



НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ  
УНИВЕРСИТЕТ

Факультет Санкт-Петербургская школа физико-математических и  
компьютерных наук

Основная образовательная программа  
«Анализ больших данных в бизнесе, экономике и обществе»

# ПОСТРОЕНИЕ ГЕНЕРАТИВНОЙ НЕЙРОННОЙ СЕТИ ДЛЯ СИМУЛЯЦИИ ЭЛЕКТРОМАГНИТНЫХ ЛИВНЕЙ

Демидова Анастасия Анатольевна  
Научный руководитель: Устюжанин Андрей Евгеньевич

Санкт-Петербург, 2019



## Эксперимент OPERA

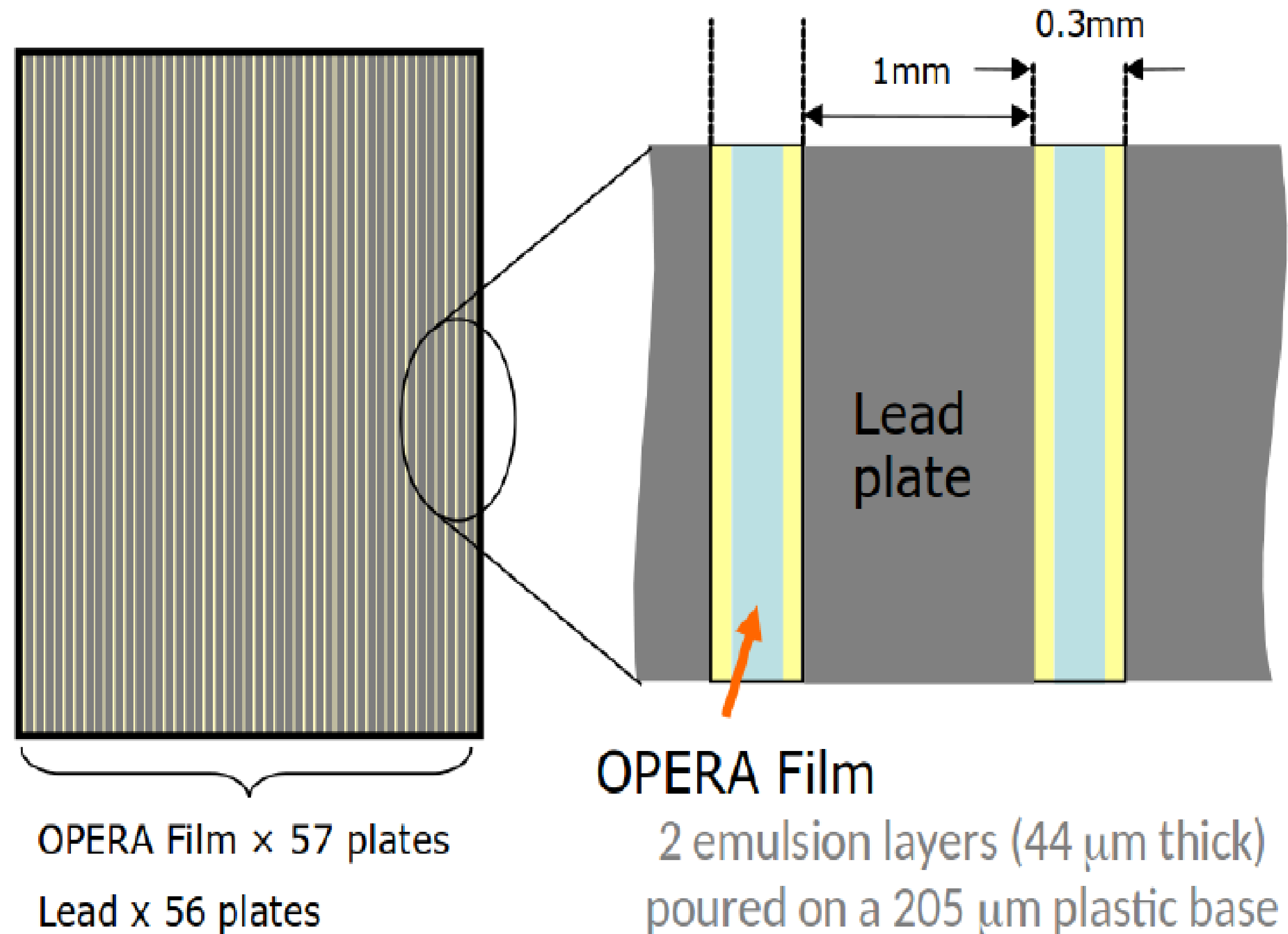
- OPERA (Oscillation Project with Emulsion-tRacking Apparatus) - международный эксперимент в области физики высоких частиц. Его основной целью было изучение нейтринных осцилляций в канале  $\nu_\mu \rightarrow \nu_\tau$
- OPERA имеет огромный детектор, в котором используется специальный вид электромагнитных сэмплирующих калориметров на основе ядерных фотоэмульсий, которые также имеют название «эмульсионные кирпичи» (ECC bricks)
- При прохождении частицы через эмульсионный кирпич формируется электромагнитный ливень. По электромагнитному ливню можно восстановить характеристики частицы: энергию частицы, точку распада и направление движения частицы



# ВВЕДЕНИЕ

## Детектор

Один кирпич состоит из 56 слоев свинца 57 пластиковых подложек с нанесенными с двух сторон ядерными фотографическими эмульсиями.





## Моделирование

- Эксперимент OPERA в значительной степени основан на детальном моделировании Monte Carlo.
- Моделирование электромагнитного ливня используются для интерпретации результатов текущих экспериментов и оценки эффективности новых. Полное моделирование ливней в детекторе является наиболее вычислительно затратной частью всего процесса моделирования, и одна итерация может занимать несколько минут.
- Поэтому разработка альтернативного более быстрого подхода для симуляции электромагнитных ливней позволит в значительной мере сократить затраты на моделирование.

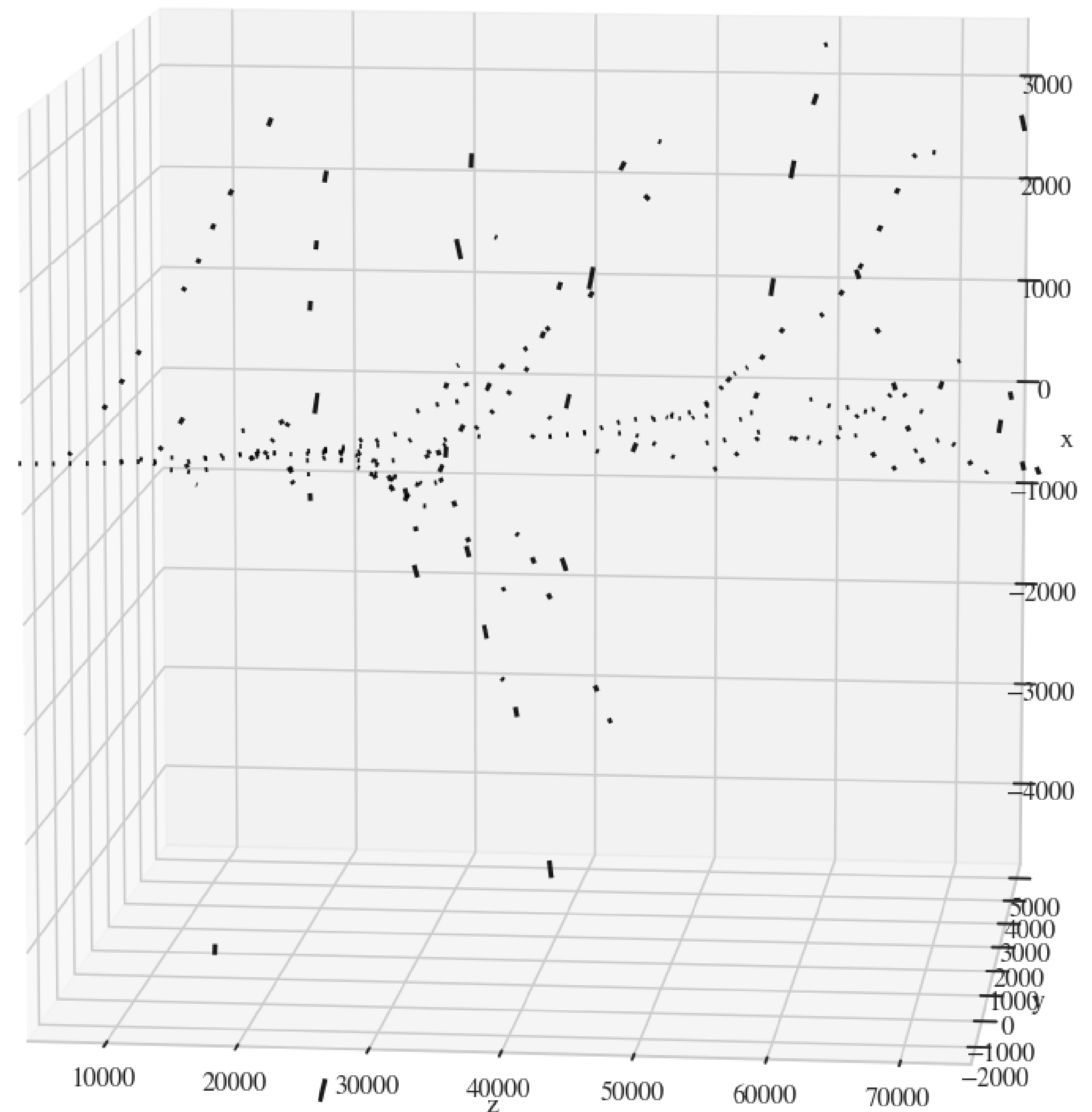


# ДАННЫЕ

Набор данных содержит 1000  
электромагнитных ливней.

Ливень представляют собой набор треков,  
который возникает при прохождении  
заряженной частицы через эмульсионный  
кирпич.

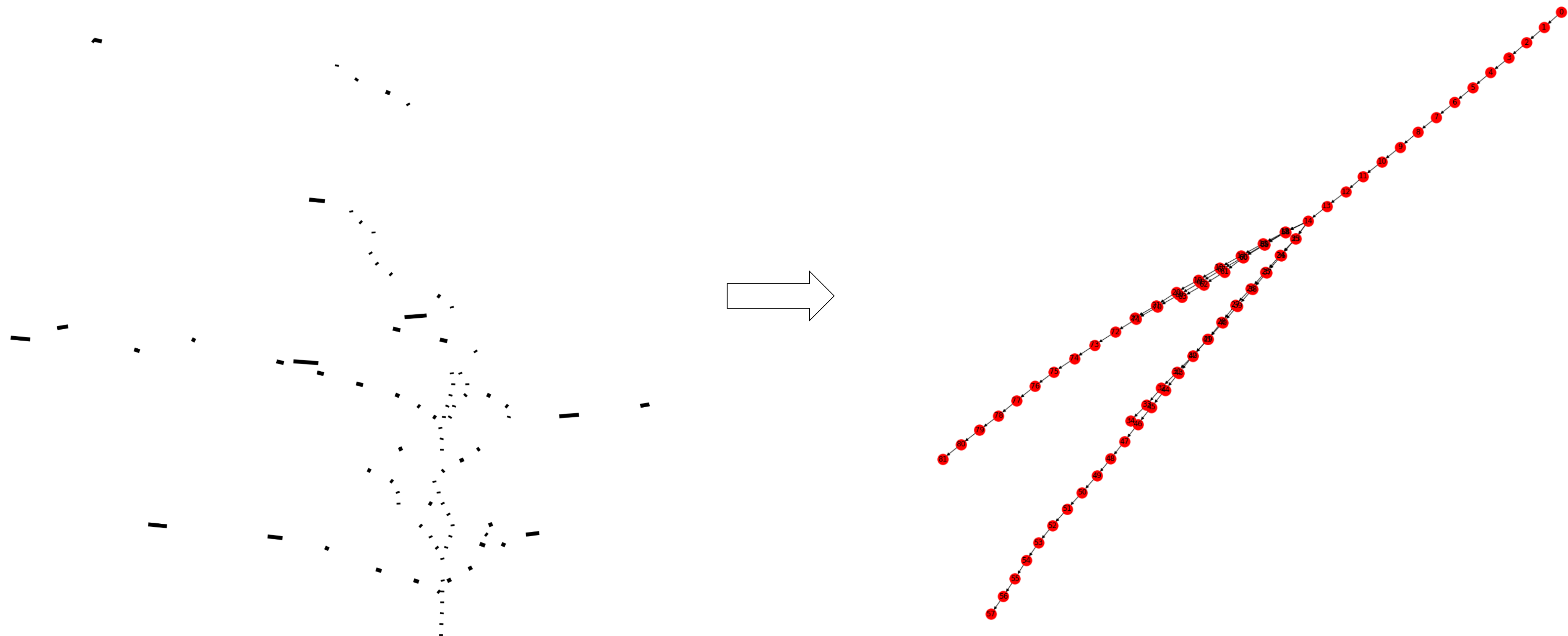
Каждый ливень характеризуется 5  
величинами:  $x$ ,  $y$ ,  $z$ ,  $\theta_x$ ,  $\theta_y$  - позиция и  
направление





# ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Электромагнитный ливень можно представить в виде графа, вершины, которого соответствуют трекам. Поэтому задача генерации ливней сводится к двум основным задачам: генерации графа и генерации характеристик вершин.







# СЛОЖНОСТИ ДЛЯ ГЕНЕРАЦИИ ГРАФА

---

- **Большая и переменная размерность графа**

для генерации графа с  $n$  вершинами требуется сгенерировать  $n^2$  значений матрицы смежности  
число вершин  $n$  и максимальное количество ребер  $m$  варьируется между различными графами

- **Неуникальное представление структуры графа**

граф с  $n$  вершинами может быть представлен  $n!$  эквивалентными матрицами смежности

- **Сложные зависимости в структуре графа**

ребра не могут быть смоделированы как последовательность независимых событий, а должны генерироваться совместно, где каждое следующее ребро зависит от предыдущих сгенерированных ребер



# ОБЗОР МЕТОДОВ

---

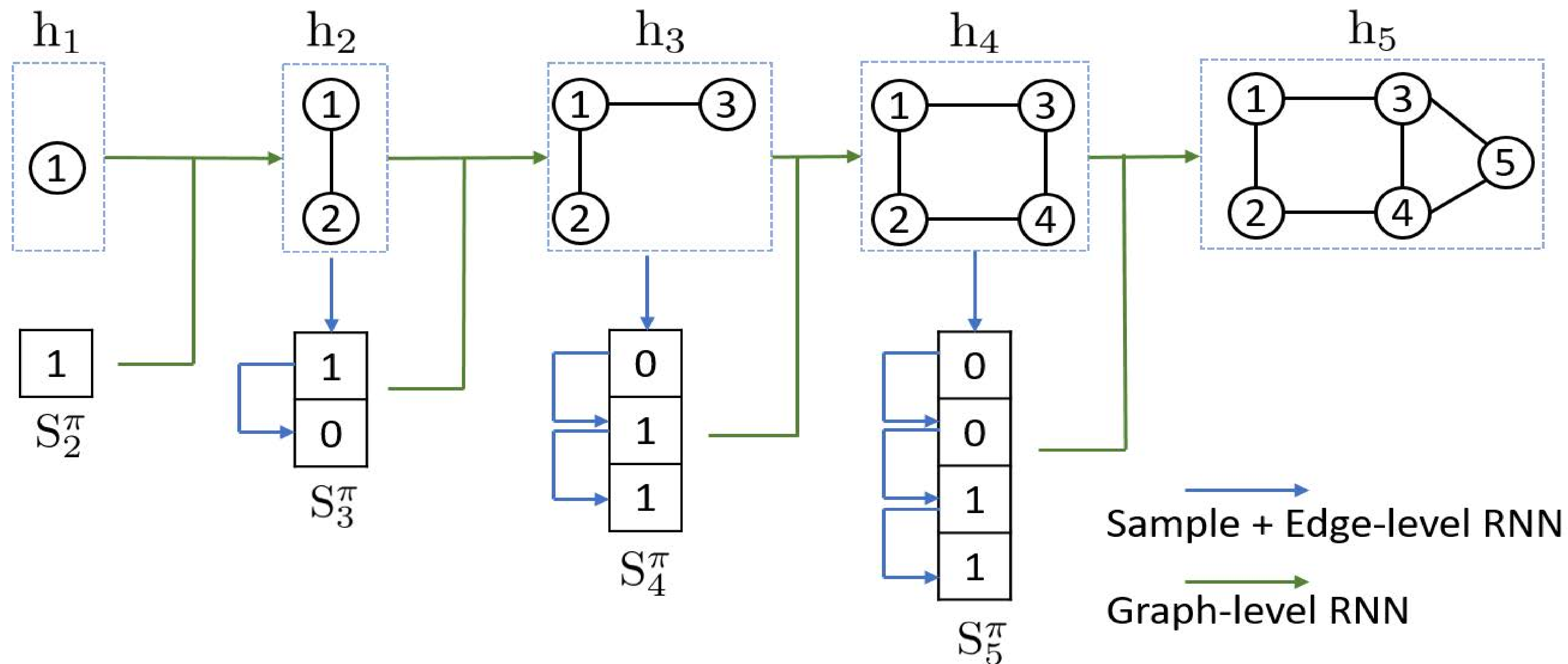
- Существует несколько работ по симуляции электромагнитных ливней методом Монте-Карло
- На данный момент не существует работ по генерации электромагнитных ливней с помощью нейронных сетей
- Однако существует ряд работ, в которых решается задача генерации графа с помощью нейронных сетей





# ГЕНЕРАЦИЯ ГРАФА: GRAPHRNN

- **Graph-level RNN:** генерирует последовательность вершин
- **Edge-level RNN:** генерирует список смежности для новой вершины





# ГЕНЕРАЦИЯ ГРАФА: GRAPHRNN

---

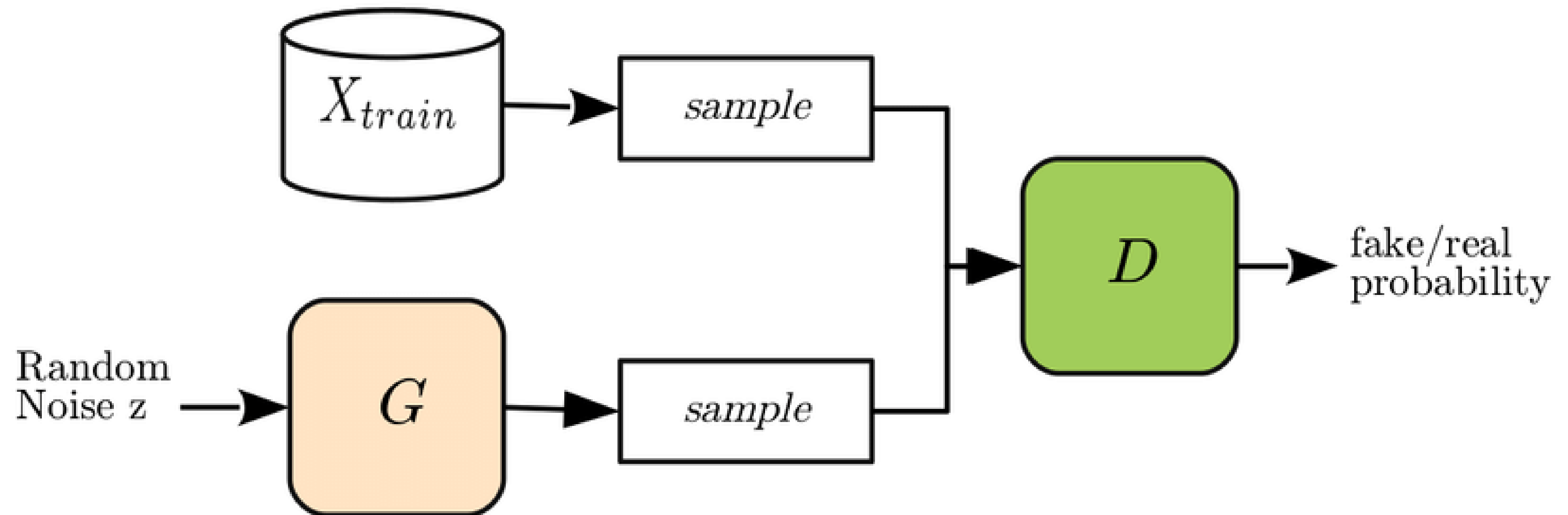
## Как задавать последовательность вершин графа?

- В худшем случае нам придется обучаться на всех возможных  $n!$  перестановках вершин графа
- Для упорядочения вершин вводится обход графа в ширину (BFS), который позволяет
  - уменьшить сложность обучения по всем возможным последовательностям вершин
  - ограничить количество ребер, предсказанных для каждой вершины



# ГЕНЕРАЦИЯ ПРИЗНАКОВ ВЕРШИН ГРАФА

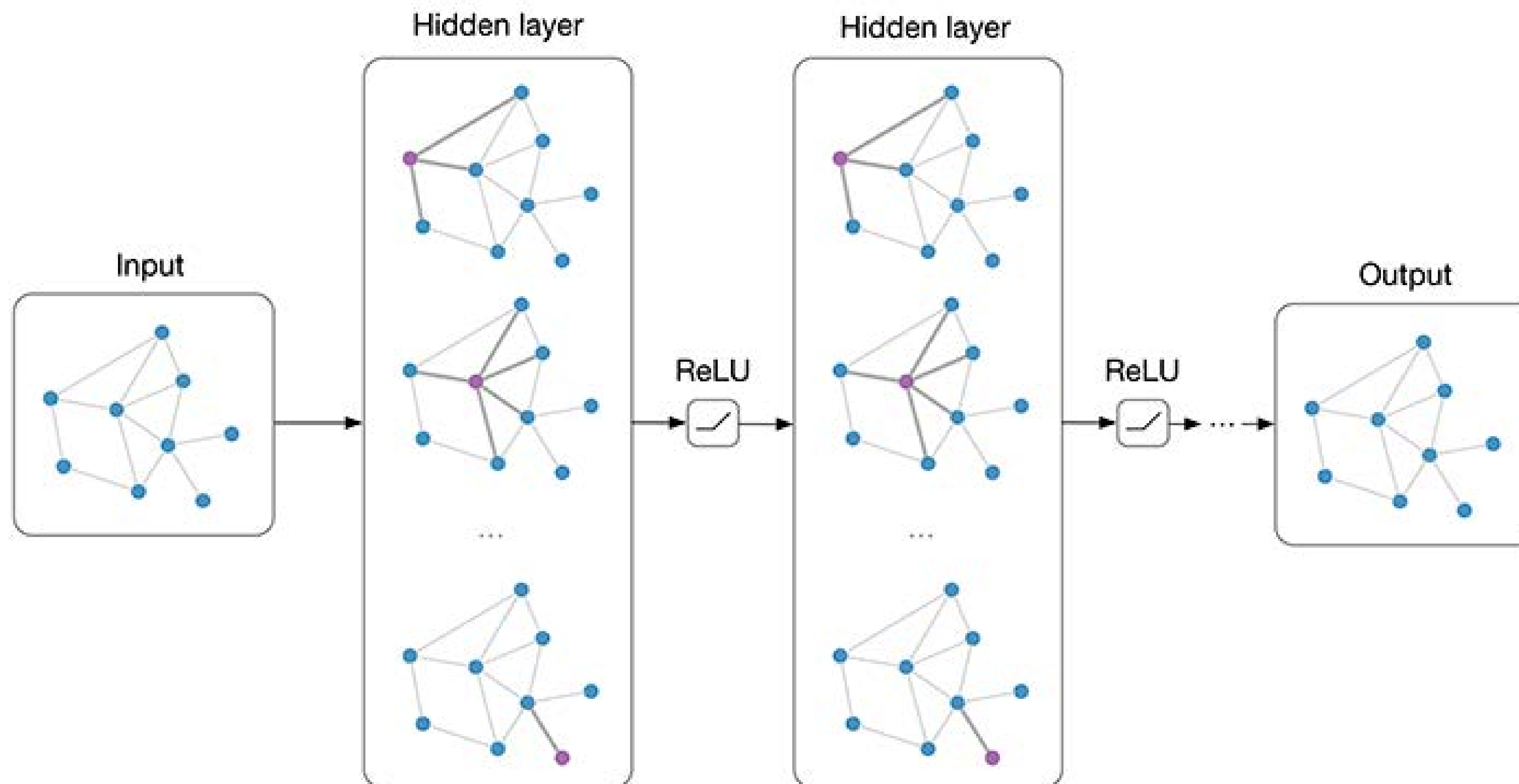
Для генерации сигналов на графе используется Generative Adversarial Network (GAN)





# ГЕНЕРАЦИЯ ПРИЗНАКОВ ВЕРШИН ГРАФА

## Графовые сверточные нейронные сети





# ГЕНЕРАЦИЯ ПРИЗНАКОВ ВЕРШИН ГРАФА

---

## Архитектура генератора

- Чтобы генератор был инвариантен к сдвигам и поворотам ливня, генерируются не сами значения, а разница  $\Delta x, \Delta y, \Delta z, \Delta \theta_x, \Delta \theta_y$
- Используются свертки для ребер графа - EdgeConv

$$x'_i = \sum_{j \in N(i)} h_{\theta}(x_i || x_j - x_i)$$

$h_{\theta}$  - нейронная сеть типа MLP

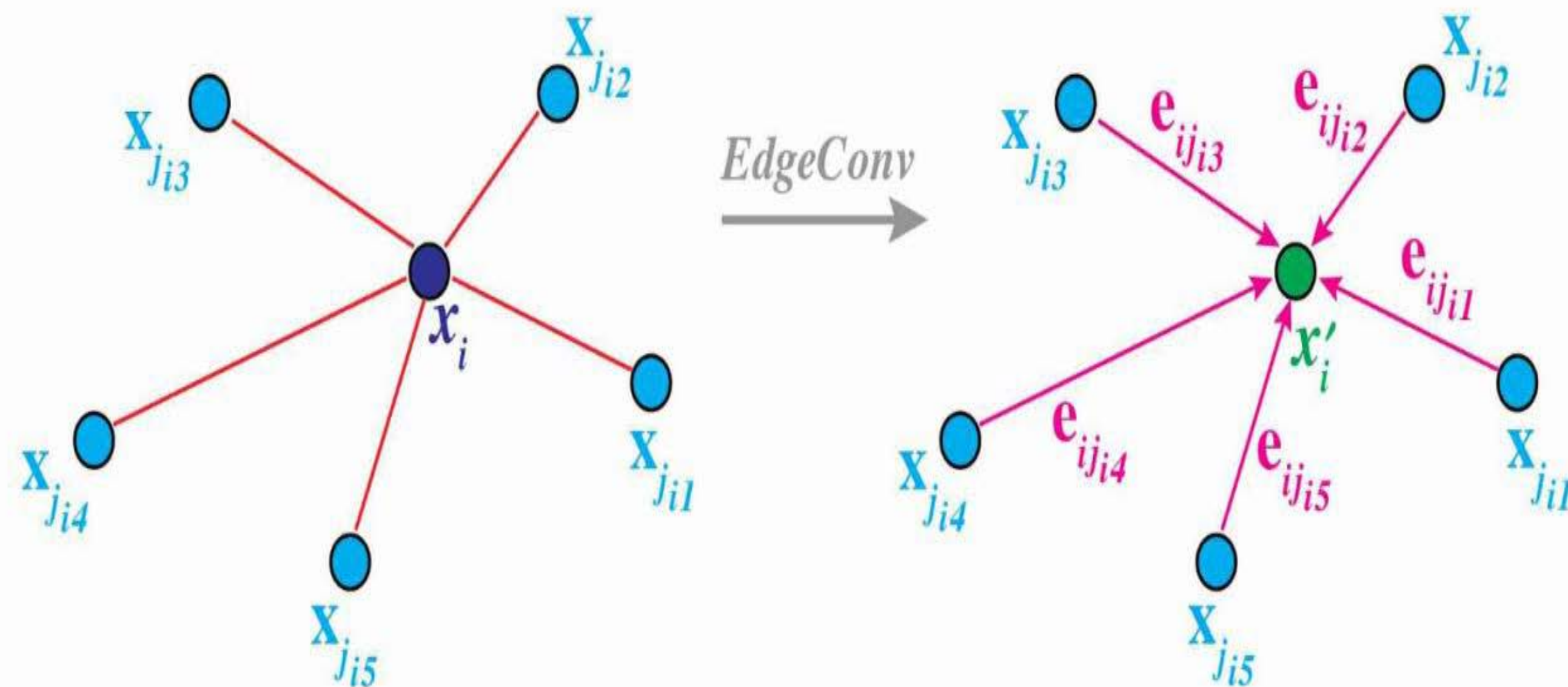
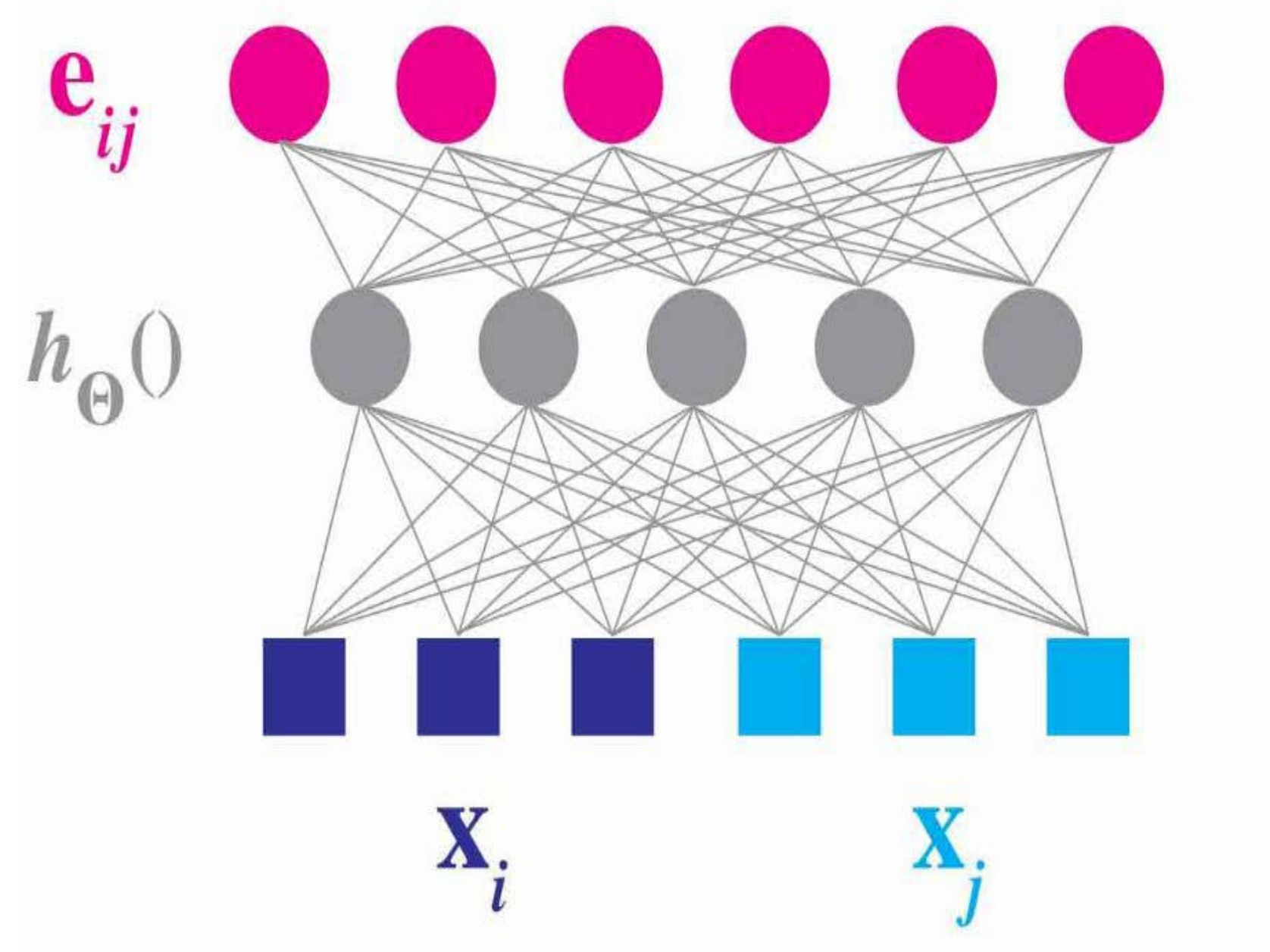
- Используются линейные слои для генерации признаков





# ГЕНЕРАЦИЯ ПРИЗНАКОВ ВЕРШИН ГРАФА

## Архитектура генератора







# ГЕНЕРАЦИЯ ПРИЗНАКОВ ВЕРШИН ГРАФА

---

## Архитектура генератора

- В качестве результата генератора получаются признаки ребер графа.
- Сгенерированный граф восстанавливался итеративно:

$$track_0 = (x_0, y_0, z_0, \theta_x^0, \theta_y^0) = (0, 0, 0, 0, 0)$$

$\forall edges (i, j) \in G:$

$$track_j = track_i + [\Delta x, \Delta y, \Delta z, \Delta \theta_x, \Delta \theta_y]$$

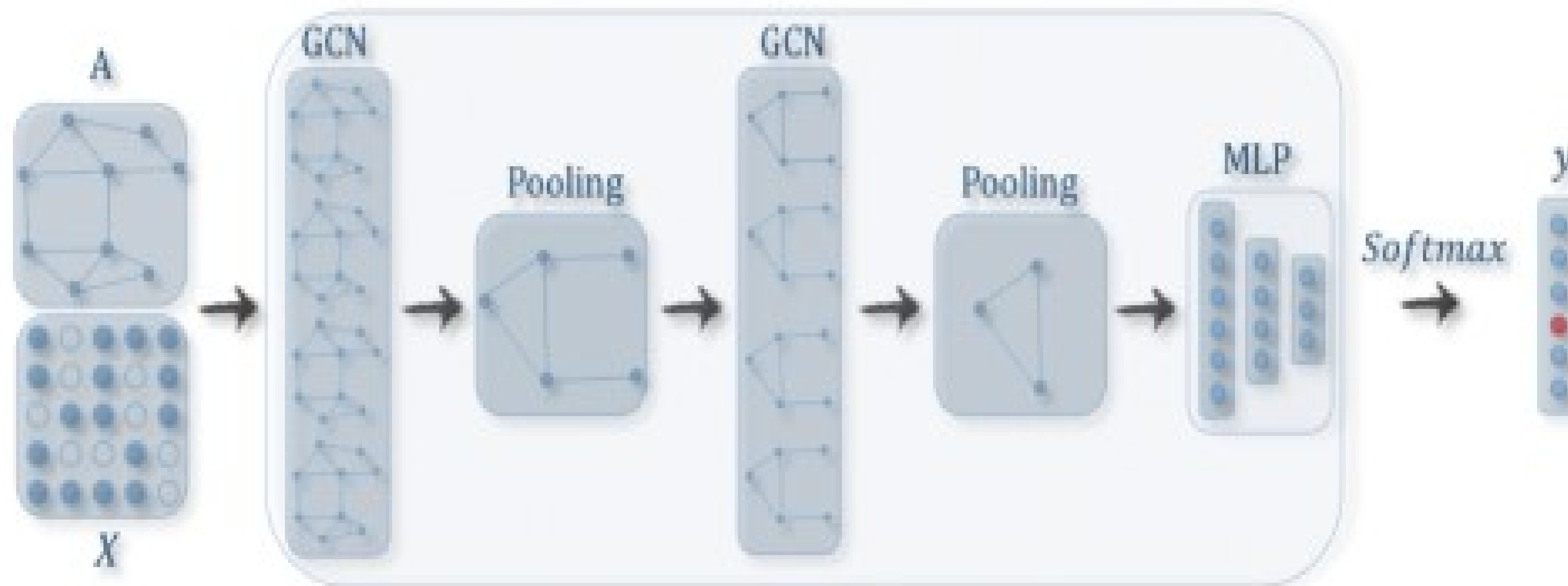


# ГЕНЕРАЦИЯ ПРИЗНАКОВ ВЕРШИН ГРАФА

## Архитектура дискриминатора

Дискриминатор решает задачу классификации на уровне графа.

По обучающему набору данных классификация на уровне графа направлена на прогнозирование метки класса для всего графа.





# ГЕНЕРАЦИЯ ПРИЗНАКОВ ВЕРШИН ГРАФА

---

## Архитектура дискриминатора

- Используется свертка для вершин графа – GraphConv

$$x'_i = \theta x_i + \sum_{j \in N(i)} \theta x_j$$

- Global mean pooling

$$r_i = \frac{1}{N_i} \sum_{n=1}^{N_i} x_n$$

- Линейные слои для вычисления скаляра



## Функции ошибки

- **GraphRNN** – binary cross entropy

$$\sum y \log(p) + (1 - y) \log(1 - p)$$

- **GAN** - adversarial loss

- Дискриминатор

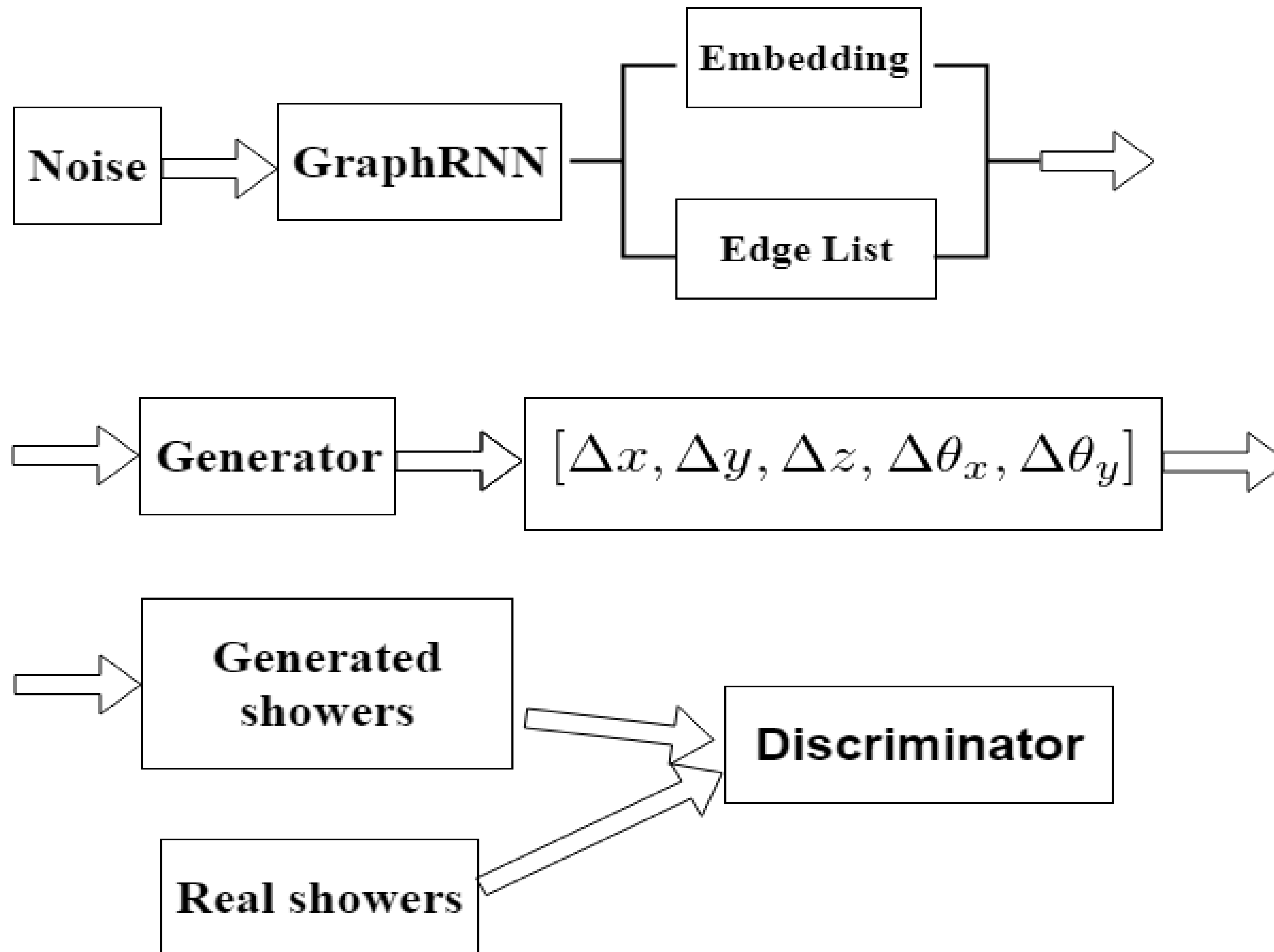
$$\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N [\log D(x_i) + \log(1 - D(G(z_i)))]$$

- Генератор

$$\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \log(1 - D(G(z_i)))$$



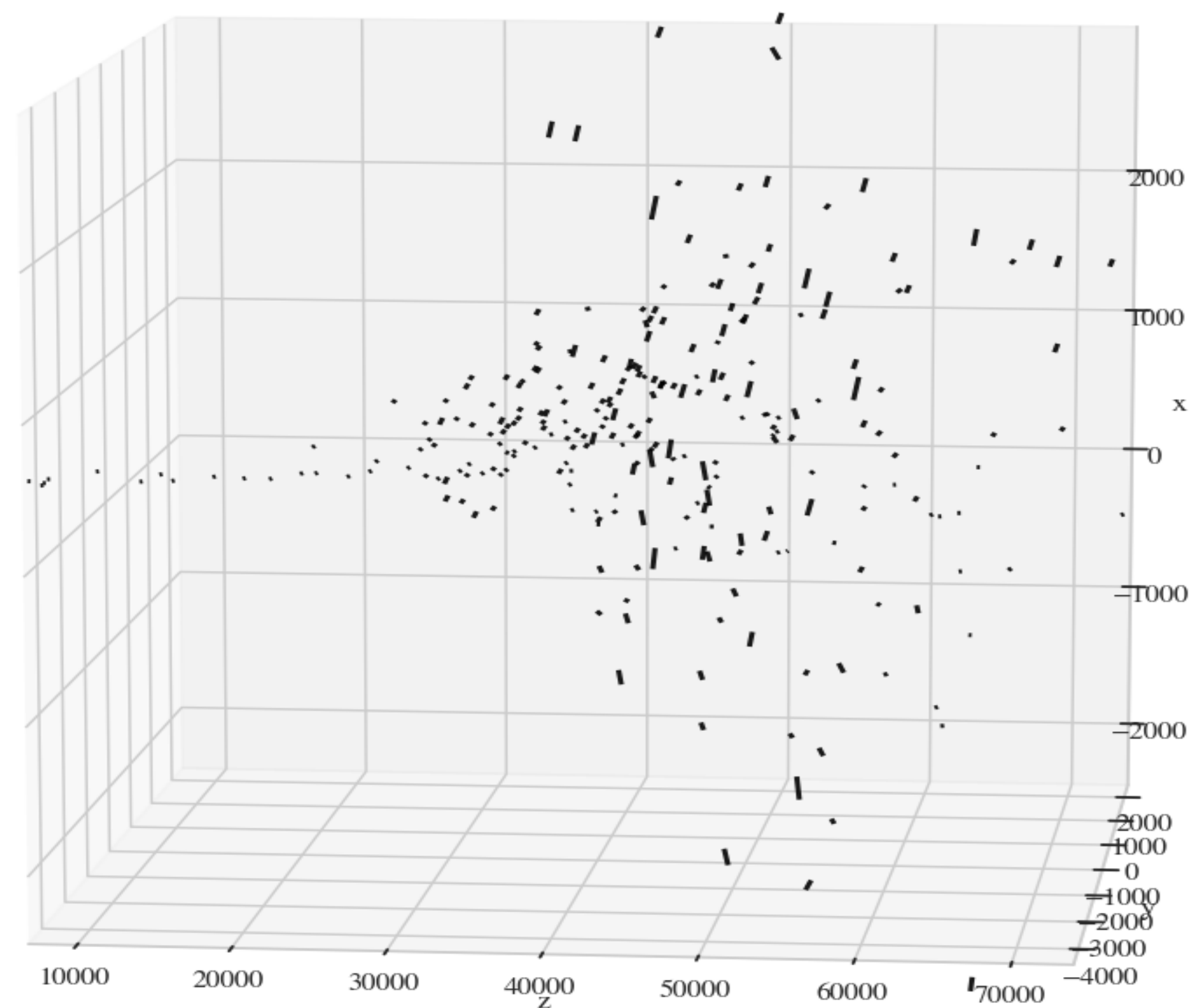
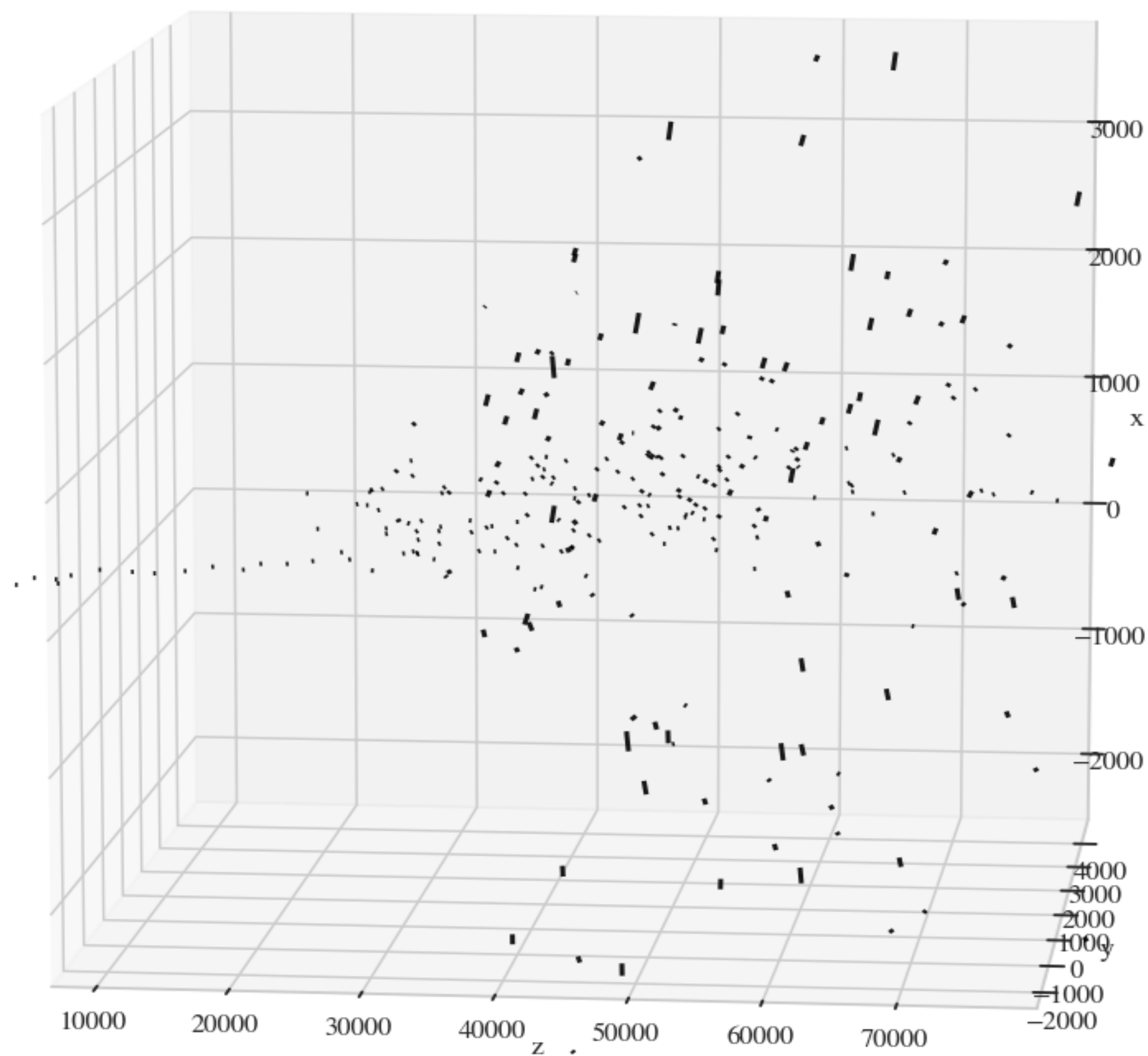
# АРХИТЕКТУРА ВСЕЙ МОДЕЛИ





# РЕЗУЛЬТАТЫ

## Примеры сгенерированных ливней

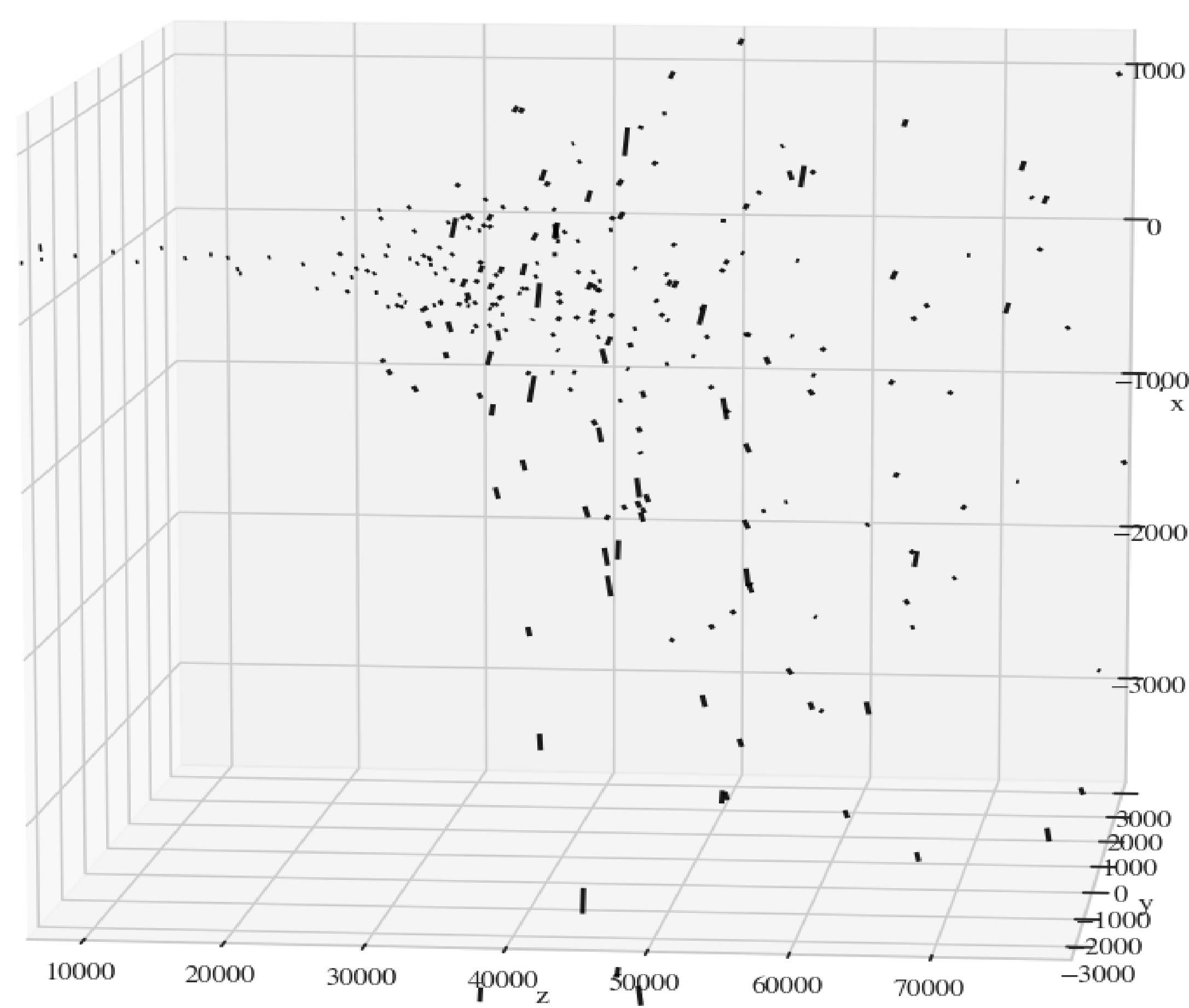
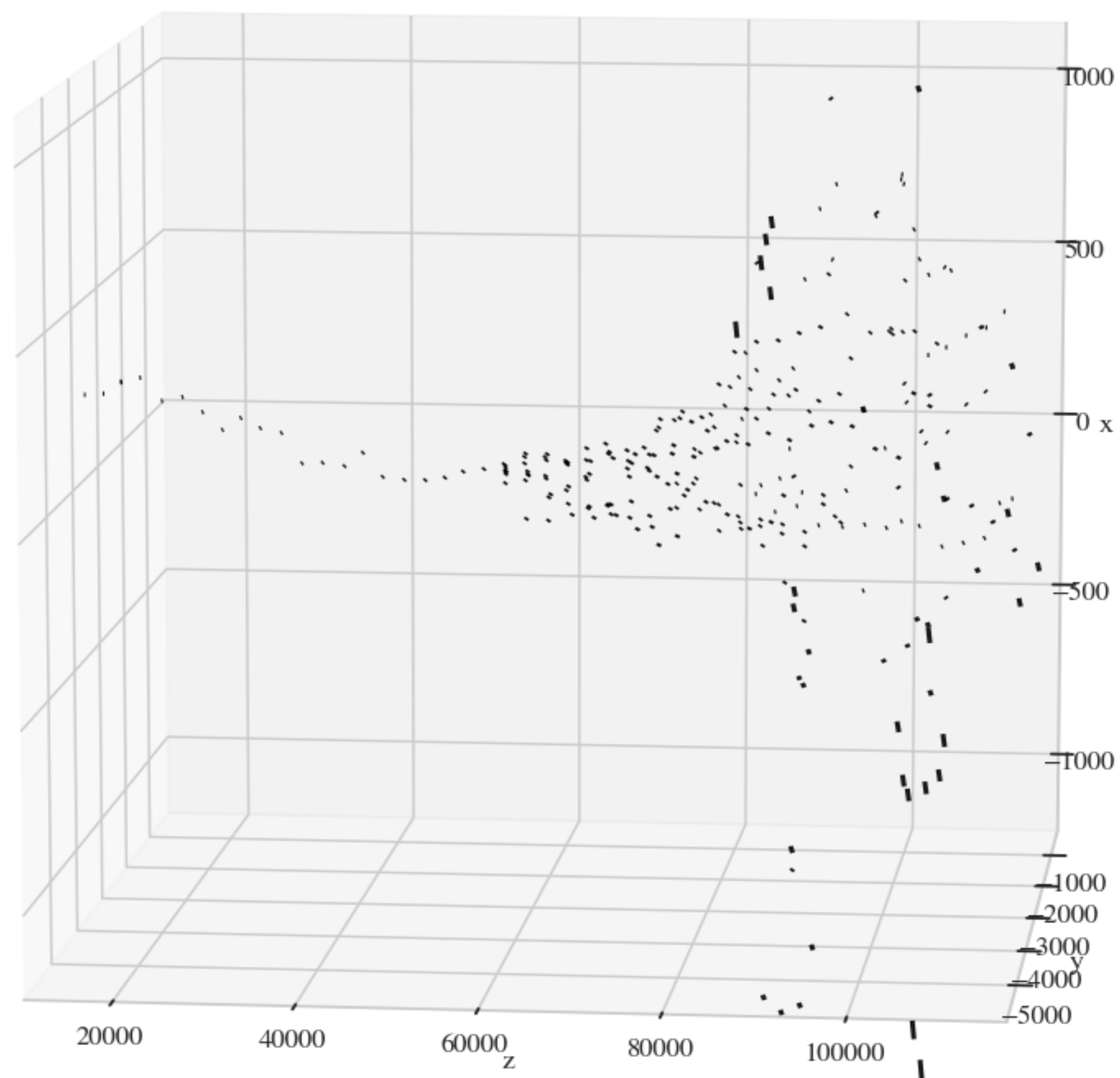






# РЕЗУЛЬТАТЫ

## Примеры сгенерированных ливней

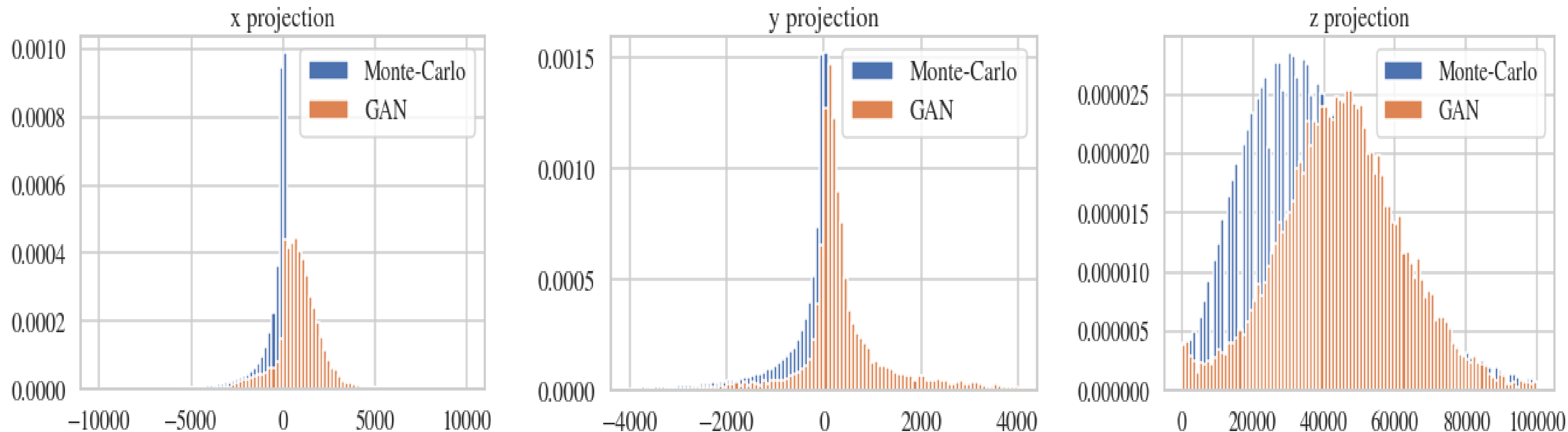




# РЕЗУЛЬТАТЫ

## Оценка качества сгенерированных ливней

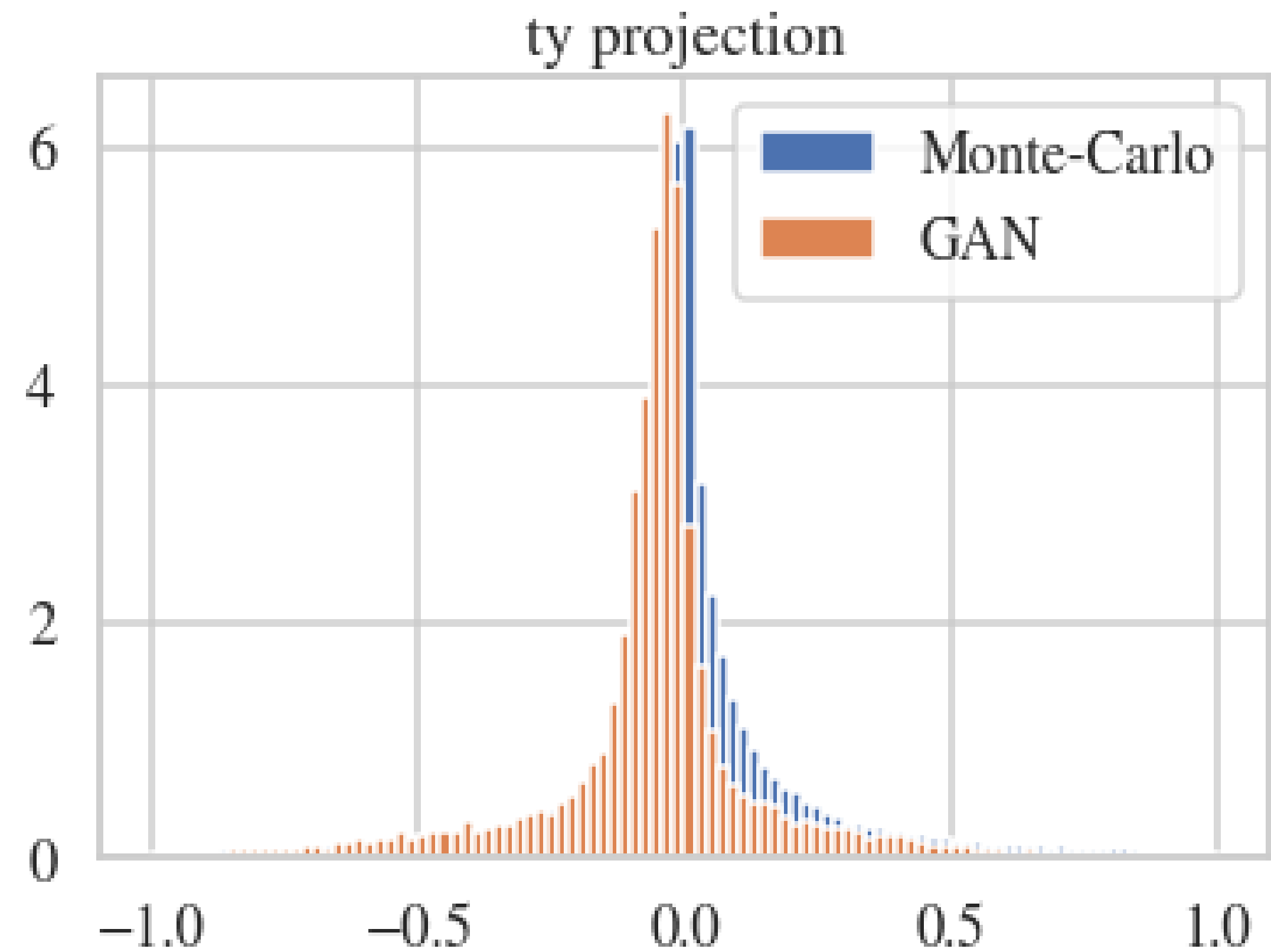
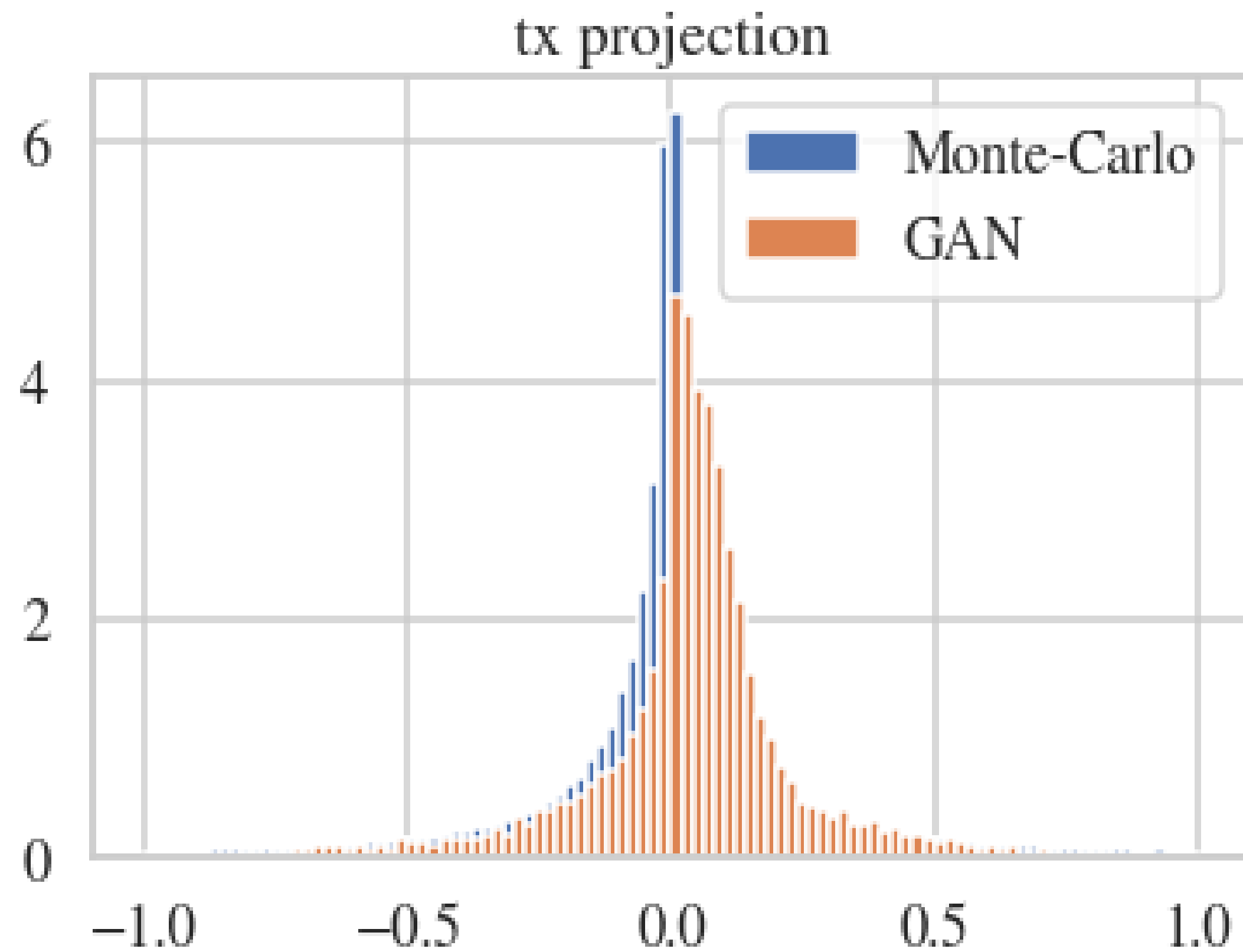
Как видно из примеров, модель фиксирует общую структуру графа, но ветвления ливня моделируются плохо. Для качественной оценки полученной модели предлагается сравнить распределения 5 характеристик электромагнитного ливня.





# РЕЗУЛЬТАТЫ

## Оценка качества сгенерированных ливней





# РЕЗУЛЬТАТЫ

## Оценка качества сгенерированных ливней

Также для оценки схожести распределений сгенерированных ливней и реальных используется статистика Колмогорова-Смирнова. Чем меньше статистика Колмогорова-Смирнова, тем более схожи распределения между собой.

	$x$	$y$	$z$	$\theta_x$	$\theta_y$
K-S	0.45	0.31	0.24	0.23	0.25



# ЗАКЛЮЧЕНИЕ

---

Предложен новый подход для генерации электромагнитных ливней на основе нейронных сетей

- Для генерации структуры графа используется авторегрессионная модель GraphRNN
- Для генерации сигналов на графе используется GAN с графовыми сверточными нейронным сетями

Данная модель генерирует ливни по структуре похожие на реальные, но плохо отображает ветвление ливня, что подтверждается анализом распределений признаков сгенерированных и реальных ливней

В качестве направления для дальнейшего исследования может быть предложена единая модель для генерации электромагнитных ливней, которая генерирует новую вершину и признаки для нее одновременно.



НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ  
УНИВЕРСИТЕТ