P11-2024-5

М. Буреш^{1, 2, *}, И. С. Кадочников^{2, **}, А. В. Коваленко^{2, ***}, Г. А. Ососков^{2, ****}

ПРИМЕНЕНИЕ СЕТИ ХОПФИЛДА ДЛЯ ТРЕКИНГА **SPD**

¹ Институт экспериментальной и прикладной физики Чешского технического университета в Праге, Прага

² Объединенный институт ядерных исследований, Дубна

^{*} E-mail: bures@jinr.ru

^{**} E-mail: kadivas@jinr.ru

^{***} E-mail: kovalen@jinr.ru

^{****} E-mail: ososkov@jinr.ru

Буреш М. и др.

Применение сети Хопфилда для трекинга SPD

Одним из ключевых этапов обработки данных, полученных в экспериментах по физике частиц, является реконструкция траекторий (треков) взаимодействующих частиц по результатам измерений. В планируемом на коллайдере NICA эксперименте SPD особую сложность вызовет чрезвычайно высокая частота взаимодействий (З МГц), ведущая к перекрытию событий при их съеме в режиме временных слайсов, а также сильное загрязнение данных ложными измерениями из-за особенностей устройства трековых детекторов SPD. Это весьма усложняет алгоритмы реконструкции треков (трекинга).

В данном исследовании изучаются методы на основе нейронной сети Хопфилда для трекинга модельных событий эксперимента SPD. Предложена оптимизация параметров построения функции энергии нейросети, позволяющая улучшить результаты трекинга с учетом специфики эксперимента, а также исследуется применимость квантового отжига для решения задачи трекинга SPD.

Работа выполнена в Лаборатории информационных технологий им. М. Г. Мещерякова ОИЯИ.

Сообщение Объединенного института ядерных исследований. Дубна, 2024

Bureš M. et al.

P11-2024-5

Application of the Hopfield Network to SPD Track Reconstruction

One of the key stages of processing data from particle physics experiments is the reconstruction of trajectories (tracks) of interacting particles from measurement data. In the SPD experiment planned at the NICA collider, a special difficulty will be caused by the extremely high frequency of interactions (3 MHz), which leads to overlapping of events during the data acquisition in the time-slice mode, as well as by the strong contamination of data by fake measurements due to the specifics of the track detectors. This makes track reconstruction (tracking) algorithms very complicated.

In this study, methods based on the Hopfield neural network for tracking simulated events of the SPD experiment are investigated. Taking into account the specifics of the experiment, optimization of the energy function parameters of the neural network is proposed to improve the tracking results, and the applicability of quantum annealing to the SPD tracking problem is investigated.

The investigation has been performed at the Meshcheryakov Laboratory of Information Technologies, JINR.

Communication of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna, 2024

P11-2024-5

введение и постановка задачи

Для современных коллайдерных экспериментов в физике высоких энергий характерна тенденция к повышению светимости, определяющей частоту столкновения взаимодействующих частиц или рождение каких-либо объектов в эксперименте. Так, в будущем эксперименте SPD на сооружаемом в ОИЯИ коллайдере NICA планируется поток поступающих данных в 20 ГБ/с при частоте столкновений 3 МГц [1], в силу чего съем данных будет проводиться не по индивидуальным событиям, а в режиме временных промежутков (тайм-слайсов), по нескольку десятков событий в каждом. Из-за этого данные о траекториях частиц (треков), составляющих эти события, будут неизбежно налагаться друг на друга, что в дальнейшем чрезвычайно усложнит выполнение ключевой задачи обработки экспериментальной информации по реконструкции треков частиц (трекинга) и оценки их физических параметров [2].

Экспериментальные установки в физике высоких энергий имеют в своем составе трековые детекторы, регистрирующие треки частиц в виде сигналов, передаваемых в компьютер в оцифрованном виде. Процесс реконструкции треков состоит из нескольких этапов. Сначала из сигналов, поступивших с датчиков детекторов, восстанавливаются хиты, т.е. пространственные точки, где была зарегистрирована какая-то частица. Потом происходит построение треков из хитов путем поиска в событии всех хитов, оставленных одной и той же частицей. Далее по форме трека можно восстановить физические параметры частицы, а зная параметры частиц в событии, извлечь из эксперимента физические выводы.

Исторически алгоритмы трекинга развивались вместе с развитием экспериментальных установок и технологий детектирования частиц. В настоящее время наиболее эффективные методы трекинга основаны на использовании фильтра Калмана [3]. Хотя преимущество этого метода заключается в учете неоднородности магнитного поля, многократного рассеяния и потерь энергии при прохождении частицы через вещество, вычислительная сложность фильтра Калмана и значительная трудность его параллельной реализации для использования преимуществ современных вычислительных средств стимулировали разработку альтернативных методов реконструкции треков, особенно из-за насущной тенденции к повышению светимости коллайдеров, а значит, и к быстрому росту множественности треков в событиях. В последнее время методы глубокого обучения стали объектом пристального внимания благодаря их способности выявлять скрытые нелинейные зависимости в данных и наличию эффективной параллельной реализации операций линейной алгебры, лежащей в основе этих методов. Разработка нейросетевых методов для реконструкции событий шла по двум направлениям. Первое — это подход, при котором, как в фильтре Калмана, треки распознаются последовательно один за другим. Применение глубоких рекуррентных нейронных сетей позволило реализовать некий нейросетевой аналог фильтра Калмана и получить неплохие результаты для модельных событий нескольких экспериментов [4,5], хотя для обработки реальных данных с учетом их зашумленности и неэффективности работы детекторов потребуется еще дополнительная доработка алгоритмов. Следует также отметить очевидные недостатки таких подходов. Обработка треков по отдельности не позволяет оценить всю картину события, увидеть зависимость между отдельными треками или группами треков — струями, отсутствует прямая возможность отслеживать такие явления, как вторичные вершины.

Второй подход — когда распознавание треков среди всех хитов события (реальных, фейковых и шумовых) осуществляется сразу по всей картине события. Именно так это делалось в одном из самых первых применений нейронных сетей для трекинга, предложенном еще в 1988 г. Б. Денби и К. Петерсоном [6,7], где предлагалось использование нейронной сети Хопфилда (НСХ) — полносвязной рекуррентной сети бинарных нейронов с симметричной весовой матрицей [8]. Нейрон сети при этом соответствует паре хитов, т.е. сегменту возможного трека. Веса сети задаются исходя из геометрии расположения сегментов, предпочитая прямые неветвящиеся треки. При эволюции к своему устойчивому положению НСХ ищет оптимальное состояние активации сегментов, которое наступает при попадании функции энергии сети в глобальный минимум и соответствует хорошему результату трекинга. Однако, как показали работы [9, 10], практическое применение НСХ для трекинга крайне осложнено медленностью процесса эволюции сети и высокой вероятностью ложной ее остановки из-за попадания функции энергии сети в локальный минимум, а также чрезмерная чувствительность НСХ к шумам.

Попытки преодолеть эти трудности с помощью методов «эластичного трекинга», в которых объединялись этапы распознавания и фитирования кривых [10, 11], были удачными, но рост сложности экспериментов и множественности событий в них воспрепятствовал их эффективному применению.

В настоящей работе исследуется один из методов восстановления треков из хитов события на основе нейросети Хопфилда для анализа модельных данных планируемого эксперимента SPD [1] на строящемся коллайдере NICA. С учетом огромного массива зашумляющих фейковых хитов, порождаемых в силу специфики детектирующих устройств SPD, были предложены специальные фильтрующие члены в формулах для функций энергии нейросети и модифицированы весовые функции. Однако предпринятая попытка трекинга модельных данных SPD такой модифицированной сетью Хопфилда дала недостаточно эффективные результаты и показала необходимость дальнейших исследований по поиску усовершенствования средств фильтрации ложных сегментов в процессе эволюции нейросети. В то же время знакомство с недавними работами [12, 13], в которых для трекинга применяются методы квантового отжига с использованием современных квантовых компьютеров, подтолкнуло авторов к идее формулировки задачи трекинга как квадратичной неограниченной двоичной оптимизации (QUBO) [14–16], решаемой на адиабатическом квантовом вычислителе, например, D-Wave [17]. Поиски более изощренных путей эффективного преодоления влияния фейкового фона привели к мысли о необходимости расширения функциональных средств нейросетевого подхода Хопфилда, основанного на нейронах-сегментах, т.е. дублетах из двух соседних измерений на треке, до новых понятий, объединяющих уже три и четыре последовательных измерения, — триплетов и квадруплетов, как это было предложено в работе [18], см. также [19, 20].

Кроме того, сделан обзор статей по оптимизации сети Хопфилда алгоритмом Харроу-Хассадима-Ллойда (HHL) [21], работающим уже на базе вентильной модели квантовых вычислений, который, как показано в недавней статье [22], прямо применим к поиску треков для данных детектора LHCb.

СЕТЬ ХОПФИЛДА

Сеть Хопфилда [8] — полносвязная сеть из бинарных нейронов с симметричной весовой матрицей w_{ij} и нулевой диагональю. Функционал энергии сети — это билинейная функция Ляпунова:

$$E(s) = -\frac{1}{2} \sum_{ij} s_i w_{ij} s_j \,, \tag{1}$$

где s_i — состояние *i*-го нейрона, а w_{ij} — вес синаптической связи нейронов *i* и *j*.

На очередном этапе эволюции сети выполняется смена ее состояний, когда происходит перебор нейронов по одному, и для каждого определяется состояние (0 или 1), при котором энергия сети уменьшается. В результате эволюции сети ее энергия E(s) убывает в локальные минимумы, соответствующие точкам стабильности сети. Классическое применение сети Хопфилда — ассоциативное распознавание образов, являющихся состояниями локального минимума, из зашумленных образов [23].

Применение сети Хопфилда к трекингу частиц требует поиска не локального, а глобального минимума энергии сети. Одним из достаточно универсальных методов, хорошо находящих глобальный минимум для широкого класса функций энергии, является имитация отжига [24]. В применении к сети Хопфилда этот метод заключается в том, что случайно выбранный нейрон меняет активацию на противоположную. Если суммарная энергия при этом уменьшилась, то такое изменение выгодно, и оно закрепляется. Если же суммарная энергия увеличилась, то изменение энергетически невыгодно, и оно скорее всего отбрасывается. Однако даже невыгодное изменение может закрепиться с вероятностью $P = \exp(-E(s') - E(s)/T)$, где T — параметр температуры. Таким образом, существует значительная вероятность выхода из локального минимума за счет эффекта «туннелирования». Постепенное уменьшение температуры позволяет постепенно уменьшать вероятность туннелирования и сходиться из вероятной окрестности в точку найденного минимума. Недостатком данного метода является медленное схождение к результату.

Как показано в [8], дискретным сетям Хопфилда с бинарными нейронами можно поставить в соответствие непрерывные сети с сигмоидальной функцией активации. При этом при достаточной крутизне функций активации у этих сетей будет одинаковый набор минимумов. Это означает, что для поиска глобального минимума сеть Хопфилда с дискретными нейронами можно преобразовать в сеть Хопфилда с сигмоидальными нейронами, применив теорию среднего поля [25]. Дискретное состояние нейронов заменяется средней активацией при заданной температуре $v_i = \langle s_i \rangle_T$, а эволюция сети определяется уравнением динамики среднего поля:

$$v_i = \frac{1}{2} \left(1 + \tanh\left(-\frac{1}{T}\frac{\delta E}{\delta v_i}\right) \right).$$
⁽²⁾

Эволюция сети начинается с некоторого произвольного состояния и стремится привести систему в минимум при заданной температуре. При постепенном снижении T набор минимумов непрерывной сети меняется, приближаясь к минимумам исходной дискретной сети. Постоянная эволюция активаций в процессе снижения T направляет систему в сторону минимума, хотя и не всегда глобального. К. Петерсон показал на примере задачи бисекции графа, что поиск глобального минимума с помощью теории среднего поля работает быстрее, чем имитация отжига, хотя и получает менее оптимальный результат [26].

ТРЕКИНГ СЕТЬЮ ХОПФИЛДА

Применение этого подхода к задаче трекинга предложили Б. Денби [6] и К. Петерсон [7]. Их подход, известный как метод сегментов, состоял в том, что на множестве экспериментальных точек на плоскости вводились нейроны s_{ij} , определяющие, соединяются точки *i* и *j* или нет, т.е. лежит ли данный направленный сегмент s_{ij} на каком-нибудь треке.

Возможны разные подходы построения сегментов-кандидатов из множества всех хитов события. Тривиальный — рассматривать все пары хитов (дублеты), лежащих на разных станциях детектора, как возможные сегменты трека. Такое построение сегментов гарантирует, что все возможные способы прохождения треков через хиты будут рассмотрены, но увеличивает вычислительную сложность задачи по сравнению с более выборочными вариантами. Размер матрицы энергии квадратично зависит от количества рассматриваемых сегментов, поэтому поиск хороших алгоритмов фильтрации набора сегментов на входе метода трекинга очень важен, чтобы обеспечить применимость сегментных подходов к большим событиям, найденным в современных экспериментах. Классический подход Денби–Петерсона ставит в соответствие каждому сегменту нейрон в сети Хопфилда. Энергия сети задается так, чтобы активировались длинные гладкие цепочки сегментов — треки. Для этого в энергию входит награда * пары соседних сегментов (образовавших так триплет из двух дублетов, см. рис. 1) за низкую кривизну и маленькую длину:

$$E_{\text{curvature}} = -\frac{1}{2} \sum_{ijkl} \delta_{jk} \frac{\cos \theta_{ijl}}{r_{ij} + r_{kl}} v_{ij} v_{kl} , \qquad (3)$$



Рис. 1. Метод сегментов. Нейрон s_{ij} — сегмент, соединяющий точки i, j

где θ_{ijl} — угол между сегментами ij и jl с длинами r_{ij} и r_{il} соответственно. Показатель степени λ —

целочисленная постоянная, ее большее значение усиливает предпочтение для более прямых триплетов.

Следующие два члена (с положительным знаком) увеличивают энергию. Во-первых, это наказание за ветвление трека:

$$E_{\text{fork}} = \alpha \left(\sum_{j \neq k} v_{ij} v_{ik} + \sum_{j \neq k} v_{ik} v_{jk} \right).$$
(4)

Далее, для того чтобы в треках в среднем участвовали все хиты события, наказывается слишком большое или слишком маленькое общее количество активных сегментов:

$$E_{\text{total}} = \beta \left(\sum_{i,j} v_{ij} - N \right)^2, \tag{5}$$

где N — общее количество хитов. Вклад каждого компонента в энергию по сравнению с вкладом $E_{\rm curvature}$ взвешивается свободными параметрами (α, β) .

К сожалению, эта схема Денби-Петерсона, принципиально запрещающая бифуркацию трека, была неприменима в случаях распадов нейтральных и рождения заряженных частиц в объеме детектора. Поэтому в ходе исследования, в котором рассматривались данные распада нейтральных каонов и гиперонов в эксперименте ЭКСЧАРМ [10], пришлось модифицировать штрафной член энергетической функции так, чтобы он позволял осуществлять распознавание разветвлений. Пример работы сети дан на рис. 2, где реальные треки показаны сплошной линией, а ложные связи отмечены пунктиром.

Следует заметить, что в той же прикладной работе [10] отмечались такие недостатки нейросетевого трекинга с сетью Хопфилда, как медленность процесса эволюции сети, высокая вероятностью ложной ее остановки

^{*} В современной литературе принято использовать слова «награда», «наказание/штраф», которые отражают влияние весовых коэффициентов и других параметров функции энергии сети на то, как эта функция обеспечивает желательное развитие эволюции сети. При этом награда уменьшает значение функции энергии сети, а наказание/штраф — увеличивает.



Рис. 2. Пример применения сети Хопфилда для распознавания событий эксперимента ЭКСЧАРМ с короткоживущими частицами

из-за попадания функции энергии сети в локальный минимум, а также чрезмерная чувствительность метода к шумам. В связи с этим в работах [11,27] было предложено объединить этапы распознавания и фитирования кривых, максимально используя априорную информацию. С этой целью предлагалось с учетом известного уравнения трека применить нейронную сеть Хопфилда с функцией энергии, специально сконструированной так, чтобы в нее вошли параметры кривой, для создания эластичного шаблона и изгибать его (меняя параметры уравнения) так, чтобы он прошел по «своим» измеренным точкам. Возникающие проблемы нахождения шаблонов (deformable templates) и начальных значений их параметров выходят за рамки данной работы. Отметим только, что во всех работах с применением эластичных методов трекинга для поиска шаблонов и их начальных значений применяется тот или иной вариант преобразования Радона-Хафа (см., например, [28]). При практической реализации это преобразование сводится к гистограммированию в пространстве параметров с последующим поиском максимального значения. В силу приближенного характера процедуры нахождения шаблонов их число могло превышать число реальных треков в событии. Появляющиеся из-за этого лишние, искусственные треки следовало удалять потом в ходе специальной процедуры отбраковки.

Метод эластичных нейросетей был успешно применен в работе [29] для обработки данных, параметризуемых уравнением окружности: колец черенковского излучения и треков в однородном магнитном поле. Однако при попытках увеличить число колец или множественность, т.е. число треков в районе поиска выше 12–13, метод переставал работать (не говоря даже о быстром росте машинного времени). Частично это происходило из-за ошибок в преобразовании Хафа, но главным образом из-за проблем с минимизацией функционала в силу постановки задачи, работающей с целым событием. Поэтому в работе [30], касавшейся применения метода эластичных нейросетей в задаче распознавания и определения параметров треков в системе дрейфовых трубок, авторы отказались от прослеживания сразу всех треков события и искали треки по данным преобразования Хафа по очереди.

Тем не менее с ростом сложности экспериментов и множественности событий в них уровень вычислительной техники и алгоритмов минимизации тех лет не позволил преодолеть вышеотмеченные трудности применения методов трекинга с использованием нейросетей Хопфилда как в подходе, учитывающем сразу всю картину события, так и в последовательном варианте.

Следует также отметить, что одну из этих трудностей с поиском глобального минимума, весьма характерную для различных применений сетей Хопфилда, обычно удается преодолеть с помощью алгоритма имитации отжига [24], но это еще больше замедляет сходимость HCX к устойчивому состоянию.

трекинг для spd

В качестве примера для оценки результатов метода мы взяли набор упрощенных событий, моделирующих геометрию эксперимента SPD на ускорителе NICA [1]. Мы предполагали однородность магнитного поля, т.е. генерировали хиты треков на пространственных спиралях вдоль оси z с нормальным распределением ошибки измерения координат хита x и y. Из-за конструктивных особенностей в straw-детекторе будет возникать большое количество фейковых хитов. Механизм возникновения фейков аналогичен тому, который был рассмотрен в стриповом детекторе GEM [31]. Поскольку на данной стадии эксперимента распределение фейков на



Рис. 3. Визуализация модельного события SPD, 10 треков, 100 шумовых хитов: *а*) трековые и шумовые хиты; *б*) хиты, сгруппированные по трекам; *в*) линии треков

качество работы нашего метода фейковые хиты в произвольно регулируемом количестве мы распределяли случайно и равномерно по всему объему детектора. Пример визуализации одного события с небольшим количеством шумовых хитов показан на рис. 3.

ПРЕДЛАГАЕМЫЙ ПОДХОД

Наш подход похож на классический метод Денби-Петерсона, т. е. поиск глобального минимума для сети Хопфилда методом среднего поля, но с внесением дополнительных параметров в формулу энергии, и с автоматической оптимизацией гиперпараметров с помощью фреймворка для байесовой оптимизации SMAC3 [32]. По сравнению с методом Денби-Петерсона потребовалось в формуле энергии заменить E_{total} (формула (5)) на регулируемое постоянное смещение b, чтобы матрица энергии (матрица связей между нейронами) стала разреженной, что резко уменьшает вычислительную сложность задачи. Мы также вносили другие параметры в матрицу энергии, но для измерения пользы от этих изменений сложности рассматриваемой задачи трекинга оказалось недостаточно.

В качестве цели оптимизации гиперпараметров мы выбрали не какуюлибо стандартную метрику качества результата для задач классификации (в применении к классификации сегментов на трековые и нетрековые), например, на основе точности и полноты, а оценку качества результатов трекинга из соревнования TrackML [33–35]. Это незначительно усложняет вычисление результата, но полученная оценка лучше соответствует реальной задаче — поиску треков.

С точки зрения оценки TrackML результатом трекинга является таблица размеченных хитов, где каждому хиту приписан номер трека, к которому хит относится. Каждому предсказанному таким образом треку (подмножеству хитов с одинаковым предсказанным номером трека), ставится в соответствие тот настоящий трек (подмножество хитов с одинаковым исходным номером трека), с которым предсказанный трек имеет наибольшее пересечение (количество общих хитов). Если при этом пересечение составляет более 50% предсказанного трека и более 50% настоящего трека, то такой предсказанный трек считается «хорошим». Оценка TrackML представляет собой сумму весов всех хитов, входящих в пересечения «хорошего» предсказанного трека и соответствующего ему настоящего трека. См. также [33], разд. 2.4 — Scoring.

Результатом работы сети Хопфилда являются не размеченные хиты, а активные и неактивные сегменты. Чтобы получить треки как множества хитов, мы выделяли в графе активных сегментов компоненты связности. Произвольно пронумеровав эти распознанные треки, можно маркировать каждый хит номером трека, к которому он относится. Таким образом, результат трекинга приводится к формату, который можно оценить метрикой TrackML.

При использовании метрики TrackML в качестве цели оптимизации мы заметили, что треки, состоящие целиком из шумовых хитов, никак

не влияют на оценку. Поэтому с увеличением количества шума такие треки появляются в большом количестве. Для подавления шумовых треков в оптимизатор был добавлен второй критерий оценки: количество ложно активированных сегментов. Оптимизация гиперпараметров предлагает несколько точек оптимума (наборов параметров), в которых с разным приоритетом максимизируется TrackML score и минимизируется количество ложноположительных сегментов.

Метрика TrackML удобна и в качестве финальной оценки, так как работает с результатами любых способов трекинга, не только классификации сегментов. Это позволяет сравнивать результат с принципиально другими методами трекинга. Особенно полезно было бы сравнить результаты с результатами соревнования TrackML. К сожалению, события в датасете TrackML содержат много хитов, и пока не удалось достаточно оптимизировать предложенный нами алгоритм и фильтрацию сегментов, чтобы применить сеть Хопфилда к этим событиям. Поэтому в настоящей работе мы представляем результаты для более маленьких модельных событий эксперимента SPD.

РЕЗУЛЬТАТЫ ЧИСЛЕННОГО ЭКСПЕРИМЕНТА

Примеры результатов работы нашего метода на событии из 10 треков с различным количеством шумовых хитов и наборами оптимизированных па-



Рис. 4. Результат трекинга события с 10 треками. Активные трековые (истинно положительные) сегменты показаны черной линией средней толщины. Неактивные нетрековые (истинно отрицательные) сегменты показаны светло-серыми линиями и образуют фон. Активные нетрековые (ложноположительные) сегменты отмечены толстой черной линией. Неактивные трековые (ложноотрицательные) сегменты отмечены пунктирной линией. а) 100 шумовых хитов; б) 1750 шумовых хитов, приоритет на подавление ложноположительных сегментов; в) 1750 шумовых хитов, приоритет на оптимизацию TrackML score

раметров показаны на рис. 4. Видно, что без большого количества шумовых хитов треки легко восстанавливаются и что сильное зашумление ухудшает качество трекинга. Благодаря большому количеству слоев детектора треки события состоят из большого количества коротких сегментов, что облегчает их реконструкцию. Кроме замены $E_{\rm total}$ на постоянное смещение b, см. (5), для построения разреженной матрицы энергии вносить изменения в метод Денби–Петерсона не понадобилось. Мы ожидаем, что более реалистичная генерация событий (построение фейковых хитов вместо шумовых, большее и переменное количество треков) усложнит подбор оптимальных параметров и потребует внесения дополнительных улучшений в данный подход.



Рис. 5. Распределения оценок TrackML score (1), количества ложноположительных сегментов (2) и числа ненайденных * треков (3) в событиях из 10 треков. а) 100 шумовых хитов; б) 1750 шумовых хитов, приоритет на подавление активации ложноположительных сегментов; в) 1750 шумовых хитов, приоритет на оптимизацию метрики TrackML score

^{*} Из функции вычисления метрики TrackML (подробнее см. в разд. «Предлагаемый подход») легко извлечь количество найденных треков, т.е. пар исходных треков и соответствующих им предсказанных. Зная общее число исходных треков, можно вычесть из него количество найденных и получить так число ненайденных треков.

Распределения оценок качества трекинга событий с разной шумностью и разными наборами параметров представлены на рис. 5. Помимо ухудшения результата, шум увеличивает размер матрицы, а значит, замедляет как оптимизацию гиперпараметров, так и финальный трекинг.

КВАНТОВЫЙ ОТЖИГ ДЛЯ ТРЕКИНГА

Задача поиска локального минимума энергии сети Хопфилда может также решаться с помощью квантового отжига, который работает в плане скорости не хуже, чем имитация отжига, но с близким по качеству результатом (по крайней мере для определенного класса задач, см. [12]). Квантовые компьютеры, реализующие квантовый отжиг, уже существуют [17], а оптимизировать гиперпараметры матрицы энергии можно заранее, имитацией отжига или методом среднего поля, на классическом компьютере.

Применимость квантового отжига для задачи трекинга показана в [12] на примере данных соревнования TrackML [33,35]. В процессе отладки алгоритмов было предложено несколько улучшений к матрице энергии, соответствующих геометрии и условиям детектора типа LHC. Исходя из общего вида задачи QUBO:

$$E = -\frac{1}{2} \left[\sum_{a,b} \left(W_{ab}^{\text{reward}} - W_{ab}^{\text{penalty}} \right) s_{ab} + \sum_{a,b,c} \left(U_{abc}^{\text{reward}} - U_{abc}^{\text{penalty}} \right) s_{ab} s_{bc} \right],\tag{6}$$

авторы предложили несколько улучшений. Из-за ограничений, предъявляемых квантовым компьютером на размер матрицы, авторы также применили новые эвристические методы фильтрации сегментов на входе и обрабатывали события, разбивая предварительно данные на сектора детектора. Конкретнее, в матрице энергии добавили угол между сегментами в цилиндрических координатах, так как треки в магнитном поле в цилиндрических координатах ближе к прямым.

Таким образом, формула энергии, предложенная в [12], имеет вид

$$E = -\sum_{a,b,c} \left(\frac{\cos^{\lambda} (\theta_{abc}) + \rho \cos^{\lambda} (\phi_{abc})}{r_{ab} + r_{bc}} \right) s_{ab} s_{bc} + \eta \sum_{a,b,c} \left(z_c - \frac{z_c - z_a}{r_c - r_a} r_c \right)^{\zeta} s_{ab} s_{bc} + \alpha \left(\sum_{b \neq c} s_{ab} s_{ac} + \sum_{a \neq c} s_{ab} s_{cb} \right) - \sum_{a,b} \left(\beta P(s_{ab}) - \gamma \right) s_{ab}, \quad (7)$$

где:

1. Первый член предлагает награду в случае, когда общая длина $r_{ab} + r_{bc}$ соседних сегментов s_{ab} , s_{bc} мала. Этот член дальше регулируется углами θ и ϕ . θ_{abc} обозначает угол между соседней парой дублетов (в цилиндрических координатах), и соответствующий член награждает

треки с маленькой кривизной (предполагаются спиральные треки частиц). ϕ_{abc} — угол между соседними дублетами в трансверсальной плоскости; соответствующий член награждает весом ρ треки с большим импульсом.

2. Второй член представляет собой штраф за отклонение перекрестного члена между s_{ab} и s_{bc} от направления к центру столкновения (в случае данных TrackML частицы возникают в маленькой области радиусом 5,5 мм вдоль оси z близко к началу системы координат).

3. Третий член — штраф за ветвление трека.

4. Четвертый член состоит из регулируемой константы γ и награды сегменту в зависимости от априорной вероятности его активности $P(s_ab)$, зависящей от направления сегмента. Этот компонент энергии выполняет ту же функцию, что и $E_{\rm total}$ в (5), — регулирует общее количество активных сегментов, но благодаря отсутствию квадратичного члена по сумме всех активаций сегментов матрица энергии получается разреженной, что позволяет обрабатывать большие события. В то же время общее количество хитов перестает соответствовать ожидаемому количеству активных сегментов при наличии большого количества шумовых хитов, т.е. $E_{\rm total}$ в любом случае требовалось бы модифицировать.

Качество результата трекинга зависит от выбора гиперпараметров функции энергии: λ , ρ , η , ζ , α , β , γ . Важным шагом является поиск оптимальных параметров с помощью алгоритмов байесовой оптимизации при имитации отжига на классическом компьютере. Найденный набор параметров (см. табл. 1 в [12]) позволяет строить матрицу энергии, которая хорошо решает задачу при имитации отжига, а значит, и при квантовом отжиге, ускоряя процесс сходимости НСХ больше чем на пару порядков в условиях данных TrackML, соответствующих экспериментам с высокой светимостью HL-LHC, но сильно отличных от данных эксперимента SPD, о которых шла речь в предыдущем разделе.

УЛУЧШЕНИЕ АЛГОРИТМА — ТРИПЛЕТЫ И КВАДРУПЛЕТЫ

Данные TrackML для поиска треков частиц в HL-LHC с помощью квантового отжига также используются в двух дипломных работах, заслуживающих внимания. Подход, применяемый в [18], см. также [19, 20], заключается в переходе от дублетов, как в подходе Денби–Петерсона, к более изощренной процедуре поиска треков путем формирования триплетов и квадруплетов, что, с одной стороны, позволяет лучше отфильтровывать ложные треки, но с другой, сильно усложняет алгоритм. Работа [36] по сути продолжает работу [18] с учетом условий эксперимента ATLAS (необходимости разбивать большие входные данные на слайсы).

Более конкретно, используя возможности QUBO, в модель можно включить сегменты, состоящие из трех, четырех или даже пяти хитов, триплеты, квадруплеты и квинтеты, см. рис. 6, что может помочь отсеву ложных соединений в графе события.

Такой подход дает множество преимуществ. Во-первых, это позволяет ослабить предположения касательно частиц, исходящих из первичной вер-



Рис. 6. Верхняя часть — построение триплетов из дублетов — позволенные (маленькая кривизна) и запрещенные (большая кривизна, ветвление трека) комбинации дублетов. Нижняя часть — построение квадруплетов и квинтетов из триплетов. Триплеты могут быть объединены в квадруплет, когда совпадают последние два хита первого триплета с первыми двумя хитами второго триплета. Квинтеты получаются, когда последний хит первого триплета совпадает с первым хитом второго триплета. Когда совпадает большее количество хитов, такие *х*-плеты помечаются как имеющие конфликт. Изображение взято из работы [18] с разрешения автора

шины. Во-вторых, получение зигзагообразного трека менее вероятно, поскольку квадруплеты такой формы вообще не будут генерироваться. Далее, в таком подходе можно извлечь больше физических свойств частиц для использования в формулировке QUBO. Например, с помощью триплетов можно получить текущую оценку радиуса (т. е. по сути импульса частицы), важную для выявления общности отсчетов, относящихся к данному треку.

Авторы предполагают, что именно такой подход поможет эффективно отфильтровать сегменты треков, включающие фейковые хиты, что является основной причиной проблем трекинга SPD. Разработка и отлаживание алгоритма, включающего в себя этот подход, является главным направлением предстоящей работы.

ОПТИМИЗАЦИЯ СЕТИ ХОПФИЛДА С ПОМОЩЬЮ АЛГОРИТМА ХАРРОУ-ХАССАДИМА-ЛЛОЙДА

В литературе существуют несколько квантовых версий сети Хопфилда, которые пытаются использовать уникальные свойства квантовых вычислений для достижения преимущества [37–40]. Стоит отметить, что для дальнейшего ускорения оптимизации функции энергии сети Хопфилда также может быть эффективно использован не только адиабатический, но и универсальный квантовый компьютер, работающий не на принципе квантового отжига, а на другой модели квантовых вычислений — на основе квантовых схем. В этой модели вычисление представляет собой последовательность операций, выполняемых квантовыми вентилями над кубитами, приготовленными в особом исходном состоянии, с последующим их измерением.

В недавнем обзоре [41] перечислены квантовые алгоритмы, которые можно использовать, чтобы найти основное состояние гамильтониана QUBO, соответствующее искомому решению. Среди них: алгоритм квантовой приближенной оптимизации (QAOA) [42, 43], Variational Quantum Eigensolver (VQE) [44] или алгоритм Харроу–Хассадима–Ллойда (HHL) [21]. QAOA и VQE представляют собой гибридный квантово-классический подход, в котором квантовый процессор подготавливает квантовое состояние в соответствии с набором вариационных параметров. Затем с использованием результатов измерений эти параметры оптимизируются классическим компьютером и по замкнутому циклу поступают обратно в квантовый компьютер. Алгоритм HHL представляет собой чисто квантовый алгоритм, разработанный для поиска решения линейных систем уравнений. Он является одним из фундаментальных квантовых алгоритмов и обладает потенциалом достижения экспоненциального преимущества по сравнению с классическими аналогами.

В статье [40] разработан метод, в котором оптимизация сети Хопфилда превращается в задачу матричной инверсии и решается с помощью HHL. Алгоритм HHL использован по аналогичной схеме в недавней работе [22], однако уже с прямым применением к поиску треков. В качестве датасета использовались данные детектора LHCb.

В заключение отметим важное открытие, сделанное в работе [45], показывающее, что адиабатические и вентильные квантовые компьютеры обладают фактически одинаковым потенциалом для достижения выигрыша, присущего квантовым вычислительным процессам, демонстрируя при этом, что алгоритм, соответствующий квантовой схеме, может быть преобразован в квантовый адиабатический алгоритм с точно такой же временной сложностью. Это имеет полезные последствия для актуальности моделей QUBO, реализованных в условиях адиабатического квантового отжига, показывая, что аналогичные достижения, связанные с моделями QUBO, в конечном итоге могут быть реализованы и в системах квантовых схем.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В данной работе произведена попытка применения разных модификаций алгоритма трекинга на основе сети Хопфилда к моделированным данным SPD с присутствием фейковых хитов. Метод показывает хорошие результаты лишь в достаточно простых условиях. Шумовые хиты создают заметные сложности для трекинга разными методами. Планируется изучить влияние событий, где фейковые хиты генерируются более корректно с точки зрения геометрии установки.

Необходимо добавить более сложную фильтрацию сегментов, которая, возможно, уменьшит влияние шумовых хитов.

В этом контексте перспективной возможностью является применение квантовых вычислений. Как было показано в работах, перечисленных выше, с помощью методов квантового отжига и имитации отжига можно эффективно решать задачи комбинаторной оптимизации и таким образом эффективно восстанавливать треки. Благодаря этому появляются возможные приложения для быстрой обработки данных SPD или HL-LHC (хотя вопрос квантового ускорения при этом остается открытым).

Более того, с помощью модели QUBO можно ввести в сеть Хопфилда прослеживание с использованием триплетов и квадруплетов, чтобы добиться резкого сокращения количества ложных треков. Это также позволит протестировать метод на данных соревнования TrackML и сравнить результаты.

Нами также предполагаются дальнейшие вычисления по оценке максимального размера матрицы энергии и изучение общей перспективности исследований в этом направлении. Желательно подвергнуть сравнительному анализу скорости выполнения и эффективности разных квантовых алгоритмов в их реализации, моделирующей квантовые вычисления на современном суперкомпьютере, применительно к данным SPD или другой тестовой задаче, например, проблемы коммивояжера.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- 1. *The SPD Collab.* Conceptual Design of the Spin Physics Detector. 2022. URL: http://arxiv.org/abs/2102.00442.
- Andreev V., Belova A., Galoyan A., Gerassimov S., Golovanov G., Goncharov P., Gribowsky A., Maletic D., Maltsev A., Nikolskaya A., Oleynik D., Ososkov G., Petrosyan A., Rezvaya E., Shchavelev E., Tkachenko A., Uzhinsky V., Verkheev A., Zhemchugov A. Offline Software and Computing for the SPD Experiment // Proc. of the 9th Intern. Conf. "Distributed Computing and Grid Technologies in Science and Education". Dubna, 2021. P. 26–31. URL: http://ceurws.org/Vol-3041/26-31-paper-4.pdf.
- Frühwirth R. Application of Kalman filtering to Track and Vertex Fitting // Nucl. Instr. Meth. A. 1987. V. 262, No. 2. P. 444–450. URL: https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0168900287908874.
- 4. Nikolskaia A., Goncharov P., Ososkov G., Rezvaya E., Rusov D., Shchavelev E., Baranov D. TrackNetV3 with Optimized Inference for BM@N Tracking // Proc. of the 9th Intern. Conf. "Distributed Computing and Grid Technologies in Science and Education". Dubna, 2021. P. 332–337. URL: http://ceur-ws.org/Vol-3041/332-337-paper-61.pdf.
- Rusov D., Nikolskaia A., Goncharov P., Shchavelev E., Ososkov G. Deep Neural Network Applications for Particle Tracking at the BM@N and SPD Experiments // Proc. of the 6th Intern. Workshop on Deep Learning in

Computational Physics – PoS(DLCP2022). SISSA Medialab, 2022. V. 429. P. 005. URL: https://pos.sissa.it/429/005.

- 6. *Denby B.* Neural Networks and Cellular Automata in Experimental High Energy Physics // Comput. Phys. Commun. 1988. V.49, No.3. P.429–448. URL: https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0010465588900045.
- 7. Peterson C. Track Finding with Neural Networks // Nucl. Instr. Meth. A. 1989. V. 279, No. 3. P. 537–545.
 - URL: https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0168900289913004.
- Hopfield J.J. Neurons with Graded Response Have Collective Computational Properties Like Those of Two-State Neurons // Proc. Natl. Acad. Sci. USA. 1984. V. 81, No. 10. P. 3088–3092.
- Stimpfl-Abele G., Garrido L. Fast Track Finding with Neural Networks // Comput. Phys. Commun. 1991. V. 64, No. 1. P. 46–56. URL: https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/001046559190048P.
- 10. Ососков Г. А., Пальчик В. В., Потребеников Ю. К., Татишвили Г. Т., Шепелев В. Б. Использование нейронных сетей для улучшения интерпретации эксперимента EXCHARM // Мат. мод. 1999. Т. 11, № 10. С. 116–126. URL: http://mi.mathnet.ru/mm1177.
- Ohlsson M., Peterson C., Yuille A.L. Track Finding with Deformable Templates — The Elastic Arms Approach // Comput. Phys. Commun. 1992. V. 71, No. 1. P. 77–98. URL: https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/ 0010465592900749.
- Zlokapa A., Anand A., Vlimant J. R., Duarte J. M., Job J., Lidar D., Spiropulu M. Charged Particle Tracking with Quantum Annealing Optimization // Quant. Mach. Intell. 2021. V. 3, No. 2.
- Funcke L., Hartung T., Heinemann B., Jansen K., Kropf A., Kühn S., Meloni F., Spataro D., Tüysüz C., Yap Y. C. Studying Quantum Algorithms for Particle Track Reconstruction in the LUXE Experiment // J. Phys.: Conf. Ser. 2023. V. 2438, No. 1. P.012127.
- Kochenberger G., Hao J. K., Glover F., Lewis M., Lü Z., Wang H., Wang Y. The Unconstrained Binary Quadratic Programming Problem: A Survey // J. Combin. Optim. 2014. V. 28. P. 58–81.
- Glover F., Kochenberger G., Hennig R., Du Y. Quantum Bridge Analytics I: A Tutorial on Formulating and Using QUBO Models // Ann. Oper. Res. 2022. V. 314.
- 16. Lucas A. Ising Formulations of Many NP Problems // Front. Phys. 2014. V.2.
- Yarkoni S., Raponi E., Bäck T., Schmitt S. Quantum Annealing for Industry Applications: Introduction and Review // Rep. Prog. Phys. 2022. V.85, No.10. P. 104001.
- Linder L. Using a Quantum Annealer for Particle Tracking at LHC. Master Thesis, EPFL, Switzerland, 2019.
- Saito M., Calafiura P., Gray H., Lavrijsen W., Linder L., Okumura Y., Sawada R., Smith A., Tanaka J., Terashi K. Quantum Annealing Algorithms for Track Pattern Recognition // EPJ Web Conf. 2020. V. 245. P. 10006.
- 20. Bapst F., Bhimji W., Calafiura P., Gray H., Lavrijsen W., Linder L. A Pattern Recognition Algorithm for Quantum Annealers // Comput. Softw. Big Sci. 2020. V. 4, No. 1. P. 1. arXiv:1902.08324.

- 21. Harrow A. W., Hassidim A., Lloyd S. Quantum Algorithm for Linear Systems of Equations // Phys. Rev. Lett. 2009. V. 103, No. 15.
- 22. Nicotra D., Martinez M. L., de Vries J. A., Merk M., Driessens K., Westra R. L., Dibenedetto D., Pérez D. H. C. A Quantum Algorithm for Track Reconstruction in the LHCb Vertex Detector. 2023. arXiv:2308.00619.
- Widrich M., Schäfl B., Pavlović M., Ramsauer H., Gruber L., Holzleitner M., Brandstetter J., Sandve G.K., Greiff V., Hochreiter S., Klambauer G. Modern Hopfield Networks and Attention for Immune Repertoire Classification. bioRxiv. 2020.

https://www.biorxiv.org/content/early/2020/08/17/2020.04.12.038158.full.pdf.

- Kirkpatrick S., Gelatt C., Vecchi M. Optimization by Simulated Annealing // Science (New York, N.Y.). 1983. V. 220. P. 671–80.
- 25. Peterson C., Anderson J. R. A Mean Field Theory Learning Algorithm for Neural Networks // Complex Syst. 1987. V. 1. P. 995–1019.
- Peterson C., Anderson J. R. Neural Networks and NP-complete Optimization Problems; A Performance Study on the Graph Bisection Problem // Complex Syst. 1988. V.2. P. 59–89.
- Gyulassy M., Harlander M. Elastic Tracking and Neural Network Algorithms for Complex Pattern Recognition // Comput. Phys. Commun. 1991. V. 66, No. 1. P. 31–46. URL: https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0010465591900056.
- 28. Запрягаев С. А., Сорокин А. И. Распознавание простых линий на изображении // Прикладная информатика. 2009. № 4. С. 76-86. URL: https://cyberleninka.ru/article/n/raspoznavanie-prostyhliniy-na-izobrazhenii.
- 29. Muresan L., Muresan L., Ososkov G., Panebratsev Y. Deformable Templates for Circle Recognition // JINR Rapid Commun. 1997. V. 1997, No. 1. P. 27–44.
- 30. Baginyan S., Ososkov G. Finding Tracks Detected by a Drift Tube System // Comput. Phys. Commun. 1998. V. 108, No. 1. P. 20–28. URL: https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0010465597001288.
- 31. Ososkov G. A., Bakina O. V., Baranov D. A., Goncharov P. V., Denisenko I.I., Zhemchugov A. S., Nefedov Y. A., Nechaevskiy A. V., Nikolskaya A. N., Shchavelev E. M., Wang L. L., Sun S. S., Zhang Y. Tracking on the BESIII CGEM Inner Detector Using Deep Learning // Comput. Res. Mod. 2020. V. 12, No. 6. P. 1361–1381. URL: http://crm.ics.org.ru/journal/article/3013/.
- 32. Lindauer M., Eggensperger K., Feurer M., Biedenkapp A., Deng D., Benjamins C., Ruhkopf T., Sass R., Hutter F. SMAC3: A Versatile Bayesian Optimization Package for Hyperparameter Optimization // J. Mach. Learn. Res. 2022. V. 23, No. 54. P. 1–9. URL: http://jmlr.org/papers/v23/21-0888.html (online; accessed: 2023-09-20).
- 33. Amrouche S., Basara L., Calafiura P., Estrade V., Farrell S., Ferreira D.R., Finnie L., Finnie N., Germain C., Gligorov V.V., Golling T., Gorbunov S., Gray H., Guyon I., Hushchyn M., Innocente V., Kiehn M., Moyse E., Puget J.-F., Reina Y., Rousseau D., Salzburger A., Ustyuzhanin A., Vlimant J.-R., Wind J. S., Xylouris T., Yilmaz Y. The Tracking Machine Learning Challenge: Accuracy Phase // The NeurIPS '18 Competition / Ed. by S. Escalera, R. Herbrich. Cham: Springer Intern. Publ., 2020. P. 231–264.

- 34. Competition "Tracking Machine Learning" (TrackML). Particle Tracking Challenge. 2018. URL: https://kaggle.com/competitions/trackml-particle-identification.
- 35. Kiehn M., Amrouche S., Calafiura P., Estrade V., Farrell S., Germain C., Gligorov V., Golling T., Gray H., Guyon I., Hushchyn M., Innocente V., Moyse E., Rousseau D., Salzburger A., Ustyuzhanin A., Vlimant J.R., Yilnaz Y. The TrackML High-Energy Physics Tracking Challenge on Kaggle // EPJ Web Conf. 2019. V. 214. P. 06037.
- 36. *Reid P. S.* Applied Quantum Annealing for Particle Tracking: Optimisation for the HL-LHC. 2021.
- 37. Liu G., Ma W. P., Cao H., Lyu L. D. A Quantum Hopfield Neural Network Model and Image Recognition // Las. Phys. Lett. 2020. V. 17, No. 4. P.045201.
- 38. *Miller N. E., Mukhopadhyay S.* A Quantum Hopfield Associative Memory Implemented on an Actual Quantum Processor // Sci. Rep. 2021. V. 11, No. 1.
- Rotondo P., Marcuzzi M., Garrahan J.P., Lesanovsky I., Müller M. Open Quantum Generalisation of Hopfield Neural Networks // J. Phys. A. 2018. V.51, No. 11. P. 115301.
- 40. Rebentrost P., Bromley T. R., Weedbrook C., Lloyd S. Quantum Hopfield Neural Network // Phys. Rev. A. 2018. V. 98. P. 042308. URL: https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.98.042308.
- 41. Meglio A. D., Jansen K., Tavernelli I., Alexandrou C., Arunachalam S., Bauer C. W., Borras K., Carrazza S., Crippa A., Croft V., de Putter R., Delgado A., Dunjko V., Egger D. J., Fernandez-Combarro E., Fuchs E., Funcke L., Gonzalez-Cuadra D., Grossi M., Halimeh J. C., Holmes Z., Kuhn S., Lacroix D., Lewis R., Lucchesi D., Martinez M. L., Meloni F., Mezzacapo A., Montangero S., Nagano L., Radescu V., Ortega E. R., Roggero A., Schuhmacher J., Seixas J., Silvi P., Spentzouris P., Tacchino F., Temme K., Terashi K., Tura J., Tuysuz C., Vallecorsa S., Wiese U.J., Yoo S., Zhang J. Quantum Computing for High-Energy Physics: State of the Art and Challenges. Summary of the QC4HEP Working Group. 2023. arXiv:2307.03236.
- 42. Farhi E., Goldstone J., Gutmann S. A Quantum Approximate Optimization Algorithm. 2014. arXiv:1411.4028 [quant-ph].
- 43. Zhou L., Wang S. T., Choi S., Pichler H., Lukin M. D. Quantum Approximate Optimization Algorithm: Performance, Mechanism, and Implementation on Near-Term Devices // Phys. Rev. X. 2020. V. 10, No. 2.
- 44. Peruzzo A., McClean J., Shadbolt P., Yung M.H., Zhou X.Q., Love P.J., Aspuru-Guzik A., O'Brien J.L. A Variational Eigenvalue Solver on a Photonic Quantum Processor // Nat. Commun. 2014. V.5, No. 1.
- 45. Yu H., Huang Y., Wu B. Exact Equivalence between Quantum Adiabatic Algorithm and Quantum Circuit Algorithm // Chin. Phys. Lett. 2018. V.35, No.11. P. 110303. URL: https://dx.doi.org/10.1088/0256-307X/35/11/110303.

Получено 8 февраля 2024 г.

Редактор Е.В.Сабаева

Подписано в печать 5.03.2024. Формат 60 × 90/16. Бумага офсетная. Печать цифровая. Усл. печ. л. 1,25. Уч.-изд. л. 1,82. Тираж 105 экз. Заказ № 60832.

Издательский отдел Объединенного института ядерных исследований 141980, г. Дубна, Московская обл., ул. Жолио-Кюри, 6. E-mail: publish@jinr.ru www.jinr.ru/publish/