



## Schlussbericht

Verbund: 05H2018 - Ausbau von ATLAS am LHC

Zuwendungsempfänger: Georg-August-Universität Göttingen  
 Projektleitung: Prof. Dr. Steffen Schumann  
 E-Mail: steffen.schumann@phys.uni-goettingen.de  
 Förderkennzeichen: 05H18MGCA1  
 Förderzeitraum: 01.07.2018 - 30.06.2021  
 Zuwendung: 128.809,87 €  
 Projektträger: Projektträger DESY

Zusätzlicher Kontakt:  
 Zusätzlicher Name:

Genutzte Großgeräte:	Labor	Gerät	Experiment
	Elementarteilchenphysik		Theorie
Diplomarbeiten:			
Dissertationen:	1		
Habilitationen:			
Referierte Publikationen:	11		
Andere Veröffentlichungen:	4		
Patente:			
Bachelorarbeiten:	5		
Masterarbeiten:	7		
Staatsexamen:			

Dieser Bericht wurde beim Projektträger über einen individuellen Online-Zugang vom Projektleiter eingereicht und am 20.12.2021 14:19 für eine Veröffentlichung freigegeben.

## **Schlussbericht**

Zuwendungsempfänger: Georg-August-Universität Göttingen

Projektleitung: Prof. Dr. Steffen Schumann

Verbund: ErUM-FSP T02 - Ausbau von ATLAS am LHC

Thema: Weiterentwicklung des Ereignisgenerators SHERPA

Förderperiode: 01.07.2018 – 30.06.2021

## **Vorbemerkung**

Das hier beschriebene Vorhaben wurde im Rahmen des ATLAS-Verbunds und Forschungsschwerpunkts durchgeführt. Als theoretisches Teilprojekt unterstützt es die Arbeiten der experimentell arbeitenden Gruppen durch Bereitstellung, Weiterentwicklung und Anpassung des Ereignisgenerators SHERPA, welcher umfangreich in der Analyse von Daten der LHC Experimente, und insbesondere in ATLAS, Verwendung findet. Begleitend dazu wurden die theoretischen Methoden zielgerichtet weiterentwickelt und verbessert, was noch detailliertere und präzisere Vorhersagen ermöglicht.

Neben seiner Rolle als Standardwerkzeug der LHC Experimente, wird SHERPA auch in der Theorie-Kommunität umfangreich genutzt. Es hat sich in der Berichtszeit zu einer Entwicklungsplattform für neuartige theoretische Methoden und Algorithmen geformt. Dies umfasst neuartige Techniken zum Sampling von Phasenräumen, basierend auf maschinellem Lernen, und semi-analytische Methoden zur exakten Resummation von Effekten weicher Gluonabstrahlungen.

## Bericht

### 1 Aufgabenstellung und Voraussetzungen

Die Interpretationen von LHC Kollisionseignisse machen präzise theoretische Vorhersagen, insbesondere in Form von Monte-Carlo Simulationen, unverzichtbar. Deren stetige Weiterentwicklung, kontinuierliche Verbesserung sowie zeitnahe Anpassung an neueste theoretische Erkenntnisse ist dabei essentiell. Im Berichtszeitraum wurde der Ereignisgenerator SHERPA maßgeblich weiterentwickelt. Drei hauptsächliche Themenfelder wurden dabei bearbeitet.

### 2 Wissenschaftlicher und technischer Stand, an den angeknüpft wurde

SHERPA ist ein OpenSource Softwarepaket, welches die vollständige Simulation von individuellen Streueignissen zum Ziel hat. Dabei beschreibt es sowohl perturbative, als auch nicht-perturbative Aspekte der Entwicklung der Ereignisse. Eine besondere Stärke von SHERPA ist dabei die automatische Berücksichtigung von exakten NLO QCD Korrekturen in Partonschauer-Simulationen. Diese sollte systematisch um elektroschwache Beiträge erweitert werden. Weiterhin galt es, die Einsatzfähigkeit von SHERPA zu verbreitern und die Effizienz in der Ereigniserzeugung zu verbessern.

### 3 Planung und Ablauf des Vorhabens sowie Kooperation mit Dritten

Die Bearbeitung der Arbeitspakete entsprach im Wesentlichen der Planung und folgte weitgehend den angedachten zeitlichen Reihenfolgen. Der Aspekt der Inkludierung elektroschwacher Splittingfunktionen in den SHERPA Partonschauer wurde durch die Behandlung mittels der Methode der Soft-Photon-Resummation nach Yennie-Frautschi-Suura (YFS) bearbeitet.

1) Hauptaugenmerk lag auf der methodischen Weiterentwicklung der Berechnung und Inkludierung von elektroschwachen Quantenkorrekturen in vollständige Simulationen von LHC Streueignissen. Während die Automatisierung der Berechnung von Einschleifenkorrekturen, insbesondere durch ein spezifisches Interface zum RECOLA Code (entwickelt in der AG Denner, Universität Würzburg), in der vergangenen Förderperiode erreicht wurde, können derartige Korrekturen nun auch in Partonschauer-Simulationen konsistent berücksichtigt werden. Hierbei approximieren wir die kompletten Korrekturen durch die virtuellen, bzw. Einschleifen-, Beiträge. In Zusammenarbeit mit der AG Denner haben wir im Berichtszeitraum damit den wichtigen Prozess der Paarproduktion von geladenen Eichbosonen in Assoziation mit QCD Jets untersucht. Hierfür wurden NLO QCD akkurate Partonschauer-Simulationen mit elektroschwachen Korrekturen kombiniert. Die entwickelten Methoden, genannt die *virtual electroweak approximation*, wird mittlerweile standardmässig von den LHC Experimenten verwendet. Reelle Photonemissionen werden dabei konsistent mit der YFS Methode behandelt.

Als alternative Methode zur virtuellen Approximation, basierende auf den exakten Einschleifenbeiträgen, konnte durch den Göttinger Mitarbeiter, Dr. Enrico Bothmann, die automatisierte Berechnung elektroschwacher Sudakov-Logarithmen in SHERPA implementiert werden.

Nach Ablauf der Förderperiode wurde eine Anschlussarbeit zur Produktion neutraler Eichbosonpaare veröffentlicht. Diese beinhaltet auch den Vergleich zur Methode basierend auf der Sudakov-Approximation, inkl. Kombination mit Soft-Photon Resummation, bzw. der YFS-Näherung.

Im Zuge der Arbeiten zu elektroschwachen Korrekturen wurden weiterhin die kompletten Standardmodell NLO Effekte für die Dreijet-Produktion in hadronischen Kollisionen berechnet. Im Rahmen dieser erstmaligen Evaluation wurde insbesondere das Verhältnis der Drei- zu Zweijet-Produktionsrate, differentiell im Transversalimpuls des härtesten Jets untersucht, eine Variable, welche sich zur Extraktion der starken Kopplungskonstanten eignet.

2) Ein zweiter Forschungsschwerpunkt lag auf der Entwicklung neuartiger Phasenraum-Sampling Methoden, basierend auf maschinellem Lernen, relevant für die Integration und die Ereigniserzeugung von Streuprozessen. Die Verbesserung und Optimierung von Samplingmethoden sind essentiell, um die zukünftigen Herausforderungen in Bezug auf Computing-Ressourcen und Rechenzeiten bewältigen zu können. Der Fokus liegt dabei auf der Effizienzsteigerung der Ereigniserzeugung, insb. der sogenannten Unweighting-Effizienz. Als vielversprechenden Ansatz haben wir die Methode *er Normalising Flows* identifiziert. Dabei handelt es sich um bijektive-Abbildungen, genutzt zur Transformation von Phasenraumvariablen, welche durch die automatisierte Anpassung von neuronalen Netzen optimiert werden. Die erzielten Ergebnisse sind vielversprechend und weisen den Weg für zukünftige Entwicklungen des SHERPA Generators.

3) Dritte Stoßrichtung der Arbeiten war die Entwicklung einer Erweiterung des SHERPA Generators auf die semi-analytische Resummation von Soft-Gluon Korrekturen zur nächstführenden logarithmischen Ordnung, komplementär zum Partonschauer-Ansatz. Insbesondere lag dabei das Augenmerk auf nicht-trivialen Anwendungen, z.B. auf Event-Shape Observablen, Multijet Auflösungsskalen, und der Substruktur von Jets. Diese Ergebnisse dienen als wichtige Benchmarks für zukünftige Weiterentwicklungen des SHERPA Partonschauers, und für den Vergleich mit experimentellen Daten.

## **4 Verwendung der Zuwendung**

Die Fördermittel wurden plangemäß für Personalmittel von drei am Projekt beteiligten Doktoranden eingesetzt: Stephan Bräuer, Daniel Reichelt und Simon Luca Villani. Ob der Corona-Pandemie konnten die Reisemittel, bis auf die Teilnahme eines Doktoranden (Timo Janssen) an der Maria-Laach Sommerschule 2020, Kosten von 500 Euro, nicht verausgabt werden. Teilnahmen an Konferenzen und Workshops fanden weitgehend virtuell statt.

## **5 Erzielte Ergebnisse mit Gegenüberstellung der vereinbarten Ziele**

Es wurden zentrale Methoden des SHERPA Generators weiterentwickelt und verbessert.

## **6 Notwendigkeit und Angemessenheit der geleisteten Arbeit**

Die Arbeiten waren ausgerichtet auf die gesteckten Entwicklungsziele und diesen angemessen.

## 7 Voraussichtlicher Nutzen, insbesondere Verwertbarkeit der Ergebnisse

In der Förderperiode wurden die Weiterentwicklungen des SHERPA Generators der Öffentlichkeit in Form neuer Release-Versionen als OpenSource Code zur Verfügung gestellt. Damit ist eine zeitnahe Nutzung durch die experimentellen Kollaborationen gewährleistet. Die experimentellen Kollaborationen wurden dabei unterstützt, SHERPA in ihre Produktionssoftware und Analyse-Frameworks zu implementieren, bzw. zu nutzen. Für das ATLAS Experiment ist dabei insbesondere die Zusammenarbeit mit der AG Sievert an der TU Dresden von zentraler Bedeutung. Die Arbeiten haben den Stand und die weitere Verwendung des SHERPA Generators maßgeblich gesichert und verbessert.

## 8 Während der Durchführung des Vorhabens dem Zuwendungsempfänger bekannt gewordenen Fortschritt auf dem Gebiet des Vorhabens bei anderen Stellen

Die Forschungsarbeiten fanden im Kontext und in enger Abstimmung und Kollaboration mit anderen Arbeitsgruppen in der Kommunität statt. Durch Teilnahmen an nationalen und internationalen Konferenzen und thematischen Workshops wurde fortwährend berichtet, und die entsprechenden Entwicklungen anderer Gruppen verfolgt. Bzgl. der Inklusion elektroschwacher Korrekturen in Partonschauer-Simulationen ist SHERPA international führend. Im Rahmen der POWHEG und [MadGraph5\\_aMC@NLO](#) Werkzeuge werden aktuell alternative Ansätze bzw. Implementationen verfolgt. Die Verwendung von Methoden des maschinellen Lernens zum verbesserten Sampling von Phasenräumen ist mittlerweile ein hoch aktives Forschungsfeld. Allerdings repräsentieren unsere Arbeiten aktuell die einzige Umsetzung in einem multi-purpose Ereignisgenerator.

## 9 Erfolgte und geplante Veröffentlichungen der Ergebnisse

### Journal Publikationen

- T. Alanne, D. Buarque Franzosi, M. T. Frandsen and M. Rosenlyst  
„Dark matter in (partially) composite Higgs models”  
JHEP 1812 (2018) 088
- J. Baron, S. Marzani and V. Theeuwes  
„Soft-Drop Thrust”  
JHEP 1808 (2018) 105
- M. Reyer, M. Schönherr and S. Schumann  
„Full NLO corrections to 3-jet production and  $R_{32}$  at the LHC”  
Eur. Phys. J. C 79 (2019) no.4, 321
- E. Bothmann, S. Schumann et al.  
„Event Generation with Sherpa 2.2”  
SciPost Phys. 7 (2019) no.3, 034
- S. Marzani, D. Reichelt, S. Schumann, G. Soyez and V. Theeuwes  
„Fitting the Strong Coupling Constant with Soft-Drop Thrust”  
JHEP 11 (2019), 179

- N. Baberuxki, C. T. Preuss, D. Reichelt and S. Schumann  
"Resummed predictions for jet-resolution scales in multijet production in e+e-annihilation"  
JHEP 04 (2020), 112
- J. Baron, D. Reichelt, N. Schwanemann, S. Schumann, V. Theeuwes  
„Soft-drop Grooming Hadronic Event Shapes“  
JHEP 07 (2021), 142
- E. Bothmann, T. Janssen, M. Knobbe, T. Schmale and S. Schumann  
„Exploring phase space with Neural Importance Sampling“  
SciPost Phys. 8 (2020) no.4, 069
- S. Bräuer, A. Denner, M. Pellen, M. Schönherr and S. Schumann  
„Fixed-order and merged parton-shower predictions for WW and WWj production at the LHC including NLO QCD and EW corrections“  
JHEP 10 (2020), 159
- E. Bothmann and D. Napoletano  
„Automated evaluation of electroweak Sudakov logarithms in Sherpa“  
Eur. Phys. J. C 80 (2020) no.11, 1024
- S. Caletti, O. Fedkevych, S. Marzani, D. Reichelt, S. Schumann, G. Soyez and V. Theeuwes  
„Jet angularities in Z+jet production at the LHC“  
JHEP 07 (2021), 076

### Konferenzbeiträge/Preprints

- S. Schumann in J. R. Andersen et al., in Proceedings of Les Houches 2017: Physics at TeV Colliders Standard Model Working Group Report", arXiv:1803.07977 [hep-ph].
- S. Bräuer et al. in J. R. Andersen et al., in Proceedings of Les Houches 2017: Physics at TeV Colliders Standard Model Working Group Report", arXiv:1803.07977 [hep-ph].
- A. Buckley et al. „Monte Carlo event generators for high energy particle physics event simulation" arXiv:1902.01674 [hep-ph]
- E. Bothmann, T. Janssen, M. Knobbe, T. Schmale, S. Schumann  
„Applying Neural Importance Sampling to Gluon Scattering“  
PoS LHCP2020 (2021) 056 [Proceedings LHCP2020 Konferenz]
- E. Bothmann, D. Napoletano, M. Schönherr, S. Schumann and S. L. Villani  
„Higher-order EW corrections in  $\$ZZ\$$  and  $\$ZZj\$$  production at the LHC“  
arXiv:2111.13453 [hep-ph]
- K. Danziger, T. Janssen, S. Schumann and F. Siegert  
„Accelerating Monte Carlo event generation -- rejection sampling using neural network event-weight estimates“  
arXiv:2109.11964 [hep-ph]
- D. Reichelt, S. Caletti, O. Fedkevych, S. Marzani, S. Schumann, G. Soyez  
„Phenomenology of jet angularities at the LHC“  
arXiv:2112.09545 [hep-ph]

## Bachelorarbeiten

- Niklas Euler: „Investigation of angular correlations in Drell-Yan lepton-pair production at the LHC“ (2018)
- Karsten Stasieniuk: „Monte Carlo methods for phase space integration of scattering processes“ (2018)
- Mathis Gerdes: „Using Hamiltonian Monte Carlo Techniques for Phase Space Sampling“ (2018)
- Niklas Schwanemann: „Groomed event shape variables in electron-positron annihilation“ (2019)
- Tobias Schmale: „Phase space sampling using neural network techniques“ (2019)

## Masterarbeiten

- Max Reyer: “Electroweak Next-to-Leading Order Corrections to Jet Production at the LHC” (2018)
- Silke Möbius: “QCD and electroweak corrections to angular coefficients in lepton pair production at the LHC” (2018)
- Christian Preuss: “The Effect of Soft Gluon Radiation on the Colour Structure of Multi-Parton Processes” (2018)
- Timo Janssen: „New sampling algorithms for high energy physics simulations“ (2019)
- Nick Baberuxki: „QCD Resummed Predictions for Jet-Resolution Scales“ (2020)
- Max Knobbe: „Machine Learning Methods for Phase Space Sampling“ (2020)
- Niklas Schwanemann: “Resummation of kt-jet rates in jet associated Drell-Yan production” (2021)

## Doktorarbeiten

- Daniel Reichelt: „Predictions to all orders in perturbative quantum chromodynamics for high energy collider experiments“ (September 2021)

Erstellt durch: Prof. Dr. Steffen Schumann

Datum: 20.12.2021

## Kurzbericht

- öffentlich -

Zuwendungsempfänger: Georg-August-Universität Göttingen

Projektleitung: Prof. Dr. Steffen Schumann

Verbund: ErUM-FSP T02 – Ausbau von ATLAS am LHC

Thema: Weiterentwicklung des Ereignisgenerators SHERPA

### 1. Ziel und Inhalt des Projektes

Ziel des Projektes war die gezielte Weiterentwicklung und Verbesserung des SHERPA Ereignisgenerators. Hauptaugenmerk lag dabei auf der Inkludierung elektroschwacher Korrekturen in Partonschauer-Simulationen von Streuprozessen am Large Hadron Collider. Dies ermöglicht eine Steigerung der Präzision der theoretischen Vorhersagen insbesondere für Standardmodell-Prozesse.

Weiterhin umfasste das Projekt die Entwicklung und Untersuchung von Methoden zur Effizienzsteigerung in der Ereigniserzeugung unter Verwendung von Techniken des maschinellen Lernens. Desweiteren wurde SHERPA zu einer Plattform zur Berechnung analytischer Vorhersagen im Rahmen der Resummation weicher Gluonabstrahlungen entwickelt. In diesem Rahmen wurden zahlreiche Anwendungen für Event-Shape und Jet-Substruktur Observablen studiert.

### 2. Ablauf und Ergebnisse des Vorhabens

Im Rahmen des Projektes wurde die *virtuelle Approximation* elektroschwacher Einschleifenkorrekturen systematisch erweitert und auf die Referenzprozesse der Eichboson-Paarproduktion angewandt. Dies ermöglicht die Beschreibung der entsprechenden Prozesse, inkl. der Assoziation zusätzlicher Jets, zu nächstführender Ordnung in der starken und schwachen Wechselwirkung unter Berücksichtigung von Partonschauer-Simulationen. Reelle Photon-Abstrahlungen werden dabei im Rahmen der Soft-Photon-Approximation nach Yennie-Frautschi-Suura behandelt.

Diese Methoden wurden in einem ersten Schritt auf die Paarproduktion geladener Eichbosonen angewandt. Parallel dazu wurde als alternative Methode die elektroschwache *Sudakov Näherung* in SHERPA implementiert und validiert. In einem weiteren Schritt wurde diese dann für den Fall der Z-Boson Paarproduktion detailliert gegen die virtuelle Approximation verglichen.

Parallel wurden Untersuchungen zur Verwendung der *Normalising Flow* Technik im Sampling des Phasenraums untersucht. Diese erweisen sich als vielversprechend und sollen gezielt weiter untersucht werden. Bzgl. der *Resummation* weicher Gluonabstrahlungen wurden konkrete Vorhersagen für globale Event-Shape Variablen unter Verwendung von Soft-Drop Grooming erzielt. Weiterhin wurden Jet-Angularity Variablen untersucht und gegen Messungen des CMS Experiments verglichen.



### **3. Konkreter Nutzen sowie Anwendungsmöglichkeiten der Ergebnisse**

Die Weiterentwicklungen des SHERPA Generators wurden und werden in Form öffentlicher Releases als OpenSource Software der breiten Kommunität zugänglich gemacht. Sie finden bereits breite Anwendung in der Analyse und Interpretation der Daten der ATLAS und CMS Experimente. Die erzielten Erkenntnisse zum Potenzial von Methoden des maschinellen Lernens für das Sampling der Phasenräume von Teilchenkollisionen leiten den Weg in zukünftige Entwicklungen effizienterer Methoden der Ereigniserzeugung. Die analytischen Vorhersagen zum Einfluss von weichen Gluonabstrahlungen auf Event-Shape und Jet-Substruktur Observablen dienen einerseits der systematischen Verbesserung von Partonschauer-Simulationen, und bereiten andererseits alternative Interpretationen/Hypothesen (zukünftiger) experimenteller Messungen dieser hochinteressanten Klassen von Observablen.