

修士論文

KamLAND2-Zen における  
グラフニューラルネットワークを用いた  
事象再構成ツールの開発及び性能評価

Development and performance evaluation  
of event reconstruction tool  
using graph neural network in KamLAND2-Zen

東北大学大学院理学研究科  
物理学専攻

梶田 祥広

2025 年

## 概要

ニュートリノが非常に軽い質量を持つ理由や物質優勢宇宙ができた理由を説明できる可能性を秘めているのが、ニュートリノのマヨラナ性である。ニュートリノのマヨラナ性を検証する現状唯一の手段が、ニュートリノを伴わない二重ベータ崩壊 ( $0\nu\beta\beta$ ) の観測である。KamLAND-Zen 実験では 2011 年から KamLAND 検出器にナイロン製のインナーバルーンを導入し、その中の液体シンチレータに二重ベータ崩壊核である  $^{136}\text{Xe}$  を溶解し、 $0\nu\beta\beta$  事象探索を行っていた。KamLAND-Zen 実験は世界最高感度で  $0\nu\beta\beta$  事象を探索し、2024 年までの探索から  $0\nu\beta\beta$  の半減期に世界で一番厳しい制限をかけているものの、 $0\nu\beta\beta$  事象の検出には至っていない。そこで、更なる背景事象の低減及び分解能向上を目指して、KamLAND2-Zen 実験が計画されている。 $0\nu\beta\beta$  の探索感度は、 $^{136}\text{Xe}$  の Q 値 ( $\approx 2.458$  MeV) 近傍におけるエネルギー分解能と、背景事象の低減能力に強く依存する。特に、 $2\nu\beta\beta$  は連続スペクトルを持つため、エネルギー分解能が有限である限り関心領域 (ROI) への染み出しは不可避であり、高精度なエネルギー再構成が重要となる。同様に、背景事象をより低減するには位置分解能の向上が重要となる。

KamLAND2-Zen では検出光量の増加により、Q 値近傍でのエネルギー分解能を現状の 4.2% から約 2% へ改善することが検出器としての目標となっている。そのために高量子効率 (HQE) PMT の導入や集光ミラーの導入が計画されている。加えて、KamLAND-Zen で支配的な背景事象の一つであったインナーバルーンフィルム中の  $^{214}\text{Bi}$  崩壊事象を低減するため、発光性インナーバルーン (PEN フィルム) の導入が検討されている。PEN フィルムは LS の発光波長域で透過率が低いため、波長変換剤として Bis-MSB をインナーバルーン内部の液体シンチレータに添加し、発光波長を長波長側 (400 nm から 450 nm) へシフトさせる必要がある。Bis-MSB の最適濃度は先行研究 [1] から 15 mg/L 程度とされている。一方で、発光性バルーンフィルムの導入や集光ミラーの追加は、検出器の時間応答や光子到達分布を複雑化させ、従来の最尤法のような光学モデルに基づく再構成では分解能の向上が難しくなることが懸念されている。特に PEN フィルムを導入し、Bis-MSB を添加した条件下においてトポロジーが変化することから、位置再構成が可能かどうか重要である。

本研究では、KamLAND 検出器を用いた  $0\nu\beta\beta$  探索実験 KamLAND2-Zen に向けて、複雑な検出器応答をデータから学習できる手法としてグラフニューラルネットワーク (Graph Neural Network, GNN) による事象再構成ツールを開発し、その性能をシミュレーションに

に基づいて評価した。GNN は球面上に配置された PMT の構造をグラフとして扱い、PMT ごとの観測量（電荷・時刻）と PMT の位置情報を入力として、事象のエネルギー  $E$  と発生位置  $(x, y, z)$ 、エネルギーの広がりを表す指標  $\sigma_{\text{vertex}}$  を同時に推定する。また、点状事象（ $\beta$  線）と広がりを持つ事象（ $\gamma$  線）が  $\sigma_{\text{vertex}}$  でそれぞれ特徴的な分布を持つことを利用した粒子識別（PID）も行った。GNN 再構成ツールの学習及び性能評価には、KamLAND2-Zen 検出器の幾何・光学条件を再現した Geant4 ベースの検出器シミュレーション (KLG4) を用いた。PEN フィルムおよび Bis-MSB を含む条件と、比較のためこれらを含まない条件の双方で学習・評価を行った。その結果、本研究で開発した GNN 再構成ツールは、KamLAND2-Zen の PEN フィルム導入および Bis-MSB 添加した光学条件下でも高精度なエネルギー・位置再構成が可能であることを示した。また、PEN フィルム導入および Bis-MSB 添加した条件下において、導入しない場合と比べてインナーバルーンフィルム近辺における位置分解能が向上するという傾向が確認された。本ツールは  $0\nu\beta\beta$  探索感度向上に資する解析基盤として重要であり、今後の検出器設計最適化や解析手法の高度化に貢献することが期待される。

# 目次

第 1 章	序論	1
第 2 章	ニュートリノ物理学	3
2.1	素粒子物理学におけるニュートリノ	3
2.2	ニュートリノ振動	4
2.3	ニュートリノの質量階層構造	7
2.4	ニュートリノのマヨラナ性	8
2.5	ニュートリノを伴わない二重ベータ崩壊	10
第 3 章	KamLAND2-Zen 実験	13
3.1	KamLAND 実験	13
3.1.1	内部検出器 (ID)	14
3.1.2	外部検出器 (OD)	16
3.2	KamLAND-Zen 実験	17
3.2.1	KamLAND-Zen400 実験	20
3.2.2	KamLAND-Zen800 実験	22
3.3	KamLAND2 実験	27
3.4	KamLAND2-Zen 実験	28
3.4.1	検出器の感度向上策	28
3.4.2	背景事象低減戦略	28
3.4.3	期待される感度	30
第 4 章	KamLAND2-Zen シミュレーション	32

4.1	KamLAND-Geant4 (KLG4) . . . . .	32
4.1.1	幾何構造と材料物性 . . . . .	33
4.1.2	シミュレーションの物理過程 . . . . .	33
4.1.3	シミュレーションの入出力と物理量 . . . . .	36
4.2	PEN フィルムと Bis-MSB . . . . .	37
4.2.1	液体シンチレータ . . . . .	37
4.2.2	インナーバルーンの設定 . . . . .	38
4.2.3	XeLS の設定 . . . . .	38
第 5 章	再構成手法 . . . . .	43
5.1	データ収集システム . . . . .	43
5.1.1	KamDAQ および KamFEE . . . . .	43
5.1.2	MogDAQ および MoGURA . . . . .	45
5.1.3	データ解析の初期段階 (波形解析) . . . . .	45
5.1.4	新データ収集システムの導入 . . . . .	46
5.2	従来の再構成手法 . . . . .	47
5.2.1	前処理と較正 . . . . .	47
5.2.2	事象再構成 . . . . .	48
5.3	KamLAND2-Zen における再構成課題と機械学習の導入 . . . . .	50
5.3.1	従来手法の課題と機械学習の合理性 . . . . .	50
5.4	グラフニューラルネットワーク (GNN) の採用理由 . . . . .	51
5.4.1	KamLAND2-Zen でのイベント再構成 . . . . .	53
第 6 章	GNN を用いた再構成モデル . . . . .	54
6.1	機械学習 . . . . .	54
6.1.1	ニューラルネットワークの構造 . . . . .	54
6.1.2	学習のプロセス . . . . .	55
6.1.3	パラメータの更新と最適化 . . . . .	57
6.2	使用しているモデル . . . . .	57
6.2.1	損失関数と学習目標の設計 . . . . .	66

6.2.2	評価指標の定義 . . . . .	68
6.3	トレーニング . . . . .	69
6.3.1	トレーニングデータセット . . . . .	69
6.3.2	GNN モデルのトレーニング方法 . . . . .	70
6.4	パラメータチューニング . . . . .	70
6.4.1	ハイパーパラメータの最適化方針 . . . . .	77
6.4.2	チューニング対象 . . . . .	77
第 7 章	性能評価 . . . . .	80
7.1	シミュレーションを用いた性能評価 . . . . .	80
7.1.1	評価用データセット . . . . .	80
7.1.2	ヒットマップ . . . . .	81
7.2	再構成性能 . . . . .	82
7.2.1	評価手法 . . . . .	84
7.2.2	Bis-MSB と PEN フィルム導入による影響評価 . . . . .	85
7.2.3	分解能の座標依存性 . . . . .	85
7.2.4	分解能のエネルギー依存性 . . . . .	86
7.3	PID (粒子識別) 性能 . . . . .	88
7.4	今後の課題 . . . . .	89
第 8 章	結論と展望 . . . . .	98
8.1	結論 . . . . .	98
8.2	展望 . . . . .	98
謝辞		100

# 目次

2.1	標準模型に含まれる素粒子 . . . . .	4
2.2	ニュートリノの質量階層構造 . . . . .	7
2.3	エネルギースペクトルのイメージ図 . . . . .	11
2.4	$2\nu\beta\beta$ と $0\nu\beta\beta$ のファインマン図 . . . . .	12
3.1	KamLAND 検出器とその周辺の様子 . . . . .	14
3.2	KamLAND 検出器の概略図 . . . . .	15
3.3	(a)17-inch PMT と (b)20-inch PMT の概略図 . . . . .	17
3.4	KamLAND-Zen の概略図 . . . . .	18
3.5	インナーバルーンの構造 . . . . .	19
3.6	KamLAND-Zen400 フェーズ 1 のエネルギースペクトル . . . . .	21
3.7	KamLAND-Zen400 フェーズ 2 のエネルギースペクトル . . . . .	22
3.8	KamLAND-Zen800 の (Singles Data) エネルギースペクトル . . . . .	23
3.9	KamLAND-Zen800 の (Long-lived Data) エネルギースペクトル . . . . .	24
3.10	KamLAND-Zen800 による有効マヨラナ質量への制限 . . . . .	25
3.11	シミュレーションされた、ROI における XeLS 中の長寿命核背景事象と その発生量 . . . . .	26
3.12	フィルム由来の $^{214}\text{Bi}$ 事象の空間分布 . . . . .	27
3.13	KamLAND2-Zen の検出器概要 . . . . .	29
3.14	インナーバルーンで $^{214}\text{Bi}$ が背景事象となるイメージ図 . . . . .	31
3.15	PEN の透過率と Bis-MSB 有無による発光スペクトルの違い . . . . .	31

4.1	$\sigma_{\text{vertex}}$ のイメージ図 . . . . .	37
4.2	減衰長の比較図 . . . . .	39
4.3	散乱確率の比較図 . . . . .	39
4.4	再発光確率の比較図 . . . . .	40
4.5	発光スペクトル比較図 . . . . .	40
4.6	光量の座標依存性 . . . . .	41
4.7	有効収光量の座標依存性 . . . . .	42
5.1	KamLAND の DAQ の概要 . . . . .	44
5.2	MoGURA ボードの写真 (左) と概略図 (右) . . . . .	46
6.1	ニューラルネットワークのイメージ図 . . . . .	55
6.2	シグモイド関数 . . . . .	56
6.3	ReLU 関数 . . . . .	56
6.4	Bis ありのデータセットに対するジッター補正 . . . . .	60
6.5	Bis なしのデータセットに対するジッター補正 . . . . .	61
6.6	本研究で使用している GNN モデル . . . . .	65
6.7	Bis-MSB 及び PEN を含むデータセットにおけるトレーニングロスのエ ポック変化 . . . . .	71
6.8	Bis-MSB 及び PEN を含むデータセットにおけるトレーニングロス・検証 ロスのエポック変化 (0epoch を除く) . . . . .	71
6.9	Bis-MSB 及び PEN を含むデータセットにおけるエネルギー評価指標のエ ポック変化 . . . . .	72
6.10	Bis-MSB 及び PEN を含むデータセットにおけるエネルギーの広がり評価 指標のエポック変化 . . . . .	72
6.11	Bis-MSB 及び PEN を含むデータセットにおける位置評価指標のエポック 変化 . . . . .	73
6.12	Bis-MSB 及び PEN を含むデータセットにおける検証時のロスのエポック 変化 . . . . .	73

6.13	Bis-MSB 及び PEN を含まないデータセットにおけるトレーニングロスのエポック変化 . . . . .	74
6.14	Bis-MSB 及び PEN を含まないデータセットにおけるトレーニングロス・検証ロスのエポック変化 (0 エポックを除く) . . . . .	74
6.15	Bis-MSB 及び PEN を含まないデータセットにおけるエネルギー評価指標のエポック変化 . . . . .	75
6.16	Bis-MSB 及び PEN を含まないデータセットにおけるエネルギーの広がり評価指標のエポック変化 . . . . .	75
6.17	Bis-MSB 及び PEN を含まないデータセットにおける位置評価指標のエポック変化 . . . . .	76
6.18	Bis-MSB 及び PEN を含まないデータセットにおける検証時のロスのエポック変化 . . . . .	76
7.1	(-180, 0, 0) におけるヒットマップ (wo/ Bis) . . . . .	81
7.2	(-200, 0, 0) におけるヒットマップ (wo/ Bis) . . . . .	82
7.3	(-180, 0, 0) におけるヒットマップ (w/ Bis) . . . . .	82
7.4	(-200, 0, 0) におけるヒットマップ (w/ Bis) . . . . .	83
7.5	(0, 0, -180) におけるヒットマップ (w/ Bis) . . . . .	83
7.6	(0, 0, -200) におけるヒットマップ (w/ Bis) . . . . .	84
7.7	再構成した座標から生成座標を引いた差分のヒストグラム (原点) . . . . .	86
7.8	エネルギー分解能の x 座標依存性 . . . . .	87
7.9	エネルギー分解能の z 座標依存性 . . . . .	88
7.10	x 方向の位置分解能の x 座標依存性 . . . . .	89
7.11	y 方向の位置分解能の x 座標依存性 . . . . .	90
7.12	z 方向の位置分解能の x 座標依存性 . . . . .	91
7.13	XeLS 内で発生させた FlatBeta の、2.37 MeV から 2.64 MeV におけるエネルギーの再構成値と生成エネルギーの値との差分のヒストグラム . . . . .	92
7.14	XeLS 内で発生させた FlatBeta のエネルギー分解能のエネルギー依存性 . . . . .	93
7.15	XeLS 内で発生させた FlatBeta のエネルギー分解能 . . . . .	94
7.16	x 軸方向の位置分解能のエネルギー依存性 . . . . .	95

---

7.17	中性子の位置分解能と Xe 核破碎バックグラウンド除去効率 . . . . .	96
7.18	$\sigma_{\text{vertex}}$ を用いた PID 結果 . . . . .	97

# 表目次

3.1	KamLAND の液体シンチレータ (KamLS) の組成比 . . . . .	15
3.2	PMT の基本性能 . . . . .	17
3.3	KamLAND-Zen 800 の $^{136}\text{Xe}$ 含有液体シンチレータ (XeLS) の組成比 . . . . .	19
6.1	時刻 $T_i$ と電荷 $Q_i$ のクリップ範囲 . . . . .	60
6.2	チューニング対象パラメータ一覧 . . . . .	79

# 第 1 章

## 序論

我々の世界は粒子で構成されており、その中でも最小の構成要素を素粒子と呼ぶ。素粒子は物質を構成するフェルミオンと、主に力を媒介する役割を果たすゲージ粒子に分類することができる。1956年にフレデリック・ライネスとクライド・コーワンにより初めてニュートリノが観測されて以来、様々な実験によってその性質が明らかになってきた。本論文の研究対象であるニュートリノも素粒子の一つだが、電気的に中性であることや質量が極めて小さいこと、標準理論の中では弱い相互作用しかしないことなどから反応断面積が非常に小さく、検出は非常に困難であり、性質の一部は未だ解明されていない。

粒子にはそれぞれ、粒子と衝突すると消失してしまう反粒子が存在する。ニュートリノは、粒子と反粒子が同一であるという性質（マヨラナ性）を持つ可能性があり、マヨラナ性を持つ場合、ニュートリノの質量が他の素粒子に比べて  $10^{-6}$  未満とかなり小さい理由や、現在の宇宙が反粒子ではなく粒子で構成されている（物質優勢宇宙となっている）理由の解明の鍵になる。

ニュートリノの観測には検出の難しさゆえに大型の検出器が用いられる。KamLAND 検出器は約 1 kt の大型液体シンチレータ反ニュートリノ検出器である。2011 年からニュートリノのマヨラナ性を検証するために KamLAND 検出器に二重ベータ崩壊核である  $^{136}\text{Xe}$  を導入し、 $0\nu\beta\beta$  事象を探索する KamLAND-Zen 実験を行っていた。KamLAND-Zen 実験は世界最高感度で  $0\nu\beta\beta$  事象を探索し、2024 年までの探索から  $0\nu\beta\beta$  の半減期に世界で一番厳しい制限をかけているものの、 $0\nu\beta\beta$  事象の検出には至っていない [2]。

そこで更なる背景事象の低減と高感度化を目指した KamLAND2-Zen 実験が計画されて

いる。KamLAND2-Zen 実験では、Xe 保持容器として使用されるフィルム由来の背景事象低減のため、発光性 PEN フィルム製ミニバルーンの導入が検討されている。また、検出光量増加のための集光ミラーの導入、光量子効率 PMT の導入も含めると、KamLAND-Zen 実験に比べて約 5 倍の検出光量が期待されている。それに伴い、解析手法のアップデートも検討されている。PEN フィルムを導入する場合、透過率と KamLAND-Zen で用いられた Xe 入り液体シンチレータの発光波長の関係から、波長変換剤 Bis-MSB を導入することが必要になる。PEN フィルムが発光性を持つことによって PEN フィルム内での吸収・再発光が可能となり、光学過程が複雑になる。その結果、事象再構成（特に位置再構成）が難しくなることが懸念されている。KamLAND-Zen 実験では PMT が検出した光量とその時刻、PMT の個性も考慮し、最尤推定法を用いることで事象の起こった位置とエネルギーを再構成してきた。KamLAND2-Zen 実験では、機械学習による事象再構成を考えている。

本論文では 2 章で前提知識となるニュートリノ物理学と  $0\nu\beta\beta$  崩壊に触れ、3 章で KamLAND-Zen 実験と将来計画である KamLAND2-Zen 実験について述べる。4 章で本研究で用いたシミュレーションについて述べ、5 章で再構成手法について議論する。6 章で本研究で開発した、グラフニューラルネットワーク (GNN) を用いた再構成ツールの詳細を述べる。7 章ではシミュレーションで作成したデータに対する GNN 再構成ツールの性能評価を行う。最後に、8 章で結論と今後の展望を述べる。

## 第 2 章

# ニュートリノ物理学

### 2.1 素粒子物理学におけるニュートリノ

素粒子とは、自然界を形成する物質の最小構成要素を指す。素粒子同士には 4 つの相互作用が存在する。それぞれ強い相互作用、弱い相互作用、電磁相互作用、重力相互作用といひ、4 つのうち重力相互作用以外を用いて素粒子の性質や反応を記述した理論を標準理論という。図 2.1 のように、標準理論において素粒子は 12 種類のフェルミオンと 5 種類のボソンから構成されている。量子場理論では、一般に各粒子には電荷共役 (C 変換) によって定義される反粒子が対応する。しかし、電荷などの加法的量子数がすべて 0 の中性粒子では、粒子と反粒子が同一 (自己反粒子) となる場合があり、光子やヒッグス粒子はその例である。スピンをもつ粒子では、スピン角運動量の運動量方向成分であるヘリシティ

$$h = \frac{\mathbf{S} \cdot \mathbf{p}}{|\mathbf{p}|}$$

により状態を分類できる。例えば、光子 (質量 0・スピン 1) は物理的に  $h = \pm 1$  の 2 状態 (右回り/左回りの円偏光) をもつ。一方、スピン 0 のスカラー粒子 (ヒッグス粒子など) にはヘリシティの自由度は存在しない ( $h = 0$  のみ)。

### 素粒子の標準模型

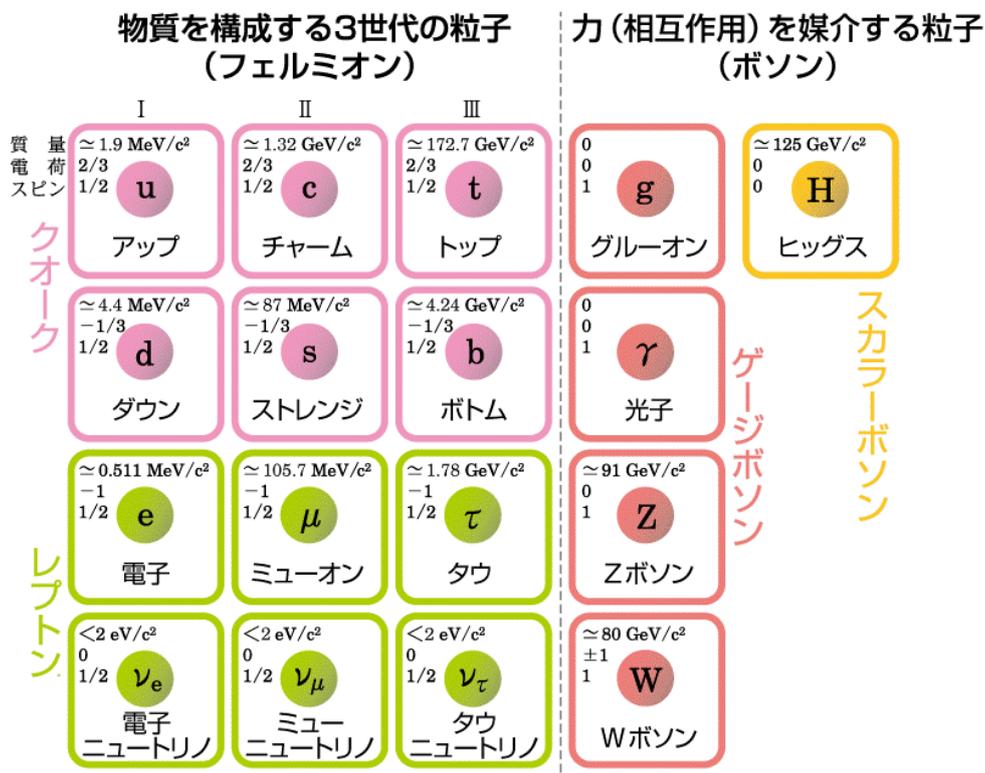


図 2.1: 標準模型に含まれる素粒子 [3]

フェルミオンは半整数のスピンを持つ、物質を構成する粒子であり、ボゾンは整数のスピンを持つ、力を媒介する粒子である。フェルミオンの中でも、クォークには強い相互作用が働くが、レプトンには強い相互作用は働かない。レプトンの中でも電荷を持たない粒子がニュートリノである。ニュートリノは 1930 年にベータ崩壊の連続的なスペクトルを説明するためにパウリ [4] によって提唱され、1956 年にライネス、コーワンが原子炉から発生した反電子ニュートリノを観測したことによりニュートリノが発見された。1957 年にはゴールドハーバーらの実験によりニュートリノのヘリシティの測定が行われ、ニュートリノは全て左巻きであり、反ニュートリノは全て右巻きであることが確認された。このことから、標準理論においてニュートリノは質量を持たず、光速で運動すると考えられていた。

## 2.2 ニュートリノ振動

前節において、標準理論ではニュートリノの質量は 0 であるとされていた。しかし、今日においてニュートリノは有限の質量を持つことが知られている。1968 年、Homestake 実験

では  $^{37}\text{Cl}$  によるニュートリノ捕獲反応を観測することで太陽より飛来する  $\nu_e$  を測定したが、理論予想のおよそ3分の1しか観測されなかった [5]。標準太陽模型の理論予想と測定結果とのズレは太陽ニュートリノ問題と呼ばれた。太陽ニュートリノ問題を説明する仮説として牧二郎、中川昌美、坂田昌一によってニュートリノ振動が唱えられた [6]。ニュートリノ振動現象とはニュートリノのフレーバー固有状態と質量固有状態が異なることで、質量固有状態の重ね合わせであるフレーバーが時間経過によって別のフレーバーに移り変わる現象である。

ニュートリノのフレーバー固有状態  $|\nu_\alpha\rangle$  ( $\alpha = e, \mu, \tau$ ) は質量固有状態  $|\nu_i\rangle$  ( $i = 1, 2, 3$ ) の重ね合わせとして書くことができ、

$$|\nu_\alpha\rangle = \sum_i U_{\alpha i}^* |\nu_i\rangle \quad (2.1)$$

と表される。式 (2.1) における  $U_{\alpha i}^*$  は Pontecorvo-牧-中川-坂田 (PMNS) 混合行列と呼ばれるユニタリ行列であり、

$$U_{\alpha i} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & c_{23} & s_{23} \\ 0 & -s_{23} & c_{23} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_{13} & 0 & s_{13}e^{-i\delta} \\ 0 & 1 & 0 \\ -s_{13}e^{i\delta} & 0 & c_{13} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_{12} & s_{12} & 0 \\ -s_{12} & c_{12} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (2.2)$$

$$= \begin{pmatrix} c_{12}c_{13} & s_{12}c_{13} & s_{13}e^{-i\delta} \\ -s_{12}c_{23} - c_{12}s_{23}s_{13}e^{i\delta} & c_{12}c_{23} - s_{12}s_{23}s_{13}e^{i\delta} & s_{23}c_{13} \\ s_{12}s_{23} - c_{12}c_{23}s_{13}e^{i\delta} & -c_{12}s_{23} - s_{12}c_{23}s_{13}e^{i\delta} & c_{23}c_{13} \end{pmatrix}$$

と書くことができる。ここで混合角を  $\theta_{ij}$  とし、 $s_{ij} \equiv \sin \theta_{ij}$ 、 $c_{ij} \equiv \cos \theta_{ij}$  とする。 $\delta$  は CP 位相であり、CP 対称性の破れを表す。質量固有状態の時間発展はシュレディンガー方程式

$$i \frac{\partial}{\partial t} |\nu_i\rangle = E_i |\nu_i\rangle \quad (2.3)$$

を解くことで

$$|\nu_i(\tau_i)\rangle = e^{-im_i\tau_i} |\nu_i(0)\rangle \quad (2.4)$$

と書ける。ここで  $\tau_i$  は静止系での  $\nu_i$  の時間を表す。実験室系では式 (2.4) の指数関数は

$$e^{-im_i\tau_i} = e^{-i(E_i t - p_i L)} \quad (2.5)$$

と変換できる。 $t, L$  は実験室系での時間、位置を、 $E_i, p_i$  は  $\nu_i$  のエネルギー、運動量を表

す。ニュートリノの質量は十分小さく、相対論的粒子と考えても良いので、 $p_i \gg m_i$ ,  $E \simeq p_i$  として、

$$E_i = \sqrt{m_i^2 + p_i^2} \simeq p_i + \frac{m_i^2}{2p_i} \simeq p_i + \frac{m_i^2}{2E} \quad (2.6)$$

となる。また、自然単位系では  $t \simeq L$  であることから

$$e^{-i(E_i t - p_i L)} \simeq e^{-i(E_i - p_i)L} \simeq e^{-i(m_i^2/2E)L} \quad (2.7)$$

と近似でき、フレーバー固有状態の時間発展は以下のように記述される。

$$\begin{aligned} |v_\alpha(L)\rangle &= \sum_i U_{\alpha i}^* e^{-i(m_i^2/2E)L} |v_i(0)\rangle \\ &= \sum_{i,\beta} U_{\alpha i}^* e^{-i(m_i^2/2E)L} U_{\beta i} |v_\beta\rangle. \end{aligned} \quad (2.8)$$

よって、フレーバー  $\alpha$  が距離  $L$  を伝播したのち  $\beta$  に変化する確率は、

$$\begin{aligned} P(v_\alpha \rightarrow v_\beta) &= |\langle v_\beta | v_\alpha(L)\rangle|^2 \\ &= \left| \sum_i U_{\alpha i}^* U_{\beta i} e^{-i \frac{m_i^2}{2E} L} \right|^2 \\ &= \sum_{i,j} U_{\alpha i}^* U_{\beta i} U_{\alpha j} U_{\beta j}^* \exp\left(-i \frac{\Delta m_{ij}^2}{2E} L\right), \end{aligned} \quad (2.9)$$

となる。ただし  $\Delta m_{ij}^2 \equiv m_i^2 - m_j^2$  は質量の二乗差である。もしニュートリノの質量が0であるならば、この質量の二乗差  $\Delta m^2$  は0であり、ニュートリノ振動の式はユニタリ行列の性質を用いて

$$\begin{aligned} P_{v_\alpha \rightarrow v_\beta}(L, E) &= \sum_{k,j} U_{\alpha k}^* U_{\beta k} U_{\alpha j} U_{\beta j}^* \\ &= \delta_{\alpha\beta} \end{aligned} \quad (2.10)$$

となる。ここで、 $\delta_{\alpha\beta}$  はクロネッカーのデルタであり、 $\alpha \neq \beta$  (異なるフレーバー) への遷移確率は0であることを示している。すなわち、ニュートリノが質量を持たないならばニュートリノ振動は起こり得ない。ニュートリノ振動の観測は、ニュートリノが質量を持つことを示してくれている。

## 2.3 ニュートリノの質量階層構造

ニュートリノ振動実験によりニュートリノにはフレーバー固有状態とは異なる質量固有状態が存在し、 $m_1, m_2, m_3$  の3種類の質量があることが示された。KamLANDなどのニュートリノ実験を通じて質量二乗差などの振動パラメータも得られたが、各ニュートリノの質量は分かっていない。中性レプトンであるニュートリノの中でも、電子ニュートリノのみが物質中において弱い相互作用ポテンシャルの影響を受けて共鳴的な反応を起こす効果をMSW効果（物質効果）といい[7, 8]、これから  $m_1 < m_2$  であることは分かっているが、 $m_2$  と  $m_3$  の大小関係は判明していない。また、以下の振動パラメータによって  $\Delta m_{12}^2 \ll \Delta m_{32}^2$  であることも分かっている。これらの情報から、ニュートリノの質量階層構造には以下の3つのモデルが存在する。そのうち縮退構造以外を図2.2に示す。

- 標準質量階層構造 (Normal Ordering, NO)  $m_1 < m_2 \ll m_3$
- 逆質量階層構造 (Inverted Ordering, IO)  $m_3 \ll m_1 < m_2$
- 縮退構造  $m_1 \approx m_2 \approx m_3$

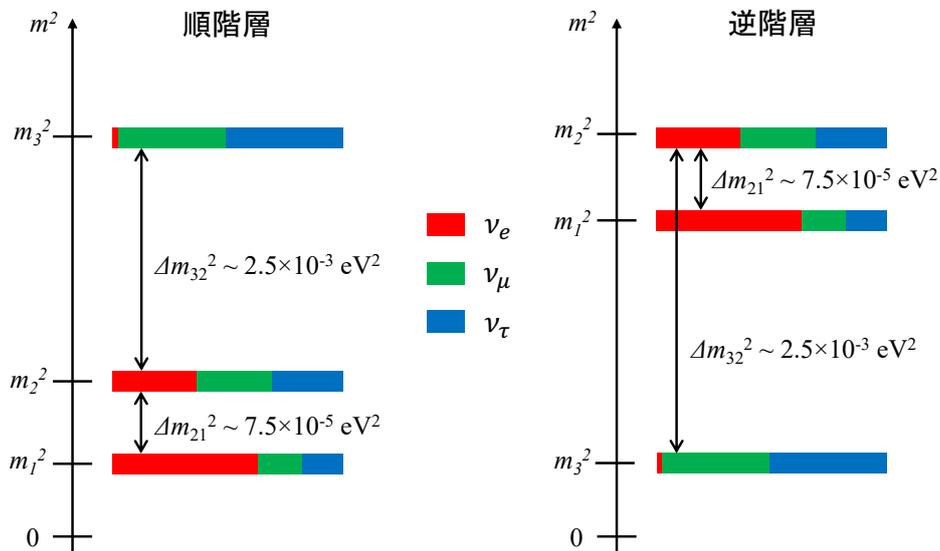


図 2.2: ニュートリノの質量階層構造 [9]。色は各質量固有状態  $\nu_i$  に含まれるフレーバー成分の割合 ( $|U_{\alpha i}|^2$ ) を模式的に示す (赤:  $\nu_e$ 、緑:  $\nu_\mu$ 、青:  $\nu_\tau$ )。縦軸は質量二乗  $m_i^2$  で、振動で決まる二乗質量差  $\Delta m_{21}^2 \approx 7.5 \times 10^{-5} \text{ eV}^2$  と  $|\Delta m_{32}^2| \approx 2.5 \times 10^{-3} \text{ eV}^2$  のスケールを表す。順階層 (左) では  $m_3$  が最も重く、逆階層 (右) では  $m_3$  が最も軽い。

## 2.4 ニュートリノのマヨラナ性

マヨラナ粒子とは 1937 年にマヨラナによって提唱された、粒子と反粒子が同一のフェルミオンのことである [10]。ニュートリノは電氣的に中性であるため、マヨラナ粒子である可能性がある。ニュートリノの波動関数はディラック方程式

$$(i\gamma_\mu \partial^\mu - m)\psi = 0 \quad (2.11)$$

に従う。粒子と反粒子を入れ替える変換である荷電共役変換  $C$  を

$$C: \psi \rightarrow \psi^C = i\gamma^2 \psi^* \quad (2.12)$$

と定義する。ニュートリノがマヨラナ粒子であると仮定すると粒子・反粒子の区別がなくなるので、

$$\psi = \psi^C \quad (2.13)$$

が成り立つ。

カイラリティ射影演算子を  $\gamma_L, \gamma_R$  とすると、ニュートリノの左巻きおよび右巻きカイラリティ成分は

$$\psi_L = \gamma_L \psi \quad (2.14)$$

$$\psi_R = \gamma_R \psi \quad (2.15)$$

で表され、 $\psi = \psi_L + \psi_R$  を満たす。(ここで  $\gamma_L = (1 - \gamma^5)/2$ ,  $\gamma_R = (1 + \gamma^5)/2$ .)

荷電共役変換では以下のようにカイラリティが逆転する。

$$C: \psi_L \rightarrow (\psi_L)^C = i\gamma^2 (\gamma_L \psi)^* = \gamma_R (i\gamma^2 \psi^*) = (\psi^C)_R \quad (2.16)$$

同様に

$$C: \psi_R \rightarrow (\psi_R)^C = (\psi^C)_L. \quad (2.17)$$

となる。

ディラック方程式を満たすラグランジアン密度は

$$\mathcal{L} = \bar{\psi} (i\gamma_\mu \partial^\mu - m)\psi \quad (2.18)$$

と表され、第二項がディラック質量項である。質量項だけを取り出すと

$$\mathcal{L}_{\text{mass}}^{(D)} = -m_D \bar{\psi} \psi = -m_D (\bar{\psi}_L \psi_R + \bar{\psi}_R \psi_L), \quad (2.19)$$

一方、電荷共役を用いると、ゲージ対称性が許す最も一般的なニュートリノの質量項は

$$\mathcal{L}_{\text{mass}} = -\frac{1}{2} (\overline{\psi_L^c}, \overline{\psi_R}) \begin{pmatrix} m_L & m_D \\ m_D & m_R \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_L \\ \psi_R^c \end{pmatrix} + \text{h.c.} \quad (2.20)$$

で与えられる。ここで  $m_D$  はディラック質量、 $m_L$  は左巻きマヨラナ質量、 $m_R$  は右巻きマヨラナ質量である。式 (2.20) の  $2 \times 2$  質量行列を対角化すると、軽い固有状態  $m_\nu$  と重い固有状態  $m_N$  が得られる：

$$m_{\nu, N} = \frac{m_L + m_R}{2} \mp \frac{1}{2} \sqrt{(m_R - m_L)^2 + 4m_D^2}. \quad (2.21)$$

左巻きニュートリノと右巻きニュートリノがそれぞれディラック質量より非常に軽い、重いとするこのような条件  $m_L \ll m_D \ll m_R$  では

$$m_\nu \simeq m_L - \frac{m_D^2}{m_R}, \quad m_N \simeq m_R, \quad (2.22)$$

となり、 $m_\nu$  は  $m_R$  が大きいほど小さくなる (seesaw 機構)。質量行列の対角化で  $m_L$  に負符号が現れる場合があるが、マヨラナ場の位相再定義によって符号を吸収でき、物理的な質量は非負として扱える。

マヨラナ質量項は

$$\mathcal{L}_M^L = -\frac{1}{2} m_L \psi_L^T C \psi_L + \text{h.c.}, \quad \mathcal{L}_M^R = -\frac{1}{2} m_R \psi_R^T C \psi_R + \text{h.c.} \quad (2.23)$$

と書け、レプトン数を  $\Delta L = 2$  だけ破る。一方、ディラック質量は

$$\mathcal{L}^{(D)} = -m_D (\bar{\psi}_L \psi_R + \bar{\psi}_R \psi_L) \quad (2.24)$$

であり  $\Delta L = 0$  を保つ。3 フレーバーの PMNS 行列には以下のようにマヨラナ位相が加わる。

$$\begin{aligned}
 U_{\alpha i} &= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & c_{23} & s_{23} \\ 0 & -s_{23} & c_{23} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_{13} & 0 & s_{13}e^{-i\delta} \\ 0 & 1 & 0 \\ -s_{13}e^{i\delta} & 0 & c_{13} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_{12} & s_{12} & 0 \\ -s_{12} & c_{12} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{i\alpha_1/2} & 0 & 0 \\ 0 & e^{i\alpha_2/2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \\
 &= \begin{pmatrix} c_{12}c_{13} & s_{12}c_{13} & s_{13}e^{-i\delta} \\ -c_{12}s_{23}s_{13}e^{i\delta} - s_{12}c_{23} & -s_{12}s_{23}s_{13}e^{i\delta} + c_{12}c_{23} & s_{23}c_{13} \\ -c_{12}c_{23}s_{13}e^{i\delta} + s_{12}s_{23} & -s_{12}c_{23}s_{13}e^{i\delta} - c_{12}s_{23} & c_{23}c_{13} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{i\alpha_1/2} & 0 & 0 \\ 0 & e^{i\alpha_2/2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (2.25)
 \end{aligned}$$

ここで  $\alpha_1$  と  $\alpha_2$  はマヨラナ位相である。ニュートリノ振動確率は  $U_{\alpha i}U_{\beta i}^*$  の形で PMNS 行列要素の積に依存するが、マヨラナ位相は各列に共通な位相として入るためこの積で相殺され、観測量から消える。そのためニュートリノ振動はマヨラナ位相に感度を持たない。したがって、ニュートリノのマヨラナ性を直接検証するには、ニュートリノと反ニュートリノの同一性が振幅として現れるレプトン数非保存過程、すなわち  $\Delta L = 2$  過程を探索する必要がある。その代表例としてニュートリノを伴わない二重ベータ崩壊反応 ( $0\nu\beta\beta$ ) がある。

## 2.5 ニュートリノを伴わない二重ベータ崩壊

ニュートリノのマヨラナ性を検証するための現実的な方法は、ニュートリノを伴わない二重ベータ崩壊 ( $0\nu\beta\beta$ ) の検出である。原子核内部で

$$n \rightarrow p + e^- + \bar{\nu}_e \quad (2.26)$$

このような反応が起こり、原子核の原子番号が一つ大きなものに変化する現象をベータ崩壊という。ベータ崩壊は親核と娘核の質量差（結合エネルギー差）により放出可能なエネルギー（Q 値）が正のときに起こる。そのため、単独のベータ崩壊が禁止されている原子核も存在する。そのような原子核の中には、2 回のベータ崩壊が同時に起こることで安定な原子核へと変化できるものがあり、そのような原子核を二重ベータ崩壊核という。

素粒子標準模型で許される反応として、図 2.4 にあるような二重ベータ崩壊 ( $2\nu\beta\beta$ ) がある。

$$(Z, A) \rightarrow (Z, A + 2) + 2e^- + 2\bar{\nu}_e \quad (2.27)$$

二重ベータ崩壊は、弱い相互作用の 2 次のプロセスでレプトン数が保存される過程であり、

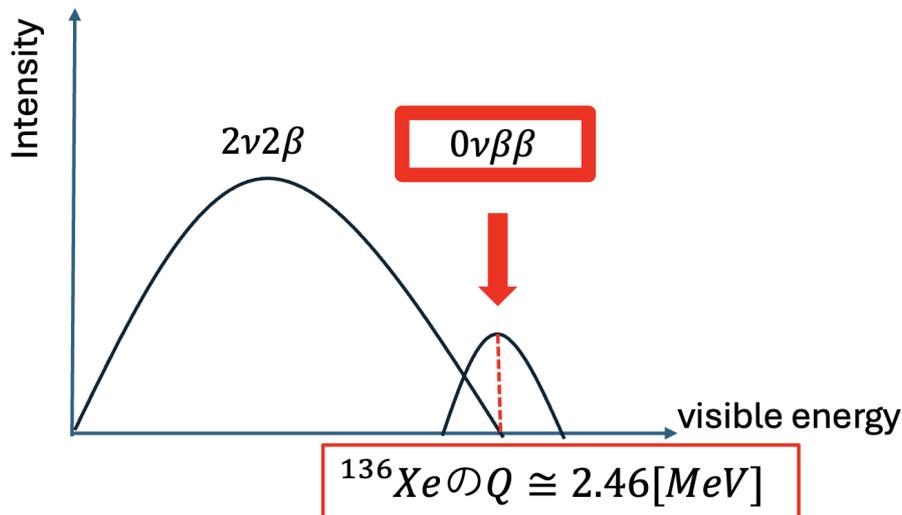


図 2.3: エネルギースペクトルのイメージ図

2 個の電子と 2 個の反電子ニュートリノを同時に放出する。2νββ 崩壊の半減期は核種に強く依存し、概ね  $10^{18}$ – $10^{24}$  年の範囲に分布する [11]。2νββ では崩壊のエネルギー差をニュートリノと電子が持ち去るため、観測される 2 個の電子のエネルギー和は 0 MeV から  $Q$  値まで広がる連続分布となる。一方、ニュートリノを伴わない二重ベータ崩壊 ( $0\nu\beta\beta$ ) はレプトン数が保存しない過程なので素粒子標準模型では許されておらず、ニュートリノがマヨラナ粒子である場合にのみ起こりうる。 $0\nu\beta\beta$  では原子核外にニュートリノを放出しないため崩壊のエネルギー差を電子が全て持ち出し、2νββ のエネルギースペクトルの端に  $0\nu\beta\beta$  の単一スペクトルが現れる。実際の実験では、有限の分解能が存在するため、 $0\nu\beta\beta$  のスペクトルは図 2.3 のように広がって見える。

$$(Z, A) \rightarrow (Z, A + 2) + 2e^- \tag{2.28}$$

世界中で  $0\nu\beta\beta$  探索実験が行われているが、未だ発見には至っていない。

直接発見には至らずとも、 $0\nu\beta\beta$  崩壊の半減期  $T_{1/2}^{0\nu}$  に下限値を設けることで、ニュートリノがマヨラナ粒子だった場合の有効質量  $\langle m_{\beta\beta} \rangle$  に上限値を与えることができる。半減期は  $\langle m_{\beta\beta} \rangle$  を使って

$$\left(T_{1/2}^{0\nu}\right)^{-1} = G^{0\nu} |M^{0\nu}|^2 \langle m_{\beta\beta} \rangle^2 \tag{2.29}$$

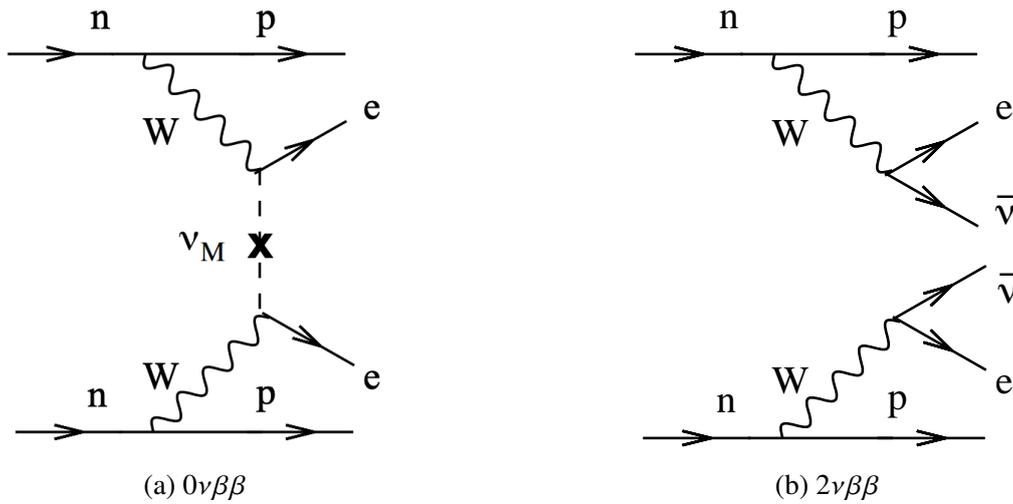


図 2.4:  $2\nu\beta\beta$  と  $0\nu\beta\beta$  のファインマン図 [9]

のように書ける。ここで  $G^{0\nu}$  は位相空間因子、 $M^{0\nu}$  は核行列要素 (NME) である。また、 $\langle m_{\beta\beta} \rangle$  はニュートリノ質量と PMNS 行列を用いて以下のように書ける。

$$\begin{aligned} \langle m_{\beta\beta} \rangle &= \left| \sum_{i=1}^3 U_{ei}^2 m_i \right| \\ &= \left| m_1 |U_{e1}|^2 + m_2 |U_{e2}|^2 e^{i(\alpha_2 - \alpha_1)} + m_3 |U_{e3}|^2 e^{i(-\alpha_1 - 2\delta)} \right| \end{aligned} \tag{2.30}$$

後述する KamLAND-Zen 実験では、図 3.10 に示すように

$$\langle m_{\beta\beta} \rangle < 28 - 122 \text{ meV}$$

という現状最も厳しい制限を与えている [12]。

## 第 3 章

# KamLAND2-Zen 実験

### 3.1 KamLAND 実験

KamLAND(Kamioka Liquid Scintillator Anti-Neutrino Detector) は、岐阜県飛騨市神岡町の池ノ山山頂直下の地下 1,000 m に設置された大型液体シンチレータ反ニュートリノ検出器である。旧カミオカンデ (KamiokaNDE) の跡地を改修して建設され、2002 年より本格的なデータ取得を開始した。KamLAND は飛来してきた反ニュートリノが検出器中の液体シンチレータ (LS) で稀に起こす逆ベータ崩壊反応を用いて検出する実験であり、原子炉や地球内部起源のニュートリノを観測する目的で開始された。主要な成果として、原子炉ニュートリノの観測によるニュートリノ振動の精密測定や、地球内部の放射性元素に由来する地球ニュートリノの初検出が挙げられ、幅広いエネルギー領域のニュートリノ研究を推進してきた。

本検出器の最大の特徴は、世界最高水準の極低放射能環境を実現している点である。材料選定やクリーン化、KamLAND の強みである LS の高純度化によって自然放射線を低減している。

KamLAND は図 3.1 にあるように地下約 1,000 m に位置し、岩盤の遮蔽厚は水換算で約 2,700 m に相当する。この厚い岩盤が背景事象となる宇宙線ミューオンの飛来数を抑えている。

ミューオンは通過時に強い電離損失を起こしてその場で非常に大きな光信号を残すだけでなく、周囲物質や液体シンチレータ中で電磁・ハドロンシャワーを誘発し、中性子や二次粒子が生成される。これらの二次反応が核破砕を引き起こし、炭素などを起源とする不安定核

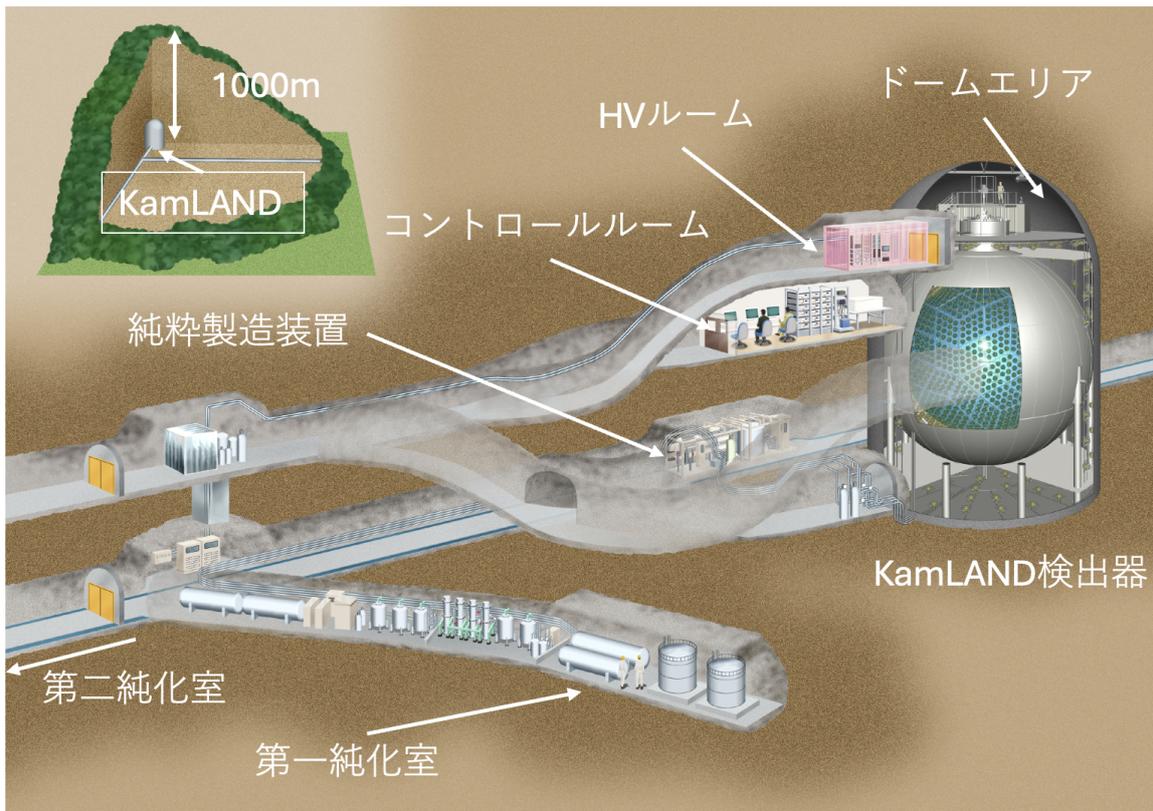


図 3.1: KamLAND 検出器とその周辺の様子

種や放射性同位体を作り出す。宇宙線ミュオンは透過力が高く、検出器内で相互作用して中性子や不安定核を生成し、支配的な背景事象となる。

この岩盤による遮蔽により宇宙線ミュオンのフラックスは地上の約 10 万分の 1 まで低減され、世界最高レベルの低背景事象環境が実現されている。

KamLAND 検出器は、図 3.2 に示すように、直径 18 m のステンレスタンクを境界として内部検出器 (Inner Detector, ID) と外部検出器 (Outer Detector, OD) に分けられる。

### 3.1.1 内部検出器 (ID)

ID は直径 18 m のステンレスタンク内側の領域であり、その中心部には直径 13 m、厚さ 135  $\mu\text{m}$  のバルーンが吊り下げられている。このバルーンはナイロン製であり、アウターバルーン (Outer Balloon) と呼ばれる。アウターバルーン内部には液体シンチレータが約 1 kt 充填されており、後述の Xe 含有液体シンチレータと区別するため KamLS と呼ぶ。

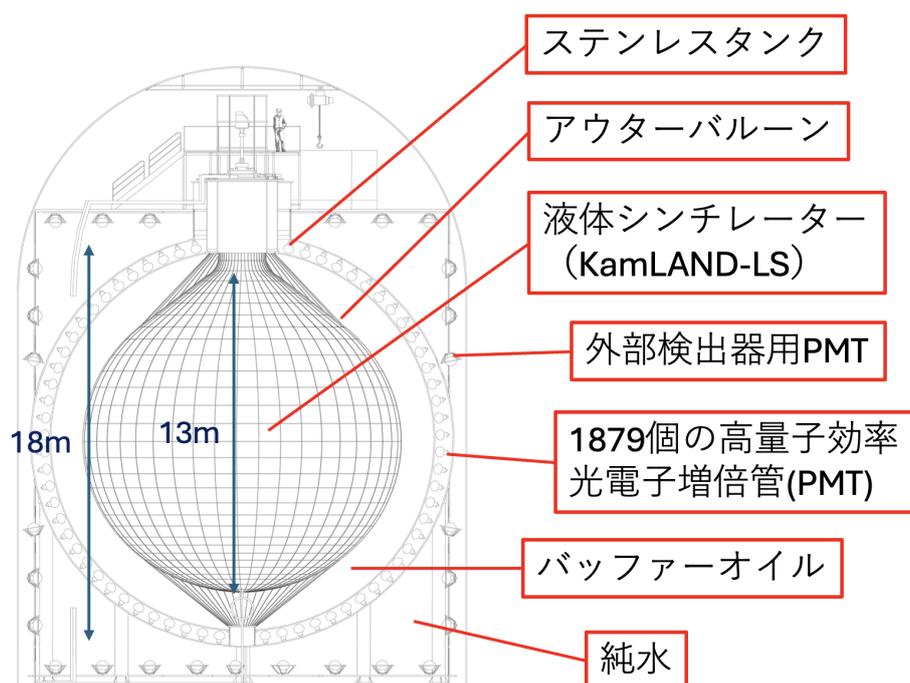


図 3.2: KamLAND 検出器の概略図

表 3.1: KamLAND の液体シンチレーター (KamLS) の組成比

	Decane	Dodecane	PC	PPO	Xe
化学式	$C_{10}H_{22}$	$C_{12}H_{26}$	$C_9H_{12}$	$C_{15}H_{11}NO$	Xe
組成比 (KamLS)	–	80.2%	19.8%	$(1.36 \pm 0.03) \text{ gL}^{-1}$	–

シンチレーターとは荷電粒子が通過した際に発光する物質の総称である。液体シンチレーター (Liquid Scintillator, LS) は、有機溶媒に蛍光物質 (溶質) を溶かし込んだ発光媒質である。KamLAND 実験では大規模化および純化の容易さから、LS を導入している。KamLS の代表的な組成を表 3.1 に示す。有機溶媒として 1,2,4-トリメチルベンゼン (プソイドクメン: PC)、発光溶質として 2,5-ジフェニルオキサゾール (PPO) を用いる。ドデカン (N12) は密度調整および透過率の改善を目的として添加される。

荷電粒子がシンチレーター中でエネルギーを失うと電子が励起され、脱励起して基底状態へ戻る際に等方的にシンチレーション光が放出される。このシンチレーション光をタンク壁面に配置された 1879 本の光電子増倍管 (photomultiplier tube, PMT) で検出し、得られた信号

から事象のエネルギーや頂点などを再構成することで物理現象を探索している。

アウターバルーンの外側にはバッファオイルが充填されている。PMT 表面に接するように設置された厚さ 3 mm のアクリルプレートを境に、内側をインナーバッファ (Inner Buffer Oil, IB)、外側をアウターバッファ (Outer Buffer Oil, OB) と呼ぶ。つまり、PMT は OB の中に配置されている。これらのバッファオイルは PMT やステンレスタンクに含まれる放射性不純物由来の  $\gamma$  線を遮蔽する役割を持つ。また、KamLS に密度を近づけることで、非常に薄いバルーンを機械的に支持する役割も担っている。

アウターバルーンは KamLAND 検出器の ID 中心に吊り下げられている直径 13 m の零状のバルーンである。アウターバルーンは 44 本のケブラーロープに支えられている。強度とガスバリア性を確保するため、ナイロンとエチレン-ビニルアルコール共重合体 (EVOH) の 5 層フィルム (厚さ 135  $\mu\text{m}$ ) で構成されている。

光電子増倍管 (PMT) は、1 光子からの微弱な光を検出可能な数 mV レベルの電気信号に変換・増幅できる真空管デバイスである。PMT に入射した光子が光電面に到達すると光電効果により光電子が放出される。光電子は収束電極で加速されてダイノードに入射し、1 個の電子に対して複数個の 2 次電子が放出される。これを繰り返すことで信号は  $1 \times 10^7$  程度まで増幅され、最終的に陽極で収集されて電気信号となる。KamLAND では 1879 本の PMT によりシンチレーション光を主に観測し、OD ではチェレンコフ光を用いて宇宙線ミューオンを識別する。KamLAND で使用された PMT には、図 3.3 のように 17-inch PMT とカミオカンデ実験で使用されていた 20-inch PMT の 2 種類がある。どちらもガラス管自体の口径 (外径) は 20-inch で共通しており、17-inch には黒いマスクをすることで有効受光面を 17 インチ (直径 430mm) に制限し、外側の領域に光が収光されない設計になっている。表 3.2 にあるように、17-inch ではダイノードの構造がボックス & ラインフォーカス型になっており、収集効率や時間分解能に優れている。20-inch は前身である Kamiokande 実験で使用されていたものに耐油加工を施して再利用している。

### 3.1.2 外部検出器 (OD)

OD は高さ・直径ともに約 20 m の円筒形空洞のうち、ID 領域を除いた部分である。OD は約 3.2 kt の純水で満たされ、検出器周辺岩盤からの高エネルギー中性子や  $\beta$  線、 $\gamma$  線を遮蔽する。OD 壁面には 140 本の PMT が内向きに設置され、水中で生じたチェレンコフ光を

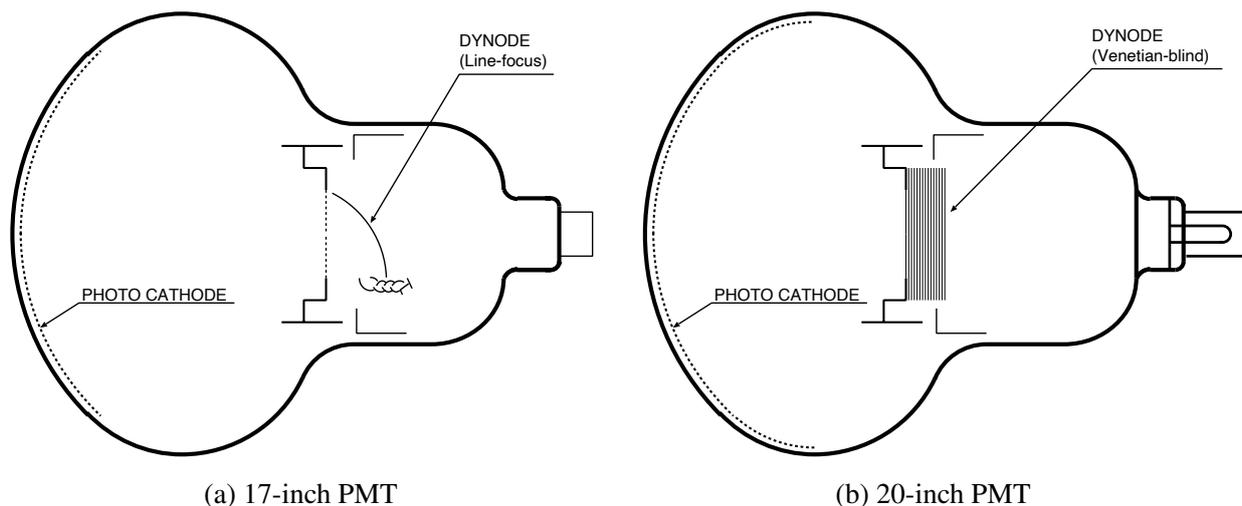


図 3.3: (a)17-inch PMT と (b)20-inch PMT の概略図 [9]

表 3.2: PMT の基本性能

	17 インチ	20 インチ
有効光電面の直径	430 mm	460 mm min.
ダイノードの構造	ボックス&ラインフォーカス型 (10 段)	ベネシアンブラインド型 (13 段)
量子効率 (390 nm)	23%	23%
電子走行時間	110 ns	90 ns
電子走行の時間広がり (FWHM)	3.5 ns	7.7 ns
PV 比	2.5	-
ダークレート	22 kHz	40 kHz
アフターパルス	~3%	~1%

検出することで宇宙線ミューオンをタグし、ミューオン起源背景事象の低減に用いられる。2016 年以前は 225 本の PMT が設置されていたが、老朽化に伴う稼働本数低下を受け、2016 年 1 月から 4 月にかけて改修工事が行われ、140 本体制となった。

### 3.2 KamLAND-Zen 実験

KamLAND-Zen 実験 (Kamioka Liquid Scintillator Anti-Neutrino Detector Zero Neutrino double beta decay search) は、KamLAND 実験装置を用いてニュートリノを伴わない二重

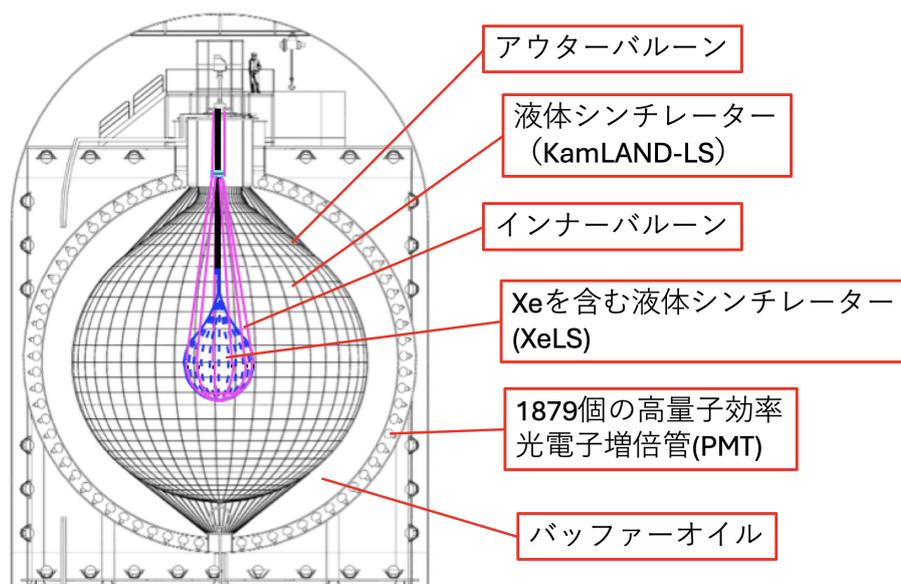


図 3.4: KamLAND-Zen の概略図

ベータ崩壊 ( $0\nu\beta\beta$ ) を探索する実験である。 $0\nu\beta\beta$  の観測は、ニュートリノがマヨラナ粒子である可能性を検証するための主要な実験的手法の一つである。

KamLAND-Zen 実験では、図 3.4 のように KamLAND 検出器 ID の中心部にインナーバルーン (Inner Balloon; 以降 IB) を導入し、その内部に二重ベータ崩壊核  $^{136}\text{Xe}$  を溶かした LS を充填することで  $^{136}\text{Xe}$  の  $0\nu\beta\beta$  を探索する。インナーバルーンの構造を図 3.5 に示す。インナーバルーンの形状は雫型であり、ナイロンフィルムをクリーンルーム内で熱溶着して作成される。

$^{136}\text{Xe}$  を用いる理由として、LS に溶解可能であること、常温での取り扱いが容易であること、純化が可能であること、 $2\nu\beta\beta$  の半減期が長いことなどが挙げられる。 $^{136}\text{Xe}$  を溶かした LS は XeLS と呼ばれる。 $^{136}\text{Xe}$  は最大で 3.2 wt% 溶解することがわかっており、XeLS では 3.13 wt% に調整されている。 $2\nu\beta\beta$  の半減期が短いと、 $2\nu\beta\beta$  の連続スペクトルの端が  $0\nu\beta\beta$  の信号領域に染み出し、信号を覆い隠す背景事象となる。そのため、 $2\nu\beta\beta$  の半減期が長ければ、この染み出しによる背景事象の数を抑えることができ、エネルギー分解能への制限を緩めることができる。

KamLS との組成の違いとして、 $^{136}\text{Xe}$  溶解による密度増加を補正するため、KamLS で用いていたドデカンから密度の小さいデカンへ変更されている。また、 $^{136}\text{Xe}$  の溶解に伴うクエンチングによる発光量低下を補うため、PPO 濃度も KamLS より高く設定されている。

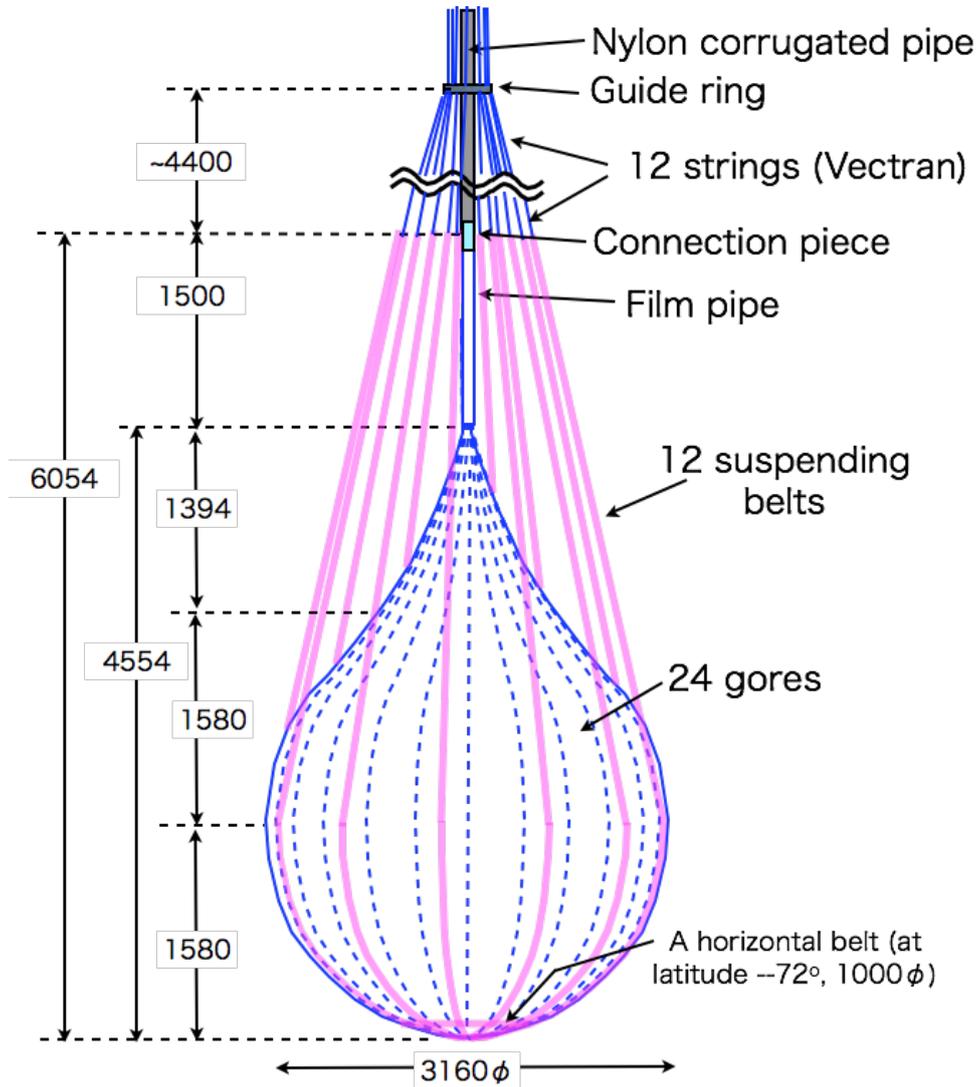


図 3.5: インナーバルーンの構造

表 3.3: KamLAND-Zen 800 の  $^{136}\text{Xe}$  含有液体シンチレータ (XeLS) の組成比

	Decane	Dodecane	PC	PPO	Xe
化学式	$\text{C}_{10}\text{H}_{22}$	$\text{C}_{12}\text{H}_{26}$	$\text{C}_9\text{H}_{12}$	$\text{C}_{15}\text{H}_{11}\text{NO}$	Xe
組成比 (XeLS)	82.4%	–	17.6%	$(2.38 \pm 0.02) \text{ gL}^{-1}$	3.13 wt%

KamLS と XeLS を隔てる IB は、高透過率・強度・低放射性不純物の観点からナイロンフィルムで製作されている。ナイロンフィルムの厚みは  $25\ \mu\text{m}$  である。IB 内に XeLS を閉じ込めることで、太陽ニュートリノや宇宙線など、体積に比例する背景事象を低減できる。Xe 原子核破壊事象は外側材料からのガンマ線 ( $^{208}\text{Tl}$  が放出する  $2.6\ \text{MeV}$  のガンマ線) に由来する背景事象の影響が大きいため、Xe を中心付近に留めたいというモチベーションも存在する。 $0\nu\beta\beta$  信号が期待されるエネルギー範囲を Region Of Interest (ROI) といい、 $^{136}\text{Xe}$  の  $0\nu\beta\beta$  の Q 値は  $2.46\ \text{MeV}$  であることより、本論文では断りのない限り  $2.35\ \text{MeV}$  から  $2.70\ \text{MeV}$  を指す。ROI の範囲はエネルギー分解能に依存するため、将来的にエネルギー分解能が向上した際には狭まることが予想される。KamLAND-Zen 実験は、主に  $^{136}\text{Xe}$  の溶解量によって二つの期間に分けられる。

### 3.2.1 KamLAND-Zen400 実験

KamLAND-Zen400 実験は 2011 年 10 月から 2015 年 10 月まで行われた。この時点では IB 直径は  $3.08\ \text{m}$  であった。運転期間は予期せぬ背景事象への対応のため二つのフェーズに分けられる。

■フェーズ 1 : 2011 年 10 月から 2012 年 6 月まで フェーズ 1 では  $320\ \text{kg}$  の  $^{136}\text{Xe}$  が溶かされた XeLS が用いられていた。2012 年 6 月に運転を中断したのは、自然界に存在しない  $^{110\text{m}}\text{Ag}$  背景事象が確認され、 $0\nu\beta\beta$  の探索が困難になったためである。実験開始後に、エネルギースペクトル上で  $^{136}\text{Xe}$  の二重ベータ崩壊の Q 値付近に想定外のピークが確認された。 $^{110\text{m}}\text{Ag}$  はベータ崩壊を起こし、図 3.6 にあるようにエネルギー領域が  $0\nu\beta\beta$  の ROI と重なるため、深刻な背景事象となることが判明した。調査の結果、2011 年 3 月の福島第一原子力発電所の事故によって放出された放射性物質が、震災直後の 5 月～8 月にかけて行われたインナーバルーンの製作中に付着・混入した可能性が高いと考えられた。2012 年 2 月から濾過（フィルタリング）による除去を試みたが効果がなかったため、2012 年 6 月に実験を一時中断し、第一フェーズと第二フェーズの間の約 18 ヶ月間にわたって、液体シンチレータおよびキセノンガスの大規模な純化作業が行われた。蒸留や液液抽出が行われた結果、 $^{110\text{m}}\text{Ag}$  事象を 10 分の 1 以下にまで低減することに成功し、高感度な探索を継続できる環境が整えられた。

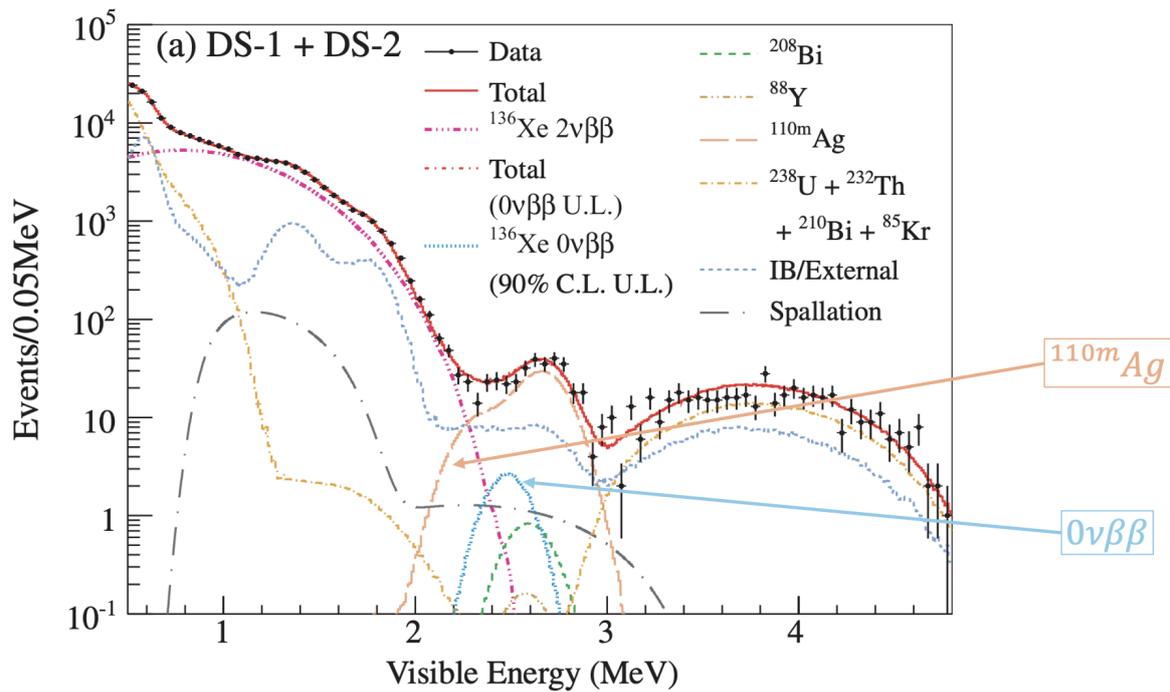


図 3.6: KamLAND-Zen400 フェーズ 1 のエネルギースペクトル [13]

フェーズ 1 の結果として、 $0\nu\beta\beta$  の半減期に対し

$$T_{0\nu\beta\beta}^{1/2} > 1.9 \times 10^{25} \text{ year (90\% C.L.)}$$

という制限を課した。また、マヨラナ有効質量は

$$\langle m_{\beta\beta} \rangle < (120 - 250) \text{ meV}$$

に制限された [13]。

■フェーズ 2 : 2013 年 12 月から 2015 年 10 月まで フェーズ 2 では  $^{136}\text{Xe}$  を約 90% 含む 380 kg の Xe が溶かされた XeLS が用いられた。両フェーズを合わせた解析により、 $0\nu\beta\beta$  の半減期に対し

$$T_{0\nu\beta\beta}^{1/2} > 1.07 \times 10^{26} \text{ year (90\% C.L.)}$$

の制限が、有効マヨラナ質量に対し

$$\langle m_{\beta\beta} \rangle < (61 - 165) \text{ meV}$$

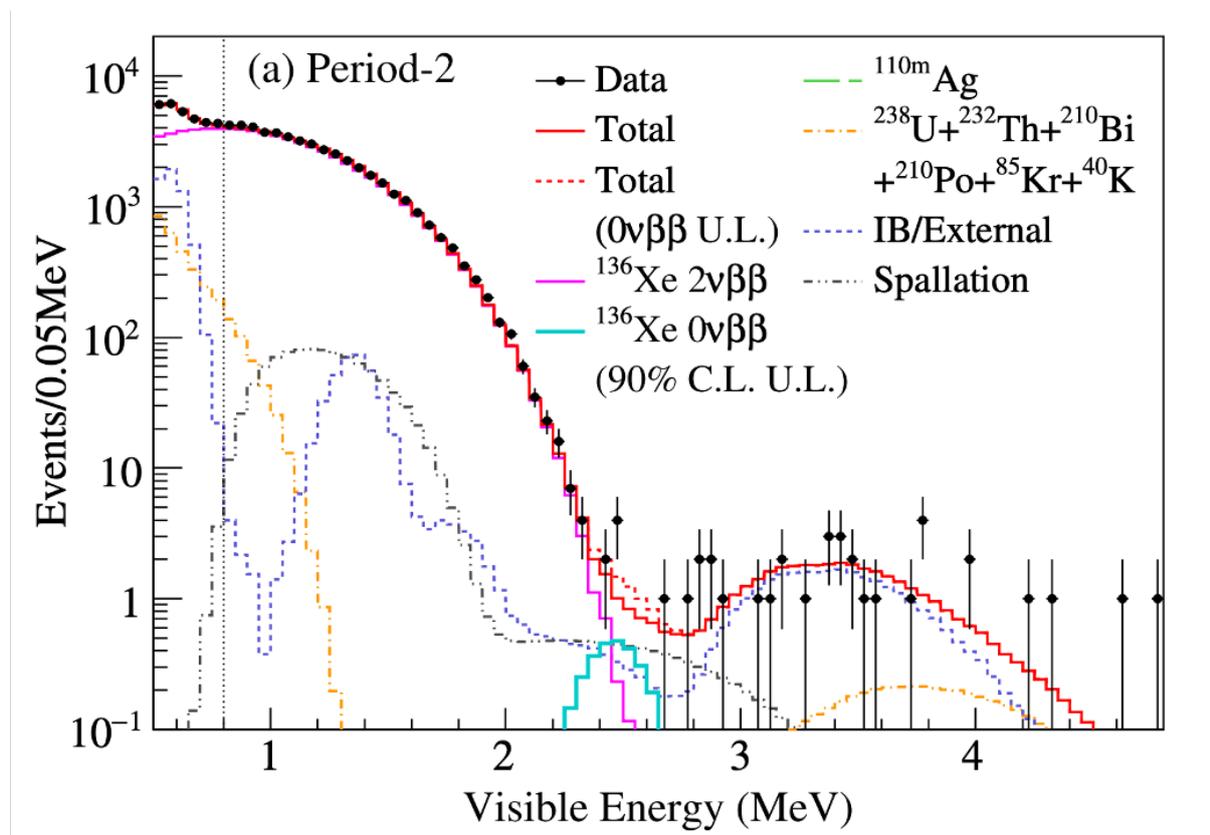


図 3.7: KamLAND-Zen400 フェーズ 2 のエネルギースペクトル [14]。第一フェーズで深刻な問題となった  $^{110\text{m}}\text{Ag}$  由来のバックグラウンドが劇的に減少した。 $^{110\text{m}}\text{Ag}$  が減少したことで、インナーバルーン (IB) フィルムに付着・混入している  $^{214}\text{Bi}$  が ROI における主要なバックグラウンドとして明確に確認された。

の上限が与えられた [14]。フェーズ 2 の観測結果、これ以上の感度を出すにはインナーバルーンをより綺麗にする必要があった。

### 3.2.2 KamLAND-Zen800 実験

KamLAND-Zen800 実験は  $^{136}\text{Xe}$  の溶解量を 745 kg ( $^{136}\text{Xe}$  を 90% 含む) に増やし、2019 年 1 月より開始された。増量に対応するため IB 直径は 3.80 m となり、素材は Zen400 と同様に厚さ 25  $\mu\text{m}$  のナイロンフィルムである。放射性不純物混入を防ぐため、スパーククリーンルームにて細心の注意を払って製作された。光量は KamLS と揃えようとしたが、実際は KamLAND-Zen800 の場合で KamLS より約 10% 低下していることが確認されている。KamLAND-Zen800 実験は 2019 年から 2024 年 1 月までデータを取得し、フルデータセッ

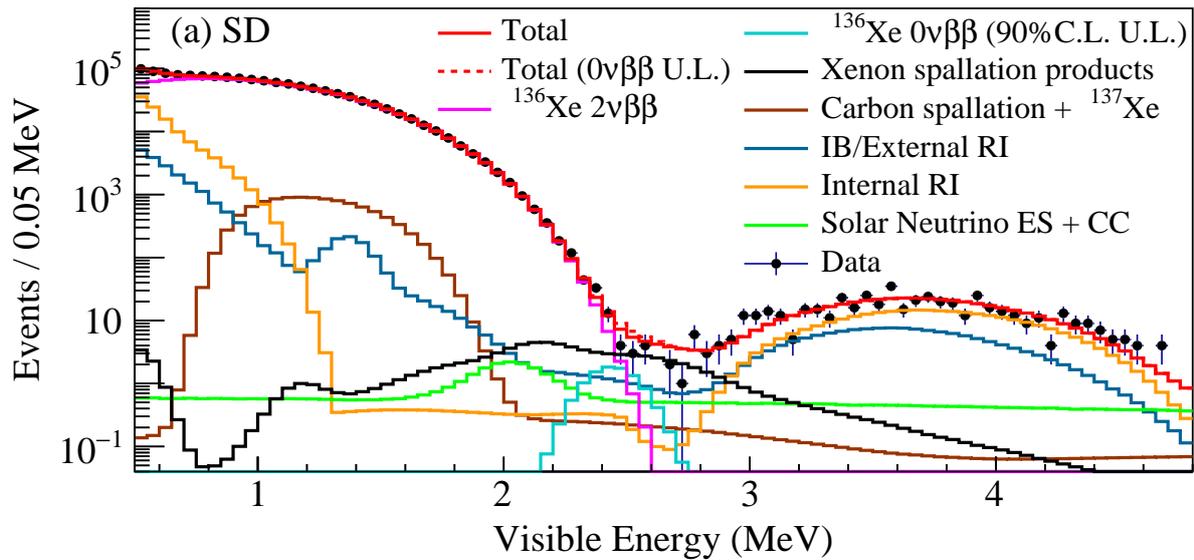


図 3.8: KamLAND-Zen800 の (Singles Data) エネルギースペクトル [12]。原子核破砕ではないと判定された事象のスペクトルであり、 $0\nu\beta\beta$  崩壊の信号を探索するためのスペクトルである。

トは  $^{136}\text{Xe}$  換算で 2.1 tonyear の露光量に相当する [2]。

### 主な成果と感度

フルデータセット解析により、 $0\nu\beta\beta$  崩壊の半減期に対し 90% 信頼度で

$$T_{1/2}^{0\nu} > 3.8 \times 10^{26} \text{ year} \quad (3.1)$$

が得られた。対応する有効マヨラナ質量  $\langle m_{\beta\beta} \rangle$  は 28 - 122 meV に制限された [12]。

KamLAND-Zen 800 実験において、設定された有効体積（半径 1.57 m 以内）および ROI (2.35 - 2.70 MeV) で観測されたイベント数は、データセットの期間によって以下の通り報告されている [2]。

#### 1. 全データセット（2019 年-2024 年）

2019 年 2 月 5 日から 2024 年 1 月 12 日までの全期間データを用いた最新の解析結果では、ROI および有効体積内で合計 60 イベントが観測された。この 60 イベントは、主に以下の背景事象の寄与によるものと見積もられている。

- $^{136}\text{Xe}$  の  $2\nu\beta\beta$  崩壊：およそ 27.68 イベント

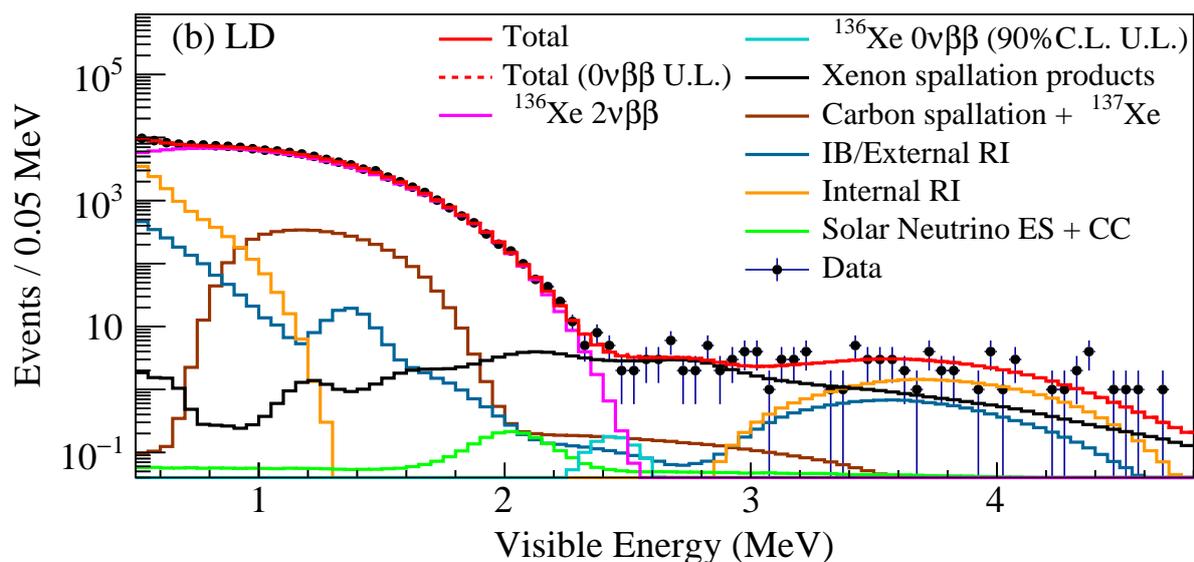


図 3.9: KamLAND-Zen800 の (Long-lived Data) エネルギースペクトル [12]。原子核破碎の可能性が高いと判断された事象のスペクトルであり、背景事象の形や量を正確に決定するための見本として機能している。

- Xe 核破碎：およそ 20.27 イベント
- 外部放射能（ミニバルーン由来など）：およそ 6.65 イベント
- $^8\text{B}$  太陽ニュートリノ（電子弾性散乱）：およそ 3.58 イベント
- 残留放射能（U 系列，Th 系列など）：およそ 1.43 イベント
- 短寿命核破碎事象（ $^{10}\text{C}$ 、 $^6\text{He}$ 、 $^{137}\text{Xe}$  の合計）：およそ 1.27 イベント

## 2. 初期データセット（2019 年-2021 年）

以前の報告（2019 年 2 月-2021 年 5 月の 523.4 日間）における First Result の段階では、同条件（ROI：2.35-2.70 MeV，有効体積：半径 1.57 m 以内）において 24 イベントが観測されていた。

## 背景事象と課題

感度を制限する主要因として、宇宙線ミュオンによる Xe 核破碎生成物（例： $^{132}\text{I}$ 、 $^{118}\text{Sb}$  など）の崩壊事象がある。これらの除去には、中性子多重度、中性子頂点までの距離、および先行ミュオンからの時間差情報を組み合わせた最尤推定法が用いられている。この手法により、長寿命核破碎背景事象は表 3.11 の  $(44.0 \pm 8.7)\%$  が除去される。

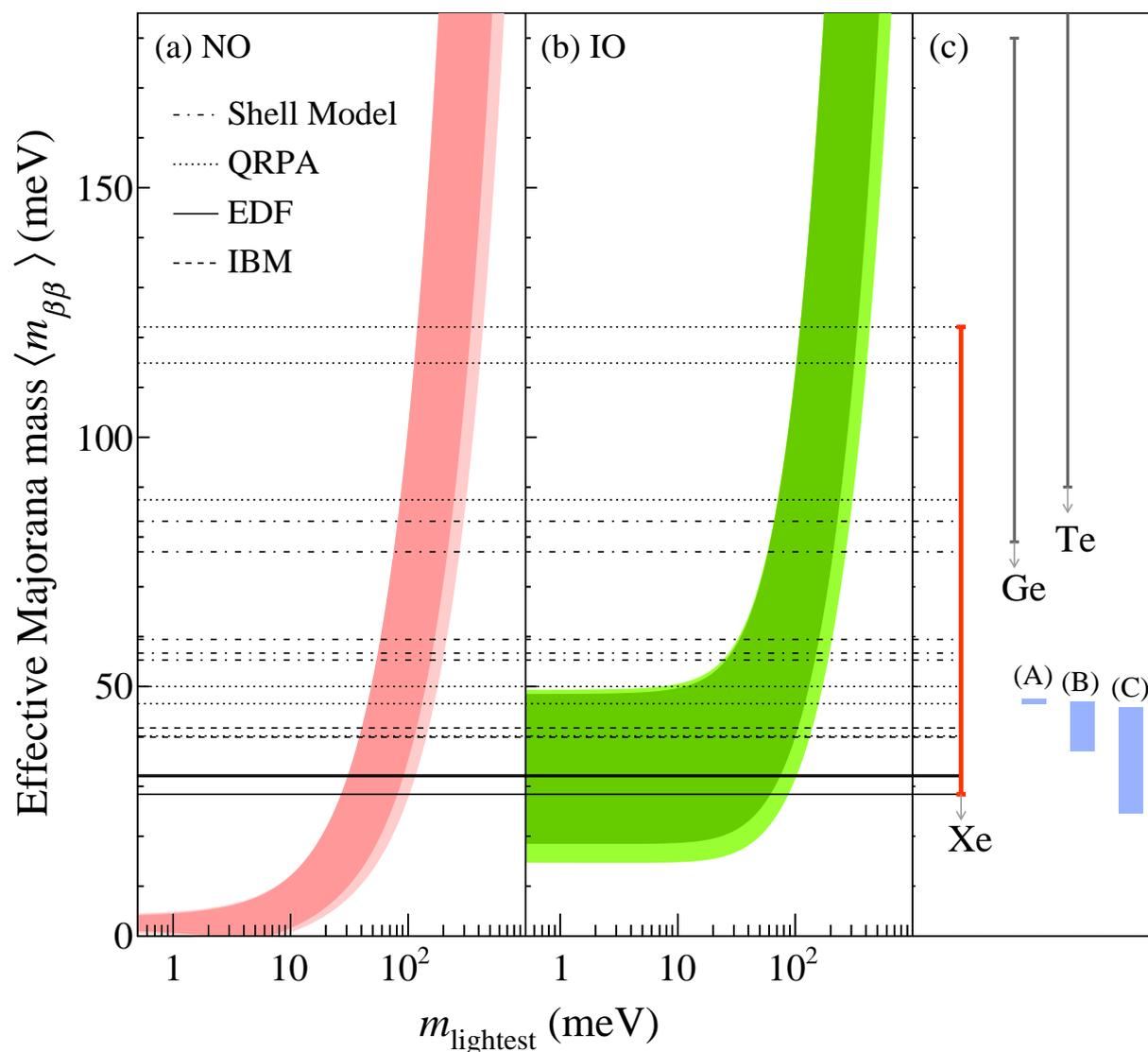


図 3.10: KamLAND-Zen800 による有効マヨラナ質量への制限 [12]。軸の意味：縦軸は有効マヨラナ質量  $\langle m_{\beta\beta} \rangle$  を，横軸は最も軽いニュートリノの質量  $m_{\text{lightest}}$  を表している。図中を斜めに走る色付きの領域は，ニュートリノ振動パラメータから予測される許容範囲である。ピンク色の領域が順階層（NO）に，緑色の領域が逆階層（IO）のモデルに対応している。各バンドの濃い色の部分は振動パラメータのベストフィット値から推定される範囲であり，薄い色の部分は  $3\sigma$  の誤差（不定性）を考慮した範囲を示している。図の上部から横方向に引かれた直線や帯は，KamLAND-Zen などの実験によって得られた有効マヨラナ質量の上限値を表す。直線より上の領域は，実験結果によって既に排除された範囲であることを意味する。

	$\tau_{1/2}$ (s)	$Q$ (MeV)	(kton day) <sup>-1</sup>	
			ROI	Total
<sup>88</sup> Y	$9.212 \times 10^6$	3.62 (EC/ $\beta^+\gamma$ )	0.110	0.136
<sup>90m1</sup> Zr	$8.092 \times 10^{-1}$	2.31 (IT)	0.012	0.093
<sup>90</sup> Nb	$5.256 \times 10^4$	6.11 (EC/ $\beta^+\gamma$ )	0.024	0.095
<sup>96</sup> Tc	$3.698 \times 10^5$	2.97 (EC/ $\beta^+\gamma$ )	0.012	0.059
<sup>98</sup> Rh	$5.232 \times 10^2$	5.06 (EC/ $\beta^+\gamma$ )	0.011	0.076
<sup>100</sup> Rh	$7.488 \times 10^4$	3.63 (EC/ $\beta^+\gamma$ )	0.088	0.234
<sup>104</sup> Ag	$4.152 \times 10^3$	4.28 (EC/ $\beta^+\gamma$ )	0.012	0.160
<sup>104m1</sup> Ag	$2.010 \times 10^3$	4.28 (EC/ $\beta^+\gamma$ )	0.018	0.111
<sup>107</sup> In	$1.944 \times 10^3$	3.43 (EC/ $\beta^+\gamma$ )	0.019	0.135
<sup>108</sup> In	$3.480 \times 10^3$	5.16 (EC/ $\beta^+\gamma$ )	0.089	0.194
<sup>110</sup> In	$1.771 \times 10^4$	3.89 (EC/ $\beta^+\gamma$ )	0.053	0.236
<sup>110m1</sup> In	$4.146 \times 10^3$	3.89 (EC/ $\beta^+\gamma$ )	0.066	0.351
<sup>109</sup> Sn	$1.080 \times 10^3$	3.85 (EC/ $\beta^+\gamma$ )	0.027	0.122
<sup>113</sup> Sb	$4.002 \times 10^2$	3.92 (EC/ $\beta^+\gamma$ )	0.036	0.231
<sup>114</sup> Sb	$2.094 \times 10^2$	5.88 (EC/ $\beta^+\gamma$ )	0.020	0.297
<sup>115</sup> Sb	$1.926 \times 10^3$	3.03 (EC/ $\beta^+\gamma$ )	0.031	0.839
<sup>116</sup> Sb	$9.480 \times 10^2$	4.71 (EC/ $\beta^+\gamma$ )	0.071	0.939
<sup>118</sup> Sb	$2.160 \times 10^2$	3.66 (EC/ $\beta^+\gamma$ )	0.165	1.288
<sup>124</sup> Sb	$5.201 \times 10^6$	2.90 (EC/ $\beta^-\gamma$ )	0.016	0.054
<sup>115</sup> Te	$3.480 \times 10^2$	4.64 (EC/ $\beta^+\gamma$ )	0.012	0.124
<sup>117</sup> Te	$3.720 \times 10^3$	3.54 (EC/ $\beta^+\gamma$ )	0.052	0.594
<sup>119</sup> I	$1.146 \times 10^3$	3.51 (EC/ $\beta^+\gamma$ )	0.053	0.533
<sup>120</sup> I	$4.896 \times 10^3$	5.62 (EC/ $\beta^+\gamma$ )	0.091	0.953
<sup>122</sup> I	$2.178 \times 10^2$	4.23 (EC/ $\beta^+\gamma$ )	0.289	1.965
<sup>124</sup> I	$3.608 \times 10^5$	3.16 (EC/ $\beta^+\gamma$ )	0.190	1.654
<sup>130</sup> I	$4.450 \times 10^4$	2.95 ( $\beta^-\gamma$ )	0.195	1.188
<sup>132</sup> I	$8.262 \times 10^3$	3.58 ( $\beta^-\gamma$ )	0.148	0.427
<sup>134</sup> I	$3.150 \times 10^3$	4.18 ( $\beta^-\gamma$ )	0.043	0.183
<sup>121</sup> Xe	$2.406 \times 10^3$	3.75 (EC/ $\beta^+\gamma$ )	0.100	0.540
<sup>125</sup> Cs	$2.802 \times 10^3$	3.09 (EC/ $\beta^+\gamma$ )	0.012	0.266
<sup>126</sup> Cs	$9.840 \times 10^1$	4.82 (EC/ $\beta^+\gamma$ )	0.011	0.080
<sup>128</sup> Cs	$2.196 \times 10^2$	3.93 (EC/ $\beta^+\gamma$ )	0.031	0.229

図 3.11: シミュレーションされた、ROI における XeLS の中の長寿命核背景事象とその発生量。ここでの ROI は 2.35 MeV から 2.70 MeV となっている。[15]

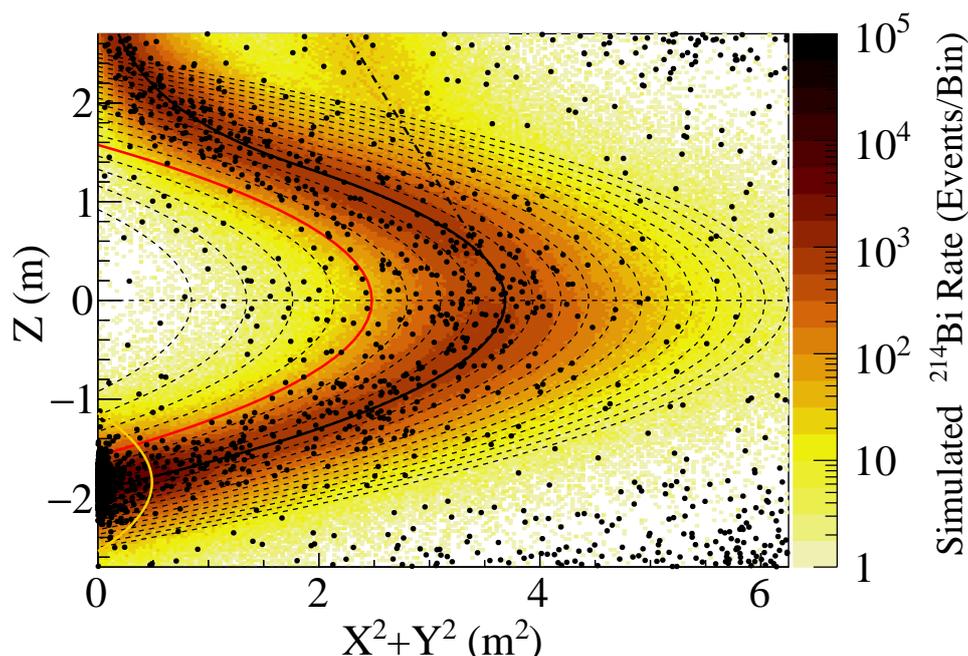


図 3.12: フィルム由来の  $^{214}\text{Bi}$  事象の空間分布。点が再構成後のデータを、ヒストグラムはシミュレーションによって得られた空間分布を表している。

また、 $2\nu\beta\beta$  は連続スペクトルを持ち、エネルギー分解能が有限であるため ( $6.7\%/\sqrt{E} [\text{MeV}]$ )、ROI へ染み出し  $0\nu\beta\beta$  感度を制限する不可避な背景事象となる。さらに、インナーバルーンフィルム中の放射性不純物 (特に  $^{214}\text{Bi}$ ) も背景事象として存在する。

KamLAND-Zen800 実験は完了し、現在はさらなる感度向上と背景事象低減を目指した KamLAND2-Zen 実験の準備が進められている。上記の課題を改善するために KamLAND2 では検出器の各要素を大規模に刷新する。それを KamLAND2-Zen 実験の概要と同時に説明する。

### 3.3 KamLAND2 実験

KamLAND2 実験は、2002 年から運用されてきた KamLAND 検出器を全面的に刷新するハードウェアのアップグレード計画である。刷新される内容として、高量子効率 PMT (HQE-PMT) の導入や、PMT 周りへの集光ミラーの設置が挙げられる。これにより集光量の増加を目指している。

## 3.4 KamLAND2-Zen 実験

### 3.4.1 検出器の感度向上策

KamLAND2-Zen ではエネルギー分解能を向上させ、主要な背景事象である  $^{136}\text{Xe}$  の  $2\nu\beta\beta$  崩壊事象が信号領域へ染み出すのを最小化することが重要である。そのため、光量を 5 倍に増加させることにより、Q 値付近でのエネルギー分解能を現在の 4.2% から約 2% に改善することを目標としている。

光量増加は主に以下の要素で達成される。

1. 高量子効率 (HQE) PMT の導入：現在の PMT の量子効率 (QE) の最大値が約 20% であるのに対し、QE の最大値を 30% 以上に向上させた新型 PMT を導入し、光収集量の増加を図る。
2. 集光ミラーの導入：既存の PMT 被覆率 (34%) を改善するため、多角形状の集光ミラーを PMT に取り付ける。
3. 波長変換剤と発光性インナーバルーンの導入：Xe による発光量減少に対して第一発光溶質である PPO の増加を行うことが有効である [1]。インナーバルーン内部にのみ Bis-MSB を導入し、外側の KamLS には入れない方針が決定している [1]。これらの効果で 1.37 倍の検出光量増加が見込まれている。その他にも KamLS の純化による光量増加も期待されている。

図 3.13 にあるように、ID 領域の PMT の本数は 1879 本から 1885 本に増やされる。また、KamLAND 検出器の時には 17-inch PMT と 20-inch PMT の 2 種類が使用されていた。KamLAND2 以降では新型 20-inch PMT に統一される。

### 3.4.2 背景事象低減戦略

光収集量の増加による  $2\nu\beta\beta$  染み出し抑制に加え、主要な背景事象に対しても対策が計画されている。

1. 発光性インナーバルーン (PEN フィルム) の導入 ナイロン製バルーンの主要な背景事

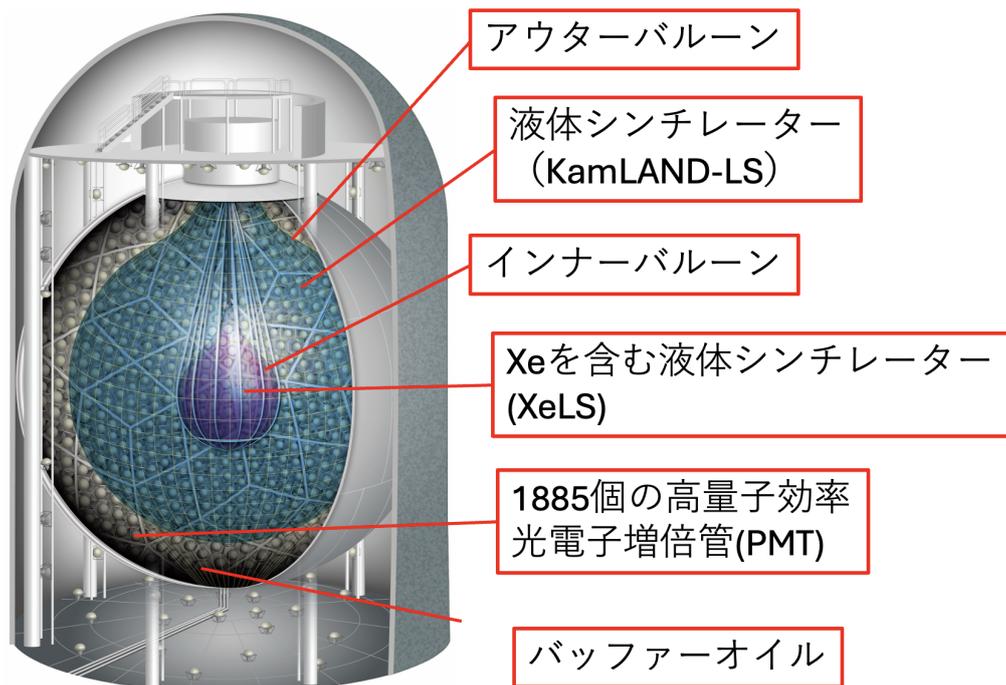


図 3.13: KamLAND2-Zen の検出器概要

象であったフィルム中の  $^{214}\text{Bi}$  崩壊事象を、遅延同時計測により除去することを目的とする。遅延同時計測とは、特定の核種が連続して崩壊する際の時間的・空間的な相関を利用して、背景事象を特定・除去する手法である。

KamLAND で問題となるのは、以下の2つの崩壊系列である。

(1) ウラン系列： $^{214}\text{Bi} \longrightarrow ^{214}\text{Po}$

- $^{214}\text{Bi}$  (先発)： $Q$  値 3.27 MeV のベータ崩壊。これは  $0\nu\beta\beta$  の  $Q$  値 (2.46 MeV) 付近に重なるため、深刻な背景事象となる。
- $^{214}\text{Po}$  (後発)：半減期 164.3  $\mu\text{s}$  (平均寿命  $\tau \approx 237 \mu\text{s}$ ) でアルファ崩壊する。 $\alpha$  線のエネルギーは 7.83 MeV である。

(2) トリウム系列： $^{212}\text{Bi} \longrightarrow ^{212}\text{Po}$

- $^{212}\text{Bi}$  (先発)： $Q$  値 2.25 MeV のベータ崩壊。
- $^{212}\text{Po}$  (後発)：半減期 0.299  $\mu\text{s}$  (299 ns) という極めて短い時間でアルファ崩壊する。 $\alpha$  線のエネルギーは 8.95 MeV である。
- パイルアップ事象： $^{212}\text{Po}$  の寿命が非常に短いため、 $^{212}\text{Bi}$  の信号と  $^{212}\text{Po}$  の

信号が同一のイベントとして重なって観測（パイルアップ）されることが多い。合算されたエネルギーが  $0\nu\beta\beta$  領域の背景事象となりうる。

従来のナイロンフィルムでは、娘核  $^{214}\text{Po}$  の  $\alpha$  線がフィルムに吸収され検出できなかった。シンチレーション性能を持つポリエチレンナフタレート (PEN) フィルムを用いることで、フィルム中の崩壊事象もフィルムのシンチレーション光により検出が可能のため、 $^{212}\text{Bi}$ - $^{212}\text{Po}$  事象の識別能力の向上が期待される。また、図 3.15 にあるように PEN フィルムは LS の発光波長域で透過率が低いため、波長変換剤として Bis-MSB を LS に添加し、発光波長を長波長側（400 nm ~ 450 nm）へシフトさせる。最適濃度は光量・費用・放射性不純物含有量のバランスから 15 mg/L 程度とされている [1]。これにより  $^{214}\text{Bi}$  背景事象を 99.7% 除去し、検出器の全領域 (FV 100%) を探索に使用できる見通しである [16]。

2.  $^{212}\text{Bi}$ - $^{212}\text{Po}$  パイルアップ事象の除去 (PSD) 発光性インナーバルーン導入に伴い、フィルム中の  $^{232}\text{Th}$  系列由来の  $^{212}\text{Bi}$ - $^{212}\text{Po}$  パイルアップ事象が新たな課題となる。この事象は LS と PEN の混合発光波形を持つため、両者の発光波形差を利用した波形弁別法 (PSD) が有効である [17]。
3. Xe 核破砕背景事象の低減 宇宙線ミューオンによる  $^{136}\text{Xe}$  原子核破砕で生じる長寿命不安定核の崩壊は、KamLAND-Zen における主要な背景事象の一つである。光量増加に伴う中性子検出効率・位置分解能の向上に加え、機械学習を用いた識別手法の開発が進められている [18]。これにより、現在の除去効率 40% 程度から最大 65% 程度まで向上することが見込まれている。

### 3.4.3 期待される感度

これらの改良により、KamLAND2-Zen 実験は  $0\nu\beta\beta$  探索感度の大幅な向上を目指している。10 年間の測定により到達感度は  $T_{1/2}^{0\nu} > 1.0 \times 10^{27}$  year を目標とする。それに対応して

$$\langle m_{\beta\beta} \rangle \simeq 20 \text{ meV} \quad (3.2)$$

が掲げられている。

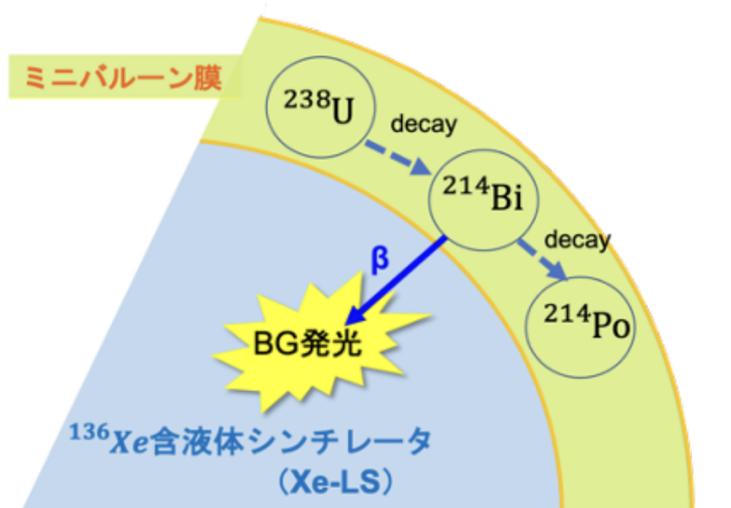


図 3.14: インナーバルーンで  $^{214}\text{Bi}$  が背景事象となるイメージ図 [19]

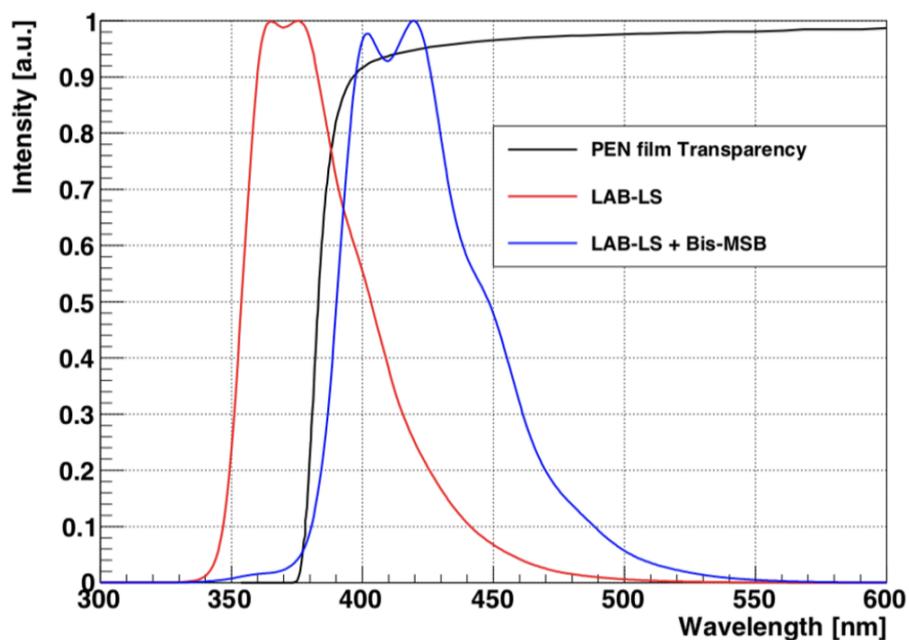


図 3.15: PEN の透過率と Bis-MSB 有無による発光スペクトルの違い [19]

## 第 4 章

# KamLAND2-Zen シミュレーション

### 4.1 KamLAND-Geant4 (KLG4)

KLG4 (KamLAND Geant4) は、Geant4 をベースとした粒子相互作用から検出器応答まで含む検出器シミュレーションであり、KamLAND 検出器応答の詳細なシミュレーションを行うために開発された。

Geant4 とは、素粒子や原子核などの粒子が物質中を通るときに起こる相互作用を、モンテカルロ法で追跡・シミュレーションするための C++ ツールキットである。高エネルギー物理だけでなく、医療などの分野でも広く使われている [20]。

KamLAND2-Zen 実験では、極めて稀な  $0\nu\beta\beta$  崩壊事象を  $2\nu\beta\beta$  崩壊や環境放射線等の背景事象から識別する必要がある。シミュレーションの信頼性を担保するために、以下の項目を高精度で再現することを目指している。

1. 粒子相互作用の完全追跡：電子、ガンマ線、中性子等の検出器内での散乱・吸収過程
2. 光学過程の詳細シミュレーション：シンチレーション光・チェレンコフ光の生成、伝播、検出
3. 検出器応答の再現：材料のパラメータや光学応答、PMT（光電子増倍管）の量子効率、時間応答、位置依存性
4. 背景事象評価：検出器材料中の放射性不純物による事象

### 4.1.1 幾何構造と材料物性

■幾何構造 KLG4 には KamLAND の幾何構造が含まれており、XeLS、インナーバルーン、KamLS、アウターバルーン、PMT などの情報がある。それらのどれを使うか決めることによって、KamLAND 検出器から KamLAND2-Zen 検出器まで使用する幾何構造を選択することができる。

■材料物性情報 シンチレーション光の空間伝搬を再現するために各材料について物性情報を定義している。その際、各材料について以下のようなパラメータが 200 - 700 nm の波長の光子に対するパラメータとして定義されている。

- 屈折率 (**RINDEX**) : 波長ごとの屈折率。
- 減衰長 (**ABSLENGTH**) : 波長ごとの減衰長。
- 散乱係数 (**OPSCATFRAC**) : レイリー散乱の確率。
- 発光スペクトル (**SCINTILLATION**) : シンチレーション光の波長分布。
- 時定数 : 液体シンチレータの発光時定数として 3 成分の時定数を用いてシンチレーション光の発光時間分布をモデリングしている。

上記のパラメータは KamLS、XeLS が独立に保持しており、KamLS は較正用放射線源を用いたキャリブレーションデータを用いて、チューニングしている。KamLAND-Zen800 の XeLS は、KamLAND-Zen800 で観測された  $^{214}\text{Bi}$  -  $^{214}\text{Po}$  反応を用いてチューニングしている。

### 4.1.2 シミュレーションの物理過程

#### 粒子追跡と電磁相互作用

KLG4 は、Geant4 標準の電磁相互作用モデルを基礎として、以下の物理過程を実装している。

電離損失 (Ionization) 荷電粒子が物質中を通過する際、原子の電離によりエネルギーを失う過程。この過程で生成された励起分子がシンチレーション光の主要な発生源となる。損失率  $dE/dx$  は Bethe-Bloch の式に従い、粒子種、エネルギー、媒質に依存する。

Bethe – Bloch は重い荷電粒子に対する式で、電子には専用の修正式（衝突損失）と放射損失を別に考える必要がある。高エネルギーでは制動放射の寄与が大きくなる。

コンプトン散乱 (Compton Scattering) ガンマ線が外殻電子と非弾性衝突し、エネルギーと方向を変化させる過程。中エネルギー領域 (100 keV – 10 MeV) で支配的であり、事象が空間的に広がる主要因となる。散乱前後のエネルギーは Klein-Nishina 公式で記述される。

光電効果 (Photoelectric Effect) ガンマ線が原子に完全に吸収され、内殻電子を放出する過程。低エネルギー領域 (< 100 keV) で支配的。放出電子のエネルギーは  $E_e = E_\gamma - E_{\text{binding}}$  で与えられる。

制動放射 (Bremsstrahlung) 高エネルギー電子が原子核の電場で減速し、ガンマ線を放出する過程。液体シンチレータ中の臨界エネルギー（電離損失と制動放射が等しくなるエネルギー）は約 100 MeV である。

電子対生成 (Pair Production) 高エネルギーガンマ線 (> 1.022 MeV) が原子核近傍で  $e^+ + e^-$  に変換される過程。生成された陽電子は最終的に電子と対消滅し、511 keV のガンマ線 2 本を放出する。

### クエンチング効果

液体シンチレータでは、粒子が失うエネルギーの全てが光に変換されるわけではない。特に電離密度（線エネルギー付与,  $dE/dx$ ）が大きい荷電粒子ほど、発光が抑制される（クエンチング）。この効果は Birks の法則により経験的に記述され、単位長さあたりの光出力は

$$\frac{dL}{dx} = \frac{S \frac{dE}{dx}}{1 + k_B \frac{dE}{dx}} \quad (4.1)$$

と表される。ここで、 $L$  は光出力、 $S$  は光変換効率を定める比例定数  $k_B$  は材料に固有な Birks 定数である。

クエンチングの強さは、電子に対する相対応答として

$$Q_p(E) \equiv \frac{L_p(E)}{L_e(E)} \quad (\simeq E_{\text{vis}}/E) \quad (4.2)$$

で定義されるクエンチング因子  $Q_p(E)$  により表す。 $Q_p(E)$  は粒子種とエネルギーに依存す

る量であり、MeV 領域では目安として電子・陽電子で  $Q \approx 1$ 、陽子で  $Q \approx 0.1$ 、 $\alpha$  粒子で  $Q \approx 0.09$  程度となることが多い。このため、同じ 1 MeV のエネルギー付与でも、粒子種によって可視エネルギーが大きく異なる。

#### 光学過程の詳細モデル

■シンチレーション光生成 電離により励起された分子が基底状態に戻る際、光子を放出する。KLG4 では、エネルギー損失量に比例した光子数を生成し、各光子に対して以下を決定する。

- 波長：発光スペクトルからのサンプリング（ピーク 425 nm、幅約 50 nm）。
- 時刻：3 成分の時定数を用いた指数関数的減衰。
- 方向：等方的な放出（ $4\pi$  立体角）。

光収量 (Light Yield) は約  $1 \times 10^4$  photon/MeV であり、クエンチング効果を考慮した後の可視エネルギーに比例する。

■チェレンコフ放射 荷電粒子が媒質中で光速 ( $c/n$ ) を超えて移動する際に放出される光。液体シンチレータ ( $n \approx 1.5$ ) 中での電子の閾値エネルギーは約 200 keV である。チェレンコフ光は即発光（時間遅延なし）であり、特定の方向性（チェレンコフ角  $\theta_c = \arccos(1/\beta n)$ ）を持つ。

■光子の伝播 生成された光子は検出器内を伝播する過程で、以下の物理過程を経験する。

- レイリー散乱：分子との弾性散乱（波長不変、方向変化）。散乱長は約 10-50 m（波長依存）。
- 吸収：分子による光子の消滅。吸収長は約 10-20 m (420 nm)。
- 再放出：吸収後、異なる波長で再放出される過程（波長シフト）。PMT 量子効率の高い波長へと変換する。
- 境界面での反射・屈折：Snell の法則 ( $n_1 \sin \theta_1 = n_2 \sin \theta_2$ ) に従う。

### 4.1.3 シミュレーションの入出力と物理量

シミュレーションの再現性のため、発生位置は事前に決めて位置ファイルに記録される。位置ファイルから読み込まれる3次元座標  $(x, y, z)$  は、放射性崩壊が発生する生成位置を表す。もう一つのインプットである粒子ファイルには、崩壊で放出される各粒子の種類と初期運動エネルギーが記録されている。

例えば  $^{214}\text{Bi}$  は  $\beta^-$  崩壊により  $^{214}\text{Po}$  の励起状態  $^{214}\text{Po}^*$  を生成し、レプトン数保存のため電子とともに反電子ニュートリノ  $\bar{\nu}_e$  が放出される：



生成された  $^{214}\text{Po}^*$  は脱励起により  $\gamma$  線を放出して基底状態へ遷移する：



ここで  $\gamma(s)$  は1本とは限らず、遷移系列に応じて複数本（カスケード）放出されうることを表す。本研究で用いる粒子ファイルでは、具体例として  $^{214}\text{Bi}$  崩壊から  $e^-$  と2本の  $\gamma$  線が生成されるイベントが含まれ、1つの  $e^-$  と2本の  $\gamma$  線の初期運動エネルギーが記録されている（生成条件により本数は変化し得る）。

放出された粒子は検出器内を伝播し、複数の相互作用点でエネルギーを失う。KLG4は各ステップ（通常1mm程度）で以下を記録する。

- エネルギー損失  $\Delta E$ （電離、散乱等）
- 相互作用点の3次元座標
- 時刻（初期頂点からの経過時間）
- 体積名（XeLS, IB, OB等）

各ステップでのエネルギー損失を蓄積し、エネルギー重心を計算する。 $\sigma_{\text{vertex}}$  は、エネルギー重心から各エネルギー損失へのエネルギー加重平均距離として定義される。つまり、 $\sigma_{\text{vertex}} \approx 0$ ：エネルギーが発生点に集中（例：低エネルギー電子）、 $\sigma_{\text{vertex}} > 0$ ：エネルギーが広範囲に分散（例：高エネルギーガンマ線のコンプトン散乱）を意味する。

$\sigma_{\text{vertex}}$  は、事象の空間的広がりを表す重要な物理量であり、1 MeV 電子で数 mm、1 MeV

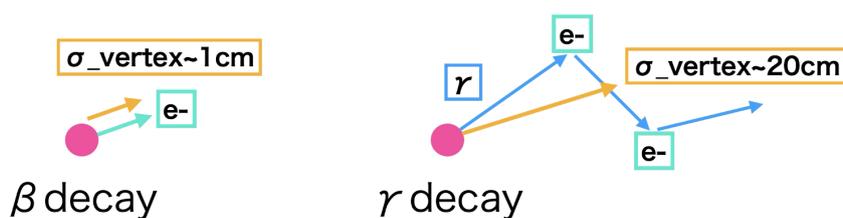


図 4.1: 左の図がベータ崩壊によって電子が放出された時の  $\sigma_{\text{vertex}}$  を表しており、 $\sigma_{\text{vertex}}$  が小さくなる。一方で右の図は  $\gamma$  線が放出された時であり、コンプトン散乱して  $\sigma_{\text{vertex}}$  が大きくなる様子を表している。

ガンマ線で数 cm から数十 cm、中性子で数十 cm の値を取る。 $\sigma_{\text{vertex}}$  が大きい事象ほど、発生点推定の不確実性が増加する。

KLG4 は、Geant4 の強力な粒子追跡機能と、KamLAND-Zen 検出器に特化した光学モデルを統合したモンテカルロシミュレーションシステムである。粒子相互作用から光学過程、PMT 応答、再構成処理に至る全プロセスを高精度で再現することにより、実験データの正確な解釈と物理解析の信頼性を確保している。本システムは、 $0\nu\beta\beta$  崩壊探索という極めて困難な課題に対し、必要不可欠な基盤を提供するものである。

## 4.2 PEN フィルムと Bis-MSB

発光性 PEN フィルムと波長変換剤 Bis-MSB を使用することにより吸収・再発光が増えるため、検出器内の物理過程は光学的に複雑になる。それによって事象再構成が難しくなってしまうことが懸念されている。この懸念を解消するには、PEN と Bis-MSB を含んだシミュレーションを作成し、そこで発生させたイベントを再構成できることを示すことが必要である。

### 4.2.1 液体シンチレータ

先行研究 [1] では液体シンチレータの原料候補としてリニアアルキルベンゼン (LAB) も研究対象に含まれているが、コスト面から KamLAND2 では現行の LS を使うことが決まっているため、本研究では従来の XeLS に Bis-MSB を添加したものを使用する。Bis-MSB の濃度については先行研究 [1] より 15 mg/L とした。XeLS に関するパラメータには測定され

ていないものもあり、XeLS(w/ Bis-MSB) の減衰長は測定されていたが、XeLS の減衰長は測定されていない。そのため、今回のシミュレーションでは XeLS の減衰長に以前から用いられていた値をそのまま用いた。

#### 4.2.2 インナーバルーンの設定

KamLAND-Zen800 と同じサイズのバルーンを用いる。XeLS(w/ Bis-MSB) を用いている場合にはミニバルーンは PEN フィルムを用い、厚みは  $50\mu\text{m}$  にしている。XeLS(wo/ Bis-MSB) を用いている場合にはナイロン製ミニバルーンを用い、厚さは  $25\mu\text{m}$  としている。光量子効率 PMT とミラーが導入されており、KamLAND2-Zen のジオメトリを用いる際には常時これらが含まれている。

#### 4.2.3 XeLS の設定

PEN と XeLS(w/ Bis)、XeLS(wo/ Bis) についてどのようなパラメータを用いたかをまとめる。XeLS(wo/ Bis) については実測されたパラメータが少なく、理論計算やチューニングベースの値がほとんどである。XeLS(w/ Bis) は先行研究 [1] で測定されているパラメータがいくつかある。チューニングベースとは KamLAND 実験 (XeLS は KamLAND-Zen) で実際の較正データと比較してチューニングした結果を基にしたテーブルのことである。

#### 減衰長

光が  $x\text{ m}$  進んだときに光が透過する割合（透過率） $A(x)$  は以下の式で計算される。

$$A(x) = \exp\left(-\frac{x}{L_{\text{Total}}}\right) \quad (4.5)$$

式 (4.5) における  $L_{\text{Total}}$  が減衰長である。

図 4.2 における青色のグラフが先行研究 [1] における XeLS (w/ Bis) の減衰長の測定結果であり、黄色のグラフがチューニングベースの XeLS (wo/ Bis) の減衰長である。

#### 散乱確率

散乱確率は図 4.3 のように定義されている。減衰長を元にどれくらい直進するかが決まる。そこで散乱されるかどうかがこの散乱確率によって決まる。

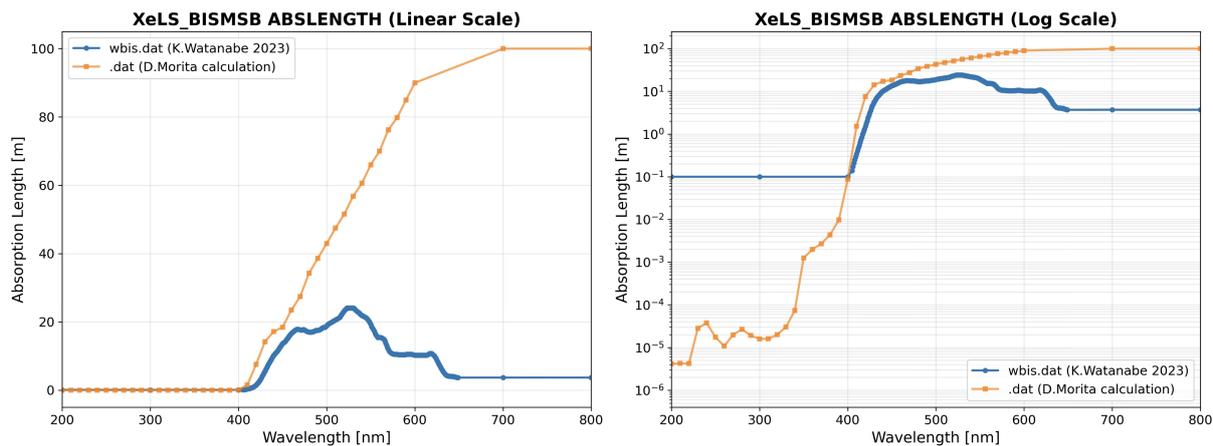


図 4.2: 減衰長の比較図

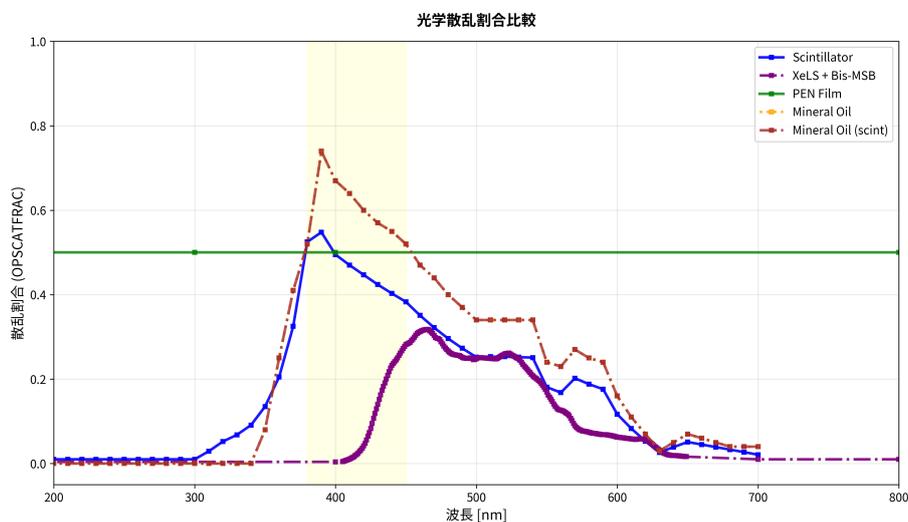


図 4.3: 散乱確率の比較図

### 再発光確率

散乱が起こらなかった場合に、再発光確率に従って再発光が起こる。再発光された場合、放出方向はランダムに選択される。どちらも起こらい光子は吸収される。

### 発光スペクトル

図 4.6 は PEN の厚みを  $50\mu\text{m}$  とした時の  $2.5\text{ MeV}$  の  $\beta$  線事象の光量についての座標依存性を表しており、Bis-MSB および PEN フィルム無しのシミュレーションにおいては、KamLAND-Zen における実際に測定された KamLS と XeLS の光量比が 10:9 であったた

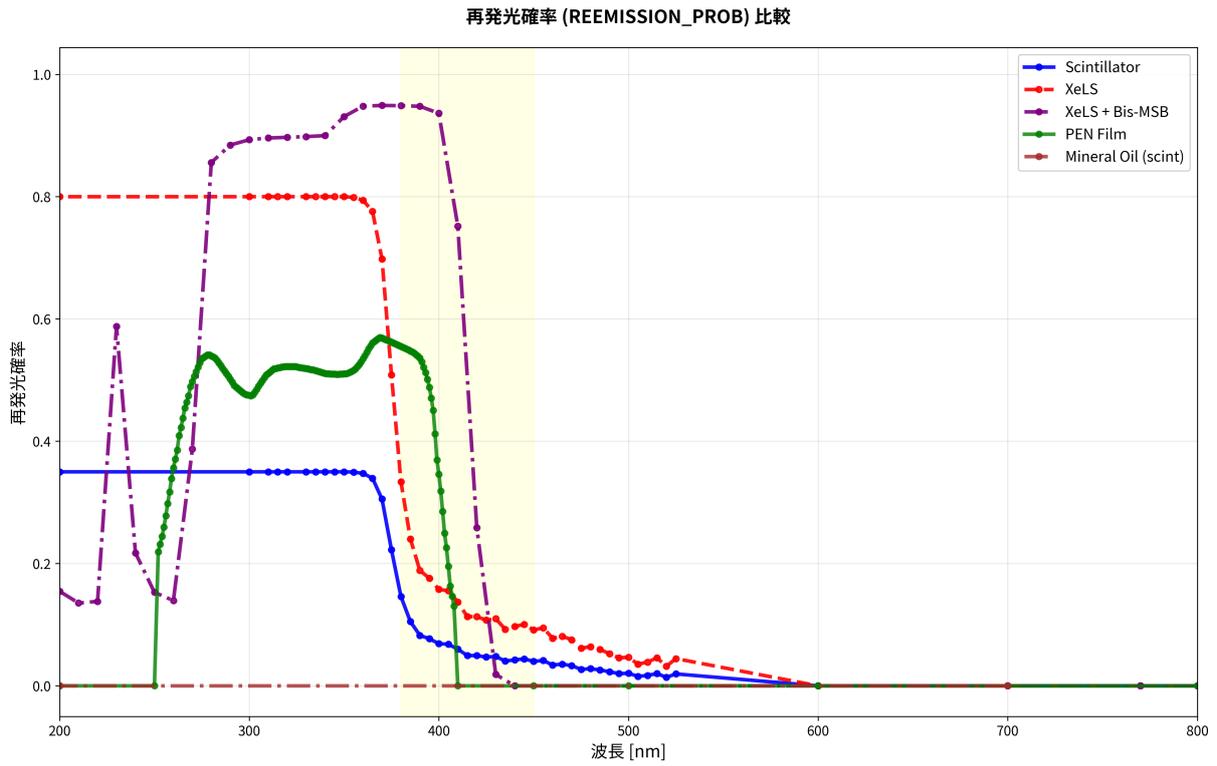


図 4.4: 再発光確率の比較図

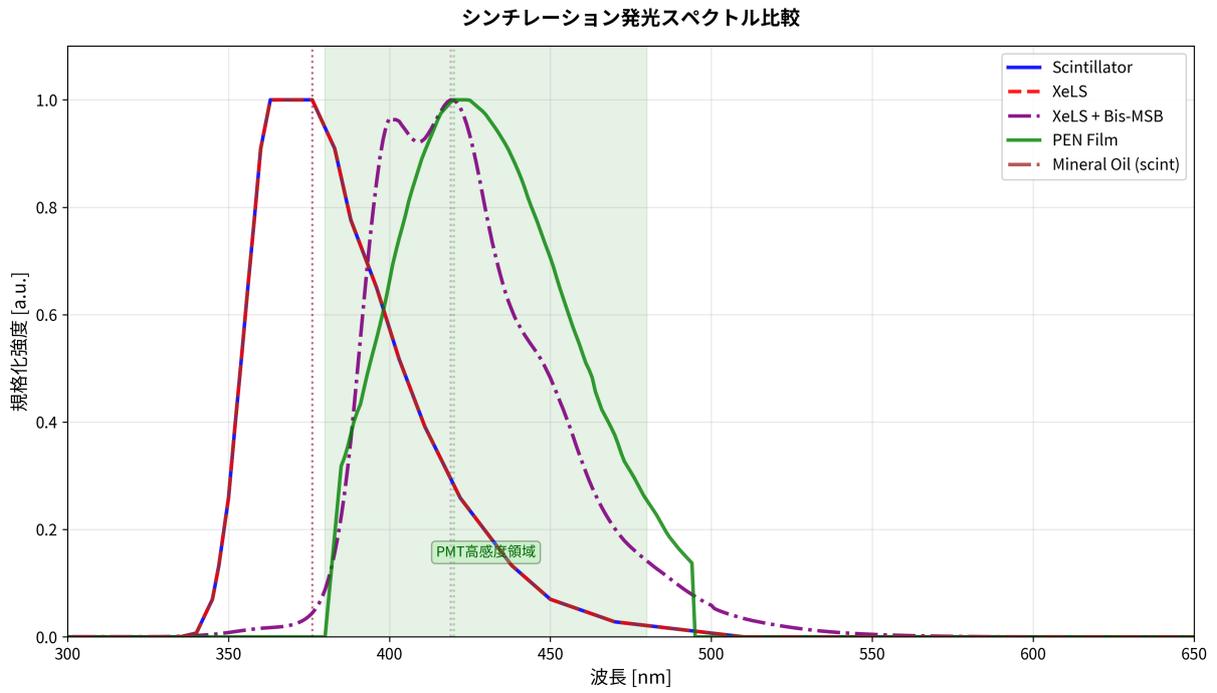


図 4.5: 発光スペクトル比較図

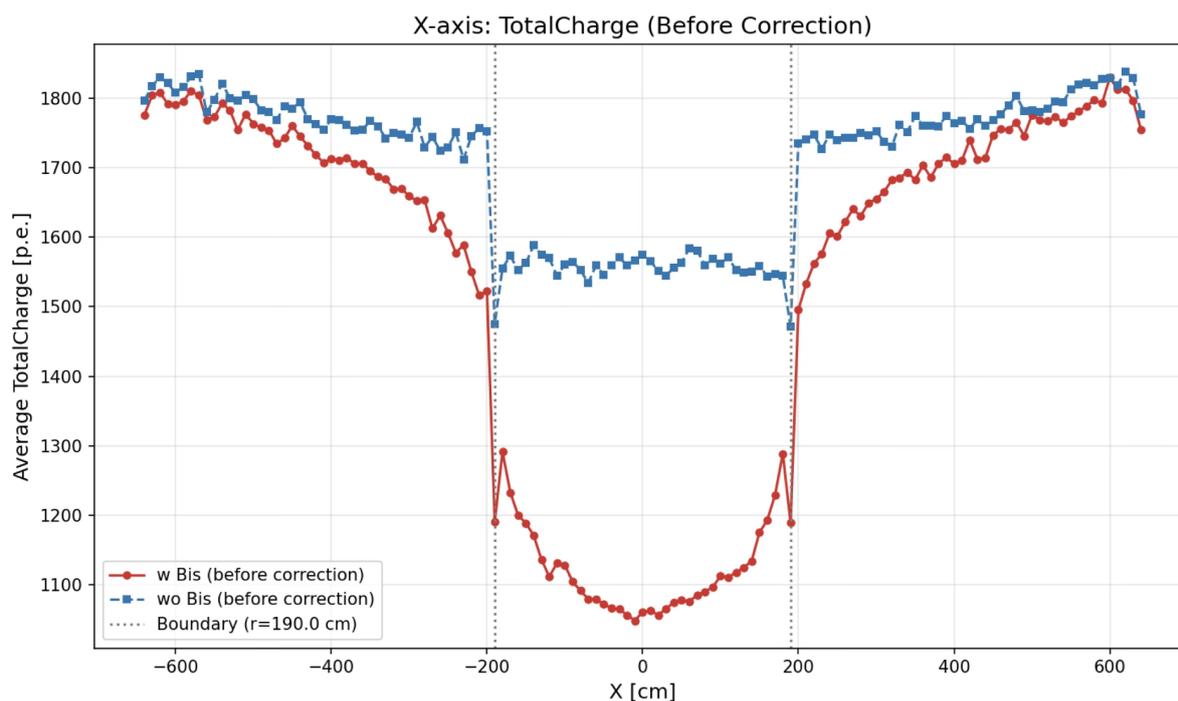


図 4.6: 光量の座標依存性

め、それを再現するように発光量を調整している。

図 4.7 では  $x$  軸上 190 cm にインナーバルーンによる境界が存在する。境界における有効収光量  $\text{p.e.MeV}^{-1}$  が不連続である場合、境界を跨いでエネルギーを落とした時の光量が異なる値となり、事象再構成ができなくなってしまう。そのため、有効収光量  $\text{p.e.MeV}^{-1}$  が連続になることが条件となる。この条件を満たすように光量に対する見かけのエネルギー (visible energy) を定義した。

図 4.7 も 図 4.6 も Bis-MSB 入り XeLS の光量が他の領域、セットアップと比較して非常に小さくなっている。これは Bis-MSB 入り XeLS の減衰長の寄与が大きく、インナーバルーン内部の光量が落ちていると考察している。Bis-MSB 入り XeLS の減衰長はチューニングベースの値ではなく、先行研究 [1] で測定された値を用いている。

本研究で作成したシミュレーションには不十分な点が多く存在する。KamLAND の光量はおよそ  $400 \text{ p.e.MeV}^{-1}$  であり [21]、そこから光量が約 5 倍になるということは、KamLAND2-Zen ではおよそ  $2,000 \text{ p.e.MeV}^{-1}$  の光量を持つことが期待される。図 4.7 と 図 4.6 は両方とも  $2.5 \text{ MeV}$  の  $\beta$  線事象に対しての光量であるため、そもそも光量が大幅に不足していることがわかる。

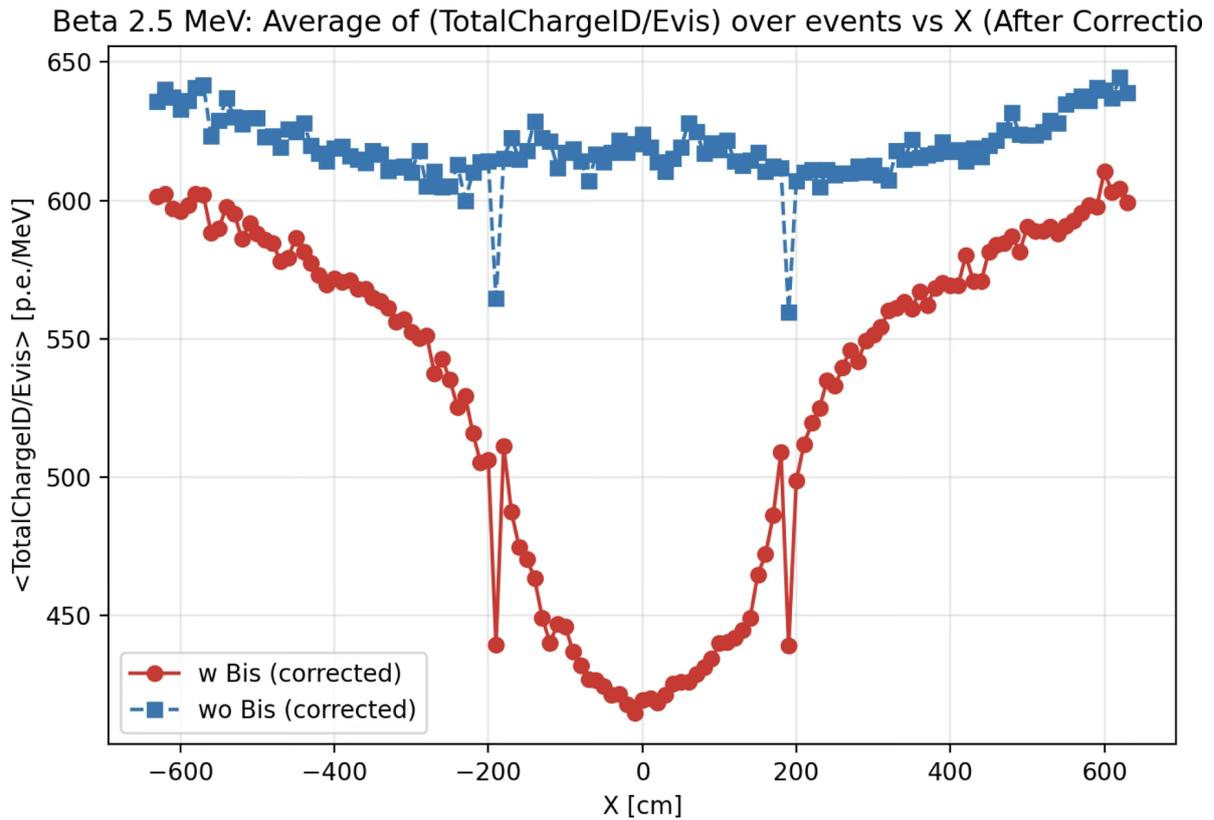


図 4.7: 有効取光量の座標依存性

また、先行研究 [1] では Bis-MSB を入れた方が光量が増加するという結果が得られていたが、実測された Bis-MSB 入り XeLS の減衰長の他にも、いくつかのパラメータを変更したため、光量が少なくなっていると考えられる。KamLS 領域の光量の少なさについては、Bis-MSB 入り XeLS の減衰長だけでは説明できないため、シミュレーション全体に関わる改善点があると予想される。

シミュレーションの光量不足を発光量で補うことも可能であるが、シミュレーションの実行時間や計算リソースの関係上、本研究では現時点でのパラメータを用いたシミュレーションを使った。

## 第 5 章

# 再構成手法

### 5.1 データ収集システム

KamLAND では 2 つのデータ収集システム (DAQ、Data Acquisition) が並行して稼働している。1 つ目は KamDAQ と呼ばれるものであり、KamFEE (KamLAND Front-End Electronics) を用いて KamLAND 実験開始時 (2002 年 1 月) から使用されている。2 つ目は MogDAQ と呼ばれ、MoGURA (Module for General-Use Rapid Application) を用いた DAQ システムである。MoGURA は宇宙線ミュオンによって生じるオーバーシュート、アフターパルスに対応するために作られたフロントエンド回路であり、2010 年 8 月から導入されている。

#### 5.1.1 KamDAQ および KamFEE

KamDAQ は、実験開始当初から使用されているデータ収集システムである。KamDAQ は KamFEE とトリガー回路、及び GPS レシーバーなどその他の構成要素からなるデータ収集システムである。PMT のアナログ信号は、図 5.1 のように KamFEE (KamLAND Front-End Electronics) と呼ばれる独自開発のフロントエンド回路に入力される。KamFEE は KamLAND 検出器のために独自開発されたデータ取得回路であり、KamLAND の全ての PMT が接続されている。

##### 1. 信号処理とダイナミックレンジ :

- KamFEE ボードは、40 MHz クロックで動作し、1 ボードあたり最大 12 チャン

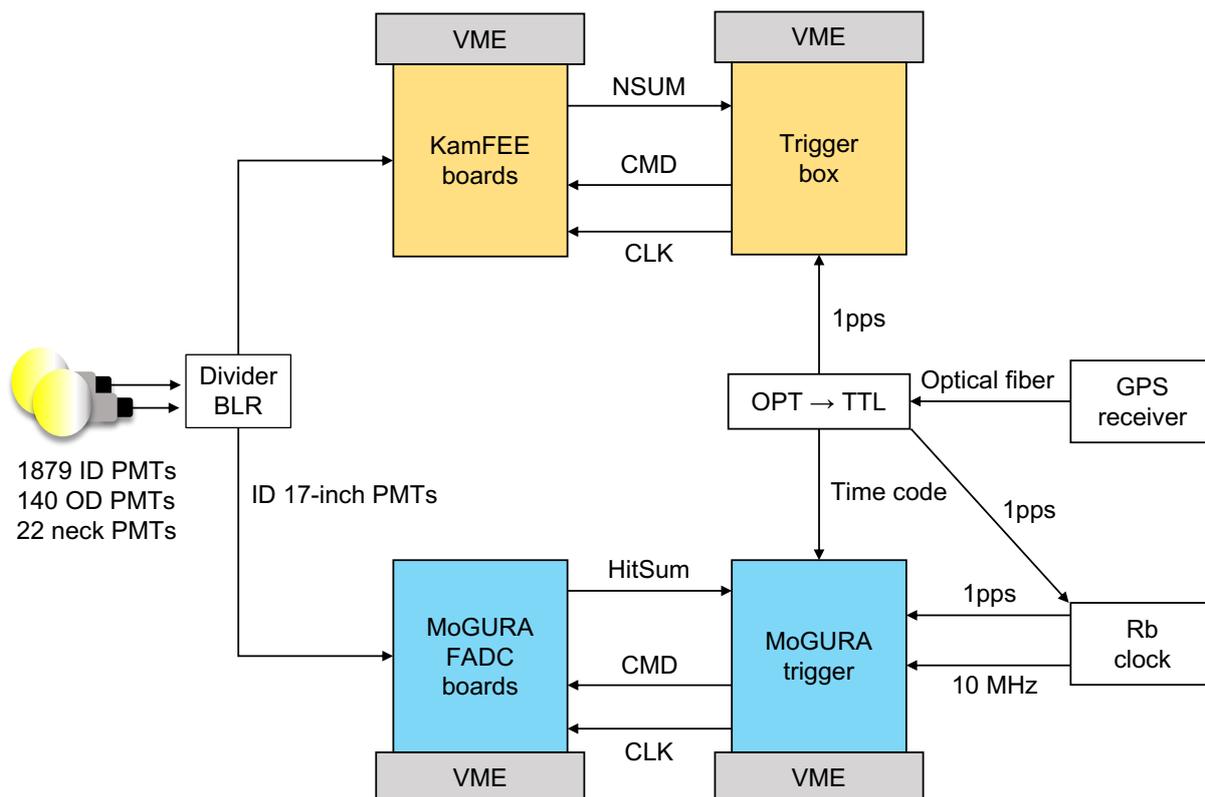


図 5.1: KamLAND の DAQ の概要 [9]

ネルの PMT 信号を処理し、約 200 枚のボードが ID、OD、ネックも含めた 2041 本（OD 改修前は 2126 本）の PMT をカバーしている。

- PMT からの信号は、3 つの異なるゲイン ( $\times 20, \times 4, \times 0.5$ ) を持つアンプを通過する。これは、1 p.e. の微弱な信号から宇宙線ミュオンのような 1,000 p.e. を超える大光量イベントまで、幅広いダイナミックレンジに対応するためである。
- 信号がディスクリミネーターで閾値を超えると、トリガー回路にヒット情報が送られる。

## 2. デジタル化とデッドタイム対策 :

- 信号は ATWD (Analog Transient Waveform Digitizer) によって、10 bit の分解能でデジタル化される。サンプリング間隔は約 1.5 ns であり、1 波形あたり 128 サンプルで構成される。
- ATWD の読み出しに約 27  $\mu$ s を要するため、不感時間（デッドタイム）を最小限にするために、2 つの ATWD が各チャンネルに交互に搭載され使用される。

### 5.1.2 MogDAQ および MoGURA

MogDAQ は、KamLAND-Zen 実験開始前に導入されたシステムであり、主に宇宙線ミュオン直後のデッドタイムを低減することを目的としている。

#### 1. 導入の必要性：

KamFEE ではミュオン信号後のオーバーシュートやアフターパルスの影響により、宇宙線ミュオン後の中性子検出の妨げとなる約 1 ms 程度の不感時間（デッドタイム）が生じていた。

#### 2. BLR の機能：

MoGURA への入力信号は BLR (Base Line Restorer) 回路を通過する。これにより、オーバーシュートによるベースライン変動が補正され、ミュオン後のデッドタイムが約 1  $\mu$ s まで大幅に削減される。

#### 3. 高速デジタル化：

MoGURA は Flash ADC (FADC) を採用している。FADC では波形を常時連続サンプリングしており、トリガ後の読み出しによる不感時間がなくなるため、KamFEE の ATWD のデッドタイム問題を解消している。クロックは 50 MHz で動作するが、最高倍率のゲインでは 1 GHz でサンプリングを行い、信号を高速でデジタル化する。

#### 4. Adaptive Trigger：

MoGURA は、主に宇宙線ミュオン起源の中性子検出に特化して用いられる。大光量イベント後に発生するアフターパルス（偽信号）を排除するため、ベースラインヒット数からの増加を検知する Adaptive Trigger が導入されている。

### 5.1.3 データ解析の初期段階（波形解析）

KamFEE や MoGURA によってデジタル波形データが取得された後、その後の事象再構成に必要な物理パラメータが抽出される。

#### 1. ペDESTAL 除去：

各 run の開始時に見積もられた信号のオフセット（ペDESTAL）が差し引かれ、ベ-

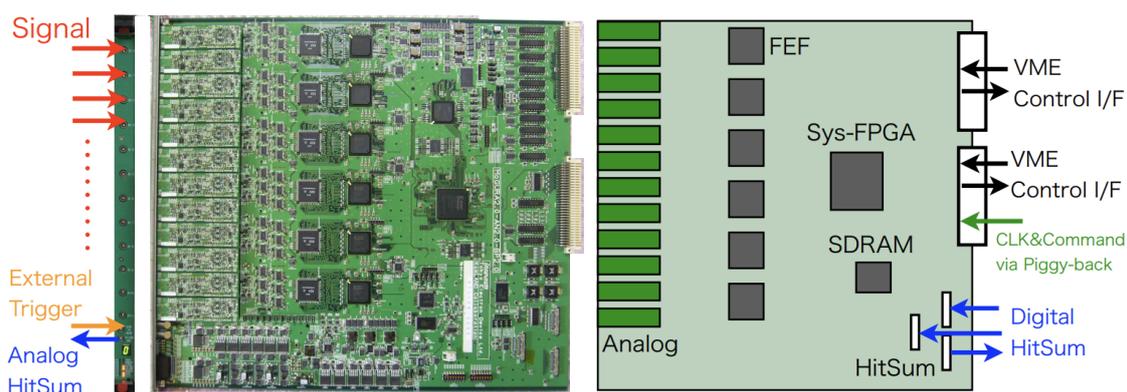


図 5.2: MoGURA ボードの写真 (左) と概略図 (右) [22]

スラインが設定される。

## 2. 物理量の抽出：

波形のスムージング処理後、波形の最初の立ち上がり時刻がヒット時間 ( $T$ ) として定義され、波形の積分値が電荷量 ( $Q$ ) として決定される。この電荷量は 1 pe 相当の面積で規格化される。

## 3. データ形式：

抽出された  $T$  と  $Q$  の情報は、RTQ (Raw Time and Charge) ファイルとして保存され、その後の較正や事象再構成の基礎データとなる。

### 5.1.4 新データ収集システムの導入

KamLAND2 では、現行の KamFEE と MoGURA の 2 系統で運用されている DAQ システムを統一し、新型の電子基盤である MoGURA2 (Module for General-Use Rapid Application 2) を導入する計画である。MoGURA2 は、宇宙線ミュオン通過後に増大する擬似信号 (PMT アフターパルス等) に起因した過剰トリガーや不感時間の増大を抑制し、KamLAND2-Zen 環境下で要求される高い事象選別性能 (特にミュオン直後の中性子捕獲事象の同定) を維持することを主目的として開発されている。

MoGURA2 では、

- ソフトウェアトリガー対応

- デッドタイムフリー性能の向上
- 低ノイズ化

といった性能向上が見込まれている [23]。

さらにシミュレーション評価として、MoGURA2 とローカルヒット判定の導入により、ミュオン直後の中性子検出効率が高い水準（例：94-97%）に達し、主要な背景である  $^{10}\text{C}$  の除去効率も 98.8% 以上まで向上し得ることが示されている [21]。以上より、MoGURA2 の導入は KamLAND2-Zen の感度向上に直接寄与する重要なアップグレードである。

## 5.2 従来の再構成手法

KamLAND 実験において、機械学習を使用しない従来の事象再構成手法は、検出器の PMT（光電子増倍管）で取得された信号の時間情報と電荷情報に基づき、主に最尤推定法 (**Likelihood Maximization**) を用いて物理事象の位置とエネルギーを決定する包括的なプロセスである。

この従来の手法は、高エネルギーのミュオン事象（トラック事象）と、低エネルギーのニュートリノ反応や放射性崩壊事象（点事象）に対して、それぞれ最適化されている。

### 5.2.1 前処理と較正

事象再構成に先立ち、PMT から得られた生データ（波形）を物理量に変換し、検出器性能の変動やノイズを補正する。

#### 1. 波形解析：

- PMT のアナログ信号波形（約 1.5 ns 間隔の 128 サンプル）から、ペDESTAL（オフセット）を除去し、ベースラインを設定する。
- ヒット時間は波形の最初の立ち上がり時刻として定義され、電荷量は波形の積分値として算出される。電荷量は 1 p.e.（光電子）相当の信号面積で規格化される。

#### 2. 較正：

- 時間較正：PMT の応答はゲインによって異なるため、色素レーザーや PEEK 材由来の  $^{40}\text{K}$  事象などを用いて時間応答の補正が行われる。

- 電荷較正：1 p.e. 相当の低エネルギー事象を集め、ガウス関数でフィッティングすることで PMT のゲインの経時変化を補正する。

### 3. PMT 品質管理：

- ダークヒットの多い PMT や応答が異常な PMT はバッドチャンネルとして選定され、解析から除外される。
- 熱電子やエレクトロニクスノイズによるダークチャージ（ノイズ由来の電荷）が、物理事象とは無関係なオフタイム事象を用いて見積もられ、エネルギー再構成時に差し引かれる。

## 5.2.2 事象再構成

### トラック事象再構成（ミューオン）

宇宙線ミューオンのような高エネルギー事象は、その軌跡（トラック）が再構成される。

#### 1. 初期トラック決定：

- ミューオン事象の入口は、時間的に最も早くヒットした PMT の位置から、その PMT と検出器中心を結んだ線がアウターバルーンと交わる点として仮定される。
- 出口は、最も電荷が大きく、ヒットタイミングが遅い PMT から決定される。

#### 2. 最尤推定による最適化：

- 仮定されたトラック（入口・出口・軸方向）に基づき、各 PMT の光子到達期待時間 ( $T_{\text{Analytic}}$ ) がチェレンコフ光の放出角度（チェレンコフ角）の原理を利用して計算される。ミューオンの飛跡決定において、シンチレーション光とチェレンコフ光は区別されない。
- この期待時間と実際の観測時間 ( $T_{\text{detected}}$ ) の差の二乗和 ( $\chi^2$ ) が最小となるように、トラックのパラメータ（位置、軸方向）が反復処理によって調整される。

#### 3. トラック品質評価：

- 再構成されたトラックは、その精度を示すパラメータである Badness などを用いて評価される。例えば、再構成されたトラックから期待される光量が実際の観測値より小さい場合や、PMT の時間の逆転（入口側より出口側の方が早いヒット）が起きている場合、再構成の精度が低いと見なされる。

### 点事象の位置再構成

MeV スケールのニュートリノ反応や放射性崩壊事象は、点事象として扱われる。

#### 1. TOF による初期推定 :

- まず、PMT のヒット時間と、検出器中心からの各 PMT までの距離を基に、**Time of Flight (TOF)** 情報を用いて大まかな事象発生時刻 ( $t_i$ ) を算出し、初期位置を推定する。

#### 2. 最尤推定法 :

- より正確な位置と時刻 ( $x, y, z, t$ ) を決定するために、最尤推定法が用いられる。
- 事象発生時刻と PMT のヒット時刻の差 ( $\tau_i$ ) に依存する確率密度関数 (PDF)  $f(\tau_i)$  を用いて尤度関数  $L$  が定義される。
- この尤度関数  $L$  の対数 ( $\log L$ ) が最大となる座標と時刻が、最終的な事象位置・時刻として決定される。

### エネルギー再構成 (Energy Reconstruction)

再構成された位置情報に基づき、最終的な可視エネルギー ( $E_{\text{vis}}$ ) が決定される。

#### 1. 尤度関数の定義 :

- 位置再構成で得られた座標と、PMT の電荷 ( $Q$ ) および時間情報 ( $T$ ) を用いて、エネルギーに関する尤度関数  $L(E_{\text{vis}})$  が定義される。
- この尤度関数は、PMT がヒットする確率、ヒットしない確率、ヒットした際の電荷のポアソン分布・ガウス分布、およびヒット時間の確率密度関数を組み合わせて構成される。

#### 2. $E_{\text{vis}}$ の決定 :

- $\log L$  を最大化するエネルギー値  $E_{\text{vis}}$  を求めるため、以下の条件式を解くことで最適な可視エネルギーが決定される。

$$\frac{\partial \log L}{\partial E} = 0 \quad (5.1)$$

#### 3. PMT 種別の結合 :

- 17-inch PMT と 20-inch PMT のエネルギーは独立に再構成された後、エネルギー分解能が最適となるように重み  $\alpha$  をつけて結合される。

## 5.3 KamLAND2-Zen における再構成課題と機械学習の導入

KamLAND の事象再構成では、観測される情報が 1,879 本（17-inch および 20-inch の混成構成）におよぶ光電子増倍管 (PMT) の電荷  $Q$  と時刻  $T$  に分散しており、入力の本質的に高次元である。例えば、数 1 MeV の物理事象ひとつに対し、数千におよぶ光子のヒット情報が時空間的な点群として記録される。さらに、光は直径 13 m のバルーン内に満たされた 1,000 ton の液体シンチレータ中で吸収・再発光や散乱を受け、境界面で反射し、PMT や電子回路の応答も含めて観測量へと変換される。

これらは互いに絡み合った非線形過程であり、加えて 12 本の吊り下げベルトによる遮光や、バルーン境界面近傍といった幾何学的条件により応答が複雑に変化する。その結果、再構成精度は空間的に一様ではなく、特定の領域で性能が悪化しやすい。したがって、KamLAND における再構成は以下の 2 つの難しさを同時に持つ問題として捉え直すことができる。

- 非線形性：複雑な光学過程（散乱・反射・吸収・再発光）が介在する。
- 不均一性：構造材や境界の影響により、場所によって応答が異なる。

### 5.3.1 従来手法の課題と機械学習の合理性

従来の再構成手法（例えば最尤推定に基づく手法）は、検出器応答を確率モデルとして定式化し、それに基づいて頂点やエネルギーを推定する点で体系的であり、物理的解釈や系統誤差の議論とも相性が良い。一方で、非線形な光学過程や境界条件を厳密に尤度へ取り込もうとするとモデルが複雑化し、多数の近似や補正に依存する。

従来手法には明確な強みがある一方で、要求される表現力が増した状況では、再構成を支えるモデルとしては柔軟性に欠ける。このような背景から、機械学習、とりわけデータ駆動の関数近似を用いることには合理性がある。KamLAND2-Zen において 1,885 本の PMT から得られる情報をそのまま扱い、頂点  $(x, y, z)$  やエネルギー  $E$  といった推定量へ直接写像す

る枠組みを構築できれば、手設計の特徴量に依存する度合いを減らし、複雑な検出器応答を包括的に学習させることが可能になる。非線形性の強い効果や位置依存性を、条件分岐や補正テーブルの増殖によって吸収するのではなく、モデル内部の表現として取り込める点も利点である。

また、頂点とエネルギーを同一モデルで同時推定するようなマルチタスク学習は、複数の推定量に共通する情報（例えば光の到来時刻分布と全電荷量の関係）を共有表現として活用でき、性能と安定性の両面で有利に働く可能性がある。もちろん機械学習は万能ではなく、MC と実データの差異、学習範囲外への外挿、データ変動に対する頑健性といった課題は別途検証が必要である。これらの課題を意識しつつ、本研究ではモデルの設計と評価を行った。

## 5.4 グラフニューラルネットワーク (GNN) の採用理由

KamLAND2-Zen における事象再構成に機械学習を用いる際に候補になるモデルのアーキテクチャは以下の通りである。ここでアーキテクチャとは、入力として与える情報（例：PMT のヒット時刻・電荷や幾何情報）をどのような表現に変換し、どのような計算手順（層の種類や接続方法）で出力（頂点位置・エネルギーなど）へ写像するかを定めた、モデルの設計方針を指す。同じタスクであっても、入力の扱い方（画像として扱うか、系列として扱うか、グラフとして扱うか）や、局所相関・大域相関の捉え方、計算コストや回転対称性への適合性がアーキテクチャによって大きく異なるため、目的とする再構成精度および実用上の制約（計算量・汎化性能など）を踏まえて適切なものを選択する必要がある。

**球面 CNN (Convolutional Neural Networks)** ヒットマップを球面に投影して画像として扱うため、投影の歪みを減らすことができる。球面の回転に対応できるため、KamLAND の幾何構造と相性が良い。

**MLP (Multi-Layer Perceptron)** ヒット情報を並べてそこから答えを出せるので実装はしやすいが、集合としての性質や幾何学的関係を表現しづらい。また、並べ方にも依存してしまう。

**Transformer** ヒットした PMT などに自動で注目しながら学習できるが、イベント当たりの要素数（ヒット数）が多い場合に計算量が増えやすい。長距離の相関（離れた PMT 間の関係など）を柔軟に捉えられる利点がある。

**PointNet** ヒットした PMT を点の集合（点群）として扱い、各点の特徴量（電荷や時刻、位置など）を統合して頂点やエネルギーを推定する。入力の並べ方に依存しにくく、ヒット数がイベントごとにも変わっても扱いやすい一方、点同士の近傍関係を明示的に取り込むには追加の工夫が必要になる。

**GNN (Graph Neural Network)** PMT を点（ノード）、PMT 同士の関係を線（エッジ）として、近い PMT 同士で情報をやり取りしながら頂点やエネルギーを推定する。PMT の位置情報や「近い PMT 同士が似た情報を持つ」という構造を自然に利用でき、入力の並べ順に依存しにくい。

モデルのアーキテクチャ選定のために KamLAND のイベントの特徴を考える。KamLAND の 1 事象は、PMT ヒットの集合として表現できる。ここで重要なのは PMT ヒットには自然な順序が存在しないことであり、入力表現はヒットの並び替えに対して不変であることが望ましい。また各ヒットは PMT の空間位置を伴い、ヒット同士の距離や時刻差といった「関係性」そのものが物理的情報を含む。例えば、ToF (Time of Flight) に基づく時間構造、散乱や反射により生じる遅れ成分、境界近傍での光の経路変化などは、個々のヒットの値だけでなく、複数ヒット間の相関として現れる。このように、入力は「集合」であると同時に「幾何学的構造と関係性を持つデータ」である。

球面 CNN は有望だが、球面分割の選択に依存するため PMT が不均一な配置を柔軟に取り込むには工夫が必要となる。Transformer は長距離相関を扱える利点があるため、Transformer の核となる Attention 機構をモデルの前半から中盤全体に導入した。PointNet はヒット情報を点集合として扱える利点はあるが、近傍関係（局所構造）を明示的に利用しにくいいため、本研究では GNN の方が適していると判断した。これに対し GNN は、ノードとして PMT（あるいはヒット）を置き、エッジとして近傍関係を定義することで、集合データの順序不変性を自然に満たしながら、幾何と関係性をモデル内部に組み込むことができる。局所的な相互作用（距離や時間差に基づく関係）を層の積み重ねで統合し、最終的に大域的な推定量（頂点・エネルギー）を得るという構造は、検出器内での光伝搬の情報が局所的な観測から積み上がって全体の再構成へ至る、という直感とも整合的である。

### 5.4.1 KamLAND2-Zen でのイベント再構成

KamLAND2-Zen の再構成において GNN を使用する理由は、以下の2点に集約できる。

- (i) **1,885** 箇所の **PMT** 配置という幾何学を保持したまま学習できること
- (ii) ヒット間の時間差・距離など関係性を特徴として扱えること

これらはいずれも KamLAND2-Zen の観測データの構造に直接対応しており、単に表現力が高いという一般論ではなく、入力に対して最も素直なモデル化である点が重要である。

一方で、GNN がブラックボックス的であること、従来法に比べて系統誤差の見通しが立ちにくいといった懸念もあり得る。これらに対しては、残差分布や位置依存ヒットマップを用いた性能の分解、特徴量のアブレーション（モデルや手法を構成する要素を1つずつ外したり置き換えたりして性能がどれだけ変わるかを見る検証）、光学パラメータや較正ずれを振った系統変動下での頑健性評価、キャリブレーション源を用いた実データ検証などを通じて、モデルの振る舞いを可視化しながら議論できる。すなわち、GNN の導入は従来法を置き換えること自体が目的ではなく、従来法が性能低下を起こしやすい領域（境界近傍や複雑な材料条件下など）を含めて再構成性能を底上げし、検出器条件の変更にも追従しやすい枠組みを得ることに主眼がある。

以上より、KamLAND2-Zen の再構成課題が持つ高次元性・非線形性・不均一性を踏まえると、機械学習による再構成は合理的な選択肢であり、特に入力が「集合×幾何×関係性」という構造を持つことから、GNN はその構造を最も自然に取り込めるモデルとして位置づけられる。

## 第6章

# GNN を用いた再構成モデル

### 6.1 機械学習

機械学習とは、データに潜むパターンや規則性をコンピュータ自身に学習させ、未知のデータに対して予測や判断を行わせる技術の総称である。人間が明示的にルールを記述する従来のアルゴリズムとは異なり、機械学習では大量のデータから数理モデルのパラメータを最適化することで、入力と出力の関係性を自動的に構築する。

機械学習の手法は、学習データの性質によって大きく「教師あり学習」、「教師なし学習」、「強化学習」の3つに分類される。「教師あり学習」は、入力データとそれに対応する「正解（ラベルや真値）」がセットで与えられる手法であり、モデルの出力が正解に近づくように学習が進む。

本研究では、シミュレーションによって生成された「入力信号」と、それに対応する物理量の「真値（正解）」が存在するため、教師あり学習を用いる。具体的には、検出器から得られる波形データ等から、粒子のエネルギーや位置といった物理量を高精度に推定（再構成）するモデルを構築することを目的とする。また、そのためのアルゴリズムとしてニューラルネットワークを採用した。

#### 6.1.1 ニューラルネットワークの構造

ニューラルネットワークは、人間の脳神経回路網（ニューロン）の仕組みを模倣した数理モデルである。基本的な構造は、データを受け取る「入力層」、データの特徴を抽出・変換す

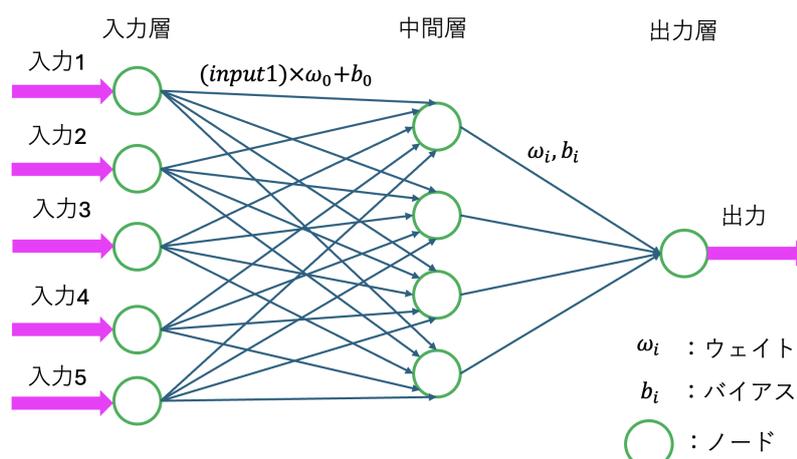


図 6.1: ニューラルネットワークのイメージ図

る「中間層（隠れ層）」、最終的な予測値を出力する「出力層」から構成される。

図 6.1 のように、各層は多数のノード（ユニット）で構成されており、層と層の間は「ウェイト（重み）」と呼ばれるパラメータを持つ結合によって繋がっている。入力されたデータは、このウェイトとの演算に加え、「バイアス」と呼ばれるパラメータによる調整を受けながら次の層へと伝播していく。この層を多層に重ねることで、データに含まれる複雑な特徴量や非線形な関係性を段階的に学習することが可能となる。これを深層学習（ディープラーニング）と呼ぶ。

また、各ノードでの演算結果には「活性化関数」と呼ばれる非線形変換が適用される。活性化関数は、モデルに非線形な表現力を与えるために不可欠な要素である。もし活性化関数がなければ、どれだけ層を重ねても単なる線形変換の組み合わせに過ぎなくなってしまう。代表的な活性化関数として、シグモイド関数や ReLU (Rectified Linear Unit) 関数などが挙げられ、タスクの性質に応じて適切なものが選択される。

### 6.1.2 学習のプロセス

ニューラルネットワークにおける「学習」とは、モデルの出力値と真値（正解）との誤差を最小化するように、ネットワーク内の膨大なパラメータ（ウェイトおよびバイアス）を適切な値に調整していく過程を指す。

まず、現在のパラメータを用いて入力データを処理し、予測値を出力する。次に、「損失

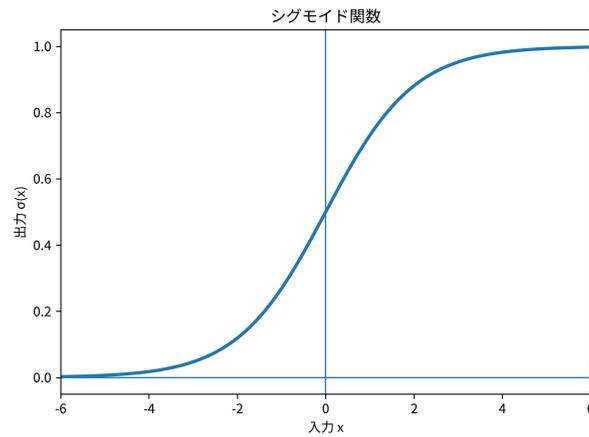


図 6.2: シグモイド関数

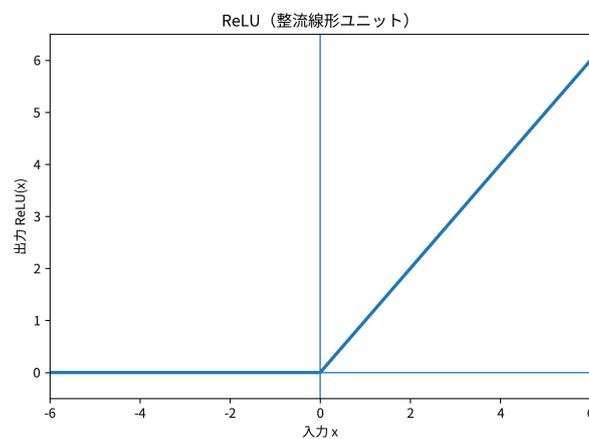


図 6.3: ReLU 関数

関数（ロス関数）」を用いて、この予測値と真値との乖離度（ロス）を定量的に評価する。損失関数は学習の指針となる指標であり、目的に応じて選択される。例えば、数値の予測（回帰）を行う本研究のようなタスクでは、予測値と真値の差の二乗平均などが用いられることが多い。

算出されたロスを基に、各パラメータをどのように変更すればロスを減らせるかを計算する必要がある。この際に用いられるアルゴリズムが誤差逆伝播法（バックプロパゲーション）である。出力層で計算した損失に基づき、連鎖律を用いて勾配  $\partial L / \partial \theta$  を各層へ逆方向に伝播させ、パラメータ  $\theta$  を更新する。これにより、ネットワーク全体のパラメータを勾配降下法などにより一括して更新することが可能となる。

### 6.1.3 パラメータの更新と最適化

誤差逆伝播法によって求められた勾配情報に基づき、実際にパラメータを更新する手法を「最適化アルゴリズム (オプティマイザ)」と呼ぶ。基本的な考え方は、ロスが減少する方向 (勾配の逆方向) へパラメータを少しずつ変化させるというものである。この変化の度合いを決めるのが「学習率」と呼ばれるハイパーパラメータである。学習率が大きすぎると学習が発散し、小さすぎると収束に膨大な時間を要するため、適切な設定が求められる。

単純な勾配降下法では、パラメータが局所的な最適解 (極小値) に留まってしまい、真の最適解 (最小値) に到達できない場合や、学習の進行が停滞する場合がある。こうした問題を解決するために、様々な改良型アルゴリズムが提案されている。

## 6.2 使用しているモデル

本研究では、KamLAND における 1 事象を「PMT 配置という幾何構造の上に載った観測データ」として扱い、近傍 PMT 間の局所相関と球面全体の広域相関を、複数の空間スケールで統合して再構成量を推定する階層型グラフニューラルネットワーク (GNN) を用いる。各 PMT の時刻  $T_i$ 、電荷  $Q_i$ 、および PMT 位置ベクトル  $\mathbf{p}_i = (x_i^{\text{PMT}}, y_i^{\text{PMT}}, z_i^{\text{PMT}})$  を入力として、出力として  $(E, x, y, z, \sigma_{\text{vertex}})$  の 5 変数を回帰する。

ここで  $(x, y, z)$  はシミュレーションにおける粒子の発生点 (真値発生点) であり、 $\sigma_{\text{vertex}}$  はエネルギーデポジットが「中心からどれくらい広がっているか」を表す広がり指標である。デポジット位置  $\mathbf{r}_k$  とそのエネルギー  $E_k$  に対して、重心

$$\mathbf{r}_c = \frac{\sum_k E_k \mathbf{r}_k}{\sum_k E_k} \quad (6.1)$$

を定義し、広がりを

$$\sigma_{\text{vertex}} = \frac{\sum_k E_k \|\mathbf{r}_k - \mathbf{r}_c\|}{\sum_k E_k} \quad (6.2)$$

で定義した。本研究ではこのような「空間的広がり」を 1 変数に圧縮した量を回帰ターゲットとして扱い、エネルギーと発生位置と同時に学習させる。 $E$  は再構成したい観測に対応するエネルギー (光量に対応する可視エネルギーに相当する量) として扱う。モデルは入力事象から予測  $(\hat{E}, \hat{x}, \hat{y}, \hat{z}, \hat{\sigma}_{\text{vertex}})$  を出力し、教師信号  $(E, x, y, z, \sigma_{\text{vertex}})$  に対して回帰損失が最

小となるよう学習する。

本モデルの設計意図は大きく3点である。(i) PMT 配置に基づいて近傍の PMT でグラフを構成し、光学応答に由来する局所相関をグラフ畳み込みで取り込む。(ii) 球面幾何において反対側方向 (antipodal) に現れ得る広域相関を別経路として導入し、局所と広域を分担して表現させる。(iii) HEALPix(Hierarchical Equal Area isoLatitude Pixelation) によるプーリングで受容野を段階的に拡大しつつ計算量を制御し、局所から大域までの統合を安定に行う。これらを支える部品としてグラフ畳み込み (Graph Convolution; GraphConv)、動的グラフニューラルネットワーク (Dynamic-graph Graph Neural Network; DCGNN)、注意機構に基づく特徴融合 (Attention-based Feature Fusion; AttentionFusion) を使用している。

学習可能パラメータ数 (number of trainable parameters) とは、ニューラルネットワークの学習により値が更新される重みおよびバイアスの総数である。パラメータ総数はモデル容量、一般に表現の自由度と関係する。本モデルの学習可能パラメータ数は 18,254,459 個である (隣接行列・クラスタ割当などの固定テンソルはバッファとして保持し、学習対象には含めない)。学習可能パラメータが多いメリットは表現力が上がることである。

### 出力 ( $E, x, y, z, \sigma_{\text{vertex}}$ ) と学習の目標

本研究で再構成したい量は、(1) エネルギー  $E$ 、(2) 発生点  $(x, y, z)$ 、(3) 広がり指標  $\sigma_{\text{vertex}}$  の5つである。特に  $(x, y, z)$  はシミュレーションにおける粒子発生点であり、モデルは PMT 観測からこの発生点を推定するよう学習する。これにより、従来の再構成で問題となりやすい境界近傍や複雑な光学効果の影響を、特徴量設計の補正に頼らず表現の幅として吸収することを目指す。

### 入力特徴と PMT 位置ベクトル $p_i$ の役割

各 PMT  $i$  について観測量は時刻  $T_i$  と電荷  $Q_i$  である。ジッター (jitter) とは、本来一定であるはずのタイミングや値が微小に揺らぐ (ばらつく) 現象を指す。PMT の観測時刻には到達時刻ジッター (timing jitter) が存在し、同一条件で生成された光子が PMT に入射しても、信号の時刻が事象ごとに微小にばらつく。

観測時刻  $T_i$  は、

$$T_i = t_0 + t_i^{\text{TOF}} + \delta \quad (6.3)$$

と分解できる。ここで  $t_i^{\text{TOF}}$  は発光点から PMT までの伝搬時間 (time-of-flight) を表し、 $\delta$  は PMT および電子回路に起因するイベントごとの確率的揺らぎ (ジッター) を表す。特に  $t_0$  はイベントごとに共通な時刻の基準 (発光時刻やトリガ基準) であり、トリガ生成やクロック位相などの影響により、イベントごとにランダムなオフセットとして揺らぐ。この  $t_0$  の揺らぎは全 PMT に共通に加わる成分であるため、単一の PMT 観測からは直接は分離できない。また、 $\delta$  のようなイベントごとに独立なランダム成分は観測情報から一意に復元できない。

機械学習モデル (GNN) でも「ノイズの統計を見込んで最適推定する」ことは可能かもしれないが、アルゴリズムでできる前処理を行うことで、GNN のタスク負担やアーキテクチャ的に難しい部分を避けられると考え、以下の要件を満たす前処理を行った。各ヒットごとの偶然のズレを“補正して元に戻す”ことではないため、学習を安定に進める上で重要なのは、(i) 無ヒット PMT を明確に区別できる表現を持たせること、(ii) イベントごとの到着時刻ジッターの揺らぎを抑制すること、(iii) 外れ値に頑健であること、の3点である。

そこで本研究では、電荷が閾値未満の PMT を無ヒットとして扱い、無ヒットの時刻を一定値 ( $T = -200$  ns) に置換する。さらにイベント内の時刻分布から代表値  $\Delta T$  (分位点) を算出し、各時刻を  $t \leftarrow t - \Delta T$  によりオフセット補正した後、所定範囲  $[T_{\min}, T_{\max}]$  に制限する。具体的には

$$T_i \leftarrow \text{clip}(T_i - \Delta T; T_{\min}, T_{\max}), \quad Q_i \leftarrow \text{clip}(Q_i; Q_{\min}, Q_{\max}) \quad (6.4)$$

このようにクリップして制限する。ここで  $\Delta T$  はイベントごとの時刻基準のずれを吸収し、クリップは外れ値を抑える。これにより、モデルが絶対時刻に過剰適合することを避け、相対的な時間構造を学びやすくする。

$[T_{\min}, T_{\max}]$  の値はデータセットに応じて変更している。表 6.1 にある値は optuna[24] を用いたチューニングで決定した。ジッター補正をデータセットごとにどのように行っているかを示したのが図 6.4, 図 6.5 である。

さらに、本研究では PMT の幾何情報を明示的に入力へ含める。PMT 位置ベクトルを  $\mathbf{p}_i$  と書き、各 PMT の特徴を

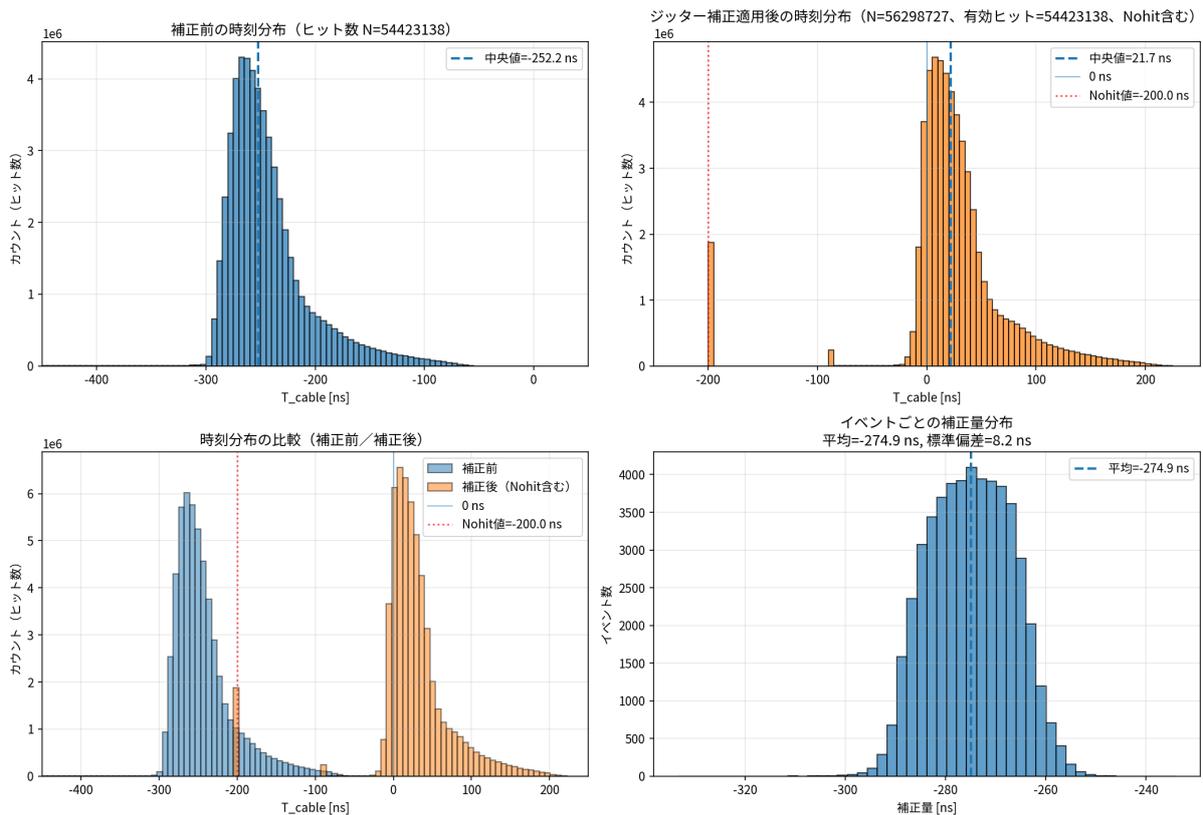
$$\mathbf{x}_i = [T_i, Q_i, \tilde{T}_i, \tilde{Q}_i, \mathbf{p}_i] \quad (6.5)$$

のように構成する (実装では最初段に入る次元が7になるよう設計されている)。ここで

表 6.1: 時刻  $T_i$  と電荷  $Q_i$  のクリップ範囲

	$T_{\min}$	$T_{\max}$	$Q_{\min}$	$Q_{\max}$
w/ Bis & PEN	-87 ns	295 ns	0 p.e.	10 p.e.
w/o Bis & PEN	-82 ns	315 ns	0 p.e.	10 p.e.

Bis有りのデータに対するジッター補正の全体統計（ヒット分布と補正量）

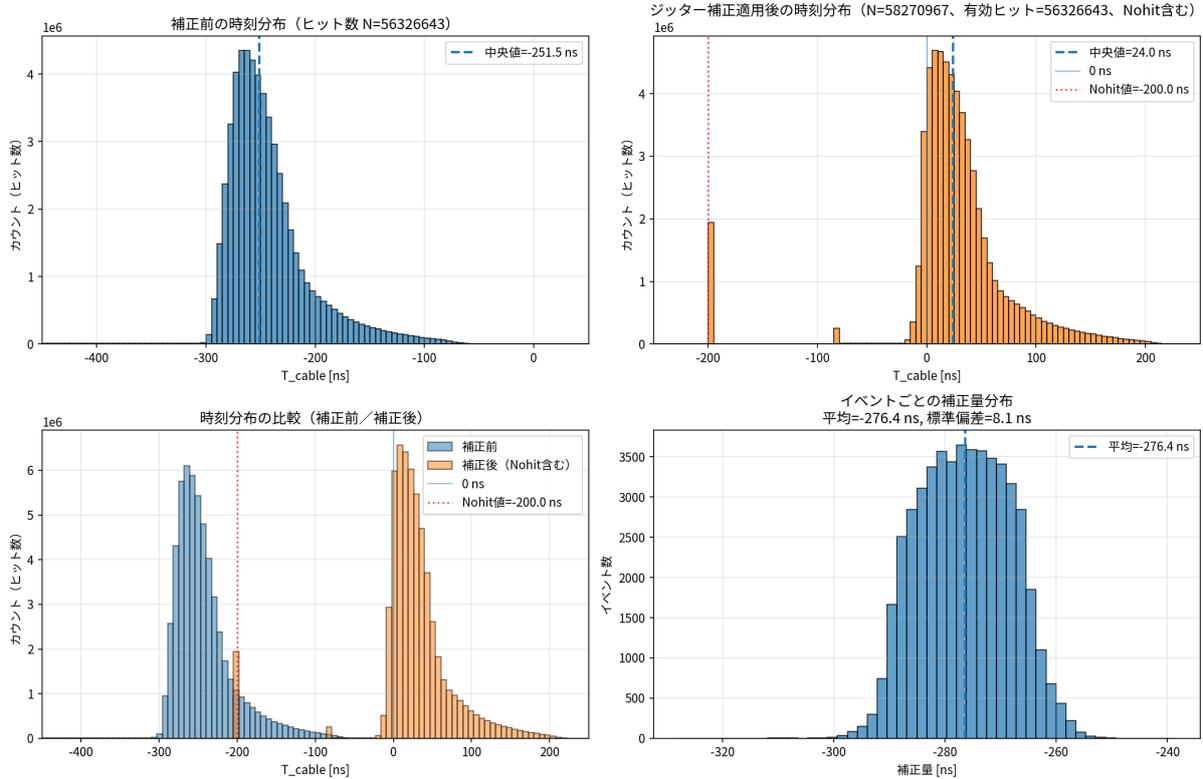


範囲外ヒット（クリップで下限に固定）=241455 (0.444%) 範囲外ヒット（クリップで上限に固定）=17 (0.000%) 範囲外率（ヒット内）  
 解析イベント数=50000 総ヒット数( $Q>0.3$ )=54423138 nohit総数( $Q\leq 0.3$ )=39826862 クリップ発生イベント=49585/50000 (99.17%)

図 6.4: Bis ありのデータセットに対するジッター補正

$T_i$ ,  $Q_i$ ,  $\tilde{T}_i$ ,  $\tilde{Q}_i$  は同一の物理量を異なる感度でモデルに提示する目的で使用する。 $T_i$ ,  $Q_i$  を追加の線形変換によって再表現し、より狭い範囲に制限した拡大スケール特徴  $\tilde{T}_i$ ,  $\tilde{Q}_i$  も併用する。重要なのは、発生点  $(x, y, z)$  を推定する“出力”と、PMT の位置  $\mathbf{p}_i$  を与える“入力”が、役割として明確に分離されている点である。モデルは「どの位置の PMT がどのように反応したか」という情報から、発生点  $(x, y, z)$  を逆算的に推定するよう訓練される。こ

Bis無しのデータに対するジッター補正の全体統計（ヒット分布と補正量）



範囲外ヒット（クリップで下限に固定）=247464 (0.439%) 範囲外ヒット（クリップで上限に固定）=0 (0.000%) 範囲外率（ヒット内）= 解析イベント数=50000 総ヒット数(Q>0.3)=56326643 nohit総数(Q<=0.3)=37923357 クリップ発生イベント=49629/50000 (99.26%)

図 6.5: Bis なしのデータセットに対するジッター補正

ここで、PMT の位置  $p_i$  は座標がなくてもデータから位置を学ぶことができるため、必ずしも必要となるわけではない。

### 近傍グラフと重み付き隣接行列

PMT は空間的に連続な配置を持つため、近い PMT 同士は同じ光伝搬の影響を受けやすい。この局所相関を取り込むため、ノード  $i$  の近傍集合  $\mathcal{N}(i)$  を、PMT の座標  $p_i$  に基づいてノード  $i$  を除いてノード  $i$  に最も近い  $k$  個の PMT として定義する。

近傍集約は一様平均ではなく、距離に応じて滑らかに減衰する重みを用いる。距離

$d_{ij} = \|\mathbf{p}_i - \mathbf{p}_j\|$  に対し、ガウシアン重み  $w_{ij}$  を定義する。

$$\begin{aligned} s_i^2 &= \frac{2}{k} \sum_{j \in \mathcal{N}_k(i)} d_{ij}^2, \\ w_{ij} &= \exp\left(-\frac{d_{ij}^2}{s_i^2}\right), \end{aligned} \quad (6.6)$$

$w_{ij}$  では局所スケール  $s_i$  (近傍の PMT の距離の平均などから定める) で正規化する。さらに、数値安定化として微小自己ループを付与し、正規化したものが実際のグラフ畳み込みで使われる隣接行列の要素  $A_{ij}$  となる。隣接行列の要素  $A_{ij}$  はノード  $i$  からノード  $j$  への接続の強さ (重み) を表す。

$$A_{ij} = \frac{w_{ij} + \epsilon \delta_{ij}}{\sum_k (w_{ik} + \epsilon \delta_{ik})}$$

$A_{ij} = 0$  はノード間にエッジがないことを表し、 $A_{ij} > 0$  はエッジがあり、値が大きいほど強く接続されていることを示す。 $\epsilon$  は自己ループの係数である ( $\epsilon > 0$ )。この工夫は、学習初期における不安定な更新やゼロ割を避け、自己情報を必ず残す意図がある。

### 反対点 (antipodal) グラフ

局所近傍だけでは、球面全体にまたがる広域の相関を表現しづらい。球面幾何では、反対側方向の情報が収支の偏りや遅れ成分のパターンとして現れ得るため、本研究では反対点方向の近傍を取るグラフを別に導入する。

具体的には、反対点方向距離

$$d_{ij}^{\text{anti}} = \|\mathbf{p}_i - (-\mathbf{p}_j)\| = \|\mathbf{p}_i + \mathbf{p}_j\| \quad (6.7)$$

に基づいて反対側にもグラフを構成し、同様に  $A_{ij}^{\text{anti}}$  を定義する。以降の処理では、近傍グラフ経路 (near) と反対点グラフ経路 (anti) を並列ブランチとして保持し、後段で統合する。意図は、局所と広域を同じ土俵で混ぜてしまう前に「別の表現」として抽出し、必要に応じて寄与を学習的に変えられる自由度を持たせる点にある。

### Graph Convolution(GC)

本研究の Graph Convolution は、近傍集約と自己成分を別の線形変換として扱う [25]。これは、近傍平均だけに依存すると深層化で表現が平滑化しやすく、また自己信号（強い局所ヒット等）が薄まることを避ける狙いがある。

ノード特徴  $\mathbf{H} \in \mathbb{R}^{N \times C}$ 、隣接行列  $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{N \times N}$  に対し、

$$\mathbf{H}' = (\mathbf{A}\mathbf{H})\mathbf{W}_{\text{rel}} + \mathbf{H}\mathbf{W}_{\text{root}} + \mathbf{b} \quad (6.8)$$

で表される。ここで  $\mathbf{W}_{\text{rel}}$  は近傍成分、 $\mathbf{W}_{\text{root}}$  は自己成分の変換であり、両者の役割を分けることで表現の劣化を抑える。

### Densely Connected Graph Convolutional Network (DCGCN)

GNN を深くすると情報が平均化され過ぎたり、勾配が不安定になったりしやすい。本研究では単純積層ではなく、Densely Connected Graph Convolutional Network(DCGCN) ブロックを用いる [26]。これは (i) 複数層の出力を蓄積して連結すること、(ii) ブロック入力を最後に足すことで深層化しても学習が破綻しにくいことを目的としている。

層出力を  $\mathbf{h}^{(1)}, \mathbf{h}^{(2)}, \dots$  とし、連結を  $[\ ; ]$  で表すと

$$\mathbf{z}^{(\ell)} = \mathbf{W}^{(\ell)} [\mathbf{h}^{(1)}; \mathbf{h}^{(2)}; \dots; \mathbf{h}^{(\ell)}] \quad (6.9)$$

のように、浅い層から深い層までの表現を同時に保持しながら混合する。さらに最終段で入力  $\mathbf{x}$  を残差として加え

$$\mathbf{y} = \mathbf{W}_{\text{final}}(\mathbf{z}^{(L)} + \mathbf{x}) \quad (6.10)$$

とする。これにより、浅い表現（素直な光量・時間パターン）と深い表現（複雑な相関）の両方が保持され、発生点  $(x, y, z)$  と広がり  $\sigma_{\text{vertex}}$  の同時推定を安定に学習できることを期待する。

### AttentionFusion

同一スケールでも、浅いブロック出力・深いブロック出力、あるいは near/anti のように複数の表現候補が得られる。固定比で足し合わせると状況に応じた寄与の違いを表現しにくい

ため、本研究では AttentionFusion により分岐統合の重み自体を学習する。学習パラメータ  $s_m$  に対して

$$\alpha_m = \frac{e^{s_m}}{\sum_{n=1}^M e^{s_n}} \quad (6.11)$$

のように Softmax 正規化を行い、各ブランチの重要度を計算する。

最終出力は各ブランチ出力  $\{\mathbf{b}_m\}_{m=1}^M$  の重み付き和

$$\mathbf{b}_{\text{fused}} = \sum_{m=1}^M \alpha_m \mathbf{b}_m \quad (6.12)$$

となる。これにより、再構成に「局所 PMT の関係が効く事象」と「遠方の PMT を含む広域が効く事象」で、統合比を自動的に切り替えられる余地が生まれる。

### HEALPix 階層化とプーリング

1885 本の PMT を大域相関まで扱うには多層化が必要だが、計算量・メモリが膨らんでしまう。そこで本研究では HEALPix (Hierarchical Equal Area isoLatitude Pixelization) による粗視化を導入し、ノード数を段階的に減らしながら大域情報を統合する。具体的には

$$1885 \text{ (PMT)} \rightarrow 768 \text{ (nside = 8)} \rightarrow 192 \text{ (nside = 4)} \rightarrow 48 \text{ (nside = 2)} \rightarrow 12 \text{ (nside = 1)} \quad (6.13)$$

の階層を用いる。nside とは HEALPix における分解能パラメータで、球面をどれだけ細かく分割するかを決定するものである。

PMT から nside=8 への変換では、PMT をセルに割り当てた上で和プーリング

$$\mathbf{H}_u = \sum_{i \in u} \mathbf{h}_i \quad (6.14)$$

により集約する。和を用いる意図は、電荷やヒット寄与のような加法的な量を自然に統合しやすい点にある。以降の縮約では平均プーリングを用い、上位スケールほど少ないノード数で広域相関を扱えるようにする。

### モデル全体構成

モデルは PMT レベルで局所特徴を抽出し、Healpix 階層でスケールを下げつつ near/anti を統合し、最終的に MLP で  $(E, x, y, z, \sigma_{\text{vertex}})$  を回帰する。図 6.6 に本研究で使用した GNN

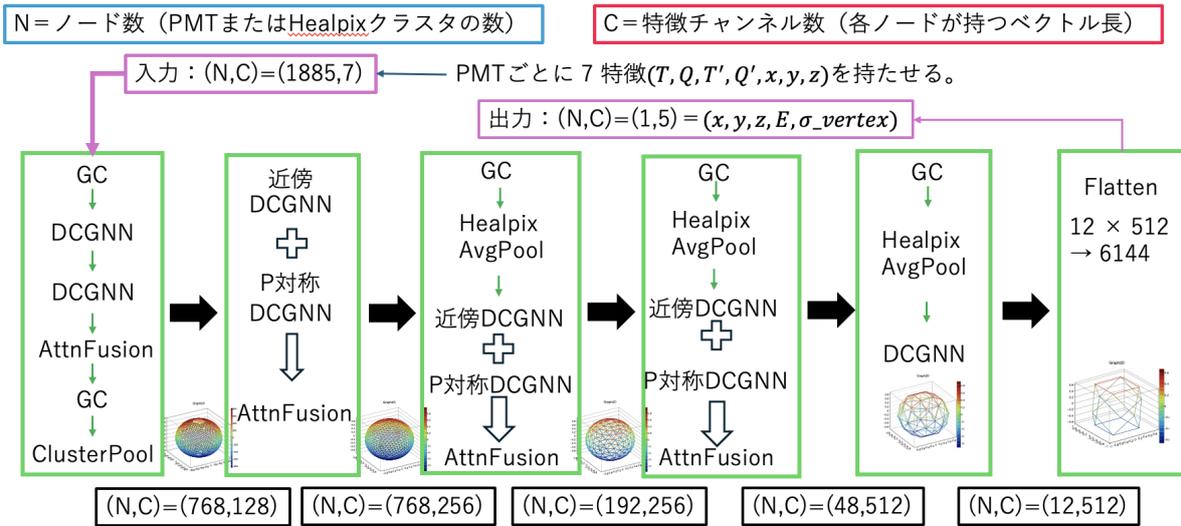


図 6.6: 本研究で使用している GNN モデル

モデルの構造を示す。以下ではモデルの中身を噛み砕いて説明する。

■Stage 0 (PMT レベル) 入力  $x_i$  (7 次元) から GraphConv と 2 種類の DCGNN (深さ違い) で表現を生成し、AttentionFusion で融合する。浅い表現・深い表現の役割分担を固定せず、データから学習させる意図である。その後チャンネルを増やして粗視化へ渡す。

■Stage 0 → 1 (PMT → ns8) 和プーリングで  $1885 \rightarrow 768$  に集約し、PMT 近傍で得た局所情報を「球面上のセル特徴」として保持する。

■Stage 1 (ns8 : near/anti の二枝) near と anti を並列に DCGNN で処理し、同一経路内は融合 (AttentionFusion)、最後に両経路を結合して次段へ渡す。局所相関と広域相関を同時に保持する設計である。

■Stage 2 (ns4) ・ Stage 3 (ns2) GraphConv と平均プーリングで縮約しつつ、near/anti 二枝を学習的に統合する。スケールが粗くなるほど大域相関が効く可能性があるため、統合比は固定しない。

■Stage 4 (ns1) と Readout 12 ノードの表現を得た後、フラット化して全結合層に入力し、最終的に

$$(\hat{E}, \hat{x}, \hat{y}, \hat{z}, \hat{\sigma}_{vertex}) \tag{6.15}$$

を出力する。ここで  $(\hat{x}, \hat{y}, \hat{z})$  は粒子発生点の推定、 $\hat{\sigma}_{\text{vertex}}$  はエネルギーデポジット広がり  
の推定であり、単なる発生点回帰に留まらず事象の空間的性質も同時に推定することを狙う。

### 6.2.1 損失関数と学習目標の設計

本研究では、モデルが出力する再構成量

$$\hat{\mathbf{y}} = (\hat{E}, \hat{x}, \hat{y}, \hat{z}, \hat{\sigma}_{\text{vertex}}) \quad (6.16)$$

が、教師信号

$$\mathbf{y} = (E, x, y, z, \sigma_{\text{vertex}}) \quad (6.17)$$

に一致するように学習を行う。単一の量（例えば発生点のみ）を最適化するのではなく、  
 $(E, x, y, z, \sigma_{\text{vertex}})$  を同時に回帰するマルチタスク設定を採る理由は、KamLAND の観測に  
おいてこれらの量が独立ではなく、エネルギー推定と位置推定が相互に制約し合うため  
である。例えば、光量スケール  $(E)$  は幾何学的減衰や光学応答の影響を受け、これは発生点  
 $(x, y, z)$  と強く結びつく。また、エネルギーデポジットの広がり  $\sigma_{\text{vertex}}$  は、時間分布・電荷分  
布の形状に反映され得るため、発生点とエネルギーの推定を補助する付加情報となる。従っ  
て、 $(E, x, y, z, \sigma_{\text{vertex}})$  を同時に扱うことで、モデルがイベントの全体像を学習しやすくなる  
ことを期待する。

#### 損失関数の構成

本研究の損失関数は、二乗誤差 (L2) と絶対誤差 (L1) を混合した形であり、さらに“重  
み付き誤差”と“素の誤差”の双方を併用している。誤差  $\delta$  に対して、まず重み付き誤差を

$$\Delta = \mathbf{w} \odot \delta \quad (6.18)$$

と定義する。

このとき、L2 型の項は

$$L_2 = \sum_{k \in \{E, x, y, z, \sigma\}} e_k(E) \Delta_k^2 \quad (6.19)$$

であり、L1 型の項は

$$L_1 = \sum_k \sqrt{e_k(E)} |\Delta_k| \quad (6.20)$$

として実装されている。係数の平方根は L1 と L2 のスケール整合のために用いられている。さらに、固定重み  $\mathbf{w}$  と  $E$  依存重み  $\mathbf{e}(E)$  を外した“素の誤差”に対しても L2/L1 を加え、学習が極端に偏ることを避ける。

最終的な損失は、係数  $\alpha, \beta, \eta, \gamma$  を用いて

$$L = \alpha L_2 + \beta L_1 + \eta L_2^{\text{raw}} + \gamma L_1^{\text{raw}} \quad (6.21)$$

として構成される。実装では  $\alpha = 0.1, \beta = 0.02, \eta = 10^{-4}, \gamma = 10^{-6}$  としており、主成分は  $\alpha L_2$  と  $\beta L_1$  が担い、raw 項は補助的（正則化的）に働く。

この混合の設計意図は次の通りである。L2 は平均的な誤差を小さくする圧力が強い一方、外れ値に引きずられやすい。L1 を加えることで、外れ値や難しいイベント（例えば境界近傍や複雑な光学条件）の影響で学習が不安定化することを抑え、頑健な回帰を実現する。また raw 項を微小に加えることで、重み付け設計の副作用（特定成分だけが極端に支配する等）を緩和し、全成分が最低限学習されることを狙う。

#### $\sigma_{\text{vertex}}$ を用いる理由

$\sigma_{\text{vertex}}$  はエネルギーデポジットの空間的広がりを表す指標であり、点状に近い事象と、複数点あるいは広がったデポジットを持つ事象とで、PMT 観測（特に時間分布や電荷分布の形状）が異なることを 1 変数で捉える狙いがある。

発生点  $(x, y, z)$  と  $\sigma_{\text{vertex}}$  を同時に回帰することの利点は、モデルが「点状であるはずの事象」と「広がりを持つ事象」を区別しつつ整合的な推定を行える点にある。例えば広がりが大きい事象では、単一発生点仮定のみで発生点を最適化しようとする、時間構造の説明が難しくなり、発生点推定が不安定化する可能性がある。 $\sigma_{\text{vertex}}$  を同時に推定することで、モデルは「広がりの寄与」を表現の中で持てるようになり、発生点推定やエネルギー推定における系統的な崩れを抑えることが期待できる。

#### 損失関数のまとめ

以上より、本研究の損失関数は

- $(E, x, y, z, \sigma_{\text{vertex}})$  の同時回帰により整合的な事象像を学習させる（マルチタスク化）
- $E$  を強く重視しつつも、位置・広がりが学習から脱落しないよう重み・raw 項で補助

する

- $E$  依存重み付けと L2/L1 混合により低エネルギー側や外れ値で学習を崩さない

という設計意図を持つ。これは、KamLAND における観測の位置依存性や光学効果の複雑さを前提に、モデルの表現力と学習の頑健性を両立させ、最終的にエネルギーおよび位置・広がり の再構成精度を高めることを狙ったものである。

### 6.2.2 評価指標の定義

学習中のモデル選択や性能比較には、損失関数  $\mathcal{L}$  (前節) だけでなく、物理量として解釈しやすい指標が必要である。そこで本研究では学習用データの 10% を検証用データとし、検証用データに対してモデル出力から  $(E, x, y, z, \sigma_{\text{vertex}})$  の残差を計算し、その分布幅 (標準偏差) を分解能指標として用いる。

#### 残差の定義

validation の各イベントに対して、教師信号を  $\mathbf{y} = (E, x, y, z, \sigma_{\text{vertex}})$ , 予測を  $\hat{\mathbf{y}} = (\hat{E}, \hat{x}, \hat{y}, \hat{z}, \hat{\sigma}_{\text{vertex}})$  とする。本研究では、エネルギーに依存した統計ゆらぎ (典型的に  $\propto \sqrt{E}$ ) を考慮するため、エネルギーの平方根  $\sqrt{E}$  を用いて残差を定義する。ただし、極端に小さい (あるいは大きい) エネルギーで重み付けが不安定になることを避けるため、 $\sqrt{E}$  は所定の範囲 (0.1 - 10) に制限して用いる。エネルギー残差は

$$e \equiv \frac{\hat{E} - E}{\sqrt{E}} \quad (6.22)$$

と定義する ( $\Delta E / \sqrt{E}$  型の正規化)。一方、位置  $(x, y, z)$  および広がり  $\sigma_{\text{vertex}}$  については、低エネルギーほど発生点が決まりにくく、高エネルギーほど分解能が改善する (典型的に  $\sigma_x \propto 1/\sqrt{E}$ ) という性質を反映するため、残差に  $\sqrt{E}$  を掛けて

$$x \equiv (\hat{x} - x)\sqrt{E}, \quad y \equiv (\hat{y} - y)\sqrt{E}, \quad z \equiv (\hat{z} - z)\sqrt{E}, \quad \sigma \equiv (\hat{\sigma}_{\text{vertex}} - \sigma_{\text{vertex}})\sqrt{E} \quad (6.23)$$

と定義する。なお、式 (6.23) の  $x, y, z, \sigma$  は座標そのものではなく、上式で定義された残差量を表す。

### 分解能指標としての標準偏差

上で定義した残差  $e, x, y, z, \sigma$  は検証イベント集合上で分布を持つ。そこで本研究では、

$$\text{std}(e), \text{std}(x), \text{std}(y), \text{std}(z), \text{std}(\sigma) \quad (6.24)$$

を分解能指標として用いる。この定義により、エネルギーについては  $\Delta E/\sqrt{E}$ 、位置・広がりについては  $\Delta r\sqrt{E}$  の形でエネルギー依存性のある程度打ち消した比較が可能となり、広いエネルギー範囲に対して公平に性能を評価できる。

### 本研究における評価の位置づけ

学習の最適化は損失  $\mathcal{L}$  により行うが、モデル選択や性能報告では、物理的に解釈しやすい  $\text{std}(e), \text{std}(x), \text{std}(y), \text{std}(z), \text{std}(\sigma)$  を併用する。特に、エネルギー  $E$  と発生点  $(x, y, z)$ 、広がり  $\sigma_{\text{vertex}}$  を同時に回帰する本研究では、ある成分だけが改善して他が悪化する可能性があるため、5成分を並列に監視することが重要である。

## 6.3 トレーニング

### 6.3.1 トレーニングデータセット

機械学習におけるトレーニングデータセットとは、モデルのパラメータ（重み）を学習・更新するために使うデータの集合のことである。本論文においてトレーニングデータセットには KLG4 で作成したシミュレーションを用いる。ジオメトリは KamLAND2-Zen のものを用いた。Bis-MSB と PEN フィルムを入れた場合の影響を調べるために以下の2種類のシミュレーションを作成した。

1. **w Bis/PEN** : Bis-MSB と PEN フィルムを用いたシミュレーション
2. **wo Bis/PEN** : Bis-MSB を用いずにナイロンフィルムを用いたシミュレーション

バルーン内の半径 6.5 m において、エネルギーに幅を持つベータ崩壊やガンマ崩壊を発生させたものをトレーニングデータに用いた。エネルギー的に一様なベータ崩壊を 100 万イベント作成した。さらにベータ崩壊のみ、ガンマ崩壊のみ、ベータ崩壊とガンマ崩壊の両方、

のどれかが発生するシミュレーションを 100 万イベント作成した。上記の 200 万イベントをトレーニング用データセットとした。200 万イベントのうち 20 万イベントは、モデルが過学習していないかの検証用に分離して使用した。トレーニングデータセットは Bis-MSB 及び PEN フィルムの有無で合計 400 万イベント作成した。

### 6.3.2 GNN モデルのトレーニング方法

トレーニングデータセットである 180 万イベントを 5 万イベントずつに分け、合計 36 ファイルを作成した。各エポックで 36 個のファイルをランダムシャッフルして学習するという処理を 60 エポックまで行った。1 エポックが終了するたびに、20 万イベントを 5 万イベントずつに分けた 4 ファイルを用いて検証を行った。検証では縦軸評価指標（ロス、 $\text{std}(e)$ ,  $\text{std}(x)$ ,  $\text{std}(y)$ ,  $\text{std}(z)$ ,  $\text{std}(\sigma)$ ）、横軸エポックの図を得ることができ、それらの図の概形を見て過学習していないか、学習がうまくいっているかを判断する。過学習している際はエポックが進むにつれて評価指標が右肩上がりになる。また、学習が上手くいっていない場合には、エポックが進んでも評価指標が一定値に収束しない。以下に本研究で使用するトレーニング済みモデルを作成した時の図をまとめる。

図 6.7、図 6.9、図 6.15、図 6.10、図 6.11、図 6.17、図 6.12、図 6.18 は学習が上手くいっていることを表している。学習が上手くいっていないのは図 6.16 にある  $\sigma_{\text{vertex}}$  であり、これは他の図と違ってエポックが進むにつれて収束していない。Bis-MSB を含むデータセットに対して、モデルが学習性能を獲得できていないことを示唆している。後に 7 章にて PID 性能を見るときに再び議論する。 $\sigma_{\text{vertex}}$  の学習が収束していないことに伴い、図 6.13 のトレーニングのロスが収束していないと推測している。

## 6.4 パラメータチューニング

ハイパーパラメータとは、モデルの学習手続きを定める設定値の総称であり、学習の中で自動的に決まる「モデルの重み（パラメータ）」とは別物である。例えば学習率は、誤差を減らす方向に重みを更新する際に、1 回の更新でどの程度重みを変化させるかを定める量である。また、学習の進め方（学習率を途中で変える規則など）、過学習を抑えるための強さ、学習の数値的安定性を保つための制約などもハイパーパラメータに含まれる。これらは学習結

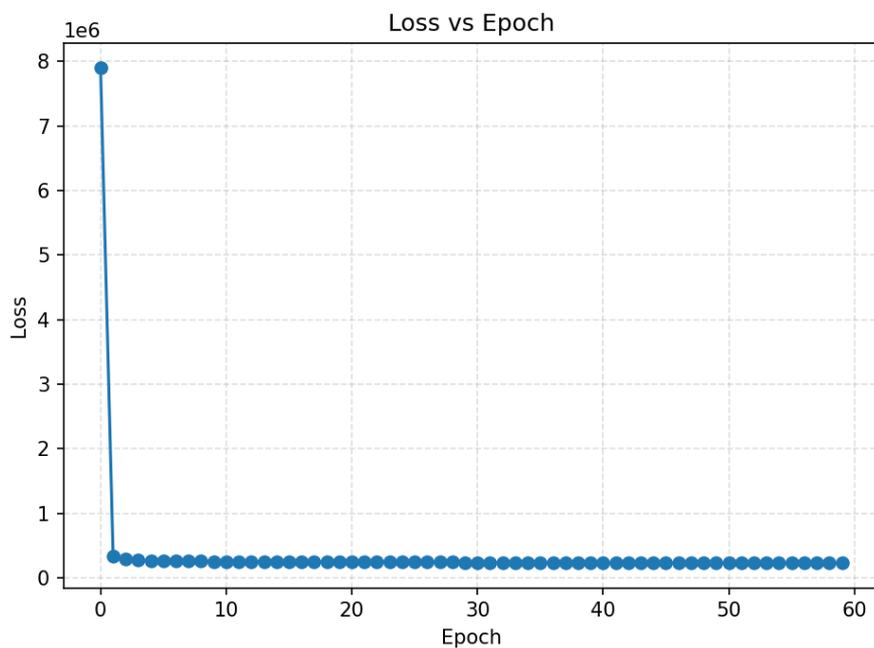


図 6.7: Bis-MSB 及び PEN を含むデータセットにおけるトレーニングロスのエポック変化

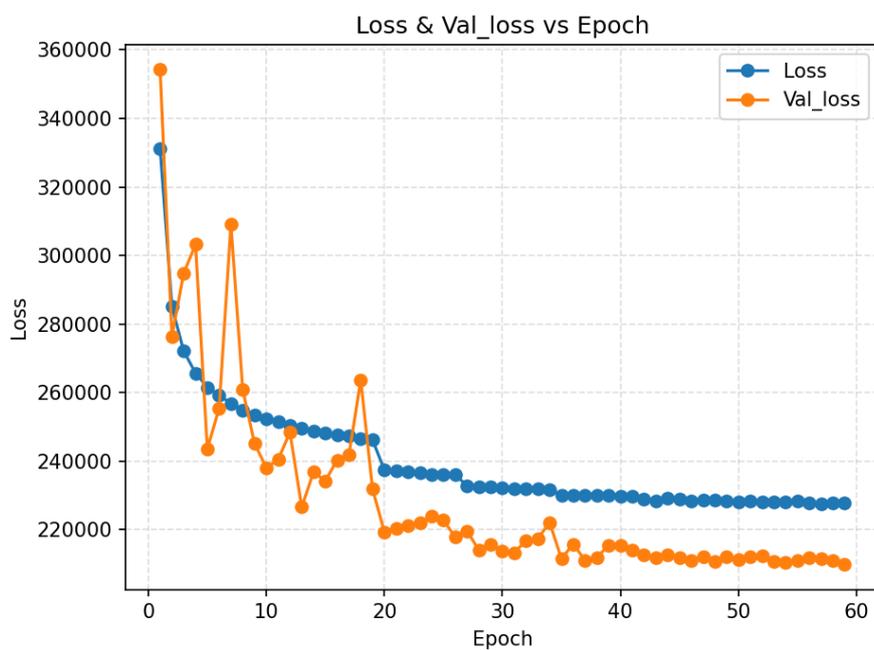


図 6.8: Bis-MSB 及び PEN を含むデータセットにおけるトレーニングロスのエポック変化

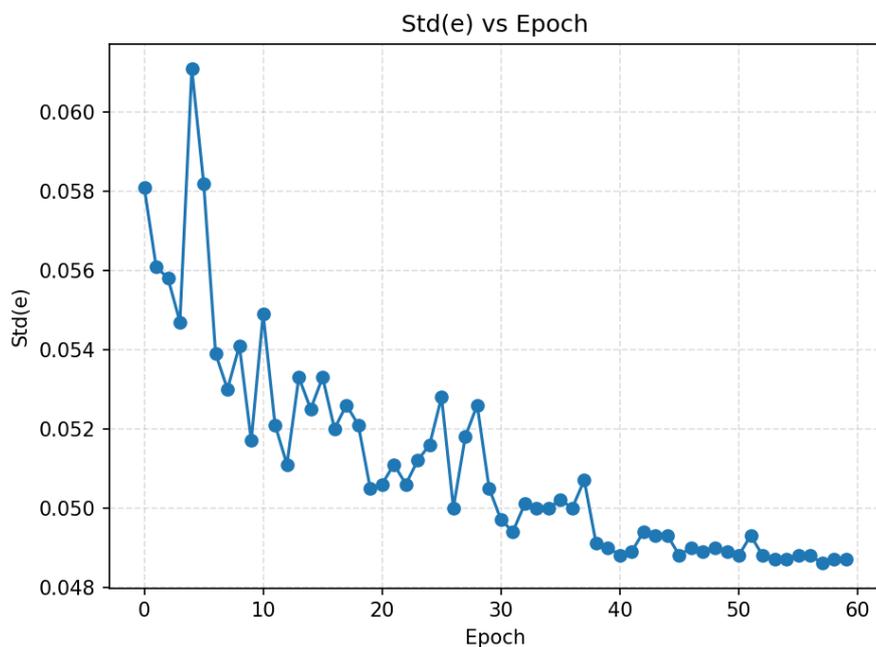


図 6.9: Bis-MSB 及び PEN を含むデータセットにおけるエネルギー評価指標のエポック変化

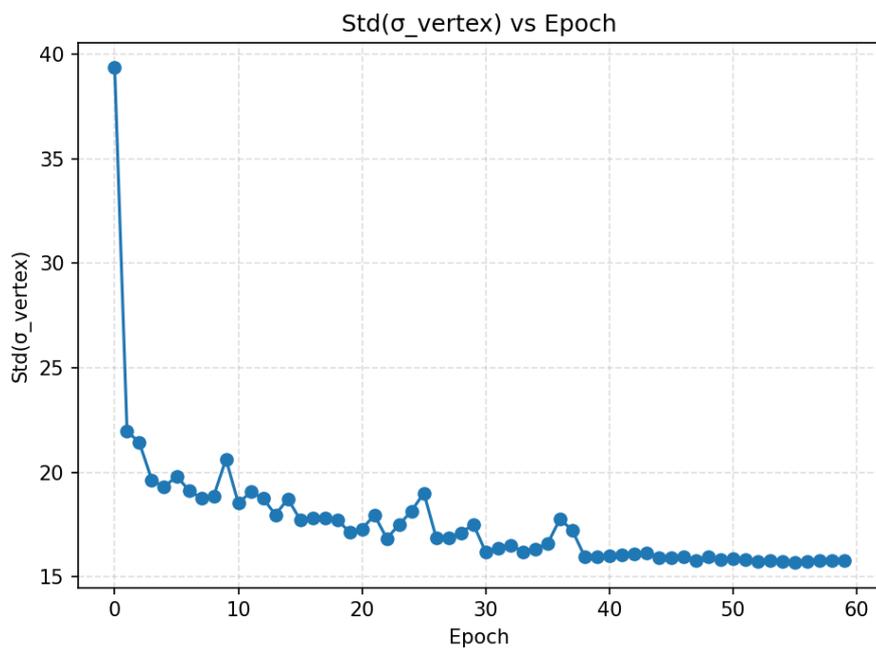


図 6.10: Bis-MSB 及び PEN を含むデータセットにおけるエネルギーの広がり評価指標のエポック変化

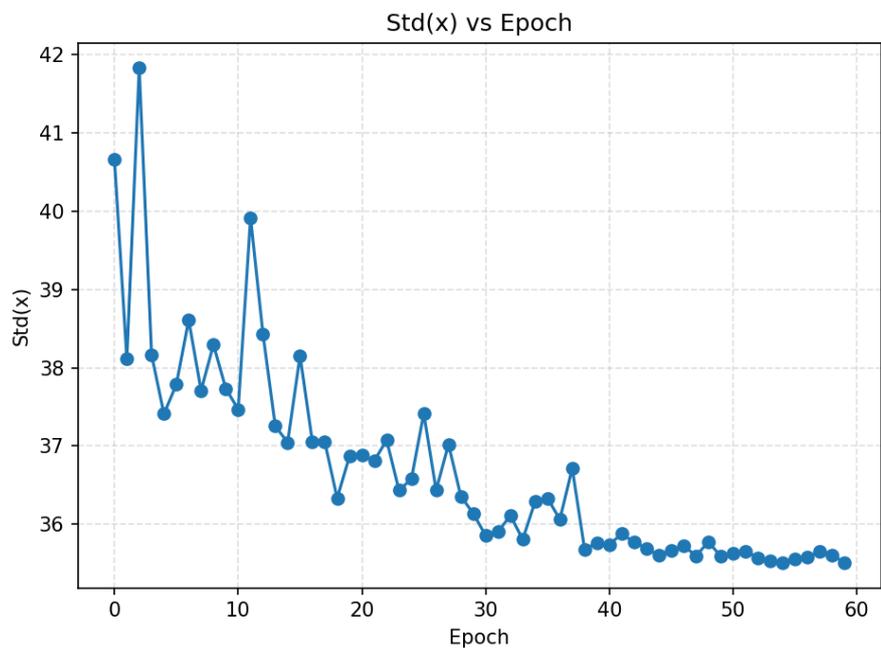


図 6.11: Bis-MSB 及び PEN を含むデータセットにおける位置評価指標のエポック変化

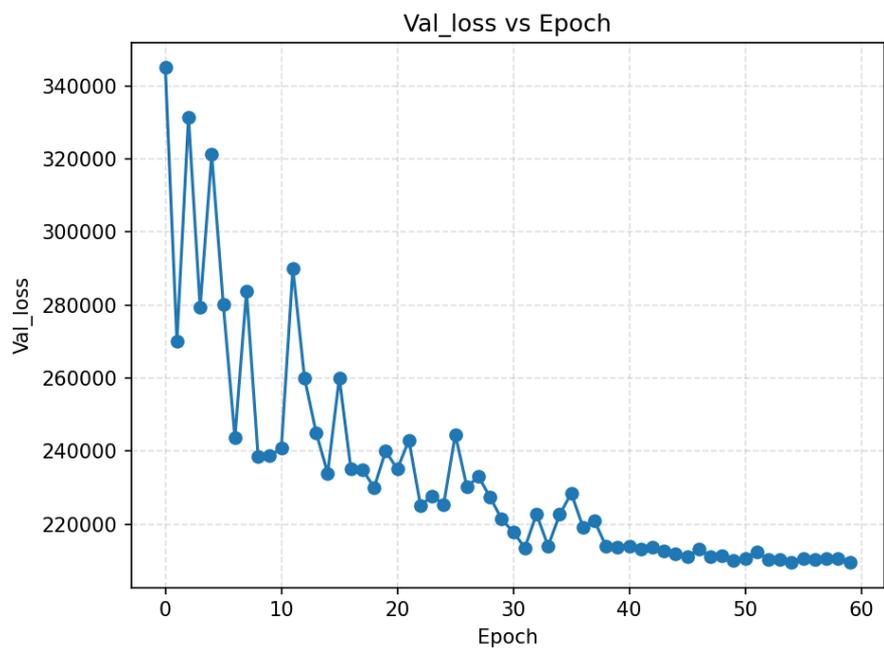


図 6.12: Bis-MSB 及び PEN を含むデータセットにおける検証時のロスのエポック変化

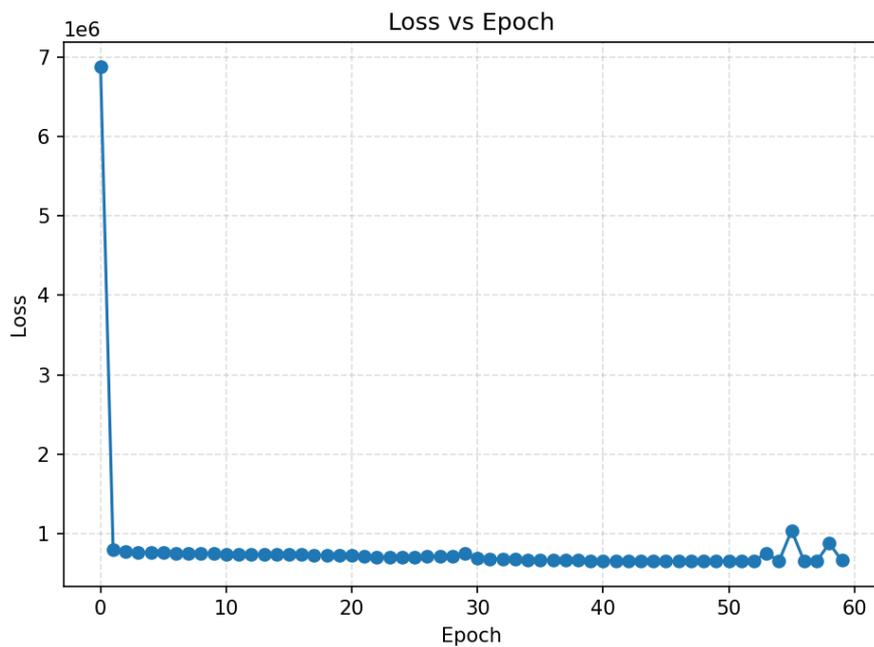


図 6.13: Bis-MSB 及び PEN を含まないデータセットにおけるトレーニングロスのエポック変化

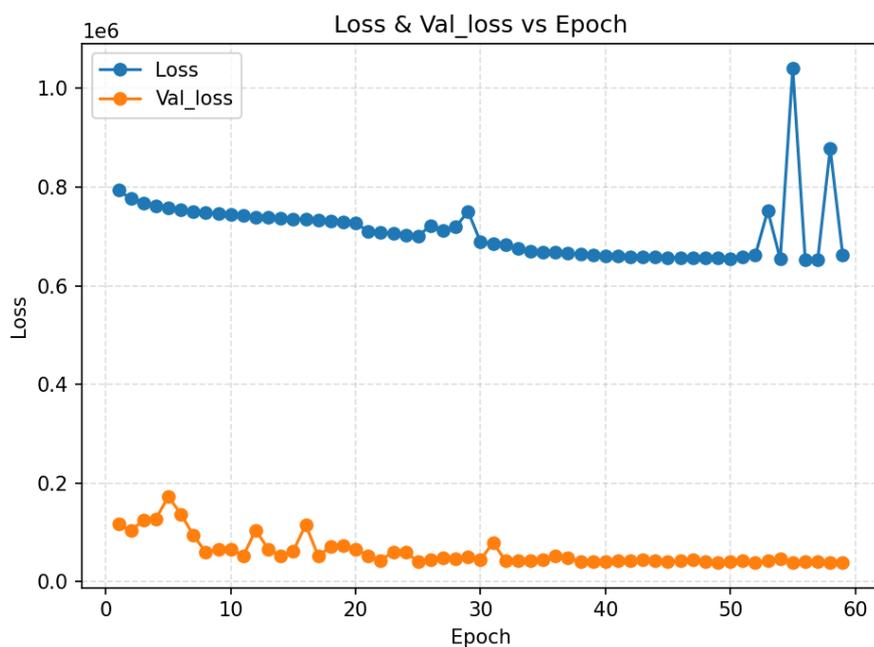


図 6.14: Bis-MSB 及び PEN を含まないデータセットにおけるトレーニングロス・検証ロスのエポック変化 (0 エポックを除く)

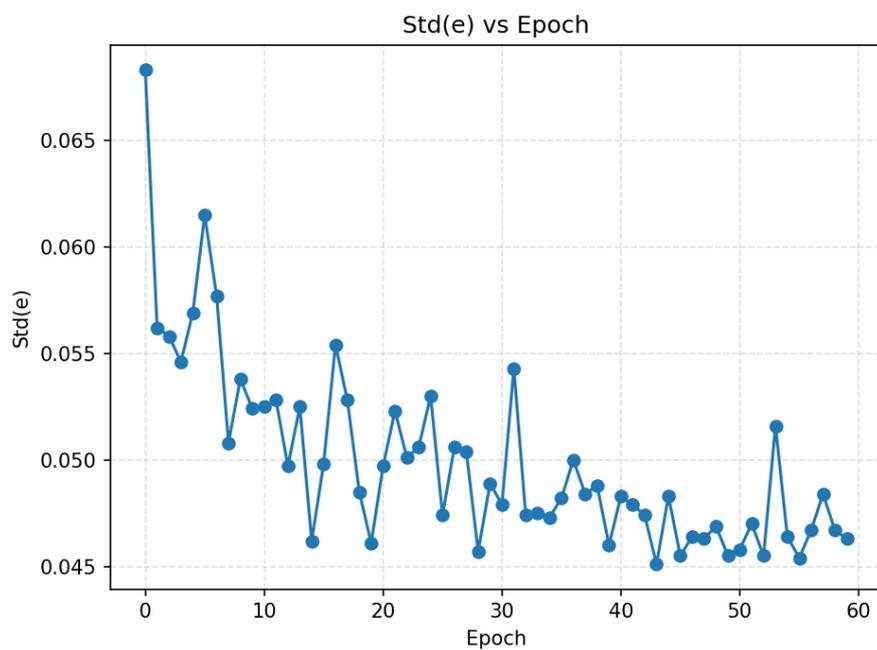


図 6.15: Bis-MSB 及び PEN を含まないデータセットにおけるエネルギー評価指標のエポック変化

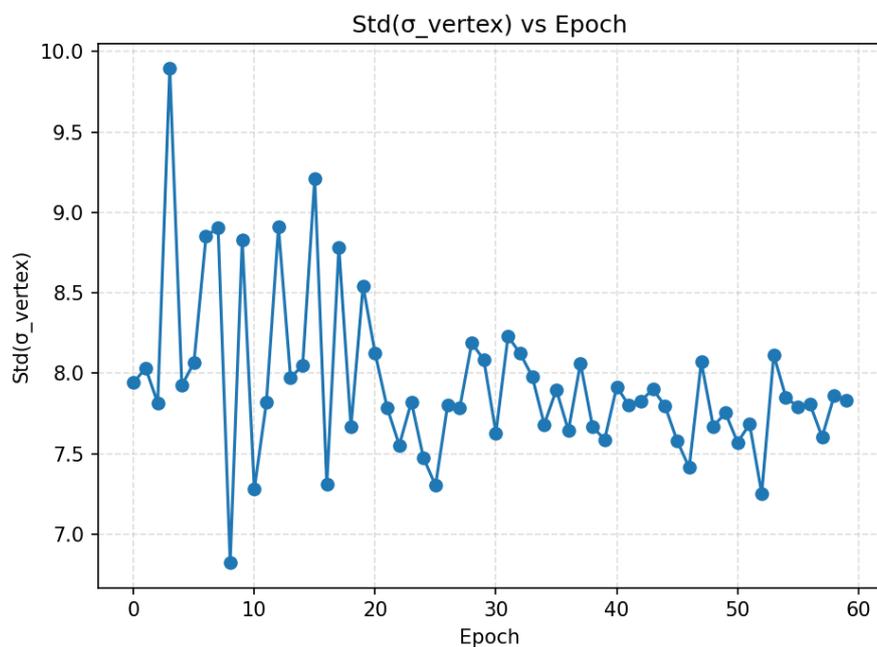


図 6.16: Bis-MSB 及び PEN を含まないデータセットにおけるエネルギーの広がり評価指標のエポック変化

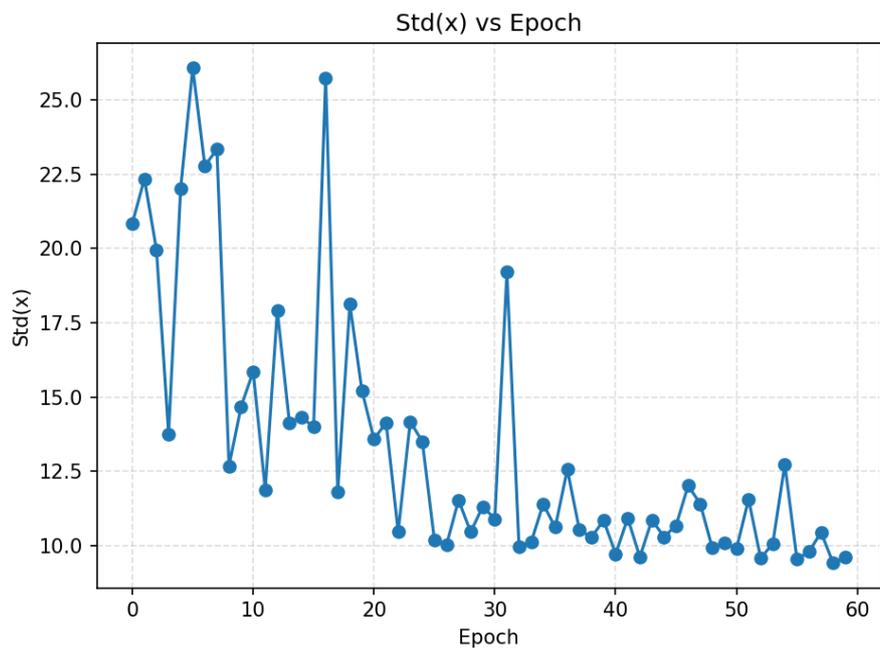


図 6.17: Bis-MSB 及び PEN を含まないデータセットにおける位置評価指標のエポック変化

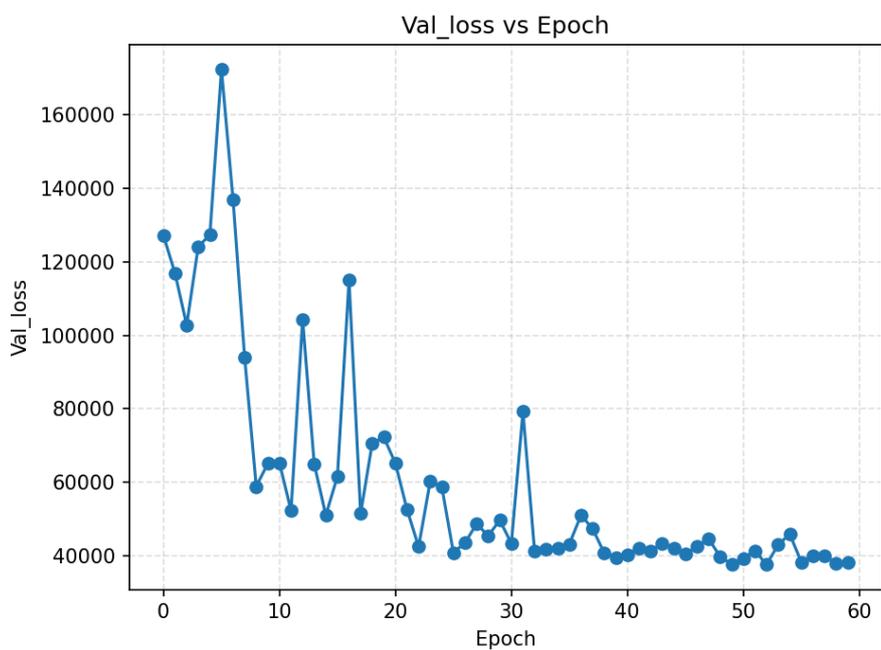


図 6.18: Bis-MSB 及び PEN を含まないデータセットにおける検証時のロスのエポック変化

果の収束の速さや安定性、およびデータセットに対する再構成性能に大きく影響するため、目的に応じて適切に選択・最適化する必要がある。

#### 6.4.1 ハイパーパラメータの最適化方針

パラメータチューニングの目的は、Bis-MSB 添加の有無により光学応答が変化するデータセットに対して、適切なハイパーパラメータを選択することで再構成した際の分解能を向上させることである。特に Bis-MSB 有り・無しの条件で観測される検出器応答の差異を考慮し、データセット (Bis-MSB 有り・無し) に応じて最適なパラメータを選ぶことを基本方針とした。モデル構造自体の変更は最小限に留め、ネットワーク構成を維持したまま、学習手続きに関わるパラメータを中心にチューニングを行った。

#### 6.4.2 チューニング対象

チューニングは、モデルの構造自体ではなく、学習の進め方を決定する設定 (ハイパーパラメータ) に対して行った。前処理に関する詳細は 6.2 に示されている。ここでは学習に関する設定のみをまとめる。調整対象は主に以下のものである。

- **学習率 (learning rate)** とその変化のさせ方：学習率とは 1 回の更新でモデルの重みをどの程度動かすかを定める量であり、収束の速さと安定性に強く影響する。学習の途中で学習率を変化させる方法も含めて最適化した。
- **オプティマイザーの選択**：勾配情報に基づいて重みを更新する方法 (オプティマイザー) (例：AdamW や Lion など) を候補とし、データセット条件に対して相性の良いものを選択した。
- **過学習を抑えるための強さ**：学習データに過度に適合して検証データで性能が落ちることを避けるため、学習中の揺らぎの入れ方 (例：dropout) や、重みが極端な値になりにくくする制約の強さを調整した。

これらの設定は互いに影響し合うため Bis-MSB 有り・無しで最適な組合せが異なり得る。そのため、本研究では Bis-MSB 有り・無しを別条件として扱い、それぞれで最適な設定を探索・決定した。

ハイパーパラメータの最適化は、パラメータごとにあらかじめ候補となる設定の範囲を定

め、その中から複数の候補を試す。最適化は Optuna[24] を用いて行った。評価では検証用データに対するエネルギーおよび位置の再構成誤差（分解能）からなる目的関数を用いた。最終的に採用する設定は、検証用データに対して最も良い性能を示したものを基本とした。具体的には、以下のような目的関数を最小化するようにチューニングを進めた。

$$\text{score} = 300 \text{std}(E) + \frac{\text{std}(x) + \text{std}(y) + \text{std}(z)}{3} + \text{std}(\sigma_{\text{vertex}})$$

ここで、 $\text{std}(i)$  とは、6.24 で定義した分解能指標である。

### 探索対象

本論文で Optuna を用いたハイパーパラメータチューニングの探索対象としたものは、学習設定に関わるもの、入力前処理、グラフ構造に関わるものに大別される。以下にパラメータとその探索範囲、データセットごとのチューニング結果を載せる。

表 6.2: チューニング対象パラメータ一覧

パラメータ名	探索範囲	wo/ Bis 採用値	w/ Bis 採用値
<b>前処理・データ系</b>			
tau_max_t	[250.0, 350.0]	315.0	295.0
tau_min_t	[-100.0, -70.0]	-82.0	-87.0
tau_th	[0.02, 0.20]	0.085	0.1129
Scalar_T	[15.0, 40.0]	22.6	20.44
Scalar_Q	[1.5, 5.0]	2.8	3.22
Norm_T	[0.005, 0.020]	0.0078	0.00972
Norm_Q	[0.8, 2.0]	1.71	1.611
clip_min	[-3.0, -1.0]	-2.79	-2.27
clip_max	[10.0, 13.0]	11.0	12.5
<b>グラフ構造系</b>			
_NK	[8, 14] (step=2)	12	14
_NKP	[7, 12]	8	11
K_NEAR_NS	[9, 12]	11	10
selfloop_eps	[ $10^{-4}$ , $3 \times 10^{-2}$ ] (log)	$5.7 \times 10^{-4}$	0.0143
<b>モデル系</b>			
dropout	[0.05, 0.25]	0.206	0.0532
dropout_f	[0.005, 0.025]	0.0111	0.0111
<b>最適化系</b>			
lr	[ $3 \times 10^{-5}$ , $2 \times 10^{-4}$ ] (log)	$7.87 \times 10^{-5}$	$5.06 \times 10^{-5}$
plateau_min_lr	[ $10^{-6}$ , $5 \times 10^{-5}$ ] (log)	$6.79 \times 10^{-7}$	$4.37 \times 10^{-7}$
plateau_patience	[2, 8]	5	5
plateau_factor	[0.3, 0.7]	0.6	0.42
warmup_steps	[200, 1600] (step=200)	1000	1000
grad_clip	[1.0, 5.0]	3.0	4.072
<b>Optimizer (Lion)</b>			
lion_beta1	[0.90, 0.95]	0.94	0.9167
lion_beta2	[0.95, 0.999]	0.98	0.9906
weight_decay	[0.0, $10^{-3}$ ] (log)	0.0	$10^{-4}$

## 第 7 章

# 性能評価

### 7.1 シミュレーションを用いた性能評価

学習済みモデルの性能を定量的に評価するため、KLG4 により生成したテストデータセットを用いた。特に本研究では、KamLAND2-Zen で導入が検討されている PEN フィルムおよび Bis-MSB が再構成性能に与える影響を検証するため、これらを導入した場合 (With Bis & PEN) と、導入しない従来構成 (Without Bis & PEN) の双方でデータを生成し、比較評価を行った。

#### 7.1.1 評価用データセット

評価に使用したデータセットは以下の 4 種類である。

- **SingleBeta:** 2.5 MeV の単色  $\beta$  線イベント ( $0\nu\beta\beta$  信号の模擬)
- **SingleGamma:** 2.5 MeV の単色  $\gamma$  線イベント (背景事象の模擬)
- **FlatBeta:** エネルギーが一様分布する  $\beta$  線イベント (エネルギー依存性の評価用)
- **LLmixROI:** ROI にエネルギーデポジットのある長寿命核種 (Long-Lived products) の混合背景事象

各データセットに対し、学習時と同一の前処理を適用し、モデルに入力した。モデルは各事象に対して、エネルギー  $E$ 、発生位置  $(x, y, z)$ 、および事象の空間的な広がりを表す指標  $\sigma_{\text{vertex}}$  を推定する。

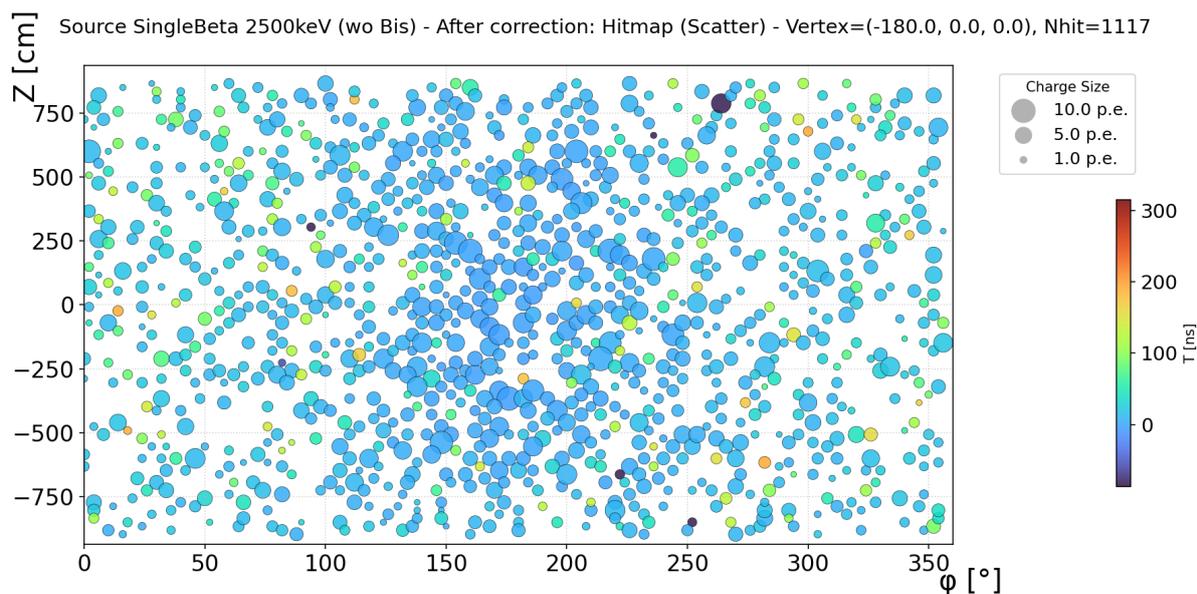


図 7.1: (-180, 0, 0) におけるヒットマップ (wo/ Bis)

### 7.1.2 ヒットマップ

ヒットマップとは、各 PMT がどれだけの光量をどのタイミングで受け取ったかを表したものである。円の大きさが光量を表しており、色はそのヒット時刻を表している。本論文ではインナーバルーンと  $xy$  平面上の交点はおよそ半径 190 cm となっている。また、方位角  $\phi$  は  $xy$  平面内で  $x$  軸正方向を基準に定義し、 $\phi = 0$  が  $x$  軸の正の向きを表す。

図 7.1 と図 7.2 が wo/Bis のヒットマップであり、インナーバルーンフィルム（ナイロンフィルム）を跨いでもヒットマップは連続的であり、境界の付近で特徴的にはなっていない。以下の図 7.3 と図 7.4 では wo/ Bis の場合とは対照的に、インナーバルーン（PEN フィルム）の内側の XeLS 領域で発光は PMT 全体に届き、外側の KamLS 領域での発光は反対側に届きにくいことがわかる。これは PEN フィルムの透過率と KamLS の発光波長の相性からインナーバルーンフィルム側に抜ける光が少ないことが原因だと考えられる。

同様に、w/ Bis の場合に  $z$  軸上で発生させたイベントのヒットマップは図 7.5 と図 7.6 であり、ここでもインナーバルーンを境にヒットマップが大幅に変化していることがわかる。

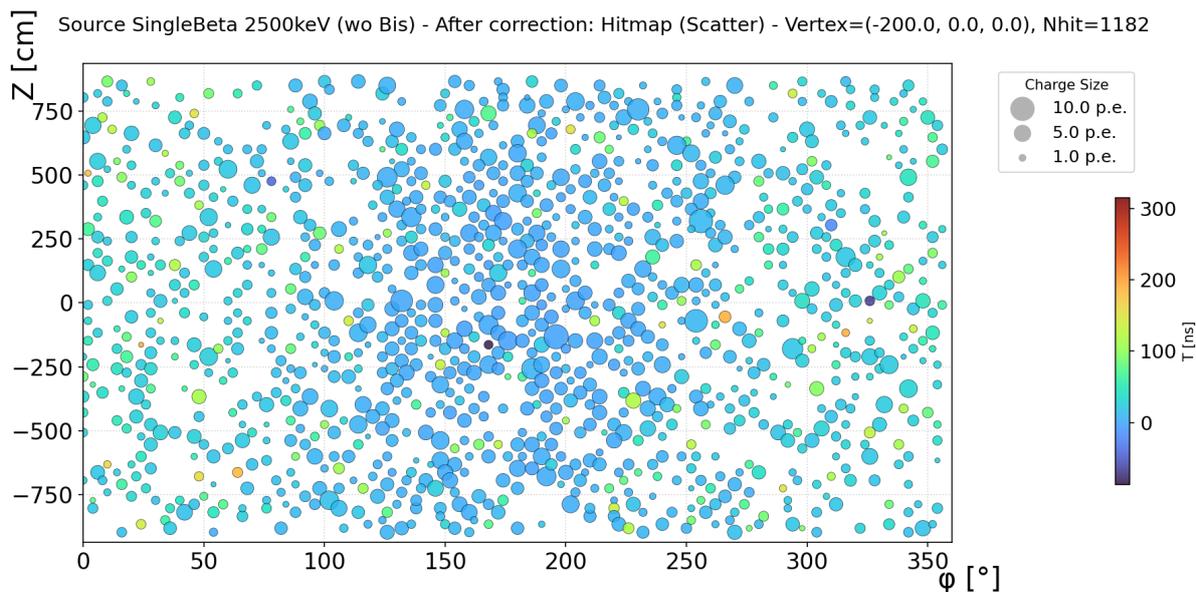


図 7.2: (-200, 0, 0) におけるヒットマップ (wo/ Bis)

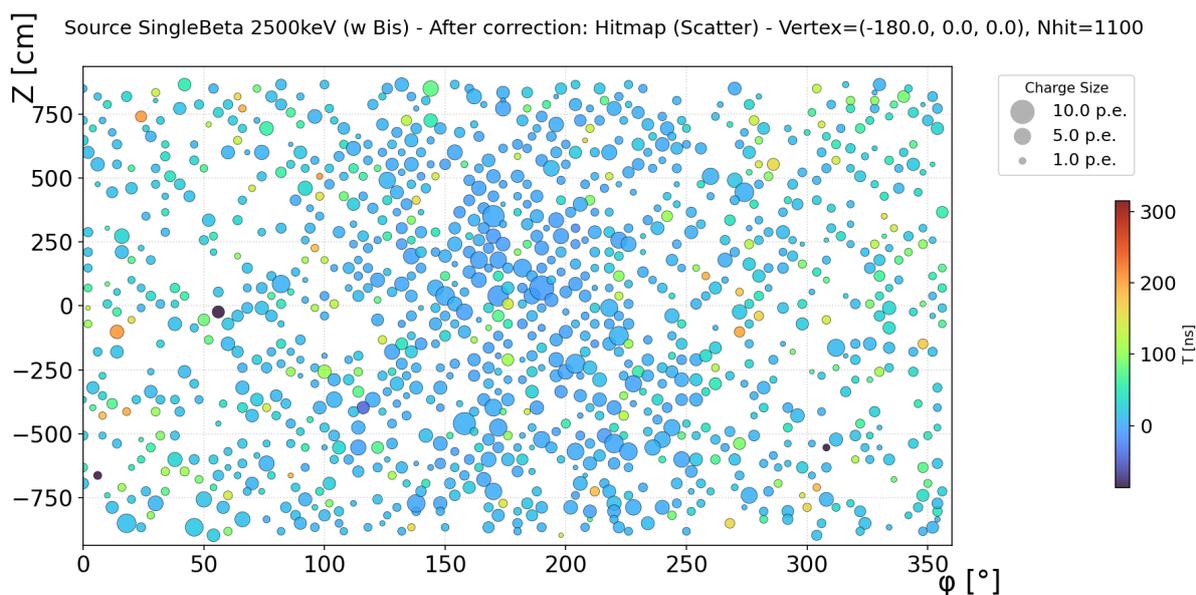


図 7.3: (-180, 0, 0) におけるヒットマップ (w/ Bis)

## 7.2 再構成性能

$0\nu\beta\beta$  探索において、信号である  $\beta$  線（点状のエネルギー損失）と、主要な背景事象である  $\gamma$  線（コンプトン散乱により空間的に広がったエネルギー損失）を識別することは極めて

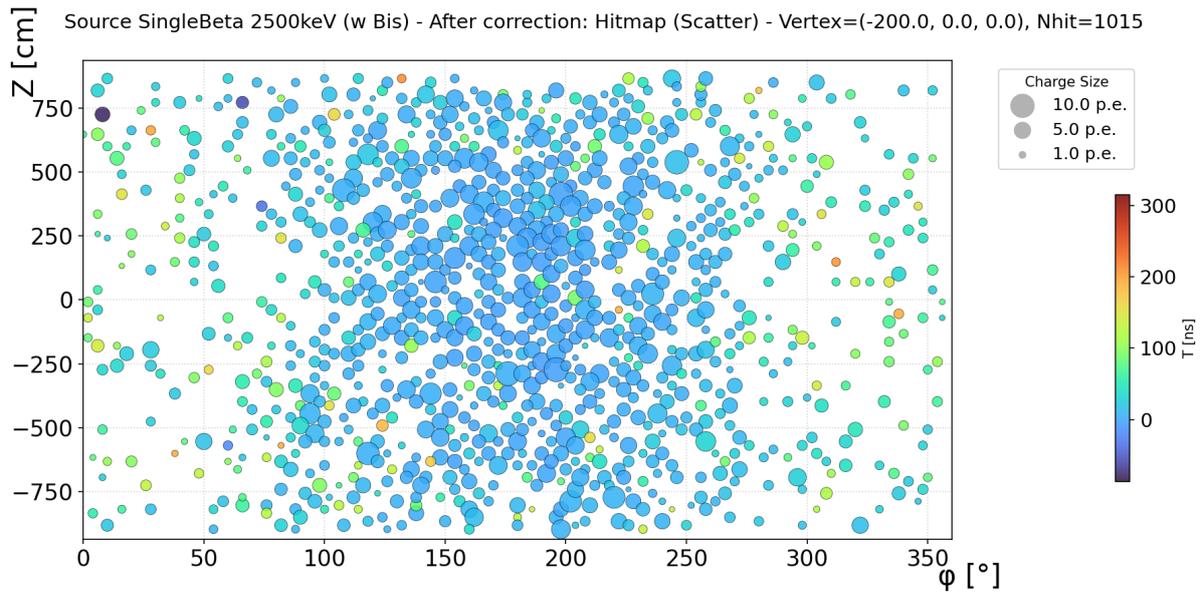


図 7.4:  $(-200, 0, 0)$  におけるヒットマップ (w/ Bis)

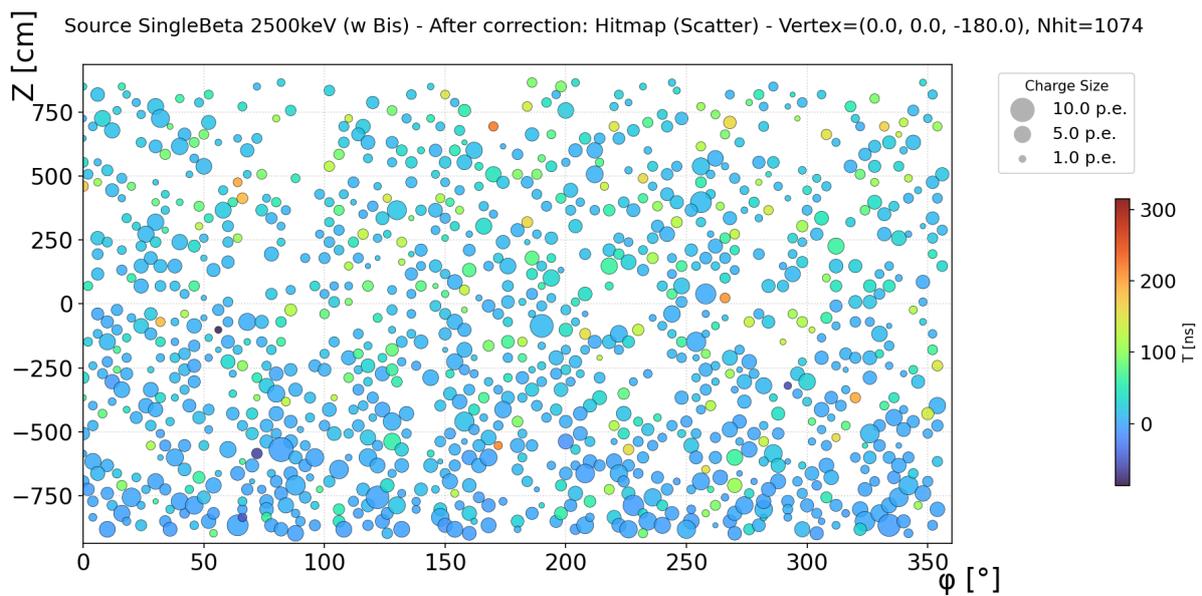


図 7.5:  $(0, 0, -180)$  におけるヒットマップ (w/ Bis)

重要である。本節では、GNN モデルが出力する広がり指標  $\sigma_{\text{vertex}}$  を用いた粒子識別 (PID) 性能について述べる。

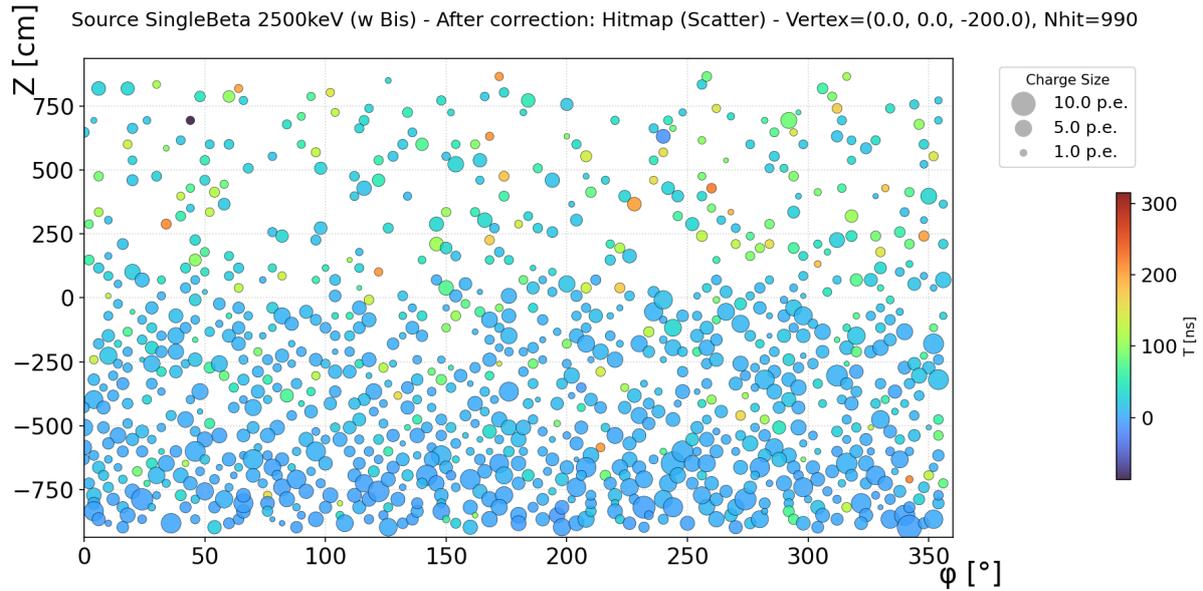


図 7.6: (0, 0, -200) におけるヒットマップ (w/ Bis)

### 7.2.1 評価手法

粒子識別性能の評価では、 $\beta$  線と  $\gamma$  線を分離する能力を定量化した。識別には再構成された事象の広がりパラメータ  $\sigma_{\text{vertex}}$  を判別変数として用いる。具体的な手順は以下の通りである。

1. 閾値の決定:  $\beta$  線イベント (SingleBeta または FlatBeta) の  $\sigma_{\text{vertex}}$  分布から、信号を 90% 保持する値 (90 パーセンタイル点) を計算し、これを識別閾値  $t_{90}$  とする。
2. 識別効率の算出:
  - $\beta$  線保持効率 (Signal Acceptance) : 定義により 90% となる。
  - $\gamma$  線除去率 (Background Rejection) :  $\gamma$  線イベントのうち、 $\sigma_{\text{vertex}} > t_{90}$  となり除去できた事象の割合を算出する。

より細かい評価を行うため、再構成エネルギーが関心領域 (ROI: 2.35–2.70 MeV) 内にあるイベントに対しての PID も実施した。

## 7.2.2 Bis-MSB と PEN フィルム導入による影響評価

本研究の目的の一つは、光量増加を狙いとした Bis-MSB および PEN フィルムの導入が、事象の再構成精度および PID 性能にどのような影響を与えるかを明らかにすることである。これらの導入は光量を増加させエネルギー分解能を向上させる一方で、波長変換に伴う再発光プロセスが光の到達時間を遅延させる。これらが GNN を用いた事象再構成に悪影響を及ぼしていないかを確認するため、Bis-MSB と PEN フィルムを用いたシミュレーションと Bis-MSB と PEN フィルムを使用しないシミュレーションを作成した。両者に対して以下の観点で比較を行った。

### 1. 分解能の座標依存性・エネルギー依存性の確認

再構成されたエネルギーおよび位置の分解能が、検出器内の位置（特にフィルム近傍）や、事象のエネルギーによってどのように変化するかを比較・検証する。

### 2. PID（粒子識別）性能の比較

事象の空間的な広がりを利用した  $\beta$  線・ $\gamma$  線の識別能力について、光学特性の複雑化による性能劣化の有無を定量的に評価する。

## 7.2.3 分解能の座標依存性

分解能の座標依存性を見るために 2.5 MeV の  $\beta$  線事象を軸上で 10 cm 間隔で発生させたシミュレーションデータを用いた。それをトレーニング後の GNN 再構成ツールに再構成させたものが図 7.8, である。分解能の計算には、図 7.7 のようなヒストグラムにガウスフィットを行い、標準偏差を算出する。そこから物理量によってエネルギー依存性を考慮して分解能を算出する。

Bis-MSB を添加した方のデータセットでは XeLS 領域の光量が少なくなっており、且つトレーニングデータにおける XeLS 領域発生イベントが少ないため、結果として XeLS 領域において分解能が低く出ていると考えている。また、KamLS 領域においては Bis-MSB を添加した場合にも特にエネルギー分解能の低下は見られなかった。次に同じイベントに対して位置分解能の座標依存性を図 7.10, , に示す。

図 7.10、7.11、7.12 から、両方のデータセットに対して XeLS 領域では約  $10.5 \text{ cmMeV}^{-1}$

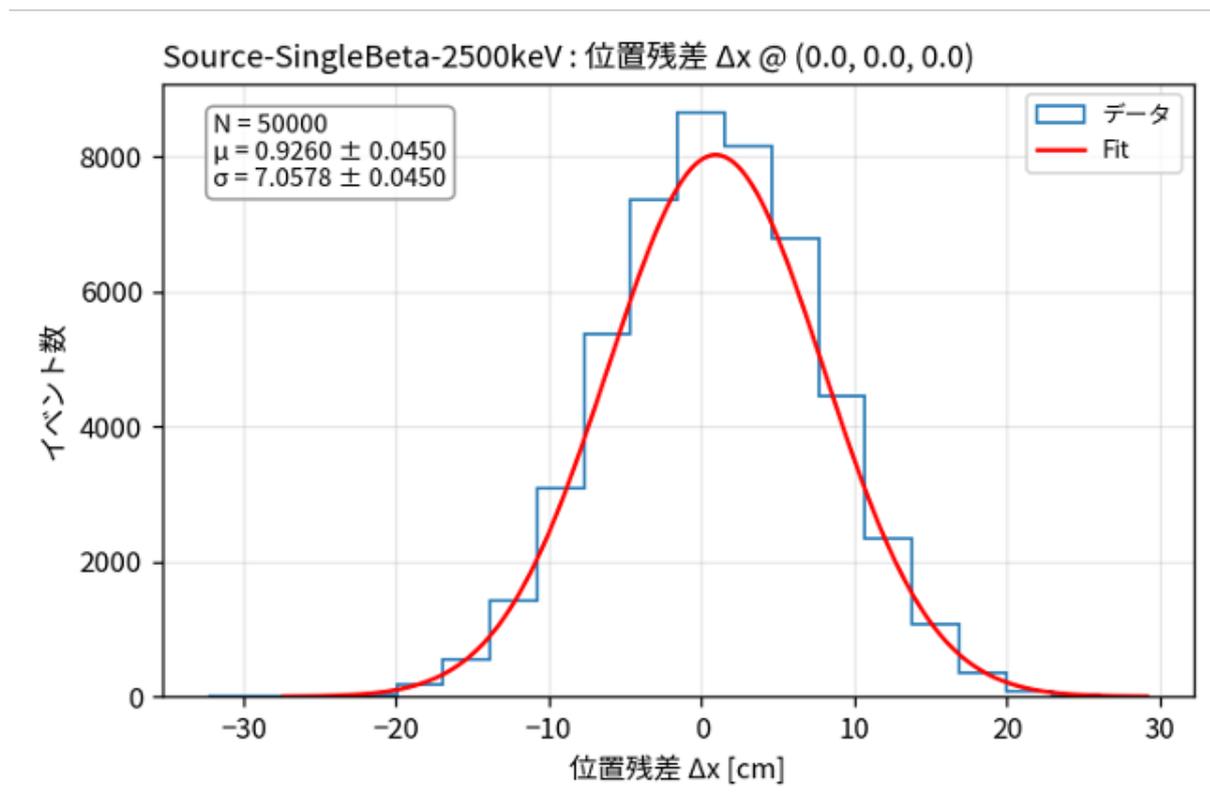


図 7.7: 再構成した座標から生成座標を引いた差分のヒストグラム (原点)

の位置分解能を持つことがわかる。フィルム近辺の領域においては、Bis-MSB と PEN の有のデータセットの方が良い位置分解能を得た。これは図 7.4 と 7.4 のようにフィルムの内外でトポロジーが特徴的であり、GNN がその特徴を捉えることができているからであると考えられる。

#### 7.2.4 分解能のエネルギー依存性

ミニバルーン内部で発生させた一様な  $\beta$  線を再構成した結果、ROI である 2.5 MeV 付近において、約 2.5% のエネルギー分解能が得られた。図 7.13 のようにエネルギーの再構成値と生成エネルギーの値との差分をとり、それを 0.50 MeV から 0.64 MeV などのエネルギー幅でヒストグラムにし、ガウスフィットで標準偏差  $\sigma$  を算出した。それをを用いてエネルギーに依存したエネルギー分解能を算出した。エネルギー分解能のエネルギー依存性を見る際、図 7.14 のようにグラフは  $\sqrt{E}$  に比例する。また、そこからエネルギー依存性を消すと図 7.15 のような一定の値に近づく。

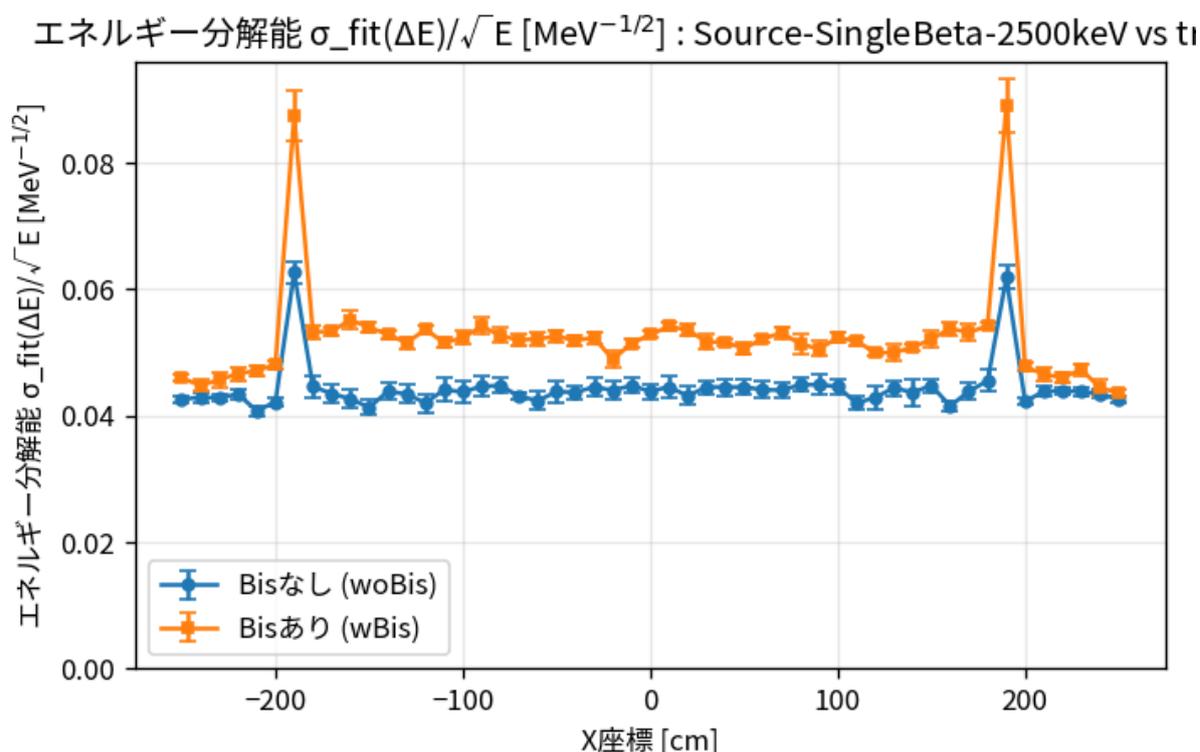
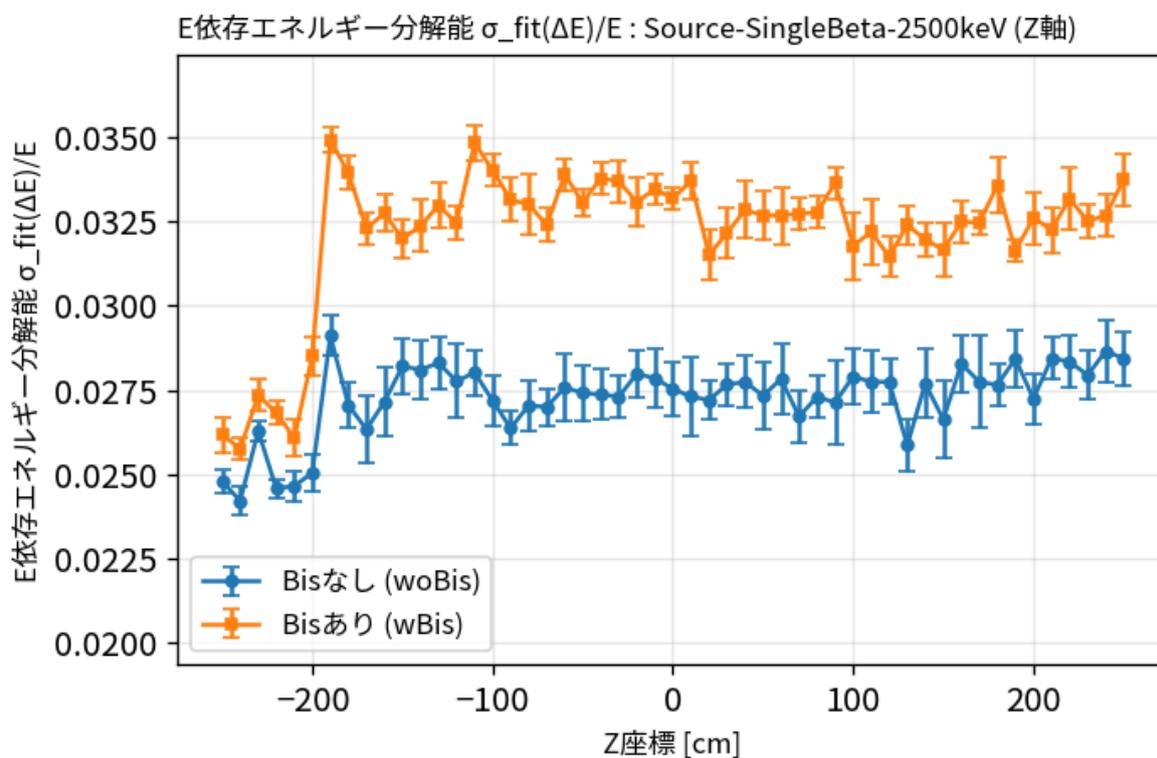


図 7.8: エネルギー分解能の x 座標依存性

$0\nu\beta\beta$  に染み込む  $2\nu\beta\beta$  背景事象の割合は、エネルギー分解能の 6 乗 (5.7 乗) に比例する。そのため、ROI における分解能が  $4.2\%/\sqrt{E}$  [MeV] から  $3\%/\sqrt{E}$  [MeV] になったと仮定すると、 $2\nu\beta\beta$  背景事象は 18% に低減することができる。同様にエネルギー分解能の向上によって ROI が狭くなるため、長寿命核などのフラットなスペクトルの背景事象は  $\frac{3\%}{4\%} = 75\%$  まで低減することができる。

位置分解能のエネルギー依存性も理論的には  $\sqrt{E}$  に比例する。しかし、再構成結果では高エネルギー領域で位置分解能が頭打ちになっている。先行研究より中性子の位置分解能と Xe 核破碎バックグラウンド除去効率が次の図 7.17 のように示されている。[18]。

これより 10 cm より小さい位置分解能は、位置相関を使うタグ (事象同定) には効かなくなると考察される。

図 7.9: エネルギー分解能の  $z$  座標依存性

### 7.3 PID (粒子識別) 性能

長寿命核と一様 $\beta$ 線の粒子識別を行い、ROIである2.35 MeV 2.70 MeVにおけるPID性能を算出した。PID結果として、約60%の除去効率を得た。これによって感度が1.6倍になることが予想される。

Bis無しのデータセットに対して学習を行った際、 $\sigma_{\text{vertex}}$ の学習がうまくいかず、7.18のようにPID性能が得られない場合があった6.16。エネルギーや発生点の学習はうまくいくため、GNNにPID性能を求めなければ問題ないが、PIDを用いた背景事象低減の観点ではBis-MSBを入れたデータセットでしかPID性能を獲得できていない。PID性能を獲得するには、損失関数のパラメータをチューニングするなどして、 $\sigma_{\text{vertex}}$ の再構成に関する重みを大きくする必要がある。

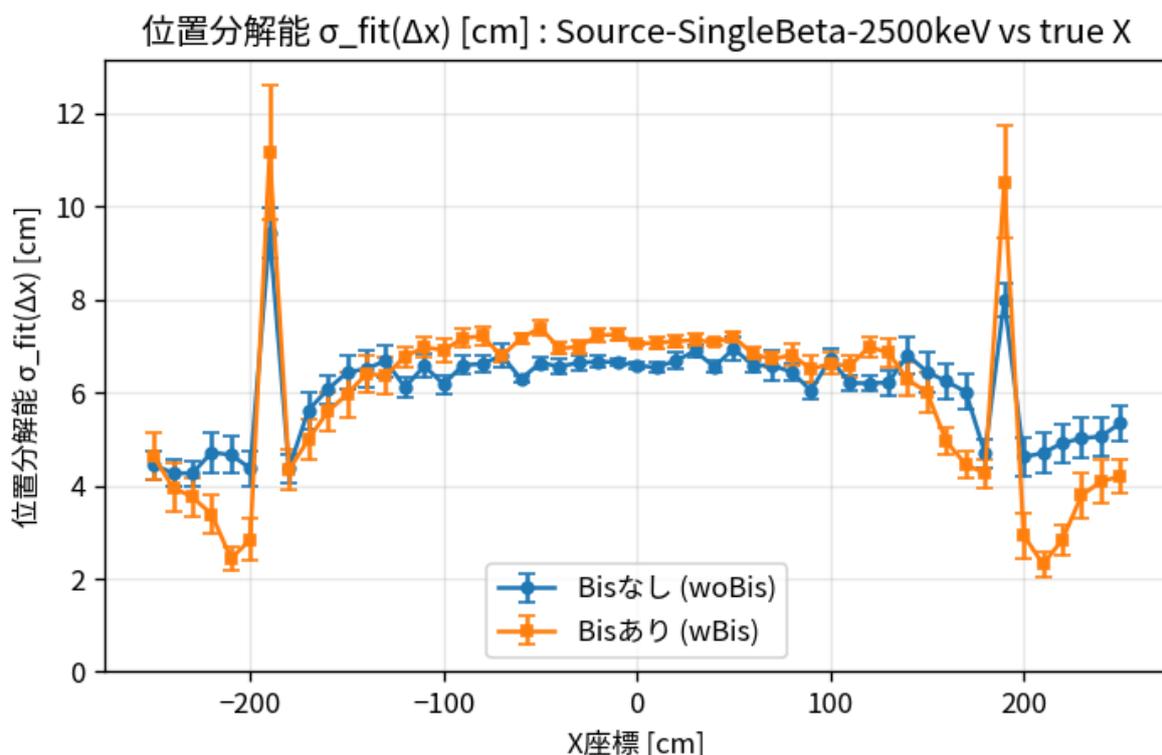


図 7.10: x 方向の位置分解能の x 座標依存性

## 7.4 今後の課題

本論文では開発した GNN 再構成ツールにトレーニングデータとして半径 6.5 m で発生させたイベントを用いた。発生させるイベント数は体積ごとに一定なので、インナーバルーンの半径が 1.9 m であることを考えると、インナーバルーン内部の XeLS 領域で発生させたイベントは全体の 2.4% 程度であることがわかる。本研究では KamLAND2-Zen 検出器全体で一律に発生させたイベントを用いて GNN 再構成ツールをトレーニングした。今後 XeLS 領域での分解能向上を狙うのであれば、トレーニングデータにおける、XeLS 領域で発生させたイベント数を増やすなどの施策が考えられる。また、トレーニングデータ中のベータ崩壊とガンマ崩壊の比率なども今後の課題になりうる。

本研究では粒子識別性能を wo/ Bis のデータセットでは得ることができなかったが、これを獲得するには損失関数のハイパーパラメータを調整することが必要であると考えられる。その調整のためには、 $\sigma_{\text{vertex}}$  の正解と予測の差分を重要視したチューニングを Optuna で行

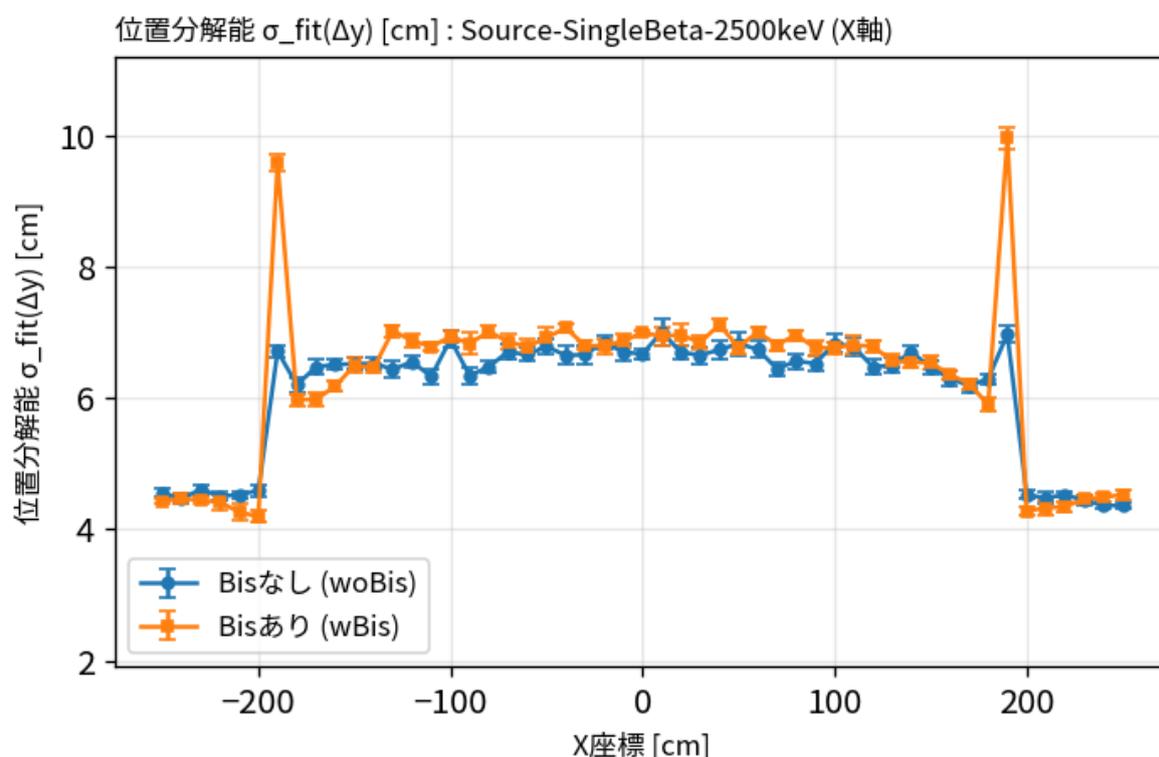


図 7.11: y 方向の位置分解能の x 座標依存性

うことが必要となる。その他にもハイパーパラメータは GNN 再構成モデルにあり、本研究ではチューニングしきれていないものもあるため、今後の研究で更なる性能獲得のためにもチューニングが期待される。

Bis-MSB と PEN フィルムを導入した場合、光学過程が特徴的になるため KamLS で発生したイベントと XeLS で発生したイベントを識別できる可能性がある。シミュレーションデータを作成する段階で発生位置やエネルギーだけでなく、どこの領域で発生させたかのラベルを付与し、そのラベルの分類学習も同じ GNN 再構成ツールで行うことを目指している。共用のシミュレーション作成ツールのリソース及び関連コード作成の観点から本論文には間に合わなかったが、今後の研究課題として試す価値があると考えている。位置再構成とエネルギー再構成は回帰学習であり、分類学習である発生位置の識別をどこのフェーズにどのように組み込むかは悩みどころである。回帰学習と分類学習を同時に行うのか、回帰学習を行った後に分類学習を始めるのかは実装する上で探る必要がある。

それに類似して、ガンマ崩壊を含むイベントを識別する分類学習も行うことが検討されており、それも発生位置の分類学習と同様の悩みが発生する。

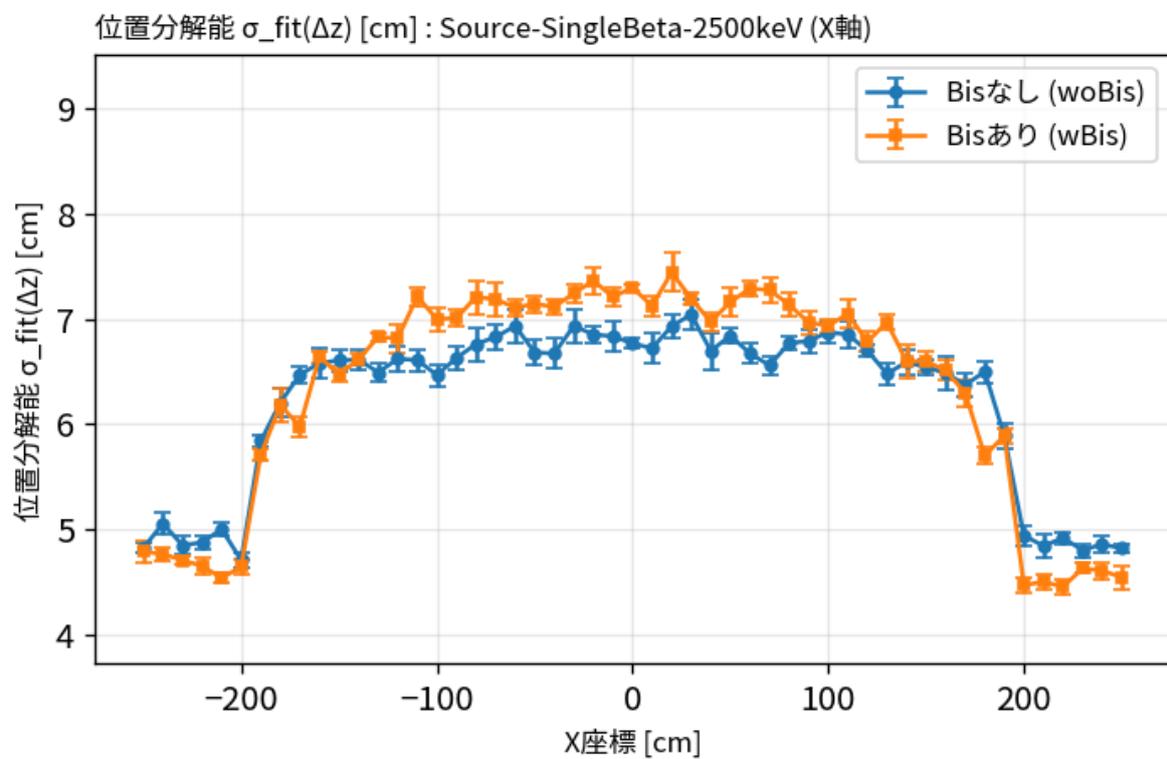


図 7.12: z 方向の位置分解能の x 座標依存性

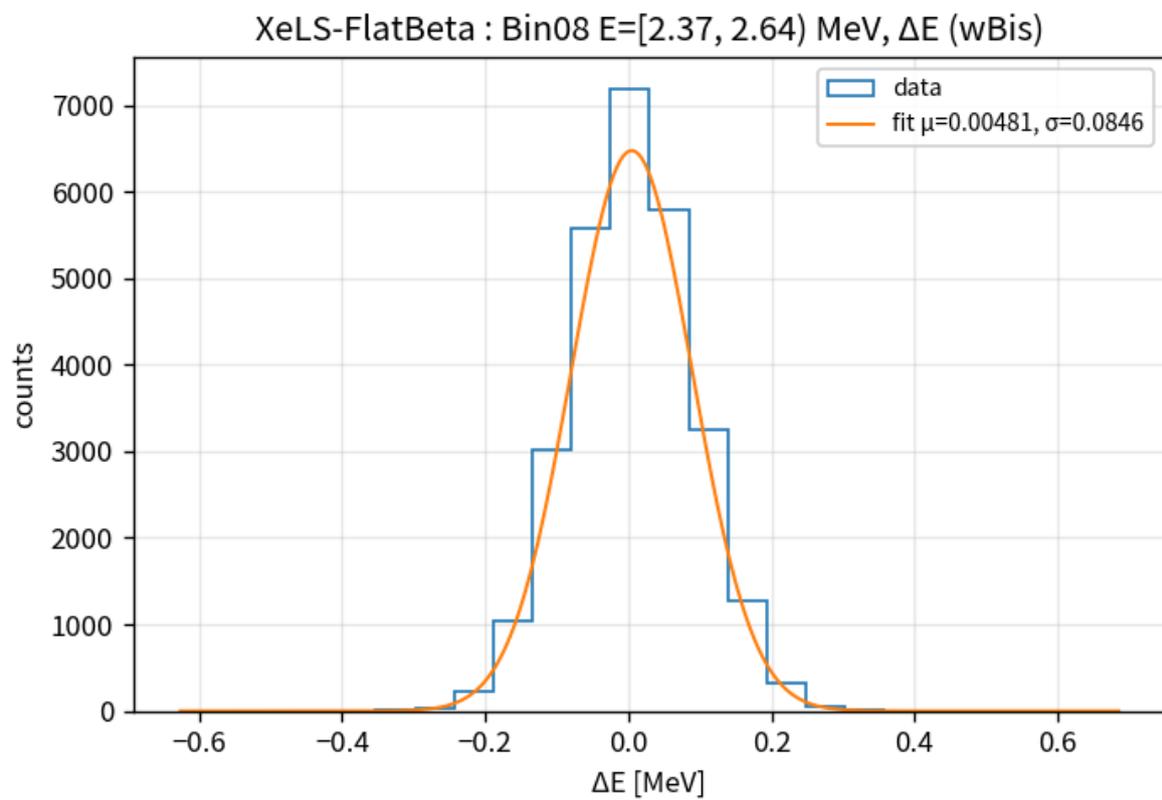


図 7.13: XeLS 内で発生させた FlatBeta の、2.37 MeV から 2.64 MeV におけるエネルギーの再構成値と生成エネルギーの値との差分のヒストグラム

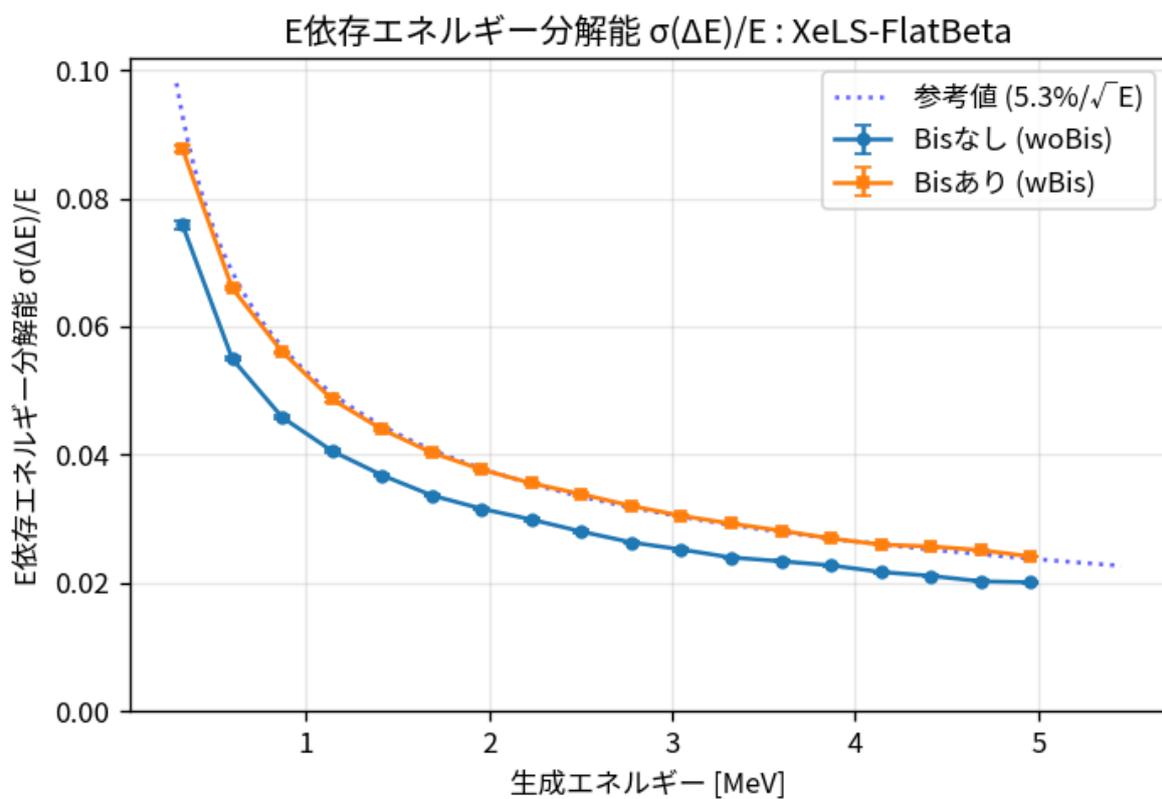


図 7.14: XeLS 内で発生させた FlatBeta のエネルギー分解能のエネルギー依存性

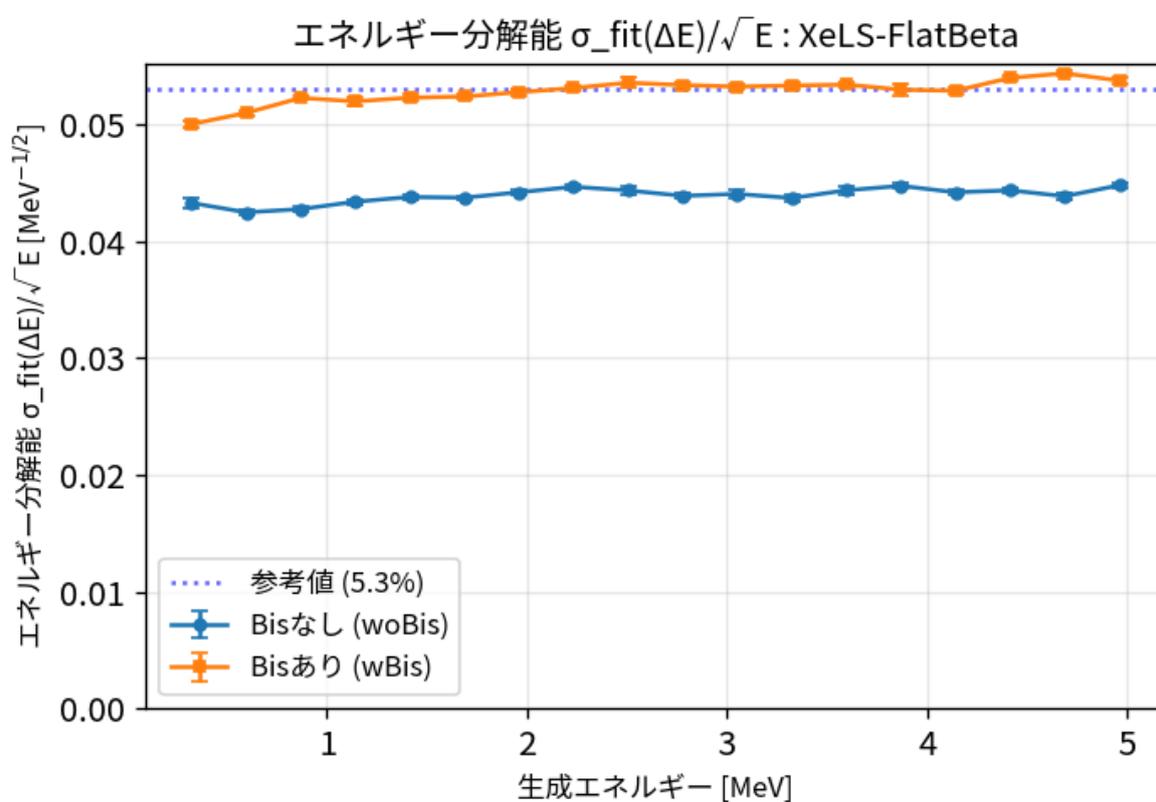


図 7.15: XeLS 内で発生させた FlatBeta のエネルギー分解能。図 7.14 からエネルギー依存性をなくした時のエネルギー分解能。

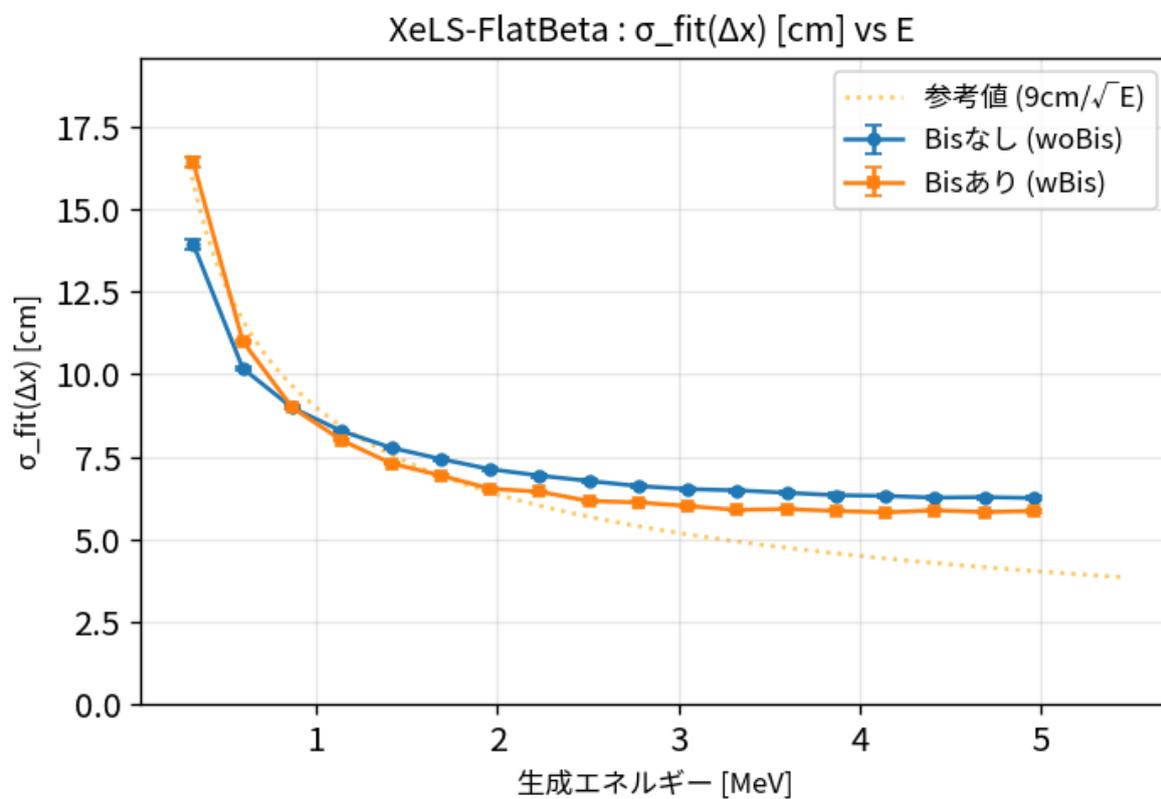


図 7.16: x 軸方向の位置分解能のエネルギー依存性

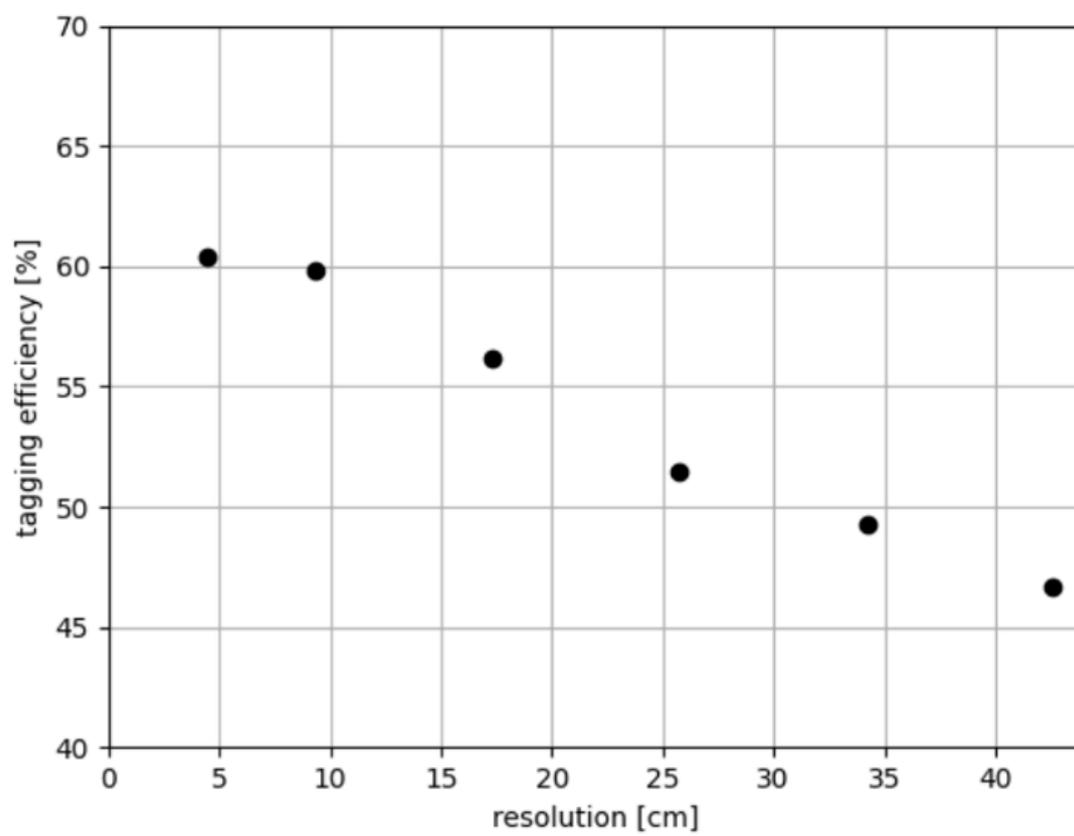


図 7.17: 中性子の位置分解能と Xe 核破碎バックグラウンド除去効率 [18]

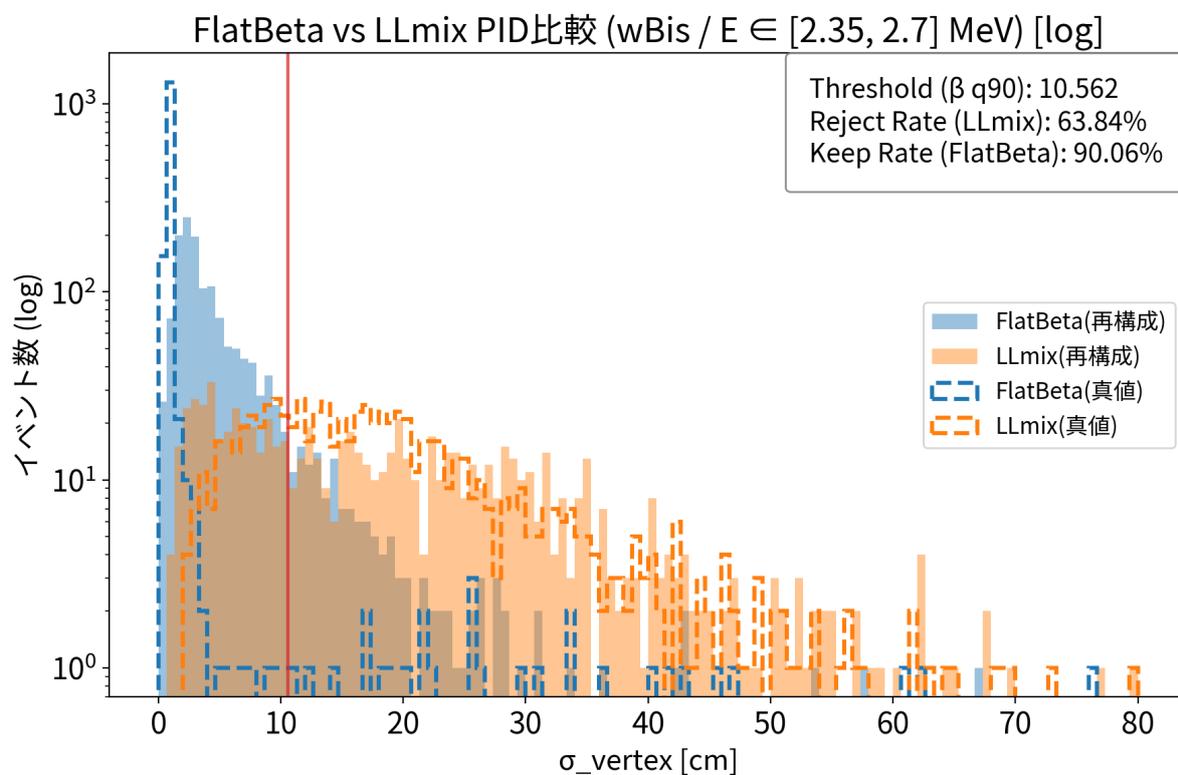


図 7.18:  $\sigma_{\text{vertex}}$  を用いた PID 結果

## 第 8 章

# 結論と展望

### 8.1 結論

本研究では、KamLAND2-Zen 実験に向け、GNN を用いた新たな事象再構成ツールを開発した。本ツールは、PEN フィルムや Bis-MSB 導入による複雑な光学条件下においても、高精度な事象発生点再構成能力と有効な粒子識別能力を持つことを実証した。これらの成果により、KamLAND2-Zen 実験では、エネルギー分解能の向上によって  $2\nu\beta\beta$  崩壊事象が KamLAND-Zen800 と比べて 18% に低減されるとともに、Xe 原子核破砕に由来する長寿命核などのフラットなスペクトルの背景事象についてもエネルギー分解能の改善により 75% まで低減されること、さらに粒子識別技術の導入により長寿命核は追加で 3 分の 1 程度まで低減が可能となることが期待される。現在建設中の KamLAND2-Zen における  $0\nu\beta\beta$  探索感度の向上に大きく寄与する成果であり、Bis-MSB 導入などの挑戦的な試みを強力に支えるソフトウェア基盤を提供するものである。

### 8.2 展望

更なる KamLAND2-Zen におけるシミュレーションの再現性を高めるためには、XeLS や PEN フィルムの精密なパラメータ測定が非常に重要である。シミュレーションの精度が向上することで、GNN の性能が鮮明になり、検出器構築判断に資するデータが得られる。また、GNN モデルには拡張の余地が非常に多く残されている。現在のモデルは一つの波形を想定しているが、2 つ以上の波形が重なった状況にも対応できるマルチヒット解析にも対応

できる可能性があると考えられる。

# 謝辞

本論文執筆にあたり、多くの方々からの御指導、御協力を賜りました。この場を借りて厚く御礼申し上げます。

尾崎先生には何から何まで本当にお世話になりました。機械学習にも解析にも疎い自分に丁寧なご指導をいただきました。仕事も遅く、未熟な資料しか見せられませんでした。ものすごく丁寧に目を通して的確なアドバイスをくださいました。自分の力不足で本研究が尾崎先生の期待通りのところまで進められなかったことに、不甲斐なさを感じております。いつもギリギリな自分を最後まで支えていただき、本当にありがとうございました。

井上先生には大変恵まれた環境で研究できる機会をいただきました。学部での授業での井上先生のお話に惹かれ、ニュートリノセンターを志望しました。学部で素粒子原子核理論研究室にいた自分にとって、KamLAND 解体のこの珍しい時期にニュートリノセンターで活動できた経験は、とても貴重で糧になるものとなりました。心より御礼申し上げます。

石徹白先生にも非常にお世話になりました。センターに来てすぐの自分に奨学金の推薦書を書いていただき、本当に有り難かったです。M1の時の物理学会前には、何をすれば良いかわからなかった自分の相談に乗ってくださり、液面系の仕事をいただきました。その後も日頃から気にかけてくださり、センターでの雑談であったり、神岡で買い物に連れて行ってくださったりと、多方面でお世話になりました。厚く御礼申し上げます。

清水先生には毎週の機械学習ミーティングにて貴重なご助言・ご指摘をいただき、議論をより厳密に進めることができました。深く感謝いたします。

センターの教員の方々、先輩、後輩にも多くの支えをいただきました。シフトを一緒にやったり、雑談したり、研究の話をしたり、飲みやBBQだったりとおかげさまでとても楽しい日々を送ることができました。特に橘さん、永塚さん、森田さん、中根さん、江田さんには解析に関するご指導、ご協力をいただきました。技術職員の方々、事務職員の方々にも

感謝申し上げます。センターに来た当初、何もわからない時に多くのご支援を賜りました。同期の皆さんの存在も、研究を進めるうえで力強い後押しとなりました。同期とセンターで雑談をする時間が大好きでしたし、飲みやセンターでのイベント準備なども一緒にできて楽しかったです。

コロナ禍から始まった大学生活でしたが、東北大学で出会った友人の皆様には、日頃より多くの励ましと支えをいただきました。最後に、遠方から支えてくれた両親と親戚一同に心より深く御礼申し上げます。

## 参考文献

- [1] 渡部 一步, “Kamland2-zen 実験で使用するキセノン含有液体シンチレータの特性研究および組成決定”, 修士論文 (掲載: 東北大学 AWA Master Thesis 一覧), MA thesis (東北大学, 2024).
- [2] S. Abe et al., “Search for majorana neutrinos with the complete kamland-zen dataset”, *Phys. Rev. Lett.* **135**, 262501 (2025).
- [3] 日本天文学会, 天文学辞典, <https://astro-dic.jp/elementary-particle/> (visited on 01/01/2026).
- [4] W. Pauli, *Letter to l. meitner and her colleagues (letter open to the participants of the conference in tubingen)*, 1930.
- [5] B. T. Cleveland, T. Daily, R. Davis Jr., J. R. Distel, K. Lande, C. K. Lee, P. S. Wildenhain, and J. Ullman, “Measurement of the solar electron neutrino flux with the homestake chlorine detector”, *The Astrophysical Journal* **496**, 505–526 (1998).
- [6] Z. Maki, M. Nakagawa, and S. Sakata, “Remarks on the unified model of elementary particles”, *Progress of Theoretical Physics* **28**, 870–880 (1962).
- [7] L. Wolfenstein, “Neutrino oscillations in matter”, *Physical Review D* **17**, 2369–2374 (1978).
- [8] S. P. Mikheev and A. Y. Smirnov, “Resonant amplification of neutrino oscillations in matter and solar neutrino spectroscopy”, *Il Nuovo Cimento C* **9**, 17–26 (1986).
- [9] 永塚 穂里, “Kamland における超新星ニュートリノの探索”, 修士論文 (掲載: 東北大学 AWA Master Thesis 一覧), MA thesis (東北大学, 2023).
- [10] E. Majorana, “Teoria simmetrica dell’elettrone e del positrone”, *Il Nuovo Cimento* (1924-1942) **14**, 171–184 (1937).

- [11] A. S. Barabash, “Precise half-life values for two-neutrino double- $\beta$  decay: 2020 review”, *Universe* **6**, 159 (2020).
- [12] S. Abe et al., “Search for majorana neutrinos with the complete kamland-zen dataset”, arXiv e-prints **arXiv:2406.11438**, 10.48550/arXiv.2406.11438 (2024).
- [13] A. Gando, Y. Gando, H. Hanakago, et al., “Limit on neutrinoless  $\beta\beta$  decay of  $^{136}\text{Xe}$  from the first phase of kamland-zen and comparison with the positive claim in  $^{76}\text{Ge}$ ”, *Phys. Rev. Lett.* **110**, 062502 (2013).
- [14] A. Gando, Y. Gando, T. Hachiya, et al., “Search for majorana neutrinos near the inverted mass hierarchy region with kamland-zen”, *Phys. Rev. Lett.* **117**, 082503 (2016).
- [15] S. Abe, S. Asami, M. Eizuka, et al., “Measurement of cosmic-ray muon spallation products in a xenon-loaded liquid scintillator with KamLAND”, *Phys. Rev. C* **107**, 054612 (2023).
- [16] 小原 脩平, “Kamland-zen 実験における  $^{214}\text{Bi}$  バックグラウンド除去のための発光性バルーンフィルムの開発研究”, 修士論文 (掲載: 東北大学 AWA Master Thesis 一覧), MA thesis (東北大学, 2015).
- [17] 中村 陸生, “Kamland2-zen における発光性バルーンでの波形弁別による  $^{212}\text{Bi}$ - $^{212}\text{Po}$  背景事象除去に向けた開発研究”, 修士論文 (掲載: 東北大学 AWA Master Thesis 一覧), MA thesis (東北大学, 2021).
- [18] 後藤 駿, “Kamland-zen 実験における  $\text{Xe}$  核破碎バックグラウンド除去効率の改善”, 修士論文 (掲載: 東北大学 AWA Master Thesis 一覧), MA thesis (東北大学, 2024).
- [19] 後藤 杏奈, “Kamland2-zen 実験の液体シンチレータに導入する最適な波長変換剤の選定と濃度決定”, 修士論文 (掲載: 東北大学 AWA Master Thesis 一覧), MA thesis (東北大学, 2022).
- [20] J. Allison, K. Amako, J. Apostolakis, P. Arce, M. Asai, T. Aso, E. Bagli, A. Bagulya, S. Banerjee, G. Barrand, et al., “Recent developments in Geant4”, *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A* **835**, 186–225 (2016).
- [21] 竹内 敦人, “Kamland2-zen に向けた  $^{10}\text{C}$  除去効率の研究”, 修士論文 (掲載: 東北大学 AWA Master Thesis 一覧), MA thesis (東北大学, 2019).

- [22] 吉田 学立, “液体シンチレータでの粒子識別による  $\alpha$  線バックグラウンド除去の研究”, 修士論文 (掲載: 東北大学 AWA Master Thesis 一覧) , MA thesis (東北大学, 2011).
- [23] 中畑 豪, “Kamland2 へ向けたフロントエンド回路の性能評価と最適化”, 修士論文 (掲載: 東北大学 AWA Master Thesis 一覧) , MA thesis (東北大学, 2023).
- [24] T. Akiba, S. Sano, T. Yanase, T. Ohta, and M. Koyama, “Optuna: a next-generation hyperparameter optimization framework”, in Proceedings of the 25th acm sigkdd international conference on knowledge discovery & data mining (kdd ’19) (2019), pp. 2623–2631.
- [25] T. N. Kipf and M. Welling, “Semi-supervised classification with graph convolutional networks”, arXiv e-prints **arXiv:1609.02907**, 10.48550/arXiv.1609.02907 (2016).
- [26] Z. Guo, Y. Zhang, Z. Teng, and W. Lu, “Densely connected graph convolutional networks for graph-to-sequence learning”, Transactions of the Association for Computational Linguistics **7**, 297–312 (2019).