

Детектирование аномалий нейронными сетями при поиске новой физики на коллайдерах

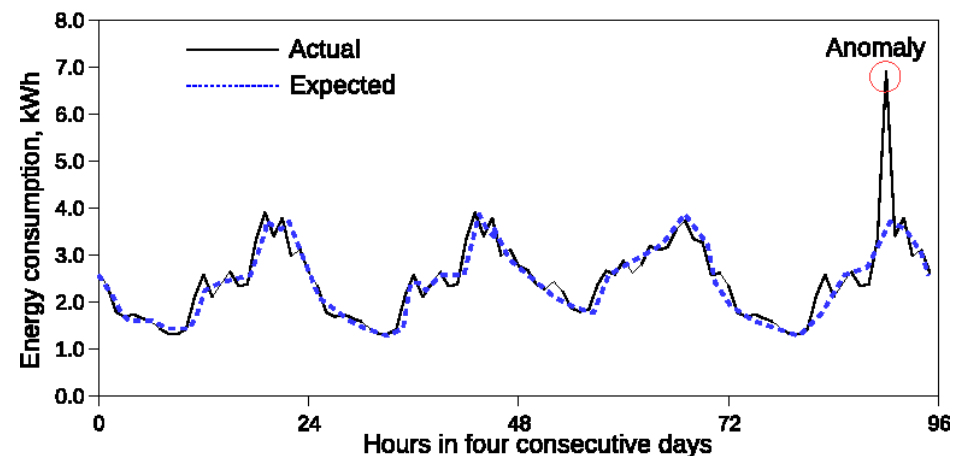
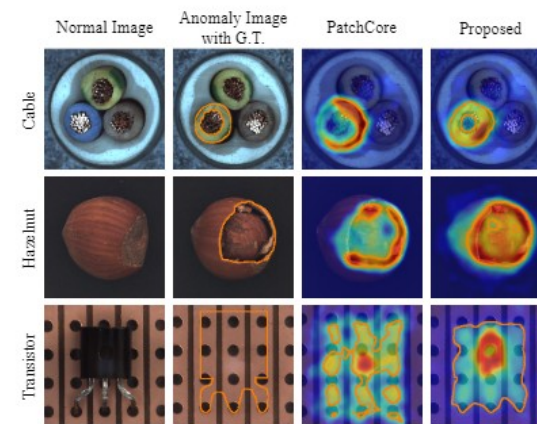
П.В. Волков, Л.В. Дудко, А.Д. Заборенко, М.А. Перфилов

НИИЯФ МГУ им. М.В. Ломоносова

Исследования выполняются в рамках научной программы
Национального центра физики и математики, направление № 5.2
«Физика частиц и космология»

Детектирование аномалий

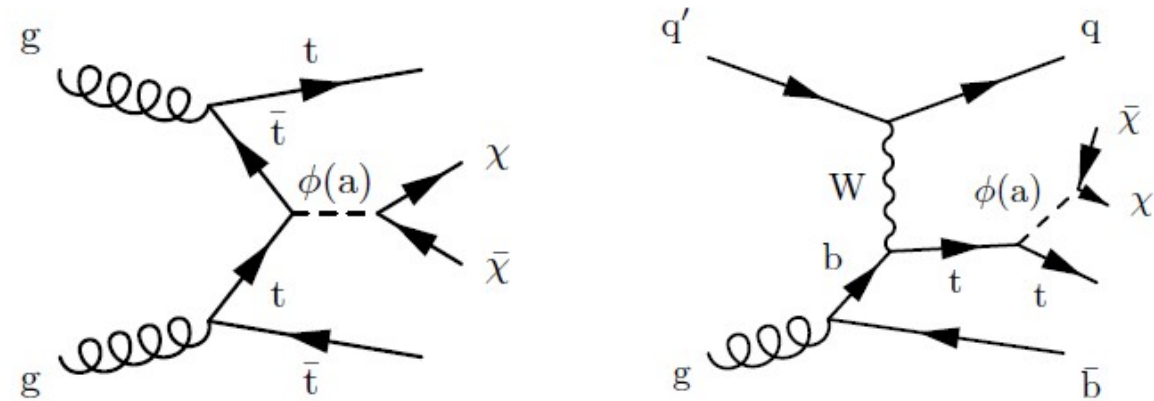
- Детектирование аномалий – процесс поиска отклонений от данных, считающихся «нормальными» без знаний о конкретной природе таких отклонений.
- Задача трудная: имея знания только об одном классе, нужно понять, что считать «отличием» а что – вариацией нормального класса. Нужно «провести» бинарную классификацию без разметки второго класса.



Детектирование аномалий
в индустрии

Детектирование аномалий на коллайдерах

- Задача поиска аномалий в НЕР: произвести **модельно-независимый** отбор событий.*
- Алгоритм поиска аномалий обучается на событиях Стандартной модели (СМ) и детектирует значимые отклонения от СМ в данных.
- Эффективность алгоритмов была оценена в задаче разделения событий Стандартной Модели от событий ассоциированного рождения топ-кварка с медиатором Темной Материи (ТМ).



Фейнмановские диаграммы характерных событий с присутствием медиатора Темной Материи.

* Более детально классический подход описан в Е. Е. Abasov, М. I. Belobrova, P. V. Volkov, G. A. Vorotnikov, L. V. Dudko, A. D. Zaborenko, M. A. Perfilov и E. S. Sivakova. «Methodology for the Application of Deep Neural Networks in Searches for New Physics at Colliders and Statistical Interpretation of Expected Results». В: Phys. Atom. Nucl.85.6 (2022), с. 708—720. doi: 10.1134/S1063778822060023.

Упрощенные модели ТМ с участием топ-кварка

- Одними из наиболее простых моделей темной материи являются так называемые «упрощенные модели», в которых предполагается, что частицы ТМ взаимодействуют с частицами СМ, обмениваясь одной или несколькими частицами, называемыми "медиаторами", которые обладают слабой связью с частицами СМ.

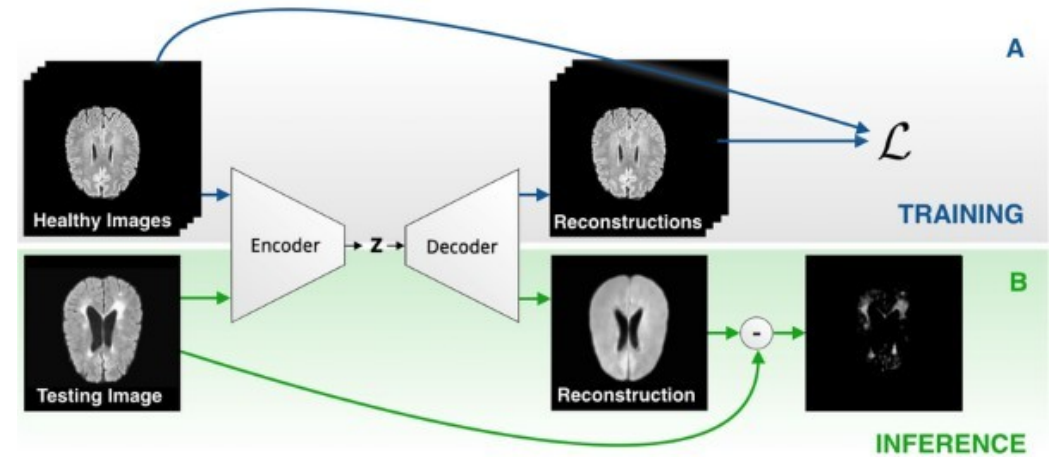
$$L_{\Phi} = g_{\chi} \Phi \bar{\chi} \chi + \frac{g_v \Phi}{\sqrt{2}} \sum_f (y_f \bar{f} f)$$

$$L_A = i g_{\chi} A \bar{\chi} \gamma^5 \chi + i \frac{g_v A}{\sqrt{2}} \sum_f (y_f \bar{f} \gamma^5 f)$$

- Это приводит к возможности рождения частиц СМ вместе с частицами ТМ и, соответственно, к наблюдению характерной "потерянной энергии" в таких процессах, поскольку частицы ТМ не детектируются напрямую. Совместное рождение частиц СМ и ТМ с последующим обнаружением потерянной энергии – основной способ обнаружить данные процессы на коллайдерах.

Классический подход: автоэнкодер

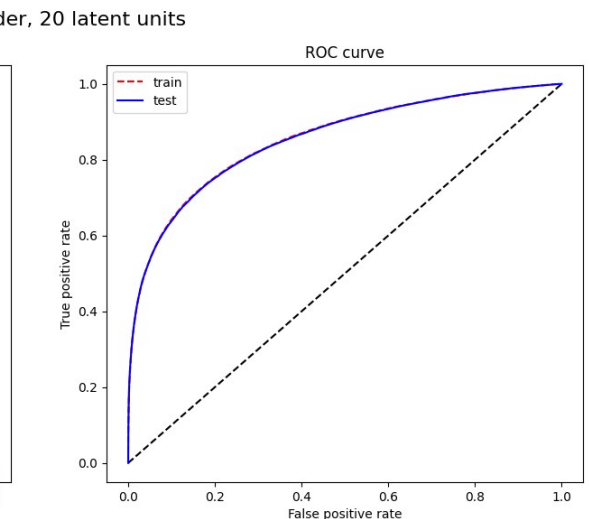
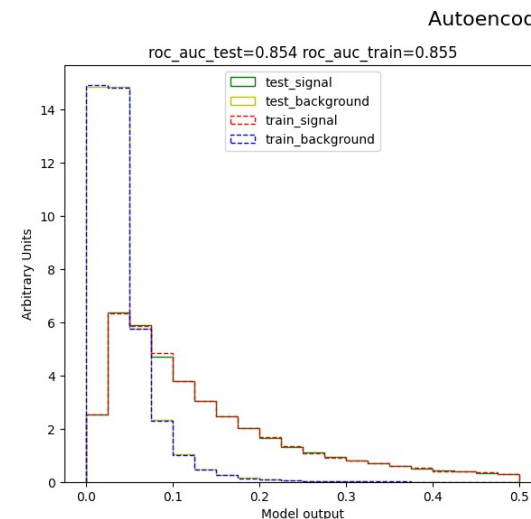
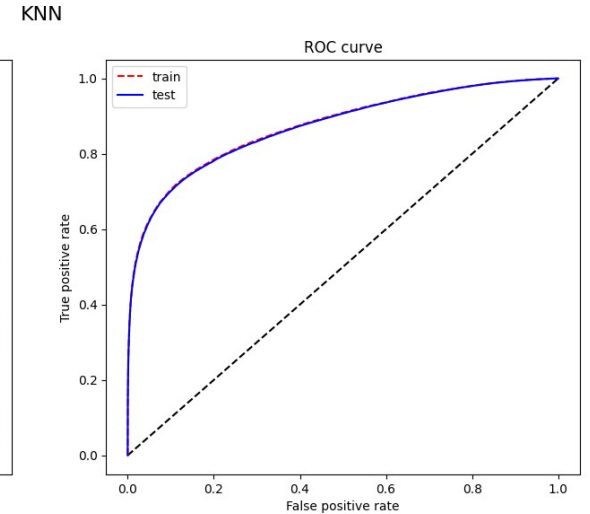
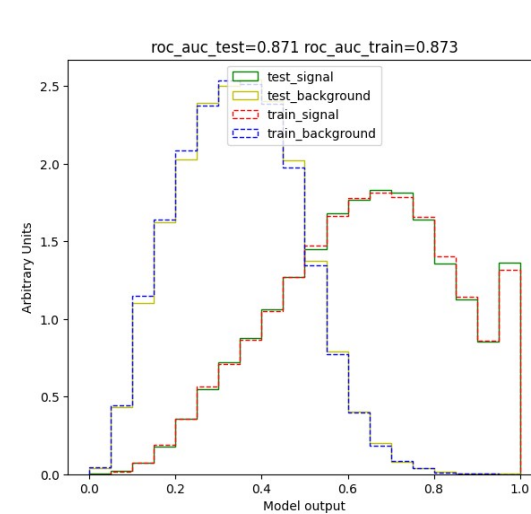
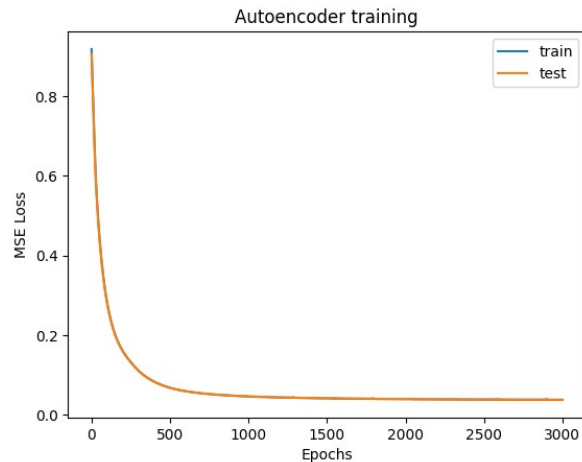
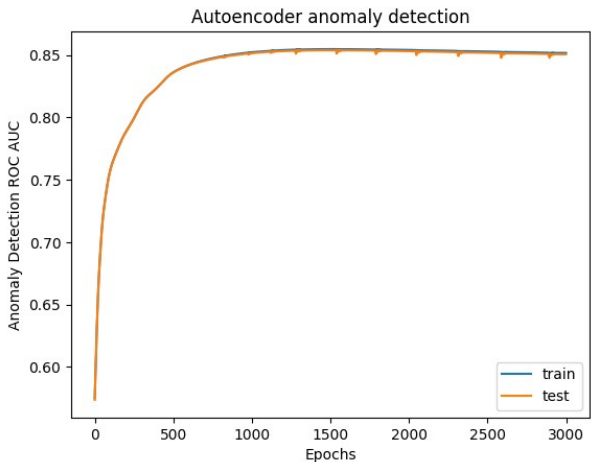
- Автоэнкодер – это нейронная сеть с «бутылочным горлышком»: слоем с числом нейронов меньшим, чем размерность входных данных.
- Задача такой нейронной сети – максимально точно реконструировать входные данные, пропустив через «бутылочное горлышко» только самые важные компоненты.



Для детектирования аномалий используется ошибка реконструкции: сеть будет хуже реконструировать те данные, которые она не «видела» при обучении.

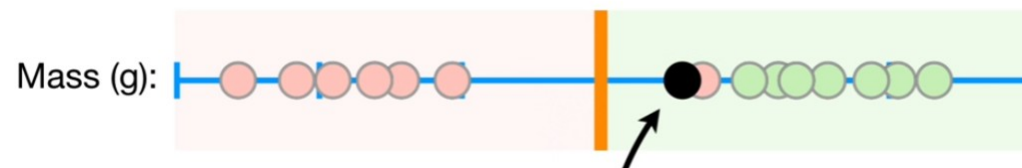
АВТОЭНКОДЕР В НЕР

- Для данных физики высоких энергий автоэнкодер показал себя неэффективным: простой классификатор по принципу ближайших соседей дает лучшие результаты.

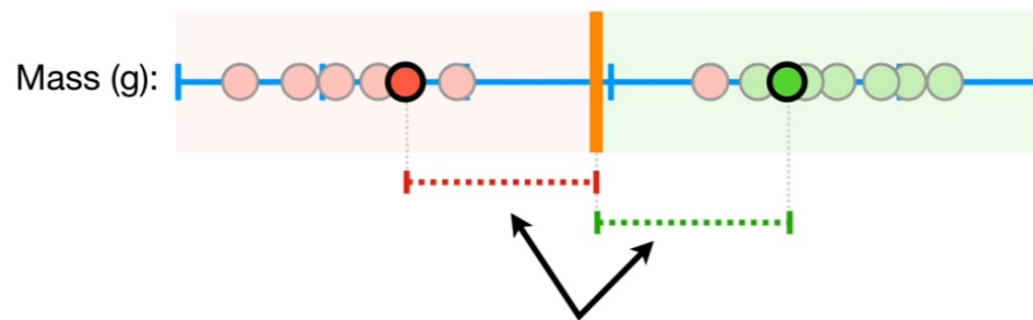


Метод Опорных Векторов (SVM)

- Метод опорных векторов:
 - Отображает данные в пространство более высокой размерности, используя специальную функцию – «ядро»
 - Разделяет классы с «правом на ошибку»: позволяет работать с шумными данными, некоторая часть точек может попасть в противоположный класс
 - Использует кросс-валидацию для поиска оптимальной классификации

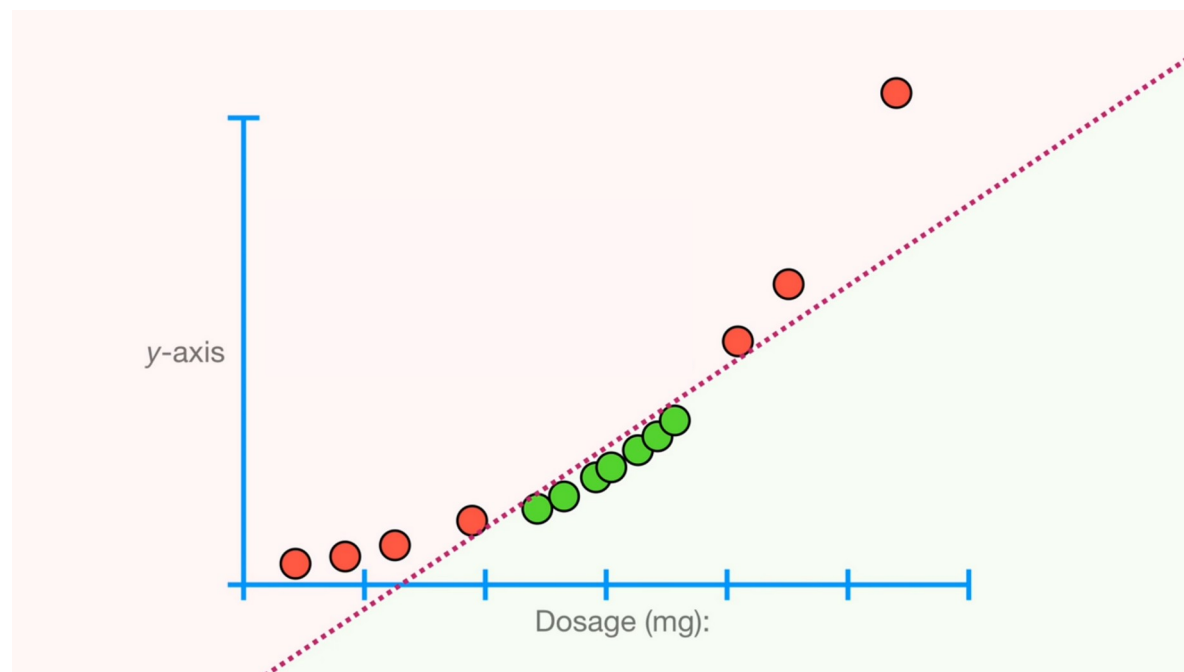
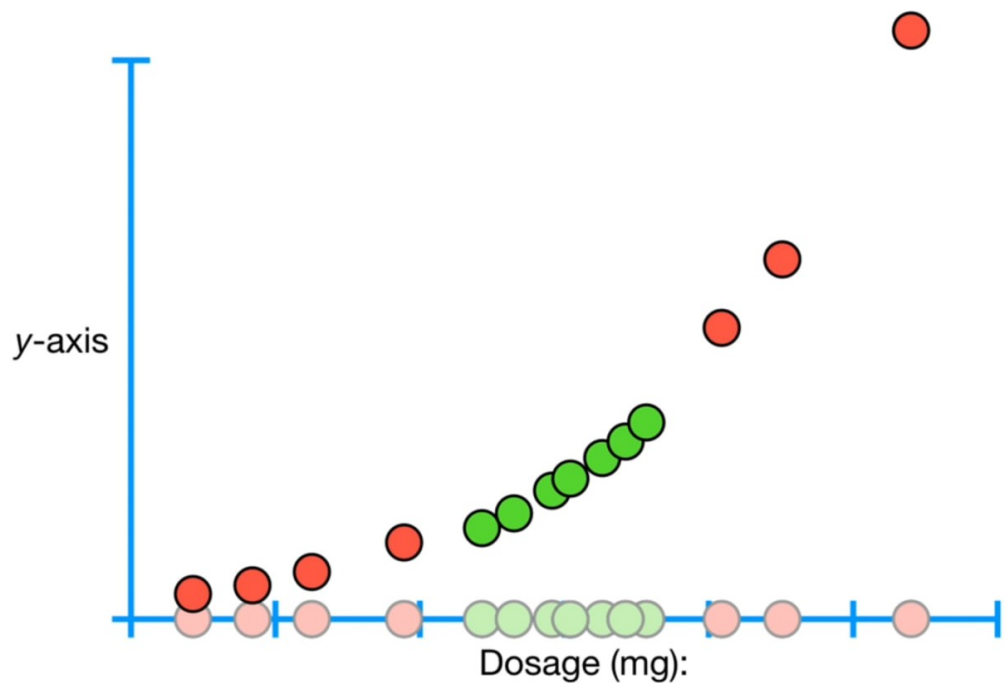


Установление порога с «правом на ошибку» с помощью кросс-валидации



Опорные векторы

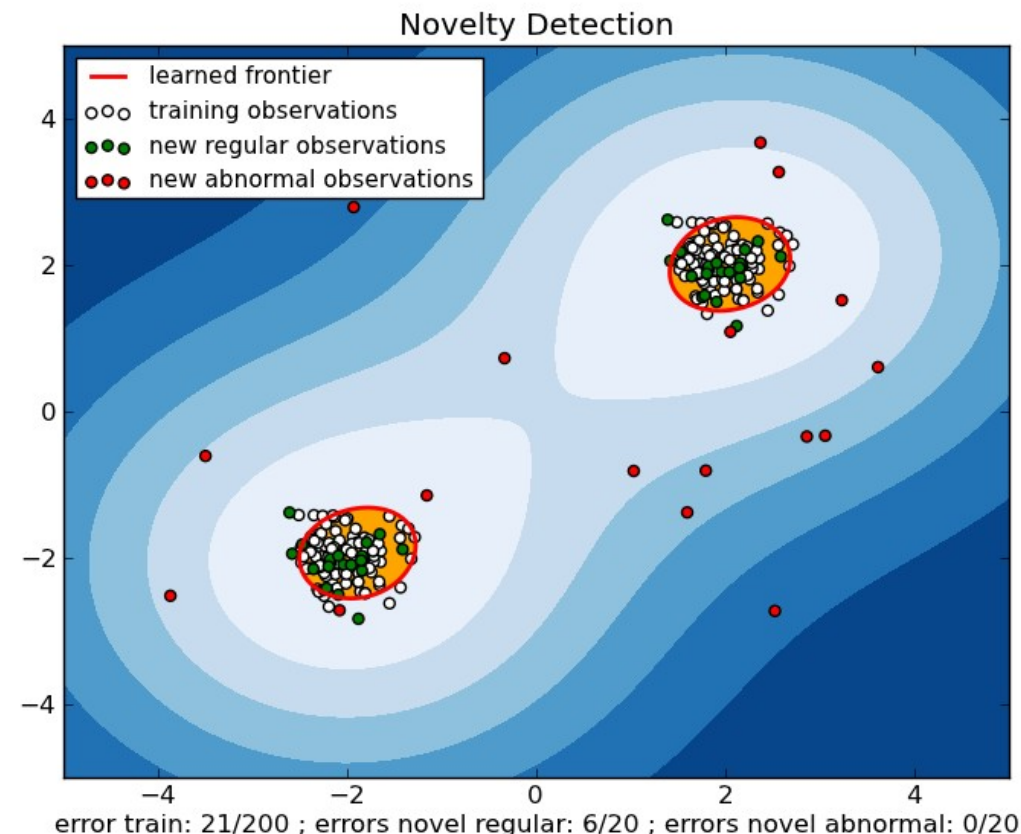
Ядро Метода Опорных Векторов



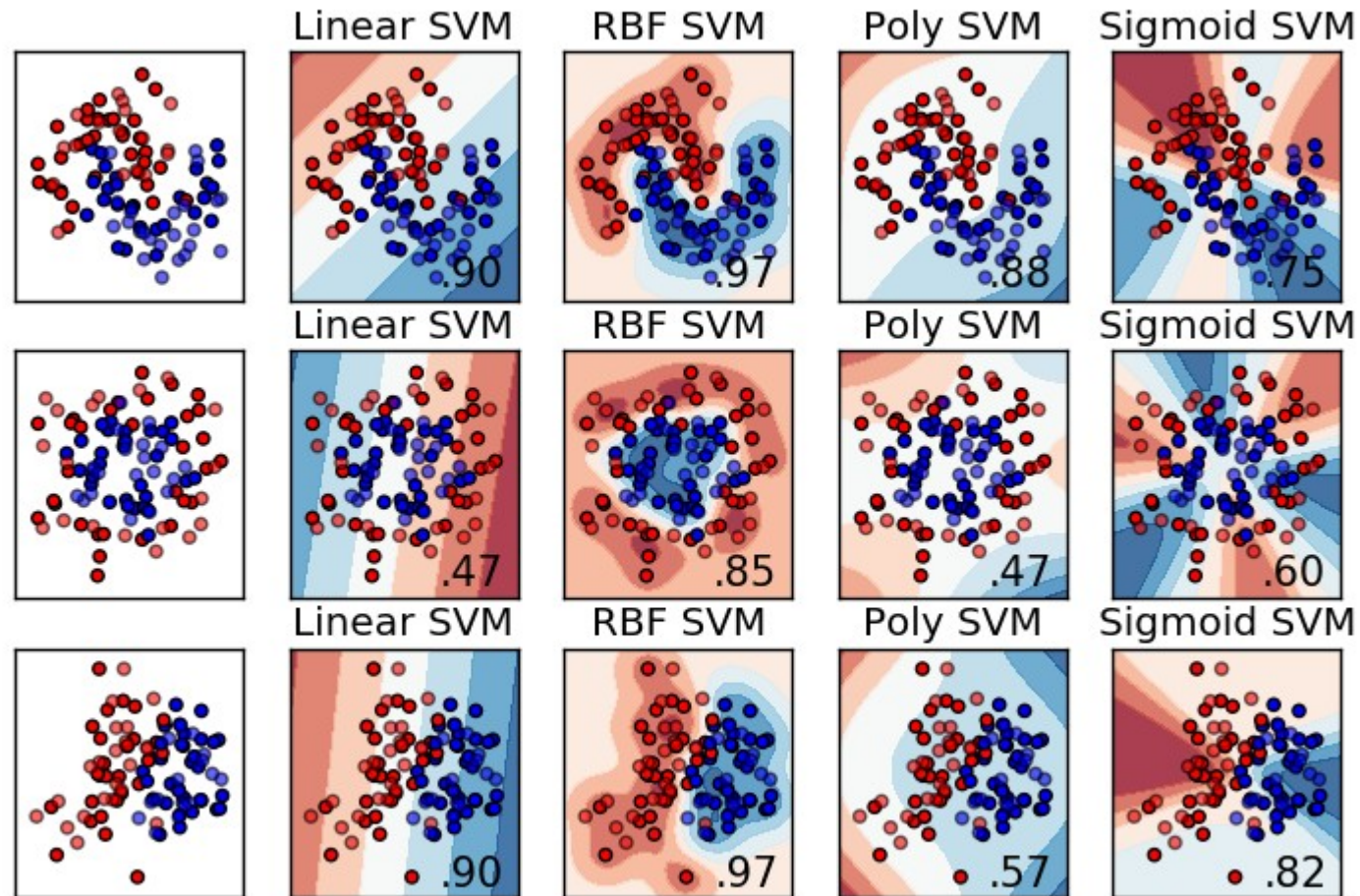
Метод Опорных Векторов для одного класса

- SVM может создавать гиперплоскость вокруг данных, позволяя выделять аномалии как выход за эту гиперплоскость.
- С правильными гиперпараметрами может быть очень точен.
- Минус – время растет квадратично/кубично с числом примеров.

Support Vector Machines are powerful tools, but their compute and storage requirements increase rapidly with the number of training vectors. The core of an SVM is a quadratic programming problem (QP), separating support vectors from the rest of the training data. The QP solver used by the `libsvm`-based implementation scales between $O(n_{features} \times n_{samples}^2)$ and $O(n_{features} \times n_{samples}^3)$ depending on how efficiently the `libsvm` cache is used in practice (dataset dependent). If the data is very sparse $n_{features}$ should be replaced by the average number of non-zero features in a sample vector.

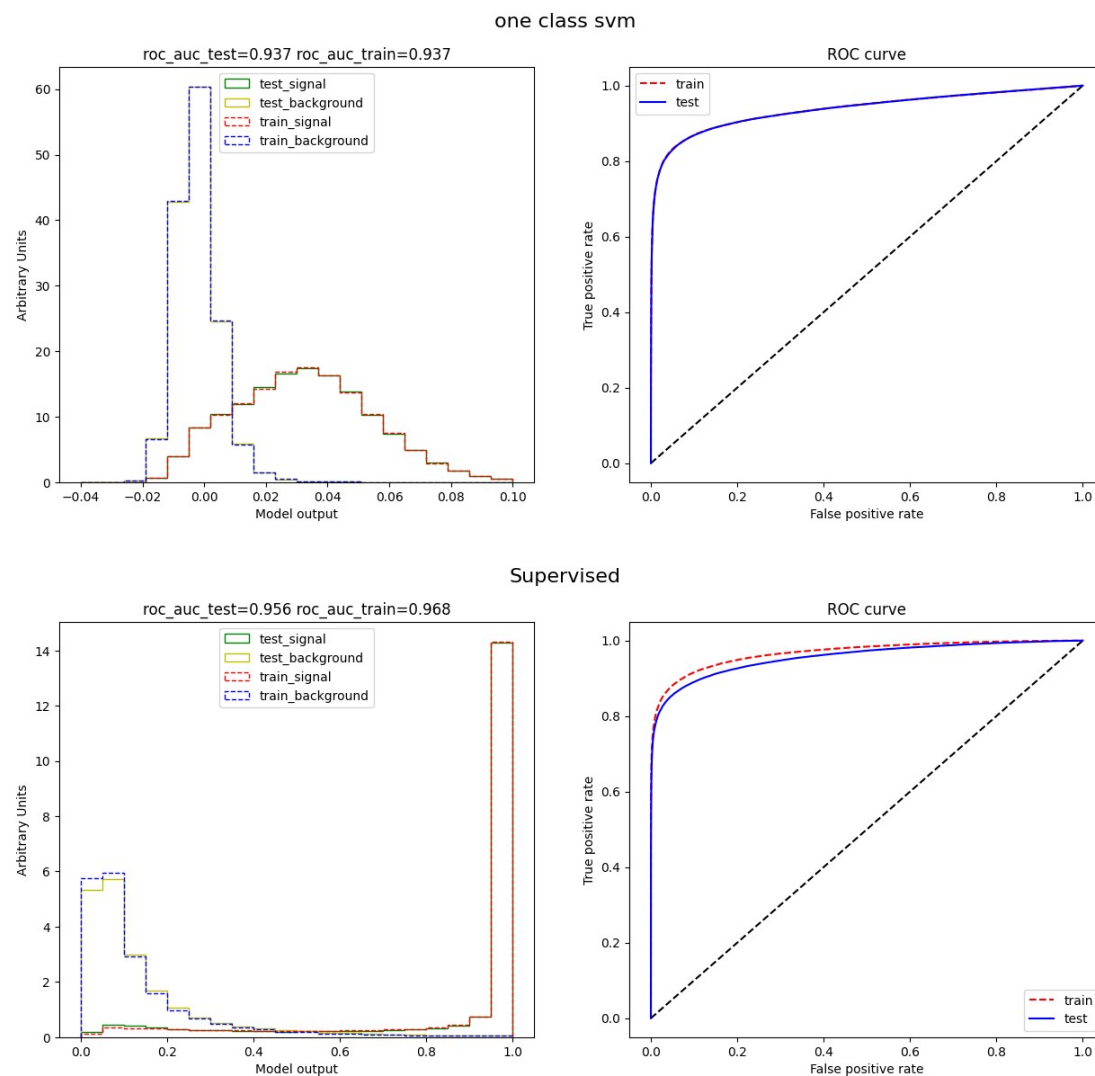


Эффект ядер метода опорных векторов на поверхность решений



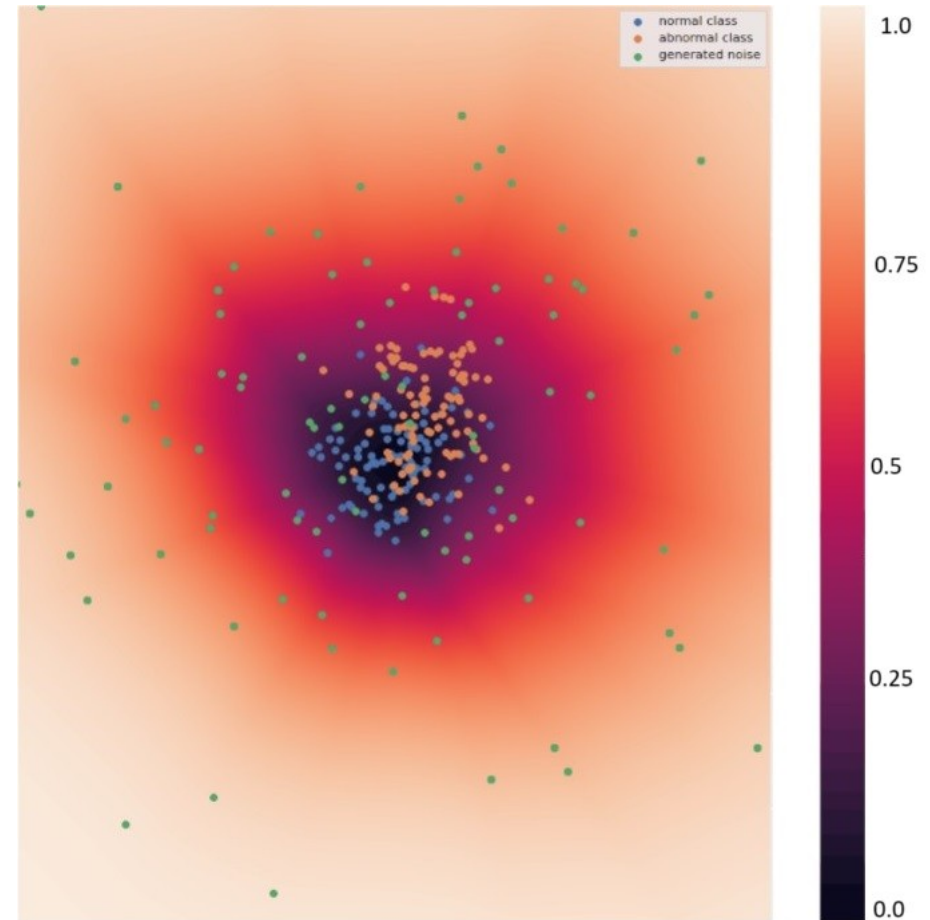
SVM: данные НЕР

- С правильными параметрами позволяет приблизиться к обучению с учителем.
- Низкая скорость предсказаний ограничивает использование в физике, где обрабатываются миллионы событий.



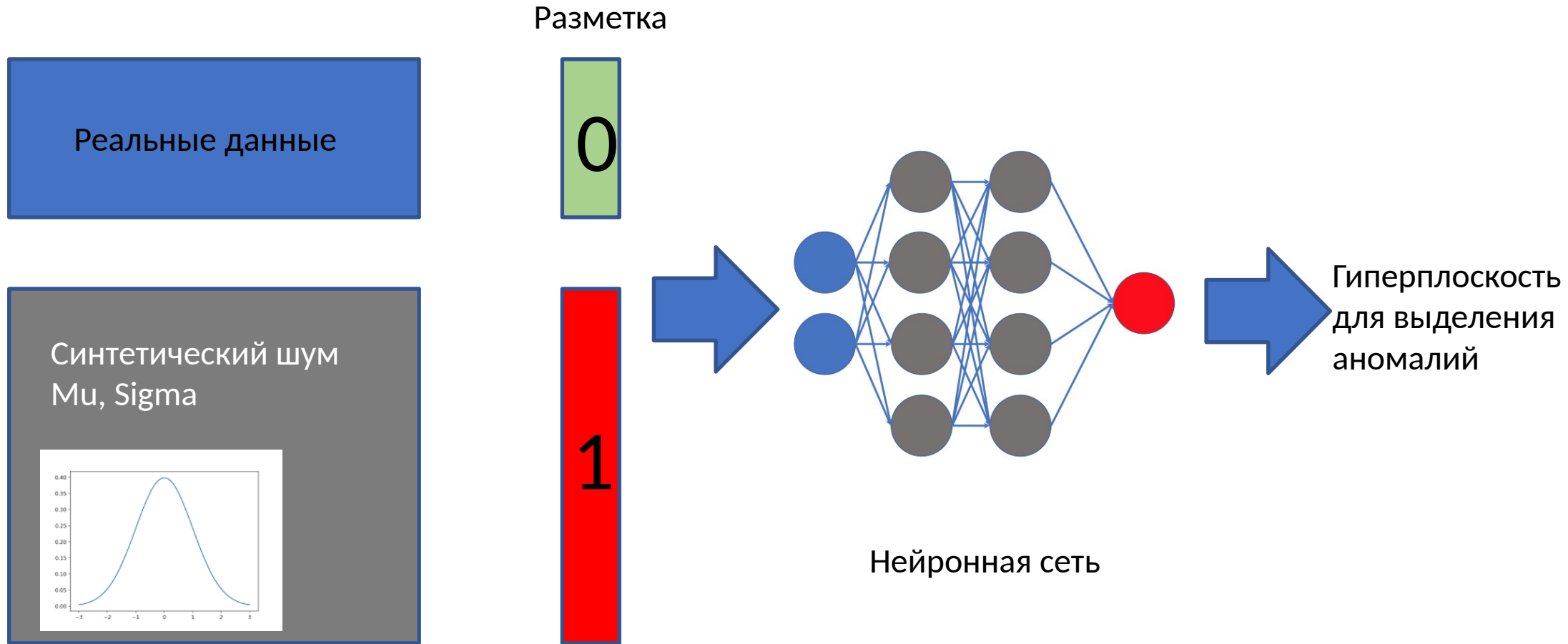
Нейронная сеть для одного класса

- Основная концепция:
 - генерировать синтетический шум* каждую эпоху
 - обучать сеть отделять шум от реальных данных
 - использовать выходные данные сети в качестве оценки аномалий
- Во время обучения сеть строит поверхность, окружающую данные, как алгоритм One Class SVM. (В задаче ТМ ранговая корреляция 0.98)



*Подход похож на метод, использованный в P. Oza and V. M. Patel, "One-Class Convolutional Neural Network," in *IEEE Signal Processing Letters*, vol. 26, no. 2, pp. 277-281, Feb. 2019, doi: 10.1109/LSP.2018.2889273.

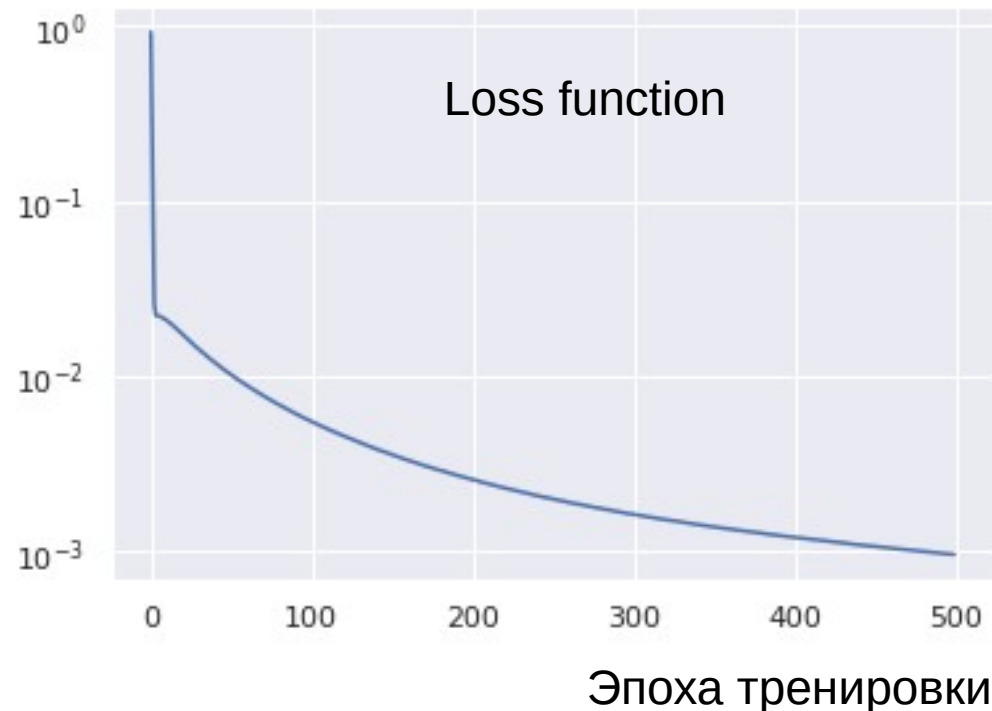
Нейронная сеть для одного класса*: схема



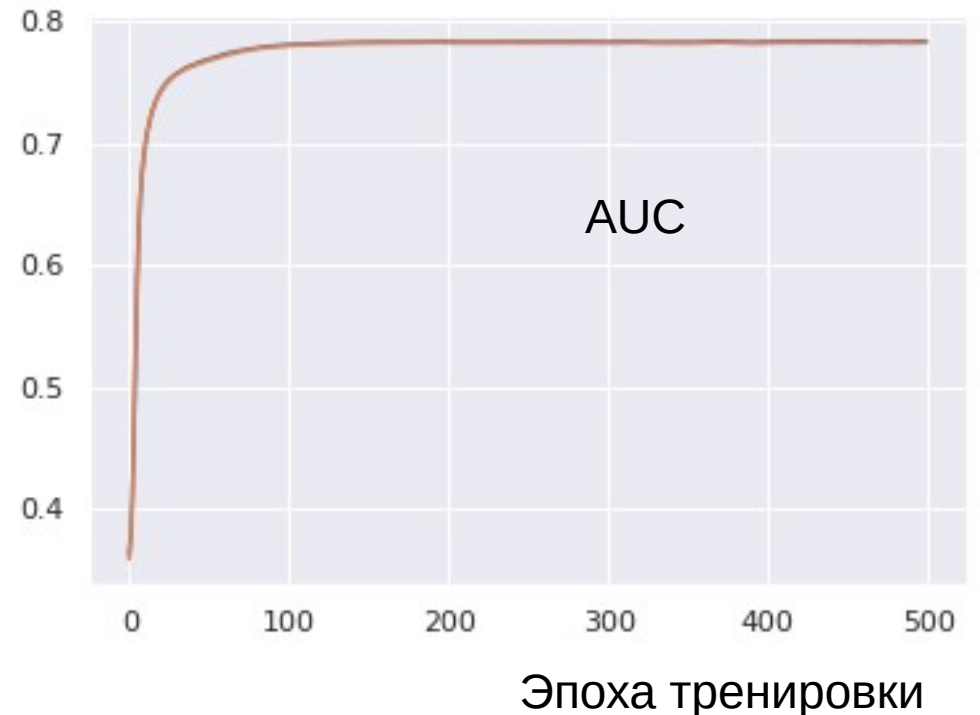
Генерируется новый шум каждую эпоху

*ISSN 0027-1349, Moscow University Physics Bulletin, 2023, Vol. 78, No. 7, pp. 80-84. DOI: 10.3103/S0027134923070329

Нейронная сеть для одного класса: обучение



Функция ошибки для разделения нормального класса от шума*

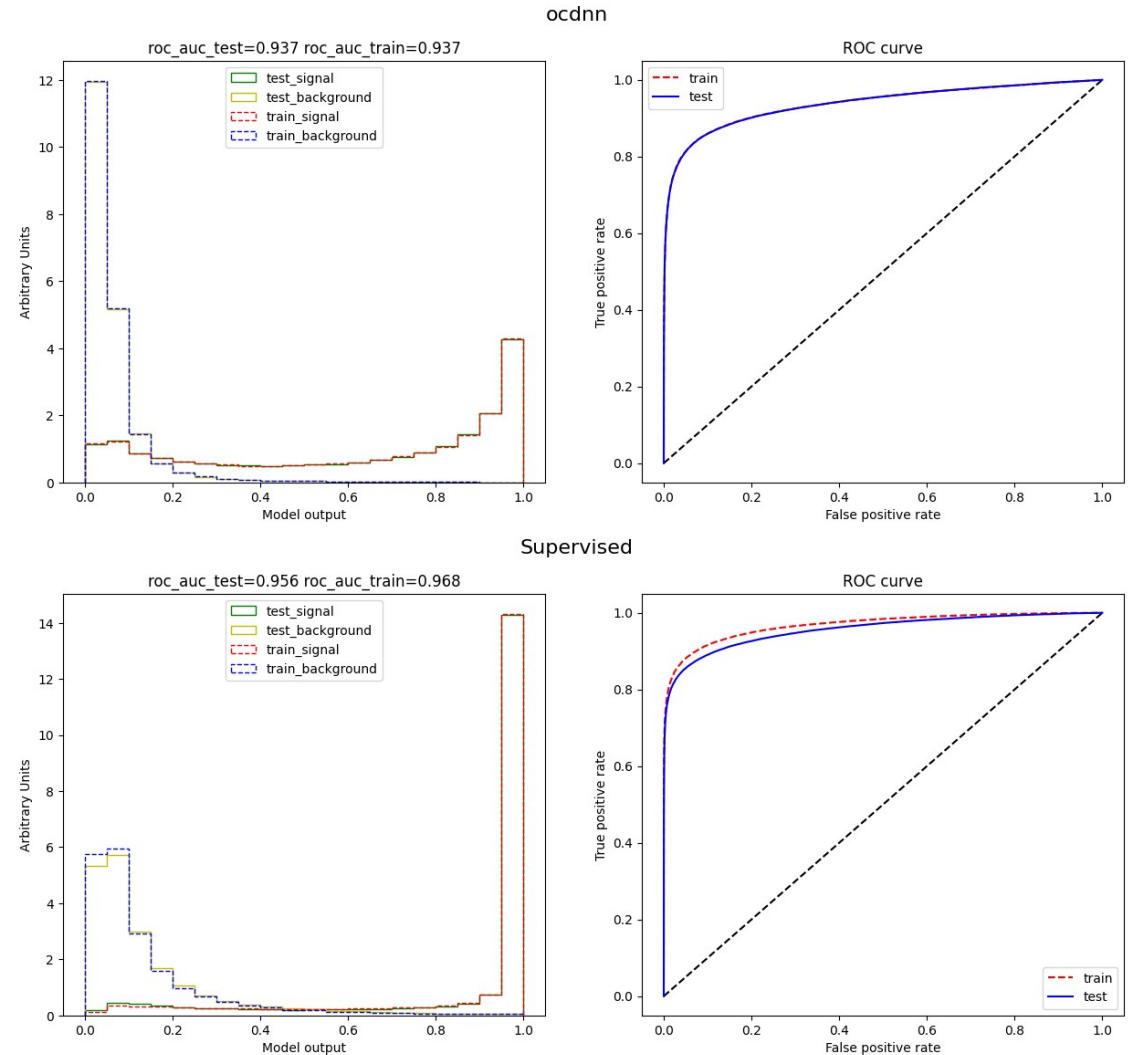


Способность сети выделять аномалии

*Unleashing the Potential of Unsupervised Deep Outlier Detection through Automated Training Stopping: Huang et al

Нейронная сеть для одного класса: результаты

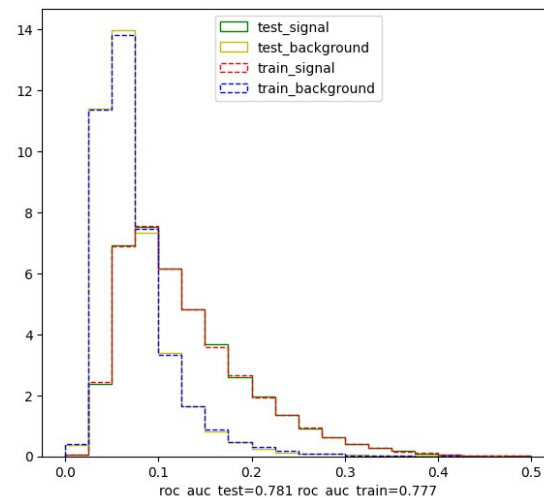
- Нейронная сеть может обучаться и делать предсказания гораздо быстрее, чем SVM (Скорость предсказаний выше в 14,000 раз)
- В более сложных задачах нейронная сеть выучивает более «тонкие» корреляции в данных, позволяя повысить точность детектирования аномалий.



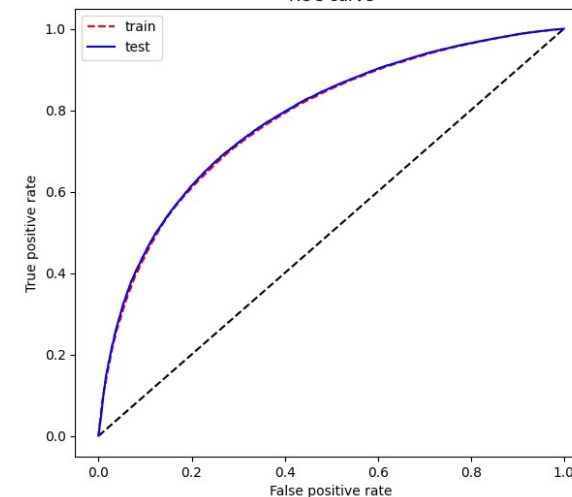
One Class SVM vs One Class DNN

- На более сложных датасетах многослойная структура нейронной сети позволяет ей выделить более сложные корреляции в данных, чем это может сделать SVM.
- Представлено сравнение алгоритмов в задаче выделения т-канального рождения топ-кварка из SM фона.

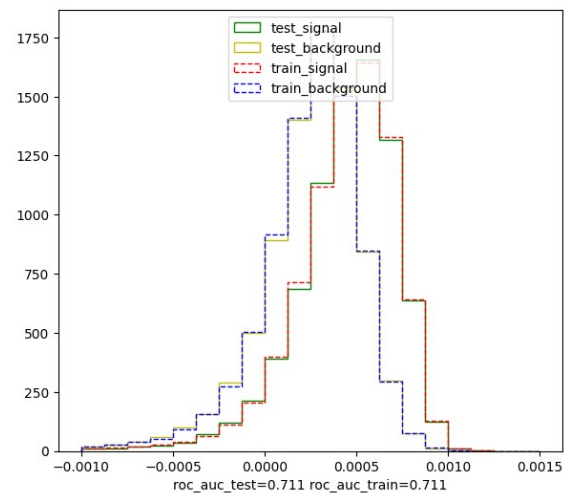
ocdnn, t-channel



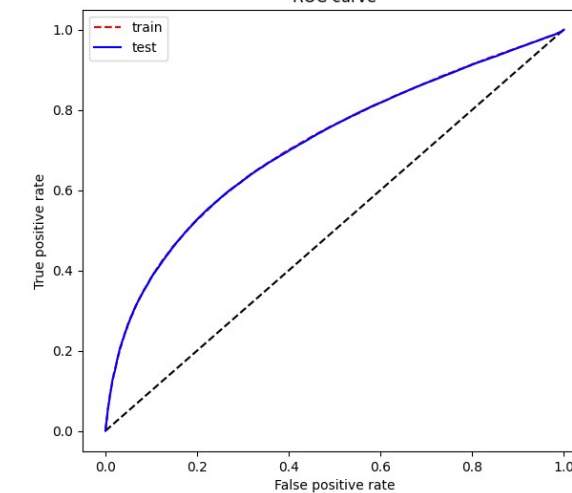
ROC curve



one class svm, t-channel

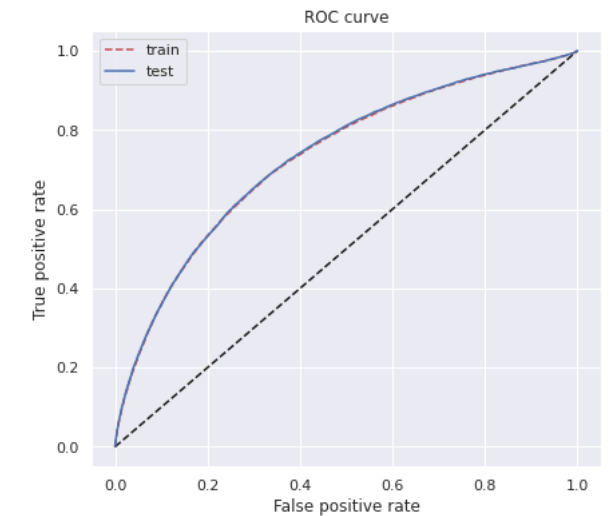
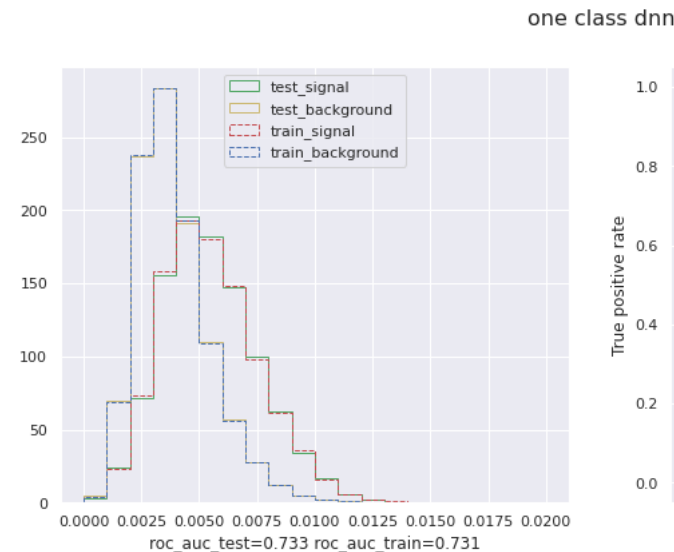
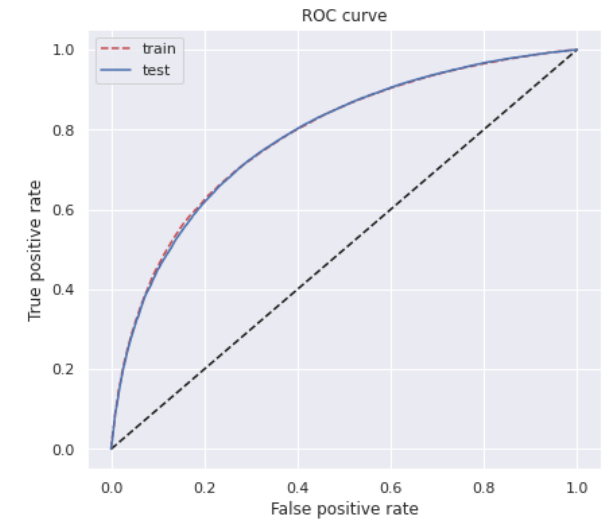
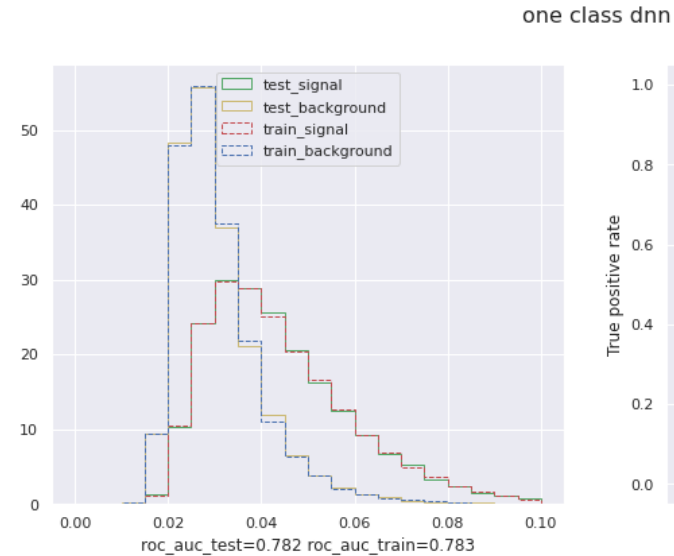


ROC curve



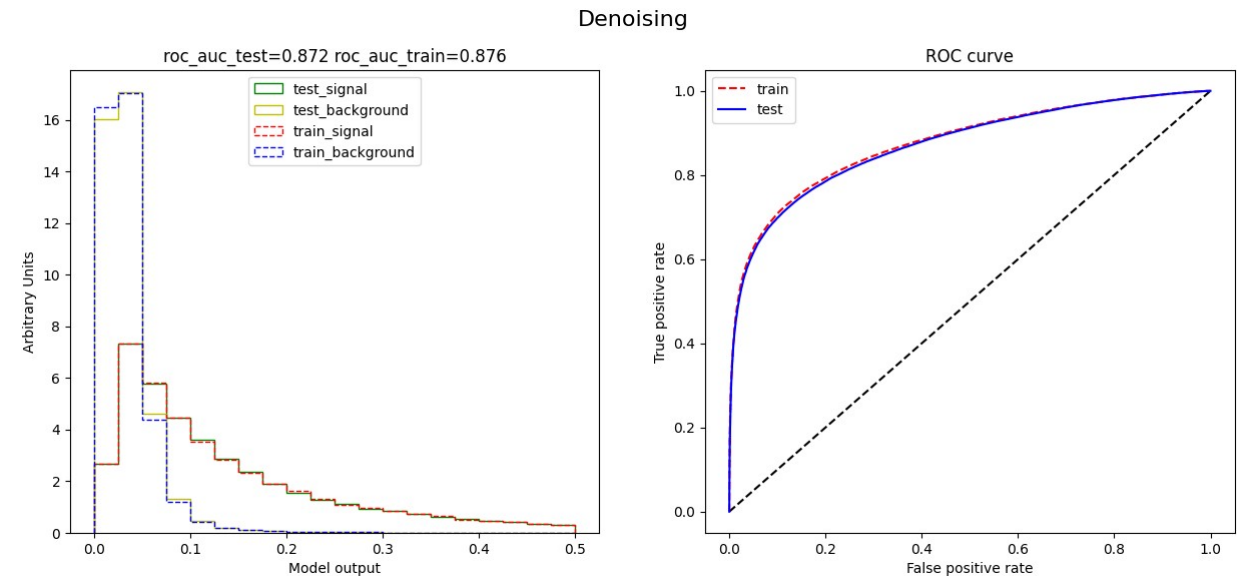
Нейронная сеть для одного класса: реальные данные

- Алгоритм был протестирован на нескольких типичных датасетах из НЕР и показал устойчивость и хорошую классификационную способность в режиме поиска аномалий.
- Верх – выделение т-канального рождения топ-кварка из СМ фона.
- Низ – выделение нейтральных токов из СМ фона.



Метод детектирования аномалий с помощью удаления шума

- Метод основан на решении задачи удаления шума (денойзинга).
- К входным данным добавляется шум с небольшим стандартным отклонением (порядка 0.01 – 0.001). Модель реконструирует исходные переменные по зашумленным. Средняя ошибка реконструкции переменных принимается за метрику аномальности.

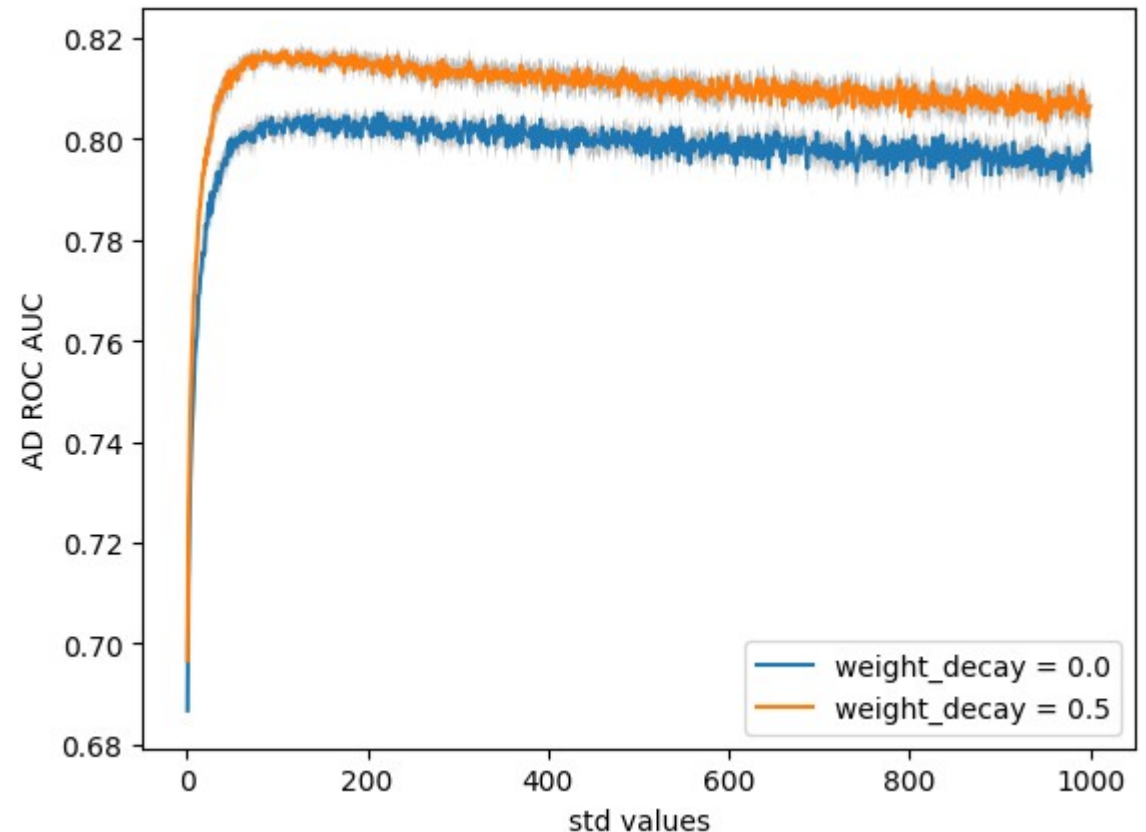


Модель работает на уровне KNN, лучше автоэнкодера, но хуже, чем OCDNN

Нейронная сеть для одного класса: параметры* шума

- Несмотря на то, что аномальный класс распределен вокруг нуля с $\text{std}=1$ (данные стандартизируются), оптимальные характеристики шума для алгоритма – это относительно большое стандартное отклонение.
- Это свидетельствует о том, что алгоритм действительно создает гиперповерхность вокруг нормального класса, а не шум удачным образом ложится на аномальный класс.

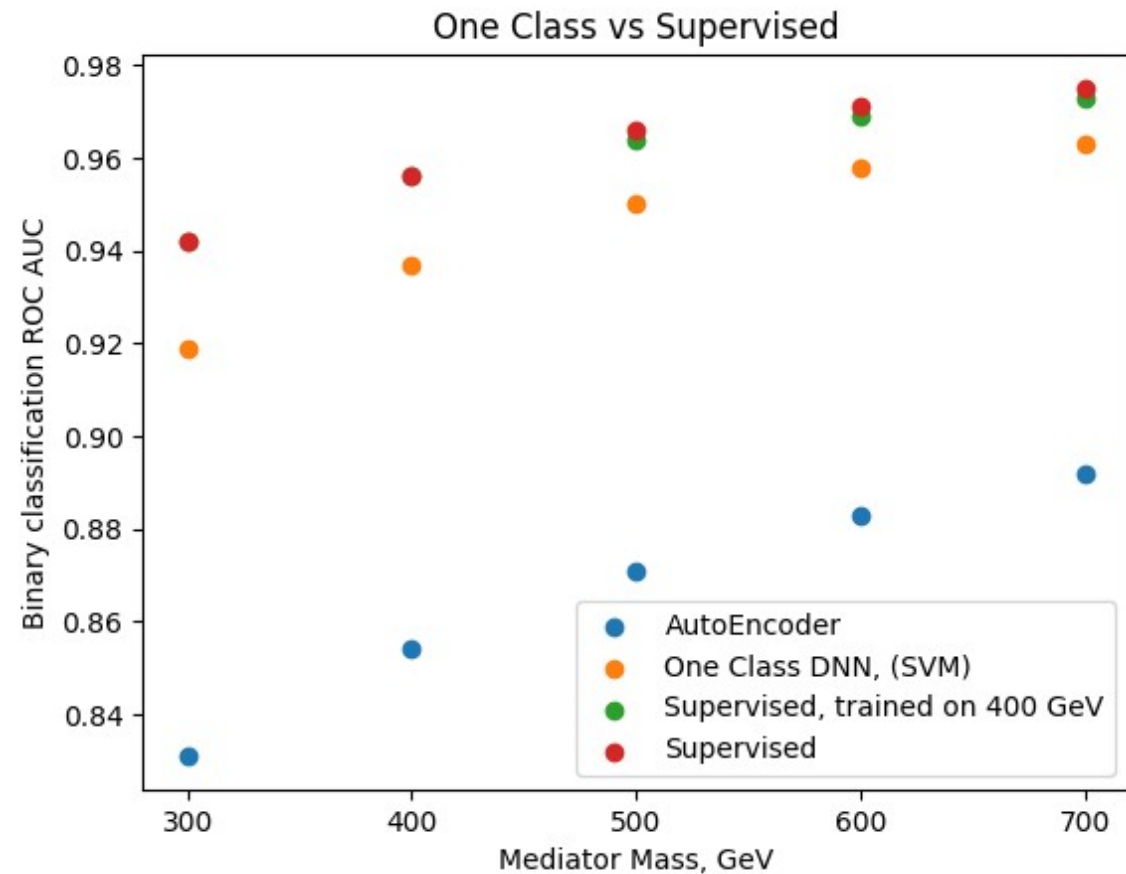
* Lev Dudko, P. V. Volkov, Georgi Vorotnikov и Andrei Zaborenko. «Application of Deep Learning Technique to an Analysis of Hard Scattering Processes at Colliders». В: Proceedings of The 5th International Workshop on Deep Learning in Computational Physics — PoS(DLCP2021) (2021).



Зависимость точности алгоритма от стандартного отклонения для сгенерированного шума.

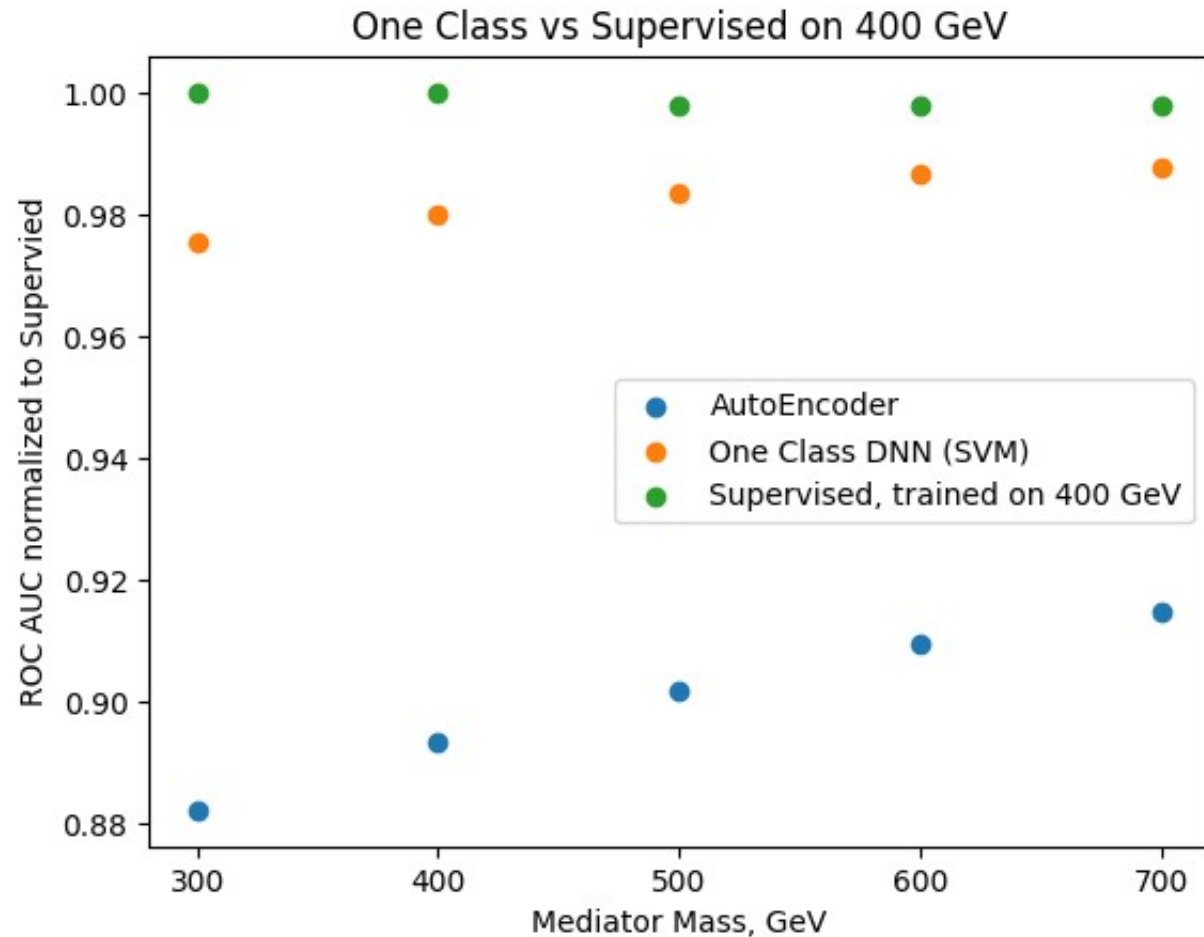
Применение алгоритмов детектирования аномалий к событиям упрощенной модели ТМ

- Вышеописанные алгоритмы были протестированы на событиях, сгенерированных с разной массой скалярного медиатора ТМ. Методы, обученные только на СМ, были противопоставлены классификатору, обученному «с учителем» на событиях ТМ с медиатором с массой 400 ГэВ.



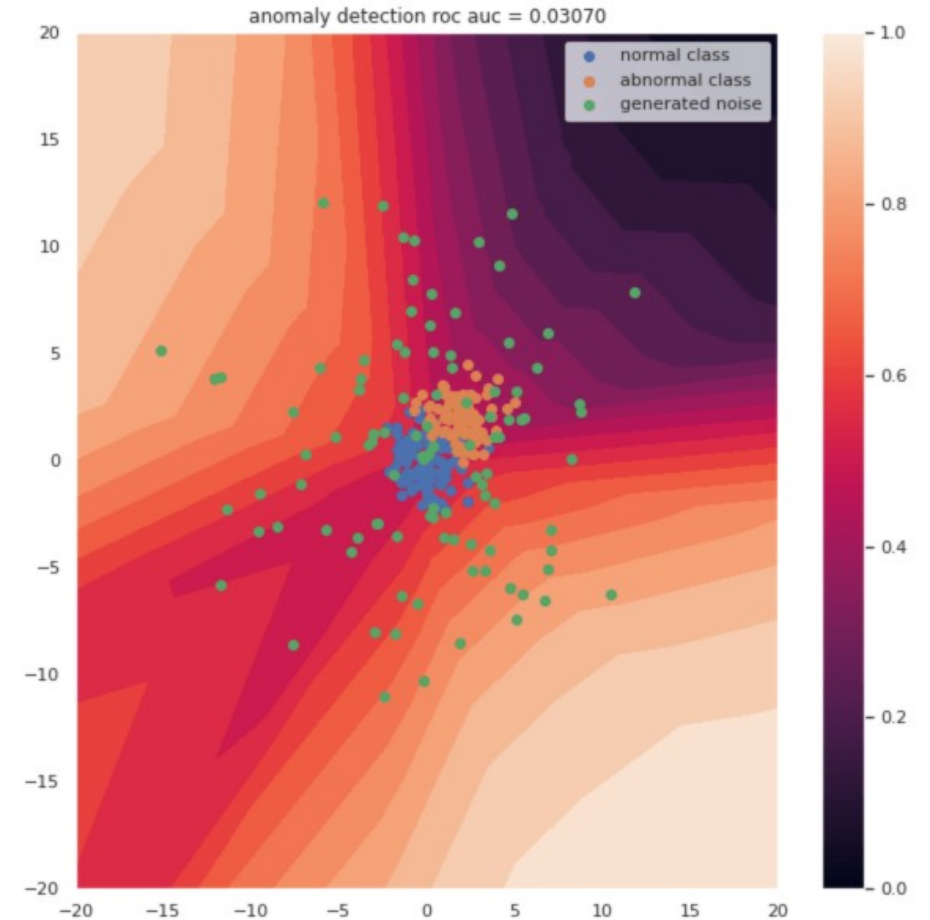
Применение алгоритмов детектирования аномалий к событиям упрощенной модели ТМ

- На приведенном графике показаны метрики ROC AUC алгоритмов детектирования аномалий, нормированные на метрику классификатора «с учителем» на данных с указанной массой медиатора.
- OCDNN и OCSVM показывают отличную точность классификации, их метрика лежит в 97-98% от «идеального» классификатора.
- Чем сильнее отличаются данные от обучающей выборки классификатора, обученного на массе 400 ГэВ, тем ниже его относительная классификационная способность, что является оптимистичным прогнозом для ОС методов, не зависящих от конкретной сигнатуры сигнального процесса.



Заключение

- Представлен метод обнаружения новизны в данных
- Метод основан на выучивании закономерностей характерных для нормальных данных (Стандартная модель)
- Эффективность метода существенно выше эффективности автоенкодеров и близка к стандартным методам обучения «с учителем», когда аномальный класс точно известен.
- Метод проверен на ряде задач поиска «новой физики» в коллайдерных экспериментах.



Moscow University Physics Bulletin, 2023, Vol. 78, No. 7, pp. 80–84.

DOI: 10.3103/S0027134923070329