of the IEEE Conference on Computer Vision and Pattern Recognition. New York: IEEE, 2016. 2921–2929
  - 70 Selvaraju R R, Cogswell M, Das A, et al. Grad-cam: Visual explanations from deep networks via gradient-based localization. In: Proceedings of the IEEE international conference on computer vision. New York: IEEE, 2017. 618–626
  - 71 Shrikumar A, Greenside P, Kundaje A. Learning important features through propagating activation differences. In: Proceedings of the International Conference on Machine Learning. Sydney, 2017. 3145–3153
  - 72 Zintgraf L M, Cohen T S, Adel T, et al. Visualizing deep neural network decisions: Prediction difference analysis. arXiv: [1702.04595](#)
  - 73 Sundararajan M, Taly A, Yan Q. Axiomatic attribution for deep networks. In: Proceedings of the International Conference on Machine Learning. Sydney, 2017. 3319–3328
  - 74 Lipton Z C. The mythos of model interpretability. [Queue](#), 2018, 16: 31–57
  - 75 Adadi A, Berrada M. Peeking inside the black-box: A survey on explainable artificial intelligence (XAI). [IEEE Access](#), 2018, 6: 52138–52160
  - 76 Montavon G. Gradient-based vs. propagation-based explanations: An axiomatic comparison. Explainable AI: Interpreting, Explaining and Visualizing Deep Learning. Heidelberg: Springer, 2019. 253–265
  - 77 Du M, Liu N, Hu X. Techniques for interpretable machine learning. [Commun ACM](#), 2019, 63: 68–77
  - 78 Zhang Q, Zhu S. Visual interpretability for deep learning: A survey. [Front Inf Technol Electron Eng](#), 2018, 19: 27–39
  - 79 Li X, Xiong H, Li X, et al. Interpretable deep learning: Interpretation, interpretability, trustworthiness, and beyond. arXiv: [2103.10689](#)
  - 80 Adebayo J, Gilmer J, Muelly M, et al. Sanity checks for saliency maps. arXiv: 1810.03292
  - 81 Ghorbani A, Abid A, Zou J. Interpretation of neural networks is fragile. In: Proceedings of the AAAI Conference on Artificial Intelligence. Vol 33. New York, 2019. 3681–3688
  - 82 Heo J, Joo S, Moon T. Fooling neural network interpretations via adversarial model manipulation. Adv Neural Information Processing Systems, 2019, 32: 2925–2936. arXiv: [1902.02041](#)
  - 83 Kindermans P-J, Hooker S, Adebayo J, et al. The (un) reliability of saliency methods. Explainable AI: Interpreting, Explaining and Visualizing Deep Learning. Heidelberg: Springer, 2019. 267–280
  - 84 Dombrowski A-K, Alber M, Anders C J, et al. Explanations can be manipulated and geometry is to blame. arXiv: [1906.07983](#)
  - 85 Goodfellow I J, Shlens J, Szegedy C. Explaining and harnessing adversarial examples. arXiv: [1412.6572](#)
  - 86 Papernot N, McDaniel P, Jha S, et al. The limitations of deep learning in adversarial settings. In: 2016 IEEE European Symposium on Security And Privacy (EuroS&P). Saarbrücken, 2016. 372–387

- 87 Moosavi-Dezfooli S-M, Fawzi A, Frossard P. Deepfool: A simple and accurate method to fool deep neural networks. In: Proceedings of the IEEE Conference on Computer Vision and Pattern Recognition. New York: IEEE, 2016. 2574–2582
- 88 Hooker S, Erhan D, Kindermans P-J, et al. A benchmark for interpretability methods in deep neural networks. *Adv Neural Inf Proc Syst*, 2019, 32: 9737–9748. arXiv: [1806.10758](https://arxiv.org/abs/1806.10758)
- 89 Gelman A, Carlin J B, Stern H S, et al. Bayesian Data Analysis. Boca Raton: Chapman and Hall/CRC, 1995
- 90 Berger J O. Statistical Decision Theory and Bayesian analysis. Heidelberg: Springer Science & Business Media, 2013
- 91 Gelfand A E, Smith A F M. Sampling-based approaches to calculating marginal densities. *J Am Statist Assoc*, 1990, 85: 398–409
- 92 Williams C K, Rasmussen C E. Gaussian processes for regression. In: Touretzky D S, Mozer M C, Hasselmo M E, eds. Advances in Neural Information Processing System 8. Cambridge: MIT Press, 1996
- 93 Williams C K I, Barber D. Bayesian classification with Gaussian processes. *IEEE Trans Pattern Anal Machine Intell*, 1998, 20: 1342–1351
- 94 Rasmussen C E. Gaussian processes in machine learning. In: Summer School on Machine Learning. 2003. 63–71
- 95 Hartigan J A, Wong M A. Algorithm AS 136: A K-means clustering algorithm. *Appl Stat*, 1979, 28: 100
- 96 Pearson K. LIII. On lines and planes of closest fit to systems of points in space. *London Edinburgh Dublin Philos Mag J Sci*, 1901, 2: 559–572
- 97 Wold S, Esbensen K, Geladi P. Principal component analysis. *Chemometrics Intelligent Laboratory Syst*, 1987, 2: 37–52
- 98 Golub G H, Reinsch C. Singular value decomposition and least squares solutions. In: Linear Algebra. Heidelberg: Springer, 1971. 134–151
- 99 Kramer M A. Nonlinear principal component analysis using autoassociative neural networks. *AIChE J*, 1991, 37: 233–243
- 100 Koller D, Friedman N. Adaptive computation and machine learning. In: Probabilistic Graphical Models: Principles and Techniques. Cambridge: MIT Press, 2009
- 101 Jolliffe I T, Cadima J. Principal component analysis: A review and recent developments. *Phil Trans R Soc A*, 2016, 374: 20150202
- 102 Comon P. Independent component analysis, a new concept? *Signal Proc*, 1994, 36: 287–314
- 103 Oja H, Nordhausen K. Independent component analysis. In: Encyclopedia of Environmetrics. Chichester: Wiley, 2013
- 104 Harman H H. Modern Factor Analysis. Chicago: University of Chicago Press, 1976
- 105 Lee D D, Seung H S. Learning the parts of objects by non-negative matrix factorization. *Nature*, 1999, 401: 788–791
- 106 Fu X, Huang K, Sidiropoulos N D. Nonnegative matrix factorization for signal and data analytics: Identifiability, algorithms, and applications. *IEEE Signal Process Mag*, 2019, 36: 59–80
- 107 Schölkopf B, Smola A, Müller K-R. Kernel principal component analysis. In: International Conference on Artificial Neural Networks. 1997. 583–588
- 108 Van der Maaten L, Hinton G. Visualizing data using t-SNE. *J Mach Learning Res*, 2008, 9: 2579–2605
- 109 Li F, Wang Y, Lü H. Application of artificial intelligence in the determination of impact parameter in heavy-ion collisions at intermediate energies. *J Phys G-Nucl Part Phys*, 2020, 47: 115104
- 110 Pang L G, Zhou K, Su N. Classify QCD phase transition with deep learning. *Nucl Phys A*, 2019, 982: 867–870
- 111 Bass S A, Bischoff A, Maruhn J A. Neural networks for impact parameter determination. *Phys Rev C*, 1996, 53: 2358–2363
- 112 Pang L G, Zhou K, Su N. An equation-of-state-meter of quantum chromodynamics transition from deep learning. *Nat Commun*, 2018, 9: 210
- 113 Du Y L, Zhou K, Steinheimer J. Identifying the nature of the QCD transition in relativistic collision of heavy nuclei with deep learning. *Eur Phys J C*, 2020, 80: 516
- 114 Huang H, Xiao B, Liu Z. Applications of deep learning to relativistic hydrodynamics. *Phys Rev Res*, 2021, 3: 023256
- 115 Ronneberger O, Fischer P, Brox T. U-net: Convolutional networks for biomedical image segmentation. In: International Conference on Medical Image Computing and Computer-Assisted Intervention. 2015. 234–241
- 116 Steinheimer J, Pang L G, Zhou K. A machine learning study to identify spinodal clumping in high energy nuclear collisions. *J High Energy Phys*, 2019, 2019(12): 122
- 117 David C, Freslier M, Aichelin J. Impact parameter determination for heavy-ion collisions by use of a neural network. *Phys Rev C*, 1995, 51: 1453–1459
- 118 Haddad F, Hagel K, Li J. Impact parameter determination in experimental analysis using a neural network. *Phys Rev C*, 1997, 55: 1371–1375
- 119 Altsybeev I, Kovalenko V. Classifiers for centrality determination in proton-nucleus and nucleus-nucleus collisions. *EPJ Web Conf*, 2017, 137: 11001
- 120 Kuttan M O, Steinheimer J, Zhou K. Deep learning based impact parameter determination for the CBM experiment. *Particles*, 2021, 4: 47–52
- 121 Huang Y, Pang L G, Luo X. Probing criticality with deep learning in relativistic heavy-ion collisions. *Phys Lett B*, 2022, 827: 137001
- 122 Pang L-G, Zhou K, Wang X-N. Interpretable deep learning for nuclear deformation in heavy ion collisions. arXiv: 1906.06429
- 123 Pratt S, Sangaline E, Sorensen P. Constraining the equation of state of superhadronic matter from heavy-ion collisions. *Phys Rev Lett*, 2015,

- 114: 202301
- 124 Bernhard J E, Marcy P W, Coleman-Smith C E. Quantifying properties of hot and dense QCD matter through systematic model-to-data comparison. *Phys Rev C*, 2015, 91: 054910
- 125 Bernhard J E, Moreland J S, Bass S A. Applying Bayesian parameter estimation to relativistic heavy-ion collisions: Simultaneous characterization of the initial state and quark-gluon plasma medium. *Phys Rev C*, 2016, 94: 024907
- 126 Bernhard J E, Moreland J S, Bass S A. Bayesian estimation of the specific shear and bulk viscosity of quark-gluon plasma. *Nat Phys*, 2019, 15: 1113–1117
- 127 Everett D, Ke W, Paquet J F. Multisystem Bayesian constraints on the transport coefficients of QCD matter. *Phys Rev C*, 2021, 103: 054904
- 128 Everett D, Ke W, Paquet J F. Phenomenological constraints on the transport properties of QCD matter with data-driven model averaging. *Phys Rev Lett*, 2021, 126: 242301
- 129 Xu Y, Bernhard J E, Bass S A. Data-driven analysis for the temperature and momentum dependence of the heavy-quark diffusion coefficient in relativistic heavy-ion collisions. *Phys Rev C*, 2018, 97: 014907
- 130 Bhalerao R S, Ollitrault J Y, Pal S. Principal component analysis of event-by-event fluctuations. *Phys Rev Lett*, 2015, 114: 152301
- 131 Mazeliauskas A, Teaney D. Subleading harmonic flows in hydrodynamic simulations of heavy ion collisions. *Phys Rev C*, 2015, 91: 044902
- 132 Mazeliauskas A, Teaney D. Fluctuations of harmonic and radial flow in heavy ion collisions with principal components. *Phys Rev C*, 2016, 93: 024913
- 133 Bożek P. Principal component analysis of the nonlinear coupling of harmonic modes in heavy-ion collisions. *Phys Rev C*, 2018, 97: 034905
- 134 Liu Z, Zhao W, Song H. Principal component analysis of collective flow in relativistic heavy-ion collisions. *Eur Phys J C*, 2019, 79: 870
- 135 Liu Z, Behera A, Song H. Robustness of principal component analysis of harmonic flow in heavy ion collisions. *Phys Rev C*, 2020, 102: 024911

## Applications of machine learning in relativistic heavy ion physics

ZHOU Meng, LUO YiQun & SONG HuiChao\*

*State Key Laboratory of Nuclear Physics and Technology, Department of Physics, Peking University, Beijing 100871, China*

Recently, with rapid hardware and algorithms development, machine learning has been widely used as a significant data analysis method. This article reviews the application of different machine learning algorithms in heavy ion collisions, including impact parameter prediction, nuclear deformation parameter prediction, phase transitions classification, fluid evolution simulation, etc. The machine learning algorithms comprise classic machine learning algorithms, such as ensemble learning and principal component analysis, and deep learning algorithms, such as convolutional neural networks and point cloud networks. Because of the excellent performance and efficiency of machine learning, these applications will receive much attention in our field.

**machine learning, deep learning, heavy ion collision physics**

**PACS:** 21.65.Qr, 25.75.-q, 25.75.Ag, 25.75.Ld, 25.75.Nq

**doi:** [10.1360/SSPMA-2021-0321](https://doi.org/10.1360/SSPMA-2021-0321)