修士学位論文 LHC-ATLAS RUN3実験に向けた 液体アルゴンカロリメーターにおける 波形異常検知システムの研究開発 (R&D on waveform anomaly detection system for the LHC-ATLAS Run3 operation of the liquid argon calorimeter )

> 東京大学大学院 理学系研究科 物理学専攻 田中研究室 仲間 聖

> > 2021年1月29日

概要

LHC (Large Hadron Collider) は欧州合同原子核研究機構 (CERN)の保有する世界最高エネル ギーの陽子衝突実験を行う大型円形加速器であり、陽子を 6.5 TeV まで加速し衝突させ、検出器に よってその事象を検出し記録する。LHC には複数の検出器が設けられており、ATLAS (A Toroidal LHC ApparatuS) 検出器では標準模型を超えた物理の探索や標準模型粒子の性質解明を行っている。 LHC は 2022 年から始まる Run3 実験や 2027 年から始まる HL-LHC (High Luminosity LHC) と 呼ばれる高輝度での運転を行う予定であり、これらの実験では従来よりも高輝度の陽子衝突が行われ る。ルミノシティの向上に伴い、エネルギーや横運動量の閾値を下げないままにトリガーパフォーマ ンスを維持することが一つの大きな課題となっている。ATLAS 検出器では、HL-LHC に向けて高 輝度化する LHC からの事象から興味のある事象を選び出すためのトリガーシステムの精度向上が求 められており、液体アルゴンカロリーメータにおいては、Super Cell と呼ばれる新しい読み出し単位 を導入することによりこれを実現する。Super Cell は従来の Trigger Tower と呼ばれる読み出し単 位  $\Delta\eta \times \Delta\phi = 0.1 \times 0.1 を 10 倍細かくした <math>\Delta\eta \times \Delta\phi = 0.025 \times 0.1$ の読み出し単位を用いており、 電子・光子由来の電磁シャワーとハドロンジェットの形状の違いを識別することによってトリガー レートを抑える。

この新しい読み出し方法の導入に合わせて、読み出しエレクトロニクスも大幅な入れ替えが行われ ている。新しい読み出しエレクトロニクスでは、Super Cell から得られた信号を LTDB と呼ばれる フロントエンドボードで整形、デジタイズされ、光ファイバーを用いてバックエンドの LDPB に送 られる。LDPB には LATOME ボードと呼ばれる AMC が搭載されており、ここでトリガーのため のエネルギー計算、及びタイミング計算が行われる。LATOME ボードで得られた計算結果は光ファ イバーによって後段の FEX に送信され、トリガー計算に用いられる。このとき LATOME ボードは 25 Tbps でデータを受信し、50 Tbps でデータを送信する。データ転送の際の BER は 10<sup>-15</sup> 以下に なるように設計されているが、シリアライザーやトランシーバーの設定により Bit の取り違いが発生 し、Super Cell からの信号の波形が歪む場合がある。

この波形異常を検知するための手法として、本研究では従来手法のカイニ乗法、機械学習による one-class SVM、および深層学習による EfficientGAN による波形異常検知システムを開発、検証、 及び比較を行った。このシステムは1つの分類器で全ての Super Cell (約 34000ch) からの信号を分 類できるように設計し、較正用パルスを訓練データとして用いた。性能の検証は正常なパルスと、人 工的に作成した異常波形のパルスを用い、その分類能力と分類時間を測定することにより行った。

また、現在運用されている LATOME ボードからのモニタリングデータを上記の分類器で異常検知し、その性能を比較した。モニタリングデータは、11 月以降に新しく検出器に導入されたフロン

トエンドボードと、そこに接続されている Super Cell からのパルスを用いた。これにより、従来の 手法では発見されなかった異常も発見できることが可能になった。

目次

第1章	序論	11
1.1	研究の背景	11
1.2	本研究の目的....................................	12
1.3	本論文の構成....................................	13
第2章	LHC-ATLAS 実験	15
2.1	LHC	15
2.2	ATLAS 検出器	15
	2.2.1 内部飛跡検出器	17
	2.2.2 カロリメータ	18
	2.2.3 ミューオンスペクトロメータ	20
	2.2.4 トリガーシステム	21
2.3	LHC アップグレード計画	22
第3章	液体アルゴンカロリメータアップグレード	25
3.1	検出器からの信号	25
3.2	アップグレード計画	25
	3.2.1 Super Cell	26
	3.2.2 読み出しエレクトロニクス	28
3.3	現在のアップグレード状況....................................	31
第4章	異常検知手法	33
4.1	液体アルゴンカロリメータにおける波形異常	33
4.2	異常検知手法の選定	34
4.3	カイ二乗による異常検知..................................	34
	4.3.1 ホテリングの T <sup>2</sup> 法	35
4.4	SVM による異常検知	35
	4.4.1 SVM (Support Vector Machine)	35
	4.4.2 one-class SVM	38
4.5	GAN による異常検知	38
	4.5.1 GAN	39

	4.5.2	AnoGAN	40
	4.5.3	Efficient GAN	41
第5章	異常検	知手法の性能評価	45
5.1	分類器	ゆひ設計	45
5.2	訓練用	データの生成	45
	5.2.1	較正用パルス	45
	5.2.2	データセットの作成	46
5.3	実行環	境	47
5.4	各手法	のパラメータ決定	47
	5.4.1	カイ二乗のチューニング................................	47
	5.4.2	one-class SVM のチューニング	48
	5.4.3	Efficient GAN のチューニング	48
5.5	チュー	・ニング後の各手法の性能比較	53
	5.5.1	評価方法	53
	5.5.2	Flip error の大きさによる分類性能の比較	54
	5.5.3		55
5.6	チュー	·ニング後の異常基準	56
第6章	実デー	・夕による異常検知手法の性能評価	59
6.1	実デー	· タの概要	59
6.2	異常検	知手順	60
6.3	Pulsec	1 Run に対する異常検知	60
0.0	6.3.1	データ概要	60
	6.3.2	各手法の異常検知結果の比較	61
64	Pedest	tal Run に対する異常検知	64
0.1	6 4 1	Pedestal Run のデータ概要	64
	6.4.2	各手法の異常検知結果の比較	64
第7章	結論と	展望	69
7.1	結論.		69
7.2	今後の	展望	70
参考文献			73
付録			75
А	データ	の前処理	75
	A.1	本研究におけるデータの前処理	75
	A.2	one-class SVM における比較	75
	A.3	Efficient GAN における比較	76

В	SVM 4	の数理	77
	B.1	最適化問題	77
	B.2	カーネルトリック	79
С	Efficien	nt GAN の構成	81
	C.1	Generator	81
	C.2	Encoder	82
	C.3	Discriminator	82

表目次

2.1	液体アルゴンカロリメータの領域ごとの名称、吸収層の素材、種別	19
3.1	液体アルゴンカロリメータのセル分割単位の比較............	27
3.2	LTDB が扱うチャンネル数と導入される LTDB の枚数	31
5.1	学習を止めた際の iteration 数、異常値、及び各ネットワークの損失.......	53
5.2	Pulsed Run に対する Flip error に対する AUC 値の比較	55
5.3	Pedestal Run における各手法の Flip error に対する AUC 値の比較	56
5.4	Pulsed Run で取得したデータに対する処理時間の比較	56
5.5	Pedestal Run で取得したデータに対する処理時間の比較	57
6.1	Pulsed Run で検出された異常の内訳	63
6.2	Pedestal Run で検出された異常の内訳	67
7.1	SVM における訓練データに用いるパルスの形状を変えた際の Accuracy の比較...	76

## 第1章

# 序論

素粒子物理学の基礎理論である標準模型が予想した粒子は、欧州合同原子核研究機構 (CERN)の Large Hadron Collider (LHC) [1]の実験により、2012 年の Higgs 粒子の発見をもって全て発見さ れた [2]。しかし、暗黒物質や階層性問題など標準模型では説明できない物理現象が報告されてお り、まだ未知の物理が存在することを示唆している。LHC ではこのような未知の物理の探索のため、 2022 年の実験再開に向けてアップグレード中であり、実験期間中に衝突エネルギーを 14 TeV に上 げる。また、2027 年から始まる HL-LHC (High Luminosity LHC) ではルミノシティが向上する予 定である。LHC のアップグレードに伴い、事象を観測する ATLAS 検出器 [3] もアップグレードを 行っており、本研究はその中でも液体アルゴンカロリメータのアップグレード、及びその安定的な運 用を目的としたものである。

### 1.1 研究の背景

LHC はジュネーヴの地下約 100 m に建設された、周長約 27 km の大型円形加速器である。2015 年から 2018 年まで行われていた Run2 実験では重心エネルギー 13 TeV での陽子陽子衝突が行われ、 最大瞬間ルミノシティ 2×10<sup>34</sup> cm<sup>-2</sup>s<sup>-1</sup>、積算ルミノシティは約 150 fb<sup>-1</sup> であった。2022 年から始 まる Run3 実験では重心系エネルギー 13 TeV、最大瞬間ルミノシティ 3×10<sup>34</sup> cm<sup>-2</sup>s<sup>-1</sup>、さらに先 の 2027 年から開始する HL-LHC は重心系エネルギー 14 TeV、瞬間ルミノシティ 5×10<sup>34</sup> cm<sup>-2</sup>s<sup>-1</sup> を目標として設計されている。LHC に複数存在する検出器のうちの 1 つである ATLAS 検出器では 今後の LHC の高輝度化に対応するため、検出器の入れ替えや読み出しエレクトロニクスのアップグ レードなどが進んでいる。

ATLAS 検出器内の液体アルゴンカロリメータは、データを保存するための判断を行う「トリガー」 を発行する役割をもち、電子や光子 (EM オブジェクト)のためのトリガーを発行する。Run2 までは 検出器を  $\Delta\eta \times \Delta\phi = 0.1 \times 0.1$ の単位で1つのセルとして扱う Trigger Tower と呼ばれる読み出し 機構が用いられていた。しかし前述のように LHC の高輝度化に伴い、従来のトリガーシステムでは 閾値を通り抜ける事象が増加し要請されるトリガーレートを維持できなくなることが予想される。液 体アルゴンカロリメータに割り当てられている Level1 EM トリガーレートは 20 kHz 以下を要請さ れており、従来の Trigger Tower でこの要請を達成しようとすると閾値を約 34 GeV まで上げる必要 がある必要がある。この場合 Z、W などの崩壊から観測される電子などの興味ある事象も排除して しまう。トリガーレートを維持したまま興味ある事象を選択するため、Run3 からは Super Cell と 呼ばれる Trigger Tower よりも 10 倍細かい読み出し単位が導入される。Super Cell は図 1.1 のよう に Trigger Tower を ATLAS の動径方向に対して 4 分割し、そのうちの 2 層を $\eta$ 方向に 4 分割する。 この構造を導入することで電子・光子由来の信号(興味のある事象)とハドロンジェット由来の信号 (興味のない信号)の判別が可能となる。



図 1.1 Trigger Tower と Super Cell の読み出し単位の比較 [4]。

## 1.2 本研究の目的

上述の Super Cell の導入に伴い、読み出しエレクトロニクスがアップグレードされる。Run2 ま での Trigger Tower ではアナログ信号を 32 チャンネル分を直径 1 cm のケーブルを用い送っていた が、これを 10 倍に増やそうとするとスペースが足りない。そのため、アップグレード後の液体アル ゴンカロリーメータのトリガーシステムはフロントエンドで信号をデジタイズし、光ファイバーで バックエンドにデータを転送する。そのレートは約 25 Tbps となる。その後、信号はバックエンド でプロセスされ、L1 トリガーに 50 Tbps で転送される。非常に膨大なデータを転送するシステムを Run 中の長期間安定的に運用することは重要な課題である。液体アルゴンカロリメータはアップグ レードの最中であり、現在でもファームウェアのバグやデータ転送時にエラーが発生することが確認 されている。そのため、検出器からのパルスが誤った波形で転送されるエラーが起きる場合がある。 このような波形の異常を検知し、対策を行う必要がある。本研究では、検出器からバックエンドまで パルスが転送される過程で起きる「異常」を検知するためのシステムを開発し、その性能の検証、及 び比較を行った。このシステムはバックエンドから記録されたモニタリング用のデータをオフライ ン\*1で行うシステムである。

<sup>\*1</sup> ストレージに記録されたデータを使用して解析を行うシステムのこと。オフラインに対して、検出器から得られた信号 が事象選択されストレージに記録されるまでのデータを扱うシステムをオンラインと呼ぶ。

## 1.3 本論文の構成

本論文では、2章で LHC 及び ATLAS 検出器の詳細について述べる。3章では ATLAS 検出器内 の液体アルゴンカロリメータのアップグレード計画及び検出器からの信号の流れとその処理について 述べる。4章では異常検知を行うための3つの手法(カイ二乗、one-class SVM、Efficient GAN)の アルゴリズムなどの詳細について述べる。5章では4章で述べた手法を用いて波形異常を検知するた めのモデルを実際に構築し、その性能を最大化するための調整と評価をする。6章では5章で構築し た各異常検知手法を実際のデータに適用し、得られた結果を比較する。7章ではまとめと今後につい て述べる。

## 第2章

# LHC-ATLAS 実験

LHC (Large Hadron Collider) は陽子を数 TeV (設計値 7 TeV、2015-2018の Run2 では 6.5 TeV) まで加速し衝突させ、検出器によってその事象を検出し記録する。LHC には 8 つの衝突点があり、 そのうち Point 1 と呼ばれる地点に設置された ATLAS (A Toroidal LHC ApparatuS) では主に標 準模型粒子の性質解明や標準模型を超えた物理の探索を目的としている。本研究は ATLAS 実験で 行われるアップグレードに関連するため、この章で詳しく説明する。

## 2.1 LHC

LHC は図 2.1 に示すような CERN が保有する大型円形粒子加速器である。ジュネーヴ郊外の地 下約 100 m に建設され、その周長は約 27 km である。イオン源から得られた陽子を複数の前段加速 器を用いて加速し、最終的に LHC に入射して 6.5 TeV まで加速して重心系エネルギー 13 TeV で衝 突させる。陽子はバンチと呼ばれる集団でまとめて加速され、バンチ内には陽子が 1.2 × 10<sup>11</sup> 個程度 詰められている。また、バンチは LHC 円周上に 2800 個ほど存在し、トレイン構造と呼ばれる各バ ンチが間隔を開けて加速されている。この間隔はおよそ 25 ns (40 MHz) である。

陽子を使う利点として、電荷あたりの質量が大きいため、磁場中で曲げられた際のエネルギー損失 が小さいことが挙げられる。欠点は陽子が素粒子ではなく、up quark 2 つ、down quark 1 つ、それ を繋ぎ止めるグルーオンから構成されていることに由来する粒子が大量に発生し、そのほとんどが興 味のない事象<sup>\*1</sup>になることである。そのため、興味のある事象の選別方法が非常に重要となる。

## 2.2 ATLAS 検出器

ATLAS 検出器は図 2.2 に示すような LHC の Point1 衝突点に設置された長さ 44 m、直径 25 m、 重さ 7000 トンの検出器である。標準模型を超えた物理の探索や、既に発見された標準模型粒子の性 質を精密測定することを目的としている。内側から順に荷電粒子の飛跡を再構成する内部飛跡検出 器、電子や光子、ハドロンなどのエネルギーを測定するカロリメータ、ミューオンの運動量を測定す るミューオンスペクトロメータで構成される。

<sup>\*1</sup> 興味のある事象(新粒子や精密測定を行う素粒子)由来の信号に対して、それとは関係のない低エネルギーのハドロン などの信号



図 2.1 LHC の全体図 [3]。ATLAS が設置されている点を Point 1 と呼び、ALICE、LHCb が 設置されている点をそれぞれ Point 2、Point 8 と呼ぶ。

ATLAS で用いられる座標系はデカルト座標系でビーム方向を z 軸、天頂方向を y 軸、LHC 中心方向を x 軸として定義する。極座標系では方位角  $\phi$  はビーム軸周り、天頂角  $\theta$  はビーム軸からの角度である。また ATLAS で用いられる座標系では天頂角  $\theta$  の代わりに擬ラピディティ  $\eta = -\ln \tan(\frac{\theta}{2})$ がよく用いられる。



z軸を基準に、正方向の半分を A-side、負方向の半分を C-side と呼ぶ。

図 2.2 ATLAS 検出器の全体図と用いられる座標系 [5]。

### 2.2.1 内部飛跡検出器

内部飛跡検出器は荷電粒子の飛跡・運動量の測定、衝突点の再構成などを行う検出器である。図 2.3 に示すように内側から Pixel、SCT、TRT の3つの検出器で構成される。また、周りをソレノイ ドコイルで覆われており、2 T の磁場がかけられている。

#### シリコンピクセル検出器(Pixel)

シリコンピクセル検出器は衝突点に一番近い半導体検出器である。 $50 \times 400 \ \mu m^2$ のピクセルを並べたものを 4 層重ねた構造になっており、この構造で粒子が通過した部分を観測する。位置分解能はおよそ  $14 \times 115 \ \mu m^2$  である。

### シリコンマイクロストリップ検出器(SCT)

シリコンマイクロストリップ検出器(SCT: Semi Conductor Tracker)はストリップ型の半導体 検出器である。長さ 12.8 cm の紐状のシリコン検出器を間隔 80 μm で並べ、40 mrad ずらして重ね ることで二次元的な読み出しを可能にする。これをバレル部で 4 層、エンドキャップでは 9 層重ねた 構造となっている。位置分解能はおよそレイヤー 1 枚で 17 μm である。

### 遷移放射検出器(TRT)

遷移放射検出器(TRT: Transition Radiation Tracker) はストロー型のチューブを束ねたガス検 出器である。チューブは直径4mm、長さ1.4mで、アルゴンガスが注入されている。飛跡の観測だ けではなく、イオン化したガスの遷移輻射により電子とそれ以外の荷電粒子の識別をする役割も兼ね ている。



図 2.3 内部飛跡検出器の全体図 [3]。

### 2.2.2 カロリメータ

カロリメータはミューオンとニュートリノ以外の粒子のエネルギー測定を行う検出器である。 ATLAS ではサンプリングカロリメータを採用しており、CMS などに採用されている全吸収型より も位置を細かく読み出せることが特徴である。検出する粒子のエネルギーをカロリメータで全て落と すために十分な大きさを確保する必要があり、その大きさは *z* 軸方向に 12 m、直径は 8.5 m である。

#### 液体アルゴンカロリメータ

ATLAS のカロリメータは吸収層が銅、鉛、タングステンで、検出層が液体アルゴンのサンプリン グカロリメータである。検出層に用いられる液体アルゴンは放射線耐性が高いこと、エネルギー分解 性能や線形性がいいこと、比較的安価であることから採用された。臨界エネルギー以上の電子または 光子が入射すると吸収層で電磁シャワーを起こし、検出層のアルゴン原子を電離して発生する電子を 読み出すことで検出される。放射長 X<sub>0</sub> に対して 22X<sub>0</sub> の長さが確保されている。

覆っている領域によって、図 2.4 及び表 2.1 のように ElectroMagnetic Barrel (EMB)、Electro-Magnetic End-Cap (EMEC)、Hadron End-Cap (HEC)、Forward Calorimeter (FCal) の 4 つに 大別され、吸収層の素材や検出目的の粒子が異なる。

本研究の主題となる検出器である。



図 2.4 カロリメータの全体図 [3]。内側の黄土色の部分が液体アルゴンカロリメータ、外側がタ イルカロリメータである。

**■EMB** EMB は吸収層が鉛で、 $0 < |\eta| < 1.5$ の領域を覆う電磁カロリメータである。図 2.5 のように  $\phi$  方向に折れ曲がるようなアコーディオン構造になっており、 $\phi$  方向への不感領域をなくしている。

名称	領域	吸収層の素材	種別
EMB	$0 <  \eta  < 1.5$	鉛	電磁カロリメータ
EMEC	$1.4 <  \eta  < 3.2$	鉛	電磁カロリメータ
HEC	$1.7 <  \eta  < 3.2$	銅	ハドロンカロリメータ
FCal(1層目)	2.2 <  m  < 4.0	銅	電磁カロリメータ
FCal(2、3層目)	$5.2 <  \eta  < 4.9$	タングステン	ハドロンカロリメータ

表 2.1 液体アルゴンカロリメータの領域ごとの名称、吸収層の素材、種別



図 2.5 EMB のアコーディオン構造を z 方向から見たものの一部 [6]。

■EMEC EMEC は EMB 吸収層が鉛で、 $1.4 < |\eta| < 3.2$ の領域を覆う電磁カロリメータである。 EMEC と同様にアコーディオン構造を採用しているが、折れ曲がる方向が r 方向になっている。

■HEC HEC は吸収層が銅で、 $1.7 < |\eta| < 3.2$ の領域を覆うハドロンカロリメータである。図 2.6 上部のように z 軸方向に 2 層になっており、それぞれ図 2.7 のような平板状の銅を重ねた楔型のモ ジュールを 32 個並べた構造になっている。

■FCal FCalは1.7 < |η| < 3.2 の領域を覆っており、図 2.6 のように z 軸方向に 3 層構造になって いる。衝突点に近い方から 1 層目は検出層が銅の電磁カロリメータ、2 ・ 3 層目は検出層がタングス テンのハドロンカロリメータである。図 2.8 銅(タングステン)に開けた 5 mm ほどの空洞に銅(タ ングステン)でできた直径 4.5 mm の金属棒を差込み、その間を液体アルゴンで満たしたストロー構 造になっている。



(a) FCal のビーム軸方向からの断面図

(b) FCal のストロー構造

図 2.8 FCal の構造 [6]。

### タイルカロリメータ

タイルカロリメータは吸収層が鉄、検出層がプラスチックシンチレータで構成されるサンプリング 型のハドロンカロリメータである。電磁カロリメータの外側の  $|\eta| \leq 1.7$  の領域に設置され、荷電パ イオンなどのハドロンを検出する。厚さは吸収長  $\lambda \sim 17$  cm に対して 11 $\lambda$  ほどである。

### 2.2.3 ミューオンスペクトロメータ

ミューオンスペクトロメータは図 2.9 に示すようなミューオンの運動量を測定するための検出 器である。ミューオンは他の検出器をすり抜けるため ATLAS 検出器の一番外側に設置されてい る。4 つの検出器から構成されている。領域毎に Station という単位で分類されており、バレル部 は Barrel Station、エンドキャップは内側から Endcap Innner Station、Endcap Middle Station、 Endcap Outer Station で構成されている。エンドキャップ部の Station はそれぞれ Small Wheel、 Big Wheel、Outer Wheel と呼ばれる場合もある。

Barrel Station 及び Endcap Innner Station がそれぞれトロイドマグネットで覆われており、 ミューオンの飛跡を曲げることにより運動量を測定する。

### Monitored Drift Tube (MDT)

MDT は精密測定用のワイヤーチェンバーであり、Barrel Station、Endcap Middle Station の  $|\eta| \leq 2.0$ の領域に設置されている。チェンバーは複数のチューブを3層で束ねた構造を2つ重ねて 構成される。それぞれのチューブは長さ1~6 m、直径30 mm のカソードチューブとその中心軸に 通された直径50  $\mu$ m のアノードワイヤーで構成され、内部にアルゴンと二酸化炭素の混合気体が3 bar で封入されている。位置分解能は80  $\mu$ m 程度である。

### Cathode Strip Chamber (CSC)

CSC は精密測定用の MWPC (Multi Wire Proportional Chamber) であり、Innner Station の 2.0  $\leq |\eta| \leq 2.7$  の領域に設置されている。チェンバー内は直径 30  $\mu$ m のワイヤーがカソードスト リップから 2.5 mm の場所に 2.5 mm 間隔で配置され、内部にアルゴンと二酸化炭素の混合気体が封 入されている。位置分解能は 60  $\mu$ m 程度である。

### Radiative Plate Chamber (RPC)

RPC はバレルにおけるトリガー用のガスチェンバーであり、 $|\eta| \leq 1.05$  の領域に設置されている。 チェンバーは 2 mm のガス層を平面電極で挟んだものを 3 層重ねて構成される。 $\eta, \phi$  方向の読み出 しが可能であり、 $z, \phi$  方向共に 10 mm の位置分解能を持つ。時間分解能は 1.5 ns である。

### Thin Gap Chamber (TGC)

TGC はエンドキャップにおけるトリガー用の MWPC であり、Inner Station に 1 層、Middle Station に 3 層設置され、 $1.05 \leq |\eta| \leq 2.7$ の領域を覆っている。ガス層は 2.8 mm、ワイヤー間隔は 1.8 mm で、内部に二酸化炭素とペンタンの混合気体が封入されている。r 方向及び  $\phi$  方向の読み出 しが可能であり、それぞれ 2~6 mm、3~7 mm の位置分解能を持つ。時間分解能は 4 ns である。

### 2.2.4 トリガーシステム

ATLAS のトリガーシステムはハードウェア上で粗く選別する Level1 トリガー、ソフトウェア上 でさらに細かく選別する High Level トリガーの 2 段階で構成される。

### Level1 トリガー

Level1 トリガーはカロリメータの情報によって判別を行う Level-1 Calo とミューオン検出器の情報によって判別を行う Level-1 Muon の情報を使用したハードウェア上で処理する初段のトリガーである。衝突後 2.5 µs 以内に事象を 100 kHz ほどまで選別し、後段の High Level トリガーに送られる。



図 2.9 ミューオンスペクトロメータの全体図 [3]。

High Level トリガー

High Level トリガーは Level1 トリガーで選別された事象を、ソフトウェアベースでさらに細かく 選別するトリガーである。カロリメータとミューオン検出器に合わせて飛跡検出器の情報も使用し、 550 ms で1 kHz ほどのレートまで落とし、このトリガーを通った事象がストレージに記録される。

## 2.3 LHC アップグレード計画

LHC のアップグレード計画予定表を図 2.10 に示す。LHC は 2015 年から Run2 を開始し、重心系 エネルギー 13 TeV、最大瞬間ルミノシティ 2 × 10<sup>34</sup> cm<sup>-2</sup>s<sup>-1</sup> で運転した後、2018 年冬からシャッ トダウン期間 (LS2) に入った。積算ルミノシティは約 150 fb<sup>-1</sup> であった。Run3 は重心系エネル ギー 13 TeV<sup>\*2</sup>、最大瞬間ルミノシティ 3 × 10<sup>34</sup> cm<sup>-2</sup>s<sup>-1</sup> を目標として設計され、2021 年 9 月末か らテストビーム、2022 年 3 月の始めから本格的な運転を開始し、2024 年冬までに積算ルミノシティ 約 200 fb<sup>-1</sup> を取得予定である。

その後、2027 年から始まる HL-LHC (High Luminosity LHC) と呼ばれる高輝度での運転に向け て 2025 年から再びシャットダウン期間 (LS3) に入る。HL-LHC は重心系エネルギー 14 TeV、瞬 間ルミノシティ 5×10<sup>34</sup> cm<sup>-2</sup>s<sup>-1</sup> を目標として設計され、積算ルミノシティ 300 fb<sup>-1</sup>/year、合計 3000 fb<sup>-1</sup> を取得目標としている。ルミノシティの向上に伴い、エネルギーや横運動量の閾値を下げ ないままにトリガーパフォーマンスを維持することが一つの大きな課題となっている。ATLAS 検出 器においては、LS2 で内部飛跡検出器とカロリメータは読み出しの強化、ミューオンスペクトロメー

<sup>\*2 2023</sup> 年、もしくは 2024 年に 14 TeV に移行する計画も存在する。

タは Small Wheel の入れ替えを行い、LS3 では TRT, SCT, Pixel の入れ替えや、ミューオンのトリ ガー手法の変更が行われる予定である。

	LHC /	HL-LH	IC Plan			LARGE	HADRON COLLIDER
			LHC			HL-L	
Run 1		R	un 2		Run 3		Run 4 - 5
7 TeV 8 TeV	LS1 splice consolidation button collimators R2E project 2013 2014	13 TeV EY	ETS cryolimit interaction regions 2017 2018	LS2 Diodes Consolidation LIU Installation 11 T dipole coll. Civil Eng. P1-P5 2019 2020 2021	13 - 14 TeV	LS3 HL-LHC installation 2025 2026 2027	14 TeV energy 5 to 7.5 x nominal Lumi 2040
75% nominal Lumi	experiment beam pipes	nominal Lumi	2 x nominal Lumi	ATLAS - CMS upgrade phase 1 ALICE - LHCb upgrade	radiation damage 2 x nominal Lumi	ATLAS - CMS HL upgrade	
30 fb <sup>-1</sup>			190 fb <sup>-1</sup>		350 fb <sup>-1</sup>		integrated 3000 fb-1 luminosity 4000 (ultimate)
HL-LHC TECHNICA DESIC	AL EQUIPMENT:	3	PROTOTYPES	CO	NSTRUCTION	INSTALLATION & COMM.	PHYSICS
	HL-LHC CIVIL ENGINEERING:						
		DEE	INITION	EXCAVATION / BUILDING	GS		

図 2.10 LHC のアップグレード計画 [7]。

## 第3章

# 液体アルゴンカロリメータアップグ レード

本章では、研究の主題となる液体アルゴンカロリメータの Run3 以降の運用に向けたアップグレー ド内容、及び検出器からの信号とその処理について述べる。

### 3.1 検出器からの信号

臨界エネルギー以上のエネルギーをもった電子が液体アルゴンカロリメータに入射すると、制動 放射により光子が放出され、光子は吸収層の物質と相互作用をすることで電子と陽電子を対生成す る。これを繰り返すことにより電磁シャワーが発生し、さらに電磁シャワーにより発生した電子や陽 電子が検出層のアルゴンをイオン化することで電離電子を発生させる。図 3.1 のように、検出層は吸 収層を覆う接地したステンレスと銅製の電極に挟まれており、その間に印加された 2 kV ほどの電圧 により電離電子が移動することにより電圧差が発生し、これを信号として検知する。あるひとつの 電離電子が作る信号は、図 3.2 のように時間に対して矩形の電圧を発生させるため、複数の矩形波が 重なることで三角波として信号が得られる。液体アルゴン中における電子のドリフト時間はおよそ 5 mm/µs であり、検出層の幅は 2~3 mm 程度であるため、この三角波の長さは約 450 ns になる。 また、波高は発生した電子数に比例するため、波高を知ることができればエネルギーを推定すること ができる。

検出器から得られた三角波はアンプで増幅された後、CR – (RC)<sup>2</sup> 回路でバイポーラパルスに変換 される。バイポーラパルスの波高は三角波の波高に比例し、積分すると 0 になる性質を持つ。バイ ポーラパルスは図 3.3 に示すようにおよそ 600 ns ほどの幅を持ち、これは BC 間隔の 25 ns よりも 長いため複数のパルスが重なり合うが、その性質により低エネルギーのパルスは互いに打ち消し合っ てベースラインを一定に保つことができる。

## 3.2 アップグレード計画

Run2 までのトリガー用の読み出しセルは図 3.4 の左図のような Trigger Tower と呼ばれる構造を 用いており、その領域で足し上げた信号をアナログデータのままバックエンドへ送り、デジタイズし



図 3.1 EMB のアコーディオン構造を z 方向から見たものの一部 [8]。

た後にエネルギーを計算し、それに閾値を設けることでトリガーとしていた。しかし Run3 以降はル ミノシティが増加するため、トリガーを通り抜ける事象が増加し要請されるトリガーレート(電子や 光子の事象判別は 20 kHz で行うことが要請されている)を維持できなくなることが予想される。従 来方法をそのまま利用した場合、要請されるトリガーレートを維持するためには閾値を 34 GeV ほど まで上げる必要があるが、この場合 Z、W などの崩壊から観測される電子などの興味ある事象も排 除してしまう。従来のエネルギー閾値を維持したままトリガーレートを維持するため、Run3 以降は Trigger Tower よりも細かく分割された Super Cell と呼ばれる新しい読み出し構造を導入した。ま た、Super Cell の導入に伴い、読み出しエレクトロニクスも一新される。

### 3.2.1 Super Cell

Super Cell はシャワーの形状を識別するため Trigger Tower を動径方向 4 層に分割し、1・ 2 層目を  $\eta$  方向に 4 分割した 10 倍細かい構造になっている。電子のモリエール半径  $\Delta R \equiv \sqrt{(\Delta \eta)^2 + (\Delta \phi)^2}$  はおよそ 0.08、ジェットの半径は 0.8 ほどであり、従来の Trigger Tower の分割 単位  $\Delta \eta \times \Delta \phi = 0.1 \times 0.1$  ではシャワーの形状を識別できなかった。しかしこの Super Cell の分 割単位は  $\Delta \eta \times \Delta \phi = 0.025 \times 0.1$  のサイズであり、シャワーの形状をより正確に測ることが可能と なる。

表 3.1 に従来構造と新しく導入される構造の比較とその特徴を示す。



図 3.2 三角波の生成原理 [9]。複数の矩形 波が重なり合うことで三角波が構成される。



図 3.3 検出器から得られる三角波と、変換 後のバイポーラパルス [8]。三角波は規格化 されている。

表 3.1	Elementary (	Cell,	Trigger	Tower,	Super	$\operatorname{Cell}$	の分割単位の比較
-------	--------------	-------	---------	--------	-------	-----------------------	----------

layer		Elementary Cell	Trigger Tower		Super Cell		Dediction longth
		$\Delta\eta\times\Delta\phi$	$n_\eta  imes n_\phi$	$\Delta\eta\times\Delta\phi$	$n_\eta  imes n_\phi$	$\Delta\eta\times\Delta\phi$	Radiation length
0	presampler	0.025  imes 0.1	$4 \times 1$		$4 \times 1$	0.1  imes 0.1	$1.7X_0$
1	front	$0.003125 \times 0.1$	$32 \times 1$		$8 \times 1$	$0.025 \times 0.1$	$4.3X_0$
2	middle	$0.025 \times 0.025$	$4 \times 4$	$0.1 \times 0.1$	$1 \times 4$	$0.025\times0.1$	$16X_0$
3	back	0.05  imes 0.025	$2 \times 4$		$2 \times 4$	0.1  imes 0.1	$2.0X_0$

新しい読み出し構造の下では、形状を識別するため以下に示す3つの変数が導入される。ここ で $E_{T,\Delta\eta\times\Delta\phi=i\times j}^{(n)}$ は n 層目の Layer において一番エネルギーを落としたセルを中心にした範囲  $\Delta\eta\times\Delta\phi=i\times j$ における横エネルギーを表す。

$$R_{\eta} = \frac{E_{T,\Delta\eta\times\Delta\phi=0.075\times0.2}^{(2)}}{E_{T,\Delta\eta\times\Delta\phi=0.175\times0.2}^{(2)}}$$
(3.1)  

$$w_{\eta,2} = \sqrt{\frac{\sum(E_{T}^{(2)}\times\eta^{2})_{\Delta\eta\times\Delta\phi=0.075\times0.2}}{E_{T,\Delta\eta\times\Delta\phi=0.075\times0.2}^{(2)}} - \left(\frac{\sum(E_{T}^{(2)}\times\eta^{2})_{\Delta\eta\times\Delta\phi=0.075\times0.2}}{E_{T,\Delta\eta\times\Delta\phi=0.075\times0.2}^{(2)}}\right)^{2}}$$
(3.2)  

$$f_{3} = \frac{E_{T,\Delta\eta\times\Delta\phi=0.075\times0.2}^{(3)}}{E_{T,\Delta\eta\times\Delta\phi=0.075\times0.2}^{(1)} + E_{T,\Delta\eta\times\Delta\phi=0.075\times0.2}^{(2)} + E_{T,\Delta\eta\times\Delta\phi=0.025\times0.2}^{(3)}}$$
(3.3)

 $R_{\eta}$ は第2層においてシャワーがどれだけの範囲でエネルギーを落としたかを表す変数である。分子は $\Delta \eta \times \Delta \phi = 0.075 \times 0.2$  (Super Cell 換算で 3 × 2)の範囲、分母は $\Delta \eta \times \Delta \phi = 0.175 \times 0.2$  (Super Cell 換算で 7 × 2)の範囲でのエネルギーである。電子のモリエール半径は 0.08 程度のため、図 3.5(a)のように 1 付近にピークを持つ。 $w_{\eta,2}$ は第2層における $\eta$ 方向のエネルギーの分散で



図 3.4 従来の Trigger Tower と新しく導入される Super Cell に  $E_T = 70$  GeV の電子がそれ ぞれ入射した場合の振る舞い [6]。

あり、 $\sum は \Delta \eta \times \Delta \phi = 0.075 \times 0.2$  の範囲の Super Cell に対して総和を取っている。先ほどと同様の理由で、3.5(b) のように電子の方が幅が狭いピークを持つ。 $f_3$  は第3層までにどれだけエネルギーを落としたかを示した変数である。表 3.1 に示した放射長から、電子は第2層までにエネルギーを落とすことがわかるので、図 3.5(c) のように電子は0付近にピークを持つ。これらの変数により、ハドロンと由来のジェットと電子・光子の識別能力が向上し、エネルギー閾値をあげることなくトリガーレートを保つことができる。これらの変数を導入した時の電子収集効率のシミュレーション結果を図 3.6 に示す。新しく導入される形状識別変数にも閾値を設けることで、およそ 21 GeV 程度のエネルギー閾値でも高い電子収集効率を維持することが可能となる。



(a)  $R_{\eta}$  (b)  $w_{\eta,2}$ 

(c)  $f_3$ 

図 3.5 電子(黒)とジェット(赤)の変数分布の比較 [8]。重心系エネルギー 14 TeV、パイル アップ 80 を仮定したシミュレーション結果。

### 3.2.2 読み出しエレクトロニクス

Super Cell の導入に伴い、エレクトロニクスもアップグレードされる。図 3.7 に、赤色の枠や矢印 で示した部分がアップグレードに伴い新しく導入されるボード及び読み出し経路である。Run2 まで 用いられていた既存の読み出し経路も引き続き維持される。フロントエンドボードはバレル及びエ ンドキャップの端を取り囲むように配置されたフロントエンドクレート内に設置され、バックエン



図 3.6 重心エネルギー 14 TeV、パイルアップ 80 のときの Z → ee の崩壊時の電子収集効率のシ ミュレーション結果 [10]。

ドボードはフロントエンドからケーブル長で約 70 m 離れた USA15 と呼ばれる地点に設置されている。以下に読み出しに用いる主なボードについて記述する。

### New Layer Sum Board (LSB)

LSB は Super Cell 信号を生成するため、検出器から得られた信号を足し合わせ後段の LTDB に送 る、Run3 から新しく導入されるフロントエンドボードの l つである。従来は  $\Delta \eta \times \Delta \phi = 0.1 \times 0.1$ の範囲で信号を足し上げていたのに対し、新しく導入される LSB は Super Cell の Front layer 及び Middle Layer で細かくなった読み出しセルに合わせた、より細かい範囲での足し上げが行われる。

### LAr Trigger Digitizer Board (LTDB)

LTDB は前段の LSB から送られてきたアナログ信号をデジタイズし、12 bit、40 MHz でサンプ リングして後段の LDPB に送る、Run3 から新しく導入されるフロントエンドボードの1つである。 各 LTDB は合計 124 枚導入され、1 枚あたり最大 320 ch の Super Cell 信号を処理する。表 3.2 に 各領域で1 枚の LTDB が扱うチャンネル数と導入される LTDB の枚数を示す。

また、Run2の際に用いられていた従来の読み出し経路を維持するため、Layer 毎に細かく分けられた信号をデジタイズする前に足し上げ、Trigger Tower Board に送信する役割も担っている。

### LAr Digital Processing Board (LDPB)

LDPB は前段の LTDB から送られてきた 12 bit デジタルデータからエネルギーを計算し L1 Calo に送信する、Run3 から新しく導入されるバックエンドボードである。全部で 31 枚導入され、各ボー ドに 4 枚の AMC (Advanced Mezzanine Card) が搭載されている。

■LATOME ボード LDPB には図 3.8 に示すような LATOME (LAr Trigger Processing Mezzanine) ボードと呼ばれる AMC が搭載され、エネルギー及びタイミングを計算する役割を担う。1 枚 あたり 96 本の光ファイバーが繋がれており、そのうち 40 本で信号を受信し(5.12 Gps/本、合計約



図 3.7 読み出しエレクトロニクスの全体図 [8]。

200 Gbps)、48 本で FEX に処理結果を送信する(11.2 Gbps/本、合計約 450 Gbps)。

LATOME ボードにインストールされるファームウェアは図 3.9 で示すように複数のブロック で構成され、それぞれ ADC データを抜き出す Istage (Input stage)、ADC データを並び替える Remap (Configurable remapping)、エネルギー及びタイミング算出を行う User Code、エネルギー クラスタを作成する Osum (Output summing)、Firmware にアクセスするための IP bus (IP Bus controller)、データを抜き出すための Mon (Monitoring) という役割を担っている。そのうち User Code の開発は東大グループが担っている。

### Trigger Feature Extractor (FEX)

FEX は AMC から送られてくる Super Cell で観測された横エネルギーから粒子の特徴を識別する。電子・光子を同定する eFEX、ジェットや消失横運動量を同定する jFEX、半径の大きなジェットを同定する gFEX の 3 つのサブモジュールで構成されている。

表 3.2 各領域で1枚の LTDB が扱うチャンネル数と導入される LTDB の枚数 [8]。通常 LTDB は各クレートに1枚ずつ挿入されるが、EMEC Special、FCal では2枚挿入されるため、添字 0, 1をつけて区別をしている。

LTDB の種別	チャンネル数	LTDB の枚数
EMB	290	64
EMEC Std	312	32
EMEC Spc 0	240	8
EMEC Spc 1	160	8
HEC	192	8
FCal Spc 0	192	2
FCal Spc 1	192	2
Total		124



### Ftont End Link Interface eXchange (FELIX)

FELIX はフロントエンドボードと TDAQ を結ぶインターフェースとして働く、バックエンドボードの一つである。主な役割として、LTDB のコンフィギュレーション、TTC 信号の分配、モニタリ ングデータの読み出しなどがある。

## 3.3 現在のアップグレード状況

現在液体アルゴンカロリメータは Run3 に向けてインストール作業を行っている。LTDB のイン ストール状況を図 3.10 に示す。ハードウェアに関して、LTDB の Barrel A-side へのインストール が完了、C-side もほぼ完了しており、Endcap などの残り部分は 2021 年 2 月にインストールが完了 する予定である。LDPB は USA15 への設置が完了しており、LTDB のインストールが完了次第接 続チェックが行われる予定である。

また LATOME ソフトウェアに関しては、User code 等は正しく機能しているものの、タイミング 計算や、Run 中に実際にデータを読み出すための Read out が設計通りの振る舞いをするための調整 を行っている最中である。本論文では、インストールされた LTDB と LDPB を用いて取得したデー タを使って研究を行った。データの詳細は5章及び6章で述べる。



(c) Endcap A-side

(d) Endcap C-side

図 3.10 2021 年 1 月 7 日時点でのフロントエンドボードのインストール状況 [13]。青く示された箇所がフロントエンドボードのインストールが完了した箇所。

## 第4章

# 異常検知手法

液体アルゴンカロリーメータのトリガーシステムはフロントエンドからバックエンドに 25 Tbps でデータを転送し、バックエンドでプロセスされたデータを L1 トリガーにで転送する。膨大なデー タを取得転送するシステムを長期的に運用するにあたって、その安定性の担保は重要な課題である。 液体アルゴンカロリメータは、前章で述べたとおりアップグレードの真っ只中であるため、システム 内の予期せぬことが原因でパルス波形が通常と異なる形で記録される場合がある。エネルギーやタイ ミング計算はパルスの波形を用いて行っているため、こういった事象を検知し、対応する必要があ る。このような予期しないパルス形状の問題を「異常」と呼び、それを検知するシステムを開発、検 証した。このシステムはバックエンドから記録されたモニタリング用のデータをオフラインで行うシ ステムである。本章では液体アルゴンカロリメータで発生する異常と、それを検知するための手法に ついての詳細を述べる。

## 4.1 液体アルゴンカロリメータにおける波形異常

第3章で述べた通り、液体アルゴンカロリメータで検出された信号はフロントエンドボードでバイ ポーラー波形に整形されたのちにデジタイズされ、バックエンドボードでエネルギー及びタイミング 計算を行う。この計算は正しいチャンネルから正しい波形のデータが送られてくることを前提とし て行われるが、データを転送する際や、ファームウェアのバグによって正常なデータを歪めてしま う場合がある。現在確認されている異常の代表的なものとして Bit Flip Error が存在する。Bit Flip Error は、図 4.1 のようにデジタイズされた信号の値を示す Bit の集まりの一部がシリアライザーや トランシーバーの設定や、位相ズレ、振幅の不足などにより反転し、波形が歪む異常である。液体ア ルゴンカロリメータにおけるトリガーシステムは波形からエネルギーとタイミングを計算するため、 波形が歪むとこれらの計算が正しく行えず、設計通りのトリガーが行われなくなる。

異常の発生する頻度は BER<  $10^{-15}$  に抑えるように設計されており、 $10^{15}$  回のビット転送に 対して 1 回のエラーが生じる。LATOME が受信するデータは 25 Tbps であるため、12 時間の Run では、およそ  $10^3$  bit のエラーが発生するが、データ転送時の Bit Flip の有無は CRC (Cyclic Redundancy Check) <sup>\*1</sup>によって確認ができる。しかし、現在運用している LATOME では CRC に

<sup>\*1</sup> 巡回冗長検査とも呼ぶ。データがシリアライズされる際に誤り判定を行うためのデータを付与し、受信した際にその

よって誤りがないことが確認されているにもかかわらず、波形異常が検出されている。この原因は現 在判明していないものの、CRC チェックの前後のフロントエンドボードや、LATOME Firmware に起因すると考えられている。



図 4.1 (a)BitFlip を起こす前のデジタイズされたパルスと (b)BitFlip を起こしたパルス。7 サンプル目の値が 250 付近から 0 付近まで落ちている。

## 4.2 異常検知手法の選定

異常検知に際して、取得されたデータの数に対して異常を示すデータは非常に少なく、学習に用い られるほど大量に集めるのは困難である。また、既知の異常を学習させる教師あり学習\*<sup>2</sup>では未知の 異常に対応できない。そのため今回は「教師なし学習」\*<sup>3</sup>の手法を用いて異常検知をする。教師なし の異常検知は正常なデータを学習し、その分布に適合しないものを異常として判別する。本研究では 従来用いられていたカイニ乗法、機械学習による one-class SVM、深層学習による Efficient GAN を異常検知手法として用いた。

## 4.3 カイニ乗による異常検知

異常を分類するための手法を訓練するデータが正規分布に従い、十分な数が用意できる場合、カイ 二乗に従う関数によって異常値 (Anomaly score)<sup>\*4</sup>を測ることができる。この方法をホテリングの *T*<sup>2</sup> 法とよび、本研究の異常検知手法の一つとして採用した。

データを用いて整合性を検証して誤りがあるかどうかを判別する。

<sup>\*2</sup> 訓練データに予め正解となるラベルをつけ、出力がその正解に近づいていくように訓練する方法。

<sup>\*&</sup>lt;sup>3</sup> 教師あり学習とは違い、正解となるラベルを用いずに学習器を訓練する方法。特徴量の抽出など、明確に出力が決まっていない場合に用いられる。

<sup>\*4</sup> 正常なデータが従う分布からどれくらい離れているかを示す指標。

### 4.3.1 ホテリングの *T*<sup>2</sup> 法

ホテリングの T<sup>2</sup> 法 [14] とは、ある N 件の d 次元のデータ x が正規分布

$$p(\boldsymbol{x}|\boldsymbol{\mu},\boldsymbol{\Sigma}) = \frac{|\boldsymbol{\Sigma}|^{-1/2}}{(2\pi)^{d/2}} \exp\left[-\frac{1}{2}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{\mu})^T \boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{\mu})\right]$$
(4.1)

に従うとき、異常値がカイ二乗分布に従う性質を用いた異常判別の手法である。μ、Σ は最尤推定で 求めることができ、

$$\tilde{\boldsymbol{\mu}} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} \boldsymbol{x}^{(i)} \tag{4.2}$$

$$\tilde{\boldsymbol{\Sigma}} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} (\boldsymbol{x}^{(i)} - \tilde{\boldsymbol{\mu}}) (\boldsymbol{x}^{(i)} - \tilde{\boldsymbol{\mu}})^{T}$$
(4.3)

となる。 $\tilde{\mu}$  は平均、 $\tilde{\Sigma}$  は共分散行列である。以降、 $\mu$ 、 $\Sigma$  は最尤推定値  $\tilde{\mu}$ 、 $\tilde{\Sigma}$  を用いることとする。 異常値は正常なデータが属する分布からどれくらい離れているかで測ることができ、その指標として 負の対数尤度を用いる。負の対数尤度は

$$\frac{1}{2} (\boldsymbol{x} - \tilde{\boldsymbol{\mu}})^T \tilde{\boldsymbol{\Sigma}}^{-1} (\boldsymbol{x} - \tilde{\boldsymbol{\mu}}) + \log \frac{|\tilde{\boldsymbol{\Sigma}}|^{-1/2}}{(2\pi)^{d/2}}$$
(4.4)

となり、データ x に依存しない項を無視すると、

$$a(\boldsymbol{x}) = (\boldsymbol{x} - \tilde{\boldsymbol{\mu}})^T \tilde{\boldsymbol{\Sigma}}^{-1} (\boldsymbol{x} - \tilde{\boldsymbol{\mu}})$$
(4.5)

となる。この式 4.5 を異常度合を表すスコアとして用い、あらかじめ定めた閾値 (threshold) を超 えた時にそのデータを異常と判別する。データの次元 d に対してデータ数が十分多い時、この異常値 a(x) は自由度 d、スケール 1 のカイ二乗分布に従う。式 4.5 で計算される異常スコアがカイ二乗分 布に従う例を図 4.2 に示す。この例で閾値は  $3\sigma^{*5}$ に設定されている。

### 4.4 SVM による異常検知

SVM は回帰や分類に用いられる機械学習手法であり、本研究では特に異常検知に特化した one-class SVM と呼ばれる教師なし機械学習手法を用いた。

### 4.4.1 SVM (Support Vector Machine)

SVM は与えられたデータに対してクラス識別を行う分類器である [15] [16]。予めラベル付けされ た学習データを用いてクラスの分類境界を決めることで、未知のデータに対してクラスの類推が可能

<sup>\*5</sup> σ<sup>2</sup> はデータが従う正規分布の分散。平均値から± 3σ の範囲にデータの 99.7 %が含まれ、この閾値を超える事象は非 常に稀である。つまり、異常値が閾値を超えた事象は偶然起きるものとは考えにくく、異常として判断される。この閾 値はカイニ乗分布の積分値が 0.997 になる点に設定される。



図 4.2 32 次元正規分布に従う乱数の異常値のヒストグラム。青線で示された自由度 32 のカイニ 乗分布に従っていることがわかる。赤線で示された threshold を超えたデータがエラーと判別さ れる。

となる。その原理について、線形分離可能なデータと線形分離不可能なデータをそれぞれ例にあげて 解説する。

#### 線形分離可能なデータセット

今、ある d 次元のデータ  $x_i$  を N 件集めたデータセット  $\chi = \{x_1, x_2, \cdots, x_N\}$  を考える。これら のデータはそれぞれ 2 つのクラスに所属しており、d 次元空間において d-1 次元の超平面で線形分 離可能であるとする。この与えられたデータセットに対して、2 クラス分類を行うこと場合を考え る。このとき、分類境界  $f(x) = w^{\mathsf{T}}x + b = 0$  に対して、所属するクラスを示すラベルを

$$y_i = \begin{cases} +1 & (f(\boldsymbol{x}_i) > 0) \\ -1 & (f(\boldsymbol{x}_i) < 0) \end{cases}$$
(4.6)

で定める。分類境界を定める w, b は図 4.3(a) のように無数に存在するが、SVM ではこれをそれぞ れのクラスに属する要素が境界よりもなるべく遠いところに存在するように定める。分類境界面に一 番近い要素をサポートベクトルと呼び、サポートベクトルと分類境界面との距離をマージンと呼び、 それを最大化することをマージン最大化と呼ぶ。マージン最大化した際の分類境界、及びサポート ベクトルは図 4.3(b) のようになる。また、全ての要素を完全に分類できる場合のマージンをハード マージンと呼ぶ。マージンは  $\frac{1}{\|w\|}$  で表され、マージン最大化はこれを最大化することを考える。こ のとき、分類境界が存在するための条件は、全ての要素 i に対して  $y_i(w^Tx_i + b) > 1$  である。故に、 マージン最大化を実現する際に解くべき最適化問題は、上記の制約条件のもとで

$$\min_{\boldsymbol{w},b} \frac{1}{2} \|\boldsymbol{w}\|^2 \tag{4.7}$$
を解くことに帰着する。後の計算の便利のために分母と分子を入れ替え、<sup>1</sup>/<sub>2</sub>の係数がついている。解 くべき問題そのものは変わっていない。

#### 線形分離が不可能なデータセット

実際のデータはハードマージンによって分類できるものは少なく、ある程度の要素が境界を超える ことを許容するソフトマージンと呼ばれる境界によって分類されることがほとんどである。ソフト マージンは制約条件を非負定数 *ξi* を用いて

$$y_i(\boldsymbol{w}^{\mathsf{T}}\boldsymbol{x}_i+b) > 1-\xi_i \tag{4.8}$$

のように拡張された境界である。式 4.8 は右辺が1以下になること、つまり境界を超えることを許容 している。ξ<sub>i</sub> が大きくなるほど境界を超える要素が増え、誤分類が増えるため、最適化問題は出来る だけ ξ<sub>i</sub> を小さくすることも考慮に入れることとなる。この時の最適化問題は

$$\min_{\boldsymbol{w},b} \left[ \frac{1}{2} \| \boldsymbol{w} \|^2 + C \sum_{i=1}^N \xi_i \right]$$
(4.9)

s.t. 
$$y_i(\boldsymbol{w}^\mathsf{T}\boldsymbol{x}_i+b) > 1-\xi_i,$$
 (4.10)

$$\xi_i \ge 0 \tag{4.11}$$

と書き換えられる。ここで *C* 正則化定数と呼ばれ、人間が予め与えておくパラメータである。*C* が 小さければ  $\sum_{i=1}^{N} \xi_i$  が大きくなれる余地が増えるため、誤分類を許容するようになり、逆に *C* を大 きくすると  $\sum_{i=1}^{N} \xi_i$  が大きくなれる余地が減るため、誤分類を許容しなくなり、*C* → ∞ でハード マージンに一致する。

カーネルトリック

実際のデータは線形分離が不可能なデータであり、上記のソフトマージンを用いても線形境界では 誤分類をかなりの数許容することとなってしまう。しかし、データを高次元の特徴空間へ写像して線 形分離を行うことにより、実空間での複雑な分類境界を実現することが可能となる。その関数を  $\phi$ とすると、写像されたデータは  $\phi(x)$  となり、分類境界は  $f(x) = w^{\mathsf{T}}\phi(x) + b = 0$  となる。これは 前小節で用いた  $x \in \phi(x)$  に置き換えただけなので、解くべき最適化問題の形は変わらない。写像を 行う関数  $\phi$  の関数形を具体的に与えることも可能ではあるが、境界をマージン最大化で求める際に 行われる計算量が膨大になるため、カーネルトリック [17] と呼ばれる手法を用いて関数  $\phi$  の具体的 な関数形は決めずに計算される。

マージン最大化を実現する最適化問題を解く際に、双対問題と呼ばれる考えるべき問題と等価な扱いやすい別問題に置き換える。今、解くべき最適化問題は式 4.9 であり、それに対する双対問題は、

$$\max_{\alpha} \left[ -\frac{1}{2} \sum_{i,j} \alpha_i \alpha_j y_i y_j \boldsymbol{\phi}(\boldsymbol{x}_i)^T \boldsymbol{\phi}(\boldsymbol{x}_j) + \sum_i \alpha_i \right]$$
(4.12)

$$s.t.\sum_{i}\alpha_{i}y_{i} = 0, \qquad (4.13)$$

$$0 \le \alpha_i \le C \tag{4.14}$$

となる。この目的関数内に現れる内積  $\phi(\mathbf{x}_i)^T \phi(\mathbf{x}_j)$  をカーネル関数と呼ばれる関数  $K(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j)$  に 置き換えて計算する方法をカーネル法と呼ぶ。カーネル関数として RBF (Radius Basis Function) カーネルと呼ばれる

$$K(\boldsymbol{x_i}, \boldsymbol{x_j}) = \exp(-\gamma \|\boldsymbol{x_i} - \boldsymbol{x_j}\|^2)$$
(4.15)

がよく用いられる。RBF カーネルを用いた際の分類境界を図 4.3(c) に示す。

ここで解く最適化問題の導出やカーネルトリックの条件などの詳細については、付録 B を参照されたい。



図 4.3 線形分離可能な 2 組のデータに対する分類境界の決定方法の比較。(a) 複数ある分類境界 の例。緑、黒、黄色で示されているのが分類境界で、条件を指定しなければ分類境界は無数に存在 する。(b) マージンを最大化した分類境界。実線が分類境界、黒丸で囲われた要素がサポートベク トル(分類境界に一番近い要素)である。実線と破線の距離がマージンと呼ばれる。(c) カーネル 法を用いた分類境界。(a),(b) が線形の境界であったのに対して、この図での分類境界は非線型で ある。この手法を用いると、線形分離が不可能なデータに対してもクラス分類が可能となる。

#### 4.4.2 one-class SVM

one-class SVM は異常検知に特化した教師なし学習を行う SVM の一種である。前述の通り SVM は教師ありクラス分類を行う手法であるが、異常検知を行う際は異常データのサンプルを用意することが難しく、教師あり学習には適していない。

そのため、 $\phi(x_a) = 0$ となるような特徴空間での原点となるデータ $x_a$ を異常を代表するデータ として扱いラベル付することで、擬似的に正常なデータのみで構成されたクラスと原点の2クラス 教師あり分類モデルに置き換えることができ、原点からなるべく遠い点に分類境界を定めることが one-class SVM における解くべき問題となる。特徴空間における原点と点 $\phi(x_i)$ の距離は、分類境 界を $f(x) = w^{\mathsf{T}}\phi(x) + b$ とすると、平面と点の距離の公式から  $\frac{b}{\|w\|}$ となる。これを最大化する最 適化問題は通常の SVM と同様の方法で解くことができる。

## 4.5 GAN による異常検知

GAN 自体は与えられたデータの特徴量を学習して、同じ特徴を持ったデータを生成する機械学習 のアルゴリズムの1つである [18]。GAN による異常検知は、正常なデータの特徴を学習済みのモデ ルから生成されたデータと、与えられた未知のデータの特徴量の差を比較することで実現する。現在 GAN による異常検知システムは複数提案されている [19] [20] が、本研究では潜在変数の探索をあら かじめ行う Efficient GAN [21] と呼ばれる手法を用いた。

#### 4.5.1 GAN

GAN (Generative Adversarial Network, 敵対的生成ネットワーク)とは、データの特徴量を学習 して、それを模した実在しないデータを生成する深層学習モデルである。主に画像などの複雑な構造 をもつデータの生成等で用いられ、図 4.4 のように潜在変数 (Latent variable) と呼ばれる乱数 z か らデータを生成する Generator とデータの真偽を判別する Discriminator の二つのニューラルネッ トワークで構成される。この 2 つのネットワークを競合させることで生成されるデータが訓練データ と同じ特徴を持つように学習される。ネットワークの訓練過程については後述する。



図 4.4 GAN の構成。Fake data は Generator によって生成された偽のデータ、Real data は 訓練に用いる正常なデータである。Generator は潜在変数 z から偽のデータ G(z) を生成する。 Discriminator は偽のデータ G(z) もしくは正常なデータ x を受け取り、それが本物か偽物かを 判別する。

#### Discriminator

Discriminator は、与えられたデータが学習モデルと同類か否かを判別するニューラルネットワー クモデルである。訓練する際は訓練データを「本物」、Generator から生成されたデータを「偽物」 としてラベル付けして正しいラベルに割り当てる確率を最大にするように訓練される。このとき Discriminator は本物と判別した際は 1、偽物と判別した場合は 0 を出力するとする。

#### Generator

Generator は潜在変数と呼ばれる乱数の集まりからデータを生成するニューラルネットワークモデ ルである。訓練する際は Discriminator が生成されたデータを「本物」と分類する確率が高くなるよ うに訓練される。

#### GAN の訓練手順

GAN を訓練する際の目的関数は

 $\min_{G} \max_{D} V(D,G) = \min_{G} \max_{D} \left[ \mathbb{E}_{\boldsymbol{x} \sim p_{data}(\boldsymbol{x})} [\log D(\boldsymbol{x})] + \mathbb{E}_{\boldsymbol{z} \sim p_{z}(\boldsymbol{z})} [\log(1 - D(G(\boldsymbol{z})))] \right]$ (4.16)

となる。ここで  $p_z(z)$  は潜在変数が従う分布、 $p_{data}(x)$  は入力データが従うデータ分布、E は期 待値、D は入力データに対するスコアである。一項目は正しいデータが Discriminator に入力され た場合のスコアである。今入力されているデータは本物であるため、D(x) = 1 になることが望ま しく、この時目的関数を最大化できる。二項目はランダムに選ばれた潜在変数 z から Generator に よって生成された偽データが Discriminator に入力された際のスコアを表している。Discriminator は D(G(z)) = 0 にする(偽物だと判別する)ことでこの項を最大化することができ、Generator は D(G(z)) = 1 にする(Discriminator に誤判別させる)ことでこの項を最小化することがで きる。Generator と Discriminator を交互に訓練させることで、Generator は目的関数を最大化させようと競合し、最適なモデルを得られる。

実際の学習は、以下のような手順を既定の回数繰り返すことで為される。ここで、以下のような1 回の学習ループを iteration と呼ぶ。また、1 回の iteration で用いるデータセットから切り出された 正常なデータを Batch と呼び、そのデータ数を Batch size と呼ぶ。 [Discriminator の訓練]

- 1. 潜在変数を Generator に入力し、偽のデータを生成する
- 2. 1 で生成された偽データを Discriminator に入力し、偽物と分類されるように(0 が出力され るように) 訓練する
- Batch を Discriminator に入力し、本物と分類されるように(1 が出力されるように) 訓練 する

[Generator の訓練]

- 4. Discriminator の学習を止める
- 5. Generator と Discriminator を結合し、一つのニューラルネットワークとみなした上で潜在変数を入力し、本物と分類されるように(1 が出力されるように)訓練する
- 6. Discriminator の学習を許可する
- 7. 上記の手順を既定の回数繰り返す

### 4.5.2 AnoGAN

AnoGAN [22] は GAN を異常検知に用いた手法の 1 つである。あらかじめ正常なデータで訓練した GAN に、図 4.5 に示すような学習可能な全結合層(Full Connection layer)を Generator の前に 1 枚追加し、適当な潜在変数から生成された画像 G(z) と与えられたデータ x との差を求め、その差 を小さくするように学習可能層を訓練する。学習済みの GAN が潜在変数から正常なデータを再現す

るように学習済みであることから、どのような潜在変数を与えても異常データを生成できない、とい う仮定のもとに提案された手法である。訓練を既定の回数繰り返すことで与えられた未知の画像に近 い画像を生成する潜在変数を探索し、生成された画像と与えられた画像との差により正常、異常を判 別する。

異常値 A(x) は

$$A(\boldsymbol{x}) = \alpha L_G(\boldsymbol{x}) + (1 - \alpha) L_D(\boldsymbol{x})$$
(4.17)

$$L_G(\boldsymbol{x}) = |\boldsymbol{x} - G(\boldsymbol{z})| \tag{4.18}$$

$$L_D(x) = |f_D(x) - f_D(G(z))|$$
(4.19)

で定義される。ここで | · | は絶対値、 $\alpha$  は 0 <  $\alpha$  < 1 の範囲であらかじめ定める定数、 $f_D$  は Discriminator の中間層\*6から得られる出力である。 $L_G(\mathbf{x})$  は与えられたデータ  $\mathbf{x}$  と、それを再現 するように訓練した全結合層を通った潜在変数から生成されたデータとの差を表す。もし与えられ たデータが正常なデータであればそれを再現する潜在変数は既に学習済みであり探索の必要がなく  $L_G(\mathbf{x})$  は小さくなるが、異常データだった場合はそれを再現する潜在変数が探索できず、入力デー タを再現できずに  $L_G(\mathbf{x})$  は大きくなる。 $L_D(\mathbf{x})$  は生成されたデータと与えられたデータの特徴量を 比較し、その分布が異なる場合は差が大きくなり、異常値が大きくなる。

実際に異常値は以下のような手順で計算される。

- 1. 前節の手順に従い GAN を訓練する
- 2. 訓練が完了したら、全てのネットワークの学習を停止する
- 3. 図 4.5 のように、訓練可能な全結合層を Generator の前に挿入する
- 4. 全結合層を通した潜在変数を Generator に入力し、出力されたデータと異常判別をしたいテ ストデータとの差が小さくなるように全結合層を既定の回数訓練する。
- 5. 最終的に Generator から生成されるデータとテストデータの差分  $L_G(\mathbf{x})$  (式 4.18) を計算 する
- 6. 最終的に Generator から生成されるデータとテストデータをそれぞれ Discriminator に入力 し、中間層から得られた数値の差分  $L_D(\mathbf{x})$  (式 4.19)を計算する
- 7. 手順 5、手順 6 で得られた  $L_G(\boldsymbol{x}), L_D(\boldsymbol{x})$  をもとに異常値(式 4.17)を計算する

AnoGAN は異常検知の際に手順4に示したような元のデータを再現するような潜在変数の探索に時間がかかり、全結合層の学習度合いを定めるパラメータを決めることが難しい。この問題を解決したのが次に述べる Efficient GAN である。

### 4.5.3 Efficient GAN

Efficient GAN [21] は図 4.6 に示すように、従来の GAN に Encoder と呼ばれる、与えられた データを潜在変数に変換するネットワークを一緒に学習させることで、潜在変数の探索を学習時 に済ませておく手法である。全てのデータに対して潜在変数が Encoder によって求められるため、

<sup>\*6</sup> ニューラルネットワークの入力層と出力層の間に存在する層のこと。異常検知の場合は出力層の1つ前のからの出力を 抜き出すことが多い。



図 4.5 AnoGAN の構成。Fake data は Generator によって生成されたデータ、Real data は 訓練に用いる正常なデータ、FC Layer が全結合層を表す。潜在変数探索のための全結合層が Generator の前に挿入されており、異常検知を行う際にこの層を訓練して潜在変数の探索を行う。

Discriminator は潜在変数も考慮してデータの判別を行う。

#### Encoder

Encoder とは与えられたデータに対応する潜在変数を出力するニューラルネットワークである。 Generator の逆写像を行っており、訓練する際は Discriminator が生成されたデータを「偽物」と分 類する確率が高くなるように訓練される。

#### 学習手順、異常検知手順

学習は通常の GAN の学習に Encoder の学習が含まれる。学習手順は下記の通りである。 [Discriminator の訓練]

- 1. 潜在変数を Generator に入力し、偽のデータを生成する
- 2. 手順1で生成された偽データと元になった潜在変数をDiscriminator に入力し、偽物と分類されるように(0が出力されるように)訓練する
- 3. Batch を Encoder に入力し、それに対応する潜在変数を得る
- 4. Batch と、Encoder から得られた潜在変数を Discriminator に入力し、本物と分類されるよう に(1 が出力されるように)訓練する

[Generator、Encoder の訓練]

- 5. Discriminator の学習を止める
- 6. Generator に潜在変数を入力し、出力されたデータと元になった潜在変数を Discriminator に 入力した際本物と分類されるように(1 が出力されるように)訓練する
- 7. Encoder に Batch を Encoder に入力し、得られた潜在変数と元になったデータを Discriminator に入力した際偽物と分類されるように(0 が出力されるように)訓練する
- 8. Discriminator の学習を許可する

異常値は AnoGAN と似た形の

$$A(\boldsymbol{x}) = \alpha L_G(\boldsymbol{x}) + (1 - \alpha) L_D(\boldsymbol{x})$$
(4.20)

$$L_G(\boldsymbol{x}) = |\boldsymbol{x} - G(E(\boldsymbol{x}))| \tag{4.21}$$

$$L_D(\boldsymbol{x}) = |f_D(\boldsymbol{x}, E(\boldsymbol{x})) - f_D(G(E(\boldsymbol{x})), E(\boldsymbol{x}))|$$
(4.22)

で定義される。ここで E(x) は Encoder によってデータ x をもとに変換された潜在変数である。 AnoGAN とは違い、Encoder から得られた潜在変数を異常値の計算に用いている。 $L_G(x)$  は与えら れた未知のデータを Encoder で潜在変数に変換した後に Generator でもう一度実データに変換した ものの差である。各ネットワークは既に正しいデータを再現されるように訓練されているため、訓練 データと違う特徴を持ったデータ x を Encoder に入力するとそのデータを再現するような潜在変数 を再現できず、生成される G(E(x)) は元のデータを再現できなくなる。また、 $L_D(x)$  は潜在変数を 考慮する形に変更されており、データの特徴だけでなく、そのデータを再現する潜在変数の分布の差 も比較する。

実際に異常判別をする場合には以下のような手順で計算される。

- 1. 前述の手順に従い EfficientGAN を訓練する
- 2. 訓練が完了したら、全てのネットワークの学習を停止する
- 3. テストデータを Encoder に入力し潜在変数に変換した後、Generator に入力して元の形式の データに戻す
- 4. Generator から生成されるデータとテストデータの差分  $L_G(\mathbf{x})$  (式 5.10) を計算する
- 5. Encoder から得られた潜在変数とテストデータの組み合わせ、及び Encoder から得られた潜 在変数と Generator から生成されたデータをそれぞれ Discriminator に入力し、中間層から 得られた数値の差分  $L_D(x)$  (式 5.11)を計算するを計算する
- 6. 手順 4、5 から得られた *L<sub>G</sub>*(*x*), *L<sub>D</sub>*(*x*) を元に異常値(式 5.9)を計算する

AnoGAN で行っていた潜在変数を探索する作業がなくなるため、異常検知のスピードが大幅に向 上するほか、潜在変数も考慮して異常判別を行うため精度も向上する。



図 4.6 Efficient GAN の構成 [21]。g は Generator、E は Encoder、d は Discriminator であ る。通常の GAN と違い、Discriminator にデータを渡す際には、青く示された箇所のように元と なった潜在変数をセットにする。

## 第5章

# 異常検知手法の性能評価

本章では、前章で取り上げた3つの異常検知手法に対して処理スピード、及び正確さを基準として チューニング及び性能評価を行う。

## 5.1 分類器の設計

Super Cell からのパルスに対して異常検知を行う分類器を作成する際、分類方法として

- 各 Super Cell に対して最適化された分類器を作成する
- 全ての Super Cell からのパルスを異常検知する1つの分類器を作成する

という2つのアプローチが考えられる。実際にこの分類器を運用する際、34000 ch 分の分類器を用 意してチューニングするのは非常に計算コストが高い。そのため、本研究では計算コストを大幅に削 減することを目指し、後者の全ての Super Cell からのパルスを異常検知する1つの分類器を作成す る。またこの分類器が実現できれば、正しいパルスが得られていない Super Cell でも異常を検知で きるようになる。

## 5.2 訓練用データの生成

液体アルゴンカロリメータのパルスは、検出器に高エネルギーの電子もしくは光子が入射すること により発生する。このように LHC で発生したビームからパルスを得ることを physics run と呼ぶ。 しかし現在 LHC はシャットダウン中であり、実際のビームから得られるデータを用いることはでき ない。そのため、液体アルゴンカロリメータにはビームを用いず人工的にパルスを発生させるシステ ムが存在する。これを較正用パルスシステムと呼ぶ。本研究で用いる異常検知手法の訓練用のデータ はこのシステムから生成されたパルスを利用する。

#### 5.2.1 較正用パルス

較正用パルスは検出器に電荷を付与することで電圧差を発生させ、実際に電磁シャワーが発生した 時と同様の状態を再現することで得られる。較正用パルスシステムの回路を図 5.1 に示す。まずフロ ントエンドクレート内にあるキャリブレーションボードで、あらかじめ定めたエネルギー値に相当す る階段状パルスを入力し、それに対応する指数型パルスが検出器に入力される。入力された指数型パ ルスは physics run における三角波を再現しており、同様の電圧差を検出器に発生させる。その後通 常通りのパスでパルスが送られ、処理される。

本来指数型パルスではなく physics run と同様の三角波パルスを入力することが望ましい。三角波 パルスはファンクションジェネレータを用いれば作ることができるがそのシステムは複雑であり、フ ロントエンドクレート内の限られたスペースに全ての Super Cell に対して導入するのは困難である。 また、複雑化することにより故障などが増え、運用上のリスクが上がる。それに対して、階段状パル スをを指数型パルスに変換するような回路は比較的簡単であるため、この手法が用いられている。

較正用パルスシステムはエネルギー計算やタイミング計算のためのパラメータ較正を行うために複数の入射パターンが存在するが、本研究ではパルスを入射しない状態でパルスを得る Pedestal run、 全ての Super Cell に既定のパルスを一斉に入射する Pulsed run で得られるデータを解析に用いる。



図 5.1 テストパルスシステムの回路図 [23]。

## 5.2.2 データセットの作成

訓練に用いるデータセットは、現在利用可能な複数の Super Cell から得られたパルスを用いて構成する。Pulsed Run 用の分類器に用いる訓練用データ (train data)、テスト用データ (validation data) は全て Pedestal を差し引いて規格化<sup>\*1</sup>したものを用いる。Pedestal Run 用の分類器に用いる

<sup>\*1</sup> 規格化はパルスの最大値と Pedestal の差が1になるように行う。

訓練用データ、テスト用データは全て Pedestal を差し引いたものを用い、規格化は行わない。デー タセットは 5000 件のパルスで構成され、1 つのパルスは 32 点でサンプリングされた ADC 値で構成 される。サンプリングされたパルスの各点の ADC 値をサンプルと呼ぶ。データセットはプログラム 上では 5000 × 32 の配列として扱われる。

## 5.3 実行環境

今回用いた環境は MacBook Pro (13-inch, 2017)

- プロセッサ: 2.3 GHz Dual-Core Intel Core i5
- メモリ: 16 GB 2133 MHz LPDDR3
- ストレージ : 512 GB SSD

プログラム言語は Python3.6 を用いた。計算に用いたライブラリは

- scikit-learn [24] 0.22.1
- keras [25] 2.3.1
- tensorflow [26] 2.2.0
- numpy [27] 1.18.1
- scipy [28] 1.4.1
- uproot [29] 3.11.0

である。scikit-learn は多数の機械学習アルゴリズムやデータ加工、性能評価できるモジュールを含 むライブラリであり、本研究では主に one-class SVM の利用のために用いる。keras はニューラル ネットワークを構築するためツールを含むライブラリであり、本研究では GAN のニューラルネット ワークを構築するために用いる。tensorflow は keras のバックエンドとして利用され、実際の微分計 算などを行う。uproot, numpy, scipy は算術計算用のライブラリである。

## 5.4 各手法のパラメータ決定

分類器を構築する際に、学習などでは定められない予めモデルに与えておかなければならないパラ メータ (ハイパーパラメータ) が存在する。このパラメータを分類器が十分に性能を発揮できる値に 設定するためのチューニングを行う。

#### 5.4.1 カイ二乗のチューニング

本研究におけるカイ二乗による異常値計算には scipy 内の distance クラスに含まれている mahalanobis 関数を用いた。訓練用データには、各 Super Cell から得られた Pulse(もしくは Pedestal) 5000 件を用いる。この手法における決めるべきパラメータは、異常値を判別する際の閾値のみであ り、今回は 3σ を用いた。正常なデータの 0.3% がこの閾値を超える確率に等しく、この閾値を超え る事象は非常に稀である。つまり、異常値が閾値を超えた事象は偶然起きるものとは考えにくく、異 常として判断する。

#### 5.4.2 one-class SVM のチューニング

本研究に用いた one-class SVM は scikit-learn 内の svm クラスに含まれている OneClassSVM を 用いた。訓練用データには、各 Super Cell から得られた Pulse(もしくは Pedestal)5000 件を用 いる。決めるべきパラメータは、訓練データ内に含まれる異常データ割合  $\nu$ 、及び RBF カーネル  $K(\boldsymbol{x}_i, \boldsymbol{x}_j) = \exp(-\gamma || \boldsymbol{x}_i - \boldsymbol{x}_j ||^2)$ 内の係数  $\gamma$  である。異常データ割合  $\nu$  は、訓練データ内の 0.3% が異常を含むと仮定し 0.003 に設定した。チューニングは  $\gamma$  に対して、正常なデータのみで構成さ れたテストデータ 5000 件を、学習済みの分類器で分類した際に何 % が正常と判別されたかを示す Accuracy で測り\*2、最大となる点を採用する。

#### パラメータ $\gamma$ の決定

パラメータ  $\gamma$  に対する Accuracy の推移を図 5.2 に示す。 $\gamma$  を 0.01 刻みで変化させながら違う データセットに対して Accuracy を 10 回ずつ計算し、その平均とエラーをプロットした。 $\gamma$  によっ て Pulsed Run では大きく性能が変わらないため、汎化性能が一番高くなる  $\gamma = 0.01$  を採用する。 Pedestal Run では  $\gamma = 0.01$  の点で Accuracy が最大となっているため、この値を採用する。



図 5.2 SVM を用いた手法における γ に対する Accuracy の推移

## 5.4.3 Efficient GAN のチューニング

本研究に用いた Efficient GAN は Keras を用いて各ニューラルネットワークを実装した。

<sup>\*2</sup> 教師あり学習における SVM の γ のチューニングを行う際には、分類されるクラス全てを用いて Accuracy を計算す ることが望ましいが、教師なし学習で同じような基準で行う場合はエラーデータを用意しなければならず、また人工的 に引き起こしたエラーデータを用いて Accuracy を計算した場合 γ を大きくすればするほど Accuracy は高くなる。 しかし γ が大きくなるほど分類境界が複雑化し、過学習となり偽陽性率が高くなっていくため採用しなかった。

#### ニューラルネットワークの構成要素

■レイヤー ニューラルネットワークはレイヤーと呼ばれる層構造を複数重ねて構成される。本研究 では図 5.3 に示すような Dense Layer(全結合層)を主に用いる。Dense Layer は前後のレイヤーを 構成するノードを全て結合し、入力全てに対して重みを計算するレイヤーである。パラメータはノー ドの数、及び出力を決定する活性化関数である。



図 5.3 全結合層。この場合のノードの数は5 である。

■活性化関数 レイヤーからの出力は関数を通して変換され、最終的な出力として次の層へと送られる。この変換を施す関数を活性化関数と呼ぶ。ニューラルネットワークに用いられる活性化関数の例を図 5.4 に示す。Leaky ReLU は入力値が 0 以下なら入力を  $\alpha_{LR}$  倍し、0 以上なら入力と同じ値を返す関数である。本研究では  $\alpha_{LR} = 0.3$  とした。Sigmoid は 0 または 1 を出力をする際に用いられ、本研究では Discriminator に用いられている。出力に活性化関数を用いない層もあり、本研究において Generator 及び Encoder は最終的な出力に活性化関数を用いていない。

■損失関数 ニューラルネットワークは正解値と出力の差を小さくするように訓練を行い、パラ メータの更新を行う。正解値と出力の差を損失 (loss) と呼び、この損失を表す関数を損失関数 (loss function) と呼ぶ。この関数は任意に選ぶことができるが、本研究では binary cross entropy を用い る。binary cross entropy は二値分類問題(出力が 0 から 1 の数値となる)に用いられ、その式は データ数を N、正解ラベルを  $t_i$ 、ニューラルネットワークの出力を  $y_i$  とすると

$$E = -\sum_{i=1}^{N} (t_i \log y_i + (1 - t_i) \log(1 - y_i))$$
(5.1)

となる。

■最適化関数 ニューラルネットワークの訓練において、損失関数を最小化する問題を最適化と呼び、最適化の方法を決める関数を最適化関数と呼ぶ。最適化関数は現在のパラメータにおける損失関





数と、その点における勾配を計算し、現在よりもより小さい損失となるようにパラメータを調整する。 本研究で用いる最適化関数は ADAM (Adaptive Moment Estimation) [30] と呼ばれる関数である。 最適化するパラメータを w、iteration 数を t、iteration 数 t における損失関数を  $f_t(w_t)$ 、 $\nabla_w$  を パラメータ w に関する勾配とすると、ADAM によるパラメータの更新は以下のように行われる。

$$g_t = \nabla_{\boldsymbol{w}} f_t(\boldsymbol{w}_t) \tag{5.2}$$

$$m_t = \beta_1 m_{t-1} + (1 - \beta_1) g_t \tag{5.3}$$

$$v_t = \beta_2 v_{t-1} + (1 - \beta_2) g_t^2 \tag{5.4}$$

$$w_t = w_{t-1} - \alpha_{\text{ADAM}} \frac{m_t}{\sqrt{v_t + \epsilon}} \tag{5.5}$$

ハイパーパラメータは $\alpha_{ADAM}$ 、 $\beta_1$ 、 $\beta_2$ であり、本研究では

$$\alpha_{\rm ADAM} = 0.0001 \tag{5.6}$$

$$\beta_1 = 0.5 \tag{5.7}$$

$$\beta_2 = 0.999$$
 (5.8)

とした。

作成したニューラルネットワーク

訓練時に用いた活性化関数は binary cross entropy を用い、最適化関数には ADAM を用いた。全 結合層内のノード数や、最適化関数のパラメータは付録 C に示す。

- パラメータ
  - 潜在変数 z の次元:10
  - Batch size : 20
- $\bullet~{\rm Generator}$

入力:潜在変数(平均0、分散1の正規分布に従う乱数)

中間層:全結合層 4 層 出力:パルス

• Discriminator

入力:パルス、潜在変数 潜在変数の入力に対する中間層:全結合層 3 層 パルスの入力に対する中間層:全結合層 4 層 出力:0~1 (Sigmoid 関数)

• Encoder

入力:パルス 中間層:全結合層 3 層 出力:潜在変数(0~1)

#### である。

決めるべきパラメータは非常に膨大であるため、本節では iteration 数及び異常値計算

$$A(\boldsymbol{x}) = \alpha L_G(\boldsymbol{x}) + (1 - \alpha) L_D(\boldsymbol{x})$$
(5.9)

$$L_G(\boldsymbol{x}) = |\boldsymbol{x} - G(E(\boldsymbol{x}))| \tag{5.10}$$

$$L_D(\boldsymbol{x}) = |f_D(\boldsymbol{x}, E(\boldsymbol{x})) - f_D(G(E(\boldsymbol{x})), E(\boldsymbol{x}))|$$
(5.11)

に用いる定数 α の探索を記述する。

#### 学習停止条件

iteration 数は、正常なデータのみで構成されたテストデータ 5000 件に対する異常値(式 5.9)の 平均が収束する点を採用する。Batch はデータセットをシャッフルした後、20 件ずつ順番に選択さ れ、5000 件を使い切るともう一度データセットをシャッフルし、順番に 20 件選択する。訓練の収束 は iteration 毎の異常値が連続 1000 回の iteration で最小値を更新しなかった場合、そこで訓練を終 了し収束とみなす。異常値を決定する際の定数は慣例で  $\alpha = 0.9$  が用いられているため、本研究でも  $\alpha = 0.9$  で計算を行った。

Pulsed Run 及び Pedestal Run で iteration 数を増やした際の異常値の推移を図 5.5 及び 5.6 に示 す。Pulsed Run では iteration 数 3600 付近で異常値が下がらなくなったため、この点を採用する。 Pedestal Run では iteration 数 50 付近で異常値が下がらなくなったため、この点を採用する。また、 収束した際の iteration 数、損失、異常値を表 5.1 に示す。

Discriminator の損失は、受け取ったデータのラベルと出力の差を Binary cross entropy で計算した。Generator の損失は、Generator が出力した結果に1(本物)のラベルをつけ、Discriminator に渡した際の出力とラベルの差を Binary cross entropy で計算した。Encoder の損失は、Encoder が出力した結果に0(偽物)のラベルをつけ、Discriminator に渡した際の出力とラベルの差を Binary cross entropy で計算した。

anomaly score, pulse

3000

iteration

4000



(a)iteration 数に対する各ネットワークの損失の



20

15 anomaly

10

5

ò

1000

score



図 5.5 Pulsed Run における iteration 数に対する損失関数及び異常値の変化。Loss は損失を表 し、Anomaly score は異常値を表す。

#### 定数 $\alpha$ の決定

定数  $\alpha$  は、異常値  $A(\mathbf{x}) = \alpha L_G(\mathbf{x}) + (1 - \alpha)L_D(\mathbf{x})$ 内にある  $L_G(\mathbf{x})$ 及び  $L_D(\mathbf{x})$ の重み付けを 決める定数である。前述の通り、この値は α = 0.9 を用いるとされているが、この分類器でも同様 の値が最適であることを定数  $\alpha$  を変化させた際の AUC (Area Under the Curve) 値を用いて示す。 AUC 値の詳細については後述するが、分類器の性能を数値化した指標であり、0.5 から1の間の数 値をとり、数値が高いほど分類性能が高い。AUC 値は正常なデータとして訓練用データと同様の方 法で得られた独立なテストデータを 5000 件、異常データとして人為的に Bit Flip を起こしたパル ス 5000 件、2 種類で合計 10000 件で構成されるデータセットを用いて測定され、10 セットの独立な データセットを用いて同様の操作を行いその平均を計算する。Bit Flip を起こす際は、パルス中の1 サンプルをランダムで選び、指定した値を足し引きして作成する。Pulsed Run 及び Pedestal Run の定数  $\alpha$  に対する推移を図 5.7 に示す。Pulsed Run、Pedestal Run 共に  $\alpha = 0.9$  の点で AUC が最



推移

図 5.6 Pedestal Run における iteration 数に対する損失関数及び異常値の変化。Loss は損失を 表し、Anomaly score は異常値を表す。

	Pulsed Run	Pedestal Run
収束時の iteration 数	3640	50
異常値	2.390	15.345
Discriminator の損失	0.712	0.747
Generator の損失	0.681	0.626
Encoder の損失	0.671	0.953

表 5.1 学習を止めた際の iteration 数、異常値、及び各ネットワークの損失

大となっているため、この値を採用する。

#### チューニング後の各手法の性能比較 5.5

前節で決めたパラメータを設定した上で、各手法の分類性能及び処理時間を比較する。

#### 5.5.1評価方法

正確さ、及び分類スピードによって各手法の性能評価を行う。評価に用いるデータセットは、正常 なデータとして訓練用データと同様の方法で得られた独立な正常パルスを 5000 件、異常データとし て人為的に Bit Flip を起こしたパルス 5000 件、2 種類で合計 10000 件のデータを用いる。この異常 データは訓練用と同様の方法で集めたデータセットをある1つのサンプルをランダムで選び Bit Flip させた後にペデスタルを差し引いて規格化したものを用いる。評価用の数値は独立な方法で得られた 10 セットのデータセットに対して同様の操作を行いその平均と誤差を測定する。

正確さは AUC 値と呼ばれる指標で測定する。AUC 値は正常データの異常値と異常データの異常 値の分布がどれほど混ざり合っているかを示す指標である。その視覚的なイメージを図 5.8 に示す。

<sup>(</sup>b)iteration 数に対する異常値の推移



(a)Pulsed Run

(b)Pedestal Run

図 5.7 異常検知定数  $\alpha$  を 0.1 刻みで変化させた際の AUC 値の推移。ラベルは Bit Flip を起こ したパルスを作成する際に、足し引きした値の大きさである。(b) の flip minus4, flip plus4 以外 は AUC 値が全ての  $\alpha$  に対して 1 であったため見えなくなっている。

図上段は正常なデータと異常なデータをそれぞれ分類器に入れた時に得られる異常値をヒストグラム として表示したものである。実際に異常を判別する際は、この上段に示された異常値にスレッショ ルドをかけて異常を判別するが、スレッショルドをどこにするのかを動かした時のそれぞれの真陽 性率、偽陽性率をプロットした図が ROC (Receiver Operating Characteristic) curve と呼ばれるも ので、下段に示されている。理想的な分類器は直角の形になり、全てをランダムに分類する分類器 は右の一直線な ROC curve を描く。このグラフの形状を定量的に示すものが AUC 値であり、この ROC curve に覆われた面積で定義される。つまり一番理想的なのは 1.0、一番悪いのが 0.5、という ことになる。

#### 5.5.2 Flip error の大きさによる分類性能の比較

各手法に対して、Pulsed Run は Flip error±32, ±16, ±8, ±4、Pedestal Run は ±16, ±8, ±4 に おける AUC 値を比較する。全て 10 回同じ操作を行い、その平均を表 5.2、表 5.3 に記す。Pulsed Run における AUC 値が Pedestal Run と比較して低いのは、規格化の工程に由来する。パルスの波 高分布を図 5.9 に示す。パルスは Super Cell のレイヤーがどこにあるかによって違い、Presampler では波高が 30 ほどであるため、波高に対してノイズが大きくなり異常として判別されるパルスが出 てきてしまう\*<sup>3</sup>。また、Back レイヤーではおよそ 800 ほどである。このような波高が高いパルスに 対して Flip error±32 が起きても、規格化の際に無視できるほど小さくなってしまい、異常として検 知されない。このような現象に対する対策として、分類器をレイヤーごとに分け、長期的な解決策と しては機械学習の訓練過程で元の波高やレイヤーの情報を一緒に訓練するなど、分類器に与える訓練 データを工夫するなどの対応が考えられる。また、図 5.10 に示すように、GAN における分類は異常 値の分布が被っているため、閾値を変えても分類できずに AUC 値が 0.5 に近い値になっている。

<sup>\*3</sup> Presampler の波高は DAC 値を変更することで、最大で 100 程度には変更可能であるが本研究ではコミッショニング で通常使われている設定で取得したデータで評価した。今後、必要があれば、DAC 値の最適化も検討する。



図 5.8 異常値のヒストグラム(上図)とそれに対応する ROC curve(下図)。右から左にかけて 分類性能が高く、AUC 値が 1 に近づいていく。

表 5.2 Pulsed Run に対する各手法の Flip error に対する AUC 値の比較。太字は 3 つの分類 器の中で最も AUC の大きいものを示す。

	flip $-32/+32$	flip $-16/+16$	flip $-8/+8$	flip $-4/+4$
chi2	$0.891 \pm 0.002$	$0.806 \pm 0.002$	$0.667 \pm 0.004$	$0.572 \pm 0.005$
	$0.889 \pm 0.003$	$0.805 \pm 0.004$	$0.667 \pm 0.005$	$0.572 \pm 0.005$
SVM	$0.630 \pm 0.005$	$0.578 \pm 0.007$	$0.544 \pm 0.003$	$0.519 \pm 0.004$
5 1 11	$0.621 \pm 0.005$	$0.572 \pm 0.005$	$0.544 \pm 0.003$	$0.516 \pm 0.005$
CAN	$0.590 \pm 0.005$	$0.556 \pm 0.006$	$0.526 \pm 0.005$	$0.511 \pm 0.005$
GAN	$0.518 \pm 0.004$	$0.514 \pm 0.005$	$0.501 \pm 0.003$	$0.496 \pm 0.004$

### 5.5.3 処理時間

訓練時間はデータの読み込み時間は含めず、各モデルが訓練データを受け取り、分類器を作成する までの時間を比較した。その結果を表 5.4、5.5 に示す。分類時間は、分類器が 5000 件のデータを受 け取り、その全てで異常検知を完了するまでの時間を比較した。全て 10 回同じ操作を行い、その平 均及び標準誤差を記す。パラメータは前述のものを用いた。

	flip $-16/+16$	flip $-8/+8$	flip $-4/+4$
chi2	1.0	1.0	$0.986 \pm 0.001$
	1.0	1.0	$0.986 \pm 0.001$
SVM	1.0	1.0	$0.974 \pm 0.002$
	1.0	1.0	$0.975 \pm 0.001$
GAN	1.0	$0.980 \pm 0.001$	$0.818 \pm 0.004$
	1.0	$0.987 \pm 0.001$	$0.842 \pm 0.003$

表 5.3 Pedestal Run における各手法の Flip error に対する AUC 値の比較。太字は 3 つの分類 器の中で最も AUC の大きいものを示す。



図 5.9 パルスの波高分布。一番値の低いものが Presampler (0 層目)、300 付近が Front layer (1 層目) 及び Middle layer (2 層目)、最も高いものが Back layer (3 層目)。

表 5.4 Pulsed Run で取得したデータに対する処理時間の比較。太字は 3 つの分類器の中で最も 処理時間の速いものを示す。

	訓練時間 [ms]	分類時間 [ms]
Chi2	$0.078 \pm 0.084$	$3.915 \pm 0.432$
SVM	$1.147 \pm 0.103$	$1.300 \pm 0.025$
GAN	$21270 \pm 90.1$	$268.2 \pm 49.6$

## 5.6 チューニング後の異常基準

チューニングを行った分類器の異常分類基準を以下に示す。6章における実データに対する異常検知は、本章でチューニングした分類器を用い、以下の基準によって行う。

■カイニ乗法 与えられたデータの異常値を式 4.5 で計算し、その値が 3*σ*(自由度 32 のカイ二乗分 布においては 58.341 となる)を超えた値を異常と判別する。



図 5.10 GAN における Pulsed Run で Bit Flip -32 を分類した際の異常値ヒストグラム。異常 値の分布が被っているため、閾値を変えても異常を分類できない。

表 5.5 Pedestal Run で取得したデータに対する処理時間の比較。太字は 3 つの分類器の中で最 も処理時間の速いものを示す。

	訓練時間 [ms]	分類時間 [ms]
Chi2	$0.065 \pm 0.048$	$3.840 \pm 0.206$
SVM	$1.198 \pm 0.063$	$1.605 \pm 0.048$
GAN	$5470 \pm 1155$	$287.3 \pm 26.2$

■one-class SVM 学習済みの分類器が定めた分類境界に対して、原点側のデータを異常と判別する。

■Efficient GAN 正常なデータで構成されるテストデータ 5000 件に対して式 5.9 で異常値を計算 し、その異常値の分布で  $3\sigma$  に相当する値を超えた場合、そのデータを異常と判別する。その値は Pulsed Run で 4.350、Pedestal Run で 14.221 である。

## 第6章

# 実データによる異常検知手法の性能評価

LHC 及び ATLAS は現在 Phase-1 Upgrade 中であり、液体アルゴンカロリメータは新しいエレ クトロニクスのインストールやファームウェアのアップデートが随時行われている最中である。これ らが正しく機能しているかどうかを本研究で開発した異常検知手法で解析した。

## 6.1 実データの概要

この章で用いるデータは Long run と呼ばれる、実際のビームによるデータ取得の時と同様に、長 期的に較正用パルスシステムを走らせて取得されたものである。Long run は複数の LATOME ボー ドから得られるイベントを1分毎にバイナリファイルとして保存する。得られた複数のファイルは扱 いが容易な root ファイル<sup>\*1</sup>にエンコードされる。

root ファイルの構造は図 6.1 のようになっている。LATOME ボードには LATOME ID と呼ば れる識別用の番号が振られており、それぞれ最大で 320 ch の Super Cell が接続されている。Super Cell には Channel ID と呼ばれる固有の識別番号が振られている。LATOME ID と Channel ID を 指定することでその ID で観測された Event が全て呼び出される。呼び出されたデータはプログラム 上では Event 数 ×32 の配列として扱われる。

前述の通り、LATOME Firmware はアップデートが随時行われている最中であり、その性能は改善している。LATOME Firmware を含め、システムが正常に機能しているかどうかを確認するため に Long run は日頃から行われ、その度に異常検知を行っている。また、11 月に入り多くの LTDB を読み出せるようになったため、それらから得られるパルスに対する異常検知は重要である。本稿で は、最新の LATOME Firmware がインストールされ、多くの LTDB が読み出せるようになった 11 月の Long Run データを用いて異常検知を行い、3 つの手法で得られる結果を比較した。

本研究で利用した実データは実際に使われるデータ読み出し経路ではなく、モニタリング用に出力 されたものを利用した。

<sup>\*1</sup> CERN が開発したデータ解析を行うためのフレームワーク ROOT [31] で扱われるファイル形式。擬似的なディレク トリのような構造を持っており、多くのデータを取り扱う際の利便性が高い。



図 6.1 root ファイル内で Event を呼び出すまでの構造。

## 6.2 異常検知手順

異常検知は各ファイルごとに対して順に行い、異常が検知された Super Cell の位置や ID、異常が 検知された数などの結果を csv ファイルで出力する。実際の手順は以下のようになる。

- 1. 異常検知を行う root ファイルを読み込む
- 2. ファイル内に記録されている LATOME の情報を読み込む
- 3. 手順 2 で読み込んだデータからある 1 つの LATOME を指定し、その LATOME に接続され ている Super Cell の情報を読み込む
- 4. 手順3で読み込んだデータからある1つの Super Cell を指定し、記録されているイベントを 全て分類器に入力し、異常検知を行い、その結果を記録する
- 5. 手順4を読み込んだデータの中の全ての Super Cell に対して行う
- 6. 手順 3~5 を読み込んだデータの中の全ての LATOME に対して行う
- 7. 上記を異常検知を行う全てのファイルに対して行う

最終的な出力は、全てのファイルの結果をまとめた上で、LATOME 毎に後述のようなヒートマップ にしてまとめられる。

## 6.3 Pulsed Run に対する異常検知

## 6.3.1 データ概要

異常検知を用いる Long run データは 2020 年 11 月 8 日 0 時 36 分 (CET) から 2020 年 11 月 8 日 1 時 11 分に記録された 35 件のファイルである。Barrel A-side の LTDB22 枚と、それに接続された 22 枚の LATOME ボードからモニタリング用のデータを取得した。LATOME Firmware のバー

ジョンは 3.2.1 である。全ての Super Cell に対して、1 ファイルあたり 55 件のイベントが記録さ れている。ファイルに記録されているパルスは、異常検知を行う前に pedestal を引き、規格化\*2を 行う。

#### 6.3.2 各手法の異常検知結果の比較

今回は得られた結果のうち、LATOME101 についての結果を図 6.2 に示す。縦軸は Channel ID と呼ばれる Super Cell に固有の番号であり、横軸は 1 つのファイルに対応する。ヒートマップは 1 ファイルに記録されている 55 件のイベントにおける異常率を示しており、緑色から赤色にかけて異 常率が高いことを示す。液体アルゴンカロリメータの BER は 10<sup>-15</sup> で設計されており、今回見る データに記録されているデータの Bit 総数は 2.4 × 10<sup>8</sup> であるため、この Long Run 中では Bit Flip は 0 件であるのが理想であるが、実際には全体の 2 割程度の Event でエラーが発生しており、設計 通りの性能を発揮できていないことがわかる。

<sup>\*&</sup>lt;sup>2</sup> パルスの最大値が1となるようにスケーリングを行う。具体的には、32 sample の中から最大値の値を選択し、その値 で全ての 32 sample を割る操作を行っている。





(a)

#### 異常として検出されたパルス

全ての手法で検知された異常波形の一部を図 6.3 に示す。図 6.3(a) は「Validation エラー」と呼 ばれるエラーが起こったときに出力される典型的な波形であり、バイナリファイルから root ファイ ルに変換する際に Bit のチェックがなされ、本来あるべき Bit から反転しているものが検知された 場合にこのような形 (-1を出力)のパルスを出力する。図 6.3(b) は Bit Flip による異常である。図 6.3(c) は形状に異常はないものの、訓練データとピーク位置が違うことや、サンプリングの位置がず れていることにより異常と判別されたパルスである。このように正常な波形を異常とみなしてしまう ことを「誤検知」と呼ぶ。誤検知は訓練データに同様の形のパルスを含めるように改善することで解 消される。

また、図 6.2(a) の上部に存在するカイニ乗で固有で検出されている異常の一部をを図 6.4 に示す。 これらのパルスが観測された Super Cell は Presampler (0 層目) であり、図 6.5 に示すように波高が 低い。そのため、波高に対してノイズが大きくなり、波形が歪になって検知されたものと思われる。

one-class SVM に固有の異常は存在しなかったが、カイ二乗で誤検知されていた事象は異常として 判別されていないため、カイ二乗と同様の異常検知性能を持ちながら、誤検知が少ないことがわかっ た。また、GAN にも固有の異常は存在せず、誤検知が少ないものの、異常として記録されるパルス が他の2手法と比べて少なかった。

図 6.2 において、全てのイベントが異常と判別された Super Cell 数の内訳を表 6.1 に示す。



(b)図 6.3 全ての手法で検出された異常。青線が訓練に用いたデータの平均値、赤線が実際に検知されたパルス。

(c)

表 6.1 図 6.2 において、全てのイベントが異常と判別された Super Cell 数の内訳。Super Cell の総数は 320 個である。

	Flip エラー	Validtation エラー	誤検知
chi2	32	32	24
SVM	32	32	0
GAN	11	0	0



図 6.4 カイニ乗法のみで検出された異常。 青線が訓練に用いたデータの平均値、赤線 が実際に検知されたパルス。



図 6.5 カイ二乗法のみで異常が検知された Super Cell で記録されたパルス 55 イベン トを加工せず全てプロットしたもの。

## 6.4 Pedestal Run に対する異常検知

## 6.4.1 Pedestal Run のデータ概要

異常検知を用いる Long run データは 2020 年 11 月 6 日 18 時 36 分 (CET) から 2020 年 11 月 6 日 19 時 25 分に記録された 50 件のファイルである。Barrel A-side の LTDB30 枚と、それに接続 された 30 枚の LATOME ボードからモニタリング用のデータを取得した。LATOME Firmware の バージョンは 3.2.1 である。全ての Super Cell に対して、1 ファイルあたり 56 件のイベントが記録 されている。ファイルに記録されているパルスは、異常検知を行う前に pedestal を引く。規格化は 行わない。

## 6.4.2 各手法の異常検知結果の比較

得られた結果のうち、LATOME 101 についての結果を図 6.6 に示す。Pulsed Run の際と同様に ヒートマップは 1 ファイルに記録されている 56 件のイベントにおける異常率を示しており、緑色か ら赤色にかけて異常率が高いことを示す。BER は 10<sup>-15</sup> で設計されており、今回見るデータに記録 されているデータの Bit 総数は 2.4 × 10<sup>8</sup> であるため、この Long Run 中では Bit Flip は 0 件であ るのが理想であるが、Pulsed Run の時と同様に全体の 2 割程度の Event でエラーが発生しており、 設計通りの性能を発揮できていないことがわかる。





#### 異常として検出されたパルス

全ての手法で検知された異常波形の一部を図 6.7 に示す。Pulsed Run の際とカイニ乗及び SVM で検知された異常に差はなく、誤検知も存在しなかった。GAN は他の 2 手法と比較して、Pulsed Run 同様検知された異常が少なかった。また、Pulsed Run の場合と比べて Pedestal Run は図 6.8 に示すように少数のエラーが含まれる Super Cell が多いため、ヒートマップがまだらになっている。 このエラーは現在原因の分かっていない未知のエラーであり、本研究で開発した異常検知システムに より自動的に検出が可能になった。図 6.6 において、全てのイベントが異常と判別された Super Cell 数の内訳を表 6.2 に示す。



図 6.7 全ての手法で検出された異常の一部。青線が訓練に用いたデータの平均値、赤線が実際に 検知されたパルス。



図 6.8 少数のエラーが含まれる Super Cell でのイベントを全てプロットした図。

表 6.2 図 6.6 において、全てのイベントが異常と判別された Super Cell 数の内訳。Super Cell の総数は 320 個である。

	Flip エラー	Validtation エラー	誤検知
chi2	20	0	0
SVM	20	0	0
GAN	0	0	0

## 第7章

# 結論と展望

## 7.1 結論

本研究では液体アルゴンカロリメータ内で発生する波形異常を検知するための異常検知手法の開 発、検証及び比較を行った。

ATLAS 検出器では、HL-LHC に向けて高輝度化する LHC からの事象から興味のある事象を選び出すためのトリガーシステムの精度向上が求められており、液体アルゴンカロリーメータにおいては、Super Cell と呼ばれる新しい読み出し単位を導入することによりこれを実現する。Super Cell は従来の Trigger Tower と呼ばれる読み出し単位  $\Delta \eta \times \Delta \phi = 0.1 \times 0.1$  を 10 倍細かくした  $\Delta \eta \times \Delta \phi = 0.025 \times 0.1$ の読み出し単位を用いており、電子・光子由来の電磁シャワーとハドロンジェットの形状の違いを識別することによってトリガーレートを抑える。

この新しい読み出し方法の導入に合わせて、読み出しエレクトロニクスも大幅な入れ替えが行われ ている。新しい読み出しエレクトロニクスでは、Super Cell から得られた信号を LTDB と呼ばれる フロントエンドボードで整形、デジタイズされ、光ファイバーを用いてバックエンドの LDPB に送 られる。LDPB には LATOME ボードと呼ばれる AMC が搭載されており、ここでトリガーのため のエネルギー計算、及びタイミング計算が行われる。LATOME ボードで得られた計算結果は光ファ イバーによって後段の FEX に送信され、トリガー計算に用いられる。このとき LATOME ボード は 25 Tbps でデータを受信し、50 Tbps でデータを送信する。データ転送の際の BER は 10<sup>-15</sup> 以 下になるように設計されているが、シリアライザーやトランシーバーの設定により Bit の取り違い が発生し、Super Cell からの信号の波形が歪む場合がある。この波形異常を検知するための手法と して、本研究では従来手法のカイニ乗法、機械学習による one-class SVM、および深層学習による EfficientGAN による波形異常検知システムを開発、検証、及び比較を行った。

このシステムは1つの分類器で全ての Super Cell からの信号を分類できるように設計し、パルス を入射しない状態で信号を得る Pedestal run、全ての Super Cell に既定のパルスを一斉に入射する Pulsed run で得られるデータを訓練として用いた。人工的に作った Bit Flip Error に対する分類性 能は、Pulsed Run に対してはカイ二乗法による分類方法が一番性能が高く、Bit Flip の大きさが± 32 ほどまでは高い分類性能が維持できることがわかった。Pedestal Run に対してはカイ二乗法と one-class SVM が同等の性能を示し、Bit Flip の大きさが± 4 ほどまでは高い分類性能が維持できる ことがわかった。また、分類器を訓練する時間はカイ二乗法がおよそ 0.078 ms、one-class SVM が 1.147 ms ほどであり、カイニ乗法の方が速いのに対して、異常の分類時間は、5000 件のパルスの分 類に対してカイニ乗法がおよそ 3.915 ms、one-class SVM が 1.300 ms と one-class SVM の方が 3 倍ほど速い性能となった。Efficient GAN は訓練に約 21 秒、分類に約 3 秒ほどかかる結果となった。

また、現在運用されている LATOME ボードからのモニタリングデータを上記の分類器で異常検 知し、その性能を比較した。Pulsed Run に対してはカイニ乗法では波形異常を検知することはでき たものの、異常のないパルスを異常と判別する誤検知が多く発生した。誤検知されたパルスはいずれ も波高の低いパルスであり、ノイズが大きく影響し波形が歪みやすいことに起因するものであった。 対して one-class SVM ではカイニ乗で検知された波形異常を全て検知しており、かつ前述のような 誤検知は発生しなかった。one-class SVM でによる判別ではデータの分布を考慮する必要がなく、訓 練データに含まれるデータ全てが分類境界の決定の際に等しく考慮されることにより、波高が低く、 波形が歪みやすいパルスであっても異常として検知されることはなかった。また、Efficient GAN で は誤検知は発生しなかったものの、異常として記録されるパルスが他の手法と比べて少なかった。 Pedestal Run に対してはカイニ乗法、one-class SVM で検知された異常波形の数に大きな差は存在 しなかった。Efficient GAN では Pulsed Run の際と同様に誤検知は発生しなかったものの、異常と して記録されるパルスが他の手法と比べて少なかった。

## 7.2 今後の展望

液体アルゴンカロリメータのハードウェアインストールや、ファームウェアのアップグレードは現 在も進行中であるため、新しい問題の発生、あるいは、既知の問題の再燃はいつ起こってもおかしく ない状況である。そのため、本研究のように定期的に波形の異常さを検知するシステムを導入するこ とは重要である。波高がレイヤー毎に違うことに由来する異常の誤検知の問題については、まず分類 器をレイヤー毎に分けることで対応し、機械学習の訓練過程で元の波高やレイヤーの情報を一緒に訓 練するなど、分類器に与える訓練データを工夫するなどの対応を模索する。また、今回は形状の異常 のみを検知しているが、Pedestal の周期的な振動や、Super Cell 間の相関で発生する異常など、パ ルスの形状を変化させない異常が確認されているため、その検知も今後の課題の一つである。GAN の異常検知への応用研究は始まったばかりであり、今後の発展も期待できる。また、GAN を用いた 異常検知は他の手法は異常検知を行うだけでは他の手法に劣るものの、異常が発生したパルスの波形 を補完するなどの用途を模索する。

本研究で利用した実データは実際に使われるデータ読み出し経路ではなく、モニタリング用に出力 されたものである。この2つの読み出し経路から得られるデータフォーマットはそれぞれ違うもので あり、また含まれる情報も大幅に増加するため、それらを正しく効率的に分類するシステムの開発が 必要となる。

謝辞

まず主査の田中純一教授、副査の石野雅也教授、奥村恭幸准教授にはお忙しい中修論審査をしてい ただき感謝申し上げます。

本研究を進めるにあたり、多くの方からの力添えをいただきましたが、特に指導教員の田中純一教 授と、江成祐二助教は毎週のミーティングなどで多くの助言を賜りました。素粒子実験は自分にとっ て初めての新しい分野でありわからないことも多くありましたが、その都度研究の方針などを共に考 えていただきました。特に修論作成の時期ではほぼ毎日のように修論の添削や発表練習をしていただ きました。また、齊藤真彦助教には修論作成の際に機械学習や深層学習の分野を中心として、多くの 助言を賜りました。

研究室のメンバーにも感謝したいと思います。先輩方の指導や先行研究のおかげで、初めて取り 組む分野への理解や研究などをスムーズに行うことができました。CERN での研究のみならず、生 活面でも多くの助言をいただき、短い期間ではあるものの慣れない海外での生活を充実したものに することができました。特に舘野元氏にはプログラムや LAr 検出器の基礎的な知識などについて、 非常に多くの時間を割いてご指導いただきました。ICEPP の同期メンバーは、入学前からのゼミや CERN 現地での生活など多くの時間を共にしました。同じ目線での話ができる同期の存在は自分に とって非常に貴重で有り難い存在でした。ICEPP 秘書室の方々には出張の手続きなど多くの事務作 業を行っていただきました。昨今の混乱する情勢の中で研究に集中できたのは秘書室の方々のサポー トがあってこそでした。進学への背中を押してくれた友人達にも感謝したいと思います。地方から上 京し、生物物理系の研究分野から素粒子系の分野に進むことは大変勇気のいる決断でしたが、振り 返ってみると良い選択であったと思います。最後に、何もかもが事後報告であっても寛大な心で受け 止め、長い学生生活を支えてくれた両親と祖父母に感謝します。非常に多くの方の手助けの下で充実 した学生生活を送ることができました。本当にありがとうございました。


- Lyndon Evans and Philip Bryant. Lhc machine. *Journal of instrumentation*, Vol. 3, No. 08, p. S08001, 2008.
- [2] ATLAS Collaboration. Observation of a new particle in the search for the standard model higgs boson with the atlas detector at the lhc. *Physics Letters B*, Vol. 716, No. 1, pp. 1–29, 2012.
- [3] ATLAS Collaboration. The atlas experiment at the cern large hadron collider. *Jinst*, Vol. 3, p. S08003, 2008.
- [4] 宇野健太. Lhc-atlas 実験における液体アルゴンカロリメータのアップグレードに向けたファー ムウェアの研究開発. Master's thesis, 東京大学理学系研究科, 2017.
- [5] Fabian Kuger. Signal Formation Processes in Micromegas Detectors and Quality Control for large size Detector Construction for the ATLAS New Small Wheel. PhD thesis, Wurzburg U., 2017.
- [6] ATLAS Collaboration. Technical design report for the phase-ii upgrade of the atlas lar calorimeter. Technical report, 2017.
- [7] HL-LHC Industry. Project schedule. https://project-hl-lhc-industry.web.cern.ch/content/ project-schedule.
- [8] M Aleksa, L Hervas, M Fincke-Keeler, I Wingerter-Seez, C Marino, Y Enari, S Majewski, F Lanni, and W Cleland. Atlas liquid argon calorimeter phase-i upgrade technical design report. Technical report, 2013.
- [9] 大石玲誉. Lhc-atlas run3 実験に向けた液体アルゴンカロリメータートリガー読み出しファーム ウェアの開発と検証. Master's thesis, 東京大学理学系研究科, 2019.
- [10] L1calotriggerpublicresults. https://twiki.cern.ch/twiki/bin/view/AtlasPublic/ L1CaloTriggerPublicResults, 2016.
- [11] Nicolas Dumont Dayot. Latome design, lapp. https://indico.cern.ch/event/470196/, 2016.
- [12] Georges Aad. Atlas lar calorimeter trigger electronics phase-1 upgrade. Technical report, ATL-COM-LARG-2017-043, 2017.
- [13] Larcratecommissioning installation cartoon. https://twiki.cern.ch/twiki/bin/view/LAr/ WebHome?topic=LArCrateCommissioning, 2021.
- [14] Harold Hotelling. Multivariate quality control. Techniques of statistical analysis, 1947.
- [15] Corinna Cortes and Vladimir Vapnik. Support-vector networks. Machine learning, Vol. 20,

No. 3, pp. 273–297, 1995.

- [16] 竹内一郎, 烏山昌幸. サポートベクトルマシン. 講談社, 2015.
- [17] Bernhard E Boser, Isabelle M Guyon, and Vladimir N Vapnik. A training algorithm for optimal margin classifiers. In *Proceedings of the fifth annual workshop on Computational learning theory*, pp. 144–152, 1992.
- [18] Ian Goodfellow, Jean Pouget-Abadie, Mehdi Mirza, Bing Xu, David Warde-Farley, Sherjil Ozair, Aaron Courville, and Yoshua Bengio. Generative adversarial nets. Advances in neural information processing systems, Vol. 27, pp. 2672–2680, 2014.
- [19] Yuan Xue, Tao Xu, Han Zhang, L Rodney Long, and Xiaolei Huang. Segan: Adversarial network with multi-scale l 1 loss for medical image segmentation. *Neuroinformatics*, Vol. 16, No. 3-4, pp. 383–392, 2018.
- [20] Raghavendra Chalapathy and Sanjay Chawla. Deep learning for anomaly detection: A survey. arXiv preprint arXiv:1901.03407, 2019.
- [21] Houssam Zenati, Chuan Sheng Foo, Bruno Lecouat, Gaurav Manek, and Vijay Ramaseshan Chandrasekhar. Efficient gan-based anomaly detection. arXiv preprint arXiv:1802.06222, 2018.
- [22] Thomas Schlegl, Philipp Seeböck, Sebastian M Waldstein, Ursula Schmidt-Erfurth, and Georg Langs. Unsupervised anomaly detection with generative adversarial networks to guide marker discovery. In *International conference on information processing in medical imaging*, pp. 146–157. Springer, 2017.
- [23] 舘野元. Lhc-atlas 実験 phase-i アップグレードにおける液体アルゴンカロリメータトリガー読 み出しの較正と性能評価. Master's thesis, 東京大学理学系研究科, 2019.
- [24] Fabian Pedregosa, Gaël Varoquaux, Alexandre Gramfort, Vincent Michel, Bertrand Thirion, Olivier Grisel, Mathieu Blondel, Peter Prettenhofer, Ron Weiss, Vincent Dubourg, et al. Scikit-learn: Machine learning in python. the Journal of machine Learning research, Vol. 12, pp. 2825–2830, 2011.
- [25] Keras: the python deep learning api. https://keras.io/.
- [26] Tensorflow. https://www.tensorflow.org/.
- [27] Numpy. https://numpy.org/.
- [28] Scipy library scipy.org. https://scipy.org/scipylib/.
- [29] Uproot documentation. https://uproot.readthedocs.io/.
- [30] Diederik P Kingma and Jimmy Ba. Adam: A method for stochastic optimization. arXiv preprint arXiv:1412.6980, 2014.
- [31] Rene Brun and Fons Rademakers. Root—an object oriented data analysis framework. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment, Vol. 389, No. 1-2, pp. 81–86, 1997.

# 付録

# A データの前処理

## A.1 本研究におけるデータの前処理

機械学習や深層学習を行う際、データの前処理はその性能に関わる重要な工程である。本研究では Pulsed Run の異常検知を行う際、パルスからペデスタルを引き、パルスの立ち上がりが 0、波高が 1 となるように規格化をしている。その過程を図 7.1 に示す。本付録では、one-class SVM と Efficient GAN がデータの前処理の違いによって分類性能にどのような差が出るかを述べる。



## A.2 one-class SVM における比較

ある 1 つの Super Cell から得られるパルスについて考える。波形を加工しないパルスで訓練した 場合、ペデスタルを引いたパルスで訓練した場合、ペデスタルを引き規格化したパルスで訓練した 場合の Accuracy を表 7.1 に示す。パラメータは  $\gamma = 0.01, \nu = 0.03$  を用いた。one-class SVM で は、規格化したパルスを訓練データ及びテストデータとして用いた方が Accuracy が高くなることが わかる。

	Accuracy
無加工のパルス	$0.803 \pm 0.026$
ペデスタルを引いたパルス	$0.804 \pm 0.03$
規格化をしたパルス	$0.944 \pm 0.004$

表 7.1 訓練データに用いるパルスの形状を変えた際の Accuracy の比較。同じ Super Cell から 得られたパルスに対して 10 回計算した Accuracy の平均とその誤差を示している。

#### A.3 Efficient GAN における比較

one-class SVM の際と同様に、ある1つの Super Cell から得られるパルスについて考える。波形 を加工しないパルスで訓練した場合、ペデスタルを引いたパルスで訓練した場合、ペデスタルを引き 規格化したパルスで訓練した場合について、それぞれ訓練時の損失の推移と、異常値の推移を図 7.2、 7.3、7.4 に示す。波形を加工しないパルス、及びペデスタルを引いただけのパルスで訓練した場合、 損失と異常値が共に収束しなくなっている。それに対し、ペデスタルを引き規格化したパルスで訓練 した場合は損失が非常に狭い範囲で振動し、異常値は iteration 数 2000 ほどで収束していることが わかる。これは、Efficient GAN が学習する際に0 に近い値から学習を始めること、そして扱う桁が 大きくなることにより、訓練時のブレが大きくなることが原因である。

4.0

3.5 3.0

e 2.5

<u>}</u> 2.0

0 1.5

1.0

0.5



(a) iteration 数に対する損失の推移



4000

iteration

6000

2000

nomaly score, raw pulse

validation loss

8000

図 7.2 無加工のパルスで訓練を行った際の損失の推移と異常値の推移











## B SVM の数理

#### B.1 最適化問題

SVM ではマージンを最大化するため最適化問題を解く必要がある。ある線形条件の元で関数を最小化もしくは最大化する問題を最適化問題と呼ぶ。今、解くべき最適化問題は

$$\min_{\boldsymbol{w},b,\xi} \left[ \frac{1}{2} \| \boldsymbol{w} \|^2 + C \sum_{i=1}^N \xi_i \right]$$
(7.1)

$$s.t.y_i(\boldsymbol{w}^{\mathsf{T}}\boldsymbol{x}_i+b) > 1-\xi_i, \tag{7.2}$$

$$\xi_i \ge 0 \tag{7.3}$$

である。最適化問題において、元の問題を主問題と呼び、最小化(もしくは最大化)する関数を目的 関数と呼ぶ。以下では、この問題を別の変数に対する最大化問題に書き換えることを考える。この書 き換えを双対化と呼び、書き換えられた最適化問題を双対問題と呼ぶ。

#### 主問題と双対問題の等価性

ラグランジュ未定乗数法を用いて双対問題を導出することを考える。 今、非負変数 α<sub>i</sub>, μ<sub>i</sub> を用いて、ラグランジュ関数

$$L(\boldsymbol{w}, b, \boldsymbol{\xi}, \boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\mu}) = \frac{1}{2} \|\boldsymbol{w}\|^2 + C \sum_{i=1}^N \xi_i - \sum_{i=1}^N \alpha_i (y_i (\boldsymbol{w}^{\mathsf{T}} \boldsymbol{x}_i + b) - 1 + \xi_i) - \sum_{i=1}^N \mu_i \xi_i$$
(7.4)

を定義する。今、ラグランジュ関数を α, μ に対して最大化すると

$$p(\boldsymbol{w}, b, \boldsymbol{\xi}) := \max_{\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\mu}} L(\boldsymbol{w}, b, \boldsymbol{\xi}, \boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\mu})$$

$$= \frac{1}{2} \|\boldsymbol{w}\|^2 + C \sum_{i=1}^N \xi_i$$
(7.5)

と記述できる。つまり、主問題の目的関数はラグランジュ関数を用いて  $\min_{\boldsymbol{w},b,\boldsymbol{\xi}} p(\boldsymbol{w},b,\boldsymbol{\xi})$  と記述できる。

次に、ラグランジュ関数を $w, b, \xi$ に対して最小化した関数

$$q(\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\mu}) := \min_{\boldsymbol{w}, b, \boldsymbol{\xi}} L(\boldsymbol{w}, b, \boldsymbol{\xi}, \boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\mu})$$
(7.6)

を考える。この関数を目的関数とし、最大化する問題  $\max_{\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\mu}} q(\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\mu})$ を双対問題と呼ぶ。

主問題、双対問題の目的関数  $p(w, b, \boldsymbol{\xi}), q(\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\mu})$  に対して、最適解  $w^*, b^*, \boldsymbol{\xi}^*, \boldsymbol{\alpha}^*, \boldsymbol{\mu}^*$  が既知である とする。目的関数が凸であり、その制約条件が線形である場合は、強双対性と呼ばれる

$$p(\boldsymbol{w}^*, b^*, \boldsymbol{\xi}^*) = q(\boldsymbol{\alpha}^*, \boldsymbol{\mu}^*) = L(\boldsymbol{w}^*, b^*, \boldsymbol{\xi}^*, \boldsymbol{\alpha}^*, \boldsymbol{\mu}^*)$$
(7.7)

の等式が成り立つことが知られている。これは、双対問題を解けば主問題の解が得られることを示している。

#### 双対問題の具体形の導出

今、双対問題の目的関数  $q(\alpha, \mu) = \min_{w,b,\xi} L(w,b,\xi,\alpha,\mu)$ が満たすべき条件を考える。これは ラグランジュ関数を最小化する問題であるため、それぞれの変数に対して偏微分が 0 になる点を考え ると

$$\frac{\partial L}{\partial \boldsymbol{w}} = \boldsymbol{w} - \sum_{i=1}^{N} \alpha_i y_i \boldsymbol{x}_i = 0$$
(7.8)

$$\frac{\partial L}{\partial b} = -\sum_{i=1}^{N} \alpha_i y_i = 0 \tag{7.9}$$

$$\frac{\partial L}{\partial \xi_i} = C - \alpha_i - \mu_i = 0 \tag{7.10}$$

となる。これを整理すると、双対問題は

$$\max_{\alpha} \left[ -\frac{1}{2} \sum_{i,j} \alpha_i \alpha_j y_i y_j \boldsymbol{x}_i^T \boldsymbol{x}_j + \sum_i \alpha_i \right]$$
(7.11)

$$s.t.\sum_{i} \alpha_i y_i = 0, \tag{7.12}$$

$$0 \le \alpha_i \le C \tag{7.13}$$

となる。

#### B.2 カーネルトリック

カーネル関数

カーネルトリックとは、データ x を特徴空間に写したときの双対問題の目的関数

$$\max_{\alpha} \left[ -\frac{1}{2} \sum_{i,j} \alpha_i \alpha_j y_i y_j \phi(\boldsymbol{x}_i)^T \phi(\boldsymbol{x}_j) + \sum_i \alpha_i \right]$$
(7.14)

内に存在する内積  $\phi(\mathbf{x}_i)^T \phi(\mathbf{x}_j)$ を、カーネル関数と呼ばれる  $K(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) = \phi(\mathbf{x}_i)^T \phi(\mathbf{x}_j)$ で表される 関数で置き換えることにより、実際の写像関数  $\phi$  の具体形や、内積の計算が必要なくなる手法であ る。カーネル関数はどのような関数でも良いわけではなく、マーサーの定理と呼ばれる、関数が内積 の総和で分解できるための必要十分条件に関する定理を満たすことが必要である。マーサーの定理は 変数  $\mathbf{x}, \mathbf{y} \in \chi$ の関数が内積の形

$$K(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}) = \sum_{i}^{\infty} \lambda_{i} \phi_{i}(\boldsymbol{x})^{T} \phi_{i}(\boldsymbol{y}), \qquad (7.15)$$

$$\lambda_i \ge 0 \tag{7.16}$$

とかけるための必要十分条件が、任意の二乗可積分の関数 f に対して

$$\int_{\chi} K(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}) f(\boldsymbol{x}) f(\boldsymbol{y}) d\boldsymbol{x} d\boldsymbol{y} \ge 0$$
(7.17)

を満たすことを主張する定理である。

カーネル関数には代表的なものとして

RBF カーネル 
$$K(\boldsymbol{x_i}, \boldsymbol{x_j}) = \exp(-\gamma \|\boldsymbol{x_i} - \boldsymbol{x_j}\|^2)$$
 (7.18)

多項式カーネル 
$$K(\boldsymbol{x}_i, \boldsymbol{x}_j) = (\boldsymbol{x}_i \boldsymbol{x}_j^T + c)^p$$
 (7.19)

シグモイドカーネル 
$$K(\boldsymbol{x_i}, \boldsymbol{x_j}) = \tanh(a\boldsymbol{x_i}\boldsymbol{x_j}^T + b)$$
 (7.20)

などが存在する。多くの場合では RBF カーネルが用いられており、本研究でも RBF カーネルを用いている。

#### RBF カーネル内の変数 $\gamma$ の解釈

RBF カーネルを新しい変数  $\gamma = \frac{1}{2\sigma^2}$  用いて表現すると

$$K(\boldsymbol{x_i}, \boldsymbol{x_j}) = \exp\left(-\frac{\|\boldsymbol{x}_i - \boldsymbol{x}_j\|^2}{2\sigma^2}\right)$$
(7.21)

とかける。これは、直感的にはデータが存在する空間上においてどれだけの分散  $\sigma$ を持つか、どれだけの範囲を自分の領域と主張するか、と解釈することができる。つまり、 $\gamma$ が小さい時( $\sigma$ が大きいとき)データは広い範囲を自分の領域と主張し、 $\gamma$ が大きいとき( $\sigma$ が小さいとき)データは狭い範囲を自分の領域と主張することになる。境界はその領域に沿って引かれるため、 $\gamma$ が大きくなるにつれて境界が複雑化する。実際に $\gamma$ が大きくなると境界が複雑化することを図 7.5 に示す。



(a)  $\gamma = 0.1$  (b)  $\gamma = 1$  (c)  $\gamma = 10$ 図 7.5  $\gamma$  を変化させた際の分類境界の変化。グレーで示された線が分類境界であり、 $\gamma$  が大きくなると境界が複雑化する。

# C Efficient GAN の構成

### C.1 Generator

Generator は潜在変数を入力とし、パルスを出力するニューラルネットワークである。全結合層4 層で構成され、活性化関数は Leaky ReLU を用い、 $\alpha_{LR} = 0.3$  とした。その構成の詳細図 7.6 に示 す。また最適化関数は Adam を用いた。



図 7.6 Generator の構成。(a) における Output Shape がノード数である。

#### C.2 Encoder

Encoder はパルスを入力とし、潜在変数を出力するニューラルネットワークである。全結合層が3 層で構成され、活性化関数は Leaky ReLU を用いた。その構成の詳細を図 7.7 に示す。また最適化 関数は Adam を用いた。



図 7.7 Encoder の構成。(a) における Output Shape がノード数である。

## C.3 Discriminator

Discriminator はパルスを入力とし、0~1を出力するニューラルネットワークである。潜在変数 の入力に対する Dense 層が3層、パルスの入力に対する全結合層が4層で構成され、活性化関数 は Leaky ReLU を用いた。その構成の詳細を図 7.8 に示す。Dense レイヤーの後ろに挿入されてい る Dropout レイヤーは、指定した割合のノードを無効化し、過学習や GAN において片方のネット ワークが強くなりすぎることを抑制するために挿入される。今回用いた Dropout レイヤーは 10 % のノードを無効化するようにパラメータを指定した。また最適化関数は Adam を用いた。



(a)



図 7.8 Discriminator の構成。(a) における Output Shape がノード数である。