

# Aplicación y comparación de técnicas de aprendizaje automático clásico y cuántico en reconocimiento de partículas supersimétricas

## Trabajo Terminal No. 2021 – A043

Alumnos: \*Castro García José Luis, \*\*Espina del Ángel José Julián

Directores: Ojeda Guillén Didier, Guohua Sun

e-mail: \*[jcastrog1702@alumno.ipn.mx](mailto:jcastrog1702@alumno.ipn.mx), \*\*[jespinad1700@alumno.ipn.mx](mailto:jespinaad1700@alumno.ipn.mx)

**Resumen** – La física de partículas requiere clasificar una gran cantidad de datos experimentales para descubrir nuevas partículas exóticas. Para esta tarea de clasificación se utilizan diferentes técnicas, dentro de las cuales se encuentra el aprendizaje automático. Sin embargo, el rendimiento que tiene cada una de las técnicas de clasificación no se ha investigado a fondo. El presente trabajo terminal se propone aplicar algoritmos de clasificación clásicos y cuánticos al reconocimiento de partículas supersimétricas para analizar las ventajas y desventajas de cada uno de ellos.

**Palabras clave** – Aprendizaje automático, computación cuántica, física de partículas.

## 1. Introducción

La física de partículas es el campo de la física que estudia los componentes elementales de la materia y las interacciones entre ellos [1], utilizando aceleradores de partículas como herramientas para generar colisiones entre partículas y así obtener datos que después se analizan a detalle; estos datos pueden aportar conocimientos fundamentales sobre la naturaleza misma de la materia [2].

Uno de los principales objetivos de la física de partículas es el descubrimiento de nuevas partículas elementales, tarea que requiere la identificación de señales de partículas nuevas entre señales causadas por otros eventos de dispersión con el mismo grado de detección (mejor conocidos como eventos de fondo). Para descubrir una nueva partícula, los físicos deben aislar un subespacio de los datos recolectados en el que la hipótesis de una nueva partícula da una predicción significativamente diferente a la hipótesis nula [3], causada por los eventos de fondo. Probar un conjunto de señales para determinar si son parte de una nueva clase de partículas es un desafío: requiere una generación de eventos de dispersión, simulación de la respuesta del detector, reconstrucción de eventos y finalmente es necesario realizar cálculos de secciones transversales para experimentar con varias regiones de señales definidas por los experimentos, entre los que se encuentran el aparato toroidal del LHC (en inglés A Toroidal LHC Apparatus, ATLAS) y el solenoide compacto de muones (en inglés Compact Muon Solenoid, CMS) [4]. Además, la estimación del número de eventos esperados para un punto fijo en una región puede tomar varias horas en tiempo de CPU cuando se realizan simulaciones completas del detector. Por lo tanto, cualquier intento de utilizar datos en modelos simulados es un proceso poco tratable.

Debido a una mayor complejidad de los datos en los procesos investigados, las técnicas de aprendizaje automático comenzaron a utilizarse de manera más amplia, convirtiéndose en una herramienta poderosa en física de partículas. Un ejemplo es el uso de árboles de decisión en los análisis que llevaron al descubrimiento del bosón de Higgs en el LHC en 2012 [5, 6] y actualmente se propone que las redes neuronales podrían ayudar a descubrir patrones más complicados dentro de los datos generados por los experimentos del gran colisionador de hadrones (en inglés Large Hadron Collider, LHC).

A pesar de esto, debido a la alta dimensionalidad de los datos y la dificultad de entrenar redes neuronales profundas, se ha optado por probar nuevos métodos que aprovechen las tecnologías cuánticas. El punto de intersección entre el aprendizaje automático y la computación cuántica se ha denominado aprendizaje automático cuántico, y se ha predicho que los métodos cuánticos pueden superar a los algoritmos clásicos en tareas de aprendizaje automático [7], y por supuesto, se ha vaticinado que el aprendizaje automático cuántico podría ser una herramienta poderosa para el análisis de datos generados por los experimentos de física de partículas [8]. Además, se sabe que es posible implementar estos algoritmos cuánticos gracias a las recientes

implementaciones de métodos de clasificación usando circuitos variacionales cuánticos en computadoras cuánticas ruidosas de escala intermedia (NISQ) [9].

Sin embargo, aun cuando el hardware para computación cuántica ha tenido un progreso significativo, existen limitaciones en los problemas de clasificación cuando el espacio de características se vuelve grande y las funciones se vuelven computacionalmente costosas de estimar [9, 10]. Por lo tanto, es complicado implementar aprendizaje automático cuántico usando solo procesadores cuánticos. En consecuencia, se han propuesto algoritmos híbridos de aprendizaje automático cuántico-clásico que usan computadoras cuánticas como aceleradores de hardware, trabajando en conjunto con procesadores tradicionales [11], demostrando ser algoritmos útiles para realizar cálculos de estructuras electrónicas [12] y agrupamientos de datos [13], aunque tales algoritmos no han sido explorados aún en física de partículas.

En vista de lo anterior quedan diversas preguntas por responder, en particular podríamos preguntarnos: ¿Cuáles son las limitaciones de los algoritmos de aprendizaje automático clásico aplicados a física de partículas?, ¿cuáles son las ventajas y limitaciones de los algoritmos de aprendizaje automático cuántico?, ¿qué aporte podrían tener los algoritmos híbridos de aprendizaje automático cuántico-clásico en el estudio de física de partículas?

## 2. Objetivo

### *General:*

Comparar el desempeño de la clasificación de algunos algoritmos de aprendizaje automático clásico y cuántico aplicados al reconocimiento de partículas en datos generados por simulaciones de colisiones de protones en aceleradores de partículas.

### *Específicos:*

- Investigar los procesos físicos detrás de las simulaciones de colisiones de protones y el significado de los atributos presentes en el conjunto de datos de las simulaciones de partículas supersimétricas.
- Preparar el conjunto de datos para el entrenamiento de distintos modelos de aprendizaje automático.
- Investigar, implementar y documentar al menos 3 algoritmos de aprendizaje automático clásico de clasificación que se adecuen al reconocimiento de partículas supersimétricas (variantes de árboles con gradiente, aprendizaje profundo y aprendizaje bayesiano).
- Investigar, implementar y documentar al menos 3 algoritmos de aprendizaje automático cuántico propuestos para otros problemas y adaptables a nuestro problema de clasificación.
- Comparar el desempeño de la clasificación de todos los algoritmos de aprendizaje implementados mediante el uso de las métricas AUROC y AUPRC.

## 3. Justificación

Durante décadas, la búsqueda de nuevas partículas ha sido un tema de gran importancia en la física moderna. Los científicos buscan encontrar las partículas elementales de las cuales está compuesta la materia con ayuda de colisionadores de partículas. Sin embargo, el descubrimiento de partículas exóticas expone un problema de clasificación debido a la alta dimensionalidad de los datos y la composición no lineal de los mismos.

Los enfoques clásicos de aprendizaje automático tienen una capacidad limitada en aplicaciones en física de partículas, y las diversas técnicas han mostrado un rendimiento equivalente, lo que ha ralentizado el avance en este tema [3]. Por esta razón, vale la pena recurrir a las técnicas de aprendizaje profundo y aprendizaje automático cuántico, que han demostrado ser capaces de aprender funciones más complejas y discriminar mejor entre señales de partículas exóticas y señales de fondo.

Sin embargo, queda abierta la pregunta de si realmente se tendrá una mejora en el rendimiento que justifique la complejidad de entrenamiento y los costos del hardware necesario para llevar tal encomienda. El presente trabajo terminal se plantea contestar esta pregunta, comparando los algoritmos clásicos de aprendizaje

automático, como los árboles de decisión, contra las técnicas modernas de redes neuronales, aprendizaje profundo y clasificadores variacionales cuánticos. Además, se propone explorar los algoritmos híbridos de aprendizaje automático cuántico-clásico para determinar si existe una mejora respecto al enfoque tradicional del aprendizaje automático cuántico, en el cual se reduce la dimensión de los datos usando *autoencoders* o análisis de componentes principales (PCA) y después se usa clasificadores variacionales cuánticos [8].

Los clasificadores de partículas exóticas a partir de datos experimentales tienen aplicaciones directas en los proyectos de los centros de estudio de partículas como Fermilab, ubicado en Estados Unidos, y el CERN, ubicado en la frontera entre Suiza y Francia. Incluso se han lanzado retos a la comunidad de aprendizaje automático con el objetivo de explorar el potencial de los métodos avanzados de aprendizaje automático en la clasificación de eventos de desintegración de partículas contra partículas de fondo [14]. Sin embargo, los beneficios van más allá del descubrimiento de nuevas partículas, por ejemplo, el descubrimiento de partículas supersimétricas ayudaría a encontrar a las superpartículas compañeras de partículas existentes. Esto equivale a descubrir partículas como la materia oscura [15], lo que podría proporcionar pistas sobre si la teoría de cuerdas describe correctamente a la naturaleza.

Para realizar el presente trabajo terminal se requerirá una investigación y aplicación de los métodos modernos de aprendizaje automático y del reciente campo del aprendizaje automático cuántico aplicados a la caracterización de partículas elementales, tema con impacto directo en las investigaciones modernas de física.

#### **4. Productos o resultados esperados**

A lo largo del trabajo, usaremos una base de datos propuesta por Baldi [3] como punto de referencia (*benchmark*) dentro de la comunidad de aprendizaje automático en la tarea de búsqueda de partículas exóticas en física de partículas. La tarea que nos proponemos resolver es la de distinguir entre un proceso en el que se producen nuevas partículas supersimétricas (SUSY) y un proceso de fondo con el mismo nivel de detección.

Al finalizar el presente trabajo, se espera contar con los siguientes productos:

1. Repositorio de algoritmos de clasificación de partículas supersimétricas usando métodos clásicos.
2. Repositorio de algoritmos de clasificación de partículas supersimétricas usando métodos cuánticos.
3. Documento técnico de los modelos empleados durante el desarrollo del trabajo terminal y su desempeño en la clasificación.
4. Publicación escrita del proyecto para un congreso o evento de divulgación científica.

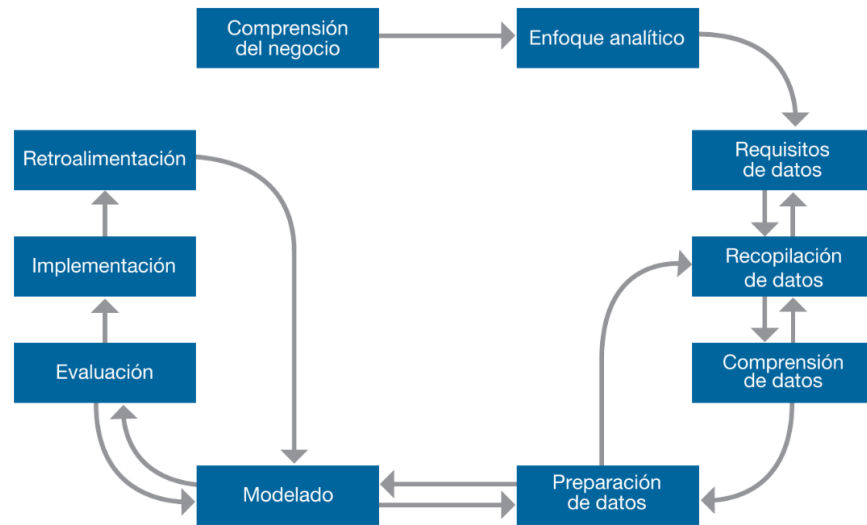
Los algoritmos de aprendizaje automático clásicos serán implementados en Python y se usarán servicios en la nube para realizar la optimización de hiperparámetros y el entrenamiento de los algoritmos. Mientras que los algoritmos cuánticos serán programados usando alguna de las librerías públicas disponibles (como Qiskit, PennyLane o Cirq) y su ejecución será simulada debido a las restricciones tecnológicas.

#### **5. Metodología**

Debido a la naturaleza del proyecto, usaremos una metodología para ciencia de datos sin perder de vista la rigurosidad del método científico. La metodología que mejor se adapta a nuestro proyecto es la propuesta por IBM [16], la cual nos ayuda a modelar los datos utilizando el enfoque analítico adecuado siguiendo etapas iterativas (ver Ilustración 1). Esta metodología nos brinda la libertad de seleccionar diversos enfoques, implementar varios modelos, evaluarlos, y utilizar la retroalimentación de los resultados de manera constructiva para mejorar el modelo.

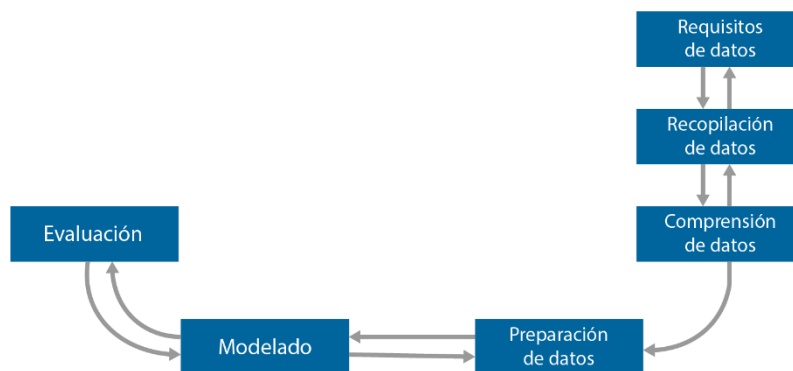
La metodología nos brinda la flexibilidad del modelo de desarrollo de prototipos, mitigando inseguridad respecto a la eficacia de un algoritmo y adaptándose a las tecnologías usadas; todo esto sin perder el rigor del método científico que implica la observación cuidadosa, formulación de hipótesis basada en tales

observaciones, el desarrollo de pruebas experimentales y refinamiento (o eliminación) de las hipótesis con base en los hallazgos experimentales.



*Ilustración 1. Metodología fundamental para la ciencia de datos de IBM.*

Sin embargo, para este trabajo terminal se prescindirá de las fases de implementación y retroalimentación debido a que no contamos con acceso a un acelerador de partículas. Además, debido a las restricciones del tiempo, el ciclo entre preparación y recopilación de datos será ignorado, y se iniciará desde la fase de requisitos de datos debido a que las fases de comprensión del negocio y enfoque analítico ya se han completado durante la investigación realizada al escribir la planeación del trabajo terminal. La metodología final se resume en la Ilustración 2.



*Ilustración 2. Metodología modificada para la ejecución del trabajo terminal.*

El flujo de la metodología nos ayudará a aprender más sobre los datos y el modelado, permitiendo regresar a una etapa anterior para realizar ajustes. Durante el desarrollo del proyecto, diversas clases de modelos se crearán y, a través de la evaluación, se mejorarán continuamente. Se espera al menos probar 3 clases de algoritmos clásicos y 3 clases de algoritmos cuánticos, pero, si el tiempo lo permite, se realizará la evaluación de otras alternativas.

## 6. Cronograma

[illegible]

ACTIVIDAD	2021					2022				
	AGO	SEPT	OCT	NOV	DEC	FEB	MAR	ABR	MAY	JUN
<b>JOSÉ JULIÁN ESPINA DEL ÁNGEL</b>										
Requisitos de datos										
Recopilación de datos										
Comprensión de datos										
Preparación de datos										
<b>CLASIFICADORES SUSY CLÁSICOS</b>										
Investigación de clasificadores clásicos										
Clase 1 - Modelado										
Clase 1 - Evaluación										
Clase 2 - Modelado										
Clase 2 - Evaluación										
Clase 3 - Modelado										
Clase 3 - Evaluación										
Evaluación TT 1										
<b>CLASIFICADORES SUSY CUÁNTICOS</b>										
Investigación de clasificadores cuánticos										
Clase 1 - Modelado										
Clase 1 - Evaluación										
Clase 2 - Modelado										
Clase 2 - Evaluación										
Clase 3 - Modelado										
Clase 3 - Evaluación										
Evaluación TT 2										
Investigación de procesos físicos en colisiones de protones										
Generación de Reporte Técnico										
Generación de Artículo de Investigación										

## 7. Referencias

- [1] “Campos y Partículas.” <https://web.archive.org/web/20080212064957/http://www.fis.utfsm.cl/partic.htm> (accessed Mar. 12, 2021).
- [2] S. Dawson *et al.*, “Higgs Working Group Report of the Snowmass 2013 Community Planning Study,” *arXiv Prepr. arXiv1310.8361*, Oct. 2013.
- [3] P. Baldi, P. Sadowski, y D. Whiteson, “Searching for exotic particles in high-energy physics with deep learning,” *Nat. Commun.*, vol. 5, no. 1, pp. 1–9, 2014, doi: 10.1038/ncomms5308.
- [4] S. Caron, J. S. Kim, K. Rolbiecki, R. R. de Austri, y B. Stienen, “The BSM-AI project: SUSY-AI—generalizing LHC limits on supersymmetry with machine learning,” *Eur. Phys. J. C*, vol. 77, no. 4, p. 1-25, Apr. 2017, doi: 10.1140/epjc/s10052-017-4814-9.
- [5] S. Chatrchyan *et al.*, “Observation of a new boson at a mass of 125 GeV with the CMS experiment at the LHC,” *Phys. Lett. Sect. B Nucl. Elem. Part. High-Energy Phys.*, vol. 716, no. 1, pp. 30–61, Sep. 2012, doi: 10.1016/j.physletb.2012.08.021.
- [6] G. Aad *et al.*, “Observation of a new particle in the search for the Standard Model Higgs boson with the ATLAS detector at the LHC,” *Phys. Lett. Sect. B Nucl. Elem. Part. High-Energy Phys.*, vol. 716, no. 1, pp. 1–29, Sep. 2012, doi: 10.1016/j.physletb.2012.08.020.
- [7] J. Biamonte, P. Wittek, N. Pancotti, P. Rebentrost, N. Wiebe, y S. Lloyd, “Quantum machine learning,” *Nature*, vol. 549, no. 7671. Nature Publishing Group, pp. 195–202, Sep. 13, 2017, doi: 10.1038/nature23474.
- [8] S. Lan Wu *et al.*, “Application of Quantum Machine Learning using the Quantum Variational Classifier Method to High Energy Physics Analysis at the LHC on IBM Quantum Computer Simulator and Hardware with 10 qubits,” *arXiv Prepr. arXiv2012.11560*, 2020.
- [9] V. Havlíček *et al.*, “Supervised learning with quantum-enhanced feature spaces,” *Nature*, vol. 567, no. 7747, pp. 209–212, Mar. 2019, doi: 10.1038/s41586-019-0980-2.
- [10] S. Y. C. Chen, C. H. H. Yang, J. Qi, P. Y. Chen, X. Ma, y H. S. Goan, “Variational Quantum Circuits for Deep Reinforcement Learning,” *IEEE Access*, vol. 8, pp. 141007–141024, 2020, doi: 10.1109/ACCESS.2020.3010470.
- [11] M. Broughton *et al.*, “Tensorflow quantum: A software framework for quantum machine learning,” *arXiv Prepr. arXiv2003.02989*, Mar. 2020.
- [12] R. Xia and S. Kais, “Hybrid Quantum-Classical Neural Network for Calculating Ground State Energies of Molecules,” *Entropy*, vol. 22, no. 8, pp. 828–840, Jul. 2020, doi: 10.3390/e22080828.
- [13] I. D. Lazarev, M. Narozniak, T. Byrnes, y A. N. Pyrkov, “Hybrid quantum-classical unsupervised data clustering based on the Self-Organizing Feature Map,” *arXiv Prepr. arXiv2009.09246*, Sep. 2020.
- [14] “Higgs Boson Machine Learning Challenge | Kaggle.” <https://www.kaggle.com/c/higgs-boson> (accessed Mar. 16, 2021).
- [15] H. Murayama, “Supersymmetry Phenomenology,” *Part. physics. Proceedings, Summer Sch. Trieste, Italy*, pp. 125–132, Feb. 2000.
- [16] J. B. Rollins, “Foundational Methodology for Data Science,” IBM Analytics, 2015.

## 8. Alumnos y directores

Castro García José Luis. – Alumno de la carrera Ingeniería en Sistemas Computacionales en la Escuela Superior de Cómputo, Especialidad en Sistemas, Boleta 2018630841, Tel. 5549476841, email [jcastrog1702@alumno.ipn.mx](mailto:jcastrog1702@alumno.ipn.mx)

CARÁCTER: Confidencial  
FUNDAMENTO LEGAL: Artículo 11 Fracc. V y Artículos 108, 113 y 117 de la Ley Federal de Transparencia y Acceso a la Información Pública.  
PARTES CONFIDENCIALES: Número de boleta y teléfono

### ACUSE DE RECIBIDO

Espina Del Ángel José Julián. – Alumno de la carrera Ingeniería en Sistemas Computacionales en la Escuela Superior de Cómputo, Especialidad en Sistemas, Boleta 2018631251, Tel. 8333854724, email [jespinad1700@alumno.ipn.mx](mailto:jespinaad1700@alumno.ipn.mx)

### ACUSE DE RECIBIDO

Ojeda Guillen Didier. – Lic. En Física y Matemáticas egresado de la Escuela Superior de Física y Matemáticas del Instituto Politécnico Nacional (2010). Maestría y Doctorado en Ciencias Fisicomatemáticas de la Escuela Superior de Física y Matemáticas del IPN (2014). Actualmente es profesor de carrera en la Escuela Superior de Cómputo del IPN trabajando en el área de Métodos Matemáticos en la Mecánica Cuántica y Óptica Cuántica, Tel. 55 5729 6000, ext. 52027, email [dojedag@ipn.mx](mailto:dojedag@ipn.mx)

### ACUSE DE RECIBIDO

GuoHua Sun. – Lic. En Matemáticas egresada de la Universidad Dalian, China (1993); Maestría en Ciencia de la Computación en el Instituto de Investigación en Matemáticas Aplicadas y Sistemas (IIMAS), UNAM (2005); Doctorado en Ciencias Fisicomatemáticas de la ESFM del IPN (2012). Actualmente es catedrática Conacyt comisionada en el CIC-IPN, en el laboratorio de Cómputo Inteligente. Tel. 55 5729 6000, ext. 56627, email [gsun@cic.ipn.mx](mailto:gsun@cic.ipn.mx)

### ACUSE DE RECIBIDO

## Re: Protocolo de trabajop terminal



Didier Ojeda Guillen <dojedag@ipn.mx>

6/4/2021 1:13 PM



To: Jose Luis Castro Garcia; Jose Julian Espina Del Angel; gsun@cic.ipn.mx

Buena tarde

Acuso de recibido el protocolo de trabajo terminal.

Saludos cordiales

Didier Ojeda Guillén

---

**From:** Jose Luis Castro Garcia <jcastrog1702@alumno.ipn.mx>

**Sent:** Friday, June 4, 2021 12:52:27 PM

**To:** Jose Julian Espina Del Angel <jespinad1700@alumno.ipn.mx>; Didier Ojeda Guillen <dojedag@ipn.mx>; gsun@cic.ipn.mx <gsun@cic.ipn.mx>

**Subject:** Protocolo de trabajop terminal

Buenas tardes, les envío la versión final del protocolo para el trabajo terminal titulado "*Aplicación y comparación de técnicas de aprendizaje automático clásico y cuántico en reconocimiento de partículas supersimétricas*"

## Re: Protocolo de trabajop terminal



Guohua Sun <gsun@cic.ipn.mx>

6/4/2021 1:09 PM



To: Jose Luis Castro Garcia Cc: Jose Julian Espina Del Angel; Didier Ojeda Guillen

Acuse de recibido.

Dra. Sun

El vie, 4 de jun. de 2021 a la(s) 12:52, Jose Luis Castro Garcia ([jcastrog1702@alumno.ipn.mx](mailto:jcastrog1702@alumno.ipn.mx)) escribió:

Buenas tardes, les envío la versión final del protocolo para el trabajo terminal titulado "*Aplicación y comparación de técnicas de aprendizaje automático clásico y cuántico en reconocimiento de partículas supersimétricas*"