

Gemeinsamer Teil zum Zwischenbericht 2019 des Verbundprojekts 05H2018 - R&D COMPUTING (Pilotmaßnahme ErUM-Data) Innovative Digitale Technologien für die Erforschung von Universum und Materie

1 Projektpartner

- Albert-Ludwigs-Universität Freiburg
- Bergischen Universität Wuppertal
- Deutschen Elektronen-Synchrotron (DESY) Hamburg¹
- Forschungszentrum Jülich (FZJ)¹
- Frankfurt Institute for Advanced Studies (FIAS)
- Friedrich-Alexander-Universität Erlangen-Nürnberg
- Georg-August-Universität Göttingen¹
- GSI Helmholtzzentrum für Schwerionenforschung GmbH¹
- Johann Wolfgang Goethe Universität Frankfurt
- Johannes Gutenberg-Universität Mainz
- Karlsruher Institut für Technologie
- Ludwig-Maximilians-Universität München
- Organisation européenne pour la recherche nucléaire (CERN)¹
- Rheinische Friedrich-Wilhelm-Universität Bonn¹
- Rheinisch-Westfälischen Technischen Hochschule Aachen
- Universität Hamburg
- Westfälischen Wilhelms-Universität Münster¹

¹assoziiert

2 Stand des Verbundprojekts

Durch die stetige Verbesserung von Experimenten steigt die Rate und das Volumen von produzierten wissenschaftlichen Daten stark an. Teilchenphysik, Hadronen- und Kernphysik und Astroteilchenphysik stehen gleichermaßen vor der Herausforderung, diese Daten zu speichern, zu verarbeiten, und optimal zu nutzen, um wissenschaftliche Erkenntnisse zu erzielen. In diesem Berichtsteil wird die Zusammenarbeit der Verbundpartner zur Bewältigung dieser Herausforderung dargestellt.

Die fachlichen Arbeiten sind in vier Themenbereiche gegliedert und in den folgenden Abschnitten beschrieben. Auch auf organisatorischer Ebene wurden Fortschritte erzielt. Bei einem Kickoff-Meeting zu Beginn der Förderperiode wurden die Projekte fast aller Partner vorgestellt, so dass jeder einen Überblick über die Verbundaktivitäten hat und Synergien erkannt und genutzt werden können. In regelmäßig organisierten Kollaborationstreffen, zwei pro Jahr, kommen die an den Projekten arbeitenden Wissenschaftler zusammen, berichten über Fortschritte und diskutieren das weitere Vorgehen. Vermehrt finden auch Treffen der Themenbereiche, meist per Videokonferenz, statt, bei denen konkrete gemeinsame Arbeitsschritte koordiniert werden. Tabelle 1 gibt einen Überblick über die Treffen. Mailinglisten, eine Indico-Seite, eine github-Community, und eine Webseite wurden eingerichtet, um die Kommunikation innerhalb des Verbunds und mit anderen Wissenschaftlern und der Öffentlichkeit zu unterstützen.

Treffen	Datum	Ort
Tracking Workshop for HEP	14.-18.01.2019	Berkley
Kickoff Meeting	21.-22.02.2019	München
Kollaborationstreffen	28.03.2019	Aachen
COBaID/TARDIS Workshop	27.06.2019	Karlsruhe
Kollaborationstreffen	30.09.-01.10.2019	Karlsruhe
Arbeitstreffen Themenbereich C	02.12.2019	Online

Tabelle 1: Treffen der Verbundpartner

Das Verbundprojekt ist in den Experimenten und international sichtbar. Es wurde z.B. auf dem Workshop von HEP Software Foundation (HSF), Open Science Grid (OSG) und WLCG neben den vergleichbaren Projekten in den USA (IRIS-HEP) und UK (IRIS) präsentiert. Auch auf der International Conference on Computing in High Energy and Nuclear Physics (CHEP) gab es mehrere Vorträge der IDT-UM-Kollaboration. Wir sind Partner im Software Institute for Data Intensive Sciences (SIDIS), das sich zur Zeit im Aufbau befindet. Wissenschaftler des Verbundprojekts sind beteiligt an der Entwicklung der WLCG-Strategie für Data Organization, Management, and Access (DOMA).

Durch das ErUM-Data-Pilotprojekt wurde eine Gruppen- und experimentübergreifende Zusammenarbeit gefördert, die es sonst so nicht gegeben hätte. Ein herausragendes Beispiel ist das vom assoziierten Partner Bonn in Absprache mit anderen Verbundpartnern entwickelte Konzept *Compute Site in a Box*. Es adressiert einen zentralen Punkt des Projektziels, den Aufwand für die Einbindung und den Betrieb von Ressourcen zu reduzieren, und ist von Anfang an darauf ausgelegt, andere Sites bei der Umsetzung zu unterstützen. Bei einer längerfristigen Perspektive für den Support dieses Ansatzes hat er das Potential, zu einer weit verbreiteten Standardlösung zu werden.

Das Pilotprojekt hat außerdem wesentlich dazu beigetragen, die Bedeutung von Computing

und Software für unsere Forschung bewusster zu machen, auch in den eigenen Communities. Dies ist insbesondere wichtig, um Nachwuchswissenschaftler mit Interesse an diesen Schlüsseltechnologien zu gewinnen und auszubilden und um ihre Aussichten auf eine wissenschaftliche Karriere zu verbessern. Insgesamt eröffnet das Pilotprojekt eine neue Dimension der Zusammenarbeit, die sicherlich noch ausgebaut werden kann, aber dessen Signalwirkung man nicht unterschätzen sollte.

2.1 Themenbereich A: Entwicklungsarbeiten zur Bereitstellung von Technologien zur Nutzung heterogener Computing-Ressourcen

Die Entwicklungsarbeiten im Themenbereich A konzentrieren sich auf die experimentübergreifende opportunistische Nutzbarmachung von heterogenen Computing-Ressourcen, wie z.B. High-Performance-Computing-Zentren und Cloud-Provider. Diese Entwicklungsarbeiten umfassen einerseits Werkzeuge und Konzepte zur dynamischen und transparenten Einbindung dieser Ressourcen. Hier wurden Gruppen- und experimentübergreifend wichtige Beiträge zur ursprünglich am KIT entwickelten Software COBa1D – The opportunistic balancing daemon und TARDIS (Transparent Adaptive Resource Dynamic Integration System) geleistet. Im weiteren Projektverlauf wurde zudem ein Konzept entwickelt, welches die Einbindung der mittels TARDIS provisionierten Ressourcen über standardisierte Grid-Technologien in das experimentübergreifende WLCG-Computing erlaubt. Auf diese Weise konnten bereits Ressourcen der HPC-Zentren am KIT und der Universität Bonn, die Tier-3 Ressourcen an den Standorten Bonn und KIT, sowie Cloud-Ressourcen am LRZ München nahtlos ins WLCG integriert werden. Zur Vermittlung dieser neuen Technologien werden in regelmäßigen Abständen Workshops und Videokonferenzen mit den Verbundpartnern veranstaltet. Hierbei kann in Zukunft das vom assoziierten Partner Bonn zu entwickelnde Konzept *Compute Site in a Box* maßgeblich und vereinfachend beitragen. Lösungen für Datenmanagement bei der Einbindung von opportunistischen HPC-Zentren könnten von einem Projekt der Universität Mainz kommen, welches sich mit der Einbindung von Ad-hoc-Dateisystemen, die über den lokalen SSDs der Rechenknoten aufgespannt werden, beschäftigt.

Des Weiteren werden im Themenbereich A Datencaches zur effizienten Nutzung von heterogenen Ressourcen entwickelt. Die neuen Techniken müssen es ermöglichen, effizient funktionierende Datencaches schnell, auf einfache Weise und ohne großen Aufwand auch auf neu hinzugekommenen heterogenen Ressourcen zu realisieren und selbige dann transparent in die vorhandene Produktions-Infrastruktur einzubinden. Bei GSI ist ein auf XrootD basiertes „Disk Cache on the fly“ genanntes System entwickelt worden, welches aktuell am Goethe-Hochleistungsrechenzentrum in Frankfurt aufgesetzt wird. KIT hat bereits vereinfachte Cache-Systeme am HPC-Zentrum bwForCluster NEMO in Freiburg sowie am KIT-Tier-3-Zentrum aufgesetzt. Es ist geplant, diese später auf das GSI-System umzustellen. Darüber hinaus hat KIT ein erweitertes XRootD-Monitoring entwickelt, mit dem die effiziente Anwendbarkeit von Caching-Systemen auf verschiedene Workflows untersucht werden kann sowie Daten für eine Simulation über das Verhalten von verteilten Cache-Systemen gewonnen werden können. Die LMU München untersucht das Verhalten des ebenfalls XRootD-basierten Caching-Systems XCache im Produktionsbetrieb. Darüber hinaus haben die LMU München und die Universität Wuppertal user job monitoring-Systeme entwickelt, mit denen Anomalien gefunden werden können. Des Weiteren stellen Wuppertal und GSI Workflows und Container-Images zur Verfügung, mit deren Hilfe Produktionsjobs in der Hochenergiephysik (Simulation, Rekonstruktion, Datenanalyse) ausgeführt werden können.

2.2 Themenbereich B: Anwendung und Test von virtualisierten Softwarekomponenten im Umfeld heterogener Computing-Ressourcen

2.3 Themenbereich C: Deep Learning, Erkenntnisgewinn durch fundierte datengetriebene Methoden

Anwendungen des maschinellen Lernens haben eine lange Tradition in ErUM Forschungsfeldern. So wäre zum Beispiel die Entdeckung des Higgs Teilchens 2012 nicht ohne diese Methoden möglich gewesen. In den letzten Jahren hat besonders Deep Learning — die Verwendung von neuronalen Netzwerken mit einer hohen Zahl an Abstraktionsebenen — stark an Bedeutung gewonnen. Nach ersten vielversprechenden Ergebnissen in der Rekonstruktion und Identifikation von Zerfallsereignissen wird nun der umfassende Einsatz dieser Werkzeuge erforscht. Anwendungsfelder reichen von stark beschleunigten Entscheidungen auf spezialisierter Hardware über verbesserte Rekonstruktion zu neuen statistischen Techniken in der Datenauswertung und Qualitätssicherung.

Ein Aspekt des Übergangs von traditionellen Methoden des maschinellen Lernen zu Deep Learning ist der Wechsel von Expertenvariablen als Eingaben für Algorithmen hin zum automatisierten Lernen aus einfachen Grössen. Dieser Wechsel erlaubt einen produktiven Austausch zwischen Forscher*innen aus unterschiedlichen Fachgebieten verwendete Werkzeuge nun nahezu identisch sind. Ein solcher Austausch wurde auch im Themenbereich C im Umfeld der ErUM Forschung organisiert. Einerseits wurden Ergebnisse, Probleme, und vor allem Lösungskonzepte der aktuellen Forschung in unterschiedlichen Projekten auf mehreren Kollaborationstreffen (persönlich und via Videokonferenz) ausgetauscht.

Zwei Themenbereiche werden dabei breit an unterschiedlichen Standorten untersucht. Dies sind einerseits die Klassifikation auf heterogenen Datenstrukturen und andererseits die beschleunigte Simulation durch generative Netzwerke. An Klassifikationsproblemen auf diversen Datenstrukturen arbeiten Gruppen an allen Standorten (Aachen, Erlangen, FIAS, Göttingen, Hamburg, Karlsruhe, Mainz, München). Aufbauend auf den spezifischen Vorarbeiten wird aktuell gemeinsam im Rahmen des Pilotprojektes untersucht welche Methoden, Repräsentationen, und Algorithmen eine weitergehende Anwendbarkeit — potentiell auch über ErUM-Bereiche hinaus — haben. Das zweite übergreifende Thema ist die schnelle und ressourcenschonende Datenerzeugung mit generativen Modellen. Erzeugt werden zum Beispiel Belle II Ereignisse (LMU, KIT), Luftschauer (Aachen, KIT), Ereignisse im EXO-200 Experiment (Erlangen), und Kalorimeterbilder in zukünftigen Detektoren (Hamburg). Austausch zu Best-Practice Methoden für dieses Problem erfolgt bereits im Rahmen von physischen und virtuellen Kollaborationstreffen und soll im Anschluss an die Klassifikationsstudie erweitert werden.

2.4 Themenbereich D: Ereignisrekonstruktion: Kosten- und Energie-effiziente Nutzung von Computing-Ressourcen

Die Aktivitäten im Themenbereich D konzentrieren sich primär auf die Weiterentwicklung und Nutzbarmachung der experimentübergreifenden Spurenrekonstruktionsbibliothek ACTS (A Common Tracking Software). Die Bibliothek wird stark vom ATLAS-Experiment am CERN unterstützt und soll die Grundlage für die künftige Rekonstruktionsalgorithmen verschiedener Experimente bilden (z.B. Belle II, FASER, PANDA, ATLAS). Dies erlaubt es den Verbundpartnern von den gemeinsamen Entwicklungs- und Optimierungsarbeiten profitieren zu können. Im Rahmen unserer Aktivitäten haben wir zwei Projektworkshops organisiert (der erste zum Auftakt der Aktivitäten im Frühling 2019 am Lawrence Berkeley National Laboratory und der zweite wird im Mai 2020 am

DESY stattfinden). Dort konnten sich die Verbundpartner mit den ACTS-Entwicklern und unseren Kollegen vom IRIS-HEP-Verbund treffen um konkrete Entwicklungsarbeiten zu koordinieren und mit den Kernentwicklern umzusetzen. Die Aktivitäten der Gruppe aus Karlsruhe bzw. Bonn (Prof. Dr. Bernlochner) konzentrierten sich auf die Entwicklung von fehlenden Komponenten, welche der Integration ins Belle II-Experiment erlauben werden. Die Implementation einer ersten Version der Belle II-Geometrie sowie erste Studien des Energieverlustes durch Mehrfachstreuung liegen vor. Auch am Forschungszentrum Jülich wurden Arbeiten zur Verwendung von ACTS in PandaRoot begonnen. Die Gruppen aus Aachen (Prof. Dr. Schmidt) und Frankfurt (Prof. Dr. Kisel) hatten bedingt durch externe Faktoren große Schwierigkeiten 2019 ihre Personalressourcen zu nutzen. Die Besetzung von zwei Doktorandenstellen ist Ende 2019 gelungen und erste verwertbare Resultate bei der Integration von Zellulären Automaten in den ACTS-Code sowie die Nutzbarmachung von GPUs werden bald folgen. Um die neuen Doktoranden und Doktorandinnen der Verbundpartner in die Architektur und die Entwicklungsarbeiten der ACTS-Bibliothek einzuführen, organisieren wir gesonderte Vorträge und Schulungen für den zweiten Projektworkshop am DESY.

Garching, 1. April 2020

Prof. Dr. Thomas Kuhr (Verbundkoordinator)