

令和 6 年 5 月 29 日現在

機関番号：12601

研究種目：若手研究

研究期間：2021～2023

課題番号：21K13936

研究課題名（和文）LHC・ATLAS実験データ解析における深層学習の発展

研究課題名（英文）Development of experimental data analysis methods using deep learning for LHC and ATLAS

研究代表者

齊藤 真彦（Saito, Masahiko）

東京大学・素粒子物理国際研究センター・助教

研究者番号：70865162

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 2,300,000円

研究成果の概要（和文）：本研究では高エネルギー加速器実験のデータ解析に深層学習を適用する際の複数の課題に着目しその解決を図った。

(1)入力データの構造を適切に扱うことのできるグラフニューラルネットワークを導入し、物理解析の性能を向上させた。(2)複数の深層学習モデルを情報伝播させやすい形で接続かつ学習手法を工夫することでタスク全体の解釈可能性を保ちつつ目的タスクの性能向上を実現した。(3)正規化流を用いた物理モデルパラメータスキャン手法を開発し、パラメータ空間の効率的な探索を可能とした。

研究成果の学術的意義や社会的意義

本研究では大規模化・複雑化する実験データを解析する上での重要な知見が得られた。このことは、物理データ解析への深層学習技術応用を促進させ、素粒子物理の新たな知見を生み出す可能性を高めることに繋がる。また、本研究のテーマである複数タスク・複雑な入力データ構造や深層学習モデルの解釈可能性の必要性は産業応用上も必要とされることがあり、本研究で得られた知見は深層学習技術の浸透に伴って今後より重要になっていくと期待される。

研究成果の概要（英文）：This study focused on and solved several problems in the application of deep learning techniques to the data analysis in high-energy collider experiments.

(1) A graph neural network that can reflect the structure of the input data was introduced, improving the performance of physics data analysis. (2) By connecting multiple deep learning models in a way that improves information propagation and introducing a multitask learning method, the performance of the target task was improved while maintaining the interpretability of the overall task. (3) A parameter scan method for physics models using normalising flows was developed to enable efficient search in the parameter space.

研究分野：素粒子実験物理学

キーワード：素粒子物理学 ATLAS実験 機械学習 深層学習

様式 C - 19、F - 19 - 1、Z - 19 (共通)

1. 研究開始当初の背景

加速器実験で得られる実験データは巨大かつ複雑であり、実験データの解析に必要な技術も複雑化・高度化している。このようなデータを、深層学習を取り入れることで高精度化、効率化する試みが近年活発に行われている。加速器実験データに深層学習を取り入れるにあたっての課題として、(1) 実験データが従来の深層学習で扱いやすい形とはなっていないこと (2) 深層学習の出力過程の解釈が困難でブラックボックス化してしまうことがある。深層学習の高い表現力を最大限に活かし、信頼できる物理解析結果を得るためには、上記の課題の解決が必要である。

2. 研究の目的

1. であげた課題を解決するため、LHC・ATLAS 実験におけるデータ解析を想定した新しい深層学習技術の開発を行う。具体的には、(1a) 複雑な形式の入力データ(可変長、非グリッド型)を扱う深層学習モデルの開発 (1b) 実験特有の条件や知識(ドメイン知識)を柔軟に深層学習モデルに組み込む手法を開発 (2a) 深層学習によって得られた結果の妥当性の検証に必要な不確かさを扱う深層学習の開発 (2b) 深層学習モデルの説明可能性を高める手法の開発を行う。

3. 研究の方法

LHC・ATLAS 実験の代表的な物理解析チャンネルであるヒッグス粒子が2つのタウ粒子に崩壊するチャンネル、及び重いボソンが2つの別のボソンを経由して4つのクォークに崩壊するチャンネルに着目した。モンテカルロシミュレーションを用いて、LHC 加速器で期待される陽子陽子衝突と、その結果 ATLAS 検出器で得られる検出器反応をシミュレーションし、実験データを模した大規模なデータセットを作成した。このデータセットを用いて、物理事象の再構成効率や生成された粒子の運動量分解能等を指針の一つとして深層学習を用いた解析技術の改善を進めた。深層学習手法としては、グラフニューラルネットワークや正規化流等の深層学習モデルを用いた他、学習手法自体の改善や複数のモデルを組み合わせた際の挙動の研究など多様な視点から研究を進めた。

4. 研究成果

(1) 多段接続深層学習モデルの開発

ヒッグス粒子が2つのタウ粒子に崩壊する過程で生じる検出器反応を模したシミュレーションデータを用いて研究を進めた。

タウ粒子は複数の粒子に崩壊し、崩壊先粒子の数は確率的に変化するため、典型的な深層学習モデルの一つである多層パーセプトロンなどのモデルでは十分な性能を出すのが難しい。そこで、可変長の入力データを扱うことのできる深層学習モデルを導入して、タウ粒子同定性能の向上を図った。レカレントニューラルネットワークの一種である Long Short-Term Memory (LSTM) やグラフニューラルネットワーク(DeepSets や Graph Attention Networks)を解析に適用し、多層パーセプトロンと比較した。結果、グラフニューラルネットワークベースの手法が最も性能が良いことが確認された。今回用いているデータセットは入力データが本質的に集合(Set)であるため、出力結果が入力データの順序に依存しないグラフニューラルネットワークが高い性能を示したと考えられる。入力データのドメイン知識を反映した深層学習モデルが高い性能を持つことを実証することができた。

次に2つのタスクを同時学習させる研究に取り組んだ。本解析チャンネルは(a)タウ粒子が検出器に残す反応からタウ粒子を他の粒子から分離するタスク(b)同定した2つのタウ粒子を用いてヒッグス粒子が生成されたかを判定するタスクの2段階に分けることができる。2つのタスクを一括で処理する大きな深層学習モデルを用いることも可能であるが、モデルが巨大になり推論過程の解釈も困難になる。各タスクをそれぞれ別の深層学習モデルで処理することで、効率的かつ解釈しやすい形での深層学習の適用が可能になる。このとき、2つの深層学習モデルを独立に学習させる手法や、2つの深層学習モデルを単純に直列に接続する手法だと前段モデルの出力の表現能力によって性能が律速されてしまうことが実験により判明した。そのため、2つの深層学習モデルの接続方法を工夫し、前段モデルの出力の情報が後段モデルに十分伝搬されるようにした。この工夫により、前段タスクの解釈可能性を保ちつつ、後段タスクの性能を向上させることに成功した。加えて、2つのタスクの学習を効率良く行うための研究も進めた。接続されたモデルをマルチタスク学習の一種と見立ててロス関数を動的に調整する手法を導入した。この手法により、モデル全体の学習が効率良く実行できることを確認した。

これらの研究により、ドメイン知識を反映させることが深層学習モデル選定において重要であること、また、複数のタスクを同時に扱うことが性能向上に重要であるが、その深層学習モデルの接続手法と学習手法に関しては注意が必要であることを示した。これらは複雑な構造を持つ加速器実験データ解析を深層学習で改善させるための重要な知見である。

(2) 生成モデルを用いた異常検知とパラメータスキャン

素粒子物理実験物理解析でこれまで主に使われてきた深層学習技術は識別モデル型である。このタイプの深層学習では、入力と出力の関係性をモデリングする。一方で、生成モデル型の深層学習モデルでは入力データの分布自体をモデリングし、データの細部までモデリングすることができる。生成モデルを加速器実験データ解析に応用するため、生成モデル型の深層学習モデルとして正規化流を使用し、(a) 事象選別における異常検知、(b) 物理モデルにおけるパラメータスキャンの研究を進めた。生成モデル型の深層学習モデルは、入力データの分布自体を学習することから、データの不確かさや解釈可能性の向上につながることを期待される。本研究では、重いボソンが別のボソンを経由して計 4 つのクォークに崩壊する過程に着目して研究を進めた。これは、この解析チャンネルがコミュニティのベンチマークデータとして存在し、他研究との比較が簡易となるためである。

異常検知手法の開発においては、Anomaly Detection with Density Estimation (ANODE)をベースとして研究を進めた。この手法では、物理モデルに一定の仮定を置いた上で条件付き正規化流で実験データをモデリングし、信号事象による事象数増加を検知する。その際、入力データのモデリング性能の向上が異常検知性能向上につながると考え、複数の正規化流モデルを導入し、性能の比較を行った。より柔軟なモデリングが可能な正規化流モデル(Spline Flow)を使用することで、実験データ分布のモデリングが向上することを実験的に示した。一方で、予想に反してモデリング性能の向上が異常検知性能の向上に繋がらないことが実験により示された。この理由として、本研究では 5 変数の多次元分布を正規化流でモデリングしたが、使用変数による原理的な性能限界に達している可能性が考えられる。異常検知性能向上のためには、入力データをより多次元に、かつ非定型な入力分布を扱う生成モデルへの拡張が必要であると考えられる。

次に、物理モデルにおけるパラメータスキャンの研究を進めた。異常検知手法では、これまで想定されていなかった物理モデルモデルへの発見感度がある一方、物理モデルへの仮定が少ないために典型的な物理モデルへの発見性能が悪化するトレードオフがある。特定の物理モデル及びベンチマークパラメータを決めた上での物理解析と異常検知での物理解析の中間に位置する「特定の物理モデルを仮定し、その模型のもつパラメータ空間全域を探索する物理解析」の重要性を認識し、これに取り組んだ。条件変数付きの正規化流を用いて入力データをモデリングすることで、物理モデルパラメータ空間内の高速な内層が可能となり、勾配法を用いたパラメータ探索が可能となることを示した。このことは、従来のモンテカルロシミュレーション・ベースのパラメータスキャン手法を大幅に拡張する可能性を示したものである。

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計1件（うち査読付論文 1件 / うち国際共著 0件 / うちオープンアクセス 1件）

1. 著者名 Masahiko Saito, Tomoe Kishimoto, Yuya Kaneta, Taichi Itoh, Yoshiaki Umeda, Junichi Tanaka, Yutaro Iiyama, Ryu Sawada and Koji Terashi	4. 巻 251
2. 論文標題 Event Classification with Multi-step Machine Learning	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 EPJ Web of Conferences	6. 最初と最後の頁 -
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1051/epjconf/202125103036	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている（また、その予定である）	国際共著 -

〔学会発表〕 計5件（うち招待講演 0件 / うち国際学会 3件）

1. 発表者名 Masahiko Saito
2. 発表標題 Study of model construction and the learning for hierarchical models
3. 学会等名 Learning to Discover AI and Physics conference（国際学会）
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 齊藤真彦
2. 発表標題 素粒子物理実験における多段深層学習モデルの学習
3. 学会等名 2022年度 人工知能学会全国大会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Masahiko Saito
2. 発表標題 Event Classification with Multi-step Machine Learning
3. 学会等名 25th International Conference on Computing in High-Energy and Nuclear Physics（国際学会）
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 齊藤真彦
2. 発表標題 マルチタスク学習としての多段深層学習モデルの学習
3. 学会等名 日本物理学会 第77回年次大会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Masahiko Saito
2. 発表標題 Signal model parameter scan using Normalizing Flow
3. 学会等名 International Symposium on Grids & Clouds (ISGC) 2024 (国際学会)
4. 発表年 2024年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

-

6. 研究組織

氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
---------------------------	-----------------------	----

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8. 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関
---------	---------