

Fremtidigt nationalt HPC-landskab

Anbefalinger fra
Arbejdsgruppen for fremtidigt nationalt HPC landskab

15. september 2019



Rapporten er udarbejdet af en arbejdsgruppe nedsat af Danish e-infrastructure Cooperation's (DeiCs) bestyrelse med henblik på at rådgive om det fremtidige nationale landskab for High Performance Computing (HPC). Arbejdsgruppen har haft følgende medlemmer:

Christian Storm Pedersen, Aarhus Universitet. <https://www.au.dk>.
Steffen Andersen, Copenhagen Business School. <https://www.cbs.dk>.
Henning Christiansen, Danmarks Tekniske Universitet. <https://www.dtu.dk>.
Philippe Bonnet, IT Universitetet. <https://www.itu.dk>.
Hans Henrik Happe, Københavns Universitet. <https://www.ku.dk>.
Thomas Schrøder, Roskilde Universitets Center. <https://www.ruc.dk>.
Claudio Pica, Syddansk Universitet. <https://www.sdu.dk>.
Torben Larsen (formand), Aalborg Universitet. <https://www.aau.dk>.

Konsulenter:

Brian Vinter, Københavns Universitet. <https://www.ku.dk>.
Ole Sigmund, Danmarks Tekniske Universitet. <https://www.dtu.dk>.

Sekretariat:

René Løwe Jacobsen, Danish eInfrastructure Cooperation (DeiC). <https://www.deic.dk>.
Rene Belsø, Danish eInfrastructure Cooperation (DeiC). <https://www.deic.dk>.

Arbejdsperiode:

Primo juni 2019 – 15. september 2019

Baggrund:

DeiCs bestyrelse nedsatte i maj måned 2019 en arbejdsgruppe (kaldet arbejdsgruppen eller NationalHPC arbejdsgruppen), med deltagelse fra alle otte danske universiteter, som skulle rådgive DeiCs bestyrelse om det fremtidige danske landskab for High Performance Computing (HPC). Arbejdsgruppens opgaver var primært fokuseret omkring [1]:

Arbejdsgruppen skal senest 15. september 2019 levere en rapport med beskrivelse og anbefalinger inden for tre områder:

1. Beskrivelse af tekniske scenarier for HPC-arkitekturer til understøttelse af forskellige beregningsbehov.
2. Beskrivelse af et understøttende support og kompetencelandskab.
3. Beskrivelse af håndtering af internationalt samarbejde, herunder sikring af hjemtagelse og udnyttelse af viden og kompetencer nationalt.

Til hvert af de tre områder var der stillet en række yderligere delopgaver. NationalHPC arbejdsgruppen påbegyndte sit arbejde i juni 2019 og har arbejdet frem til aflevering af nærværende rapport søndag den 15. september 2019.

Den stillede opgave, som kan løses på mange forskellige måder, har indbefattet adskillige forskellige synspunkter fra de otte universiteter (via deres repræsentanter i NationalHPC arbejdsgruppen). Det er en betydelig opgave, at give meget specifikke og konkrete bud på løsninger og implementering af de mange komplekse problemstillinger ovenfor. Yderligere har arbejdet for en betydelig del kollideret med planlagte sommerferier for medlemmerne af arbejdsgruppen. Selv med en stor arbejdsindsats har dette presset arbejdsgruppens arbejde betydeligt. Derfor har arbejdsgruppen fokuseret på de overordnede linjer, hvilket giver mulighed for at udfolde specifikke løsninger senere.

NationalHPC arbejdsgruppen har afholdt et antal fysiske møder samt tele-konferencer i plenum og desuden et stort antal telefonmøder med få deltagere for at levere bidrag til diskussionerne undervejs. På trods af mange forskelligartede synspunkter er alle enige om og står bag nærværende rapport.

Rapporten med anbefalinger er opbygget som:

- Afsnit 1-4: Beskrivende afsnit samt anbefalinger og disses udfoldning.
- Afsnit 5: Overordnede anbefalinger.
- Afsnit 6: Referencer.
- Afsnit 7: Forkortelsesliste.

September 2019

Christian Storm Pedersen
Steffen Andersen
Henning Christiansen
Philippe Bonnet
Hans Henrik Happe
Thomas Schrøder
Claudio Pica
Torben Larsen

Indholdsfortegnelse

1	DE VIDENSKABELIGE OMRÅDERS HPC-BEHOV.....	5
1.1	NATURVIDENSKAB, TEKNISK VIDENSKAB OG SUNDHEDSVIDENSKAB.....	5
1.2	SAMFUNDSVIDENSKAB OG HUMANISTISK VIDENSKAB.....	6
2	HPC-ANLÆG DÆKKENDE DE VIDENSKABELIGE HOVEDOMRÅDER.....	6
2.1	INTERNATIONALE ANLÆG OG DERES ADGANG.....	6
2.2	NATIONALE BEHOV FOR HPC-ANLÆG.....	6
2.3	RELATIONER TIL DATA MANAGEMENT OG STORAGE.....	8
2.4	PROCES FOR ETABLERING.....	9
2.5	KRAV TIL INTEGRATION.....	9
3	UNDERSTØTTENDE SUPPORT- OG KOMPETENCELANDSKAB.....	10
3.1	KOMPETENCELØFT AF NYE HPC-BRUGERE.....	11
4	INTERNATIONALT SAMARBEJDE.....	12
5	ANBEFALINGER.....	12
6	REFERENCER.....	13
7	FORKORTELSER.....	13

1 De videnskabelige områders HPC-behov

De fem hovedområder har både nogle fælles og nogle separate behov for adgang til HPC-anlæg og support. Et overblik dækkende hovedområders behov for HPC er sammenstykket ud fra NationalHPC arbejdsgruppens erfaringer, inspiration fra andre lande og ikke mindst tidligere afholdte workshops/spørgeskemaer og andet fra flere danske universiteter. Dette har afdækket, at der er mange fællestræk mellem 1) naturvidenskab, teknisk videnskab og sundhedsvidenskab, og 2) samfundsvidenskab og humanistisk videnskab. Teknologiudviklingen indenfor både hardware og software går særdeles stærkt og arbejdsgruppen søger derfor at anbefale *typer* af anlæg mere end teknologispecifikke eller specifikke implementeringer af anlæg. De forskellige anlægstyper er omtalt i flere detaljer i Afsnit 2 – i Afsnit 1 anvendes derfor en mere overordnet tilgang til og brug af typerne for at skitsere de forskellige brugeres behov.

Der er for NationalHPC arbejdsgruppen ingen tvivl om, at aktuelle anlæg samt fremtidige top-ydende HPC-anlæg er baseret på accelererede enheder, som også vil have et fokus på energieffektivitet. Der er også udvikling i retning af øget beregning i forbindelse med memory og storage, hvilket giver en kompleks beregningsplatform.

Anlægstyper som bør være tilgængelig for alle danske forskere uanset videnskabeligt hovedområde er:

- **Interactive HPC:** Denne type vil oftest være første bekendtskab med HPC, når den enkelte forskers egen bærbare eller desktop computer er utilstrækkelig på grund af beregningskraft, storage eller memory. Også erfarne brugere kan være brugere af denne anlægstype til prototyping og idéudvikling, ligesom det vil kunne være studerendes første tilgang til HPC-anlæg. Det kan potentielt være muligt at starte instanser af programmel på fler-kerne CPU'er med forskellige memory konfigurationer og GPU'er. Denne facilitet skal leveres "as-a-service", så danske forskere kan tilgå data på et "netværksdrev" fra alle lokationer. Dette er en nødvendig "storage" tilgang men i flere tilfælde skal der være højtydende storage ved de enkelte HPC-anlæg for at udnytte beregningskapaciteten effektivt.
- **Throughput HPC:** Denne anlægstype leverer ofte en høj beregningsperformance til problemer med lang eksekveringstid. Der er primær fokus på hvor mange jobs, der kan færdiggøres på en vis tid. Problemer indenfor sundhedsvidenskab, tekniske simuleringer, kemi, fysik og bioinformatik i bred forstand, hvor der ofte vil være krav om HPC-anlæg med fokus på høj "throughput performance". Anlægstypen kan også kræve sikker håndtering af personhenførbare data.

Flere brugere peger på vigtigheden af, at de selv kan installere software efter behov i beskyttede miljøer på de enkelte HPC-anlæg. Dette stiger i vigtighed med øget fokus på reproducerbarhed, hvor opnåede resultater kan variere med kombinationen af fx compilere og diverse biblioteker af programfunktionalitet.

1.1 Naturvidenskab, Teknisk videnskab og Sundhedsvidenskab

De tre områder naturvidenskab, teknisk videnskab og sundhedsvidenskab har mange overlappende behov for HPC-anlæg og support. Udover de to ovenfor anførte anlægstyper, Interactive HPC og Throughput HPC, er dette:

- **Accelerated HPC & Capability HPC:** Accelerated HPC og Capability HPC dækker typisk over (samtidig) håndtering af mange videnskabelige problemer med fokus på høj peak-performance. Disse anlægstyper bruges på tværs af mange discipliner som fysik, bio-science, simuleringer indenfor det tekniske område, molekylær dynamik, kemi og vejrprognose. Der foregår i øjeblikket en transition af stor-skala HPC-applikationer fra CPU- til GPU-accelererede anlægstyper, men en væsentlig mængde kommerciel og egenudviklet software er stadig, og vil i år fremover være, CPU-baserede. Dog er nogle HPC-applikationer allerede idag GPU-accelererede. Et eksempel er indenfor Kunstig Intelligens med fokus på "deep learning", hvor der er mange forskellige anvendelsesområder med store træningsdatasæt og produktionskørsler, hvilket kræver accelererede beregningsenheder som fx GPU'er.
- **Large Memory HPC:** Dette er en anlægstype som er karakteriseret ved typisk relativt få kerner med adgang til et stort globalt adresserbart memory-område. Anvendelser eksempelvis indenfor visse områder af klassisk kemi, fysik, signalbehandling med fx håndtering af store (sparse) matrixproblemer, kvantekemi, problemer med store PDE-systemer og anvendelser hvor en relativt simpel OpenMP tilgang til udnyttelse af parallelitet er mest hensigtsmæssig.

1.2 Samfundsvidenskab og Humanistisk videnskab

Samfundsvidenskab og humanistisk videnskab er i HPC-sammenhæng stadig i den indledende fase med en stejl indfasningskurve. Der er stort behov for lokal support og for let tilgængelige løsninger som løfter sig fra en traditionel bærbar eller desktop computer til noget med større beregnings-, memory- og/eller storage-kapacitet. Endvidere er der i en del tilfælde brug for at kunne håndtere GDPR data – typisk grundet krav om ophavsret til materiale. Samlet vil anlæg af Interactive HPC anlægstypen kunne indfri den langt største del af behovet suppleret med Throughput HPC anlægstypen.

Repræsentanter fra Kulturarvsclusteret har informeret NationalHPC arbejdsgruppen om, at det tidligere krav til fysisk placering af data i betydelig grad ikke længere er gældende. Dog skal en stor del af data stadig håndteres på et GDPR-compliant anlæg. Arbejdsgruppen ser rent datasikkerhedsmæssigt ingen argumenter for at data fra Kulturarvsclusteret samt Danmarks Statistik og lignende institutioner ikke skulle kunne overføres til nationale DeiC anlæg, der er GDPR-compliant for forskningsfaglige analyser. Dette kan eksempelvis ske på en GDPR-compliant del i relation til anlægstyperne 1 og 2 på Tabel 1. DeiC anbefales at gå aktivt ind i denne problemstilling af hensyn til danske forskere, hvor adskillige efterspørger en langsigtet bæredygtig løsning.

2 HPC-anlæg dækkende de videnskabelige hovedområder

2.1 Internationale anlæg og deres adgang

Der findes en række internationale HPC-anlæg, som typisk er tilgængelige via betaling eller via konkurrence. Betydelige eksempler er:

- DECI (Distributed European Computing Initiative), der ved deltagelse giver adgang til en lang række europæiske HPC anlæg, baseret på bytte af HPC ressourcer.
- PRACE (Partnership for Advanced Computing in Europe), giver ved national betalt medlemskab, peer review baseret adgang til de største europæiske HPC anlæg.
- EuroHPC giver ved EU medlemskab, peer review baseret adgang til 50% af alle EuroHPC ressourcer (driftet hardware for godt 500 millioner Euro).
- EuroHPC LUMI, som er et finsk ledet konsortium, der har Danmark som medlemsland. Danske forskere har via dette en adgang til LUMI. Den danske del udgør i alt 2,82% af LUMI. Den danske del er fordelt som: 1) De danske universiteter: 50%; 2) Uddannelses- og Forskningsministeriet (UFM), peer-review: 45%; og 3) UFM, "sandkasse": 5%. Universiteternes del er til disses disposition efter en aftalt fordelingsnøgle. Hele Danmarks del vil være tilgængelig for danske forskere men efter forskellige mekanismer (fx noget via åben peer review konkurrence og noget via sandkasse-tilgang).
- Nogle danske forskere har gennem konkrete internationale forskersamarbejder i nogle tilfælde adgang til større internationale HPC-anlæg.

Der findes anlæg internationalt, som er rettet mod forskellige anvendelser. Der er dog en tydelig trend i retning af accelerator-baserede anlæg; eksempelvis forventes i en tidlig version af specifikationen for EuroHPC LUMI, at ca. 95% af peak-beregningskapaciteten er baseret på acceleratore (primært GPU'er). Hvis danske forskere skal kunne hjemtage midler eller kørselstid på disse internationale anlæg, er det essentielt at etablere en national support, som opsamler "best practice" viden, skaber internationalt netværk og assisterer forskerne med skrivning af konkurrencedygtige ansøgninger.

Danske forskere modtager stadigt mere data fra internationale samarbejder, enten som generelle konsortium medlemmer eller som partshavere i større eksperimenter. I WLCG-samarbejdet har Danmark en kontrakt med LHC-eksperimentet om at modtage, lagre og arkivere en proportional andel af de data, der genereres på CERN. Data til WLCG modtages på en dedikeret linje og håndteres på en dedikeret installation med meget specielle krav til QoS og interoperabilitet i softwarestakken. De senere år er videnskabelige data begyndt at blive håndteret mere generelt og med mere hensigtsmæssige åbne protokoller.

2.2 Nationale behov for HPC-anlæg

Set over en helhed af forskere er der et nærmest uendeligt behov for forskellige varianter af HPC-anlæg. Ofte ønsker de erfarne HPC-brugere at have adgang til anlæg, som er specifikt optimerede til givne behov. Set fra en national side er det umuligt at opfylde alle ønsker, og NationalHPC arbejdsgruppen har søgt at definere en håndfuld forskellige anlægstyper, uden der nødvendigvis er skarpe skodder mellem

disse. Ud fra Afsnit 1, som er baseret på udsagn fra en stor diversitet af forskere, defineres fem HPC-anlægstyper, som danske forskere bør have adgang til.

NationalHPC arbejdsgruppen har fokuseret på anlægstyper mere end helt specifikke anlæg. Der er fokuseret på typer af anlæg, som arbejdsgruppen mener bør være tilgængeligt for danske forskere. De fem anlægstyper er fremstillet i Tabel 1.

Type 1 er en i national sammenhæng ny anlægstype, hvis karakteristika er en interaktiv tilgang med fokus på at sikre lave barrierer for anvendelse – en HPC-as-a-service tilgang. Type 2 er en maskintype med et stort antal kerner af potentiel varierende beregningsperformance, evne til håndtering af store mængder data og ofte fokus på høj sikkerhed, så GDPR personhenførbare data kan håndteres. Type 3 er en anlægstype, som egner sig til beregningsproblemer med relativt få kerner og store mængder hukommelse, som kan tilgås fra alle kerner. Type 4 peger mod fremtidens accelererede teknologier for storskala HPC-anlæg. Endelig giver anlæg af Type 5 adgang til de klassiske supercomputere, som afvikler få samtidige men store problemer, som kræver enorme beregningsmæssige ressourcer.

Tabel 1: HPC typer danske forskere bør have adgang til.

Titel	Type 1 Interactive HPC	Type 2 Throughput HPC	Type 3 Large Memory HPC	Type 4 Accelerated HPC	Type 5 Capability HPC
Beskrivelse	Fokus på interaktive beregningsressourcer og let tilgang for nye brugere. Desuden vil denne type kunne udgøre en fælles platform for uddannelse. Denne type vil forventeligt øge andelen af nye brugere og bruges til generel prototyping for mere generelle/erfarne HPC-brugere.	Denne anlægstype har typisk et stort antal kerner som kan være et mix mellem kost-effektive og beregnings-effektive enheder med stort throughput kapacitet med ofte høj fokus på sikkerhed. Ideel til mange små og mellemstore jobs, der bruger store data/filer.	Fokus på applikationer som ikke nemt eller effektivt kan distribueres mellem mange computer-noder. Krav om stort fladt memory-space som ved store matrixproblemer eller anvendelser med stor mængde memory og forholdsvis lille antal effektive kerner.	En anlægstype hvis primære beregningskapacitet kommer fra acceleratoren af forskellig slags. Denne muliggør, at danske forskere fremadrettet klædes på til næste generations supercomputere. Det kan være spirende teknologier som FPGA, in-memory og in-storage computing.	En anlægstype med særlig fokus på at løse problemer som kræver et mellemstort til stort antal computer-noder samtidigt. Få og store problemer samtidigt som løses hurtigst muligt. Dette kan fx være EuroHPC LUMI sub-exa-scale anlægget.
Primær(e) beregningsenhed(er)	CPU, GPU; Tynde og/eller tykke noder	CPU	CPU	CPU, FPGA, "Next generation GPUs", computational storage og evt. andre relevante enheder	CPU, GPU
Interconnect	Ikke nødvendigt	Low latency	Shared: Ikke nødvendigt Cluster: Low latency	Low latency	Low latency
Access	Interaktiv	Jobbaseret	Jobbaseret	Jobbaseret	Jobbaseret

Type 1: Interaktive anlæg som fokuserer på at gøre HPC så let tilgængeligt som muligt for nye brugere – samtidig vil interaktive anlæg ofte være første HPC-anlæg ved prototyping eller ideer til nye metoder til at løse et problem. Denne anlægstype udgør en ressource efter ideen om HPC-as-a-service. Der er fokus på håndtering af mange brugere, som tildeles beregningsressourcer efter tilgængelighed. Typisk vil det være muligt at initiere instanser på 1) en- eller fler-kerne CPU koblet til flere størrelser af memory eller 2) en- eller fler-kerne CPU i kombination med GPU'er. Typisk vil denne anlægstype være første trin op for en forsker fra at bruge egen bærbar eller desktop computer grundet lang eksekveringstid, memory eller storage krav. Det skal være muligt for alle danske forskere at logge på denne anlægstype uanset fysisk lokation med medfølgende "netværksdrev", som typisk vil være fysisk placeret på brugerens hjem-universitet.

Type 2: Throughput anlægstypen har mange kerner, som afhængig af anvendelse og setup kan være kost-optimale eller performance-optimale. Der er typisk krav til håndtering af store mængder data og fokus på at kunne afvikle mange jobs indenfor typisk længere eksekveringstid. Desuden skal anlægstypen (eller en del af den) ofte kunne håndtere personhenførbare data. Eksempelvis anlæg der vil kunne passe til bioinformatik, sundhedsvidenskab og befolkningsanalyser, men også andre anvendelser.

Type 3: Anlæg af Large Memory typen er rettet mod klassiske HPC-brugere. Anlæg af denne type kan i nogle tilfælde med fordel implementeres som en shared memory maskine, som giver brugeren adgang til et meget stort globalt hukommelsesmæssigt adresseringsrum. Dette gør endvidere programmeringsmodellen nemmere tilgængelig for brugeren. Grundet maskinens arkitektur vil det være muligt at have store mængder hukommelse til en tråd, og det vil ikke være nødvendigt at kommunikere over netværk ved parallelle beregninger (i stedet kan OpenMP bruges). Anlæg af denne type kan også laves som et cluster, hvilket kræver anvendelse af en mere kompleks programmeringsmodel med større kompetencekrav til brugeren. Large Memory anlægstypen er rettet mod brugere som fx arbejder med kvantekemi, signalbehandling, og store (sparse) matrix-problemer.

Type 4: Anlæg af Accelerated typen er tænkt som fremtidens HPC-anlægstype med fokus på accelerators, som forventes at være de nyeste (ikke mainstream) GPU'er og andre slags accelerators. Dette kan være kommende generationer af FPGA, in-memory computing og in-storage computing, som vil give forskerne flere nye programmeringsmodeller end dagens GPU-type. Dette vil give danske forskere mulighed for at udvikle deres applikationer inden teknologierne ses i stor-skala anlæg.

Type 5: Anlæg af Capability typen henviser til supercomputer anlæg, der har som fokus at håndtere de største og mest beregningskrævende problemer på anlæg med få samtidigt kørende problemer. Normalt er der tale om performanceoptimerede anlæg med store krav til rå ydeevne beregningsmæssigt og relativt hurtige eksekveringstider. EuroHPC og LUMI forventes i større grad at kunne dække behovet for dagens cluster-brugere.

Bemærk at konkrete fysiske HPC-anlæg (installationer) kan dække mere end en anlægstype, men også at en anlægstype kan kræve flere fysiske HPC-anlæg (installationer). Dette afhænger af de enkelte HPC-anlægs karakteristika. Alle anlægstyper skal naturligvis kunne håndtere brugernes data på en sikker måde, så de ikke kan læses af andre. Men kun i særlige tilfælde (fx Type 2) etableres denne som et GDPR-compliant anlæg, som kan håndtere personhenførbare data med skrappe krav til brugeradskillelse, brugerhåndtering, logning, procedurer mv.

Anlægsspecifik supportkompetence bør følge med opbygning og drift af et givet fysisk HPC-anlæg. Denne kompetence skal være dybere og reflektere den nære adgang til anlægget end den mere generiske support, som et brugeruniversitet kan og skal tilbyde.

2.3 Relationer til data management og storage

Forskningsdata af forskellig slags er i dag et betydeligt resultat af forskning. Data skal lagres og arkiveres effektivt, så det er tilgængelig for forskere under og efter den periode, hvor forskningen gennemføres. Der er mange politikker og best-practices, som skal eller bør overholdes ved behandling af forskningsdata. Det ligger naturligt i national data management og storage regi at facilitere dette, men HPC bør anses som en væsentlig spiller.

Både lokale, nationale og internationale HPC-anlæg kan blive storforbrugere af national storage. Årsagen er, at et mål med HPC-anlæg er at behandle data og skabe nye resultater, som skal gemmes i kortere eller længere tid. National arkivering kan her indgå som et sikkert og trygt sted, hvor HPC-brugere kan få opbevaret resultater inklusive meta-data i længere tid. Storage i HPC-anlæg fokuserer på performance og ikke på mængde eller langtidsopbevaring. Det er også dyrt at lave hurtig storage med meget plads. Derfor komplementerer HPC-storage og national storage hinanden godt, både funktions- og performance-mæssigt samt økonomisk.

En ensartet og sikker adgang til national storage fra de nationale HPC-anlæg passer også godt ind i visionen om HPC-as-a-service, da brugerne vil kunne tilgå data uanset lokation. Hvis man ønsker at udnytte ydelsen i det lokale HPC-storage, kræver det, at man flytter data. Imidlertid vil det foregå på samme måde på alle nationale anlæg. Det nationale storage skal også kunne tilgås fra lokale og internationale HPC-anlæg via gængse metoder, da man her ikke kan diktere den tilgængelige funktionalitet.

Mængden af data vil stille store performance-krav til det nationale storage. HPC-brugere skal hurtigt kunne modtage og sende data fra HPC-anlæggene. På store internationale anlæg er der grænser for, hvor længe brugerne må have data liggende efter endt kørsel. Her bør national storage hjælpe med hjemtagelse af data.

Automatisering af overførelser i forbindelse med job kørsel (staging), bør også kunne faciliteres. Dette kunne tænkes som et led i data management, men også bare som et normalt workflow for HPC-brugere.

Når data bliver opbevaret på national storage vil datamanagement funktionaliteterne automatisk også blive en del af værktøjskassen for HPC-brugere.

I punktform er ønskerne:

- Tilgå nationalt storage på en ensartet og sikker måde fra alle nationale HPC-anlæg. Det vil her være en fordel, hvis filer er, tilgængelige som hvis de er en del af det lokale HPC-filsystem (dog langsommere).
- Integre med gængse metoder for overførsler på HPC-anlæg.
- Hurtige overførsler af store datasæt til/fra (nationale og internationale) HPC-anlæg. Her skal der sigtes efter at kunne udnytte de 100 Gbit/s forskningsnettet i dag kan tilbyde.
- Facilitere automatiserede overførsler i forbindelse med jobkørsler (staging).

2.4 Proces for etablering

En konkret etablerings- og investeringsplan er et prioriteringsmæssigt spørgsmål, som ligger udover NationalHPC arbejdsgruppens tekniske overvejelser. Desuden vil universiteternes ønsker til de forskellige anlægstyper og deres tidsmæssige indfasning direkte påvirke en konkret etablerings- og investeringsplan.

Grundet ovenstående foreslås derfor en plan for den proces, som DeiC-bestyrelsen efter NationalHPC arbejdsgruppens anbefaling med fordel kan følge:

- DeiC bestyrelsen beskriver skriftligt ønsker til en eller flere anlægstyper.
- DeiC bestyrelsen nedsætter et "bud- og evalueringssudvalg", som forestår den konkrete udformning af det tekniske udbud og som efterfølgende sikrer en transparent evaluering af indkomne bud ud fra DeiC-bestyrelsens overordnede kriterier (bud- og evalueringssokumenter itererer mellem DeiC-bestyrelsen og "bud- og evalueringssudvalget"). "bud- og evalueringssudvalget" anbefales at:
 - have repræsentation fra alle universiteter.
 - inkludere såvel brugere som tekniske eksperter (hvilket sikres af DeiCs bestyrelse).
- "Bud- og evalueringssudvalget" udarbejder konkret budmateriale inkluderende såvel anlægstype som support. Budmaterialet vil fx indeholde:
 - Minimumskrav til anlægstypen.
 - Minimumskrav til brugersupport.
 - Minimumskrav til anlægstypens oppetid.
 - For at optimere forskernes HPC tilgang anbefales, at budgiver medfinansierer mindst 50% af personale til direkte support samt mindst 20% af udgifterne til strøm og serverrum. Udgiftsopgørelsen skal følge en fastlagt, transparent og revisionsgodkendt procedure.
 - Det skal fremgå af budet, om det er et delanlæg eller et fuldt anlæg, som dækker den givne anlægstype. Der er ingen præference for de to muligheder.
- DeiC bestyrelsen godkender "bud- og evalueringssudvalgets" arbejde (evt. efter iteration) og udsender til de otte universiteter.
- Indkomne bud evalueres af "bud- og evalueringssudvalget", og acceptable bud indstilles til bestyrelsen. Den samlede evaluering vil fx indeholde indeholde:
 - Beregninger, storage og support for pengene.
 - Past performance i drift og support af omtalte anlægstype.
 - Budgivers drift og support af aktuelt moderne udstyr, hvor erfaringer direkte vil kunne tages i anvendelse.
 - Hvordan det enkelte bud kan indgå i den samlede løsning for den givne anlægstype.

2.5 Krav til integration

Hvordan brugere identificerer sig og tilgår de nationale anlæg (HPC, storage, mm.) er identitetsskabende for den nationale forskningsinfrastruktur og væsentlig for brugbarheden, men også afgørende for sikkerhed. Ud fra et isoleret sikkerhedsperspektiv burde hvert fysisk HPC-anlæg have adskilte brugerdata-baser (brugernavn/password), men det vil til besværliggøre indgangen for brugere, hvorfor en brugerdatabase "på tværs" er ønskelig. Dette vil også understøtte "as-a-service" tilgangen, som DeiC-bestyrelsen klart ønsker prioriteret.

I linje med "as-a-service" tankegangen bliver WAYF i dag brugt som autentificering på tværs af universiteter til primært webservices. Dvs. man kan bruge det lokale brugernavn/password til at tilgå tvær-

institutionelle systemer. Brugere oprettes og nedlægges decentralt af de deltagende universiteter. De lokale brugernavne/passwords er meget udsatte, da de bruges af mange systemer på universiteterne, hvilket gør dem eksponerede for misbrug. Sikkerhedsmæssigt er WAYF derfor ikke nok i sig selv, men kombineret med multi-faktor autentificering kan det problem løses. Uanset hvilken løsning der vælges, skal multifaktor autentifikation inkluderes.

Det er uklart, hvorvidt WAYF i sig selv kan anvendes på længere sigt til de arbejdsredskaber forskere bruger indenfor HPC og storage. Det vil dog kunne bruges som en første indgang. Der skal derfor udarbejdes en plan for, hvordan dette skal gøres på tværs af de nationale anlæg. Planen skal adressere:

- Skabe en fælles indgang til national infrastruktur og international hvis muligt.
- Hvordan brugeradgang skal fungere.
- Understøtte de værktøjer og protokoller, der anvendes (fx SSH, SFTP og LDAP).
- Hvordan ekstra "identity management" data som f.eks. gruppe-medlemskab kan vedligeholdes.
- Minimere risikoen for at en sikkerhedshændelse på et anlæg spreder sig til andre.
- Minimere risikoen for at eksterne hændelser kompromitterer de nationale anlæg (f.eks. opsnappet WAYF brugernavn/password).

I en overgangsperiode, hvor allerede eksisterende anlæg indgår i et nationalt HPC-center, forventes der ikke at være en teknisk løsning klar, hvorfor der skal udarbejdes procedurer for at opnå den samme tilgængelighed i brugeradgang.

3 Understøttende support- og kompetencelandskab

En gennemgående kommentar fra forskere af alle typer og fra alle videnskabelige områder er at selv det bedste HPC-anlæg intet er bevendt uden forskerens evner til at bruge det. Dette gør support i bred forstand til det helt centrale for udbredelsen af HPC. Support skal være tilgængelig vertikalt i forhold til internationalt, nationalt og lokalt. I forhold til arten af support skal den horisontalt dække fra basal brugersupport af rutinespørgsmål (QA-lignende), via kodeoptimering til teambaseret hjælp til en eller flere forskere om løsning af et videnskabeligt problem. Dette kan opdeles niveaumæssigt som fx følgende, som er inspireret af det, Gauss¹ i Tyskland gør:

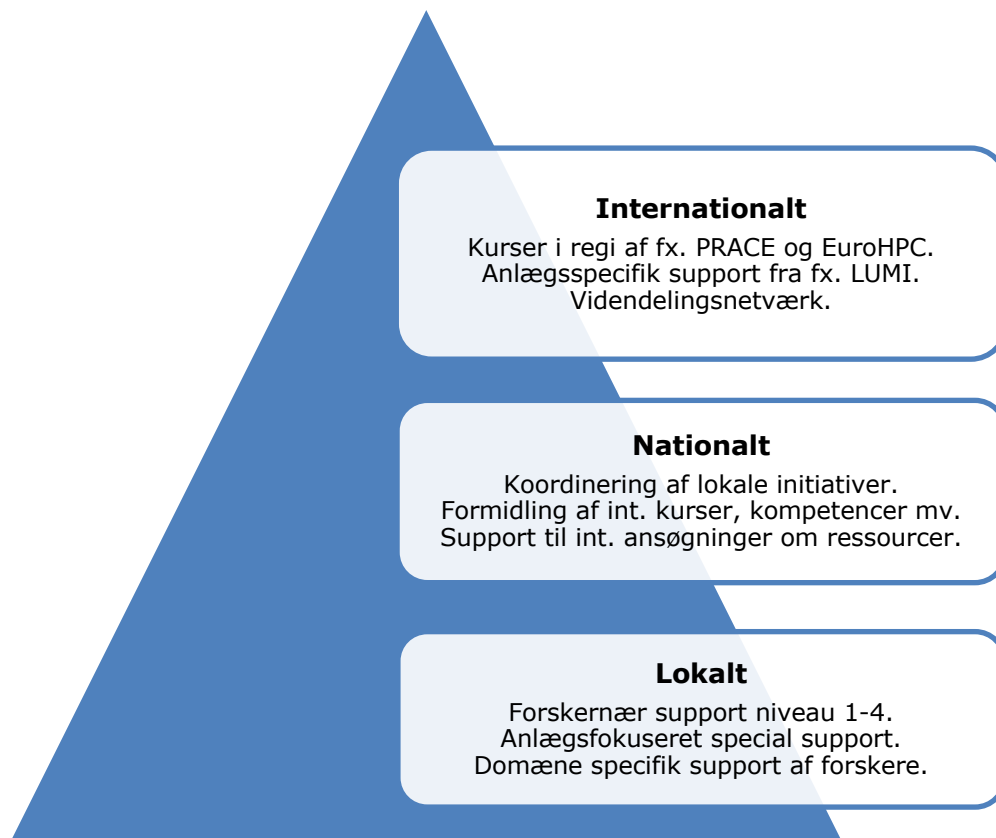
- **Niveau 1:** En service- eller helpdesk, som kan afhjælpe mindre spørgsmål og problemer. Her modtages alle henvendelser som registreres. Efterfølgende løses mindre og afgrænsede opgaver på niveau 1 og ellers løftes opgaven til niveau 2 eller 3. Ved nogle universiteter kan den almindelige IT-support muligvis forestå den indledende behandling og ellers løftes opgaven til niveau 2 eller 3.
- **Niveau 2:** Her håndteres supportopgaver af en kompleksitet og omfang, som ikke uden videre lader sig løse på niveau 1. Dette er opgaver, som kan løses indenfor det faste supportteam, som dækker kompetencer indenfor det relevante anlæg og et udvalgt softwaresæt, data science og data management. Opgaver kan være indenfor kodeoptimering, kode-refactoring, kodeanalyse, datavisualisering og udformning af en datamanagementplan.
- **Niveau 3:** Her håndteres opgaver, som kræver en indsats fra det samlede kompetencesæt dækket af det faste supportteam – altså opgaver, som kræver anlægseksperter, data science ekspertise og data management ekspertise. Opgaverne kan være af såvel kortere som længere tid, hvilket aftales med den relevante forsker eller forskergruppe.
- **Niveau 4:** Her håndteres opgaver, som kræver indsats fra et sæt af kompetencer i supportteamet samt af forskere med relevant domæne-ekspertise. Opgaverne kan være af såvel kortere som længere varighed, hvilket aftales med den relevante forsker eller forskergruppe. Support af denne type vil ofte initieres tidligt i et digitaliseringsforløb, så de rigtige metoder og algoritmer, anlæg, softwarepakker, data managementplaner vælges fra start.
- **Mentor:** For support niveau 2-4 udpeges en mentor, som er "Single Point Of Contact (SPOC)" for fremtidige henvendelser. Mentoren sikrer koordinering med det faste supportteam og eventuelle videnskabelige domæne-eksperter.

Alle universiteter, som drifter en eller flere HPC-installationer, bør tilbyde support efter en model, som kan implementeres som ovenstående. Som minimum bør alle universiteter tilbyde forskerne support på Niveau 1. Udover dette er det vigtigt med en HPC-kompetenceudviklings- og formidlings-strategi for forskerne, som kan indeholde komponenter som:

¹ Se <https://www.gauss-centre.eu/for-users/user-services-and-support/>.

- Kurser og lignende kompetenceudviklende initiativer på lokalt, nationalt og internationalt niveau. Nationalt bør der ske en koordinering af lokale initiativer samt en formidling til nationale interessenter omkring internationale muligheder (fx via PRACE og DECI).
- EuroHPC LUMI konsortiet kan, på grund af Danmarks direkte involvering, passende bruges som platform for opbygning og deling af specialiseret viden i mindre omfang (grundet begrænsede ressourcer) på koordinerede områder.
- En aktiv Web-plattform med webinars, artikler, rapporter, MOOCs, links til internationale ressourcer mv.
- Nationalt formidlet adgang til lokale supportteams indsamlede Q&A, "best practice", deling af udviklede software-pakker/-biblioteker mv.
- Forskerinitierede ERFA-grupper indenfor forskellige områder alt efter forskernes behov.
- National opsamling af viden og direkte ansøgningsstøtte til hjemtag af internationalt konkurrenceudsatte beregningsressourcer til computational sciences.

Som det ses af ovenstående, og illustreret på Figur 1, så skal der ske support og kompetenceudvikling på flere niveauer (lokalt, nationalt og internationalt), og det skal udbydes gennem flere kanaler (fx kurser, og web).



Figur 1: Oversigt over opgaver lokalt, nationalt og internationalt.

3.1 Kompetenceløft af nye HPC-brugere

Et vigtigt fokusområde lokalt, nationalt og internationalt er inklusion af nye brugere og introduktion af HPC til "nye" videnskabelige områder som humanistisk videnskab og samfundsvidenskab. Det er her vigtigt at få identificeret de primære barrierer for anvendelse af HPC i forskningen.

- Adgang til første trin HPC med et absolut minimum af ekstra indsats.
- Adgang til interaktiv HPC (anlægstype 1 på Tabel 1), som mest muligt ligner den grafiske brugergrænseflade man allerede kender og er vant til.
- Niveau 1 support skal være placeret fysisk tæt på nye eller nyere brugere for at afhjælpe diverse barrierer.
- Adgang til læsevenlig dokumentation og videomateriale – herunder adgang til emneorganiseret information.
- Udvikling af koncepter i samarbejde med denne gruppe af brugere.

4 Internationalt samarbejde

Det internationale samarbejde er delvist beskrevet i Afsnit 3. Danmark har plads i EuroHPC LUMIs strategiske og operationelle organer samt medlemskab i EuroHPC og PRACE. NationalHPC arbejdsgruppen anbefaler, at der på nationalt niveau sikres en opsamling af viden fra Danmarks officielle repræsentanter i internationale HPC-fora af strategisk betydning og at denne fra nationalt niveau formidles til universiteterne. Den opsamlede viden indgår endvidere i den support forskerne kan modtage nationalt i forbindelse med hjemtag af internationalt konkurrenceudsatte beregningsressourcer. Det anbefales helt eksplicit at der opbygges effektive kanaler til formidling af de muligheder for optræning som DECI, PRACE og EuroHPC tilbyder. Efter initiativ fra, eller efter godkendelse ved, DeiCs bestyrelse kan en særlig strategisk betinget indsats gøres for at etablere nye samarbejder. Det er pt. ganske usikkert om PRACE fortsat vil kunne eksistere efter etableringen af EuroHPC. Officielt taler begge parter for egen eksistens, men det er også klart, at der uformelt er meget store indbyrdes konflikter i forhold til det fremtidige europæiske HPC-landskab.

5 Anbefalinger

I det følgende beskrives overordnet NationalHPC arbejdsgruppens anbefalinger til DeiC bestyrelsen i relation til udviklingen af det fremtidige nationale HPC landskab. Anbefalingerne er yderligere udfoldet i Afsnit 1-4.

HPC-anlæg:

- Arbejdsgruppen anbefaler, at danske forskere har adgang til anlægstyperne 1-5 i Tabel 1.
- Det anbefales, at der opbygges få og betydelige anlæg under hensyntagen til eksisterende kapacitet og kompetencer samt anvendelsesområdets behov for driftssikkerhed, risikospredning og datanærhed.
- Arbejdsgruppen er af den overbevisning, at dataudtræk fra kilder som eksempelvis Kulturarvsclusteret og Danmarks Statistik bør kunne analyseres på et nationalt DeiC finansieret anlæg med GDPR-compliant lager, og det anbefales, at DeiC tager initiativ til at sikre danske forskere denne mulighed.

Storage:

- Det anbefales, at Type 1 HPC-systemet tilknyttes et lagringssystem, som er tilgængeligt for alle brugere fra deres lokale computere uanset disses fysiske placering (svarende til et "netværksdrev"). Dette matcher DeiC-bestyrelsens ønske til "HPC-as-a-service".
- Det anbefales, at alle typer anlæg har et lokalt storage hvis ydelseskarakteristika matcher de behov, der knytter sig til den givne anlægstype. Dette matcher brugerens ønske om at hente mest mulig performance ud af det givne anlæg.
- Der skal være mulighed for at integrere nuværende og kommende nationale og internationale standarder (herunder EOSC).

Support og kompetence:

- Nationalt (fx i DeiC regi):
 - En lille (<5) enhed med koordinerende og faciliterende funktion.
 - Fokus er at koordinere lokal og international support og sikre etablering og drift af en kontinuerlig videndeling på tværs af universiteter.
 - Facilitere hjemtag af konkurrenceudsatte HPC-ressourcer i specielt EU-regi.
 - Være praktisk knudepunkt for peer review processer omkring fordeling af nationale HPC-ressourcer.
 - Formidling og afvikling af kompetenceopbyggende indsatser på tværs af universiteter.
- Internationalt:
 - Spidskompetence på det givne anlæg i regi af fx EuroHPC eller PRACE.
- Lokalt (på de otte universiteter):
 - Der skabes/driftes support, som matcher det lokale behov indenfor supportniveauer 1-4 i Afsnit 4.
 - En anlægsvært skal tilbyde support jf. det konkrete bud på anlægs- og driftsopgaven – det skal ske via nye stillinger finansieret halvt af anlægsværten og halvt af nationale midler via DeiC.
 - Alle universiteter skal aktivt og konstruktivt indgå i kvalitetsstyrkelse af den danske support via tæt samarbejde og der skal samarbejdes om kompetenceopbygning for forskere, teknikere og administrativt ansatte som nødvendigt og hensigtsmæssigt.
 - Det anbefales, at alle universiteter indgår i en videndeling, kursussamarbejde, idéudveksling mv. på tværs af universiteter og koordineret af DeiCs nationale enhed.

Indfasning:

- Baseret på universiteternes ønsker og DeiC-bestyrelsens strategiske overvejelser for Dansk HPC anbefaler arbejdsgruppen, at DeiC-bestyrelsen overordnet prioriterer indfasningen og tilhørende budget for de forskellige anlæg og tilhørende support.
- Det anbefales, at der etableres et "bud- og evalueringsudvalg", som forestår det praktiske og tekniske elementer for at implementere den valgte strategi. Dette foreslås udført som beskrevet i Afsnit 2.4.

Internationalisering:

- Arbejdsgruppen anbefaler, at der nationalt sker en systematisk opsamling af viden:
 - om hvilke anlæg og institutioner der har forskernes bevågenhed.
 - om de udvalgte anlæg og institutioner og proaktivt søger relevante informationer.
 - fra officielle danske repræsentanter i HPC-relevante organisationer (fx rapporter fra møder og når ellers relevant).
- Det anbefales, at ovenstående enhed sikrer hastig deling af informationen med universiteterne.
- Det anbefales, at DeiC-bestyrelsen udvikler en internationaliseringsstrategi og sikrer at denne matcher universiteternes (og deres forskeres) interesser og behov.

6 Referencer

- [1] DeiC Bestyrelse: "Kommissorium for arbejdsgruppe vedr. forslag til fremtidigt nationalt HPC landskab", maj 2019.
- [2] Uddannelses- og Forskningsministeriet – Styrelsen for Forskning og Uddannelse: "Strategi for nationalt samarbejde om digital forskningsinfrastruktur (Anbefalinger fra strategigruppen)", december 2019, ISBN 978-87-93706-24-8.
- [3] DeiC Bestyrelse: "Indstilling til Rektorkollegiet vedr. behandling af oplæg til fremtidig økonomi og HPC ressourcer fra DeiCs bestyrelse". Marts 2019.

7 Forkortelser

Forkortelse	Beskrivelse
CERN	European Organization for Nuclear Research
CPU	Central Processing Unit
DECI	Distributed European Computing Initiative
DeiC	Danish e-infrastructure Cooperation
FPGA	Field Programmable Gate Arrays
FTP	File Transfer Protocol
GDPR	General Data Protection Regulation
GPU	Graphics Processing Unit
HPC	High Performance Computing
LDAP	Lightweight Directory Access Protocol
LHC	Large Hadron Collider
LUMI	Large Unified Modern Infrastructure
MOOC	Massive Open Online Course
PDE	Partial Differential Equation
PRACE	PartneRship for Advanced Computing in Europe
QoS	Quality of Service
SFTP	Secure File Transfer Protocol (Secure FTP)
SSH	Secure SHell
UFM	Uddannelses- og Forskningsministeriet
WAYF	Where Are You From
WLCG	Worldwide LHC Computing Grid