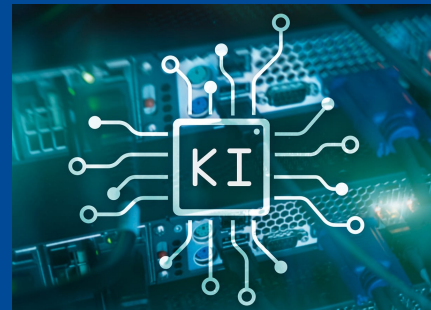


Experimentnahes Computing

Status, Herausforderungen und Bedarf



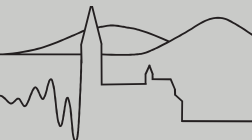
“Unverzichtbar um aus Daten neues Wissen zu generieren”

Albert-Ludwigs-Universität Freiburg

Markus Schumacher
Prisma-Strategiegelgespräch ErUM-Themengebiet „Teilchen“
DESY, Hamburg, 3. Februar 2023

Physikalisches Institut

Albert-Ludwigs-
Universität Freiburg



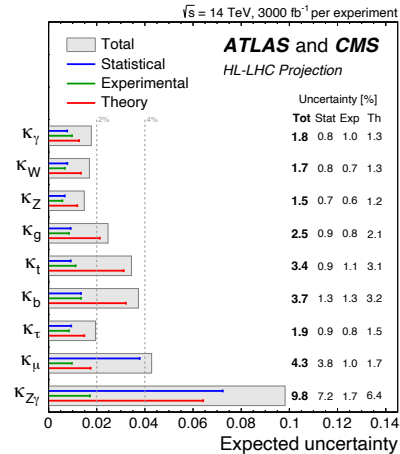
**UNI
FREIBURG**

Bedeutung von Computing und Software

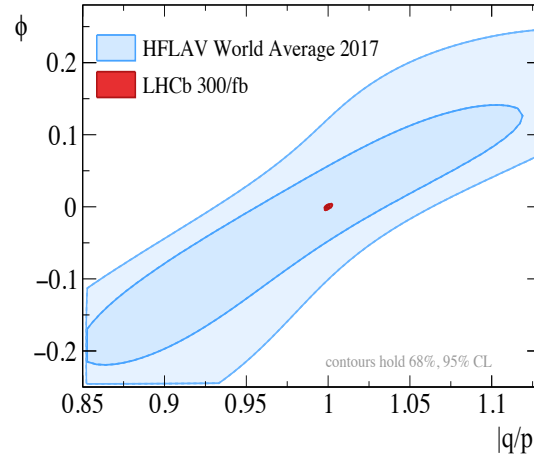
Bereitstellung und Betrieb von IT-Infrastrukturen und F&E-Arbeiten für zukünftige Herausforderungen mit noch größeren und komplexeren Datensätzen um neues Wissen zu generieren

- unabdingbar zur Ausschöpfung des großartigen Physikpotentials bei FAIR, am LHC, HL-LHC, SuperKEKB,...
- unverzichtbar um Gruppen an deutschen Instituten führende Rolle in der Datenanalyse zu ermöglichen

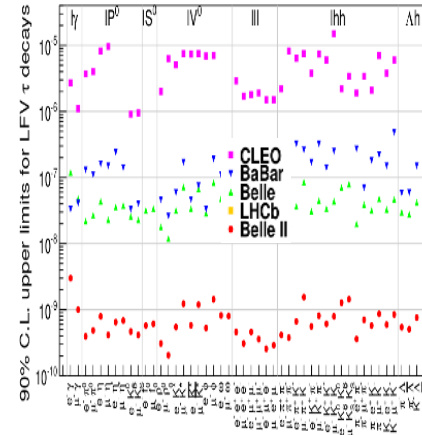
Higgs-Boson-Kopplungen



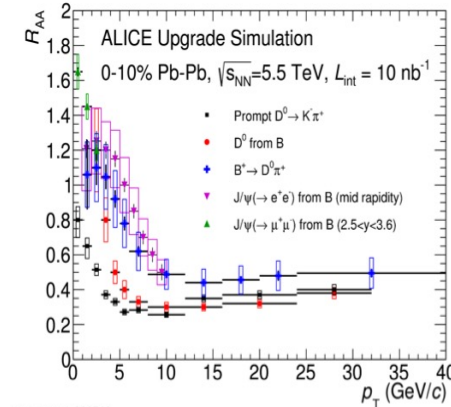
Schlüsselparameter für ind. CPV im c-Sektor



LFV τ -Lepton-Zerfälle bei Belle-2



Nuklearer Modifikations-Faktor R_{AA}



- Ausbildung des wissenschaftlichen Nachwuchses in modernsten digitalen Technologien
- Transfer des erworbenen Wissens in Industrie, Dienstleistungssektor, ...
- Weiterhin Vorreiterrolle und Ausstrahlung in andere Wissenschaftsdisziplinen

Bereitstellung der WLCG-Ressourcen (Status 2023)

Helmholtz-Zentren DESY, GSI, KIT

Tier-1-Zentrum GridKa am KIT (100% Tier-1 in D)
Tier-2-Zentren bei DESY und GSI (58% Tier2 in D)

Max-Planck-Institut für Physik München (MPP)

Tier-2-Zentrum integriert in MPCDF (7% Tier2 in D)

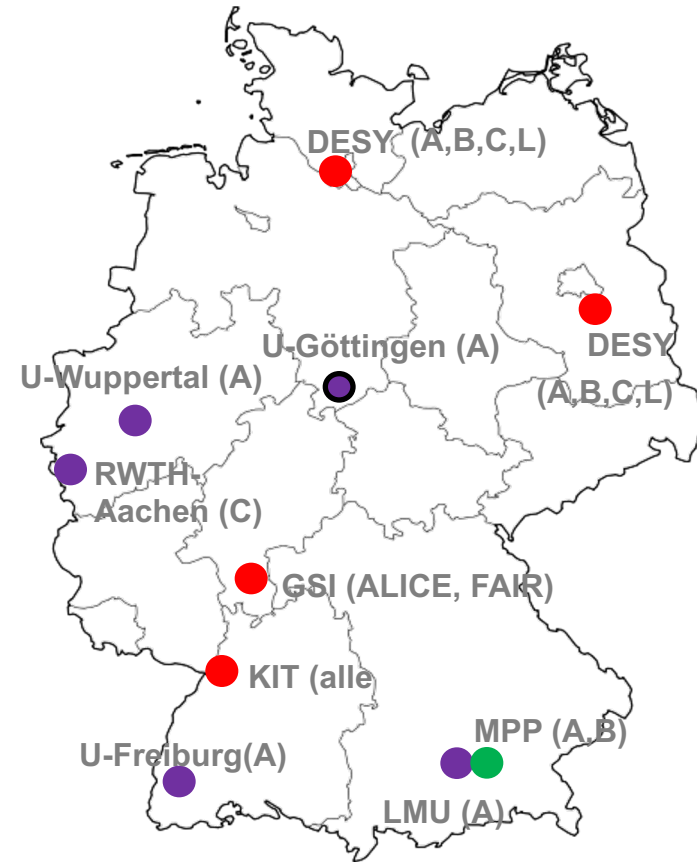
Universitäten (5 Tier-2-Zentren) (35% Tier-2 in D)

Aachen, Freiburg, Göttingen, München (LMU), Wuppertal
In FP21-24 finanziert aus ErUM-Data (750 kEuro pro Jahr)

Koordination der strategischen Entscheidungen und
Diskussion der Bereitstellung der Ressourcen im
GridKa Overview Board und Technical Advisory Board

Austausch mit anderen Wissenschaftsbereichen in ErUM
im *DIG-UM Resource Provider Board*

Ressourcen für FAIR-Experimente durch GSI bereitgestellt



A=ATLAS B=BELLE C=CMS L=LHCb

Bereitstellung der WLCG-Ressourcen (Status 2023)

Tier-1-Zentrum GridKa am KIT: 15% aller weltweiten WLCG-Tier-1-Ressourcen

(CPU 520 kHS06 Disk 53 PB Tape 121 PB (+ 56 GPUS NVIDIA V100))

GridKa-Anteil am WLCG.: ALICE 25%, ATLAS 12,5%, CMS 10%, LHCb 17% orientiert am Autorenanteil

Tier-2-Zentren: (315 kHS06 Disk 27 PB)

	Anteil am Exp.	CPU [kHS06]	Disk [PB]	Aufteilung in Deutschland [%]		
ALICE	10,2%	63	6,1	GSI 100		
ATLAS	12,5%	210	19,8	DESY 29	MPP 14	4 Unis 57
CMS	7,5%	108	8,7	DESY 66		1 Uni 34
LHCb	16,7%	20	35 TB	DESY 100		
Belle	14,0%	56	2,7	DESY 45	MPP 10	GridKa 45

Der Anteil an den Universitäten soll mittelfristig durch Ressourcen an Helmholtz-Zentren und durch Nutzung der NHR-Zentren ersetzt werden

- Anforderungen von und Zusagen (“Pledges”) an WLCG wurden immer erfüllt
- Exzellenter Betrieb für ≥ 15 Jahre mit sehr hoher Verfügbarkeit und Verlässlichkeit
- Wichtige Beiträge zu experimentspezifischer F&E in den Kollaborationen
- Beitrag der Universitäten von großer Bedeutung für Betrieb und F&E aber auch für Ausbildung und Rekrutierung von Nachwuchswissenschaftler*innen auf dem Gebiet des HPC- & HTC-Computing

Übersicht über zur Zeit geförderte Projekte

Verbund „Föderiertes Computing für die ATLAS- und CMS-Experimente am Large Hadron Collider in Run-3“

Partner: AC, FR, GÖ, HH, KA, M (LMU), W Assoziierte: DESY, KIT, MPP

- Investmittel für Hardware an 5 Universitäten Tier-2-Zentren (150 000 Euro pro Jahr und Standort)
- Personal für Betrieb der WLCG-Cloud und für experimentsspezifische F&E-Arbeiten (beantragt 14 FTE)

Weitere FTE in Standortanträgen für ALICE (3,2 FTE), Belle (0,5 FTE) und LHCb (1 FTE)

Verbund „Föderierte Digitale Infrastrukturen für die Erforschung von Universum und Materie (FIDIUM)“

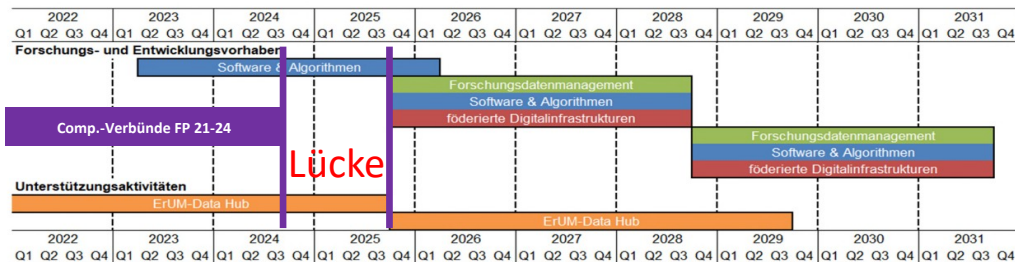
Partner: AC, BN, F (GU), FR, GÖ, HH, KA, MZ, M (LMU), W Assoziierte: CERN, DESY, GridKa, GSI

Experimentübergreifende F&E im Hinblick auf

Herausforderungen in der HL-LHC-Ära und bei FAIR (beantragt 18 FTE)



Derzeitige Förderung der beiden Verbünde von 10/2021 bis 9/2024 finanziert aus ErUM-Data-Budget



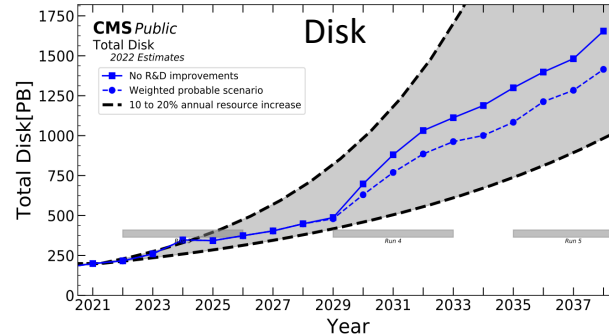
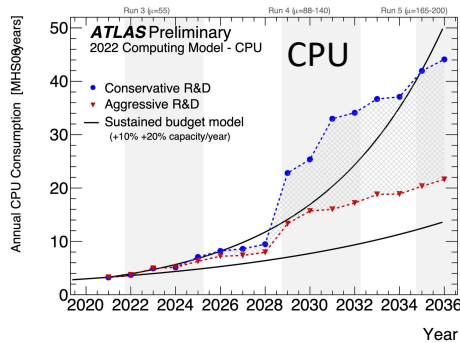
Kontinuierliche Förderung im mindestens gleichen Umfang bei Personal unerlässlich

- für erfolgreichen Betrieb der WLCG-Cloud und erfolgreiche Datenanalyse vor Run-4
- für dringend benötigte F&E-Arbeiten im Hinblick auf HL-LHC

Zeitlücke gefährdet sorgsam aufgebaute Expertise: Expert*innen könnten Feld verlassen

Ressourcenbedarf & Transformation des Computing-Modells

Höhere Speicherrate, komplexere Daten → signifikanter Anstieg der Ressourcenanforderungen am HL-LHC



Trotz F&E in Software und Computing-Modellen und technologischen Fortschritt in Hardware in “flat budget”-Szenario wahrscheinlich nicht ausreichend für HL-LHC-Ära

Bei ALICE, LHCb und Belle-2 hat der Anstieg im Ressourcenbedarf bereits begonnen

Aspekte von “Grüner IT” (Energieeffizienz, Nachhaltigkeit, ...) werden immer bedeutender

WLCG empfiehlt für zukünftige Bereitstellung der Ressourcen:

- Konzentration des Massenspeichers auf weniger Standorte (weniger Kopien, bessere QoS ...)
- Gemeinsame Nutzung von HPC-Zentren in fachdisziplinenübergreifender Anstrengung

→ Transformation der Bereitstellung der Ressourcen für WLCG in Deutschland

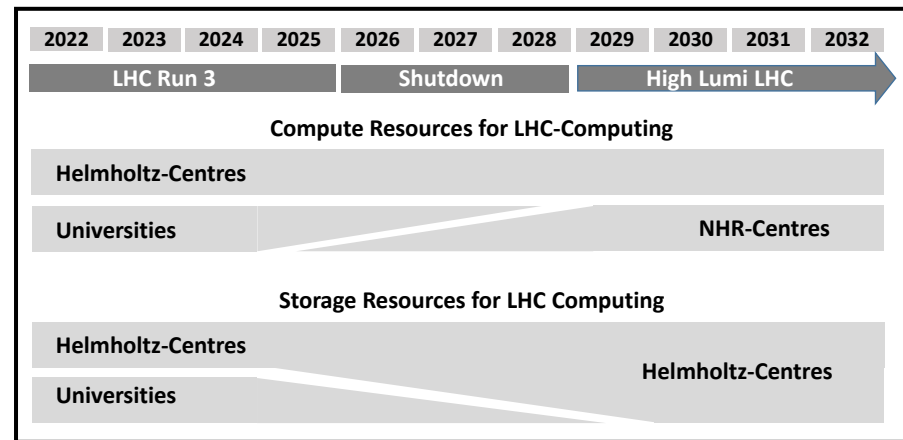
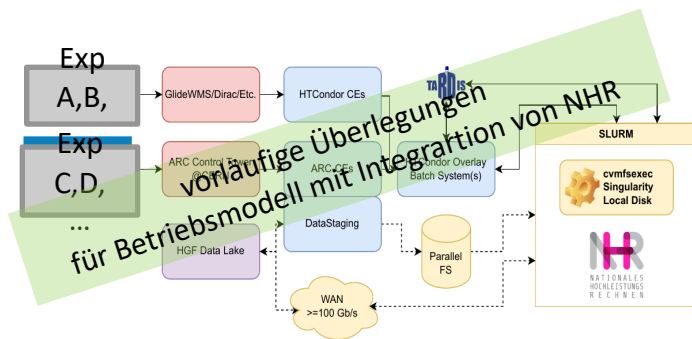
- Vergrößerung der Energie- und Ressourceneffizienz im neuen Modell
- Förderung neuer Synergien zwischen verschiedenen Wissenschaftsdisziplinen

→ Perspektivpapier von KET zur Bereitstellung der WLCG-Ressourcen in der HL-LHC Ära

https://www.ketweb.de/sites/site_ketweb/content/e199639/e312771/KET-Computing-Strategie-HL-LHC-final.pdf

Transformation der Bereitstellung der WLCG-Ressourcen

- Massenspeicher wird komplett durch Helmholtz-Zentren (DESY, GSI, KIT) und MPP bereitgestellt
- CPU-Anteil der universitären Tier-2-Zentren wird durch NHR-Zentren abgedeckt
- Experimentspezifische F&E und Betrieb der WLCG-Cloud (inkl. NHR-Nutzung) durch Uni-Gruppen an derzeitigen Tier-2-Standorten



Die vorgeschlagene Transformation bildet einen wichtigen Grundstein für ein weiterhin leistungsfähiges und gleichzeitig noch energieeffizienteres und ressourcenschonenderes LHC-Computing in Deutschland.

Übergangsperiode 2025-2028:

- vorhandene Hardware an Unis weiter betrieben
- neue Ressourcen bei DESY, KIT und NHR

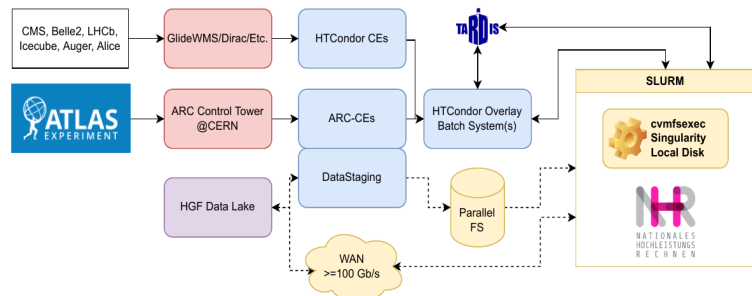
Personal wird weiterhin benötigt für:

- F&E-Arbeiten zur erfolgreichen Umsetzung der Transformation und Optimierung des Modells
- Betrieb der WLCG-Cloud und experimentspezifische Anpassungen während und nach der Transformation

Betrieb der WLCG-Cloud und experimentspezifische F&E

Ausreichendes Personal für erfolgreichen und effizienten Betrieb der WLCG-Cloud, Nutzerbetreuung und experimentspezifische Entwicklungen unverzichtbar

Kofinanziertes Personal am GridKa weiterhin von großer Bedeutung (alle LHC-Experimente und Belle-2 haben solche Stellen)



Umsetzung und Betrieb des neuen Computing-Modells inklusive Data-Lake-Konzept, Integration der NHR-Zentren in WLCG-Workflow

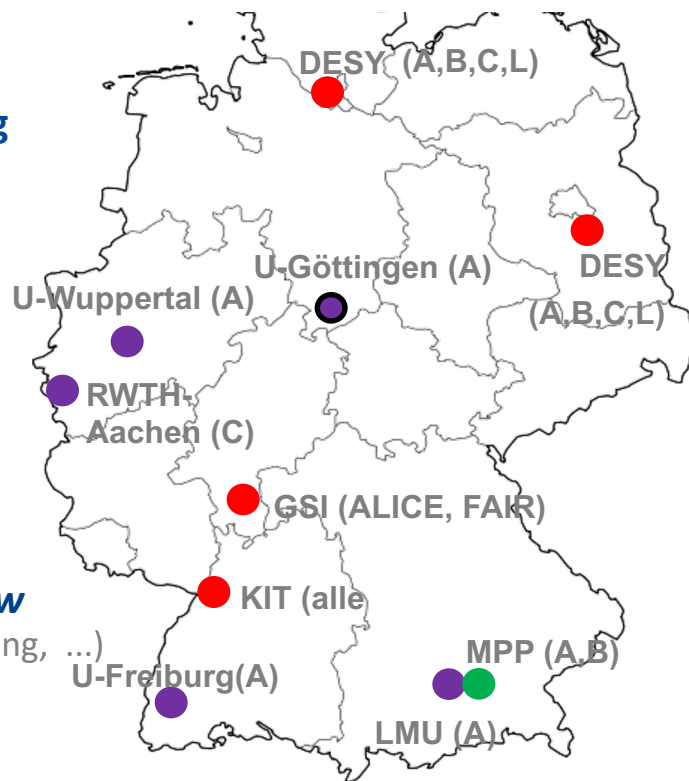
(Aktualisierung der Software, Betrieb der Edge Services, Monitoring, Accounting, ...)

bedarf wahrscheinlich zusätzliches Personals im Vgl. zu FP21-24

(Personal für Aufgaben an NHR-Zentren ähnlich zu GridKa erscheint sinnvoll)

Ausweitung des derzeitigen Verbundes von ATLAS- und CMS-Gruppen auf alle LHC-Experimente und Belle-2 unter Diskussion

A=ATLAS B=BELLE C=CMS L=LHCb

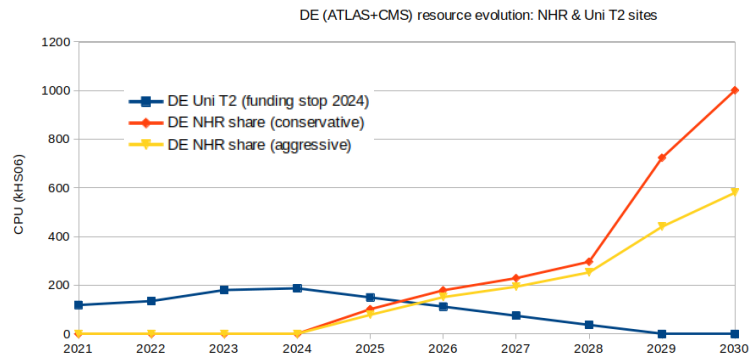


plus hoffentlich Integration von n NHR-Zentren

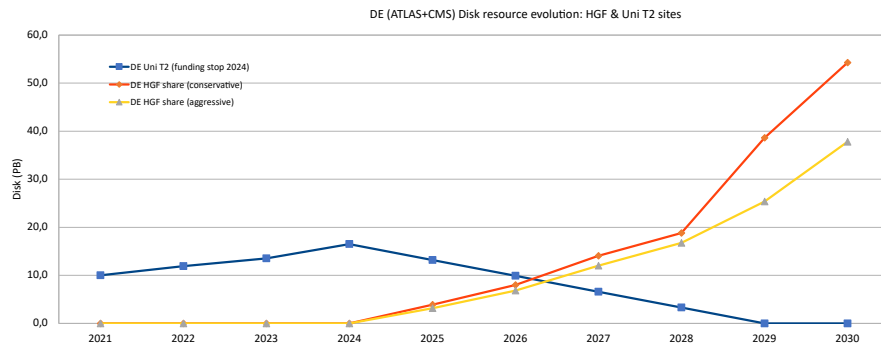
Hardwareinvest an Universitäten in Förderperiode 2024-2027

Erwünschte Übernahme der Ressourcen von den universitären Tier-2-Zentren

Rechenknoten durch NHR-Verbund



Massenspeicher durch Helmholtz-Zentren



Fortlaufende Diskussionen mit Helmholtz-Zentren, NHR-Verein mit Unterstützung von BMBF und PT-DESY

Investbedarf an Uni-Tier-2-Zentren abhängig von Zusagen von Helmholtz-Gemeinschaft und NHR-Verein

Massenspeicher und/oder Rechenknoten? Förderung für 0, 1, 2, 3 Jahre?

Benötigtes Finanzvolumen an Universitäten wird gegenüber FP21-24 voraussichtlich ansteigen

- höherer Investbedarf auf Grund von Inflation und geringerem technologischen Fortschritt als erwartet
- eventuell müssen auch Betriebskosten für Leistungsverbrauch, Kühlung, ... in Teilen beantragt werden

Experimentübergreifende F&E „Föderierte Infrastrukturen“

Temporäre Integration von mehreren HPC-Zentren
in WLCG-Workflow bereits erfolgreich bewiesen

Ist das Ergebnis von erfolgreicher F&E in IDT-UM und FIDIUM

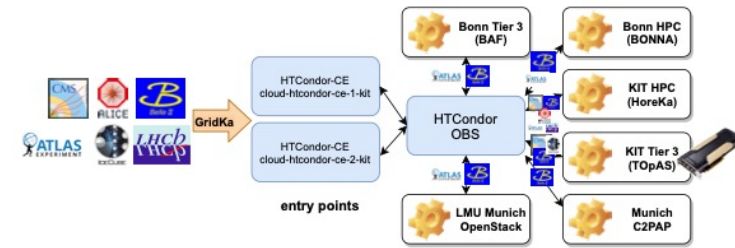
(Zusammenarbeit von KAT-, KET- und KHuK-Gruppen)

z.B. Werkzeuge in allgemein zugänglichen Softwarepaketen



„Compute-Site-in-a-Box“

„Disk-Caching-on-the-Fly“



Umsetzung des Data-Lake-Konzepts und optimierte und dauerhafte Integration von HPC-Zentren
erfordert Fortsetzung und Erweiterung der F&E-Arbeiten u.a. in den Bereichen

- Weiterentwicklung und Optimierung der Job-Orchestrierung auf heterogenen Ressourcen
- Weiterentwicklung und Optimierung von Caching-Lösungen für Cluster ohne lokalen Massenspeicher
- Weiterentwicklung und Optimierung von Monitoring- und Accounting-Frameworks
- Adaption, Aktualisierung und Betreuung der bereits entwickelten Werkzeuge

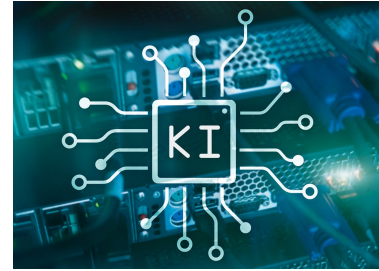
Kontinuierliche Förderung von Personal in mindestens gleichen Umfang wie bisher unverzichtbar, um
Entwicklungen rechtzeitig für die HL-LHC-Ära abzuschließen und in ErUM-Gemeinschaft auszurollen

Experimentübergreifende F&E „Software & Algorithmen“

Experimentübergreifende Herausforderungen für Ausschöpfung der Daten im Hinblick auf optimierte Sensitivität der Analysen, Nachhaltigkeit, ...

Viele Teilchenphysik-Experimente mit dringendem und überlappendem Entwicklungsbedarf im Bereich des **Maschinelles Lernens (ML)**

→ F&E am Besten in neuen experimentübergreifenden Verbünden angehen, z.B. für



Entwicklung von generischen Echtzeit-Anwendungen von ML

Anforderungen in *Trigger* und Echtzeitrekonstruktion verlangen neue, innovative ML-Konzepte

F&E dringend notwendig um ML-Algorithmen auf *Field-Programmable-Gate-Array* (FPGA) zu transferieren

Experimentübergreifende Herausforderungen an NN-Architekturen, Numerische Präzision, ...

unter Nutzung derselben Elektronikchips (z.B. Xilinx Virtex Ultrascale 9P)

Entwicklung und Bereitstellung nachhaltiger grundlegender ML-Modelle „Foundational models“

Viele ähnliche ML-Aufgaben (Klassifikation, Regression, ..) in allen Experimenten

Wiederholung des aufwendigen Trainings bedeutet ineffiziente Nutzung von Ressourcen (FTE und CPU-Zeit)

→ Entwicklung von „Foundational models“: Allgemeines Training für breite Klasse von Aufgaben

→ Re-Training für spezifische Aufgaben ressourcenschonend und schnell

Zusätzliches Personal unabdingbar um Projekte gemeinschaftlich und zeitgerecht durchzuführen

Zusammenfassung

Exzellentes, effizientes und nachhaltiges Computing war und ist essential für die starke Beteiligung der Gruppen in Deutschland bei der vollständigen Ausschöpfung des einzigartigen Physikpotentials der Experimente bei FAIR, am LHC, HL-LHC, SuperKEKb, ...

Unterstützung der Aktivitäten in den folgenden Bereichen ohne zeitliche Lücke und im mindestens selben Umfang wie bisher ist unabdingbar:

- Betrieb und experimentspezifische Weiterentwicklung der WLCG-Infrastruktur
- Bereitstellung der zugesagten Ressourcen im Rahmen des WLCG gemäß *MoU*
Anteil der Unis abhängig vom Fortschritt der Diskussionen mit Helmholtz-Zentren und NHR-Verein
- Experimentübergreifende F&E im Hinblick auf HL-LHC-Ära im Bereich "Föderierte Infrastrukturen"
- Experimentübergreifende Entwicklungen auch im Hinblick auf Nachhaltigkeit u. Energieeffizienz im Bereich "Software und Algorithmen" mit Schwerpunkt „Maschinelles Lernen“

Beteiligung der Universitäten ist unverzichtbar auf Grund der vorhandenen Expertise und der Ausbildung des wissenschaftlichen Nachwuchses in modernsten digitalen Technologien

Messestände auf „Hannover-Messe“ und „ISC High Performance“ für weiteren Kontakt zur Industrie
unter Beteiligung von LHC-ErUM-FSP-Büro, ErUM-Data-Hub, PUNCH, FIDIUM- und A+C-Run-3-Verbund

Zusammenfassung

Exzellentes, effizientes und nachhaltiges Computing war und ist essential für die starke Beteiligung der Gruppen in Deutschland bei der vollständigen Ausschöpfung des einzigartigen Physikpotentials der Experimente bei FAIR, am LHC, HL-LHC, SuperKEKb, ...

Unterstützung und Weiterentwicklung in den folgenden Bereichen ohne zeitliche Lücke und im mindestens selben Umfang wie bisher ist unabdingbar:

- Betrieb und experimentsspezifische Weiterentwicklung der WLCG-Infrastruktur
- Bereitstellung der zugesagten Ressourcen im Rahmen des WLCG gemäß MoU
- Anteil der Unis abhängig vom Fortschritt der Diskussionen mit Helmholtz-Zentren und NHR-Verein
- Experimentübergreifende F&E im Hinblick auf die Zukunft im Bereich "Föderierte Infrastrukturen"
- Experimentübergreifende Entwicklungen auch im Hinblick auf Nachhaltigkeit u. Energieeffizienz im Bereich "Software und Algorithmen" mit Schwerpunkt "Machine Learning"

Beteiligung der Universitäten ist unverzichtbar auf Grund der vorhandenen Expertise und der Ausbildung des wissenschaftlichen Nachwuchses in modernsten digitalen Technologien

Messestände auf „Hannover-Messe“ und „ISC High Performance“ für weiteren Kontakt zur Industrie unter Beteiligung von LHC-ErUM-FSP-Büro, ErUM-Data-Hub, PUNCH, FIDIUM- und A+C-Run-3-Verbund

Entwicklung der Anforderungen bei LHCb

CPU Power (kHS06)	LS3			Run4			
	2026	2027	2028	2029	2030	2031	2032
Tier 0	700	908	1119	1272	1305	1371	1436
Tier 1	2295	2976	3665	4169	4277	4491	4706
Tier 2	1282	1662	2047	2329	2389	2509	2629
Total WLCG	4.278	5.547	6.831	7.770	7.971	8.371	8.771
Increase		30%	23%	14%	3%	5%	5%

Disk (PB)	LS3			Run4			
	2026	2027	2028	2029	2030	2031	2032
Tier0	55,3	58,3	61,2	77,6	93,9	110,2	126,6
Tier1	110,6	116,5	122,5	155,1	187,8	220,5	253,2
Tier2	21,4	22,5	23,7	30,0	36,3	42,6	48,9
Total	187,3	197,3	207,3	262,7	318,0	373,3	428,6
Increase	6%	5%	5%	27%	21%	17%	15%

Tape (PB)	LS3			Run4			
	2026	2027	2028	2029	2030	2031	2032
Tier0	225,6	230,4	235,3	304,6	373,9	443,3	512,7
Tier1	239,9	245,1	250,2	320,1	389,9	459,7	529,5
Total	465,5	475,5	485,5	624,7	763,8	903,0	1042,2
Increase	2%	2%	2%	29%	22%	18%	15%