

PAUL SCHERRER INSTITUT



WIR SCHAFFEN WISSEN – HEUTE FÜR MORGEN

PSI AWI department meeting 2

7901 host <https://indico.psi.ch/category/557/>

Next host is 7902

Bi-Monthly Meeting 7901 Host



Tuesday 3 May 2022, 09:00 → 10:30 Europe/Zurich

Description <https://psich.zoom.us/j/66701545202>

09:00 → 09:20 **AWI General Update**

Speaker: Alun Ashton (PSI - Paul Scherrer Institut)

🕒 20m

09:20 → 10:20 **7901 presentations**

09:20

Tools at SwissFEL: slic & sfdata

Speaker: Sven Augustin (PSI - Paul Scherrer Institut)

🕒 30m

09:50

SciLog - An electronic logbook for user experiments

Speaker: Klaus Wakonig (PSI - Paul Scherrer Institut)

🕒 10m

10:00

Towards a unified BEC solution for SLS 2.0

Speaker: Klaus Wakonig (PSI - Paul Scherrer Institut)

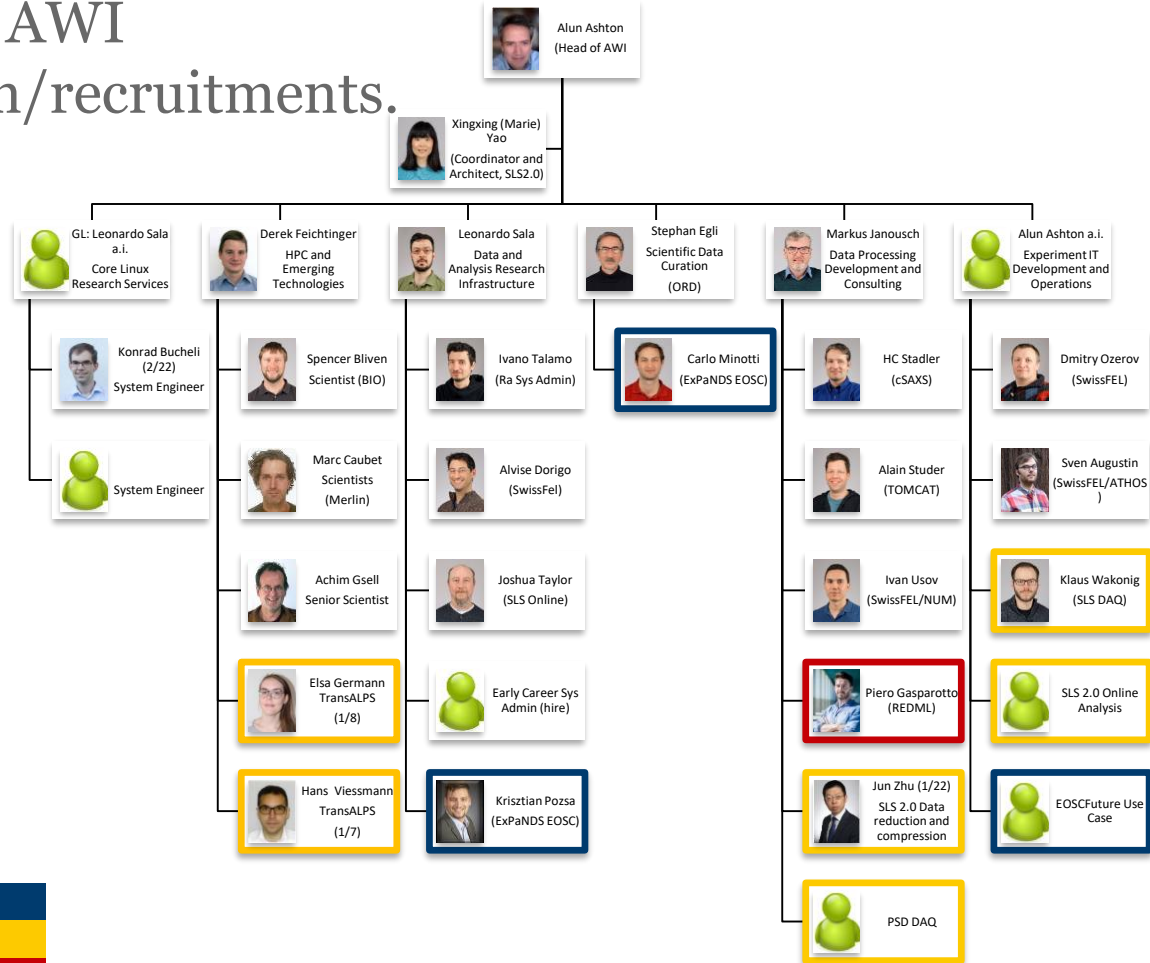
🕒 20m

10:20 → 10:30 **AOB**

🕒 10m

Updates on AWI organization/recruitments.

- Hans Viessmann (1/7) and Elsa Germann (1/8) start on TransAlps (7905)
- [re-]advertise
 - GL & SE Core Linux Research Services
 - Early career Sys admin
 - SE SLS 2.0 Online Analysis



Key to Fixed Term Roles

EU Funded

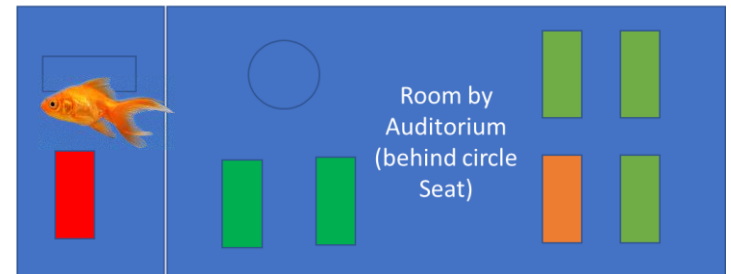
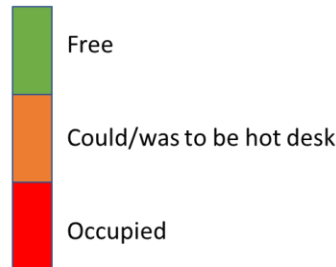
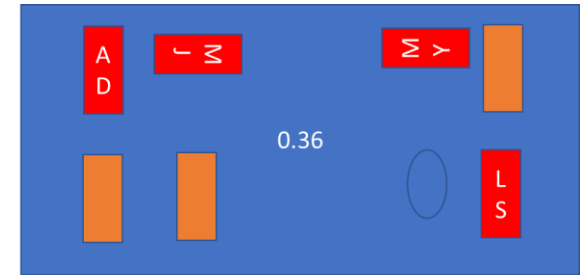
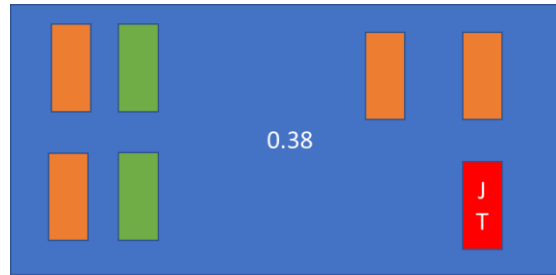
PSI Funded fixed term

Swiss Funded initiatives

Office space update

- OBBA 'update'
- WHGA and return to office, all still to be finalized, if you don't have a desk, use hot desk in office off auditorium area.

- 19 staff in West
- 21 desks
- 6 roles known in pipeline.



Return to office

- Please see last nights emails
 - if we require additional furniture/cupboards/lockers/IT equipment....
- Discuss with GL how you will work.
 - Expect more PSI meetings to now to be on site.
- Questions?

- Open research data <https://ethrat.ch/en/eth-domain/open-research-data/>
- <https://discovery.psi.ch>
- SLS 2.0
- European projects (ExPaNDS, EOSCFuture, LEAPSIInnov, AI4SI....)
- EnhanceR: <https://www.enhancer.ch/> (Evolve into e.g. <https://researchsoftware.org/>)
- AWI management trialing <https://psi-scicomp.getoutline.com/home> wiki
- IT quarterlies, topics to present?
- AWI highlight for SCD@DIRK

Save the Date

Thursday, May 19, 2022 at 4 pm
Meeting point: Brugg train station

We are happy to announce the SCD Summer Event 2022

**A little adventure is awaiting us at the Vindonissapark
in Windisch, followed by a cozy get-together with
delicious food.**

**A detailed agenda will follow as soon as everyone has filled in the
Nuudel poll: [HERE](#) Deadline for registration → May 4, 2022**

- <50% of the department completed the poll.

Schneller und smarter

Wenn Grossforschungsanlagen wie der Schweizer Freie-Elektronen-Röntgenlaser SwissFEL und die Synchrotron Lichtquelle Schweiz SLS auf Hochtouren laufen, produzieren sie gewaltige Mengen an Daten. Um diese zu interpretieren und beispielsweise zur Entwicklung neuer Medikamente oder Materialien zu nutzen, bündelt das PSI jetzt seine Expertise im neuen Forschungsbereich Computergestützte Wissenschaften, Theorie und Daten.

Text: Bernd Müller



Alun Ashton kümmert sich am PSI darum, dass Forschende eine exzellente IT-Infrastruktur nutzen können.

Die Forscherkarriere von Alun Ashton begann in den 1990ern, also gewissermassen in der Steinzeit, zumindest was die Nutzung von Computern betrifft. «Als Student habe ich die Daten meiner Messungen auf Floppy-Discs gespeichert», erinnert sich der Biochemiker und Computerwissenschaftler. Für alle, die nicht wissen, wovon hier die Rede ist: Disketten waren wechselbare Magnet-speicher, die in ihrer modernsten Ausführung sagenhafte 1,4 Megabytes fassen konnten. «Müsste ich die Daten, die heute an nur einem Experiment an der Synchrotron Lichtquelle Schweiz SLS entstehen, auf solchen Floppys speichern, bräuchte ich davon Millionen- und mehrere Leben, um die Disketten zu wechseln.»

Zum Glück hat sich die Informationstechnologie so rasant entwickelt, dass Ashton seine Zeit für sinnvollere Dinge nutzen kann. Selbst grosse Datenmengen aus den Experimenten am PSI werden ausreichend schnell verarbeitet und gespeichert. Zumindest bis jetzt. Spätestens wenn 2025 nach einem Upgrade der SLS die SLS 2.0 den Betrieb aufnimmt, werden die Forschenden am PSI vor einem grossen Problem stehen. Nach dem Upgrade auf die SLS 2.0 können Experimente eine bis zu tausendfach höhere Leistungsfähigkeit haben als bei der heutigen SLS und bei anderen Konfigurationen und können daher viel mehr Daten liefern als bislang. Hinzu kommen bessere und schnellere Detektoren mit höherer Auflösung. Wo die heutige SLS-Strahllinie einen Datensatz pro Minute erzeugt, werden mit der SLS 2.0 in weniger als einer Sekunde solche Datenmengen erzeugt. Der brandneue Jungfrau-Detektor am SwissFEL kann bei voller Geschwindigkeit sogar 50 Gigabytes pro Sekunde erzeugen, eine herkömmliche PC-Festplatte wäre schon nach wenigen Sekunden randvoll. Insgesamt liefern die Experimente am PSI derzeit 3,6 Petabytes pro Jahr, wenn die SLS 2.0 voll in Betrieb ist, können die Experimente allein dort bis zu 30 Petabytes pro Jahr erzeugen, wofür man rund 50 000 PC-Festplatten bräuchte. Wer das unbedingt in Floppy-Discs umrechnen möchte, kann gut und gerne noch sechs Nullen anhängen.

Frische Ideen gesucht

Seit Jahren ist klar: Mit den alten Konzepten lassen sich am PSI die neuen Herausforderungen nicht bewältigen. Es braucht frische Ideen, wie man der riesigen Datenmengen Herr werden kann, um die immer anspruchsvolleren und zahlreicheren Forschungsfragen zu beantworten. Und es braucht einen eigenen Forschungsschwerpunkt mit entsprechender organisatorischer Struktur. Ergebnis ist der neue Forschungsbereich Computergestützte

Wissenschaften, Theorie und Daten, kurz SCD, der im Juli 2021 gegründet wurde. Der SCD verbindet bereits bestehende Einheiten wie beispielsweise das Labor für Simulation und Modellierung, das interimweise von Andreas Adelmann geleitet wird, aber auch neue Einheiten wie den dritten Standort des Swiss Data Science Center am PSI, der die beiden bisherigen Standorte an der ETH Lausanne (EPFL) und der ETH Zürich (ETHZ) ergänzt. Rund siebzig Personen in vier Abteilungen forschen, entwickeln und stellen Support bereit, schon bald sollen es hundert sein. Während die drei Laborleiter Andreas Adelmann, Andreas Läuchli und Nicola Marzari sich vor allem um wissenschaftliche Methoden in ihren jeweiligen Fachdisziplinen kümmern, leitet Alun Ashton mit der Abteilung Wissenschaftliche IT-Infrastruktur und Dienstleistungen eine Service-Einheit, die Wissenschaftler und Wissenschaftlerinnen im Forschungsbereich Photonenforschung, am SCD sowie PSI-weit fachlich im Scientific Computing unterstützt.

«Die Forschungsabteilungen sollen forschen und nicht eigene IT-Abteilungen unterhalten», so Ashton. Deshalb sei die Zentralisierung im SCD der richtige Schritt. «Wir erfinden das Rad nicht neu, aber mit dem SCD haben wir dennoch ein Alleinstellungsmerkmal», pflichtet Andreas Adelmann bei. Der neue Forschungsbereich nutze Synergien besser, habe Strahlkraft in der internationalen Wissenschaft und ziehe gute Leute an. Adelmann: «Das SCD ist mehr als die Summe seiner Teile.»

Einer seiner interessantesten «Kunden» sei Marco Stamparoni, sagt Alun Ashton mit einem Augenzwinkern. Das Team des ETH-Professors hat sich der tomografischen Röntgenmikroskopie verschrieben, die allerhöchste Anforderungen an die Rechenleistung und Speicherkapazität stellt. Um etwas zu untersuchen, wie bei der Synthese einer neuen Legierung ein warmes Gas in einen metallischen flüssigen Schaum dringt, muss die Software für jede Millisekunde einen dreidimensionalen Schnappschuss aus den Daten errechnen. Das sind gewaltige Datenmengen, die erzeugt und weiterbearbeitet werden müssen. Andere Kollegen im gleichen Labor beschäftigen sich mit computergestützter Mikroskopie und insbesondere der Ptychografie. Sie ersetzt die konventionelle Röntgenmikroskopie, die mit Linsen arbeitet, aber nicht so feine Auflösungen erreicht, wie es mit Röntgenstrahlen eigentlich möglich wäre. Bei der Ptychografie rekonstruiert ein iterativer Algorithmus das Röntgenbild aus den Rohdaten des Detektors, der weit von der Probe entfernt ist, ohne dass eine Linse dazwischen liegt, und der die kohärenten Eigenschaften einer Synchrotronquelle nutzt. Die zugrunde liegende mathematische Operation ist



No group updates this time

- If there is time GL's will give a quick update at the end of the meeting.
- Questions?

Bi-Monthly Meeting 7901 Host



Tuesday 3 May 2022, 09:00 → 10:30 Europe/Zurich

Description <https://psich.zoom.us/j/66701545202>

09:00 → 09:20 **AWI General Update**

Speaker: Alun Ashton (PSI - Paul Scherrer Institut)

🕒 20m

09:20 → 10:20 **7901 presentations**

09:20

Tools at SwissFEL: slic & sfdata

Speaker: Sven Augustin (PSI - Paul Scherrer Institut)

🕒 30m

09:50

SciLog - An electronic logbook for user experiments

Speaker: Klaus Wakonig (PSI - Paul Scherrer Institut)

🕒 10m

10:00

Towards a unified BEC solution for SLS 2.0

Speaker: Klaus Wakonig (PSI - Paul Scherrer Institut)

🕒 20m

10:20 → 10:30 **AOB**

🕒 10m