arXiv:2303.18150v1 [physics.ins-det] 31 Mar 2023

快速量热器簇射模拟的新视角

Sascha Diefenbacher[1], **Engin Eren**[2], **Frank Gaede**[2,3], **Gregor Kasieczka**[1,3], **Anatolii Korol**[2], **Katja Kr¨uger**[2], **Peter McKeown**[2*], **Lennart Rustige**[2,3]

[1] 汉堡大学实验物理研究所，Luruper Chaussee 149，22761 汉堡，德国¨德国电子同步加速器DESY，Notkestr. 85，22607 汉堡，德国¨自然科学数据与计算中心CDCS，德国电子同步加速器DESY，Notkestr. 85，22607 汉堡，德国

[*] 通讯作者。电子邮箱：peter.mckeown@desy.de

2023年3月

摘要。 高能物理实验的模拟需求对计算资源提出了巨大要求，推动了新型模拟工具的开发。基于机器学习的生成模型提供了一种兼具速度与准确性的解决方案。在本项工作中，我们从两个关键方向扩展了有界信息瓶颈自编码器（BIB-AE）架构。该架构旨在模拟高粒度量能器中的粒子簇射。首先，我们将模型推广到多参数条件化场景，同时保持较高的物理保真度。随后，我们详细研究了将最先进的基于粒子流的重建程序应用于生成的簇射所产生的影响。我们证明，模型在重建后仍保持较高性能。这些结果是构建更通用模拟工具的重要一步；在该工具中，重建后仍能保持物理性能是最终目标。

1 引言

使用复杂探测器系统对粒子相互作用进行详细模拟，是现代高能物理的核心工作，既为理论与实验之间搭建桥梁，也为未来实验中探测器的设计与优化提供手段。传统上，模拟工具基于蒙特卡罗方法，其中GEANT4 [1] 最为普遍。这种方法能够生成质量非常高的模拟结果，但代价是消耗大量计算资源 [2]。

一种有望加速模拟的替代方法，是使用基于生成模型的代理模拟器。为此，人们提出了大量不同的生成模型来完成这一任务，包括生成对抗网络（GAN）[3–10]，有界信息瓶颈自编码器（BIB-AE） [11] [12], Wasserstein生成对抗网络（WGAN） [13] [14], 归一化流 [15] [16] [17]以及基于分数的模型 [18]。

基于生成模型的快速模拟方法面临的一项重大挑战是，下一代将在对撞机上开展的粒子物理实验将配备粒度不断提高的探测器。例如，为即将到来的大型强子对撞机高亮度阶段筹备的CMS实验量能器端盖升级 [19]，，以及所谓希格斯工厂中的实验，都具有这一特点。这类设施将由一台 e^+e^- 对撞机构成，可以是环形或线形，为高精度研究希格斯玻色子、电弱和顶夸克扇区提供洁净环境 [20] [21]。这些探测器所具备的高粒度对基于生成模型的模拟器的物理性能提出了很高要求，同时也带来了高维数据。

在此前使用高性能 BIB-AE 模型模拟高粒度量能器中的电磁 [11] [22]和强子 [12] 簇射的研究基础上，本工作的贡献有两方面。首先，我们扩展了先前的研究，展示了如何基于多个参数对 BIB-AE 进行条件控制，同时保持相对于 GEANT4较高的物理保真度。这是将此类模拟器应用于现实环境的关键一步；在现实环境中，粒子可能以不同角度和能量入射探测器。其次，我们详细研究了应用先进的重建算法所产生的影响，并展示了基于 BIB-AE 的模拟器仍能保持出色性能。这项评估有力地表明了模型的质量，而最终评判模型的标准将是其重建后的物理性能。

本文结构如下。第 2 节介绍数据集的详细信息，并描述所使用的粒子流重建算法。生成模型[1] 将在第 3 节介绍；第 4 节将回顾其重建前后的性能，以及计算性能。

[1] 模型的实现以及用于训练的超参数可在 https://github.com/FLC-QU-hep/new_angles 获取

2 数据集与重建方案

本节将在第 2.1 节介绍本研究所使用的量能器系统和数据集的生成，并在第 2.2 节概述用于重建的粒子流算法。

2.1 数据集

在本研究中，我们聚焦于为国际直线对撞机（ILC）提出的国际大型探测器（ILD）[23]，a探测器概念。国际直线对撞机是希格斯工厂和高能轻子对撞机的一种方案。ILD探测器针对粒子流算法进行了优化，该算法旨在重建事例中的每一个独立粒子，以期获得尽可能最佳的整体探测器分辨率。

这对探测器提出了许多要求，其中与本研究最相关的是量能器所需的高粒度。本研究的主题是对ILD电磁量能器（ECAL）硅钨方案中的光子簇射进行模拟。该探测器是一种采样量能器，由30层夹在钨吸收层之间的活性硅传感器组成。它采用两种采样分数——前20层钨层的厚度为2.1毫米，而最后10层的厚度为4.2毫米。硅层中的单元尺寸为 5×5毫米[2]。

iLCSoft [24] 生态系统由 ILD 用于模拟和重建探测器响应，以及后续分析。本研究所使用的训练数据通过使用 GEANT4 版本 10。4 和 QGSP BERT物理列表进行完整模拟生成，所采用的是在 DD4HEP [25] 中实现的、具有逼真细节的探测器模型。训练数据集由 ILD ECAL 中的簇射组成，这些簇射由虚拟粒子枪发射的光子产生。该粒子枪 的位置固定为（x'，$y'z'$）=（0。0 mm，1810 mm -50 mm）[2]，位于ILD坐标系中。该坐标系的方向定义为： z' 沿束流轴， y' 沿竖直方向，即垂直于量能器表面。用于训练的簇射图像通过将电磁量能器击中投影到局部（x，y，z）坐标系中的规则 $30 \times 60 \times 30$ 体素网格上生成。在变换后的坐标中， z 轴与量能器表面正交，因此沿该维度的每个体素平面对应于物理电磁量能器中的30个层之一。在该投影空间中，光子以固定的单元格入射，其索引为（i_x，i_y，i_z）=（15，12，0）。由于电磁量能器的几何结构并非完全规则，图像沿 z方向通常会出现交错排列 [11]。从物理几何结构到规则网格的投影也往往会产生伪影；对此进行了校正，使规则网格中的每个体素恰好对应量能器中的一个传感器。训练数据集中共有50万簇射，由具有不同入射能量和

[2] 粒子枪位置的选择使粒子恰好在电磁量能器表面生成，并且不会撞到量能器中的缝隙

角度[3]的光子产生。入射角沿一个方向变化，使其对应于 ILD全局坐标系中的极角（即相对于z'轴的角度）。入射能量在10至100吉电子伏特范围内均匀变化，同时 $y-z$ 平面中的角度也从相对于量能器表面的90度变化至30度。局部 $x-z$ 平面中的角度（对应于 ILD全局坐标系中的方位角）固定为90度。最后，使用9个测试数据集检查模型在整个相空间中的性能，每个数据集包含1900个由光子产生的簇射，这些光子具有固定的能量（$\{20, 50, 90\}$ 吉电子伏特）和极角（$\{40, 60, 85\}$ 度）组合。这样可以评估模型的单粒子能量和角度响应，这是模拟器的最终目标。应用固定的校准因子对最后10层中的击中能量进行缩放，以修正由较厚吸收层导致的采样分数变化。

2.2 重建方案

未来的 e^+e^- 希格斯工厂要实现精确物理学目标，必须在这些设施中普遍采用粒子流重建。这种方法旨在针对每个事例，利用最适合相关任务的子探测器系统所提供的信息，重建其中的每个粒子，从而优化整体探测器分辨率。在本研究中，我们使用 PandoraPFA [26]，这是一种先进的模式识别算法，应用于 ILD 和其他直线对撞机探测器概念。

ILD 使用的完整重建链是一个多步骤过程。首先，对模拟产生的击中进行数字化处理，其中包括模拟传感器固有的效应或由读出电子学引起的效应。其次，对于量能器，要经过两步校准过程，将探测器中沉积的总可见能量转换回入射粒子的能量，单位为吉电子伏特。接着，运行若干模式识别算法，从带电粒子中重建径迹；随后，PandoraPFA 利用径迹信息（如适用），对所得的量能器击中迭代执行复杂的聚类过程。最终结果是一份重建粒子列表，即粒子流对象（PFO），其中包含与粒子相关的重要信息（能量、动量、粒子标识等）。这些信息随后用于高层重建和后续物理分析。

3 生成模型

3.1 有界信息瓶颈自编码器

有界信息瓶颈自编码器（BIB-AE）首次于 [27],提出，融合了常见生成对抗（GAN）和变分自编码器（VAE）架构中的许多特性。BIB-AE架构已成功应用于 [11], 中的量能器簇射模拟，并在此基础上进一步

[3] 训练数据集可在 https://doi.org/10.5281/zenodo.7786846 获取

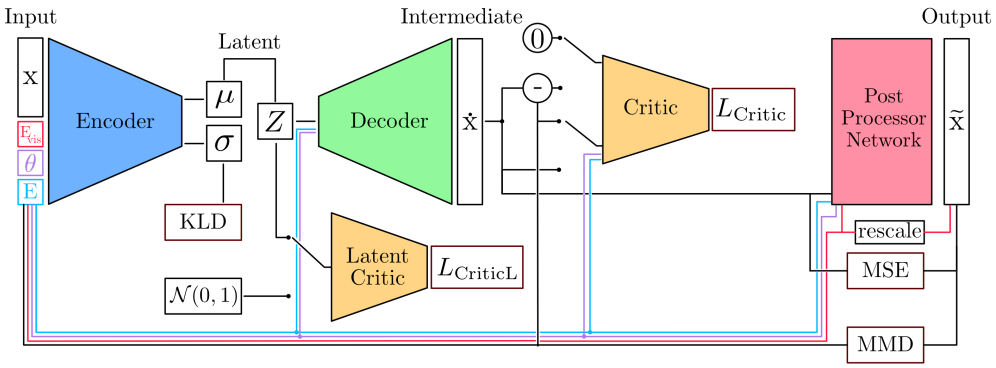


图 1. BIB-AE架构在训练过程中的示意图，展示了各个网络及其对应的损失项。编码器将输入的量能器簇射压缩到低维潜在空间中，并通过 Kullback–Leibler散度和最大均值差异损失项以及潜在空间判别器对其进行正则化。解码器从潜在空间重建簇射图像；双重用途的重建判别器则同时辅助重建并评估输出簇射的质量。后处理网络在第二步中进行训练，以逐个调整体素。蓝色和淡紫色线表示以入射粒子的能量和角度为条件的输入，红色线则表示以可见能量为条件的输入。

在 [22] 和 [12]中进行了改进。此处介绍的 PyTorch [28] 实现是在 [12], 中开发的实现基础上扩展而来，如图 1 所示。

BIB-AE的核心是一个自编码器，其中编码器网络 N_E 将量能器簇射映射到较低维度的潜在空间，解码器网络 N_D则根据潜在表示重建簇射。围绕这一核心，一些辅助组件用于支持训练或生成过程中的特定环节。

第一组附加组件聚焦于潜在空间。与标准的变分自编码器方法一样，自编码器的潜在空间必须向已知分布进行正则化；对此，我们采用标准正态分布 $\mathcal{N}(0,\ 1)$ 作为标准选择。损失函数中包含两项，用于强制施加这一潜在空间正则化约束。第一项是 Kullback–Leibler 散度（ KLD ）项，定义为

$$\mathcal{L}_{KLD} = D_{KL}(N_E(x)||\mathcal{N}(0,1)), \tag{1}$$

其中， D_{KL} 表示 Kullback–Leibler散度。它定义于两个概率分布 P 和 Q之间，这两个分布的概率密度分别为 p 和 q ，定义如下

$$D_{KL}(P||Q) = \int p(x) \log\left(\frac{p(x)}{q(x)}\right) dx. \tag{2}$$

第二个潜在空间正则化项是最大均值差异（MMD） [29] 项

$$\mathcal{L}_{MMD} = MMD(N_E(x), \mathcal{N}(0,1)), \tag{3}$$

用于衡量潜在空间与标准正态分布之间的差异，定义为 s

$$MMD^2(P,Q) = \mathbb{E}[k(x,x')] + \mathbb{E}[k(y,y')] - 2\mathbb{E}[k(x,y)]. \tag{4}$$

其中， x、 x' 和 y、 y' 分别是从分布 P 和Q 中抽取的独立样本， k 是正定函数， $\mathbb{E}$ 表示期望值。此外，还加入了来自类 Wasserstein-GAN 潜在空间判别器 C_L 的损失项，该判别器经过训练，可区分潜在空间与标准正态分布，其损失定义为

$$\mathcal{L}_{Critic_L} = \mathbb{E}[C_L(N_E(x))]. \tag{5}$$

从该潜在空间进行采样的方法将在第 3.2 节中介绍。

第二个作用由第二个类 Wasserstein-GAN 重建判别器C承担，其损失项为

$$\mathcal{L}_{Critic} = \mathbb{E}[C(N_D(E(x)))]. \tag{6}$$

该判别器有双重作用——它不仅通过比较输入和输出的簇射图像，帮助从潜在空间重建图像，还会反馈簇射是否看起来真实。请注意，根据 [12], 中的进展，图 1 所示的潜在空间判别器和重建判别器实际上采用两个相同的网络架构，但权重彼此独立。一个网络持续训练，另一个网络则在每个训练轮次后重置其权重和优化器。这样既能防止持续训练的判别器因对特定数据特征变得不敏感而产生伪影，又能保留重置判别器时会丢失的已学习行为。该方法最初在 [12] 中提出，用于应对强子簇射中额外的稀疏性；不过，我们发现，在此处研究的较大网格尺寸下，它也有助于提升网络生成光子簇射的性能。

将这些元素结合起来，可得到总损失，其表达式为 b y

$$\begin{aligned}\mathcal{L}_{BIBA-AE} = \beta_{KLD} \cdot \mathcal{L}_{KLD} + \beta_{MMD} \cdot \mathcal{L}_{MMD} \\ + \beta_{Critic_L} \cdot \mathcal{L}_{Critic_L} + \beta_{Critic} \cdot \mathcal{L}_{Critic},\end{aligned} \tag{7}$$

其中每一项均由独立的超参数 β_i [12] 控制。

该架构的最后一个组件是一个独立的后处理网络。该网络由一系列卷积核尺寸为一的卷积组成，这使网络倾向于细化各个体素能量，而不是创建或移除体素。通过引入基于均方误差（MSE）和排序核最大均值差异（SK-MMD）的损失项，以及基于对一批簇射进行平均比较的损失项，可以显著改善对击中能量谱的描述 [11]。主预训练 BIB-AE 设置中的网络完成训练并被冻结后，再进行第二步训练该网络，以增强后处理网络训练的稳定性 [12]。

重要的是，要使该模型能够用作物理学模拟器，就必须能够给出依赖于入射粒子属性、且具有物理意义的探测器响应。因此，BIB-AE架构中的所有网络（潜在空间判别器除外）都以入射粒子的能量和极角为条件。后处理网络还以每个簇射在量能器中沉积的总可见能量为条件。这些网络由三维卷积与全连接层组合构成，使用 ADAM优化器 [30]，并采用指数学习率衰减。训练过程中始终采用小批量判别。在将训练数据输入网络之前，会应用一个阈值，将低于 1×10^{-4} 兆电子伏的击中映射为零。BIB-AE架构总共训练了 50 个训练轮次，随后冻结模型，并对后处理网络再训练 53 个训练轮次。为了选出表现最佳的训练轮次，采用了与 [22] 中所述方法类似的方案。因此，选择依据是 BIB-AE 与 GEANT4 生成的簇射在关键物理观测量（见第 4.1 节）分布上的逐箱面积差异。可见能量和角响应被赋予了较高权重，并据此选出表现最佳的基础 BIB-AE 训练轮次和后处理训练轮次。

3.2 采样策略

到目前为止，我们对 BIB-AE 实现的描述仅关注训练模型所需的步骤。然而，如果要将该模型用作模拟器，我们必须能够从学习到的潜在表示 z中抽取样本。正因如此，生成式自编码器方法通过正则化为潜在空间引入结构。不过，这种正则化也会带来代价——我们越是促使潜在空间具有已知结构，就越少能够编码信息。受缓冲区变分自编码器方法 [31], 的启发，先前的 BIB-AE 研究 [22] [12] 应用了密度估计，以实现改进的潜空间采样。这种方法的优势在于，它降低了正则化约束，并使模型能够更加注重信息保留。此前，核密度估计 [32] 已在 [22] [12], 中用于此目的，为潜在空间变量及其相关性提供了准确的模型，并最终得到性能良好的模拟器。然而，由于这两项研究都仅限于根据入射粒子的能量进行条件控制，因此它们采用了拒绝采样方法来生成特定能量的样本。对于单参数条件控制而言，这种采样方法足够快速；但对于多参数条件控制而言，它会成为主要的性能瓶颈。因此，需要一种新的条件密度估计策略。

一类非常适合此任务的模型称为归一化流 [33] [34]。这类模型旨在学习一个双射映射 $X = g(Z)$，其逆映射为$f := g^{-1}$ ，用于连接一个基随机变量 $z \in Z$ （其概率密度函数 $p_z(z)$已知且易于处理）与一个具有某种未知概率密度函数 $p_x(x)$的随机变量 $x \in X$ 。根据变量变换公式， $p_x(x)$ 可以

随后通过 $p_z(z)$ 计算得到：

$$p_x(x) = p_z(f(x))\left|det\frac{\partial f(x)}{\partial x}\right| = p_z(z)\left|det\frac{\partial g(z)}{\partial z}\right|^{-1}. \tag{8}$$

我们的归一化流模型使用 PYRO [35] 深度概率编程库实现。模型本身是一种混合模型，由 8 个模块组成，每个模块包含 7 个耦合层。在这些耦合层中，6 个基于仿射变换 [36]，另一个基于线性阶数为 [37] [38]的逐元素有理样条双射。每一层都以包含能量和角度标签的二维上下文作为条件，其中能量和角度标签分别通过除以 100 和 $\frac{\pi}{2}$ 进行预缩放。为训练模型，使用预训练的 BIB-AE 模型对 500k 个簇射样本进行编码，从而为每个簇射得到 24 个潜变量。此外，还附加了每个簇射对应的能量总和（单位为兆电子伏），并将其缩放 10^4 倍，最终得到 25 维训练分布。此处加入簇射的能量总和，不仅在采样过程中为后处理网络提供了额外的条件标签（见第 3.1 节），还允许以类似于 [15] 的方式对可见能量总和进行逐簇射重缩放（见图 1）。归一化流模型总共训练了 200 个训练轮次，并根据损失选出表现最佳的训练轮次。随后，在推理过程中使用该模型的参数配置进行潜空间采样，并将采样结果输入预训练的 BIB-AE 模型。

4 结果

为了评估 BIB-AE生成器的物理性能，我们将该模型生成的关键物理观测量的统计分布与第 4.1 节中GEANT4 的统计分布进行比较。这一比较分为两部分。

首先，我们考察<style id='1'>模拟层级。这里使用两个模拟器的直接输出，以此评估 BIB-AE模型从训练数据中学习的效果。这一直是绝大多数既有研究（例如 [11] [5]）中采用的典型比较方式；虽然它提供了有用且颇具意义的比较，但无法呈现完整图景。

因此，我们还会比较重建层级上的可观测量，因为这些最终将是物理学分析中使用的量。由于重建过程（见第 2.2 节）通常依赖于应用一系列复杂的拓扑聚类算法，因此，模型需要捕捉高维数据空间中的哪些属性，事先绝非显而易见。 [12]此前对此进行了展示。在此基础上，我们进一步开展了研究：此前的研究仅考察了重建对线性度和分辨率的影响，而我们则系统研究了重建对大量可观测量的影响。

我们在第 4.2 节通过报告 BIB-AE模型在推理过程中的计算性能，并将其与 GEANT4 进行比较，从而总结这些结果。

4.1 物理性能

对于每个可观测量，我们首先研究重建前 BIB-AE 与 GEANT 的性能对比，同时采用一个简单的校准因子来修正两种采样分数的影响（如第 2.1 节所述）。

对于能量沉积低于 0.07875 兆电子伏的单元施加截断值，这对应于单元能量低于一个最小电离粒子（MIP）最概然能量损失一半的情况。由于这一区域低于噪声底，这种处理模拟了真实量能器中的情况。

随后，我们研究重建（见第 2.2 节）对每个可观测量的影响。为此，我们对数据设置了选择标准，仅使用包含一个 PFO 的事件进行性能评估。

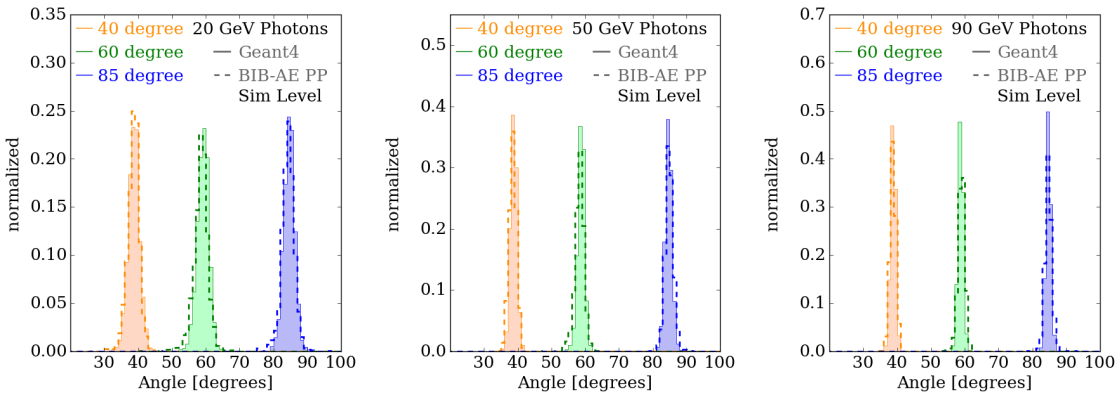


图 2。 模拟层级下 GEANT4 （填充直方图）和 BIB-AE 生成的光子簇射（虚线、未填充直方图）的角响应。分布分别展示了 20GeV（左）、50 GeV（中）和 90 GeV（右）三种入射能量，以及 40度（橙色）、60度（绿色）和 85度（蓝色）三种入射角的情况。

作为量化 BIB-AE 模拟器质量的第一步，我们通过考察与入射光子的角度和能量高度相关的可观测量，研究其条件性能。

4.1.1 角响应

通过对簇射进行主成分分析（PCA）并找出其主轴，来表征角响应。图 2 展示了 20 GeV（左）、50 GeV（中）和 90 GeV（右）簇射的重建角度（单位：度）分布，并将 GEANT4 测试数据与 BIB-AE 生成的数据进行比较。在本图及本文其余部分中，我们采用统一的配色方案来表示

对应于入射角分别固定为 40度（橙色）、60度（绿色）和 85度（蓝色）的簇射分布。在所考察的固定角度和能量范围内，BIB-AE 生成簇射的角分布与其 GEANT4 对应数据相符。最明显的差异是，BIB-AE 对 GEANT4 分布中出现的极尖锐峰值建模略有偏差，而且随着入射光子能量增加，这一偏差往往更加明显。

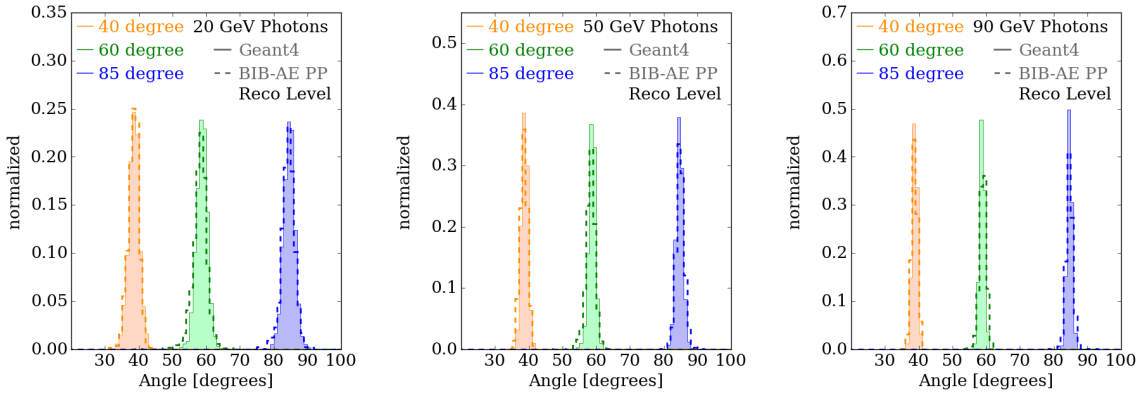


图3. GEANT4 （实心直方图）和 BIB-AE 生成的光子簇射（虚线、空心直方图）的重建角响应。图中展示了入射能量分别为 20 GeV（左）、50 GeV（中）和 90 GeV（右），以及入射角分别为 40度（橙色）、60度（绿色）和 85度（蓝色）时的分布。

图3展示了重建对模型角性能的影响。每个簇射的重建角是根据聚类击中的本征方向得到的。重建对角度几乎没有明显影响；与 GEANT4 整体吻合良好，以及高能量下尖锐峰值的轻微建模偏差，均得以保留。

图4通过对 GEANT4 和 BIB-AE 分布进行高斯拟合，更详细地刻画了角分布。随后提取拟合的均值 μ 和标准差 σ，并将均值（左）和标准差（右）绘制为入射粒子角度的函数，以获得入射能量分别固定为 20 GeV、50 GeV 和 90 GeV 时的有效角度线性度和宽度。BIB-AE 对角分布均值的再现效果非常好，与 GEANT4 值的最大偏差仅达到 1% 的水平。再看图右侧的分辨率图，BIB-AE 的性能似乎随能量增加而下降。入射角为 40度时，20 GeV 簇射的角响应吻合极佳；而入射角为 85度时，90 GeV 簇射的偏差接近 40%。

重建对角度线性度和宽度的影响如图5所示。这证实，重建对BIB-AE的角性能影响极小，聚类过程仅使分布的均值和宽度发生了轻微变化

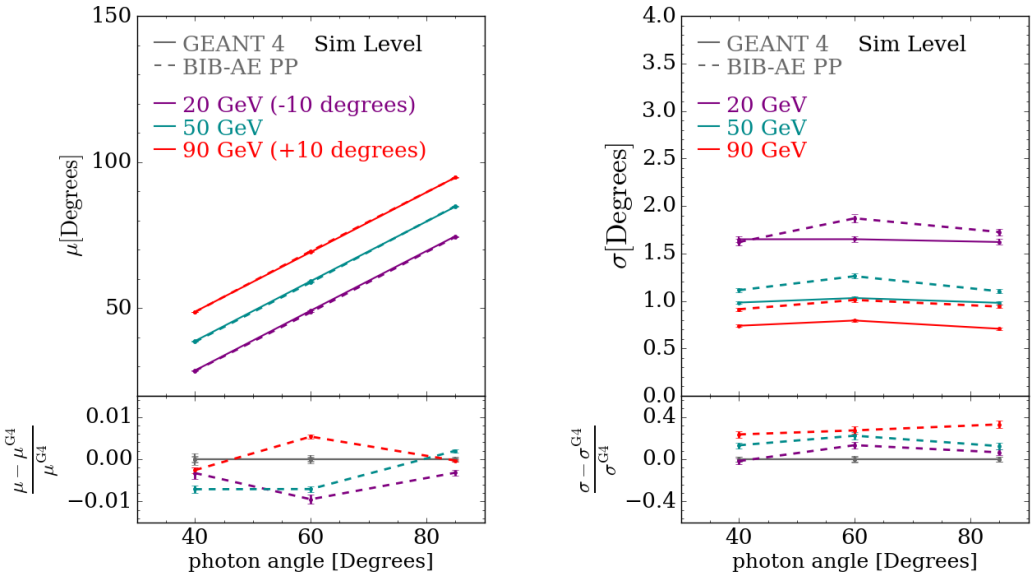


图4。 GEANT4 和 BIB-AE 生成簇射在模拟层级上的角度线性度（左）和宽度（右）。图中分别以紫色、深青色和红色表示固定入射能量为 20 GeV、50 GeV 和 90 GeV 时的曲线。在左侧的角度线性度图中，为便于观察，能量为 20 GeV 和 90 GeV 的簇射均值分别平移了−10度和 +10度。每幅图中的子面板显示了 BIB-AE 角响应与其 GEANT4 等效值之间的相对偏差。

角度二面体重建中的聚类过程所引入的分布 .

4.1.2 能量响应

为研究 BIB-AE 的能量条件化性能，确定量能器有源部分中的沉积总能量，并将其显示于图6中。BIB-AE 分布的能量和与其 GEANT4 等效值整体相符，仅存在细微偏差。这直接得益于使用归一化流生成的每簇射能量和进行的重新缩放过程（见第 3.2 节）。图7进一步详细展示了能量和分布，并计算了分布中心90%的均值（μ_{90}）和均方根（σ_{90}）。对于各种不同的入射角，这些结果在图中表示为入射粒子能量的函数，即线性度和分辨率。线性度（左）描述得尤为准确，尤其是对于低入射角的光子，其相对于 GEANT4 值的最大偏差被限制在远低于 1% 的水平。尽管分辨率（右）表现出较大的偏差，但其描述同样较为准确，偏差被限制在 10% 以下。

重建对模型能量条件化性能的影响如图8所示。在这种情况下，分布显示了粒子

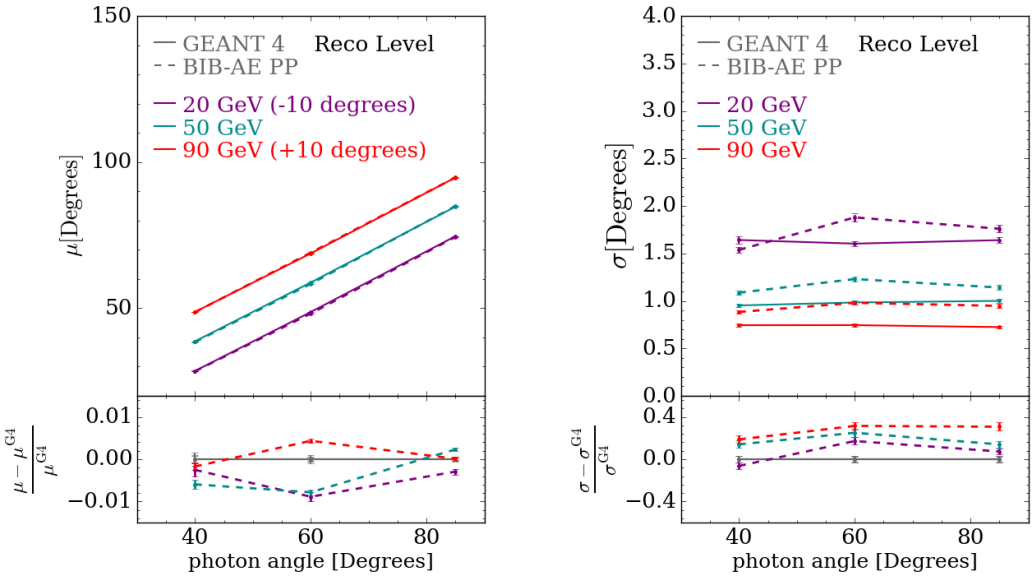


图5。 GEANT4 和 BIB-AE 生成簇射的重建角度线性度（左）和宽度（右）。分别针对 20 GeV、50 GeV 和 90 GeV 这三种固定入射能量展示曲线，其颜色依次为紫色、深青色和红色。在左侧的角度线性度图中，为便于观察，能量为 20 GeV 和 90 GeV 的簇射均值分别平移了−10 度和 +10 度。每幅图中的子面板展示了 BIB-AE 角响应相对于其 GEANT4 等效值的相对偏差。

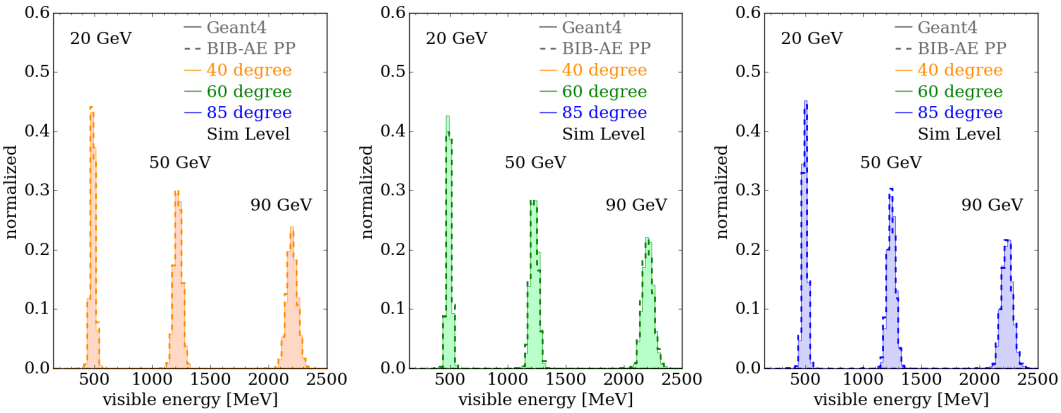


图6。 GEANT4 和 BIB-AE 生成簇射在模拟层级沉积于量能器中的可见能量。分布按照入射光子角度分组，分别为 40度（左，橙色）、60度（中，绿色）和 85度（右，蓝色）。

流对象（PFO）的能量，该流对象由PandoraPFA重建，对应于已重建的入射粒子能量。同样，可以观察到BIB-AE与 GEANT4 分布高度吻合。图9所示的PFO线性度和分辨率证实了这一点。重建对线性度的影响

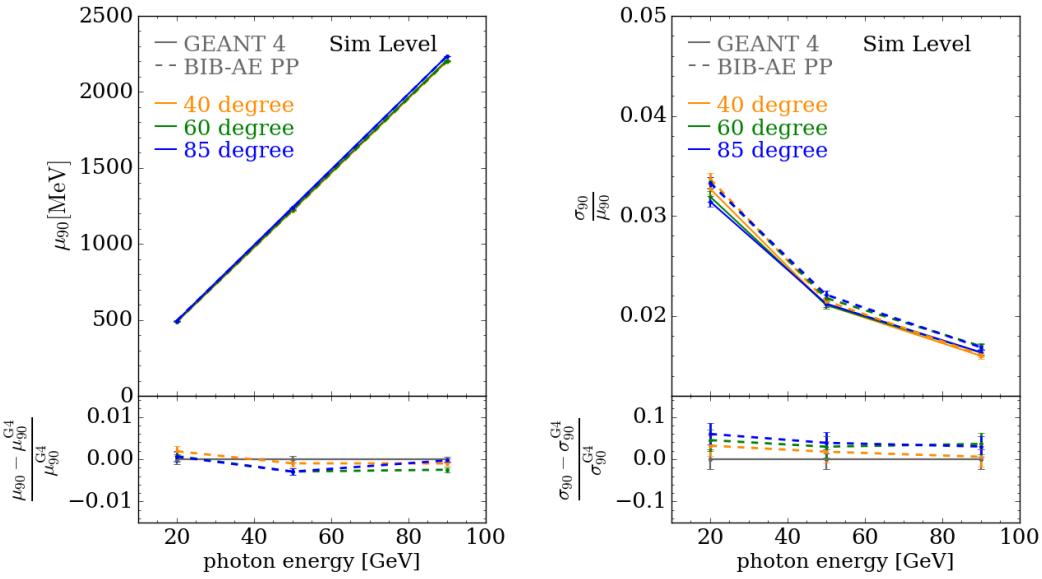


图 7. GEANT4 和 BIB-AE 生成簇射在模拟层级的能量线性度（左）和分辨率（右）。曲线按三个入射角分组：40度（橙色）、60度（绿色）和 85度（蓝色）。每幅图中的子图显示了 BIB-AE 可见能量响应相对于其 GEANT4 对应值的相对偏差。

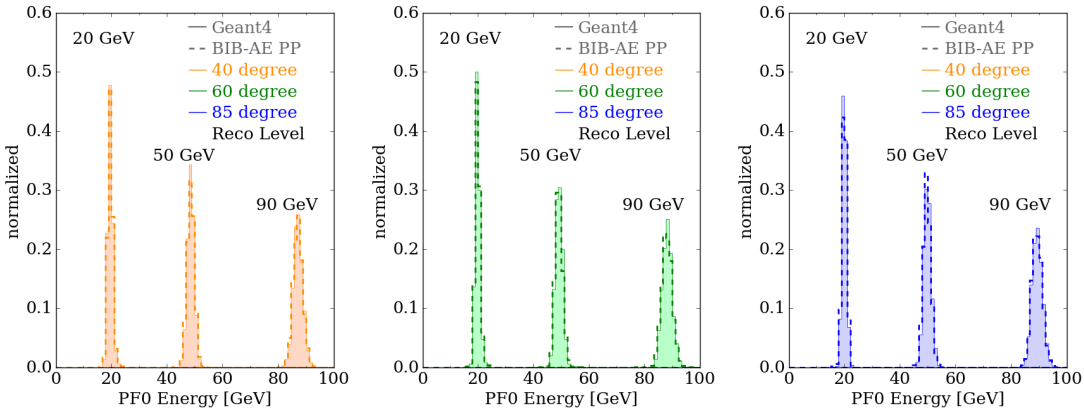


图 8. GEANT4和 BIB-AE 生成簇射对应的重建粒子（PFO）能量。分布按入射光子角度分组：40度（左，橙色）、60度（中，绿色）和 85度（右，蓝色）。

影响很小。虽然可以看出分辨率略有变化，但所有测试点的偏差仍均低于 10%。

4.1.3 单元能谱

现在我们转向我们关注簇射的单元能谱。结果如下

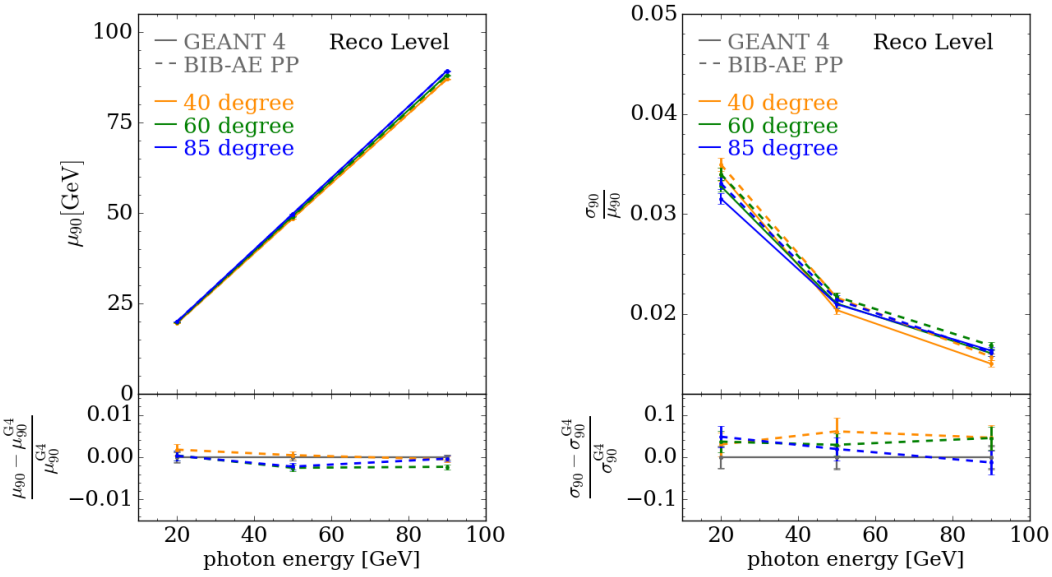


图9。 对于 GEANT4 和 BIB-AE 生成的簇射，重建粒子（PFO）的能量线性（左）和分辨率（右）。曲线根据 40度（橙色）、60度（绿色）和 85度（蓝色）三个入射角进行分组。每幅图中的子图显示了 BIB-AE 可见能量响应相对于其 GEANT4 等效值的相对偏差。

表 1 总结了通过计算每种能量和角度组合下GEANT4 与 BIB-AE 分布之间的 Jensen-Shannon距离（JSD）得出的结果。两个概率分布 P 和 Q的 JSD（其概率密度分别为 p 和 q）是 Jensen-Shannon散度的平方根

$$\mathrm{JSD}(P||Q) = \sqrt{\frac{D_{KL}(P||M) + D_{KL}(Q||M)}{2}}, \tag{9}$$

其中 $M = \frac{1}{2}(P+Q)$， D_{KL} 是 Kullback–Leibler散度，其定义见第 3.1 节中的公式 2。

对于模拟层级结果，图 10 中重点展示了最佳组合（50 GeV，85 度）和最差组合（90 GeV，40 度）。这些图左侧的灰色斜线区域表示低于半个 MIP 的区域，在实际量能器中该区域将被移除（通常称为 MIP截断）。因此，对于模拟层级结果，报告的 JSD 仅在高于 MIP截断的区域内计算。与 GEANT4 真实值相比，在该截断值附近及以下区域会出现更大的偏差。然而，在高于半个 MIP截断的区域内，随着入射粒子能量和角度变化，该谱形状的变化趋势通常能够得到准确描述。其关键特征是谱中约 1 MIP 处出现的明显峰值；得益于其后处理网络，BIB-AE 能够很好地再现这一峰值。该能力

表 1. 该表展示了在每种固定能量和角度组合下，Geant4 与 BIB-AE 的模拟层级和重建层级单元能量谱之间的詹森-香农距离（JSD）。对于模拟层级结果，报告的 JSD 仅在 MIP 截断值以上的区域内计算。

		能量（吉电子伏特）					
		SIM			REC		
		20	50	90	20	50	90
角度（度）	40	0.029	0.024	**0.036**	**0.031**	0.022	0.029
	60	0.026	0.021	0.032	0.027	0.018	0.025
	85	0.028	**0.018**	0.029	0.029	**0.015**	0.021

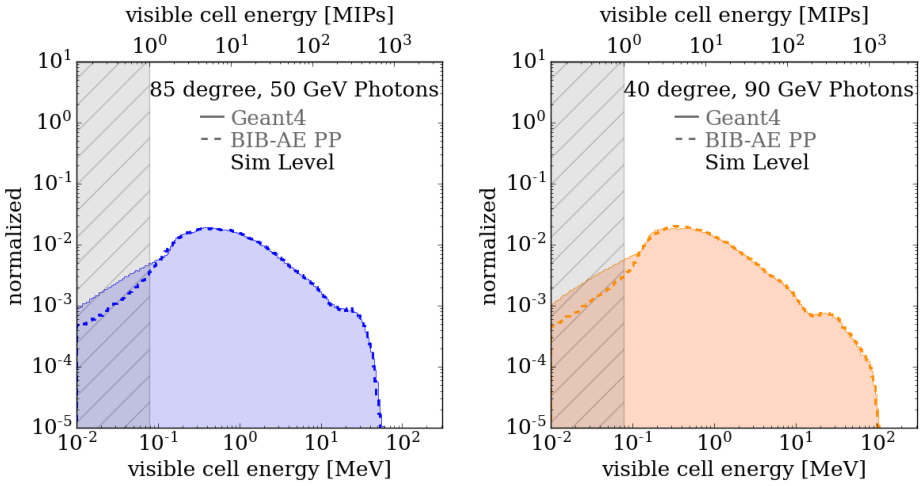


图 10. 最佳（50 GeV，85度，左）和最差（90 GeV，40度，右）入射角与能量组合的模拟层级单元能谱。灰色阴影区域表示低于半个 MIP 的范围。

最初由原始 BIB-AE架构实现， [11], 这些结果表明，这一能力可以扩展到更一般的模拟场景，在这些场景中需要使用多个条件参数。

重建后各能量和角度组合的单元能量谱对应的JSD值汇总于表 1右侧。最佳情况（50 GeV，85度）和最差情况（现为20 GeV，40度）以粗体突出显示，分布如图11所示。这些分布在半MIP阈值处结束，因为较低能量的命中会在重建过程中被舍弃。重建后，模拟层级中平滑的MIP峰由于两个MIP

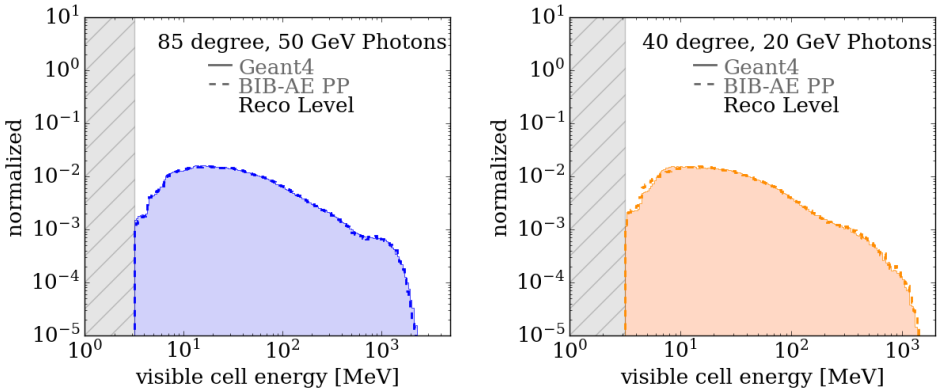


图11。 最佳（50 GeV、85度，左）和最差（20 GeV、40度，右）入射角与能量组合下重建的单元能量谱。灰色阴影区域表示低于半个 MIP 的区域。

校准因子在该过程中的应用而变得模糊。总体而言，重建后BIB-AE能够很好地复现单元能量，即使对于表现最差的20 GeV、40度分布，也只能观察到轻微偏差。

4.1.4 命中数

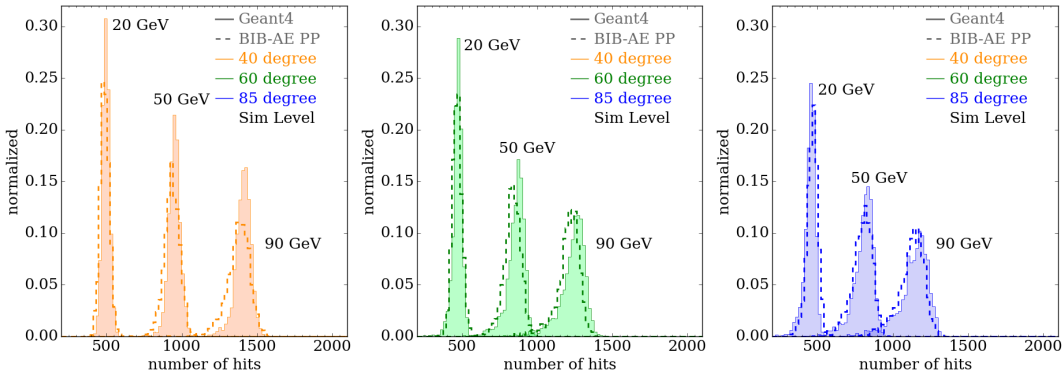


图12。 GEANT4 和 BIB-AE 生成簇射的模拟层级命中数。分布按入射光子角度分组：40度（左，橙色）、60度（中，绿色）和85度（右，蓝色）。

后处理网络能够发挥关键作用的另一种分布，是正确生成图12所示的能量高于半MIP阈值的命中数分布。该分布会受到截断值附近单元能量谱建模准确程度的显著影响，即使存在轻微偏差，也可能对最终高于半MIP阈值的命中数产生重大影响。

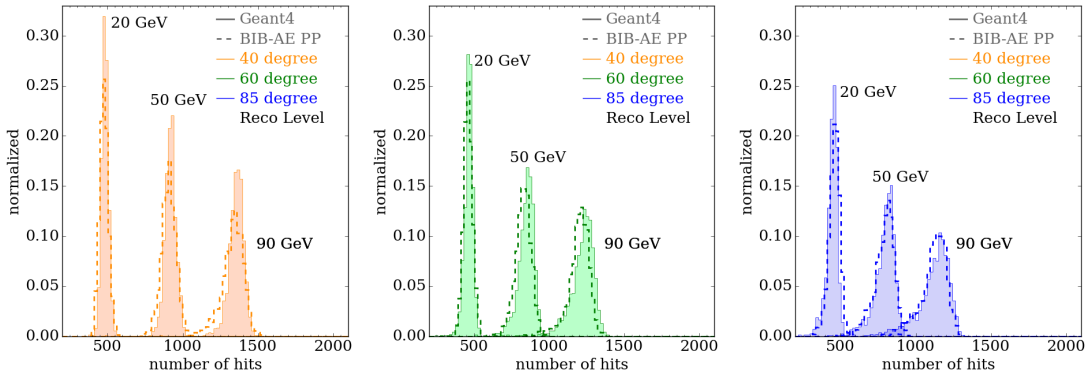


图13。 GEANT4 和 BIB-AE 生成簇射的重建后的命中数。分布根据入射光子角度分组，分别为 40度（左，橙色）、60度（中，绿色）和 85度（右，蓝色）。

这些分布中可以观察到的差异，在命中数增加的较高能量下往往会变得更加明显，因此可以归因于截断值附近单元能量谱中更显著的偏离。

重建后的命中数分布如图 13 所示。这些分布与模拟层级的分布相比没有明显偏移，表明高于半MIP阈值的绝大多数命中在重建后得以保留，这符合电磁簇射的预期。

4.1.5 重心

表2。 该表展示了对于固定能量和角度的每种组合，Geant4 和 BIB-AE 结果在模拟层级和重建层级重心之间的 Jensen-Shannon 距离（JSD）。

		能量 (吉电子伏特)					
		SIM			REC		
		20	50	90	20	50	90
角度（度）	40	0.066	0.062	0.072	0.081	**0.057**	0.064
	60	0.062	0.059	0.058	0.067	0.064	0.070
	85	**0.076**	**0.057**	0.070	0.079	0.067	**0.091**

簇射形状观测量对于生成模型来说也至关重要，因为它们会显著影响下游重建。我们首先回顾模型沿量热器

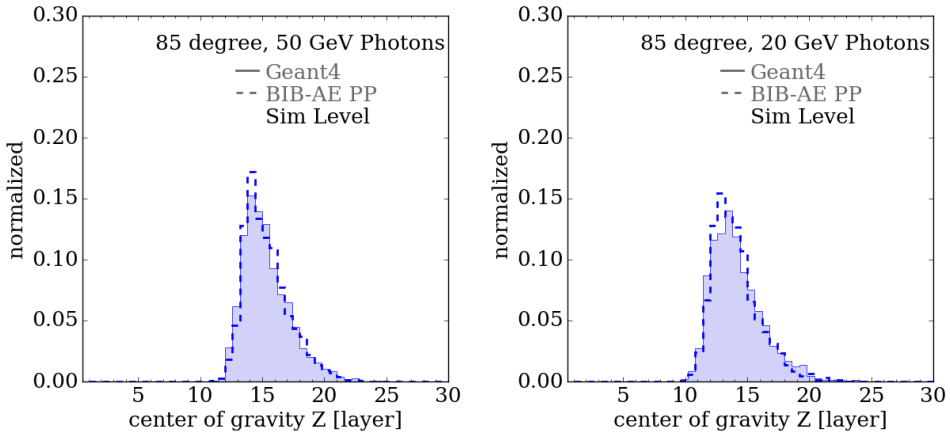


图14。 最佳（50 GeV、85度，左）和最差（20 GeV、85度，右）入射角与能量组合的模拟层级重心分布。

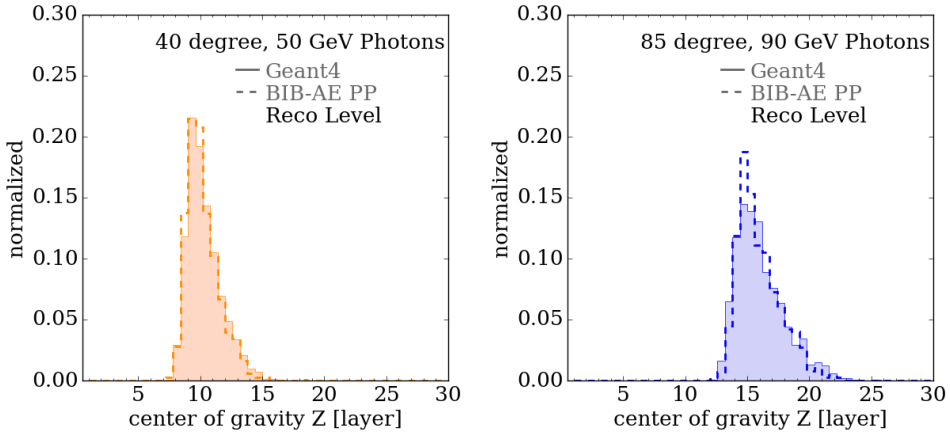


图15。 最佳（50 GeV、40度，左）和最差（90 GeV、85度，右）入射角与能量组合的重建重心分布。

深度（即沿 z轴）的性能。首先，计算了量热器深度方向的重心，即沿 z轴的一阶矩，并在表2中展示了模拟层级和重建层级下，BIB-AE 与GEANT4分布在各个角度和能量组合下的 JSD值。在模拟层级，性能最佳（50 GeV，85 度）和最差（20 GeV，85 度）的能量与角度组合以粗体标出，其分布展示于图14。总体而言，模型对这些分布的描述较好；最明显的差异在于，BIB-AE 生成的分布往往比 GEANT4 对应的分布略窄。

重建后，入射角和能量组合中表现最好和最差的分别是 50 GeV、40度和 90 GeV、85度。这些

分布如图15所示——在最佳情况下（右图），BIB-AE 分布与 GEANT4 分布非常接近；而在最差情况下（左图），BIB-AE 再次产生了略窄的分布。

4.1.6 纵向剖面

所研究的第二种与量热器深度方向上簇射发展相关的物理分布是纵向剖面 [4]。表3展示了 BIB-AE 与 GEANT4 分布在各个入射粒子能量和角度组合下的 JSD值。在模拟层级下，能量和角度组合中表现最好（90 GeV，85度）与最差（20 GeV，40度）的结果以粗体标出，其分布见图16。请注意，第20层附近出现的明显不连续，是由于应用了校准因子以补偿两种采样分数所致。因此，对于入射方向更接近垂直且能量更高的粒子，这一特征会更加显著，因为更多能量会沉积在量能器较后的层中。对于所研究的各种能量和角度组合，BIB-AE 在重现这一分布方面表现出色。这也包括对许多能量和角度组合中中央层所呈现阶梯状特征的出色重现（例如图16左图中的 90 GeV、85度簇射）；这些特征源自 ILD ECAL 的交替层结构。

重建后，表现最差的入射能量与角度组合仍为 20 GeV、40度，而表现最佳的组合则变为 90 GeV、60度。这些组合对应的分布见图 17。在所研究的能量和角度范围内，模拟层级上观察到的 BIB-AE 与 GEANT4 分布之间的高度吻合，在重建过程后依然存在。

4.1.7 径向剖面

通过研究簇射绕主轴的径向剖面，考察 BIB-AE 捕捉簇射横向发展的能力。表 4 展示了每种固定入射粒子能量与角度组合下，BIB-AE 与 GEANT4 之间的 JSD值。在模拟层级，表现最佳（90 GeV、60度）和最差（20 GeV、40度）的组合以粗体标出，并展示于图 18。BIB-AE 通常能够很好地捕捉高能核心周围的剖面，但在较大半径处，表现则有所不同。在某些情况下，模型能够高度忠实地再现较大半径处的分布；而在另一些情况下，通常是簇射倾斜度较大的情形（即 40度簇射），与GEANT4 簇射相比，BIB-AE 分布的衰减过快。

[4] 本文中，我们将纵向剖面称为簇射向量能器深度方向的发展，而非沿簇射轴方向的发展。

表3. 表中展示了针对每种固定能量和角度组合，在模拟和重建层级的纵向剖面上，Geant4 与 BIB-AE 结果之间的 Jensen-Shannon 距离（JSD）。

		能量（吉电子伏特）					
		SIM			REC		
		20	50	90	20	50	90
角度（度）	40	**0.025**	0.021	0.023	**0.027**	0.017	0.015
	60	0.021	0.015	0.014	0.020	0.014	**0.009**
	85	0.023	0.014	**0.009**	0.023	0.015	0.011

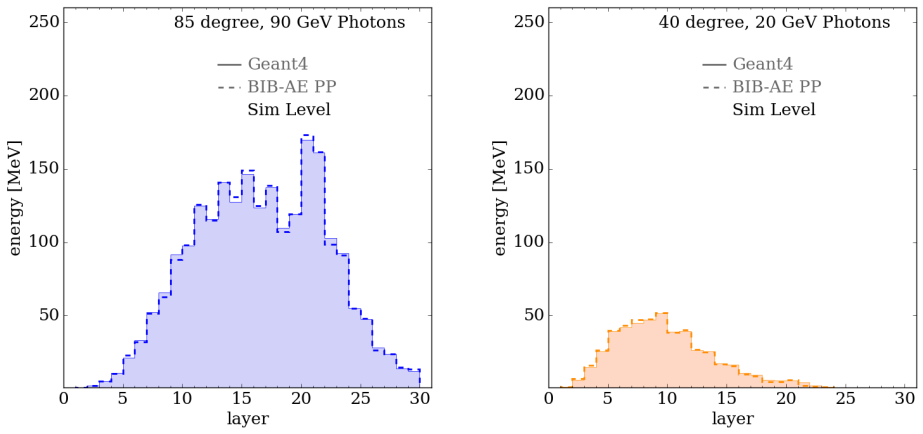


图16。 最佳（90 GeV、85度，左）和最差（20 GeV、40度，右）入射角与能量组合的模拟层级纵向分布。

重建后，表现最好和最差的入射粒子角度与能量组合仍分别为 90 GeV、60度和 20 GeV、40度。与模拟层级的情况一样，各种情况下簇射核心附近的剖面都得到了良好再现。在表现最佳的情况下（即 90 GeV、60度），即使在较大的半径处，BIB-AE 与 GEANT4仍保持高度一致。有趣的是，在表现最差的 20 GeV、40度情况下，尽管仍可观察到大半径处数值下降的现象，但其程度似乎比模拟层级时稍轻。在更一般的情况下，这可能有助于区分重叠光子簇射。我们将此类情形下相对于 GEANT4 的比较留待后续研究。

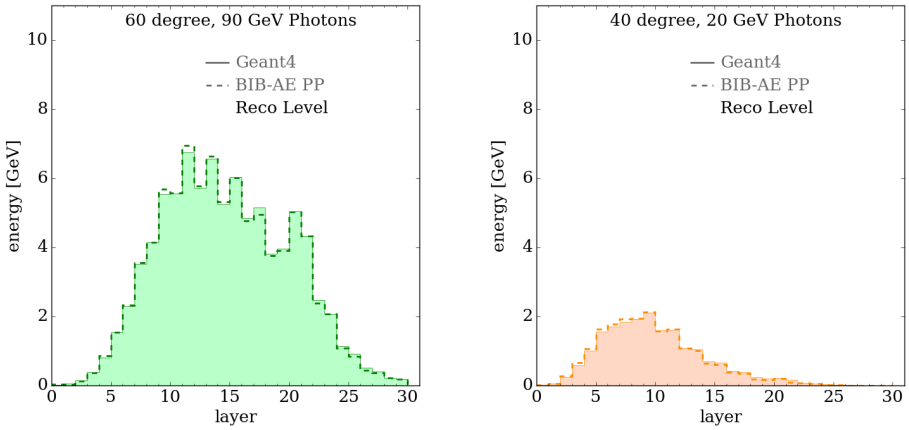


图 17。 最佳（90 GeV，60度，左）和最差（20 GeV，40度，右）入射角度和能量组合对应的重建纵向剖面。

表 4。 该表展示了不同固定能量和角度组合下，模拟层级和重建层级的径向剖面中 Geant4 与 BIB-AE 结果之间的 Jensen-Shannon 距离（JSD）。

		能量（吉电子伏特）					
		SIM			REC		
		20	50	90	20	50	90
角度（度）	40	**0.019**	0.014	0.016	**0.018**	0.013	0.013
	60	0.011	0.006	**0.006**	0.010	0.007	**0.004**
	85	0.011	0.007	0.007	0.010	0.007	0.008

4.2 计算性能

生成模型作为代理模拟器是否适用，最终取决于其每次簇射的推理时间。为此，我们在中央处理器和图形处理器硬件上对每个样本的生成时间进行了基准测试。表 5 展示了使用 GEANT4 和 BIB-AE 生成簇射的平均耗时；簇射的能量在 10–100 吉电子伏特范围内均匀分布，角度则在 90–30 度范围内均匀分布。与 GEANT4 相比，该生成模型显著提升了速度，在图形处理器上加速比最高可达三个数量级。

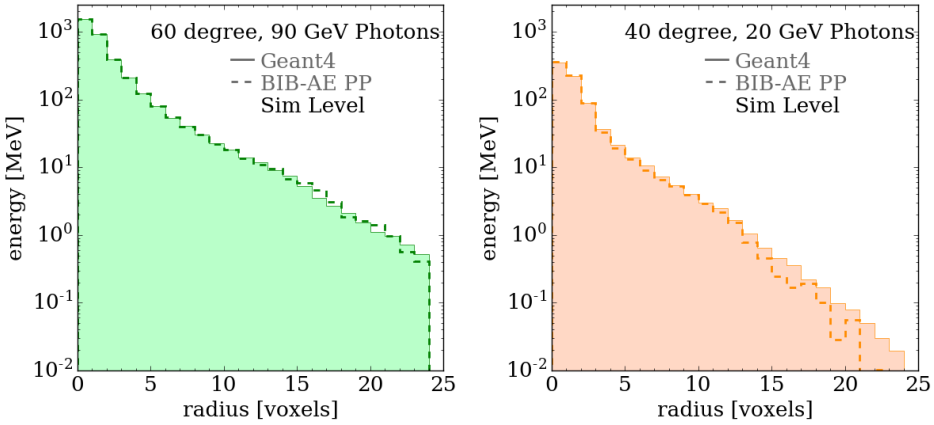


图 18. 最佳（90 GeV、60度，左）和最差（20 GeV、40度，右）入射角与能量组合的模拟层级径向分布。

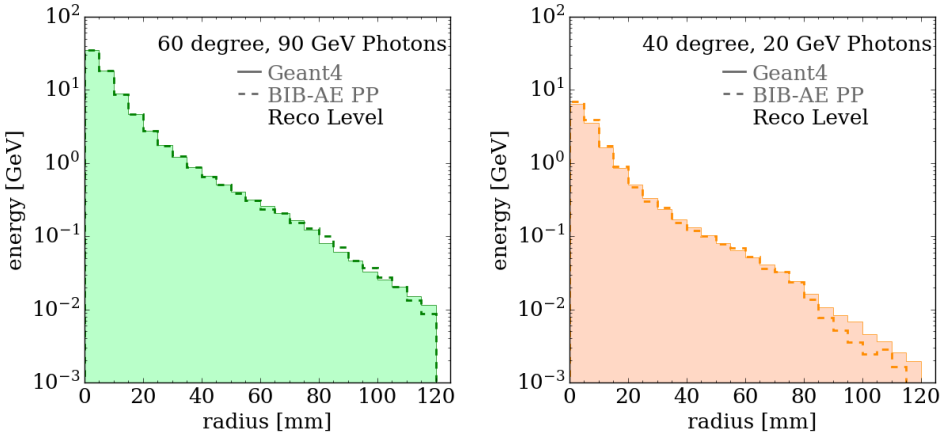


图 19. 最佳（90 GeV、60度，左）和最差（20 GeV 和 40度，右）入射角与能量组合的重建径向分布。

5 结论

生成模型有望为快速模拟提供强大的工具，并显著减少粒子物理实验所需的计算资源。本文的贡献有两方面。首先，我们将用于量热器模拟的最强生成模型之一——BIB-AE架构——推广到高粒度量能器中的多参数条件化场景。将基于生成模型的模拟工具扩展到此类多参数条件化场景时，一个关键挑战在于需要覆盖更大的相空间。这意味着生成模型不仅需要稳健的条件化方案，还必须具备足够的容量和能力。此外，为在规则网格上进行学习而设计的模型，其扩展性也需要预先考虑，因为更大的网格尺寸

表 5. 比较 BIB-AE 生成器与 GEANT4 在单核 Intel® Xeon® 中央处理器 E5-2640 v4（中央处理器）和配备 40 GB 内存的 NVIDIA® A100（图形处理器）上的计算性能。对于 BIB-AE，选取性能最佳的批量大小。所示数值是对一组包含 2000 个簇射的数据取均值，这些簇射的能量均匀分布于 $10 - 100$ 吉电子伏特，角度均匀分布于 $30 - 90$ 度；误差由标准差给出。

硬件	模拟器	时间 / 簇射 [毫秒]	加速
CPU	GEANT4	4417 ± 83	$\times 1$
	BIB-AE	362 ± 2	$\times 12$
GPU	BIB-AE	4.32 ± 0.09	$\times 1022$

对于入射角不断变化的簇射，将需要实现这一点。其次，我们首次在如此高颗粒度的探测器中，详细研究了粒子流重建对生成模型性能的影响。我们证明，可以设计出一种在重建后仍能保持强大性能的模拟器——经过这一处理后的物理性能，将成为判断代理模拟器适用性的最终依据。

研究表明，BIB-AE模型在一系列物理观测量上都具有出色的物理性能。从条件化角度来看，其能量响应尤其出色，这在一定程度上得益于使用归一化流学习量能器有源区域中的沉积总能量，从而实现了逐簇射重缩放。这种方法有助于使模型的能量条件化性能比先前版本 [11]更加可靠。相比之下，角响应稍弱，但总体而言仍能提供良好的描述。

BIB-AE保留了在一系列角度和能量范围内良好学习单元能量谱的能力，同时还能以高度保真度再现簇射形状。分布中最明显的差异出现在倾角更大的簇射和更大半径处的径向剖面中。

相较于 GEANT4，生成模型经过文献充分确立的改进计算潜力，对于扩展设置下的BIB-AE架构仍然成立。相较于 GEANT4，最高可达三个数量级的加速与该模型此前的结果 [11] [12]一致。

未来工作的关键一步是开发处理探测器几何结构不规则情况的通用方法。这对于改变探测器表面上的入射位置，以及处理整个探测器子系统来说是必不可少的。这一步还将使我们能够在更一般的

存在重叠簇射的环境中研究重建的影响。研究生成模型经过重建后的物理性能是一项重要工作，最终也是评估任何生成模型是否适用于量热器模拟所必需的。

致谢

本研究的部分工作得到了位于德国汉堡、由德国电子同步加速器 DESY 运营的 Maxwell 计算资源的支持。本项目获得了欧盟地平线 2020 研究与创新计划的资助，资助协议编号为 101004761。SD 获得了德国研究基金会在德国卓越战略框架下的资助，即 EXC 2121 量子宇宙项目资助，项目编号为 390833306。我们感谢 KISS 联盟（05D23GU4、13D22CH5）提供的支持，该联盟由德国联邦教育与研究部 BMBF 通过 ErUM-Data 行动计划资助。

参考文献

[1] **Agostinelli S 等，2003，Geant4——一种模拟工具包，《核仪器与物理研究方法 A辑：加速器、光谱仪、探测器及相关设备》506，250–303，ISSN 0168-9002，网址：http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/ S0168900203013688**[2]**Albrecht J 等（高能物理软件基金会），2019，面向 2020 年代的高能物理软件与计算研发路线图，《计算、软件与大科学》3，7。1712.06982**[3] **de Oliveira L、Paganini M 和 Nachman B，2017，通过示例学习粒子物理：用于物理合成的位置感知生成对抗网络，《计算、软件与大科学》1，4。1701.05927**[4] **Paganini M、de Oliveira L 和 Nachman B，2018，CaloGAN：利用生成对抗网络模拟多层电磁量热器中的三维高能粒子簇射，《物理评论D》97，014021。1712.10321**[5] **Khattak G R、Vallecorsa S、Carminati F 和 Khan G M，2022，利用生成对抗网络快速模拟高颗粒度量热器，《欧洲物理学杂志C》8。2109.07388**[6] **ATLAS 合作组，2022，AtlFast3：ATLAS 快速模拟的下一代工具，《计算、软件与大科学》6**[7] **Rehm F、Vallecorsa S、Borras K 和 Kr¨ucker D，2021，针对高能物理量能器模拟的深度卷积生成对抗网络验证。2103.13698**[8] **Kansal R、Duarte J、Orzari B、Tomei T、Pierini M、Touranakou M、Vlimant J R 和 Gunopulos D，2021，用于高能物理稀疏数据生成的图生成对抗网络。2012.00173**[9]**Buhmann E、Kasieczka G 和 Thaler J，2023，EPiC-GAN：用于粒子喷注的等变点云生成。2301.08128**[10] **Hashemi H、Hartmann N、Sharifzadeh S、Kahn J 和 Kuhr T，2023，利用事件内感知生成对抗网络和自监督关系推理进行超高分辨率探测器模拟。2303.08046**[11] **Buhmann E、Diefenbacher S、Eren E、Gaede F、Kasieczka G、Korol A 和 Kr¨uger K，2021，更上一层楼：高速、高保真模拟高颗粒度量热器，《计算、软件与大科学》5，13。2005.05334**

[12] Buhmann E、Diefenbacher S、Eren E、Gaede F、Hundhausen D、Kasieczka G、Korcari W、Kr¨uger K、McKeown P 和 Rustige L，2022，强子，更好、更快、更强，《机器学习：科学与技术》3，025014。2112.09709[13] Erdmann M、Geiger L、Glombitza J 和 Schmidt D，2018，在对抗网络中利用 Wasserstein距离生成并优化粒子探测器模拟，《计算、软件与大科学》2，4。1802.03325[14]Erdmann M、Glombitza J 和 Quast T，2019，利用 Wasserstein生成对抗网络精确模拟电磁量能器簇射，《计算、软件与大科学》3，4。1807.01954[15] Krause C 和 Shih D，2021，CaloFlow：利用归一化流快速、准确地生成量能器簇射。2106.05285[16] Krause C 和 Shih D，2021，CaloFlow II：利用归一化流更快且同样准确地生成量能器簇射。2110.11377[17] Diefenbacher S、Eren E、Gaede F、Kasieczka G、Krause C、Shekhzadeh I 和 Shih D，2023，L2LFlows：生成高保真三维量能器图像。2302.11594[18] Mikuni V 和 Nachman B，2022，用于量能器簇射模拟的基于得分的生成模型，《物理评论D》106，092009。2206.11898[19] CMS合作组，2017，CMS端盖量能器的第二阶段升级，技术报告 CERN-LHCC-2017-023。CMS-TDR-019，欧洲核子研究中心，日内瓦，网址：https://cds.cern.ch/record/ 2293646[20] 国际直线对撞机国际发展团队，2022，国际直线对撞机：Snowmass 2021 报告。2203.07622[21]Bernardi G 等，2022，未来环形对撞机：美国 Snowmass 2021 进程总结。2203.06520[22]Buhmann E、Diefenbacher S、Eren E、Gaede F、Kasieczka G、Korol A 和 Kr¨uger K，2021，解码光子：BIB-AE生成网络潜在空间中的物理学，《EPJ网络会议》251，03003。2102.12491[23] Abramowicz H 等（ILD概念组），2020，国际大型探测器：中期设计报告。2003.01116[24] 2016 iLCSoft项目页面 https://github.com/iLCSoft[25] Frank M、Gaede F、Grefe C 和 Mato P，2014，DD4hep：高能物理实验的探测器描述工具包，《物理学会议系列》513，022010[26] Marshall J S 和 Thomson M A，2015，用于模式识别的 Pandora 软件开发工具包，《欧洲物理学杂志C》75，网址：http://dx.doi.org/10.1140/epjc/ s10052-015-3659-3[27]Voloshynovskiy S、Kondah M、Rezaeifar S、Taran O、Holotyak T 和 Rezende D J，2019，通过变分视角理解信息瓶颈。1912.00830[28] Paszke A 等，2019，PyTorch：一种命令式风格、高性能的深度学习库，《神经信息处理系统进展》32，8024–8035；《神经信息处理系统进展》32，第 8024–8035 页，网址：http://papers.neurips.cc/paper/9015-pytorch-an-imperative-style-high-performance-deep-learning-library.pdf[29] Gretton A、Borgwardt K M、Rasch M J、Sch¨olkopf B 和 Smola A J，2008，双样本问题的核方法，CoRR 0805.2368[30] Kingma D P 和 Ba J，2015，Adam：一种随机优化方法。1412.6980[31] Otten S、Caron S、de Swart W、van Beekveld M、Hendriks L、van Leeuwen C、Podareanu D、de Austri R R 和 Verheyen R，2019，利用深度生成模型和密度信息缓冲区进行物理学事件生成与统计抽样。1901.00875[32] Parzen E，1962，概率密度函数与众数的估计，《数学统计年刊》33，第 1065–1076 页；《数学统计年刊》33，第 1065 页，网址：http://www.jstor.org/stable/2237880[33] Rezende D J 和 Mohamed S，2015，利用归一化流进行变分推断

1505.05770[34] Kingma D P、Salimans T、Jozefowicz R、Chen X、Sutskever I 和 Welling M 2016 **使用逆自回归流改进变分推断**1606.04934[35] Bingham E、Chen J P、Jankowiak M、Obermeyer F、Pradhan N、Karaletsos T、Singh R、Szerlip P A、Horsfall P 和 Goodman N D 2019 **Pyro：深度通用概率编程**《机器学习研究杂志》**20** 28:1–28:6 URL http://jmlr.org/papers/v20/18-403.html[36] Dinh L、Sohl-Dickstein J 和 Bengio S 2016 **使用 Real NVP 进行密度估计**1605.08803[37] Durkan C、Bekasov A、Murray I 和 Papamakarios G 2019 **神经样条流**1906.04032[38] Hadi M Dolatabadi Sarah Erfani C L 2020**使用线性有理样条进行可逆生成建模**2001.05168