KFS: Digitale Agenda

Nutzerperspektive aus Göttingen

Markus Osterhoff
Institut für Röntgenphysik,
Uni Göttingen

AG Tim Salditt + AG Sarah Köster

1. Wissenschaft
2. aktueller Stand
3. Bedarf & Wünsche

Unsere Arbeitsgruppen

- AG Tim Salditt
- AG Sarah Köster
- *AG Simone Techert (FS-SCS)*
- Doktoranden
- Master- und Bachelorstudenten

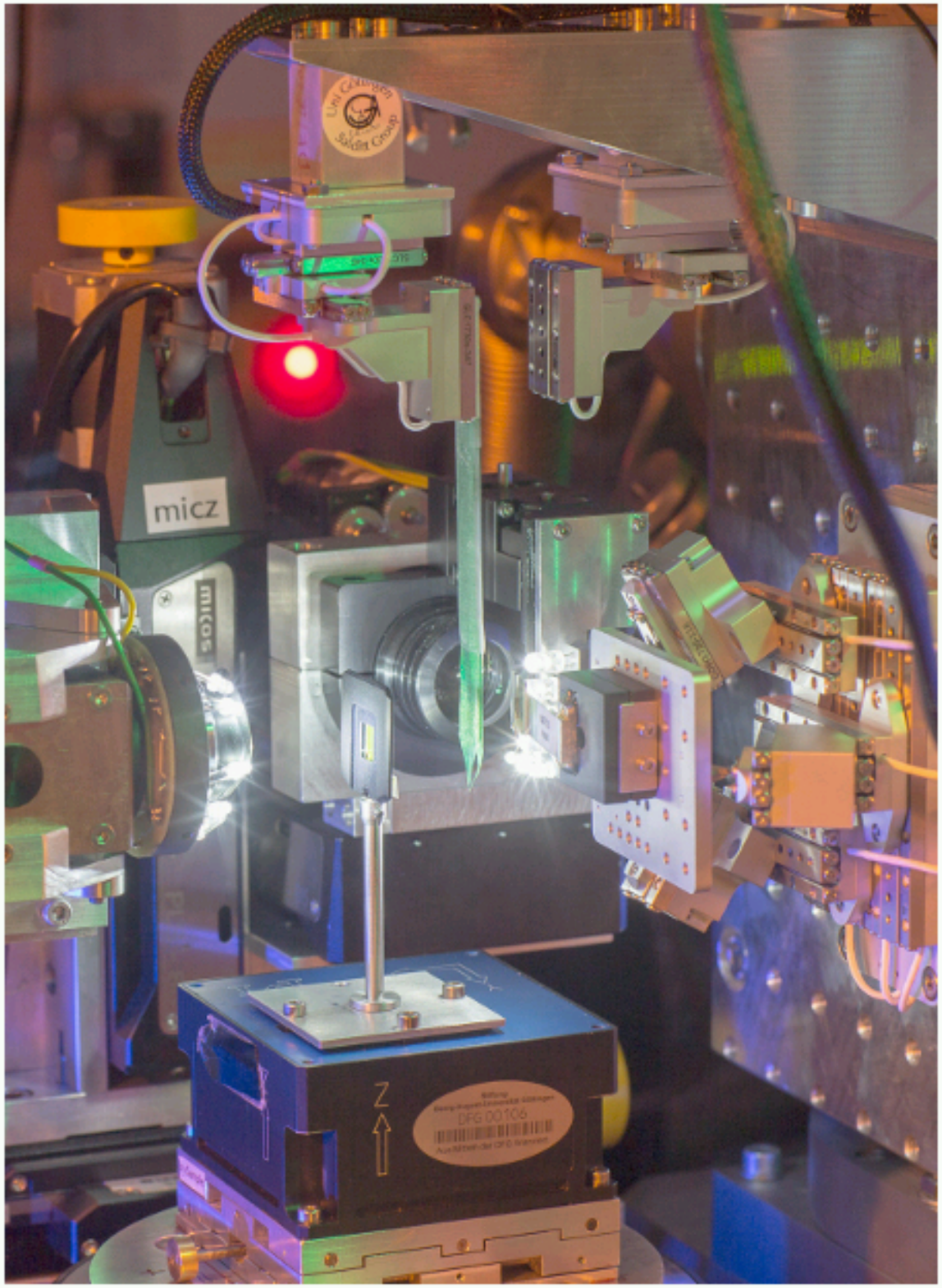
Danke für die Unterstützung

- DESY Photon Science
  - FS-EC, FS-PE
  - insbesondere Michael Sprung, P10
- Drittmittel
  - BMBF
  - SFB 755
  - Campuslabor AIMS
- Danke an
  - unsere Studenten
  - unsere Werkstätten

Wo sind wir?

überall :)

- Laborquellen
- PETRA III
  überwiegend
  GINIX @ P10
- ESRF, SLS, Elettra

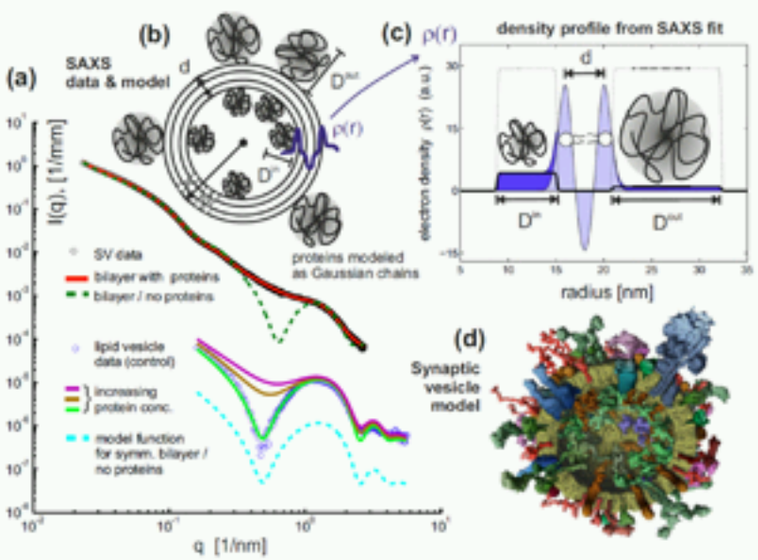


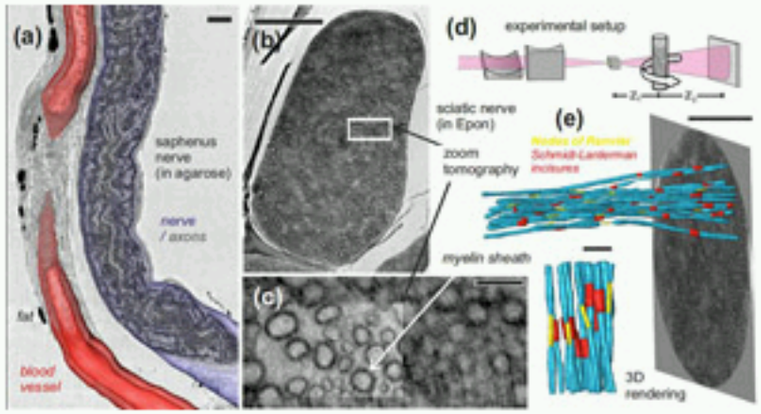
Wissenschaft (kurz und knapp)

Weiche Materie

- Struktur und Funktion
  von Molekülen über Zelle zu Gewebe

- quantitative physikalische Beschreibung



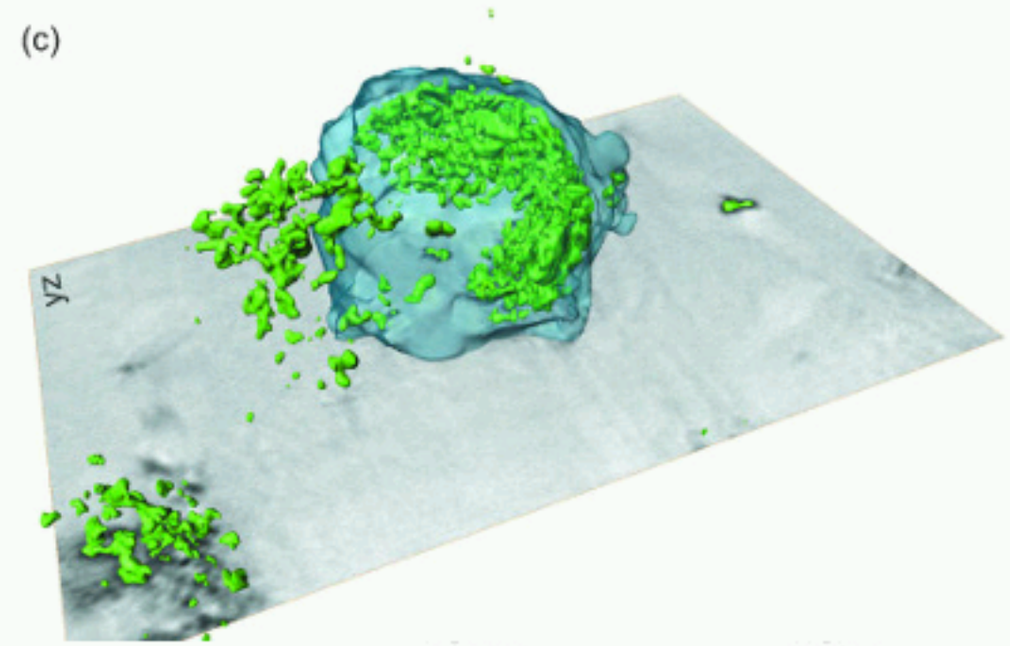


Dynamische Bildgebung auf der Nanoskala

Wissenschaft (kurz und knapp)

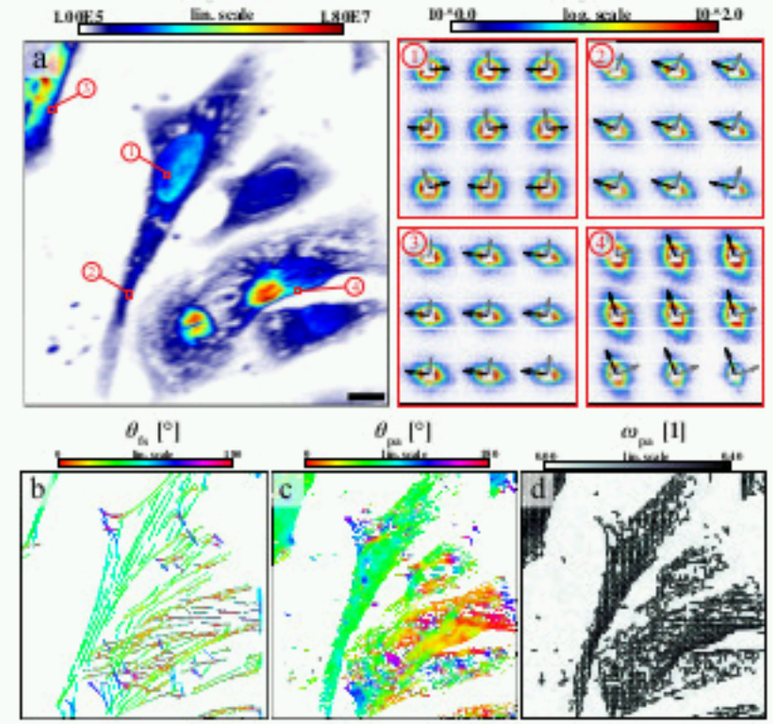
Röntgenbildgebung

- Holographie, Tomographie



Röntgenstreuung

- Raster-nano-SAXS



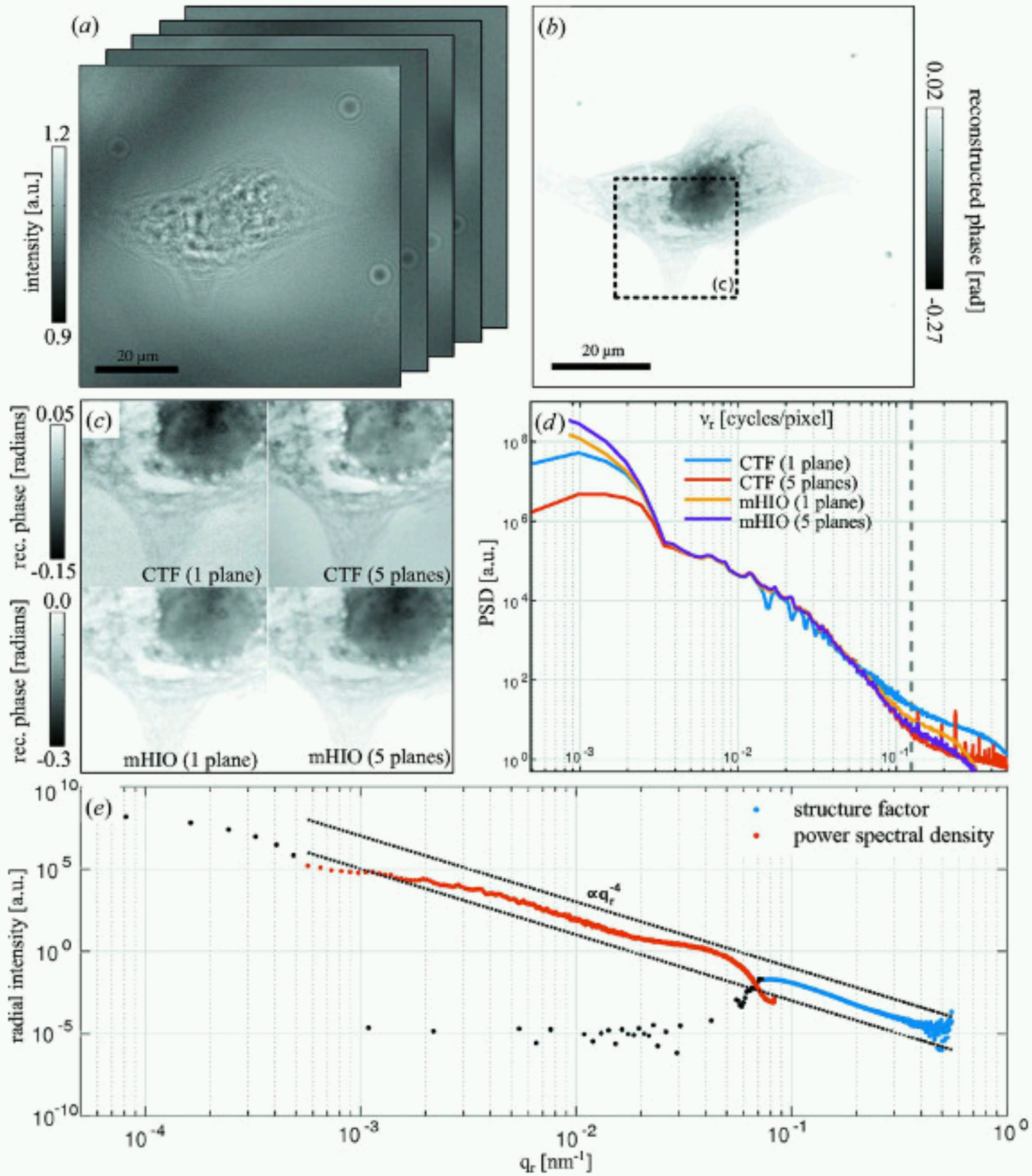
optische Fluoreszenz

Zellmechanik

In-situ-Bildgebung

Methodenentwicklung

Wissenschaft (kurz und knapp)



Datenraten

Tomographie:

- 4 Distanzen
  × 1500 Winkel
  × 4 Megapixel (sCMOS)
  × 16 Bit
  = 45 GiB in < 1 Stunden

- Auswertung:
  - × 4 (complex float) zur 3D-Phasenrekonstruktion

- muss vollständig in RAM passen
- anschließend: Volumendarstellung

Datenraten

Raster-nano-SAXS (STXM):

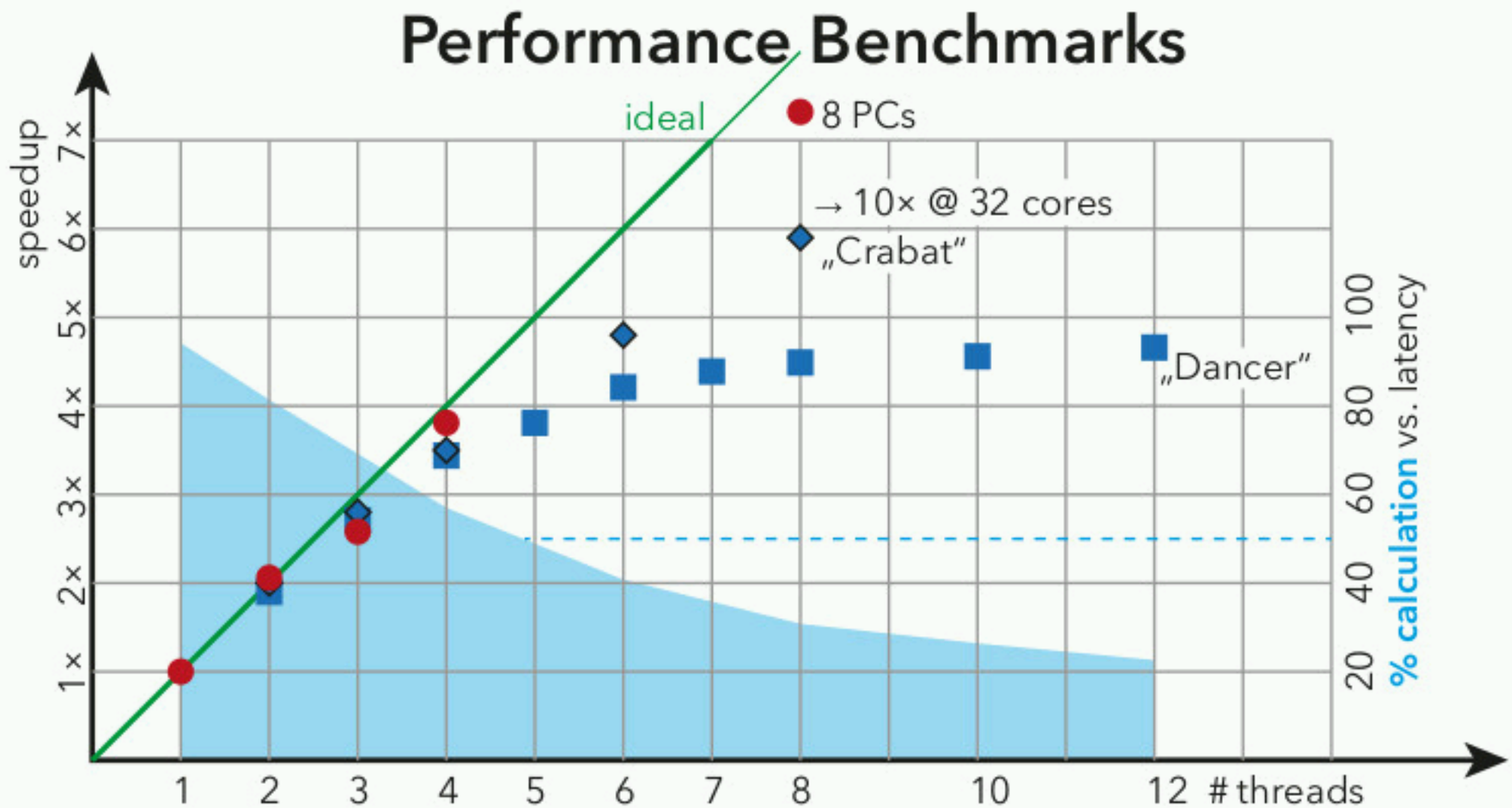
- 255 × 255 Positionen
  × 4 MP (Eiger)
  × 0.1 Byte (LZ4)
- 24 GiB in 3 … 30 … 120 Minuten
  (750 Hz … 50 Hz … 10 Hz)

- während der Auswertung: 480 GiB entpackt

- Vorteil: unabhängige Bilder
- sehr hohe Informationsverdichtung
  4 MP -> eine Zahl
  (Fragestellung: welche Zahl?)

Schlechte Skalierung auf Parallel-Prozessoren

- CPU-Cache „leeranalysiert", bevor neue Daten aus Arbeitsspeicher nachgeflossen sind (Latenz ~100 ns)



Lösung für dieses Problem

„Heinzelmännchen“ (24×450€):

- nicht ein Groß-Rechner, sondern viele kleine Computer
- 1 „Heinzelfrau“:

Lösung für dieses Problem

„Heinzelmännchen“ (24×450€):

- nicht ein Groß-Rechner, sondern viele kleine Computer
- 1 „Heinzelfrau“:
  - SSD-Cache zwischen NFS und Knoten
  - Lastverteiler + web-GUI
  - 20 GBit uplink,
    24 × 1 GBit downlinks

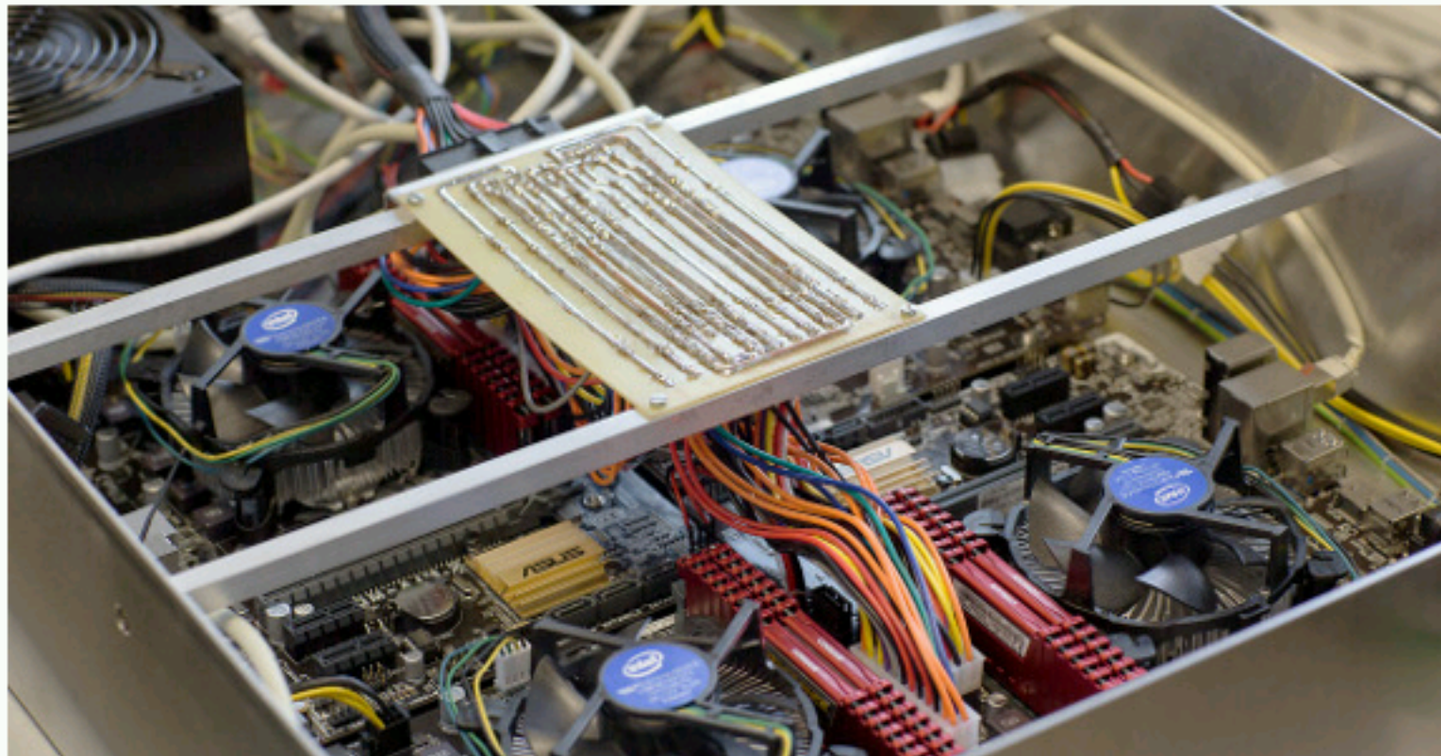
Lösung für dieses Problem

„Heinzelmännchen“ (24×450€):

- nicht ein Groß-Rechner, sondern viele kleine Computer
  - 24 Systeme
  - 24 Intel i7-7700
  - 24 × 8 GiB RAM
  - 6 Netzteile; selbstgebaute 19"-Schubladen
- 1 „Heinzelfrau“:
  - SSD-Cache zwischen NFS und Knoten
  - Lastverteiler + web-GUI
  - 20 GBit uplink, 24 × 1 GBit downlinks

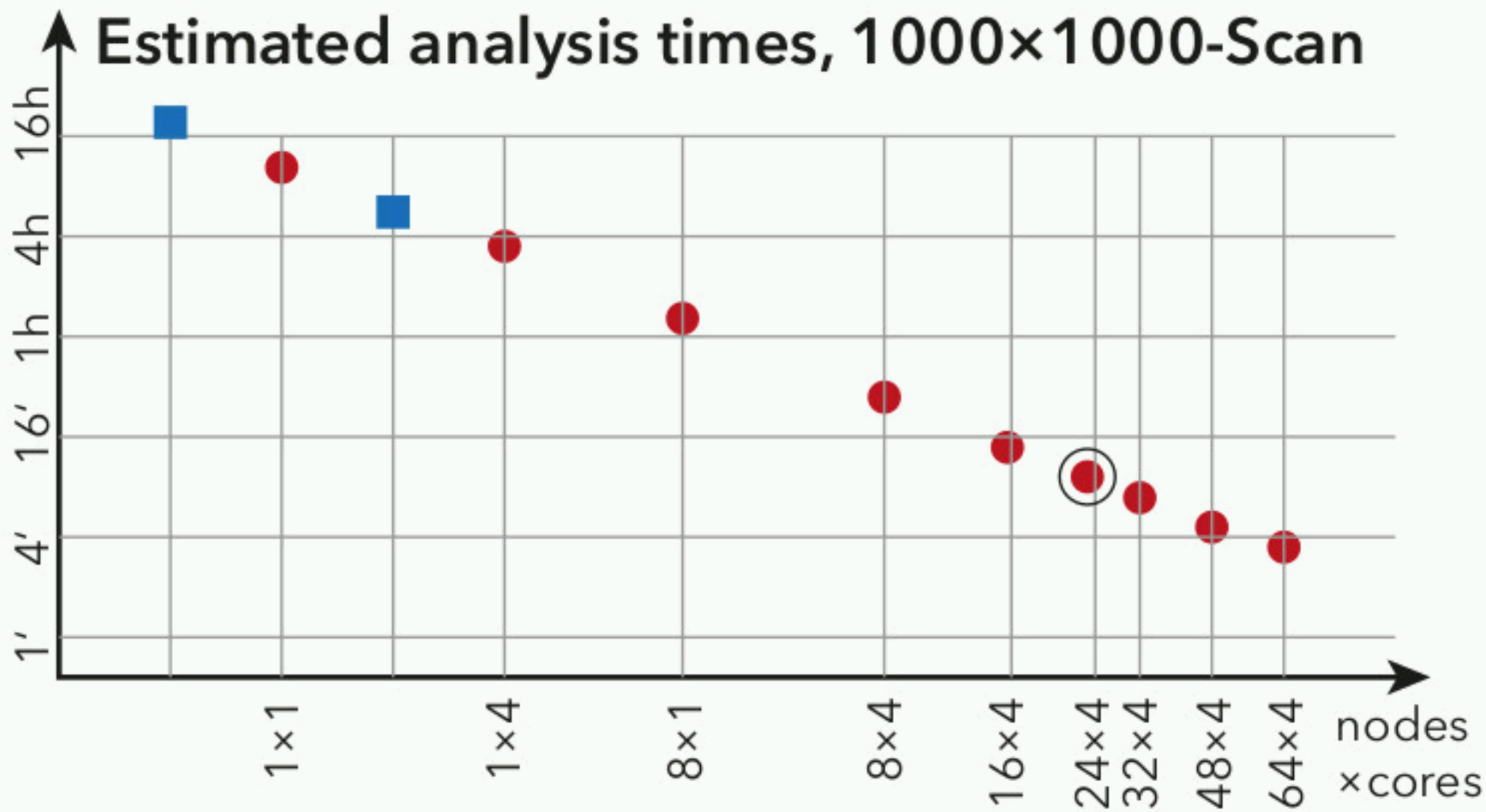
Lösung für dieses Problem

„Heinzelmännchen“ (24×450€):



Lösung für dieses Problem

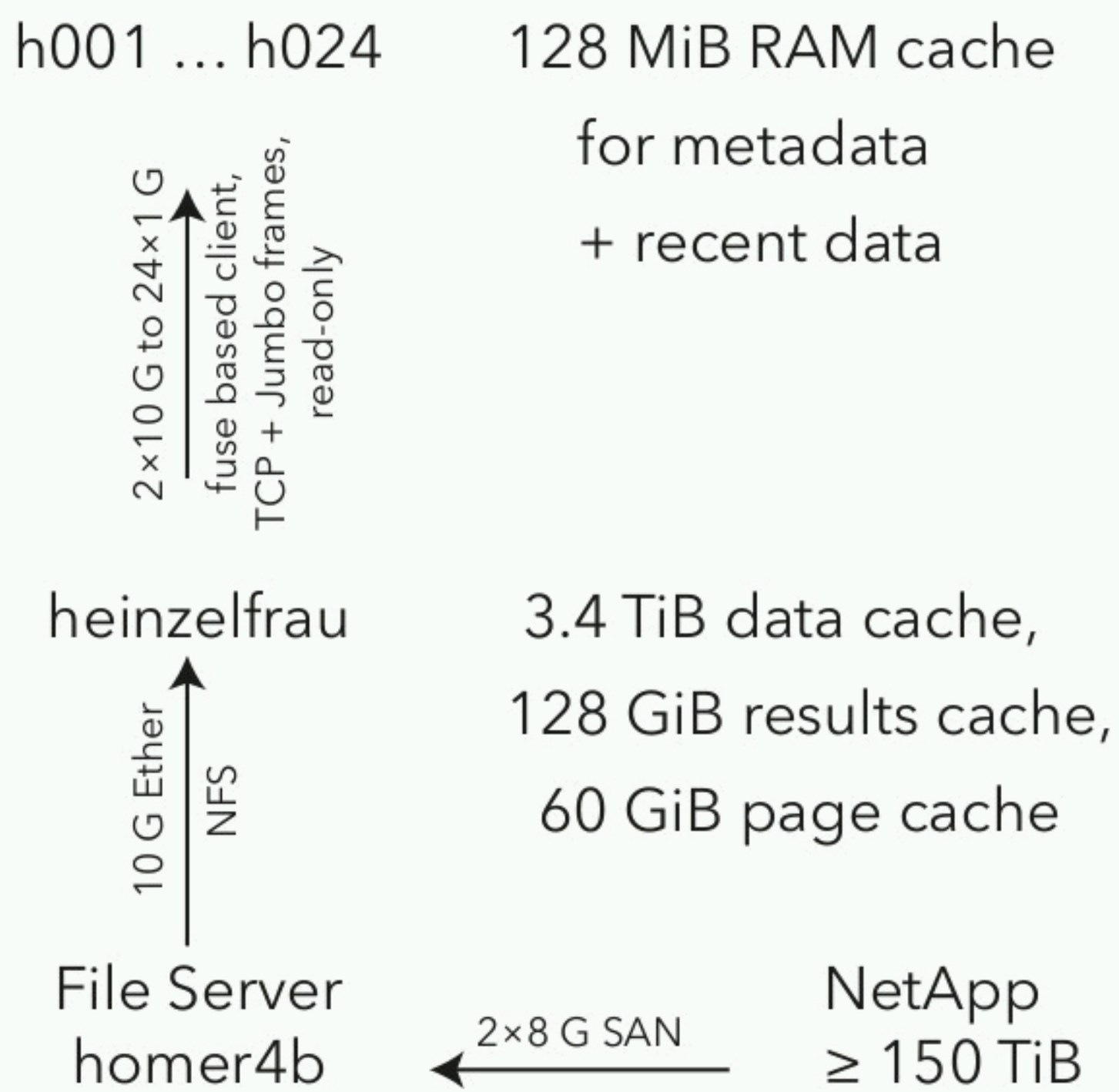
„Heinzelmännchen“ (24×450€):



Lösung für dieses Problem

dadafs (optimiertes Netzwerkprotokoll)

- nur lesen
- RAM-Cache
- Rohdaten auf NetApp
- SSD-Cache
  - Dateifragmente
  - Metadaten
- bis 14 GBit/s
- bis 3200 Eiger/s



IT-Infrastruktur in Göttingen

Institut für Röntgenphysik

aktueller Ausbau auf

- 2 neue Fileserver (Büro + Labor)
- 300 TiB lokaler Speicher
  + Massenspeicher im Rechenzentrum

- diverse Numbercruncher
  - bis 64 CPU-Kerne
  - bis 512 GiB RAM
  - bis 12 TiB Scratch

- Heinzelmann-System
  - 24 „kleine” Computer für parallele Jobs

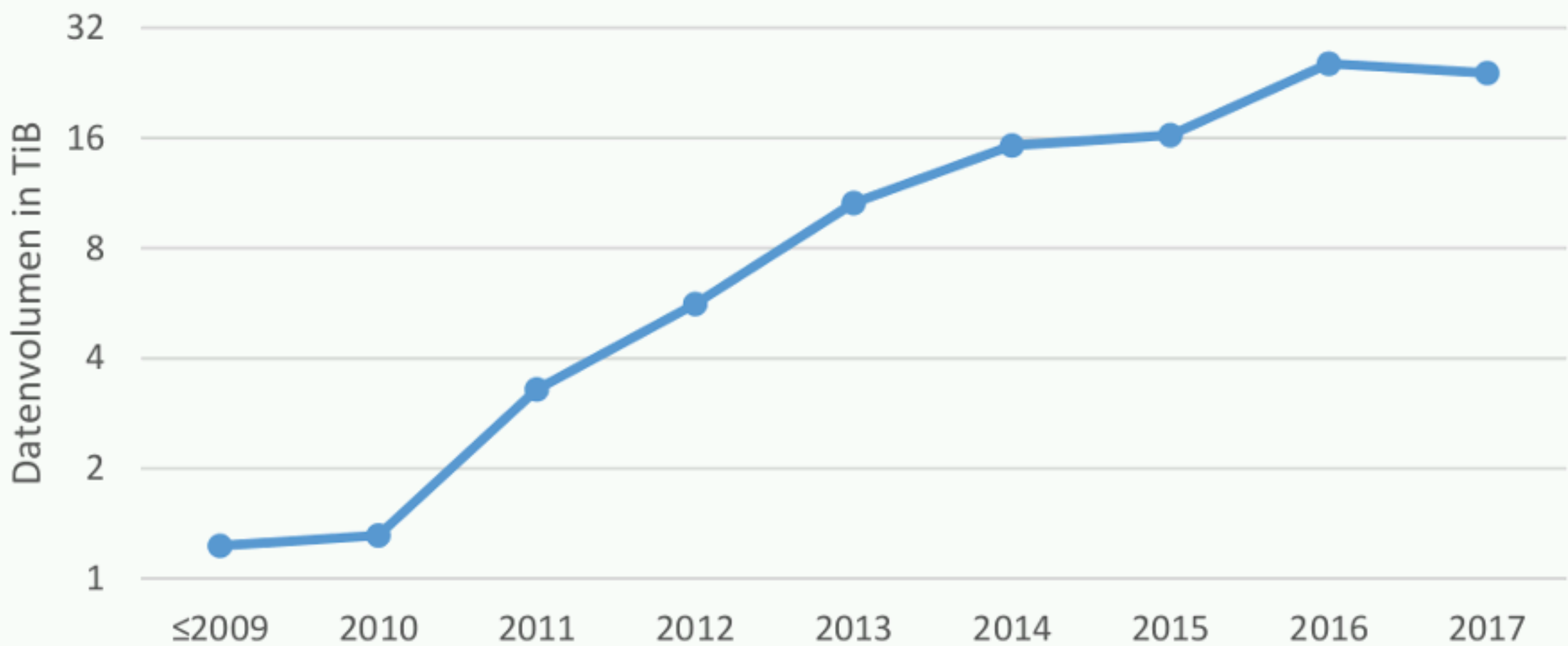
IT-Infrastruktur in Göttingen

Institut für Röntgenphysik

aktueller Ausbau auf

- 2 neue Fileserver (Büro + Labor)
- 300 TiB lokaler Speicher

jährlicher Daten**zuwachs** im IRP:



IT-Infrastruktur in Göttingen

GWDG

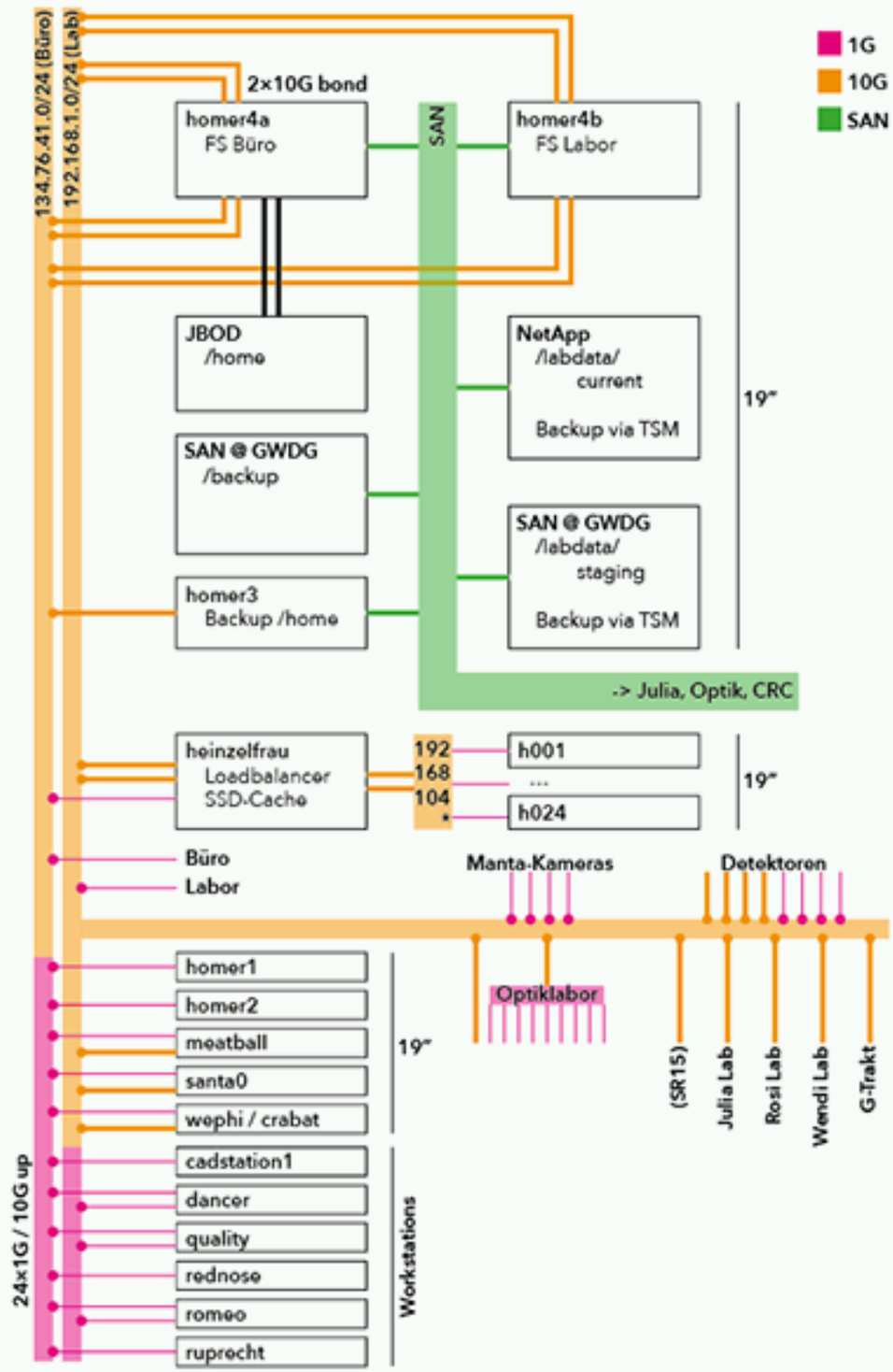
- Gesellschaft für wissenschaftliche Datenverarbeitung
- uniweites Rechenzentrum + Max Planck

- Netzwerk & Infrastruktur
- Basisdienste

- Massenspeicher per SAN / StorNext
- Parallelrechner

- HLRZ IV – norddt. Hochleistungsrechner, zweiter Standort neben Zuse-Institut Berlin

IT-Infrastruktur in Göttingen



Notwendige IT-Infrastruktur

Tomographie / Raster-nano-SAXS:

- Speichervolumen bis zu 1 TiB pro Tag
- viel RAM / viele Knoten

aktuelle Upgrades @ IRP:

- 10 GBit/s-Infrastruktur
- neue Speichersysteme
- weitere Auswertesysteme

Anforderungen @ DESY:

- Auswertepipelines (ähnlich XFEL)
- Nutzer erhält rekonstruiertes Volumen
- Experiment = Messzeit + Analyse vor Ort

Algorithmen

eigene Arbeiten sehr methodenorientiert

- Entwicklung neuer Algorithmen im Rahmen des SFB 755 zusammen mit Mathematikern
- Fragestellungen:
  - Korrektheit von Rekonstruktionen?
  - Konvergenz / Geschwindigkeit?
  - Verhalten unter Rauschen?
- Spannungsfeld zu Industrie / medizinischer Bildgebung / patentierte Algorithmen

Data-Policies: Embargo / Open Data

Methodenentwicklung braucht viel Zeit

- „das Experiment ist die Forschung”

- Datenauswertung kann mehrere Jahre dauern
- Folgeexperimente über einige Jahre

Data-Policies: Embargo / Open Data

Methodenentwicklung braucht viel Zeit

Methodenenwicklung würde behindert

- wenn andere Wissenschaftler „unsere“ Daten veröffentlichen, und damit „unsere” Methode nicht mehr „neu” wäre
- Urheberrecht

Data-Policies: Embargo / Open Data

Methodenentwicklung braucht viel Zeit

Methodenenwicklung würde behindert

Unsere Forderungen:

- Daten **mit/nach** der Publikation veröffentlichen,
- aber nicht vorher

- **keine verbindlichen Richtlinien für alle**

Wünsche zu Fördermaßnahmen

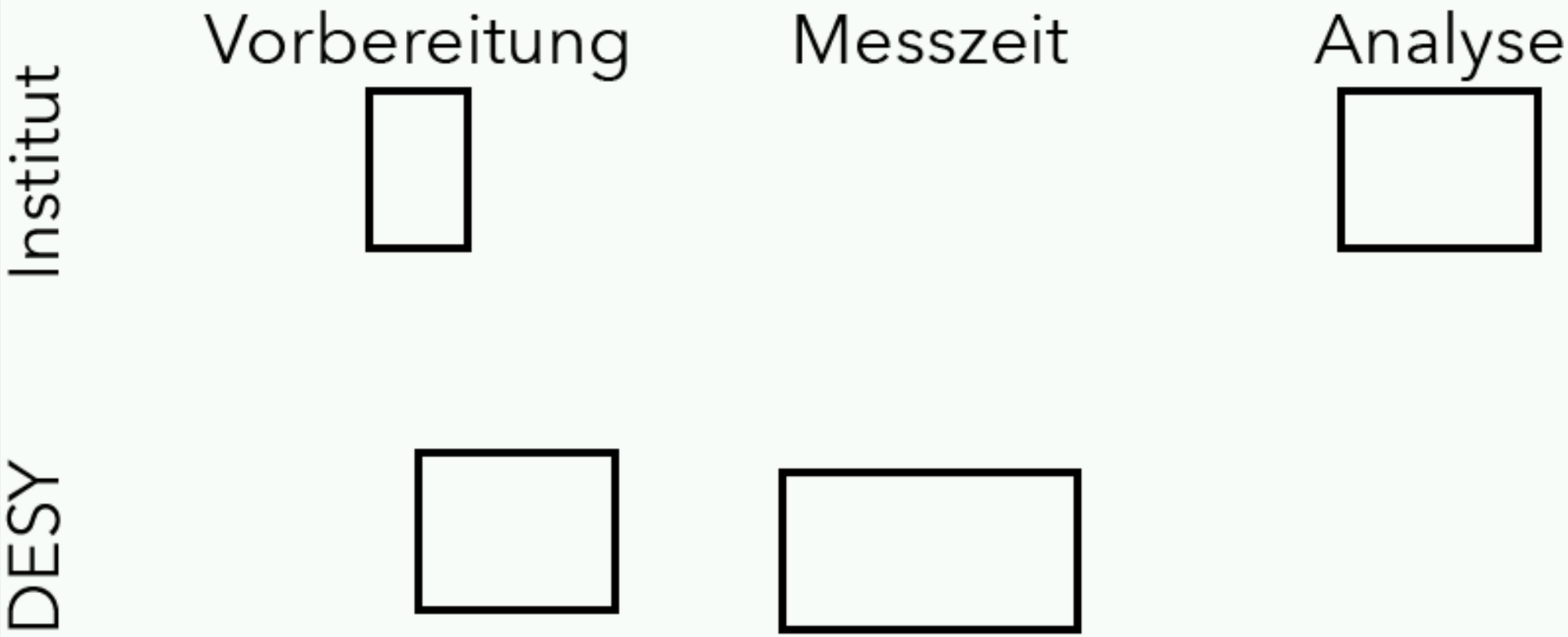
Infrastruktur

- Beschaffung von IT könnte einfacher sein …

Methodenentwicklung

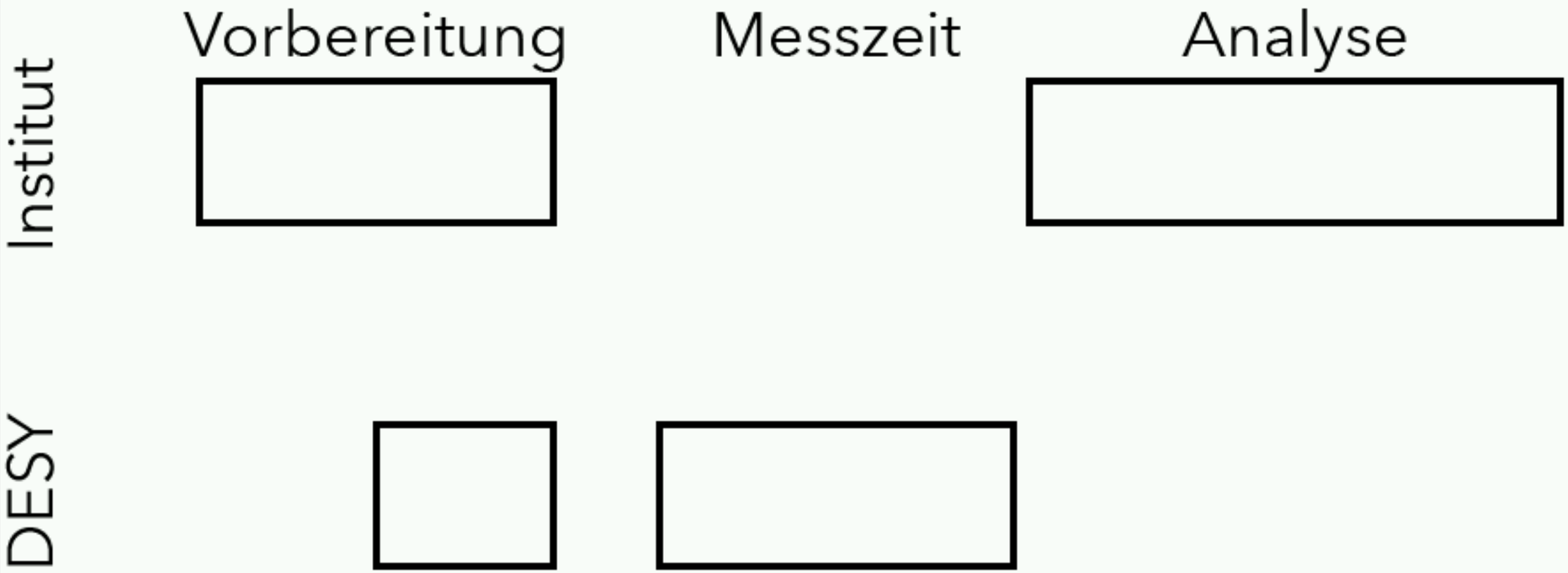
- Unterstützung, „fertige” Algorithmen in Infrastruktur der Einrichtung einzupflegen
- Programmierer (Backend, Frontend, Daten) (derzeit alles in Eigenleistung)

gestern, heute, morgen – eine Vision



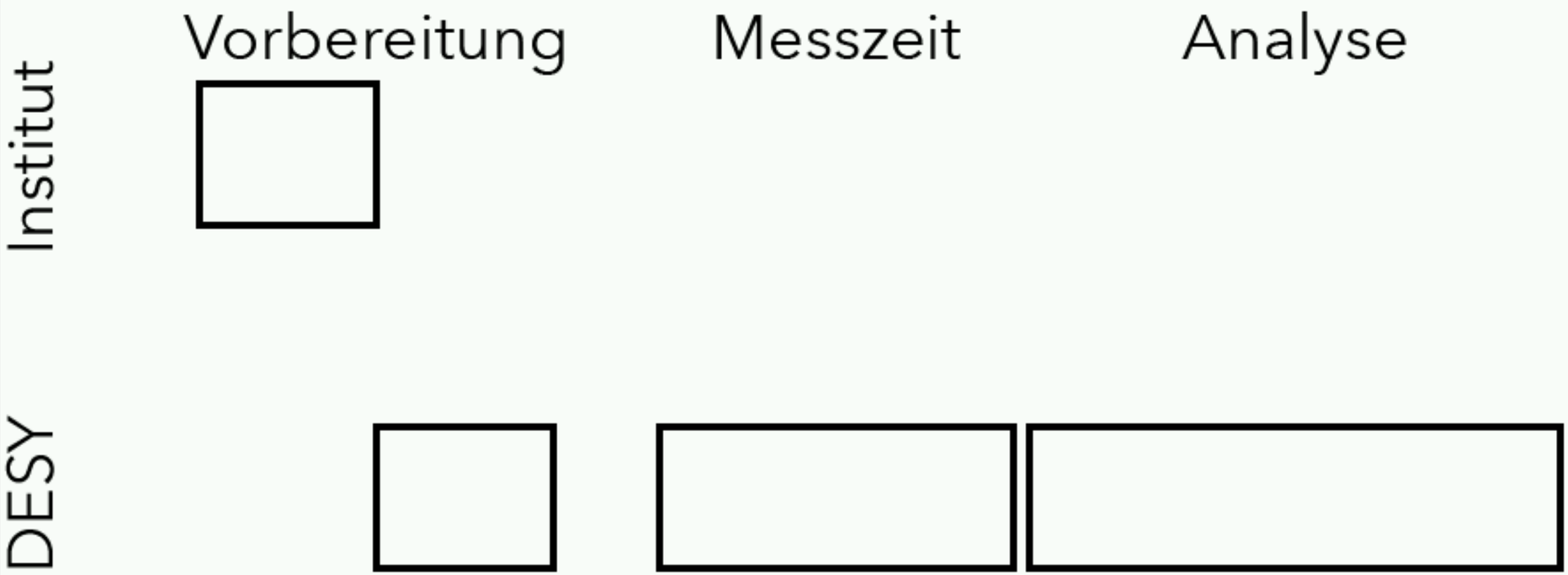
Nutzer arbeiteten sehr selbstständig,
alleine als einzelne Gruppe

gestern, heute, morgen – eine Vision



Nutzer planen die Messzeit mit DESY-Gruppe,
Analyse weiterhin alleine

gestern, heute, morgen – eine Vision



Nutzer-Gruppe(n) und DESY-Gruppe(n) planen,
Analyse fast nur noch vor Ort
DESY: Experte für **Daten**, Nutzer: Experte für **Frage**

Unser Bedarf (Zusammenfassung)

- IT
  - schneller Speicher vor Ort,
  - Auswertung parallel zum Experiment
- Algorithmen
  - eigene Entwicklung
  - Unterstützung durch Programmierer
- Open Data
  - keine allgemeingültigen starren Regeln
  - nicht zu früh