arXiv:2302.01317v1 [hep-ex] 2 Feb 2023



面向高亮度大型强子对撞机物理学的软件升级下一阶段：IRIS-HEP战略计划

2023年2月3日 - 1.0版

编辑： Brian Bockelman（莫里奇研究所）、Peter Elmer（普林斯顿大学）、Gordon Watts（华盛顿大学）

贡献者： Kyle Cranmer（威斯康星大学麦迪逊分校）、MatthewFeickert（威斯康星大学麦迪逊分校）、Rob Gardner（芝加哥大学）、Heather Gray（加州大学伯克利分校和劳伦斯伯克利实验室）、Alexander Held（威斯康星大学麦迪逊分校）、DanielS. Katz（伊利诺伊大学厄巴纳-香槟分校）、David Lange（普林斯顿大学）、Kilian Lieret（普林斯顿大学）、Mark Neubauer（伊利诺伊大学厄巴纳-香槟分校）、Oksana Shadura（内布拉斯加大学林肯分校）、Mike Sokoloff（辛辛那提大学）、Robert Tuck（普林斯顿大学）、Frank Wuerthwein（加利福尼亚大学圣迭戈分校）

本报告由 IRIS-HEP 项目（http://iris-hep.org）编写，并得到美国国家科学基金会 OAC-1836650 号资助。本文所表达的任何观点、发现、结论或建议均属于项目参与者，并不一定反映美国国家科学基金会的观点。

执行摘要

探索自然界基本构成单元及其相互作用，是人类最古老、最宏大的科学事业之一。欧洲核子研究中心的大型强子对撞机（LHC）为这一探索迈出了巨大的一步。希格斯玻色子的发现、对 B 介子极其罕见衰变的观测，以及对许多可行的超越标准模型（SM）物理学理论施加的严格限制，都彰显了大型强子对撞机物理计划的巨大科学价值。这项全球科学计划的下一阶段将是高亮度大型强子对撞机（HL- LHC），预计从2029年左右开始收集数据，并持续至2030年代。其首要科学目标是寻找超越标准模型的物理；如果发现相关现象，则研究其影响。在高亮度大型强子对撞机时代，ATLAS 和 CMS 实验记录的碰撞次数将达到发现希格斯玻色子时所用碰撞次数的 $\sim$100 倍（且能量是当时的两倍）。美国国家科学基金会和美国能源部都在大力投资探测器升级，以使高亮度大型强子对撞机能够在高碰撞率环境下运行。对用于获取、管理、处理和分析高亮度大型强子对撞机数据的软件研发进行类似投资，对于最大限度地提升升级后的加速器和探测器投资回报至关重要。

本报告为可能开展的第二个为期5年的资助阶段（2023年至2028年）提出一项战略计划，旨在通过**高能物理软件研究与创新研究所（IRIS-HEP）** [1, 2] 弥补剩余的软件与计算差距，从而实现高亮度大型强子对撞机科学研究。IRIS-HEP最初于2018年9月获得美国国家科学基金会资助，当前资助期限至2023年8月。IRIS-HEP源于2016—2017年国际社区规划进程；该进程制定了2020年代高能物理软件研发路线图 [3] ，并提出了最初的战略计划 [4]，阐述由美国国家科学基金会资助的高能物理软件研究所（HEP）如何在应对高亮度大型强子对撞机挑战方面发挥关键作用。IRIS-HEP的使命有两个方面：既要成为软件研发的活跃中心，又要成为更广泛社区软件研发工作的知识枢纽，以确保高亮度大型强子对撞机科学计划取得成功。其各项活动旨在弥合实现这一目标所面临的4项关键差距：（G1）原始资源缺口；（G2）分布式计算网络基础设施的可扩展性；（G3）在高亮度大型强子对撞机的规模上执行分析；以及（G4）在高亮度大型强子对撞机运行周期内及之后，维持软件与计算系统的可持续性。

在过去5年取得成功的基础上，并结合近期社区研讨会的意见，IRIS-HEP 将继续推进若干具有重大影响的研发领域。这些领域被确定为弥合差距、实现高亮度大型强子对撞机科学研究所必需的领域：(1) 开发高性能分析系统，以缩短“洞察时间”并最大限度发挥高亮度大型强子对撞机的物理学潜力；(2) 开发用于数据重建和触发的先进创新算法；(3) 开发面向艾字节时代的数据组织、管理和访问系统；(4) 开展设施研发，以支持其他研发领域不断变化的需求。此外，还确定了一个可能十分重要的新兴机遇：(5) 转化人工智能。IRIS-HEP 将继续投资于(6)分布式高吞吐量计算的基础设施，为大型强子对撞机社区的网络基础设施提供通往高亮度大型强子对撞机的途径。这些活动领域的具体目标和任务包括：

1. **分析系统**：现代化并发展用于分析高亮度大型强子对撞机数据集的工具和技术。分析系统领域将聚焦于*G3*（规模化分析）相关主题，包括管理规模大一个数量级的数据集、支持更复杂的技术（包括使用现代机器学习），以及采用数据科学工具来实现*G4*（可持续性）目标。交付成果将包括支持规模化分布式列式数据分析完整人才培养渠道的工具，并确保其与高能物理及更广泛的数据科学生态系统中的其他要素实现互操作。还将集成现代机器学习技术和运维方法，包括可微分分析流水线，并全面支持分析保存和重新诠释。

2. **重建与触发算法**：开发并改进模式识别软件，使其能够利用新一代探测器技术、计算平台和编程技术，准确、高效地识别带电粒子轨迹。本领域的工作对于消除因新型且能力更强的实验装置、更高的数据速率以及不断演进的计算硬件而产生的*G1*（资源）缺口至关重要。在高亮度大型强子对撞机运行期间，算法必须经过设计，确保具备足够的*G4*（可持续）性。本领域将交付径迹重建流水线的关键组件，优先确保算法互操作性、实现高度并行，并采用稳健的算法。我们将考虑传统和新颖的径迹重建算法，因为径迹重建是一个多方面的问题，其优化点会因实验装置设计和计算技术设计而异。

3. **转化人工智能**：利用机器学习方法提升高亮度大型强子对撞机的物理探测能力。转化人工智能领域将借助基础研究成果，例如美国国家科学基金会人工智能研究所开展的工作，并重点帮助高亮度大型强子对撞机实验将这些能力转化为生产环境中的应用。活动包括推动并使用基于机器学习的服务，帮助该领域对接现有基础设施，以及致力于实现对正在使用的模型进行“重新训练”，以适应新数据。

4. **数据组织、管理与访问（DOMA）**：扩展并升级批量数据传输基础设施，包括采用新的授权方案、传输协议和网络集成方式；提供新的数据交付服务和技术，供分析设施使用。DOMA 致力于弥合 G2（可扩展性）计算差距，以缩小当前至高亮度大型强子对撞机运行开始期间广域数据传输速率预期相差 20 倍的差距。DOMA 将为站点间批量数据传输创新授权方案，协调国际数据挑战，以衡量朝目标数据速率迈进的进展并集成新技术。在分析方面，DOMA 将开发列式数据交付服务，并将数据库社区的现代数据管理技术引入高亮度大型强子对撞机分析环境。

5. **设施研发**：创新面向美国大型强子对撞机的设施建设新方法，并使社区采用与美国国家科学基金会更大范围协调的网络基础设施相一致的方法。该领域将 Kubernetes 用作“底层平台”来编排可移植服务，为研究所内的项目提供测试平台设施，并探索利用多站点 Kubernetes 集群提升分布式服务运营敏捷性的方法。设施研发通过降低运维复杂性和成本，为*G4*（可持续性）目标作出贡献；并通过为未来的分析设施应用敏捷技术，为*G3*（规模化分析）目标作出贡献。

6. **分布式高通量计算服务网络（OSG）**：运营一套专门满足大型强子对撞机需求的服务网络，并为其面向高亮度大型强子对撞机的演进提供稳定路径。OSG-LHC 小组确保大型强子对撞机实验的需求得到满足，同时为更大的联盟作出贡献，使大型强子对撞机也能受益于更广泛的通用服务。

7. **培训、劳动力发展与外展**：执行并协调各类活动，满足 HL-LHC 社群在培训、劳动力发展与外展方面的需求。研究所内的该领域将确保提供多个层次的培训（本科生、研究生、博士后、专业人士），并开展 IRIS-HEP 研究员计划——一项深入的虚拟导师计划，面向高年级本科生和低年级研究生。这是弥合*G4*（可持续性）差距的关键。

IRIS-HEP 将继续采用“重大挑战”这一概念，围绕长期、大规模目标开展活动，使其成为研究所整体愿景的一部分。重大挑战不同于较为传统的

里程碑或交付成果，其特点在于规模更大（通常需要跨领域团队协同合作）、周期跨越多年，而且可能无法预先确定完整的实施方案。这些挑战通过一系列难度不断增加的练习来推进，并由社区协调开展。目前已定义并计划开展的重大挑战如下：

- **分析大挑战（AGC）**：AGC旨在利用IRIS-HEP开发的一系列工具、设施和服务作为范例，开展具有现实意义、规模和复杂程度达到高亮度大型强子对撞机预期水平的分析。AGC团队每年组织一次研讨会，展示当前工作相对于目标的进展，并根据需要更新愿景和方法。

- **数据大挑战（DGC）**：IRIS-HEP的数据大挑战通过一系列与WLCG协调开展的全球数据挑战来实现。这些挑战每两年举办一次，汇聚全球整个社区，展示聚合数据传输速率，并将当前可达到的水平与高亮度大型强子对撞机路线图进行比较。这些挑战也为将DOMA正在开发的新技术整合到生产基础设施中提供了机会。

- **培训大挑战（TGC）**：为了应对高亮度大型强子对撞机带来的挑战，我们需要一支具备广泛软件知识的人才队伍，其能力涵盖从基础编程技能到高度专业化培训。TGC制定路线图，以便高效扩大培训活动的规模，并提供充分的培训，从而培养出能够实现高亮度大型强子对撞机科学研究所需的具备软件技能的人才队伍。

其他研究所活动（如数据重建和径迹重建）更适合由各个实验自行协调。IRIS-HEP 将与各实验合作，使这些交付成果与其时间表和生产代码相衔接。基于项目前五年成功开展的研发工作，IRIS-HEP 第二阶段将开发生产级工具、设施和服务，供各实验用于其科学计划。

最后，作为知识枢纽，研究所将继续牵头开展以下工作：(1) 汇聚 IRIS-HEP团队、关键利益相关方和相关领域专家，为研究所的使命提供意见；(2) 通过“蓝图”研讨会汇集美国和国际研发工作，确保各项工作充分协调一致；(3) 推动高能物理与网络基础设施、计算机科学和数据科学社区建立合作伙伴关系，探索应对高亮度大型强子对撞机挑战的新方法；(4) 引入美国大学的新力量，着重开展专业发展和培训；(5) 在所需的二十年间，维持高能物理软件及其底层算法和实现知识。高能物理是一项全球性、复杂的科学事业。这些活动将确保由全球分布式社区开发和部署的软件拓展高亮度大型强子对撞机的科学探索能力，并在其整个生命周期内得到持续维护。

本报告提出的面向高亮度大型强子对撞机物理学的战略计划，适用于2023—2028年，体现了社区愿景。该计划以2016—2017年的初期规划活动为基础，并结合了IRIS-HEP正在开展的活动；这些活动通过一系列专题研讨会和会议与社区保持互动。该计划与各实验的高亮度大型强子对撞机规划活动相辅相成、保持一致 [5–7]。IRIS-HEP已准备好交付所需软件，以支持高亮度大型强子对撞机科学研究取得尽可能好的成果。

支持者

这项战略计划已获ATLAS和CMS实验代表，以及US-ATLAS和US-CMS运营项目代表的明确认可。具体认可者包括：Wolfgang Adam（维也纳高能物理研究所）、Lothar Bauerdick（费米国家加速器实验室）、Brian Bockelman（莫里奇研究院）、Tulika Bose（威斯康星大学麦迪逊分校）、Kenneth Bloom（内布拉斯加大学林肯分校）、Paolo Calafiura（劳伦斯伯克利国家实验室）、Kyle Cranmer（威斯康星大学麦迪逊分校）、Alessandro Di Girolamo（欧洲核子研究中心）、Peter Elmer（普林斯顿大学）、Matthew Feickert（威斯康星大学麦迪逊分校）、Robert Gardner（芝加哥大学）、Heather Gray（加利福尼亚大学伯克利分校和劳伦斯伯克利国家实验室）、Oliver Gutsche（费米国家加速器实验室）、Alexander Held（威斯康星大学麦迪逊分校）、Michael Hildreth（圣母大学）、Daniel S. Katz（伊利诺伊大学厄巴纳-香槟分校）、Patrick Koppenburg（荷兰国家亚原子物理研究所）、David Lange（普林斯顿大学）、James Letts（加利福尼亚大学圣迭戈分校）、Kilian Lieret（普林斯顿大学）、Carlos Maltzahn（加利福尼亚大学圣克鲁兹分校）、Zachary Marshall（劳伦斯伯克利国家实验室）、Verena Martinez Outschoorn（马萨诸塞大学阿默斯特分校）、Patricia McBride（费米国家加速器实验室）、Shawn McKee（密歇根大学）、Mark S Neubauer（伊利诺伊大学厄巴纳-香槟分校）、Ianna Osborne（普林斯顿大学）、Danilo Piparo（欧洲核子研究中心）、Eduardo Rodrigues（利物浦大学）、Elizabeth Sexton-Kennedy（费米国家加速器实验室）、Oksana Shadura（内布拉斯加大学林肯分校）、Lucia Silvestris（INFN 巴里分部）、Michael D Sokoloff（辛辛那提大学）、Matevˇz Tadel（加利福尼亚大学圣迭戈分校）、Lauren Tompkins（斯坦福大学）、Robert Tuck（普林斯顿大学）、Vassil Vassilev（普林斯顿大学）、Gordon Watts（华盛顿大学）、Derek Weitzel（内布拉斯加大学林肯分校）、Mike Williams（麻省理工学院）、Peter Wittich（康奈尔大学）、Frank Wuerthwein（加利福尼亚大学圣迭戈分校）和Avi Yagil（加利福尼亚大学圣迭戈分校）。

文档修订

修订历史如下:

2022年12月19日 0.9版 - 文档初稿已传阅，以征求反馈和认可。

2023年1月23日 0.95版 - 根据针对0.9版的反馈和认可意见改进了文档。执行摘要内容更加完整。提交给美国国家科学基金会的暂定版本。

2023年2月2日 1.0版 - 已提交至 arXiv

目录

1 引言 **1**

2 科学驱动力 **4**

3 高亮度大型强子对撞机软件与计算缺口 6

3.1 原始资源缺口.6 3.2 整体分布式计算网络基础设施的可扩展性.9 3.3 规模化分析.10 3.4 可持续性.11

4 研究所的作用 **13**

4.1 研究所在高亮度大型强子对撞机社群中的作用.13 4.2 研究所作为知识枢纽.14 4.3 研究所在软件生命周期中的作用.15 4.4 研究所要素.16

5 研究所的战略活动领域 **18**

5.1 分析系统.20 5.2 重建与触发算法.30 5.3 转化人工智能.37 5.4 数据组织、管理与访问（DOMA）.43 5.5 设施研发与集成.51 5.6 分布式高吞吐计算服务结构.60 5.7 培训与劳动力发展.65 5.8 LHCb 与 LHC 第5轮运行.69

6 高亮度大型强子对撞机的重大挑战 71

6.1 分析大挑战.71 6.2 数据重大挑战.76 6.3 培训重大挑战.79

7 外展与扩大参与 **81**

8 资助方案 **82**

A 附录 - 研讨会列表 84 B 附录 - 研究所组织结构与演进过程 86 C 附录 - 缩略语表 88

1 引言

高亮度大型强子对撞机（HL-LHC）计划于2029年开始产生数据，并将大型强子对撞机的物理计划延续至2030年代。其首要科学目标是寻找超越标准模型（BSM）的物理现象；若发现此类现象，则研究其影响。尽管普通物质的基本组成成分及其相互作用，已由粒子物理学的标准模型（SM）极其精确地描述——标准模型是一种建立在简单而强大的对称性原理之上的量子场论——但它并不完备。例如，宇宙中大多数通过引力相互作用的物质，并不通过电磁相互作用或强核相互作用进行相互作用。由于不会产生可直接观测到的信号，这种物质被称为暗物质。标准模型中的粒子或场都无法解释暗物质的存在。同样重要的是，标准模型并未解答与其自身组成粒子的详细性质或支配其相互作用的特定对称性相关的基本问题。为实现这一科学计划，高亮度大型强子对撞机将记录的数据量相当于大型强子对撞机第一轮运行所记录质子-质子碰撞次数的100倍；探测器将更加复杂，且每次碰撞的数据处理也将复杂得多。

要充分发挥高亮度大型强子对撞机的潜力，需要对升级后的硬件进行大规模投资。这些硬件升级的建设项目目前已经启动。大型强子对撞机上的两个通用探测器 ATLAS 和 CMS 分别由拥有 3000 多名科学家的合作组运行。美国人员约占这些实验合作者的 30%。在美国，ATLAS 和 CMS 的建设与运行资助由能源部（DOE）和美国国家科学基金会（NSF）共同提供。美国参与 LHCb 实验的资助仅由美国国家科学基金会提供。美国国家科学基金会还通过大型研究设备与设施建设（MREFC）资助，在高亮度大型强子对撞机 ATLAS 和 CMS 探测器的硬件升级中发挥重要作用；这项资助始于 2020年。

高亮度大型强子对撞机**还需要对软件研发进行相应的投入，** 并开展部署。软件对于获取、管理、处理和分析数据不可或缺。目前对高亮度大型强子对撞机计算需求的估计，已大幅超出在固定运行预算下，即使假设遵循摩尔定律，也可能实现的能力 [5, 6]。计算硬件（处理器、存储和网络）的基础形态也在不断演变；需要处理的数据量正在大幅增加，其复杂性也在提升，同时还需要更加复杂的分析，以最大限度地提高高亮度大型强子对撞机的物理学产出。要解决高亮度大型强子对撞机计算所面临的庞大问题，需要采取不同的方法。

大型强子对撞机实验现有的计算系统，是近 20 年工作和经验的结晶。除了应对未来的重大挑战，维持迄今建立的系统的基本方面同样至关重要。幸运的是，这一物理计划具有对撞机的特性，意味着几乎所有计算挑战都可以“轻松地”并行处理。大型强子对撞机合作组每年通过模拟以及实验记录的数据触发器，产生数百亿个事件；这些事件在统计上彼此独立，可以并行处理。科学本身所带来的这一固有简化，使分布式计算资源得以汇集，也非常适合采用高吞吐计算来满足大型强子对撞机和高亮度大型强子对撞机的计算需求。此外，大型强子对撞机目前所需的计算资源，超过了任何单一地点（如欧洲核子研究中心）的资助机构所能提供的资源。因此，分布式高吞吐量计算（DHTC）将继续成为高亮度大型强子对撞机的基本特征，而不断发展 DHTC 对高能物理界至关重要。

在规划高亮度大型强子对撞机时，各方就软件目标和优先事项达成一致，并确保各项工作彼此互补至关重要；对于 IRIS-HEP 而言，这一协同过程始于 2016年，并持续至今。该过程始于 2016年末高能物理软件基金会（HSF）开展的一项规划工作，旨在编写社区白皮书（CWP） [3] ，为高亮度大型强子对撞机时代的软件研发制定路线图。社区

identi 确定并优先排序了所需的软件研发投入 d:

1. 采用新的计算与软件方法，从而大幅拓展探测器的物理探测能力；2. 提升软件效率、可扩展性和性能，并利用中央处理器、存储和网络技术的进步；3. 确保软件在高亮度大型强子对撞机的整个运行生命周期内具备长期可持续性。

在开展这项全球性工作的同时，在美国国家科学基金会的资助下，美国社区还执行了一项概念化流程，旨在制定一份战略计划，说明面向高能物理的科学软件《创新》研究所（S^2I^2）如何帮助应对高亮度大型强子对撞机的挑战。具体而言， S^2I^2-高能物理概念化流程 [8]还有另外三个目标：

1. 确定可纳入美国大学社区 S^2I^2 的具体研发重点领域；2. 在美国高能物理软件社区内就共同开展工作形成共识；3. 与科学计算和软件工程相关领域的专家合作，确定彼此感兴趣的主题，并组建协作团队，以推进所有社区的科学利益。

这最终形成了一份文件，即《高能物理科学软件创新研究所（S^2I^2）战略计划》 [4]。2018年9月，美国国家科学基金会资助了“高能物理软件研究与创新研究所（IRIS-HEP）”，这是由美国19所大学组成的合作项目（图1），旨在执行一项工作计划，实现该战略计划。

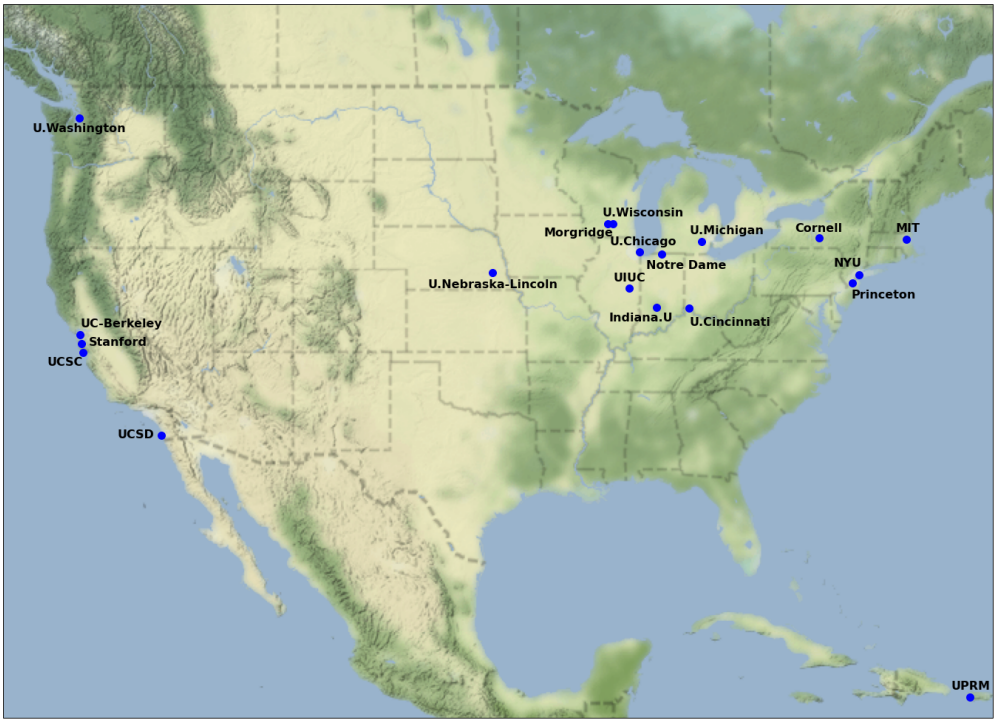


图1：IRIS-HEP软件研究所第一阶段（2018—2023年）获得资助的机构。

IRIS-HEP还在国际高能物理界发挥着重要的领导作用，推动各方为高亮度大型强子对撞机的硬件升级做好准备，并同步推进“软件升级”。IRIS-HEP是更广泛的国际和国家级项目体系的一部分。作为软件研发的知识枢纽，它正在构建一个更具包容性的社区流程，用于开发、原型开发和部署软件。它利用自身资源直接推动特定领域的研究与开发（研究所下一阶段的计划见第5节），并通过合作努力发挥这些资源的更大作用。经过两年的启动阶段后，IRIS-HEP进入执行阶段，并已建立起实现研究所级实体所期望的大规模愿景所需的技术团队、项目管理和治理结构。该阶段的成果包括：构建基于 Python 数据科学生态系统的分析流水线；向 CMS 投入使用一种新的矢量化卡尔曼滤波算法；将大型强子对撞机网络基础设施迁移至一种新的基于HTTP的批量数据传输协议；推广采用基于能力令牌的新授权范式；以及为社区交付一个可组合的、基于Kubernetes的设施研发平台。

IRIS-HEP 已进入第五年。它已落实由 S^2I^2概念化项目制定的战略计划，同时也开始超越计划最初设定的条件不断发展。因此，研究所主导了规划工作，包括社区规划研讨会（见附录 A）和内部研讨。更新后的这份战略计划描绘了研究所在未来五年必须完成的工作，以推动高亮度大型强子对撞机物理学的发展。

2 科学驱动力

IRIS-HEP 致力于交付高亮度大型强子对撞机科学研究所需的软件，尤其是为发现超越标准模型物理并最终深入研究其细节提供支持。要理解发现并阐明超越标准模型物理为何会带来变革性影响，我们需要从标准模型的关键概念入手，了解它们能够解释什么、无法解释什么，以及高亮度大型强子对撞机将如何解决后者。

在过去的200年里，物理学家发现了普通物质的基本组成成分，并发展出一套非常成功的理论来描述它们之间的相互作用（力）。所有原子及其构成的分子，都可以用这些组成成分来描述。原子核由强核相互作用结合在一起。原子核的衰变源于强核相互作用和弱核相互作用。电磁力将原子结合在一起，也将原子结合成分子。电磁力、弱核力和强核力都用量子场论来描述。一般而言，这些理论的预言极为精确，并且已通过同样精确的实验测量得到验证。电磁相互作用和弱核相互作用密切相关，但存在一个根本区别：在电磁相互作用中负责传递能量和动量的粒子（光子）没有质量，而在弱相互作用中负责传递能量和动量的粒子（ W 和 Z 玻色子）质量约为质子的100倍。标准模型的一个关键要素是其预言（早在50多年前就已提出）：一种性质全新的粒子——希格斯玻色子——将赋予 W 和 Z 玻色子质量。 2012 [9,10] 年，ATLAS和CMS合作组在大型强子对撞机上发现了希格斯玻色子，从实验上证实了标准模型最后一个关键要素。

SM 能够非常出色地描述几乎所有已知物理学，但其数学结构以及一些重要的实验证据表明，它并不完整。这些观察结果促使人们提出大量 SM 扩展理论，通常采用量子场论形式体系来描述超越标准模型物理。例如，“普通”物质仅占宇宙质能预算的 5%，而通过引力与普通物质相互作用的暗物质占 27%。尽管我们对宏观尺度上的暗物质有所了解，但对其微观量子本质一无所知，除了知道其粒子不属于 SM，且不具有电磁相互作用和 SM 核相互作用。超越标准模型物理还涉及观测到的宇宙的一个关键特征：物质似乎占据了相对于反物质的主导地位。轻子生成和重子生成的基本过程（即电子和质子及其更重的同类粒子如何在早期宇宙中产生）无法由 SM 解释，所需程度的 CP破坏（物质与反物质在电荷共轭和宇称共轭下的不对称性）也同样无法解释。对超越标准模型物理的约束来自“传统”高能物理实验，以及其他直接或间接搜寻暗物质粒子的实验。

大型强子对撞机旨在寻找希格斯玻色子和超越标准模型物理，这些目标属于发现科学范畴。ATLAS 和 CMS 探测器经过优化，可观测并测量大质量粒子的直接产生与衰变。如今，它们正以更高的精度测量希格斯玻色子的性质，以检验这些性质与标准模型预言的符合程度。

ATLAS 和 CMS 主要是为直接研究高质量粒子而设计的，而 LHCb 则旨在研究重味物理：质量极高、无法在大型强子对撞机上直接探测的粒子所产生的量子效应，会显现在低能现象中。LHCb 的首要目标是寻找超出标准模型物理，包括 CP破坏（CPV，定义为粒子及其对应反粒子衰变中的不对称性）以及底和粲强子的稀有衰变。Isidori、Nir 和 Perez [11]以此为例，说明如何将味物理与标准模型的扩展联系起来：他们利用混合和 CP破坏的测量值，推导出模型无关的超越标准模型约束。他们假设新场的质量高于标准模型的场，并构建了一个有效场论。随后，他们“用有限数量的参数（即高维算符的系数）分析标准模型所有现实可行的扩展”。他们确定了有效耦合的界限

强度耦合。他们的结果表明，K介子、 B_d、 B_s 和 D^0 的混合与 CP破坏测量值能够提供彼此互补的强有力约束，而且往往比针对高质量粒子的直接搜索更有力地约束超出标准模型物理。

粒子物理项目优先级评估小组（P5）于2014年5月发布了其美国粒子物理战略计划 [12] 。该计划很快获得高能物理咨询小组的认可，并提交给美国能源部和美国国家科学基金会。报告指出：我们确定了五个极具吸引力的研究方向，它们有望在未来*10*至*20*年内带来重大发现。这些就是科学驱动力：

- 将希格斯玻色子用作发现新现象的新工具
- 探索与中微子质量相关的物理学
- 确定暗物质所涉及的新物理
- 理解宇宙加速膨胀：暗物质与暴胀
- 探索未知：新粒子、相互作用和物理原理。

高亮度大型强子对撞机将利用以第一轮运行两倍的能量和 100 倍的亮度采集的数据，探索其中的第一、第三和第五个问题。正如 P5 报告所述，

> 最近发现的希格斯玻色子是一种此前从未观测到的物质形态，充满了谜团。哪些原理决定了它对其他粒子的影响？它如何与中微子或暗物质相互作用？希格斯粒子只有一种，还是有多种？这个新粒子真的是基本粒子，还是由其他粒子构成？希格斯玻色子为探索自然规律提供了独特的门户，并连接了粒子物理学的多个领域。其预期性质哪怕出现微小偏差，都将是重大突破。
>
> 通过对希格斯性质开展百分比级精度的研究，希格斯玻色子的全部发现潜力将得以释放。测量这些性质是高能对撞机物理计划的首要任务。大型强子对撞机（*LHC*）将是首个把希格斯玻色子用作发现工具的实验室：初期将在 *14 TeV* 下进行大幅提高能量的运行，随后在高亮度大型强子对撞机（*HL-LHC*）上采集十倍于此前的数据。高亮度大型强子对撞机拥有令人瞩目且全面的计划，其中包括对希格斯性质进行的关键测量。

物理学动机摘要：大约30年前，即1992年10月，ATLAS和CMS合作组发表了在大型强子对撞机开展实验的意向书。当时，顶夸克尚未被发现；没人知道这些实验会发现希格斯玻色子、超对称、色 technicolor，还是完全不同的东西。展望未来，没人能说高亮度大型强子对撞机时代会有哪些发现。不过，未来20年记录的碰撞数据量将是第一轮运行的100倍，很可能会带来更多令人振奋的发现。

3 高亮度大型强子对撞机软件与计算缺口

距离高亮度大型强子对撞机时代开启约还有5年，为实现高亮度大型强子对撞机科学研究所需的软件能力仍存在哪些主要差距，现已逐渐明朗。弥合这些“差距”需要社区从现在起到高亮度大型强子对撞机启动期间持续开展稳健的研发计划。这将直接影响可开展科学研究的数量和质量。

高亮度大型强子对撞机所需的网络基础设施由科学需求驱动。实验已通过广泛的模拟分析 [13–15]，评估了实现高亮度大型强子对撞机数据集精密测量与发现潜力所需的条件。这些分析探究了升级后的探测器的能力、 3000 fb^{-1} 数据集的潜力，以及高亮度大型强子对撞机亮度大幅提升所带来的事例复杂度增加所驱动的需求。这些研究的一个重要成果，是估算出实验在线触发和离线计算设施所需的事例率。尽管这些估算，尤其是离线计算方面的估算，随着大型强子对撞机数据分析的持续开展仍在不断变化，但它们为确定高亮度大型强子对撞机的总体网络基础设施需求提供了基准方案。

高亮度大型强子对撞机软件与计算缺口

本节将详细讨论以下四项软件与计算缺口：

G1. **原始资源缺口**：高亮度大型强子对撞机数据集将极其庞大。事例复杂度和事例数量都将增加约一个数量级。如果算法或资源管理技术没有改进，高亮度大型强子对撞机实验将根本无法处理和存储科学计划所需的数据。

G2. **分布式计算网络基础设施的可扩展性**：仅仅购买计算核心和磁盘是不够的——实验所用的网络基础设施也必须具备足够的可扩展性，以支持相应规模的硬件。数据传输方面的挑战尤为突出：软件必须做好准备，共享网络资源（例如美国的 ESNet）也必须得到妥善管理。

G3. **规模化分析**：高亮度大型强子对撞机上的分析将有显著不同，原因有二：(a) 所涉及数据集的规模，以及 (b) 使用新一代技术（例如最新的机器学习技术）来提升每项研究成果的科学探测能力。前者要求用户大量使用专用的“分析设施”，并针对高数据速率输入/输出进行优化；后者则要求开发新的服务和数据管理技术。

G4. **可持续性**：高能物理是一门由设施驱动的科学——为实验搭建的网络基础设施必须能够持续使用或逐步演进数十年。这限制了网络基础设施方面的一些策略——例如，大型强子对撞机不可能采用“自己动手”的方式，并拥有整个软件栈。即使在研发阶段，也必须落实具体的可持续发展策略，以确保实验初期部署的网络基础设施是社区能够负担得起的。

3.1 原始资源缺口

甚至在第一轮运行于2009年开始之前，一个专门的审查小组就每年审查大型强子对撞机实验提交的原始资源申请。这些预测的输入来自若干物理输入（计划中的LHC运行时间秒数、每秒记录的物理事件数、平均亮度）和技术输入（事件平均大小、每个事件的模拟时间、每个事件的重建时间）；

参数	第3轮运行 (2022年-2025年)	第4轮运行 (2029年-2032年)	第5轮运行 (2035-2037)
大型强子对撞机能量 [TeV]	13.6	14.0	14.0
平均堆积	50	140	200
运行时间 [百万秒/年]	6	6	6
积分亮度 [fb^{-1}/年]	80	270	350

表1：总结 ATLAS 和 CMS 在大型强子对撞机第三轮运行以及高亮度大型强子对撞机计划期间典型年份内收集的预期数据量。

结合某个实验的计算模型，为未来三年的中央处理器、磁盘和磁带总需求制定指导方案。

类似地，自 2016年左右起，社区便开始提供对高亮度大型强子对撞机资源需求的预测。这些估算的不确定性较大——研发将为社区带来多大的性能提升，以及十年后预计能有多大的计算采购能力，都尚不明确——但这些估算帮助社区了解了潜在的资源缺口。

背景： 高亮度大型强子对撞机计算基础设施必须提供充足的原始数据资源，才能开展高亮度大型强子对撞机实验的科学计划。大规模使用商用硬件主要体现在两个方面：在线系统包含一座大型计算设施，通过软件触发器筛选事件；离线系统则负责执行多项任务，包括数据处理、模拟生成和分析。这些网络基础设施需求通常按计算能力（中央处理器、图形处理器等）、快速访问存储（磁盘）、长期存储（磁带）以及广域网需求进行跟踪。实验团队会根据对支持高亮度大型强子对撞机科学计划所需资源的了解，定期估算长期（未来 5 至 10 年）和短期（未来 1 至 3 年）的计算需求。本文聚焦美国大学项目，主要讨论离线计算系统的计算和磁盘存储需求。

实验采用相同的基本方法来推导短期和长期的资源预测。该方法很简单：以当前的计算模型和加速器运行计划为基础，并纳入研发成果，这些成果将在未来减少（或极少数情况下增加）所需的计算资源。这些估算包括数据处理模型、模拟生成需求、分析处理和数据管理需求。资源预测存在诸多不确定性来源，包括大型强子对撞机的运行计划、随着大型强子对撞机结果不断推进而对物理计划范围产生的变化，以及持续研发导致的软件性能演进。显然，这些不确定性在长期资源预测中会大得多。

作为比较，这些资源需求会与现有分布式计算基础设施的预测进行对照；这种预测基于对未来预算的假设，或者简单地采用资源每年增长的百分比。正如模型预测存在不确定性一样，鉴于技术演进和市场力量的变化，资源预测同样存在不确定性。综合计算需求和资源预测，可以为潜在的原始资源缺口提供指导。

资源预测： 图2展示了高亮度大型强子对撞机计划前两个运行期内 ATLAS 和 CMS 对中央处理器和磁盘需求的预测。如表3.1所示，第4轮运行（于2029年开始）预计每次束团交叉（每25 ns）最多会有140次同时发生的 pp 相互作用，而第5轮运行预计最多会有200次此类相互作用。这一时期的积分亮度预计最高可达 $350\ fb^{-1}$。在第4轮运行期间，ATLAS 实验目前预计每秒约有10千赫兹的事件进入离线系统，而

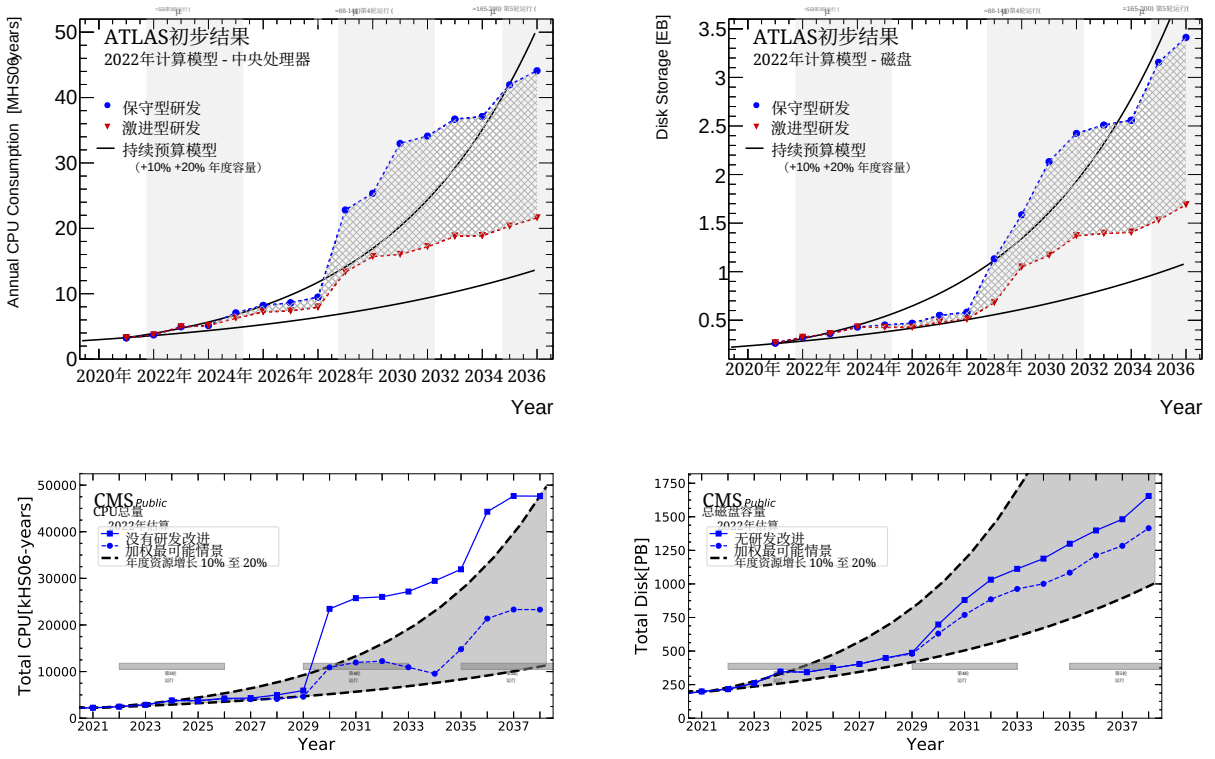


图2：ATLAS（上）和 CMS（下）对高亮度大型强子对撞机前两轮数据采集运行期间中央处理器（左）和磁盘（右）需求变化的当前预测。每项预测均包含基线估算，以及包含通过从现在到高亮度大型强子对撞机启动前的研发可实现改进的估算。每个实验均已发布关于这些预测的详细文件 [5,6]，供 LHCC 最近一次评审参考 [16]。

CMS 则约为每秒5千赫兹。相比之下，在2022年运行期，每个实验采集的数据约为每秒5千赫兹。在每种情况下，所有这些事件的完整原始数据都会被保留。

实验也已开始将未来研发成果的影响纳入资源预测。例如，在分析中采用小型列式数据格式，可以大幅降低实验的磁盘需求。同样，加快事例重建应用的运行速度也会降低计算需求。研发成果本身存在不确定性，因此外推时会采用不同假设，判断正在进行的研究最有可能实现哪些成果。在这方面，预测通常较为保守，因为开发人员往往能实现研究数年前尚未预料到的性能提升。

另一个主要的不确定性来源是 HL-LHC 物理计划的需求。在第2轮运行期间，各实验积累了大量知识，推动第3轮运行期间的科学计划进一步拓展。尤其是，CMS 和 ATLAS 都拥有规模可观的数据集，可用于 b-物理研究；而在 2010 年代中期制定的 HL-LHC 事例率预测中，并未纳入这类研究。这得益于持续重视性能优化，从而降低资源需求。我们预计，随着大型强子对撞机第三轮运行计划（刚刚完成第一年运行）不断推进，各实验将继续细化对 HL-LHC 的需求。

弥合资源差距

IRIS-HEP 将继续开发先进的重建与触发算法（第 5.2 节），并特别注重带电粒子径迹重建。该机构还将投入一个新兴领域——转化人工智能（第 5.3 节），这一领域具有巨大的潜力。

3.2 Sca整体分布式计算网络基础设施的可用性

尽管高亮度大型强子对撞机实验尚未完成其技术设计报告，但预计它们将采用大型强子对撞机成功的、基于分布式计算的方法。分布式网络基础设施能够灵活地部署资源，并使社区能够利用各种机会，例如在任何地方获取新资源。它还有助于基础设施实现扩展，因为不需要任何单一站点大到足以支持一个实验。

分布式方法的一个权衡是更加依赖中间件和广域网（WAN）服务。尽管全球大型强子对撞机社区的部分成员拥有专门用于实验的网络路径，但在美国，大多数设施都高度依赖共享的 ESNet 网络。ESNet 为美国境内站点之间的数据传输以及连接欧洲核子研究中心的跨大西洋通信提供网络连接。

高亮度大型强子对撞机面临的 可扩展性挑战，主要在于提升这一共享资源的数据速率、展示其处理能力，并确保网络提供商拥有足够的工具来监控和管理高亮度大型强子对撞机流量。这是一个仅购买硬件还不够的领域——包括文件传输软件在内的整个技术栈都必须经过调优并为这一挑战做好准备。

根据高亮度大型强子对撞机的原始资源需求，可以合理估算必须维持的广域网数据速率（例如，假设在一年最后三个月内，分配给费米国家加速器实验室处理的欧洲核子研究中心原始数据量为 100PB，那么我们知道，至少需要维持 110Gbps 的速率达 90 天，才能传输这些输入数据）。截至 2021年，全球大型强子对撞机计算网格（WLCG）[17] 估计，全球各设施合计需要以 10Tbps 的速率传输数据，以满足高亮度大型强子对撞机的需求；其中，传输至布鲁克海文国家实验室的速率为 900Gbps，传输至费米国家加速器实验室的速率为 1.6Tbps，跨大西洋链路的速率为 2,500。2021年，ESNet 开展了一项需求评估 [18]，估计在高亮度大型强子对撞机启动时，一个典型的 Tier-2站点需要 400Gbps 的连接能力。这些数字大约是当前水平的 20 倍。

为满足这些可扩展性要求，社区将数据重大挑战（第6.2节）定义为一系列逐步升级、每两年开展一次的演练，并将在2025年达到预期高亮度大型强子对撞机数据传输规模的100%。数据组织、管理与访问（DOMA）战略领域则制定了配套的工作序列，将数据挑战作为定期集成节点，以便衡量朝目标取得的进展。

数据重大挑战有助于为应对数据移动方面的可扩展性挑战做好网络基础设施准备。可扩展性挑战的另一个方面是计算中间件——将各种分散的资源整合到虚拟资源池中，并执行科学工作流（数据重建、模拟、分析数据集派生）。这些受管理的计算资源也将增长一个数量级。不过，计算方面的可扩展性挑战较为温和，因为部分资源增长会被每项计算任务并行性的提升所抵消，这意味着整体运行任务的数量仍大致处于同一数量级。对于计算，实验共享一个名为“计算入口点”（CE）的通用软件层，用于提交从远程批处理系统获取计算能力的“先导”作业。OSG-LHC 小组负责管理计算入口点及运行在美国大型强子对撞机计算设施上的其他分布式中间件。

由于持续集成的可扩展性会影响高亮度大型强子对撞机实验可用的分布式计算资源数量，迎接这一挑战与高亮度大型强子对撞机科学研究目标直接相关：

如果不能将输入数据传输到处理位置，也不具备大规模处理能力，就无法开展高亮度大型强子对撞机科学研究！

弥合网络基础设施可扩展性差距

IRIS-HEP 中的许多数据组织、管理与组织（DOMA）活动（第 5.4 节）旨在帮助扩大批量数据传输规模并弥合这一差距。一项专门的数据重大挑战活动（第6.2节）将与社区合作，衡量进展并为高亮度大型强子对撞机做好准备。

3.3 规模化分析

在高亮度大型强子对撞机时代，单看事件数，高能物理分析的规模将超过第一轮运行或第2轮运行时期的 10 倍。提升物理灵敏度并控制系统误差的新技术，将在高亮度大型强子对撞机物理分析中变得更加重要。要开展高亮度大型强子对撞机预期的广泛科学研究，并让各合作组的参与更加普及，就需要能够赋能规模更小、行动更灵活的分析团队的技术。因此，分析模式必须改变，才能实现高亮度大型强子对撞机的物理计划。

分析是物理学人才培养渠道的最后阶段——将实验产生的官方数据集转化为已发表的科学成果与发现。这意味着要反复处理数据，以构建直方图和其他聚合量。在第一轮运行和第二轮运行中，最大的分析数据集为数百至数万吉字节。在高亮度大型强子对撞机时代，其规模将经常达到数百至数千太字节 。如图 3 所示，社区开展这项工作的方式有三个方面在高亮度大型强子对撞机时代难以为继。首先，为每项分析或一组分析生成的中间数据集大多包含官方数据的副本，将占用越来越多的磁盘资源，最终超出预算。其次，采用目前的方法，从官方数据创建衍生数据集需要 1 至 2 周。若将这些成本按数据量增加 10 倍进行扩展，那么任何需要新数据、筛选切选或新数据集的新想法，都将耗时数月。创新和前沿科学研究对学生而言将变得难以负担。第三，自动化程度不足，无法支持规模较小的分析团队。要及时大规模处理这些数据，需要采用新颖的数据交付和分布式处理方法；对于高亮度大型强子对撞机而言，小型集群、有时甚至笔记本电脑就已足够，但仍需要配备先进配套服务的大型“分析设施”。

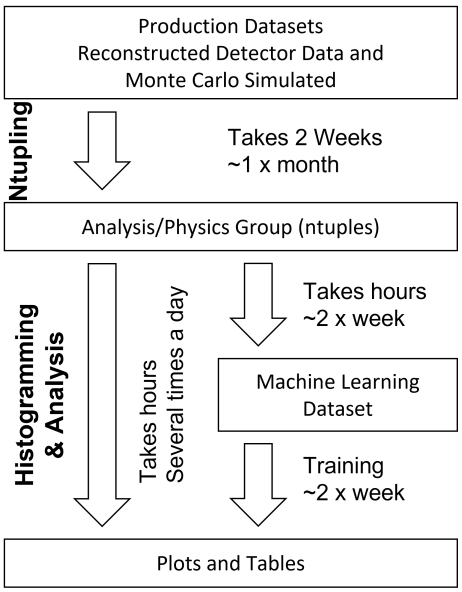


图 3：大型强子对撞机上第2轮运行和第3轮运行传统物理分析的数据与分析工作流程。

不同类型的物理分析会使用不同的工具，并具有不同的数据访问模式。ATLAS 和 CMS 实验已发表论文，详细介绍了高亮度大型强子对撞机的一些重要物理分析 [15] ，并尝试量化所需的数据量以及高亮度大型强子对撞机预期的物理探测能力。基于这些内容，我们重点介绍三项分析，作为 IRIS-HEP 下一阶段的旗舰示例或范例，用以展示我们的工具和方法：

- **高容量　　我**：需要极大数据集的物理分析示例是顶夸克质量测量　　e

，位于 $tt \to \mathrm{l}+$jets 分析道中。该分析道中的大量背景意味着，使用最大数据集时接受度最高。背景通过蒙特卡洛模拟进行建模，这会产生非常庞大的模拟数据集。这是一项典型的高数据量分析。

- **高复杂度**：双希格斯测量探测希格斯自耦合，使我们能够探究电弱对称性破缺的来源——而电弱对称性破缺是最近发现的希格斯机制的基础。这是高亮度大型强子对撞机的一项旗舰测量。即使使用高亮度大型强子对撞机的完整数据集，对希格斯自耦合的灵敏度也仅勉强可实现。这是一个很好的例子，说明某项分析将需要运用所有工具来提高其灵敏度；机器学习以及利用多个控制区来控制系统误差，就是其中的一些实例。

- **基准方案**：最后，tt 截面测量是一项理解透彻且易于复现的测量。目前也已有开放数据，可用于开展规模测试。

规模化分析需要许多单独的工具协同工作。IRIS-HEP 与社区共同创建了分析大挑战（AGC），以整合分析系统、DOMA 和设施研发领域，并展示朝着高亮度大型强子对撞机目标取得的进展；这是 IRIS-HEP 用来展示规模化分析差距正在缩小的机制。AGC 使用由分析系统、数据交付和原型分析设施构建的现代工具，执行物理分析的所有步骤。这包括初步读取数据集、构建直方图、确定统计误差和系统误差、执行统计分析，以及最终生成包含物理结果的论文图表。在 IRIS-HEP 的当前阶段，AGC 使用 CMS 开放数据，并部分实现了**基准方案** tt 截面测量。在下一阶段，研究所可以通过扩展基准方案，并实现现实的**高数据量** 希格斯自耦合测量和**高复杂度** tt 顶夸克质量测量，来证明其正在缩小这一差距。

弥合规模化分析差距

IRIS-HEP 的分析系统活动（第 5.1 节）开发了许多关键软件组件，以弥合这一差距，同时借助 DOMA 项目（第 5.4 节）实现面向分析的高效数据交付。分析大挑战（第6.1节）旨在与社区合作，整合完整系统，并展示高亮度大型强子对撞机所需的规模。

3.4 可持续性

鉴于高亮度大型强子对撞机及2020年代的其他设施至少到2030年代仍将发挥作用，软件生态系统的长期可持续性对高能物理至关重要。“可扩展性”的关键组成部分包括提高应对新挑战的适应性、软件持久性和效率。我们的目标是确保软件更易于开发和维护，使其未来仍能在新平台上使用，满足新的需求，并尽可能地重复利用。可持续性也与人才队伍密切相关；在预期的可持续发展期内，需要在个人持续参与（以积极投入或智力贡献的形式）与不断吸引和融入新成员之间取得平衡。在高亮度大型强子对撞机时代，大型强子对撞机社区**面临可持续性鸿沟的风险**：必须谨慎行事，确保软件数量不会超出我们在高亮度大型强子对撞机计划期间所拥有的人才队伍的可持续维护能力。

过去几年，IRIS-HEP 一直与社区合作 [19, 20]，通过更加有意识地规划软件的开发方式和内容，提升软件可持续性。具体活动主要围绕两方面展开：*(a)* 定义并不断发展软件生态系统，以及 *(b)*劳动力发展。

软件生态系统： 对于一门以设施为基础的科学而言，计算在设施中发挥着关键作用，因此可以预期，在设施的整个生命周期内，满足计算需求需要投入一定数量的“运维”工作量；但必须作出明确的战略选择，以确保网络基础设施能够在运维工作量范围内得到有效管理。鉴于当前大型强子对撞机和高能物理软件生态系统的特点，以下两条路径尤为相关：

- **识别并整合重复的高能物理专用解决方案：**由于历史和组织方面的种种原因，许多高能物理软件解决方案都是在单个实验的背景下开发的。如果不同实验的实际需求相似，这就会导致针对同一问题出现多种解决方案。
- **采用更广泛的科学界或开源社区所使用的解决方案：**采用应用更广泛的解决方案，通常也会扩大支持其可持续发展的群体。

这两种途径实际上都归结为扩大使用特定软件组件的社区规模。没有一定程度的专门投入，以及某个机构或长期项目的“所有权”，大多数软件产品都难以存续并发展壮大。如果扩大社区规模并未显著扩大软件的适用范围，那么这实际上会提高投入所产生的影响。将社区现有的投入集中于单一解决方案，最终将带来更出色、更可持续的解决方案。

例如，IRIS-HEP 的 OSG-LHC 团队 5.6 不再于研究所内部单独维护分布式高吞吐量计算服务，而是为更大的 OSG联盟作出贡献。这样一来，所需的通用服务便可在美国国家科学基金会科学与工程领域内共享，从而大幅减少该领域所需的总工作量。

虽然已有部分软件为大型强子对撞机第三轮运行交付，但整合和充分利用这些成果的工作必须持续推进，直到为高亮度大型强子对撞机部署软件解决方案和计算系统。可持续性是研究所所有活动的重点，也体现在我们所做的选择中，详见第5节。

劳动力发展与演进：人才也是软件可持续性的关键。IRIS-HEP 的培训活动（第5.7节）是与社区合作、从根本上培养更可持续的软件实践和技能的核心组成部分。研究所的蓝图活动旨在凝聚社区共识，推动做出更可持续的选择并开展相关活动。

研究所在软件生命周期的早期阶段发挥着特别重要的推动作用。随后，研究所与其他组织（实验、美国大型强子对撞机运行计划以及相关机构）合作，负责生命周期后期的各项工作，并制定长期可持续发展路径。

最后，我们指出，**跨学科且得到广泛应用的软件，若拥有能够自我维持的社区，便可使科学更加民主，消除对专业技术知识的需求**，并使研究人员都能平等地获得帮助。

弥合可持续性鸿沟

可持续性工程已融入 IRIS-HEP 的所有软件活动。从战略层面看，IRIS-HEP 分析系统（第 5.1 节）的活动正在推动采用应用更广泛的数据科学工具。DOMA 的活动 5.4 致力于为整个高能物理领域提供通用软件工具。最重要的是，IRIS-HEP 培训活动 5.7 和培训重大挑战 6.3 正在引领社区做好准备，为高亮度大型强子对撞机时代培养人才队伍。

4 研究所的作用

4.1 研究所在 HL-LHC 社群中的作用

IRIS-HEP 的使命是直接开展一系列研发活动，并作为更广泛社区研发工作的知识枢纽，助力弥合 HL-LHC 计算差距。图 4 展示了大型强子对撞机和高亮度大型强子对撞机的时间表；IRIS-HEP 的第二阶段预计将在 2023 年至 2028 年这约五年期间开展，即从 IRIS-HEP 资助结束后，持续到高亮度大型强子对撞机于 2029 年启动前的研发窗口期结束。此期间将与迈向高亮度大型强子对撞机的两个重要步骤相重合：ATLAS 和 CMS 实验提交计算技术设计报告（CTDR） ~2025 ，以及 2026—2028年第三次长停机。CTDR 将阐述各实验在资助机构所规定的经费限制下，构建软件和计算系统以最大限度发挥 HL-LHC 物理探测能力的技术蓝图。对于 ATLAS 和 CMS 而言，预计第3轮运行的数据集规模相较第2轮运行的增长不会构成重大挑战；与第4轮运行预期的升级相比，探测器的改动也将较为有限。因此，ATLAS 和 CMS 有机会在第3轮运行期间继续对高亮度大型强子对撞机计算的部分要素进行原型开发和部署，尤其是在年末技术停机期间，并在生产工作负载运行的同时开展基础设施扩展测试。相比之下，LHCb 在第3轮运行开始时将大幅改变数据处理量，而高亮度大型强子对撞机带来的变化较小；在 IRIS-HEP 的下一阶段，团队将着手开展第5轮运行所需的早期研究。

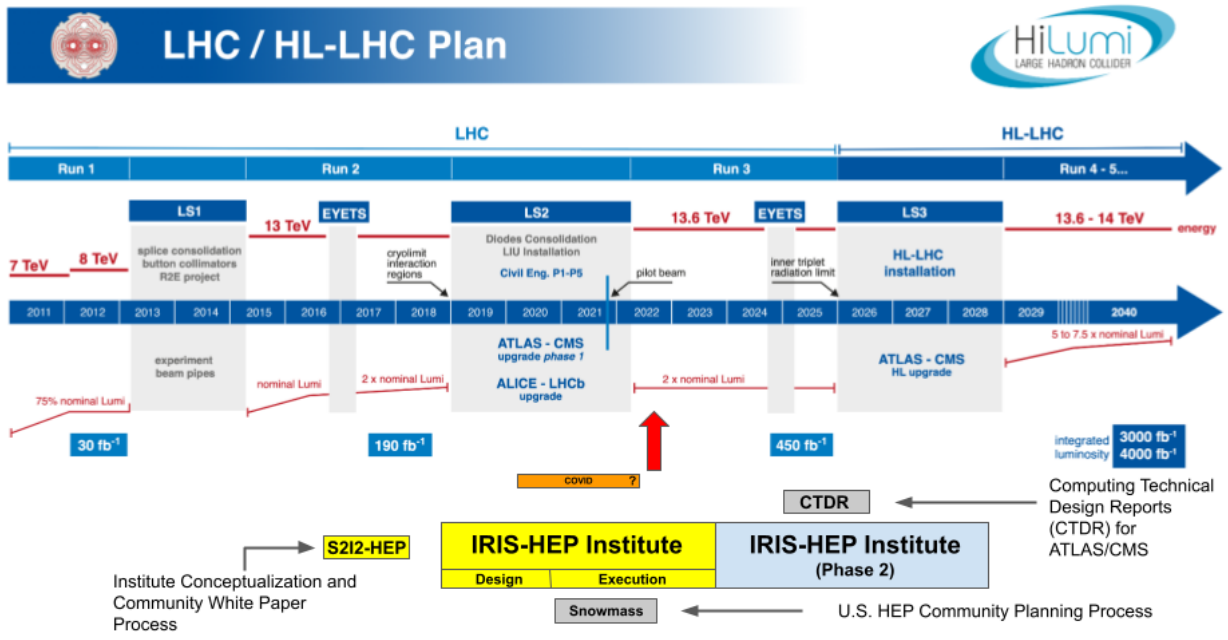


图 4：截至2022年1月的大型强子对撞机和高亮度大型强子对撞机 [21] 时间表，显示了数据采集期以及用于升级加速器和探测器的“停机”期。数据采集期以（下方）红线表示，显示相对亮度；（上方）红线表示质心能量。无数据采集的停机期以蓝色方框表示（LS = 长停机期、EYETS = 延长年末技术停机）。当前 IRIS-HEP 资助项目的规划期和资助期以黄色标示。

IRIS-HEP 处于更大的国际和国家级项目背景之中，而这些项目对于利用软件和计算在当今及未来成功推动大型强子对撞机的科学研究是必不可少的

。在国家层面，最重要的是由美国能源部和美国国家科学基金会共同资助的美国大型强子对撞机“运营项目”，以及 OSG联盟。在国际层面，重要合作伙伴包括高能物理软件基金会（HSF）和全球大型强子对撞机计算网格（WLCG）。这两个国际组织主要发挥协调和达成共识的作用，对于像 IRIS-HEP 这样希望与整个领域进行沟通的项目很有帮助。HSF 主要专注于物理软件，而 WLCG 则负责协调全球生产基础设施的设施、中间件和运营工作。

研究所的使命是通过合作性的社区流程开展软件的开发、原型开发与部署。采用研究所规模的方法，其优势在于整体效果大于各部分之和；这种方法所促成的更广泛社区工作，能够产出比其他方式更优质且更具可持续性的软件。与这一使命一致，IRIS-HEP 的职责是：

1. 利用自身资源直接推动特定重点领域的软件研发流程，同时通过合作性工作加以发挥（见第5节）。

2. 与大型强子对撞机实验、其美国运行计划、相关国家实验室以及更广泛的高能物理界密切合作，确定软件与计算方面最优先的问题，并建立合作机制加以解决。3. 作为更广泛的高能物理软件与计算社区工作的知识枢纽。IRIS-HEP 汇聚来自高能物理、其他领域科学、学术界计算机科学以及私营部门的大量专家，就可持续软件开发为高能物理界提供建议。同样，研究所还充当传播当前软件与计算生态、新兴技术及工具相关知识的中心。研究所将继续对新提出的软件组件进行严格评估，包括其算法本质（例如避免重复工作）、可行性与可持续性，并就培训、人才队伍和软件开发向合作组（包括实验和理论合作组）提出建议。

4. 通过以下方式创造价值：(a) 为 ATLAS 和 CMS 的计算技术设计报告的编制作出贡献；(b) 开展软件和服务的研究、开发与部署。

4.2 研究所作为知识枢纽

IRIS-HEP 的一项非常成功的工作——也彰显了研究所架构本身的价值——是为更广泛的社区发挥知识枢纽的作用。通过一系列有组织的活动，IRIS-HEP 将整个高能物理界（甚至包括研究所高亮度大型强子对撞机科学驱动目标之外的群体）聚集起来，共同解决具体问题、传播知识并分享经验。

通过发挥社区知识枢纽的作用，IRIS-HEP 能够凭借其物理软件、培训和共享网络基础设施，直接影响 DUNE、电子离子对撞机、Belle II、未来环形对撞机、SPT-3G、XenonNT 和 NOvA 等实验。例如，电子离子对撞机、Belle II 和未来环形对撞机正在评估并使用分析工具项目和 ACTS。开放科学网格-LHC（OSG-LHC）开发的服务（尤其是软件栈）在高能物理界广受欢迎；DUNE、SPT-3G、XenonNT 和 NOvA 都在使用这些服务，而且美国几乎所有大型高能物理合作组也都在使用。作为知识枢纽这一组成部分，研究所将帮助凝聚并引导更广泛的高能物理界。

知识枢纽开展的具体活动包括蓝图活动 以及举办协同生态系统研讨会系列活动：

- **蓝图活动**：IRIS-HEP 蓝图活动旨在为 IRIS-HEP 战略愿景的制定与演进提供参考，并在由软件和计算创新驱动的各社区之间建立（或加强）合作伙伴关系。蓝图流程包括一系列研讨会，邀请 IRIS-HEP团队成员、关键利益相关方以及来自对研究所使命至关重要的学科领域的专家共同参与。

  为促进与社区各方伙伴建立有效合作，研究所将继续积极参与并召集关键人员，围绕具体研发主题举办小型“蓝图”研讨会。在这些蓝图研讨会上，伙伴们不仅会相互通报各个项目的进展和目标，还会积极阐明并记录共同愿景，说明各项活动如何相互配合，形成连贯的研发整体图景。每场蓝图研讨会的范围都应以务实的方式设定，以便就共同愿景达成共识；如有必要，相关关键人员应能够在各个项目内部重新调整工作方向。蓝图流程的设计本就灵活敏捷，能够响应社区需求。举例来说，在从疫情中学习：高能物理及其他领域会议的未来 研讨会上，[22] 与会者分享了 COVID-19 疫情期间举办高能物理线上活动的经验，并探讨了未来会议的最佳实践，包括在高能物理领域日益普遍的混合形式参会方式。

  这些蓝图研讨会的整体安排将形成一种流程，使研究所能够确立其在更广泛的高亮度大型强子对撞机研发工作中的作用。蓝图流程也是一种机制，通过这一机制，研究所及其各合作伙伴能够推动研发主题随时间的发展。

- **协同生态系统研讨会**：与开展专题研讨会的蓝图活动不同，IRIS-HEP（及其前身 S^2I^2 为研究所铺平道路的概念化流程 [4]）于2017年、2019年和2022年举办了三次“协同生态系统研讨会”（第三次研讨会因COVID-19 疫情而推迟），重点关注整个领域的研发。每次研讨会都包括对美国能源部和美国国家科学基金会各项主要活动的广泛概述，随后分组协调各个子领域。研讨会的目标是确定潜在的合作主题（找出可能因资助机构或实验不同而被忽视的共性），帮助社区根据自身需求和科学机遇制定项目优先级排序，识别当前生态系统中的空白，并避免启动不必要的重复项目。研究所将继续开展这一系列研讨会，并就是否应将其频率提高到每年一次，以及是否应围绕更广泛的科学驱动力组织讨论，征求社区意见。

更广泛地说，研究所将继续支持相关活动，提升更广大的高能物理及相关社区开展和支持大型**科研软件合作**的能力，使其产出不仅与大型强子对撞机相关，也具有更广泛的意义。科研软件是我们研究的一项重要智力成果，而不只是关键工具。IRIS-HEP启发了其他类似的工作，这些工作的持续成功将成为研究所影响深远且重要的遗产。这尤其包括支持高能物理软件基金会的活动，同时也包括与其他近期获得资助的国内外社区科研软件项目建立相关合作，使其能够借鉴我们的经验。

4.3 研究所在软件生命周期中的作用

图5展示了美国国家科学基金会高级网络基础设施办公室（OAC）所理解的软件生命周期各个环节：从核心概念和算法的研究，到开发

原型，再到软件产品的部署，以及作为持续生产一部分的长期支持。该研究所的社区愿景是，将资源重点用于开发后期阶段（并开展一些探索性工作，涉及相互关联的研究后期／开发早期软件项目）；在接近高亮度大型强子对撞机启动的几年里，与各实验、美国大型强子对撞机运行计划及其他机构合作，推动软件过渡到持续生产环境。与 IRIS-HEP 相比，该研究所在生命周期后期阶段的投入会更多。各实验已在其内部生命周期流程中全面开展集成、测试和部署。该研究所不会重复这些工作，而是与各实验、运营项目和 OSG联盟合作，开展软件集成活动以及与新软件产品初期部署相关的活动。这还可能包括逐步淘汰较旧的软件组件、推动现有系统转向新的工作模式，以及整合现有的冗余软件组件。

研究所下一阶段的生命周期将是有限的 5 年，并在高亮度大型强子对撞机启动前立即结束；这仍远短于高亮度大型强子对撞机活动的计划周期。因此，与美国大型强子对撞机运行计划密切协调至关重要。这些运行计划将持续至美国参与高亮度大型强子对撞机项目结束，从而确保研究所项目的长期延续性和可持续性。作为高能物理软件创新的知识枢纽，研究所将就整个高能物理生态系统内的软件开发提供广泛的建议和指导。实现这一目标的方式，是在高能物理领域内外以及网络基础设施社区中，维持一支由科学软件开发专家组成的关键规模团队，并与研究所开展合作。

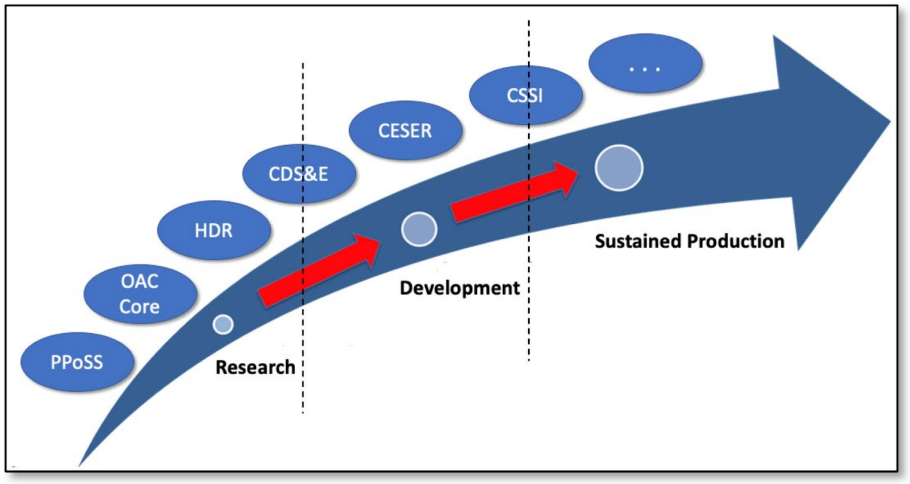


图5：美国国家科学基金会所呈现的软件生命周期；研究所将把项目从早期的研究与开发阶段衔接到持续生产环境。图示转载自美国国家科学基金会科研计算办公室的《国家数据与软件网络基础设施蓝图》 [23]。

4.4 研究所要素

IRIS-HEP 的下一阶段将包含若干内部职能要素，如图 6 所示。

研究所管理： 为实现其使命，研究所将建立明确的内部管理架构，以及外部治理和咨询架构。附录 B 对这一方面作了进一步说明。

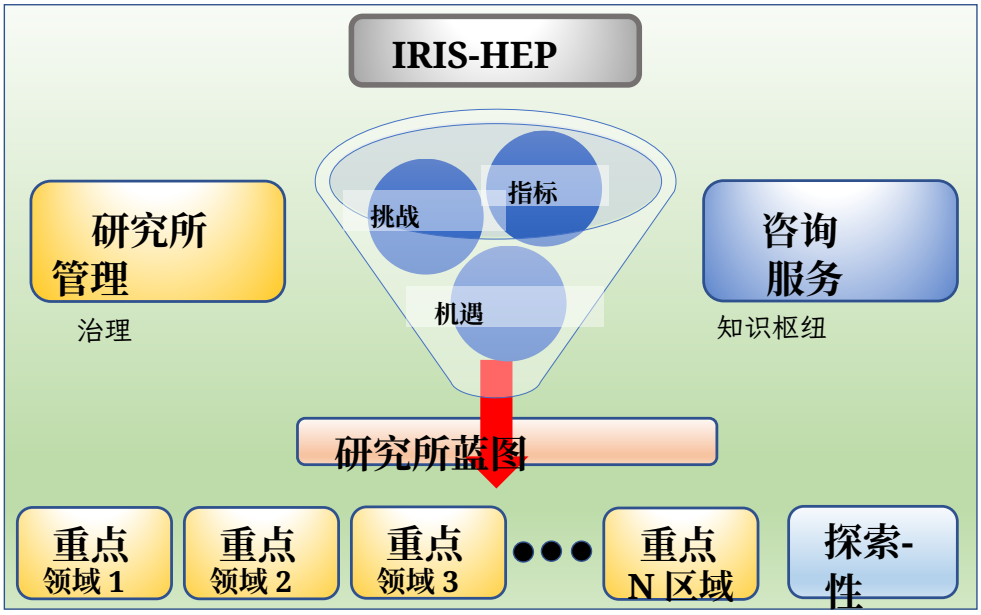


图 6：IRIS-HEP 软件研究所的组成部分。后续研究所设想的重点领域见第5节。

领域： 研究所将设立 7 个相互关联的活动领域，以实现研究所的主要目标；这些领域详见第 5 节。最终的领域数量将取决于可获得的资助（见第 8 节）。每个重点领域都将制定自己的具体工作计划和评估指标。

蓝图与可持续软件活动：研究所的蓝图活动将维护研究所的软件愿景，并且每年 3 至 4 次汇聚专业力量，针对研究所活动范围内的具体关键问题作出解答；必要时，也会探讨更广泛的高能物理软件与计算领域的问题。如第4.2节所述，蓝图活动将成为与其他高能物理及高亮度大型强子对撞机研发工作建立共同愿景的重要组成部分。随后，这些蓝图将为研究所活动的发展以及社区整体的高亮度大型强子对撞机研发中长期目标提供指导。

探索性：研究所偶尔可能会投入适度资源，开展与研究所规划和整体使命相关的短期探索性研发项目。

咨询服务： 研究所将通过为其他项目提供技术与规划建议并参与评审，在更广泛的科研软件社区（高能物理领域及其他领域）中发挥作用。研究所将由直接受雇于研究所的人员承担这项职能，同时通过其合作伙伴网络邀请其他人员参与。

研究所WBS领域	工作量（全职当量）
管理/项目办公室	1.9
分析系统	10.4
DOMA	2.9
创新算法	8.9
可持续发展与培训	1.4
可扩展系统实验室	1.3
OSG-LHC	5.2
总计	**32.0**

表2：截至当前 IRIS-HEP 资助项目/项目第5年的全职当量分布，按“工作分解结构（WBS）”领域分组。

研究所的5个战略活动领域

作为一个专注于确保高亮度大型强子对撞机科学研究成功所需软件与服务的研究所，IRIS-HEP 是更广泛的国际研究、开发与部署共同体的一部分。它直接资助并主导部分研发工作，支持实验开展相关部署工作，并作为多元化工作的知识枢纽。在 IRIS-HEP 可能于 2023—2028年进入第二阶段的情况下，研究所的工作量将围绕以下重点领域组织：

1. **分析系统**：现代化并发展用于分析高亮度大型强子对撞机数据集的工具和技术。分析系统领域将专注于*G3*（规模化分析）相关主题，包括管理规模大一个数量级的数据集、支持更复杂的技术（包括使用现代机器学习），以及采用数据科学工具以实现*G4*（可持续性）目标。交付成果将包括支持规模化分布式列式数据分析完整人才培养渠道的工具，并可与高能物理及更广泛的数据科学生态系统中的其他组成部分互操作。还将集成现代机器学习技术与运作方式（包括可微分分析流水线），并全面支持分析保存和重新诠释。

2. **重建与触发算法**：开发并改进模式识别软件，使其能够利用新一代探测器技术、计算平台和编程技术，准确高效地识别带电粒子轨迹。本领域的工作对于消除因新型且能力更强的实验装置、更高的数据速率以及不断发展的计算硬件而产生的*G1*（资源）差距至关重要。算法必须经过设计，能够在高亮度大型强子对撞机运行期间*G4*（可持续）地持续运行。本领域将交付径迹重建流水线的关键组件，优先确保算法互操作性、实现高度并行，并采用稳健的算法。我们将考虑传统和新颖的径迹重建算法，因为径迹重建是一个多方面的问题，其优化重点因实验装置设计和计算技术设计而异。

3. **转化人工智能**：利用机器学习方法提升高亮度大型强子对撞机的物理探测能力。转化人工智能领域将借助基础研究的成果，例如美国国家科学基金会人工智能研究所开展的工作，并重点帮助高亮度大型强子对撞机实验将这些能力应用于生产环境。活动包括推动并使用基于机器学习的服务、帮助该领域接入现有基础设施，以及推动对正在使用的模型进行“重新训练”，以适应新数据。

4. **数据组织、管理与访问（DOMA）**：扩展并升级批量数据传输基础设施，包括采用新的授权方案、传输协议和网络集成；为分析设施提供新的数据交付服务与技术。DOMA 有助于弥合 *G2*（可扩展性）计算差距，以消除从现在到高亮度大型强子对撞机启动期间预期广域数据传输速率相差 20 倍的问题。DOMA 将为站点间批量数据传输创新授权方案，协调国际数据挑战，以衡量朝目标数据速率迈进的进展并集成新技术。在分析方面，DOMA 将开发用于交付列式数据的服务，并将数据库社区的现代数据管理技术应用于高亮度大型强子对撞机分析环境。

5. **设施研发**：创新为美国大型强子对撞机建设设施的新方法，并使社区采用与更广泛的美国国家科学基金会协调的网络基础设施相一致的方法。该领域将 Kubernetes 作为“底层平台”来编排可移植服务，为研究所内的项目提供测试平台设施，并研究利用多站点 Kubernetes 集群来提高分布式服务运营的敏捷性。设施研发通过降低运维复杂性和成本，为实现 *G4*（可持续性）目标作出贡献；同时通过将敏捷技术应用于未来的分析设施，为实现 *G3*（规模化分析）目标作出贡献。

6. **分布式高通量计算服务网络（OSG）**：运营专门满足大型强子对撞机需求的一系列服务，并为其向高亮度大型强子对撞机演进提供稳定路径。OSG-LHC 小组确保大型强子对撞机实验的需求得到满足，同时为更大的联盟作出贡献，使大型强子对撞机也能从更广泛的通用服务中受益。

7. **培训、劳动力发展与外展**：执行并协调广泛的活动，以满足 HL-LHC 社群在培训、劳动力发展与外展方面的需求。研究所内的该领域将确保能够提供满足不同层次需求的培训（本科生、研究生、博士后、专业人士），并运行 IRIS-HEP 研究员计划——一项面向高年级本科生和低年级研究生的深度虚拟导师计划。这对于弥合 *G4*（可持续性）差距至关重要。

这些活动领域的选择，主要依据相关投入对第 3.1 节所述 HL-LHC 计算差距可能产生的影响，以及通过研讨会（附录A）、IRIS-HEP指导委员会和众多直接合作者从社区持续收集的意见。

虽然这些战略领域涵盖范围广泛——从探测器读出事件的那一刻，一直到科学成果的最终发表——但它们共同致力于弥补第 3 节所述的高亮度大型强子对撞机计算差距；在 IRIS-HEP 第一阶段之后，这些领域也彼此交织、相互依赖。DOMA 为生产基础设施开发的软件，大部分通过 OSG-LHC 发布给大型强子对撞机设施。设施研发领域为分析系统组件的测试和扩展提供了广泛支持。Coffea-Casa 原型分析设施这类活动横跨 OSG-LHC、DOMA、分析系统和设施研发。另一项跨领域活动是支持 LHCb 实验；与 ATLAS 和 CMS 相比，LHCb 实验正处于生命周期的不同阶段。因此，在第 5.8 节中，我们将分布于研究所各领域的 LHCb 活动汇总在一起。即便是重建算法和 OSG-LHC 这类鲜有明确关联的领域，也能从研究所架构中受益，例如项目管理，以及组织蓝图活动的知识枢纽。以研究所为基础的工作方式能够提供长期愿景、组织架构，并协调彼此独立的活动；若仅将这些活动作为一系列小型项目来开展，则无法做到这一点。

5.1 分析系统

分析系统（AS）构建工具、库和人才培养渠道，帮助物理学家将实验生产数据转化为物理学结果。这些方法可用于、也确实已用于大型强子对撞机分析，不过其首要目标是让分析能够达到高亮度大型强子对撞机时代所需的规模和复杂程度。尽管现有工具在2029年仍能正常运行，但仅凭高亮度大型强子对撞机的规模，就会使其成本高得难以承受：如今有些分析已经难以在博士生的学习期限内完成。若在探索阶段将事件数增加 20 倍，许多团队实际上将难以开展分析。

这使大型强子对撞机社区面临严重的计算差距（*G3*（规模化分析），第 3.3 节）：当前的分析方法无法适应高亮度大型强子对撞机数据集的规模和资源限制。为解决这一问题，IRIS-HEP 致力于以蓬勃发展、规模庞大的开源 Python 数据科学社区为基础构建分析生态系统。该社区在工业界得到了广泛应用，也是天体物理学和地球科学领域现代数据分析方法发展的重要推动力 [24]。如图 7 所示，该生态系统由各自以可持续方式开发的分析工具组成，旨在改善分析人员的用户体验。生态系统注重一致的应用程序接口和通用数据交换格式，因此从设计上便具备互操作性；通过集成这些工具，可以构建高效且高度可扩展的工作流和数据分析管线，涵盖从数据摄取到最终统计分析的全过程。对开发的关注使这些工具能够提供更简洁的接口，而这正是实现分析复用与重新诠释的关键要素。

端到端的人才培养渠道涉及的远不止软件工具。我们需要服务来交付数据，也需要设施作为“家园”，让用户能够以远超当前的规模运行分析。要实现高效的数据交付和分析执行，DOMA、设施研发和分析系统团队之间必须紧密整合。为促进此类合作，IRIS-HEP 制定了分析大挑战（AGC）；详见第6.1节。AGC 包含一系列综合性、难度逐步提高的练习，旨在为各团队协同开展高亮度大型强子对撞机规模的分析做好准备。这些练习的最终目标，不仅是让规模最大的大学团队能够开展高亮度大型强子对撞机分析，还要赋能资源不足的小型团队，扩大参与科学事业的范围。

具体挑战与机遇

从现在到高亮度大型强子对撞机运行期间的剩余研发阶段，持续改进、优化并整合分析系统工具，使其彼此协同，并与更广泛的高能物理分析生态系统中的其他工具协作，至关重要。此外还有令人振奋的新机遇：以自然的方式将机器学习（ML）应用整合到分析流水线中，提升重新诠释能力，并实现完全可微分的分析管线。

高亮度大型强子对撞机分析的用户体验：AGC 是工具集成和性能测试的理想测试平台。目前，AGC 正在使用一项 $t\bar{t}$ 截面测量作为分析示范。这个相对简单直接的分析为社区提供了宝贵反馈，例如指出需要改进分析各个阶段之间的数据传递方式，并提升大型分布式工作流的用户体验。然而，要妥善处理系统不确定性并使这一方法更加贴近实际，仍需开展工具和集成方面的开发工作。在下一阶段，为了引入更贴近实际的挑战，AGC 将采用新的旗舰分析，涵盖高数据量和高复杂度的案例。增加使用更大数据集的分析（例如 $t\bar{t}$ ℓ+喷注质量测量），以及使用机器学习技术的分析（例如希格斯自耦合测量），将进一步检验集成的各个方面。

将机器学习（ML）集成到分析流水线中：机器学习技术在分析中发挥着日益重要的作用。到高亮度大型强子对撞机时代，几乎每项分析

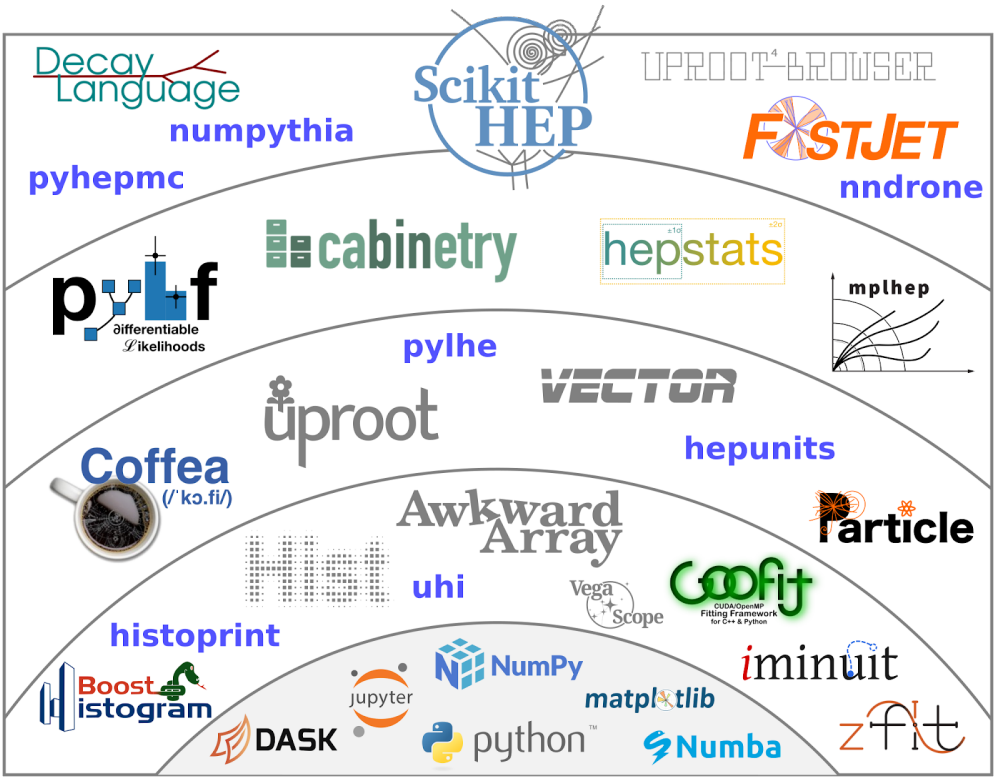


图 7：用于高能物理的 Python 分析生态系统的组成部分。底层环由 Python 数据科学生态系统中广受欢迎的库构成。底层环周围的各环包含专为粒子物理分析和应用设计的工具；虽然底层的高能物理层得到广泛应用，但越往上，各层就越具备分析或实验特异性。许多高能物理专用工具属于分析系统流水线，由 IRIS-HEP 所有或得到 IRIS-HEP 的贡献。

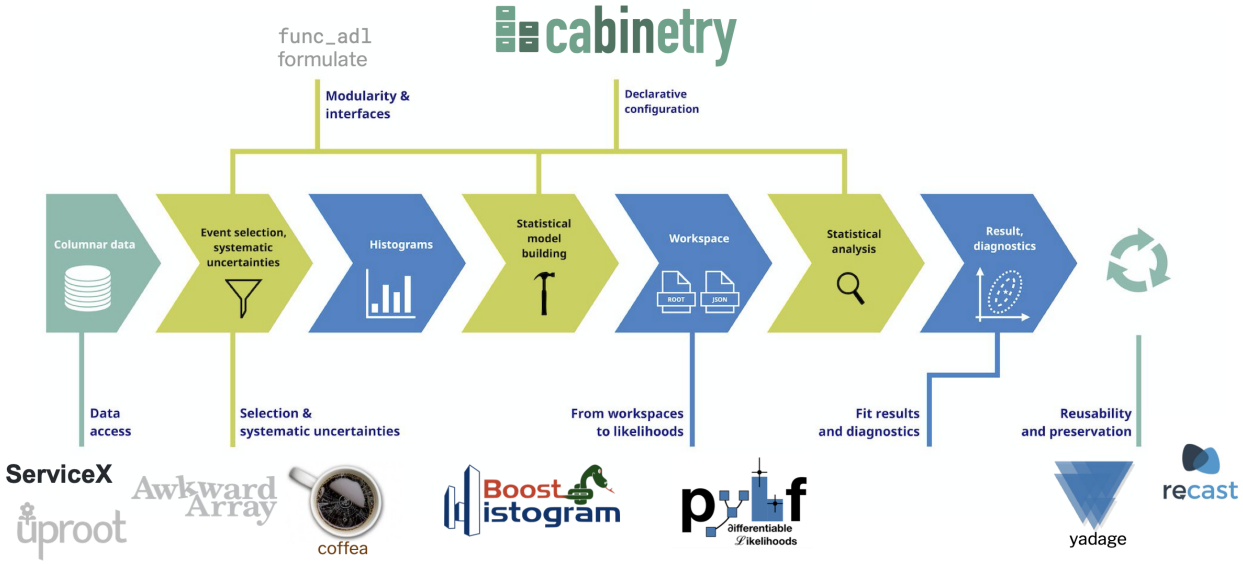


图 8：分析系统分析流水线示意图。图中展示的项目代表了必须集成在一起、以高效开展分析的主要工具。

将依赖机器学习来提升物理灵敏度和物理探测能力。除了社区普遍采用的传统方法外，还有许多独立工具可用于辅助机器学习模型的构建、训练、优化和部署（例如 MLFlow 或 KubeFlow）。这些方法之间存在许多阻抗失配，导致分析人员反复解决相同的工具问题。鉴于机器学习在 ATLAS 和 CMS 的高亮度大型强子对撞机计划中的核心地位 [25–27]，以及研究所在设计分析工作流方面的丰富经验和专业知识，将机器学习工具和服务协调一致地融入整体生态系统，为改善使用机器学习的分析人员的用户体验提供了机会。

分析重新诠释：对物理分析进行重新诠释，是拓展现有分析物理探测能力的一项关键技术。它使物理学家能够利用先前发表的分析结果排除新提出的模型，并借助新的观测结果拓展分析的探测能力。重新运行复杂的工作流，要求所有步骤都能移植到新的环境中，并且需要一种工作流语言规范来连接各个步骤。REANA 可复现分析平台 [28], 用于协调大规模分布式资源上的工作流。REANA 很适合面向批处理的工作流，但尚不清楚它及其他保存服务需要如何适应更新的服务和工具。面临的挑战是在推动新分析创新的同时，维持对该领域至关重要的重新诠释能力。

完全可微分的分析系统流水线：机器学习技术历来都只是孤立地应用于粒子物理学分析中。神经网络通常被训练为最终的分析判别量，以优化信号与本底分离，不过机器学习技术在分析方面还有更大的潜力。例如，训练中未纳入系统不确定性，这意味着网络优化可能会依赖那些虽有助于区分信号与本底、但尚未得到充分理解的变量。若要扩展网络训练，使其纳入分析其他部分的信息——例如用于灵敏度分析的似然函数信息，以及干扰参数的系统变化——就需要分析流水线完全可微分，以便在各个阶段之间传递梯度计算。neos 项目 [29] 已通过一个简化的分析示例，展示了可微分分析系统的价值：该示例针对预期灵敏度进行优化，并在过程中考虑了系统

不确定性的建模与处理 [30,31]。分析系统的完整愿景是让整个流水线端到端可微分，涵盖从分析预筛选切选到最终的灵敏度判定。尽管端到端可微分分析尚未实现，因此难以评估这一方法的全部影响，但在当前分析中纳入系统不确定性已初步显示出灵敏度提升。

当前方法与发展路线图

将高亮度大型强子对撞机分析融入数据科学生态系统

资助方案：低（缩减范围）[1]、中、高

描述：物理学家与其分析环境之间的使用体验质量至关重要。过去，物理学家通常接受编写分析代码的培训，随后将代码提交至批处理计算系统，并等待系统返回结果。在第一阶段，IRIS-HEP 开始研究源自数据科学领域的替代方法，包括基于任务的计算、笔记本交互式计算环境和富有表现力的基于查询的语言，将其作为缩短分析反馈循环并使数据探索更具交互性的工具。分析系统建立在现有的稳健数据科学工具之上，主要来自 Python生态系统，并创建了一个面向高能物理、具有互操作性的 Python风格的数据分析工具生态系统，如图 7 所示。随后，这一生态系统中的工具根据各自在数据分析操作和功能方面的特点，被组织成一条分析流水线，如图 8 所示，从而实现物理分析各阶段之间连贯的数据流动。Uproot 软件包 [32] 为 ROOT [33] 数据文件提供数据访问，这些文件由 ServiceX [34] 以及 DOMA 的其余部分提供；数据随后被转换为不规则的 Awkward 数组 [35] ，以便进行高效的基于数组的计算。func adl 查询语言 [36]支持在分析逻辑中定义富有表现力的事例和运动学筛选标准，并在 Uproot 中进行处理；之后，处理结果被交给 Coffea 列式分析框架 [37]作进一步处理，最终以 boost-histogram [38] 对象的形式生成分析筛选结果的直方图。这些直方图对象经过序列化后，被 cabinetry [39] 读取，用于创建分析中所处理物理过程的统计模型；随后，利用 cabinetry 针对常见分析任务提供的稳健应用程序接口集合，对模型进行高效拟合。这一过程由 pyhf 高效的统计推断和优化技术 [40, 41], 提供支持，最终得到分析的汇总统计量。分析系统通过整合并协调这些高能物理数据科学工具及其相互作用，构建高效的数据分析管线。这些工具彼此紧密协作，以确保稳健的互操作性和高效的计算，同时也支持作为独立工具进行富有表现力的操作和探索。通过与数据科学领域中的其他工具（例如 Awkward 和 Dask、pyhf 及 JAX）交互，这种设计还能够扩展分析系统流水线的覆盖范围和功能。

如第 5.6 节中进一步讨论的那样，随着硬件市场日益多样化，预计到高亮度大型强子对撞机 [25–27]启动时，分析设施除了支持更传统的计算架构外，还将支持更多基于ARM的资源以及图形处理器。更广泛的数据科学和机器学习领域一直顺应这些市场趋势，将工具支持从传统的x86架构扩展到多个基于 ARM 的平台。同样，业界的机器学习框架也开始将支持范围扩展到多种商用 GPU架构。分析系统通过与 Python 数据科学生态系统集成并在其基础上拓展，完全能够利用这些趋势。许多分析系统工具已经支持基于 ARM 的平台，统计工具也已支持在商用图形处理器上进行硬件加速。预计随着机器学习将

[1]在本节中，我们为每项活动标注相应的资助方案（低资金情景——每年 400 万美元，中等／基准方案——每年 500 万美元，高资金情景——每年 600 万美元）。这些方案表示 IRIS-HEP 将在哪些情景下开展该活动。此项活动在所有预期情景下都会得到支持；但在某些情况下，例如本项活动，在资助较低的情景下，活动范围和规模将大幅缩减。

成为分析多个阶段中更常见的组成部分，且更多分析工具能够利用硬件加速，对图形处理器资源的需求将会增长（详见第 5.4 节）。现在向分析设施投资更多图形处理器资源，将使机器学习工作流和服务成为分析工作流中的主流组成部分，并在高亮度大型强子对撞机启动前实现生产级集成。

当前及未来潜在活动：

- 新数据格式：ROOT 工具包正在为该领域开发一种新的数据格式 RNTuple。目前已在 Uproot 中实现对该格式数据的基本读取，但访问方式对用户不够友好，且 RNTuple 写入功能尚未完成。由于 RNTuple 格式仍在不断演进，Uproot 的实现也需要随之调整。此外，ATLAS 和 CMS 正在考虑采用 Apache Parquet 和 Apache Arrow 数据格式实现快速列式数据访问 [25–27], 。ServiceX、Awkward 和 Coffea 现有的兼容性使分析系统流水线能够立即使用这些新格式开展分析。

- 支持异构计算资源：随着分析设施及整个领域中异构计算资源日益丰富，支持这些平台变得愈发重要。分析系统工具已基本支持多个基于 ARM 的平台，并正在扩大对运行资源的覆盖范围。

- 支持列式数据分析：分析系统分析流水线基于列式分析方法构建，并充分利用 Awkward 和 Coffea 的设计优势。支持列式数据访问和分析基础设施，是 ATLAS 和 CMS 面向高亮度大型强子对撞机规划的里程碑。随着相关工作不断推进，分析系统工具需要进行调整，以支持与实验方案实现互操作（例如 ROOT 的 RNTuple、ATLAS 的 PHYSLITE 和 CMS 的 NanoAOD 实现）。 [25–27]

- 填补序列化方面的空白：生态系统中各组件之间的互操作性对用户体验至关重要。虽然大多数分析都可以转换为纯 Python，但有一些关键对象类型无法在 Python 中顺利地进行序列化／反序列化（例如 ROOT 的“逐成员序列化”模式、RooFit 模型、boost-histogram 对象）。弥合这些空白后，IRIS-HEP 下一阶段将能更好地服务于采用这些技术的高亮度大型强子对撞机用户群体。

- 推动工具成熟并投入生产环境：尽管大多数分析系统工具已成为成熟项目，并在 Scikit-HEP 社区中广泛使用， [42] 具备稳定的应用程序接口、庞大的用户群体，且开发团队之外的人员也为其作出贡献，但在功能、用户体验和相关知识方面仍存在一些边缘问题，需要加以解决才能达到生产环境就绪状态。涵盖分析大挑战演练的全部范围，同时支持已在使用分析系统工具的大型强子对撞机分析，为实现功能完备且可用于生产环境的状态提供了路线图，也带来了加强与 Scikit-HEP 协同、以及与设施和美国运行工作协调的机会。要达到生产环境就绪状态，使高能物理界能够为 IRIS-HEP 运行工作范围之外的项目长期维护作出贡献，还需要建立社区对分析系统工具生态系统的投入并积累相关知识（*G4*（可持续性）），第 3.4 节）。分析系统正通过多种方式应对这一问题：

  – 社区培训：通过参与由 IRIS-HEP 协调的社区培训与劳动力发展活动（见第5.7节），分析系统能够向高能物理界介绍所开发的工具和工作流，同时直接收集用户对用户体验的反馈。分析系统也积极参与 HSF 各工作组的活动，多位成员担任 HSF 高能物理中的 Python（PyHEP）工作组的共同召集人。PyHEP

每年举办一次在线研讨会，介绍 Python 在该领域的发展现状，并提供针对广泛使用工具的深入教程。分析系统工具已成为研讨会教程中的常设亮点，这些教程每天有数百名活跃参与者，历来注册参与者超过一千人，使最新技术、工作流和进展得以分享给高能物理用户和贡献者社区。

– 融入更广泛的科学开源社区：一些分析系统项目（如 Awkward）提供的功能，解决了科学计算中常见的用例，因此其用户群已从高能物理扩展到其他科学领域和工业界。这促成了与数据科学公司 Anaconda 的工程师开展合作，共同创建 dask-awkward [43]，使 Awkward 数组能够原生用于 Dask 计算工作流。为促进其在更广泛的数据科学社区中的采用，并加强与分析系统生态所依托的开源工具之间的相互作用，多个工具已申请成为 NumFOCUS [44] 的“附属项目”。NumFOCUS 是一个非营利性社区组织机构，旨在推动研究、数据和科学计算领域的开放实践，其成员项目包括 NumPy、SciPy、Jupyter 和 Numba。pyhf 是首个于 2022年 获准成为 NumFOCUS 附属项目的 IRIS-HEP 项目，预计其他项目也将在 2023年 获准。与工业界和开源数据科学社区的合作，有助于分析系统工具建立多元化的贡献者社区和维护支持体系。

为分析系统生态系统各组件之间，以及这些组件与外部数据分析库之间提供高度互操作性，是分析系统团队最具影响力的活动之一。

高亮度大型强子对撞机统计工具
资助方案：低（缩减范围）、中、高
描述：高亮度大型强子对撞机分析的统计推断需求，要求工具能够高效拟合大型且复杂的统计模型。这意味着工具必须更加易用——物理学家应能借助表达力强的应用程序接口快速构建复杂的统计模型——并能更好地利用现有硬件加速器，避免统计步骤成为瓶颈。在 IRIS-HEP 的第一阶段，项目采用了 pyhf Python 库，因为它能够利用硬件加速和自动微分来加快拟合。同样，cabinetry Python 库也已开发出来，构建于 pyhf 之上，以改进模型构建体验，并为高能物理中常见的统计程序提供高级应用程序接口。下一阶段的统计工具将重点关注添加必要的功能，以满足高亮度大型强子对撞机的需求，并实现完全可微分的分析系统人才培养渠道，同时优化库的性能，以支持在图形处理器上进行统计推断。

当前及未来潜在活动：

- 完全可微分分析管线：pyhf 利用机器学习框架，对构建的似然函数进行自动微分，从而加快统计推断。目前，为此创建的计算图仍仅供计算内部使用。要扩展这一功能，使梯度信息能够从 pyhf 传递到其他库，还需要进一步工作。neos 项目以 pyhf 为基础，提供了一个示例实现，展示了为实现对基于 pyhf 的计算进行求导所需变更的一部分。该项目也将作为 pyhf 开发的外部对照，并成为未来用于验证的外部用户。

• 硬件加速优化：IRIS-HEP 第一阶段优先关注用户在图形处理器上拟合统计模型的体验，而非性能优化。预计，重点提升其支持图形处理器的各类计算后端的性能，可带来 2 倍或更高的加速。这项优化工作将为加强 IRIS-HEP团队与 NVIDIA 软件工程师之间的合作关系创造机会，这些工程师正在开发 RAPIDS AI 产品。

• 采用统一的统计模型标准：高能物理统计序列化标准（HS3） [45] ——由高能物理统计建模生态系统中各工具的维护者（包括 pyhf 的开发人员）近期提出并概述。该标准将统一高能物理统计领域中的模型规范，计划于 2023年 年底发布新规范。让 pyhf 和 cabinetry 支持 HS3 标准，将提升互操作性（*G4*（可持续性），第 3.4 节），并消除 pyhf 与 RooFit、贝叶斯分析工具包（BAT）等其他统计库之间进行模型序列化格式转换的必要。 [46]

• 高效编排模板直方图生成：cabinetry 提供便捷的高级应用程序接口，用于构建和控制模板拟合；不过，目前模板直方图生成步骤是顺序执行的，尚未经过优化。分析中若包含大量系统不确定性，这就可能成为瓶颈，因为每种系统变化都需要重复进行顺序读取和计算操作。高亮度大型强子对撞机的规模更大的分析将要求 cabinetry 优化基于变化的读取和决策操作，并实现高效的直方图生成并行化。

分析系统统计工具的性能、灵活性和互操作性，为对高亮度大型强子对撞机分析产生重大影响提供了机会。

分析保存与重新诠释
资助方案：中等 (缩减范围)，高
描述：确保大型强子对撞机和高亮度大型强子对撞机分析以稳健且完整的状态得到保存，从而能够用于对新的物理信号进行重新诠释，这在物理学上具有重要价值。除了减少分析团队调查新物理模型所需的时间外，与首次创建分析相比，这还能够减少所需的总计算量。此外，还需要开展额外工作，以寻找方法将现有大型强子对撞机分析的分析保存与重新诠释技术映射到为在 Coffea-Casa 基础设施上运行而设计的分析系统工作流；或者，将完整的类 AGC 分析映射到更大型的分析重新诠释工作流中的一个计算节点（即使用 REANA 实现）。

当前及未来潜在活动：

•协调分析保存与重新诠释技术的开发：IRIS-HEP 分析系统团队成员是 RECAST 软件的开发人员，该软件 [47], 用于 ATLAS 的完整分析保存方案；团队还与 REANA 开发团队协调，确保 RECAST 与 REANA 版本兼容。这项协调和开发工作将扩展至为分析系统工作流提供支持，并将其与这些现有技术集成。

• 开发与 *Coffea-Casa* 兼容的重新诠释工作流：为确保使用现代高能物理技术保存的 AGC 分析不会限制分析计算，需要探索各种实现范式。一种方法是将整个分析嵌入更大型的重新诠释工作流（即 REANA）中的一个节点，

但这会带来额外的部署限制。另一种方法是开发相应方案，让现有的保存与重新诠释技术工作流图能够在 Coffea-Casa 基础设施中执行，从而实现更紧密的集成。目前尚不清楚哪种实现范式才是正确的，因此需要探索各种选项，并据此设计合适的解决方案。

为高亮度大型强子对撞机实现可微分分析

资助方案：中等（缩减范围）、高

描述：分析系统的目标之一，是通过审慎设计工具并切实落实实现，让开展更高级的分析变得更简单、更快捷。在大型强子对撞机的分析中，人们经常针对特定变量进行选择优化，但通常是通过逐步进行离散变化来实现的。若能对选择步骤求导，就可以精确优化该变量。同样，如果整个分析工具链都支持求导，就能针对模型参数优化最终判别量，从而对整个分析进行端到端优化。这是一个大型项目，需要为所有核心分析系统项目（Awkward、Uproot、func adl、Coffea、直方图库、pyhf 和 cabinetry）开展新的开发和设计工作量，也将是分析系统的一次绝佳集成实践。

当前及未来潜在活动：

- 支持 *AS* 工具中的自动微分：要实现完全可微分的分析系统流水线，所有组件都必须能够处理可微分运算，并传播梯度信息。目前，相关工作正在为 Awkward 添加自动微分支持，并将 pyhf 的内部自动微分功能开放给其他运算；不过，为其余工具实现支持，并高效集成所有工具以支持端到端优化，仍需要大量开发工作。

集成到分析流水线中的机器学习

*Funding S*情景：我 dium (reduced 范围)，高

描述：随着高亮度大型强子对撞机的分析规模和复杂度不断提升，机器学习在分析各个方面的应用也将日益增加。我们必须能够在分析系统流水线的任何阶段支持机器学习工作流，并提供清晰的示例，说明如何将机器学习工作流和应用集成到现有流水线中。

当前及未来潜在活动：

- 将机器学习运维集成到 *AGC* 分析中：目前正在开展相关工作，以扩展 AGC基准分析，并纳入机器学习组件。第一阶段是选取大型强子对撞机实验广泛使用的机器学习模型，并将其部署集成为分析系统流水线的一个附加阶段。除了这一初步步骤，还需要支持在 Coffea-Casa 基础设施上利用图形处理器高效训练机器学习模型，并将其直接用于分析系统流水线。

- 提供机器学习运维基础设施：稳健地重新训练机器学习模型、对其进行测试和评估，并以带版本管理的方式将其部署到生产分析环境中，这一流程在机器学习研究领域通常称为“机器学习运维”（MLOps），需要大量的编排和维护。分析系统生态及其人才培养渠道旨在具备可扩展性，使分析人员能够快速迭代分析而不受限制，因此，为分析系统提供机器学习运维支持，将有助于更快地将用户的机器学习模型集成到分析中。提供机器学习运维基础设施，需要在机器学习运维系统开发和部署方面培养专业能力并建设软件基础设施；但对于严重依赖机器学习方法的物理分析而言，这将显著缩短周转时间。

机器学习运维的实现将成为与设施研发密切合作的重点，以确保高效利用图形处理器及其他计算资源，同时不中断工作，也不增加额外负担。

- 支持高级机器学习工作流：除了机器学习运维基础设施，用户还需要高级工作流，使他们能够以可复现的方式遍历机器学习生命周期——从实验到部署，再到分析系统流水线。业界开发了 MLFlow 和 KubeFlow 等开源机器学习运维编排工具，帮助研究人员更轻松地管理构建和部署机器学习模型这一端到端流程的复杂性。利用这些行业标准快速创建可复现的工作流，将改善使用复杂机器学习模型进行分析的物理学家的用户体验。

使用 Awkward Array 处理复杂数据

资助方案：低（缩减范围）、中、高

描述：高能物理数据的一大特点是其复杂性；它本质上具有深层嵌套结构，使用可变长度数组、记录、混合类型，并且记录中还包含缺失数据。这使得高能物理数据难以使用 NumPy 等标准数据科学工具，因为这类工具通常假设数据具有固定大小且呈规则排列。Awkward Array 填补了这一空白，为这类所谓的“锯齿状”数据提供了类似 NumPy 的接口。Awkward 已发展成熟，围绕它构建的工具生态系统也日益完善，其中包括与 Anaconda 的合作等非高能物理领域的应用。它是 IRIS-HEP 所构建基础设施的基石，分析系统流水线也构建于其之上。

当前及未来潜在活动：

- 支持自动微分：完整的可微分人才培养渠道要求 Awkward Array 能够执行在计算过程中传播梯度的操作。这需要投入大量额外的开发工作。

- 加速计算：Awkward 为用户提供了便捷的 Python 接口来处理高能物理数据；如今接口已经建立，提高整体速度至关重要。虽然它类似 NumPy 的接口快得多，但速度仍不及原生 C++ 代码。C++ 即时编译后端可以将操作组合起来并直接降为机器码，从而消除许多此类问题。
- *ROOT* 集成：在 Python 之外，数据分析的事实标准工具包是 ROOT。AS团队致力于实现 ROOT 与其他生态系统之间的无缝互操作性。例如，在处理 Awkward 数组时，需要对 ROOT 的 RDataFrame 分析方法进行广泛测试，并视情况加以扩展。

高亮度大型强子对撞机上的数据和分析将变得更加复杂。对 Awkward Array 的计划改进将提供应对这些挑战所需的数据处理和操作能力。

影响与成功标准

在 IRIS-HEP 的第一阶段，分析系统在面向终端用户的高能物理软件社区中发挥了引领作用。分析系统的成员担任高能物理软件基金会高能物理中的 Python 工作组的召集人，并在 Scikit-HEP 社区项目中担任管理员；同时，分析系统也为软件讨论提供了发源地，促成了许多 IRIS-HEP 蓝图活动会议，并推动了 IRIS-HEP Slack 上的开发讨论和最佳实践。分析系统带来的最大影响，是提供了成熟且可互操作的

分析软件，使大型强子对撞机实验的物理学家能够将其用于工作流和分析中。最值得一提的是，Coffea 项目虽被 CMS 积极用于分析，却并非 IRIS-HEP 项目；不过，它已采用分析系统生态中的许多组件——包括 Awkward、Uproot 和 hist——作为核心依赖项，以更好地融入分析系统的分析设计理念，而这也影响了 CMS 的分析。此外，截至 2022年12月，ATLAS 已使用 pyhf 库发布了 24 个已发表 ATLAS 结果的完整统计模型；该库也已成为 ATLAS 超对称性小组用于 ATLAS 第二轮运行结果的分析框架的核心依赖项。尽管采用分析系统中各个独立组件的集合是一项进步，但要充分发挥分析系统的效益，就需要将整个生态系统整合使用。作为美国国家科学基金会资助的软件研究所的一部分，对分析系统的投入将使更多大型强子对撞机分析在高亮度大型强子对撞机启动前具备充分条件，采用分析系统流水线；同时，也能充分发挥 IRIS-HEP 第一阶段设计和构建的分析生态系统对现代物理分析格局的影响。将分析系统设为重点领域，能够延续发展势头并保持生态系统的连续性；IRIS-HEP 现有开发团队已准备好在分析生态系统和社区的成功基础上继续建设。

分析系统中的分析活动所产生的高影响成果，将与 AGC 的成功和参与度紧密相关。AGC 将提供多次展示计划中分析系统里程碑的机会，相关内容详见第6.1节，包括实现高复杂度的双希格斯搜索 AGC 分析，该分析将利用分析系统流水线新增的机器学习组件以及统计工具的改进。这些演示的高潮将是 2026年 AGC 对完全可微分分析的演示，它将借助分析系统生态中的各项进展。随着这些演示工作进一步为大型强子对撞机实验全面采用分析系统流水线提供路线图，其价值也将不断提升。

成功标准 – 里程碑与交付成果：

以下概述的里程碑与交付成果侧重于研究所成立后的前三年。这些高层次的项目将在项目执行过程中进一步细化，并补充后续年份的内容。

D4.1. 分析系统人才培养渠道的所有核心组件均全面支持分布式分析。**2024年5月**。D4.2. 展示运行一项完整分析，该分析适合纳入 AGC，并使用机器学习。**2024年7月**。D4.3. 展示运行一项完整分析，该分析适合纳入 AGC，并能够使用以统一的 HS3 序列化格式定义的统计模型（计划于 2023 年底发布）。**2024年12月**。D4.4. 展示将分析系统人才培养渠道用于重新诠释工作流（例如，较大计算图中的一个节点在 REANA 分析平台上执行分析）。**2024年12月**。D4.5. 分析系统人才培养渠道的所有核心组件均支持集成可微操作并传递梯度。**2025年7月**。D4.6. 展示通过使用重新诠释平台对 AGC 分析进行重新诠释。**2025年12月**。

D4.7. 展示一项适合纳入 AGC 的分析，该分析通过对分析系统人才培养渠道进行自动微分，实现了端到端优化。**2026年12月**。

成功标准 – 指标:

指标是为管理层提供定量信息、了解总体目标进展情况的有用工具。以下是我们认为适用于分析系统领域的高层级指标:

M4.1. 在分析早期阶段使用分析系统工具和/或人才培养渠道的用户和分析团队数量。收集这些早期采用者的反馈，有助于更好地了解与用户体验相关的问题。目标是每年至少新增两项分析。

M4.2. 支持与自动微分集成的分析系统工具数量。目标是到2023年12月达到所有相关项目的一半，并在2024年12月底前覆盖所有相关项目。

M4.3. 在分析系统流水线中使用机器学习，并能够执行模型训练的部分环节或进行模型推理的分析数量。目标是在2024年7月底前实现一项，并在2025年7月底前实现来自每个目标大型强子对撞机实验的一项。

M4.4. 各目标大型强子对撞机实验中，引用使用分析系统工具和分析流水线的出版物、会议报告或公开报告的数量。目标是到2024年12月底至少有一篇，到2025年12月底每个目标大型强子对撞机实验至少有一篇。

M4.5. 至少拥有一名来自更广泛科学开发者社区的定期贡献者或维护者的分析系统工具数量。目标是每个正在积极开展功能开发的项目至少有一个；处于生命周期成熟阶段且仅发布缺陷修复版本的项目，不要求增加 IRIS-HEP 以外的维护者。

5.2 重建与触发算法

算法会解包探测器原始数据，并将其转换为数据结构，以便据此识别感兴趣的事件：要么由软件触发系统实时识别，要么在分析之前的重建阶段稍后识别。大型强子对撞机实验在三种不同情境下运行这些算法。第一种是在软件触发系统中：在高亮度大型强子对撞机的标准数据采集条件下，每秒约有一百万个事件需要做出保留或舍弃的决定。这一过程颇具挑战，因为这些事件中只有约1%（即大型强子对撞机总碰撞率的 0.01%）能够保留。第二种是离线运行这些算法（即在欧洲核子研究中心的探测器环境之外），以重建数据，并按照各实验特有的数据格式向分析人员提供数据。第三种是运行这些算法来重建蒙特卡洛模拟，从而以相同的数据格式向分析人员提供数据。这些应用案例共同决定了高亮度大型强子对撞机实验的计算处理需求。第3轮运行期间这一点已然如此，而由于若干原因，这些算法的资源需求增长速度比其他方面更快。首先，进入软件触发系统以及从系统输出（并进入离线处理）的事例率预计将大幅提升。更重要的是，由每次 pp 相互作用中同时发生的重叠“堆积”事件数量所决定的事例复杂度将增加三至四倍；重建的计算成本大致随堆积量呈平方增长。最后，为实现高亮度大型强子对撞机所需的科学探索能力，必须采用更先进、同时也更复杂的探测器。

这三种影响都会推高高亮度大型强子对撞机物理计划所需的计算处理资源。

在在线触发和离线重建算法中，最消耗资源的是径迹重建算法：这类算法协同确定带电粒子穿过探测器内部的位置及其运动学性质。这并不意外，因为每次束团交叉时，我们的探测器中需要数字化的电子学通道数量，主要来自内层径迹探测器。尽管在大型强子对撞机第一轮运行和第2轮运行期间，这一直是持续研究的重点，但随着事例复杂度增加，传统方法的计算需求仍在迅速增长，并且需要重大创新。重新设计——在某些领域甚至需要彻底重新思考方法——对于确保高亮度大型强子对撞机的物理计划至关重要，也是影响在线和离线环境所需处理能力规模的关键因素。

具体挑战与机遇

对于模式识别算法，从现在到高亮度大型强子对撞机启动前这段时期，是巩固研究成果并将算法集成到实验的触发和事件重建人才培养渠道中的阶段。相关工作包括提高算法的稳健性和可维护性，以及开展算法验证。

采用抽象库为高亮度大型强子对撞机编写的代码需要持续使用十年甚至更久——相当于典型超级计算环境的三代甚至更多代。针对底层供应商库编写代码的成本很高；我们的算法越灵活，在硬件（尤其是加速器）发生巨大变化时，就越能保持可持续性。为了在整个高亮度大型强子对撞机计划期间高效运行，我们需要找出适用于覆盖面最广的算法的最佳方案。在已达成共识的情况下，我们计划采用该领域确定的策略，例如 HEP-CCE 的成果。一种可能的发展路径是使用抽象库，例如 Alpaka、Kokkos 等，它们能够为其支持的各类硬件架构有效编译内核。

算法互操作性尽管新的径迹重建算法通常是在完整跟踪流水线之外开发的，但它们与该完整流水线互操作的能力至关重要。例如，设计适合算法间数据交换的数据结构；另一个例子是能够灵活地最大限度减少异构基础设施中的数据移动。随着算法日趋成熟并被实验采用，纳入其完整径迹重建流水线，互操作性就显得至关重要。

算法设计与优化算法必须经过设计和演进，以充分利用并行性、采用优化的数据结构，并高效利用计算资源与内存。径迹重建算法必须尽可能向底层环境提供并行化机会。暴露并行性对于利用加速器至关重要；对于基于 CPU 的方法，这也同样重要，因为需要指令级并行才能有效利用所有可用的硅芯片。鉴于内存延迟和带宽的提升相较于计算能力的增长停滞不前，采用优化的数据结构会极大影响算法性能。这既包括径迹重建算法之间的数据交换，也包括从径迹重建算法向工作负载后续步骤传递数据。此处需要考虑的因素包括：在高度并行的环境中实现高效的数据访问、优化 CPU 到 GPU 的数据移动，以及确保能够执行向量化计算。随着算法开发日趋成熟并转向集成与优化，应通过调优过程降低计算和内存需求。通常，只有在分析中能够充分纳入数据交换和算法互操作性方面的考量时，才能最好地完成这一过程。

用于径迹重建的机器学习方法 机器学习有望带来新颖且创新的算法。不过，一项关键里程碑在于理解这些算法如何为

径迹重建流水线的特定环节提供更优或更可持续的方法，以提升速度或物理性能。图神经网络（GNN）是目前最有希望的方法，不过，鉴于我们的社区如今对机器学习方法应用于径迹重建问题的优势和局限性有了更深入的认识，我们应持续关注更广泛的机器学习研究社区，以发现新的机遇。

集成与验证 将新算法或方法集成到实验中极具挑战性；如果代码中的错误导致整个数据集都必须重新处理，那么再显著的性能提升也毫无意义。触发算法则更加保守：错误地拒绝一个事件，就会使其永远丢失！底层算法的接受和采用可能是一个漫长而耗时的过程。因此，实验团队建立了详细的验证流程，用于评估并最终采用新算法。鉴于这些流程十分复杂，需要与开发人员密切、深入地合作，才能实现相关效益。在这方面，像 IRIS-HEP 这样的研究所凭借其充足的资源、长远的时间规划和广阔的视野，可以发挥独特作用。

当前方法与发展路线图

研究所下一阶段的首要重点是推动研究方向成熟，并开始整合各实验面向高亮度大型强子对撞机的径迹重建计划中的工作。每个实验的径迹重建很可能会采用多种算法方法；各实验在线和离线处理可能采取不同方法，彼此之间也可能作出不同选择。这些都是自然的选择，因为径迹重建是一个多方面的问题（种子查找、径迹查找、径迹拟合），而且其优化重点会因实验装置设计和计算技术设计而异（例如，在线处理追求快速且近似的结果，离线处理则追求尽可能高的精度）。

ACTS 开发与集成

资助方案：低 (范围缩减)，中，高

描述：通用跟踪软件（ACTS）项目是一个国际开源项目，致力于开发一套独立于具体实验的径迹重建工具。其核心理念是提供可用于任何跟踪探测器的高层径迹重建模块。跟踪探测器的几何结构描述经过优化，可实现高效导航和快速径迹外推。该项目支持多种常见几何描述语言的转换器。设计这套工具的首要目标，是实现高性能且高度可定制的径迹重建算法。此外，能否应用于真实的高能物理实验，也是开发过程中的重要考量。除了算法代码，该项目还提供事件数据模型，用于描述径迹参数和测量值。项目的主要特性包括：可基于标准社区几何库构建的跟踪几何描述；简单高效的事件数据模型；高性能且高度灵活的径迹传播和拟合算法；基础种子查找算法。C

urren t *and Potential Future Activities:*

- 完整径迹重建链：在 IRIS-HEP 中，主要重点一直是开发 ACTS 中的核心径迹重建算法，并将其应用于 ATLAS 实验。预计 ACTS 将取代当前用于高亮度大型强子对撞机的 ATLAS 跟踪算法，因为它能够利用现代 C++ 和内置的多线程功能来提升速度。目前，已有若干算法开发完成，ACTS 集成到 Athena（ATLAS 物理框架）的工作仍在进行中。重要里程碑是在 Athena 中基于 ATLAS ITk 几何结构运行完整的径迹重建链。实现这一目标后，便可详细评估其物理学表现和计算性能，并对算法进行调整。

- 机器学习与硬件加速：ACTS 还有与主项目并行推进的研发方向。traccc 项目正在开发一种演示程序，用于展示可在图形处理器上运行的端到端径迹重建算法。种子查找等已移植到图形处理器上的算法已展现出令人鼓舞的速度提升；然而，仍需实现完整的端到端径迹重建链，才能验证图形处理器是否适用于高亮度大型强子对撞机。

- 事件过滤器触发中的径迹重建：ATLAS 目前正在探索事件过滤器级别径迹重建的不同方案。一种可能的方案是将 ACTS 用于完全基于软件的事件过滤器触发。IRIS-HEP 已投入少量人力开展探索性研发，这也是下一阶段令人振奋的方向。我们将探索代码的中央处理器和图形处理器版本，并比较两者的性能。在触发系统中采用 ACTS 将降低 ATLAS 实验的长期维护成本，因为在线和离线径迹重建将使用同一套代码。

mkFit 的开发与集成
资助方案：低（缩小范围）、中、高
描述：MkFit 是对传统卡尔曼滤波径迹重建进行重新设计，以充分利用现代中央处理器架构的能力。迄今为止，大部分研究集中在最耗时的径迹重建组件——轨迹查找上。MkFit 已取得充分进展，成为 CMS 在第3轮运行中的基准径迹重建方案，并用于查找超过 90% 的 CMS 径迹。对于这些径迹，轨迹查找现在明显快于径迹拟合算法，这表明重新设计传统算法以适应现代计算架构具有潜在优势。

当前及未来潜在活动：

- 卡尔曼参数拟合：评估将 mkFit 方法用于最终卡尔曼参数拟合的方案。这包括在适用于面向向量化的中央处理器算法或加速器的 CMS 数据结构中进行评估。

- 整合并提升算法速度：mkFit 软件已作为 CMS 第3轮运行软件的一部分部署到生产环境中；我们预计将吸取 2022年 初期部署的经验教训，并针对高亮度大型强子对撞机几何结构进行改进。

- 提升 *CMS* 径迹重建链中的互操作性：尽管 mkFit 是作为独立项目开发的，但其最终目标是在 CMSSW 框架中高效运行。例如，在下一阶段，我们将设计高效机制，以便从现代化像素径迹重建中获取径迹种子（“Patatrack”算法 [48] 作为输入。

线段径迹重建的开发与集成
资助方案： 低（缩小范围）、中、高
描述：线段径迹重建（LST）旨在充分利用 CMS 专用径迹探测器布局，该布局包含双层结构。这种几何结构使得径迹段可以先在每组双层结构中找到，而这一过程高度适合并行化。随后，可以将这些双层结构连接起来，生成径迹种子，并最终形成完整的径迹候选。该算法的初始实现本质上是并行的，且已使用 NVIDIA 的 CUDA 图形处理器编程语言实现，因此应能轻松移植到其他加速器平台。C
当前及未来的潜在 A活动：

- 成熟的算法：LST方法展现出潜力，有望满足高亮度大型强子对撞机时代CMS对速度和正确性的要求。不过，一个尚待研究的问题恰恰是还能实现多大的加速；还需要进一步提高实现的“真实性”（去除最初用于展示这一概念的简化处理和脚手架代码），以达到预期的影响。

- 采用硬件抽象层：当前LST算法的研发版本采用CUDA编写，无法在非NVIDIA资源上运行，例如美国能源部提供的、基于AMD的Frontier；它目前是全球速度最快的超级计算机。要使算法在整个高亮度大型强子对撞机时代持续可用，就需要硬件抽象库。

- 提高并行性</style】：与现代图形处理器上可用的内存相比（也与高亮度大型强子对撞机时代可能负担得起的内存相比），当前的 LST 算法非常耗内存。分配给每个图形处理器设备的工作量——因此算法的总并行性和加速比——受可用内存限制，导致图形处理器计算核心闲置。下一阶段的初步目标是减少内存占用，充分利用可用的硅芯片。

用于径迹重建的机器学习方法

资助 S景：高

描述：与传统的径迹重建方法不同，图神经网络人才培养渠道随数据密度呈线性而非二次方增长，因此在高亮度大型强子对撞机环境中颇具应用前景。各种研究工作已建立起人才培养渠道，用于研究适用于不同径迹重建算法的图神经网络架构和训练方法。尽管在技术性能（速度）或物理学性能（准确度）方面，这些方法尚未赶上经过高度调优的现有算法，但它们正在迅速发展，并有望帮助缩小高亮度大型强子对撞机所需的原始资源差距。

当前及未来潜在活动：

- 更紧凑的图神经网络：评估新的图神经网络技术，并将部分研究重点放在内探测器（基于像素）的径迹重建上。规模小、因而评估速度快的图神经网络架构很有前景，但仍需进一步研究，才能达到足够的物理性能。一个重要的应用场景是在线系统，在那里，计算速度比精度更重要。

为 ATLAS 和 CMS 定义径迹重建流水线

资助方案：中等、高

描述：单个算法并不足够；必须将它们组合成完整跟踪流水线。此过程面临的性能挑战在于算法边界处的数据交换，以及如何在整体物理性能与计算成本之间取得平衡。

当前及未来潜在活动：

- 各实验正在制定未来五年左右的径迹重建流水线。例如，CMS在高亮度大型强子对撞机上的径迹重建，很可能会采用这样的方案：先由 Patatrack 创建像素种子，然后解包／聚类外层径迹探测器的信息，并使用 LST 匹配外层径迹探测器的击中。这两个步骤可以组合在加速器上完成，从而避免在 GPU内存和主存之间传输数据所带来的高昂开销。之后，再采用较为传统的卡尔曼滤波器方法，通过 mkFit 完成径迹寻找和最终的径迹拟合。这种方案适用于在线和离线环境，并可通过不同的配置满足两种应用各自不同的目标。要构建这样的流水线，需要算法开发人员积极参与，以便正确配置并优化它。

影响与成功标准

对模式识别算法（尤其是带电粒子径迹重建算法）相关技术的研究投入，将推动实现一种径迹重建方法，使其满足高亮度大型强子对撞机科学计划的目标；在第3轮运行所用的资源预算内运行；并具备足够的灵活性，以便在整个高亮度大型强子对撞机时代充分利用不断演进的计算硬件。主要成功指标与实现卓越的技术性能 以及相较于最先进算法和其他研发方法取得更优的科学性能有关：

- **性能**：无论在线还是离线，关键指标都是单位（计算）成本对应的事件吞吐量。根据当前的性能估算，完整径迹重建流水线的处理量减少一半，将使 CMS 在高亮度大型强子对撞机上的计算需求降低 25%。通过持续研究，单个径迹重建算法的性能已取得显著提升。如今，研发工作必须在实践中实现这些收益。在 IRIS-HEP 的下一阶段，我们的研究旨在**将关键径迹重建算法的速度提升两到三倍**，同时适用于离线和触发环境。

- **正确性**：物理性能——针对底层输入计算出"正确"结果——至关重要。高亮度大型强子对撞机计划为算法的物理性能设定了最低门槛，以达到预期的科学探测能力。这一点尤其重要，因为径迹重建是许多其他重建组件的基础，这意味着其中的不足会传导至用于分析的整个物理数据格式。鉴于现有算法的物理性能出色，这项指标的首要目标是在保持当前水平的同时，着力弥补潜在差距。预期需要弥补的差距包括：在特别高密度的环境中（例如，在高-p_t 喷注中）提高跟踪效率；改善对高度位移径迹（例如，来自长寿命粒子的径迹）的处理；以及进一步减少假径迹（即算法"找到"但实际上并不属于真实物理过程的径迹）。

已编写但未被实验采用的径迹重建代码，影响微乎其微。与采用多种不同方法的分析环境不同，每个高亮度大型强子对撞机实验都只能负担得起在线和离线运行一套资源消耗最大的径迹重建算法。未来五年将经历漫长的评估和决策过程，以确定各实验中高亮度大型强子对撞机径迹重建工作的基础。必须跟踪这一过程，以促进采用有前景的研究方向，并及时终止那些不会被采用的方向；**研究所的架构和长远规划对实现预期影响至关重要**。

针对事例重建算法和触发应用的研究建立在美国国家科学基金会此前及持续进行的多项投资之上，也为职业生涯早期的高能物理研究人员提供了绝佳的培训环境。例如，该领域中曾与 IRIS-HEP 合作的三位博士后现已担任教员：Philip Chang 现任佛罗里达大学教员（曾在加州大学圣迭戈分校从事 LST 跟踪研究）；Xiaocong Ai 是郑州大学教授（曾在加州大学伯克利分校从事 ACTS 研究）；Dylan Rankin 是宾夕法尼亚大学教授（曾在麻省理工学院从事加速器上的强子量能器重建算法研究）。

高亮度大型强子对撞机计算缺口影响：重建与触发算法方面的研究会影响缺口*G1*（原始资源使用）和*G4*（可持续性）。该领域是资源的主要消耗方——据估计，在 CMS 中甚至是最大的资源消耗方——因此对该领域的投入对弥补资源缺口影响最大。要实现可持续发展，实现方案必须能够灵活适应不同的硬件平台和代际。高能物理依赖于有效利用专用高性能（在线）硬件、通用（离线）硬件以及高性能计算的能力。如今，这意味着代码必须经过良好设计，既可通过互操作层，也可通过其他方式适配新的硬件架构。大型强子对撞机社区无法控制硬件市场，对分布式资源所用硬件架构的控制也仅限于间接影响，因此，径迹重建算法必须在设计中纳入机制，以支持高亮度大型强子对撞机时代最普遍的硬件架构。高能物理探测器的设计在高亮度大型强子对撞机初始阶段之后仍将不断演进。在能量前沿领域，针对未来对撞机以及所谓的 LHC 第三阶段升级都在开展研发；软件应具备足够的适应性，以用于这些项目或其他未来实验。要在特定探测器几何结构中实现径迹重建算法的极致性能，通常需要进行细致调优；而力求适用于单个实验之外的算法，则必须证明其他实验能够多容易地使用这些算法，以及这样做是否会带来性能上的权衡。

成功标准 - 里程碑与交付成果
D2.1 ATLAS 演示项目（2024年第二季度）。ATLAS 实验目前正在确定一份示范项目清单。选定的演示项目需在 2024年第二季度前发布，之后由该实验评估其物理性能、技术性能和整体就绪情况。

D2.2 实验的 CDR/TDR 文件（2024年）。两个实验都有时间表，以编制描述其面向高亮度大型强子对撞机的软件与计算模型的文件，并提交文件以支持 LHCC 对 WLCG 的审查。这些文件的重要组成部分是潜在径迹重建算法的性能和就绪情况。

D2.3 由实验进行筛选和验证（2026年或之后）。从研究转向评估并由实验进行验证的工作必须完成，才能由实验最终采用。时间表将在高亮度大型强子对撞机运行开始前夕制定。

成功标准 - 指标：
M2.1. 满足或超过高亮度大型强子对撞机科学计划性能要求的已部署径迹重建算法组件数量。

M2.2. 在离线或触发环境中，使高亮度大型强子对撞机的资源需求降低至少两倍的已部署径迹重建算法组件数量。

M2.3. 实验框架采用抽象库后，能够高效运行的径迹重建算法组件数量。

5.3 转化人工智能

人工智能和机器学习领域的前沿研究（简称“人工智能”）直接有益于高亮度大型强子对撞机的物理计划。从许多方面来看，人工智能正在改变该领域开展物理学研究的方式。投入专门工作量开展转化人工智能，将扩大对有前景的新技术的采用，并缩短在实验中部署这些解决方案所需的时间和工作量。这将对高亮度大型强子对撞机物理学的各个方面产生重大影响，包括触发、重建、模拟和分析。

高能物理领域长期以来一直在使用人工智能，并且积极拥抱现代人工智能研究、为其作出贡献。该领域培养了一批人工智能专家，也开始看到非专家更广泛地采用这些技术。

新型人工智能技术能够处理复杂的底层数据，与传统方法相比，通常可以提升性能或灵敏度。同样，针对模拟、多变量展开和异常检测的新型人工智能技术，正带来全新的能力，从更根本的层面改变高亮度大型强子对撞机的物理计划。

探索性人工智能研发通常在实验之外开展。这类工作是在 IAIFI [49]和 A3D3 [50], 等美国国家科学基金会项目的背景下进行的，也可能由小型研究团队开展，或明确作为实验物理学家的基础物理研究资助的一部分获得资助。将这类研究应用于实验中存在诸多障碍。例如，若没有同时精通这两个领域的专家协助，人工智能研究人员撰写的论文往往难以转化为高能物理背景下的实际应用，因此只有该领域的机器学习专家才能理解。即使论文内容易于获取，要将新技术调整至适用于实验场景，实现起来仍需进一步开发。最后，将机器学习技术集成到实验工作流中，往往需要采用定制化方案，而且同一实验中的不同团队通常会采取不同做法。

> 社区越快吸收新的人工智能研究成果，并将其转化为实验应用，就越能对物理学计划产生影响。

人工智能研究组与实验之间的临时合作和交流，围绕人工智能与粒子物理学研究人员之间的合作逐渐形成。这些链接汇聚了一小群活跃于粒子物理学领域的人工智能专家。交流确实是双向的：粒子物理学为人工智能中的应用启发式研究提供机会，而这些合作也会影响人工智能研究，从而产生与该领域问题高度契合的成果。随着该领域必须寻找将先进技术带给更广泛受众的方法，这种良好的交流必须得到维护和加强。图神经网络（GNNs）就是一个很好的例子。这类人工智能模型尤其适合我们的研究问题空间。包括物理学家和 Deep Mind 人工智能研究人员在内的多学科团队，已经撰写了一篇综述文章和立场文章，概述了这一发展 [51]。如今，GNNs 已用于底夸克识别 [52], ，取代了基于循环神经网络的方案，并正在探索其在径迹重建、喷注重建和标记中的应用。不过，在 GNNs 能够用于径迹重建之前，仍有许多进展需要实现（见第5.2节）。

需要进行协调，引导机器学习在各种场景（例如触发、重建、模拟和分析）中的应用，从当前快速研发、原型开发和定制化部署方案阶段，发展为一套更加成熟、稳固的实践。美国资助机构已投入资源，推动人工智能领域的基础性进展。这一新的战略领域将改进研究部署人才培养渠道，进一步推动机器学习的普及，并提供一套最佳实践，供所有研究人员而不仅仅是专家使用。

具体挑战与机遇

有助于改变机器学习在高亮度大型强子对撞机中的应用方式的挑战与机遇，可分为三大类。

将人工智能社区的研究引入高亮度大型强子对撞机： 大多数人工智能研究都在实验之外进行。例如，计算机科学或统计学研究团队会开发一种新技术。另一种常见模式是，由一支小型团队（成员包括一些来自 HL-LHC 社群的人和一些计算机科学领域的人）利用大幅简化的探测器数据，直接针对该领域的问题发表论文。这些新技术不容易融入实验中。目前，开发、培训和部署都采用定制化方案。更糟的是，目标环境——触发、重建和分析——在推断方面都需要不同的方案。我们有机会与人工智能研究社区和粒子物理学界合作，构建能够跨越不同领域的工具，让新人工智能技术更容易融入其中。

美国国家科学基金会和美国能源部资助了大量基础人工智能研究。美国国家科学基金会的两个研究所 IAIFI 和 A3D3 就是这类工作的典型例子。IRIS-HEP 凭借其知识枢纽的角色所拥有的广泛影响力，以及在分析设施和培训基础设施方面的工作，为将这类研究引入该领域创造了机会。

加强高亮度大型强子对撞机与人工智能研究社区的互动： 我们所研究的问题领域对人工智能研究人员很有吸引力。然而，要以非领域专家能够理解的方式向研究人员提供逼真的数据并不容易。部分实验不愿公开发布其模拟数据，这又使问题更加复杂。最后，与人工智能研究人员合作时，最好使用与实验无关的数据。虽然已有用于生成与实验无关数据的工具链 [53], ，但它无法充分体现高亮度大型强子对撞机探测器的复杂性，而且生成的数据采用了特定领域的格式（ROOT）。改进这些工具和数据格式将使合作更加顺畅。通过这项工作，并加深对挑战和基准测试工具集的认识，社区将能够更有效地参与公开挑战赛，并更轻松地与高能物理领域之外的人工智能研究团队合作。

高亮度大型强子对撞机中的人工智能可持续性： 人工智能领域正在迅速发展，新技术不断取代旧技术。人们会转而从事其他任务，也可能离开某个实验。随着人工智能越来越多地应用于重建和触发，建立一套维护流程变得至关重要。在高亮度大型强子对撞机的运行期间（预计超过十年），来自探测器的数据流会不断变化，例如探测器组件的位置发生改变，或出现辐射损伤。因此，关键任务机器学习算法的重新训练不能依赖于（前）学生笔记本电脑的配置。该领域需要围绕重建和触发中的机器学习算法长期可持续性，建立基础设施并制定最佳实践。

当前方法与发展路线图

转化人工智能将成为 IRIS-HEP 的一个新领域，而该领域已经开展了大量人工智能相关工作。
IRIS-HEP 至少可以在两个方面发挥独特作用，而这两个方面也契合其现有优势：帮助弥合基础人工智能研究社区与高亮度大型强子对撞机物理学家之间的鸿沟，以及帮助在实验中构建可持续的人工智能。要完成前一项工作，首先需要在该领域建立共识，然后协助落实这一共识。这项工作包括蓝图会议和具体的开发项目。对于 IRIS-HEP 的下一阶段而言，这将是一个新领域；它曾出现在最初的 S^2I^2 战略计划中

但由于可用资源有限，其范围大幅缩减。部分任务对于实验的长期可持续性十分重要，必须由该领域加以解决；IRIS-HEP 可以开展重要的跨实验贡献，并帮助确定社区的发展方向。与本战略计划的其他领域相比，目前的工作和路线图更具探索性，因为这是 IRIS-HEP 的新领域，而且涵盖了该领域尚未进行深入思考的大量内容。

培训与社区

建立社区共识

资助 S情景：中等

描述：举办**蓝图会议**（作为第4.2节中知识枢纽活动的一部分）将有助于建立社区共识，并指导该领域的探索性活动。这些会议将致力于增进实验之间以及各实验中的群体之间的相互了解，同时探讨粒子物理学领域之外的最佳实践，并加强与人工智能研究社区的合作。下文列出的活动均为计划举办的会议，旨在启动这一新领域的各项活动。

当前及未来潜在活动：

- 简化机器学习数据交付流程：在原型开发、训练和部署过程中，会使用不同的网络基础设施来处理数据。用于提取输入数据以构建训练／原型开发数据集的方法和代码，通常不同于已部署解决方案执行同一任务的方式。采用一套通用工具来解决这一问题，可以缩短部署时间，并可能实现对复杂训练所需的国家级或国际级资源的统一访问。这项工作还可能支持缓存训练数据集，从而减轻 DOMA 的负担。

- 在不同环境中部署训练好的模型：实验的触发、重建和分析领域都有硬件与软件专家。我们希望在这些截然不同的环境中运行机器学习算法。各领域中机器学习的原型开发和部署方式大相径庭，因此所需的基础设施也截然不同。本次会议将了解这些不同的环境，并探讨如何尽可能统一训练环境。

- 在高能物理中使用人工智能基准测试与挑战基础设施：本次蓝图会议旨在推动训练、部署、基准测试和挑战活动更多地使用通用工具，并将各个社区聚集起来，了解当前的最先进水平，以及如何进一步发展，从而帮助各社区快速交流新想法和解决方案。社区中已有大量专业知识。ML4Jets、ML4PS、NeurIPS、Hammer & Nails、MODE、Aspen、IPAM、Dagstuhl 和 MIAPbP 等研讨会已经发起、组织并报告了挑战和基准测试工作。美国能源部近期资助的项目“公平宇宙：面向物理学的无偏数据基准生态系统”，正是明确针对这一工作的基准测试部分。

- 在该领域推广高级机器学习技术：建立一个涵盖高级机器学习技术的资源库——即机器学习论文的译文——并非易事。对大多数物理学家来说，阅读机器学习论文很困难，因为这些论文涉及不同的问题领域，使用的词汇也不尽相同（有时甚至同一个概念也会有不同说法！）。同样，也不可能让一两个人把所有论文都翻译成某种统一的示例格式，因为这种做法无法规模化。本次会议将汇集来自类似研究所的人员，例如华盛顿大学的 eScience研究所（该研究所正积极应对类似问题），以及粒子物理学领域的专家，共同探讨如何以可规模化的方式将先进的人工智能技术应用于各项实验。

- 基础 模型：人工智能的许多领域都在采用一种称为基础模型的模式 al

模型：使用一个大型、多用途模型作为多个任务的通用骨干。虽然基础模型可能需要使用大量数据进行昂贵的训练，但这些成本可以通过相对低成本的微调或特定任务模块来分摊。迄今为止，高能物理尚未采用这种模式，但它具有潜在优势。不过，这种模式是否适用于高能物理的应用案例，目前也并不明确。若能制定一套蓝图来探索这种模式，将会很有价值。

- 基于语言模型的提示词助手：近期发布的 GitHub Copilot 和 ChatGPT 等模型，可以将以普通英语文本提示词形式编写的指令快速转换为代码或其他操作。本次蓝图会议将召集此类模型方面的专家，以及来自高能物理和高能物理/机器学习领域的专家，共同制定一项未来几年内（在 IRIS-HEP 内部或外部）可持续推进的研究计划，以发挥这些新模型的潜力。

培训与推广
资助方案：高
描述：要让物理学家掌握先进的人工智能技术，需要制定涵盖多个层次的培训计划，尤其是在必须扩大规模、覆盖全体高亮度大型强子对撞机物理学家的情况下。高亮度大型强子对撞机领域的许多人工智能用户仍在学习基础知识，因此必须以一种能够帮助他们日后使用更先进技术的方式满足其需求。

当前及未来潜在活动：

- 基础机器学习技能：高能物理软件基金会和 IRIS-HEP 以及许多其他组织，正按照 Software Carpentry 的模式合作构建基础软件技能培训资源库。该资源库已经包含两项与机器学习相关的培训：一项是 PyTorch 基础培训，另一项是使用图形处理器加速训练；今后还将添加高级培训材料，以涵盖大型强子对撞机特定主题，而非通用的基础主题。
- 高级技术：我们将构建一个展示高级机器学习技术应用案例的库。这个库将帮助已完成基础培训的物理学家运用这些技术，并融入蓝图会议总结的最佳实践。

让资助　　基础人工智能研究为高亮度大型强子对撞机实验持续发挥作用

高亮度大型强子对撞机上的可持续人工智能
资助方案：高
描述：目前，实验中部署的人工智能解决方案正被通过相对临时的流程开发出的新方案和改进方案迅速取代。随着人工智能解决方案逐渐稳定下来，我们需要建立系统，以便根据运行条件的变化，简化这些人工智能模型的重新训练或微调。这类似于实验所进行的常规重新校准和数据再处理，但也带来了不同的计算挑战（例如，访问图形处理器、对成批训练事件进行多轮处理等），因为训练中遇到的算法模式与重新校准时遇到的模式不同。这也对用于跟踪运行条件和软件版本管理的元数据提出了新要求。我们有机会设计能够利用适用于人工智能的计算资源的系统，并减少在缺乏更精简解决方案时出现的数据传输低效和冗余。当前及未来潜在活动：

- 再训练挑战赛：与实验中的重建作者合作，使用社区工具自动重新训练重建组件。实施后，跟踪其使用情况以及为确保其持续运行所需的更新，以适应运行条件和探测器的变化。

基准测试与人工智能挑战
资助方案：高

描述：需要开展协调工作，引导这一阶段快速研发、原型开发和定制化方案部署的工作，逐步转向在各种场景（触发、重建、模拟、分析）中更成熟或更完善的机器学习实践。我们有机会建立网络基础设施组件（包括人员和技术），在实验之外蓬勃开展的人工智能研发活动与实验专用软件和计算框架之间发挥桥梁作用。

当前及未来潜在活动：

- 社区挑战与基准测试基础设施工作：利用蓝图会议“在高能物理中使用人工智能基准测试与挑战基础设施”制定的路线图，形成一项工作计划，更好地将挑战赛和基准测试工具整合到大型强子对撞机高亮度升级（HL-LHC）的机器学习基础设施中。
- 在实验中使用通用基础设施：弥合用于基准测试和挑战赛的后端基础设施与实验中所用基础设施之间的差距。实验涉及多种环境，需要分别开展研究（触发、重建、分析）。随着实验中探索新技术，支持原型开发工作尤其重要。

硬件加速器
资助方案：高
描述：利用加速器（例如 FPGA）开展人工智能研发，以及在高度受限的计算环境（例如触发系统）中开展研发，既需要专用硬件，也需要专业知识。这提高了参与门槛，阻碍了更多不同团队以分布式方式参与。通过投资建设配备专门人才和硬件的集中式资源，为在这些高度受限的计算环境中开展分布式人工智能研究提供支持，就有机会促进研究并降低参与门槛。

当前及未来潜在活动：

- 让现场可编程门阵列上的机器学习更易普及：与 A3D3研究所 [50] 合作，充分了解如何将其研发成果转化为实验中其他人也能使用的形式。尤其是可托管于社区资源（例如分析设施）上的软件流水线和测试平台。这项工作的目标是降低开发机器学习触发解决方案的门槛。

改进基于高能物理数据的人工智能研究

扩展人工智能与高能物理社区之间的联系
资助方案：高
描述：来自高亮度大型强子对撞机探测器的数据非常适合多种类型的人工智能研究。需要解决的问题（例如喷注标记、径迹重建、信号识别）要求学习复杂的过程、物理概念，甚至几何关系。此外，解决这些问题会对高亮度大型强子对撞机的物理研究能力和资源需求产生重大影响。该领域用于生成适合机器学习的数据的常用工具，更偏向于内部使用。当前及未来潜在活动：

- 模拟通用高亮度大型强子对撞机探测器：DELPHES 等工具可简化模拟大型强子对撞机探测器。我们需要更新这套工具，以反映高亮度大型强子对撞机探测器的部分复杂特性：增加更现代的径迹探测架构，以及一种主动式量能器，类似于 CMS 下一代前向量能器。这项工作还将包括构建更自动化的人才培养渠道，以生成可用于挑战的数据集。

- 面向研究的数据格式：高亮度大型强子对撞机社群使用的数据格式大多基于 ROOT，不便于人工智能研究人员及该领域之外的其他人使用。NumPy、Pandas 数据框或 Arrow 表等工具更为常用。这项任务将致力于将这些通用格式打造为一等公民。
- 人工智能挑战：随着上述工作逐步落实，这将使该领域能够组织并开展人工智能挑战赛。然而，成功举办一场挑战赛绝非易事。与该领域中曾举办过挑战赛的其他人士合作，通过示范逐步形成一套最佳实践。

影响与成功标准

成功标准 – 里程碑与交付成果:

以下列出的里程碑与交付成果着眼于研究所的前三年。这些高层次事项将在项目执行过程中进一步细化，后续年份的内容也将逐步补充。

D4.1. 每次蓝图会议的成果之一都将是一份报告。报告分发给社区将作为一项里程碑。预期日期将与时间安排挂钩（约在蓝图会议召开后4个月）。**Various**

D4.2. 再训练挑战赛完成：用于重建或触发的机器学习算法已实现自动重新训练。**2025年12月**。

D4.3. 启动一个 FPGA 测试平台（如 SSL）。**2026年12月**。

D4.4. 举办一场面向人工智能研究社区参与者的挑战赛。**202年12月**

7D4.5. 访问一个用于机器学习训练的 FPGA，可通过分析设施实现。**202年12月** **7**

训练与测试基础设施支持在本地和非本地运行训练。将训练标准化后，研究人员便可在世界各地利用图形处理器进行训练，或在托管训练服务的基础设施上进行训练，并获得相同的用户体验。

成功标准 – 指标:

指标是一个有用的工具，能够为管理层提供量化信息，以了解实现总体目标的进展。以下是我们认为适用于转化人工智能领域的高层次指标：

M3.1. 加入 HSF 培训库的基础培训数量，以帮助物理学家将机器学习融入其工作流。

M3.2. 加入某个库、作为该领域范例的高级机器学习技术数量。

M3.3. 使用研究所开发的流程集成到实验基础设施中的人工智能 / 机器学习模型或应用案例数量。

M3.4. 每季度在分析设施中使用 FGPA 服务的次数。

5.4 数据组织、管理与访问（DOMA）

鉴于“数据”对高亮度大型强子对撞机将开展的所有工作都至关重要，数据组织、管理与访问这一投资领域是四项 HL-LHC 计算差距的关键组成部分，也就不足为奇了。海量数据最容易理解：从预测的触发率、每年的数据采集天数和事件大小入手，高亮度大型强子对撞机实验便可对实现预期科学目标所需的原始数据、处理后数据和模拟数据集进行一阶估算。将这些数字代入当前的资源需求建模后便会发现，所需磁盘容量已超出固定预算方案的承受范围。然而，若进一步考虑到这些数据必须在共享国家级网络基础设施中传输、必须在各设施以远高于当今的速率进行分析，而且还必须借助通用基础设施来降低可持续性成本，问题就会更加复杂。

总的来说，DOMA 领域面临的这些挑战表明，高亮度大型强子对撞机科学研究并非只需购买更多服务器、磁盘和网络交换机，同时让现有方法保持不变就能实现。DOMA 的生产基础设施和分析设施两个子领域都需要强有力的研发计划，并在过去 5 年取得的成果基础上继续推进。在大规模数据传输方面，整个大型强子对撞机生产基础设施已从小众的 GridFTP 协议迁移到业界标准 HTTP，这既展示了将研发成果投入生产环境的能力，也证明了实施全系统变革的能力。社区已规划并执行了首个两年一度的数据挑战 DC21，将其作为数据重大挑战的一部分（第 6.2 节），展现了在全球范围内协调行动并为技术项目设定综合性里程碑的能力。最后，在 IRIS-HEP 期间，Coffea-Casa 分析设施平台得以开发；Coffea-Casa 为新的分析系统服务提供了一个与用户接触的“初步体验”场所。图 9 展示了 IRIS-HEP 期间 DOMA 团队开展工作的领域。

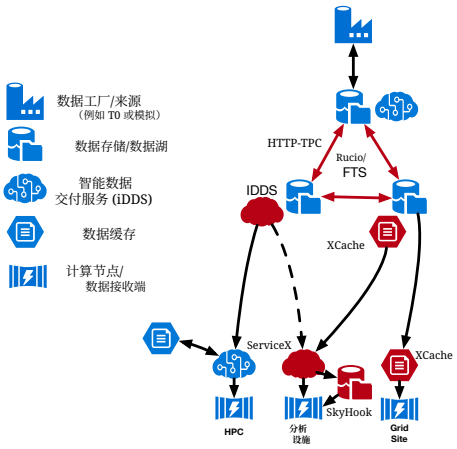


图 9：展示生产基础设施中与 DOMA 相关组件的示意图。DOMA 在 IRIS-HEP 中启动或参与的组件以红色标示。从 IDDS 指向 ServiceX 的虚线箭头表示下一阶段的一个计划项目。

具体挑战与机遇

从现在到高亮度大型强子对撞机期间剩余的研发阶段，我们看到 DOMA 领域存在一些机遇：继续开展工作，为高亮度大型强子对撞机的数据量做好协调一致的网络基础设施准备，并转向更新的技术——这些技术已被工业界及其他领域的科学计算基础设施采用，并可将数据交付给分析设施。

扩展数据量以满足高亮度大型强子对撞机的需求：LHC 社区使用的批量数据传输基础设施中，几乎每项服务都需要创新、开发和集成，以便为高亮度大型强子对撞机的数据量做好准备。机遇包括：在现有研发测试平台（如国家研究平台（NRP） [54], ）上对现有软件进行基准测试；利用新一代网络（如 FABRIC [55], ）；以及利用经过工程设计的网络路径（如 ESNet SENSE 项目 [56]）。在两年一度的全球数据挑战（第6.2节）之间，社区可以利用这些测试平台来验证相关技术，也可以将其用于任何区域性或美国特定的演练。

批量数据移动的技术转型：历史上用于批量数据移动技术栈的多项技术已到生命周期末期，导致基础设施难以实现可持续性。例如，WLCG 范围内使用的磁带归档协议存储资源管理（SRM）基于定制的传输层（并非互联网普遍采用的传输层安全协议 TLS），且使用了早已不再流行的远程过程调用协议 SOAP。这为重新审视生态系统的部分组成创造了新的机遇。例如，社区已经用业界标准 HTTP 取代了小众的 GridFTP 协议，从而有望通过采用业界标准大幅提升可持续性。未来5年，我们认为社区需要进行以下潜在转型：

- 将授权方案从基于身份映射（将凭据映射到本地身份）迁移到基于能力的方案（将凭据绑定到特定操作）。基于能力的方案能够提供更细粒度的授权——只需将作业所需执行的操作随作业一并发送。这一转变需要对整个软件栈进行协调变更，并实现与生态系统的集成。

- 将大规模数据传输迁移到 IPv6。互联网工程任务组（IETF）认为 IPv4 是一种遗留协议，这意味着未来网络层的创新将专门针对 IPv6；所有大规模流量向 IPv6 的迁移都应完成。例如，ESNet 上用于监控网络流的数据包扩展仅针对 IPv6 定义。

向分析设施交付数据：高亮度大型强子对撞机的分析将以数据集的规模（事件数量和数据量）、以更低延迟交付初始结果的需求，以及使用来自物理学领域之外的更广泛的“数据科学”和机器学习工具为显著特征。预计数据量和复杂环境将促使用户从笔记本电脑级别的机器转向分析设施；这些设施专门支持高数据速率输入输出、机器学习支持服务（例如推理服务）、用户界面（例如伪交互式任务计算或笔记本）以及高级数据管理服务。这些设施无论是采用第 5.5 节中的新方法建设，还是构建在现有面向批处理的分析设施之上，都将需要高级数据交付和管理服务。

例如，高能物理分析的一个重要趋势是转向使用 Python 工具和列式分析。列式分析不仅能让分析人员获得使用热门数据科学工具的经验，还能通过针对列而非单个事件定义操作，释放向量化和性能方面的优势。要成功利用这些分析技术，就需要提供服务，以筛选、转换列，并将其传送至运行在分析设施上的工作负载。

高能物理分析历来是一项高度依赖文件系统的活动：用户会获取一个数据集——通常只是某个目录中的一组文件——并进行简单的转换和筛选，最终得到一个新的数据集中规模较小的一组输出文件。用户往往只做简单的更改，例如为事件添加几个派生值，因此这些派生数据集之间存在大量重叠。此外，如果原始推导中缺少某一列或列值有误，用户就必须从头重复整个流程。这种系统既浪费磁盘空间，也浪费——更重要的是——物理学家的时间。如今已有现代数据管理系统，无需将整个生态系统转换为关系数据库管理系统，就能运用虚拟视图和连接等常见数据库技术；这既能借助业界大量投资（有助于弥补*G4*（可持续性）方面的差距），也能提高物理学家的工作效率。随着数据管理方式的发展，数据交付也需要相应改变，以便有效地调度并从更广泛的分布式网络基础设施中提取数据，将其送入设施并转换为数据管理所需的格式。这需要分析设施和网络层都提供相应服务

（利用 t　　（NRP 和 SENSE 工作）以确保适当的优先级排序和有效缓存　　.

衔接点：最后，研究所本身的组织架构提供了一个独特的机遇。大型强子对撞机和高亮度大型强子对撞机的 DOMA 生态系统规模庞大、错综复杂，且发展缓慢，因此独立的小规模研究项目（例如 NSF CSSI Elements 计划中的项目）很难将其成果投入生产环境。研究所的 DOMA 战略领域规模足够大，可以作为知识枢纽，连接进入 NSF 生态系统的创新理念、国家级研发测试平台，以及服务于高亮度大型强子对撞机的生产网络基础设施。

当前方法与发展路线图

DOMA 领域可分为两类投资：一类投向生产基础设施，主要聚焦于满足可持续性（G4）、可扩展性（G2）和原始资源需求（G1）方面的 HL-LHC 计算差距；另一类投向分析系统，聚焦于可持续性（G4）和规模化分析（G2）。下面我们将概述各领域现有的方法。

生产基础设施项目

将持续集成扩展至高亮度大型强子对撞机的数据速率

资助方案：中等（缩减范围）、高
描述：从第3轮运行开始到高亮度大型强子对撞机的首个完整年份，大型强子对撞机实验每年传输的预期数据量将增长20倍。为应对这些数据速率，社区制定了一系列两年一度的数据挑战，详见第6.2节。数据挑战旨在作为阶段性总结和里程碑；大部分工作是在挑战前几年进行准备。该项目将致力于工程实现并整合社区范围内的研究项目，以展示网络基础设施已准备就绪，能够满足高亮度大型强子对撞机的规模需求。

当前及未来潜在活动：

- 展示参考平台的扩展能力：在生产系统上进行负载测试之前，必须先证明各种用于批量数据传输的软件参考平台（对于 IRIS-HEP 而言，是运行在 POSIX 文件系统之上的 XRootD）能够良好扩展。美国国家科学基金会资助了多种实验性存储资源（例如提供文件系统的 NRP）和网络资源（例如连接圣迭戈与纽约的 1 Tbps FABRIC 平台）。借助外部研发测试平台，社区能够尝试进行高亮度大型强子对撞机规模的测试，而无需在生产设施上“提前采购”。

- 利用经过规划的网络路径：通过将高亮度大型强子对撞机的批量数据流量划分到专门规划的网络路径上，网络连接服务提供商（对于美国大型强子对撞机而言，即 ESNet）便能够隔离用户指定的数据流，从而提升其可追踪性，同时实现优先级划分、流量分段和专门的服务质量技术。ESNet 的 SENSE 项目 [56] 提供了端到端规划网络路径的机制；然而，这项功能需要集成到大型强子对撞机的数据管理软件（Rucio）中，并证明其能够在多个站点间正常工作。

- 组织美国区域演练：WLCG 范围的数据挑战为设施和技术提供了每两年一次的全球同步节点。这些挑战需要投入大量工作并进行协调，因此难以纳入成熟度较低的技术或区域性关注事项。我们预计有必要开展美国专属的区域演练，重点关注美国大型强子对撞机正在投入的技术（例如 Rucio / SENSE 集成）以及与美国高性能计算站点集成等挑战。一个跨越高亮度大型强子对撞机实验、以研究所为规模的 DOMA 战略领域，将特别适合协调此类演练。

扩展网络基础设施，以弥合当今与高亮度大型强子对撞机预期传输速率之间的 20 倍差距，是 DOMA 团队影响最大的活动之一。

分布式基础设施授权技术全面升级
资助方案：中等、高
描述：基于能力的授权为在分布式基础设施上声明授权提供了一种强大的新范式。如今，每个实验都有一个令牌发行服务，用于声明持有者（因此称为“持有者令牌”）可在该实验的分布式资源上执行的特定操作；IRIS-HEP 致力于确保大型强子对撞机社区使用的存储系统能够以互操作的方式解读这些声明。

然而，社区使用的所有软件要完成适配，以便获取、管理和使用这些新凭证，仍有大量工作要做。这些技术仍是下一次数据挑战计划中的重点功能，以便留出充足时间，在高亮度大型强子对撞机启动前完成全面过渡。

当前及未来潜在活动：

- 协调令牌用法和配置文件的演进：虽然 SciTokens 项目于 2017年 提出了基于能力的令牌这一理念，但要拓展该理念以涵盖所有大型强子对撞机应用场景并使其在社区中得到广泛采用，需要大量协调工作。在站点之间传输数据时，对授权方案作出一致解读是建立信任的严格要求；随着配置文件不断演进并采用新技术，DOMA 战略领域有机会继续与 WLCG 授权工作组合作。

  如今，能力语言方面的基础工作已经完成，社区需要进一步明确令牌获取和交换工作流，例如，设计它们如何从数据管理系统（Rucio）流转到文件传输系统（FTS），再到存储端点。

- 构建参考实现：IRIS-HEP 的 DOMA 领域为嵌入 XRootD 服务器软件中的基于令牌的授权提供了参考实现。多个大型强子对撞机设施都在使用该实现，它为存储和中间件开发人员提供了一个端点，用于测试各自独立的实现。

- 提供引领和支持：新技术总会给系统管理员带来挑战。提供专业知识和明确方向有助于减轻他们的负担，也能让社区更乐于接受变革。

有序地向运行中的生产工作流交付数据
资助方案：高
描述：在 IRIS-HEP 成立的前四年里，DOMA 领域投入资源开发了智能数据交付服务（IDDS），使 PanDA 工作流管理系统能够执行以数据为中心的工作流。IDDS 被用于实现“磁盘轮换”（最大限度减少 ATLAS 实验对磁盘缓冲区的使用），并管理大规模超参数优化任务；在高能物理以外，LSST 也采用 IDDS 来管理大规模数据处理。鉴于磁盘存储的原始成本高昂——据一些估算，专供高亮度大型强子对撞机使用的磁盘存储比中央处理器更贵——严格管理磁盘缓冲区有望缩减其所需容量，使社区能够更多地依赖成本较低的归档存储层。

当前及未来潜在活动：

- IDDS 与 ServiceX 的集成：目前，面向分析设施的列交付服务（ServiceX）完全依赖于输入数据集存储在磁盘上，并先传输再处理。通过让 ServiceX 调用 IDDS 执行数据处理，

便有机会利用这项技术将数据集从磁带流式传输到分析设施，提取分析所需的列式数据，而无需将整个数据集持久化存储在磁盘上。

分析项目

使用 ServiceX 交付列式数据
资助方案：中等、高
描述：列式分析是一种相对较新且不断发展的物理分析方法。ServiceX 是一项旨在分析设施内部运行的服务，用于创建并缓存列，以满足分析人员的数据交付需求。ServiceX 从设计之初就能够读取实验专用数据格式，并将选定事件及其属性写入业界通用的列式数据格式（此外也支持高能物理原生的“ROOT”格式）。
当前及未来潜在活动：

- 扩大可用数据格式的范围：随着高亮度大型强子对撞机的计算模型不断完善，分析方法也在持续演进。ServiceX 专注于紧凑、面向分析的数据格式；然而，新的机器学习技术往往会使用底层对象，而这些对象可能包含在更原始的数据中（可能存储在磁带上，因此需要与 IDDS 集成）。通过尽可能广泛地覆盖应用案例，ServiceX 可以帮助提升未来分析设施的影响力。
- 与数据管理工具集成：目前，该服务可以将数据交付到类 S3 对象存储；这两种方式都提供了相当简单的数据管理工具。结合行业技术（例如交付到 SkyHook，见下文）后，用户将能够更好地利用这些工具。
- 与分析保存系统集成：“由文件组成的数据集”之所以经久耐用，一个原因在于其简单性：帮助复现工作流所需的唯一数据服务就是文件系统。当处理链中使用一系列复杂服务时，情况未必如此；例如，交付一个列并将其集成到现有数据集中（这可能意味着交付服务需要纳入分析保存）。为了维持保存分析的能力，RECAST 等常用工具需要能够理解并保存使用 ServiceX 运行的分析。

利用行业数据管理技术服务高能物理
资助方案：中等（缩小范围）、高
描述：分析数据集将显著增长，用户也将要求更高的事例率，以缩短洞察时间。Skyhook 项目投资于新兴的数据处理架构，这类架构可在网络与存储层提供额外的计算资源和硬件加速器。该服务利用常用的数据访问库，将结构化查询“下推”至这些层，从而减少数据移动，并在不创建副本的情况下生成数据集视图。Skyhook 项目的重要组成部分是元数据管理，它能够建立视图，并支持视图的版本控制与分支管理（类似于基于 Git 的源代码管理中的版本控制与分支管理）。支持 Skyhook 的存储系统是维护这些元数据并以便捷格式提供给其他工具的理想位置。该项目利用了 Apache Arrow、Parquet、Substrait 和 Apache Iceberg 等成功开源项目的数据与查询规范。Skyhook 项目成功将一项 Ceph 扩展贡献至 Apache Arrow 项目，使 Apache Arrow 数据集接口查询能够下推并分发至存储 Parquet 文件的 Ceph 存储服务器。Skyhook 项目的其他部分包括使用 Substrait 作为查询规范和处理状态，通过多个 Bluefield 智能网卡协同处理粒子物理数据的 Apache Arrow 数据流，以及将基因组比较任务卸载到硬盘。

当前及未来潜在活动：

- 与基于文件的数据管理系统集成：Apache Iceberg 等基于文件的数据管理系统能够提供通常与数据库相关的功能，同时保留大型强子对撞机高度依赖的基于文件系统的方法。SkyHook 有意使用 ADL基准测试库 [57] 来比较 Iceberg 的性能与 Graur等人在 VLDB'22 [58] 上发表的结果，并使用 py.iceberg 来实现版本化视图。

- 替代性数据建模语言：面对大型强子对撞机事件这样复杂的数据，建模和查询并非易事，也难以很好地映射到 SQL 等常见语言；我们的目标是评估新的查询与数据建模语言（例如 Malloy），并将其与 [58] 中介绍的结果进行比较。

- *Substrait* 集成：Substrait 正迅速成为一种既定方式，用于独立于原始查询语言来指定查询计划。它似乎是构建可组合数据管理栈的一种很有前景的方式，可统一多种查询方法。例如，它可以帮助指定视图、为缓存查询命名，并将 LHC 分析栈连接到业界及更广泛的计算机科学研发领域正在开发的未来数据处理、数据管理和存储系统。

联合领域项目

Coffea-Casa：面向高亮度大型强子对撞机的分析设施平台（与分析系统、设施研发联合开展）

资助方案：中、高
描述：IRIS-HEP 前四年的一项经验是，要让成熟度各不相同的多个项目朝着共同目标保持一致，十分困难。Coffea-Casa 是一个分析设施原型，旨在成为多种技术的通用集成点，并让这些技术首次接触到分析人员用户群体。

Coffea-Casa以用于低延迟列式分析的“Coffea”处理框架为基础，并采用模块化方式添加其他服务，例如 ServiceX、SkyHook，或将任务横向扩展到传统批处理系统中。该设施为物理学家提供了交互式体验，比起传统的基于批处理系统的设施，更接近于在笔记本电脑上工作的体验。该设施采用了一种方法，借助 Kubernetes 这一赋能技术，将现有计算设施转变为可组合的系统。Kubernetes 不仅使开发人员能够通过 DevOps 方法论快速部署服务，还充当服务编排的通用语言（见第 5.5 节），从而能够轻松地在多个 Coffea-Casa实例之间复制这些服务。

在 IRIS-HEP 中，Coffea-Casa 用于执行 IRIS-HEP 分析大挑战的练习（第6.1节），并已部署供美国 CMS 和美国 ATLAS 物理学家社区使用。当前及未来潜在活动：

- 推动 *Coffea-Casa* 成熟并投入生产环境：随着分析设施的概念和服务日益成熟，我们正努力扩大用户群，以积累必要经验，支持高亮度大型强子对撞机的大规模分析。我们将继续利用 Kubernetes 作为技术底座，提供更多服务并实现可移植性。Coffea-Casa 将随着日益复杂的分析大挑战演练不断发展并扩展规模。与真实 CMS 和 ATLAS 分析的集成将帮助我们针对高亮度大型强子对撞机的数据速率进行调优和基准测试。此外，随着原型设施的用户规模从目前的数十人扩大到可能数百人，我们预计将面临挑战，需要改进这些设施中的资源管理。

- 加强 *DOMA* 研发之间的集成：作为 IRIS-HEP 分析系统和 DOMA 领域中面向分析工作的集成点，Coffea-Casa 仍需部署新版本和数据交付服务。需要加强与现有项目的集成（例如，让 ServiceX 凭证在登录时自动生成，

或扩展数据缓存服务），并开始与 Bearer 令牌支持等新技术集成，以便授权全局数据访问。

- 制定支持基于机器学习的分析的方法：机器学习技术在高能物理领域已有悠久的应用历史。然而，这些技术很少发展到需要在站点基础设施中进行明确规划的规模；随着机器学习在科学和工业领域迅速发展，大型强子对撞机社区对它的兴趣也日益增长。我们将研究可提供带 GPU 访问的交互式训练环境的方法（由于设施中的 GPU 设备数量有限，这比 CPU 调度更困难），并寻求与国家级 GPU／机器学习训练资源整合的机会。此外，业界已经开发出多种用于 Kubernetes 部署的新工具，例如 MLflow，可用于管理超参数优化跟踪和高级机器学习流水线。最后，多项分析已开始将机器学习推理纳入其工作负载；通过设施本地推理服务提升吞吐量，将使这些分析受益。

- 分析保存：新增的服务类型（数据管理、机器学习推理服务、基于任务的计算）带来了新的范式，需要将其纳入分析保存系统。我们需要制定保存策略，并将其与其他社区项目整合。

- 协调日益壮大的大型强子对撞机分析设施网络：IRIS-HEP 并非唯一一个研究高亮度大型强子对撞机分析方法的机构；全球还有多个类似的工作。未来的软件研究所可以发挥重要作用，成为知识枢纽，确保国际项目、美国国家科学基金会资助的工作以及美国大型强子对撞机设施之间的协调与知识共享。

Coffea-Casa 设施原型已证明，它是 IRIS-HEP 分析研发愿景的重要“交汇点”；团队则在研究所内外发挥着知识枢纽的作用。

使用 XRootD 和 XCache 进行核心数据流传输 （与 OSG-LHC 联合开展）

资助情景：中等、高

说明：XRootD 软件框架是大型强子对撞机各项工作的基础。它在 IRIS-HEP 中被用作数据流传输和批量数据传输的参考平台，是 CMS 数据联邦的基础；在“XCache”配置下，还可作为生产环境和分析的数据缓存服务。确保这一平台的可持续性至关重要。

当前及未来潜在活动：

- 不断演进的批量数据传输：作为多协议服务器，XRootD 同时实现了专有的“xrootd”协议和标准 HTTPS。美国大型强子对撞机设施中，超过半数使用它在站点之间进行基于 HTTP 的数据传输。随着批量数据传输技术栈不断演进——改进基于 HTTP 的数据移动、提升数据速率并实现相关技术——该平台将继续引领社区。
- 核心开发、集成与交付：除批量数据传输外，XRootD 也是大型强子对撞机社区的关键软件。它是一项由美国能源部实验室、大学和欧洲核子研究中心共同参与并作出贡献的合作项目；DOMA 和 OSG-LHC 战略领域也可以发挥作用，通过核心开发、测试、集成和软件交付等方面作出贡献，确保对该软件的投入得以持续。像 IRIS-HEP 这样由美国国家科学基金会资助、达到研究所级别的项目参与这些活动，将有助于该合作项目为美国国家科学基金会网络基础设施社区提供更广泛的利益相关方架构。
- 探索事件交付：XRootD 的多协议框架包含远程过程调用和流式传输层，可实现可扩展且负载均衡的数据交付。SkyHook 项目

已展示了 Apache Arrow 作为高性能、可互操作数据格式的价值；然而，目前它仅限于作为 Ceph 的一部分使用（Ceph 较为常见，但远未普及于大型强子对撞机设施）。利用 XRootD 以 Apache Arrow 格式交付高层次、结构化数据，同时借助该软件现有的身份验证和流式传输功能，具有很大潜力。

影响与成功标准

DOMA 一直是美国大学社区的传统优势领域。尤其是在过去 5 年里，现有的 IRIS-HEP团队在该领域担任 WLCG 的领导职务，设计并实施了从 GridFTP 到 HTTP-TPC 的迁移，并开始向令牌迁移。将 DOMA 纳入美国国家科学基金会资助的软件研究所，可使高亮度大型强子对撞机社群与美国国家科学基金会高级网络基础设施办公室（OAC）更广泛的活动和优先事项保持一致；DOMA 得天独厚，能够在其工作计划中充分利用现有的分布式测试平台资源。现有团队已负责 ServiceX 和 Skyhook 等服务，并能够在 IRIS-HEP 项目的成功基础上继续推进。将 DOMA 作为一个战略领域，既能保持工作的延续性——完成 IRIS-HEP 结束时仍在进行的项目——也能借助一支现有的高效团队启动新项目。此外，该团队还将能够帮助维持 XRootD 等在整个社区广泛使用的关键项目。

DOMA 生产环境活动的高影响成果，将围绕成功参与并执行与 WLCG 部分协调的两年一度的数据挑战展开。这项工作的顶点将是 2027年数据挑战（约为 IRIS-HEP 下一阶段的第 4 年），届时我们将力求展示批量数据传输达到预期高亮度大型强子对撞机数据速率的 100%。另一个重要里程碑将在 DC23 实现，届时大多数数据传输将采用基于令牌的授权。对于 DC25，我们预计其余基础设施也将采用基于令牌的方式，社区将利用网络服务来改进数据传输的问责、监控和管理。

对于与分析相关的活动，DOMA 战略领域的预期成果将体现在新型分析设施范式以及相关数据交付和管理服务的应用上。我们预计，在高亮度大型强子对撞机运行初期，这些将成为最普遍的分析环境；并且到 2026年，研究所将展示能够满足高亮度大型强子对撞机规模分析需求的数据速率，具体要求由分析大挑战定义。ServiceX 预计将成为用户将官方实验数据集导入分析环境的主要方式；Skyhook 或类似服务将提供一种在环境中管理数据（虚拟视图、列连接）的方式，并让分析能够使用面向用户、达到生产级质量的机器学习推理服务。

高亮度大型强子对撞机计算缺口影响：预计 DOMA 领域将对已定义的四项高亮度大型强子对撞机计算差距产生影响。大部分资源将投入*G2*（可扩展性），用于不同软件组件的基准测试，以及参与区域数据演练和全球数据挑战。这项工作将帮助我们更好地了解网络流，并推动更多使用网络服务，从而提高数据传输的可管理性，实现更高效的资源使用。*G1*（原始资源使用）计算差距将通过投资于借助 IDDS 进行的数据交付来解决；IDDS 有助于管理年度数据（重新）处理所使用的磁盘缓冲区，并减少高亮度大型强子对撞机所需的在线磁盘总量。对于*G3*（规模化分析），DOMA 将把新的服务和技术投入生产环境，构建交互式设施，将“本地笔记本式”的响应能力与高亮度大型强子对撞机规模的数据集相结合。

最后，在*G4*（可持续性）方面，DOMA 领域尽可能采用业界协议（HTTP、采用 JWT 格式的持有者令牌）、方法（基于 Kubernetes 的服务编排）和技术（Apache Arrow）。通过帮助大型强子对撞机社区使用更广泛的生态系统，而不是

自行开发技术，我们将大型强子对撞机专属的部分限制在社区真正独特的领域。

成功标准 – 里程碑与交付成果:
以下列出的里程碑与交付成果侧重于研究所的前三年。这些高层级项目将在项目执行过程中进一步细化，并补充后续年份的内容。

D4.1. Coffea-Casa 用于 ATLAS 和 CMS 各自的一项生产环境分析设施。**2023年12月**。

D4.2. 美国大型强子对撞机二级站点均支持在其存储元素上使用持有者令牌进行第三方复制传输。**2023年12月**

D4.3. Rucio/SENSE 集成纳入 DC23。**2024年3月**

D4.4. 成功执行 DC23，并实现其数据传输和技术目标。**2024年3月**D

4.5. 将 ServiceX 用于 Coffea-Casa 中的物理分析。**2024年3月**。
D4.6. 展示作为分析大挑战一部分、以 200 Gbps 运行的分析。**2024年12月**

D4.7。展示 XRootD 扩展至 400 Gbps 以上的能力。**6月20日** **25**

成功标准 – 指标:
指标是为管理层提供定量信息、了解总体目标进展情况的有用工具。以下是我们预计适用于 DOMA 领域的高级指标:

M4.1. 将数据速率表示为预期高亮度大型强子对撞机速率的百分比。该指标的目标由 DGC 在第6.2节所列时间表中定义。M4.2. 参与 Rucio/SENSE 测试平台的站点数量。目标是 DC23 时达到 4 个，到 2025年3月达到 8 个。M4.3. 支持数据传输持有者令牌的美国大型强子对撞机设施所占百分比。目标是在 DC23 时达到 $> 50\%$，并在 DC25 时覆盖所有站点。M4.4. XRootD 参考平台所展示的最高传输速率，占二级站点所需高亮度大型强子对撞机速率（持续 400 Gbps）的百分比。目标是在 DC23 时达到 200 Gbps，到 DC25 时达到 400 Gbps。

5.5 设施研发与集成

设施研发 广义上是指探索和创新系统、服务及物理基础设施的相关活动，这些系统、服务及基础设施为高亮度大型强子对撞机服务环境和运行时生态系统提供适用的平台。这些设施可以完全位于本地（即部署在局域网内的平台），也可以是分布式的，也就是说，服务通过广域网实现互操作（即“网格”，或如今所说的分布式平台）。IRIS-HEP 的两个研究领域（分析系统和 DOMA）选择采用软件容器和云原生应用管理方法（Helm 图表和 GitOps）来标准化部署。在 DOMA 软件开发和分析大挑战对可扩展性的要求推动下，可扩展系统实验室（SSL）尝试了采用云原生技术的灵活策略。

事实上，采用 Kubernetes 的设施“底层平台”概念，是 IRIS-HEP 蓝图会议、“k8s-hep 聚会”以及 WLCG Kubernetes 研讨会率先提出的一项策略；由于能够实现可复现的应用程序部署并提升运行可靠性，这一概念正逐渐在大型强子对撞机生产分析设施中流行起来。然而，为满足高亮度大型强子对撞机所需的能力和规模，设施研发的范围远不止底层平台，还涉及多个技术领域，包括多样化的数据存储系统、创新型网络，以及用于持续集成和运行的服务。图 10 展示了支持生产工作流的基础设施、平台和更高层服务之间的关系。

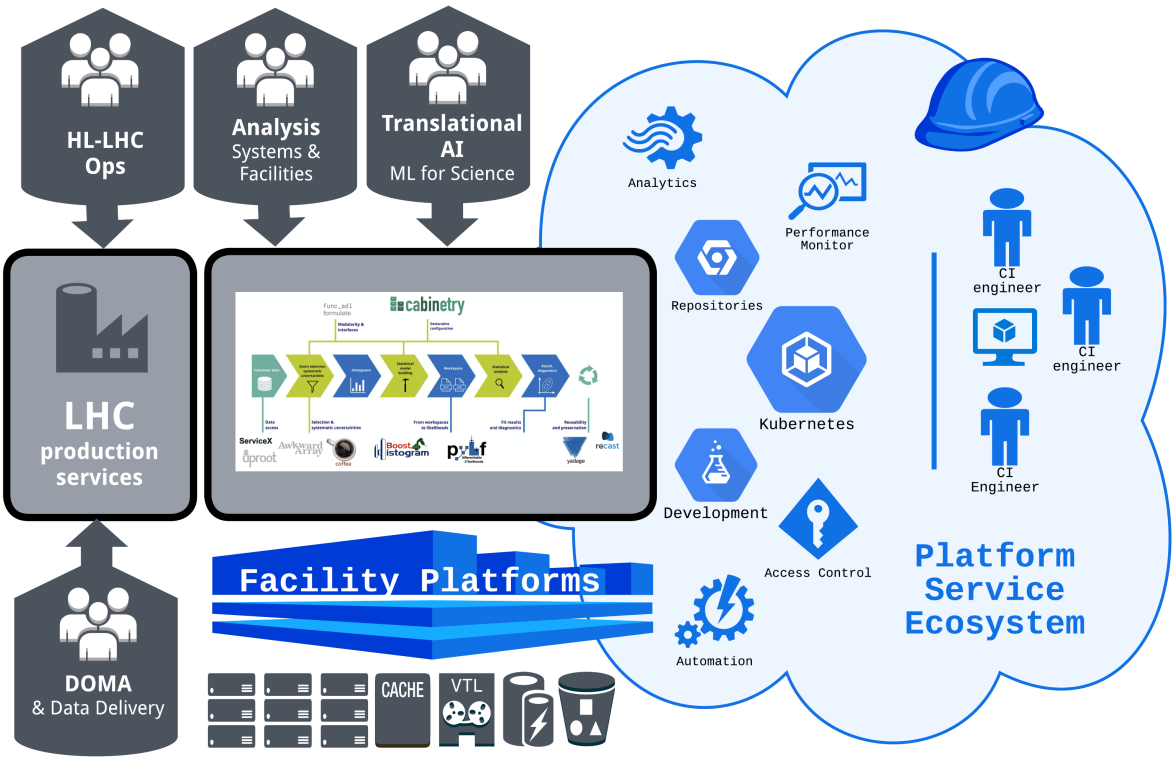


图 10：设施研发在生产环境和分析生态系统中的作用示意图。持续集成工程师准备并运营基础设施和服务，以支持先进的数据交付、分析及其他服务。

设施集成 指与 IRIS-HEP**开发和预生产** 软件组件的安装、配置和运行相关的活动。在 IRIS-HEP 中，这些组件包括 Coffea-Casa、ServiceX、Skyhook 和其他服务。生态系统中找到应用的其他科研网络基础设施服务（例如声明式处理框架、缓存服务和容器镜像仓库）同样需要集成到生产系统中。在可能的情况下，开发服务会部署在切实可行的环境中，与实验现有的系统和生产基础设施协同运行。这是了解整个网络基础设施中哪些组件面临最严峻可扩展性挑战的最直接途径。IRIS-HEP 软件开发人员与经验丰富的美国大型强子对撞机 Tier-2 和 Tier-3 大学系统管理员之间的合作，对于实现可持续系统至关重要，以确保这些系统能够服务于

高亮度大型强子对撞机的整个运行周期。这也包括美国大型强子对撞机运行计划中的分布式软件开发人员，以及一级中心的实验室工作人员。

IRIS-HEP 可扩展系统实验室是一个面向 DOMA、分析系统和创新算法的 Kubernetes DevOps 平台。SSL 为 CoDaS-HEP 培训活动以及分析大挑战人才培养渠道测试和教程提供基础设施。

具体挑战与机遇

在过去十年中，WLCG 生产计算基础设施基本保持不变，仍采用数十年前的部署和管理技术进行管理。持续运行的一级和 Tier-2 设施基础设施，一直能够应对截至目前成功开展大型强子对撞机实验物理计划所需的事件处理速率和存储需求。但在高亮度大型强子对撞机时代，除非这些设施作出改变，否则这种情况将不复存在。例如，要从分布式数据源向分析平台访问和传输数据，就需要利用网络、计算存储系统、设施资源管理器和服务编排框架中的新能力。随着我们开发新能力以应对高亮度大型强子对撞机的数据速率和处理规模，基础设施管理和扩展方法变得至关重要。设施基础设施本身必须随之演进。

在 IRIS-HEP 第一阶段期间，人们认识到了这一点：SSL 发挥着两个关键作用——作为测试平台基础设施，用于孵化 DOMA 和分析系统原型，并由大型强子对撞机第二轮运行规模下的终端用户物理学家进行评估；同时也作为挑战环境，让系统管理员和持续集成工程师能够灵活、自适应地构建所需的基础设施平台。早在大型强子对撞机第三轮运行期间，构建 SSL 时采用的方法就已为分析设施提供了基础设施创建与运行的蓝图。在 IRIS-HEP 下一阶段，继续开展受 SSL 启发的设施研发以及预生产服务集成至关重要。IRIS-HEP 内部积累的丰富经验，以及与现有生产服务集成所获得的经验，有助于确定研究所这一领域当前及长期面临的挑战与机遇。

面向下一代 Tier-2 和分析设施的基础设施演进：在未来五年中，社区将转变 Tier-2 和终端用户分析设施在 WLCG 计算层级中的传统角色，以适应不同的需求。例如，大型强子对撞机实验日益利用来自领先级和国家级高性能计算中心的机会性资源来填补资源缺口（大型强子对撞机第三轮运行期间已有应用，在 Run4 中则会更加显著），目前承担集中组织的模拟和数据衍生任务主力工作的 Tier-2 中心，可能会日益成为分析与数据交付生态系统中的关键参与者。目前，这些中心尚不能轻易适应并应对这些挑战。同样，最终阶段的物理分析将从笔记本电脑（或小规模机构集群）转向共享分析设施，这些设施将托管能够处理高亮度大型强子对撞机规模处理和数据速率的分析与数据访问服务。实际上，随着用于编排服务的框架为生态系统中的资源带来更高的灵活性，我们或许会看到这些设施融合不同角色并分担职责。

要创建、优化并可靠地运行各种服务（例如分析处理框架和数据重格式化服务），使其具备持续的服务能力，并确保当前 Run3 物理学团队采用相关工具集，持续开展研究与集成工作至关重要。这需要在不同社群的交汇点开展合作：LHC 物理学家、LHC（及高亮度大型强子对撞机）软件开发人员、科研网络基础设施创新者、国家级及领导级高性能计算技术人员，以及云原生计算基金会（CNCF）中的研究终端用户组 [59] [60]。

分布式 I　　基础设施管理：DOMA 系统本质上依赖分布式

服务来实现各种功能，例如向分析和生产设施交付数据。ATLAS 和 CMS 在多个一级和 Tier-2 站点部署的 XCache 网络就是一个典型例子。它们本质上提供了与商业内容分发网络（CDN）相当的服务，但有一个重要区别：在 WLCG 环境中，这些服务大多由多个团队跨管理域共同管理，导致软件更新延迟，有时也会降低运行效率。由于整个分布式平台缺少无缝的 DevOps 流水线，DOMA 开发团队难以推动新功能，或在整个平台范围内快速响应漏洞和安全问题。此外，随着分析设施扩展以满足高亮度大型强子对撞机的运行需求，我们预计在分析活动高峰期需要通过“向场外扩展”来应对突发性工作负载。场外处理周期可能来自 Tier-2 生产设施、云资源，以及可能的高性能计算中心（这些中心拥有大量图形处理器）。一些团队通过集中管理服务来弥补这一能力缺口，例如美国国家科学基金会的国家研究平台（https://nationalresearchplatform.org/）所采用的技术。该平台使用单一管理域（拥有完整权限）整合了 50 多个站点的资源。类似地，在 IRIS-HEP 的前五年中，SSL 团队与美国国家科学基金会 SLATE 项目（https://slateci.io/）合作，开发了联合运营模型（“FedOps”）。该模型只需用户在配备 Kubernetes 的集群上拥有用户权限，即可部署和运营边缘服务。采用这种方法后，一个覆盖美国所有 ATLAS Tier-2 设施并延伸至欧洲另外约六个站点的 XCache 网络，可由一人管理，从而能够随着底层 xrootd 软件的发展快速更新。在 Run3 和 LS3（即迈向高亮度大型强子对撞机的准备阶段）期间，我们有机会扩大以这种方式管理的服务数量，与更广泛的 CNCF 社区合作，采用可持续的框架改进交付工具，并加强运营策略和所需的安全模型（相关工作将与 OSG-LHC 合作开展）。

Run3期间与生产服务的集成：研究所开发的软件最终会与实验的生产生态系统以及生产基础设施发生联系。越早实现这一点，就能越快地发现挑战并识别机遇。为此，我们确保从 SSL 毕业且已准备好进行生产部署的软件，其完整生命周期都能被妥善打包，并在其他地方复现，例如 Tier-2s、国家实验室（一级）、机构集群、提供 Kubernetes 托管平台的高性能计算中心，甚至设备齐全的网络测试平台（如 FABRIC）。例如，ServiceX 已与 ATLAS 和 CMS 的生产级分布式数据管理服务集成，实质上优化了数据查找，并在生产存储端点和生产缓存上进行了测试。此外，我们还将 Coffea-Casa 分析设施软件与生产环境中共享的 Run3分析中心（包括 Tier-2 和分析设施）部署在一起，以了解资源共享、软件访问、身份管理、数据交付和用户文件系统集成。另一个好处是，软件与数百位正在分析大型强子对撞机第二轮运行和 Run3 数据的物理学家并肩运行，从而简化了向新的用户群体引入 IRIS-HEP 创新能力的过程，及早获取反馈并提高采用率。

当前方法与发展路线图

整个生态系统中的设施研发

资助方案：高

描述：可扩展系统实验室是本领域的一项独特资源，它提供了一个灵活多样的 DevOps 平台，供 IRIS-HEP 软件团队、ATLAS 和 CMS 的开发人员、相关美国国家科学基金会网络基础设施项目的持续集成工程师，以及大型强子对撞机系统管理员共同使用。它的吸引力部分来自其所处的环境：在行政管理上，它与现有的大型强子对撞机生产级第三级设施和 Tier-2 设施，以及支持多个 OSG-LHC 相关服务（例如托管计算接入点）的基础设施相邻。事实证明，它是一项不可或

缺的资源，不仅可用于 IRIS-HEP 软件开发和服务部署测试，也可用于多项可通过 Kubernetes 部署的科研网络基础设施服务，包括面向 WLCG PerfSONAR 网格的网络分析服务、网络可视化服务、用于 ATLAS 软件和探测器条件数据分发的分析服务、CMS 的 XCache 分析服务、由 FuncX（函数即服务）核心开发团队开展的可扩展性测试、REANA 测试部署、容器化 Rucio 服务测试、年度 CoDaS-HEP 培训活动的笔记本服务，以及一个可持续访问图形处理器资源的笔记本门户，为 ATLAS 机器学习社区提供服务。

当前及未来潜在活动：

- 持续运行参考 *SSL*：随着 IRIS-HEP 软件组件不断成熟，并与生态系统中的其他服务协同运行，提供测试平台基础设施仍至关重要。在 IRIS-HEP 的前五年里，我们建立了开发和“生产环境”SSL 集群测试平台，以满足 DOMA 和分析系统开发团队在开发节奏和稳定性方面的要求。随着这些服务投入生产环境，这项工作将继续稳步推进：开发者冲刺将根据用户和运维反馈、新的应用案例以及替代策略作出响应。

- 构建共享的 *Tier-3* 分析设施：与更广泛的 WLCG 社群合作，确定最佳实践、基础设施管理模式，以及在 SSL 上形成的方案，从而部署可靠且可扩展的服务；这些服务近期能够以 Run3 的规模支持数百名用户，同时具备经过验证的能力，可在 LS3 期间扩展至 Run4。

- 改进 *Tier-2* 基础设施管理：为 Tier-2 设施增设底层平台和更高层级的基础设施管理工具与服务，并尽可能采用行业标准解决方案。重点将放在可持续性上，并确保稳定、持续运行 Run3 所需的关键能力，同时引入面向高亮度大型强子对撞机演示项目和挑战性问题的新服务。为应对重大挑战所需的可扩展性及其他概念验证演示项目，需要协调调配 Tier-2 集群各处的资源。

> IRIS-HEP SSL 为新一代 WLCG Tier-2 中心和共享 Tier-3 分析设施基础设施的设计提供参考。

- 总结设施模式与蓝图：创建并整理 GitOps 图表和代码仓库操作，以提高可靠性和可复现性，使基础设施和应用程序都能轻松地在各设施间复制。

- 识别基础设施（及服务）瓶颈：在数据和分析重大挑战演练以及实验计划的相关演示性概念验证试验中，一项关键活动是对具有代表性的软件工作负载进行负载测试，准确模拟计划中的基础设施和高亮度大型强子对撞机应用场景。这需要为服务和基础设施配置所需的监控钩子，将生成的指标流式传输到分析仪表板，识别并分析可能存在的瓶颈，并测量整体性能。

- 探索采用 *ARM* 处理器节省成本的潜力：未来几年，对高亮度大型强子对撞机采用 ARM 处理器技术的价值和定量评估将成为整个社区的共同工作。美国 ATLAS Tier-1 将为 ATLAS PanDA 工作负载管理系统提供一个 ARM 测试平台，用于测试各种模拟、重建和分析任务。IRIS-HEP 可以利用这些资源测试关键服务的性能和适用性，例如 ServiceX 转换器在 ARM 上的性能。相关任务

将为 OSG-LHC 软件团队提供基础设施，以构建适用于 ARM 处理器的镜像，并测试 OSG-LHC 中间件所需的变体（与 OSG-LHC 协调开展工作）。

- 提升设施上不同任务间的资源共享：众所周知，Kubernetes 提供的默认资源分配机制，无法满足多样化平台对公平共享调度能力的全部需求。此类平台可能同时为 ServiceX 转换器提供中央处理器，为 Coffea-Casa 提供 Dask 工作节点，并为传统批处理提供 HTCondor 作业槽位。对于提供新旧分析环境的共享 Tier-3 分析设施，必须在 Run3 期间解决这一问题。

- 存储系统组织与访问的演进策略：如上文 DOMA 战略所述，加快数据对象访问的一种有前景的方法，是将部分查询求值“下推”至存储基础设施中，利用该层的处理器以及可能配备的加速器。Skyhook 为基于 Ceph 的对象存储系统提供了这一能力。针对具有代表性的分析查询和处理流水线，需要开展大规模测量，并评估 Skyhook 对 ServiceX 转换器性能的影响。

- 未来存储系统研发活动：如前文 DOMA 战略所述，弥合存储差距确实可能是高亮度大型强子对撞机时代面临的最大计算挑战。未来几年，IRIS-HEP 内部以及大型强子对撞机计算社区各方的工作，将为研究所内设施研发活动的优先事项提供依据，重点关注有前景的存储技术与方法。例如，将通过概念验证试验，探索创建异构存储系统，利用分布式异步对象存储（DAOS）和 RNTuple 格式，实现高效的分析数据访问。比较采用 NVMe 驱动器的 POSIX 文件系统、使用旋转磁盘的分布式 dCache 池（通过 xrootd 协议访问），以及现成对象存储在 RNTuple 和列式数据格式下的处理速率，将为社区提供宝贵的参考。研究所需要广泛开展合作，并直接参与由各实验推动的特定演示项目。

- 透明的存储服务质量与“分层存储”模型：在许多情况下，只要让预期工作负载更好地匹配底层存储系统的性能特征，就能节省成本。通过透明的数据服务质量机制，将这些信息提供给 DOMA 客户端和作业工作负载管理系统，或许就能实现这一点。例如，一项服务可将较小的日志文件发送到对象存储，将探测器模拟输入数据发送到由旋转磁盘支持的文件系统（这些任务对 I/O 的需求极低），并将分析输出发送到由高速 NVMe 支持的文件系统，以便快速迭代访问。收集到的信息可使更高级别的服务根据访问模式将数据迁移到冷存储：访问频率极低的数据（“极冷数据”）可以迁移到按程序控制关闭的机器上，类似于 Amazon Glacier，从而降低设施的总体成本。设施管理人员可利用某一年收集的分析数据规划下一年的采购，并根据实验按访问类别预测的需求，安排不同类型存储的采购。

管理广域网基础设施以实现规模化

资助方案：中等、高

描述：过去几年，在远程管理协同服务集方面取得了显著进展，这使我们能够更轻松地创新系统，同时降低运营成本。这些进展改变了我们对分布式计算资源的看法：从由计算站点组成的协作网格，转向提供服务编排程序化能力的可扩展研究平台。鉴于访问方式的灵活性大幅提升，这一转变有望带来深远影响。在 IRIS-HEP 的下一阶段，我们预计将在设施基础架构方面取得进展，以改进数据交付和分析

处理，并融入这些理念。
当前及未来潜在活动：

- 通过缓存降低站点存储需求：目前，ATLAS 和 CMS 均采用涉及不同访问与缓存架构的数据交付方法，并使用 XRootD 技术；这些方法会直接影响设施管理和存储成本。可使用用于管理全局系统的核心工具，引入新功能和更新，从而强化基础设施。利用缓存以及对数据放置和访问历史的了解，有望降低 WLCG 处理站点当前的存储容量需求。在环境中增加无存储站点，显然可以扩大可用中央处理器资源池，并促进对机会性资源的访问。此外，具备充足广域网带宽的现有 WLCG 站点，有望完全撤除其存储端点，以提供更高的中央处理器容量；也就是说，以额外的中央处理器换取存储成本（包括运维人力和设备成本）。作为这项活动的一部分，我们将使用多种分析工作负载对缓存网络进行大规模压力测试，并向 DOMA 开发团队提供性能和运维方面的反馈。

- 通过分布式工作节点提升分析能力：迄今为止，Coffea-Casa 分析设施仅部署在单站点 Tier-3 或 Tier-2 集群上。为了应对高亮度大型强子对撞机的数据规模，并缩短现有生产环境设施中的等待时间，可以打包并部署轻量级服务端点，为中央主节点（即“Casa”）提供潜在无限数量的 Dask 工作节点。我们需要研究集中式登录服务器、主目录服务器和本地用户存储服务，与克隆的独立系统之间的相互作用及权衡。这样做有望大幅降低分析设施的成本（减少设施数量），同时显著提升性能。借助我们在 SSL 中采用的 FedOps 技术，可以跨管理域协调管理由轻量级工作节点提供方组成的网络，即“Coffea-Pots”。

- 在网络中嵌入高级筛选服务：我们已开始探索在 FABRIC 测试平台内部署 ServiceX，这为分布式环境中的数据交付和成本评估开辟了新策略。例如，在服务器端、数据源处部署 ServiceX，可以在数据源端结合筛选和重新格式化功能，而无需通过网络复制完整文件，从而减少分析客户端与存储系统之间的带宽消耗。这可能产生重大影响，有望降低网络容量和存储的成本；两者都是设施基础设施中价格高昂的组成部分。2023 年第二季度，作为美国国家科学基金会 FAB 项目（跨境 FABRIC）的一部分，一个 FABRIC“节点”将在欧洲核子研究中心投入生产环境，与 Tier-0 托管的数据集共置。我们将探索在 Tier-0 运行服务器端 ServiceX 的优势，同时将 Run3 样本快速交付给美国的生产分析设施。此次测试将估算跨大西洋昂贵链路上潜在的带宽削减幅度。

- 使用现代软件升级 *WLCG* 软件分发和探测器条件数据缓存网络：我们已开始研究在 WLCG 站点管理适合缓存的数据的替代方案，例如使用 Varnish（ https://www.varnish-software. com/）软件。替代数据分发方法旨在降低运营 WLCG 站点的总成本，帮助弥合整体资源缺口。

将实验环境集成到生产基础设施中
资助方案：高
描述：在整个开发过程中，从原型到预生产软件和系统，都存在与实验的更大软件生态系统进行集成的环节，必须对这些环节进行设计、开发和迭代测试。这需要开发团队之间以及开发团队与设施的系统工作人员之间保持密切且频繁的联系。此外，为了开展

有意义的测试，使用真实环境并达到适当规模的重大挑战演示项目需要调配生产规模资源，并在持续运营的同时公平地安排资源使用。当前及未来潜在活动：

- 预生产服务的设施集成：在 IRIS-HEP 的第一阶段，为 ServiceX 与大型强子对撞机数据管理服务 Rucio 提供高效接口是一项重大挑战，需要进行多项优化，以降低对中央生产服务进行查询时的延迟。随着 Rucio 按照自身的开发路线图不断演进，这项集成工作也需要继续推进。正如 DOMA战略计划所述，ServiceX 与 iDDS 的集成为提升变换器处理能力提供了机会；反过来，也能为由 PanDA 经纪的分析任务提供列式重格式化服务。通过加强 ServiceX 与 XCache 的集成，可能获得性能提升，但只有在生产环境中才能探索这些优势。还需要为 MinIO 等辅助服务构建基础设施并进行部署。MinIO 是用于存储 ServiceX 格式化数据输出的存储服务；同时还需要用于管理这些输出的工具。在这一阶段，通常会发现并移除实验专属依赖（早期开发原型中未曾注意到），使其适用于多个实验。要支持早期采用者社区运行 DOMA 服务预生产实例和分析设施，并为其提供访问权限（包括初稿用户指南），需要具备两个领域的专业知识。

- 大规模准备演示项目资源：迄今为止，我们采取的方案主要由 IRIS-HEP 开发人员优先事项、分析重大挑战目标、设施研发机遇，以及寻找可持续发展路径的愿望所推动，旨在打造声明式、可复现的网络基础设施，使其能够扩展至任何可获取资源的地方。除了 IRIS-HEP 数据和分析重大挑战演练外，大型强子对撞机实验还计划开展其他演示项目，作为计算技术设计报告（TDR）的输入。这些 TDR 将列出在大型强子对撞机第三次长停机（S3）期间需要完成的研发项目的优先级。为这些决策提供依据，面向 TDR 的研发项目必须制定一项工作计划，推动 Run4 软件与系统版本的发布。计划必须包括风险和工作量估算，以及概念验证演示项目，以便估算对资源利用的影响（例如 CPU时间、GPU时间、内存、本地磁盘与服务等级、磁带和网络）。IRIS-HEP 将与计算与软件管理团队合作，协调用于这些影响研究的目标、配置、数据集和平台。

- 与高性能计算设施进行高级集成：尽管高性能计算资源被视为在高亮度大型强子对撞机运行期间弥合处理能力差距的重要机遇，但将实验的数据和工作负载管理服务与这些设施相结合仍将是一项重大挑战，因为高能物理只是这些设施所服务的众多科学驱动领域之一。近期的一次研讨会（https://indico.cern.ch/event/1183995/）指出了若干挑战，其中包括向这些设施传输数据以及从这些设施传出数据。高性能计算设施可能会在其基础设施中支持 Kubernetes 平台，甚至不仅限于用于托管用户服务的边缘平台，从而有望提供更多选项，将这些资源纳入大型强子对撞机计算环境。SSL组将与 OSG-LHC 合作，为制定策略作出贡献，以便通过高性能计算设施的资源“应用程序接口”高效对接实验系统。

- 培训与入门基础设施：为了确保社区采用并最大限度地收集用户对开发人员的反馈，必须继续为 IRIS-HEP 软件教程活动、面向分析设施的实验入门活动，以及由研究所赞助的高级培训活动提供培训基础设施，例如年度高能物理计算与数据科学培训学校（CoDaS-HEP）。在无法使用实验专用资源的情况下（例如生产环境中的 Tier-3 分析中心），SSL 可以为不同群体的青年研究人员提供所需的笔记本、中央处理器和图形处理器资源

以支持这些活动。

影响与成功标准

为 IRIS-HEP 配备可扩展系统实验室，不仅加快了 DOMA 和分析系统的开发进程及其与实验生产服务和设施系统的集成；其多功能性也使其成为高能物理计算领域独一无二的资源。SSL 已托管 ATLAS 分布式计算分析平台（https://analytics.mwt2.org）和 OSG 计算入口点（可从 20 多所大学访问集群资源），并为多元化的持续集成工程师社区提供了 DevOps 环境。显然，SSL 设施及为其组建的运营团队为美国国家科学基金会网络基础设施生态系统整体作出了重要贡献。SSL 实施了创建和管理灵活、可复现基础设施的方法，WLCG 社区的其他成员正在采用这些方法。未来五年，维持一个灵活、开放的设施环境，以孵化创意、在实际场景中试用服务原型、探索并培育新的基础设施交付模式，以及应对集成和可扩展性挑战，对于研究所的成功至关重要。

需要注意的是，尽管在 IRIS-HEP 的前五年中，已经组建了特定资源（专用集群）和基础设施，并将其统称为“SSL”，但设施研发的范围当然更广，分布于整个社区，来自许多大学、国家实验室和欧洲核子研究中心的软件开发人员、持续集成工程师、系统管理员和研究人员都为此作出了贡献。在研究所内，我们有机会让来自众多源头的方法趋于一致，从而弥合差距，满足高亮度大型强子对撞机的计算资源需求和能力要求。

成功标准 – 里程碑与交付成果:

与研究所的其他领域一样，以下概述的里程碑和交付成果聚焦于前三年。随着项目的推进，这些高层次事项将在后续年份进一步细化。不过请注意，在撰写本文时，更广泛的社区正在规划这一时期内的许多概念验证演示项目和设施研发主题，这可能会影响下文所述的交付成果。

D5.1. 建立必要的基础设施和编排服务，以持续提供参考 SSL。**2023年12月**

D5.2. 在欧洲核子研究中心的 FABRIC 内部署 DOMA 和 ServiceX。**2023年12月**

D5.3. 发布支持分布式分析、部署在 SSL 上的分析系统人才培养渠道。**持续**

D5.4. 提供升级版软件分发和条件数据缓存服务器的部署包。**2024年5月**

D5.5. 与 AS 合作，评估用于 Coffea-Casa 的分布式工作节点。**2024年5月**

D5.6. 策划并发布生产环境 Tier-3 部署模式，包括整合 Run3 期间使用的传统系统和面向未来的分析系统。**2024年12月**

D5.7. 与 AS 合作，支持演示运行一个适用且使用机器学习的完整分析。**2024年12月**

D5.8. 评估下一代大型强子对撞机 Tier-2 设施的技术、服务和基础设施管理模式，并发布成果供社区参考。**2025年12月**

成功标准 – 指标:

指标是为管理层提供量化信息、了解总体目标进展情况的有效工具。我们预计，以下高层级指标适用于设施研发与集成领域:

M5.1. 投入生产运行的分析设施数量。目标为 6 个。

M5.2. 在生产运行中为分析设施提供分布式工作节点的站点数量。目标为 3 个。

M5.3. 持续投入生产运行的无存储站点数量。目标为 2 个。

M5.4. 在生产环境中部署了升级版软件分发和探测器条件数据缓存服务器的站点数量。目标为 7 个。

5.6 分布式高吞吐量计算服务体系

大型强子对撞机依赖全球分布式网络基础设施来处理、传输和存储数据，而这套基础设施需要不断发展，以满足高亮度大型强子对撞机的需求。OSG联盟提供 OSG服务架构——一套紧密集成的服务，为美国境内现有的大型强子对撞机实验提供网络基础设施。

> OSG联盟成立于2005年，负责运营一套分布式高通量计算（DHTC）服务架构，以支持国家科学与工程界。组成该联盟的科研合作组织、校园机构、国家实验室和软件提供商，秉持共同承诺，通过这些服务推动开放科学。

OSG联盟并非法律实体，而是一群协调合作、朝着共同目标努力的利益相关方。需要设立一个名为“OSG-LHC”的战略领域，为OSG联盟作出贡献，以满足大型强子对撞机现有的网络基础设施需求，确保美国大型强子对撞机设施持续运行，并将其融入全球基础设施。

在国家级分布式高吞吐计算基础设施中，大型强子对撞机社区在分布式系统的规模和复杂性方面处于领先地位。通过参与更广泛的 OSG联盟，为大型强子对撞机社区开展的工作和积累的知识，其影响超越了大型强子对撞机和高能物理领域。在 IRIS-HEP 项目期间，OSG-LHC 团队始终与吞吐计算推进伙伴关系（PATh）保持密切合作。后者涵盖美国国家科学基金会的整个科学与工程社区，确保 OSG-LHC 开展的创新在全国范围内产生广泛影响。OSG-LHC 通过与多个领域共享相关基础设施，助力高亮度大型强子对撞机提升网络基础设施的可扩展性和可持续性。

过去 15 年来，开放科学网格联盟为高能物理界提供了稳定的软件和通用服务基础，以满足其需求。在软件世界瞬息万变的背景下，管理变化是一项重要工作。例如，OSG-LHC 主导了整个国家级分布式高吞吐量计算（dHTC）基础设施的转型，从小众的“网格安全基础设施”（GSI）基于身份的身份验证模式，转向采用业界标准的持有者令牌来实现能力授权。当 Globus 组织宣布将停止支持 Globus 工具包时，OSG-LHC 团队协助成立了网格社区论坛，并分叉该工具包，开发出网格社区工具包（GCT）。IRIS-HEP 成立后的前四年，一项重要成果是停止使用 GCT，并以更新的服务取而代之。

OSG-LHC 还与研究所的其他部分开展协作。例如，通过与设施研发领域的互动，OSG-LHC 开始将容器作为软件分发的“一等公民”；DOMA 和分析系统小组都使用 OSG-LHC 的容器注册表；DOMA 在 XRootD 软件中实现持有者令牌或 HTTP-TPC 的工作，也由 OSG-LHC 进行分发。因此，软件不仅从开发人员流向各个社区，研究所内部的构想也会影响 OSG-LHC 的工作方式。管理完整的软件生命周期是任何分布式持续集成的关键组成部分，也是 OSG-LHC 未来将继续发挥的重要作用。

具体挑战与机遇

容器原生设施的兴起 以容器为中心（“云原生”）的计算设施代表了站点运行方式以及向大型强子对撞机实验提供算力方式的一次世代变革；网络基础设施的快速变化概述见第 5.5 节。
OSG-LHC 在以集成良好的软件包形式提供服务方面积累了丰富经验，这些软件包采用操作系统的默认打包格式发布。历史上，大多数部署分布式服务的站点都采用这种理想的机制。以容器为中心的站点（大多部署在 Kubernetes 之上）更倾向于以容器形式交付服务，不受打包方式甚至容器操作系统的限制，并使用更高层次的服务编排语言来规定服务的部署方式。OSG-LHC 已开始采用这些格式交付服务，但仍有进一步发展的空间；例如，容器可以让服务在主机上无需超级用户权限即可交付，而容器镜像仓库则能够每天扫描 OSG-LHC 容器，检查已知的安全漏洞。

并非所有站点都能均衡采用较新的技术。网络基础设施领域存在需求——这并非针对任何特定实验——即围绕 Kubernetes 社区开展知识建设，包括培训与劳动力发展。

硬件资源日益多样化 大型强子对撞机社区长期受益于相对同质化的资源——在十多年时间里，其所有承诺资源均为配备 2GB 内存的 x86 核心。随着图形处理器的出现，这种情况开始缓慢改变（尽管其速度受到大规模图形处理器工作流匮乏的限制）。随着更多基于 ARM 的服务器进入市场，并且相较于基于 x86 的容量更具竞争力，资源异构化可能会进一步加速。

与高性能计算、机器学习和非 WLCG 资源的集成 贯穿大型强子对撞机发展历程的一个共同特点是，其最低硬件需求一直通过专用资源得到满足。在第2轮运行和第3轮运行期间，大量使用了来自 WLCG 之外的额外高性能计算资源，但这些资源从未成为科学计划的关键路径。对于高亮度大型强子对撞机，为了在预计预算持平的情况下满足需求，这些非 WLCG 资源将变得不可或缺。作为与实验无关的计算基础设施，OSG-LHC 有机会帮助将美国国家科学基金会的领导级资源和 ACCESS 分配的资源整合到各实验的计算基础设施中。

预计高亮度大型强子对撞机将需要一种新型资源和服务：机器学习推理服务。用户长期以来一直在分析中使用推断，但预计模型的复杂性将在未来几年迅速增加。与其试图在大型强子对撞机专用设施内提供充足的资源，不如整合国家级推理投资，为社区创造价值。

运行生产服务 与其他包含处于软件开发生命周期不同阶段项目的战略领域不同，OSG-LHC 的宗旨是运行、维护并发展生产服务。OSG-LHC 必须确保 OSG联盟的服务体系持续运行，并为美国大型强子对撞机运行计划创造价值。这涵盖生命周期的所有环节，包括弃用和淘汰——例如，OSG-LHC 将随着 Enterprise Linux 7 于2024年6月终止支持，退役 OSG 3.6软件发行系列。OSG-LHC 将帮助社区从当前的网络基础设施过渡到高亮度大型强子对撞机所需的网络基础设施。

当前方法与发展路线图

拓展服务交付
资助方案：中等、高
描述：目前，服务以软件包的形式交付，适用于 WLCG 上的标准平台（Enterprise Linux 7、8，或更新版本，运行于 x86架构）。随着社区迈向高亮度大型强子对撞机，需求将变得更加多样化（包括 ARM服务器，以及未来五年内作为美国国家科学基金会协调的网络基础设施的一部分提供的高性能计算平台），并需要采用其他交付机制（包括容器镜像和 Helm 图表等服务打包形式）。

当前及未来潜在活动：

- 支持异构架构：改进现有的软件编译版本和存储库，使其也支持包括 ARM 在内的非 x86 架构。
- 容器原生服务交付：除单个软件包外，为 Kubernetes 等较新的技术平台创建并维护服务描述仓库。与社区合作，制定并实施最佳实践，例如降低运行中容器内的权限。
- 高性能计算集成：OSG-LHC 已开发出多种将资源集成到 OSG服务架构中的机制。其中包括“托管计算元素”，通过 SSH连接集成计算资源；还包括支持使用非特权容器的 XRootD 端点，从而访问高性能计算中心的存储资源。
- 托管研究所容器镜像：研究所的其他领域会以容器镜像的形式产出软件。OSG-LHC 与“保护开放且可信的研究基础设施和应用生态系统”（SOTERIA）项目密切合作，为 IRIS-HEP 镜像提供一个以国家网络基础设施为重点的托管环境。

维护OSG服务体系
资助方案：低、中、高
描述：通过 OSG-LHC，开放科学网格联盟维护着对美国大型强子对撞机设施的运行及其融入全球网络基础设施至关重要的服务。共享服务包括资源使用核算、端点注册和服务状态监控。

当前及未来潜在活动：

- 软件打包：作为 OSG-LHC 对联盟所作贡献的一部分，OSG 软件团队维护着一套经过筛选的软件栈，供各设施用于计算入口点（CE）、存储端点和工作节点运行时客户端等服务。
- 资源与服务注册：OSG-LHC 维护 OSG联盟服务的权威清单，并记录这些服务与管理员的关联（这对于通信和安全响应必不可少）。我们的目标是与基于 CILogon 的单点登录（SSO）集成，确保管理员可以使用本地凭证登录基础设施。同样的

机制也可以扩展，以帮助简化新分析设施的工作流，以及其他服务（例如面向 ATLAS 分析用户的容器注册表）的工作流。

- 国际网络基础设施集成：设施必须向 WLCG 报告使用情况，并报告监测结果，以确保美国大型强子对撞机组织履行其承诺。OSG-LHC 管理核算和监测服务，并确保这些服务适应 WLCG 的变化。

运营网络安全

资助方案：低、中、高

描述：与任何网络基础设施一样，大型强子对撞机设施、OSG服务架构和用户群体都是黑客持续攻击的目标。OSG安全团队为运营安全提供工作量，负责安全演练和政策制定、应对威胁，以及扫描服务中的漏洞。

当前及未来潜在活动：

- 与全球网络安全团队协调：与数据传输一样，要实现正常运行的网络安全，就需要与其他基础设施互操作。OSG-LHC网络安全团队是连接美国大型强子对撞机工作与 EGI、欧洲核子研究中心及 WLCG 安全团队的桥梁。

- 改进对软件制品和基于容器的服务的监测：许多安全控制措施是在服务由部署在物理主机上的软件包构成时设计的。然而，大多数服务都运行在容器中，且具有临时性——这意味着除非将日志保留在中央日志服务中，否则日志很可能会丢失。需要采用安全控制措施并更新政策，为各设施提供有关类似方法的指导。

网络监测

资助方案：中等、高

描述：无论是进行大规模数据传输，还是向使用者传送流式事件，网络性能对大型强子对撞机社区都至关重要。OSG-LHC网络监测领域致力于开发和运行相关技术，以监测网络性能并了解应用层面的网络使用模式。

当前及未来潜在活动：

- 数据包监测：过去，网络运营人员很难了解大型强子对撞机社区对其网络的使用情况，这使长期规划更加困难。通常，大型强子对撞机站点之间的流量都会被标记为“大型强子对撞机”，而不管这些流量是否确实与大型强子对撞机有关（而非其他实验），也不区分用户流量与生产环境流量，或高优先级与低优先级流量。网络监测团队正努力让传输服务为数据包头添加注释，以便网络提供商获得更丰富的元数据。
- *WLCG* 网络监控工作组的领导作用：网络也是一个需要保持国际社区步调一致的关键领域。目前，OSG-LHC 与其他机构共同领导 WLCG 网络监控工作组，非常有能力指导从现在到高亮度大型强子对撞机阶段的网络转型。

影响与成功标准

OSG-LHC 在研究所的战略领域中独树一帜，其首要目标是确保大型强子对撞机网络基础设施平稳运行，并提供符合既定服务级别协议的服务；这一时期的“成功”意味着为迈向高亮度大型强子对撞机时代制定运营路线图。然而，预期成果和里程碑并不局限于运营。例如，该领域将完成服务向 Kubernetes 的迁移，并开始支持仅使用 Kubernetes（或至少以 Kubernetes 为核心）的站点。目前，OSG-LHC 在 Kubernetes 上运行生产服务方面发挥着领导作用，我们预计这些新建和改造后的设施将高度依赖其专业知识。OSG-LHC

对于部署下一代网络监测，OSG-LHC 也至关重要，这将使网络提供商能够深入监测高亮度大型强子对撞机流量。

目前，OSG-LHC由一支团队组成，他们在过去15年里引领了OSG的发展演进。这意味着团队积累了丰富的经验，能够运行分布式高吞吐量计算服务结构，并且深入掌握当前系统的运行方式。它是未来任何研究所不可或缺的组成部分。若没有它，美国大型强子对撞机的运行项目就需要承担这些活动，而各实验分别实现解决方案，成本效益很可能不如采用统一方案。让OSG-LHC成为高亮度大型强子对撞机未来网络基础设施的一部分，将确保从现在到高亮度大型强子对撞机时代期间，运行工作能够顺利延续。

高亮度大型强子对撞机计算挑战的影响：OSG-LHC的影响主要体现在*G4*（可持续性）和*G2*（可扩展性）计算挑战上。OSG-LHC战略领域采取的做法是为更广泛的OSG联盟作出贡献，从而通过在美国国家科学基金会的科学与工程领域之间共享通用层，提升网络基础设施的可持续性。我们认为这会带来互惠互利：OSG-LHC将使用由多个项目共同贡献的共享资源，而其他项目则能受益于大型强子对撞机／高亮度大型强子对撞机社区独特的可扩展性经验。OSG-LHC将为高亮度大型强子对撞机提供基础设施，因此有责任确保网络基础设施能够满足高亮度大型强子对撞机的可扩展性目标。

成功标准 - 里程碑：

D.1. 在下一次数据挑战活动中使用网络流量监控；参见第6.2节。**2024年3月**D.2. 在下一次数据挑战活动中成功使用令牌进行数据传输（与 DOMA 联合开展）。**2024年3月**D.3. 随着 RHEL7 停止支持，淘汰 OSG 3.6。**2024年7月**D.4. 在第3轮运行结束时，移除 OSG服务架构中对 GSI / X.509 安全机制的最后要求和相关用法。**2026年1月**

成功标准 - 指标：

M.1. 达成约定服务级别协议的关键 OSG-LHC 服务的百分比。目标是所有服务级别协议均达标，按季度衡量。

M.2. 在 OSG-LHC 容器镜像仓库中托管的 IRIS-HEP 和大型强子对撞机容器映像数量。目标是稳步增加，按季度测量。

5.7 培训与人才队伍发展

人才是软件成功的关键。社区目前正在进行硬件升级，并为高亮度大型强子对撞机时代做准备。该时代将于本十年末开始 采集数据，之后至少还将持续采集十年。来自不同学科和实验、跨越数代的人们携手合作，将成为可持续软件赖以发展的关键基础。

具体挑战与机遇

高能物理领域对软件相关活动的培训支持历来不均衡。尽管大多数大学确实开设了一些相关的计算机科学和软件工程课程，许多大学目前也开设了“数据科学”入门课程，但许多高能物理研究生和博士后并不需要将这些课程作为课程体系的一部分。随着学生进入研究生培训的研究阶段，许多人意识到此类课程的价值，但此时已经不太容易再修读这些课程。无论是针对高能物理实验，还是针对整个高能物理领域，都不存在面向新入学学生的“标准”建议。一些大学正在制定面向科学、技术、工程和数学培训的课程体系，或开设基础数据科学和软件培训的“证书”项目，但这些项目远未普及。因此，研究生和博士后群体历来拥有多样化的相关技能。

为应对这一问题，IRIS-HEP 五年前与 HSF 合作制定了社区愿景（图11），提出了一系列培训活动的递进路径；如果由社区加以实施，将培养新一代具备软件能力的科学家。其最终目标是今天就投资于年轻的学生和博士后，使他们成长为在高亮度大型强子对撞机时代引领研究议程的教职领导者。IRIS-HEP 一直与社区合作，推动这一愿景的实施。可持续的软件培训框架将成为 IRIS-HEP 留给社区的重要遗产，并使社区能够在高亮度大型强子对撞机时代取得最大成功。

当前方法与发展路线图

基础课程体系： 过去几年中，HSF 培训小组已开展合作，实施了一套完整的基础课程体系（图11中的最低阶），其水平适合高能物理学生。该课程体系包括由 The Carpentries 开发的材料，以及针对高能物理初学者量身定制的其他培训模块。借助这一课程体系，IRIS-HEP 软件培训小组及其合作者已组织了30多场培训活动，为1500多名学生和博士后提供了培训。这些材料还被 DUNE 实验用于软件培训活动，并应用于 USCMS PURSUE 暑期学生项目，该项目 [61] 侧重于扩大参与。由50多名积极投入的教育者组成的社区推动下，这些培训模块具有开源和合作性质，涵盖了从扎实的基础软件技能到图形处理器上的机器学习等进阶主题。鉴于社区每年都有数百名新成员加入，可持续性一直是这一方法的核心。GitHub 等不同工具和平台确保了技术延续性，促进了合作，并培育了开发可复现、可复用软件的意识。为确保基础软件课程体系得到足够频繁的讲授，以便大多数学生能在研究生涯早期接受培训，相关方面投入了大量工作。 [62],

按照 The Carpentries 的方法，每个培训模块都对应一个培训网页，其中包含详尽的说明、要点摘要和练习，让培训更具互动性。我们所有研讨会的录像均可观看，其中若干课程还配有专门面向个人学习者的视频。截至2022年，基础课程体系已被视为完成，并由社区投入生产环境使用。一套面向更进阶主题、可重复使用的培训模块也已开始推出。（示例见图12，完整内容请参阅 HSF 培训中心 [63]。）

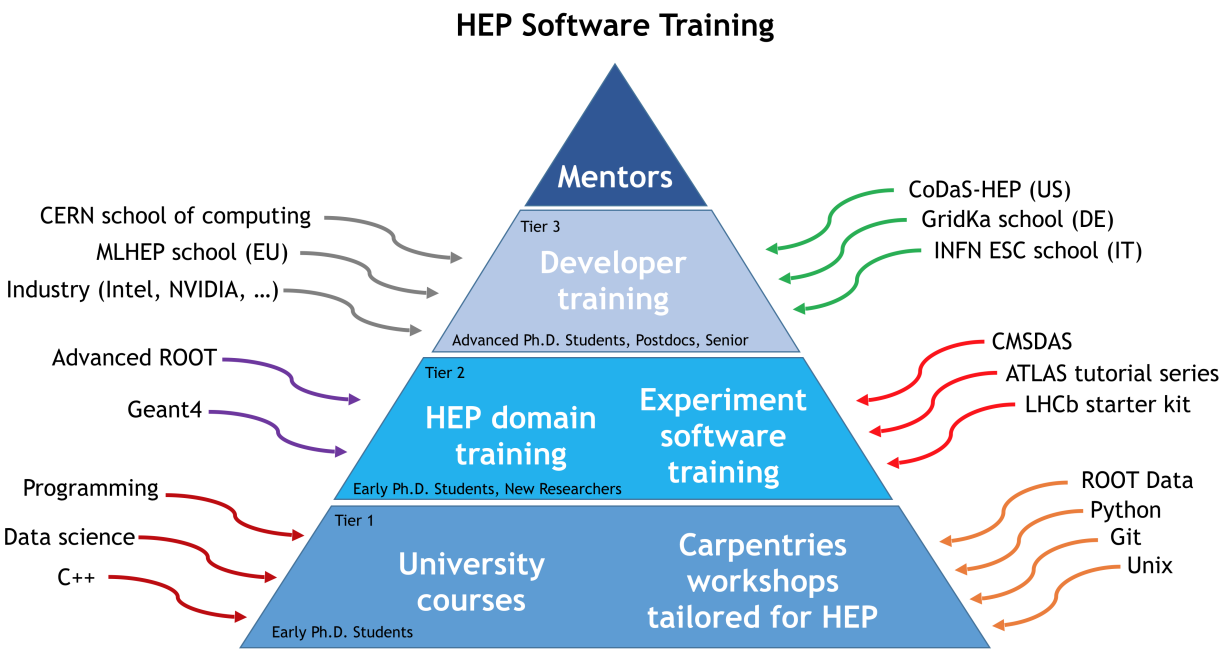


图11：HSF 对粒子物理学软件培训的愿景：从普遍必需的基础软件技能，到高级开发人员培训，并最终通过导师指导，帮助学员为科研软件项目作出贡献。

专家级研讨会与指导： 对于主要参与小组数据分析的物理学家而言，基础培训通常已经足够；但许多社区成员会成为网络基础设施专业人员，并参与各自实验的大规模软件开发活动。鉴于实验的时间跨度很长，传授可持续软件开发最佳实践至关重要。此外，当职业发展促使人们转向工业界或其他学术研究领域时，更进阶的软件和数据科学技能往往也会成为重要优势。为网络基础设施专业人员介绍不同的职业发展路径，将是维持软件专家需求的重要一环。

一些更高级培训的内容已经付诸实践。例如，面向高能物理计算与数据科学（CoDaS-HEP）的强化型为期一周暑期学校于2017年创办，旨在教授更高级的技能，例如并行编程、数据科学工具与技术、机器学习技术与方法、代码性能评估，以及协作使用 Git 和 GitHub。该暑期学校包括讲座和实践课程，汇聚了来自不同高能物理实验（不仅限于大型强子对撞机实验）的青年科学家，以及来自高能物理领域内外的专家。通过将兴趣相近的参与者集中到同一地点共度一周，暑期学校也营造了“同届学员”的体验。该暑期学校最初是较早一项由美国国家科学基金会资助的项目（PHY-1521042）的一部分，参与者支持经费也由美国国家科学基金会的 CyberTraining 奖项（OAC-1829729）提供。不过，许多讲师通常来自 IRIS-HEP 资助的人员。受新冠肺炎影响，暑期学校在2020年和2021年停办，2022年恢复举办，并预计今后每年举办。

最后需要指出，许多高级概念，例如架构设计决策，无法仅靠教学轻易传授，而必须在.....的指导下刻意练习

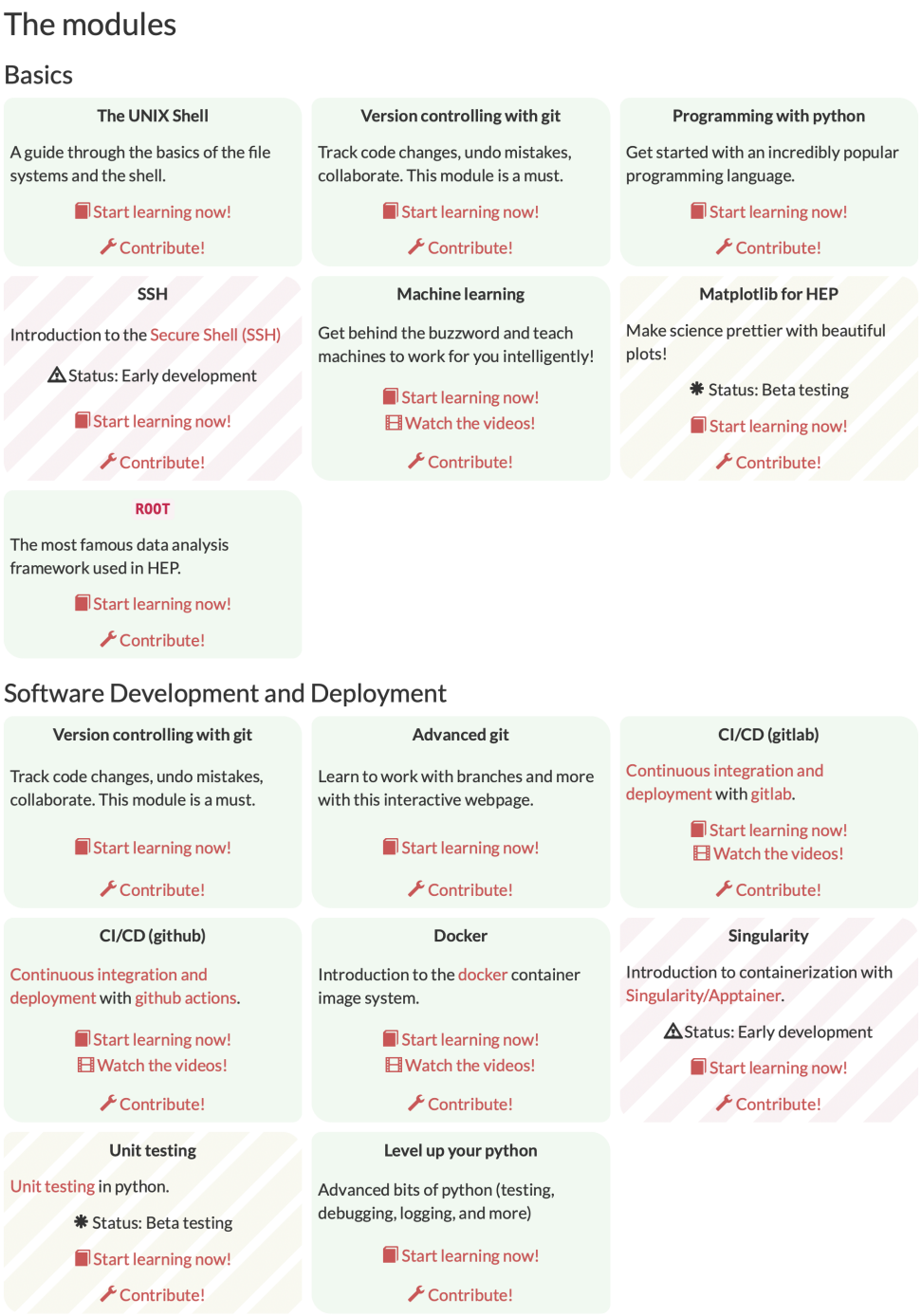


图12：HSF 培训课程体系中的部分内容。完整内容请访问 HSF 培训中心网站。 [63]

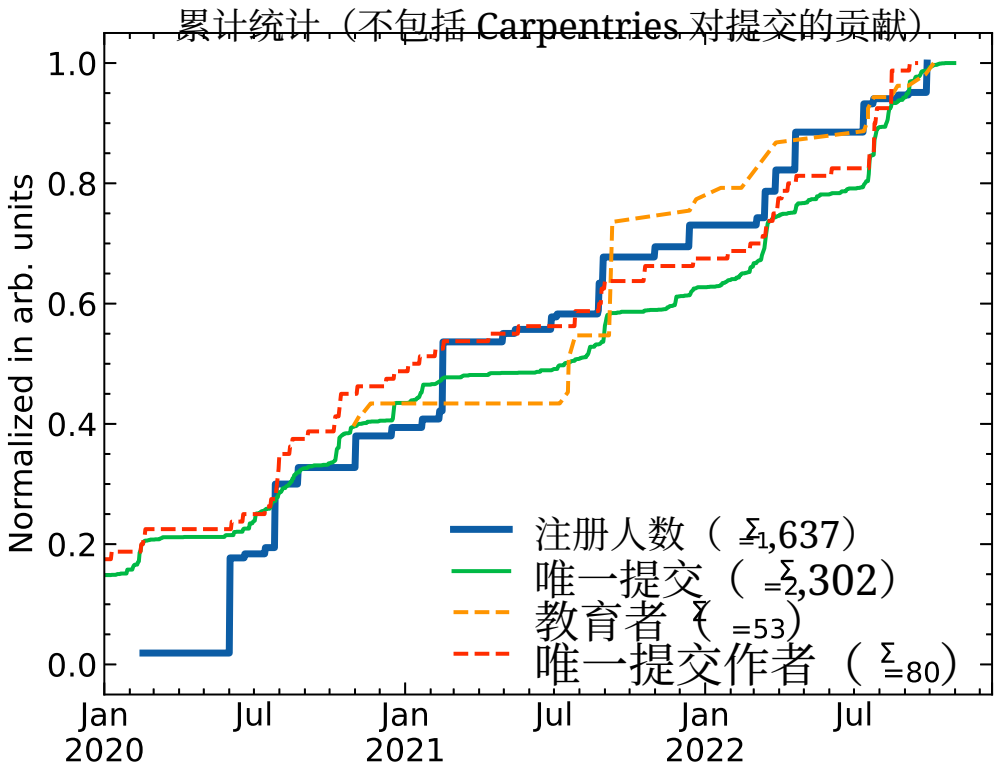


图 13：壮大培训小组。图中叠加了四种不同的累计指标：活动的注册人数、代码仓库中的唯一提交数（不包括对 The Carpentries 开发的框架所做的提交）、在 HSF 培训社区注册的教育者人数，以及唯一提交作者数（同样不包括归于 The Carpentries 的提交）。每项指标的绝对值均显示在图例中。



图14：CoDaS-HEP 2022 暑期学校的参与者。

在导师的指导下，他们能够学习开发供他人使用的科研软件。为此，IRIS-HEP Fellows 项目应运而生。研究员奖学金提供密集且个性化的开发人员培训。在为期数月的项目期间，研究员会开展自己选择的项目，并由该领域的专家全程指导。通过参与高能物理软件项目，研究员能够亲身体验协作软件开发，并将所学的软件知识付诸实践。自2019年以来，已颁发逾100项研究员奖学金。由美国国家科学基金会资助的 IRIS-HEP Fellows 项目成效显著，也吸引了私人基金会和业界提供额外资助，以扩大项目规模。例如，2022年为来自乌克兰的20名学生提供了支持；自2020年以来，Simon 研究所每年为约5至8名国际研究员提供支持。我们已经看到，一些 CoDaS-HEP 参与者和研究员在职业生涯不断发展的同时，仍继续投身于高能物理科研软件的开发。

IRIS-HEP 下一阶段的计划：当前的 IRIS-HEP 项目在推进图11所示的人才培养渠道愿景方面发挥了重要作用。然而，这一愿景尚未完全实现：在高亮度大型强子对撞机时代，我们希望每一位加入实验的学生都能熟练掌握基本的软件技能，并且许多人具备创建和演进高能物理科研软件所需的更高级软件技能。此外，现有的培训进阶路径将得到广泛认可，并建立可持续机制。例如，参加过培训活动的“学生”可能会作为下一届的讲师回归。研究员计划将被广泛认可为学生的“入门途径”，不仅帮助他们培养技能，还能让他们参与实验和社区的科研软件活动。最后，我们未来几年培训的学生将成为高亮度大型强子对撞机时代的教员、科研人员和科研软件工程师。

5.8 LHCb 与 LHC 第5轮运行

最后，我们介绍 IRIS-HEP 内部围绕 LHCb 开展持续协作的其他战略利益。LHCb 是另一个由美国支持、主要资助方为美国国家科学基金会的大型强子对撞机实验。LHCb 的升级计划与 ATLAS 和 CMS 不同步：其重大升级已在大型强子对撞机第三轮运行期间完成，并计划在 LHC 第 5 轮运行期间进行下一轮升级。例如，在 LHC 第2轮和第3轮运行之间，LHCb 进行了一次重大升级：移除了其硬件触发器，如今一级触发器（Hlt1）可处理 30 MHz 的束流交叉，对应约 5 TB/s 的数据。在第4轮运行期间，扩展软件基础设施的多个方面对 LHCb 将十分重要；而在第5轮运行期间，这将至关重要，并可能为高亮度大型强子对撞机时代其他实验所需的软件提供模型或起点。

从第3轮运行起，Hlt1便在图形处理器上运行，每个图形处理器上运行一个 Allen 实例 [64]。目前，每个图形处理器都会从事件构建单元（一台 x86 CPU服务器）接收完整事件，并同时处理数千个事件。探测器原始数据会被复制到图形处理器上，完整的 Hlt1 序列也在图形处理器上处理；只有事例选择决策以及用于事例选择的对象（例如径迹和主顶点）会被复制回中央处理器。因此，两个 x86服务器集群（Hlt1集群和 Hlt2集群）之间的数据传输速率降低了 30–60 倍。Allen 在生产环境中运行于 Gaudi 内部。Allen 内置的原生监控软件具有与 Gaudi 类似的接口，因此汇总后的直方图会传回主机，最终交由 Gaudi 处理。未来，LHCb 计划也将 Allen 用于二级触发器，这需要开展额外工作。Allen 的 x86编译版本可在 WLCG 上运行。在这种情况下，事件循环由 Gaudi 驱动，Allen 每次处理一个事件。虽然 Allen 并非在图形处理器上完全实现重建和事例选择的唯一方案，但它证明了这种做法确实可行。其他实验或许可以考虑采用 Allen，或将其中一些功能集成到自己的图形处理器软件中。随着图形处理器成为 WLCG 的一部分，构建基础设施以便 Allen 高效利用这些资源将十分重要。

其运行环境将与在线系统截然不同，因此，使用异构资源的新基础设施需要专门投入开发工作。这套基础设施也可以设计为供所有使用 WLCG 资源的实验共同使用。

LHCb 开发了 PyConf，使 Gaudi 应用程序的配置更加安全、简洁且易于调试。它最初是作为一个通用的 Python 风格函数式框架开发的，用于配置复杂的 CPU 工作流，但同样适用于 GPU 工作流。目前，该软件包专用于 LHCb 版本的 Gaudi，但应当可以将其推广到 Gaudi 的其他用户（例如 ATLAS）。这可能是 IRIS-HEP 的一项合适工作。

最近，LHCb 使用模拟的 LHCb Run 3 数据证明，端到端深度神经网络（DNN）在寻找主顶点（PVs）时能够提供更高的效率**和** 更低的假阳性率。它以径迹参数为输入，并生成“目标直方图”，由一个简单的启发式算法扫描这些直方图，以提取初级顶点位置和估计的纵向分辨率。训练了两个彼此独立的 DNN，随后将它们连接起来，并在中间层加入额外通道，使整个算法能够学习更多细节。第一个 DNN 由全连接层组成。它模拟启发式核密度估计器（KDE）的计算过程；核密度估计器是一种一维表示，用于表示径迹彼此相交的位置。第二个 DNN 是卷积神经网络。它以核密度估计为输入，并生成目标直方图。多个卷积神经网络架构产生了在统计上无法区分的结果。首选架构类似于用于医疗应用中图像分割的 U-Net 架构 [65]。核密度估计到直方图算法已进行调整，以便从模拟的 ATLAS 数据中寻找初级顶点，初步结果很有希望。将 LHCb 算法扩展到寻找次级顶点，并了解如何最好地调整该算法以供 ATLAS 和 CMS 使用，是 IRIS-HEP 的一个有前景方向。

LHCb 已在其 CPU 软件栈中部署了较旧版本的核密度估计到直方图算法。目前，完整的端到端算法正在部署到 Allen 中。NVIDIA 最新的图形处理器除了 CUDA 核心外，还配备了张量核心。张量核心针对矩阵乘法进行了优化，而矩阵乘法是深度神经网络推理引擎的典型特征。在 RTX-A6000 上，张量核心的标称性能为 310 万亿次浮点运算每秒，而 CUDA 核心的单精度性能为 39 万亿次浮点运算每秒。Allen 尚未使用张量核心。如果能够利用张量核心运行端到端推理引擎，就能更充分地利用硅芯片。未来的研究方向之一是探究不同的深度神经网络架构如何最有效地利用张量核心。由于许多架构都能达到相同的物理性能，在我们（高能物理计算领域）思考如何用深度神经网络取代其他类型的启发式算法时，找出性价比最高的架构将十分重要。

用深度神经网络取代启发式初级顶点搜寻算法后，自然的下一步是开发深度神经网络来取代卡尔曼滤波器的部分功能。简化来说，卡尔曼滤波器有三个功能：(i) 描述轨迹；(ii) 描述轨迹上的协方差矩阵；(iii) 提供质量指标，用于说明构成轨迹的击中与投影轨迹的匹配程度。正如利用领域专业知识将初级顶点搜寻算法拆分为两个步骤一样，卡尔曼滤波器问题也需要拆分成若干步骤，分别处理，然后再将各部分重新组合起来。深度神经网络无需比启发式算法实现更好的物理性能，而是需要通过更好地利用图形处理器中的硅芯片，更快地执行。随着高亮度大型强子对撞机运行期间每个事件的径迹数增加，这一点将变得愈发重要。尽管具体细节会因实验而异，但这是另一个跨实验合作有望取得重大进展的领域。

本节所述的工作与第 5.2 节和第 5.3 节所述的工作高度重叠。本节讨论的 PyConf 工作或有助于解决第 5.5 节所述的 WLCG 硬件资源日益多样化带来的一些问题。

6 高亮度大型强子对撞机的重大挑战

从 2020年 起，IRIS-HEP 在研究所内引入了“重大挑战”这一概念，旨在围绕研究所整体愿景中的长期、大规模目标，聚焦一个或多个领域。重大挑战与较为传统的里程碑或交付成果不同，其特点在于规模更大（通常需要跨领域团队协同合作）、周期以多年计，而且实施方案可能无法预先完全确定。这些挑战通过一系列难度逐步提升、由社区协调开展的练习来推进。目前确定的重大挑战如下：

- **分析大挑战（AGC）**：AGC旨在使用 IRIS-HEP 内开发的一系列工具、设施和服务作为范例，开展规模和复杂程度符合高亮度大型强子对撞机预期的现实分析。AGC团队协调举办年度研讨会，展示当前工作相对于目标的进展，并视需要更新愿景和方法。

- **数据大挑战（DGC）**：IRIS-HEP 的 DGC 通过一系列与 WLCG 协调开展的全球数据挑战来实现。这些每两年举办一次的挑战汇聚全球整个社区，展示聚合数据传输速率，并将当前可实现的水平与高亮度大型强子对撞机路线图进行比较。这些挑战也为将 DOMA 正在研发的新技术集成到生产基础设施中提供了机会。

- **培训大挑战（TGC）**：要应对高亮度大型强子对撞机带来的挑战，我们需要一支具备广泛软件知识的人才队伍，涵盖从基础编程技能到高度专业化培训的各个方面。TGC 制定路线图，以高效扩大培训活动的规模，并提供适当培训，从而培养能够实现高亮度大型强子对撞机科学研究的具备软件技能的人才队伍。

研究所内并非所有活动都适合采用重大挑战的形式。例如，各实验的数据重建和径迹重建活动均由各自独立协调；考虑到实验时间表和生产代码存在差异，这些活动并不适合联合演练。相反，通常通过相对性能的提升以及向实验生产框架交付成果来跟踪进展。

6.1 分析大挑战

> 物理分析流水线会用到大量工具和服务——分析大挑战提供必要的端到端测试，以全面涵盖工作流的复杂性，确保整个技术栈为高亮度大型强子对撞机做好准备。

与当今大型强子对撞机实验所处的环境相比，高亮度大型强子对撞机将带来更具挑战性的分析环境。数据量将增加 $\sim$100 倍；为了达到预期的物理探测能力，分析人员需要采用第 3.3 节所述的新技术和方法。如今可以在笔记本电脑上处理、并存储于本地文件系统中的事件数据，在高亮度大型强子对撞机时代则需要借助专用设施处理，并利用大规模计算硬件、先进的数据交付服务，以及机器学习训练和推理环境。正如第5.1节所述，目前正在积极开发新的工具和服务，以应对这些挑战。

即使所需的所有工具和服务都已各自具备，也只有将它们集成到经过调优、可在分析设施上运行的一致技术栈中，才能充分发挥其潜力。分析

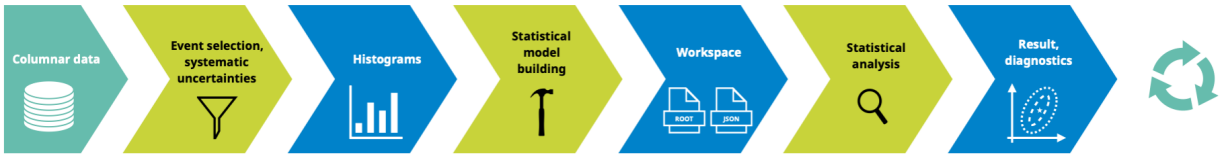


图15：AGC的数据分析流水线。这是图8中分析系统流水线的简化视图。

大挑战（AGC）旨在通过一系列逐步升级的集成演练，最终全面展示高亮度大型强子对撞机的分析工作及其复杂性。AGC 汇集来自 AS、DOMA 和设施研发领域（以及其他领域）的工具，并定义了能够代表高亮度大型强子对撞机需求的物理分析任务。这些任务必须通过端到端分析流水线来完成，要求所有组成部分作为一个系统协同高效运作。图15展示了分析的各个步骤，以及由此延伸出的软件栈组件。

AGC不仅连接研究所内部的领域，也与周边更广阔的生态系统相连；例如，AGC使用的Coffea分析框架最初由费米国家加速器实验室的科学家开发。在IRIS-HEP内部和外部构建的工具，旨在作为小型可插拔库和工具链中的步骤，而非一个框架。AGC利用这一点，在其他工具已经开发完成的地方直接引入这些工具。

IRIS-HEP的目标之一是帮助推动科学民主化：任何人，无论是否隶属于某个实验，都可以使用自己选择的工具和工作流重新实现分析流水线。这使AGC能够成为更广泛社区的中心汇聚点，专注于高能物理中的终端用户分析。所有AGC演示和工作手册均可公开访问；我们还努力让尽可能多的组件基于公开可用的开放数据，以便任何人都能试用。同时，基于现实情况，也需要开发一些使用实验数据运行的演示。

AGC将以年度三天研讨会的形式开展；每场研讨会都将由AGC负责人设定一系列技术能力和规模目标。各项练习将循序渐进，在前一年的规模、复杂度和真实性基础上不断提升。典型的研讨会安排为：第一天由IRIS-HEP团队进行演示，第二天开展教程（如需讨论专有分析技术，则分为ATLAS和CMS专题环节），最后一天进行规划，制定并更新下一场研讨会的目标。

在IRIS-HEP第一阶段取得成功之后，AGC有机会将这些练习延续至高亮度大型强子对撞机启动之初。我们预计，AGC将继续为协同工作提供平台，并组织不同领域、计划和其他实体（例如ROOT项目、CERN信息技术部门和Coffea）之间的信息交流。AGC将作为一项集成练习和最新进展的测试平台，引领分析方法迈入高亮度大型强子对撞机时代。

AGC现有工作

在 IRIS-HEP 的第一阶段，AGC 选取了一项相对简单的物理分析任务作为先导分析：基于 CMS 开放数据进行 $t\bar{t}$ 截面测量。IRIS-HEP 实施了高度依托 Python 数据科学生态系统的分析流水线（其中包括并结合了由分析系统领域开发的分析工具）。这些流水线采用了 ServiceX 等新颖的数据交付方式，并利用了 Coffea-Casa 等分析设施中的新服务。从欧洲核子研究中心集中提供的开放数据样本出发，AGC 为这项分析实现了物理学家开展数据分析时所需的通用工作流环节：数据提取与筛选、对象标定与系统不确定性评估、可观测量构建、直方图化、统计模型构建与推断，以及可视化

以研究并传播分析细节和结果。

IRIS-HEP通过专门举办的年度AGC研讨会 [66, 67] 以及在相关高能物理会议上的投稿，证明了其分析系统方法的可行性，例如高能物理国际会议（ICHEP 2022） [68] 和物理研究高级计算与分析技术国际研讨会（ACAT 2022） [69]。

专门展示与AGC人才培养渠道相关工具和工作流的年度AGC研讨会包括：

- **AGC工具2021年研讨会I**：首届AGC研讨会旨在向终端用户介绍各种工具和服务，以及它们作为AGC分析流水线组成部分的作用。这些工具由粒子物理学界开发，服务于粒子物理学界，并基于相关网络基础设施进行部署，以便大规模运行。研讨会议程还包括面向特定实验的专题环节，以收集CMS和ATLAS分析人员对流水线和部署的早期反馈。

- **AGC工具2022年研讨会II**：第二届AGC研讨会议程安排了基于AGC工具的详细动手教程，并为参与者提供了在SSL提供的专用分析设施上参与所有教程的机会（内布拉斯加大学林肯分校和芝加哥大学的Coffea-Casa分析设施）。

这些论坛使团队能够与社区讨论 AGC 中制定的物理分析工作流愿景，并展示人才培养渠道在实际中的应用。在各种分析设施中对人才培养渠道进行大规模测试，暴露出性能瓶颈和易用性问题，之后已针对这些问题进行改进。社区还贡献了不同的分析管线实现，包括使用 ROOT 的 RDataFrame 的版本，使用户能够比较可用于物理分析的不同方法。

AGC下一阶段

我们发现，通过年度研讨会展示高亮度大型强子对撞机分析在规模、复杂性和真实性方面不断提升，是实现 AGC 目标的有效方式，因此计划今后继续举办此类研讨会。本小节概述 AGC 计划如何与内部各个领域协同，随后介绍 IRIS-HEP 下一阶段的计划和目标。

鉴于大型强子对撞机社区涵盖的物理分析种类繁多，在 IRIS-HEP 下一阶段，我们选取了两项高亮度大型强子对撞机分析作为旗舰示例，以补充当前的探路者 $t\bar{t}$ 截面分析。

- **顶夸克质量**：预计在 $tt \rightarrow$ 轻子 +喷注道中进行顶夸克质量测量,¯需要极其庞大的分析数据集，因为该道存在显著的背景。这将作为一项**高数据量**分析，挑战系统在事例率方面的极限。

- **双希格斯搜索**：大型强子对撞机上的双希格斯分析计划探测希格斯自耦合；据信，只有高亮度大型强子对撞机数据集才能勉强达到探测这一耦合的要求。要最大限度地提高对希格斯三线性耦合的灵敏度，就需要采用最新的机器学习和统计技术；AS领域开发的软件旨在支持这些方法。这将作为一项**高复杂度**分析示例，把这些工具结合起来。

与分析系统的联系AGC 与分析系统（AS）领域之间存在许多深层联系，这一点并不令人意外；事实上，AS团队是 AGC练习工具的主要提供方。AGC研讨会期间的社区互动，证明是了解用户在分析工作中的体验的一种有效方式。基于这些经验以及整体愿景中尚未完成的事项，IRIS-HEP 下一阶段计划开展的工作主题包括：

• **处理系统不确定性**：在《分析生态系统研讨会 II》报告中，将分析人才培养渠道中系统不确定性的处理列为最终用户面临的首要痛点 [70]。AGC分析任务涵盖了所有相关类型的系统不确定性及其相关元数据处理，以探究相应的用户体验。顶夸克质量测量尤其是理想的研究环境：限制灵敏度的主要因素来自系统不确定性，而评估工作需要涉及多种不同类型的不确定性。

• **机器学习服务**：将机器学习集成到 AGC 框架中，是社区互动中经常提出的需求。机器学习在物理学分析中日益普遍，但用户往往不得不将机器学习训练拆分到单独的人才培养渠道中。AGC 可用于探索简化用户体验的工作流，包括确定设施应提供哪些服务来助力实现这一目标。

• **可微分分析**：可微分分析管线能够通过梯度下降实现端到端的分析优化，从而提升分析整体的物理探测能力。要实现这一目标，分析流水线的所有不同部分都必须支持计算并传递梯度信息。AGC 可用于跟踪具备所需技术能力的组件数量不断增加的进展，并在真实环境中测试相关功能。

与 DOMA 的联系 DOMA 团队在数据交付服务（能力）方面作出重要贡献，并在提升 AGC 所用设施的数据速率（容量）方面提供专业知识。下一阶段将重点关注以下主题：

• **数据交付**：数据提取和数据交付边缘服务 ServiceX 为人才培养渠道提供数据访问功能。用户可以按需筛选事件、为事件添加额外的列（例如 CMS NanoAOD），并将结果存放在设施中。下一阶段的目标工作流是允许用户从 NanoAOD 中选择列，利用所需的选择条件，在中心位置从 MiniAOD 文件中筛选事件并提取列，最后获取用于该选择的新列，并将其整合回现有的 NanoAOD 工作流。ATLAS 数据集也计划提供类似功能。

• **数据管理**：高亮度大型强子对撞机分析的一项关键能力，是能够就地操作、扩充和提取数据子集，而无需创建数据集的派生副本（大型强子对撞机上经常采用这种做法）。如第 5.4 节所述，Skyhook 项目的下一阶段将支持将分析人员使用的派生列数据（例如 NanoAOD 或 PHYSLITE 格式）与 ServiceX 提供的新生成列或从参考数据集派生的列（例如 MiniAOD 或 PHYS 格式）合并。

与设施研发的协作AGC成功的第三个关键组成部分，是研究现代网络基础设施方案，以便将这些服务组合成一个设施，并支持在多个地点复制该设施。AGC将与设施研发领域及费米国家加速器实验室、布鲁克海文国家实验室等其他设施密切合作，提供一个复杂的“内部”用例，以展示现代设施的需求。

• **Coffea-Casa 设施**：AGC 大量使用的原型设施是 Coffea-Casa 分析设施。该设施是 IRIS-HEP 的一项跨领域项目，旨在为用户带来从研发走向生产环境的新型交互范式。该设施用作测试平台，让最终用户能够以高亮度大型强子对撞机的数据速率执行分析。它采用一种方法，将现有设施（例如美国 LHC T2 站点）转变为可组合的系统，并以 Kubernetes 作为支撑技术。

• **规模**：我们将把 AGC 输入数据集扩展至 200 TB，以便在对网络基础设施具有实际意义的规模上测试分析流水线的 I/O 性能（这比目前常用于分析收尾阶段的数据集大约大 20 倍）。每场研讨会的一个环节是使用该输入数据集达到特定的处理时间目标。两场研讨会之间，AGC 将定期在各种合作方设施上开展基准测试，以确保在大规模且计算复杂度更高的情况下执行人才培养渠道时，不会出现性能退化。

• **机器学习服务**：AGC 将致力于整合分析社区所需的新兴功能和服务，例如让用户更便捷地使用机器学习（ML）。我们的目标是纳入机器学习推理服务器（现有示例之一是 SONIC [71]），该服务器基于 NVIDIA 的 Triton 推理服务器构建，可在用户应用程序中透明地访问高速、基于 GPU 的推理。我们还将扩展环境，纳入 MLFlow 等工具，以帮助跟踪用户的人工智能训练实验。在可能的情况下，重点将放在整合国家级人工智能资源，而非仅使用高能物理设施内部的资源。

AGC 目标 AGC 的年度研讨会形式使我们能够针对全面开展高亮度大型强子对撞机分析制定具体目标。若 IRIS-HEP 进入下一阶段，首届 AGC 研讨会可能于 2024年 举行；尽管整个阶段的工作量和规模目标已有共识，但在这一时间范围内准确规划新技术的引入顺序则更加困难。表 3 概述了 AGC 可能的目标和指标。

Year	目标
2024	• 为顶夸克质量和双希格斯测量定义分析任务。 • 在规模达到高亮度大型强子对撞机所需规模 20% 的数据集上完成高数据量分析，并在 1 小时内完成。 • 将机器学习推理服务与 AGC 集成。
2025	• 在规模达到高亮度大型强子对撞机所需规模 40% 的数据集上完成高数据量分析，并在 1 小时内完成。 • 演示 AOD 列提取工作流
2026	• 在规模达到高亮度大型强子对撞机所需规模 60% 的数据集上完成高数据量分析，并在 1 小时内完成。 • 演示完全可微分分析
2027	• 在规模达到高亮度大型强子对撞机所需规模 80% 的数据集上完成高数据量分析，并且在 1 小时内完成。
2028	• 在规模达到高亮度大型强子对撞机所需规模 100% 的数据集上完成高数据量分析，并且在 1 小时内完成。

表 3：AGC 五年期间按年份划分的目标。

6.2 数据重大挑战

数据挑战是全球社区为高亮度大型强子对撞机的数据速率准备网络基础设施的机制，也是 IRIS-HEP 为生产环境准备新技术的机制。

高亮度大型强子对撞机面临着数据组织、管理与访问方面的多重挑战。或许人们过于频繁地将高亮度大型强子对撞机的“数据问题”聚焦于数据的原始总量；然而，仅仅购买一定数量的硬盘是不够的。问题还包括数据传输速度——原始数据必须从探测器传输到分布式站点，从模拟站点传输到归档存储，并从缓冲区传输到高性能计算资源——以及数据管理。在协调分布式网络基础设施方面，数据传输速度是更棘手的问题，因为数据必须通过共享网络资源传输（这意味着需要与多个提供商协调并进行资源管理），而且所选技术栈必须能够与全球各地的设施互操作。

考虑到涉及的数据集，传输速度——即全球汇总的太比特每秒数——也是扩展方面的问题。高亮度大型强子对撞机社区需要**维持比基准方案高 20 倍的数据速率**，该基准方案由大型强子对撞机第三轮运行所设定。

简而言之，大型强子对撞机社区尚未为高亮度大型强子对撞机的数据速率做好准备，而准备工作并非只是在加速器启动前立即购买交换机和光纤。相反，正如第 5.4 节所述，这一领域需要一项稳健的研发计划，将新技术引入软件栈，并展示各组件已准备好满足高亮度大型强子对撞机的数据速率。

为促进全球研发工作的整合，并展现朝着高亮度大型强子对撞机最终目标所取得的进展，大型强子对撞机社区制定了数据重大挑战，其中包括一系列两年一度的数据移动演练。这些演练设定了全球持续数据移动目标，如表4所示。每次演练都有两个目标——“最低情景”和“灵活情景”。最低情景根据计算模型的输入参数推导而来，包括每年预期的事件数、每种事件格式的大小，以及数据集需要传输或处理的最少次数。灵活情景则基于大型强子对撞机的实际运行经验：数据传输往往是突发性的，并非全年均匀进行；我们可能需要将数据移动到高性能计算资源，以利用规模较大的限时资源分配；有时还需要多次传输数据以进行处理，从而应对软件错误。

Year	百分比 高亮度大型强子对撞机规模	最低情景 汇总目标（吉比特每秒）	灵活情景 聚合目标（吉比特每秒）
2021	10%	480	960
2023	30%	1,440	2,880
2025	60%	2,880	5,760
2027	100%	4,800	9,600

表4：提交给 WLCG 管理委员会的两年一次的数据挑战全球聚合目标， 2021 [17]月。

各实验的计算模型草案粗略划分了高亮度大型强子对撞机所需的数据在不同计算站点之间的分配；相关内容见表5。全球实验的计划没有预测到 Tier-2 级别，但美国大型强子对撞机项目也参与了与 ESNet 合作的网络容量规划工作 [18] ，该工作还得出结论：**一个典型的 Tier-2 站点需要 400 Gbps容量**才能满足高亮度大型强子对撞机的需求。

大型强子对撞机一级站点	高亮度大型强子对撞机网络需求（吉比特每秒） 最低情景	高亮度大型强子对撞机网络需求（吉比特每秒） 灵活情景
CA-TRIUMF	200	400
DE-KIT	600	1,200
ES-PIC	200	400
FR-CCIN2P3	570	1,140
IT-INFN-CNAF	60	1,380
KR-KISTI-GSDC	50	100
NDGF	140	280
NL-T1	180	360
NRC-KI-T1	120	240
UK-T1-RAL	610	1,220
RU-JINR-T1	200	400
US-T1-BNL	450	900
US-FNAL-CMS	800	1,600
（大西洋链路）	1,250	2,500
SUM	**4,810**	**9,620**

表5：为规划数据挑战演练，向 WLCG 管理委员会提交的各站点预期数据速率明细（ 2021 [17]年2月）。

DGC 现有工作

首次数据挑战 DC21 的目标是达到高亮度大型强子对撞机规模的 10%。这一目标与大型强子对撞机第三轮运行当前的生产规模相近，这意味着该挑战主要侧重于：(a) 构建运行本次及未来数据挑战所需的可复用基础设施；(b) 展示全球社区协作应对此类挑战的能力；(c) 在生产规模下验证新技术。

DC21 有两项重要的新技术：

- **HTTP-TPC**：大多数数据传输都采用基于 WebDAV 的 HTTP-TPC 协议。HTTP-TPC 是对 WebDAV 协议的一种约定解释，基于行业标准 HTTPS 构建。数据挑战结束后，各实验正式承诺在大型强子对撞机第3轮运行的生产环境中使用 HTTP-TPC；这标志着二十年来传输协议的首次升级，也是自大型强子对撞机第1轮运行开始以来唯一一次协议变更。以 HTTPS 为基础体现了更广泛行业的发展，并使大型强子对撞机社区能够**为未来走上可持续发展的道路**。

- **SRM/HTTP**：WLCG 使用的磁带／归档管理协议是存储资源管理（SRM）协议。SRM 使用一种类似 TLS 的专有传输层，并以 SOAP 作为 RPC 层；这两种技术在现代环境中都已不再广泛使用。此外，SRM 基于一种远程空间管理模型，而 WLCG 已经弃用该模型——目前只使用该协议的一小部分（磁带管理）。大型强子对撞机网络基础设施正在逐步淘汰这项走入死胡同的技术；第一步是在 DC21 期间实施的，当时没有在 GridFTP 之上叠加 SRM，而是使用了 HTTP-TPC。

DC21成功实现了所有目标。这项演练于2021年10月举行，使用了ATLAS和CMS在生产环境中采用的同一套Rucio / FTS软件栈，并达到了最低阶和灵活情景下的目标数据速率。

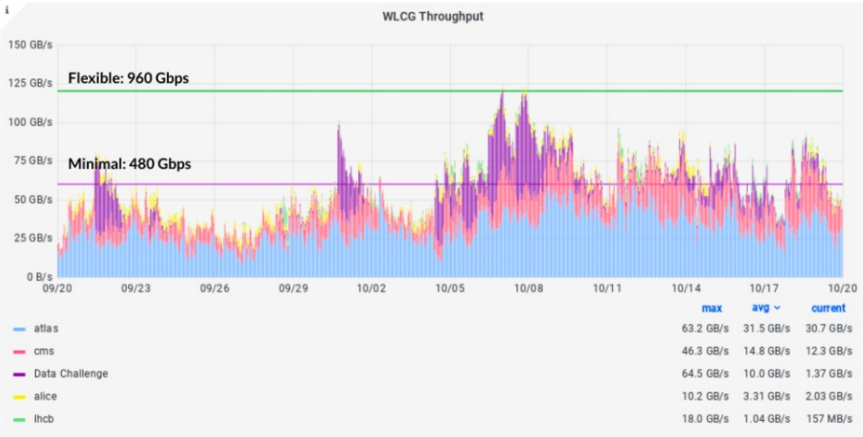


Figure 1 - Mock DC1 22/09/2021; Mock DC2 01/10/2021; Network Challenge (DC) 04-10/10/2021; Tape Challenge 11-19/10/2021.

图16：DC21期间成功传输所达到的每小时平均数据速率。图表转载自 [72]处的报告。

DGC下一阶段

在IRIS-HEP的下一阶段，我们将参与接下来的四次数据挑战。下面概述了下一次挑战——DC23（由于日程冲突，目前计划于2024年3月举行）——以及后续演练的已知计划。

DC23：DC21验证了通过开展协调一致的数据移动演练来应对数据重大挑战这一方法。下一次数据挑战 DC23 难度更高，既包含重要的“新技术”组成部分，也面临严峻的规模挑战：目标数据速率从高亮度大型强子对撞机规模的 10% 提高到 30%（这是 DGC计划中相对增幅最大的一次）。DC23计划采用的新技术和能力包括：

- 动态设计网络路径：利用 ESNet 提供的技术，展示将特定流量迁移到动态设计路径的能力，并将流量类型与特定路径关联，从而为未来实现差异化处理奠定基础。
- 新的授权范式：美国大型强子对撞机计算设施已从基于身份映射的授权转向基于能力的授权，从而实现更细粒度的授权方式。数据传输方面的相应变革正在推进，预计将成为 DC23 的基石。
- 着重采用 *IPv6*：IPv6 正在 WLCG 中广泛部署，也是采用新网络技术的先决条件。其报头扩展用于为网络流添加元数据，从而改进对工程化网络路径之外流量的监控。我们希望在 DC23 期间，大多数数据传输都使用 IPv6。

此外，美国大型强子对撞机社区正在研究区域性小型挑战，以确保其设施为提高后的数据速率做好准备。有关所涉及技术的更多信息，请参阅第 5.4 节。

DC23之后：能够在2025年和2027年集成到生产环境中的具体技术尚不明确。鉴于DC21和DC23代表了传输协议和授权方式的代际变革，预计DC25和DC27的重点将是扩大

生产系统的规模。软件扩展测试至关重要，有些相关工作已经启动，以便让存储端点为应对这些挑战做好准备；DC25的目标数据速率将比当今生产流量高一个数量级。DC23之后，生产设施将开始逐步采购硬件，使社区能够更多地依赖生产端点，而不是测试平台设施。

6.3 培训重大挑战

高亮度大型强子对撞机的物理学研究将高度依赖软件。要最大限度地提升物理产出，就要求各个职业阶段的社区成员都具备扎实的知识基础，以便充分利用正在开发的软件工具。即使对于开展物理分析的小型合作组或个人而言，软件素养也是基础。对于这一类“网络基础设施用户”，培训应包括基础编程、版本控制、最先进的软件工程最佳实践等内容。随后，社区中相当大一部分成员还将参与开发供其合作者使用的软件工具，并可能为社区生态系统作出贡献（“网络基础设施贡献者”）。这些人员很可能需要更高级的技能，其中一些人还将成为我们社区中的“网络基础设施专业人员”。第5.7节详细介绍了我们如何扩展软件培训活动，以匹配高亮度大型强子对撞机人才队伍的庞大规模。

培训重大挑战设定了一系列目标，以指导我们的工作。我们认为以下三个领域会受到影响：

- **通过标准化先修要求（已完成）推动科学民主化：**一系列涵盖所有基础软件先修知识的标准化培训模块，让学生能够在开始实验入门前弥补知识上的不足。

- **扩大进阶主题培训规模：**需要定期组织中级至高级课程和研讨会，并让学生及其导师了解这些活动。同时，所有材料都应便于自学，也应易于查找，避免给学生造成信息负担。为此，我们应扩展培训中心，收录该领域内所有相关且经过验证的培训资源。

- **为开发人员建立职业发展路径：**必须明确建立通往网络基础设施专业人员或软件方向长期职位的职业发展路径。还需要为专注于软件工程技能的学生提供专门的研讨会和指导机会。

为高效且可持续地实现这些目标，我们还制定了以下重点领域：

- **建设教育者社区：**我们需要壮大由 IRIS-HEP/HSF 培训小组建立的跨实验教育者社区。这包括进一步提升所有贡献者的认可度和知名度。定期在大型会议上发表演讲，并在《开放源代码教育期刊》（JOSE）等期刊上发表文章，是这一策略的重要组成部分。我们还应加强与各实验及其他致力于开源培训的类似倡议之间的合作，尤其是那些围绕研究网络基础设施开展的新倡议。

- **培训材料的可持续性：**社区应大力推动以可编辑且便于社区维护的格式发布培训材料，并采用开源许可证。如果使用传统的演示软件（PowerPoint、Keynote、Impress），就应同时发布相应的可编辑文件。不过，应鼓励使用基于源文件的系统（例如，

由 LaTeX 文件、Markdown 文件或 Jupyter 笔记本制作的演示文稿）。研讨会应鼓励教育者遵循这些准则，尤其要注意许可问题。

表6列出了实现这些目标的一系列里程碑及预计时间表。

Year	目标
2018 – 2022年	• 开发并讲授涵盖必备软件先修知识的标准化培训模块（已完成）。 •建立并发展一个培训小组，负责协调并持续开展跨实验培训工作（已完成）。
2023	• 扶持专题小组，基于2022年培训现状调查开发新的中级/高级培训材。 • 重建并扩展培训中心，使其成为所有软件高能物理培训资源的中心。 • 加强与实验和新组织的合作，这些组织支持 CI 专业人员的职业发展路径。
2024	首批中高级培训模块正在授课。
2025	• 80% 的适用于博士生的跨实验软件主题应通过标准化培训模块进行讲授。 • 90% 的高能物理博士生应了解以下机构提供的内容：IRIS-HEP/HSF 培训小组。 • 50% 的高能物理博士生应至少参加一个中级——高级培训。
2026—2028	• 重点加强为有志成为开发人员的高能物理领域人士和持续集成专业人员提供研讨会、交流机会和讨论为 HEP 中有志成为开发人员和 CI 专业人员的人士提供平台。 • 20% 的博士生和博士后应加入软件相关社区或参加过高级研讨会。 • 20% 的高能物理博士生应在攻读博士学位期间至少一次教授或协助举办软件研讨会。

表6：为培养高亮度大型强子对撞机人才队伍而开展的培训活动及培训重大挑战目标。

7 外展与扩大参与

女性和少数族裔在高能物理领域的参与度通常较低，而在高能物理软件与计算领域，这一比例甚至更低。我们估计，高能物理软件与计算领域的从业者中女性比例不足10%；而根据大型强子对撞机实验的统计数据，大型强子对撞机实验合作者中女性比例在13%至20%之间。在美国，黑人占高科技行业就业人口的7.4%， [73], 而在高能物理软件与计算领域，这一比例小得可以忽略。美国高能物理以及高能物理软件与计算领域的其他多样性指标，可能也会以类似方式偏离整个社会的情况。展望未来，扩大高能物理软件与计算领域人才队伍的多样性有望带来两类益处。首先，从基本原理来看，更大人才池中排名前5%的人才，其整体水平应始终高于规模只有一半的人才池中排名前10%的人才。此外，研究表明 [74–76] 来自多元背景的团队在为复杂问题制定解决方案时更具创新性，也能做出更好、更有利可图的决策。

IRIS-HEP 至少必须（而且确实做到了！）在组建自身团队时关注多样性，但这还远远不够。仅凭 IRIS-HEP 自身直接资助的团队，无法显著提高代表性不足群体在更广泛的高能物理界，甚至在整个高能物理软件与计算领域中的占比。即使是像 IRIS-HEP 这样由美国国家科学基金会资助的研究所级项目，单凭自身力量也只是很小的参与者。不过，这种规模的项目能够助力构建更广泛的人才培养渠道，并通过与积极朝着同一方向努力的其他机构和项目合作，审慎地协调自身工作，以取得最大成效。

在实践中，这意味着要重点关注项目中能够让人们在学术生涯早期参与进来的环节。IRIS-HEP 直接资助的团队成员大多是教员、工作人员、博士后或研究生。在高中阶段，IRIS-HEP 已在波多黎各的 UPR-Mayag¨uez 试行外展活动，与高中教师共同开展编程、机器学习和物理学相关活动。通过着力赋能教师，我们可以扩大影响力。我们正通过与 QuarkNet [77] 项目合作，将这项工作扩展到全国；该项目同样面向高中教师，包括与学生群体多样性较高的学校有联系的教师。具体而言，IRIS-HEP 在新冠肺炎疫情后于2022年与 QuarkNet 合作，为高中教师开发了“编程训练营2”，并于2022年夏季在费米国家加速器实验室试行。该项目在 QuarkNet 现有的物理与软件课程体系基础上进一步拓展。2022—2023年，我们将利用 QuarkNet 现有的全国联系网络，以及 IRIS-HEP 各机构的地方外展项目，在不同地点为教师举办另外6场编程训练营研讨会。总体目标是每年惠及近100名高中教师，帮助他们掌握基础的软件与物理相关培训内容，并将其用于教室教学。该项目将在 IRIS-HEP 的第二阶段继续开展。

在本科阶段，IRIS-HEP 制定了全面的培训计划（第 5.7 节），其中尤其包括一项“研究员”计划，让参与者投身与软件相关的物理研究项目。该计划让学生能够将所学的一般软件技能应用于开发科研软件，以解决粒子物理学领域的问题。研究员计划最初面向研究生，但在新冠肺炎疫情期间逐渐转变为主要面向本科生的计划。每位本科生研究员都会与一位导师合作，参与一个与粒子物理学相关的科研软件项目（通常在暑期开展）。他们通常远程与导师合作，不过也有一些研究员曾短期前往导师所在地进行面对面合作，或参加会议或研讨会。

过去几年里，IRIS-HEP 已开始调整其培训（第5节）和 Fellows 机制，使其也能助力扩大参与。如前所述，学生掌握基本软件技能的水平参差不齐。在规模较小和非 R1级院校，学生接触科研软件（以及一般研究活动）的机会则更少。

8 资助方案

在规模、结构和组织方面，IRIS-HEP 的下一阶段有一个明确的比较基准，即目前获得资助的研究所。如第4节所述，我们认为研究所的基本理念和组织框架行之有效，因此下一阶段将继续沿用。研究所的大部分资助（约90%）用于人员开支；主要的非人员开支包括 IRIS-HEP Fellows 项目、研讨会支持、更广泛的外展活动，以及用于启动分析设施活动的一次性硬件采购。表2显示，在 IRIS-HEP 第5年，约90%的人力工作量用于技术领域（研发或运营），5%用于培训和外展，5%用于项目管理。虽然下一阶段每年的具体比例会有所不同，但预计总体分配仍将大致保持不变。

在这份战略计划中，我们考虑了三种基本资助方案：**低**档，每年提供 400 万美元；**中**档，每年提供 500 万美元（基准方案，即当前 IRIS-HEP 的资助水平）；以及**高**档，每年提供 600 万美元。每种方案均计划资助五年，以支持 IRIS-HEP 从第一阶段结束到高亮度大型强子对撞机研究年份结束期间的工作。

在第5节中，各领域都概述了一系列预期活动，并进一步标注了相应的资助方案。例如，标记为中等范围（活动缩减）、高的活动，预期将在高档资助方案下获得全面支持，在中档资助方案下大幅缩减范围和规模，而在低档资助方案下则得不到支持。请注意，资助情景标签并不一定对应优先级；例如，在 DOMA 领域，“将持续集成扩展至高亮度大型强子对撞机的数据速率”最为重要，但由于所需工作量巨大，在低档资助方案下并不可行（鉴于这对整个高亮度大型强子对撞机计划至关重要，运营项目可能需要承担这项活动）。我们不尝试对每种方案中的活动进行排序；这类细节留待正式的项目提案确定。

各情景概述如下：

- **中等／基准情景**：在这一情景下，IRIS-HEP 的规模和范围将与现有情况最为相似，涵盖的活动也与目前相同。转化人工智能领域（第5.3节）仍将保留，但规模较小，大致相当于研究所各领域中分散开展的探索性人工智能研发的总规模。各领域将适度发展——例如，DOMA 仍将致力于新增 XRootD 活动，同时小幅缩减其他项目。IRIS-HEP 第二阶段将从目前的研究水平逐步发展，在研究所第二个五年任期接近尾声时，更多地聚焦于开发、部署和可持续性。

- **高资金情景**：在高资助情景下，新的转化人工智能领域将获得全额资助，并有望在该领域产生重大影响。现有领域中其他更具雄心的工作也将成为可能——例如，分析系统将能够切实推进相关技术，力争及时完成实现全面可微分分析所需的技术，以赶上高亮度大型强子对撞机的进度。重建与触发算法领域将能够直接支持基于机器学习的方法进行径迹重建，并承担更大的风险，努力弥补预计在高亮度大型强子对撞机阶段出现的资源缺口。IRIS-HEP 第二阶段的项目中将包含更多研究活动，因为该阶段能够同时支持研究和可持续性活动。

- **低资金情景**：在此情景下，预算较当前资助水平减少 20%（考虑到过去五年暴胀的累积影响，实际冲击将超过 20%），

IRIS-HEP 将不会启动任何新的活动，例如 XRootD，或开拓转化人工智能等领域。为符合资助水平，数据重大挑战等重要活动，或设施研发等整个领域，可能需要被削减或合并到更大的领域中。研究所几乎会立即调整方向，重点转向完成并维持现有活动。研究所可能无法支持任何与 LHCb 相关的研发活动。

A 附录 -研讨会列表

IRIS-HEP 知识枢纽的一个职责是帮助组织和协调面向整个社区的会议；自研究所成立以来，这项工作一直在持续进行。2022年期间，IRIS-HEP 参与或协助举办、旨在界定社区需求和要求的会议包括（按时间顺序）：

分析生态系统第二次研讨会
日期：2022年5月23日至25日
地点：Laboratoire de Physique des 2 infinis Ir`ene Joliot-Curie（法国奥赛）网址：
https://indico.cern.ch/event/1125222/总结报告：https://zenodo.org/record/7003962

描述：（摘自研讨会网站）自2017年 HSF 组织首次分析生态系统研讨会以来，已经过去五年。这段时间发生了许多变化：新项目、工具和数据格式相继出现，成熟项目也开展了大量活动并取得进展。然而，高亮度大型强子对撞机时代高效分析的挑战仍未解决，因此 HSF 和 IRIS-HEP 与 IJCLab 一同组织了第二次分析生态系统研讨会。

研讨会的主题包括但不限于：

- 分析设施
- 机器学习工具和可微计算工作流
- “实时”触发器级分析
- 分析用户体验和声明式语言
- 基于精简格式或专用输入的分析
- 记账和系统误差处理

Connecting the Dots 2022
日期：2022年5月31日至6月2日
地点：普林斯顿（新泽西州普林斯顿）
网址：https://indico.cern.ch/event/1103637/
描述：（摘自研讨会网站）Connecting The Dots 研讨会系列汇集了径迹重建以及其他涉及稀疏采样数据模式识别问题的专家。该研讨会主要聚焦于高能物理（HEP）探测器，但旨在涵盖其他科学学科，只要这些领域也存在类似的问题或解决方案。

Snowmass社区夏季研究研讨会
日期：2022年7月17日至26日
地点：华盛顿大学（西雅图，华盛顿州）网址：
http://seattlesnowmass2021.net/
描述：（摘自研讨会网站）Snowmass21是由美国物理学会（APS）的粒子与场分部（DPF）主办的一项为期一年的研究，大约每十年开展一次。其目的是确定粒子物理学领域最重要的问题，并找出解决这些问题的有前景机会。这项研究旨在由社区推动，具有包容性、全球性、透明性和跨学科性。

西雅图会议是Snowmass21期间举办的各种研讨会和市政厅会议的总结，这些活动分别在2020年、2021年和2022年举行。

第二个MO　DE 实验设计可微编程研讨会　　n

日期：2022年9月12日至16日
地点：OAC会议中心（科林瓦里，克里特岛，希腊）
网址：https://indico.cern.ch/event/1145124/
描述：MODE（机器学习优化实验设计）合作旨在推动将可微编程应用于天体物理与粒子物理的构想。本次研讨会邀请了相关领域的主题演讲嘉宾，并设有教程和黑客马拉松，旨在协调该领域对可微编程的研究方法。

PyHEP 2022研讨会
日期：2022年9月12日–16日地点：（线上）网址：https://indico.cern.ch/event/1150631描述：（摘自研讨会网站）PyHEP研讨会是由高能物理软件基金会（HSF）发起并支持的一系列研讨会，旨在提供一个交流和推广 Python 在整个高能物理界应用的平台。

IRIS-HEP研究所静修会
日期：2022年10月12日至14日地点：普林斯顿（新泽西州普林斯顿）网址：https://indico.cern.ch/event/1196111/说明：（摘自研讨会网站）IRIS-HEP软件研究所获得美国国家科学基金会资助后，最近完成了第四个年度的工作。本次闭门会议的目标是：

- 回顾 IRIS-HEP 迄今为止的工作进展，并制定下一年度（项目第5年）的具体计划和可实现目标
- 明确当前进展与高亮度大型强子对撞机启动所需条件之间的差距
- 构想 IRIS-HEP 在额外开展五年工作后能够实现的愿景

面向高亮度大型强子对撞机计算研发的协同生态系统
日期：2022年11月7日至9日
地点：圣母大学基欧全球事务学院（华盛顿特区）网址：https://indico.cern.ch/event/1203733

描述：（摘自研讨会网站）为应对高亮度大型强子对撞机带来的高能物理挑战所需的研发工作极具挑战性。目前的大型强子对撞机物理计划依托复杂的软件与计算生态系统得以开展。高亮度大型强子对撞机计划进行的重大硬件升级及其物理计划，将要求这一生态系统大幅演进。要取得成功，就需要大幅提升软件性能、适应性、可持续性、劳动力发展和培训，并充分利用未来的数据与计算平台，同时借鉴高能物理领域之外的发展成果。要实现那个时代的物理学目标，就必须持续开展协调一致的软件与计算研发工作。

高能物理中的软件引用与认可
日期：2022年11月22日 – 23日地点：（线上）
网址：https://indico.cern.ch/event/1211229

描述：（摘自研讨会网站）本次会议旨在围绕高能物理实验如何处理软件引用，以及如何认可那些促成面向公众发布物理学结果的软件工作，展开社区讨论。

B 附录 - 研究所组织结构与演进过程

研究所的基准组织、管理和指导模式见图 17，整体上反映了 IRIS-HEP 的做法。具体选择可能会在后续实现阶段根据资助水平和项目参与者的情况有所调整，但此处的基本框架预计不会改变。

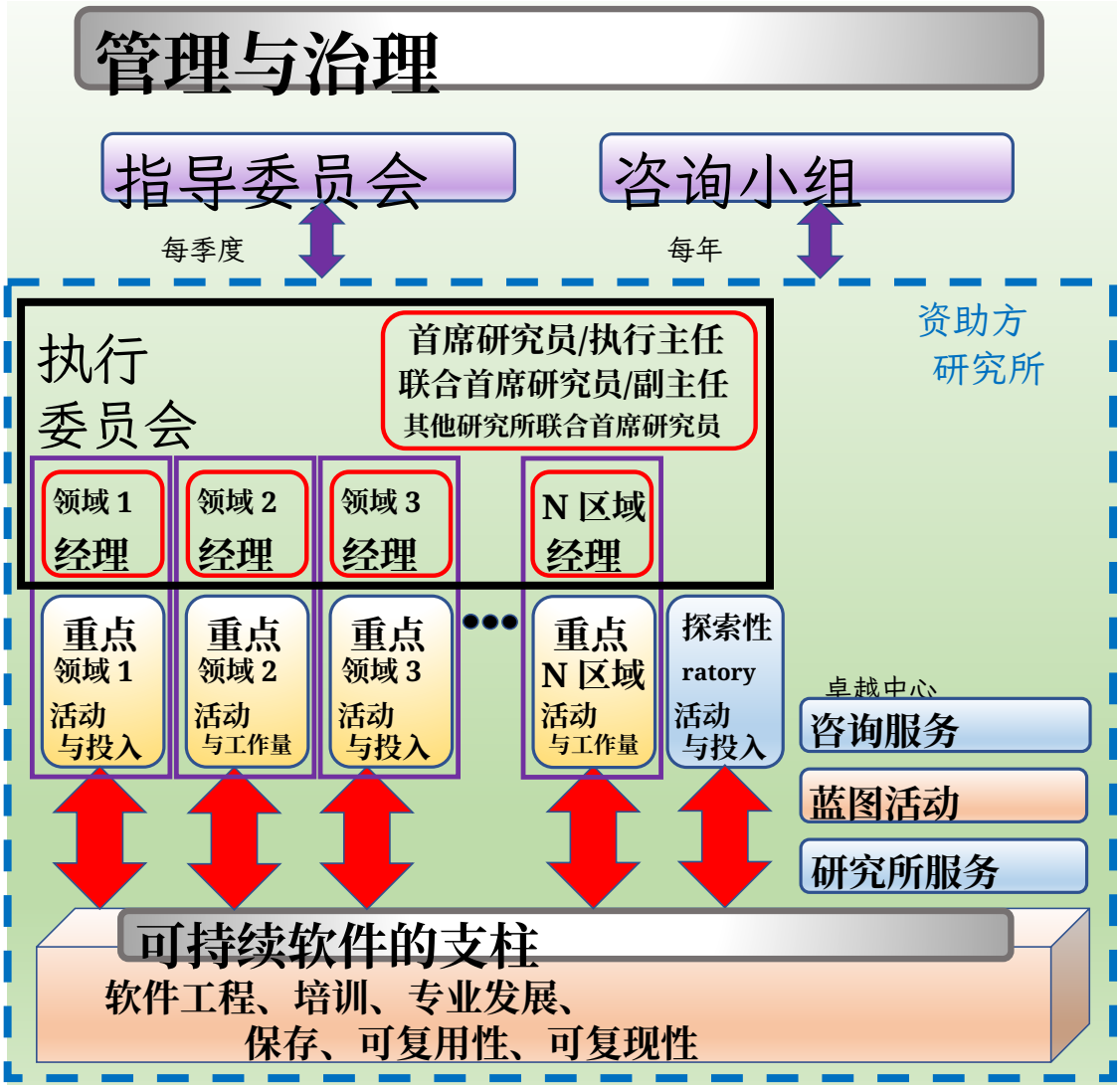


图 17：研究所管理与治理的基准方案。

该组织结构中的主要要素及其在研究所内的职责如下：

首席研究员／共同首席研究员： 未来研究所实现提案中的首席研究员／共同首席研究员将承担由美国国家科学基金会规定的项目职责。

重点领域： 研究所将在任何给定时间确定若干重点领域。这些领域将体现研究所的主要优先事项，涉及旨在开发软件基础设施、以实现研究所使命的活动。首批

战略领域见第5节。最终纳入实现的领域数量和规模将取决于实现目标所能获得的资源。这些领域可能会随着研究所的发展而变化，但预计通常为六至八个。研究所的每个重点领域都将制定书面年度目标，并根据项目执行计划获得相应的研究所资源。作为年度规划流程的一部分，每年将对活跃的重点领域进行审查，并在听取指导委员会意见后，决定是否更新领域清单及其年度目标。

领域经理： 每位领域经理将负责管理某个重点领域的日常活动。我们将特别注意为每个领域确定一名副手，以确保经理担任新职位或新角色时工作的延续性。遴选领域经理时，将力求兼顾高能物理、计算机科学以及不同实验的代表。

执行委员会： 执行委员会将负责管理研究所的日常活动。委员会由首席研究员、共同首席研究员和各领域经理组成。委员会将每周召开会议，以管理研究所的常规活动并制定短期计划。为促进透明度与合作（例如共享服务或资源方面），将邀请美国大型强子对撞机运行计划等其他组织的联络代表，以“观察员”身份参加执行委员会的每周会议。

指导委员会： 研究所将设立指导委员会，约每季度与执行委员会召开会议，审议研究所的宏观优先事项、战略和重点领域。指导委员会由每个参与实验的两名代表、美国大型强子对撞机运行计划的代表以及其他代表（包括欧洲核子研究中心和费米国家加速器实验室的代表）组成。指导委员会成员由各自所属组织提名，并由执行主任与执行委员会协商后予以接纳。

执行主任：执行主任将管理研究所的整体活动及其与外部实体的相互作用。一般而言，日常决策将通过执行委员会达成共识后作出；战略和优先事项方面的决策则依据指导委员会和执行委员会的意见与建议作出。如果无法达成共识，最终决定将由执行主任作出。研究所组织中将设副主任，在执行主任无法履职期间代行其职责，以确保研究所运营的连续性。

咨询小组：将视需要召集咨询小组，对项目及未来计划进行内部审查。小组成员由首席研究员／共同首席研究员在征询指导委员会意见后选定。小组将包括未以其他方式参与该研究所工作的专家，涵盖物理学、计算物理学、可持续软件开发和网络基础设施等领域。

C 附录——缩略语表

近似贝叶斯计算 近似贝叶斯计算

ACAT 一个关于高能物理高级计算与分析技术的系列研讨会。

ALICE 大型离子对撞机实验，是欧洲核子研究中心大型强子对撞机上的一项实验。

ALPGEN 一种事件生成器，旨在生成强子碰撞中的标准模型过程，尤其关注具有较高喷注多重数的末态。它基于对部分子矩阵元的精确最低阶计算，以及具有螺旋度关联的顶夸克和规范玻色子衰变。

AOD 分析对象数据是重建事件的摘要，包含常见物理分析所需的充足信息。

ATLAS 环形大型强子对撞机装置，是欧洲核子研究中心大型强子对撞机上的一项实验 .

BaBar 一项大型高能物理实验，于1999年至2008年在SLAC运行。

BSM 超越标准模型物理（BSM）是指为解释标准模型（SM）的不足而开展的理论研究，例如质量的起源、强CP问题、中微子振荡、物质–反物质不对称，以及暗物质和暗能量的本质。

CDN 内容分发网络

CERN 欧洲核子研究中心是粒子物理学实验室，也是大型强子对撞机（以及未来的高亮度大型强子对撞机）加速器和 ALICE、ATLAS、CMS 及 LHCb 实验的所在地。

CHEP 国际　高能与核物理计算会议系列 .

CI 网络基础设施，指提供强大而先进能力所需的人员、软件和硬件。

CMS 紧凑型缪子线圈，是欧洲核子研究中心大型强子对撞机上的一个实验。

CMSSW CMS 实验的应用软件，包括处理框架本身，以及与事例重建、高能级触发、分析、硬件触发模拟、模拟和可视化工作流相关的组件。

CMSDAS CMS数据分析学校

CoDaS-HEP 高能物理计算与数据科学学校。

CP 电荷与宇称共轭对称性

CP破坏CP破坏

计算机科学计算机科学

计算资源审查组计算资源审查组，这是一个 WLCG 委员会，负责审查和评估大型强子对撞机实验的年度资源申请，为资助机构的决策做准备。

计算技术设计报告 计算技术设计报告（CTDR）是由某个实验撰写的文档，用于说明该实验构建软件和计算系统的技术蓝图。

CVMFS CERN 虚拟机文件系统是一种基于 HTTP 的网络文件系统，经过优化，可通过先进的缓存策略快速、可扩展且可靠地交付实验软件。

CVS 并发版本系统，一种源代码版本控制系统

CWP 社区白皮书是有组织的工作成果，旨在阐述高能物理领域2020年代的软件与计算研发社区战略和路线图。这项工作在 HSF 的框架下开展。

DASPOS 开放科学数据与软件保存项目

DeepLearning 机器学习算法的一类，基于大量神经网络层。

DES 暗能量巡天

DIANA-HEP 高能物理数据密集型分析项目，由美国国家科学基金会通过 SI2 计划资助

DOE 能源部

DHTC 分布式高通量计算

DOMA 数据组织、管理与访问，指从整体角度考察项目与数据互动及使用数据各方面的术语。

EFT 有效场论，是标准模型的扩展

EYETS 延长年末技术停机，用于指冬季的一段时间（通常为数月），在此期间会对 CERN 加速器综合设施和探测器进行小规模升级和维护

FNAL 费米国家加速器实验室，又称费米实验室，是美国主要的高能物理实验室，由美国能源部资助

FPGA 现场可编程门阵列

FTE 全职当量

FTS 文件传输服务

GAN 生成对抗网络是一类用于无监督机器学习的人工智能算法，由两个神经网络组成，它们在零和博弈框架中相互竞争。

GAUDI 由欧洲核子研究中心开发的事件处理应用程序框架

Geant4 一种用于模拟粒子穿过物质过程的工具包。

GeantV 一个研发项目，旨在充分利用新一代中央处理器在探测器模拟领域日益提供的并行性。

通用图形处理器计算 图形处理器通用计算是指使用图形处理器（GPU）执行传统上由中央处理器（CPU）处理的应用计算任务。图形处理器通常只负责计算机图形处理。图形处理器编程通常更具挑战性，但可以显著提高算术吞吐量。

高能物理 高能物理

HEP-CCE 高能物理计算卓越中心，是一项由美国能源部资助的跨领域计划，旨在推动高性能计算（HPC）领域的卓越发展，包括数据密集型应用、科学模拟以及数据移动与存储

HEPData 达勒姆高能物理数据库是一个开放访问存储库，收录实验粒子物理学的散射数据。

HEPiX 每年举办两次的一系列研讨会，汇聚参与高能物理计算的信息技术人员和高能物理人员

HL-LHC 高亮度大型强子对撞机是拟于2026年对大型强子对撞机进行的一项升级。此次升级旨在将机器的亮度提高10倍，达到 $10^{35}\text{cm}^{-2}\text{s}^{-1}$，从而更有机会观测到稀有过程，并提高边缘测量的统计精度。

HLT 高能级触发。软件触发系统通常使用位于探测器附近的大型计算集群。事件会被实时处理（或在小型缓冲区所定义的延迟时间内处理），并筛选出必须存储以供后续离线处理的事件。

HPC 高性能计算。

HS06 用于衡量CPU性能的高能物理领域通用基准，基于SPEC2006基准测试（https://www.spec.org）。

HSF 高能物理软件基金会致力于促进国际高能物理（HEP）软件与计算领域的协调和共同努力。

IgProf Ignominius性能分析器是一款用于分析大型C++ 应用程序（例如高能物理领域所用应用程序）的CPU和内存使用情况及性能的工具

IML 跨实验LHC机器学习工作组专注于为高能物理问题开发现代、先进的机器学习方法、技术和实践。

INFN 意大利国家核物理研究院，是意大利高能物理研究领域的主要资助机构及一系列实验室的统称

JavaScript 一种高级、动态、弱类型、基于原型、支持多种范式的解释型编程语言。与 HTML 和 CSS 一样，JavaScript 是万维网内容生产的三大核心技术之一。

Jupyter Notebook 这是一种服务器-客户端应用程序，允许通过网页浏览器编辑和运行笔记本文档。笔记本是由 Jupyter Notebook 应用程序生成的文档，包含计算机代码（例如 Python）和富文本元素（段落、方程、图表、链接等）。笔记本文档既是包含分析说明和结果（图表、表格等）的可读文档，也是可执行文档，可运行以进行数据分析。

LEP 大型正负电子对撞机，最初的加速器，位于欧洲核子研究中心一条长27公里的环形隧道内；如今大型强子对撞机占据了这条隧道。

大型强子对撞机 大型强子对撞机，是欧洲核子研究中心的主要粒子加速器。

LHCb 大型强子对撞机底夸克实验，是欧洲核子研究中心大型强子对撞机上的一项实验。

LIGO 激光干涉引力波天文台

LS 长停机期，指大型强子对撞机停止产生数据、CERN 加速器综合设施及探测器进行升级的时期（通常为一年或更长时间）。

LSST 大型综合巡天望远镜

ML 机器学习是计算机科学的一个领域，赋予计算机无需显式编程即可学习的能力。它侧重于利用计算机进行预测，涵盖许多算法类别（提升决策树、神经网络.....）。

MREFC 大型研究设备与设施建设，是美国国家科学基金会用于大型建设项目的一种机制

NAS 美国国家科学院

NCSA 伊利诺伊大学厄巴纳-香槟分校国家超级计算应用中心

NDN 命名数据网络

NSF 美国国家科学基金会

ONNX 开放神经网络交换，一种不断发展的用于交换人工智能模型的开源标准

Openlab CERN开放实验室是一个公私合作伙伴关系，旨在加速开发面向全球大型强子对撞机社区及更广泛科学研究的尖端解决方案。

OSG 开放科学网格

P5 粒子物理项目优先级评估小组是一个科学咨询小组，负责为美国未来十年在粒子物理学研究方面的投资提出规划建议。

PI 首席研究员

QA 质量保证

QC 质量控制

QCD 量子色动力学，描述夸克与胶子之间强相互作用的理论。

REANA 可复用分析，是一个用于保存和实例化分析工作流的系统

REU 本科生研究体验，美国国家科学基金会资助本科生参与研究项目的一项计划。

RRB 资源审查委员会，由欧洲核子研究中心设立，成员包括参与大型强子对撞机合作组的资助机构代表、欧洲核子研究中心管理层以及实验管理层。

ROOT 一种广泛用于高能物理数据处理应用的科学软件框架。

SciDAC 通过先进计算实现科学发现，美国能源部的一项计划，旨在资助与美国能源部科学办公室相关的计算领域先进研发

SDSC 加州大学圣迭戈分校圣迭戈超级计算机中心

SHERPA SHERPA 是一款蒙特卡罗事件生成器，用于模拟轻子-轻子、轻子-光子、光子-光子、轻子-强子及强子-强子碰撞中的高能粒子反应。

SIMD 单指令多数据（SIMD）描述的是一种计算机架构，其中多个处理单元能够同时对多个数据点执行相同的操作。

SI2 美国国家科学基金会（NSF）的持续创新软件基础设施计划

SKA 平方公里阵列

SLAC 斯坦福直线加速器中心，一所由美国能源部资助的实验室

SM 标准模型是 20 世纪 70 年代赋予一种基本粒子及其相互作用理论的名称。它是目前占主导地位的理论，用于解释基本粒子及其动力学。

SOW 工作说明书，一种用于界定多机构项目中由子授奖资助的个人预期活动和交付成果的机制。SOW 通常每年修订一次，并同步调整相应预算。

SSI 软件可持续性研究所，这是一个位于英国、致力于推动更优质且更具可持续性的研究软件的组织。

SWAN 基于网页的分析服务是一个在欧洲核子研究中心云上使用 Jupyter Notebook 界面进行交互式数据挖掘的平台。

TMVA 基于 ROOT 的多变量数据分析工具包是一个独立项目，提供与 ROOT 集成的机器学习环境，用于处理和并行评估复杂的多变量分类技术。

TPU 张量处理单元是 Google 设计的一种专用集成电路，专用于机器学习应用

URSSI 美国软件可持续性研究所，是一项由美国国家科学基金会建议资助的 S^2I^2 概念化活动

广域网 广域网

WLCG 全球大型强子对撞机计算网格项目是一个全球合作项目，由 42 个国家的 170 多个计算中心组成，并连接各国和国际网格基础设施。WLCG 项目的使命是提供全球计算资源，用于存储、分发和分析欧洲核子研究中心大型强子对撞机（LHC）产生的数据。

x8664 x86 指令集的 64 位版本。该指令集源自英特尔 8086，如今已由多家公司的处理器实现，包括英特尔和 AMD 的处理器；如今，高能物理领域使用的绝大多数计算资源都由这些处理器构成。

XRootD 软件框架，是一套通用解决方案，可实现快速、低延迟且可扩展的数据访问。

参考文献

[1] IRIS-HEP 网站。http://iris-hep.org。[2] 美国国家科学基金会合作协议 OAC-1836650。https://www.nsf.gov/ awardsearch/showAward?AWD_ID=1836650&HistoricalAwards=false。[3] Johannes Albrecht 等人。《2020年代高能物理软件与计算研发路线图》。*Comput. Softw. Big Sci.*，3(1):7，2019年。[4] Peter Elmer、Mark Neubauer 和 Michael D. Sokoloff。《高能物理科学软件创新研究所（S2I2）战略规划》。2017年。[arXiv 1712。06592]https://arxiv.org/abs/1712.06592。[5] ATLAS 合作组。ATLAS 软件与计算 HL-LHC 路线图。技术报告，欧洲核子研究中心，日内瓦，2022年。[6] CMS 离线软件与计算。CMS 第二阶段计算模型：更新文件。技术报告，欧洲核子研究中心，日内瓦，2022年。[7] 欧洲核子研究中心（Meyrin）LHCb 合作组。LHCb 第二次升级框架技术设计报告——高亮度大型强子对撞机时代味物理及更广泛领域的机遇。技术报告，欧洲核子研究中心，日内瓦，2021年。[8] S2I2-HEP 项目网页：http://s2i2-hep.org。[9] G. Aad 等人 [ATLAS 合作组]。利用大型强子对撞机上的 ATLAS 探测器，在标准模型希格斯玻色子的搜寻中发现一种新粒子。*Phys. Lett. B*，716:1，2012年。[10] S. Chatrchyan 等人 [CMS 合作组]。利用大型强子对撞机上的 CMS 实验发现一种质量为 125 GeV 的新玻色子。*Phys. Lett. B*，716:30–61，2012年。[11] Gino Isidori、Yosef Nir 和 Gilad Perez。《超越标准模型的物理的味物理约束》。*Ann.Rev.Nucl.Part.Sci.*，60:355，2010年。[12] 粒子物理项目优先级评估小组。《为发现而建设：全球背景下的美国粒子物理战略计划》。http://science.energy.gov/~/media/hep/hepap/ pdf/May%202014/FINAL_DRAFT2_P5Report_WEB_052114.pdf。[13] D Contardo、M Klute、J Mans、L Silvestris 和 J Butler。CMS 探测器第二阶段升级技术提案。技术报告，日内瓦，2015年。升级项目负责人副手：Lucia Silvestris（INFN 巴里分部）、Jeremy Mans（明尼苏达大学）其他联系人：Lucia.Silvestris@cern.ch、Jeremy.Mans@cern.ch。[14] ATLAS 第二阶段升级范围界定文件。技术报告，欧洲核子研究中心，日内瓦，2015年。[15] A. Dainese、M. Mangano、A. B. Meyer、A. Nisati、G. Salam 和 M. Vesterinen。CERN 黄色报告：专著，第 7 卷（2019年）：高亮度大型强子对撞机物理及高能大型强子对撞机展望。2019年12月。[16] A Boehnlein、C Biscarat、A Bressan、D Britton、R Bolton、F Gaede、C Grandi、F Hernandez、T Kuhr、G Merino、F Simon 和 G Watts。高亮度大型强子对撞机软件与计算评审组第二次报告。技术报告，欧洲核子研究中心，日内瓦，2022年。

[17]S. Campana。高亮度大型强子对撞机网络需求与数据传输挑战。https: // indico.cern.ch/event/1004222/contributions/4241102/attachments/2194497/3745965/HL-LHC%20network%20challenges%20-%20V2.pdf。[18] Jason Zurawski、Benjamin Brown、Dale Carder、Eric Colby、Eli Dart、Ken Miller、Abid Patwa、Kate Robinson、Lauren Rotman 和 Andrew Wiedlea。高能物理网络需求审查（最终报告，2020年7月至10月），2021年6月。[19] HEP 可持续软件研讨会。https://indico.cern.ch/event/930127/。[20] Daniel S. Katz、Sudhir Malik、Mark S. Neubauer、Graeme A. Stewart、K´et´evi A. Assamagan、Erin A. Becker、Neil P. Chue Hong、Ian A. Cosden、Samuel Meehan、Edward J. W. Moyse、Adrian M. Price-Whelan、Elizabeth Sexton-Kennedy、Meirin Oan Evans、Matthew Feickert、Clemens Lange、Kilian Lieret、Rob Quick、Arturo S´anchez Pineda 和 Christopher Tunnell。软件可持续性与高能物理。技术报告，2020年。[21]根据 HL-LHC 项目网站上的进度图（2017年12月）：https:// project-hl-lhc-industry.web.cern.ch/content/project-schedule。[22] Mark S. Neubauer 等。从疫情中学习：高能物理及其他领域会议的未来。载于*IRIS-HEP* 蓝图研讨会，2021年6月。[23] 通过网络基础设施转变科学：美国国家科学基金会关于21世纪科学与工程国家网络基础设施生态系统的蓝图。https://www.nsf. gov/cise/oac/vision/blueprint-2019/。[24] C. R. Harris 等。使用 NumPy 进行数组编程。*Nature*，585(7825):357–362，2020年9月。[25] ATLAS HL-LHC 计算概念设计报告。2020年。

[26] ATLAS 合作组。ATLAS 软件与计算 HL-LHC 路线图。技术报告，欧洲核子研究中心，日内瓦，2022年。

[27] 美国 CMS 软件与计算：HL-LHC 研发战略规划文件。2023年。[28] REANA 可复现分析平台。https://github.com/reanahub/reana。[29] Nathan Simpson 和 Lukas Heinrich。neos：版本 0.2.0。https://github.com/gradhep/ neos，1 2021年。[30] Nathan Simpson 和 Lukas Heinrich。neos：面向高能物理的端到端优化的摘要统计量。发表于第*20*届先进计算与分析国际研讨会

s

物理学研究技术：*AI* 解码——迈向可持续、多元、高性能的 *d*

高效科学计算，2022年3月。[31] Tommaso Dorigo 等人。通过可微编程实现粒子物理仪器端到端优化：白皮书。2022年3月。[32] Jim Pivarski、Henry Schreiner、Angus Hollands、Pratyush Das、Kush Kothari、Aryan Roy、Jerry Ling、Nicholas Smith、Chris Burr 和 Giordon Stark。Uproot。10.5281/zenodo.4340632。[33] Rene Brun 和 Fons Rademakers。ROOT——一个面向对象的数据分析框架。《核仪器与方法物理研究 *A* 部分：加速器、能谱仪、探测器及相关设备》，389(1):81–86，1997年。物理研究中的新计算技术 V。

[34] B. Galewsky、R. Gardner、L. Gray、M. Neubauer、J. Pivarski、M. Proffitt、I. Vukotic、G. Watts 和 M. Weinberg。ServiceX：分布式缓存列式数据交付服务。*EPJ* 网络会议，245:04043，2020年。[35] Jim Pivarski、Ianna Osborne、Ioana Ifrim、Henry Schreiner、Angus Hollands、Anish Biswas、Pratyush Das、Santam Roy Choudhury、Nicholas Smith 和 Manasvi Goyal。Awkward Array。10.5281/zenodo.4341376。[36] func adl。https://github.com/iris-hep/func_adl。[37] Lindsey Gray、Nicholas Smith、Benjamin Tovar、Andrzej Novak、Jayjeet Chakraborty、Peter Fackeldey、Nikolai Hartmann、Gordon Watts、Douglas Thain、Giordon Stark、BenGalewsky、Jonas R¨ubenach、Benjamin Fischer、Devin Taylor、MoAly98、Dmitry Kondratyev、Paul Gessinger、Yi-Mu "Enoch" Chen、Joosep Pata、Anna Woodard、Andreas Albert、slehti、Zoe Surma、Alexx Perloff、Kevin Pedro、dnoonan08、Andrew Hennessee、Karol Krizka、kmohrman 和 Lukas。coffea。10.5281/zenodo.3266454。[38] Henry Schreiner、Hans Dembinski、Aman Goel、Jay Gohil、Shuo Liu、Jonas Eschle、Chan-chal Maji、Andrzej Novak、Chris Burr、Doug Davis、Kilian Lieret、Konstantin Gizdov、Kyle Cranmer 和 Pierre Grimaud。boost-histogram。10.5281/zenodo.3492034。[39] Alexander Held、Matthew Feickert、Henry Schreiner、Lars Henkelmann、Angus Hollands 和 Nathan Simpson。cabinetry。10.5281/zenodo.4742752。[40] Lukas Heinrich、Matthew Feickert 和 Giordon Stark。pyhf：v0.7.0。10.5281/zenodo.1169739。[41] Lukas Heinrich 、Matthew Feickert、Giordon Stark 和 Kyle Cranmer。pyhf：HistFactory 统计模型的纯 Python 实现。《开放源代码软件期刊》，6(58):2823，2021年。[42] Eduardo Rodrigues 等人。Scikit HEP 项目——概述与展望。*EPJ* 网络会议，245:06028，2020年。[43] dask-awkward。https://github.com/dask-contrib/dask-awkward。[44]NumFOCUS 附属项目。https://numfocus.org/sponsored-projects/ affiliated-projects。[45]高能物理统计序列化标准（HS3）。https://github.com/ hep-statistics-serialization-standard/hep-fit-serialization。[46] Oliver Schulz、Frederik Beaujean、Allen Caldwell、Cornelius Grunwald、Vasyl Hafych、Kevin Kr¨oninger、Salvatore La Cagnina、Lars R¨ohrig 和 Lolian Shtembari。Bat.jl：用于贝叶斯推断的基于 Julia 的工具。《*SN* 计算机科学》，2(3):210，2021年4月。[47] ATLAS 的 RECAST。https://github.com/recast-hep/recast-atlas。[48] Andrea Bocci、Vincenzo Innocente、Matti Kortelainen、Felice Pantaleo 和 Marco Rovere。利用 CMS 像素径迹探测器对径迹和主顶点进行异构重建。《*Front. Big Data*》，3:601728，2020年。[49] NSF 人工智能与基本相互作用人工智能研究所（IAIFI）。https: //iaifi.org。[50] A3D3：用于数据驱动发现的加速人工智能算法。https:// a3d3.ai/。

[51] Jonathan Shlomi、Peter Battaglia 和 Jean-Roch Vlimant。粒子物理学中的图神经网络。*Machine Learning: Science and Technology*，2(2):021001，2020年12月。[52] ATLAS 合作组。使用 ATLAS 探测器进行图神经网络喷注味标记。2022年。[53] J. de Favereau、C. Delaere、P. Demin、A. Giammanco、V. Lemaˆıtre、A. Mertens 和 M. Sel- vaggi。Delphes 3：用于通用对撞机实验快速模拟的模块化框架，2014年2月。[54] 国家研究平台。https://nationalresearchplatform.org/。[55] FABRIC 测试平台。https://fabric-testbed.net/。[56] SENSE：面向百亿亿级端到端联网科学的软件定义网络。https://sense.es.net/。[57] Mason Proffitt、Ingo M¨uller、Dan Graur、Mat Adamec、Pieter David、Enrico Guiraud 和 Sebastien Binet。iris-hep/adl-benchmarks-index：ADL 功能基准测试索引 v0.1。10.5281/zenodo.5131287，2021年7月。[58] Dan Graur、Ingo M¨uller、Mason Proffitt、Ghislain Fourny、Gordon T. Watts 和 Gustavo Alonso。评估高能物理数据的查询语言和系统，2021年10月。[59] 研究终端用户组。https://community.cncf.io/research-end-user-group/。[60] 云原生计算基金会。https://www.cncf.io/。[61]HSF 培训工作组。https://hepsoftwarefoundation.org/workinggroups/ training.html。[62] Tulika Bose、Sudhir Malik 和 Meenakshi Narain。美国 CMS - PURSUE（本科生暑期研究体验项目），2022年。[63] HSF 培训课程。https://hepsoftwarefoundation.org/training/curriculum.html。[64] Roel Aaij 等。Allen：用于 LHCb 的图形处理器高能级触发。*Comput. Softw. Big Sci.*，4(1):7，2020年。[65] Olaf Ronneberger、Philipp Fischer 和 Thomas Brox。U-net：用于生物医学图像分割的卷积网络，2015年。[66] IRIS-HEP AGC Tools 2021 研讨会。https://indico.cern.ch/event/1076231/。[67] IRIS-HEP AGC Tools 2022 研讨会。https://indico.cern.ch/event/1126109/。[68]Alexander Held 和 Oksana Shadura。IRIS-HEP 分析大挑战。*PoS*，ICHEP2022:235，2022年。[69] 分析大挑战的首次性能测量。https://indico.cern. ch/event/1106990/contributions/4998188/。[70] Graeme A Stewart、Peter Elmer、Giulio Eulisse、Loukas Gouskos、Stephan Hageboeck、Alli- son Reinsvold Hall、Lukas Heinrich、Alexander Held、Michel Jouvin、Teng Jian Khoo、Paul Laycock、Pere Mato Vila、Jim Pivarski、Jonas Rembser、Eduardo Rodrigues、Jana Schaarschmidt、Elizabeth Sexton-Kennedy、Oksana Shadura、Nathan Simpson、Nicola Skidmore、Michael

Sokoloff、Gordon Watts、Aly Mohamed、Jackson Burzynski、Bryan Cardwell、Daniel C Craik、Tomas Dado、Antonio Delgado Peris、Caterina Doglioni、Engin Eren、Martin B Eriksen、Jonas Eschle、Conor Fitzpatrick、Jos´e Flix Molina、Sean Gasiorowski、Aman Goel、Enrico Guiraud、Kanhaiya Gupta、Michael Hern´andez Villanueva、Jos´e M Hern´andez、Julius Hrivnac、Kilian Lieret、Luke Kreczko、Nils Krumnack、Thomas Kuhr、Baidyanath Kundu、Eric Lancon、Jo- hannes Lange、Nicholas J Manganelli、Andrzej Novak、Antonio Perez-Calero Yzquierdo、Mason Proffitt、Grigori Rybkin、Henry F Schreiner、Markus Schulz、Andrea Sciab`a、Sezen Sekmen、Tal van Daalen、Tibor Simko、Jaydip Singh、Nicholas Smith、Giles C Strong、Gokhan Unel、Vassil Vassilev、Mark Waterlaat、Efe Yazgan、Ayanabha Das 和 Ben Galewsky。HSF IRIS-HEP 第二届分析生态系统研讨会报告。10.48550/arXiv.2212.04889，2022年12月。

[71] Jeffrey Krupa、Kelvin Lin、Maria Acosta Flechas、Jack Dinsmore、Javier Duarte、Philip Harris、Scott Hauck、Burt Holzman、Shih-Chieh Hsu、Thomas Klijnsma 等。将 GPU 协处理器作为服务，用于高能物理中的深度学习推理。*Machine Learning: Science andTechnology*，2(3):035005，2021年。

[72] Forti Alessandra、Di Maria Riccardo、Dona Rizart、Garrido Borja、Lassnig Mario、Dimitrios Christidis、Ellis Katy、Paspalaki Garyfalia 和 Gomez Felipe。《WLCG 网络数据挑战 2021：总结与建议》，2021年12月。

[73]《隔离谷：关于 Google 和科技行业多样性的丑陋真相》。
https://www.theguardian.com/technology/2017/aug/07/
silicon-valley-google-diversity-black-women-workers。

[74] Max Nathan 和 Neil Lee。《文化多样性、创新与创业：来自伦敦的企业层面证据》。《经济地理学》，89(4):367–394，2013年。

[75] Cristina D´ıaz-Garc´ıa、Angela Gonz´alez-Moreno 和 Francisco Jose S´aez-Mart´ınez。研发团队中的性别多样性：对创新激进性的影响。《创新》，15(2):149–160，2013年。

[76] Sheen S. Levine、Evan P. Apfelbaum、Mark Bernard、Valerie L. Bartelt、Edward J. Zajac 和 David Stark。族裔多样性抑制价格泡沫。《美国国家科学院院刊》，111(52):18524–18529，2014年。

[77] QuarkNet 网站。https://quarknet.org。