

# 模拟框架现状与展望

曹国富，邓子艳，方文兴，黄性涛，李腾，  
李卫东，**林韬**，尤郑昀，邹佳恒

[lintao@ihep.ac.cn](mailto:lintao@ihep.ac.cn)

2023年粒子物理实验计算软件与技术研讨会

山东大学青岛校区

2023.06.10

# ChatGPT列的报告大纲（1）

TA

我要准备一个25分钟的学术报告，关于粒子物理实验中的探测器模拟框架。大概会介绍一下国内外实验中的情况，然后展望未来Gaussino框架。能帮我列个大纲吗？



当然可以，以下是一份关于粒子物理实验中的探测器模拟框架的学术报告的大纲：

**标题:** "粒子物理实验中的探测器模拟框架：当前状态与Gaussino框架的展望"

## I. 引言 (2分钟)

- 探测器模拟在粒子物理实验中的重要性。
- 本报告的目的。

## II. 国内外探测器模拟框架现状 (8分钟)

- 高亮在粒子物理实验中最常用的模拟框架。
- 这些框架的应用、优点以及限制。

## III. 国内外探测器模拟框架的应用案例 (5分钟)

- 选取一个鲜明的案例，展示这些模拟框架在实际研究中的应用和影响。

# ChatGPT列的报告大纲（2）

---

## IV. 挑战和局限性 (3分钟)

- 简要讨论当前模拟框架面临的主要挑战。

## V. Gaussino框架介绍及其未来前景 (5分钟)

- Gaussino框架的基本介绍和它在粒子物理实验中的应用。
- Gaussino框架的未来发展和预期影响。

## VI. 结论 (2分钟)

- 对讲座的总结。
- 对探测器模拟框架进步的重要性的反思。

这个大纲应该适合你25分钟的报告时间。请注意，时间分配是大约的，你可能需要根据你的演讲速度和听众的反应进行调整。

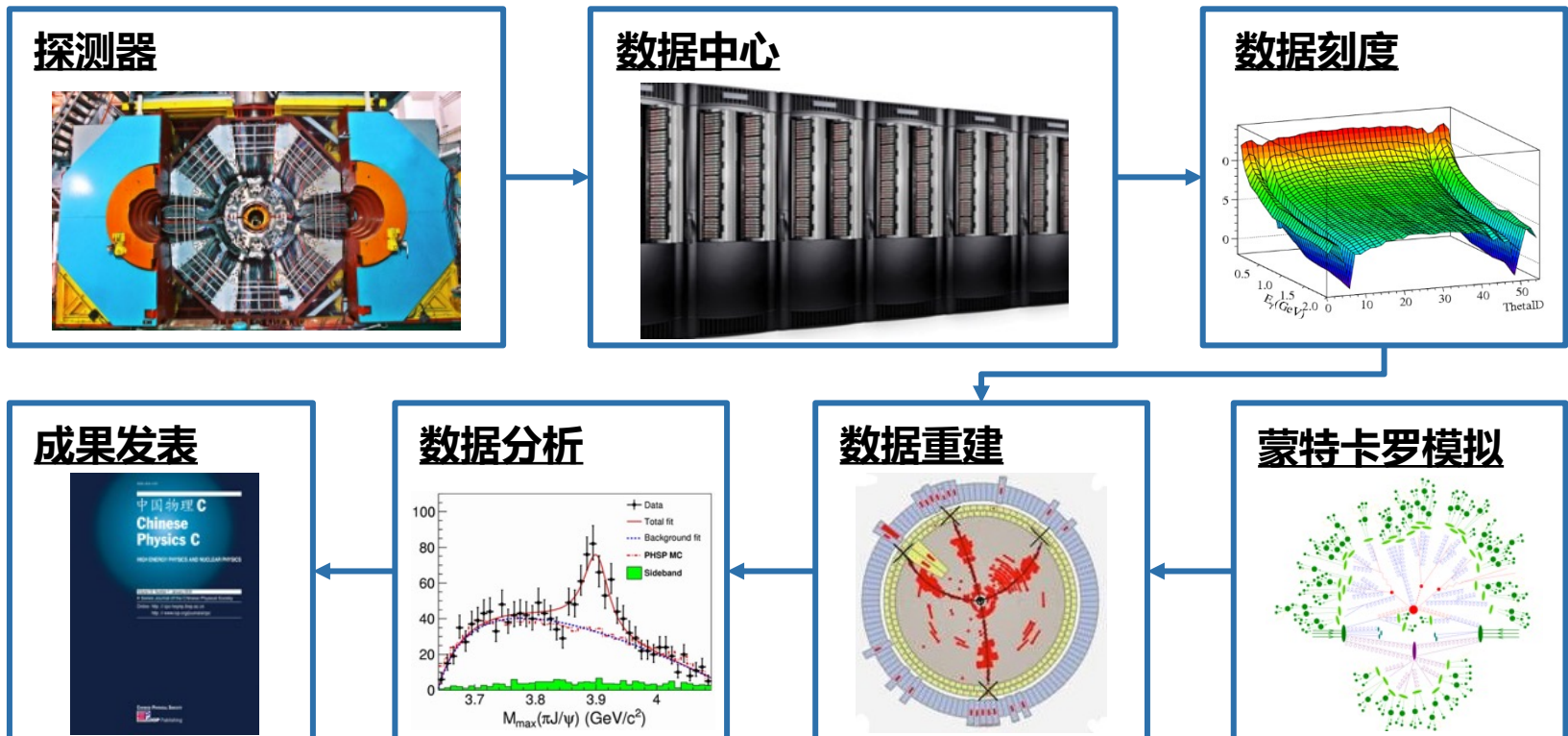
# 大纲

---

- ❖ 引言
- ❖ 模拟框架软件
- ❖ 我国模拟框架的发展：以BESIII、JUNO和CEPC为例
- ❖ 下一代模拟框架Gaussino：来自LHCb的模拟框架
- ❖ 总结和展望

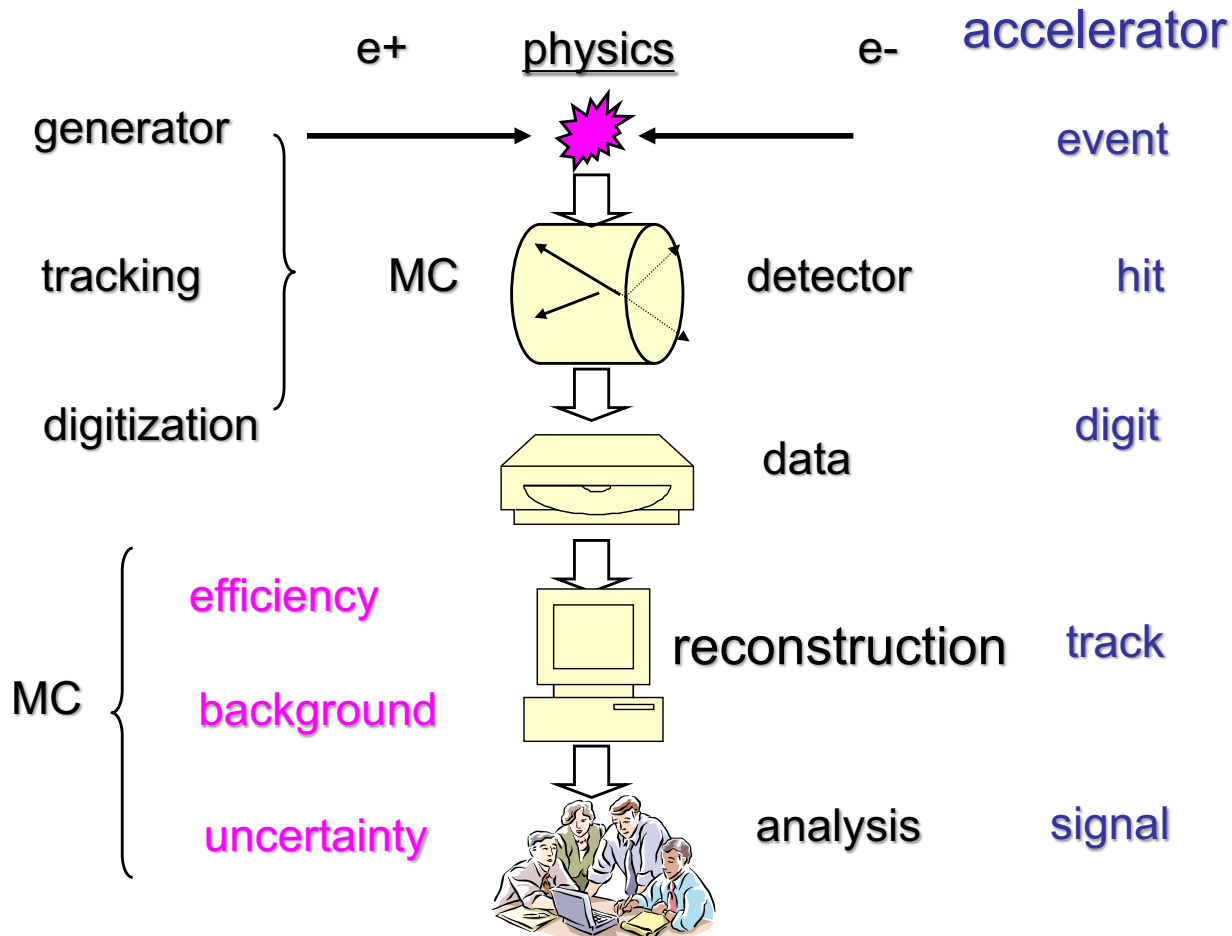
# 引言 (1)

- ❖ 粒子物理实验中的蒙特卡罗模拟是通过计算机仿真微观粒子在探测器中的反应过程。
- ❖ 用于探测器设计优化、重建算法、物理性能等研究。



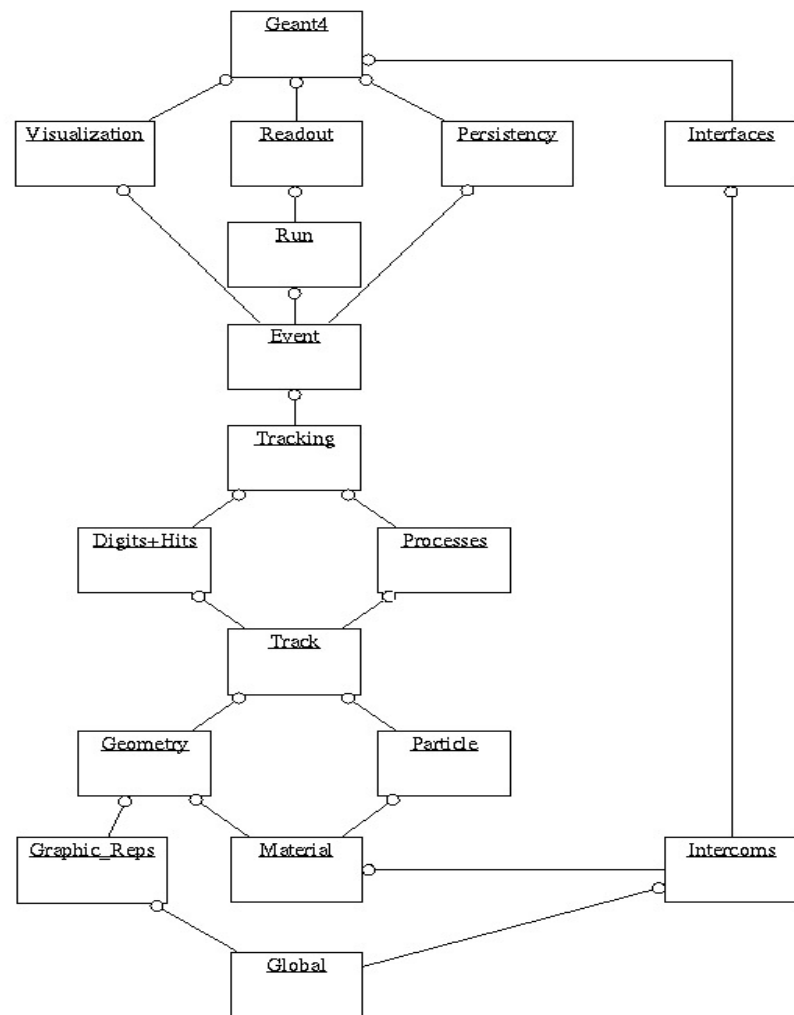
# 引言 ( 2 )

- ❖ 模拟包括物理产生子、探测器模拟、数字化等过程。
- ❖ 常用的模拟软件：GEANT4、FLUKA



# GEANT4 Toolkit

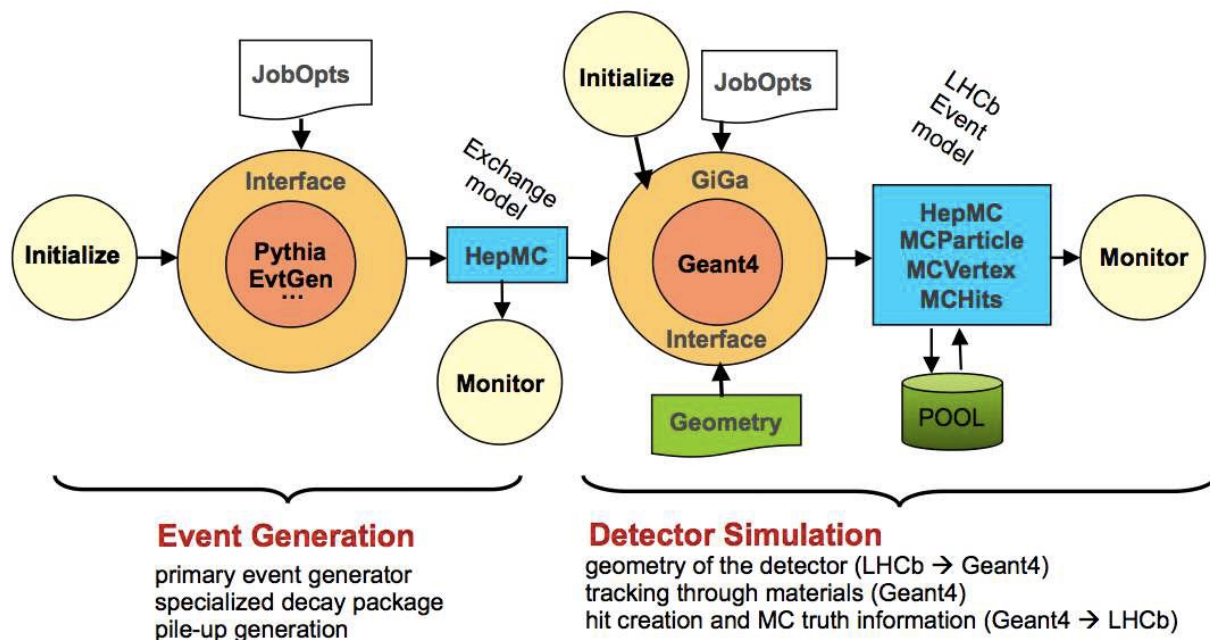
- ❖ GEANT4是一套基于C++开发、采用面向对象技术的模拟工具包。
- ❖ 由G4提供软件接口和组件
  - G4内核程序
  - 粒子、物理过程、几何、可视化
- ❖ 由用户代码构建应用
  - 定义探测器几何、磁场
  - 选择合适的物理过程
  - 定义产生的事例信息
  - 获取MC truth信息



尽管G4提供了强大的功能，真正用于Production还需要大量的开发工作。

# 模拟框架软件

- ❖ 模拟框架是将已有的工具包、软件框架变成真正的“应用”。
- ❖ 基于模拟框架，用户不仅能够运行完整的模拟流程，而且能够对模拟进行配置，无需专业的编程。



核心要素:

1. 事例数据模型 (用于连接不同阶段)
2. 产生子接口 (用于整合产生子)
3. 探测器模拟接口 (用于整合G4)
4. 探测器几何
5. Hits和MC truth

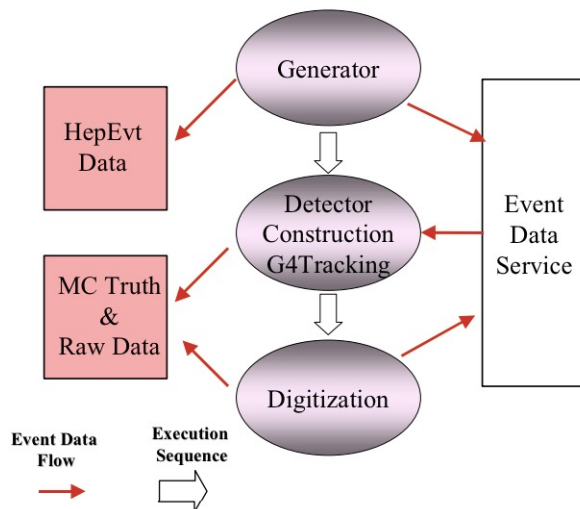
案例: LHCb模拟框架GAUSS



# 我国模拟框架发展：以BES3/JUNO/CEPC为例

## ❖ BES3

- 背景：国内当时主要使用基于Fortran的GEANT3进行模拟。
- 选择了基于C++的Gaudi和GEANT4作为基础。
- 实现了完整的链条，经过数字化生成与真实数据一致的格式。
- 为BES3开发了大量的模拟软件组件，包含几何、产生子、物理过程、磁场、数字化、MC truth、I/O、触发和本底混合。



图片来自 W.D Li et al CHEP 2006

## Simulation Algorithm

- ❖ Developed in BOSS framework
- ❖ Based on Geant4 toolkit
- ❖ External packages
  - Geant4.8.1+p01
  - GCC 3.2.3
  - CLHEP 1.9.2.3
  - GDML 2.8.0
  - Xerces\_C 2.7.0
  - ROOT 4.03.02
- ❖ Components
  - Geometry description
  - Event Generator
  - Physics processes
  - Magnetic field
  - Digitization
  - MC truth
  - Data I/O
  - Trigger simulation
  - Background mixing

Project Leader: Liu  
Huaimin

Cao Guofu, Deng Ziyang,  
He Miao, Liang Yutie,  
Pan Minghua, You  
Zhendun, Yuan Ye

Deng Ziyang, IHEP

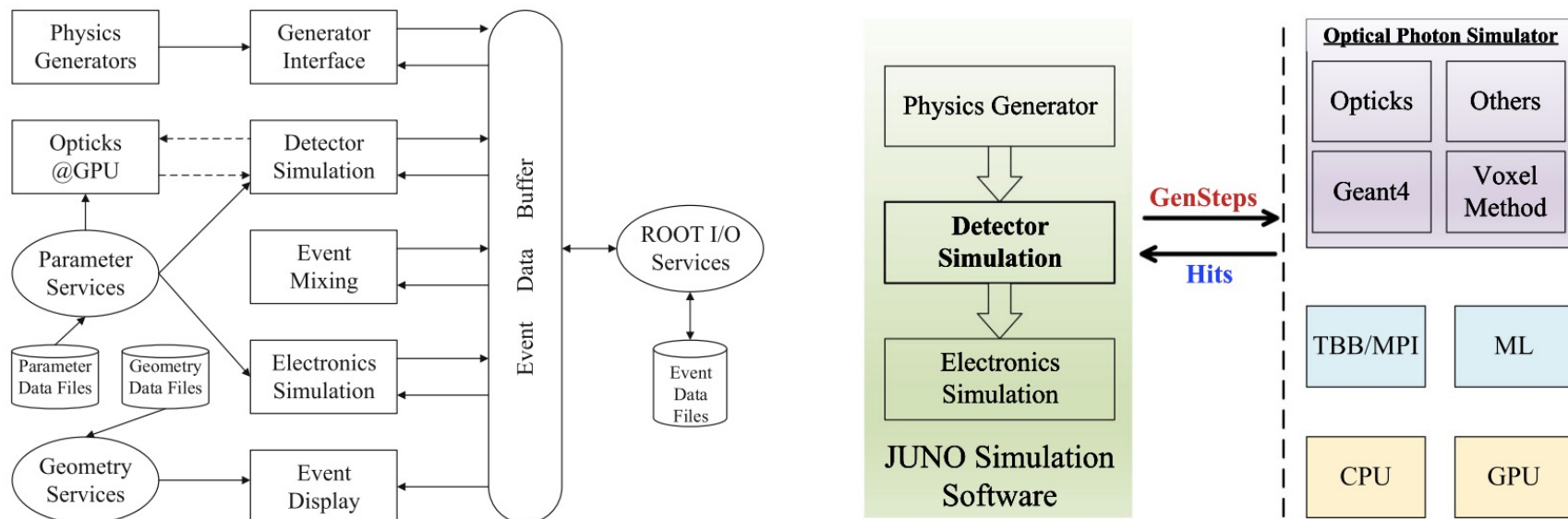
6

图片来自 Z.Y Deng et al ACAT 2007

# 我国模拟框架发展：以BES3/JUNO/CEPC为例

## ❖ JUNO

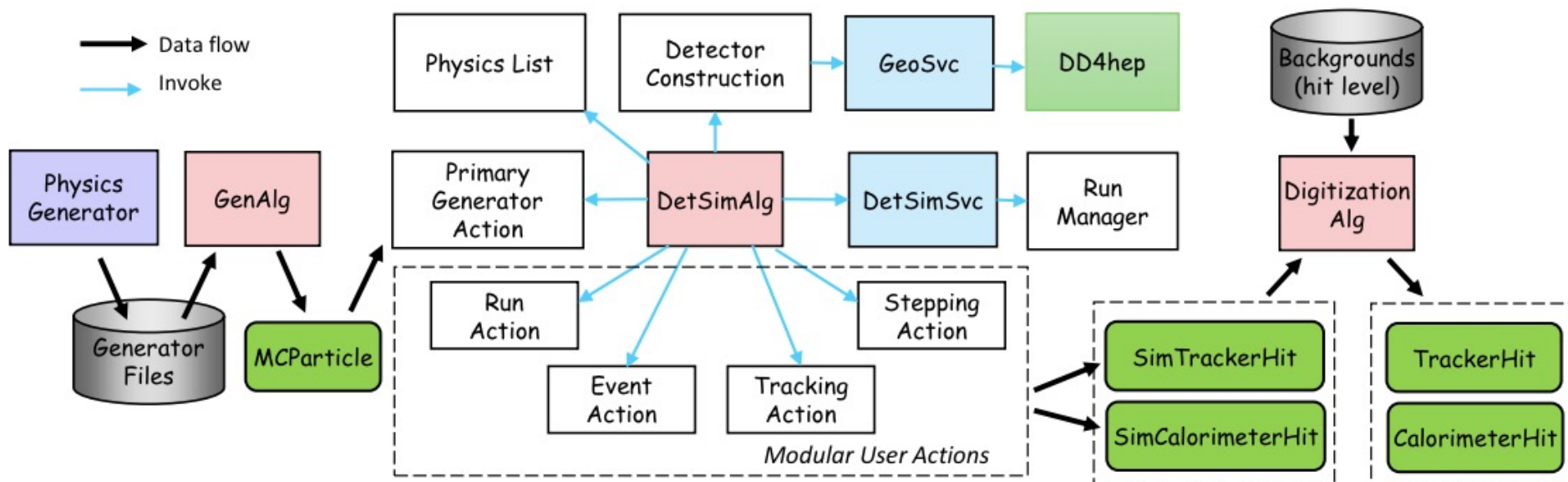
- 背景：已经积累了模拟框架的经验，但中微子实验有其特殊性。
- 挑战：信号稀少、本底高，单个宇宙线事例千万级的光子模拟。
- 基于SNIiPER研制了全新的模拟软件，发展了多种模拟方法与技术。
  - Opticks GPU模拟、MTSNIiPER事例级并行模拟、快速模拟方法



# 我国模拟框架发展：以BES3/JUNO/CEPC为例

## ❖ CEPC

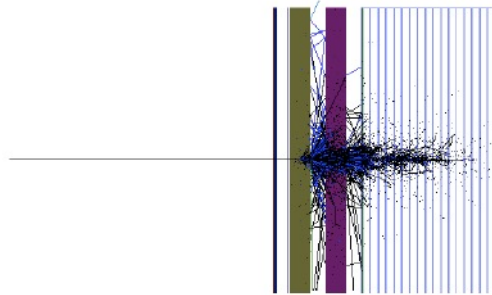
- 背景：参与国际合作Key4hep，软件技术更加前沿，也更具挑战性。
- 基于Key4hep common software stack，而CEPC模拟框架又是Key4hep的一部分。
- 核心框架：Gaudi；数据模型：EDM4hep；几何管理：DD4hep



# 现有的挑战 ( 1 )

- ❖ 回到模拟本身，主要的挑战来自计算资源的不足，无法满足模拟数据的产生。需要速度更快、精度更高的新方法。

## Simulation Landscape

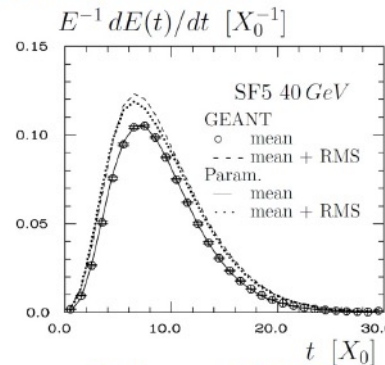


“FullSim”

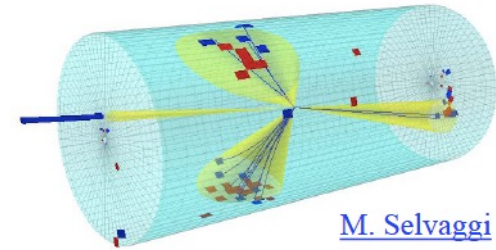
- Common software framework (i.e. Geant4)
  - Experiments can provide additional code via user actions
- Explicit modeling of detector geometry, materials, interactions w/ particles

“FastSim”

- Usually experiment-specific framework
- Implement approximations: analytical shower shapes (e.g. GFLASH), truth-assisted track reconstruction, etc.



[arXiv:hep-ex/0001020](https://arxiv.org/abs/hep-ex/0001020)



[M. Selvaggi](#)

Delphes

- Ultra-fast parametric simulation
- Used for phenomenological studies, future projections, etc.

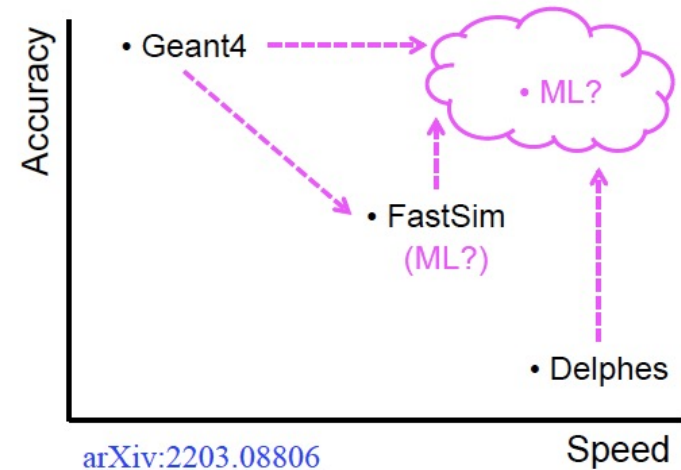
Simulation is crucial in HEP!

# 现有的挑战 ( 2 )

- ❖ 在模拟中引入AI/ML方法，已经成为热点方向之一。

## AI<sup>†</sup> Landscape

- Options to use ML<sup>†</sup> for sim:
  1. Replace or augment (part or all of) Geant4
  2. Replace or augment (part or all of) FastSim
- Goals:
  1. Increase speed while preserving accuracy
  2. Preserve speed while increasing accuracy
- ML can also create faster, but less accurate simulation
  - à la existing classical FastSim
    - then augment w/ more ML to improve accuracy
- Another option: replace entire chain (“end-to-end”)
  - Exciting prospect, potentially complements other cases



ML can also be used for event generation, hadronization, etc.!

<sup>†</sup> “AI” or “ML” here: almost always deep neural networks (DNNs)

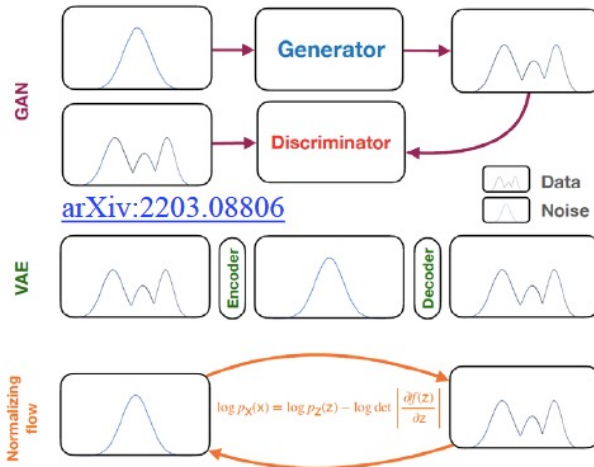
# 现有的挑战 ( 3 )

## ❖ 需要在模拟框架中支持不同层次的AI/ML技术

- 更加复杂的模拟流程：全部、部分，不同粒子、区域  
**Taxonomy**

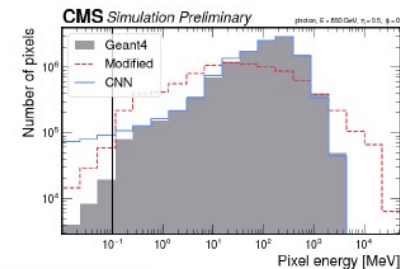
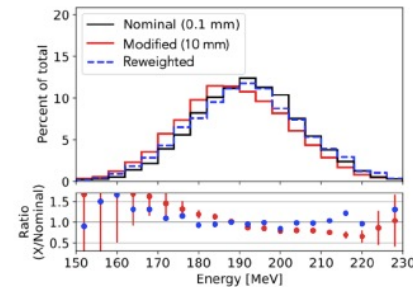
- Generative models (“replace”):

- Usually *stochastic*
- Generative Adversarial Networks (GANs)
- Variational Autoencoders (VAEs)
- Normalizing Flows (NFs)



- Refinement techniques (“augment”):

- Usually *deterministic*
- Classification-based (reweighting)
- Regression-based (correcting)



# 如何应对挑战？

---

## ❖ 不同实验应该共享解决方案

- 例如Geant4 11官方例子中添加了ONNX的支持，为实验模拟软件提供了整合机器学习的解决方案。

## ❖ 共享模拟框架软件，复用已有代码

- 这是Key4hep的目标之一，各个实验复用模拟框架。维护成本能够下降，及时使用新功能。

## ❖ 保持开放性，为发展新方法提供平台

- 模拟框架在开发时受到的约束条件可能会影响新方法的发展。
- 因此模拟框架需要足够灵活，保持开放的接口。

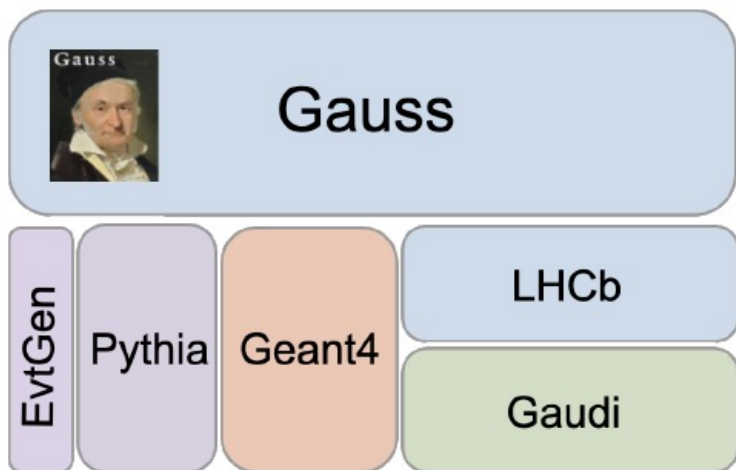
## ❖ Key4hep目前正在评估来自LHCb的Gaussino模拟框架。

- Gaussino基于Functional Gaudi开发，支持并行化。
- 一旦方案可行，将作为common software stack的一部分。

# LHCb模拟软件Gauss的演变（1）

## ► Simulation software in LHCb

LHCb-TDR-017



### Gauss is the LHCb simulation framework:

- ➔ generates primary events,
- ➔ simulates the interaction with the detector,
- ➔ based on Gaudi as a core software framework.

### Landscape for Run3 and future runs

- ❗ large increase in luminosity very challenging for computing,
- ❗ simulation for Run 2, takes up to 90% of the experiment computing resources,
- ❗ major rewrite of the software in LHCb.

### Simulation software upgrade needed!

- ➔ need for code optimization,
- ➔ clean up of 'dead' code,
- ➔ fix memory usage issues,
- ➔ use multi-threaded Gaudi and Geant4,
- ➔ extensive fast simulation models,
- ➔ new external software technologies.



### Separate simulation core functionalities!

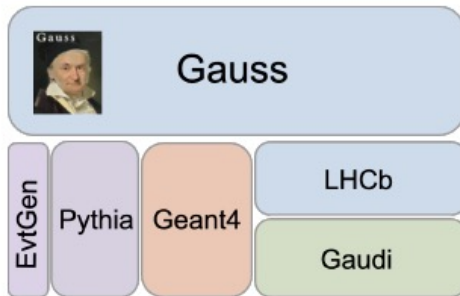


# LHCb模拟软件Gauss的演变（2）

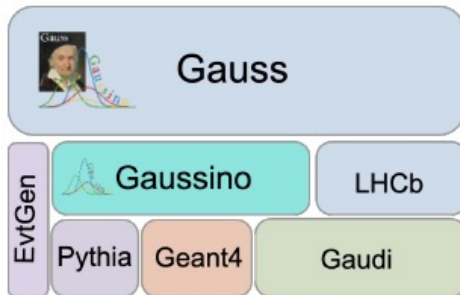
## ► From Gauss to Gauss-on-Gaussino

LHCB-TDR-017

💡 Introduce an experiment-independent layer!



(a) Gauss current dependencies



(b) Gauss-on-Gaussino dependencies

### ➔ Gaussino

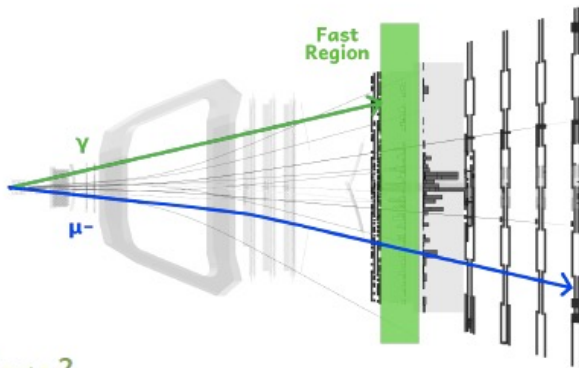
- ➔ new core simulation framework,
- ➔ created by extracting experiment-independent components from Gauss,
- ➔ ideal test bed for new developments,
- ➔ idea came up in collaboration with the CERN SFT group / FCC,
- 👉 **more on Gaussino** in the following [talk!](#),

### ➔ Gauss-on-Gaussino

- ➔ new version of LHCb simulation framework,
- ➔ based on Gaussino's core functionalities,
- ➔ adds LHCb-specific components and configurations,

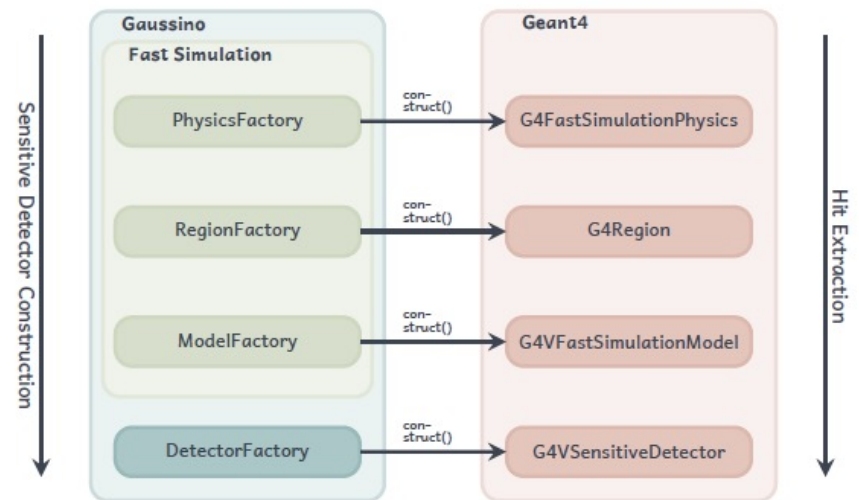
# Gaussino ( 1 )

## ► Interfacing ~~fast simulations~~ *custom physics* with G4



1. Where?
  - ✓ region where the fast simulation takes place
2. What?
  - ✓ what types of particles should be tracked
3. How?
  - ✓ conditions when to fast simulate,
  - ✓ fast hit generation algorithm,

## ➔ high-level configuration available!



# Gaussino ( 2 )

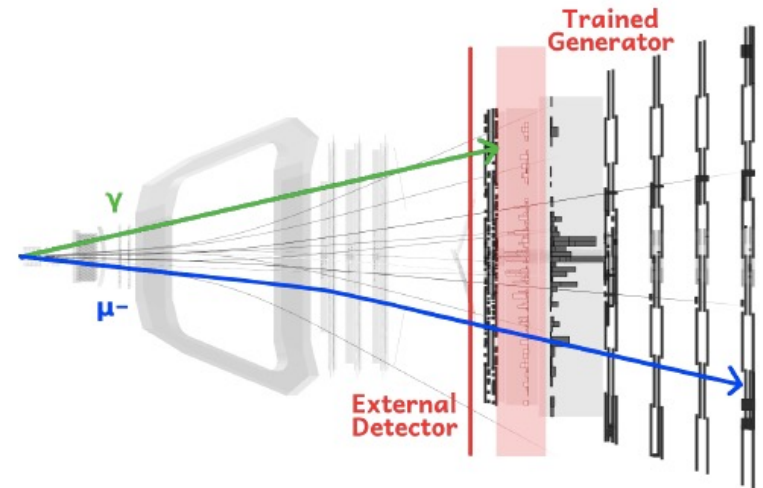
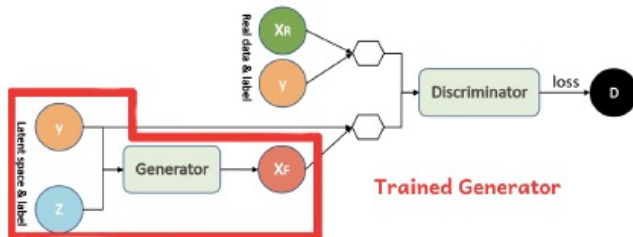
## Machine learning in fast simulations

LHCb-FIGURE-2021-004

### (Example) Generative Adversarial Networks

Idea: use GANs trained on the data produced by a detailed simulation to generate showers in ECAL

use the trained generator of the network as a fast simulation model



interface to machine learning libraries needed!

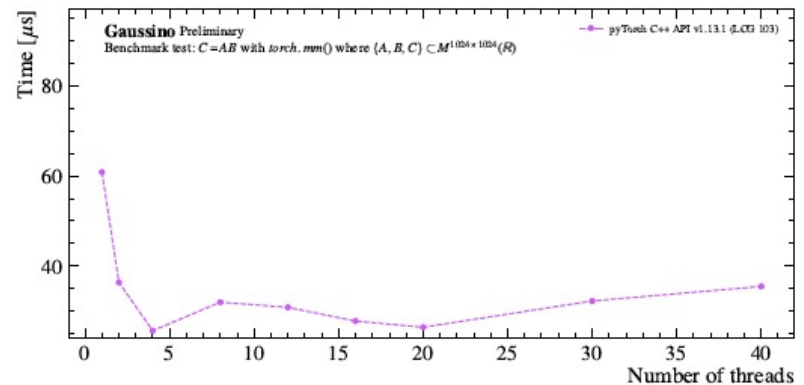
# Gaussino ( 3 )

## ► Generic ML interface

LHCB-FIGURE-2023-010

- 👉 **ML model serving** using Gaudi's services,
  - 👉 handles loading of the model,
  - 👉 model accessible throughout the whole execution,
  - 👉 setting general properties:
    - 👉 threads no. in inter-op parallelism,
    - 👉 threads no. in intra-op parallelism,
- 👉 **ML model evaluation** using Gaudi's tools and algorithms,
  - 👉 pass the random generator seed to guarantee reproducibility,
  - 👉 fixed or automatic types for inputs & outputs,

- 👉 first candidate: **pyTorch C++ API**,
- 👉 preliminary throughput tests:



# Gaussino ( 4 )

## ► ML inference in fast simulations

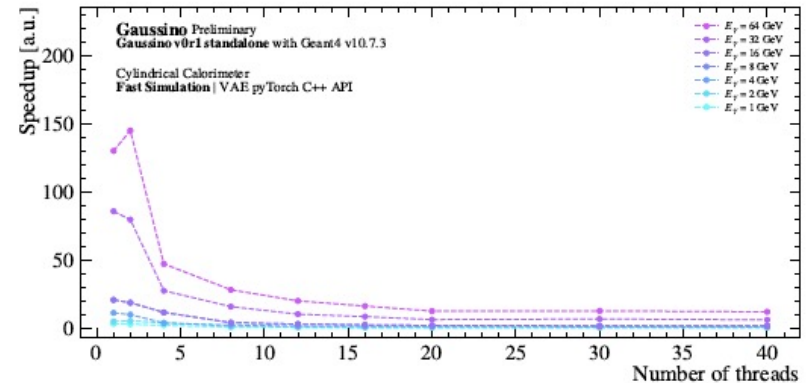
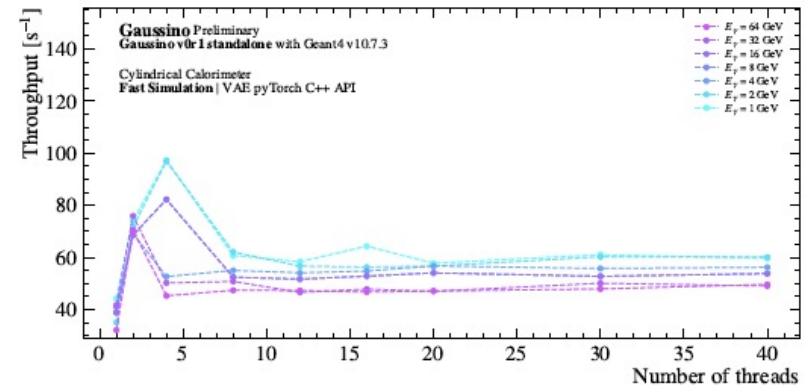
Geant4/ML4SIM & LHCb-FIGURE-2023-010

### 2 possibilities for ML inference

- 1 internally in Geant4,
- 2 in a Gaudi algorithm after the simulation algorithm takes place,

### First benchmarks

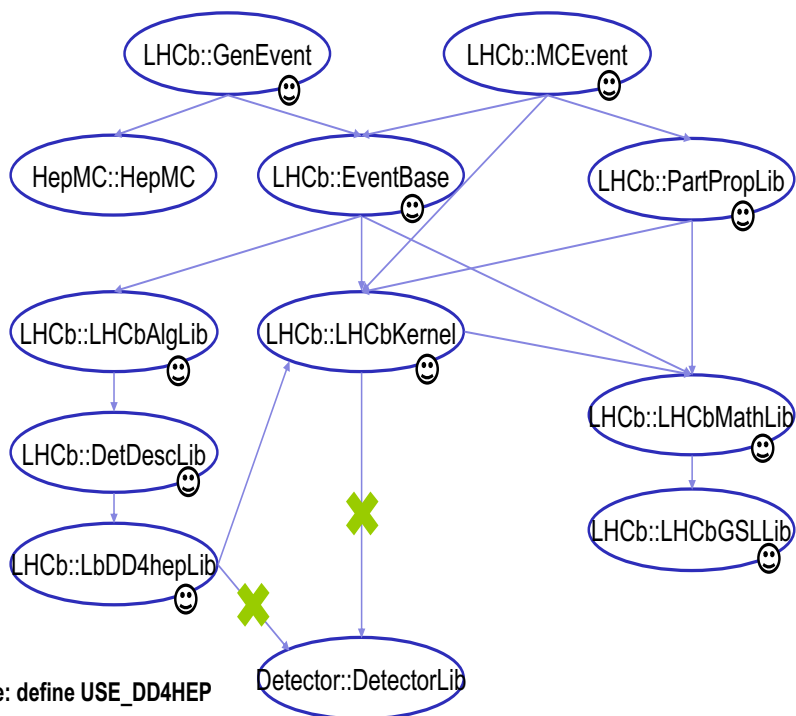
- 👉 in a close collaboration with **Geant4/ML4Sim**,
- 👉 compatible with the **CaloChallenge** setup,
- 👉 generic cylindrical calorimeter setup,
- 👉 variational autoencoder for photons,
- 👉 Gaussino's interface to pyTorch C++ API,



[10/15]

# 进行中：Gaussino在CEPC的应用

- ❖ Gaussino代码仍然与LHCb耦合，因此需要解决Gaussino对LHCb代码的依赖。
- ❖ 在CEPC的临时方案：将Gaussino作为黑箱使用，但减弱Gaussino对LHCb的依赖关系。



Note: define USE\_DD4HEP

From Graeme A Stewart  
To 林韬  
Subject Re: Building Gaussino using LCG 103 instead of LbEnv  
2023/6/5 17:21

Hi Tao

This is very useful - thanks for the update and all of the links. I have started working on this myself, last week, and I am doing the complimentary work of removing, slowly, the LHCb dependencies. At the moment the next step is taking the particle properties service that is in LHCb and adding it instead to Gaudi.

I now realise that I didn't check this in for a while and the code is on my old laptop. So I will send a link to that later.

Cheers

Graeme

# 总结和展望

---

- ❖ 模拟框架是离线数据处理软件的重要环节。
  - 应用场景：探测器设计、重建算法、物理性能研究。
  - 核心要素：数据模型、产生子接口、探测器接口、几何、MC Truth。
- ❖ 以 BES3、JUNO、CEPC为例，回顾了国内模拟框架的发展经历。
  - BES3：明确研究方向，确定技术路线
  - JUNO：针对中微子实验，进一步发展
  - CEPC：与国际接轨，发展更加通用的框架
- ❖ AI/ML是新的契机，Gaussino是目前研究的重点。
  - 更加通用的Gaussino将为新方法的发展提供更好的平台。

# 经验和思考

- ❖ 在BOSS、JUNOSW、CEPCSW研制了模拟框架，深入参与国际合作Key4hep项目、开展对Gaussino框架的研究。
- ❖ 经验一：复用代码，站在巨人的肩膀上
  - 不同实验模拟框架的核心思想是相同的。
  - 构建公共模块，减少实验模拟软件的维护成本。
- ❖ 经验二：求同存异，保持可扩展性
  - 实验需求、底层技术不同，模拟框架的实现并不完全相同。
  - 提供接口用于扩展实验的需求。
- ❖ 经验三：庖丁解牛，注重基础
  - 只有深入理解模拟流程以及核心代码，才能不断完善和提升模拟框架，支持来自实验、物理的不同需求。

谢谢！