

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ АВТОНОМНОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ
ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ «НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ ЯДЕРНЫЙ
УНИВЕРСИТЕТ «МИФИ»

УДК 539.12.01

ОТЧЕТ
О НАУЧНО-ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКОЙ РАБОТЕ

РАЗРАБОТКА РЕШЕНИЙ ПО
МОДЕЛИРОВАНИЮ И РЕКОНСТРУКЦИИ С
ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ НЕЙРОННЫХ СЕТЕЙ
И МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ

Научный руководитель

к.т.н.

К. В. Герценбергер

Студент

Д. Н. Джавадов

Москва 2025

Содержание

Введение	2
1 Классические алгоритмические методы реконструкции треков	4
1.1 Метод преобразования Хафа (Hough Transform)	4
1.1.1 Описание метода	4
1.1.2 Вычислительная сложность метода	5
1.1.3 Основные проблемы в эксперименте	5
1.2 Алгоритмы на основе клеточных автоматов	6
1.2.1 Описание метода	6
1.2.2 Вычислительная сложность метода	6
1.2.3 Основные проблемы в эксперименте	6
2 Графовые нейронные сети как основа нового подхода	8
3 Выбор архитектуры: Graph Attention Network (GAT)	9
4 План реализации и развития метода	10
Заключение	12
Список литературы	13

Введение

Эксперимент BM@N (Baryonic Matter at Nuclotron) в рамках мегасайенс-комплекса NICA (Nuclotron-based Ion Collider fAcility) в ОИЯИ (Объединенный институт ядерных исследований) направлен на исследование свойств ядерной материи при экстремальных плотностях, создаваемых в столкновениях пучков тяжелых ионов с фиксированной мишенью. Получение физических результатов напрямую зависит от точности и эффективности обработки сырых данных, регистрируемых сложной системой детекторов [1].

Одним из важных и нетривиальных этапов при обработке полученных данных эксперимента является реконструкция треков — восстановление траектории заряженных частиц по координатным сигналам (хитам), оставленным в различных слоях детекторной системы. Этот процесс можно разделить на два этапа: поиск трек-кандидатов (первичное связывание хитов в возможные траектории) и фитирование треков (уточнение параметров треков частиц). Наибольшие вычислительные и алгоритмические сложности связаны с первой стадией.

Для поиска трек-кандидатов в современных экспериментах, таких как эксперимент столкновения частиц BM@N, используют алгоритмы, основанные на геометрических и комбинаторных принципах. К ним относятся:

- Метод преобразования Хафа (Hough Transform), который преобразует задачу поиска прямых или кривых в поиск максимумов в пространстве параметров линий [2, 3].
- Алгоритмы на основе клеточных автоматов, имитирующие процесс «выращивания» трека из точек [4, 5]. Алгоритм начинается с выбора одной или нескольких начальных точек (в данном случае хитов) и на каждом шаге пытается продлить растущий трек, добавляя к нему подходящие хиты с соседней детекторной плоскости.

Основное ограничение этих методов — их комбинаторная природа. Высокая плотность фоновых хитов в GEM-детекторах, к примеру, вызванных дельта-электронами, которые создают дополнительные сигналы, не принадлежащие

основному треку, число возможных комбинаций для перебора становится чрезвычайно велико. Это приводит к значительным вычислительным затратам и увеличению времени реконструкции, что делает данные методы малопригодными для задач онлайн-обработки в экспериментальном сеансе в случае высокой частоты столкновения частиц.

В качестве перспективного направления, позволяющего как сравнивать эффективность различных подходов, так и значительно ускорить обработку данных, вплоть до использования в онлайн-системе эксперимента, рассматривается применение методов машинного (Machine Learning, ML) и глубокого обучения (Deep Learning, DL). Эти подходы позволяют не явно программировать правила связывания хитов, а обучить модель распознавать сложные паттерны и закономерности на полученных данных. Одной из различных архитектур ML для задач трекинга является парадигма графовых нейронных сетей (Graph Neural Networks, GNN) [6]. Она позволяет напрямую представить набор хитов как набор вершин графа, а задачу поиска треков — как задачу классификации ребер (связей между вершинами-хитами). В качестве базовой архитектуры GNN предлагается использовать Graph Attention Network (GAT). Ее механизм внимания позволяет модели избирательно «взвешивать» влияние соседних хитов, для избирательного анализа информации в зашумленной среде.

Целью данной научно-исследовательской работы являлся выбор метода и базовой архитектуры на основе машинного обучения для быстрой реконструкции треков частиц с использованием анализа ограничений применяемых классических методов, а также формирование поэтапного плана реализации и развития выбранного метода для эксперимента на фиксированной мишени BM@N.

1 Классические алгоритмические методы реконструкции треков

Задачу трекинга частиц в классическом подходе можно сформулировать как поиск оптимальных геометрических соответствий между точками (хитами) в пространстве детектора, удовлетворяющих физическим ограничениям. Таким образом, основная сложность заключается в предварительном комбинаторном поиске наборов хитов-кандидатов для дальнейшего фитирования.

1.1 Метод преобразования Хафа (Hough Transform)

1.1.1 Описание метода

Математическая суть преобразования Хафа и принцип работы аккумулятора заключаются в переходе от анализа отдельных точек в пространстве изображения (хитов) к анализу пространства параметров геометрических фигур (параметрических кривых). [2, 3]

Каждая точка с координатами (x, y) преобразуется в кривую в параметрическом пространстве. Для случая прямой, заданной в нормальной параметризации, это преобразование описывается уравнением:

$$\rho = x \cos \theta + y \sin \theta, \quad (1)$$

где ρ — расстояние от начала координат до прямой, а θ — угол её нормали. В результате, одна точка в пространстве (x, y) соответствует синусоидальной кривой в пространстве (θ, ρ) , представляющей собой множество всех возможных прямых, проходящих через данную точку.

Аккумулятор — это дискретный массив (таблица), представляющий собой параметрическое пространство (θ, ρ) . Каждая ячейка этого массива соответствует определённому малому диапазону параметров θ и ρ . Алгоритм последовательно обрабатывает все хиты: для каждого хита вычисляется набор ячеек, через которые проходит его синусоидальная кривая, и значение в каждой из этих ячеек увеличивается на единицу.

Таким образом, точки, принадлежащие одной геометрической фигуре (например, лежащие на одной прямой) в исходном пространстве, порождают кривые, пересекающиеся в одной области параметрического пространства. Это приводит к формированию локального максимума в соответствующей ячейке аккумулятора. Следовательно, задача обнаружения фигур сводится к поиску таких максимумов в аккумуляторном массиве, координаты которых непосредственно дают параметры искомых фигур.

1.1.2 Вычислительная сложность метода

Метод изначально создавался для анализа снимков пузырьковых камер, его применение к поиску сложных треков (дуг, спиралей) сталкивается с проблемой размерности. Поиск прямых требует 2 параметров (ρ, θ), окружностей — уже 3 параметров (a, b, r), а эллипсов или спиралей — еще больше. В следствие чего, размер аккумулятора и объем вычислений растут экспоненциально с увеличением количества параметров. Это делает классический метод Хафа крайне требовательным к ресурсам памяти и времени при поиске сложных кривых.

1.1.3 Основные проблемы в эксперименте

Ключевые проблемы применения метода в условиях BM@N связаны с высокой зашумлённостью данных и вычислительной сложностью. Ложные хиты создаёт в аккумуляторе случайные накопления, порождая ложные максимумы, которые маскируют сигналы от реальных треков. Тонкая настройка метода требует поиска неустойчивого компромисса: выбор размера ячейки аккумулятора (бинирование) колеблется между потерей точности при крупных бинах и «размытием» сигнала при мелких.

1.2 Алгоритмы на основе клеточных автоматов

1.2.1 Описание метода

Алгоритмы на основе клеточных автоматов представляют собой иную парадигму вычислений, где решение ищется не через глобальное преобразование (как в методе Хафа), а через локальные взаимодействия дискретных элементов [4, 5]. Математическая суть метода заключается в итеративном обновлении состояний ячеек решётки по единым правилам, зависящим только от состояния ближайших соседей.

В контексте реконструкции треков каждая ячейка соответствует хиту (точке измерения), а вся система — координатному пространству детектора. Процесс начинается с выбора одного или нескольких начальных хитов. На каждом шаге алгоритм анализирует возможные соединения хита на текущем слое с хитами-кандидатами на соседнем слое, применяя локальные геометрические и кинематические правила (например, проверку на допустимый угол между сегментами или согласованность с магнитным полем). Таким образом, трек увеличивается от слоя к слою, а сложная глобальная структура (траектория) возникает как результат множества простых локальных решений.

1.2.2 Вычислительная сложность метода

Главным источником вычислительной сложности в данном подходе является его комбинаторная природа, аналогичная проблемам метода Хафа, но проявляющаяся иначе.

На каждом шаге построения трека для его продолжения может существовать несколько потенциальных хитов-кандидатов на следующем слое. Алгоритм должен исследовать все эти возможности, что приводит к ветвлению процесса и построению «дерева поиска».

1.2.3 Основные проблемы в эксперименте

Большое число ложных хитов резко увеличивает число ложных кандидатов на каждом шаге построения трека. Это приводит к экспоненциальному росту

числа проверяемых гипотез, что делает время реконструкции неприемлемым для онлайн-обработки, а также эффективность алгоритма критически зависит от точного выбора начальных точек и параметров локальных правил. Это требует сложной эмпирической настройки, которая часто является компромиссом между потерей реальных треков и генерацией ложных треков, снижая надёжность метода.

2 Графовые нейронные сети как основа нового подхода

Графовые нейронные сети (GNN) предлагают принципиально иную парадигму, основанную на естественном представлении данных трекового детектора [6]. В этой модели каждое измерение (хит) рассматривается как узел графа, а гипотетические связи между измерениями на соседних станциях образуют рёбра.

Ключевое преимущество такого подхода заключается в возможности глобального анализа всего события одновременно: нейросеть оценивает все взаимосвязи между хитами в рамках единой структуры, что важно для разрешения сложных перекрытий треков.

Таким образом, задача реконструкции переформулируется как задача классификации рёбер — модель обучается отличать рёбра, соответствующие реальным сегментам треков, от ложных связей, возникших из-за шума или пространственных совпадений. Кроме того, операции, лежащие в основе GNN, эффективно распараллеливаются, что открывает путь к масштабируемой обработке данных и значительному ускорению операции трекинга.

3 Выбор архитектуры: Graph Attention Network (GAT)

Для классификации ребер выбрана архитектура Graph Attention Network (GAT). Её ключевое преимущество — механизм внимания (attention), позволяющий модели избирательно взвешивать информацию от соседних узлов графа. В отличие от стандартных графовых сверток Graph Convolutional Network (GCN), где признаки соседей агрегируются с фиксированными весами, слой GAT динамически вычисляет уникальный вес внимания для каждого ребра [6].

Коэффициент внимания — это скалярная величина, вычисляемая для пары связанных узлов. Он количественно оценивает силу связи между ними: чем выше коэффициент, тем сильнее признаки одного узла будут влиять на обновление признаков другого при агрегации информации в графе (процесс объединения и суммирования данных от соседних узлов для обновления информации в текущем узле). Этот коэффициент не является константой, а вычисляется нейросетью на основе обучаемой функции от признаков обоих узлов, что позволяет модели адаптироваться к структуре конкретных данных.

Работа слоя GAT включает три этапа. Сначала для каждой пары связанных узлов вычисляется исходный коэффициент внимания. Затем коэффициенты для всех соседей данного узла нормализуются функцией Softmax, что преобразует их в распределение вероятностей, где сумма весов равна единице. Наконец, признаки узла обновляются посредством взвешенной суммы признаков его соседей с учётом полученных нормированных весов.

В условиях эксперимента BM@N, где ложные хиты превосходят по количеству полезные сигналы, эта способность GAT к адаптивной фильтрации и фокусировке на релевантных связях является критически важной. Архитектура позволяет нейросети выделять устойчивые паттерны, соответствующие физическим траекториям частиц, и эффективно игнорировать шум, формируя более точное представление о событии.

4 План реализации и развития метода

Практическая реализация метода будет осуществляться поэтапно. Первым этапом станет подготовка датасета на основе моделированных данных с использованием программного комплекса BmnRoot. Исходный набор данных будет включать пространственные координаты хитов, идентификаторы частиц, геометрию детекторных плоскостей трековых детекторов и истинные идентификаторы треков (TrackID) для разметки. На основе этих данных будет создан код для автоматического построения начальных графов событий. В качестве простейшего эвристического подхода для формирования ребер-кандидатов на первом этапе планируется реализовать алгоритм k-nearest neighbors (k-NN), который будет соединять хиты на соседних станциях по критерию минимального евклидова расстояния в пространстве.

Следующим этапом развития станет усложнение логики построения графа за счет включения физических принципов. Планируется разработать и интегрировать в код правила, учитывающие ограничения по кривизне траектории частицы в магнитном поле эксперимента, многократное рассеяние частиц, минимально допустимые расстояния, последовательность прохождения частицами слоев детектора, а также возможность образования вторичных вершин, возникающих при распадах частиц в объёме детектора. Это позволит перейти от абстрактного геометрического графа к физически мотивированному представлению, что предполагается значительно сократит количество изначально ложных гипотез и повысит эффективность обучения модели.

Основные усилия будут сосредоточены на реализации и тонкой настройке архитектуры GAT. Модель будет обучаться решать задачу бинарной классификации ребер. Для объективной оценки качества работы модели будут использоваться стандартные для задач классификации метрики машинного обучения: accuracy (доля верно классифицированных ребер), precision (точность среди предсказанных положительных связей), recall (полнота обнаружения истинных связей) и F1-Score (гармоническое среднее precision и recall), а также физические метрики качества реконструкции треков (на уровне целых траекторий), полученные после сборки треков из предсказанных связей:

эффективность (доля успешно восстановленных истинных треков), чистота (purity, доля хитов от первичной частицы в восстановленном треке), доля ложных треков (ghost rate, доля восстановленных треков, не соответствующих ни одной истинной частице), распределение отклонений предсказанных координат хитов от истинных, характеризующее точность трекинга. Такой двухуровневый подход к валидации позволяет напрямую оценить её полезность для решения конкретной физической задачи в условиях эксперимента BM@N.

Ключевым этапом станет интеграция обученной модели в реальную цепочку реконструкции BmnRoot. Поскольку модель разрабатывается на Python (PyTorch), а BmnRoot — это фреймворк на языке программирования C++, для совместимости планируется экспорт модели в открытый формат ONNX (Open Neural Network Exchange). Это позволит выполнять вывод модели в среде C++ с помощью ONNX Runtime и встроить этап нейросетевого трекинга непосредственно в цепочку обработки данных BmnRoot для тестирования и последующего использования.

Заключение

В данном отчёте обоснован и детально расписан подход к решению задачи быстрой реконструкции треков в эксперименте BM@N с использованием графовых нейронных сетей. В качестве основного инструмента выбрана архитектура Graph Attention Network (GAT), ключевым преимуществом которой является механизм внимания, позволяющий модели избирательно анализировать связи между измерениями. Эта способность критически важна для эффективной работы в условиях высокого фона детекторов BM@N.

Основная практическая цель будущей работы — создание современного, быстрого алгоритма, интегрируемого в существующую цепочку обработки данных событий эксперимента.

Главными ожидаемыми результатами внедрения данного подхода являются:

- Значительное ускорение реконструкции для потенциального использования в системах онлайн-обработки данных непосредственно во время экспериментального сеанса.
- Создание независимого инструмента для кросс-проверки результатов, получаемых классическими алгоритмами (метод Хафа, клеточные автоматы), что повысит надёжность цикла реконструкции.

Таким образом, проделанная работа закладывает основу для создания эффективного программного модуля, который дополняет и усиливает существующие методы, решая конкретные инженерные задачи эксперимента BM@N: увеличение скорости обработки и повышение достоверности данных.

Список литературы

- [1] BM@N publications and documentation. Publications section, BM@N experiment website, JINR. <https://bmnn.jinr.ru/publications>.
- [2] Hough P.V.C. Method and means for recognizing complex patterns. U.S. Patent 3,069,654. 1962.
- [3] Ballard D.H. Generalizing the Hough transform to detect arbitrary shapes. Pattern Recognition. 1981. Vol. 13, no. 2, pp. 111-122.
- [4] Quantum cellular automaton. Wikipedia. (Дата обращения: 25.12.2025).
- [5] Marrero J., Hortal M. Cellular Automata and Lattice Boltzmann Modeling: A New Approach to Computational Fluid Dynamics and Particle Transport
- [6] Графовые нейронные сети. Справочник по машинному обучению от Яндекс // <https://education.yandex.ru/handbook/ml>.