

2024年度 修士論文

ハドロンコライダーにおけるグラフニューラルネットワークを用いた particle flow アルゴリズムの研究

(Research of particle flow algorithm using graph neural network in hadron collider)

河野 匡

東京大学大学院 理学系研究科物理学専攻

指導教員: 寺師 弘二 教授

令和7年1月

要旨

CERN に設置されている大型ハドロン衝突型加速器 LHC では、世界最高エネルギーでの陽子陽子衝突による物理現象の研究が行われている。その探究や物理理論の検証においては、トラッカーとカロリメータの情報を利用した衝突イベントの再構築能力が重要である。

現在、ATLAS 実験では、トラックとカロリメータの情報を互いに組み合わせ、二重カウントを避ける Particle Flow アルゴリズムが採用されている。しかし、Particle Flow アルゴリズムの性能も完全ではなく、精度向上を目指す研究が続けられている。

本研究では、Particle Flow アルゴリズムに機械学習を応用した先行研究 (F. A. Di Bello et al., arXiv:2212.01328) において提示された HGPflow モデルをベースとし、そのアルゴリズムの改善を図る。Particle Flow は本来衝突事象全体に対する再構成を目標としているが、今回はまずジェット 1 本の再構成を対象とした。HGPflow モデルは、カロリメータのセルにどの粒子がエネルギーを落としたかを表す Incidence Matrix という行列を予測する前段とその行列をもとにそれぞれの粒子の運動量や種類を予測する後段の 2 段階に分かれたグラフニューラルネットワークベースのモデルである。

先行研究で提示されたモデルで学習を行うと非常に時間がかかっていたため、本研究ではまず使用するデータの情報量を落とすことで学習にかかる時間を削減した。それによる精度低下を回避するために、HGPflow モデルの前段と後段のそれぞれのアーキテクチャに変更を加えた。

その後先行研究と同じデータセットに対して予測精度をビーム軸に対する横運動量である p_T および擬ラピディティ η と方位角 ϕ について検証したところ、荷電粒子の p_T に関してはオリジナルと同程度の予測精度を保っていた。一方、中性粒子の η 、 ϕ 、 p_T に関しては精度が劣化していた。特に p_T に関しては劣化が大きかった。

これは前段モデルでの予測精度が低くなっており、その結果に強く影響される中性粒子の p_T の精度低下として現れていると考えられる。一方で、後段に導入した tabnet によって中性粒子の p_T の予測分解能を向上させ、先行研究の結果に近づけることができた。また、研究の中で先行研究や本研究で採用されている損失関数も最適なものではない可能性があるなど、前段モデルに対する改善すべき点がいくつか確認できた。そのため、さらなる精度向上のためには前段のモデルへの工夫が必要である。

Contents

1	序論	1
1.1	コライダー実験とジェット再構成	1
1.1.1	LHC 実験の概要	1
1.1.2	粒子の検出とデータ取得	1
1.1.3	ジェット	2
1.2	Particle Flow アルゴリズム	3
1.2.1	アルゴリズムの概要	3
1.2.2	カロリメータのみを使ったジェット再構成	3
1.2.3	従来の Particle Flow と機械学習ベースの手法	4
1.3	研究目的と本論文の構成	4
2	加速器実験の概要	5
2.1	加速器実験の目的と背景	5
2.2	LHC 加速器と ATLAS 検出器	5
2.2.1	LHC 加速器	5
2.2.2	ATLAS 検出器	6
2.2.3	座標系の定義	10
2.2.4	物理オブジェクトの定義	10
3	Particle Flow	12
3.1	Particle Flow	12
3.2	ATLAS における Particle Flow アルゴリズム	12
4	ハイパーグラフを用いた Particle Flow	14
4.1	ハイパーグラフ	14
4.2	本モデルにおける Incidence Matrix	14
4.3	モデルの全体像	16
4.4	Incidence Matrix を予測する前段モデルの詳細	16
4.4.1	モデルの学習のための準備	16
4.4.2	学習のステップ	17
4.4.3	損失関数と列方向のマッチング	18
4.5	粒子の物理量と PDGID を予測する後段モデル	19
5	データセット	21
5.1	検出器シミュレーション	21
5.2	データ生成	22
5.3	モデルへの入力変数	23

6	HGPflow モデルの研究とアーキテクチャ変更による改善	25
6.1	カロリメータ由来のデータの粒度の変更	25
6.2	前段モデルでの予測対象の変更	25
6.3	ネットワークの部分的変更	26
6.4	後段のネットワークの変更	26
6.4.1	Residual MLP	26
6.4.2	tabnet	26
6.4.3	アンサンブル	26
6.4.4	後段ネットワークの変更	27
7	先行研究のモデルとの精度比較	28
7.1	比較するモデル	29
7.2	時間に関する優位性	30
7.3	前段モデルの予測	30
7.4	荷電粒子に対する予測性能	31
7.5	中性粒子に対する予測性能	32
7.5.1	ϕ および η の精度比較	32
8	考察と展望	34
8.1	まとめ	39
	References	42

Chapter 1

序論

この章では、本研究の目的とその背景について端的に解説し、最後に本論文の構成について述べる。

1.1 コライダー実験とジェット再構成

1.1.1 LHC 実験の概要

近年の高エネルギー物理学実験においては、標準模型の精密検証に加え、標準模型を超える新物理の探索が重要なテーマとなっている。欧州原子核研究機構 (CERN) が運用する大型ハドロン衝突型加速器 (Large Hadron Collider, LHC) は、陽子同士を非常に高いエネルギーで衝突させることにより、理論の検証やそれを越える物理の発見に貢献してきた。LHC では ATLAS 実験や CMS 実験など複数の国際共同研究が行われており、2012 年には ATLAS および CMS の両実験でヒッグス粒子が観測されたことが大きな話題を呼んだ。

標準模型は多数の実験でその有効性が検証されてきた一方で、暗黒物質の存在や電弱スケールの階層性など、未解明な問題が依然として残されている。こうした課題を解明するため、LHC 実験ではさらなる統計量の蓄積や衝突エネルギーの向上に伴い、より高精度な解析が求められている。

1.1.2 粒子の検出とデータ取得

LHC の実験では、高エネルギー陽子衝突の断面積が非常に大きいため、膨大な数の衝突事象が発生する。実験では衝突から生じる粒子を効率よく捉え、その素性を識別するため、巨大な多層構造の検出器システムが用いられる。高精度な空間分解能をもつ**内部飛跡検出器 (トラッカー)**は荷電粒子を捉え、その飛跡を再構成し運動量などを測定する。一方、トラッカーの外側に設置される**電磁カロリメータ** および**ハドロンカロリメータ**は、粒子が残すエネルギーを測定し、荷電粒子・中性粒子を含めた粒子種の同定やエネルギー測定に利用される。これらの点については2章にてより詳しく解説する。

実際のデータ取得・解析では、実験で観測される 40 MHz 以上にもなる膨大な事象の中から、トリガーシステムを使って興味のある事象のみ (約 1 kHz) を取り出す。保存したデータは、再構成・識別・キャリブレーション等を経て、新物理探索や標準模型の精密測定などのデータ解析に用いられる。

1.1.3 ジェット

ハドロンとハドロンの衝突では大量の粒子が生成される。その中でもクォークとグルーオンは検出器内では**ジェット**として観測される。ジェットはクォークやグルーオンが強い相互作用をして多数のハドロンを生成することによってできる噴射状の粒子の集団である。検出器で観測されるのは、それらの個々の粒子が落としたエネルギーであるのでこの情報から一度粒子あるいは粒子群として再構成し (pflow オブジェクトと呼ぶ)、それを元にジェットを再構成する必要がある。さらに、このジェットの観測量であるエネルギーや向きを精度良く求めることは、ジェットを用いたデータ解析において重要となる。

ATLAS 実験グループでは、ジェットの再構成に anti- k_t アルゴリズム [1] が採用されている。以下に anti- k_t アルゴリズムの仕組みとジェットエネルギー分解能に関する測定結果を述べる。

anti- k_t アルゴリズムによるジェット再構成

anti- k_t アルゴリズムでは、以下の手順でジェットを再構成する。:

1. 距離尺度の定義

pflow オブジェクト間の結合距離 d_{ij} および粒子とビーム軸との距離 d_{iB} を以下のように定義する。:

$$d_{ij} = \min \left(\frac{1}{p_{T,i}^2}, \frac{1}{p_{T,j}^2} \right) \frac{\Delta R_{ij}^2}{R^2}, \quad d_{iB} = \frac{1}{p_{T,i}^2}.$$

ここで、 $p_{T,i}$ は pflow オブジェクト i の横運動量、 $\Delta R_{ij} = \sqrt{(\Delta\eta)^2 + (\Delta\phi)^2}$ は粒子 i と j の距離、 R はジェットサイズを決定するパラメータである。

2. 最小距離の計算と結合

全ての粒子ペア d_{ij} および粒子とビーム軸の距離 d_{iB} を計算し、最小値を持つ距離に応じて以下を行う:

- 最小値が d_{ij} の場合、粒子 i と j を結合する。
- 最小値が d_{iB} の場合、粒子 i をジェットとして確定する。

3. 反復処理

全ての粒子がジェットに割り当てられるまで、この処理を繰り返す。

ここで R はジェットのサイズを表し、LHC では 0.4 や 0.5 が典型的に用いられており、ATLAS 実験では 0.4 を採用している。このように、 $\min(p_T^{-2})$ を用いることで横運動量の大きなオブジェクトを重視し、IRC safe を実現している。また、 p_T の逆数を用いることが anti- k_t の名前の由来である。

ジェットエネルギースケール

ジェットエネルギースケールは、ジェットエネルギーの測定値を補正するために用いられる。後に述べる Particle Flow アルゴリズムなどを組み合わせることで、以下のような系統誤差が達成されている:

- $p_T = 20$ GeV では約 5%。
- $p_T = 250 \sim 2000$ GeV では約 1%。
- $p_T > 2.5$ TeV では約 3.5%。

ジェットエネルギー分解能

ジェットエネルギー分解能は、ジェット再構成の精度を表す重要な指標であり、次式で記述される：

$$\frac{\sigma(E)}{E} = \frac{a}{\sqrt{E}} \oplus b,$$

ここで、 a は確率的要因、 b は検出器以外の部分に落としたエネルギーのような Constant タームを表す。ATLAS 検出器を用いた $\sqrt{s} = 13$ TeV の陽子-陽子衝突データに基づく結果は以下の通りである。[2]：

- $p_T = 20$ GeV では分解能は約 24%。
- $p_T = 300$ GeV では分解能は約 6%。

エネルギー分解能はジェットの横運動量 p_T に依存しており、高いエネルギー領域ではより良好な分解能が得られる。

1.2 Particle Flow アルゴリズム

1.2.1 アルゴリズムの概要

加速器実験における粒子同定とエネルギー測定を高精度で実現する手法として、Particle Flow と呼ばれるアルゴリズムが提案・発展してきた。Particle Flow は、トラックが得意とする荷電粒子の運動量測定と、カロリメータが得意とするエネルギー測定を組み合わせることで、衝突事象における粒子ごとの運動量などを推定する手法である。その足掛かりとして最も重要であるジェットに対する Particle Flow が本論文の研究テーマである。具体的には、3章にて詳しく述べる。

1.2.2 カロリメータのみを使ったジェット再構成

Particle Flow の導入以前、大型加速器実験におけるジェットの再構成は、主に各検出器が独立して行った再構成結果を統合する形で行われていた。例えばトラックのみでの再構成は以下のように行われていた。

トラックでの再構成手法

トラックでは、以下の手順で荷電粒子のトラックを再構成できる。[3]:

- **ヒットのクラスタリング:** 各検出層で記録されたヒットをクラスタリングし、ノイズを除去。
- **ヒットの結合とトラックの作成:** クラスタリングされたヒットを結び、粒子が通過した軌跡（トラック）を再構成。
- **トラックパラメータの推定:** 再構成したトラックを基に、磁場中での曲率などのトラックパラメータを計算。

電磁カロリメータでの再構成手法

また、電磁カロリメータでは以下のように粒子の再構成が行われている。[4]:

- **シャワーのクラスタリング**: 粒子の入射位置を基にエネルギーが落ちているカロリメータセルをクラスタリング。
- **エネルギー較正**: シミュレーションやビームテストで得られた較正係数を使用してエネルギーを較正。
- **粒子識別**: シャワー形状や位置を基に電子と光子を識別。

これらの手法には独立して再構成を行うことによる不整合や複雑な衝突事象での精度が十分でないことなどの課題があった。

1.2.3 従来の Particle Flow と機械学習ベースの手法

Particle Flow アルゴリズムは、それぞれの検出器の測定結果を組み合わせるという点で独立した再構成手法よりも優れている。しかしながら従来の Particle Flow アルゴリズムでは粒子の種類やエネルギーを推定するために、人間が設計したルールや閾値を用いていた。しかし近年、機械学習 (Machine Learning, ML) 技術の発展に伴い、大量のシミュレーションデータや実験データを用いてニューラルネットワークなどのモデルを学習させ、より自動的かつ最適化された手法の探索が活発に行われている。特に深層学習 (Deep Learning) の進展は、検出器の情報を効果的に取り込むことを可能にし、従来のルールベース手法を上回る性能を示す可能性を秘めている。

1.3 研究目的と本論文の構成

研究目的

本研究は、Particle Flow アルゴリズムに機械学習を応用した先行研究 [5] において提示された HGPflow モデルをベースとし、そのアルゴリズムの改善を目的としたものである。先行研究によって提案されていたモデルを用いると学習および予測に非常に長い時間がかかっていた。本研究において行った再現実験では、NVIDIA RTX A6000 を用いての学習で1エポックあたり1時間ほどかけて150エポック以上学習させたが、先行研究の精度には到達しなかった。そのため、本研究ではできるだけ精度を落とさず学習にかかる時間を削減することを目指した。

本論文の構成

本論文は上記目的を目指した本研究の結果報告であり、まず2章において加速器実験に関する前提知識について提示する。その後、3章では加速器実験における衝突事象の再構成手法である、Particle Flow について導入する。それに続く4章では先行研究において提示されたモデルである HGPflow モデルの構造について解説し、5章で実験で用いたデータについて説明する。それ以降の6章では、まず先行研究のモデルにどのような変更を加えたのかについて説明する。7章では加えた変更によって得られた結果を提示し、8章においてその結果に関する考察およびそこから得られる展望について触れる。

Chapter 2

加速器実験の概要

本研究は大型加速器における機械学習アルゴリズムに関するものである。そのためまず、加速器実験に関する前提知識を提示する。

2.1 加速器実験の目的と背景

全ての物質は原子から構成されているということが、18から19世紀ごろの物理化学の発展により広く信じられるようになった。1897年のトムソンによる電子の発見およびラザフォードによる原子核の発見に伴い、原子にも構造があるということがわかり、その原子核も中性子と陽子からなることも発見された。1969年には陽子や中性子にも構造があることがわかった。陽子や中性子はクォークと呼ばれる素粒子から構成されており、このクォークは内部構造を持たない素粒子と考えられている。クォークや電子などのレプトンと呼ばれる粒子は大きさを持たない素粒子だと考えられており、少なくともその大きさは 10^{-19} m以下であることが確かめられている。

物理学、特に素粒子物理学の領域ではこのような微小な粒子を調べるようとしているのだが、このように非常に小さなスケールを探索するためには非常に大きなエネルギーが必要となる。そのエネルギーの大きさはおよそ以下のドブロイ波長から見積もることができる。

$$\lambda = \frac{2\pi \times 197 \text{ MeV} \cdot \text{fm}}{p} \quad (2.1)$$

ここで、 p は運動量であり、単位系は自然単位形である。ここに先ほどの 10^{-19} mを代入するとおよそ 10^{13} eV=10 TeV(1eVは素電荷を持つ粒子を1Vで加速した時に得られるエネルギー)ほどのスケールとなる。

最先端の加速器であるLHC加速器はこのスケールのエネルギーまで粒子を加速し、その衝突によって 10^{-19} mほどの分解能で素粒子物理の探索を行うことができる。

2.2 LHC 加速器と ATLAS 検出器

2.2.1 LHC 加速器

LHC (大型ハドロン衝突型加速器) は、スイス・ジュネーブ郊外のCERNに設置された周囲27 kmの巨大な円形加速器で、地下約100 mのトンネル内に構築されている。外見は円形に見えるが、実際には1/8周ごとに円弧と直線が交互に配置されており、円弧部分が合計18 km、直線部分が合計9 kmとなっている。

LHCでは、直線部分で高周波電場を発生させ、陽子を6.8 TeVにまで加速している。

円弧部分では磁場で陽子を曲げている。磁場に垂直な運動量成分が p_T であるような電荷 e の粒子を曲率半径 ρ で曲げるのに必要な磁場は、

$$p_T(\text{GeV}) = 0.3B(\text{T}) \times \rho(\text{m}) \quad (2.2)$$

により求められる。この式から、非常に高い p_T を持つ粒子を曲げるには強力な磁場が必要である。この強力な磁場を実現するために、LHCでは絶対温度1.9 Kに冷却された超伝導コイルを使っている。このコイルの材料にはNbTi（ニオブチタン）が採用されており、約1万アンペアの電流を流すことで強力な双極子磁場を生成している。

LHCで陽子を利用する理由は、シンクロトロン放射によるエネルギー損失（これは $(\frac{E}{mc^2})^4$ に比例）が電子に比べて非常に小さいためである。そのため陽子はシンクロトロン放射による損失を気にせずに効率よく加速できる。

2.2.2 ATLAS 検出器

ATLAS 検出器 (図 2.1) は、LHC によるハドロン衝突事象を検出するための粒子検出器であり、全長 46 メートル、直径 25 メートル、重量 7,000 トンにもなる。この検出器は、多種多様な粒子の特性を高精度に解析するために設計されている。ATLAS 検出器は内側から、内部飛跡検出器 (トラック)、電磁カロリメータ、ハドロンカロリメータ、ミューオン検出器という主な構成要素から成り立つ。内部飛跡検出器 (図 2.2) は、衝突点から飛び出す荷電粒子の軌跡を高精度で測定する装置であり、シリコンピクセル検出器、シリコンストリップ検出器、遷移放射トラック (TRT) から構成されている。これにより、粒子の運動量や電荷を特定することができる。電磁カロリメータ (図 2.3) は、電子や光子などの電磁相互作用を行う粒子のエネルギーを測定する装置で、鉛と液体アルゴンを用いたサンプリングカロリメータとして設計されており、高いエネルギー分解能を持つ。ハドロンカロリメータは、ハドロンのエネルギーを測定する装置で、鉄とシンチレータタイルを用いたサンプリングカロリメータとして構成されている。この装置はハドロンの全エネルギー測定に重要な役割を果たす。ミューオン検出器 (図 2.4) は、物質を透過しやすいミューオンを検出器の最外周で測定する装置であり、超伝導トロイダル磁石による磁場内での飛跡を追跡し、高精度な運動量測定を可能にする。

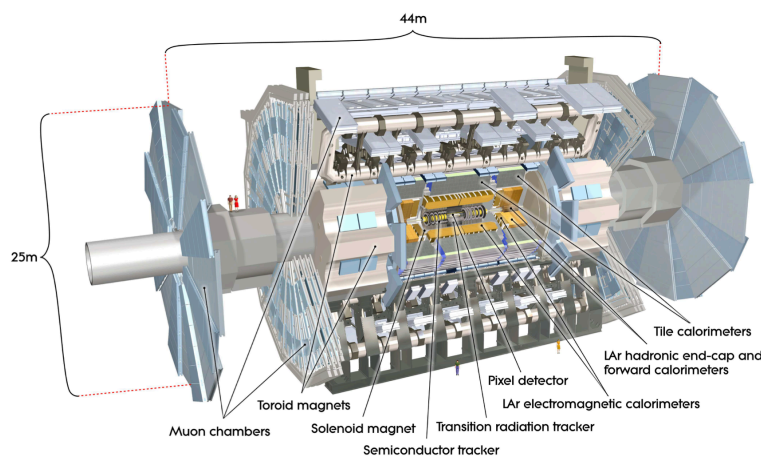


図 2.1: ATLAS 検出器 [6]

内部飛跡検出器 (トラッカー)

内部飛跡検出器は、ATLAS 検出器の中心部に位置し、衝突点から飛び出す荷電粒子の軌跡を高精度で測定するために設計されている。衝突点から半径 1.2 メートル、全長 6.2 メートルの円筒形の構造を持ち、非常に高い粒度と分解能を実現している。この検出器は、シリコンピクセル検出器、シリコンストリップ検出器、遷移放射トラッカーの三つの主要なサブシステムで構成されている。

シリコンピクセル検出器は、衝突点に最も近い位置に配置され、微細構造を持つピクセルセンサーを使用して荷電粒子の軌跡を記録する。これにより、粒子の初期位置や衝突点での特性を非常に高い精度で測定することができる。このセンサーは、空間分解能が優れており、複数のピクセルを組み合わせることで、 $r-\phi$ 方向で約 10 マイクロメートル、 z 方向で 115 マイクロメートルの精度を実現している。

シリコンストリップ検出器は、シリコンピクセル検出器の外側に配置され、ストリップ状のセンサーを用いて粒子の飛跡を検出する。この検出器は複数の層になる形で設置されている。これらの層は 2 重になったシリコンストリップセンサーを持っており、それらが 40 mrad の角度で張り合わされることで、入射粒子の位置測定を行っている。

遷移放射トラッカーは、シリコンストリップ検出器の外側に配置され、軽量で高密度のストロー状検出器を用いて粒子の軌跡を追跡する。このシステムは、電子と他の荷電粒子を識別する能力を持ち、遷移放射の特性を利用して粒子の識別をする。遷移放射トラッカーは非常に高いヒット効率を持ち、荷電粒子が通過した際の検出精度を向上させている。

これらのサブシステムが組み合わさることで、内部飛跡検出器は、粒子の運動量や電荷を正確に測定し、衝突事象の詳細な解析を可能にしている。この検出器は、磁場 (ソレノイド磁石 2 T) を利用して荷電粒子の軌跡を湾曲させ、その曲率半径から運動量を計算する。高精度なデータを提供することで、ATLAS 全体の粒子識別能力と物理解析における重要な役割を果たしている。

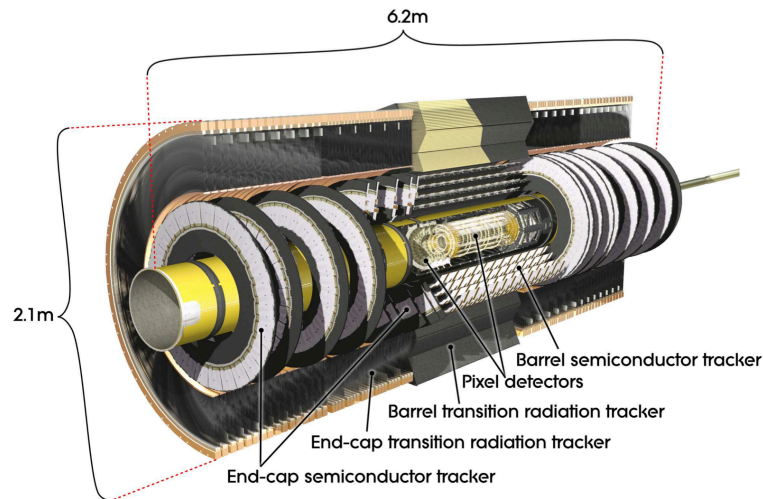


図 2.2: 内部飛跡検出器 (トラッカー)[7]

電磁カロリメータ

電磁カロリメータ (Electromagnetic Calorimeter) は、電子や光子などの電磁相互作用を行う粒子のエネルギーを高精度で測定するために設計されている。ATLAS 検出器では、液体アルゴンを使用したサンプリングカロリメータの方式が採用されており、鉛と液体アルゴンを交互に配置した構造を持つ。鉛は粒子のシャワー生成を促進するための吸収材として機能し、液体アルゴンはそのシャワーにより生じた電離を検出する役割を担う。

ハドロンカロリメータ

ハドロンカロリメータ (Hadronic Calorimeter) は、ハドロンが持つエネルギーを測定するために設計されている。この検出器は、鉄や銅などの高密度材料を吸収材として使用し、その間に配置されたシンチレータタイルや液体アルゴンをを用いて粒子のエネルギーを検出するサンプリングカロリメータの方式を採用している。

ハドロンカロリメータは、電磁カロリメータよりも厚みがあり、粒子の運動エネルギーを完全に吸収することで全エネルギーを測定することを目的としている。ハドロンカロリメータは、バレル (中心部)、エンドキャップ (端部)、前方 (ビームライン付近) のセクションに分かれており、それぞれのセクションが異なる角度範囲をカバーしている。

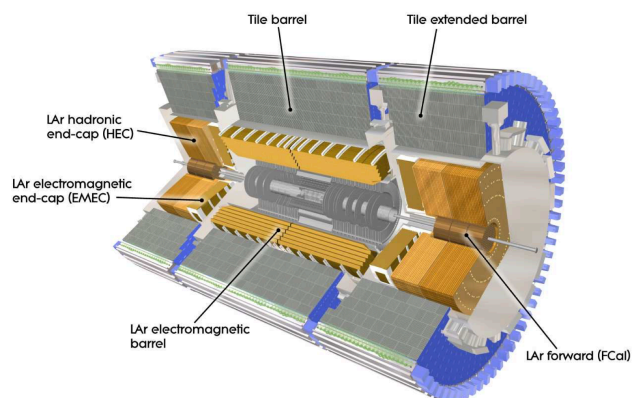


図 2.3: カロリメータの図。内側が電磁カロリメータであり、外側がハドロンカロリメータ [7]

ミューオン検出器

ミューオン検出器 (Muon Spectrometer) は、ATLAS 検出器の最外周部に配置され、衝突事象で生成されるミューオンを検出するために設計されている。ミューオンは他の粒子に比べて物質を透過しやすいため、カロリメータを通過してしまう。その軌跡と運動量を測定するためにミューオン検出器が用いられる。この検出器は、超伝導トロイダル磁石による大規模な磁場内で動作し、磁場内で粒子の軌跡がどのように湾曲するかを測定することで運動量を計算する。

ミューオン検出器は、Monitored Drift Tube (MDT)、Cathode Strip Chamber (CSC)、Registive Plate Chamber (RPC)、および Thin Gap Chamber (TGC) といった複数のサブシステムで構成されている。これらのサブシステムは、それぞれ異なる役割を果たし、MDT と CSC は高精度、RPC と TGC は高速なトリガー処理を実現している。

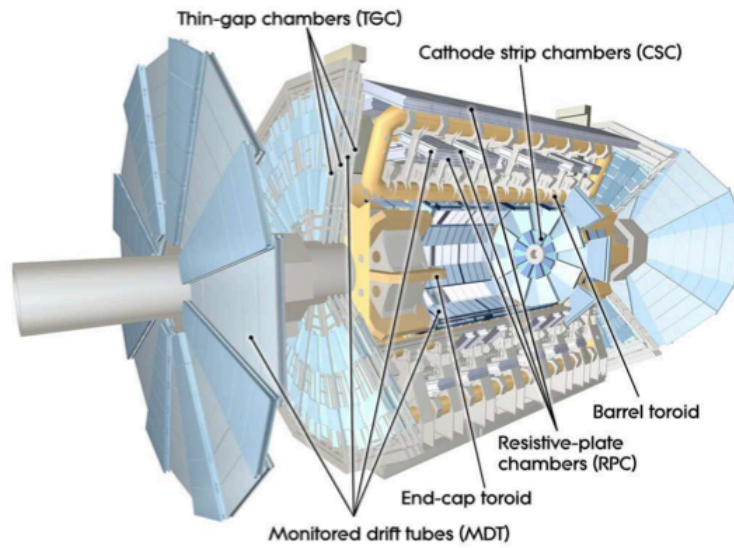


図 2.4: ミューオン検出器 [7]

2.2.3 座標系の定義

LHC において特有の物理量などが存在するのでそれらを定義する。まず座標系は (x, y, z) 座標系で見た場合、 x 方向は LHC の円の中心方向、 y は鉛直上向の方向、 z はビーム軸の方向とする。ビーム軸周りの角度を ϕ 、 z 軸からの天頂角を θ と定義する。この時擬ラピディティ η という量を以下のように定義する。

$$\eta = -\ln \tan \frac{\theta}{2} \quad (2.3)$$

ビーム軸に平行な方向には保存則が使えないため、ビーム軸に垂直な運動量である横運動量 (p_T) をよく用いる。

$$p_T = \sqrt{p_x^2 + p_y^2} \quad (2.4)$$

本研究ではジェット中の粒子の p_T, η, ϕ を Particle Flow で予測する。

2.2.4 物理オブジェクトの定義

トラック

トラックは、荷電粒子が検出器内を通過した際に残す軌跡のことであり、内部検出器 (トラッカー) によって記録される。トラッカーには磁場がかかっており、荷電粒子はその運動量に応じて軌跡が湾曲するためこの曲率から粒子の運動量を計算することができる。

セル

セルは、ATLAS 実験のカロリメータにおける基本的な検出単位であり、粒子の energy deposit を測定する。電磁カロリメータは主に、電磁相互作用する電子および光子のエネルギーを、ハドロンカロリメータはハドロンのエネルギーを測定することができる。

トポクラスター (クラスター)

トポクラスターは一定のクラスタリングアルゴリズム (例えば [8] Topological clustering) によってセルをまとめたものである。この手法に関しては、5.2 章にてトポクラスターの構成について述べている部分で詳しく触れる。

PDGID

PDGID (Particle Data Group Identifier) は粒子物理学において素粒子や複合粒子を一意に識別するために使用される識別番号である [9]。PDGID の付与には一定の規則があり、例えば正の値は粒子そのものを、負の値がその反粒子を示すという規則がある。今回使用するデータの予測対象は光子、電子、中性ハドロン、荷電ハドロン、ミューオンである。中性ハドロンと荷電ハドロンは複数の粒子をまとめた呼称として使っており厳密には一つの PDGID が振り分けられているわけではないが、以下の文章では便宜上 PDGID (または粒子の種類) を予測すると記述している場面がある。

Chapter 3

Particle Flow

3.1 Particle Flow

Particle Flow アルゴリズムは、トラッカー、カロリメータ、ミューオン検出器などのサブ検出器からの情報を統合して個々の粒子を特定し、そのエネルギーや運動量などの性質を正確に再構築するための手法である。このアルゴリズムの設計思想は、異なる検出器が持つ得意分野を最大限に活用することにある。トラッカーは運動量が 40 GeV を上回らない程度の荷電粒子の運動量測定に優れ、トラックにより運動量を測定できない中性粒子についてはカロリメータの情報をを用いる。これらの情報を統合することで、全体の粒子再構築精度を向上させることができる。

Particle Flow アルゴリズムは、CMS や ATLAS で採用されているものなどいくつかの種類が存在するが、概ねトラックとカロリメータのセルに落ちたエネルギーをまとめたクラスターを一定の手法で関連付けることでまず荷電粒子のエネルギーや粒子の種類を特定する。その後、トラックと関連づいていないクラスターを中性粒子由来のものとすることで中性粒子のエネルギーや粒子の種類を特定するというアルゴリズムになっている。Particle Flow は現在、人の手によって閾値を決めているルールベースのアルゴリズムだが、この部分を機械学習に置き換えることも可能であり、本研究では機械学習を応用した Particle Flow アルゴリズムの改善を試みている。

3.2 ATLAS における Particle Flow アルゴリズム

ATLAS における Particle Flow アルゴリズム [10] の流れを以下に示す。まず以下の基準によりトラックを選択する。

1. シリコン検出器において少なくとも 9 つのヒットが必要で、ピクセル検出器で期待されるヒットがすべて存在すること。
2. $p_T > 0.5 \text{ GeV}$ かつ $|\eta| < 2.5$ 。
3. $p_T > 40 \text{ GeV}$ のトラックは、除外される。

その後、トラックの外挿位置とトポクラスターの距離を計算してトラックとクラスターのマッチングを行う。その際に用いる距離指標 ΔR は、以下のように定義されている。

$$\Delta R = \sqrt{\left(\frac{\Delta\phi}{\sigma_\phi}\right)^2 + \left(\frac{\Delta\eta}{\sigma_\eta}\right)^2},$$

ここで、 σ_ϕ および σ_η はクラスタの角度的広がりを表す。この指標を基に、以下の手順でマッチングを行う。

1. $E_{\text{clus}}/p_{\text{trk}} > 0.1$ の条件を満たすクラスタを選択する。
2. 選択されたクラスタの中から、最小の ΔR を持つものを対応するクラスタとして割り当てる。

適切なクラスタが見つからない場合、そのトラックはそのまま保持され、カロリメータからのエネルギー除去は行われぬ。そして、ここまでのエネルギーの除去を行なったのちに残るクラスタを中性粒子由来のものとみなす。この流れを図にすると図 3.1 のようになる。

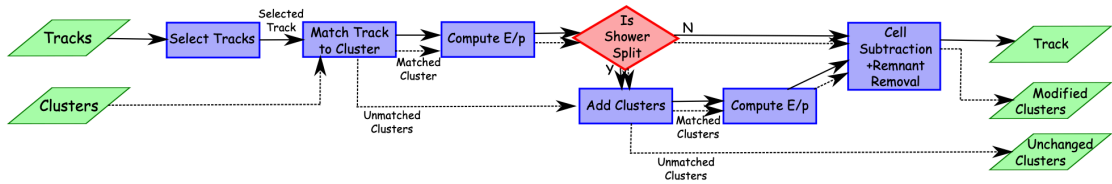


図 3.1: ATLAS における particle flow の流れ [10]

ATLAS のアプローチは各トラックを個別に処理していくことでカロリメータからエネルギーを引いていき、最終的に中性粒子のエネルギーを推定するジェットに対する手法である。一方で CMS では複数の粒子を同時に再構成するグローバルな Particle Flow アルゴリズムをとっている。本研究も現在の対象はジェットであるが、最終的には CMS のようなグローバルの Particle Flow を目標としている。

Chapter 4

ハイパーグラフを用いた Particle Flow

今回、予測に用いるベースのモデルとして、ハイパーグラフを用いた Particle Flow アルゴリズムである HGPflow を採用した。

4.1 ハイパーグラフ

ハイパーグラフ (hypergraph) は、通常のグラフを一般化した構造である。ハイパーグラフにおいて、エッジは任意の個数のノードと繋がることができ、このエッジをハイパーエッジという。ハイパーグラフにおいては、グラフは Incidence Matrix という行列によって表される。Incidence Matrix は行が頂点を、列がハイパーエッジを表しており、その要素には対象とする頂点がハイパーエッジと繋がっていれば 1 を、繋がっていなければ 0 が入れられる。

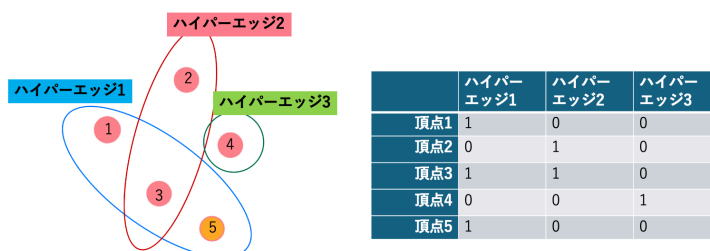


図 4.1: hypergraph の例 (左図) とそれを表す Incidence Matrix(右図)

図 4.1 左にハイパーグラフの例を示す。このグラフは 5 つの頂点と 3 つのハイパーエッジからなっている。ハイパーエッジ 1 は頂点 1 と頂点 3 と頂点 5 に、ハイパーエッジ 2 は頂点 2 と頂点 3 に、ハイパーエッジ 3 は頂点 4 のみに繋がっている。これを Incidence Matrix に直すと図 4.1 右のようになる。

4.2 本モデルにおける Incidence Matrix

加速器実験において、粒子の残したトラックやエネルギーの落とされたカロリメーターのセルを頂点 (nodes) に、粒子をハイパーエッジに対応させ、あるハイパーエッジ (粒子) に注目した際、そのハイパーエッジとつながっている頂点 (トラック/カロリメーター) と関連している、つまり「トラックならばそのトラック

を残し、カロリメーターであるならばそのセル/クラスターにエネルギーを落としていいる」と解釈することによりハイパーグラフを用いて衝突事象を表すことができる。以下の図 4.2 はある衝突事象を簡単な図で表したものである。

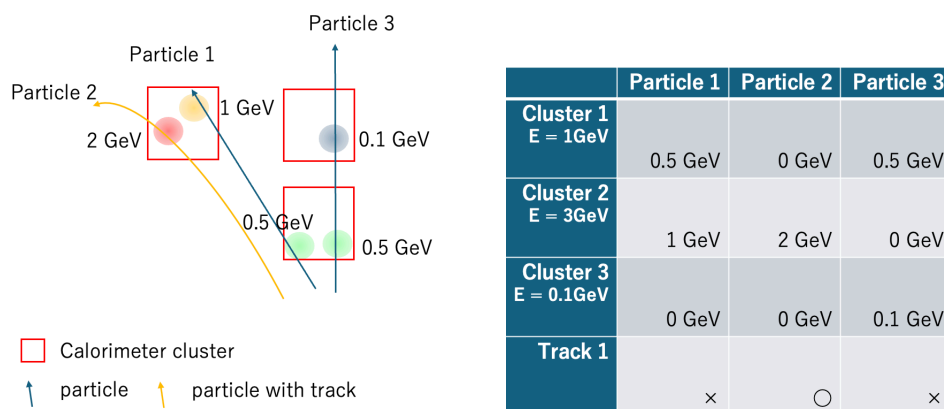


図 4.2: ある衝突事象とそれを表す行列

この図の衝突事象では最終的に3つの粒子 (Particle1 から Particle3) が生じ、それらが3つのセルにエネルギーを落としていいる。その中で Particle2 はトラックにトラックを残している。これを行をカロリメーターおよびトラックとし、列を粒子とした行列で表すと図 4.2 の右図のようになる。その後この行列を行に関して正規化したもの (図 4.3 の右図) を Incidence Matrix として解釈することができる。

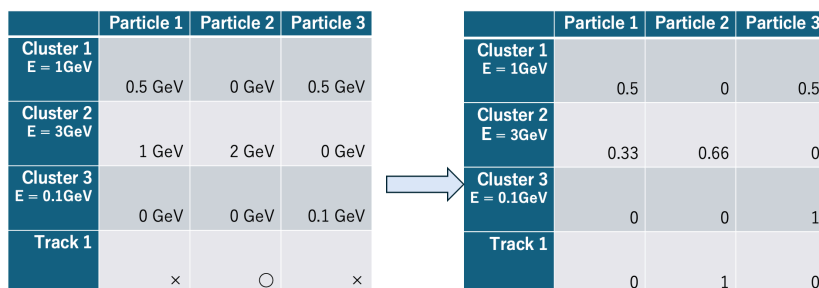


図 4.3: 衝突事象を表す行列 (左図) を元に Incidence Matrix(右図) を作成

これによって定義された Incidence Matrix の i 行 a 列の要素 I_{ia} は対応する行のクラスターに落とされたエネルギーのうち対応する列の particle からの寄与の割合を表している。

$$I_{ia} = \frac{E_{ia}}{\sum_{\text{particle } b} E_{ib}} = \frac{E_{ia}}{E_i} \quad (4.1)$$

ここで E_{ia} は粒子 a が i 行目のセル/クラスターに落としたエネルギーである。また、トラックに関してはそのトラックを残した粒子にのみ 1 を割り振り残りは 0 とする。

4.3 モデルの全体像

HGPflow モデルは以下の2つのステップからなる。

ステップ 1. イベントを元に作成されたグラフ構造をもとに Incidence Matrix を予測する。

ステップ 2. ステップ 1 で予測された Incidence Matrix をもとに粒子の p_T , η , ϕ および PDGID を予測する。

ステップ 1 ではサイズが $(N+1) \times K$ の行列を予測する。ここで N はイベントでエネルギーを落とされたクラスター/セルとトラックの数の合計であり、 K は粒子の数である。しかし粒子数 K はあらかじめにはわからないため、 $K=30$ と固定して予測させる。ここで K を 30 と設定したのは使用したデータの 1 イベントあたりに含まれる粒子の数の最大値が 30 であるためである。この値は適用先に応じて生じる粒子の数を全てカバーできるように設定しなければならない。行方向の余った 1 行は indicator と呼ばれ、30 個の粒子候補のうちどれだけが実際に粒子であるかを 01 で予測するための行である。

ステップ 2 では予測された Incidence Matrix をもとに算出された p_T, η, ϕ のベースとなる以下の値と実際の値とのずれを予測し補正する。

$$\hat{E}_a = \sum_{\text{nodes } i} E_i I_{ia}, \quad \hat{\eta}_a = \sum_{\text{nodes } i} \eta_i \tilde{I}_{ia}, \quad \hat{\phi}_a = \sum_{\text{nodes } i} \phi_i \tilde{I}_{ia} \quad (4.2)$$

ただし \tilde{I}_{ia} は以下のように定義される dual Incidence Matrix である。

$$\tilde{I}_{ia} = \frac{E_i \cdot I_{ia}}{\sum_{\text{nodes } j} (E_j \cdot I_{ja})} \quad (4.3)$$

また、それと同時に粒子の種類をトラックの有無をもとに荷電粒子と中性粒子に分類し、粒子の種類を予測する。

4.4 Incidence Matrix を予測する前段モデルの詳細

4.4.1 モデルの学習のための準備

Incidence Matrix を予測する具体的な方法としては、まず各イベントごとにトラックやカロリメーター/セルを表す頂点 (以下では nodes という) と粒子を表す頂点の二種類の頂点 (以下では pflows という) をもつグラフを作成し、それらの頂点全てを辺で結び無向完全グラフを作成する (図 4.4)。この中で nodes と pflows を結ぶ辺は、結んでいるカロリメーター/セルと粒子の間の Incidence Matrix の要素と見ることができるため、予測された Incidence Matrix の値 (以下 Incidence val という) はこの辺の特徴量として格納される。また、nodes と pflows の頂点にはそれぞれの特徴量を格納しておく (pflows の特徴量は初めはランダムな値が割り振られる)。

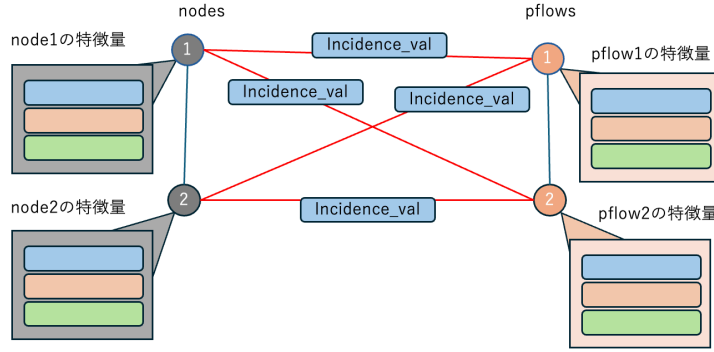


図 4.4: 作成されるグラフの一例。

4.4.2 学習のステップ

Incidence Matrix I および nodes 特徴量 V と pflows 特徴量 U は、以下の順に予測・更新されていく。ただし小文字の v 及び u は個々の node や pflow の特徴量である。

$$I_{ia}^{t+1} = \phi_I(v_i^t, w_a^t, I_{ia}^t) \quad (4.4)$$

$$I_{ia}^{t+1} = \text{Softmax}_i(I_{ia}^{t+1}) \quad (4.5)$$

$$u_a^{t+1} = \phi_U(\text{concat}(u_a^t, \rho_{V \rightarrow U}(a, t))) \quad (4.6)$$

$$v_i^{t+1} = \phi_V(\text{concat}(v_i^t, \rho_{U \rightarrow V}(i, t), v^0)) \quad (4.7)$$

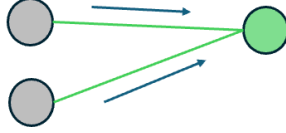
ここで、 t は上記の予測・更新の繰り返しの回数であり、 e や u は特定の node や pflow の特徴量、Softmax は nodes についてとっている。また、 $\rho_{V \rightarrow U}(a, t) = \sum_i I_{ia}^{t+1} v_i^t$ および $\rho_{U \rightarrow V}(i, t) = \sum_a I_{ia}^{t+1} u_a^t$ は、nodes 特徴量 (V) および pflows 特徴量 (U) を Incidence Matrix で重み付けして集約したものである。予測・更新に用いる ϕ_I , ϕ_V , および ϕ_U は各繰り返しの中で同じものを使用する。 ϕ_I は単純な多層パーセプトロンであり、後者二つは DeepSets[11] モデルである。以上のプロセスを図に起こすと図 4.5 のようになる。

V : track + cluster
 U : particle
 I : Incidence matrix

グラフの更新過程

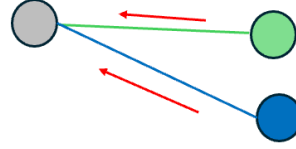
$$1. I'_{ij} = MLP(I_{ij}, V_i, U_j)$$

$$2. U'_j = \sum I'_{ij} * V_i$$



$$3. (U''_1, \dots, U''_j) = DeepSets(U'_1, \dots, U'_j)$$

$$4. V'_i = \sum I'_{ij} * U''_j$$



$$5. (V''_1, \dots, V''_i) = DeepSets(V'_1, \dots, V'_i)$$

図 4.5: Incidence Matrix の予測ステップ

まず、現在の Incidence Matrix の値と対応する行 (track+cluster) および列 (particle) の特徴量を用いて Incidence Matrix の更新する (図中のステップ 1、式 4.4)。次に、列 (particle) の特徴量を行 (track+cluster) の特徴量を用いて更新する (図中のステップ 2)。この際、行の特徴量をどれだけ反映するかは行列の Incidence Matrix の値で重みがつけられている。これによって得られた特徴量のベース値を DeepSets に入れることで列 (particle) の (この回における) 最終的な特徴量とする (図中のステップ 3、ステップ 2 と合わせて式 4.6)。次に、行 (track+cluster) の特徴量を列 (particle) の特徴量を用いて更新する (図中のステップ 4)。この際にも、列の特徴量をどれだけ反映するかは行列の Incidence Matrix の値で重みがつけられている。列の場合と同様にしてこのベース値を DeepSets に入れることで行 (track+cluster) の最終的な特徴量とする。これを設定した回数分繰り返す。

4.4.3 損失関数と列方向のマッチング

上記のステップで予測した Incidence Matrix (I^{pred}) と正しい Incidence Matrix (I^{truth}) との差を以下の損失関数 L で評価し、パラメータを更新していく。

$$L = KL \left(I_{ia}^{truth}, I_{ia}^{pred} \right) - \text{f1 score} \left(I_{ia}^{truth}, I_{ia}^{pred} \right) \quad (4.8)$$

ただし KL (Kullback-Leibler ダイバージェンス) および連続値を取る行列に対する f1 score は以下のように定義されている。triumean は上三角行列の非対角成

分の平均を取る操作である。

$$\text{KL}(P, Q) = \sum_x P(x) \log \frac{P(x)}{Q(x)} \quad (4.9)$$

$$\text{TP}(P, Q) = \text{trimean}(P^T P * Q^T Q) \quad (4.10)$$

$$\text{FP}(P, Q) = \text{trimean}((1 - P^T P) * Q^T Q) \quad (4.11)$$

$$\text{FN}(P, Q) = \text{trimean}(P^T P * (1 - Q^T Q)) \quad (4.12)$$

$$\text{recall}(P, Q) = \frac{\text{TP}(P, Q)}{\text{TP}(P, Q) + \text{FN}(P, Q)} \quad (4.13)$$

$$\text{precision}(P, Q) = \frac{\text{TP}(P, Q)}{\text{TP}(P, Q) + \text{FP}(P, Q)} \quad (4.14)$$

$$\text{f1 score}(P, Q) = \frac{2 * \text{recall}(P, Q) * \text{precision}(P, Q)}{\text{recall}(P, Q) + \text{precision}(P, Q)} \quad (4.15)$$

ここで TP、FP、FN はそれぞれ true positive、false positive、false negative のことであり、順に (2 値問題において) 1 を 1 と正しく予測できた数、実際は 0 であるものを 1 と予測してしまったものの数、実際には 1 であるものを 0 と予測してしまったものの数の意味である。また、recall は実際には 1 であるもののうちのどれだけを正しく予測できたかの割合であり、precision は 1 と予測したもののうちどれだけが実際に 1 であったかの割合である。しかしながら、このように定義された TP、FP、FN は正確には実際の TP、FP、FN を表していないことには注意が必要である。

以上で定義した損失関数をもって予測値を評価するのだが、Incidence Matrix の列方向の要素である pflows(粒子) の順番は順不同であるべきなので、損失関数が最も小さくなる列の入れ替え方をハンガリアンマッチング [12] により探索し、最小となるように入れ替えた上での損失を予測値に対する Loss としている。

4.5 粒子の物理量と PDGID を予測する後段モデル

HGPflow アルゴリズムの後段は前段のステップで予測された Incidence Matrix をもとに粒子の物理量 (p_T , η , ϕ) と PDGID を予測するタスクからなっている。この際に、物理量に関しては (4.2) 式によって計算される物理量のベースとなる値を活用する。

予測の際、各粒子はトラックの有無によって荷電粒子と中性粒子に分類される。このうち荷電粒子はトラックに結び付けられた p_T, η, ϕ の値が存在するためその値をベース値とし p_T はそのベース値と実際の値とのずれを学習し、 η, ϕ に関してはその値をそのまま用いる。PDGID は「電子」、「荷電ハドロン」、「ミューオン」のいずれかに分類される。一方でトラックを持たない中性粒子は Incidence Matrix をもとに計算されたベース値を用い、 p_T, η, ϕ 全てで実際の値とのずれを学習させる。また、PDGID は「光子」、「中性ハドロン」のいずれかに分類される。上記の物理量と PDGID 予測は前段のモデルの中で得られた pflows の特徴

量 (U^a) とベース値をもとに多層パーセプトロン (Φ) によってなされる。

$$p_T^a(\text{charged}) = \Phi_{\text{ch-property}}(U^a) + p_T^a(\text{from track}) \quad (4.16)$$

$$\phi^a, \eta^a(\text{charged}) = \phi^a, \eta^a(\text{from track}) \quad (4.17)$$

$$\text{PDGID}(\text{charged}) = \Phi_{\text{ch-pdgid}}(U^a) \quad (4.18)$$

$$p_T^a, \phi^a, \eta^a(\text{neutral}) = \Phi_{\text{neu-property}}(U^a) + \hat{p}_T^a, \hat{\phi}^a, \hat{\eta}^a \quad (4.19)$$

$$\text{PDGID}(\text{neutral}) = \Phi_{\text{neu-pdgid}}(U^a) \quad (4.20)$$

ただし荷電粒子の η 、 ϕ に関してはトラックから推定される値の精度が十分に高いため、その値をそのまま用いる。これによって予測された各物理量および PDGID はそれぞれ以下の MSE(二乗平均誤差) とクロスエントロピーによって評価される。

$$\text{MSE} = \frac{1}{N} \sum_{\text{particle}} (x_a^{\text{truth}} - x_a^{\text{pred}})^2 \quad (4.21)$$

$$\text{Cross Entropy} = -\frac{1}{N} \sum_{\text{particle}} \sum_{c=1}^C y_{i,c} \log(\hat{y}_{i,c}) \quad (4.22)$$

x は物理量、 y は各クラス (粒子の種類) の予測確率、 N はデータ数、 C はクラス数である。

この際 truth と pred のマッチングは前段で行ったマッチングの通りに対応させる。

Chapter 5

データセット

本研究では加速器シミュレーションによって生成されたデータを用いて学習、評価を行った。このデータは HGPflow アルゴリズムが提案された際に Di Bello, Dreyer, Ganguly, et al. (2023)[5] らが作成、使用したものである。

5.1 検出器シミュレーション

上記研究グループは、簡易的なシミュレーションである DELPHES[13] のような公開ソフトウェアでは再現できない、粒子の詳細な相互作用を含むデータセットを必要とした。このため、Configurable Calorimeter simulatiOn for AI (COCOA)[14] パッケージを新たに導入し、より実際の結果に近いデータを生成した。COCOA パッケージでは、検出器との相互作用は GEANT4 にてシミュレーションされている。COCOA カロリメーターは、粒子の衝突や検出器の幾何学的特性を反映した構造を持ち、バレル領域 ($0.0 < |\eta| < 1.5$) とエンドキャップ領域 ($1.5 < |\eta| < 3.0$) に分かれている。エンドキャップ領域は、バレル領域との遷移部に隙間ができないよう、完全密閉設計が施されている。深さ方向には電磁カロリメーター (ECAL) 3層とハドロンカロリメーター (HCAL) 3層の合計6層があり、それぞれ異なる機能と材質を持つ。

各層では η および ϕ 方向に均一な分解能を持ち、granularity は ECAL の第一層と第二層では 256×256 、第三層では 128×128 、HCAL の第一層と第二層では 64×64 、第三層では 32×32 になっている。各カロリメーター層の深さは、 $\cosh \eta$ に応じて調整され、粒子がカロリメーター内で均一に相互作用するように設計されている。ECAL には鉛と液体アルゴンの混合材質が用いられ、その放射線長 ($X_0 = 2.5, \text{cm}$) が得られるように調整されている。一方、HCAL は鉄を吸収体、ポリビニルトルエンプラスチックを発光体として使用しており、核相互作用長 ($\lambda_{\text{int}} = 26.6, \text{cm}$) に基づいて設計されている。

エネルギーの分解能を現実的に再現するため、各層の energy deposit はサンプリング分解能に基づいてスミアリング (統計的ぼかし) が適用されている。また、パイルアップと電子雑音の影響を再現するため、各層ごとに正規分布に基づくランダムなノイズ成分が追加されている。このノイズは層ごとに異なる標準偏差を持ち、ATLAS カロリメーターシステムの実験データに近似した設定である。

トラック (荷電粒子の軌跡) は、粒子の横方向運動量 (p_T) に依存した分解能を持つモデルを使用して再現され、分解能は比例定数を $a = 10^{-5}/\text{GeV}$ とし、 $\sigma(p)/p = a \times p$ でスミアリングしている。さらに、粒子の方向のスミアリングは無視されており、これは研究で扱う課題においてその影響が小さいと考えられるためである。加えて、ある特定の条件下 (例えば、横方向半径がバレル

ルでは75mm、エンドキャップでは250mmを超えた場合)では、荷電粒子がトラックとして再構築されないこともモデル化されている。

本研究のデータセットは、主にカロリメーターでの粒子検出を中心に構成されており、トラックとカロリメーター情報を統合することで、検出器で観測される現象を詳細に再現している。これにより、LHC環境に近い複雑な粒子相互作用を反映したデータセットの生成が可能となった。

5.2 データ生成

データセット生成には、PYTHIA8[15]を使用し、初期状態のクォークまたはグルーオン粒子から始まるイベントのhadronizationとparton showerをシミュレートした(ただし、本研究ではグルーオンのデータは用いていない)。

初期エネルギーは10 GeVから200 GeVの範囲でランダムにサンプリングされ、角度 η (擬ラピディティ)と ϕ (方位角)は一様分布から選ばれる。生成された最終状態粒子はGEANT4[16]を用いてシミュレートされ、カロリメーターでのシャワー形成や相互作用が再現される。このデータセットには追加のピルアップ(複数の散乱事象)は含まれていない。

機械学習アルゴリズムのターゲットは、横方向運動量(p_T)が1 GeV以上でカロリメーターに到達する安定した最終状態粒子である。シミュレーションされたカロリメーターセルはenergy depositをもとに**トポクラスタ**と呼ばれるグループにクラスタリングされる。このクラスタリングは、各セルのエネルギーとノイズの比(E/σ)が4を超えるセルをシードとして開始される。次に、近傍セルを探索し、エネルギーとノイズ比が2を超えるセルをシードセルに統合する。これを統合するセルがなくなるまで繰り返す。最後に、エネルギーとノイズ比がゼロ以上の近傍セルを統合する。さらに、シードセルを共有するクラスタの統合や近接する粒子がある場合にはクラスタの分離などを行う。

このシミュレータでは、各セルのエネルギーに寄与した粒子情報が保存される。エネルギー寄与が主にノイズに由来するセルのクラスタがわずかな割合で発生するため、23%のトレーニングイベントでノイズが支配的なトポクラスタが1つ以上含まれる結果となっている。データセットには、次の3種類のオブジェクトが含まれる。

1. トポクラスタに属するカロリメーターセル
2. カロリメーターに到達したすべてのトラック
3. カロリメーターに入射した粒子のセット

この構成でトレーニング用として50,000イベント、テスト用として30,000イベントが生成された。また、「グルーオンジェット」データセットとして、初期状態粒子をグルーオンに置き換えた30,000イベントのデータセットも作成された。このデータセットは同じエネルギーと角度分布を持つ。これらのイベントのオブジェクト(セル、トラック、各種粒子などの数)は図5.1のようになっている。

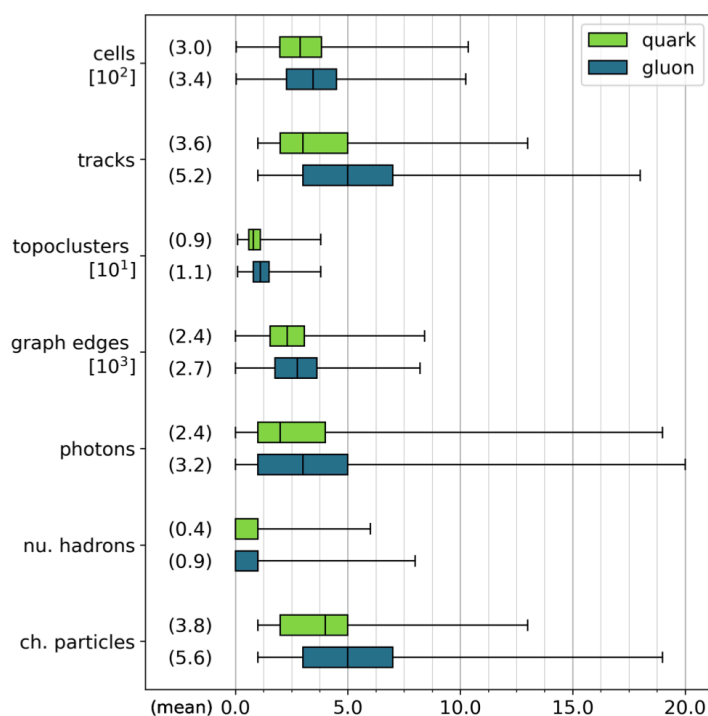


図 5.1: イベントごとのオブジェクト数の分布 [5]。シングルクォークとシングルグルーオンのサンプルを、平均値は括弧内で示し、分布のばらつきをボックスプロットとバーを使って四分位数として可視化している。バーで最小値と最大値、ボックスで下位 4 分の 1、中央値、上位 4 分の 1 の境界を表している。

5.3 モデルへの入力変数

モデルの入力として用いた主な変数は以下のようにになっている

1. **トラックに関する変数:** トラック自体の $(\log d_0, \log z_0, \log p_T, \eta, \phi, \sin \phi, \cos \phi)$ 、レイヤーごとの $(\eta, \phi, \sin \phi, \cos \phi)$ 及びトラックがミューオンによるものかどうかの符号
2. **トポクラスターに関する変数:** $(x, y, z, \log E, \eta, \phi, \sin \phi, \cos \phi)$ 及び電磁カロリメータに落としたエネルギーの割合、ハドロンカロリメータに落としたエネルギーの割合

変数のうち主要なものの分布は図 5.2 のようになっている。

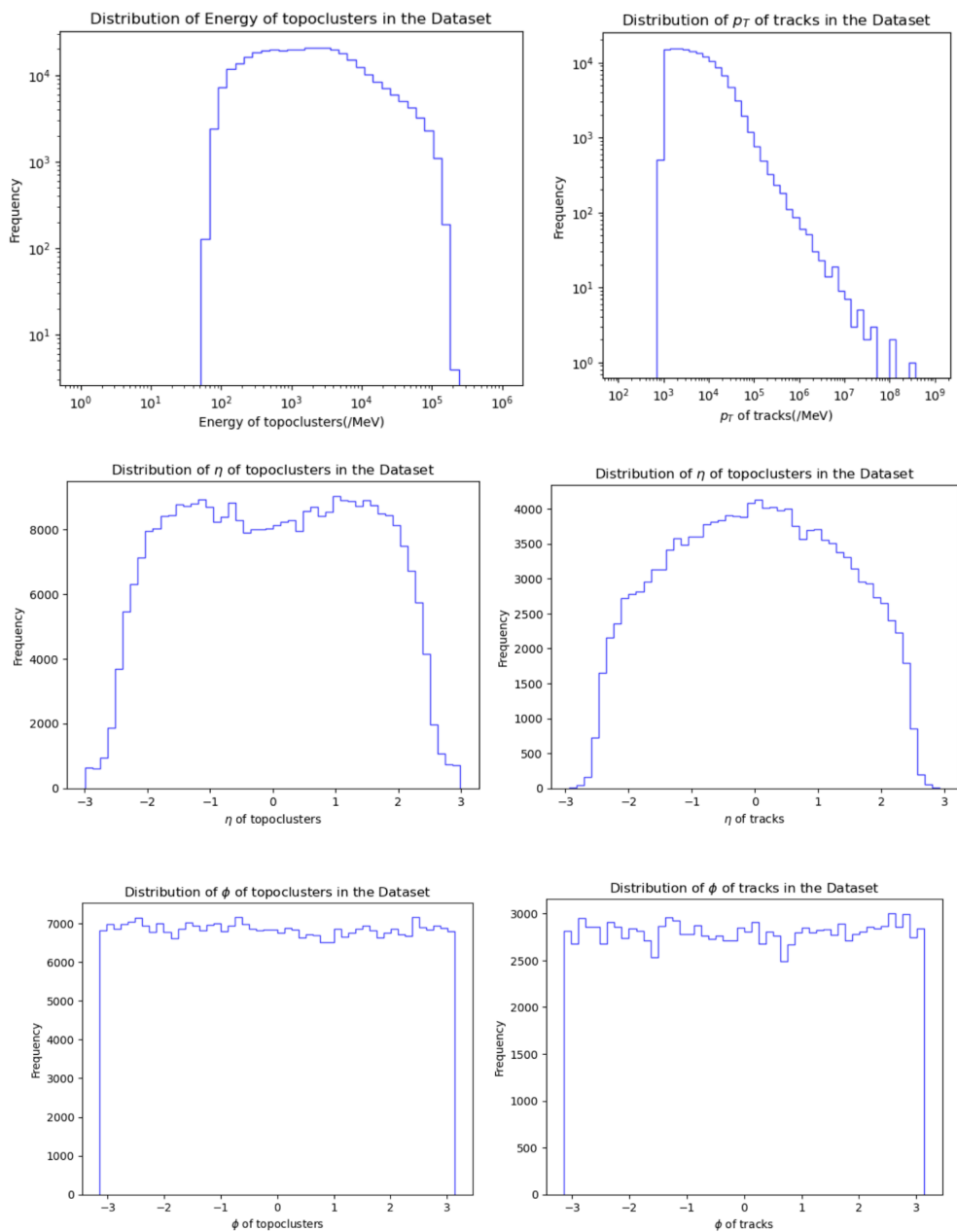


図 5.2: 入力に用いたトラックおよびトポクラスターの p_T とエネルギー (上)、 η (中央)、 ϕ (下) の分布。

Chapter 6

HGPflow モデルの研究とアーキテクチャ変更による改善


この章においては、先行研究によって提示された HGPflow モデルに加えた変更点についてまとめる。

6.1 カロリメータ由来のデータの粒度の変更

先行研究においては、前段の Incidence Matrix を予測する上で用いる情報として、カロリメータからの情報はセル単位の粒度で情報を利用していった。しかしながらセル単位で情報を用いてしまうと学習および予測にかかる時間が非常に長くなってしまいう問題があった。そのため、カロリメータからの情報をセル単位ではなく、トポクラスターにまとめた単位で扱うような変更を施すことで学習にかかる時間を削減することを図った。

6.2 前段モデルでの予測対象の変更

先行研究における前段モデルの予測対象は Incidence Matrix の行列要素であった。Incidence Matrix の行列要素は対象とするクラスター (セル) に落ちたエネルギーのうちどれだけが対象とする列の粒子から来たものかを表す比であり、これは物理量ではない。また、この Incidence Matrix の行列要素は、他の粒子による影響を考えなければならないため対象となる行のクラスター (セル) と列の粒子の情報のみでは確定しない。そのため直接の予測は難しいと言えるため、予測対象を粒子が落としたエネルギーそのものとする変更をした (図 6.1)。



	Particle 1	Particle 2	Particle 3
Cluster 1 E = 1GeV	0.5	0	0.5
Cluster 2 E = 3GeV	0.33	0.66	0
Cluster 3 E = 0.1GeV	0	0	1
Track 1	0	1	0

	Particle 1	Particle 2	Particle 3
Cluster 1 E = 1GeV	0.5 GeV	0 GeV	0.5 GeV
Cluster 2 E = 3GeV	1 GeV	2 GeV	0 GeV
Cluster 3 E = 0.1GeV	0 GeV	0 GeV	0.1 GeV
Track 1	×	○	×

図 6.1: 元々の予測対象である Incidence Matrix(左) と変更後の予測対象 (右)

実際には、予測しなければならないエネルギーは数百 MeV から数十 GeV までと非常に幅があるため、 $\log(\text{エネルギー (MeV)})$ を予測する。

6.3 ネットワークの部分的変更

先行研究におけるモデルでは、Incidence Matrix を予測したり特徴量更新に用いていた多層パーセプトロン (4 章における ϕ たち) のパラメータは繰り返し各回で共有されており、同じネットワークに通していた。しかしながら各回での多層パーセプトロンの役割は異なっているはず (例えば最初は更新されていない特徴量をもとに Incidence Matrix の予測値のベースとなる値を出力することが役割であるが、以降は更新された特徴量をもとにベースからのずれ (残差) を予測することが役割であるなど) なので、各回の多層パーセプトロンのパラメータは全て独立のものとする変更を行った。

6.4 後段のネットワークの変更

後段の物理量および粒子に種類を特定する部分において、先行研究のモデルにおいては単一の MLP に通すモデルであったが、この部分に変更を加えた。以下に説明のために必要な事項の導入を行なったのちに加えた変更について記述する。

6.4.1 Residual MLP

Residual MLP[17] とは通常が多層パーセプトロン (MLP) にスキップ接続を加えたものである。通常が多層パーセプトロンでは、入力 x に対してウェイト W をかけバイアス項 b を足した $Wx + b$ を出力とし、これに活性化関数 ϕ を作用させる。一方で Residual MLP では上記の $\phi(Wx + b)$ に恒等写像によるスキップ接続 x を加えた $\phi(Wx + b) + x$ を出力とする。このスキップ接続を加えることにより、層を重ねるごとに勾配が小さくなっていく勾配消失を回避することができる。そのため、通常 MLP よりも深い層を持たせることができる。

6.4.2 tabnet

tabnet[18] は、表形式データ (tabular data) に特化した、決定木に似た性質を持つディープラーニングモデルである。各学習ステップで入力特徴量の中から重要なものを動的に選択するアテンション機構を採用している。このアテンション機構では、特徴量ごとの重要度を計算し、それに基づいて次のステップで使用する特徴量を絞り込む。これによって、不要な特徴量を無視し、効率的な学習が可能になるだけでなく、モデルの解釈可能性も向上させることができている。実験的な結果から高い予測精度を持つとされているが、再帰的な構造と特徴選択処理を含むため、通常 MLP や Residual MLP と比べて計算コストが高く、学習にかかる時間も長い傾向にある。以下で説明するアンサンブルの効果が高めるために、MLP や Residual MLP とは性質の異なる決定木ベースのモデルを採用することで各モデルの相関が小さくなることを狙っている。

6.4.3 アンサンブル

アンサンブルは、より高い予測精度を得るために複数の機械学習モデルを組み合わせる手法である。機械学習における誤差は以下の式に示すように削減不可能な誤差 (第 1 項) とバイアスと呼ばれる推定値の平均と真の値との差

の2乗(第2項)、およびバリエーションと呼ばれる学習に用いたデータの偏りに由来する誤差項(過学習の度合いを示す)(第3項)の和に分解できる。そのため、最終的な予測性能を向上させるためにはバイアスとバリエーションのバランスを取ることが重要となる(これらはトレードオフの関係にあるため)。

$$error = \sigma^2 + Bias^2 + Var \quad (6.1)$$

アンサンブルには複数のモデルを組み合わせることでバリエーションを低減させる効果がある。また、アンサンブルによるバリエーションの低減のためには組み合わせるモデルは各々の相関は小さいことが望ましい。アンサンブルの手法としては独立に構築したモデルによる予測値に対して多数決/平均をとったものを最終的な予測値とする単純なものから、バギングやブースティングといった複雑な手法まであるがモデル全体を過度に複雑にしないために今回は単純に平均を取る手法を採用した。

6.4.4 後段ネットワークの変更

先述した通り、後段の物理量および粒子に種類を特定する部分において、先行研究のモデルにおいては単一のMLPに通すモデルであった。この部分を

1. **ネットワークの多様化:** 使用するネットワークをMLP一つからMLP、Residual MLP、tabnetの3つに増やす。
2. **予測する数値の多様化:** 各ネットワークごとに p_T, η, ϕ の数値を予測する部分において、過小評価に対するペナルティを大きくすることで数値を大きめに予測するモデル、過大評価に対するペナルティを大きくすることで数値を小さめに予測するモデル、通常のモデルの3つのモデルを作成する。値を大きめに予測するモデルの損失関数は以下のように定義し、

$$Loss = \sum_{pred < truth} 3 * (x_a^{truth} - x_a^{pred})^2 + \sum_{pred > truth} (x_a^{truth} - x_a^{pred})^2 \quad (6.2)$$

値を小さめに予測するモデルの損失関数は以下のように定義する。

$$Loss = \sum_{pred < truth} (x_a^{truth} - x_a^{pred})^2 + \sum_{pred > truth} 3 * (x_a^{truth} - x_a^{pred})^2 \quad (6.3)$$

3. **アンサンブル:** 以上9つの出力を平均して最終的な出力とする。

というように変更をほどこす。性質の異なるネットワークを3つ採用することにより、アンサンブルによるより多くのバリエーションの低減が期待でき、かつ過大予測および過小予測のモデルを追加することで最終的な数値を安定させることを狙っている。

Chapter 7

先行研究のモデルとの精度比較

HGPflow をはじめとした particle flow モデルは最終的には衝突事象の再構成を目的としている。今回は single jet をデータとして用いており、最終的に生じた粒子の種類と各物理量を予測することを目標としている。そのためモデルの評価の観点には粒子の物理量の再構成精度と粒子の種類をどれだけ正確に予測できているかということになる。今回は粒子の種類を予測する部分のモデルにはあまり大きな変化を加えていないため物理量の予測精度を比較する。比較の方法に関しては先行研究の論文に倣い

荷電粒子の p_T の分解能

荷電粒子の p_T の絶対誤差である

$$p_T^{truth} - p_T^{pred} \quad (7.1)$$

を各粒子ごとに計算し plot したものをガウシアンで近似する。その際の標準偏差を p_T の分解能として定義し、評価指標とする。

中性粒子の ϕ 、 η の誤差

中性粒子の ϕ および η の絶対誤差である

$$\phi^{truth} - \phi^{pred} \quad (7.2)$$

$$\eta^{truth} - \eta^{pred} \quad (7.3)$$

を中性粒子の ϕ 、 η に対する評価指標とする。

中性粒子の p_T の相対誤差

中性粒子の p_T の相対誤差である

$$\frac{(p_T^{truth} - p_T^{pred})}{p_T^{truth}} \quad (7.4)$$

を中性粒子の p_T に対する評価指標とする。これらの結果を比較する。また、学習にかかった時間についても比較する。

7.1 比較するモデル

性能の評価に際して、以下のモデルを比較する。学習は試作モデルと改善版モデル。学習はある程度損失が下がったところまでさせたが、最適なエポック数の探索は行えていない。また、学習および予測には GPU として NVIDIA RTX A6000 を使用した。

1. **オリジナルモデル**: 先行研究のチームによって公開されているオリジナルのモデル。公開されているコードそのままでは動かなかったためそれを動くように整えたもので学習・予測をさせた。150 エポック分 (1 エポックあたり 1 時間ほどで計約 9000 分) 学習をさせたが先行研究の結果を再現できなかったため、先行研究の論文より結果を引用して比較するものとする。パラメータは約 1.8M。
2. **試作モデル**: 後段のネットワークを MLP から Residual MLP にした試作モデル。その他の変更に関しては上述した改善をそのまま適用している。150 エポック分 (1 エポックあたり 4 分ほどで計約 600 分) 学習をさせた。パラメータは約 2.1M。
3. **改善版モデル**: 上述した変更点を全て取り入れた改善版のモデル。10 エポック分 (1 エポックあたり 30 分ほどで計約 300 分) 学習をさせた。パラメータは約 18M。

改善版モデルに関して、学習を 10 エポックで停止させたのは図 7.1 に見られるようにここから先では loss があまり低下しなくなり、かつ別で確認していた validation データに対する損失も増加していったためである。

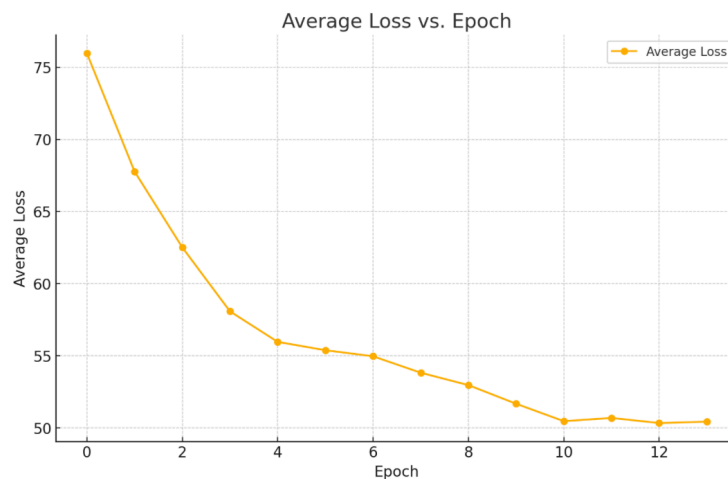


図 7.1: 改善版モデルの loss の推移。

ハイパーパラメータ

これらのトレーニングに関するハイパーパラメータは以下のように定めた。

1. **learning rate**:0.0005
2. **batch size**:128

7.2 時間に関する優位性

上述のようにセル単位の情報から使っているオリジナルのモデルでは学習に9000分以上かかっているものを、試作モデルおよび改善版モデルでは大幅に削減されている。オリジナルのモデルが提案された論文 [5] には学習にかかった具体的な時間に関しての言及はないが、先行研究のチームが出した最新の論文 [19] では、学習のかかった時間は NVIDIA RTX A6000 を用いて約 60 時間ほどと主張している。ただし、新しい論文で用いられているモデルは元のオリジナルのモデルからの改良を含んでいる。

7.3 前段モデルの予測

前段のモデルでは Incidence Matrix を予測しているが、この部分に関してはあまり正確に予測できていない。全体のイベントの中でも、荷電粒子に対する予測や、イベントに関係する粒子数およびクラスター数が少ない場合に関しては高い再構成精度を見せる傾向 (図 7.2) にあるが、トラックによる補正のできない中性粒子や、イベントに関係する粒子数およびクラスター数が多い場合は再構成精度が低い傾向 (図 7.3) にある。

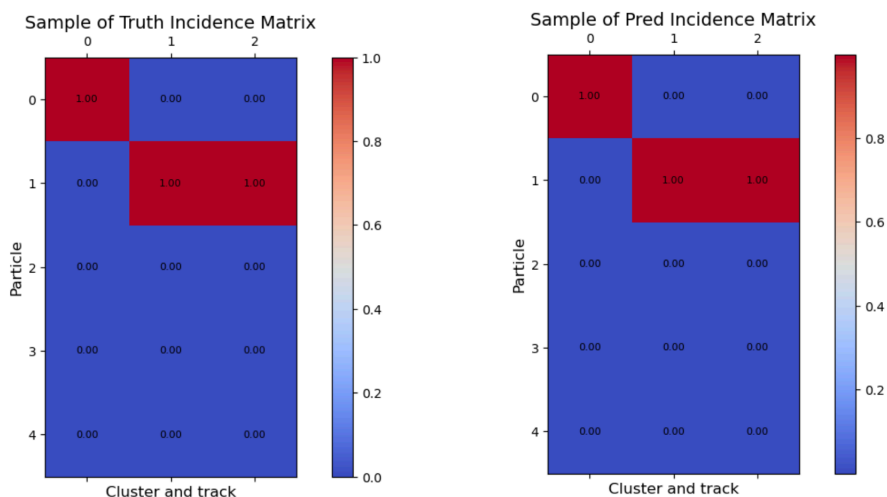


図 7.2: 予測が容易なイベントに対する正解の Incidence Matrix(左) と予測された Incidence Matrix(右) の一例。Incidence Matrix は実際は 30 行あるが見やすさのため粒子でない部分 (値が 0 しか入っていない部分) の多くを省略している。以下 Incidence Matrix を図示する場合そのように粒子でない 0 しか入っていない部分を一部省略する。

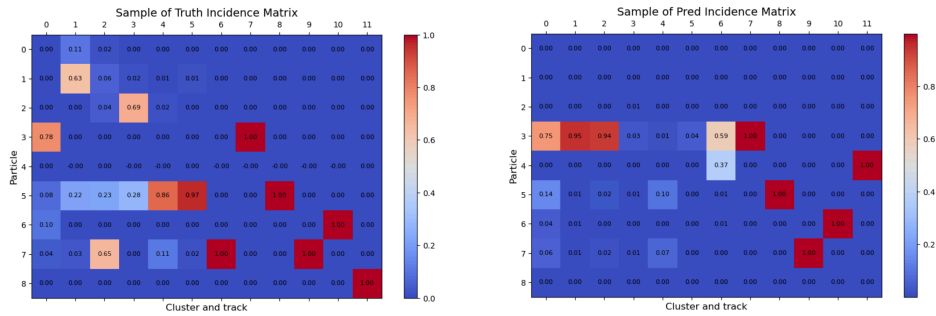


図 7.3: 予測が難しいイベントに対する正解の Incidence Matrix と予測された Incidence Matrix

7.4 荷電粒子に対する予測性能

図 7.4 は荷電粒子の p_T に対する分解能である。pflow origin は先行研究における HGPflow モデルの結果を読み取り plot したものであり、track はトラックのみから算出された値。pflow upd は本研究により作成したモデルの結果である。両方の図にある track は純粹にトラックに残したトラックのみをもとに計算された p_T の分解能であり、機械学習などによる補正はない。 p_T の分解能の算出は 15 から 20GeV、20GeV から 30GeV、30GeV から 50GeV、50GeV 以上の 4 区間について行った。15GeV より低い領域に関しては、トラックをもとに推測した p_T の方が精度が良くなるため表示していない。これは p_T が小さいほど、磁場のかかっている内部飛跡検出器を通る際に大きく曲がり、曲率半径の測定の精度が高くなるためである。

まず本研究における改善版モデルの各区間での結果をトラックをもとに算出したもの (track) と比較すると、中 p_T 領域 (15 から 30GeV) では track とほとんど同じ分解能が出ている。これは、HGPflow モデルが荷電粒子の p_T 予測に関してはトラックからの推定値をベースとしてそこへの補正値を予測しているためである。一方で 30GeV 以上の p_T 領域では、track をもとに推定した p_T よりもより正確な値に補正することができている。次に先行研究との比較を行うと、ほぼ同程度の精度言えるレベルである。

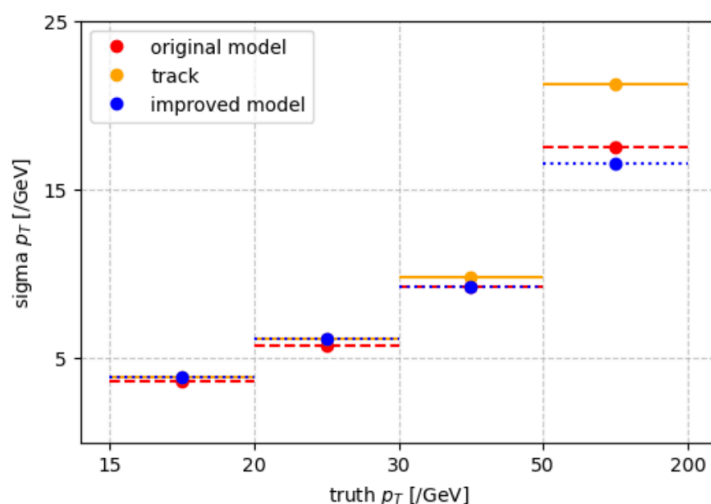


図 7.4: 荷電粒子の p_T の分解能。original model は先行研究における HGP flow モデルの結果を読み取り plot したものであり、track はトラックのみから算出された値。improved model は本研究により作成した改善版モデルの結果。

7.5 中性粒子に対する予測性能

7.5.1 ϕ および η の精度比較

図 7.5 は ϕ および η の絶対誤差のヒストグラムをプロットしたものである。赤線が先行研究のオリジナルのモデルの結果であり、青線が改善版のモデルである。縦軸はノーマライズしてありで横軸は truth - prediction の値を表している。

まず ϕ に関して見てみると、改善版の中央 (truth = prediction) のピークはオリジナルに比べ 10.3%劣化しており、FWHM(resolution) は 47.6%劣化している。 η に関しては、ピークはオリジナルに比べ 47.6%劣化しており、FWHM は 95%劣化している。ただし、FWHM はビンの分け方による影響もあるが、オリジナルのデータが入手できなかったため他のビンの分け方での比較はできなかった。

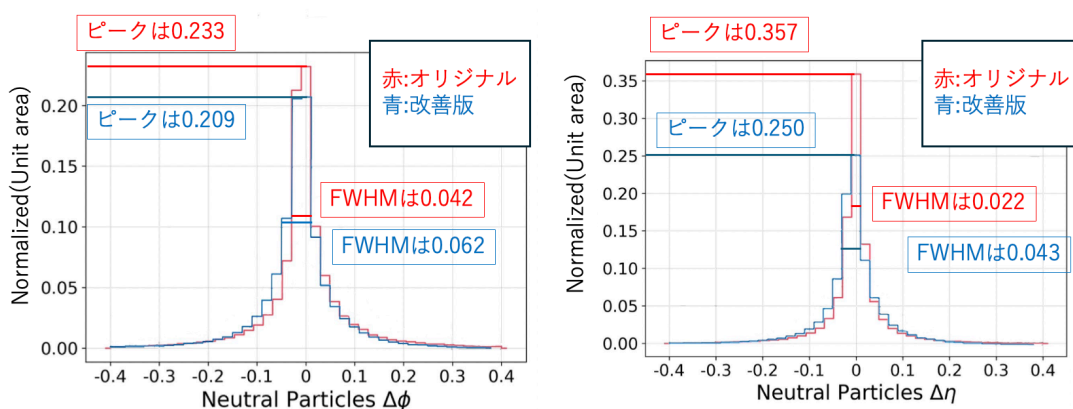


図 7.5: 中性粒子の ϕ (左) と η (右) の誤差 (truth-prediction) の比較。赤線がオリジナルのモデルの結果であり、青線が改善版モデルの結果である。

図 7.6 は中性粒子に対する p_T の相対誤差のヒストグラムをプロットしたものである。赤線が先行研究のオリジナルのモデルの結果であり、緑線が試作モデ

ルの結果、青線が改善版のモデルである。縦軸はノーマライズしてあり、横軸は $(\text{truth} - \text{prediction})/\text{truth}$ の値を表している。

まず、試作モデルと改善版モデルともにオリジナルから比べると再構成精度がピークの高さと位置および resolution の両方の観点から劣化している。試作モデルのピークは0.041でFWHMは1.37、改善版モデルのピークは0.048、FWHMは1.0であった。若干ヒストグラムが右側に傾いているのは、精度が高いため見えにくくなっているがオリジナルに対してもその傾向が確認できる。これは p_T を予測する際にそのまま p_T を予測しているのではなく $\log p_T$ を予測対象としており、 $\log p_T$ の相対誤差をプロットした際に左右対称の山型になっているものを \exp を取ったことに起因している。

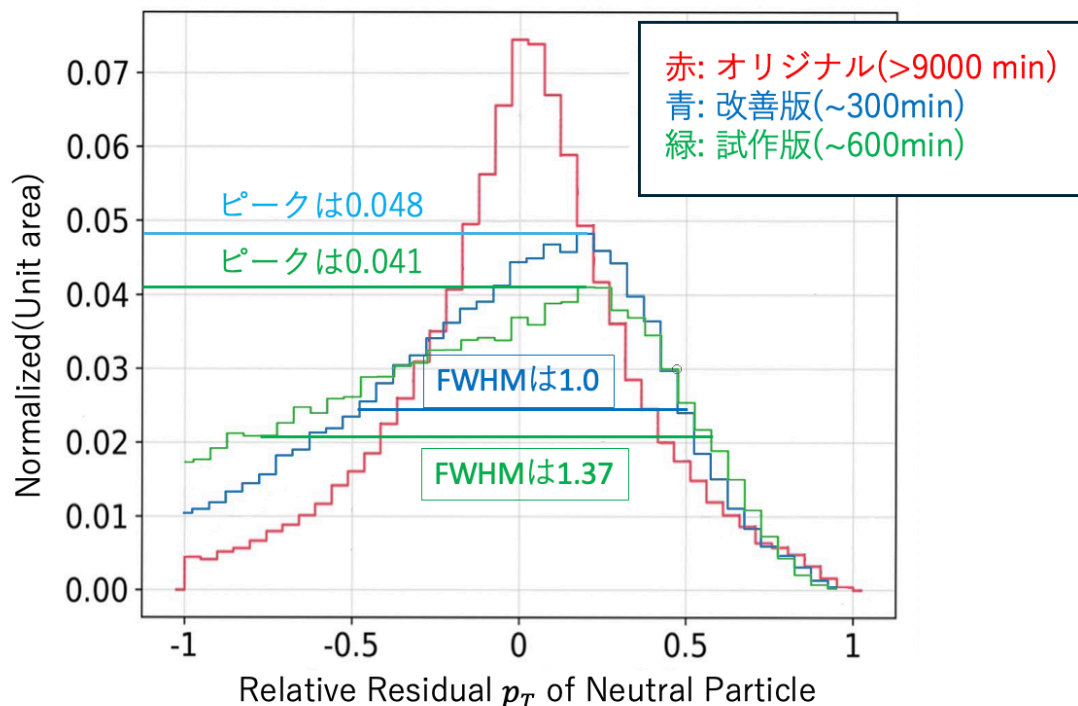


図 7.6: 中性粒子の p_T の相対誤差の比較。赤線がオリジナルのモデルの結果であり、緑線が MLP のみを用いた試作モデルの結果。青線が改善版モデルの結果である。

Chapter 8

考察と展望

入力変数の変更の影響

まず、使うカロリメータの情報の粒度をセル単位からトポクラスター単位に変更したことによる影響は、若干の精度低下はあるものの荷電粒子 p_T においては小さく、中性粒子においては大きな影響があった。荷電粒子の p_T 予測に関してはトラックの持つ情報が重要であり、目標とする精度のレベルにもよるが学習時間の削減のために学習に用いるカロリメータの情報の粒度をトポクラスター単位にしても問題ないと考えられる。

次に、中性粒子の精度に関しては、これらは Incidence Matrix の予測精度と深く関連づいている。なぜなら荷電粒子はトラックからの情報も予測に際して大きな重要度を持つが、中性粒子に関しては Incidence Matrix のみをもとに予測するためである。学習時間の削減を目的として使用する情報をセル単位からトポクラスター単位にしたが、それにより Incidence Matrix の予測精度は低下する。それを回避するために前段モデルに様々な工夫を設けたが、 p_T の予測結果などを見ても Incidence Matrix の予測精度は回復しておらず、大きな効果を示していないと言える。これはそもそも Incidence Matrix が、列方向の入れ替えを許容しており、初期のゼロ行列の状態から正確な Incidence Matrix に収束させるのが難しく、予測対象をより予測しやすいものにしたたり、実質的にパラメータを増やすだけの変更では対応しきれなかったと考えられる。

前段モデルの課題

また、前段の予測モデルに関しては、構造上の改善可能点があると考えている。現在の予測モデルでは以下の図のように、予測対象である Incidence Matrix の行列要素に対して、行要素の特徴量と列要素の特徴量のみを元に予測している。(図 8.1 を参照)

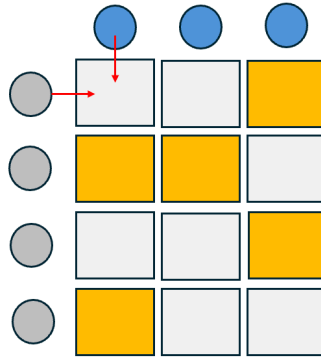


図 8.1: Incidence Matrix の予測の構造。Incidence Matrix の値 (行列要素) は列の特徴量と行の特徴量 (と現在の Incidence Matrix の値) のみから予測しており、周囲の列や行の特徴量が予測に反映されにくい。

例えば、ある地点のクラスターに大きなエネルギーを落としている粒子がそこから大きく離れた地点のクラスターにもエネルギーを落としている可能性は低いですが、現状ではクラスターを独立に予測しているためそのような相関関係を反映するのが難しい。Incidence Matrix の性質から、他の行や列との関係を直接的に予測に活かすことができるモデルにすべきであると考えられる。この点に関して、オリジナルのモデルではグラフ構造を採用して周囲の特徴量を反映するように意図しているが (図 8.2)、行方向 (クラスターやトラック) の持つエネルギーや η 、 ϕ などの情報は他のクラスターのエネルギーなどと混合するよりもむしろそのまま保持されていた方が予測の役に立つ。例えばどれだけのエネルギーを落としたかを予測する上ではそのクラスターに全体でどれだけのエネルギーが落ちたかの情報がそのままあったほうが良いと言った具合である。

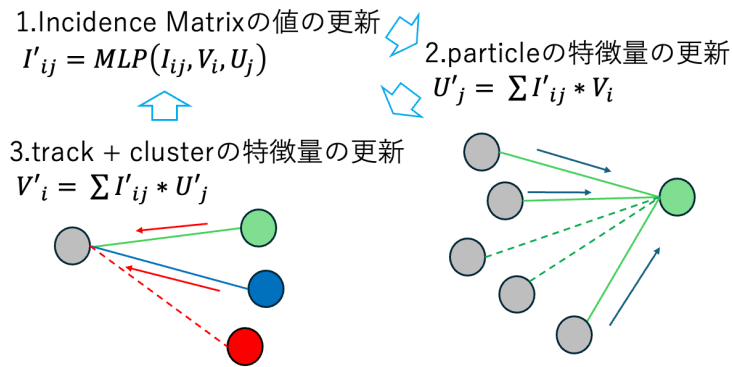


図 8.2: Incidence Matrix の予測段階である前段での特徴量の更新ステップ。クラスター (+トラック) の特徴量が Incidence Matrix の値によって重みづけられ粒子の特徴量に反映され、さらにそれを反映した粒子の特徴量を Incidence Matrix の値によって重みつけてクラスター (+トラック) の特徴量に反映させる。前段モデルではこのステップが複数回繰り返される。

前段モデルの損失関数

また、ここまでのことであまり Incidence Matrix の予測精度に関して定量的な評価ができていないが、この点も HGPflow モデルにおける難点であると言える。損失関数としては、オリジナルにおいては KL divergence、試作モデルおよび改善版モデルにおいては MSE となっているが、Loss が一通り下り切っているにもかかわらず正確なイベント再構成から大きく離れた Incidence Matrix を予測している例が少なくない。

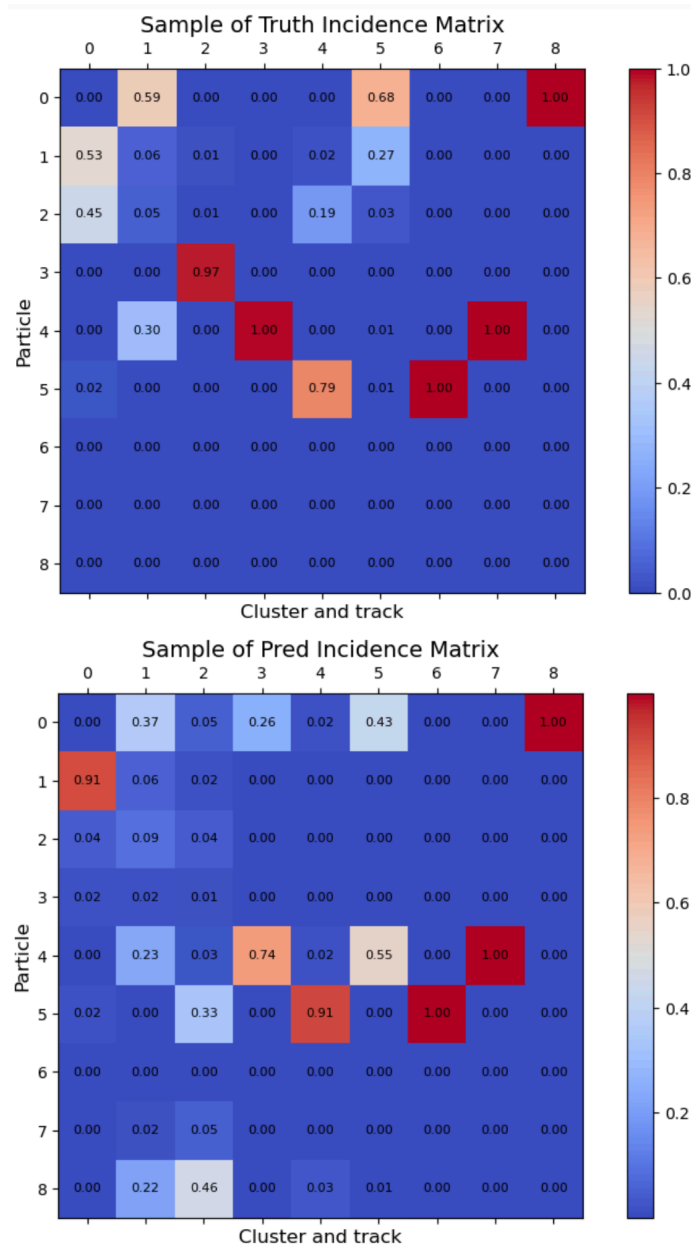


図 8.3: 損失関数の値が小さい Incidence Matrix の一例。具体的な数値は KL divergence で 2.92×10^{-2} 。上が truth であり下が prediction。

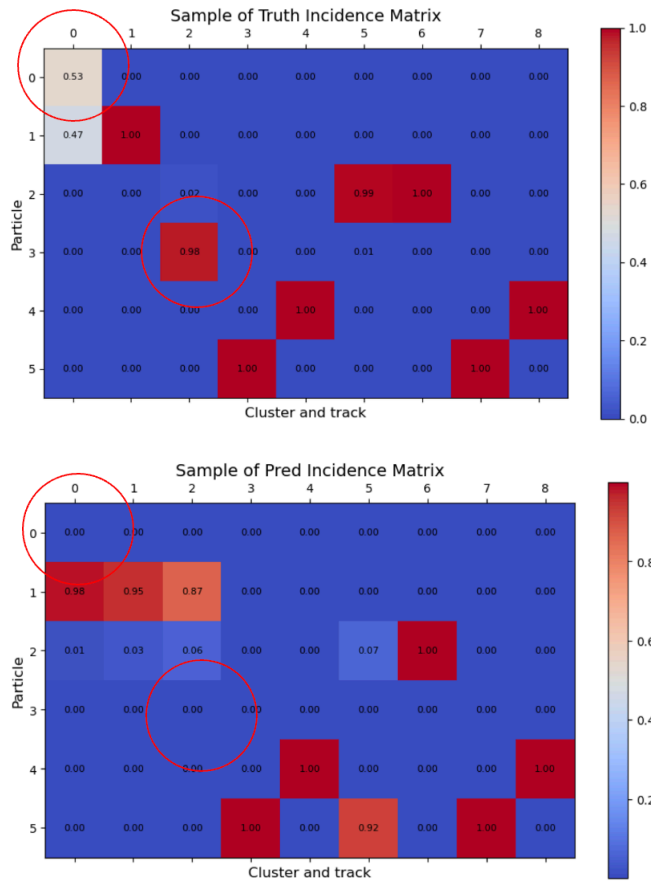


図 8.4: 損失関数の値が大きい Incidence Matrix の一例。具体的な数値は KL divergence で 7.20×10^{-2} 。上が truth であり下が prediction。丸がついている部分が loss が悪化している要因

例えば、図 8.3 は損失関数の値が同程度のサイズのイベントに対して比較的小さい Incidence Matrix であり、図 8.4 は損失関数の値が同程度のサイズのイベントに対して比較的大きい Incidence Matrix である。各 Incidence Matrix を見てみると、損失関数が小さくよく予測できているとされる行列に関しては truth の方では存在するはずの粒子番号 3 の行に一切値が割り振られておらずこの粒子の存在が完全に見落とされてしまっている。それだけでなく truth の方では存在しないはずの粒子番号 7 と 8 の粒子が予測された Incidence Matrix の方では存在することになっておりこの中だけでも粒子 3 つ分の誤りがある。一方で、損失関数が大きくあまり予測できていないとされる行列の方にはそのような粒子の見落としは二つである (省略されている部分の値は全て 0 である)。また数値に関してはどちらも大きく外している箇所が複数あるわけではない。どちらが適切にイベントを再構成しているかは観点によるが、今回あまり予測できていないとされる行列の損失が大きくなってしまったのは、KL divergence の定義が truth と prediction に対して非対称であり、0 を 1 と予測する時の損失よりも 1 を 0 と予測した時の損失が大きくなるためである。そのためイベントを表す Incidence Matrix に対する損失はどのような再構成の誤りに対してペナルティを課したいかによって慎重に考えるべきと言える。

後段モデルの改善とその要因

一方で試作モデルと改善版モデルの比較をすると後段モデルの工夫には一定の効果があることが伺える。改善版モデルの精度が試作モデルよりも向上していた要因として考えられるものとして

1. 9つのモデルを混合したことによるアンサンブルの成果
 2. MLP よりも高い予測精度を誇る tabnet を採用したため
- があり、それぞれがどの程度寄与しているか確認する。

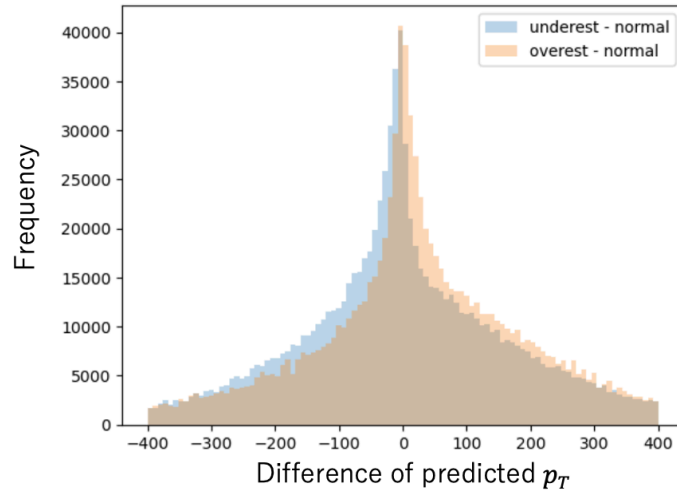


図 8.5: 過大予測するように損失関数を設定したモデルと通常モデルの p_T 予測値の差 (オレンジ) と過小予測するように損失関数を設定したモデルと通常モデルの p_T 予測値の差 (青)。過大 (過小) 予測するモデルの出力から通常モデルの出力を引いている。また、それぞれのモデルの値は MLP、Residual MLP、tabnet の出力を平均している。

図 8.5 は過大 (過小) 予測するモデルの p_T 予測値と通常モデルの p_T 予測値の差である。これを見るとその差は数十 MeV 程度であり、 p_T の精度の悪さと比較して小さい。そのため過大評価するモデルと過小評価するモデルのアンサンブルが精度向上に大きく寄与しているとは考えにくい。

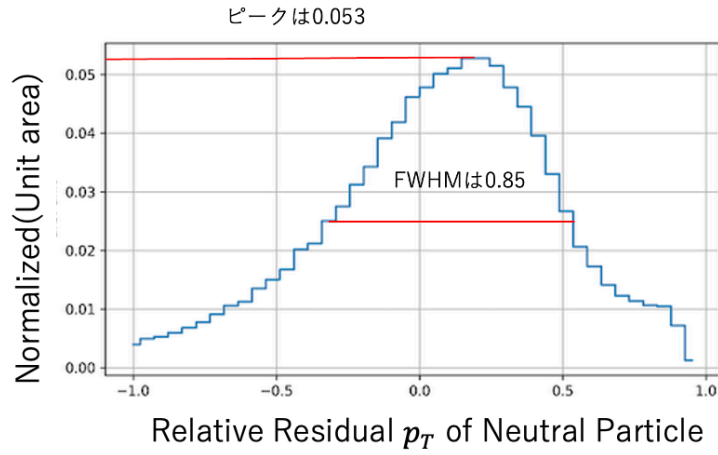


図 8.6: 後段で tabnet のみを用いて予測させた場合の中性粒子の p_T の相対誤差のピークと FWHM。

次に MLP、Residual MLP、tabnet によるアンサンブルの効果を確認する。図 8.6 は後段で tabnet のみを用いて 300 分学習させたのちに p_T を予測させた場合の中性粒子の p_T の相対誤差である。これと図 7.6 に示した中性粒子の p_T の相対誤差を比較すると、tabnet のみを用いた場合の方がピークの高さ及び resolution の観点で高い精度を出していることがわかる。そのため MLP 及び Residual MLP とのアンサンブルはかえって結果を悪化させていた。

一方で tabnet のみでより高い精度が得られることが確認できたため、MLP などの単純なモデルではなくより複雑なモデルを後段に導入することによる精度の向上を期待できると言える。ところで中性粒子の η 、 ϕ の精度が p_T に比べて劣化していない点に関しては、そもそもイベントごとの η と ϕ の値の散らばりが小さく、またセルをトポクラスターにまとめる際、位置座標が近いもの、つまり η や ϕ の近いもの同士をまとめているので粒度を落としたことによる情報劣化の影響が薄いためと考えられる。

8.1 まとめ

本研究では、Particle Flow アルゴリズムに機械学習を応用した先行研究 (HGPflow モデル) の改良を目指した。先行研究には、学習に非常に時間がかかるという問題点があったため、計算効率を向上させるためにデータの情報を削減し、精度低下を回避するために前段および後段のモデルアーキテクチャを改良した。その結果、カロリメータ由来の情報の粒度をセル単位からトポクラスター単位に変えることで学習にかかる時間を大幅に短縮でき、荷電粒子の物理量の予測精度は大きく低下しないことが確認された。一方で中性粒子の擬ラピディティ (η)、方位角 (ϕ)、 p_T の予測精度の劣化が確認された。これは Incidence Matrix の予測精度の低さに起因しており、前段モデルを構造的に大きく変更しない限り、Incidence Matrix を正確に予測するのは難しいことが判明した。また、Incidence Matrix の予測構造には改善の余地があり、定量的評価方法についても慎重な選択が必要であることが確認された。

中性粒子の p_T の予測精度は大きく低下していたが、後段モデルにより複雑なモデルを導入することでその精度を向上させることが可能であることが示された。また、アンサンブルモデルの効果を検証した結果、アンサンブルによる大

きな効果は得られなかった。

謝辞

本研究を遂行するにあたり、指導教員である寺師弘二先生には、研究内容に関する多くの助言や発表資料及び本論文への添削や、修論完成までのスケジュール管理など様々な面で大変お世話になりました。また、田中純一先生には、研究テーマの提案や研究内容などへの多くの助言を賜り、多くの場面で助けていただきました。齊藤真彦先生には、直接的にご指導いただき、研究の中で困った場面での手助けや全体的な研究のリード及び研究内容や発表資料の添削などの本当に多くの点でお世話になりました。研究を進めていく上で、御三方のご助力は大変大きなものであり、なければ研究を形にまとめることはできませんでした。研究の性質と自身の特性からあまり研究室に向かうことがなく、自宅での研究が多く、ご心配とご迷惑をおかけしてしまったことをお詫び申し上げます。また、学会による出張の際にはICEPPのスタッフの方々にも大変お世話になりました。出張の手続きに慣れていない中、多くのサポートをいただきました。最後に、生活面と経済面、及び精神面において支え続け、ここまで育ててくださった母に感謝申し上げます。

References

- [1] M. Cacciari et al. The anti- k_t jet clustering algorithm. *Journal of High Energy Physics*, 2008(4):063, 2008.
- [2] ATLAS Collaboration. Jet energy scale and resolution measured in proton-proton collisions at $\sqrt{s} = 13$ TeV with the ATLAS detector. 2020. arXiv:2007.02645 [hep-ex].
- [3] ATLAS Collaboration. Performance of the ATLAS Track Reconstruction Algorithms in Dense Environments in LHC Run 2. *Eur. Phys. J. C*, 77:673, 2017.
- [4] C. Fabjan and F. Gianotti. Calorimetry for particle physics. *Reviews of Modern Physics*, 75(4):1243–1286, 2003.
- [5] F. A. Di Bello et al. Reconstructing particles in jets using set transformer and hypergraph prediction networks. *Eur. Phys. J. C*, 2023.
- [6] Joao Pequenao. Computer generated image of the whole ATLAS detector. 2008 <https://cds.cern.ch/record/1095924?ln=ja>.
- [7] ATLAS Collaboration. The ATLAS Experiment at the CERN Large Hadron Collider. *JINST*, 3:S08003, 2008.
- [8] ATLAS Collaboration. Topological cell clustering in the ATLAS calorimeters and its performance in LHC Run 1. *Eur. Phys. J. C*, 77:490, 2017.
- [9] L. Garren et al. MONTE CARLO PARTICLE NUMBERING SCHEME. *Review of Particle Physics*, 2006. Revised edition, maintained by the Particle Data Group.
- [10] ATLAS Collaboration. Jet reconstruction and performance using particle flow with the ATLAS Detector. *Eur. Phys. J. C*, 77:466, 2017.
- [11] M. Zaheer et al. Deep sets. In *Advances in Neural Information Processing Systems (NeurIPS)*, volume 30, 2017.
- [12] H. W. Kuhn. The Hungarian method for the assignment problem. *Naval Research Logistics Quarterly*, 2(1-2):83–97, 1955.
- [13] J. de Favereau et al. DELPHES 3, A modular framework for fast simulation of a generic collider experiment. *Journal of High Energy Physics (JHEP)*, 2014(2):1–26, 2014.

- [14] F. A. Di Bello et al. Configurable calorimeter simulation for AI applications. *arXiv preprint*, arXiv:2303.02101, 2023.
- [15] C. Bierlich et al. A comprehensive guide to the physics and usage of PYTHIA 8.3. *SciPost Physics Codebases*, page 008, 2022.
- [16] S. Agostinelli et al. GEANT4: A simulation toolkit. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A*, 506(3):250–303, 2003.
- [17] Kaiming He et al. Deep Residual Learning for Image Recognition. *arXiv*, 1512.03385v1, 2015. Presented at ILSVRC 2015.
- [18] Sercan Ö. Arik and Tomas Pfister. TabNet: Attentive Interpretable Tabular Learning. *arXiv*, 1908.07442v5, 2019. Presented by Google Cloud AI.
- [19] Nilotpall Kakati et al. HGPflow: Extending Hypergraph Particle Flow to Collider Event Reconstruction. *arXiv preprint*, arXiv:2410.23236v1, 2024.