

中国科学院高能物理研究所  
*Institute of High Energy Physics*  
*Chinese Academy of Sciences*



国家高能物理科学数据中心  
National HEP Data Center

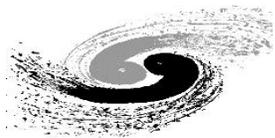


高能所计算中心  
IHEP Computing Center

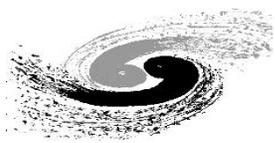
# HEPS光源实验中云计算平台系统 的设计和应用

徐吉平 胡庆宝 李亚康

2023年7月



- 高能物理实验及计算系统概况
- 高能同步辐射光源及计算系统概况
- HEPS光源云平台的研究基础和功能设计
- HEPS远程云桌面系统介绍
- HEPS光源云平台中的存储系统
- HEPS远程云桌面系统实验应用效果
- 总结展望



# 高能物理实验及计算系统概况



## ❖ 高能物理实验及相关应用:

- 实验粒子物理学
- 理论粒子物理学
- 天体物理学和宇宙射线
- 加速器技术和应用
- 核分析技术
- 计算和网络应用
- **同步辐射和应用**

## ❖ 计算模式及特点

- HTC: 高通量,日均百万计算任务
- HPC: 高性能,并行&GPU等异构加速
- 分布式计算: 资源整合及共享

**国际合作**

ATLAS CMS LHCb BELLE II AMS02 DUNE

**粒子物理实验**

**IHEP主导**

BESIII DYB JUNO CEPC LHAASO

**粒子物理实验**

**IHEP主导**

AlicPT AS HXMT GECAM

**天体物理实验**

**光源、中子源实验**

BSRF CSNS HEPS

**新挑战**



# HEPS光源及计算系统概况



当今大科学装置快速发展，实验数据存储和计算需求急速上升

高能同步辐射光源HEPS是《国家重大科技基础设施建设“十三五”规划》优先布局的十个重大科技基础设施之一，将成为世界上发射度最低、亮度最高的同步辐射光源，填补了我国高能区同步辐射装置的空白。

- 年均提供实验机时将在5000小时以上
- 第一阶段的 14 条光束线每月将产生数十 PB 的原始实验数据

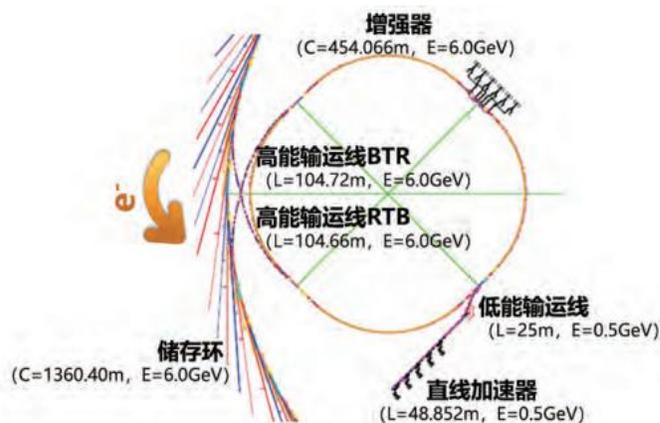
科学数据

大科学装置



科学计算

科学管理



Main parameters	Unit	Value
Beam energy	GeV	6
Circumference	m	1360.4
Emittance	pm·rad	< 60
Brightness	phs/s/mm <sup>2</sup> /mrad <sup>2</sup> /0.1%BW	>10 <sup>22</sup>
Beam current	mA	200
Injection		Top-up



# HEPS光源及计算系统概况

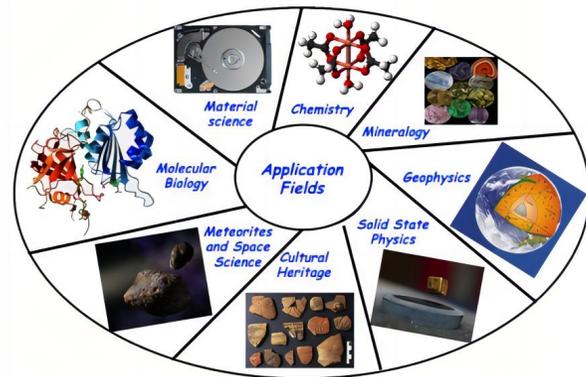


同步辐射是物理学、化学、材料科学、生命科学、医学等领域最先进的工具之一，实验分析场景更加多样化，时效性要求更高。同时也给计算、数据存储等工作提出了新的挑战。

计算作业



新模式



大数据量

多实验种类

高性能需求

HEPS中的成像类、晶体散射类、AI类等实验的特点:

- 对图像显示效果要求高，观察样品细节
- 需要大量存储，TB 到 PB级的非结构化数据
- 需要大内存，实验软件使用大的RAM来处理图像
- 需要高性能GPU计算和图像处理：CT图像重建和渲染、AI算法
- 很多实验分析软件不开源，无法集成

光源用户使用本地计算环境进行数据下载和分析或提交批处理计算作业的方式无法完全满足实验需求。如何使用云计算的方法，提供计算平台和高性能GPU计算服务至关重要。

## HEPS Beamlines

- Engineering Materials
- Hard X-ray Multi-analytical Nanoprobe
- Structural Dynamics Beamline
- Hard X-ray Coherent Scattering
- Hard X-ray High Energy Resolution Spectroscopy
- High Pressure
- Hard X-ray Imaging
- X-ray Absorption Spectra
- Low-dimension Structure Probe
- Biological Macromolecular Microfocus
- SAXS with Pink Beam
- High Resolution Nanoscale Electronic Structure Spectroscopy
- Transmission X-ray Microscope
- Tender X-ray



# HEPS光源云平台



高能所计算中心  
IHEP Computing Center

在复杂的计算环境中，云计算可以显著提高计算资源利用率，可以快速发布和弹性配置(计算,存储,网络)

高能所计算中心基于 OpenStack 和 K8S搭建了 IHEP 公共服务云和交互式计算平台

CERN使用云服务支持站点的物理计算和基础设施服务，为用户提供计算密集型数据处理、WLCG和 CERN服务的节点



优势明显

## 安全性

使用行业标准的安全实践来保护数据安全，包括防火墙、加密和身份验证系统。

## 可扩展性

按需扩展或缩减系统

## 流动性

实现更大的灵活性和移动性

Anytime, Anywhere, Any device

## 高性能

不受本地硬件限制，远程高性能服务器支持

## 更好的协作

提供了一个协作的在线环境



## 一致性的体验

确保操作都在同一页面上

## 降低成本

灵活且可扩展的同时，节省硬件、升级和软件许可方面的费用。

## 易集成

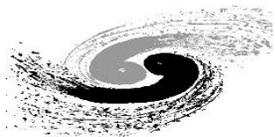
集成各类实验分析软件，软件框架

## 海量存储

分布式文件系统：文件存储、快存储、对象存储

## 灾难恢复

为自然灾害和电力中断等紧急情况提供快速恢复



虚拟计算云

为HEPS光源实验用户提供计算虚拟机、虚拟远程云桌面等服务，开展光源类实验分析，数据处理等工作



公共服务云

为用户服务系统等业务应用服务器提供虚拟化IT资源和云服务



容器计算云

使用K8S容器编排动态整合计算资源，通过 web 浏览器为用户提供可交互的UI软件、算法开发以及数据处理环境



HPC

Slurm集群支持CPU并行计算和GPU异构加速计算

用户服务



监控服务



代理服务



认证服务



集群管理服务



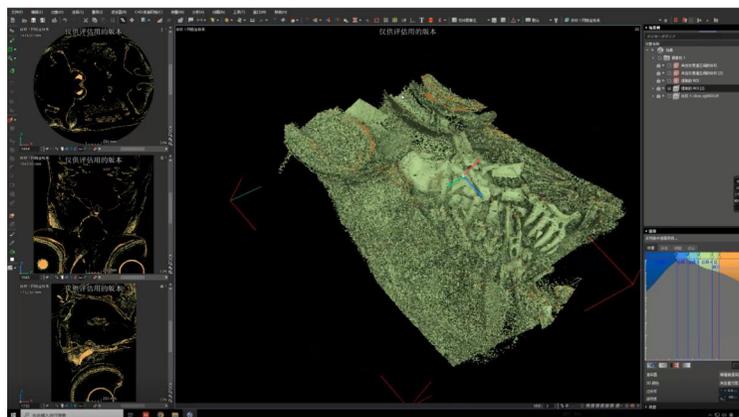
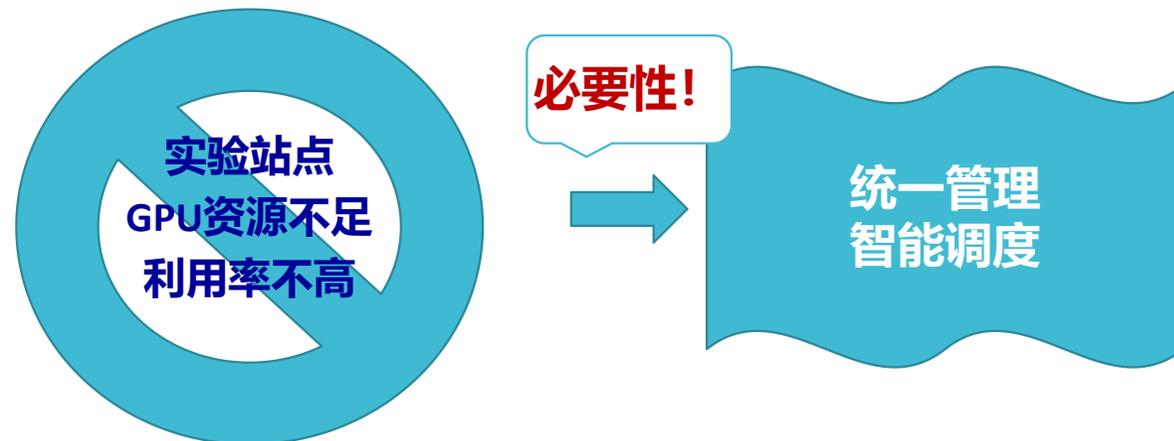


# HEPS虚拟计算云-远程云桌面

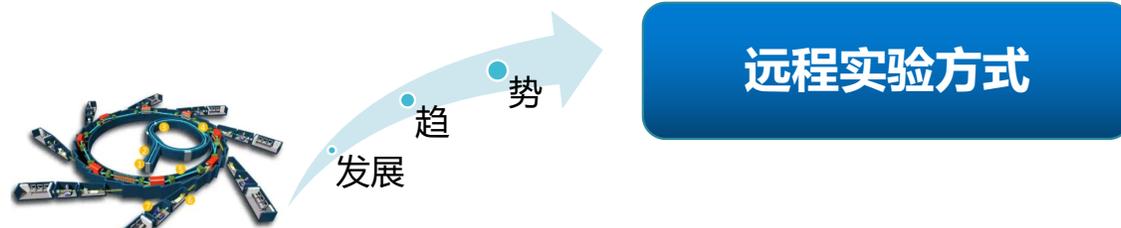


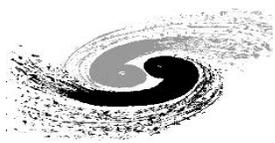
一般的远程桌面软件在光源实验成像类等实验无法满足实验要求:

- 分辨率、帧率
- 渲染速度慢, 转换3D视角卡顿
- 与HEPS服务、数据管理等系统无法融合



目的建立一个面向光源类实验远程云桌面系统, 使用户可以清晰便捷地访问云端的操作系统界面, 一站式完成实验分析工作, 提供高分辨率和高帧率的显示效果, 研究更高效CPU&GPU异构资源调度算法, 进行高性能计算、图像处理, 提高实验分析的效率。





# HEPS远程云桌面-整体架构



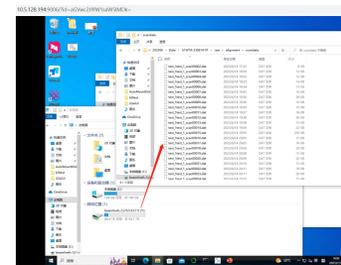
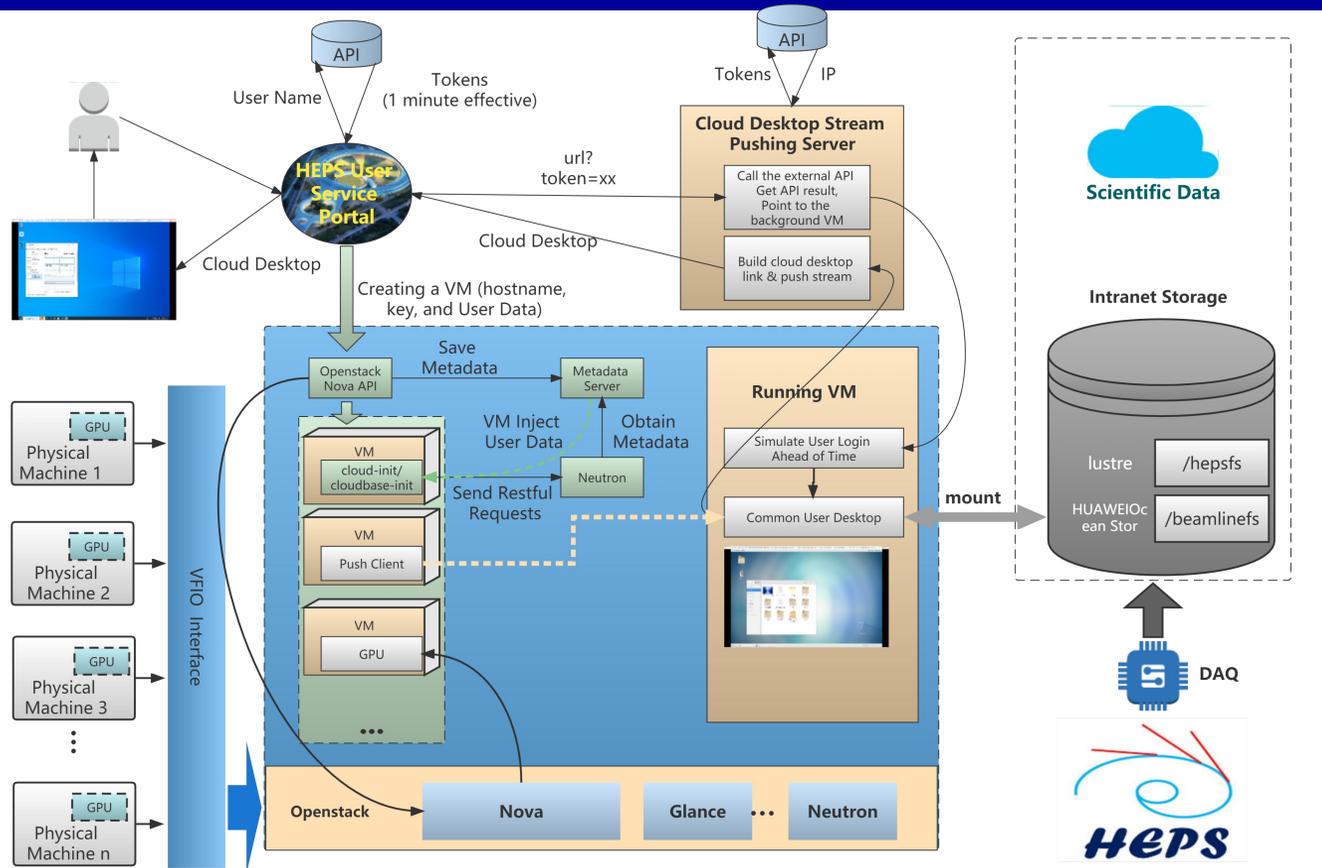
Infrastructure as a service

Platform as a Service

Software as a Service

Desktop as a Service, DaaS

- Computing Cluster
- Computing Platform
- Experimental Software
- OS Interface



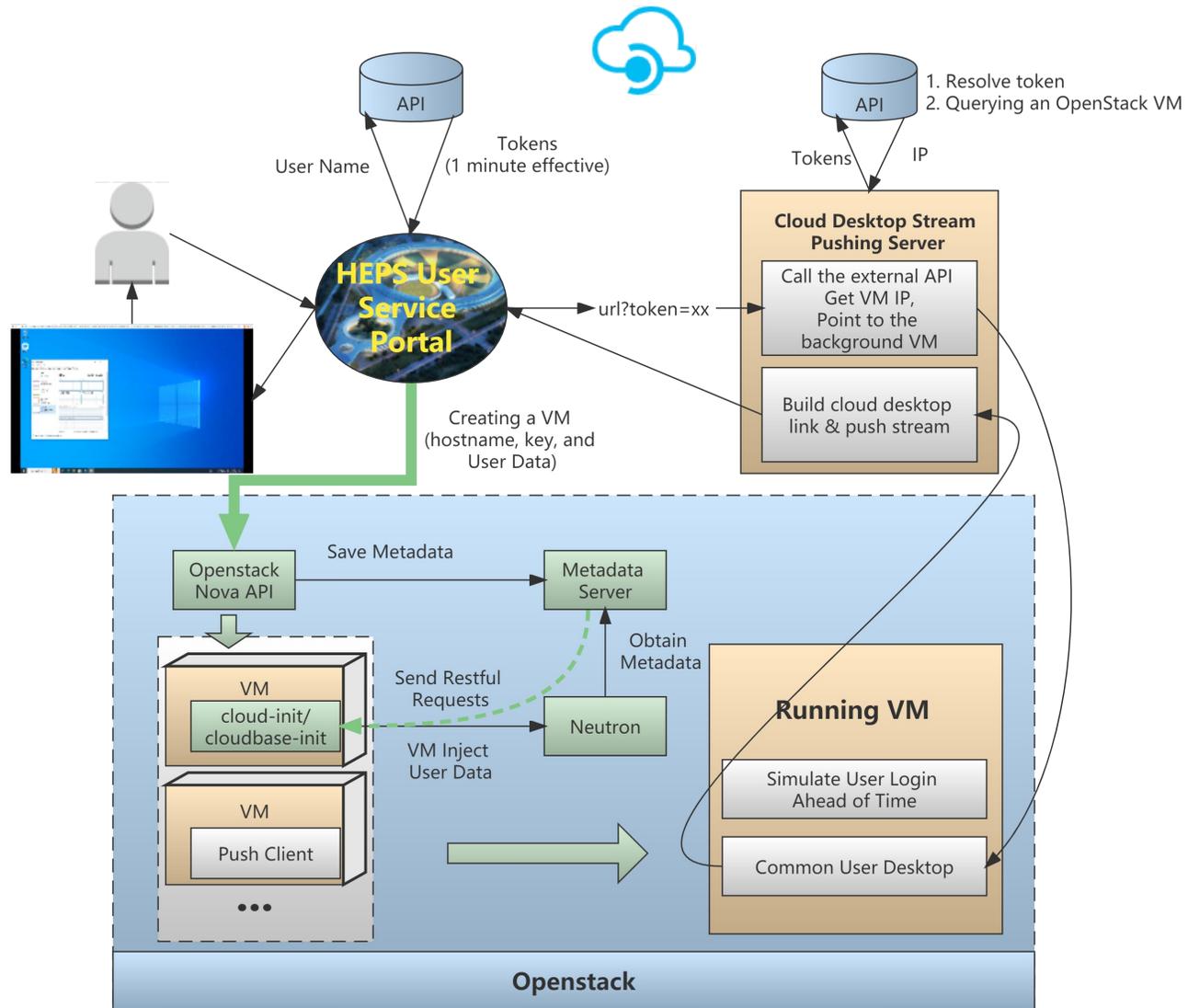


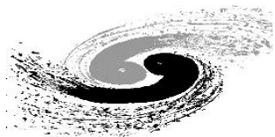
# HEPS远程云桌面-认证模式



## Token认证模式

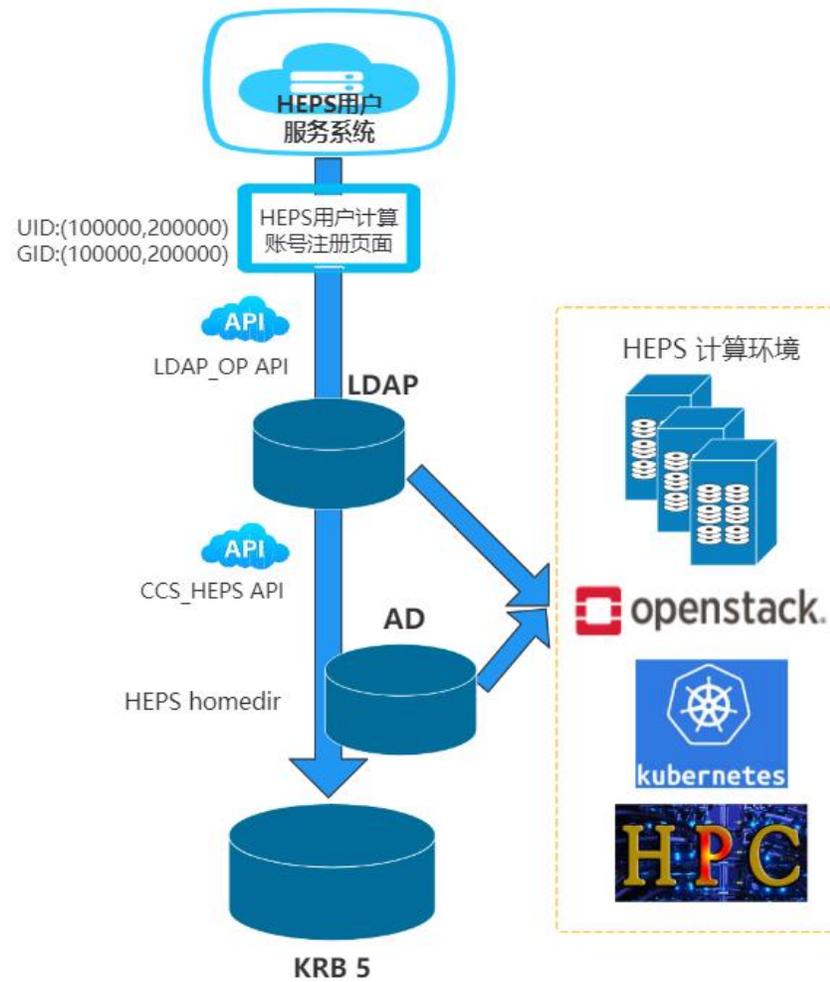
- HEPS用户服务网站根据当前登录用户的统一认证信息访问token服务器，获取token
- 用包含推流服务器的IP、端口号和token的URL在浏览器中访问云桌面推流服务器。
- 推流服务器接收到请求，调用外部API解析token获取用户身份，查询对应云桌面虚拟机的IP。
- 推流服务器将虚拟机的OS界面推送到浏览器的新页面。

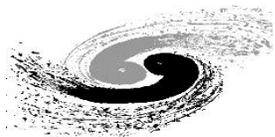




## AD域账号管理系统 - 统一认证系统

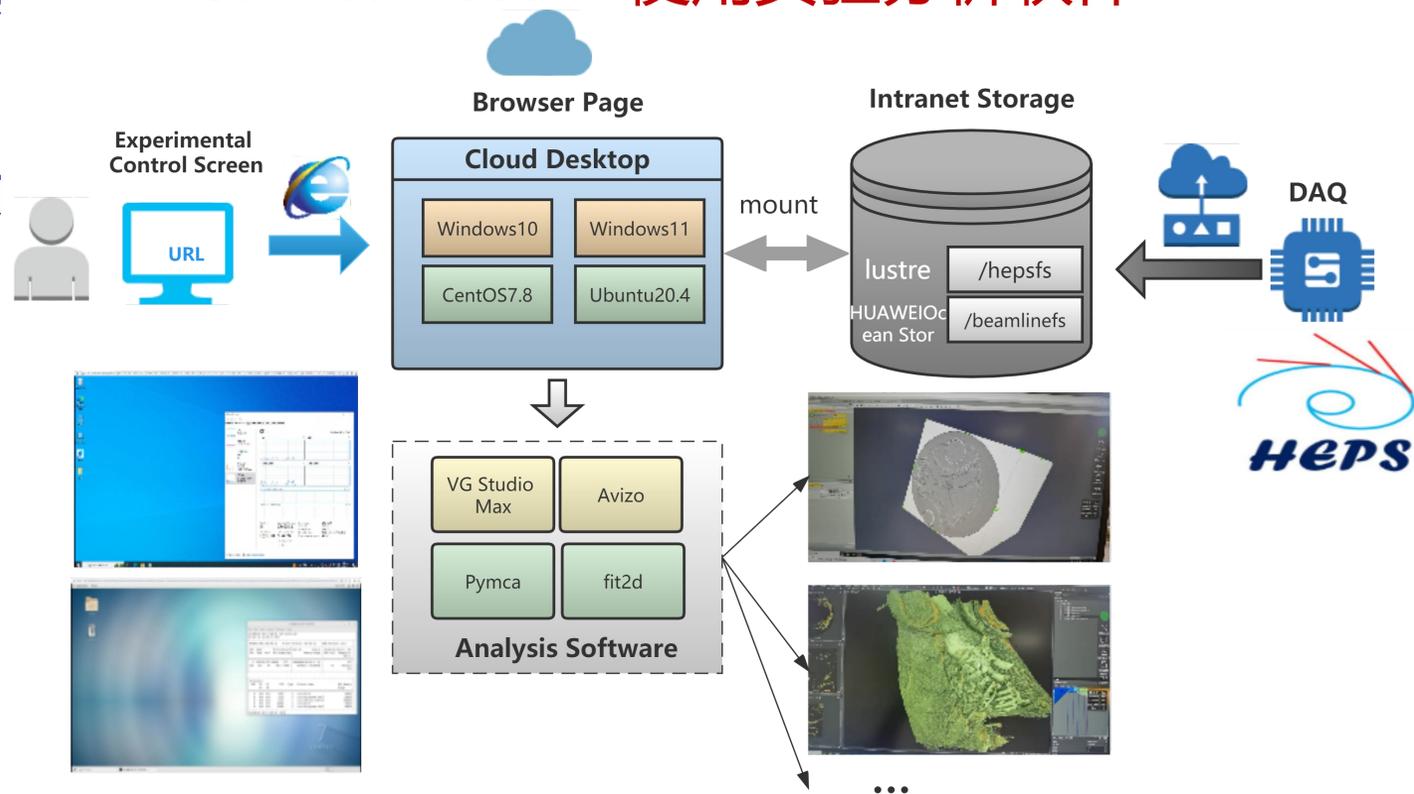
- 创建光源计算环境账号
  - 用户从服务系统申请创建计算环境账号
  - API添加实验组成员，自动创建成员的计算环境账号
- 同时创建LDAP账号和AD域账号
- 用户通过AD域账号登录远程云桌面，携带身份信息访问分布式存储系统
- 存储系统中完成AD域账号到LDAP域的映射，赋予用户正确的访问权限

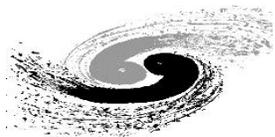




- 非开源的实验分析软件；自研计算平台和软件框架
- 云桌面的镜像包括Windows, Linux多个版本
- 对于不同的实验站，云桌面的镜像差异化定制，硬X射线成像线站会配置VG Studio Max，高压线站会配置Fit2D、Dioplas。

## Service mode 1: 使用实验分析软件





# HEPS远程云桌面-服务模式

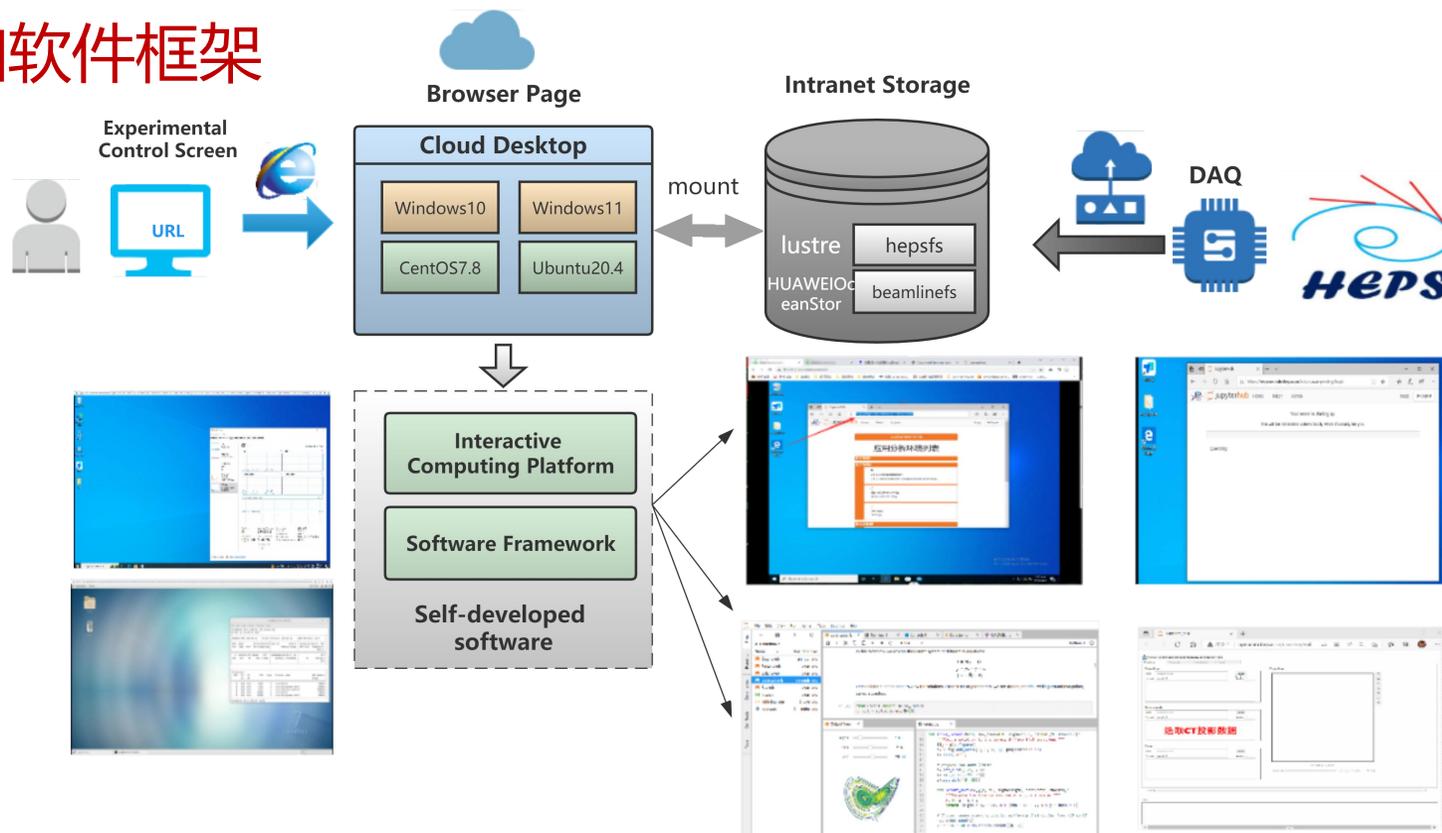


Service mode 2:

作为门户：使用交互式计算平台和软件框架

支持以下分析环境：

- HEPSCCT
- cumopy
- alphafold



- 软件框架将计算硬件资源抽象，提供标准的调用接口给上层应用，给用户提学科软件开发环境。
- 交互式计算平台通过 web 浏览器为用户提供软件、算法开发以及数据处理环境，使用K8S动态整合计算资源

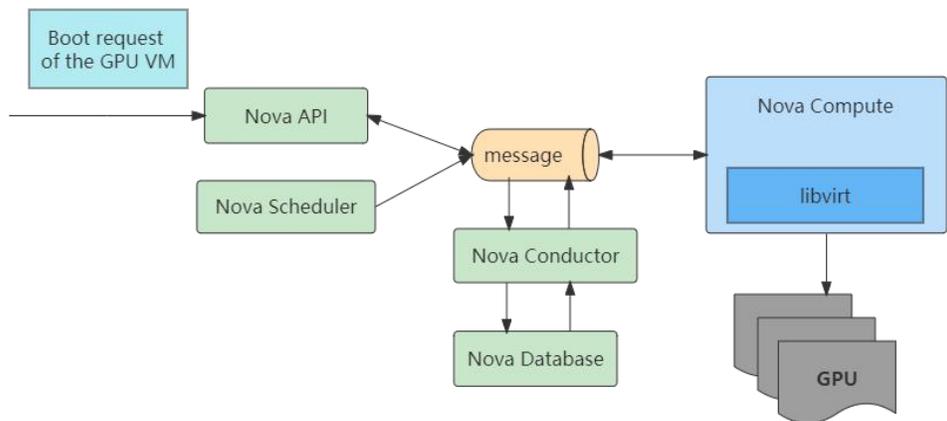


# HEPS远程云桌面-使用GPU



云桌面需要高性能的GPU来做图形处理，虚拟机通常只能使用虚拟的显卡设备，性能和功能都受到限制。

使用PCI-passthrough将物理显卡映射到云桌面虚拟机中，虚拟机直接访问显卡的硬件资源，从而获得更好的图形性能和用户体验。

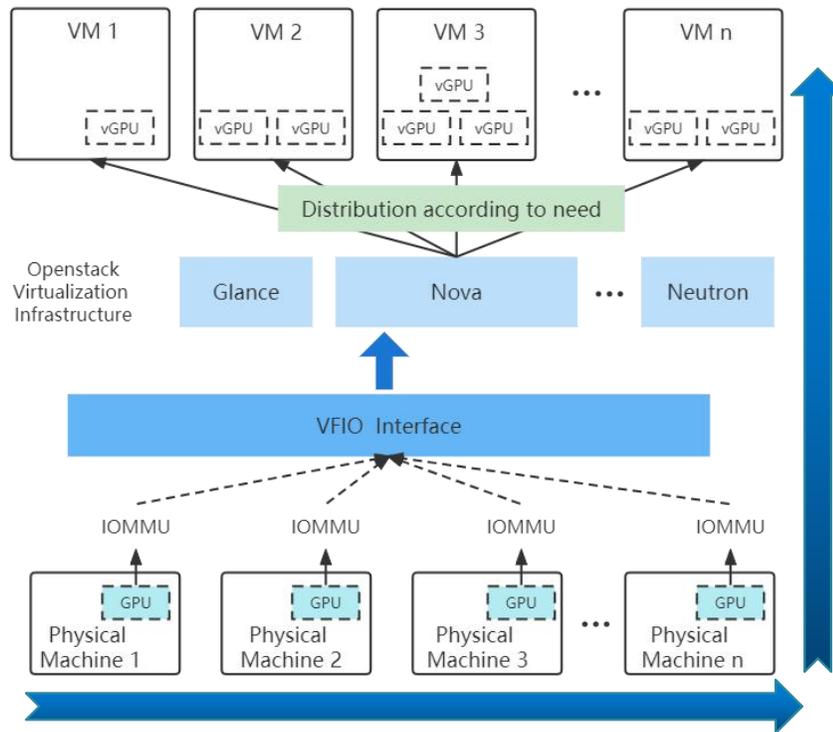


OpenStack  
计算节点

Easy Configuration

High Performance

Universality



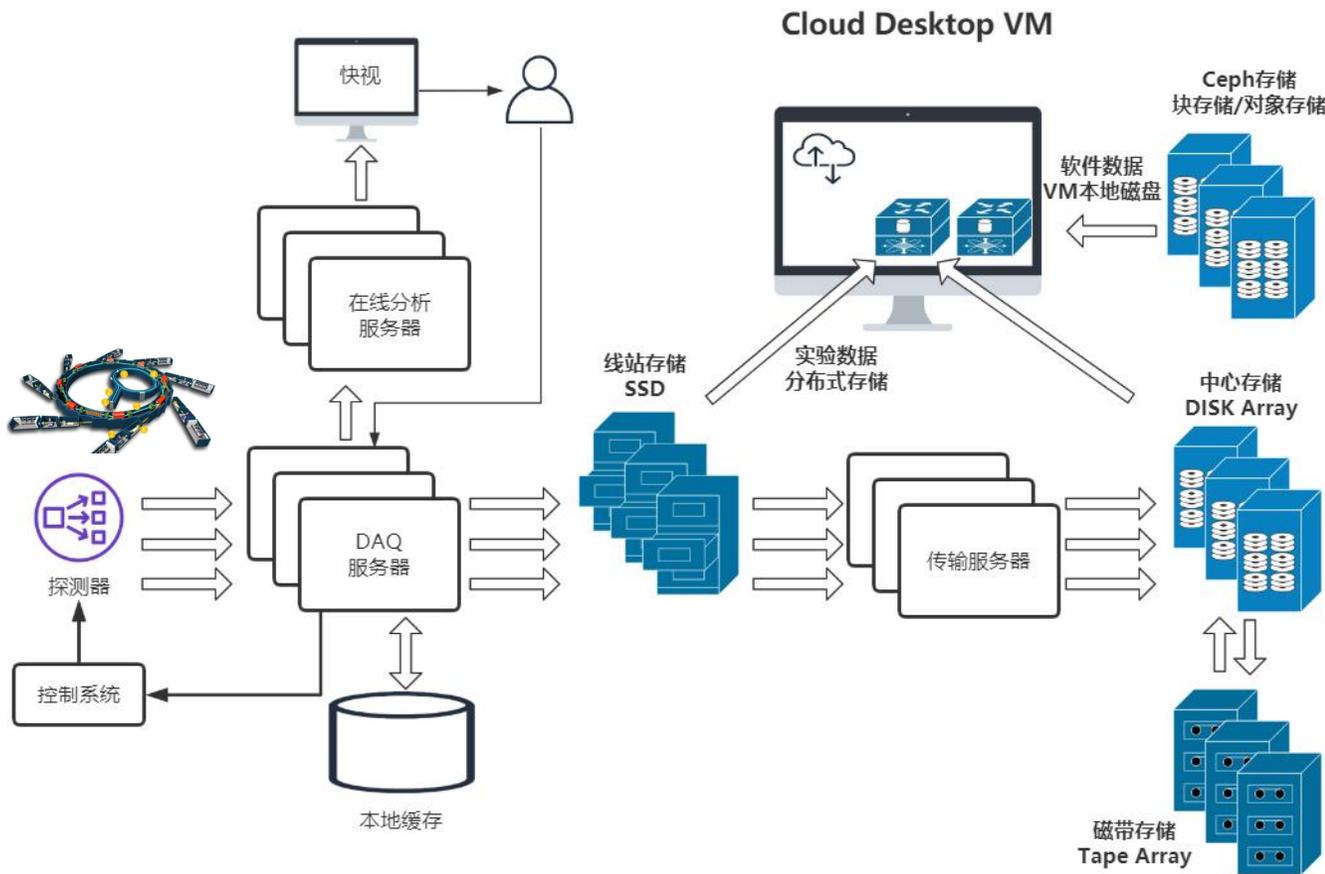


# HEPS云平台中的存储系统



## HEPS存储系统架构

- DAQ 数据采集
- 线站存储: ALL SSD, 快速的数据读写速度和低延迟
- 中心存储: Lustre/HW9550 分布式磁盘存储, 兼顾读写速度和容量
- 磁带存储: EOS CTA, 高密度大空间, 数据永久保存, 存储成本低
- Ceph存储:
  - 提供高性能、可扩展的块存储、对象存储、文件存储。
  - 提供虚拟机磁盘存储、快照、克隆等, 提高虚拟机的可用性和灵活性。
  - 高可用性和容错性: 在某个存储节点或硬盘发生故障时, 数据仍然可靠地存储和访问。保证虚拟机的数据不会丢失, 并且可以快速恢复故障节点的数据完整性。

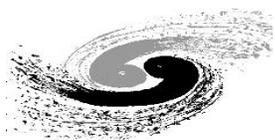


在线分析

数据采集过程中分析

离线分析

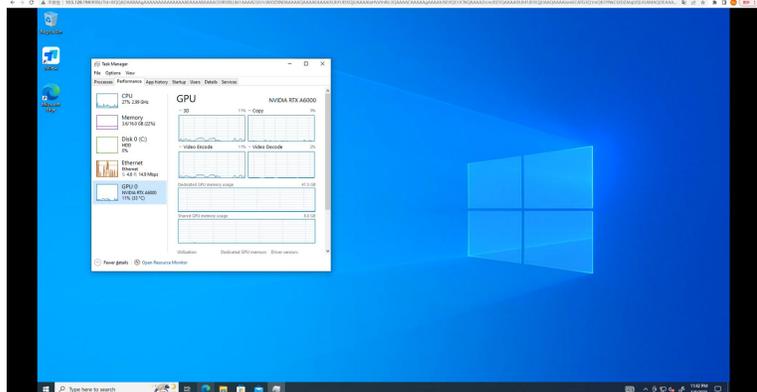
实验结束, 数据落盘, 用户离开HEPS后的分析



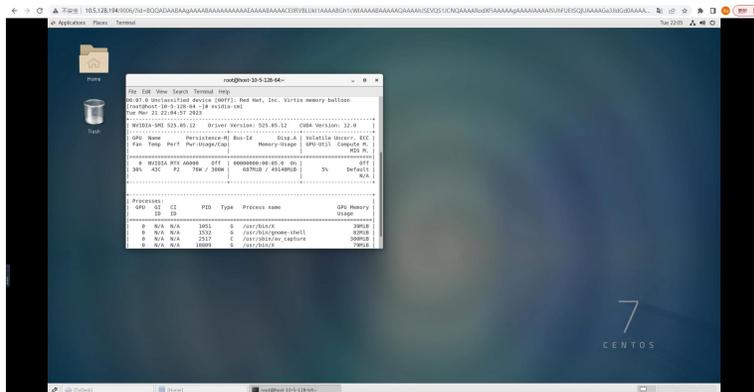
# 应用效果



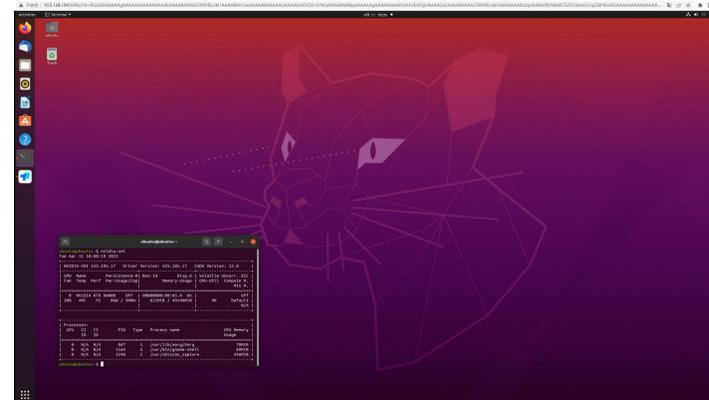
延迟: <50 ms 帧率: 30—120 FPS 分辨率: Max=3840\*2160



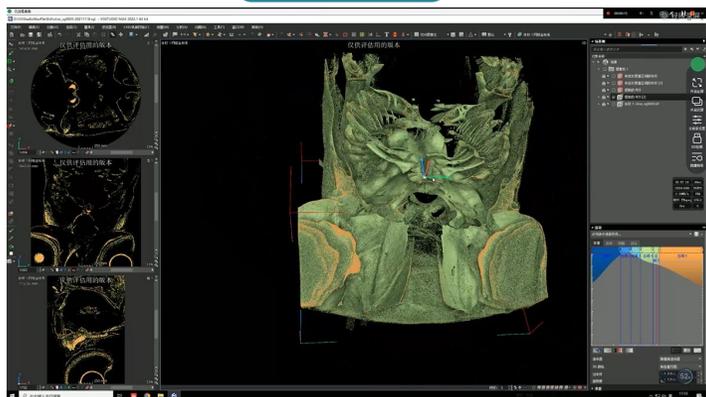
Windows  
10



CentOS  
7.8

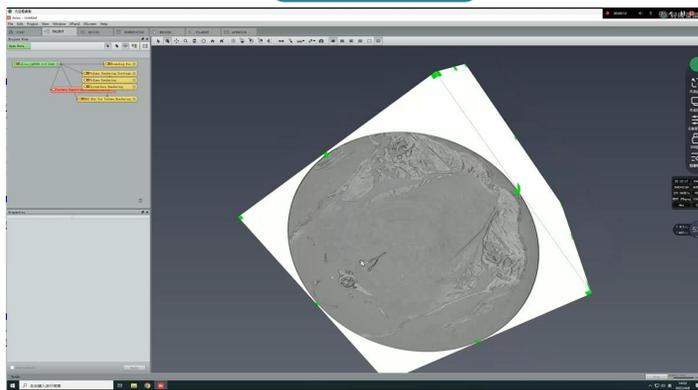


Ubuntu  
20.04

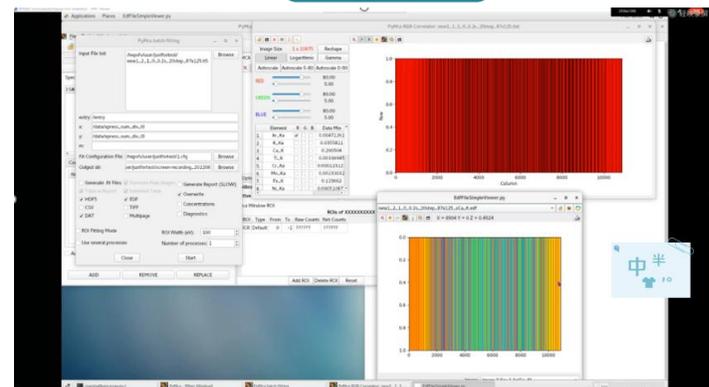


VG Studio  
Max

三维数据分析和可视化, 处理CT、MRI、X射线, 进行三维重建、分割、形态分析、缺陷检测



Avizo



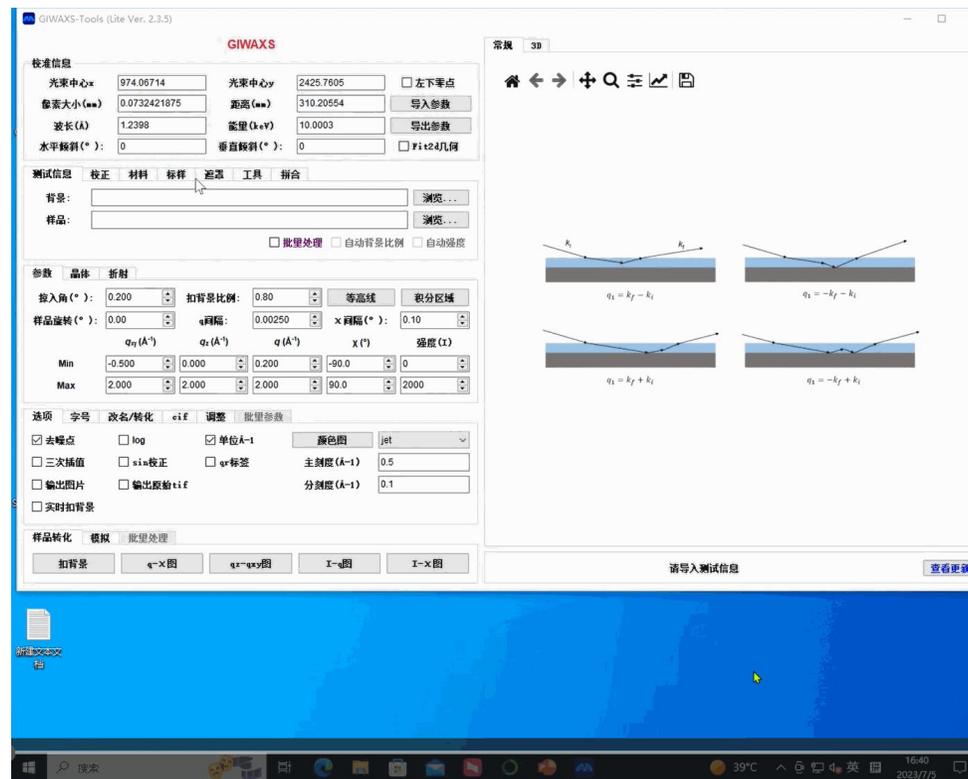
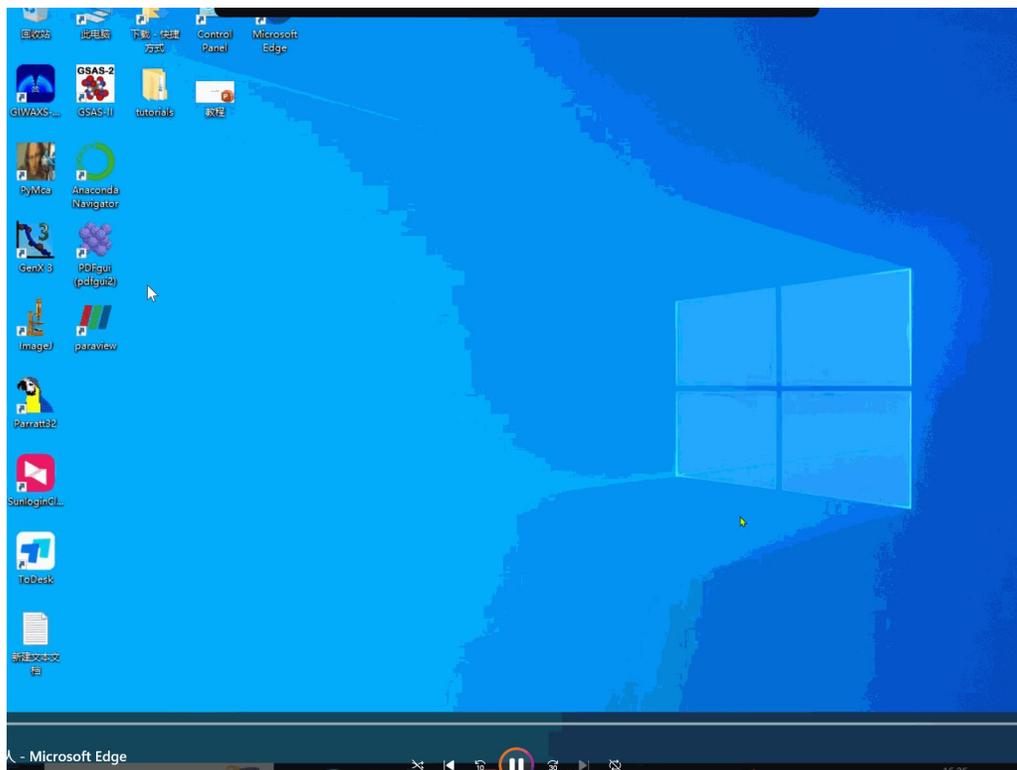
Pymca

基于Python的多元素分析软件,用于光谱数据分析

数据来源于:  
BSRF

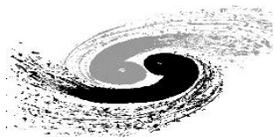


# 应用效果

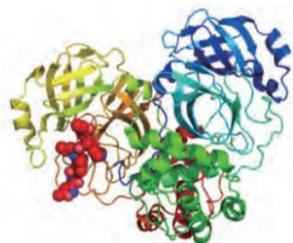


## 使用场景：x射线吸收谱学线站

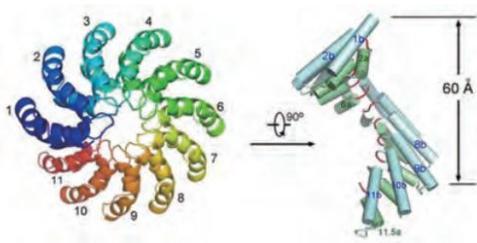
PDFgui 用于分析和处理X射线和中子衍射数据，帮助解析晶体结构和材料性质



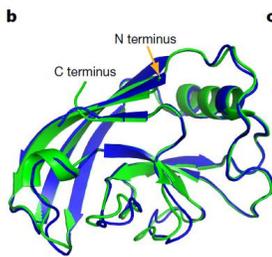
# 第四代同步辐射光源



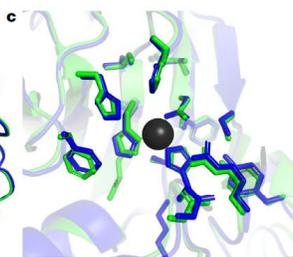
2003年，清华大学的饶子和院士团队利用北京同步辐射装置获得了非典（SARS）病毒主蛋白酶的三维结构，以此为基础仅仅几个月的时间就筛选出了适合成药的化合物。



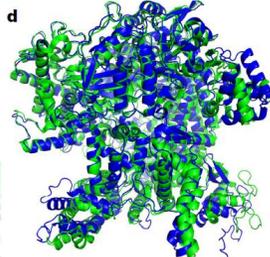
2012年，清华大学颜宁研究组和施一公研究组利用上海光源，合作解析出TAL效应蛋白特异性识别DNA的结构基础，这一研究成果入选2012年度“中国科学十大进展”。



AlphaFold Experiment  
r.m.s.d.<sub>95</sub> = 0.8 Å; TM-score = 0.93



AlphaFold Experiment  
r.m.s.d. = 0.59 Å within 8 Å of Zn



AlphaFold Experiment  
r.m.s.d.<sub>95</sub> = 2.2 Å; TM-score = 0.96

蓝色：预测结构；绿色：真实结构

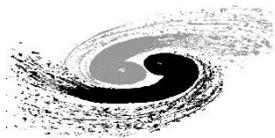
在2020年末CASP14中，Alpha Fold2对大部分蛋白质结构的预测与真实结构只差一个原子的宽度，达到了人类利用冷冻电镜等复杂仪器观测的水平，震惊了结构生物学界 *Nature* 596, 583–589 (2021)

HEPS云计算平台采用**集中式的资源管理**，其中远程云桌面可以提供与用户本地数据分析同等的操作便利性，**提供更合理的资源调配策略和更强劲的计算分析能力**。目前云平台的规模在持续扩展中，下一步将有更多的光源线站加入实施过程，在大规模的使用中不断改进和完善。

我们目标是**研究和建设面向HEPS光源实验等大科学装置实验的云计算平台系统**

- ▶ 新一代同步辐射光源必然是新的计算技术、存储技术、网络技术共同推动的
- ▶ 大数据和人工智能或许决定了同步辐射科学未来的发展趋势以及新成果的研究方向

HEPS云计算平台将探索更丰富的技术服务，助力光源实验探索微观世界



Thanks