

Leitfaden Intensivberatungen

HPC.NRW Kompetenznetzwerk

November 15, 2024

1 Ziele dieses Guides

Dieser Leitfaden zur Vermittlung von Intensivberatungen richtet sich an beteiligte Mitarbeiter der Standorte des Kompetenznetzwerks HPC.NRW. Es wird beschrieben wie Support-Anfragen, die an das HPC.NRW Projekt gestellt wurden, behandelt werden sollen. Besonders bei aufwändigen Anfragen können die im Projektnetzwerk vorhandenen Kompetenzen aktiviert werden um einen Beratungscluster für die jeweilige Situation zu bilden.

In Abschnitt 2 werden die erwarteten Nutzer-Gruppen definiert und ein Beratungsablauf geschildert. Der Ablauf wird ebenfalls in der Abbildung auf Seite 8 visualisiert. Der Abschnitt 3 beinhaltet eine Sammlung Informationen, die bei jeder Anfrage angefragt werden sollten.

Dieses Dokument ist als lebendes Dokument gedacht und sollte fortlaufend aktualisiert werden. Änderungen können direkt über das Git Repository¹ eingearbeitet werden. Alternativ können auch Hinweise an Martin Errenst und Marc-André Hermanns² gesendet werden.

2 Anfragen

2.1 Zu beratende Personen

- aus NRW:
 - **NRWothers:** Mitglieder von Forschungseinrichtungen ohne HPC-Ressourcen/Support
 - **NRWinternal:** Mitglieder eines Standorts mit Tier-2/3-Ressourcen/Support
- Mitglieder einer deutschen Forschungseinrichtung außerhalb von NRW
- Sonstige

¹<https://git-ce.rwth-aachen.de/hpc.nrw/ap2/leitfaden-intensivberatung/>

²<mailto:errenst@uni-wuppertal.de>, hermanns@itc.rwth-aachen.de

2.2 Ablauf

Siehe Seite 8 für eine Visualisierung als Flow-chart.

1. **Eingang:** Anfragen die eine intensive Beratung erfordern können über mehrere Kanäle entstehen
 - Lokaler Support des Standorts
 - Externe Mail an helpdesk@hpc.nrw
2. Eingang des Tickets kurz bestätigen und gegebenenfalls fehlende Informationen erfragen (siehe Unterabschnitt 3)
 - Lässt sich die Anfrage durch den Hinweis auf eine demnächst geplante Schulung oder ein existierendes Tutorial beantworten?
 - Schau in den Kalender kommender Schulungen und HPC-Wiki für Tutorials
3. Ein Gitlab-Issue unter ag-nutzendenberatung/Allgemeines erstellen, um dort das Vorgehen zu besprechen und zu protokollieren. Label **Beratung** anhängen. Beispiel: Verbesserung der Software-Architektur eines Fortran MPI CFD Codes in Aachen
4. **Vermittlung:** Ziel ist die Herstellung eines Kontakts zu jemanden mit den passenden Kompetenzen
 - **Lokal:** Gibt es eine lokale Kontaktperson die die Anfrage beantworten kann?
 - Falls nicht, Mailingliste verständigen und den Kontakt anfragen/zuweisen das Thema zu übernehmen.
 - **Über HPC.NRW:** Wenn keine entsprechende Person vor Ort existiert, und über die Mailingliste keine Resonanz kommt, Suche nach Kompetenzen bei anderen HPC.NRW Standorten:
 - Überprüfe die Beratungskompetenzen der Standorte.
 - Kontaktiere einen passende Personen/Standorte.
 - **Clusterbildung:** Zielt die Anfrage auf eine längerfristige Unterstützung eines Forschungsprojekts ab?
 - Koordinatoren übernehmen Clusterbildung zur Unterstützung des Projekts
5. Anfrage wird durch Kontaktperson bearbeitet oder kann nicht beantwortet werden
6. Falls nicht schon geschehen: Bei Abschluss des Support Case im Gitlab-Issue die folgenden Informationen festhalten
 - Personengruppe (NRWinternal, NRWothers, Mitglied einer deutschen Forschungseinrichtung, sonstige)
 - Thema/Problem der Anfrage

- Welche Kompetenzbereiche & Standorte waren involviert?
- Wie viele Treffen gab es? Weitere Angaben zur Abschätzungen des Aufwands, falls vorhanden.

3 Sinnvolle Informationen

- Wer stellt die Anfrage? (Personengruppe)
 - Primärer(e) Kontakt(e) (mit dem/denen interagiert wird)
 - Arbeitsgruppe, Standort
 - In welchem Forschungsgebiet
- Was wird angefragt? Zu welchem Thema? (Abgleich mit Beratungskompetenzen)
 - Debugging
 - Leistungsanalyse
 - Verbesserung domänenspezifischer Verfahren
 - ...
 - Buzzwords/tags zu den Beratungsklustern
- Bei Software Problemen: Welche Software wird eingesetzt?
- Bei Betriebs Problemen: Welche Technologien kommen zum Einsatz? Wie ist die Architektur/das Zusammenspiel?
- Ist der Umfang abschätzbar?
 - Geht es z.B. um die langfristige Unterstützung eines Forschungsprojekts?

3.1 Methoden

- Visualization
 - Welches Parallelisierungsschema wird verwendet: Shared oder Distributed oder Beschleuniger oder Hybrid
 - Welche Decomposition wird für die Parallelisierung eingesetzt
 - In-Situ oder Post.-Processing Visualisierung
 - für In-situ: Live-View oder nur Offline-Rendering
 - Wird eine Volumen- oder Strömungsvisualisierung durchgeführt?
 - Welches Visualisierungsframework wird genutzt?

3.2 Betrieb

- Monitoring
 - Kommt die Abfrage von einem Nutzer oder Admin? (Kann vermutlich ohne Nachfrage beantwortet werden.)
 - Geht es um einen einzelnen Job (wenn ja, single node oder multi-node Job?), einen Knoten oder das gesamte Cluster?
 - Was will man erkennen bzw. was ist das konkrete Ziel durch Monitoring?
 - Wie granular (zeitlich gesehen) soll es sein?
- Research data
 - Wurde Kontakt zur lokalen FDM Einheit aufgenommen?
 - Gibt es einen Datenmanagementplan, spezielle Anforderungen von Fördergebern oder der Fachcommunity?
 - Handelt es sich um sensible Daten? Wie gross ist das Datenvolumen? Speicherdauer der Daten? Redundanzlevel?
 - Wie häufig wird auf die Daten Zugriffen?
 - Ist ein Metadatenschema vorhanden? Wie werden die Daten mit Metadaten angereichert?
 - Wie ist die Datenorganisation geregelt?
- System software & ha solutions
 - System software: Was ist der Output von "uname -a"?
 - HA: Wie soll die HA-Lösung gegen einen Ausfall absichern?
- User & project management
 - Warum soll/muss/wird nun ein Rechenzeit-Antrag gestellt?
 - Wofür benötigt man das Accounting?
- Courses and workshops
 1. Wie ist das Thema des gewünschten Kurses oder Workshops?
 - Allgemeine Einführung in HPC
 - Verwendung eines HPC-Clusters
 - Beantragung von Rechenzeit oder Rechenzeitantraege
 - Bestimmte Softwarecodes oder Pakete
 - Compiler oder HPC-spezifische Bibliotheken, usw.
 - Kurse in bestimmten Programmier- oder Skriptsprachen
 - Codeoptimierung, Debugging usw.

- Sonstiges Thema
- 2. Welcher Kenntnisstand ist erforderlich?
 - Grundlagen
 - Fortgeschritten
- 3. Was ist das bevorzugte Format des Kurses oder Workshops?
 - Online
 - Vor Ort
 - Kurzes Online-Tutorial
 - Eintaegig oder mehrtaegiges Training
- 4. Ist eine Reise an einen anderen Ort fuer den Kurs oder Workshop eine Option?
 - Ja
 - Nein
- Interactive services, cloud/grid-Comp., virt.
 - Containers & Virtualization: Welche Technologie kommt zum Einsatz?

3.3 Fächer

- Physik
 - Angewandte Methode (z.B. Quanten Monte Carlo (QMC), Dichtefunktionaltheorie (DFT), DMRG ...)
 - Was ist das physikalische/chemische Problem / System?
 - Würden Sie sich eher als Softwareentwickler oder Softwarenutzer sehen?
 - * Welche Software?
 - * Lizenz und Sourcecodezugänglichkeit?
 - * Was erhoffen sie sich davon auf ein HPC System zu gehen (z.B. angestrebte Skalierung)?
 - * (Wenn Entwickler) Welche Programmiersprache?
 - * (Wenn Entwickler) Welches "Level"?
 - * (Wenn Entwickler) Was ist aktuell das Hinderniss/Bottleneck? (z.B. Algorithmus, Implementierung, Skalierung)
- Chemie: siehe Fragen bei Physik
- Ingenieurwissenschaften
 - Welches Parallelisierungsschema wird verwendet: Shared oder Distributed oder Beschleuniger oder Hybrid
 - Welche Decomposition wird für die Parallelisierung eingesetzt

- Welcher Anwendungsbereich: Festkörper, Teilchen oder Fluid
- Festkörper: Kontinuum Mechanik oder Starrkörpermechanik
- Fluid: Large-Eddy-Simulation (LES) oder Direct Numerical Simulation (DNS) oder ...
- Informatik
 - Welches Parallelisierungsschema wird verwendet: Shared oder Distributed oder Beschleuniger oder Hybrid
 - Welche Decomposition wird für die Parallelisierung eingesetzt

3.4 Häufige Fragen

Hier FAQ der Mitarbeiter sammeln.

- **Q:** Wie startet die Arbeit in einem der Beratungscluster?
A: In den Meetings der AG Beratung werden laufende Support Cases im Blick behalten. So wird sichergestellt, dass die entsprechenden KoordinatorInnen der Beratungscluster aktiv werden. Danach sind die Koordinatoren der Beratungskompetenzbereiche gefragt, sich entsprechend der Anfrage zusammen zu finden und zu organisieren. Hinweis: die AG-Struktur wird sich wahrscheinlich nach 2024 wieder ändern, sodass dies in den AP2-Sitzungen passieren muss.

Todos

- Buzzwords/Tags für 3 sammeln?



Guidelines für die Vermittlung von Intensivberatungen

<https://hpc.dh.nrw>

