# 素粒子実験へのAIの応用研究の最前線

田中純一
東京大学 素粒子物理国際研究センター

2024年6月14日

# 自己紹介

- 東大の素粒子実験の研究室（相原研の一期生）卒業
  - Belle実験（つくば、KEK）でD論を書きました。
  - 研究室の同期には横山先生（東大理学部物理）、樋口先生（東大IPMU）
    - 同期の東大大学院関係の先生: 濱口先生、福嶋先生、矢向先生　（結構います…）

物性にも…

- 2002年から素粒子センターでアトラス実験をやっています。
  - 計算機センターのお仕事：Grid
  - データ解析の準備（2010年まで待った）
  - 実際のデータ解析 → 2012年7月 ヒッグス発見
  - 2013年3月 EMカロリメータの読み出しデジタルトリガーのR&Dに正式に参加
    - FPGA Firmwareの開発
    - デジタルトリガーのオペレーション
  - 2018年4月 Tokyo Tier2, ビッグデータを使った計算機科学
    - 計算機センター（グリッド、クラウド、スパコン）
    - 深層学習、量子コンピュータ
    - Beyond AIなどにも参画していた

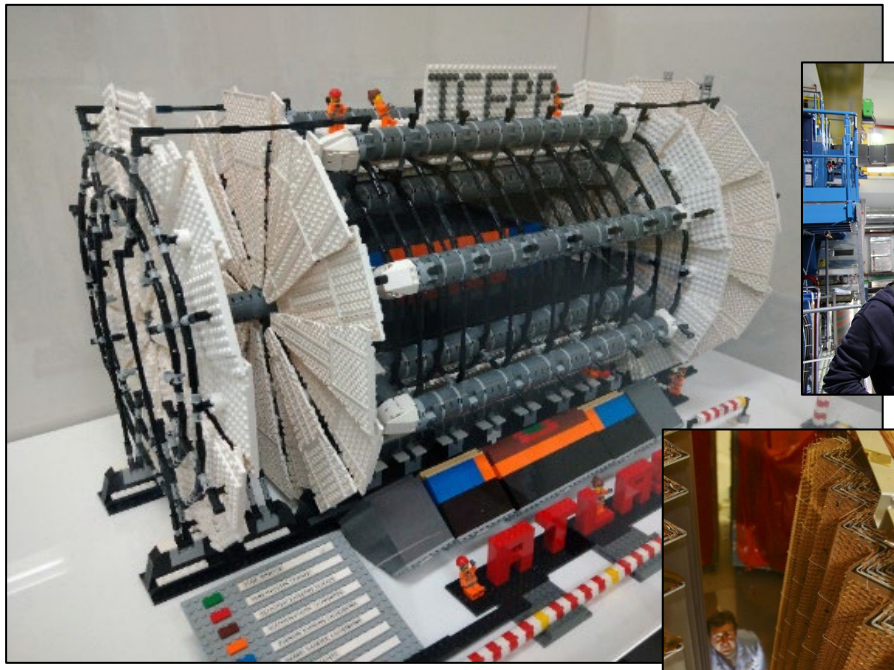
ヒッグスでは終わりたくないですね。

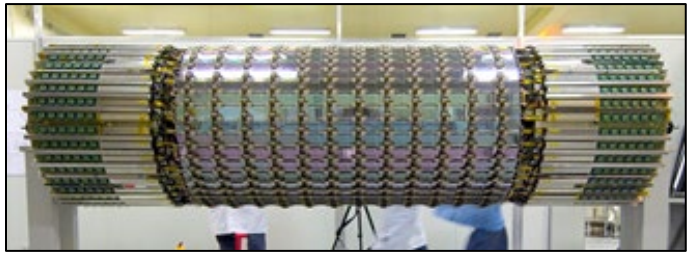
田中研：アトラス募集。もちろん、アトラス以外もOKです！

# 素粒子「実験」の研究

みなさんにはたくさんの選択肢があります！

ハードウェア開発・オペレーションの仕事




計算機上での仕事

検出器データ

↓ 再構成

再構成データ

↓ 粒子識別

解析データ

↓ 解析・検定

学術データ

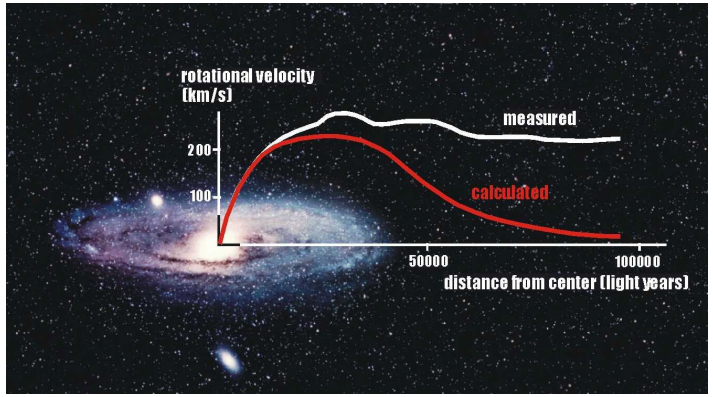
今日は人工知能を使った研究の紹介！

# 素粒子物理・素粒子実験

Understand our universe, the origin of everything
→ how to interact?, what is matter?, what is force?, …

Find ultimate equation(s) to explain our universe!

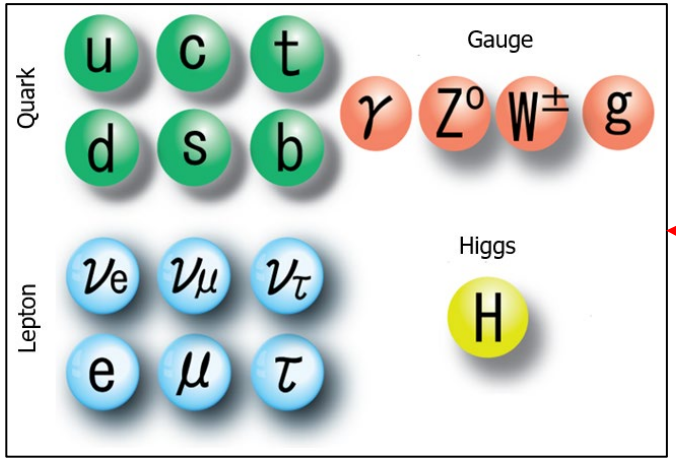
見えている物質で計算した速度
より早く動いている.




**素粒子標準模型**

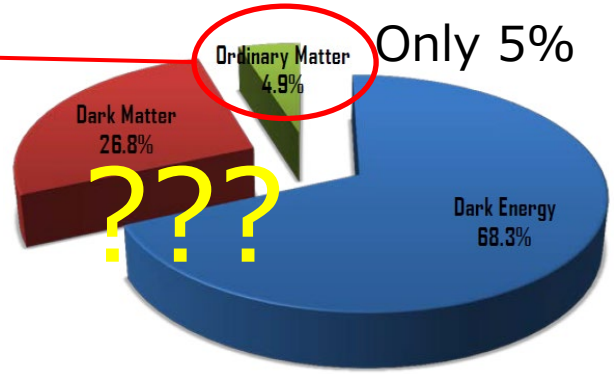
$$\mathcal{L} = -\frac{1}{4}F_{\mu\nu}F^{\mu\nu} + i\bar{\psi}\not{D}\psi + h.c. + \psi_i y_{ij}\psi_j\phi + h.c. + |D_\mu\phi|^2 - V(\phi)$$

**17個の素粒子**




Matter
Fermion (Spin ½)

Force
Boson (Spin 0 or 1)




（個人的に）達成したいこと: 今の標準模型を超えたものを見つけたい. 暗黒物質候補とSUSYの証拠

世界最高エネルギーの**LHC加速器**は宇宙初期（ビッグバンの$10^{-12}$秒後の世界）の状態を人工的に作り出すことができる！

Swiss Geneva

CERN

ATLAS

CERN Meyrin

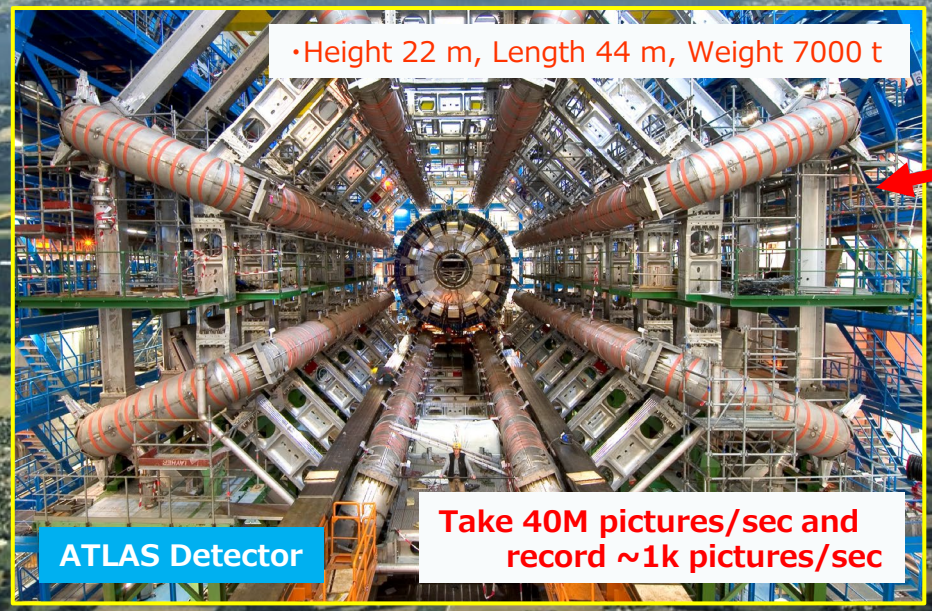
SUISSE

FRANCE

CMS

SPS 7 km

ALICE




**LHC tunnel** 27km circumference
100m underground

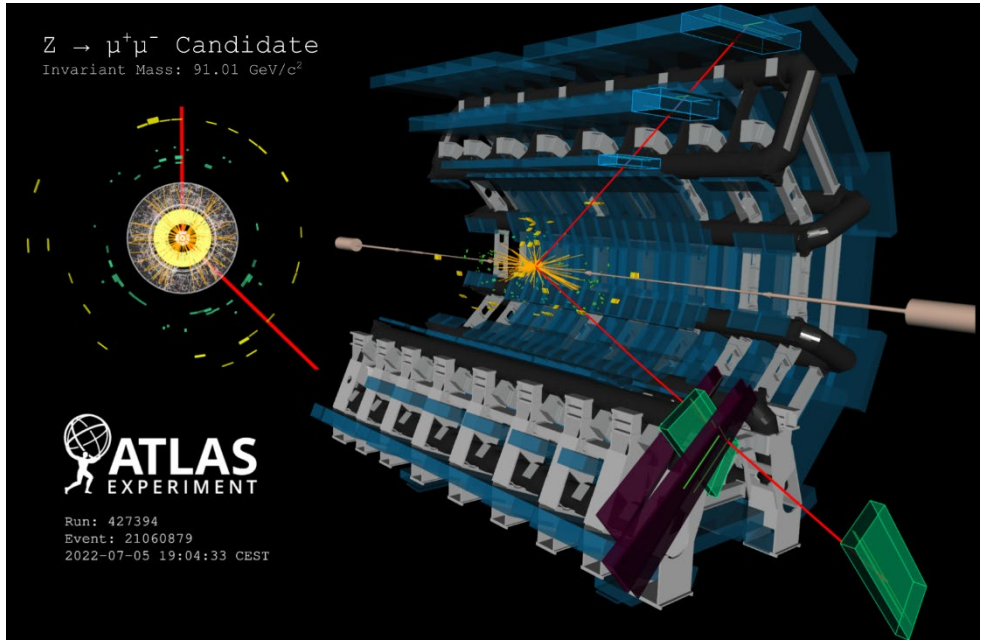
検出器のセンサー数 1億チャンネル

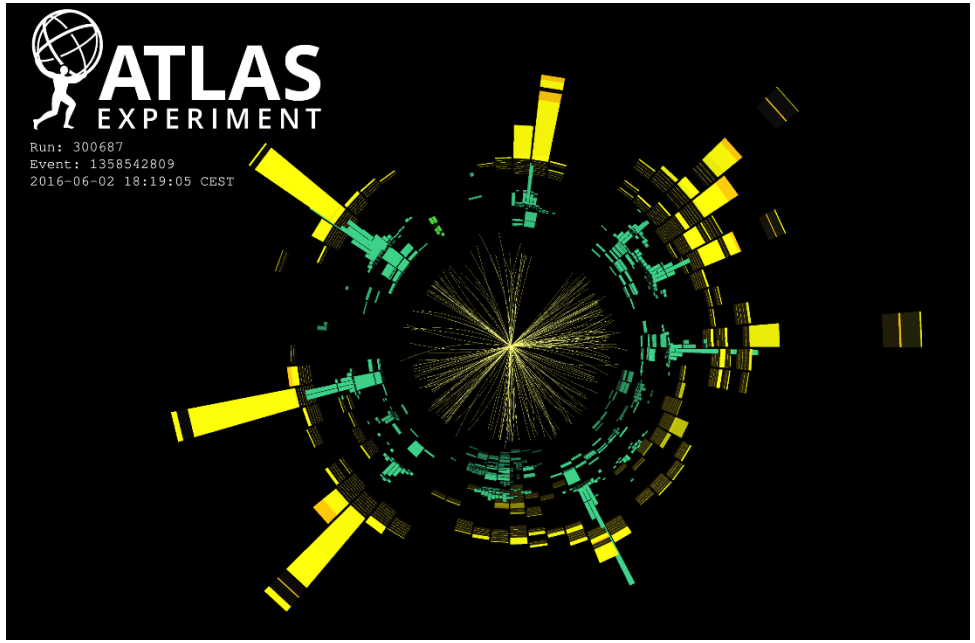
1秒間に最大1000枚の写真

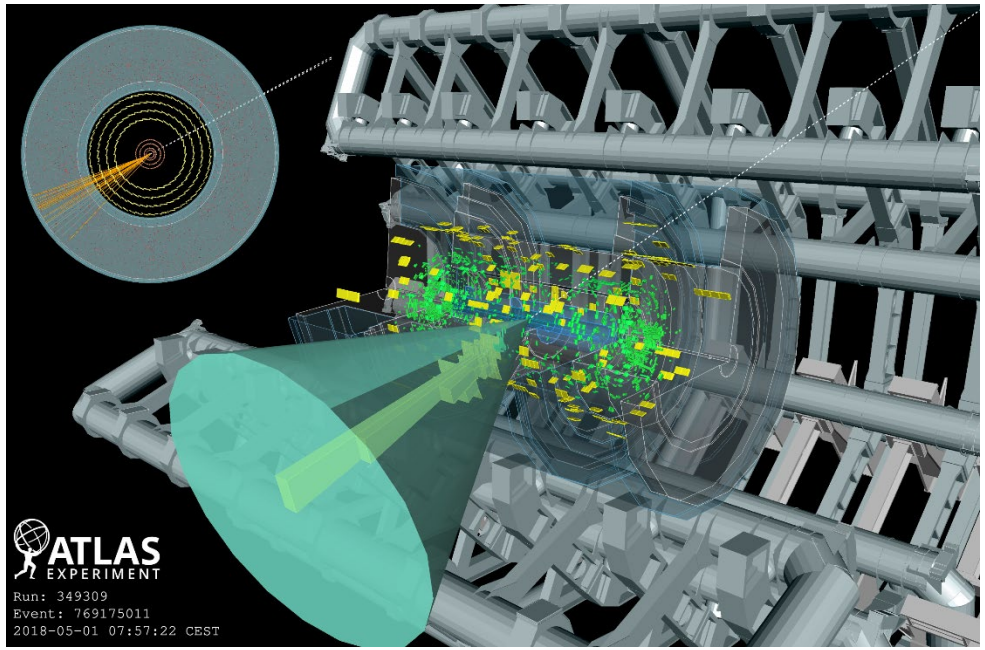
| | | |
|---|---|---|
| Tokyo | Yamanote-line | 34.5km |
| Nagoya | Meijo-line | 26.4km |
| Osaka | Kanjo-line | 21.7km |

*Large Hadron Collider (LHC)*

LHC 27 km




**実験データ**の事象（写真！）の一例

ChatGPT3.5: 約45TB

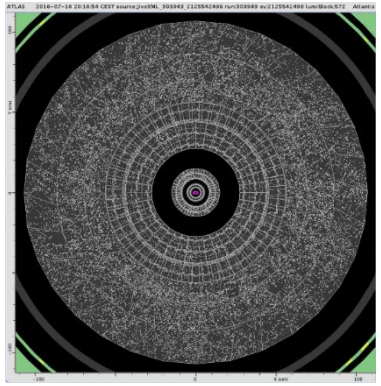
2015-2018年 Run2実験:約2,000,000,000事象
（約20ペタバイト）

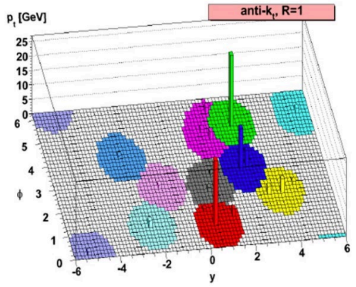
2022-2025年 Run3実験（進行中）
2040年ごろまでに20倍になる計画

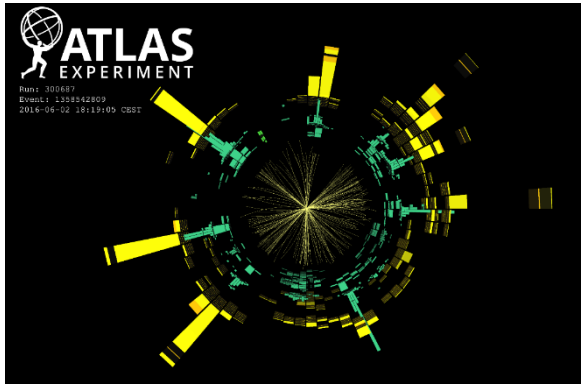
**シミュレーションデータ**は数十倍

我々の研究：
**実験データを再現したシミュレーションデータとの比較**
**（シミュレーションデータを駆使した比較）**

# 素粒子実験：データ解析ワークフロー





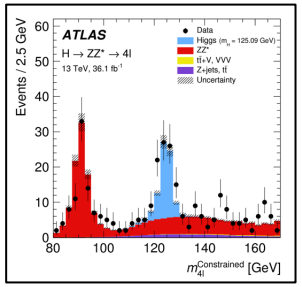




検出器データ → 「再構成」
- 飛跡検出器
- カロリメータ検出器
- ミュー粒子検出器

→ 再構成データ → 「粒子識別」
- 電子や光
- ミュー粒子
- ジェットの種類

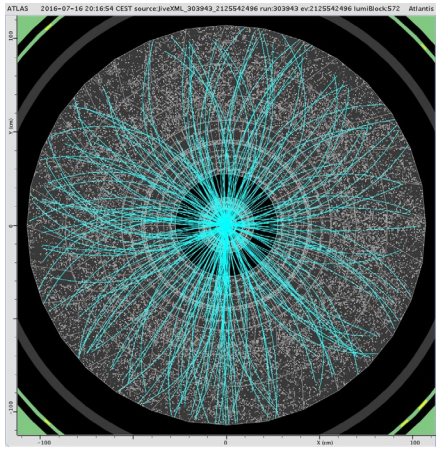
→ 解析データ → 「データ解析」

学術論文

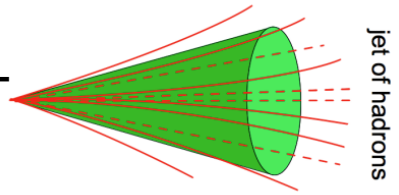



信号事象かどうか?
発見か?

点
（位置）



曲線や塊：
運動量やエネルギー




このジェット何？

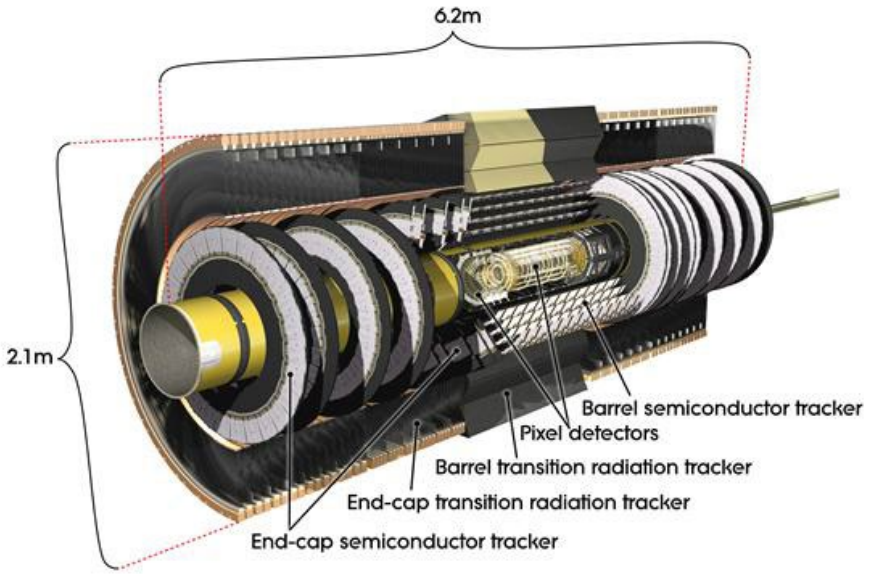
粒子名が付いた
運動量やエネルギー

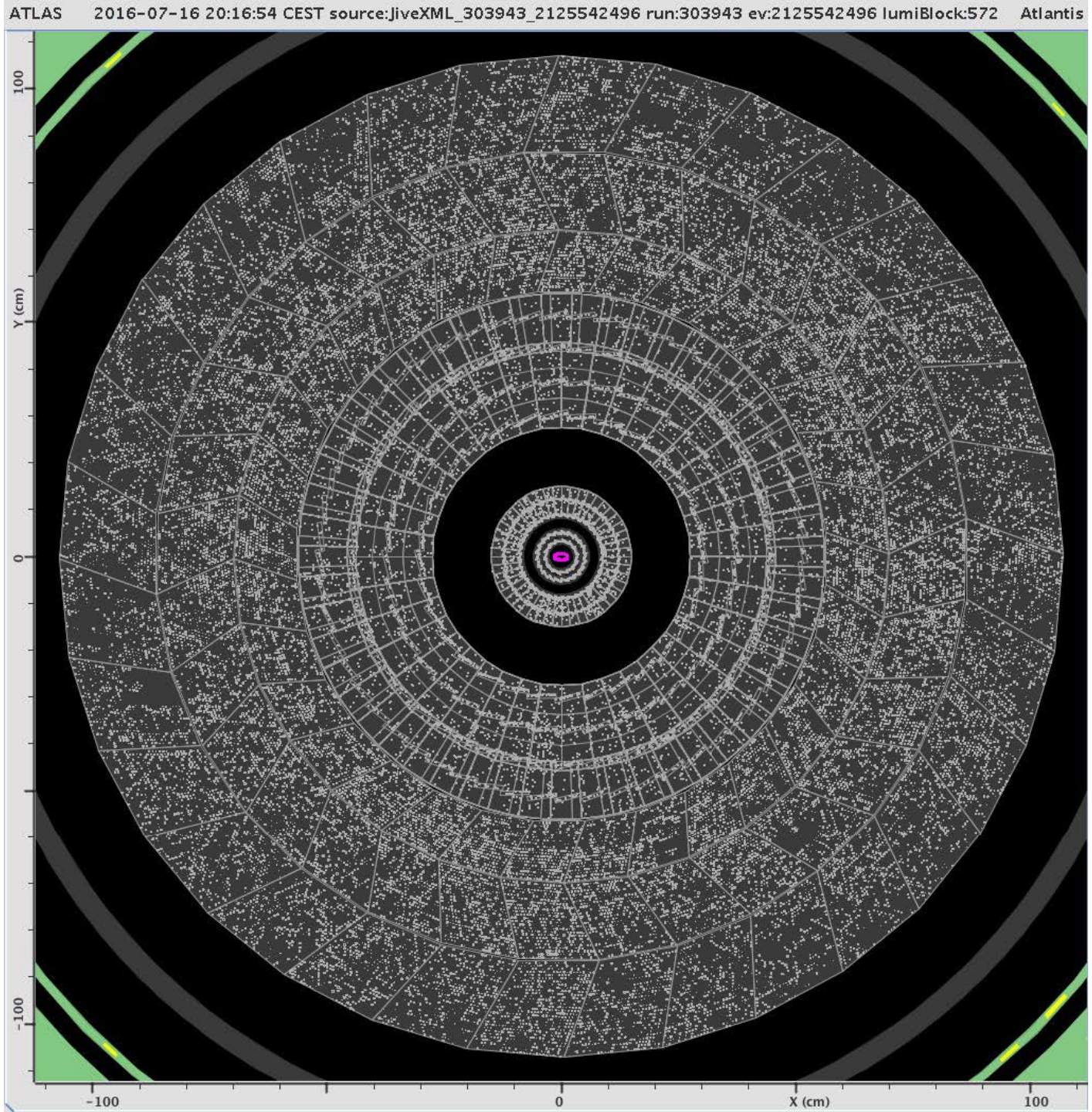
測定値(E,**p**)を持つ
電子や光子など

ここまでくれば
シグナルかバックグラウンドか
判断可能になる.

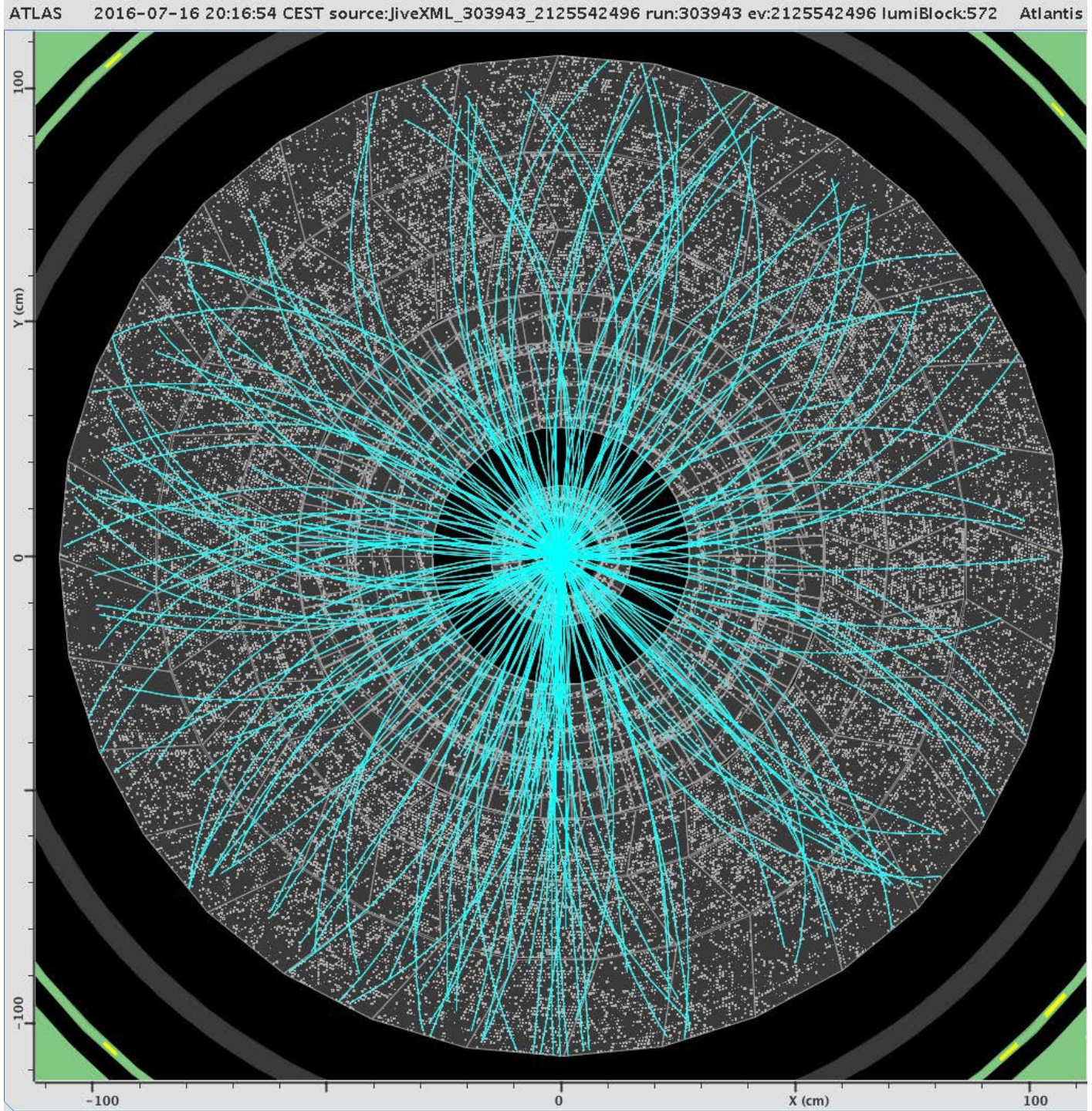
# 内部飛跡検出器のデータ

- 電荷を持った粒子が「点」を残していく.
- 磁場のため、粒子は曲がる.



人工知能の出番！
- 画像系の機械学習？
- 物理法則は？



# 素粒子実験と人工知能

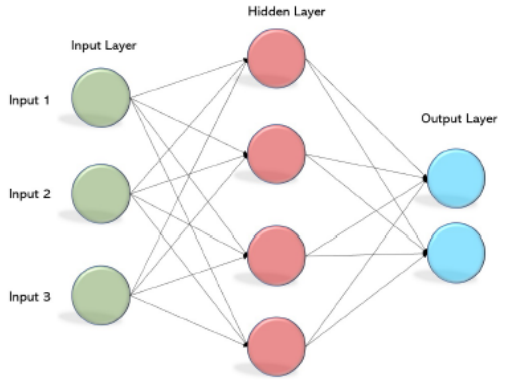
- データ解析の改善
  - オーソドックスなアプローチ：Non-ML・DLからML・DLへ@データ解析ワークフロー
    → これが主流！
  - アグレッシブ：素粒子実験データの基盤モデル（Foundation model）
    フレームワークの開発、たとえば、全体最適化（微分接続）

- よりアグレッシブ：より“intelligent”/“creative”な部分を
  - コード開発
  - データ解析：背景事象の見積もり方法の開発
  - 論文執筆
  - 実験計画・実験設計

  etc.

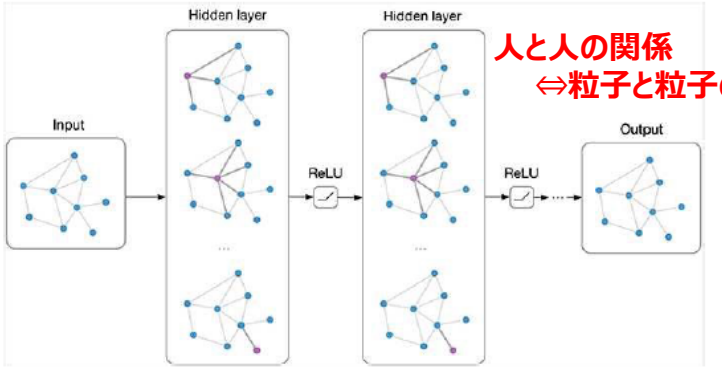
「人工知能」の分野では日々新しいアイデアが生まれている → 素粒子物理への応用

## Multi-layer perceptron (MLP)




From: https://becominghuman.ai/multi-layer-perceptron-mlp-models-on-real-world-banking-data-f6dd3d7e998f

## Graph neural networks (GNNs)

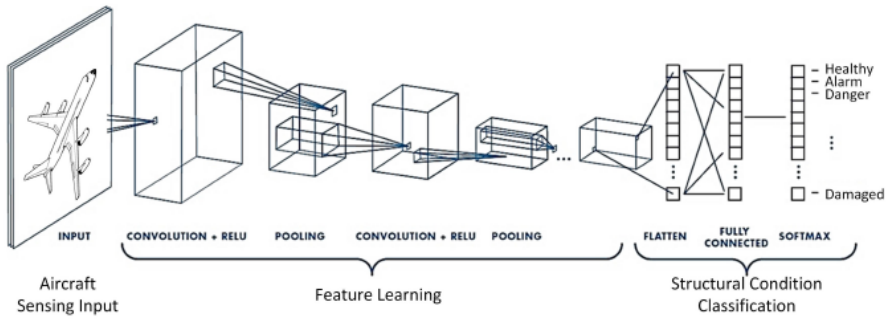



人と人の関係
⇔粒子と粒子の関係

From: https://theaisummer.com/Graph_Neural_Networks/

"Scaling law"に従う
(パラメータ数、データセットサイズ、予算に対してべき乗則)

## Convolutional neural networks (CNNs)

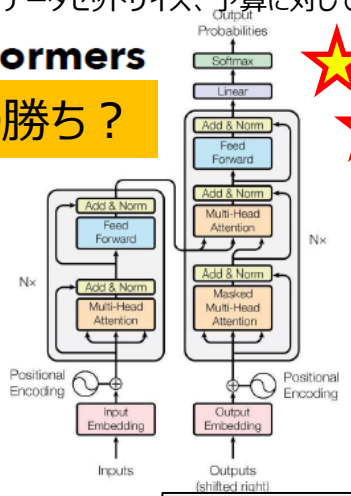



From: [Tabian et al., "A Convolutional Neural Network for Impact Detection and Characterization of Complex Composite Structures," Sensors 19(22), 2019]

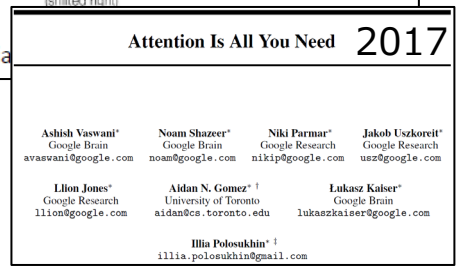
AlexNet (2012) by Hinton's team

## Transformers

金持ちの勝ち？




From: https://pytorch.org/tutoria

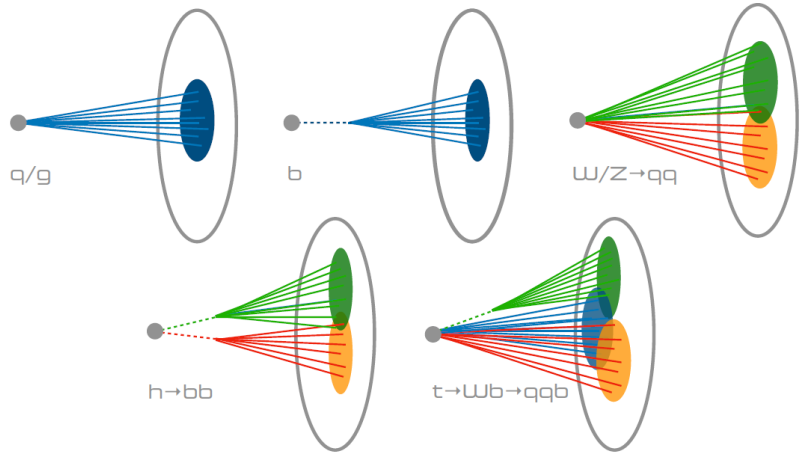

Attention Is All You Need 2017

Ashish Vaswani* Google Brain avaswani@google.com
Noam Shazeer* Google Brain noam@google.com
Niki Parmar* Google Research nikip@google.com
Jakob Uszkoreit* Google Research usz@google.com
Llion Jones* Google Research llion@google.com
Aidan N. Gomez* † University of Toronto aidan@cs.toronto.edu
Łukasz Kaiser* Google Brain lukaszkaiser@google.com
Illia Polosukhin* ‡ illia.polosukhin@gmail.com

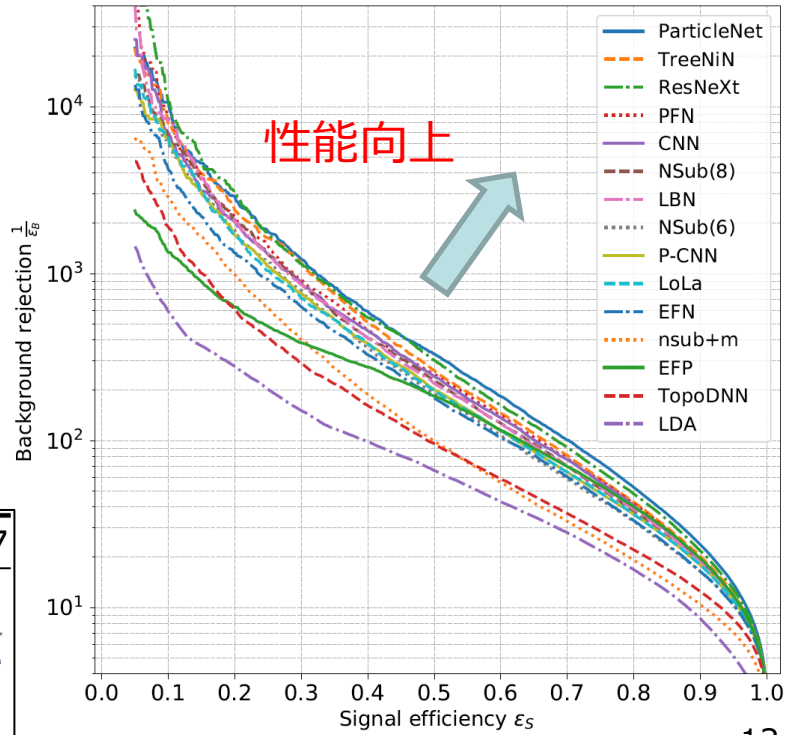
阪大IDS：中島悠太先生のスライドから

2012年「ヒッグス発見」と「AIブーム再燃」
2022年「生成AI元年」

arXiv:1909.12285




トップクォーク「ジェット」の識別性能




arXiv:1902.09914

# 素粒子実験データとGraph Neural Network

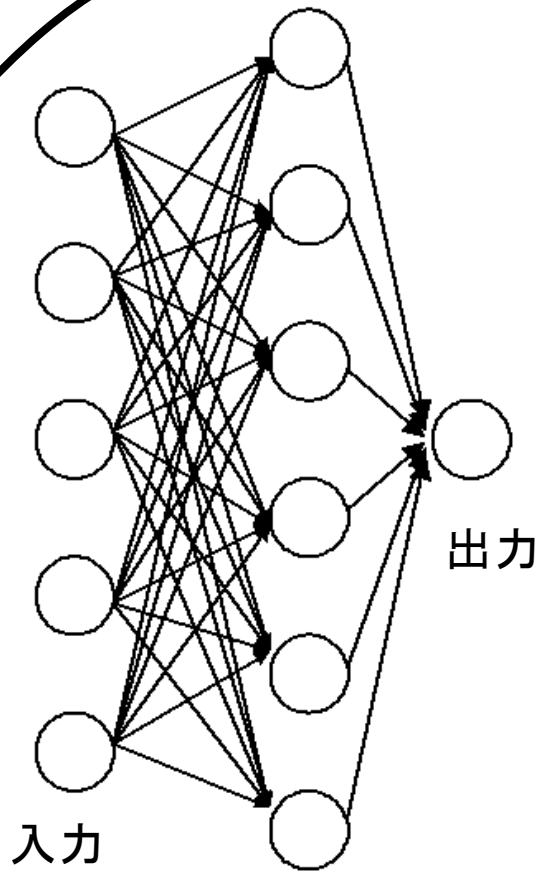
荷電粒子の特徴：運動量と位置（インパクトパラメータ）
クラスターの特徴：運動量（エネルギーとその場所）etc.

特徴量の数は固定

荷電粒子の数
クラスターの数

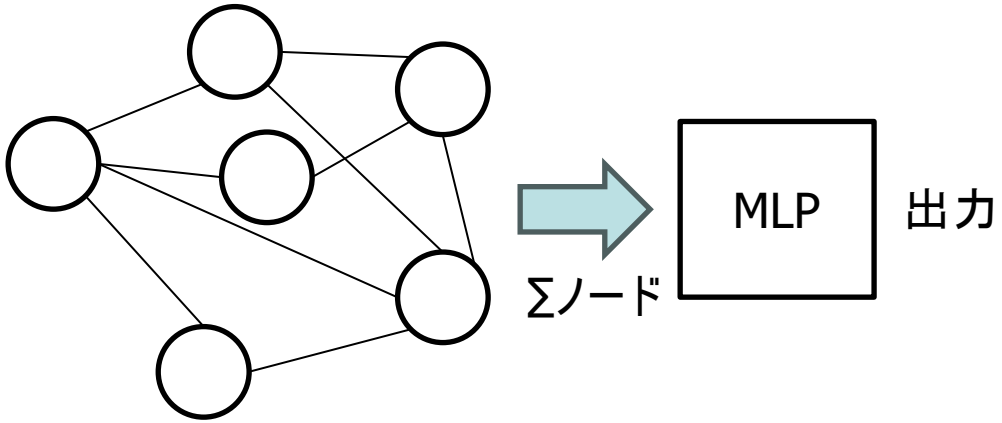
事象ごとに異なる

どうならべる？




**MLP = Multi layer perceptron（多層パーセプトロン）**

**グラフニューラルネットワーク (GNN)**

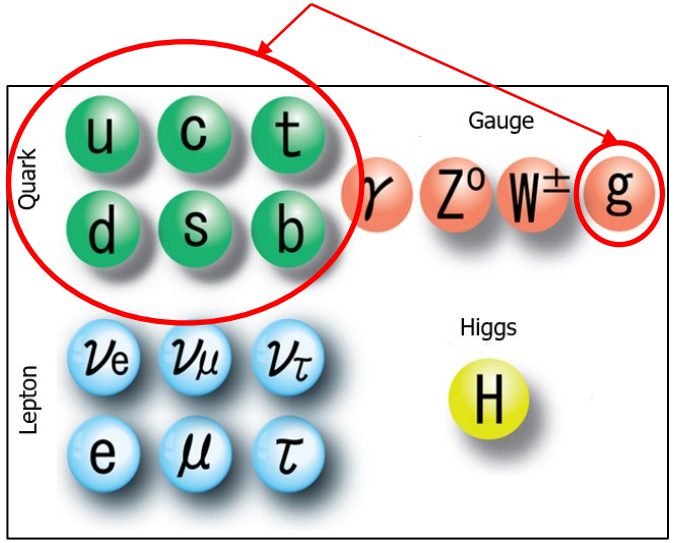



- 各ノードに荷電粒子やクラスター（の表現）を割り当てる。
- ノードやエッジがMLP

GNNは素粒子データと相性はいい

この人たちは単独では観測できない(QCD理論)!

# ジェットの識別

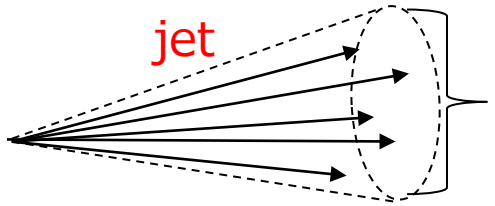



(生成時)

quark or gluon

QCD

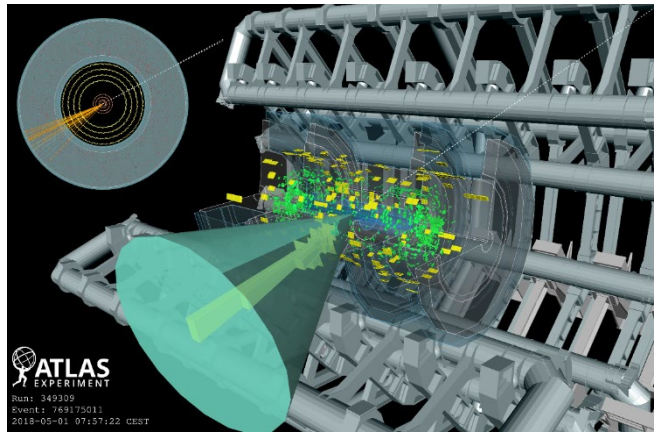
(検出器では)



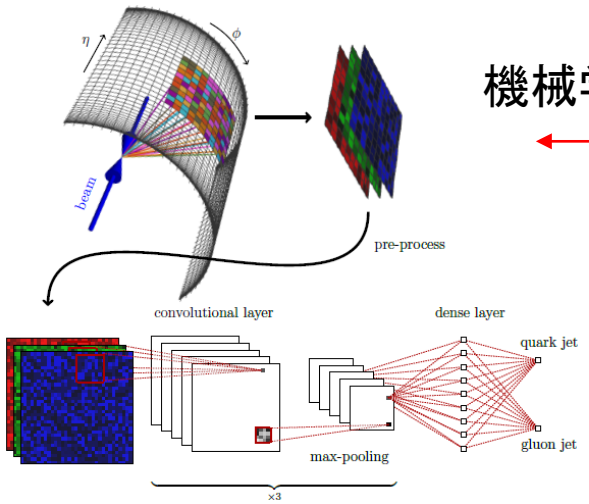

particles

ジェット＝粒子の束

粒子をよーく観ると

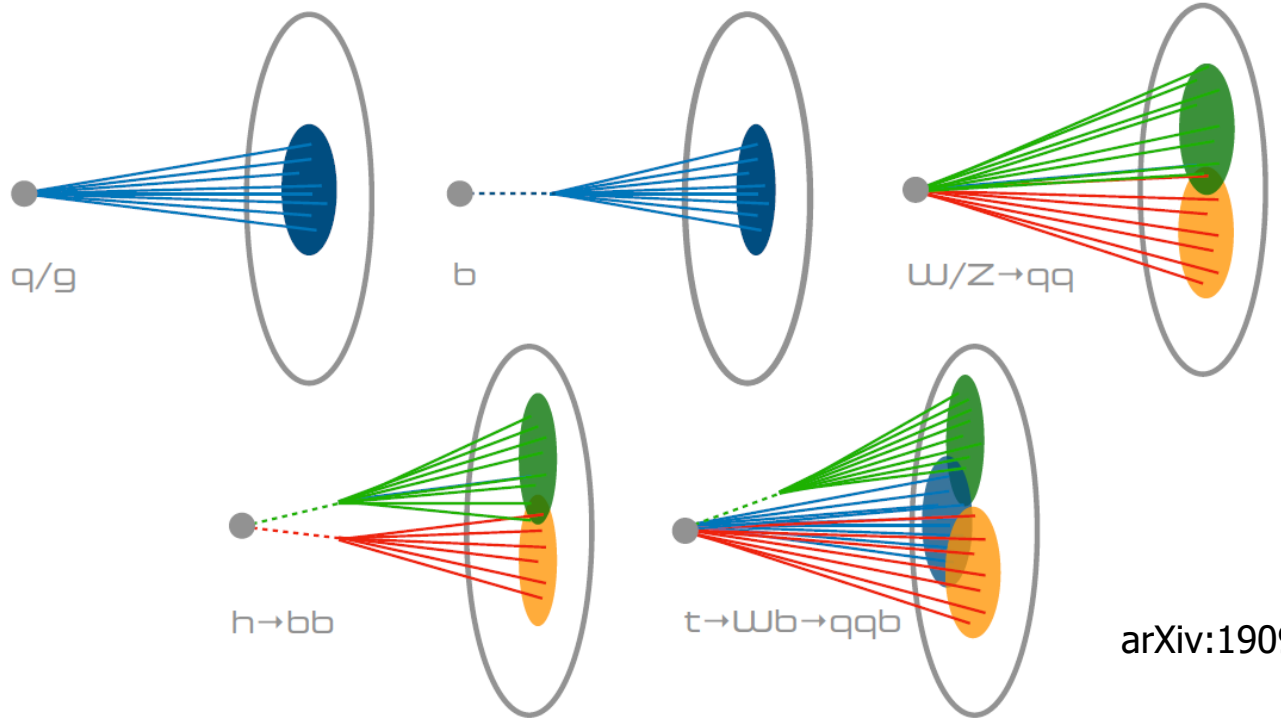



歴史的にはCNNから




arXiv:1612.01551

機械学習化



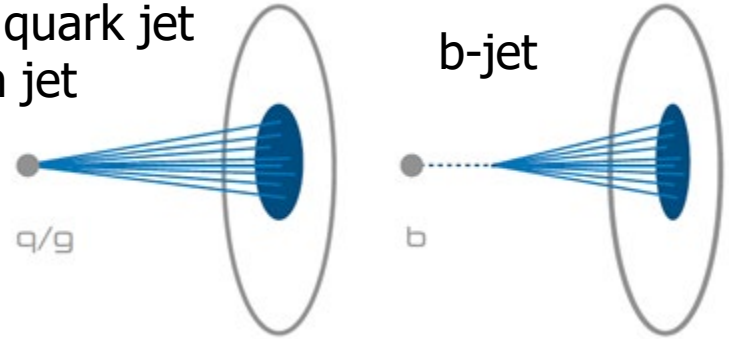

arXiv:1909.12285

ATL-PHYS-PUB-2022-027

# Graph Neural Networkを用いたb-tagging

H→bb（ヒッグス粒子の崩壊）のような研究：b-jetの識別が鍵

u,d,s
Light quark jet
Gluon jet




b-jet: Bハドロンの崩壊 B→Dlν, D→Klν

BやDは比較的長寿命→検出器で識別可能

従来の方法：長寿命という性質を抽出する複数のアルゴリズムの開発
それらの出力を機械学習のインプットに。

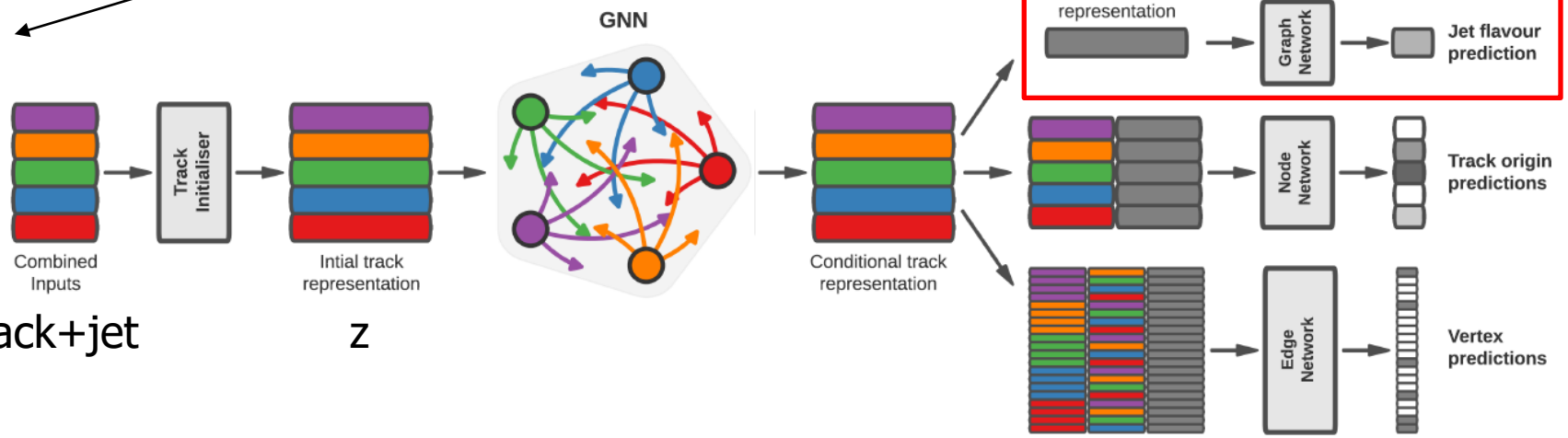
最新の方法：粒子(track)を「ノード」として表現したグラフを使った深層学習
入力変数は多いが、どちらかといえば、かなり生データに近い.

| Jet Input | Description |
|---|---|
| $p_T$ | Jet transverse momentum |
| $\eta$ | Signed jet pseudorapidity |
| **Track Input** | **Description** |
| $q/p$ | Track charge divided by momentum (measure of curvature) |
| d$\eta$ | Pseudorapidity of the track, relative to the jet $\eta$ |
| d$\phi$ | Azimuthal angle of the track, relative to the jet $\phi$ |
| $d_0$ | Closest distance from the track to the PV in the longitudinal plane |
| $z_0 \sin\theta$ | Closest distance from the track to the PV in the transverse plane |
| $\sigma(q/p)$ | Uncertainty on $q/p$ |
| $\sigma(\theta)$ | Uncertainty on track polar angle $\theta$ |
| $\sigma(\phi)$ | Uncertainty on track azimuthal angle $\phi$ |
| $s(d_0)$ | Lifetime signed transverse IP significance |
| $s(z_0)$ | Lifetime signed longitudinal IP significance |
| nPixHits | Number of pixel hits |
| nSCTHits | Number of SCT hits |
| nIBLHits | Number of IBL hits |
| nBLHits | Number of B-layer hits |
| nIBLShared | Number of shared IBL hits |
| nIBLSplit | Number of split IBL hits |
| nPixShared | Number of shared pixel hits |
| nPixSplit | Number of split pixel hits |
| nSCTShared | Number of shared SCT hits |
| nPixHoles | Number of pixel holes |
| nSCTHoles | Number of SCT holes |
| leptonID | Indicates if track was used in the reconstruction of an electron or muon (only for GN1 Lep) |

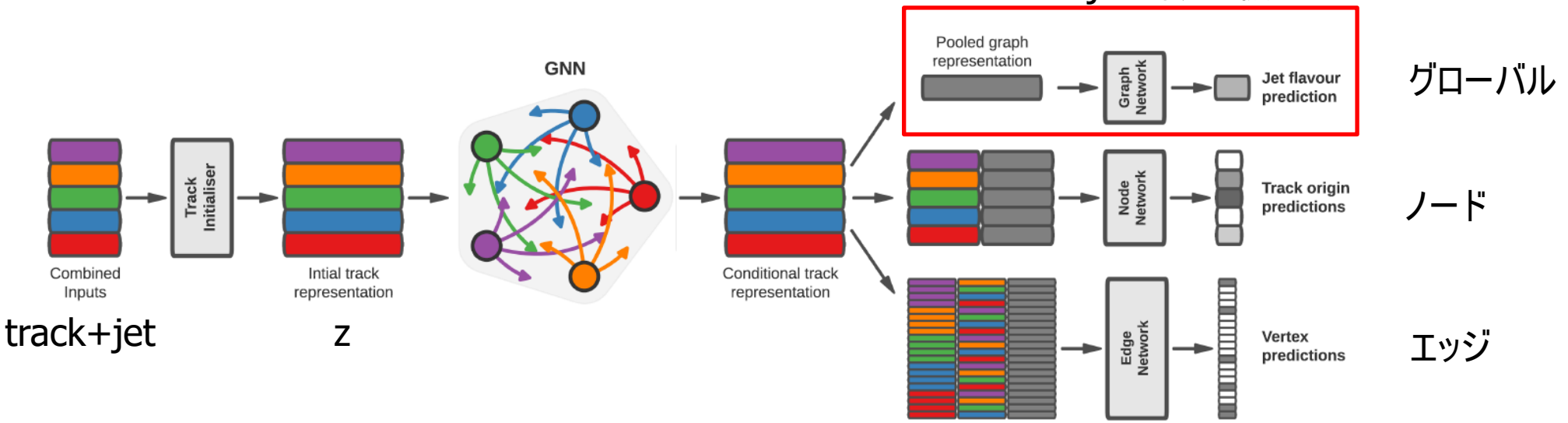
track+jet

z

これがjetの識別機



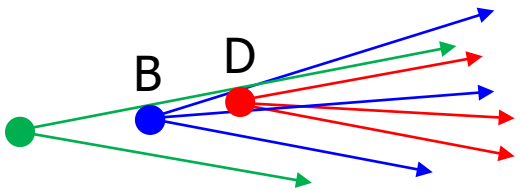
これがjetの識別機




track+jet　　z

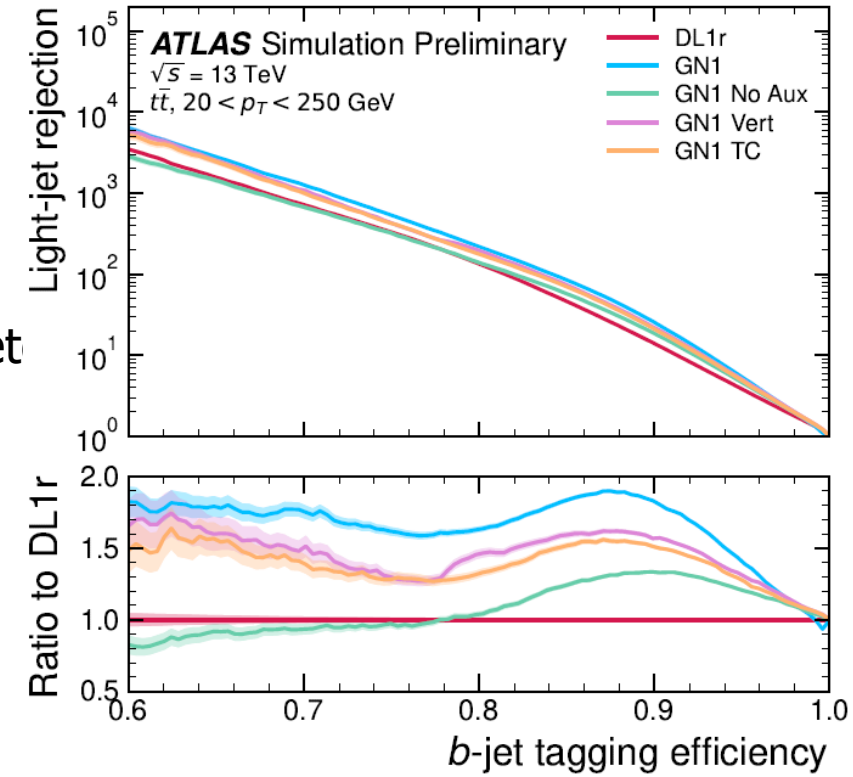
工夫：グラフのノードとエッジ情報も学習に使う!

- 赤と青のトラックがb-jet由来
- 緑のトラックは別の陽子・陽子の相互作用（パイルアップ）




ノード識別：生成点分類（例：赤丸、青丸、緑丸 et
エッジ識別：同じ生成点由来かどうか？

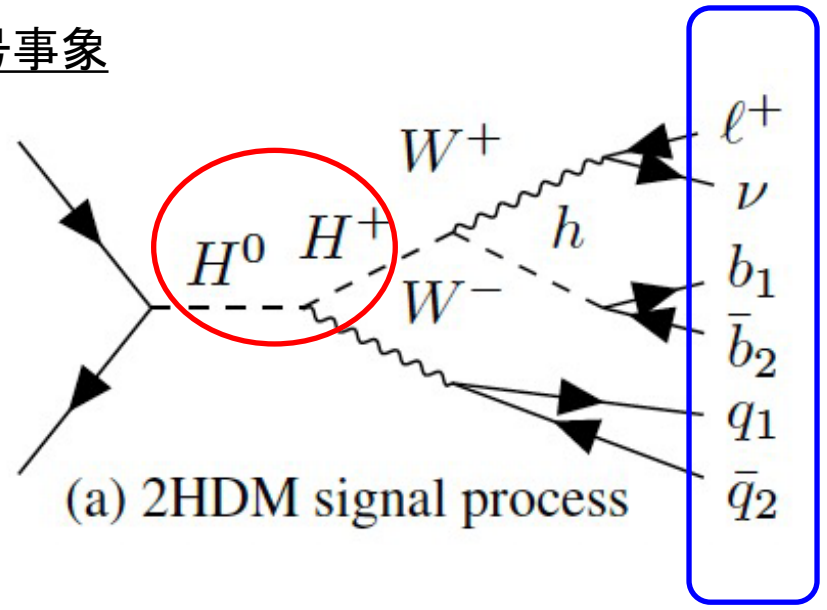
$$L_{\text{total}} = L_{\text{jet}} + \alpha L_{\text{vertex}} + \beta L_{\text{track}}$$



研究者が積極的に使いたい知識を

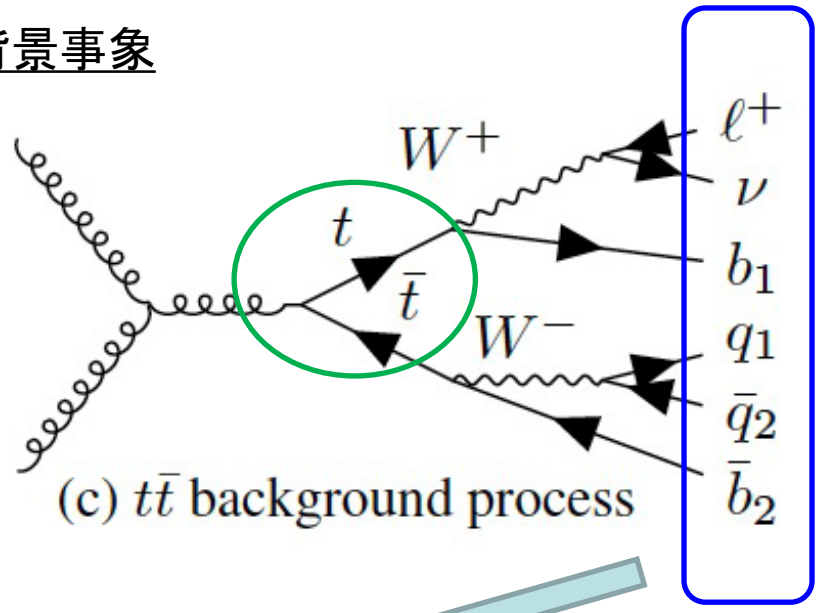
# 事前知識を機械学習へ

信号事象



(a) 2HDM signal process

背景事象



(c) $t\bar{t}$ background process

解析データ（検出器データ）でみえるものは全く同じ

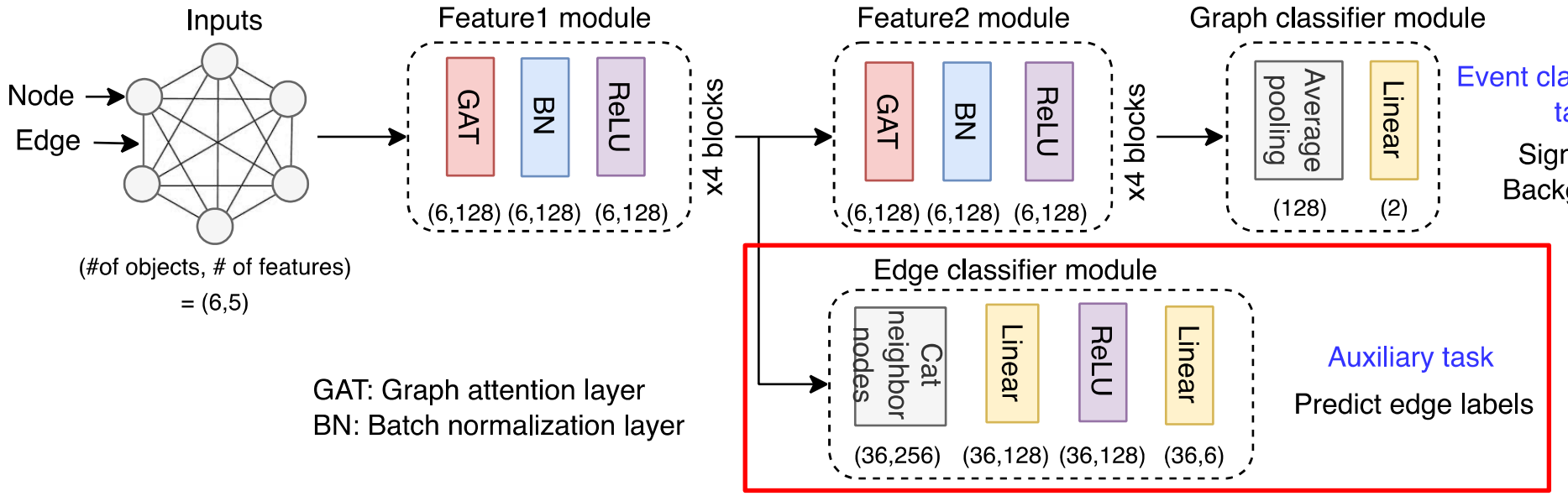
しかし、信号事象と背景事象の生成過程は異なることは知っている！
→ 信号事象には途中でHiggsが存在、背景事象では途中でtopが存在などという情報

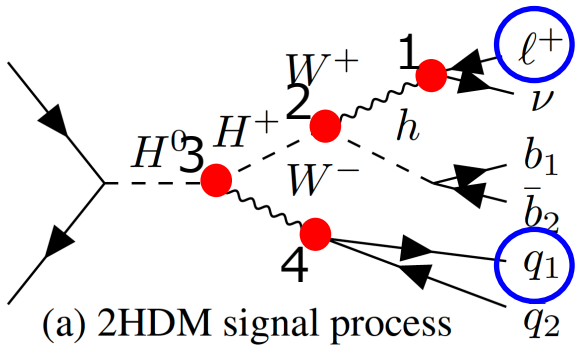
異なるファインマン図

(arXiv:2212.08759, Accepted by the "NeurIPS 2022 ML4PS Workshop")

# Decay-aware neural network

異なるファインマン図 → 異なるホップ数（Vertex数）

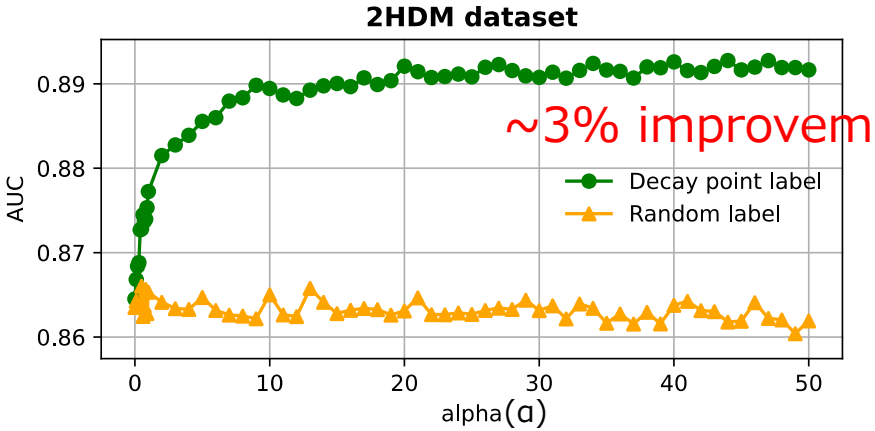


(a) 2HDM signal process

| | l | v | $b_1$ | $b_2$ | $q_1$ | $q_2$ |
|---|---|---|---|---|---|---|
| l | 0 | 1 | 3 | 3 | 4 | 4 |
| v | 1 | 0 | 3 | 3 | 4 | 4 |
| $b_1$ | 3 | 3 | 0 | 1 | 4 | 4 |
| $b_2$ | 3 | 3 | 1 | 0 | 4 | 4 |
| $q_1$ | 4 | 4 | 4 | 4 | 0 | 1 |
| $q_2$ | 4 | 4 | 4 | 4 | 1 | 0 |

Label matrix based on decay chains




Loss = L (event classification)
+ α* L (auxiliary task)

# Scaling Laws

（ちょっと大きな話？）

arXiv:2001.08361

## Scaling Laws for Neural Language Models


**Jared Kaplan** *
Johns Hopkins University, OpenAI
jaredk@jhu.edu

**Sam McCandlish***
OpenAI
sam@openai.com

**Tom Henighan**
OpenAI
henighan@openai.com

**Tom B. Brown**
OpenAI
tom@openai.com

**Benjamin Chess**
OpenAI
bchess@openai.com

**Rewon Child**
OpenAI
rewon@openai.com

**Scott Gray**
OpenAI
scott@openai.com

**Alec Radford**
OpenAI
alec@openai.com

**Jeffrey Wu**
OpenAI
jeffwu@openai.com

**Dario Amodei**
OpenAI
damodei@openai.com

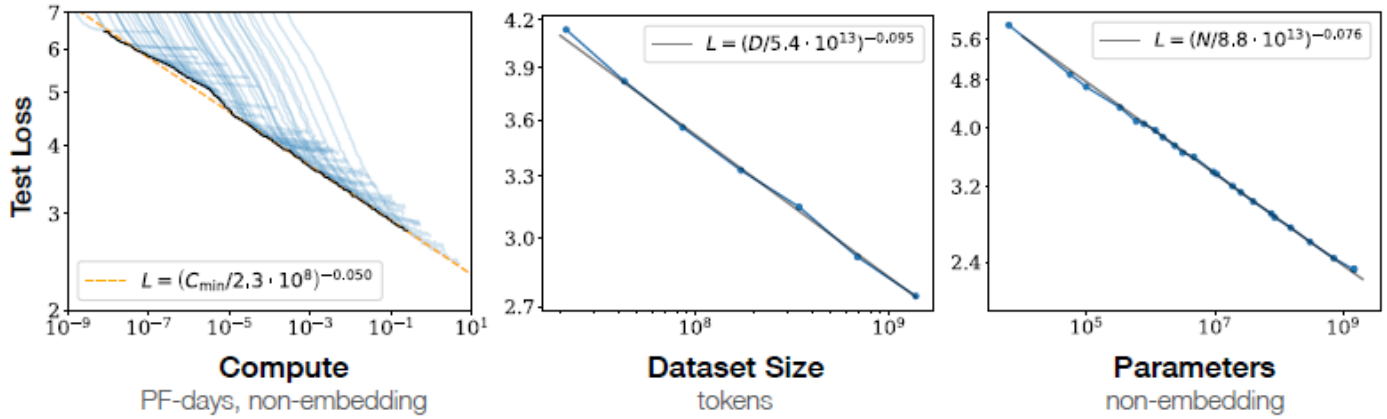

Transformerの凄さ（？）

経験則であるが、**スケーリング則**とは
- ネットワークモデルのパラメータ数
- データ数
- 計算量

が上がれば上がるほど、性能が向上する

金持ちの勝ちの法則…？

ChatGPTなど



# Transformer

学習データが膨大なら、Transformerでなんとかなるのでは?

$$\mathrm{Attention}(Q,K,V) = \mathrm{softmax}(\frac{QK^T}{\sqrt{d_k}})V$$

Q: Query
K: Key
V: Value

KeyとValueが「メモリー」的な働き

Queryは「問い合わせ」

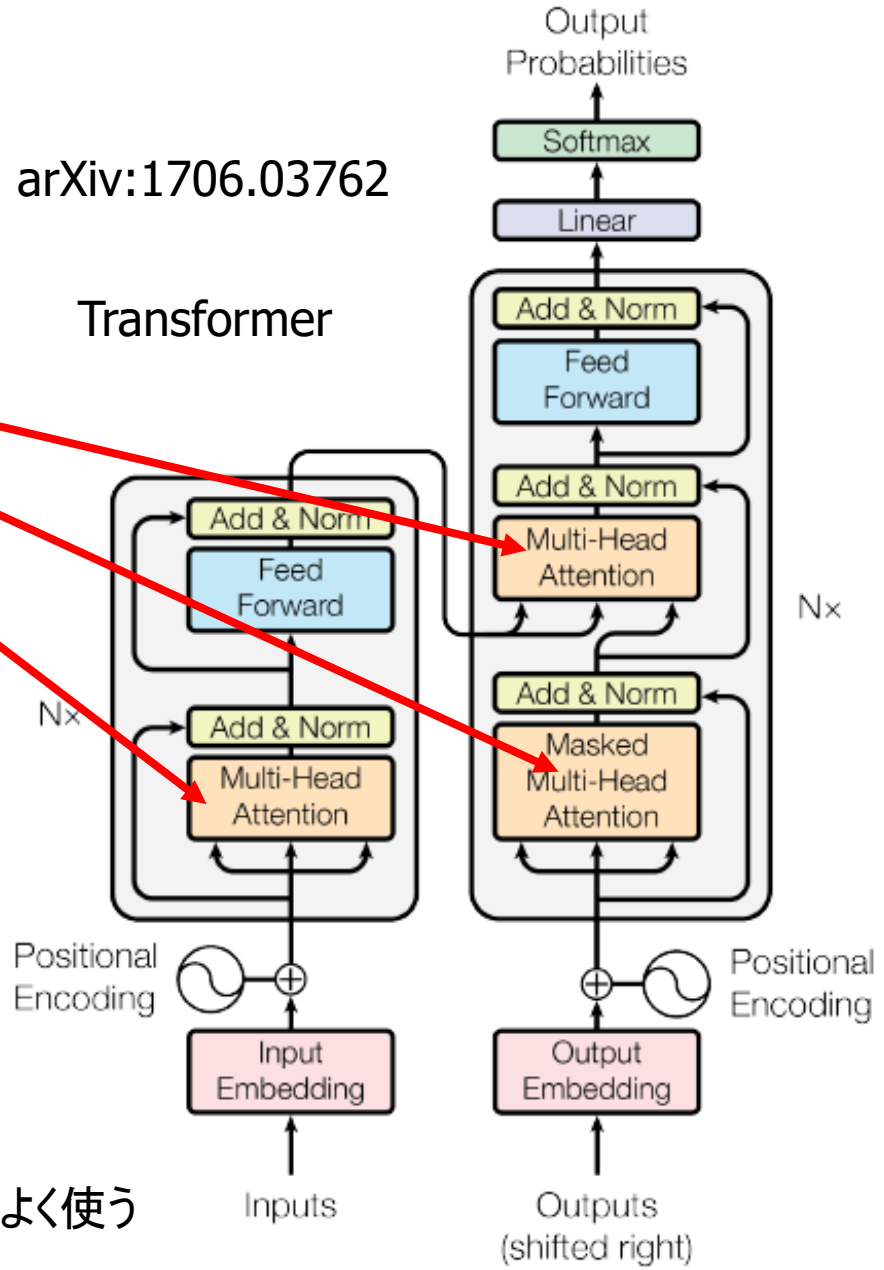
$QK^T$で「問い合わせ」と「メモリー」を
照らし合わせて、関係性、つまり、
「どこに注目すべきか」を抽出。(Attention weight)

Self-attentionの場合、Q=K=V

素粒子データでは
左側(エンコーダー)だけをよく使う

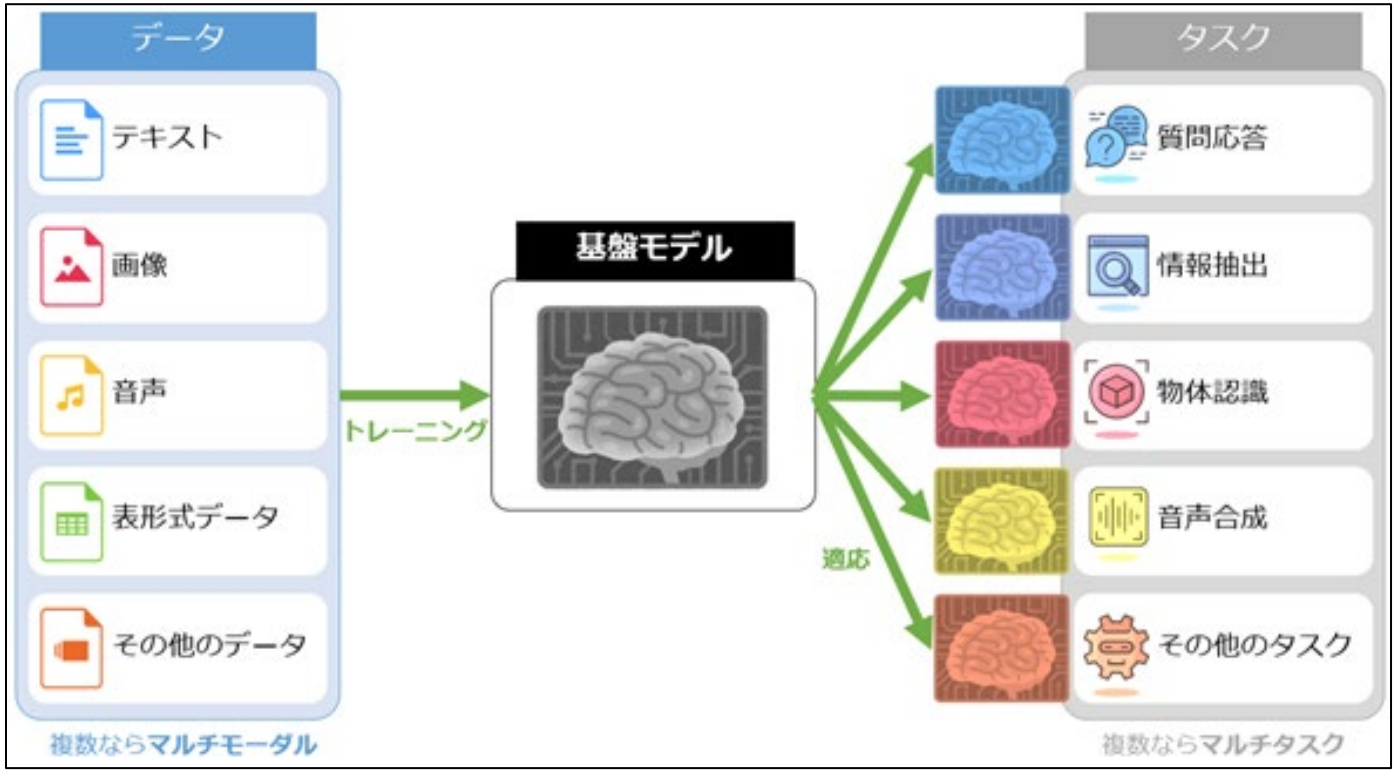
arXiv:1706.03762

Transformer



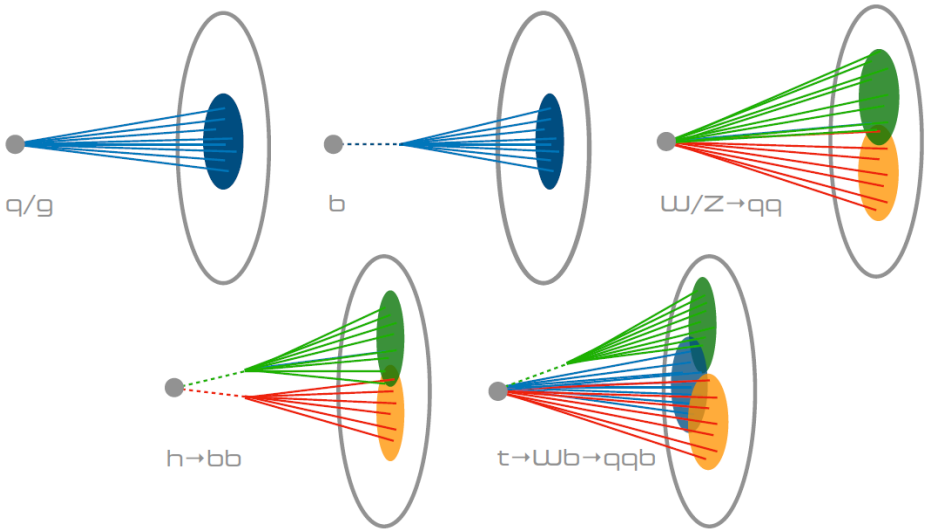
# 「基盤モデル」：ジェット汎用識別

「基盤モデル」




https://atmarkit.itmedia.co.jp/ait/articles/2302/27/news014.html

ジェットもいろいろ：q,g,b,W,Z,H,top etc.




ちょっとテーマが小さいと思うかもしれないが、
素粒子データでも「基盤モデル」使えそう

ざっくり言うと「基盤モデル」とは「汎用的で賢いモデル」のこと。
実際に使うには、それをベースに目的に合わせてファインチューニング（再トレーニング、転移学習）をする。

粒子識別等の性能改善（識別問題）

- b-tagging, c-tagging, tau-ID, q/g tagger
- W/Z, Top, Higgs tagger
- (Low $p_T$) electron, (low $p_T$) muon etc.
- 信号事象と背景事象の分類
- Particle flow (“粒子”と“測定データ”をマッチさせることでより正確に識別)

AIって：
- Artificial intelligence？
- Assistant intelligence？

シンギュラリティってあるの？

シミュレーション

- 検出器シミュレータ (Geant4の代替)
- 物理現象のシミュレータ：ジェット生成

“ChatGPT 3.5”の出現 (2022年11月)

基盤モデル

LLM (Large Language Model)

ビッグデータから新粒子を発見できるのか？

- 異常検知

データ解析の基盤モデルのPoC

転移学習は使える？

ATLAS実験のデータ量は膨大

科学するAI・オートメーション化（自動運転） etc.

- 説明責任（Explainable AI），解釈可能（Interpretability）
- 物理法則、対称性などの抽出
- 素粒子実験の一連の流れを（半）自動化するようなシステム：人と人の連携 → AIとAIの連携
  （→微分可能なプログラムを作る）

素粒子物理で人工知能（データサイエンス）を研究しましょう！

# まとめ

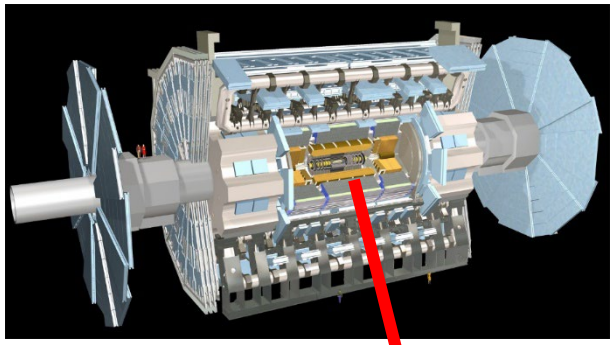
- 素粒子実験
  - BigData → 人工知能の応用（情報理工的な理論寄りでなく実践的なツール）

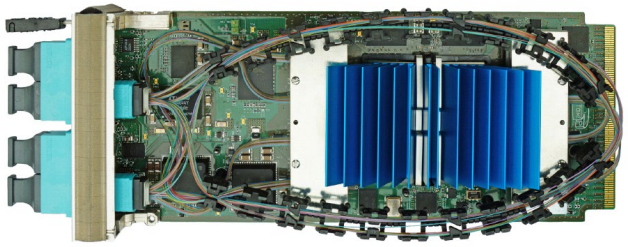
- 既存のツールを**機械学習を取り入れたツール**に置き換える
  - 個人的な感覚的では、5年ぐらい前まではかなり懐疑的（特にATLAS実験グループでは）
  - 今は積極的
    - **圧倒的な改善がときどきある（少々の改善は確実）**
    - 実験データの理解と十分に使えるだけの研究実績・経験
    - 競争相手の存在（ちょっと不甲斐ないですが）
  - 素粒子実験データ
    - グラフネットワークやトランスフォーマは相性がいい

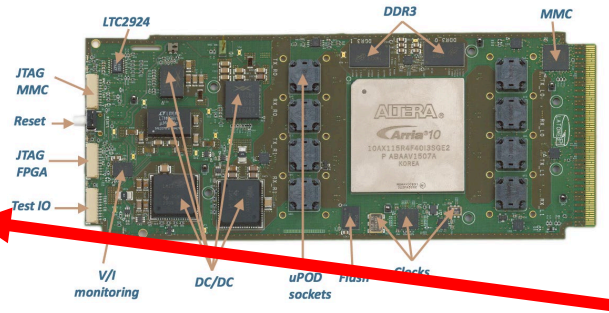
- 素粒子実験のデータ解析用の
  **基盤モデル（Foundation Model）**の可能性

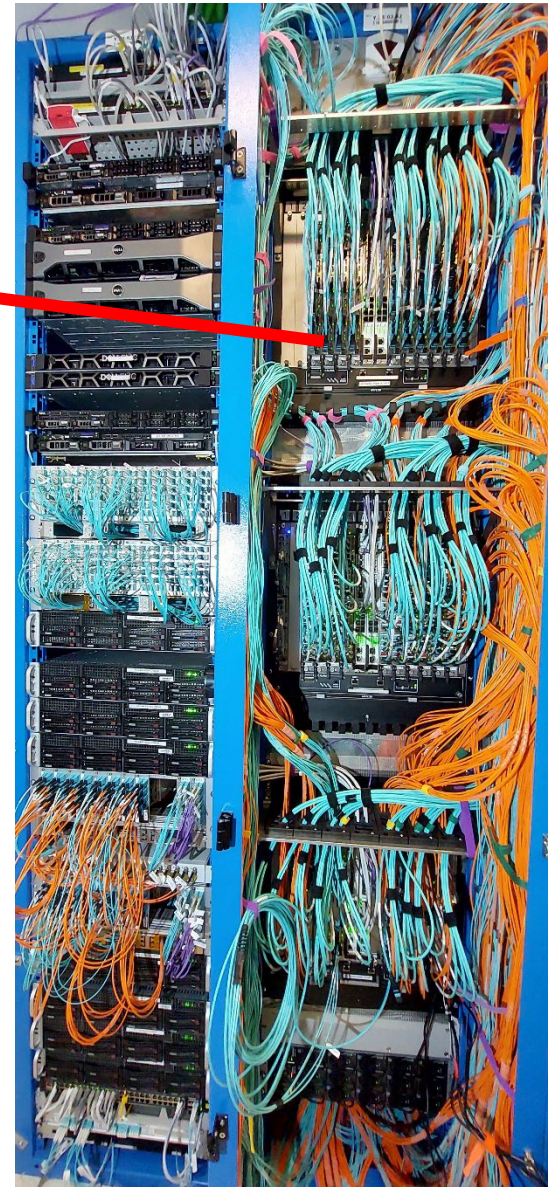

素粒子屋さんとしては **「素粒子標準模型」の牙城を崩す！**

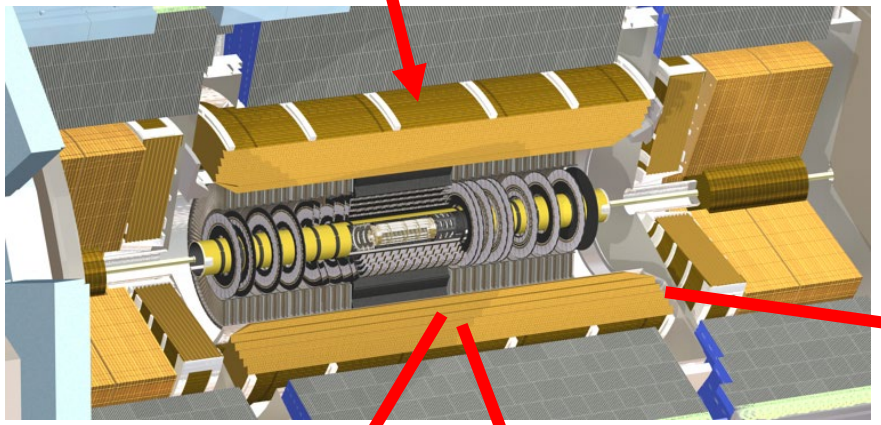
（もう一枚、宣伝）

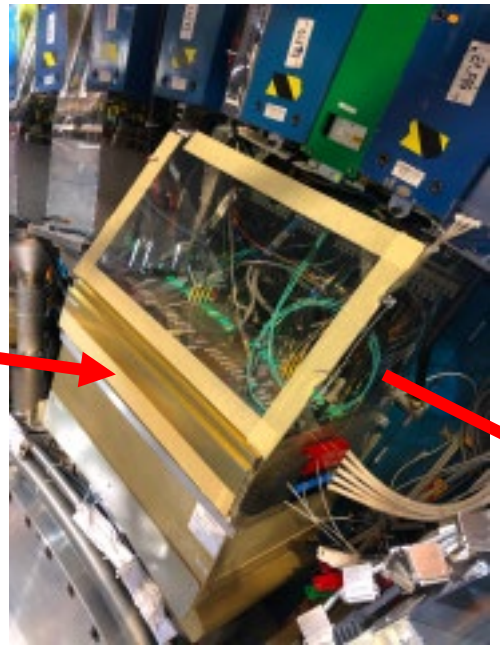


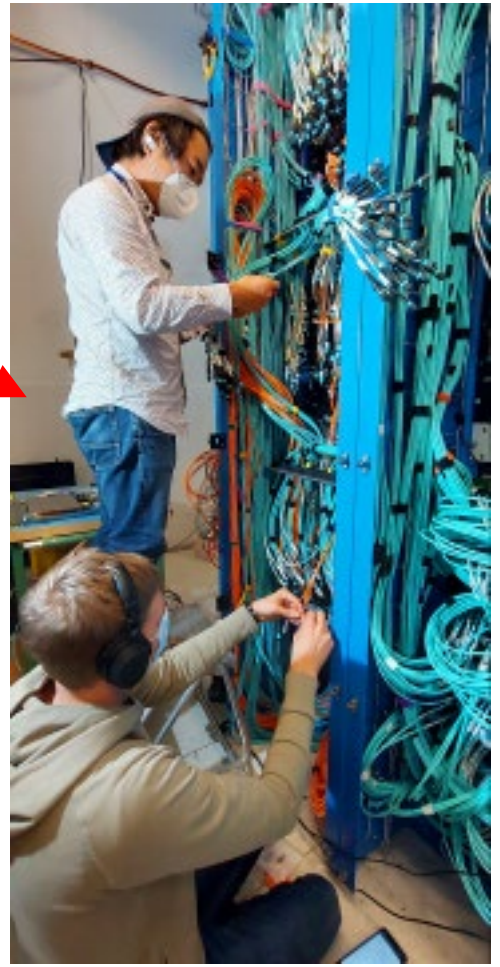


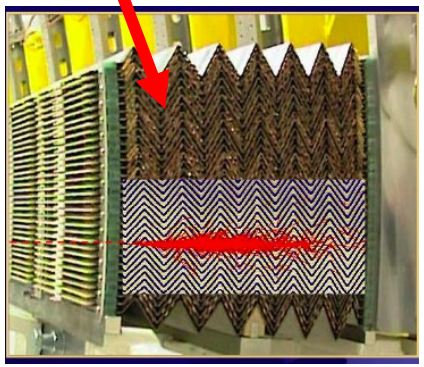

LTC2924
DDR3
MMC
JTAG MMC
Reset
JTAG FPGA
Test IO
V/I monitoring
DC/DC
uPOD sockets











カロメータ関連の研究