

Collaborative Research Project

R&D Computing

Innovative Digitale Technologien
für die Erforschung
von Universum und Materie



Bundesministerium
für Bildung
und Forschung

KET Software and Computing
Strategy Workshop
27.09.2018

Thomas Kuhr
LMU München



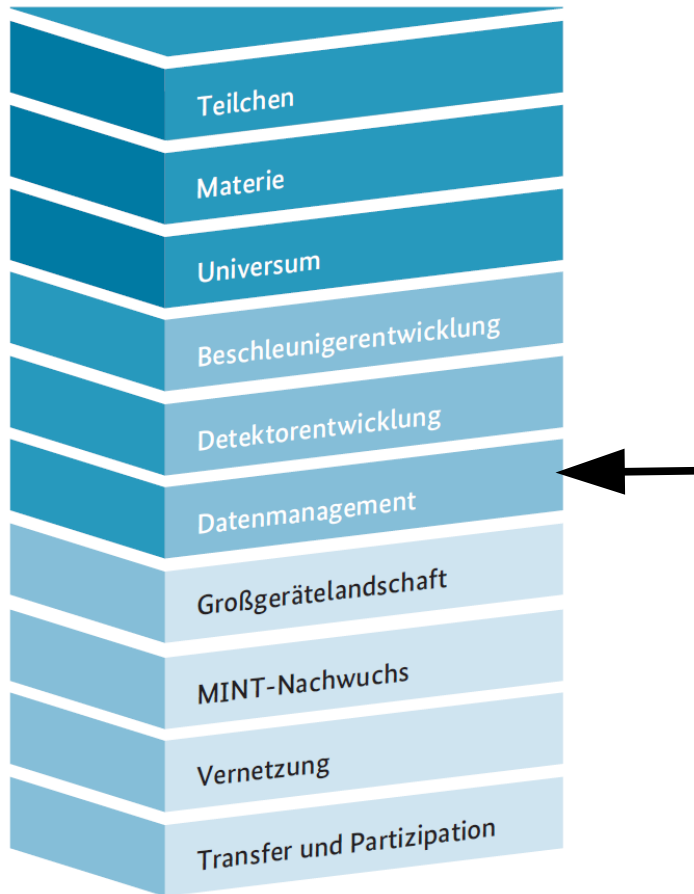
TUM



LMU

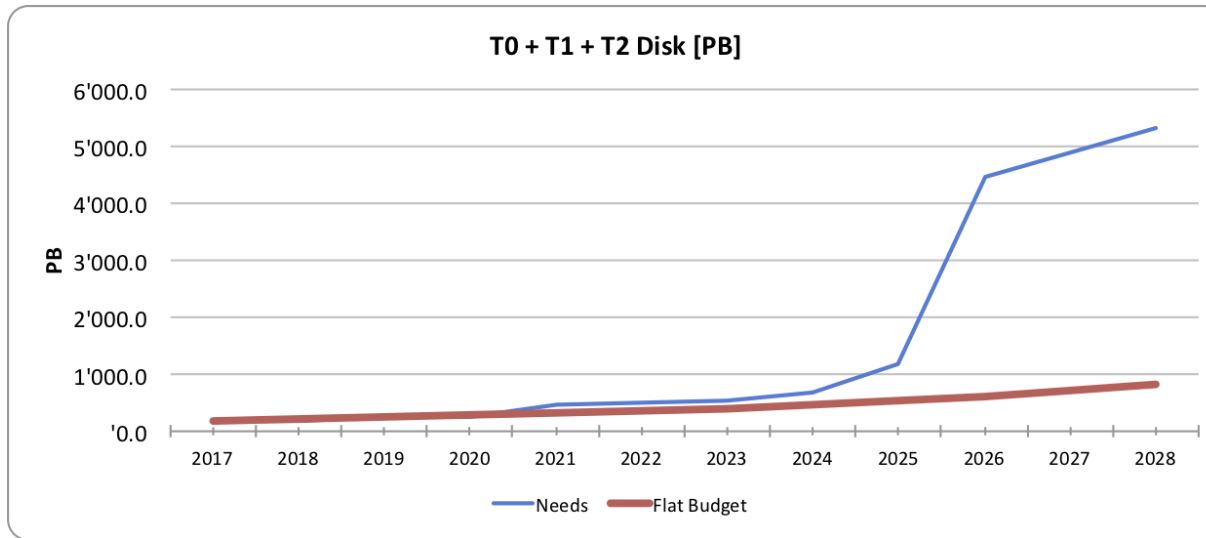
Erforschung von Universum und Materie – ErUM

Rahmenprogramm des Bundesministeriums für Bildung und Forschung

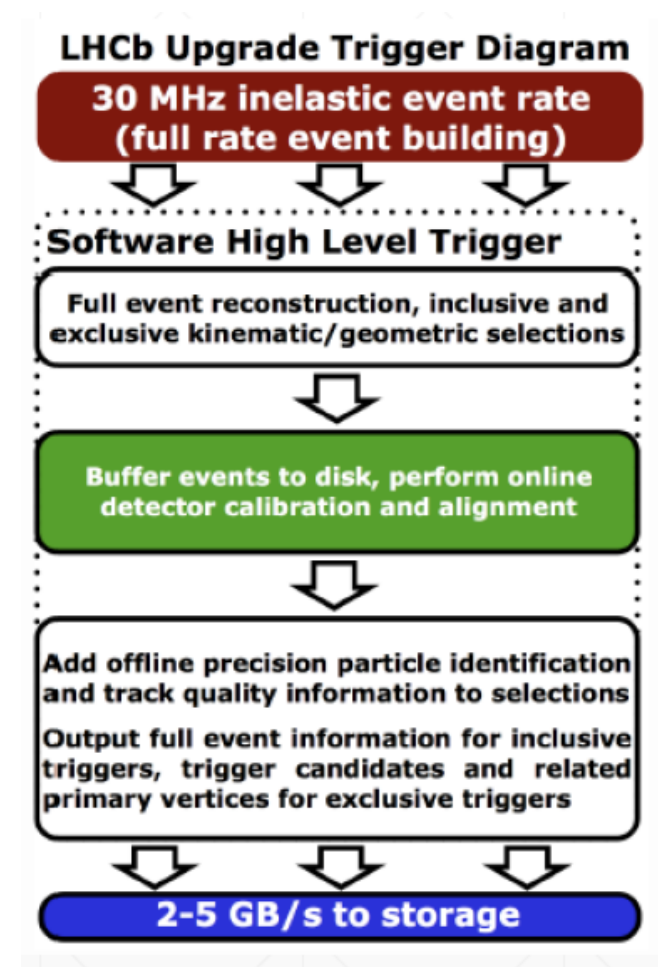


Naturwissenschaftliche Grundlagenforschung ist zentrales Einsatzfeld neuer digitaler Methoden und Techniken. Sie ist maßgeblicher Treiber für die weitere digitale Entwicklung. Steigendem Berechnungsaufwand und komplexem Datenmanagement wird mit standortübergreifenden Arbeitstechniken und der Beseitigung technologischer Flaschenhälse begegnet. Offener Zugang und langfristige Datenhaltung müssen dabei auch in Zukunft die Anforderungen und Spezifika der verschiedenen Forschungsinfrastrukturen berücksichtigen. Der wissenschaftliche Nachwuchs baut im Bereich Datenmanagement eine einzigartige Expertise auf. In Zukunft können auf Basis des Know-hows aus der Grundlagenforschung neue Dienstleistungen und ganzheitliche Lösungen entstehen.

Challenges: Data Volumes/Rates



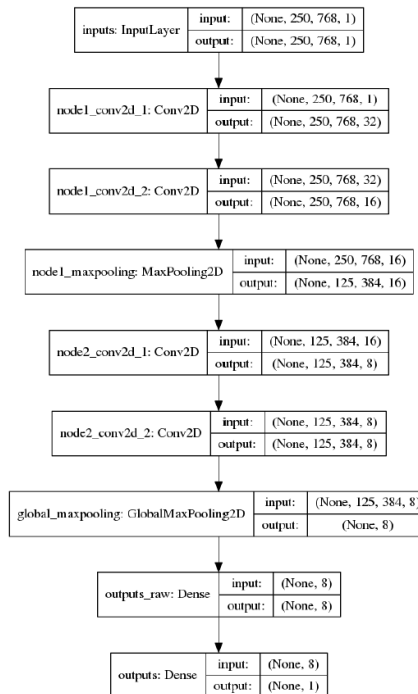
- HL-LHC resource estimates factors above flat budget scenario
- ALICE & LHCb: Triggerless readout in Run 3
- Belle II: 50x more data than Belle
- FAIR: 30 PB per year, 300.000 CPU cores
- CTA: several 10 PB per year



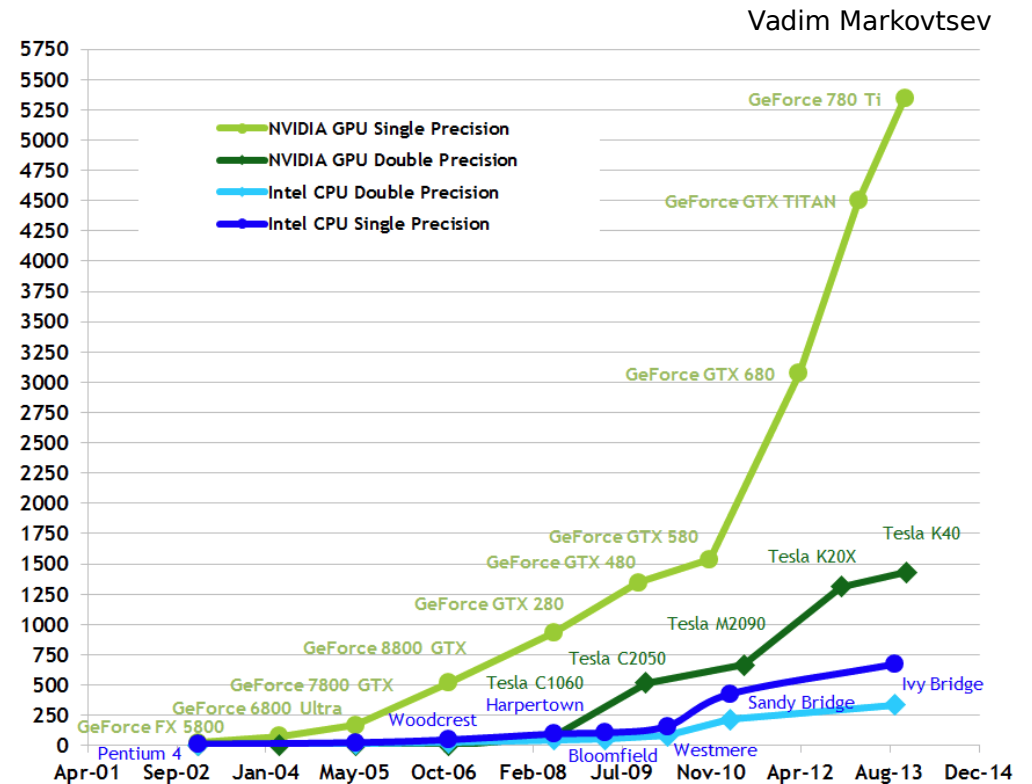
Challenges: Technological Evolution

And opportunities:

- Multicore machines
- GPUs
- SSDs
- Virtualization
- Machine Learning
- ...



Theoretical GFLOP/s



Approach:

→ Find common solutions

Improvements in software efficiency, scalability and performance

arXiv:1712.06982

The bulk of CPU cycles consumed by experiments relate to the fundamental challenges of simulation and **reconstruction**. Thus, the work programmes in these areas, together with the frameworks that support them, are of critical importance. The sheer volumes of data involved make research into appropriate data formats and event content to reduce storage requirements vital. Optimisation of our distributed computing systems, including **data and workload management** is paramount.

→ Expertise
at several
German
Institutes

Enable new approaches that can radically extend physics reach

New techniques in simulation and reconstruction will be vital here. Physics analysis is an area where new ideas can be particularly fruitful. Exploring the full potential of **machine learning** is one common theme that underpins many new approaches and the community should endeavour to share knowledge widely across subdomains. New data analysis paradigms coming from the Big Data industry, based on innovative parallelised data processing on large computing farms, could transform data analysis.

Ensure the long-term sustainability of the software

Project Partners

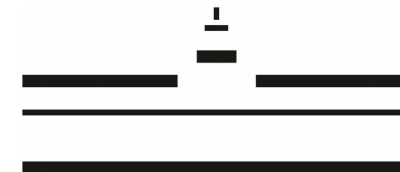


JOHANNES GUTENBERG
UNIVERSITÄT MAINZ

Universität Hamburg
ER FORSCHUNG | DER LEHRE | DER BILDUNG

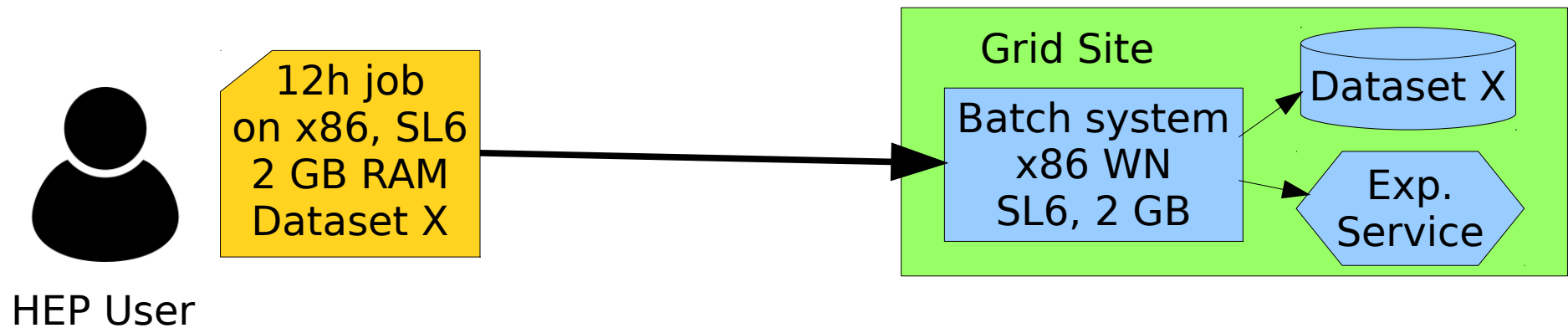


JÜLICH
FORSCHUNGSZENTRUM

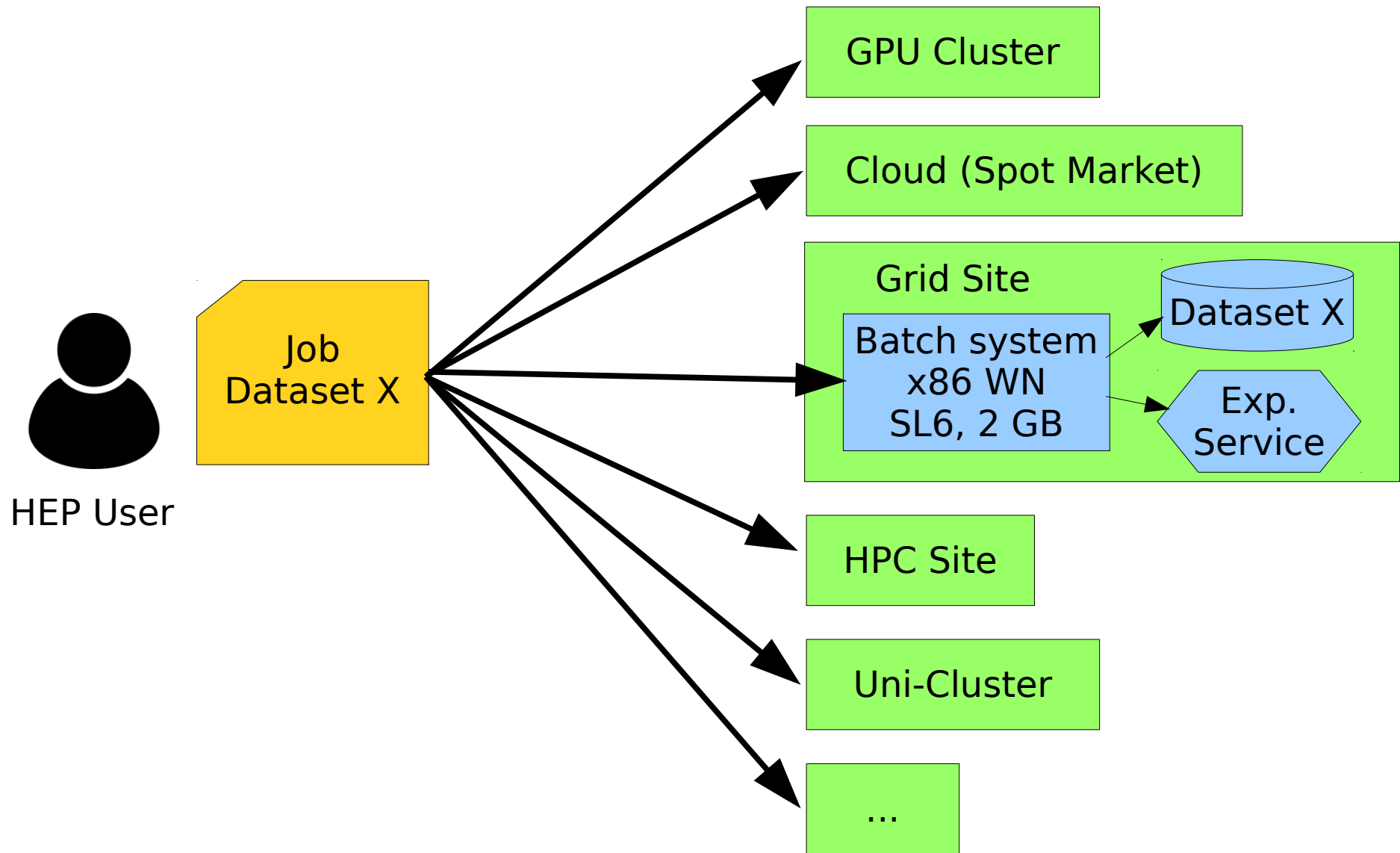


WESTFÄLISCHE
WILHELMS-UNIVERSITÄT
MÜNSTER

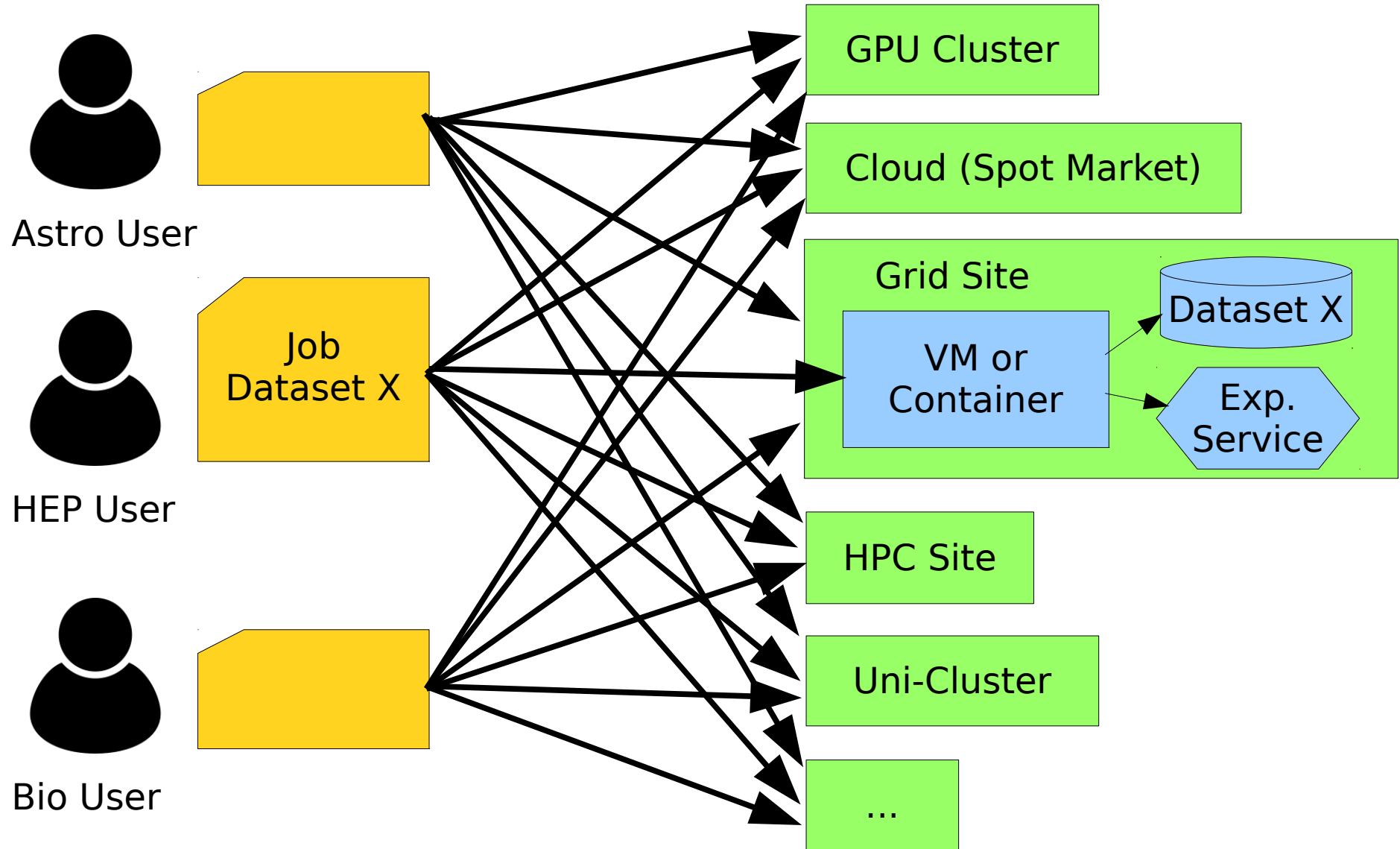
HEP Computing Today



HEP Computing Tomorrow



Scientific Computing Vision



Subject Area A

- Developments for the provision of technologies for the use of heterogeneous computing resources

Item 1
of
strategy
document

A1) Werkzeuge zur Einbindung <ul style="list-style-type: none">• Scheduling von Cloud-Jobs• Container-Technologien• Checkpointing• Zugang zu Experiment-Datenbanken	A2) Effiziente Nutzung <ul style="list-style-type: none">• Transiente Datencaches• Transparenter Zugriff auf verteilte Daten
A3) Workflow-Steuerung <ul style="list-style-type: none">• Identifikation und Steuerung• In-Pilot Job-Monitoring• Accounting• Optimierung durch Data-Mining	

Subject Area B

- Application and test of virtualized software components in the environment of heterogeneous computing resources

Item 1
of
strategy
document

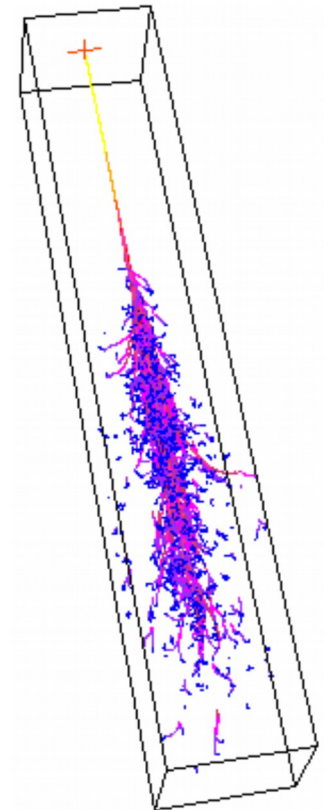
B1) Tests der Technologiekomponenten Implementierung und Tests auf verschiedenen Plattformen von <ul style="list-style-type: none">• Speicher- und Cachinglösungen und• virtualisierter Dienste (Datenbanken, Monitoring, Accounting).	B2) Job- und Ressourcenmanagement Jobverteilung und Überwachung in der Umgebung heterogener Computingressourcen unter Einbeziehung von Containervirtualisierung.
B3) Virtualisierung von Nutzerjobs <ul style="list-style-type: none">• Erfassung der Anforderungen,• Bestimmung und Erzeugung der Laufzeitumgebung,• Erstellung des Containers und von Metadaten und• Checkpointing von Containervirtualisierung.	B4) Kombinierte Tests Testen von Gesamtsystemen (Speicher, Dienste, Ressourcenmanagement) auf verschiedenen Plattformen in Bezug auf <ul style="list-style-type: none">• Installations- und Wartungsaufwand,• Performance,• Skalierbarkeit und• Robustheit.

Subject Area C

- Deep Learning, Gain of knowledge by substantiated data-driven methods

Item 2 of strategy paper

C1) Sensornahe Verarbeitung von Daten <ul style="list-style-type: none">• Signalfilter, Rauschunterdrückung• Verarbeitung von zeitabhängigen Signalen	C2) Objektrekonstruktion <ul style="list-style-type: none">• Spur- und Clusterrekonstruktion, Jetbildung, Ereignisrekonstruktion• Fragestellungen für Anordnung, Reihenfolge, Zuordnungen von Daten• Optimierungen zur Extraktion kleiner Signale bei großem Untergrund
C3) Netzwerkbeschleunigte Simulationen <ul style="list-style-type: none">• Generative adversarial networks, Anpassung von Simulationen an Datenverteilungen• Evaluationsverfahren für die Qualität der Netzwerksimulationen	C4) Qualität von Netzwerkvorhersagen <ul style="list-style-type: none">• Reduzierung experimenteller systematischer Unsicherheiten• Spezielle Lernstrategien• Vorhersagenrelevante Information• Unsicherheiten von Vorhersagen



Subject Area D

- Event reconstruction: Cost- and energy-efficient use of computing resources

Item 2
of
strategy
document

D1) Spurfindung

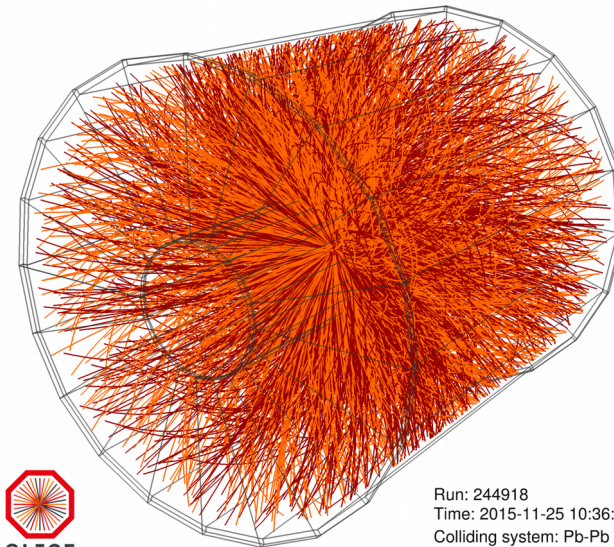
- alternative Algorithmen, z.B. zellulärer Automat
- alternative Architekturen, z.B. GPUs

D2) Parameterbestimmung

- Verknüpfung GenFit2-ACTS

D3) Neutrinoexperimente

- dünnbesetzte Detektorinstrumentierung
- variable Signalzeit als kritische Information



Overview Work Packages

Institute	Experiments	A1	A2	A3	B1	B2	B3	B4	C1	C2	C3	C4	D1	D2	D3
Aachen	CMS, Auger, ν -Exp.								X			X	X		X
Erlangen	CTA, IceCube									X		X			
Frankfurt	ALICE, CBM	X	X	X	X			X					X		
Freiburg	ATLAS	X	X	X		X		X							
Hamburg	CMS									X		X			
Karlsruhe	CMS, Belle II, Auger	X	X	X							X			X	
Mainz	ATLAS								X	X					
München	ATLAS, Belle II		X	X	X		X	X			X				
Wuppertal	ATLAS	X		X	X		X	X							
<i>Associated</i>															
CERN	ATLAS							X		X			X	X	
DESY	(ILC in WP D2)		X					X						X	
GridKa								X							
GSI		X	X					X							
Jülich	Panda													X	
Münster	ALICE, CBM									X	X				

Summary

- Particle physics, hadron and nuclear physics, and astro particle physics face similar huge technological challenges
 - Vast increase of data volumes
 - Evolution of technologies
- Expertise in key areas available at several German institutes
- ➔ Bundling of expertise in collaborative research project with partners from particle, hadron and nuclear, and astro particle physics **to develop experiment overarching solutions**
- ➔ Pilot project R&D Computing funded by BMBF with ~12 FTE for three years starting October 2018

Backup

Verbundprojekt: Executive Summary

Die Erforschung der Physik der kleinsten Teilchen steht vor großen technologischen Herausforderungen. Durch die fortlaufende Verbesserung der Messinstrumente wächst die Menge der aufgezeichneten Daten deutlich stärker als der durch technologischen Fortschritt zu erwartende Zuwachs an Speicherkapazitäten. Gleiches gilt für den Bedarf an Rechenleistung, um die Daten auszuwerten. Nach dem Upgrade des LHC zu höheren Luminositäten wäre in zehn Jahren eine 60 mal größere Rechenkapazität als heute erforderlich, wenn keine Effizienzsteigerung in der Verarbeitung erreicht wird. Das Belle II-Experiment wird bis zur Mitte der nächsten Dekade eine 50 mal größere Datenmenge aufzeichnen als sein Vorgängerexperiment. Für die Speicherung und Verarbeitung der von den FAIR-Experimenten genommen Daten wird ein jährlicher Bedarf von 30 PB und 300.000 Prozessorkernen abgeschätzt. Mit dieser Herausforderung stehen die Elementarteilchen- und Hadronen- und Kernphysik nicht alleine da. In vielen Wissenschaftsbereichen gibt es ein enormes Wachstum des Datenvolumens. Als Beispiel aus der Astroteilchenphysik sei hier das Cherenkov Telescope Array (CTA) genannt, das mehrere 10 PB an Messdaten pro Jahr produzieren wird.

Eine weitere Herausforderung ergibt sich aus dem digitalen Wandel. Heute eingesetzte Technologien könnten in Zukunft durch neuere ersetzt werden. Dies gilt sowohl für Prozessorarchitekturen als auch für Speichertechnologien. Durch den technologischen Fortschritt ergeben sich allerdings auch neue Chancen, das Problem der großen Datenmengen zu lösen.

Verbundprojekt: Executive Summary

Mehrere Institute an deutschen Hochschulen und assoziierte Partner aus den Bereichen Elementarteilchenphysik, Hadronen- und Kernphysik und Astroteilchenphysik haben sich zusammengeschlossen, um die Herausforderungen gemeinsam anzugehen. Dabei haben wir enge Verbindungen zu nationalen und internationalen Initiativen wie der Helmholtz Data Federation (HDF), der Helix Nebula Science Cloud, der European Open Science Cloud und der HEP Software Foundation (HSF). Ziel des Verbundvorhabens ist die Entwicklung von experimentübergreifenden Lösungen. Entsprechend der bei den beteiligten Partnern vorhandenen Expertise konzentrieren sich unsere geplanten Arbeiten auf vier Themenbereiche.

Bisher sind die von den Experimenten der Elementarteilchen- und Hadronen- und Kernphysik genutzten Ressourcen größtenteils speziell für deren Anforderungen aufgebaut und konfiguriert. Einerseits macht diese Tatsache es schwierig, Ressourcen für eine breitere Nutzerschaft anzubieten und somit größere Synergieeffekte zu nutzen. Andererseits sind die Computing-Systeme der Experimente oft so ausgelegt, dass sie Ressourcen, die nicht den engen Anforderungen entsprechen, nicht oder nur mit großem Aufwand einbinden können. In Themenbereich **A** streben wir an, durch den Einsatz von Virtualisierungs- und Containertechnologien sowie durch neue Methoden der Datenbereitstellung die Nutzung heterogener Systeme zu vereinfachen und somit sowohl den Ressourcenprovidern als auch den Experimenten neue Möglichkeiten zu erschließen.

Verbundprojekt: Executive Summary

Die verstärkte Nutzung heterogener und opportunistischer Computingressourcen durch Virtualisierungstechnologien ist eine notwendige Vorbedingung, um für die zukünftigen Großexperimente die notwendigen Computingkapazität zu erhalten. Die Aufgaben, die sich aus der Komplexität der Anforderungen der Hochenergie-, Kern- und Astrophysik, in Bezug auf die Breite der Computingaufgaben (Rekonstruktion, Simulation, Analyse), die Daten- und Metadatenverwaltung und die benötigten Bandbreite, ergeben, sollen im Rahmen des Themenbereichs **B** durch die Kombination verschiedener Dienste und spezifischer Anpassungen gelöst werden. Das Ziel ist ein Gesamtsystem, welches die Virtualisierungstechnologien im Rahmen moderner Ressourcenmanagementsysteme nutzt, um eine größtmögliche Flexibilität zu erreichen und dieses System unter realistischen Bedingungen zu testen.

Neben der Erschließung neuer Ressourcen ist eine effizientere Nutzung ein unerlässlicher Teil zur Bewältigung der Herausforderungen. Hier können neue Technologien helfen. Ein vielversprechender Kandidat, um das Verhältnis von physikalischen Resultaten zu eingesetzten Ressourcen zu verbessern, sind tiefe neuronale Netze. Sie haben das Potential die Ressourceneffizienz von Simulations-, Rekonstruktions- und Analysealgorithmen zu verbessern bzw. mit den gegebenen Ressourcen qualitativ höherwertige Ergebnisse zu erzielen. Dieses Potential soll in Themenbereich **C** ausgelotet werden.

Ein weiterer Ansatz zur Verringerung des Ressourcenbedarfs ist die Optimierung von Algorithmen durch Ausnutzung der Fähigkeiten moderner Prozessorarchitekturen. Da solche Optimierungen oft architekturabhängig sind und somit nur mit großem Aufwand an die technologische Entwicklung anzupassen sind, ist es wichtig die Expertise auf diesem Gebiet zu bündeln.

— Dies ist die Stoßrichtung von Themenbereich **D**. —