面向粒子物理的高精度回归器

Fady Bishara[a], *, **Ayan Paul**[b], *和 **Jennifer Dy**[b], *

[a]德国电子同步加速器研究所 DESY，诺特克街 85 号，D-22607 汉堡，德国[b]东北大学电气与计算机工程系，波士顿亨廷顿大道 360 号，MA 02115，美国*电子邮件：fady.bishara@desy.de，a.paul@northeastern.edu，j.dy@northeastern.edu

arXiv:2302.00753v1 [physics.comp-ph] 2 Feb 2023

摘要

在欧洲核子研究中心大型强子对撞机等粒子对撞机上，对物理过程进行蒙特卡罗模拟会占用很大一部分计算预算。对于某些模拟，根据第一性原理计算单个数据点需要数秒、数分钟，甚至数小时。由于每次模拟所需的数据点数量级为 10^9 – 10^{12}, , 可以使用机器学习回归器替代物理模拟器，从而显著减轻计算负担。然而，这项任务需要高精度回归器，能够在函数的整个定义域内提供相对误差小于 1% 甚至 0.1% 的数据。本文提出了最优训练策略，并调整了多种机器学习回归器，以满足高精度要求。我们利用粒子物理中的对称性论证来优化回归器的性能。受残差网络启发，我们设计了一种带有跳跃连接的深度神经网络，其性能优于全连接深度神经网络。我们发现，在较低维度下，提升决策树的表现远胜于神经网络；而在较高维度下，神经网络的表现则显著更好。我们表明，与蒙特卡罗模拟中目前使用的第一性原理计算相比，这些回归器可将模拟速度提高 10^3 – 10^6 倍。此外，利用从粒子物理推导出的对称性论证，我们将每次模拟所需的回归器数量减少了一个数量级。我们的工作有望显著减轻当前及未来对撞机实验中蒙特卡罗模拟的训练和存储负担。

1 引言

粒子物理实验（例如欧洲核子研究中心大型强子对撞机的实验）正在以越来越高的能量运行，所收集的数据也比以往任何时候都多。因此，实验测量的精度在不断提高。然而，要推断这些测量结果对物质基本组成部分之间相互作用意味着什么，就必须将其与我们当前的理论认识进行比较，并结合这一认识加以解读。为此，需要对这些高能过程进行逐阶的第一性原理计算，并按照幂级数展开进行计算。计算完成后，所得函数会用于蒙特卡罗模拟。简单来说，幂级数展开中的各项依次逐渐变小。示意性地，这可以写作：

$$F(\boldsymbol{x}) = f_{00}(\boldsymbol{x}) + \alpha\, f_{01}(\boldsymbol{x}) + \alpha^2 \left\{ f_{11}(\boldsymbol{x}) + f_{02}(\boldsymbol{x}) \right\} + \ldots . \tag{1}$$

其中 $\alpha \ll 1$ 是较小的展开参数。我们当前工作关注的是 方程（1）中由花括号括起的项，我们将其称为二阶项[1]。函数 $F(xxx)$必须在每次模拟中求值约 10^9 – 10^{12} 次。然而，对于许多过程，求二阶项，尤其是 f_{02}, , 会计算耗费空间和时间，计算单个数据点可能需要数秒。此外，这些样本无法重复使用，导致整个待研究过程的计算成本很高。构建代理模型以加速蒙特卡罗模拟不仅与粒子物理密切相关，也适用于所有物理学分支中大量采用微扰展开（如 方程（1））的问题。我们将在第 4 节中更全面地概述其物理动机和应用。

[1]这里，阶数指展开系数的幂 α。

加速函数计算的一种简单方法是使用具有代表性的数据样本构建回归器。然而，为了达到与实验结果相匹配所需的准确度，回归器必须在函数的整个定义域内给出准确率极高的预测。我们对回归器提出的要求，尤其是我们所说的高精度，如下：

高精度：在函数定义域超过 90% 的范围内，预测误差为 $< 1\%$**速度**： 每个数据点的预测时间为 $< 10^{-4}$ 秒**轻量**： 为确保可移植性，回归器的磁盘大小最多应为几兆字节

在本研究中，我们探索以下新颖概念：

- 我们使用来自粒子对撞机中真实物理过程的模拟数据，研究采用提升决策树（BDT）、深度神经网络（DNN）和带跳跃连接的深度神经网络（sk-DNN）时，多维分布在整个输入特征空间中的误差分布。

- 我们研究了这些回归器在 2、4 和 8 维（D）数据上的表现，并比较提升决策树、深度神经网络和带跳跃连接的深度神经网络的性能，目标是在至少 90% 的输入特征空间内将误差控制在 1%–0.1% 以下。

- 我们概述了构建这些不同类型高精度回归器所需的架构决策、训练策略和数据量。

接下来我们将展示，如何在不影响预测准确率的前提下，将计算量最大的部分$f_{11}(xxx) + f_{02}(xxx)$（定义见方程 (1)）的计算时间缩短数个数量级，从数秒降至亚毫秒级。我们表明，要实现高精度目标，物理启发的归一化策略、学习策略以及物理对称性的运用不可或缺。在我们的实验中，低维情况下提升决策树的表现优于深度神经网络；而在更高维度下，深度神经网络的准确率相当（四维）或显著更高（八维）。即使参数少得多，带跳跃连接的深度神经网络也能达到与全连接深度神经网络相当的表现，并优于复杂度相当的深度神经网络。此外，深度神经网络和 sk-DNN 使用 8D 数据时达到并超过高精度标准，而提升决策树则未能达标。我们的目标是构建最轻量级的回归器，用于实时预测，从而加速蒙特卡罗模拟。

2 相关工作

在近期的粒子物理文献中，构建用于振幅回归的模型一直是持续探索的方向。长期以来，提升决策树（BDT）一直是粒子物理领域的主力工具，但主要用于从占主导地位的背景中识别微弱信号 [1]。然而，直到最近，才有人提出将提升决策树用作回归器，以对实验特征进行理论估算 [2]，并已证明其在二维数据上能够达到令人瞩目的准确率。

其他几种机器学习算法也已用于加速蒙特卡罗模拟中的样本生成。文献 [3] 提出使用归一化流 [4] 与可逆神经网络实现重要性抽样 [5, 6]。最近，神经网络代理模型已被用于辅助对撞过程的蒙特卡罗模拟 [7]。文献 [8]使用贝叶斯神经网络对粒子物理振幅进行回归，重点在于理解误差传播和估计。文献 [9] 尝试借助神经网络达到高精度范围，在整个输入特征空间上积分后，误差达到 0.7%。文献 [10] 则研究了参数积分，即仅对部分变量进行积分的积分；这类积分出现在精密粒子物理计算中，其在一系列参数值范围内达到了 0.1% 至 1% 的精度。文献 [11] 研究了物理感知神经网络，试图处理回归函数中的奇点。在生成模型领域，生成对抗网络 [12–14] 和变分自编码器 [14] 已被用于样本生成 [15, 16]。

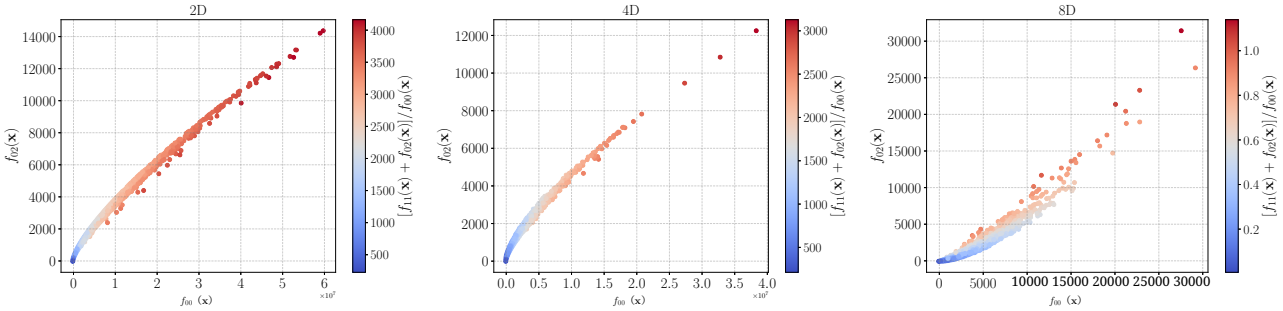

图 1. 将二阶项 $f_{02}(xxx)$ 与零阶项 $f_{00}(xxx)$ 进行归一化的效果。这两个函数高度相关（八维时为 $\rho = 0.87$，四维时为 $\rho = 0.91$，二维时为 $\rho = 0.96$），归一化后的函数 $f(xxx) = [f_{11}(xxx) + f_{02}(xxx)]/f_{00}(xxx)$ 的峰值则低得多。

在物理学的其他领域中，蒙特卡罗模拟也有类似的应用。文献 [17]探索了自学习蒙特卡罗方法。玻尔兹曼机的应用 [18], 深度神经网络 [19] 和自回归神经网络 [20] 最近也已有相关研究。文献 [21] 将神经网络用于量子蒙特卡罗模拟，以学习哈密顿算符的本征值和自旋构型的自由能；这一应用不属于粒子物理的定义域。然而，所有这些工作的主要目标都是避免第一性原理计算，从而缩短计算时间，同时将误差控制在可信的误差预算范围内；具体预算则根据问题而定。

与先前的工作相比，[2, 3, 15, 16], 我们的贡献在于尝试使用快速、高效的回归器，在被回归函数的整个定义域内实现高精度。为此，我们比较了梯度提升决策树和神经网络在输入特征空间维度分别为二维、四维和八维的函数上的表现。我们提出了一种新架构，即带跳跃连接的深度神经网络，以避免更深层神经网络中的梯度消失问题，并证明其性能优于全连接深度神经网络。我们还提出了源自物理领域知识的新方法：利用另一个计算成本低廉且与被回归函数高度相关的函数，对被回归函数进行缩放。我们利用所研究物理过程的对称性，减少需要训练的回归器数量。我们的方法不仅适用于其开发所针对的定义域，也可用于任何需要通过加速模拟或样本生成来实现高精度的应用。

3 模型：决策树与神经网络

在本节中，我们将介绍几种方法，帮助我们达到设定的高精度要求。我们将采用以下条件作为基准：$|\delta| < 1\%$ 在被回归函数的定义域中超过 90% 的范围内[2]。这里，δ 定义为函数的预测值$f(xxx)_{\text{predicted}}$与其真实值$f(xxx)_{true}$之差，再除以$f(xxx)_{true}$，即：

$$\delta = \frac{f(\boldsymbol{x})_{\text{predicted}} - f(\boldsymbol{x})_{\text{true}}}{f(\boldsymbol{x})_{\text{true}}} \tag{2}$$

事先已知$f(xxx)_{\text{true}}$ 是正定的。在机器学习中，通常通过单一的准确度度量来评估回归器的性能并进行模型比较，该度量是整个测试样本中该准确度度量分布的统计平均值。然而，这并不能全面反映回归器在高精度应用中的准确性。使用误差分布而非单一数值，可以为模型选择提供更好的准则，并增强模型的可解释性。

物理信息归一化：尝试使用蒙特卡罗模拟的原始数据构建回归器，结果无法满足我们设定的高精度要求。因此，我们必须求助于

[2]如需更详细地了解精度要求，请阅读第 4 节

一种基于支配物理过程的物理规律所推导出的新型归一化方法。对撞机中的粒子物理过程中，我们关注的函数往往在一个或多个维度上具有非常尖锐的峰值。这使得构建一个能在函数的整个定义域内保持所需高精度的回归器相当困难。由于这些峰值可能非常窄，且比函数的均值高出几个数量级，因此对数缩放或标准化为零均值和单位方差都无法解决这一问题。对经过对数缩放的函数进行训练的回归器，会在整个定义域内产生一种误差分布；将其取指数后，峰值附近的误差会变得很大。这种情况并不理想。标准缩放也无济于事，因为分布的标准差远小于峰值，往往小好几个数量级，导致峰值成为离群值。

作为一种解决方案，我们按照方程（1）中的定义，用零阶贡献对二阶贡献进行归一化，即将其转换为分布：

$$f(\boldsymbol{x}) = \frac{f_{11}(\boldsymbol{x}) + f_{02}(\boldsymbol{x})}{f_{00}(\boldsymbol{x})}, \tag{3}$$

其中，$\mathrm{f\,(xxx)}$ 是待回归的函数。这个一阶项 $\mathrm{f_{00}(xxx)}$ 也有一个峰值，与二阶项 $\mathrm{f_{11}(xxx) + f_{02}(xxx)}$ 相似，并且与之高度相关，$\rho \sim 0.9$。因此，这种归一化得到的分布 $\mathrm{f\,(xxx)}$ 更便于进行回归。图 1 展示了一些示例，可以看出，$\mathrm{f_{00}(xxx)}$ 和 $[\mathrm{f_{11}(xxx) + f_{02}(xxx)}]$ 都有明显的峰值，且跨越数个数量级，但由于这两个项高度相关，它们的比值只跨越一个数量级。根据第一性原理计算一阶项在数值上开销很小，无需进行回归。此外，我们通过去除均值并缩放至单位方差，对分布进行标准化。

3.1 深度神经网络设计决策

我们使用的深度神经网络架构由全连接层构成，隐藏层采用 *Leaky ReLU* [22] 激活函数，输出层采用线性激活。我们在第 5.3 小节中展示了激活函数的比较研究，发现*Leaky ReLU* 的表现优于其他激活函数，例如*ReLU* [23, 24], *softplus* 和*ELU* [25]。本文不考虑任何可学习的激活函数，将其留待未来研究。我们采用以下设计决策：

目标函数： 我们使用均方误差损失函数，不进行任何正则化。虽然我们使用线性相对误差 δ 来估计模型在整个特征空间中的表现，但选择均方误差损失函数，是为了优先惩罚离群值并减少其出现。

学习率： 随着目标函数逐渐接近最小值，有必要降低学习率。这对于寻找能使整个特征空间中的误差均匀保持较低的最优解至关重要。对于深度神经网络和 sk-DNN，我们都使用 Adam 优化算法。参考文献 [26] 讨论了 Adam 优化器的平方根倒数衰减率缩放。我们发现这种方法并不适用于这项高精度应用。平方根冷却的形状相当固定，因为除乘法常数外，其形状不随缩放而变化。因此，我们采用学习率的指数冷却，其渐近行为类似于平方根倒数缩放，但形状的可调性高得多。训练开始时，学习率从 10^{-3} 开始冷却，到 2500 个训练轮次时降至 10^{-6}。大部分学习在训练早期阶段完成，即 200 个训练轮次以内。此时的 R^2 分数与最终的 R^2 分数（$> 99.9\%$）相差约 0.5%。然而，为满足高精度要求，训练的最后阶段不可或缺，还需要再训练约 2500 至 3000 个训练轮次。

训练轮次与验证： 我们使用基于均方根误差的早停准则，来确定回归器的训练轮次。耐心值[3] 设为一个异常大的数值，即 200 轮。我们将耐心值设得这么大，是为了让优化器在学习率很低时仍有机会移至更优的最优点（如果存在更优点）。我们首先将数据划分为 20% 的测试集和 80% 的训练集与验证集。后者进一步

[3]我们将耐心值定义为：在验证集上计算的均方根误差不再降低时，经过多少个训练轮次后停止训练，并将权重和偏置重置为均方根误差最低时对应的值。

划分为 60% 的训练集和 40% 的验证集。因此，测试集、训练集和验证集的划分比例分别为 20%、48% 和 32%。较大的验证集是必要的，以确保在被回归函数的整个定义域内，误差始终较低且分布均匀。对于所有情况，我们都使用包含 1000 万个样本的数据集。

3.2 带跳跃连接的深度神经网络

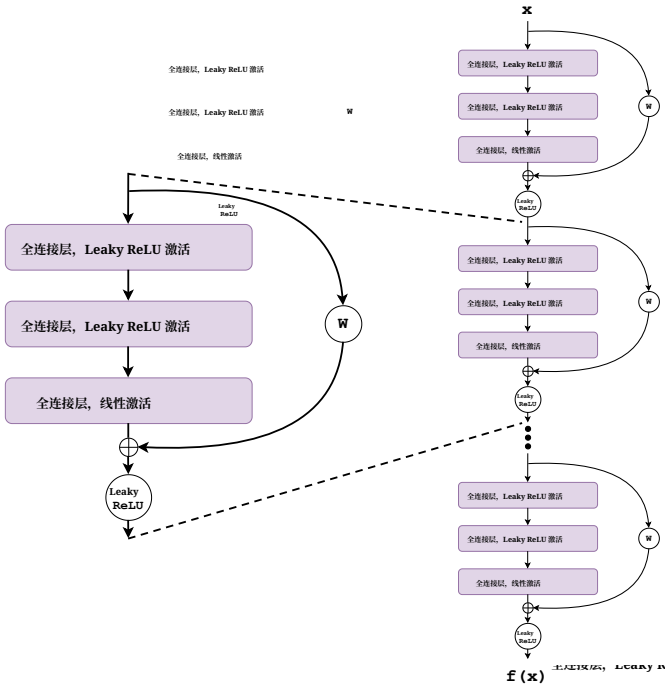

图 2. 带跳跃连接的深度神经网络的基本模块。前两层为全连接层，并采用 *LeakyReLU* 激活函数。最后一层采用线性激活，其输出在经过非线性 *Leaky ReLU* 函数变换之前，会通过跳跃连接与输入相加。矩阵WWW 是权重矩阵；当模块的输入维度与输出维度不同时，该矩阵可训练，否则为III 。这些模块依次堆叠，构成神经网络。

除了全连接深度神经网络外，我们还尝试了带跳跃连接的深度神经网络（sk-DNN），以解决更深层神经网络中的梯度消失问题。sk-DNN 的基本模块如 图 2 所示。给定输入xxx ，该模块的输出为

$$\boldsymbol{y} = g\left(h(\boldsymbol{x}) + \boldsymbol{W}\boldsymbol{x}\right) \tag{4}$$

其中，$h(xxx)$ 是采用线性激活的第三层的输出，g 是非线性函数，WWW 是可训练的权重矩阵；当输入维度 $i \times j$ 与输出维度 i不同时，该矩阵的维度为j；否则为III 。该模块的结构可由 HighwayNetwork [27] 架构推导得出，其中$transform$ 门设为III ，当 $\dim(xxx) \neq \dim(yyy)$ 时，$carry$ 门设为WWW ；否则设为III 。从结构上看，sk-DNN 模块与 ResNet 块 [28] 类似，但隐藏层有所不同。

我们对目标变量的归一化和学习率衰减计划采用与深度神经网络相同的设置。我们还测试了权重矩阵WWW 固定为随机初始化元素的 sk-DNN，发现模型准确率没有变化，因此保持WWW 可训练。

4 物理背景

我们希望阐明本文所讨论的回归器在何种情况下是必需的，从而说明引言中提出的要求。具体而言，

1. 相对于精确值的预测误差应为 $< 1\%$；2. 在函数定义域的 90% 范围内均应满足这一要求；3. 评估时间应短于 $\mathcal{O}(10^{-3})$ 秒；4. 最后，回归器的磁盘大小应以兆字节计，而非吉字节。

这些回归器将用作精确函数的代理模型，而这些精确函数的数值求值速度很慢。由于速度（极其）缓慢，这些用于蒙特卡罗模拟的精确函数，远远构成了模拟中最大的瓶颈。

物理背景： 描述基本粒子及其相互作用的理论模型称为粒子物理标准模型。该模型是量子场论的一个例子；其确切含义在此并不重要。相反，该理论的重要特征在于，通常无法精确地计算可观测量（即实验结果），因为这类计算由于多种原因而难以处理，而对这些原因的解释超出了本文的范围。获得预测结果的通常方法，是将理论展开为关于一个小展开参数的幂级数，并计算该展开的更高阶项，以提高预测的准确率。此类微扰展开在物理学中普遍存在，因为只有少数系统（尤其是简谐振子和二体逆r^2 问题等）能够精确求解。涉及原子物理学、核物理学、凝聚态物理学、天体物理学、宇宙学、流体动力学、电动力学、量子力学、复杂系统等领域的物理问题中，有相当大一部分需要使用微扰展开，而其中的高阶项计算起来非常繁琐且耗时。因此，我们在此开发的方法具有更广泛的适用性：凡是使用微扰展开，和/或需要大量求值且求值速度非常慢的函数，同时又要求达到某一精度阈值的问题，都可以应用这些方法。

本研究关注的慢函数出现在该幂级数展开的二阶。每一阶产生的项数会迅速增加，出现的数学函数也会变得越来越复杂。例如，在展开的一阶（若零阶是所谓的树过程）中，可能出现的多重对数函数最高为二阶；而在二阶中，则会出现更高阶的多重对数函数。除了这些函数的数值计算耗时较长之外，它们之间通常还存在大幅抵消，因此需要使用任意精度算术库来规避数值分析中臭名昭著的“灾难性消去”问题。

例如，通过纳入二阶项来提高对四个电子产生率预测的准确率，所付出的时间代价是增加到原来的1500倍。详情请参阅参考文献 [29]期刊版本中的表11。因此，要求3背后的逻辑就在于：二阶函数通常需要 $1-10$ 秒才能计算一个点，而蒙特卡罗模拟中的所有其他函数通常只需几毫秒。因此，如果代理模型计算每个点所需的时间不超过 10^{-3} 秒，就能消除这一瓶颈。

精度要求： 存在许多不确定性来源，这些不确定性会传播到最终预测中。粗略地说，目前以及在可预见的未来，都存在约为 1% 且无法降低的系统误差。此外，蒙特卡罗模拟生成的有限样本还会带来固有的统计误差。我们的目标是努力使蒙特卡洛统计误差远小于 1%，例如达到 0.1%。由于二阶函数的贡献约为 10%，因此，只要代理模型的准确率达到 1%，总预测（包括零阶和一阶）的误差就足以控制在约 0.1%。虽然最好能在整个函数定义域内都达到这一精度，但鉴于我们设定的误差范围，这并非必要。假设模型所作预测中的误差遵循高斯分布，我们可以放心地将阈值设定为：在函数定义域的 90% 范围内，误差不超过 1%。事后我们检查发现，高斯假设大致成立（参见图 6）。要进一步阐述这一点，就需要讨论粒子物理中具体散射过程的具体积分，而这部分内容我们将留给更偏向粒子物理的后续工作。

可移植性： 与速度和准确率要求（第 1、2 和 3 项）相比，模型的磁盘大小在兆字节量级（第 4 项）是理想目标，但并非硬性要求。实际上，要将本文讨论的代理模型应用于蒙特卡洛代码，需要使用多个回归器。由于这些

对称性减少了所需函数的数量

维数	总函数	独立函数	求和结果符合物理规律吗?
2D	18	5	Yes
4D	162	25	No
8D	8	4	Yes

表1. 在二维、四维和八维中出现的函数总数和独立函数数量；独立函数是一个最小子集，通过重新映射特征空间即可由其生成其他函数。

代码必须由用户下载到本地，因此磁盘大小越小越好。如前所示，对于维度较高的数据，梯度提升决策树经过压缩后的模型文件可能达到数 GB。因此，本文着重构建更具可移植性的专用神经网络。

4.1 物理模拟

这里所说的函数是映射，$f_{(n)\,ij}\colon \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$，其中 $n \in \{2,4,8\}$ 且 i、$j \in \{0,1,2\}$，参见方程 (1)。函数的定义域，即特征空间，被映射到单位超立方体，并从均匀分布中取样。相应的数据集使用粒子物理模拟代码 VVAMP [30]，从第一性原理出发，利用我们称为形状因子的构建模块函数生成。除作为四维数据集特例的二维数据集外，生成四维和八维数据集时使用了相同的形状因子。四维和八维特征空间的差异在于相关过程的物理性质，具体而言，是函数所描述的外部粒子数量。四维函数的回归器 $g^{(4)}{}_{ij} \approx f_{(4)\,ij}$，乘以另外两个计算开销很低的（精确）函数并将结果相加后，可用于生成八维函数 $f_{(8)\,ij}$。

结果函数的数量（技术上称为螺旋度振幅）取决于维度，如表1所示。尽管四维特征空间所需的回归器数量最多，但它也为后续物理分析提供了最大的灵活性。要生成八维函数，必须在生成数据时指定更多过程细节，这些细节随后会固化到回归器中。因此，不同的物理分析需要不同的回归器。相比之下，四维回归器的通用性更强，不包含任何固化的物理参数。

通过利用下文讨论的、根据物理领域知识推导出的对称性，便可减少表1第三列中所需函数的数量。对于本分析所用的数据，这些对称性源自模拟的散射过程中体现出的对称性。最后一列表示对函数求和是否具有物理意义；若具有物理意义（即二维和八维的情况），则只需一个回归器来拟合函数之和。

对称性： 对于任意维度，$f_{(n)\,ij}$所构成的完整函数集合都是冗余的。描述该过程的外部粒子经过特定置换后，一对函数可以相互映射。这会独立地对第二个坐标 x_2, 施加线性变换，并与特征空间中第三、第四个坐标 x_3 和x_4, 的置换组合起来。例如，在四维中，两个置换π_{12}：$p_1 \leftrightarrow p_2$ 和 π_{34}：$= p_3 \leftrightarrow p_4$,，其中 p_i 是标签为i 的粒子，可将独立函数的数量从 162 减少到 25。

置换	粒子对称性	坐标对称性
π_{12}	$p_1 \leftrightarrow p_2$	$x_2 \to 1 - x_2$
π_{34}	$p_3 \leftrightarrow p_4$	$x_2 \to 1 - x_2$和 $x_3 \leftrightarrow x_4$

蒙特卡罗模拟的计算负担：生成二维、四维和八维数据集时，每组 1300 万个数据点需要在 96 个 AMD EPYC 7402 核心上运行 144 小时。这一过程必须进行两次：一次用于二维

数据集，另一次用于四维和八维数据集；后者由相同的、计算密集型的形状因子生成，而这些形状因子必须通过第一性原理计算。相比之下，我们构建的回归器在任何台式计算机上都能在几秒到几分钟内生成一百万个样本。

5 结果

接下来，我们将推导出有助于满足高精度要求的模型最优超参数。我们还将研究一组激活函数，以便更好地设计神经网络架构。基于这些内容，我们比较了所有数据集上各个模型的准确率。

5.1 提升决策树

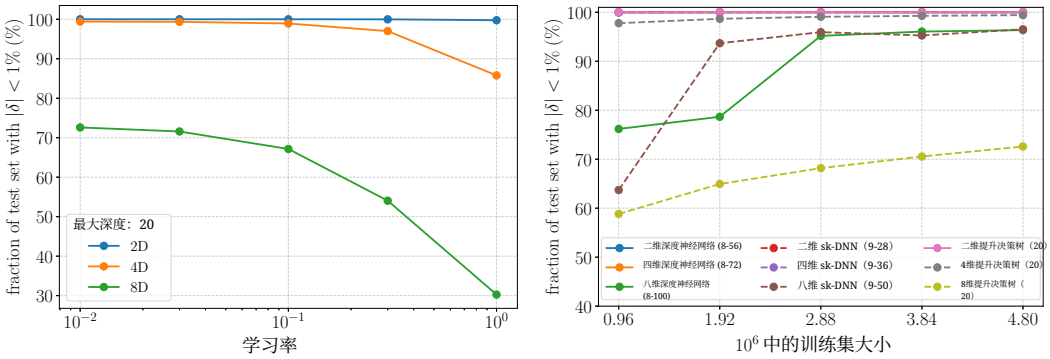

图 3. 左图： 学习率对提升决策树实现高精度的影响。对于低维度，学习率并非重要参数；但对于高维度，学习率则十分重要。**右图：** 训练不同回归器所需的数据量。对于低维度，少量数据（< 1M）就足够了。然而，对于高维度，则需要更多数据。

我们使用 `XGBoost` [31] 实现提升决策树。在调整回归器的架构时，我们重点关注最大深度这一提升决策树的超参数，它控制提升集成中决策树生长的最大深度。如果 图 3 我们展示了改变学习率和训练数据量如何影响训练后的提升决策树模型的准确率。在最终的实验中，我们使用 0.01 的学习率和 1000 万个数据点，其中 48% 用于训练，32% 用于验证和提前停止，20% 用于测试。有关超参数相关性和选择的更多细节，请参见 第 5.2 节。

5.2 提升决策树的超参数调查

集成中决策树的最大深度： 提升决策树模型采用提前停止条件进行训练：每隔 25 轮检查一次均方根误差是否下降，如果均方根误差不再下降，就停止增加决策树。这使得用于训练提升决策树的超参数在一定程度上相互关联。例如，降低学习率会增加决策树的数量，直到达到最优值。图 4展示了这一点。然而，随着每棵决策树的最大深度增加，生成的决策树总数会减少。决策树的节点数随深度呈指数增长，因此，允许决策树具有更大的最大深度，会使训练所得模型的磁盘大小大幅增加。更高维度的数据会进一步加剧这一问题。因此，当可移植性至关重要时，提升决策树不适用于高维数据的高精度应用。

学习率和决策树的最大深度： 在 图 4中探究提升决策树模型的学习率时，我们发现，学习率从 1 开始逐渐降低时，训练后的模型准确率起初会提高，但达到某个点后，准确率便会下降。对于较浅的决策树，这一现象尤为明显。我们还注意到，模型的准确率会随着决策树最大深度的增加而提高，但只会提高到某一深度。在 图 4右侧面板的示例中，我们使用八维数据，可以看到模型准确率在最大深度达到 15 之前持续提高，之后则有所下降。

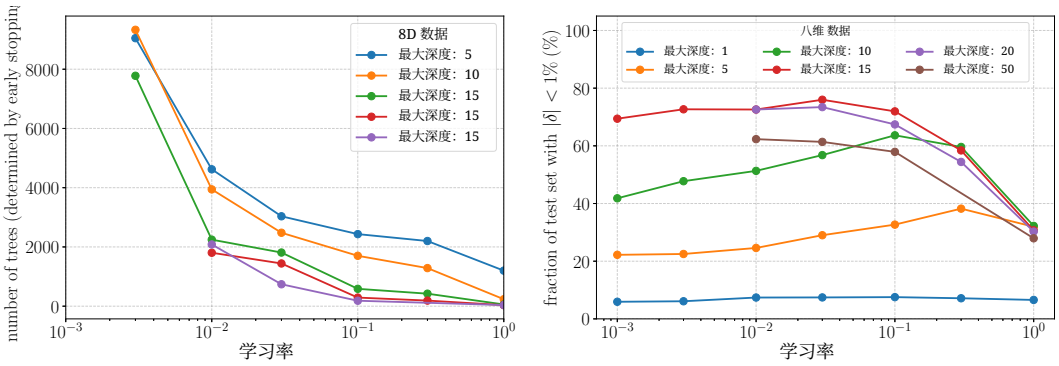

图 4. 左图： 使用早停准则时，随着学习率降低，BDT 集成中生长的决策树数量会迅速增加。注意：对于最大深度为 20 和 50 的梯度提升决策树，由于使用 8D 数据训练模型时产生的内存消耗占用磁盘空间过大，超出了高性能计算集群单个节点的容量，因此学习率无法降低到 0.1 以下。**右图：** BDT 集成的最大深度增大时，准确率会提高，直至达到某个值，之后准确率便会下降。最大深度的最优值似乎为 15 或 20。此外，学习率也存在一个最优值，超过该值后，准确率会下降或趋于平稳。

5.3 深度神经网络与跳跃连接

对于神经网络，我们关注回归器的深度、宽度和可训练参数数量（在表格和图中记作“宽度-深度（可训练参数）”）。sk-DNN 的深度表示回归器中串联的 sk-DNN 模块数量，而非层的总数。sk-DNN 的宽度设为深度神经网络宽度的一半，并调整 sk-DNN 的深度，使其参数数量与深度相近的深度神经网络大致相同。含有 2 个模块的 sk-DNN 是个例外，其参数数量多于相应的含有 2 层的深度神经网络。数据策略与提升决策树相同。

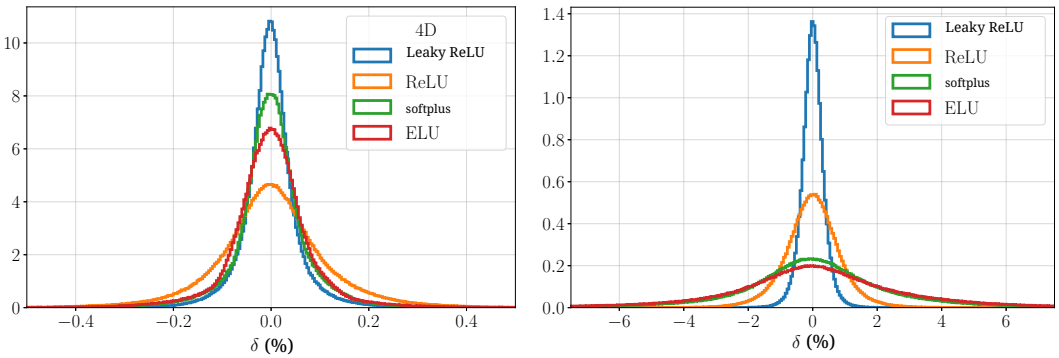

图 5. 使用 sk-DNN 对 8D 数据进行比较：*LeakyReLU*、*ReLU*、*softplus* 和*ELU* （**左图：**）适用于四维，包含 9 个宽度为 36 的块；（**右图：**）适用于八维，包含 9 个宽度为 50 的块。*Leaky ReLU*激活函数优于其他所有激活函数，而且这种优势在八维时比在四维时更加明显。我们在本文的所有实验中都将其用于深度神经网络和带跳跃连接的深度神经网络。

我们在保持其他所有超参数和数据策略不变的情况下，对各种激活函数进行了测试。我们使用四维和八维数据集，分别采用深度为 9、宽度为 36 的四维 sk-DNN 和深度为 9、宽度为 50 的八维 sk-DNN，使用指数学习率调度，并依据公式 (3)对数据进行归一化。我们仅探究不可训练的激活函数，例如*ReLU*、*Leaky ReLU*、*ELU* 和 softmax 激活函数。选择后三者是因为它们与*ReLU* 相似，并且已在多个领域展现出更强的学习能力 [22, 24, 25]。与其他实验一样，模型采用早停准则进行训练。从图 5 可以看出，*Leaky*

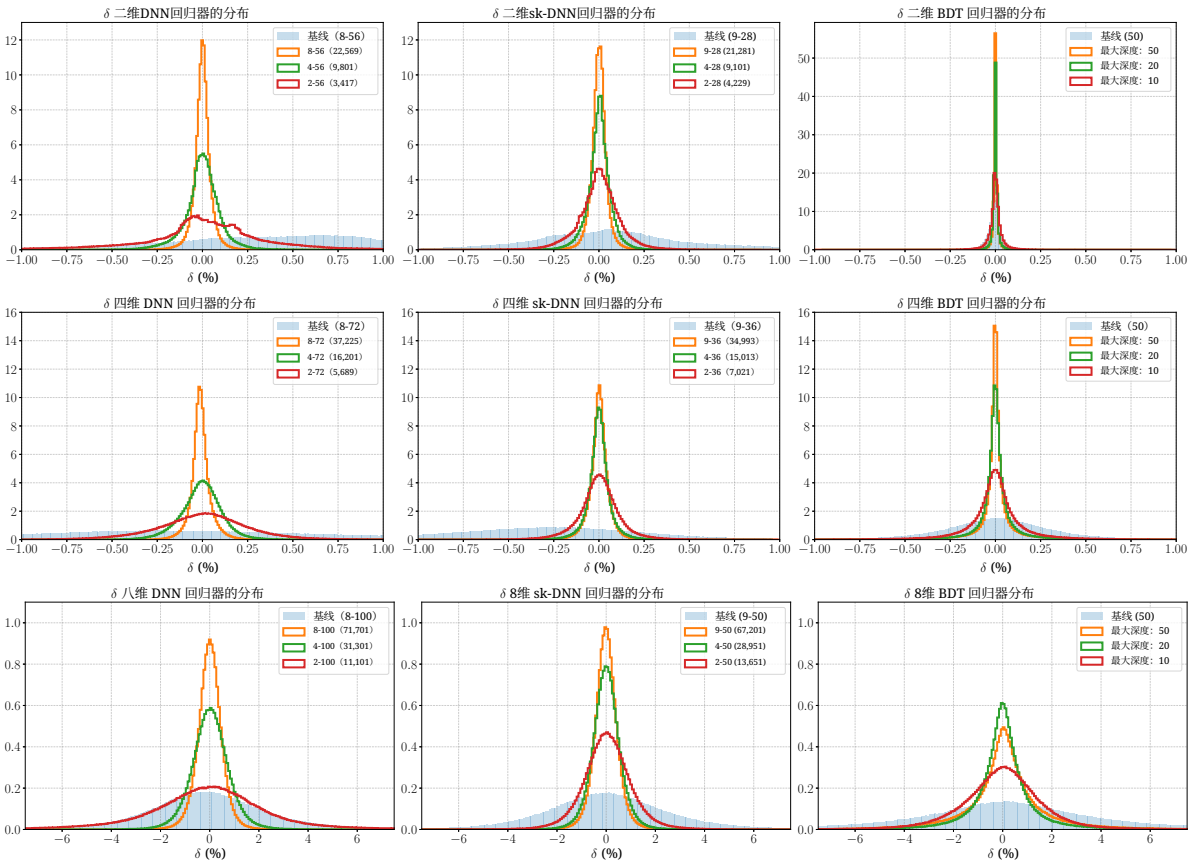

图6. 各种二维（**上方各图**）、四维（**中间各图**）和八维（**下方各图**）回归器的 $\delta = (f(xxx)_{\text{predicted}} - f(xxx)_{\text{true}})/f(xxx)_{\text{true}}$ 分布。DNN 和 sk-DNN 的标签表示深度-宽度（参数数量），其中深度对于 DNN 指层数，对于 sk-DNN 指块数。对于梯度提升决策树，标签表示最大_深度：N，其中最大_深度指决策树的最大深度。详细分析见正文。

ReLU 激活函数的表现远胜于其他所有激活函数，且误差分布更窄。与八维数据相比，这一优势在四维数据上更为显著。因此，在本研究的所有实验中，我们均使用*Leaky ReLU*激活函数。

为了比较回归器的性能，我们使用 δ 的分布（定义见公式（2））。我们重点关注这一分布，因为要满足高精度要求，识别测试数据中误差较大的部分至关重要。我们将考察以下统计量：

$|\delta| < 1\%$：测试集中 δ 小于 1% 的比例

μ_δ： δ 分布的均值

σ_δ： δ 分布的标准差

5.4 模型比较

基线： 为了了解我们所开发优化策略的效果，我们为提升决策树、深度神经网络和带跳跃连接的深度神经网络构建了未经任何优化的基线。我们没有按照第 3 节中的描述对数据进行归一化，而仅对数据进行对数缩放。我们将训练验证集划分设为 80%-20%。对于提升决策树，我们使用最大深度为 = 50 的集成，并将学习率设为 0.1。对于深度神经网络和带跳跃连接的深度神经网络，我们将 Adam 优化器的学习率固定为 10^{-3}，将耐心值降低至 10 轮，并采用从高精度回归器中选出的效果最佳架构

	2D	$\|\delta\| < 1\%$(%)	$\|\delta\| < 0.1\%$(%)	μ_δ(%)	σ_δ(%)
DNN	2-56 (3,417)	95.54	32.43	0.0114	0.52
	4-56 (9,801)	99.95	75.58	−0.0005	0.13
	8-56 (22,569)	99.99	94.43	0.0	0.06
	基线 (8-56)	77.16	9.01	0.1361	1.83
sk-DNN	2-28 (4,229)	99.92	67.71	0.0001	0.14
	4-28 (9,101)	99.99	87.95	0.0012	0.07
	9-28 (21,281)	100.0	95.72	−0.0005	0.05
	基线（9-28）	90.79	15.31	0.0173	1.39
BDT	最大深度：10	100.0	95.01	−0.0001	0.05
	最大深度：20	100.0	99.1	0.0	0.03
	最大深度：50	100.0	99.16	0.0	0.02
	基线（50）	99.91	94.04	−0.0045	0.1
	4D				
DNN	2-72（5,689）	99.18	34.34	0.002	0.32
	4-72（16,201）	99.97	66.42	−0.0068	0.13
	8-72（37,225）	100.0	91.58	−0.0096	0.07
	基线（8-72）	88.67	13.63	0.0449	1.1
sk-DNN	2-36（7,021）	99.96	69.23	0.0004	0.13
	4-36（15,013）	100.0	89.24	−0.0009	0.07
	9-36（34,993）	100.0	92.85	0.0007	0.06
	基线(9-36)	84.99	10.81	0.2701	1.11
BDT	最大深度：10	99.26	66.16	0.0014	0.22
	最大深度：20	99.41	81.34	0.0016	0.18
	最大深度：50	99.4	83.19	0.0017	0.18
	基线 (50)	95.85	27.8	0.0023	0.55
	8D				
DNN	2-100 (11,101)	37.2	3.95	0.1322	4.13
	4-100 (31,301)	82.37	11.64	0.029	1.05
	8-100 (71,701)	94.22	18.12	0.0016	0.6
	基线 (8-100)	31.97	3.3	0.799	4.38
sk-DNN	2-50 (13,651)	72.76	9.31	0.049	1.5
	4-50 (28,951)	90.98	15.69	0.0035	0.7
	9-50 (67,201)	94.94	19.36	−0.0063	0.56
	基线（9-50）	30.91	3.23	−0.547	4.85
BDT	最大深度：10	51.68	5.95	0.0921	2.91
	最大深度：20	72.6	12.06	0.0577	1.85
	最大深度：50	62.15	9.61	0.1505	2.36
	基线（50）	22.33	2.3	1.3953	13.35

表2. 从图6所示误差分布中提取的参数。使用100万个测试样本的预测结果生成了这些统计数据。二维、四维和八维各自表现最佳的模型以粗体标出。有关符号说明的更多详情，请参阅正文。

。结果列于 表2 和图6中。我们可以看到，未经优化时，回归器的表现非常糟糕。

关键结果： 我们在 表2 和 图6中展示了实验结果。我们展示了两个变量上的误差分布：质心能量平方根 $\sqrt{s} \mapsto x_1$, 和 $\cos\theta \mapsto x_2$，见 图7。显然，在二维情况下，梯度提升决策树的表现远优于深度神经网络。然而，在四维和八维情况下，带跳跃连接的深度神经网络不仅优于全连接深度神经网络，也优于梯度提升决策树，这一点可以从图6中的分布和 表2中的数值看出。在四维情况下，深度神经网络和带跳跃连接的深度神经网络相较于梯度提升决策树的准确率提升有限；而在八维情况下，准确率则有显著提升。梯度提升决策树的一大缺点是，随着集成规模增大，尤其是在维度较高时，会占用大量磁盘空间。这对于高精度应用是必要的，但会影响其可移植性。因此，带跳跃连接的深度神经网络是一个很好的解决方案，能够提供兼具可移植性与准确性的回归器，并满足我们在工作之初设定的阈值。

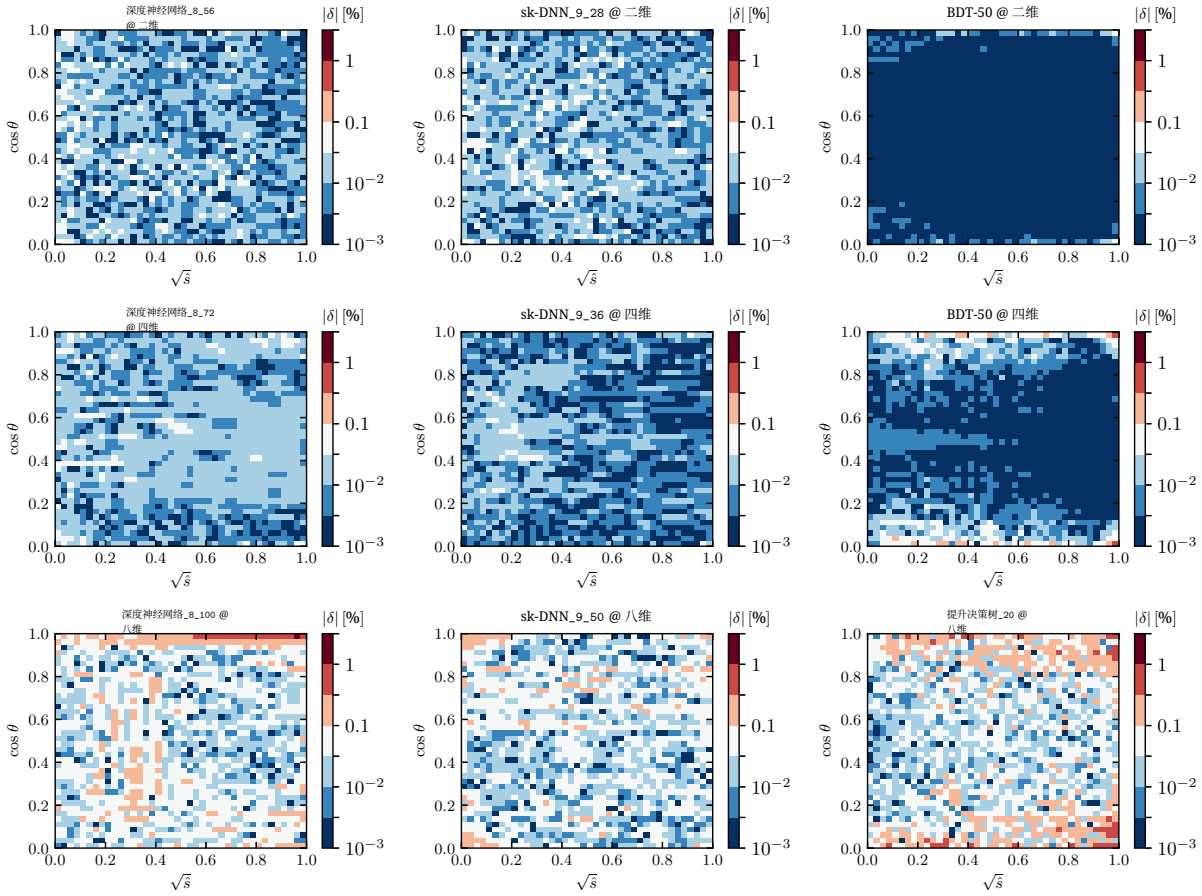

图7。各种二维（上排）、四维（中排）和八维（下排）回归器的 $\delta = (f(xxx)_{\text{predicted}} - f(xxx)_{\text{true}})/f(xxx)_{\text{true}}$ 分布。误差是对每个分箱取平均后得到的。

6 结论

鉴于物理学中的蒙特卡罗模拟耗时且消耗资源，因此迫切需要构建回归器来加速模拟。我们仔细研究了这些回归器的高精度要求，并制定了设计策略，以达到必要的基准。我们利用粒子物理领域的知识来确定归一化策略，运用对称性论证来减少所需回归器的数量，并为高精度回归设定基准。

我们表明，提升决策树是可靠的主力模型，即使使用规模庞大、结构复杂的神经网络，它们在较低维度下也能轻松胜过深度神经网络。然而，提升决策树相较于神经网络的优势在较高维度下往往会逐渐消退，尤其是在使用带跳跃连接的深度神经网络时。事实上，对于四维和八维数据，带跳跃连接的深度神经网络优于深度神经网络和提升决策树，并且在函数定义域超过 90% 的范围内超越基准。$\delta < 1$此外，正如表2所示，带跳跃连接的深度神经网络能够胜过复杂度更高的深度神经网络。

提升决策树的主要缺点是，随着维度增加，树集成会变得非常庞大，占用大量磁盘空间，通常达到 > 1 GB；如果回归器计划作为蒙特卡罗模拟软件包的一部分使用，这会影响其可移植性。另一方面，神经网络占用的磁盘空间不到几兆字节，因此便携性要好得多。总之，我们工作的主要结论如下：

- 要将蒙特卡罗模拟加速 10^3–10^6 倍，需要高精度回归器；利用物理定义域知识和对称性论证，可以更好地优化这些回归器。

- 在较低维度下，提升决策树的表现优于深度神经网络，但在较高维度下，它们在函数定义域的某些部分开始产生较大的预测误差。虽然全连接深度神经网络在较高维度下表现相对良好，但在四维和八维下，带跳跃连接的深度神经网络优于提升决策树和全连接深度神经网络。
- 带跳跃连接的深度神经网络可以胜过参数数量更多的深度神经网络。
- 与蒙特卡罗模拟中生成单个样本所需的几秒钟相比，我们设计的回归器能够在毫秒到微秒内给出精确预测。

在这项工作中，我们旨在达到所需的精度，但绝不意味着我们已经穷尽了进一步提高精度的可能性。未来可以探索的方向包括：考察更广泛的激活函数、在似然中加入可能的物理约束或对称性论证进行修改，或者通过单个神经网络同时预测一组函数，进一步减少模型数量。

对可持续性的贡献

物理过程的蒙特卡罗模拟会留下非常巨大的碳足迹。据估计，大型强子对撞机每项实验约有 50% 的能源预算消耗在此类模拟上。因此，我们的工作通过更高效地生成这些事例，直接显著减少了碳足迹。

生成二维、四维和八维数据集需要使用 96 个 AMD EPYC 7402 核心耗时 144 小时，每个数据集包含 1300 万个数据点。这项工作必须完成两次：一次用于二维数据集，另一次用于四维和八维数据集；后两者由同一次第一性原理计算生成。相比之下，我们构建的回归器在任何台式计算机上只需几秒到几十秒即可生成一百万个样本。由于我们的重点是构建轻量级模型，因此只需配备几个 CPU线程和一块图形处理器的个人计算机，就能在一天左右的时间内训练我们构建的回归器。训练或测试这些回归器不需要特殊硬件。鉴于在单次分析的整个生命周期中，这类蒙特卡罗模拟需要进行数千次，回归器能够在不显著牺牲定量科学研究所需精度的前提下，大幅减少能源消耗产生的碳足迹。

可复现性声明

复现本研究所需的代码和数据可在 https://github.com/talismanbrandi/high-precision-ml 获取。

参考文献

1. Radovic, A. 等. 粒子物理能量前沿与强度前沿的机器学习。《自然》560, 41–48, DOI: 10.1038/s41586-018-0361-2 (2018). 2. Bishara, F. & Montull, M. 用（机器）学习振幅，加速事件生成。arXiv 电子预印本 (2019). arXiv:1912.11055. 3. Winterhalder, R. 等. 用神经网络处理多圈积分。SciPost Phys. 12, 129, DOI: 10.21468/SciPostPhys.12.4.129 (2022). 4. Jimenez Rezende, D. & Mohamed, S. 基于归一化流的变分推断。arXiv 电子预印本 (2015). arXiv:1505.05770. 5. Müller, T., McWilliams, B., Rousselle, F., Gross, M. & Novák, J. 神经重要性抽样。CoRR 电子预印本 (2018). arXiv:1808.03856. 6. Ardizzone, L. 等. 使用可逆神经网络分析逆问题。CoRR 电子预印本 (2018). arXiv:1808.04730. 7. Danziger, K., Janßen, T., Schumann, S. & Siegert, F. 加速蒙特卡罗事件生成——使用神经网络事件权重估计进行拒绝抽样。SciPost Phys. 12, 164, DOI: 10.21468/SciPostPhys.12.5.164 (2022).

8. Badger, S., Butter, A., Luchmann, M., Pitz, S. & Plehn, T. 基于精确网络的圈振幅。arXiv (2022). arXiv:2206.14831. 9. Chen, I.-K., Klimek, M. D. & Perelstein, M. 改进的神经网络蒙特卡罗模拟。SciPost Phys. 10, 023, DOI: 10.21468/SciPostPhys.10.1.023 (2021). 10. Maître, D. & Santos-Mateos, R. 使用神经网络进行多变量积分。arXiv 电子预印本 (2022). arXiv:2211.02834. 11. Maître, D. & Truong, H. 考虑因子分解的矩阵元模拟器。高能物理学杂志 11, 066, DOI: 10.1007/JHEP11(2021)066 (2021). 12. Goodfellow, I. J. 等. 生成对抗网络。arXiv 电子预印本 (2014). arXiv:1406.2661. 13. Springenberg, J. T. 使用分类生成对抗网络进行无监督和半监督学习。第4届国际学习表征会议（ICLR 2016），圣胡安，波多黎各，2016年5月2–4日，会议论文集（2016）。网址：http://arxiv.org/abs/1511.06390. 14. Brock, A., Donahue, J. & Simonyan, K. 用于高保真自然图像合成的大规模GAN训练。CoRR 电子预印本 (2018). arXiv:1809.11096. 15. Butter, A., Diefenbacher, S., Kasieczka, G., Nachman, B. & Plehn, T. GAN增强事件样本。SciPost Phys. 10, 139, DOI: 10.21468/SciPostPhys.10.6.139 (2021). 16. Otten, S. 等. 使用深度生成模型和密度信息缓冲区进行物理事件生成与统计抽样。《自然·通讯》12, 2985, DOI: 10.1038/s41467-021-22616-z (2021). 17. Liu, J., Qi, Y., Meng, Z. Y. & Fu, L. 自学习蒙特卡罗方法。Phys. Rev. B 95, 041101, DOI: 10.1103/PhysRevB.95.041101 (2017). 18. Huang, L. & Wang, L. 使用受限玻尔兹曼机加速蒙特卡罗模拟。Phys. Rev. B 95, 035105, DOI: 10.1103/PhysRevB.95.035105 (2017). 19. Shen, H., Liu, J. & Fu, L. 使用深度神经网络的自学习蒙特卡罗方法。Phys. Rev. B 97, 205140, DOI: 10.1103/PhysRevB.97.205140 (2018). 20. Wu, D., Rossi, R. & Carleo, G. 使用自回归神经网络进行无偏蒙特卡罗簇更新。Phys. Rev. Res. 3, L042024, DOI: 10.1103/PhysRevResearch.3.L042024 (2021). 21. Stratis, G., Weinberg, P., Imbiriba, T., Closas, P. & Feiguin, A. E. 使用神经网络为自旋-费米子模型生成样本。arXiv 电子预印本 (2022). arXiv:2206.07753. 22. Maas, A. L. 整流非线性提升神经网络声学模型 (2013). 23. Nair, V. & Hinton, G. E. 整流线性单元提升受限玻尔兹曼机。ICML'10, 807–814 (Omnipress, Madison, WI, USA, 2010). 24. Sun, Y., Wang, X. & Tang, X. 深度学习的人脸表示具有稀疏性、选择性和鲁棒性。CoRR 电子预印本 (2014). arXiv:1412.1265. 25. Clevert, D., Unterthiner, T. & Hochreiter, S. 使用指数线性单元（ ELU ）实现快速准确的深度网络学习。第 4 届国际学习表征会议（ICLR 2016），圣胡安，波多黎各，2016年5月2–4日，会议论文集（2016）。网址：http://arxiv.org/abs/1511.07289. 26. Kingma, D. P. & Ba, J. Adam：一种随机优化方法。第3届国际学习表征会议（ICLR 2015），圣迭戈，美国加利福尼亚州，2015年5月7–9日，会议论文集（2015）。网址：http://arxiv.org/abs/1412.6980. 27. Srivastava, R. K., Greff, K. & Schmidhuber, J. 高速公路网络。CoRR 电子预印本 (2015). arXiv:1505.00387. 28. He, K., Zhang, X., Ren, S. & Sun, J. 用于图像识别的深度残差学习。CoRR 电子预印本 (2015). arXiv:1512.03385. 29. Grazzini, M., Kallweit, S. & Wiesemann, M. 使用 MATRIX 进行完全微分的 NNLO 计算。Eur. Phys. J. C 78, 537, DOI: 10.1140/epjc/s10052-018-5771-7 (2018).

30. Gehrmann、T.、von Manteuffel、A. 和 Tancredi、L. 关于 $qq' \to V_1V_2 \to 4$ 轻子过程的双圈螺旋度振幅。高能物理学杂志**09**，128，DOI：10.1007/JHEP09(2015)128 (2015)。
31. Chen、T. 和 Guestrin、C. XGBoost：一种可扩展的树提升系统。收录于 第*22*届 *ACM SIGKDD*知识发现与数据挖掘国际会议论文集，KDD '16，785–794，DOI：10.1145/2939672.2939785 (ACM，美国纽约州纽约市，2016年)。

致谢

我们感谢 Demba Ba 在阿斯彭物理中心进行的有益讨论，并感谢他向我们建议使用残差神经网络。A.P. 的工作由 Roux研究所和 Harold Alfond基金会资助。A.P. 的工作还得到大众汽车基金会“新冠危机及其之后——科学、学术与社会的展望”倡议的部分资助，资助编号为 99091。F.B. 的工作部分得到德国研究联合会（德国研究联合会，德国研究基金会）在资助编号 491245950 项下以及德国卓越战略——EXC 2121“量子宇宙”——390833306 项下的支持。本研究部分在阿斯彭物理中心开展，该中心由美国国家科学基金会资助，项目编号 PHY-1607611。本研究还部分使用了德国电子同步加速器研究中心（德国汉堡）运营的 Maxwell计算资源。

作者贡献声明

F. B. 和 A. P. 对本研究的贡献相同。

利益冲突

作者声明不存在任何利益冲突。