PROCEEDINGS OF SCIENCE

用于研究高维参数空间的聚类与可视化工具：B介子反常示例

Ursula Laa[a] **and German Valencia**[b,*]

[a]维也纳自然资源与生命科学大学，景观、空间与基础设施科学系，统计研究所，*Peter-Jordan-Straße 82/I*，*1190* 维也纳，奥地利[b]物理与天文学学院，莫纳什大学，*Wellington Road*，*Clayton*，维多利亚州 *3800*，澳大利亚

电子邮件：ursula.laa@boku.ac.at，german.valencia@monash.edu

我们以所谓的中性B介子反常为例，介绍聚类和可视化工具的应用。聚类可以将参数空间划分为若干区域，并根据给定的测量值区分这些区域。它能直观展示问题中所有可观测量对参数的集体依赖关系。这些方法突显了不同可观测量的相对重要性及相关性的影响，并有助于理解全局拟合中的张力。我们介绍的工具还可以通过线性投影和切片，对高维可观测量空间和参数空间进行可视化检查。

*2022*年科孚夏季研究所“基本粒子物理与引力学校及研讨会”，*2022*年*8*月*28*日—*10*月*1*日，希腊科孚

*演讲者

© 版权所有归作者所有，依据《知识共享署名-非商业性使用-禁止演绎 4.0 国际许可协议》（CC BY-NC-ND 4.0）的条款。

arXiv:2304.00151v1 [physics.data-an] 31 Mar 2023

1. 引言

物理学中的许多问题包含大量参数和/或大量难以可视化的预测值。本文探讨巡游如何帮助可视化这类问题。多参数问题还涉及另一个问题：如何将不同的参数区域映射到不同的预测区域。为了解决这一问题，我们提出一种基于在可观测量空间中对预测值进行聚类的参数空间划分方法。具体而言，我们讨论这些工具在所谓的“中性B介子反常”问题中的应用，并展示它们能揭示哪些常规全局拟合之外的信息 [1]。

我们所使用的巡游方法所得出的结果通常以电影或动画的形式呈现，而这些内容在 PDF 文件中无法显示。这里提到的一些动画可以通过运行 Shiny应用中的示例生成，网址为 https://github.com/uschiLaa/pandemonium。至于其余动画，您可以直接联系其中一位作者。展示这里所引用动画的短片也可以从本文的 arXiv 版本中获取。

如我们所知，在 B介子衰变模式中存在多个可观测量（数百个分箱的分支比和衰变分布），它们源自夸克层次的跃迁 $b \to s l^+ l^-$，其中轻子为μ子或电子。由于这些可观测量持续偏离标准模型（SM），它们一直受到相当多的关注，尽管最近两个可观测量（R_K 和 R_{K^*}）之间的差异似乎已经消失 [2]。人们通过对数百个可观测量进行全局拟合，使用从两个到六个不等的参数，对这一系统进行了研究。从这类分析中可以得到的结果包括

- 寻找最佳拟合（BF）参数
- 测量拟合优度，并将其与标准模型进行比较
- 进行模型选择，以找出最能描述数据的参数子集
- 确定拟合参数的置信区间

后者已经对应于基于到一个参考点（可观测量的实验值）的单一距离对参数空间进行划分，如图 1左图所示。这些结果对于物理学研究非常有用，可用于确定给定模型是否适合描述数据。即使对于这些已有研究，对高维置信水平区域进行可视化，也能提供超出考察二维投影所能观察到的信息。例如，我们在图 1右图中展示了引导式巡游的结果，该巡游用于寻找能够呈现标准模型点与六参数拟合所得数据最佳拟合之间最大分离的投影，相关拟合见 2019 [3]。该视图表明，与标准模型的表观偏差沿着参数空间中的 C_9 方向发生。动画 1 则能带来更直观的理解，其中展示了最佳拟合附近六维区域的全巡游，并标出了标准模型、六维最佳拟合点，以及 [3]中所述的若干单参数和双参数拟合。

2. 超越全局拟合

通过聚类可以从数据集中获得的一些新见解包括

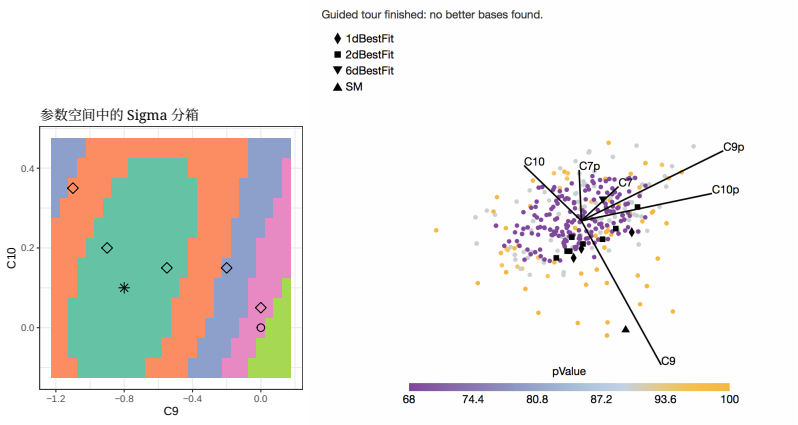


图 1： 左图：利用全局拟合的置信水平区域对参数空间进行划分。右图：通过引导式巡游得到的全局拟合六维参数空间最优投影，显示最佳拟合结果主要沿 C_9 方向偏离标准模型。

- 将参数空间划分为簇时，会使用点与点之间的所有距离。它不依赖于某个特定的参考点，例如可能尚不存在的实验测量（或者可能发生变化的实验测量，正如最近 R_K的情况一样）。不同的聚类参数适合突出问题的不同方面。

- 空间中的簇数量，即不同群组的数量，反映了特定数据集的分辨能力。

- 聚类结果有助于从部分可观测量中分离出趋势和效应。

In 此外，高维可视化工具可以提供新的视角。例如， ey

- 直观展示可观测量对参数的集体依赖关系。
- 以图形方式展示超过三维的可观测量空间。
- 突出显示不同可观测量的相对重要性，从而帮助确定进一步研究的优先级。

- 虚拟评估相关性、主导可观测量、全局拟合中的张力等因素的影响。

2.1 B异常示例

为使概念更加清晰并简化可视化，我们首先选取文献中用于讨论 $b \to s l^+ l^-$ 系统的一部分可观测量和参数。现有的大多数全局拟合都将有效哈密顿量中的威尔逊系数（WC）视为自由参数。我们先用一个二维案例说明我们的方法，其中 C_9^μ 和 C_{10}^μ 是参数；随后，我们再加入另外两个参数 $C_{9'}^\mu$和 $C_{10'}^\mu$，以构建一个四维案例。在 B介子质量尺度下，导致 $b \to s l^+ l^-$ 跃迁的有效弱哈密顿量通常写作

as

$$\mathcal{H}_{\text{eff}} = -\frac{4G_F}{\sqrt{2}} V_{tb} V_{ts}^{\star} \sum_i C_i^{\ell}(\mu) O_{i\ell}(\mu) \tag{1}$$

$$O_9^{\ell} = \frac{e^2}{16\pi^2}(\bar{s}\gamma_\mu P_L b)(\bar{\ell}\gamma^\mu \ell),\ O_{9'}^{\ell} = \frac{e^2}{16\pi^2}(\bar{s}\gamma_\mu P_R b)(\bar{\ell}\gamma^\mu \ell), \tag{2}$$

$$O_{10}^{\ell} = \frac{e^2}{16\pi^2}(\bar{s}\gamma_\mu P_L b)(\bar{\ell}\gamma^\mu \gamma_5 \ell),\ O_{10'}^{\ell} = \frac{e^2}{16\pi^2}(\bar{s}\gamma_\mu P_R b)(\bar{\ell}\gamma^\mu \gamma_5 \ell). \tag{3}$$

这里我们挑出了要讨论的四个算符。这组算符在威尔逊系数为实数时，只允许守 CP 新物理，并且只影响 μ子。我们的记号约定是，这些威尔逊系数仅指新物理贡献，在标准模型中取值为 0；标准模型效应则单独计入。

为清晰起见，还需要降低可观测量空间的维度。我们根据对 [3] 的排名分析选取了十四个可观测量的子集。这些可观测量列于表 1 中，最后一列给出了该可观测量在 [3] 中的 ID。不过需要注意的是，部分可观测量的定义并不完全相同：这里 P_2 的符号被反转了，而且在某些情况下，由于本研究依赖 flavio [4] ，我们对不同的实验测量进行了平均。我们选择了标有 ★ 的可观测量，它们在全局拟合中被确定为对确定 C_9^{μ} 和 C_{10}^{μ} 最重要的可观测量。我们还纳入了标有 ★ 的可观测量，它们被确定为对 $C_{9'}^{\mu}$ 和 $C_{10'}^{\mu}$ 很重要。其余的 P_2 和 P_5' 个区间被选用，以补全这两个可观测量的 q^2 分布。需要注意的是， R_K 和 $R_{K^\star}$ 是其实验值最近发生变化的可观测量，这使我们能够在本研究中评估这一变化。实验值取自：对于 P_5' ，LHCb [5], 、CMS [6] 和 ATLAS [7]； P_2 ，LHCb [5]； R_K ，LHCb [8] 和 Belle [9]； $R_{K^\star}$ ，LHCb [10] 和 Belle [11]。 R_K 和 $R_{K^\star}$ [2] 的修正值。除非另有明确说明，所有图和结果都将使用 R_K 和 $R_{K^\star}$ 的“旧”值。由 flavio [4] 获得的该数据集的二维最佳拟合点为 $(C_9^{\mu}, C_{10}^{\mu}) = (-0.8, 0.1)$，与标准模型相差 3.7σ。在大多数图中，这两个点分别用 $*$ 和 ◦ 标记。将 R_K 和 $R_{K^\star}$ 更改为同一数据集后的最佳拟合变为 $(C_9^{\mu}, C_{10}^{\mu}) = (-0.4, -0.1)$。

在本研究中，我们将在（C_9^{μ}、 C_{10}^{μ}）的取值网格上生成模型（由 14 个预测值组成）。原始的 Shiny应用 要求网格均匀，但通常并不需要如此。所有预测值均由 flavio [4] 生成，且所选网格足够大，能够同时包含 SM 和最佳拟合点。

3. 聚类

为了划分连续参数空间，我们考虑模型点 M_k ，它们在参数空间中的坐标为（C_9^{μ}， C_{10}^{μ}）$_k$，在可观测量空间中的坐标为（O_1，$\cdots$， O_{14}）$_k$。使用可由坐标计算得出的距离函数会比较方便（但并非必须）。为此，我们将每个模型点在可观测量空间中的坐标定义为

$$Y_{ki} = \sum_j \Sigma_{ij}^{-1/2}(X_{kj} - R_j) \approx \sum_j \frac{1}{\sqrt{(\Sigma^{-1})_{ii}}}(\Sigma^{-1})_{ij}(X_{kj} - R_j), \tag{4}$$

ID	可观测量	Exp.	[3]中的ID
1★	P_5'（$B \to K^*\mu\mu$）[0。1 − 0。98]	0.52 ± 0.10	20
2	$P_5'(B \to K^*\mu\mu)$ [1。1 − 2。5]	0.36 ± 0.12	28
3	$P_5'(B \to K^*\mu\mu)$ [2。5 − 4]	-0.15 ± 0.14	36
4 ★	P_5'（$B \to K^*\mu\mu$）[4 − 6]	-0.39 ± 0.11	44
5 ★	$P_5'(B \to K^*\mu\mu)$ [6 − 8]	-0.58 ± 0.09	52
6	$P_5'(B \to K^*\mu\mu)$ [15 − 19]	-0.67 ± 0.06	60
7	$P_2(B \to K^*\mu\mu)$ [0。1 − 0。98]	0 ± 0.04	17
8	$P_2(B \to K^*\mu\mu)$ [1。1 − 2。5]	$-0。44 \pm 0。10$	25
9	$P_2(B \to K^*\mu\mu)$ [2。5 − 4]	$-0。19 \pm 0。12$	33
10★	$P_2(B \to K^*\mu\mu)$ [4 − 6]	0.10 ± 0.07	41
11 ★	$P_2(B \to K^*\mu\mu)$ [6 − 8]	$0。21 \pm 0。05$	49
12 ★	$P_2(B \to K^*\mu\mu)$ [15 − 19]	0.36 ± 0.02	57
13 ★★	$R_K(B^+ \to K^+)$[1。1 − 6]	0.86 ± 0.06	98
	新值	$0.949^{+0.047}_{-0\ 046}$	
14 ★★	$R_{K^*}(B^0 \to K^{0*})$ [1。1 − 6]	0.73 ± 0.11	100
	新值	$1.027^{+0.077}_{-0.073}$	

Table 1: 用于对具有潜在 $b \to sl^+l^-$ 夸克跃迁的测量值进行聚类的可观测量列表 n.

其中，X_{kj}是模型 k对可观测量 O_j的预测，R_j是该可观测量的“原点”或参考点，而 Σ_{ij}是包含理论和实验不确定度及相关性的总协方差矩阵。原点 R_j是任意的，但通常会选取一个特殊点。在这个例子中，它可以是实验观测点 E_i、标准模型预测，或任何其他首选模型。因此，这些坐标衡量的是相对于参考点的距离，单位为理论和实验合并不确定度。利用这些坐标，我们将模型之间的距离（的平方）**定义为**

$$d_{\chi^2}(X_k, X_l) = \sum_{i,j}[X_{ki} - X_{li}](\Sigma^{exp} + \Sigma^{th})^{-1}_{ij}[X_{kj} - X_{lj}] = \sum_i (Y_{ki} - Y_{li})^2. \tag{5}$$

如果 Σ 不依赖于模型，则最后一个等式成立；这是一种常用的近似，尤其是在实验误差占主导地位时。在这种情况下，聚类结果将不依赖于参考点。特别是，最近 R_K 和 $R_{K^\star}$中心值的变化**不会改变**聚类结果。

这种距离的定义就是坐标由公式 4定义的欧几里得距离，并且可以将其解释为 $\Delta\chi^2$。我们利用这一解释来构造划分：首先为每个簇定义一个质心和半径。簇 c_j的质心 C_j是使 $f(c, C_j) = \sum_{x_i \in C_j} d(c, x_i)^2$最小的簇成员，而该簇的半径为 $r_j = \max_{x_i \in C_j} d(c_j, x_i)$。质心旨在作为每个簇的代表点，可充当进一步研究的基准。利用这些定义，例如可以使用“一个标准差”簇来获得划分。在这种情况下，其含义是：如果未来对所有实验进行全局拟合得到的最佳拟合落在某个质心上，则相应的簇包含所有位于 1σ 区域内的点，$\Delta\chi^2 \leq 2$。对于两个参数。不过请注意，没有任何一个质心会被单独选出

作为全局拟合的结果：在这一阶段，无需存在拟合（甚至无需存在测量值）。类似地，我们可以要求任意两个质心之间至少相隔 $\Delta\chi^2 > 2$。3。有两点需要特别注意：总会存在彼此足够接近、但仍然位于不同簇中的点；此外，如果改变所研究的参数范围，簇之间的边界也会发生移动。这种聚类方法示意于图 2左侧的两个面板中，而我们的示例结果则显示在可观测量空间中的第三个面板内。

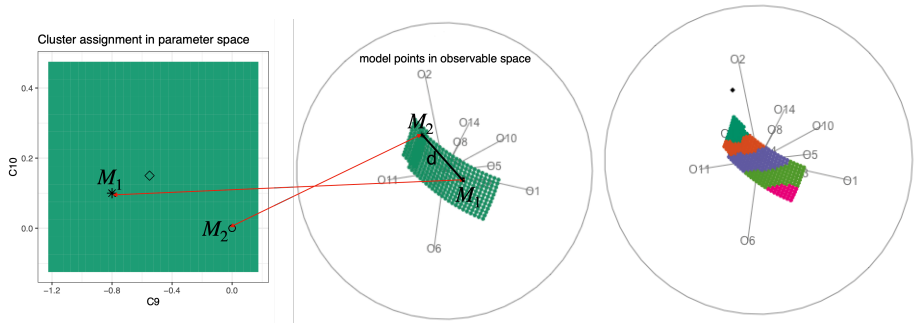


图2： 通过测量可观测量空间中两个模型 M_1和 M_2 之间的距离，对（连续）参数空间进行划分（左侧两个面板）。本示例的结果如右侧面板所示，具体获得方式见正文。

簇之间的距离称为联结，此处我们关注 Ward.D2 联结，该方法通过最小化簇内不相似度函数来定义簇。为确定簇数量，我们计算簇半径的最大值和质心之间的最小距离随簇数量变化的关系。将簇视为在某一置信水平下彼此无法区分的点集，这一概念确定了最大半径，进而确定了簇数量的最小值。若要使质心在某一置信水平下存在差异，它们之间的最小距离也必须确定，这一条件给出了簇数量的最大值。这些综合要求使本示例中最终得到五个簇，如图 3 所示。给定数据集的分辨能力取决于参数空间体积、在该参数空间区域内某一可观测量的预测值范围，以及测量值和预测值中的不确定度大小。可以通过增加可观测量或提高测量精度来增强分辨能力。最近对 R_K 和 $R_{K^\star}$的测量便是后一种情况；若将这一更新后的实验误差纳入考虑，该数据集的分辨率将提高到六个簇。对 R_K 和 $R_{K^\star}$ 所作的这些改变对聚类分析结果的影响很小，因此我们继续采用在 [1] 中得到的结果。稍后我们将展示使用 R_K 和 $R_{K^\star}$ 的新数值后会发生哪些变化。

由此得到的簇如图所示4。左图展示了参数空间的划分。簇之间的边界大致沿着恒定 R_K 的线分布，其意义将在下文讨论。右图是可观测量空间的平行坐标（主成分图）表示。此主成分图是在坐标中心化后绘制的。这样做会去除关于各点与参考点之间距离的信息，但能更好地比较各可观测量预测值变化的相对大小。如果更关注模型在图中的变化轨迹，而非变化的相对大小，则可以使用经过中心化和缩放的主成分图。工具pandemonium中也提供了此选项。全巡游

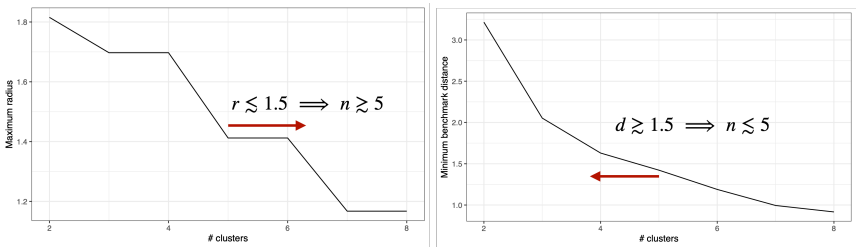


图3： 最大簇半径与质心之间的最小距离随簇数量的变化，决定了该示例的最优选择，即五个簇。

动画2中展示了可观测量空间中的簇视图，以及实验点（黑点）。例如，从动画中可以看出，对于这两个参数的所有取值，实验点都与预测超平面分离。

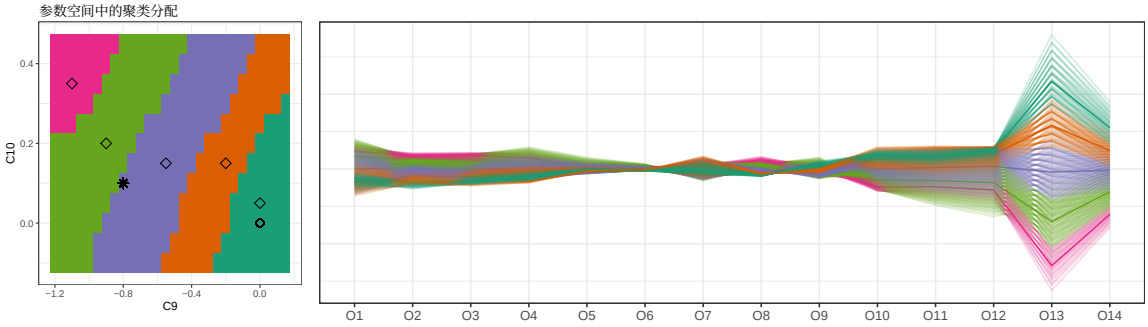


图4： 使用 Ward.D2 联结（使簇内方差最小化）和欧几里得距离进行聚类所得的聚类结果（左图），以及对应的全部14个可观测量的居中平行坐标（PC）（右图），并采用匹配的颜色编码。PC图中每种颜色较深的线表示簇基准（左图中也以空心菱形符号标示）。图2的最后一个面板展示了14维可观测量空间的一个投影。

在图 5 中，我们说明聚类分析的结果如何帮助直观展示所有可观测量对参数的集体依赖关系。在左图中，我们展示两个可观测量 R_K 的依赖关系（红线表示恒定值），以及 $P_5'[4-6]$ 的一个分箱（黑线）。当可观测量很多时，这样的图并不实用；相反，人们可能希望查看具有不同权重的可观测量组合，如中图所示，其中展示了两个可观测量恒定平均值的曲线。右图所示的聚类分析有效地以不同权重组合了所有可观测量，而这些权重可以通过选择距离函数和联结方式进行调整。我们在最后一个图中叠加了恒定 R_K和 $P_5'[4-6]$ 的曲线，以显示簇之间的边界如何沿着近似恒定的 R_K曲线分布。这仅仅反映了在此情况下，该可观测量完全占主导地位。这一点也可以从图 4的主成分图中看出。该图中 O_{13} 的巨大分散表明，以不确定度为单位时，该可观测量在这片参数空间区域内的变化最大。在同一张图中还可以看到， R_K 在确定不同簇方面占主导地位（沿着 O_{13} 坐标轴，颜色之间几乎没有重叠）。同样的推理表明， O_2、 O_8、 O_{14} 也能清晰地将这些簇分隔开。

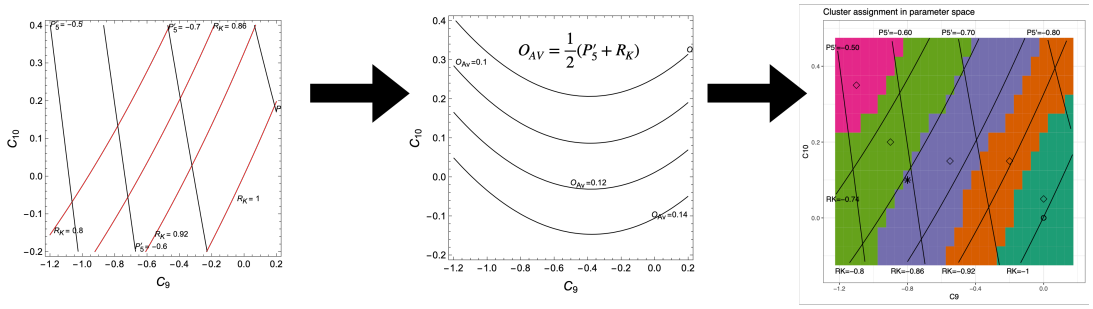


图5： 左图展示了两个可观测量在参数区域中的变化，中图展示了这两个可观测量的平均值如何变化，右图则展示了聚类结果所捕捉到的全部14个可观测量的整体行为。

例如，通过增加第六个簇，可以观察到次主导效应。在图 6 中，我们看到黄色的第六个簇与浅绿色簇分离，二者之间近似水平的分界表明，在远离标准模型的区域，对 C_{10} 具有敏感性。箭头指向主成分图，可以看到主要是 $O_{11、12}$ （$P_2[6-8]$ 和 $P_2[15-19]$）对确定黄色簇与粉色簇之间的分离最为重要。需要提醒的是，数值精度会影响细节，而这些细节在某种程度上最终会变成噪声。

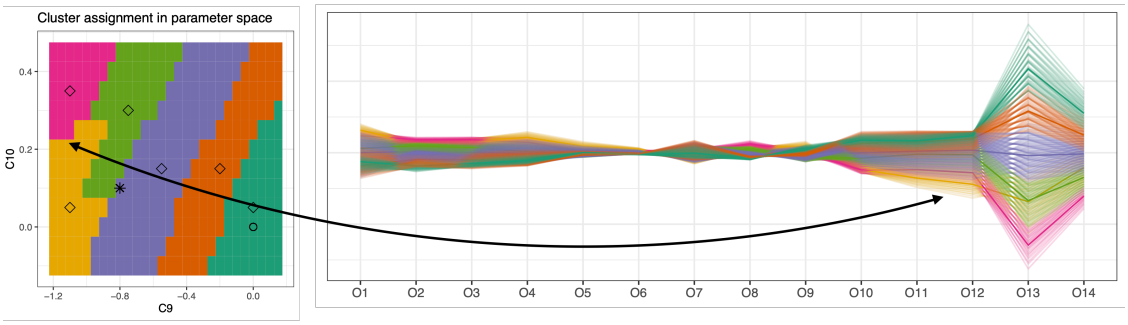


图6： 将簇数量增加到六个时，我们把其中一个区域拆分开来，该区域现在呈现为浅绿色和黄色。将参数区域图（左）与主成分图（右）联系起来，可以发现，两个可观测量对于黄色新簇的分离至关重要。

研究次主导效应的另一种方法是去除主导可观测量，在本例中即R_K。结果如图 7 所示，此时分辨能力已降低至仅能区分3个簇。剩余可观测量集中占主导地位的算符是 R_{K^*}，但其影响不如 R_K重要。这一点从它在主成分图中的变化幅度以及簇间边界的形状都可以明显看出。去除 R_K后，该可观测量集主要对 C_9敏感。在这种情况下，从主成分图可以看出，簇分离是由许多可观测量共同作用所致。棕色簇主要由 P_5' 决定；主成分图显示，对于 P_2 可观测量，该簇与其他簇存在重叠。当然，去除 R_K后，最佳拟合（$*$）也发生了偏移。

通过更改聚类参数，可以增强或抑制某些效应。若要提高主导可观测量的重要性，可以使用最大距离和完全连接法

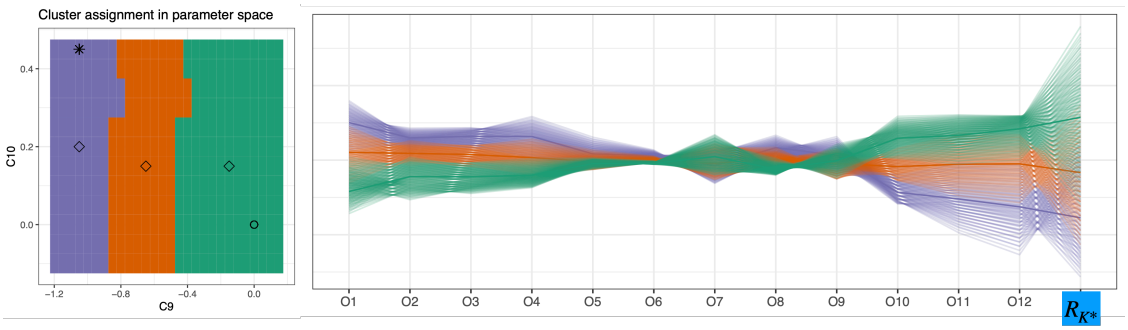


图7： 移除主导可观测量 R_{K^*} 后的聚类结果，此时第十三个坐标变为 $R_{K^\star}$。

，而不是使用欧几里得距离和 Ward linkage。图 8 左图通过示意图对此进行了说明：两个模型 A 和 B 在一个可观测量方向上的距离为 3，在另一个可观测量方向上的距离为 1。使用最大距离会将次主导可观测量排除在图示之外，而使用曼哈顿距离则会提高其相对重要性。中图展示了使用最大距离和完全连接法对由 13 个可观测量组成的集合进行聚类的结果（移除 R_K 后）。这提高了 $R_{K^\star}$ 的权重，这一点反映在边界形状相较于图 7左图所示形状的变化上。右图展示了对完整的 14 个可观测量集合使用曼哈顿距离进行聚类的结果（采用 Ward linkage）；此时，各簇是由集体效应产生的。

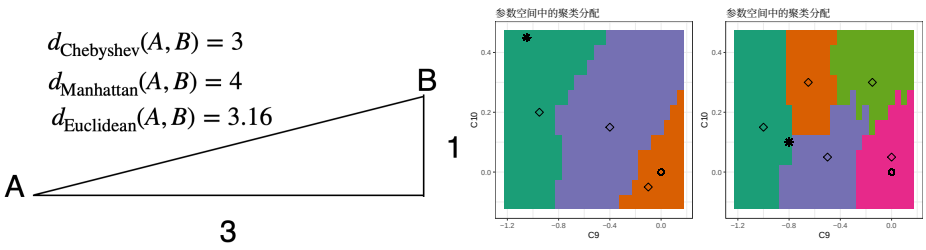


图8： 左图：示意不同距离之间的差异。中图：使用切比雪夫（最大值）距离和完全连接法对移除 R_K 后的可观测量进行聚类。右图：使用曼哈顿距离对全部 14 个可观测量进行聚类。

我们以采用 R_K 和 $R_{K^\star}$ LHCb 最近报告的 [2]新数值结束本节。根据我们的讨论，我们预计中心值的变化不会改变聚类，因为聚类不依赖于参考点。另一方面，新数值的误差更小，这会提升这两个可观测量的重要性。由于它们原本就占主导地位，我们预计不会出现重大差异。比较图9 和图4可以证实这一点：簇的形状和大小相似，但 R_K 比之前更为显著；最佳拟合点（$*$）的位置当然发生了变化。

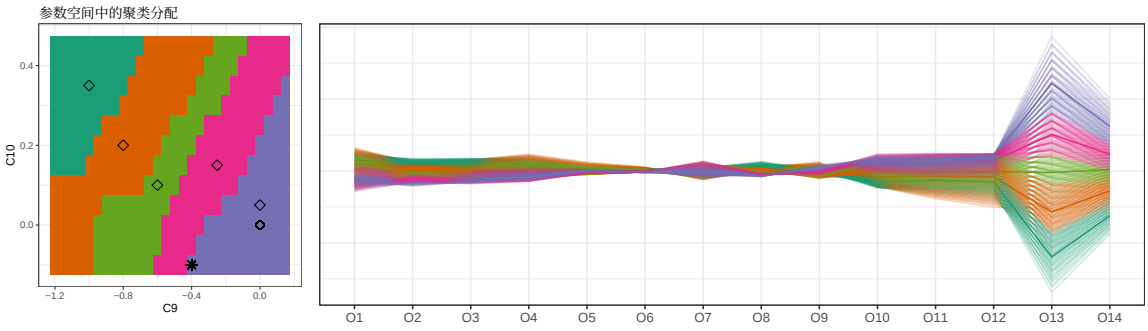


图9： 与图4 中的聚类结果相匹配，但使用新的实验值 R_K 和 R_K *.

4. 可视化

如果坐标未经中心化或缩放，主成分图可用于展示可观测量空间的其他方面。图10 展示了这一点，其中标记为“Exp”的水平线将原点固定在实验测量的位置（中心值，因为不确定性已计入坐标的定义中）。该图可用于直观检查以下几点：

- 我们可以看到哪些可观测量与模型预测存在张力，例如，O_1 在研究区域内，对于参数的任何取值都无法与实验值相匹配（在一定的不确定度范围内，我们在图14的纵轴中对其进行了量化）。
- 我们可以看出哪些可观测量对参数 C_9 和 C_{10}不敏感：它们是 O_6 和 O_7，因为在所研究的范围内，它们的变化最小。
- 我们观察到拟合中的张力：例如，最佳拟合位于紫色簇和浅绿色簇的边界上。主成分图显示，$O_4(P_5'[4-6])$ 和 $O_5(P_5'[6-8])$这两个 P_5' 区间在标准模型与实验之间的差异最大，它们偏好位于浅绿色簇中的模型，这些模型具有更大的负 C_9。请注意，$P_5'[4-6] = -0.39 \pm 0.11$ 的实验值位于所绘制参数区域之外，即其左侧。另一方面，2022 年之前的 R_K 值偏好紫色簇。还可以进一步看出，使 $P_5'[4-6], P_5'[6-8]$ 最接近其对应实验值的模型点，使 R_K 偏离得最远。有趣的是，随着 R_K 的新值（该值与标准模型一致，并将在此图中落在深绿色簇上）的引入，这一张力反而变得**更加严重**。

可以研究可观测量集对参数空间中给定方向的敏感性，并将其与特定可观测量在参数范围内的变化联系起来。例如，在图 11中，叠加线表明该集合主要对具有 $C_{10} \approx 0$的模型敏感。$2C_9$，而对具有 $C_{10} = C_9$的模型几乎不敏感。这两个特征从全局拟合的结果中早已获知，而这种方法提供了清晰的可视化图像。右图显示了 O_{11}，它以正交方式在参数范围内变化（该量是从交互式工具 `pandemonium` 中选出的，该工具会显示所有可观测量），这表明，要提高对具有 $C_{10} = C_9$ 的模型的敏感性，一种方法是提高对 O_{11}（$P_2[6-8]$）的测量精度。

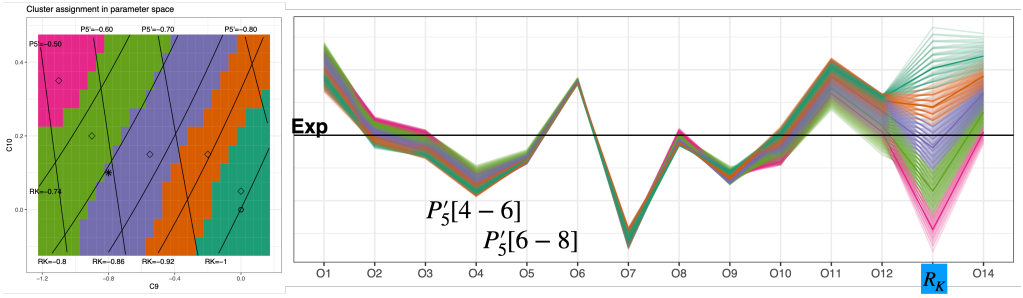


图10： 左侧面板显示等值线 $P_5'[4-6]$ 和 R_K 叠加在图 4的聚类结果上。右侧面板显示未进行中心化或缩放的主成分图，说明各可观测量与其实验值的偏差。

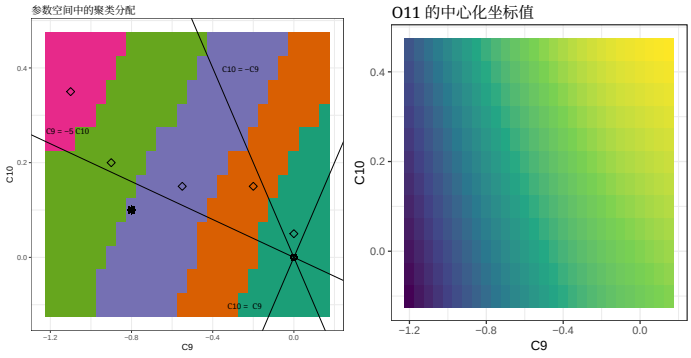


图11： 左侧面板显示等值线 $C_9 = -5C_{10}$、$C_{10} = C_9$ 和 $C_{10} = -C_9$ 叠加在图 4的聚类结果上。右侧面板显示 O_{11} ($P_2[6-8]$) 在参数范围内的变化。

巡游可以帮助我们将高维（本例中为14维）的可观测量空间可视化，并观察模型与测量值的比较。在图 12 的左图中，我们展示了参数空间中的典型二维图，并将其与相应的可观测量空间二维图进行对比。二者传达了互补的信息，后者揭示了模型预测与测量值的相对位置。要在高维空间中实现这一点，可以使用主成分图，例如图 10右图中的主成分图；也可以使用巡游。巡游能够更直观地展现完整空间，动画2便展示了这一点。在图 12 的右图中，我们展示了动画中全巡游的一次投影。这表明，该参数空间无法达到实验点。

5. 四个参数的情形

从物理学角度来看，引入另外两个参数 C_9^μ 和 $C_{10'}^\mu$，可以探索包含右手夸克流的模型。这些模型本身很有研究价值，但不受全局拟合支持。从可视化角度来看，存在两个高维（超过三维）空间使问题变得更加复杂。这一额外复杂性要求

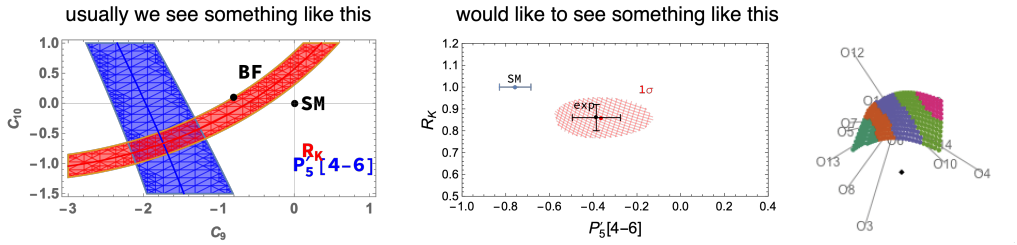


图 12: 左侧和中间面板对比了参数空间与可观测量空间图示所能传达的信息。右侧面板是对 14 维可观测量空间的投影，该空间被划分为五个簇，清楚地显示了实验点（黑色 ♦）与由这一范围参数化的所有模型彼此分离。

引入切片工具 [12, 13] 以检查正交空间中薄切片的二维投影，如图 13所示。

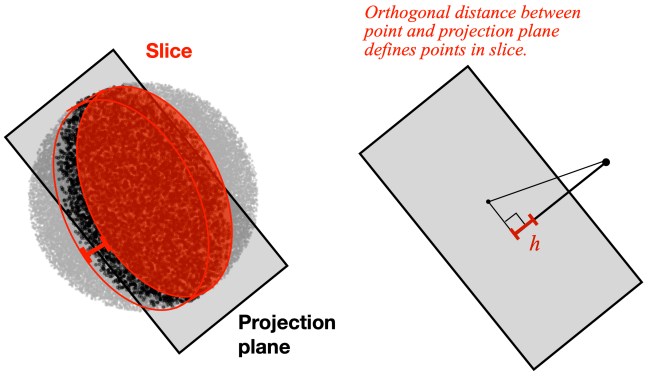


图 13: 示意图展示了如何根据数据点到投影平面的正交距离，从高维数据中选取一个切片。

在 B介子反常的示例中，我们扩大了研究所用的参数空间，为两个新增参数选择的取值范围既涵盖标准模型，也至少涵盖全局拟合中最佳拟合附近的 1σ 范围。对于新的参数空间和相同的 14 个可观测量，结果仅分为四个簇；我们在图14中使用主成分图比较这一情形与双参数情形。我们可以立即看出，预测值范围的扩大增加了与实验数据的重叠（两幅图的纵轴尺度相同）。尤其可以看到，扩大参数空间后，$O_{4,\ 5,\ 6}$ 的预测值范围向原点延伸。这表明（当然是在误差范围内）$C_{9'}^{\mu}$ 和 $C_{10'}^{\mu}$ 是解释这些数据所必需的。观察 O_{13}，我们发现 R_K 已无法再清晰地区分各簇。我们还观察到 P_5' 与 R_K之间的张力有所减小。

现在我们转而对这一四维情形的参数空间进行可视化。在图 15 中，左侧面板展示了一个 $C_9 - C_{10}$ 投影，显示了 $C_9 - C_{10}$ 由于 R_K而产生的相关性仍占主导地位。右侧面板展示了可观测量空间的投影，显然，这个由模型构成的四维体积同样不包含实验点。中间面板是投影到 $C_9 - C_{9'}$ 上的一个薄切片，展示了这两个参数之间的相关性；若不进行切片，这种相关性便无法观察到。该切片是使用 [14]中所述的工具获得的。参数空间中的簇以及

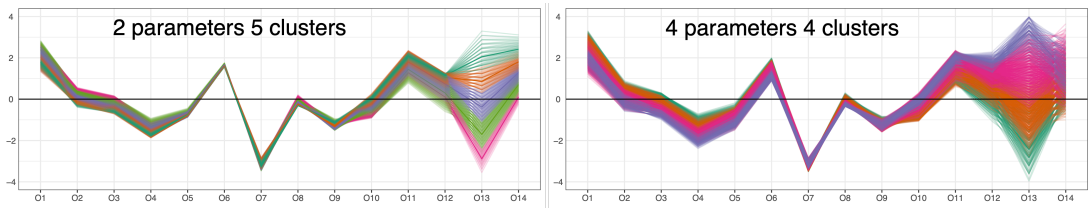


图14： 使用 Ward linkage 和欧几里得距离得到的主成分图：两个参数和五个簇（左），以及四个参数和四个簇（右）。这些图经过对齐，以匹配垂直尺度。

对于这一情形，可观测量空间可以通过动画 3 和 4 更清晰地展示。动画 5 展示了沿标准模型点切片并投影到 $C_9 - C_{10}$ 平面上的效果（交互式工具 mmtour 允许用户更改切片高度和投影平面）。动画 6 展示了在投影到 $C_9 - C_{9'}$ 平面时改变切片高度会发生什么。后者揭示了这两个参数之间的相关性，这种相关性只有在薄切片中才能观察到，在任何投影中都会被掩盖。

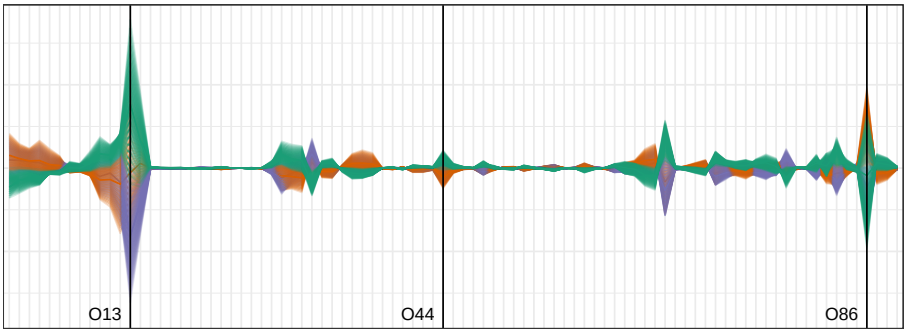


图15： 参数空间（左和中）及可观测量空间（右）中巡游所得的部分投影，展示了使用四个参数得到的簇。颜色编码与图14右侧面板中的一致。

6. 纳入更多可观测量

据我们所知，已有数百种可观测量被用于讨论 $b \to s l^+ l^-$ 跃迁。这里我们考察在 [1], 中选出的89种，其中前14种列于表1。使用所有这些可观测量时，该数据集的分辨能力对应于8到10个簇。我们将仅用五个簇来说明主要结果。图16 中的中心化主成分图可用于选择其他可能重要的可观测量。尤其是， $O_{86}\,(B(B_s \to \mu^+\mu^-))$ 尤为突出。若采用由`flavio`计算的平均实验误差， $B(B_s \to \mu^+\mu^-) = (2.81 \pm 0.24) \times 10^{-9}$，则仅这一可观测量就能解释使用89种可观测量与仅使用前14种所得簇的大部分差异。比较图17左侧的两个面板即可看出这一点。

为了将这些结果应用于其他问题，我们把注意力转向 O_{44} 图 16 显示其重要性中等。在图17的第三个面板中，我们展示了这一可观测量的坐标变化。这表明，如果能提高其显著性，它就可以约束当前整体图景遗漏的方向。目前，这一可观测量的实验值为 $O_{44} = P_4'[0。1 - 0。98] = 0。135 \pm 0。118$。我们可以研究未来降低这项测量的不确定度后会产生什么影响



Figu图16： 89个可观测量的中心化主成分图，详见 [1],前14个对应于表中的可观测量 1.

。例如，图 17 的右侧面板展示了仅将这一可观测量添加到原有的 14 项中所产生的影响，但假设其实验误差可以**降低至原来的四分之一**。

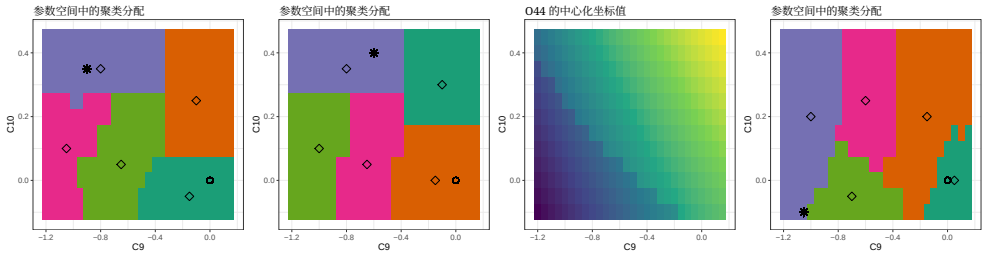


图17： 左图展示了仅包含两个参数 C_9、C_{10} 和89个可观测量时参数空间中的5个簇。左起第二幅图展示了仅包含前14个可观测量以及文中所述的$B(B_s \to \mu^+\mu^-)$时的5个簇。第三幅图展示了 O_{44} 随 C_9、C_{10} 的变化，最后一幅图展示了仅使用前14个可观测量以及 $P_4'[0。1 - 0。98]$ 时得到的5个簇，此时实验误差比当前小四倍。

7. 结论

以B介子反常为例，我们展示了如何通过一组相互关联的图示来解读不同的聚类结果，从而研究参数空间与可观测量空间之间的关系。工具 pandemonium 的交互式环境使这项分析更加便捷，能够轻松比较不同参数设置下的聚类结果。通过选择不同的设置，可以突出或弱化特定可观测量。该工具提供相关信息，帮助确定给定数据集的最佳分区数，以及应突出哪些可观测量以探索参数空间中的特定方向。在本次报告中，我们运用这些方法讨论了一个著名的B物理问题，并为将这些方法应用于其他情况提供了反馈。

以 B介子反常为例，我们的研究凸显了 R_K 的重要性，以及它与测量精度之间的联系。随着测量精度的提高，这一可观测量变得更加占主导地位。尽管采用新的、更精确的 R_K 和

$R_{K^\star}$数值后，全局拟合将更接近标准模型，但与 P_5' 某些区间之间的张力反而增大。不同可观测量精度的提高对于探索与R_K正交的参数空间方向是必要的，而我们的工具有助于确定针对不同目的应重点关注哪些方向。可观测空间巡游揭示了模型的参数不足以解决与参考点之间差异的情况，而主成分图可用于对此进行量化。在本例中，使用四个 Wilson系数虽能改善这种模型的表现，但无法解决以这种形式参数化的模型无法完全解释实验结果的问题。我们引入了切片巡游，以便考察投影中隐藏的参数之间的相关性，尤其是 C_9 与 $C_{9'}$之间的相关性。当其他参数的影响掩盖了这种相关性时，就会出现这种情况。

我们提出的技术和软件工具在粒子物理学及其他领域有广泛的应用，能够带来新的见解，尤其是在了解较少的情境中。

本次演讲中介绍的工具由 Ursula Laa 实现，并以 Shiny 应用（一个 R 软件包）的形式发布在 GitHub 上：https://github. com/uschiLaa/pandemonium。本次演讲中展示的切片巡游所用工具由 Alex Aumann 实现，是一个 Mathematica 软件包，可在 GitHub 上获取：https://github.com/uschiLaa/mmtour。

致谢

这项工作部分由澳大利亚政府通过澳大利亚研究理事会资助。

参考文献

[1] *U. Laa* 和 *G. Valencia*，《*Pandemonium*：一种用于划分参数空间的聚类工具——应用于 *B*介子反常》，*Eur. Phys. J. Plus 137 (2022)* 145, [2103.07937].[2] *LHCb* 合作组，《对 $b \to s l^+ l^-$ 衰变中轻子普适性的检验》，*2212.09152*.[3] *B. Capdevila*、*U. Laa* 和 *G. Valencia*，《对 $b \to s l^+ l^-$ 反常的六参数拟合剖析》，*Eur. Phys. J. C 79 (2019)* 462, [1811.10793].[4] *D. M. Straub*，《*flavio*：用于标准模型及其以外的味物理与精度现象学的 *Python* 软件包》，*1810.08132*.[5] *LHCb* 合作组，*R. Aaij* 等，《CP 衰变中$B^0 \to K^{*0}\mu^+\mu^-$平均可观测量的测量》，《物理评论快报》*125 (2020)* 011802, [2003.04831].[6] *CMS* 合作组，*A. M. Sirunyan* 等，《在 $\sqrt{s} = 8$ *TeV* 质子—质子碰撞中，对衰变 $B^0 \to K^{*0}\mu^+\mu^-$ 的角参数进行测量》，*Phys. Lett. B 781 (2018) 517–541*, [1710.02846].[7]*ATLAS* 合作组，*M. Aaboud* 等，《利用 *ATLAS*探测器在 $\sqrt{s} = 8$ *TeV* 的 pp 碰撞中对 $B_d^0 \to K^* \mu^+ \mu^-$ 衰变进行角分析》，高能物理学杂志 *10 (2018)* 047, [1805.04000].[8] *LHCb* 合作组，*R. Aaij* 等，《在 $B^+ \to K^+ l^+$ 中寻找轻子普适性破坏的迹象》

ℓ^-

衰变，《物理评论快报》**122** (2019年) 191801, [1903。09252]。

[9] *Belle* 合作组，*A. Abdesselam* 等，《在 $B \to Kl^+l^-$衰变中检验轻子味普适性》，*1908.01848*。[10] *LHCb* 合作组，*R. Aaij* 等，《利用 $B^0 \to K^{*0}l^+l^-$ 衰变检验轻子普适性》，高能物理学杂志 *08 (2017)* 055, [1705。05802]。[11] *Belle* 合作组，*A. Abdesselam* 等，《在 *Belle* 实验中检验 $B \to K^*l^+l^-$衰变中的轻子味普适性》，*1904.02440*。[12] *U. Laa*、*D. Cook* 和 *G. Valencia*，《用于在高维数据中发现空洞性的切片漫游》，计算与图形统计学杂志 *29 (2020) 681–687*，[*https://doi.org/10.1080/10618600.2020.*1777140].[13] *U. Laa*、*D. Cook*、*A. Buja* 和 *G. Valencia*，《空洞还是颗粒？用于发现……的截面追寻指数

g

多维中的隐藏结构，计算与图形统计学期刊**31** (2022)739–752, [https://doi.org/10.1080/10618600.2022.2035230]。[14] U. Laa、A. Aumann、D. Cook 和 G. Valencia，用于投影巡游和切片漫游的新型简化手动控制，及其在探索高维分类边界中的应用，2210.05228。