

量子机器学习在高能物理数据处理中的应用研究

李腾 姚志鹏 黄性涛 丁彪 邹佳恒 林韬 李卫东

山东大学

中国科学院高能物理研究所

2023年3月31日

报告内容

❖ 量子机器学习介绍

❖ 量子机器学习的应用举例

- BESIII上的粒子鉴别算法
- 基于QCNN的D_{TOF}粒子鉴别算法
- BESIII上的数据分析
 - 修正MC样本
 - Z_c(3900)信号寻找

❖ 总结

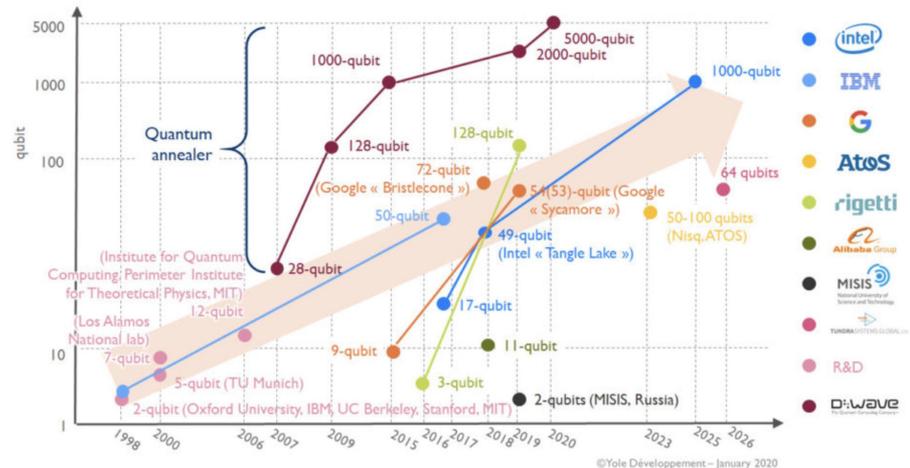
量子计算机

- ❖ 利用量子态的叠加性和纠缠性信息进行运算和处理的机器
 - 量子计算机的强并行性，打开了提升计算效率的完全不同的技术路径
- ❖ 在高能物理领域，量子计算的应用研究已经进行了多年
 - CERN 量子技术计划 (CERN QTI)在2021年10月公布长期量子研究计划的路线图，促进量子技术在**高能物理学**领域的应用



Physical qubit roadmap for quantum computer

(Source: Quantum Technologies 2020 report, Yole Développement)



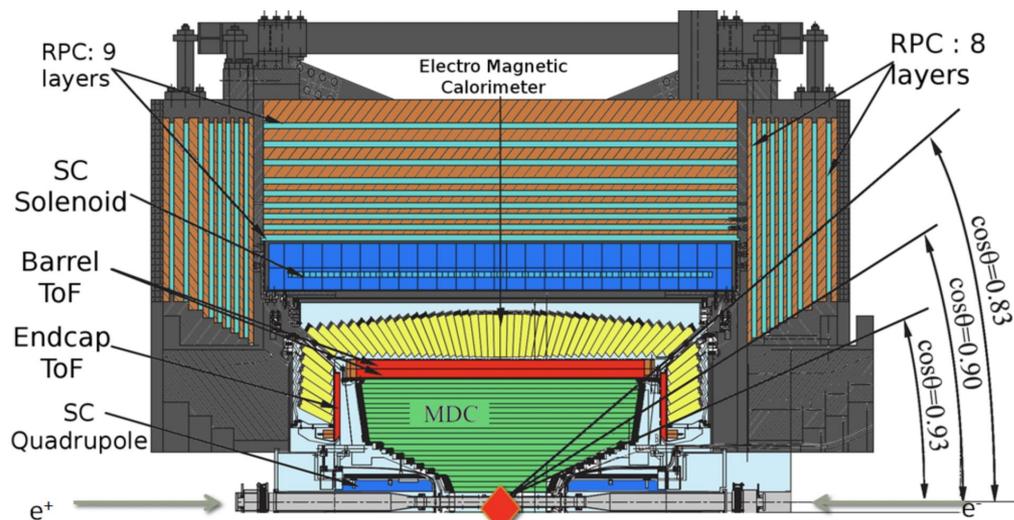
量子机器学习

- ❖ 属于量子计算和算法的研究范畴
 - 为传统机器学习算法提供了额外的方案
 - QSVM、QNN、QCNN、QGNN、QGAN...
- ❖ 量子计算机可能对机器学习带来“量子优越性”
 - 加速模型收敛速度
 - 在高维空间中处理数据，达到经典计算机无法比拟的效果
- ❖ 目前针对量子机器学习的研究多为可行性研究
 - 探究在高能物理实验数据处理中使用量子计算机的可行性
 - 一般在含噪中尺度量子计算机（NISQ device）上做验证
 - 为将来更复杂的应用提供指导（模拟、重建和物理分析等）

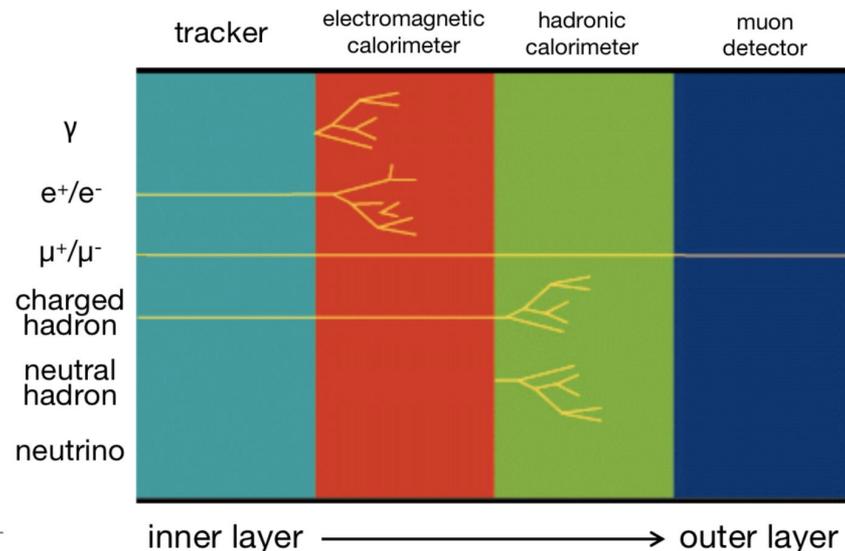
BESIII上的粒子鉴别研究

BESIII上的粒子鉴别

- ❖ 传统的机器学习方法已经有了较多研究结果
 - 决策树、神经网络等模型，通常擅长联合多个子探测器综合给出结果，从而更好解决困难的PID任务
- ❖ 以 μ/π 鉴别为例，研究量子机器学习 ($\sim O(10^4)$ MC样本, 9输入特征)
 - 量子支持向量机
 - 变分量子分类器 (量子神经网络)



BESIII detector (upper half)



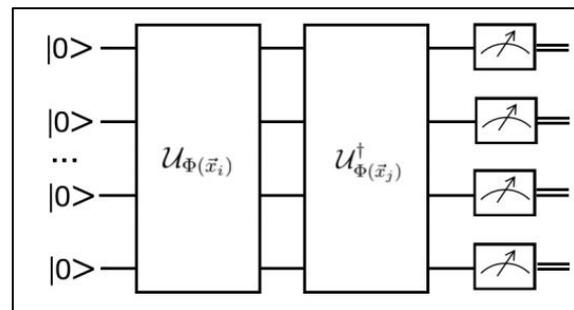
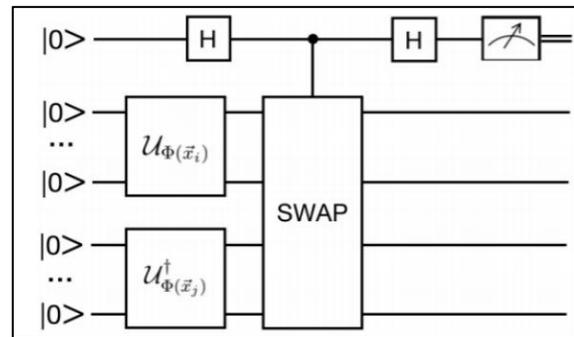
Characters of particles in sub-detectors

量子支持向量机：原理

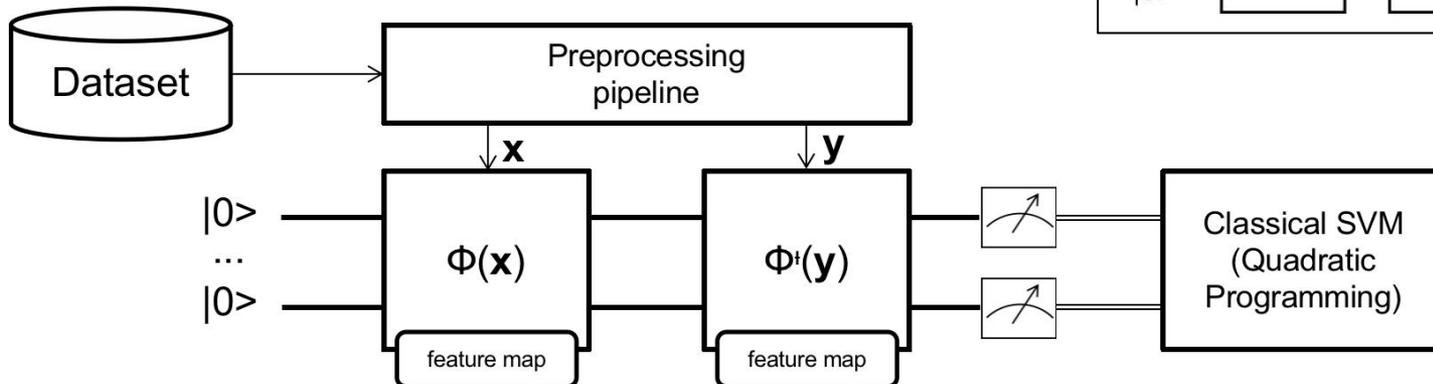
- ❖ 两个量子态的内积计算可以等效为计算核函数

$$\begin{aligned} \text{maximize} \quad & L(\vec{\alpha}) = \sum_{i=1}^N y_i \alpha_i - \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \alpha_i \alpha_j y_i y_j K(\vec{x}_i, \vec{x}_j) \\ \text{subject to} \quad & \sum_{i=1}^N \alpha_i y_i = 0 \text{ and } \alpha_i \geq 0, \forall i = 1, 2, \dots, N \end{aligned}$$

$$K(\vec{x}_i, \vec{x}_j) = |\langle \Phi(\vec{x}_i) | \Phi(\vec{x}_j) \rangle|^2 = \left| \langle 0^{\otimes n} | \mathcal{U}_{\Phi(\vec{x}_j)}^\dagger \mathcal{U}_{\Phi(\vec{x}_i)} | 0^{\otimes n} \rangle \right|^2$$



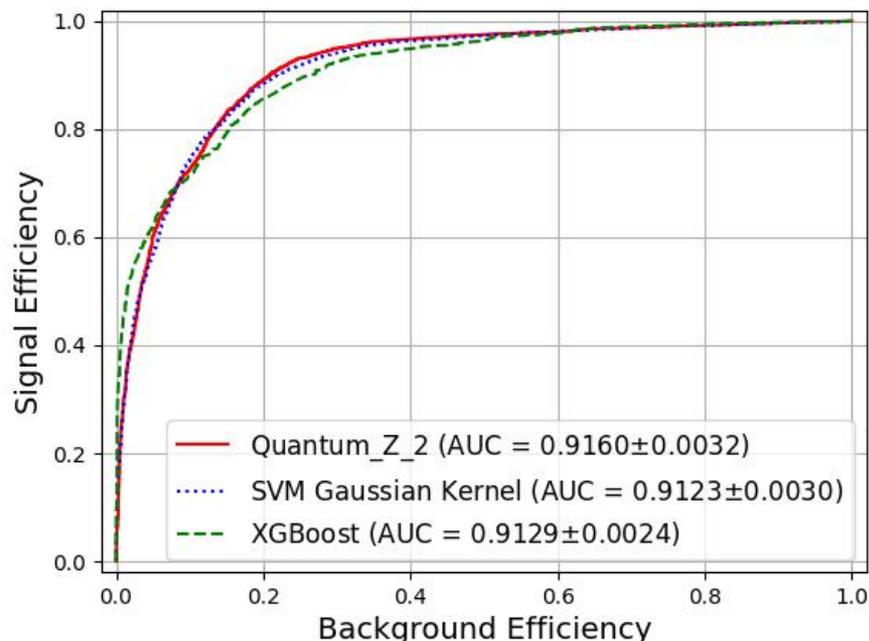
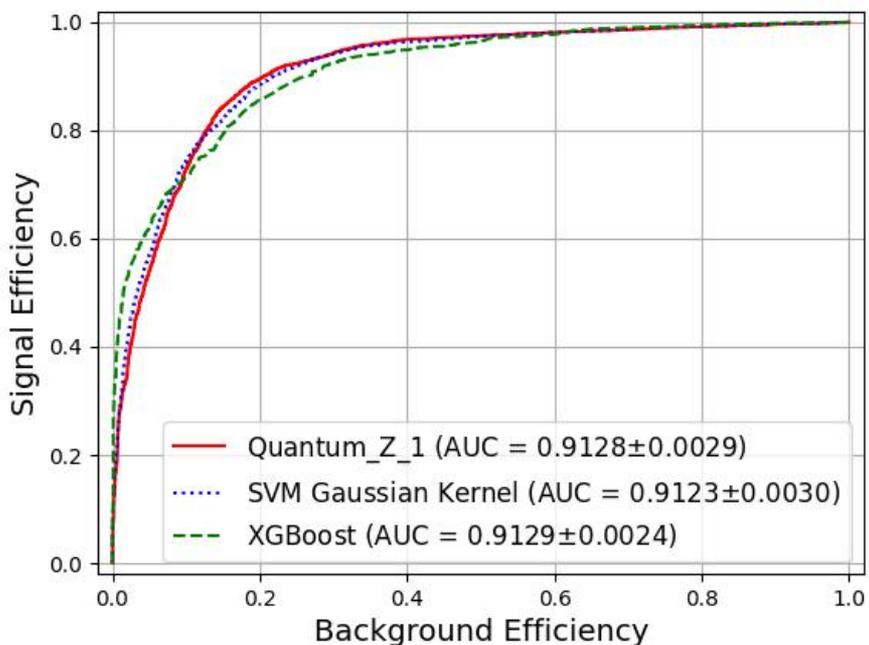
- ❖ 量子支持向量机的概览:



量子支持向量机：性能

❖ 为了评估量子支持向量机的性能，我们与传统机器学习模型进行了比较

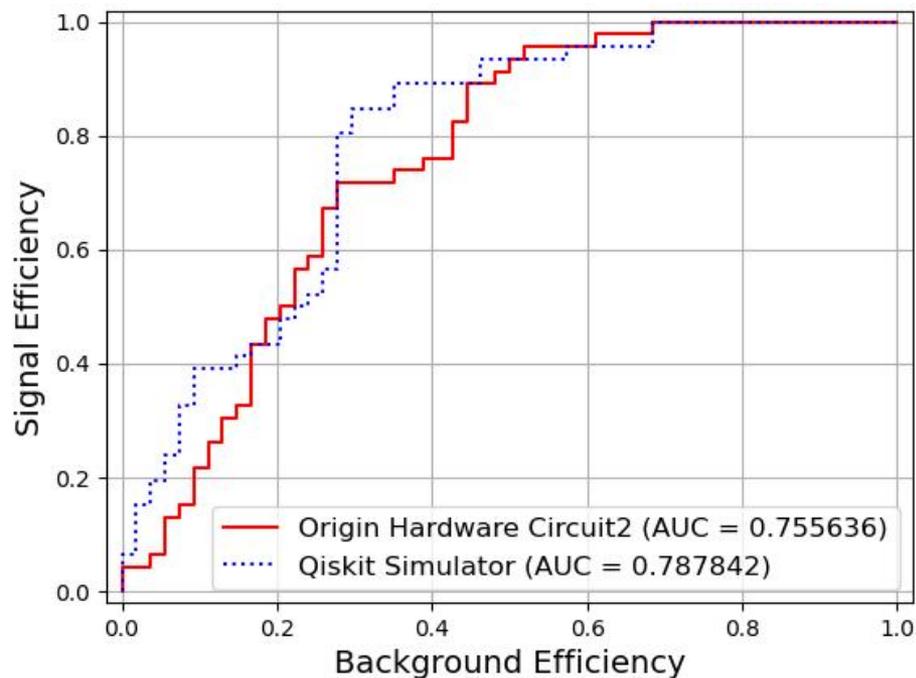
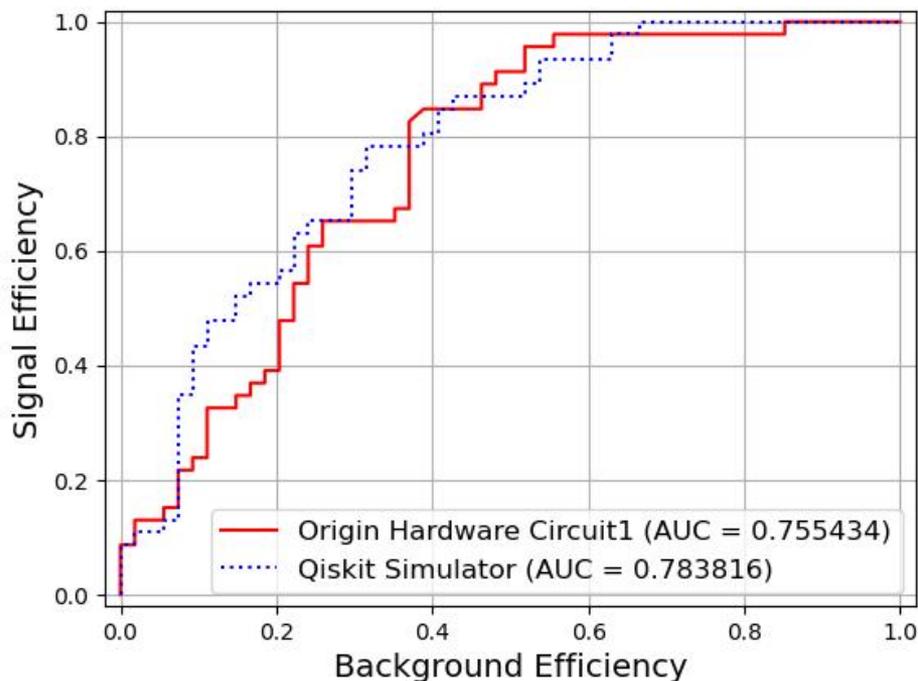
- 经过仔细调整优化超参数后，量子支持向量机、经典支持向量机和决策树达到了相似的PID能力
- ~20000训练集，9特征量



量子支持向量机：硬件性能

❖ 通过悟源系统训练模型，获取PID性能结果

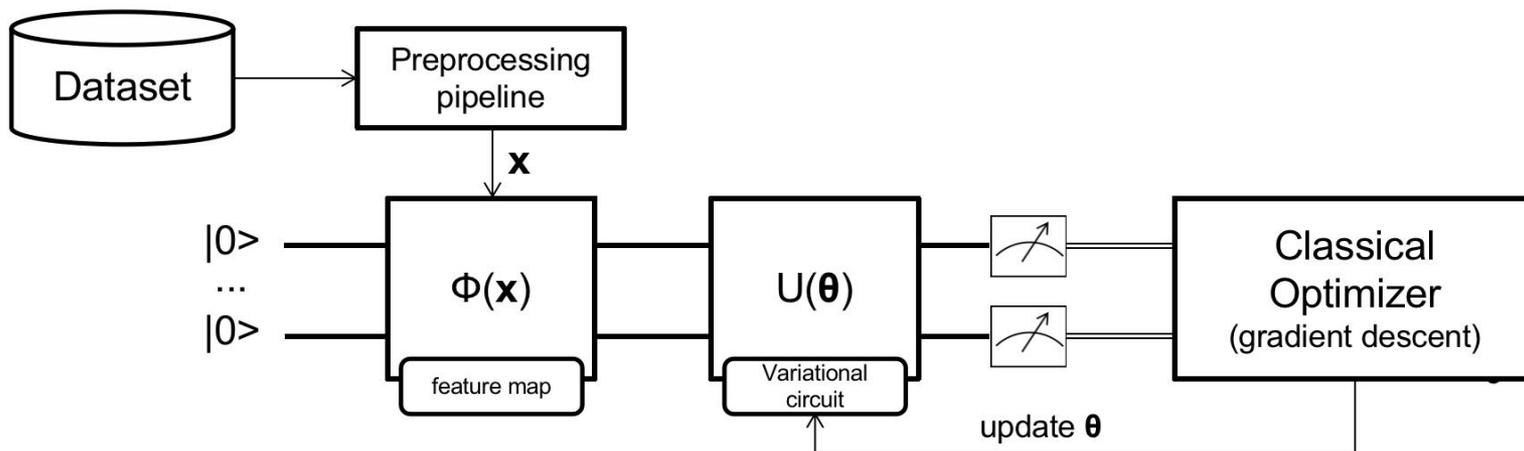
- 受限于硬件计算资源，仅使用了较小的数据样本（100条径迹的训练集和100条径迹的测试集）
- 结果显示，噪声等问题会略微损害最终的PID性能，但程度不大



* 结果已于ACAT 2021[报告](#)，[会议论文](#)；
CERN QTI workshop报告

变分量子分类器：原理

- ❖ 变分量子分类器属于经典-量子计算混合模型



- 编码线路将数据编码到量子态上
- 经过编码线路之后，变分线路（可训练）在准备好的量子态上进行线性变换
- 变分线路的参数通过经典优化器（**parameter shift rule**）进行优化
- 通过观测控制位量子比特，分类被编码的数据（通过估计每种态的概率）

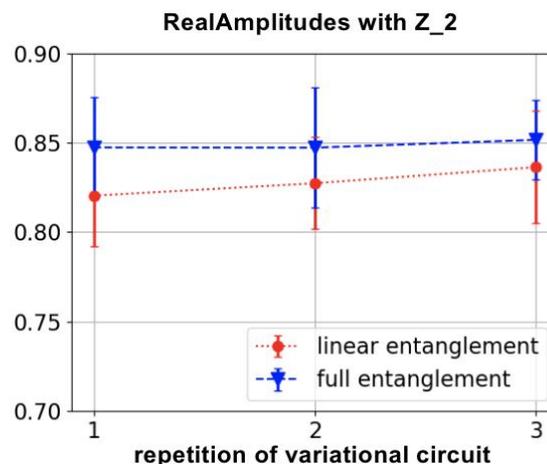
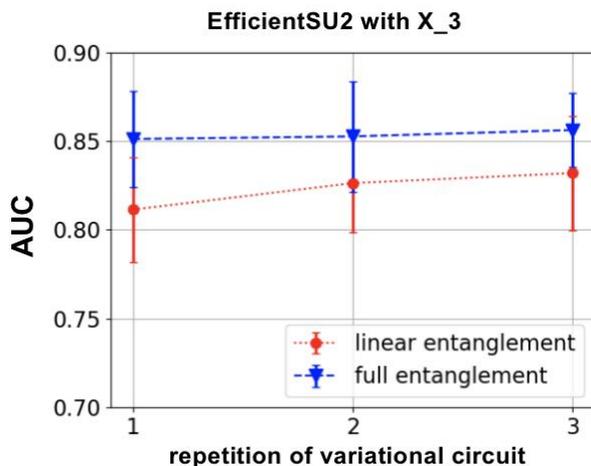
变分量子分类器：原理性能测试

❖ 不同编码线路对性能的影响

variational circuit	Test set AUC with X_3	Test set AUC with Z_2
EfficientSU2	0.84983±0.0292	0.84514±0.0365
ExcitationPreserving	0.42660±0.0327	0.52333±0.0280
PauliTwoDesign	0.74614±0.0277	0.76688±0.0425
RealAmplitudes	0.84656±0.0303	0.84711±0.0277
TwoLocal	0.84102±0.0330	0.84707±0.0272

❖ 不同ansatz结构对性能的影响

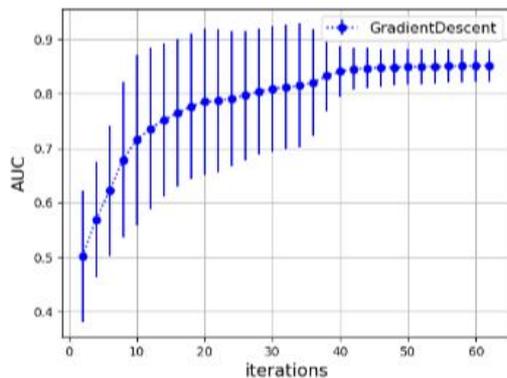
- 通过模拟不同的纠缠方式和线路深度，检测它们对PID性能的影响
- 通常，更复杂的纠缠方式和更深的线路结构（更多的可训练参数）总会带来更强的PID性能，但消耗的计算资源也会显著提升



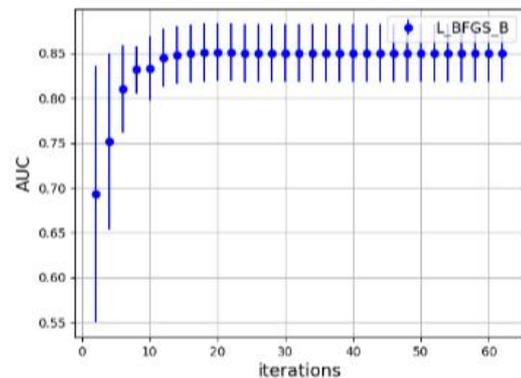
变分量子分类器：优化算法

❖ 对比了经典的梯度下降法和和Quasi-Newton法

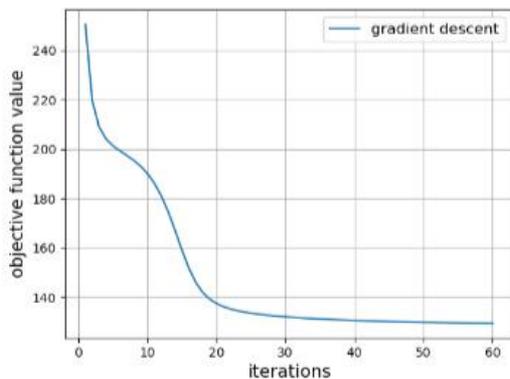
由于L_BFGS_B优化器 (Quasi-Newton法) 在计算梯度时考虑到了损失函数的二阶导数，模型的收敛速度显著提升



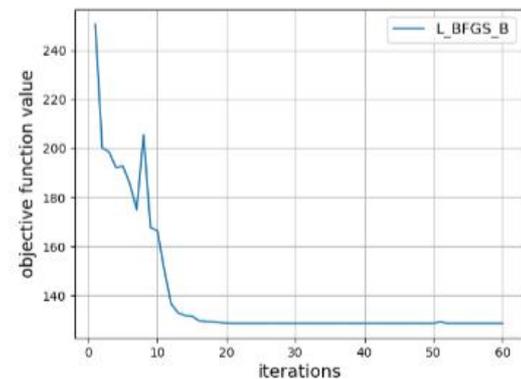
(a)



(b)



(c)



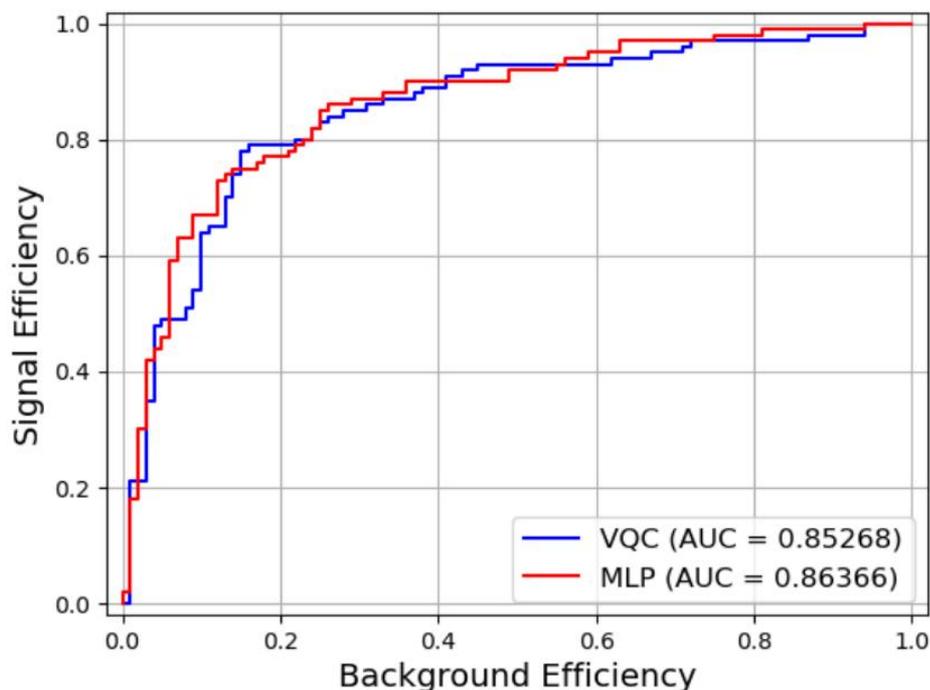
(d)

(a)(c) Variation of AUC with the number of iterations

(b)(d) Variation in the objective function during the iteration.

变分量子分类器：性能对比

- ❖ 为了评估VQC，对比了VQC和经典神经网络的性能
 - VQC配置: EfficientSU2 with X_3 and L_BFGS_B optimizer
 - 经典神经网络配置: 400x200x100x50x15 (relu, adam)
- 结果显示，在小数据集上，VQC可以达到和经典神经网络类似的性能



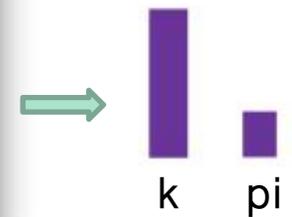
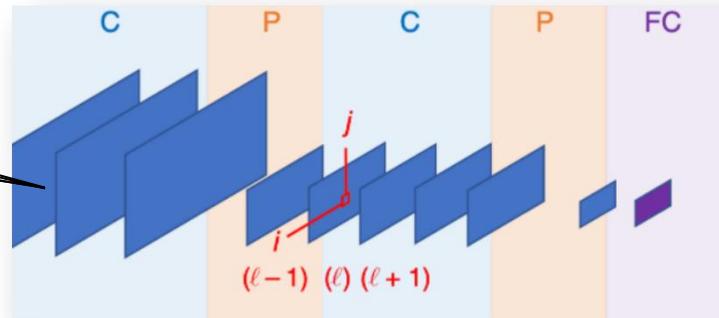
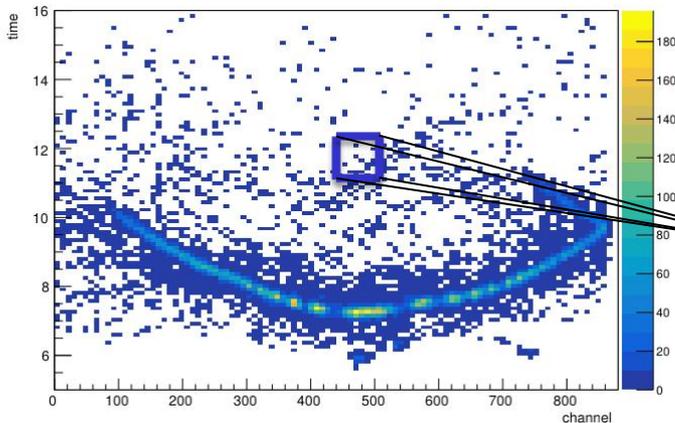
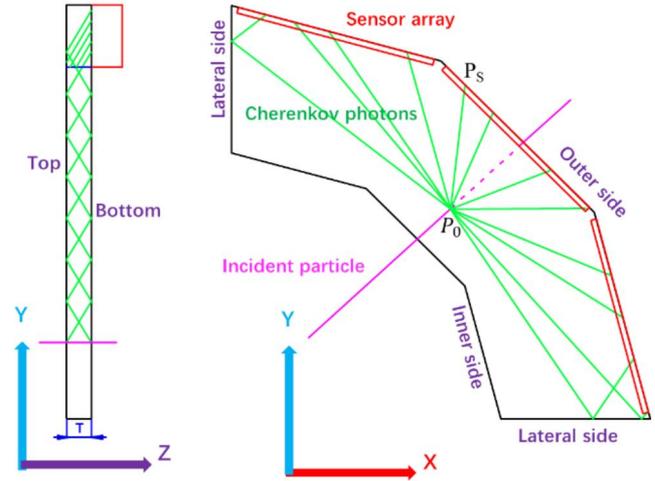
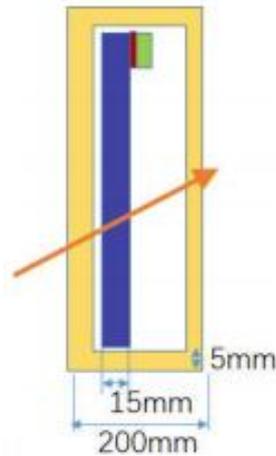
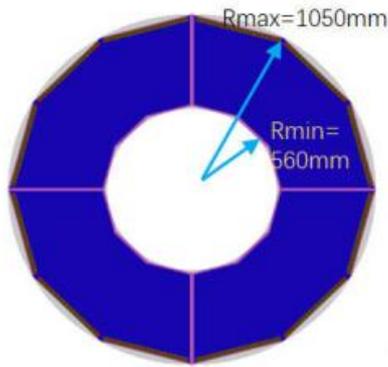
* 细节请见
[BESIII软件与计算研讨会](#)

* 该项工作已完成投稿
EPJC (审稿中)

STCF DTOF探测器上基于图像 分析的粒子鉴别研究

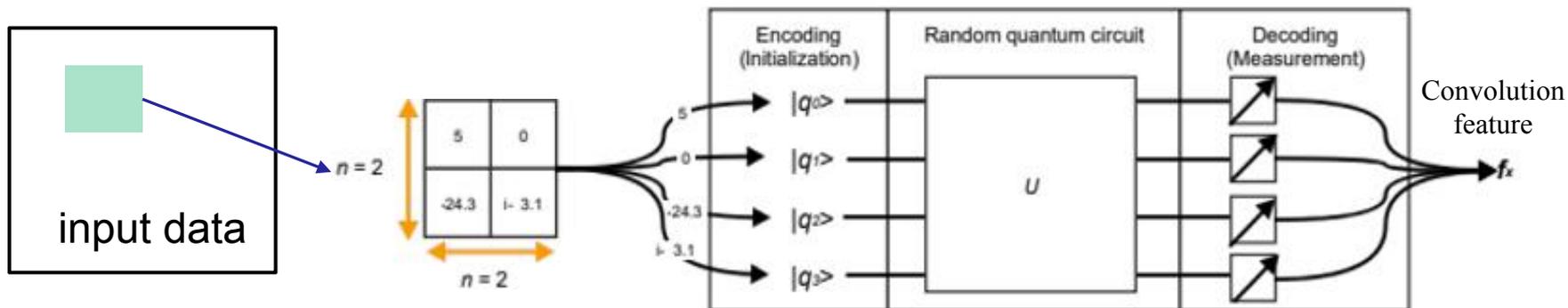
DTOF上基于图像分析的粒子鉴别算法

- ❖ DIRC-like Time-of-flight探测器，基于内部反射的切伦科夫光进行粒子类型鉴别

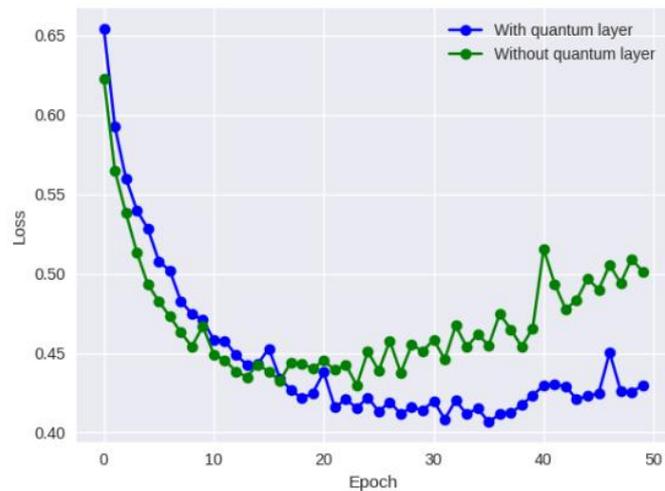
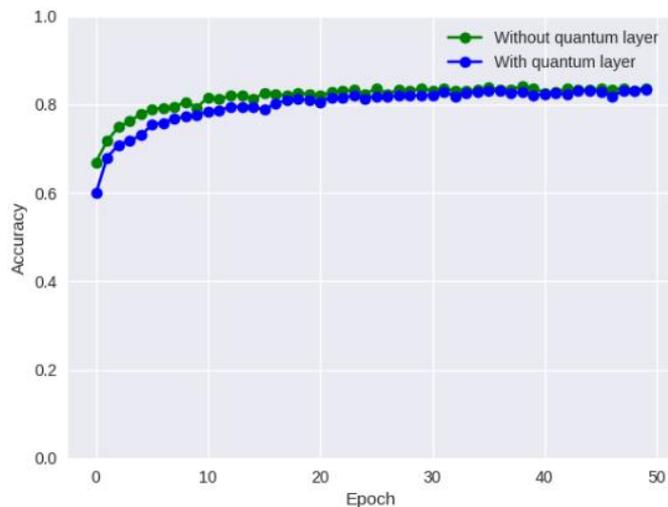


量子卷积神经网络

❖ 利用可训练的“量子卷积核”提取图像特征，输入经典CNN



❖ 初步结果



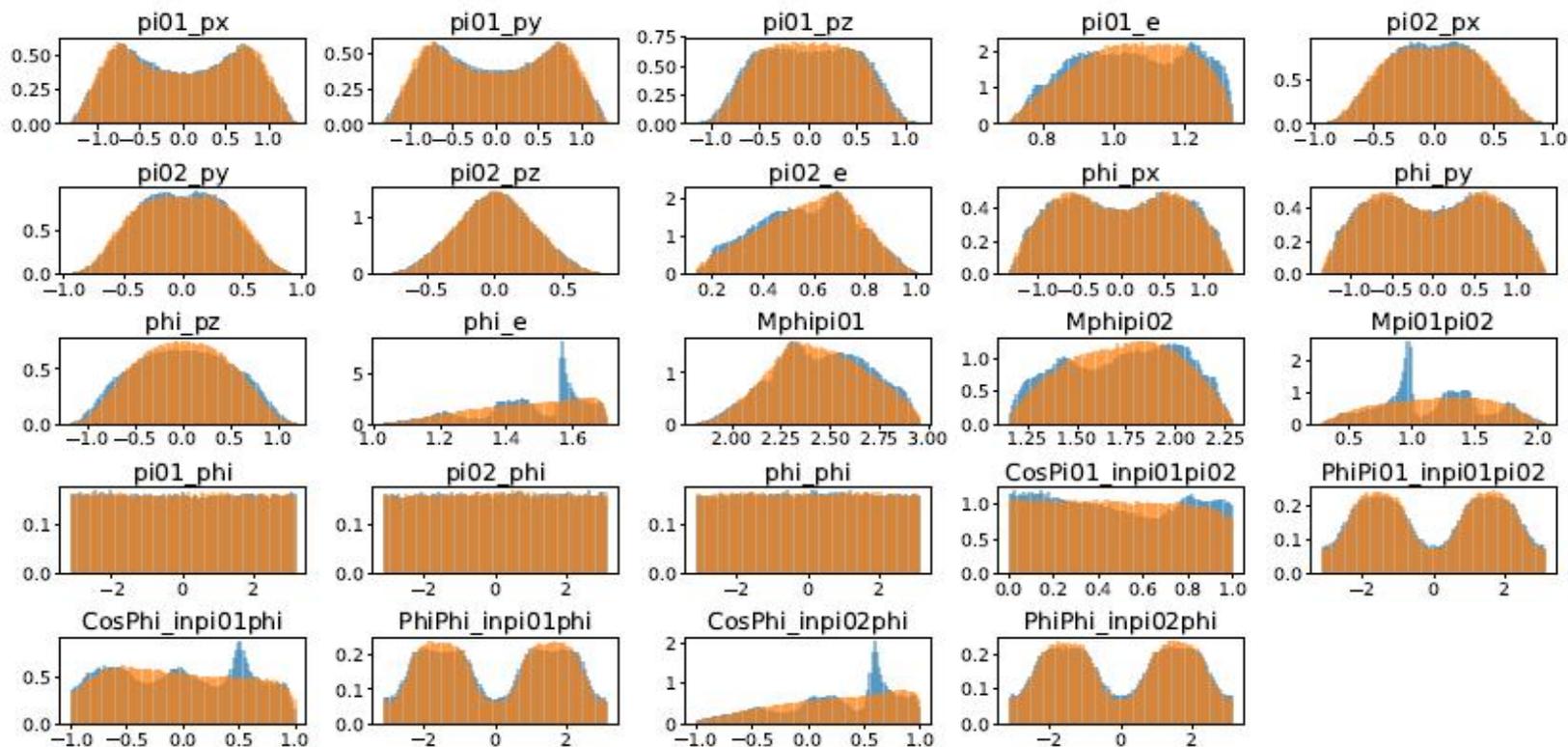
* 该项工作细节和初步结果将于[CHEP2023](#)口头报告

BESIII上的数据分析研究

- 通过reweight缩小蒙卡与真实数据的分布差异
- $Z_c(3900)$ 信号寻找

BESIII上的数据分析应用研究 (I)

- ❖ 目标：通过reweight缩小蒙卡与真实数据的分布差异

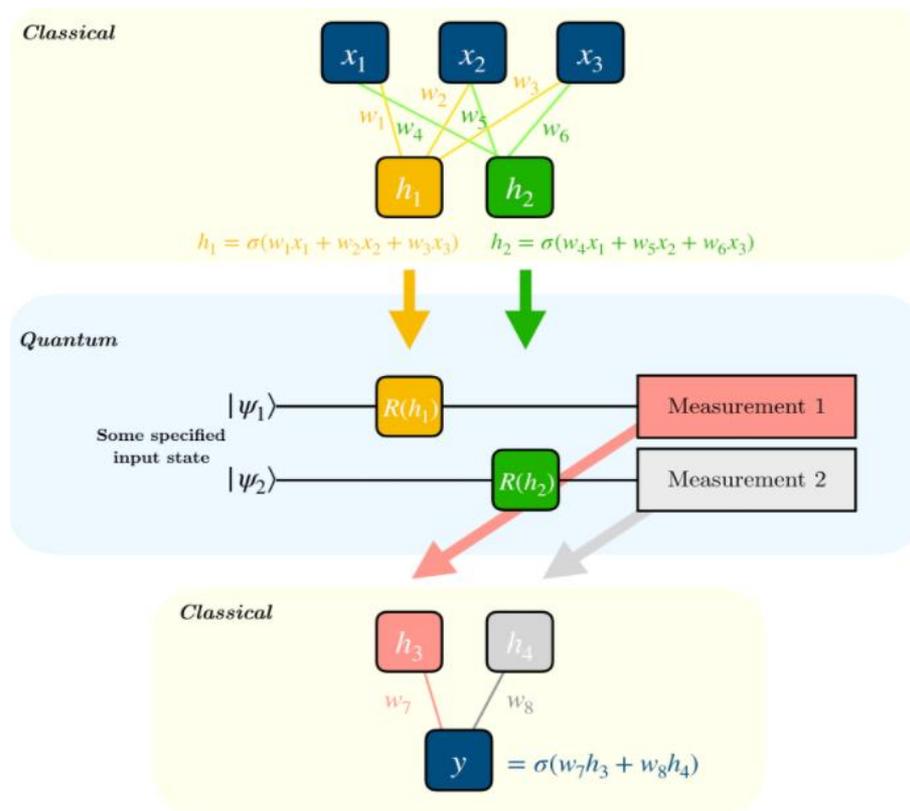


■ $J/\psi \rightarrow \phi\pi^0\pi^0$ MC
■ $J/\psi \rightarrow \phi\pi^0\pi^0$ Data

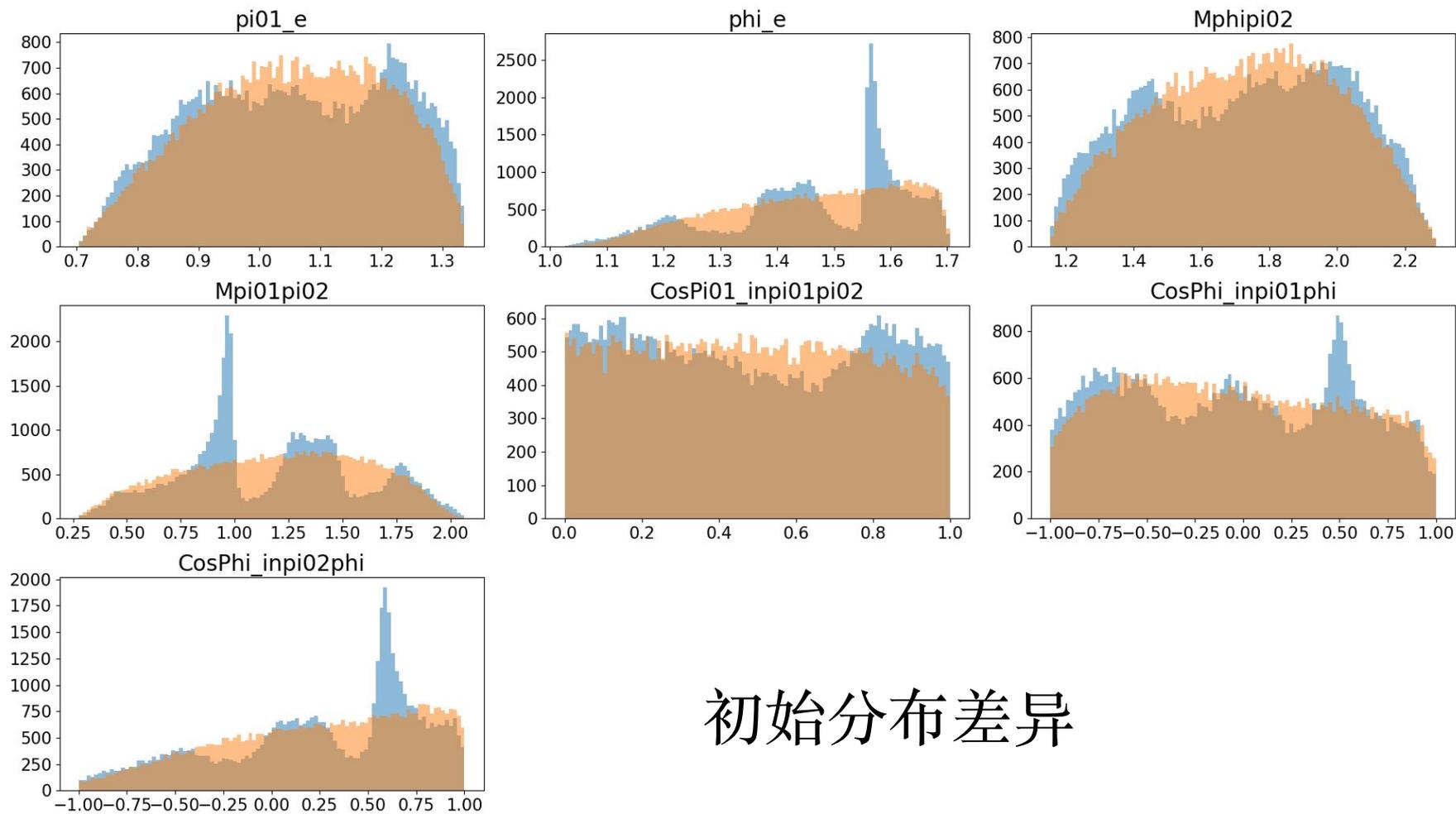
量子神经网络：基本原理

❖ 量子神经网络

- 量子与经典混合模型
- 经典神经网络的输出(h_1, h_2)被编码到量子线路中
- 量子线路的观测值重新输入神经网络(h_3, h_4)
- 参数化的量子线路作为经典神经网络的隐藏层
- 量子线路中的逻辑门参数作为可训练参数

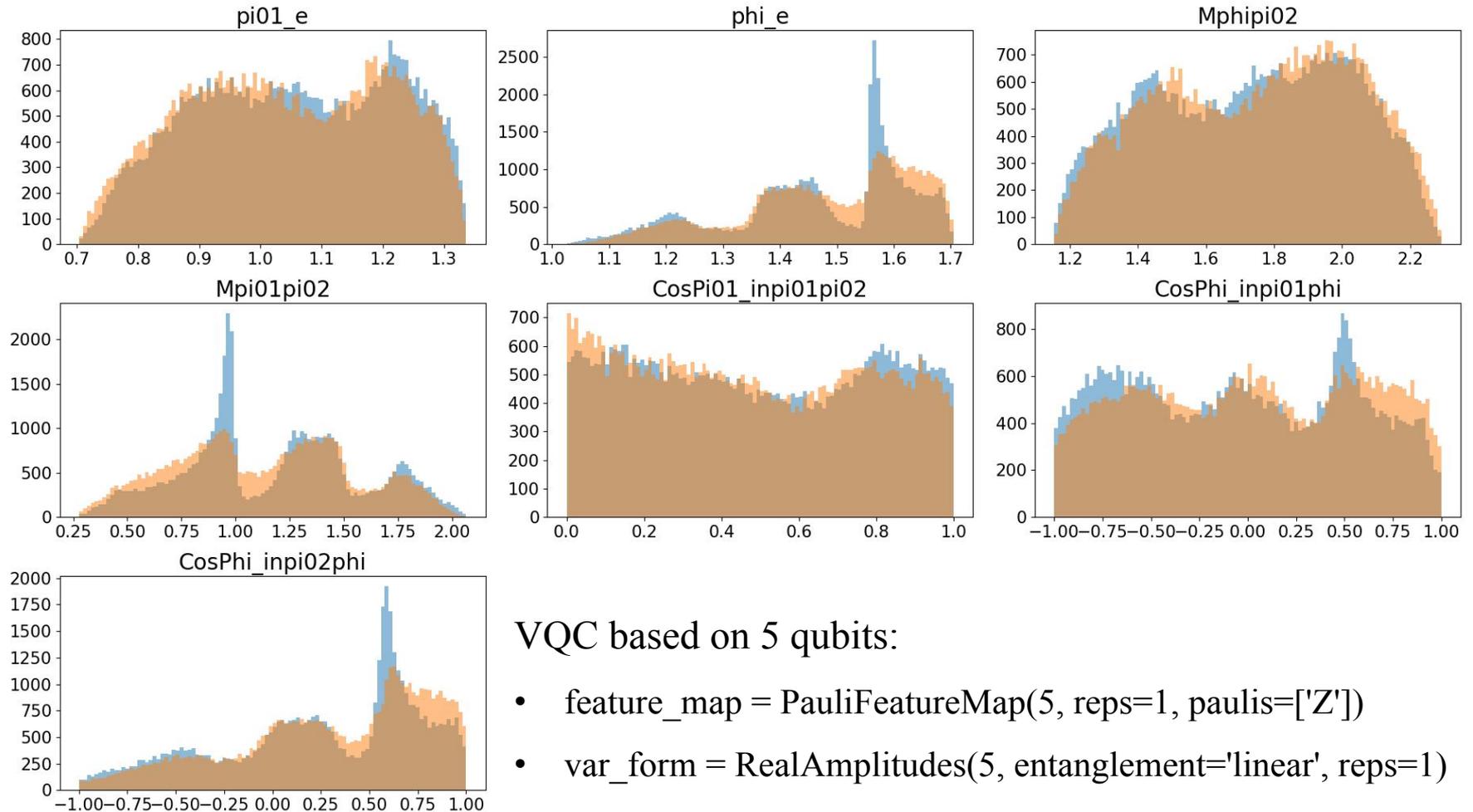


量子神经网络：性能



初始分布差异

量子神经网络：性能



VQC based on 5 qubits:

- `feature_map = PauliFeatureMap(5, reps=1, paulis=['Z'])`
- `var_form = RealAmplitudes(5, entanglement='linear', reps=1)`

* 性能还在进一步优化中

BESIII上的Zc(3900)信号识别

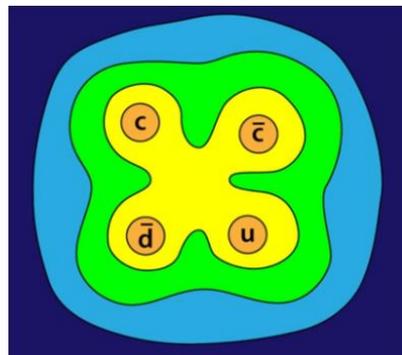
❖ Zc(3900) @ BESIII

❖ 目标衰变道

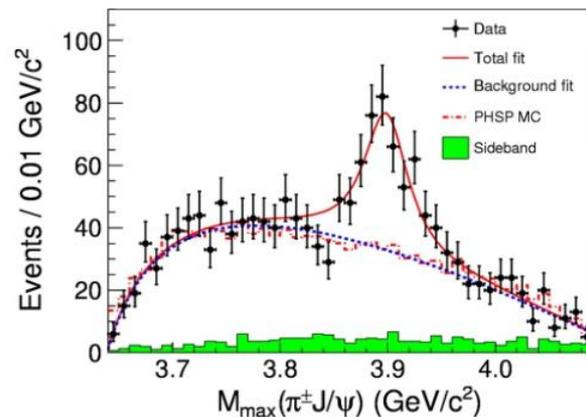
○ $e^+e^- \rightarrow J/\psi \pi^+ \pi^-$

□ $J/\psi \rightarrow e^+e^-$

□ $J/\psi \rightarrow \mu^+\mu^-$

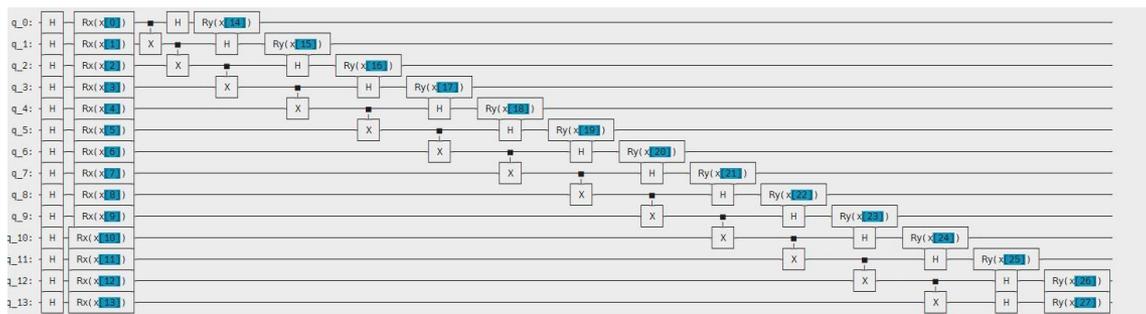


Schematic Diagram of Zc (3900) Quark Structure

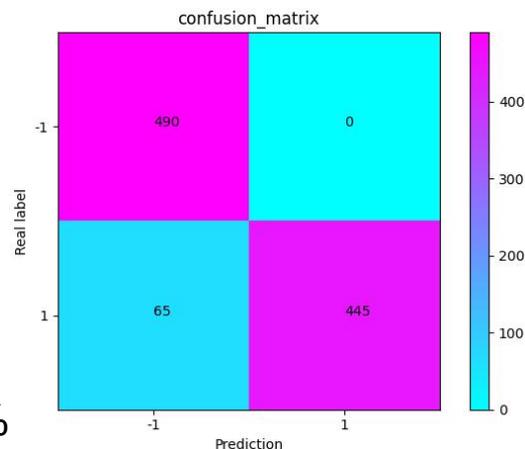


❖ 使用QSVM区分信号与本底

● 输入特征量：末态径迹能量、动量、夹角与光子能量等



• Very preliminary accuracy:93.5%



* 实现细节和初步结果将于[CHEP2023墙报](#)展示

总结与展望

- ❖ 基于量子机器学习，山大和高能所合作，投入人力在高能物理实验数据处理领域开展了多项研究，并积累了一定的经验
 - 基于QSVM和VQC的 μ/π 粒子鉴别算法，以及基于QCNN的粒子鉴别算法，已经取得初步的结果
 - 正在进一步研究基于QSVM和量子神经网络的数据分析方法
 - 在新一代实验上，正着手研究基于QGAN的电磁量能器快速模拟算法
- ❖ 我们研究了大量的基本问题
 - 编码线路结构、可变线路结构、可变线路的优化算法等
- ❖ 在本源悟源量子计算机上，我们测试了量子支持向量机模型
- ❖ 在较小的数据集上，量子算法和经典算法表现出了相似的性能。随着量子模拟器和硬件的进一步发展，在高能物理中可能有一定的应用前景