

Bereitstellung der Computing-Ressourcen in Deutschland für Speicherung und Auswertung der Daten des Large Hadron Colliders

Die Hochluminositätsphase (HL) des Large Hadron Colliders (HL-LHC) ab dem Jahr 2029 stellt immense Herausforderungen an die Bereitstellung und den Betrieb der erforderlichen Rechen- und Speicherressourcen in Deutschland. Um dem immer stärker ansteigenden Rechen- und Speicherbedarf gerecht zu werden, sind innovative Computingmodelle notwendig. Gleichzeitig muss die Transformation hin zu einer ressourcen- und umweltschonenderen Bereitstellung der Rechen- und Speicherleistung gelingen. Das LHC-Computing übernimmt hier auch eine Vorreiterrolle für andere daten- und rechenintensive Wissenschaften.

Unter Berücksichtigung der Herausforderungen wird im Folgenden eine Zukunftsvision für das deutsche LHC-Computing als Teil des erfolgreichen *Worldwide LHC Computing Grid* (WLCG) aufgezeigt. Die Bereitstellung der Rechen- und Speicherleistung für den HL-LHC soll dabei ab dem Jahr 2029 im Wesentlichen auf zwei Säulen ruhen. Zum einen sind dies die Rechenzentren der Helmholtz-Gemeinschaft am Deutschen Elektronen-Synchrotron (DESY) in Hamburg und Zeuthen, am Karlsruher Institut für Technologie (KIT) und am Helmholtz-Zentrum für Schwerionenforschung (GSI) in Darmstadt, die heute schon einen großen Anteil am LHC-Computing übernehmen. Sie sollen weiter ausgebaut werden und insbesondere die Speicherung der Daten übernehmen. Zum anderen sollen in Zukunft auch die Ressourcen des nationalen Verbundes von Hochleistungsrechenzentren (NHR) für das LHC-Computing intensiv genutzt werden¹. Parallel dazu sind erhebliche Forschungs- und Entwicklungsarbeiten (F&E) notwendig, um diese Transformation erfolgreich umzusetzen.

LHC-Computing in Deutschland - Status und Zeitraum bis zum HL-LHC

Die für den Betrieb und die Datenauswertung des LHC notwendigen Computing-Ressourcen werden im Rahmen des WLCG bereitgestellt. Das WLCG ist ein Zusammenschluss von etwa 170 Rechenzentren weltweit, die die benötigten Computing-Infrastrukturen betreiben. Die verschiedenen am LHC beteiligten Nationen tragen zu diesen Infrastrukturen nach dem *Fair-Share*-Prinzip bei, wobei sich der prozentuale nationale Beitrag am Autorenanteil orientiert und für die einzelnen Rechenzentren durch ein *Memorandum of Understanding* geregelt wird.

Der deutsche Beitrag wird bisher durch Rechenzentren der Helmholtz-Gemeinschaft, sowie Rechen-Cluster der Universitäten und der Max-Planck-Gesellschaft erbracht. Insbesondere waren dies das WLCG-Tier-1-Zentrum fungierende Rechenzentrum GridKa am KIT, sowie die WLCG-Tier-2-Zentren am DESY, an der GSI, am Max-Planck-Institut für Physik in München² und an den Universitäten in Aachen, Freiburg, Göttingen, München (LMU) und Wuppertal. Dank erheblicher Investitionen aller Beteiligten und der Unterstützung durch das BMBF hat die Bereitstellung der deutschen WLCG-Ressourcen und der Betrieb der deutschen WLCG-Zentren in den vergangenen Jahren hervorragend funktioniert. Alle von Deutschland gemachten Zusagen an das WLCG konnten im Zusammenspiel von Helmholtz-Gemeinschaft, Max-Planck-Gesellschaft und Universitäten erfüllt werden.

Die drei von der Helmholtz-Gemeinschaft betriebenen WLCG-Tier-1/2-Rechenzentren (KIT, DESY, GSI) sind für die Sicherung des deutschen Beitrages zum WLCG absolut essentiell und benötigen schon heute

¹ Die Diskussion mit den Zentren des NHR-Verbundes und deren Strategieausschuss wurde noch nicht begonnen.

² Zurzeit plant das MPP das WLCG-Tier-2-Zentrum im Rahmen der MPCDF (Max-Planck-Central Data Facility) weiterhin zu betreiben und den Anforderungen entsprechend auszubauen.

weitere Ausbauinvestitionen, um die gemachten Zusagen bis zum Jahr 2028 zu erfüllen. Zur Sicherung dieser Investitionen und des Betriebs der Rechenzentren bis zum Jahr 2028 haben die drei Helmholtz-Zentren einen gemeinsamen Eintrag „Upgrade Tier Centres for HL-LHC“ im Rahmen der Helmholtz-Roadmap „Future Infrastructure (FIS)“ vorgenommen. Ohne diese Ausbauinvestitionen werden die Helmholtz-Zentren nicht in der Lage sein, ihre herausragende Rolle im WLCG-Computing in Deutschland weiter wahrzunehmen. Der deutsche Beitrag zum LHC-Computing wäre dann insgesamt dramatisch gefährdet.

Die Teilchenphysiker:innen in Deutschland unterstützen den Eintrag des „Upgrade Tier Centres for HL-LHC“ in die Helmholtz-FIS-Roadmap und den entsprechenden Antrag mit Nachdruck und hoffen auf die Unterstützung durch die Helmholtz-Gemeinschaft.

Zukunftsperspektive für das LHC-Computing in Deutschland in der HL-LHC-Phase

Mit dem Start der Hochluminositätsphase des LHC im Jahr 2029 werden die Anforderungen an die WLCG-Infrastrukturen erheblich steigen³. Die höhere Luminosität des LHC führt in den Experimenten sowohl zu komplexeren Ereignissen als auch zu einer starken Erhöhung der Speicherrate, was einen erheblichen Mehrbedarf an Speicherkapazität und Rechenleistung zur Folge hat. Trotz großer algorithmischer und software-technischer Anstrengungen der Experimente und des technologischen Fortschritts in der Hardware wird es voraussichtlich nicht gelingen, den Mehrbedarf alleine durch das Fortschreiben der bisherigen Ausbauinvestitionen („flat budget“-Annahme) zu decken. Um diesen Herausforderungen zu begegnen, soll die Bereitstellung der Massenspeicher und Rechenressourcen neu verteilt werden. Diese Transformation des Computing-Modells wird die Energie- und Kosteneffizienz erhöhen und wird Synergien zwischen Wissenschaftsfeldern befördern.

Massenspeicher

Innerhalb der WLCG-Kollaboration gibt es den Konsens, dass die Bereitstellung der Massenspeicher auf wenige Standorte im Rahmen des sogenannten *Data-Lake*-Modells reduziert werden soll. Dies wird einhergehen mit einer Reduktion der gespeicherten Kopien der Datensätze und der Implementierung eines verbesserten *Quality of Service* (Dienstgüte). Diese Konzentration des Massenspeichers auf wenige Standorte wird zu einer Kostenreduktion beim Personal für den Basisbetrieb der Hardware und der Beschaffung führen. Weiterhin soll damit die Energieeffizienz des Betriebs erhöht werden und so auch ein Beitrag zur ökologischen Nachhaltigkeit des LHC-Computing geleistet werden.

Der gesamte von Deutschland zugesagte Beitrag zum WLCG-Massenspeicher sollte in der HL-LHC-Phase von den drei Helmholtz-Zentren DESY, GSI und KIT bereitgestellt werden.

Die vorgeschlagene zukünftige Überführung der heute teilweise von den universitären WLCG-Tier2-Standorten bereitgestellten Anteile am Massenspeicher an die Helmholtz-Zentren erfordert zusätzliche Investitionsmittel für die Helmholtz-Zentren bereits ab dem Jahre 2025, um die Anforderungen zum Start des HL-LHC mit dem notwendigen zeitlichen Vorlauf erfüllen zu können.

Die Helmholtz-Gemeinschaft und die Geldgeber beim Bund werden gebeten, den Dialog über die Bereitstellung des WLCG-Massenspeichers an den Helmholtz-Zentren aufzunehmen und mögliche Finanzierungsmodelle vorzuschlagen.

³ Während der Start der eigentlichen HL-Phase des LHC erst für das Jahr 2029 vorgesehen ist, werden die Experimente ALICE und LHCb bereits ab 2022 bei höheren Luminositäten betrieben und werden daher anders als die Experimente ATLAS und CMS bereits ab 2022 höhere Anforderungen an WLCG stellen.

Rechenressourcen

Die WLCG-Kollaboration plant in Zukunft auch heterogene Rechenressourcen (z.B. HPC-Cluster) disziplin- und Community-übergreifend zu nutzen, um den Bedarf an Rechenleistung (CPU und GPU) für die Produktion von simulierten Datensätzen und die Analyse der Daten am HL-LHC zu decken. Aus der Sicht der Teilchenphysiker:innen sind in Deutschland die Hochleistungsrechenzentren des NHR-Verbundes prädestiniert, diese Aufgabe in einem transformierten Computing-Modell zu übernehmen⁴. Der nationale Verbund von Hochleistungsrechenzentren (NHR) hat das Mandat, den Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftlern an deutschen Hochschulen die für ihre Forschung benötigte Rechenkapazität in wenigen Rechenzentren zur Verfügung zu stellen. Die Nutzung der großen Rechenressourcen an den NHR-Zentren für den HL-LHC würde die Effizienz des Energieeinsatzes im Vergleich zu kleineren Rechenclustern beim Betrieb der Rechenknoten erhöhen und damit ebenfalls einen Beitrag zur ökologischen Nachhaltigkeit im Bereich des Computing leisten.⁵ Darüber hinaus wird die gemeinsame und gleichzeitige Nutzung von Rechenclustern durch die LHC-Community und andere Wissenschaftsfelder die Auslastung der IT-Infrastrukturen weiter erhöhen. Die erfolgreiche Umsetzung der Transformation wird die Synergien zwischen verschiedenen Wissenschaftsfeldern befördern und erweitern. Es ist davon auszugehen, dass das transformierte Computing-Modell und die damit verbundenen F&E-Arbeiten auch auf die Anforderungen in anderen Forschungsfeldern portiert werden können.

Die NHR-Zentren sollen die universitären WLCG-Tier2-Standorte bei der Bereitstellung der Rechenressourcen ablösen und deren Rechenleistung für das LHC-Computing ab dem Jahr 2029 im Rahmen des WLCG bereitstellen.

Obwohl die in den Hochleistungsrechenzentren existierenden Rechnerarchitekturen für massiv paralleles Rechnen optimiert sind, können diese durch den Einsatz von Virtualisierungs- oder Containertechniken für Simulation, Ereignisrekonstruktion und Nutzeranalyse der LHC-Experimente genutzt werden. Dazu gibt es bereits heute erste erfolgreiche oder prototypische Ansätze, die die technische Realisierbarkeit zeigen. Der Übergang in das transformierte Modell sollte bereits im Jahre 2025 beginnen, d.h. dass ab dann der zugesagte Aufwuchs der Rechenressourcen nicht mehr länger durch die universitären WLCG-Tier-2-Zentren, sondern von den NHR-Zentren übernommen wird. Die beschriebene Transformation zur zukünftigen Nutzung der NHR-Zentren erfordert allerdings Anpassungen im Betriebsmodell der NHR-Zentren und bei der bereitgestellten Hardware. Die Vergabe der Rechenzeiten an den NHR-Zentren basiert auf einem projektbasierten Bewerbungsverfahren und ist derzeit nicht zur Sicherung eines festen Rechenbeitrages zum WLCG-Computing geeignet. Hier muss zusammen mit dem Strategieausschuss des NHR-Verbundes nach möglichen praktikablen Umsetzungen gesucht werden. Die effiziente Nutzung der NHR-Zentren durch die Teilchenphysik erfordert darüber hinaus, dass beim zukünftigen Ausbau die besonderen Bedürfnisse im Hinblick auf die Rechnerarchitekturen, den Bedarf für schnelle temporäre Speicher und die notwendige Netzwerkanbindung an das WLCG berücksichtigt werden. Ohne die Umsetzung dieser Anliegen der Teilchenphysik wird die erfolgreiche Integration der NHR-Zentren in Deutschland in das LHC-Computingmodell der Zukunft nicht möglich sein.

Die Teilchenphysiker:innen bitten das BMBF, ihre Anliegen im Hinblick auf IT-Infrastruktur und Vergabe von Rechenzeit in den Diskussionen mit den NHR-Zentren und mit deren Strategieausschuss mit Nachdruck zu unterstützen und den notwendigen Diskussionsprozess zu begleiten.

⁴ Weitere HPC-Zentren und HTC-Cluster z.B. an Universitäten sollen zusätzlich opportunistisch genutzt werden. Deren Beitrag kann aber nicht fest zugesagt werden und wird zeitlich schwanken.

⁵ Die Energieeffizienz einer IT-Infrastruktur hängt von der verwendeten Kühltechnologie ab und skaliert i. A. mit der Größe der IT-Infrastruktur unabhängig vom Standort an Universitäten, Helmholtz-Zentren oder NHR-Zentren.

Notwendige Forschungs- und Entwicklungsarbeiten

Die Transformation des Computing-Modells und die optimale Nutzung insbesondere der NHR-Ressourcen für das LHC-Computing stellt eine große Herausforderung dar und erfordert signifikante F&E-Anstrengungen in verschiedenen Bereichen, die bereits heute begonnen bzw. fortgesetzt werden müssen. Diese F&E-Arbeiten umfassen u.a. die Entwicklung und Implementierung modifizierter Computing-Modelle, die Entwicklung neuer Interface-Techniken und neuer Methoden zur optimalen Nutzung heterogener Rechnerarchitekturen inklusive Monitoring und Accounting. Dies beinhaltet auch die Anpassung der Software an die heterogenen Rechnerarchitekturen der NHR-Zentren und anderer HPC-Zentren und die Entwicklung neuer auf Methoden des maschinellen Lernens basierender Analysetechniken großer Datensätze (Big Data Analytics).

Mit dem Aktionsplan ErUM-Data hat das BMBF ein Förderinstrument zur Verfügung gestellt, diese Entwicklungsarbeiten zu unterstützen. So wurden bzw. werden bereits im erfolgreichen ErUM-Data-Pilotprojekt IDT-UM und dessen Nachfolgeprojekt FIDIUM wichtige Entwicklungsarbeiten geleistet. Um die Neuaufstellung des LHC-Computings bis zum Start des HL-LHC abzuschließen, müssen diese erfolgreichen Arbeiten in den nächsten Jahren in voller Breite fortgesetzt und intensiviert werden.

Die Gruppen an den derzeitigen universitären WLCG-Tier2-Standorten werden auf Grund ihrer langjährigen Erfahrung und ihres Expertenwissens eine zentrale und strategische Rolle einnehmen, um diese F&E-Arbeiten durchzuführen und die effiziente Integration der heterogenen IT-Infrastrukturen in das WLCG unter Berücksichtigung der WLCG-spezifischen und experimentspezifischen Anforderungen nachhaltig zu gewährleisten. Diese Integration kann im Rahmen strategischer Kooperationen zwischen einzelnen Universitätsgruppen und den lokalen und nationalen HPC-Zentren sowie den Helmholtz-Zentren formalisiert werden. Diese Kooperationen sind insbesondere auch für die Gewinnung des wissenschaftlichen Nachwuchses für Computing-Aufgaben und -Projekte von großer Bedeutung.

Es wird daher weiterhin eine Finanzierung des Personals sowohl für F&E-Arbeiten als auch im Bereich des WLCG- und experimentspezifischen Betriebs und der Nutzerbetreuung benötigt.

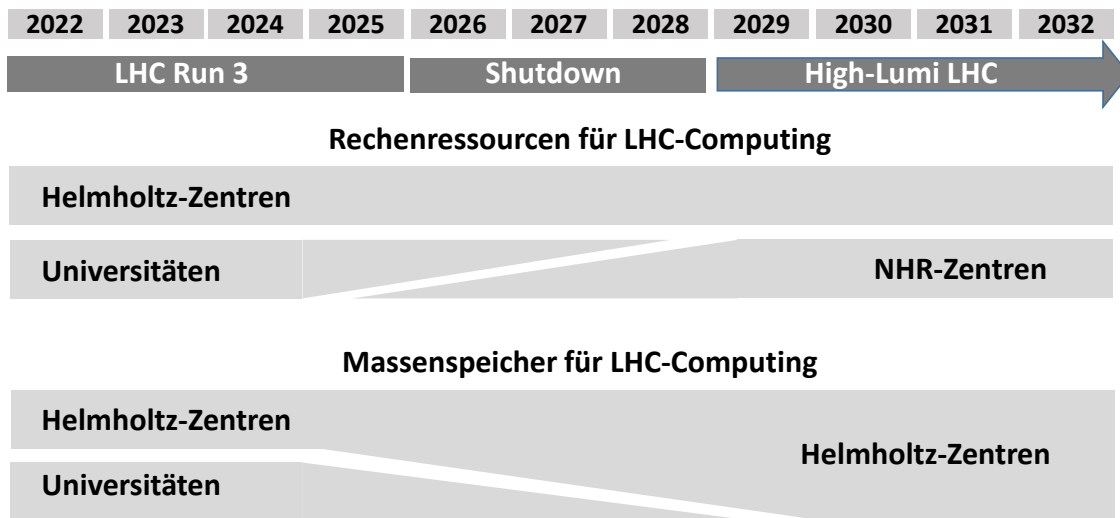
Die Teilchenphysiker:innen bitten das BMBF um die nachhaltige Begleitung und Unterstützung des skizzierten dynamischen Transformationsprozess für das zukünftige LHC-Computing.

Zusammenfassung der vorgeschlagenen Transformation des Computingmodells für den HL-LHC:

- Die Helmholtz-Zentren DESY, GSI, KIT übernehmen bei der Bereitstellung der WLCG-Ressourcen die zentrale Rolle, im Besonderen soll durch sie der gesamte Massenspeicher bereitgestellt werden.
- Die NHR-Zentren unterstützen den Transformationsprozess im Bereich der rechenintensiven Aufgaben durch Übernahme des Beitrags zu den Rechen-Ressourcen von den universitären WLCG-Tier2-Zentren.
- Den universitären Gruppen an den derzeitigen universitären WLCG-Tier2-Standorten kommt bei der Umsetzung der Transformation eine zentrale Rolle zu, sowohl bei den notwendigen F&E-Arbeiten, als auch beim WLCG- und experimentspezifischen Betrieb und der Nutzerbetreuung.

Der zeitliche Verlauf der Transformation in der Bereitstellung der Ressourcen ist in der Abbildung qualitativ dargestellt.⁶

⁶ Die Breite der Balken berücksichtigt weder den Aufwuchs in den WLCG-Ressourcen noch stellt sie die Anteile, die bereits heute von den Helmholtz-Zentren und den Universitäten bereitgestellt werden, quantitativ dar.



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