GA
Gauß-Allianz

Empfehlungen zur Etablierung national abgestimmter Beantragungs- und Bewilligungsverfahren

Hoch- und Höchstleistungsrechnen in Deutschland

Diese Publikation entstand im Projekt “Aufbau einer Governance für die Aufgaben der Gauß-Allianz e. V.“. Das Projekt wird gefördert durch das Bayerische Staatsministerium für Bildung und Kultus, Wissenschaft und Kunst, das Hessische Ministerium für Wissenschaft und Kunst, die Johannes Gutenberg-Universität Mainz, das Ministerium für Wissenschaft, Forschung und Kunst Baden-Württemberg, den Regierenden Bürgermeister von Berlin, Senatskanzlei Wissenschaft und Forschung und das Sächsische Staatsministerium für Wissenschaft und Kunst.
Die Verantwortung für den Inhalt dieser Publikation liegt bei dem Gauß-Allianz e. V..

Impressum

Herausgeber: Gauß-Allianz e. V.
Redakteure: GA-Arbeitsgruppe „Begutachtungsverfahren“ – Jens Doleschal, Prof. Dr. Matthias S. Müller, Prof. Dr. Wolfgang E. Nagel, Prof. Dr. Alexander Reinefeld, Dr. Dörte Sternel, Jonas Stolle, Dr. Christian Terboven, Prof. Dr. Ramin Yahyapour
Layout: Gauß-Allianz e. V., www.rembrandt-hennig.de
Bildnachweis: Taiga / fotolia (Umschlag)
September 2017

GA
Gauß-Allianz

Empfehlungen zur Etablierung national abgestimmter Beantragungs- und Bewilligungsverfahren

September 2017

Inhaltsverzeichnis

Vorwort und Zusammenfassung 5
1 Einleitung 7
2 Zentrumsspezifische Beantragungsverfahren 9
2.1 Projektvorbereitungsphase 9
2.2 Antragsstellung 9
3 Zentrumsspezifische Bewilligungsverfahren 13
3.1 Wissenschaftliche Begutachtung 14
3.1.1 Gutachterauswahl 14
3.1.2 Begutachtung 16
3.1.3 Anhörung (opt.) 18
3.1.4 Nachbegutachtung (opt.) 19
3.2 Bewertung, Vergabe, Kontrolle 19
3.2.1 Bewertung 19
3.2.2 Beschlussfassung 19
3.2.3 Migrationsempfehlung (opt.) 20
3.2.4 Durchführung und Kontrolle 20
3.3 Begutachtungszeitpunkte 20
3.4 Rollen, Rechte und Verfahrensregeln 21
4 Antrags- und Bewilligungsverfahren in einem föderierten HPC-Ökosystem 23
4.1 Koordiniert, Hierarchisch und Föderiert 23
4.2 Beantragungsverfahren 25
4.3 Bewilligungsverfahren 26
4.4 Durchführung und Abwicklung 27
Literaturverzeichnis 28
Anhang 29

Vorwort und Zusammenfassung

Die in der Gauß-Allianz (GA) organisierten HPC-Zentren verfügen bereits über eigene Strukturen zur wissenschaftsgeleiteten Begutachtung und Bewilligung von Anträgen für den Zugang zu HPC-Ressourcen. Diese können sich unter Umständen aufgrund von regionalen und nationalen Rahmenbedingungen voneinander unterscheiden, so dass letztendlich verschiedene Anforderungen und Kriterien bei der Begutachtung Anwendung finden.
Zur Förderung der Fairness sowie der Sicherstellung der Qualität in den Antrags- und Zugangsverfahren kommt der Gauß-Allianz als intermediäre Organisation eine bedeutende Rolle bei der Vereinheitlichung respektive bei der deutschlandweiten Abstimmung der Verfahren bei.

In einem ersten Schritt hat die Gauß-Allianz damit begonnen, sich einen Überblick über bestehende Verfahren zur Bewilligung und Vergabe von HPC-Ressourcen im nationalen Hoch- und Höchstleistungsrechnen zu verschaffen. Hierfür wurde ein Fragebogen zu Strukturen und Prozessen bei der Bewilligung von HPC-Ressourcen an alle Mitglieder bzw. deren Begutachtungs-/Lenkungsgremien versendet.

Das vorliegende Dokument stellt eine Empfehlung im Bereich der Beantragungs- und Bewilligungsverfahren für den Zugang zu HPC-Ressourcen im nationalen HPC-Ökosystem dar und soll somit zur Etablierung national abgestimmter Verfahren beitragen.

Mit dem Ziel der Sicherung der wissenschaftlichen Qualität bei der Begutachtung unter Berücksichtigung von Objektivität, Fairness, Transparenz sowie Wirksamkeit der Verfahren strukturiert diese Empfehlung sowohl die Beantragungs- als auch die Bewilligungsphase in unabhängige Bereiche. Zur Unterstützung der Antragssteller sowie zur Sicherung der Qualität im Verfahren wird ausdrücklich die Begleitung der Antragssteller durch HPC-Experten schon in der Vorbereitungsphase einer Antragsstellung empfohlen. Zur Adressierung unterschiedlicher Aspekte der Projektanträge sowie zur Steuerung des Begutachtungsaufwands stellt diese Empfehlung eine Klassifizierung der Projekttypen vor.
Zur Gestaltung der Organisation wie auch der Mechanismen im Bewilligungsverfahren wird eine Einigung auf gemeinsame Kriterien für die Gutachterauswahl und die wissenschaftliche Begutachtung empfohlen. Ergänzt wird dies durch eine Darstellung aller am Bewilligungsverfahren beteiligten Personen und Gremien und ein vom Verfahren abgeleiteten Rollenmodell. Des Weiteren werden Verfahrensregeln adressiert sowie mögliche Begutachtungszeitpunkte mit einer entsprechenden Anwendungsempfehlung dargestellt.
Abschließend stellt diese Empfehlung eine Möglichkeit zur Zusammenführung von autonomen Organisationsverfahren zu einem koordinierten hierarchischen föderierten System vor. Insbesondere werden dabei die Chancen und die Herausforderungen bei der Etablierung eines nationalen Gutachterpools beschrieben sowie auch die Notwendigkeit zur unterstützenden Darstellung der unterschiedlichen Aspekte der Systeme und Verfahren an einer zentralen Stelle wie dem HPC-Portal der Gauß-Allianz dargestellt.

1 Einleitung

Viele Bereiche des modernen wissenschaftlichen Alltags wie zum Beispiel die Projektförderung, die Publikation in Fachzeitschriften und der Zugang zu Forschungsgeräten sind wettbewerbsorientiert. Die wissenschaftliche Qualitätssicherung erfolgt dabei mittels gegenseitiger Kontrolle. Dies gilt auch für den Zugang zu speziellen und hochwertigen aber auch raren IT-Infrastrukturen wie den HPC-Ressourcen im nationalen HPC-Ökosystem, um insbesondere eine effiziente und exzellenz- bzw. qualitätsorientierte Nutzung der Ressourcen sicher zu stellen. Dafür bedarf es entsprechender Regelstrukturen, die dann in den lokalen sowie nationalen Beantragungs- und Bewilligungsverfahren Anwendung finden. Wohldefinierte wissenschaftsgeleitete Regelstrukturen sichern zum einen die im Artikel 5 Absatz III Grundgesetz (GG) geschützten Rechte der Wissenschafts- und Forschungsfreiheit und setzen zum anderen die Hauptbewertungskriterien [4] von Regelstrukturen in geeigneter Weise um:

1. *Fairness*: *gleiche Kriterien und Anforderungen für den Zugang und die Vergabe von HPC-Ressourcen sowie Bewertung der wissenschaftlichen Qualität unabhängig von Zugehörigkeit, Regionalität, Forschungsgebiet, ...;*
2. *Objektivität*: *Unabhängige und neutrale Bewertung der wissenschaftlichen Qualität;*
3. *Transparenz*: *nachvollziehbare Verfahren, Regeln, Kriterien und Entscheidungen sowie frei zugängliche Informationen zu diesen.*

Die in der Gauß-Allianz (GA) organisierten HPC-Zentren verfügen bereits über eigene Regelstrukturen zur wissenschaftsgeleiteten Begutachtung und Bewilligung von Anträgen für den Zugang zu HPC-Ressourcen. Diese können sich unter Umständen aufgrund von regionalen und nationalen Rahmenbedingungen voneinander unterscheiden, so dass letztendlich verschiedene Anforderungen und Kriterien in den Zugangsverfahren Anwendung finden. Eine Vereinheitlichung respektive Abstimmung der Verfahren im nationalen HPC-Ökosystem kann die Qualität der Antrags- und Zugangsverfahren sowohl in Bezug auf Effizienz und Effektivität wie auch hinsichtlich der vorgenannten Bewertungskriterien steigern. Die Darstellung der Randbedingungen für deutschlandweit abgestimmte Beantragungs- und Bewilligungsverfahren sowie die Begleitung der Umsetzung einer solchen Lösung an den verschiedenen Standorten ist unerlässlich und eine erklärte strategische Aufgabe der Gauß-Allianz [1].
Damit folgt die Gauß-Allianz den Überlegungen des Wissenschaftsrates, die er 2012 in seinem Positionspapier zur „Strategische Weiterentwicklung des Hoch- und Höchstleistungsrechnens in Deutschland“ dargelegt hat [2]. Hierin heißt es in Abschnitt II.3 zur Koordination:

> *Eine ausdifferenzierte und arbeitsteilige Struktur der Versorgung mit HPC-Ressourcen erfordert neben einem koordinierten Finanzierungskonzept eine enge Abstimmung der jeweiligen Betreiber von Rechenzentren. Diese müssen [...] auch zu gemeinsam getragenen Kriterien für die Vergabe von Rechenzeit und die Bewertung der wissenschaftlichen Qualität der Nutzungsanträge kommen.*

Das Handbuch des HPCWorld Konsortiums [3] fasst Empfehlungen und Praxismodelle zur Umsetzung eines individuellen peer review Verfahrens beginnend ab der Ausschreibung bis zur Kontrolle und Bewertung des Verfahrens zusammen sowie stellt die am gesamten Verfahren beteiligten Akteure dar. Das Verfahren ist nach eigener Aussage des HPCWorld Konsortiums in der Lage mit ein paar hundert Anträgen umzugehen.
Dagegen liegt der Schwerpunkt dieses Dokumentes in der detaillierten Ausführung der Beantragungs- und Bewilligungsphase mit Blick auf die Abstimmung respektive Vereinheitlichung der nationalen Zugangsverfahren.

Deutschlandweit abgestimmte Beantragungs- und Bewilligungsverfahren für den Zugang zu regionalen und nationalen HPC-Ressourcen sollen den Prozess vereinheitlichen, den bürokratischen Aufwand durch Wiederverwendbarkeit und Homogenisierung reduzieren sowie Fairness, Objektivität und Transparenz sichern. Lokale und regionale Rahmenbedingungen

sollen dabei weiterhin mitberücksichtigt werden können. Zudem soll die Zusammenarbeit der Lenkungsgremien gefördert und unterstützt werden. Eine Berücksichtigung zukünftiger Rahmenbedingungen durch eine mögliche Einführung eines Verbundes von Kompetenzzentren für „Nationales Hoch- und Höchstleistungsrechnen“ (NHR) ist jedoch zum aktuellen Zeitpunkt nicht möglich.
Bei der Abstimmung der Beantragungs- und Bewilligungsverfahren in einem föderierten System müssen dabei unter anderem die folgenden Aspekte bzw. Fragestellungen berücksichtigt werden:

- Welche Anforderungen und Rahmenbedingungen (z. B. aus der Finanzierung) gibt es bei der Beantragung von HPC-Ressourcen?
- Nach welchen Kriterien wird über die HPC-Ressourcenanträge entschieden?
- Welchen Einfluss haben die am Verfahren beteiligten Akteure?
- Welche Mechanismen, Regeln und Strukturen existieren im Auswahlverfahren um die Qualität des Verfahrens und der Entscheidungen zu sichern?

Im Rahmen dieser Abstimmung finden zudem die folgenden Mehrwerte Beachtung:

- Übersicht über alle bereits gestellten Anträge,
- Schaffung von Synergien,
- Vermeidung von Doppel- bzw. Mehrfachanträgen,
- Vermeidung von Doppelbegutachtungen,
- Reduktion des Aufwands.

Dieses Dokument stellt eine Empfehlung – die regelmäßig evaluiert und an die zukünftigen Gegebenheiten angepasst werden sollte – zur Abstimmung der Beantragungs- und Bewilligungsverfahren für den Zugang zu den nationalen HPC-Ressourcen in einem föderierten System vor. Hierfür wurden bestehende Verfahren der HPC-Zentren der GA auf Basis einer Befragung analysiert und davon abgeleitet ein Struktogramm für einen einheitlichen Beantragungs- und Bewilligungsprozess erstellt (siehe Abbildung 1 sowie Abbildung 7 im Anhang). Dieses dient im Folgenden als Grundgerüst für die verschiedenen Aspekte des gemeinsamen Beantragungs- und Begutachtungskonzeptes. Dabei werden zunächst Mechanismen und Organisation des Verfahrens spezifisch für ein HPC-System im lokalen Kontext eines Zentrums betrachtet und anschließend das Zusammenwirken der verschiedenen Akteure in einem föderierten System dargestellt.

Abbildung 1: Struktogramm des Beantragungs- und Bewilligungsprozesses von HPC-Ressourcen

Beginnend mit der Sicht eines Antragsstellers, beschreibt Abschnitt 2 die lokale, systemspezifische Projektvorbereitung und Antragstellung an einem Zentrum als Basis für die anschließende Begutachtung. Darauf aufbauend beschreibt Abschnitt 3 die Aspekte eines lokalen Bewilligungsverfahren zur Vergabe von HPC-Ressourcen. Abschließend wird in Abschnitt 4 das Zusammenwirken der verschiedenen Akteure in einem nationalen föderierten System dargestellt.

Anmerkung: Zum aktuellen Zeitpunkt konnten die Verfahren von einigen HPC-Zentren der GA aufgrund ihrer thematisch-dedizierten Ausrichtung bzw. aufgrund ihres explizit formulierten Versorgungsauftrags nur bedingt berücksichtigt werden.

2 Zentrumsspezifische Beantragungsverfahren

Vorbemerkung: In Abhängigkeit der jeweiligen regionalen bzw. nationalen Rahmenbedingung sowie des individuellen Versorgungsauftrags können im Folgenden nur einige Aspekte relevant sein. Zum Beispiel sollte geprüft werden, inwiefern eine Notwendigkeit zur Unterscheidung von Projektanträgen besteht und in welchem Umfang diese Differenzierung umgesetzt werden kann. Eine Differenzierung – wo möglich – könnte zum einen zur Gestaltung der Zugangskriterien, z. B. zur Vereinfachung des Zugangs für HPC-Neueinsteiger, sowie auch zur Steuerung des Begutachtungsaufwands eingesetzt werden.

Aus der Perspektive eines Antragsstellers kann ein zentrumsspezifisches Beantragungsverfahren formal in eine Vorbereitungsphase und die Phase der Antragsstellung unterteilt werden.

2.1 Projektvorbereitungsphase

Innerhalb der Vorbereitungsphase klärt der Antragssteller (meist implizit, z. B. durch lokale Faktoren) die folgenden Fragen:

- Welche und wie viele Ressourcen benötige ich zur Umsetzung meines Forschungsprojektes?
- Wer kann mir die entsprechenden Ressourcen unter Berücksichtigung der jeweiligen Zugangskriterien bieten?
- Welche Voraussetzungen und Termine sind bei der Antragsstellung zu beachten?

Zur Sicherung der Qualität und Vollständigkeit der Anträge sowie um den (Erst-)Aufwand der Antragsstellung zu reduzieren, wird empfohlen, die Antragssteller schon im Vorfeld geeignet zu begleiten. Durch Bereitstellung von Informationen über den Antragsprozess (u. a. Zugangskriterien, Voraussetzungen, Termine, ...), der Struktur eines Antrags sowie zum Zugang zu Beratungsleistungen an verschiedenen Stellen (z. B. Webseite, Wiki, Broschüre, ...) können die Antragssteller in geeigneter Weiser unterstützt und die Transparenz erhöht werden.
Mit der Bereitstellung einer gezielten Beratung und Begleitung der Antragsteller im Vorfeld einer Antragsstellung durch erfahrene und kompetente Experten eines Zentrums oder eines Verbundes können sowohl formale Fehler und Unklarheiten frühzeitig erkannt wie auch die Eignung des Projektes für den Einsatz der vorhandenen HPC-Rechner und der Umfang der benötigten Ressourcen überprüft und gegebenenfalls für den Antrag angepasst werden. Besonders HPC-Neueinsteiger können erfahrungsgemäß die HPC-Eignung sowie den Umfang der benötigten Ressourcen schwer abschätzen. Insbesondere reduziert die Implementierung eines umfangreichen Beratungs- und Unterstützungsangebotes im Rahmen verschiedener Qualitätssicherungsmaßnahmen den Aufwand im Bewilligungsverfahren.

Empfehlung: *Sowohl die Erstberatung durch lokale Mitarbeiter der HPC-Zentren wie auch eine geeignete Informationsbereitstellung können den Aufwand für die Antragsteller und aller am Bewilligungsverfahren beteiligten Akteure erheblich reduzieren sowie die Qualität der Anträge signifikant verbessern. Eine abgestimmte kooperative Umsetzung beider Ansätze wird daher nachdrücklich empfohlen.*

2.2 Antragsstellung

Projekttypen und -klassifizierung

In Abhängigkeit der regionalen bzw. nationalen Rahmenbedingungen sowie des jeweiligen Versorgungsauftrags können die lokalen Projekte je nach Bedarf während der Antragsstellung nach dem Zweck, dem Status sowie anhand der benötigten Ressourcen differenziert werden. Abbildung 2 stellt diese Klassifizierung schematisch da. Zum einen kann die Klassifizierung

zur Steuerung des Begutachtungsaufwands sowie unter anderem zur Gestaltung der Zugangskriterien, z. B. für einen vereinfachten Zugang für HPC-Neueinsteiger, eingesetzt werden.

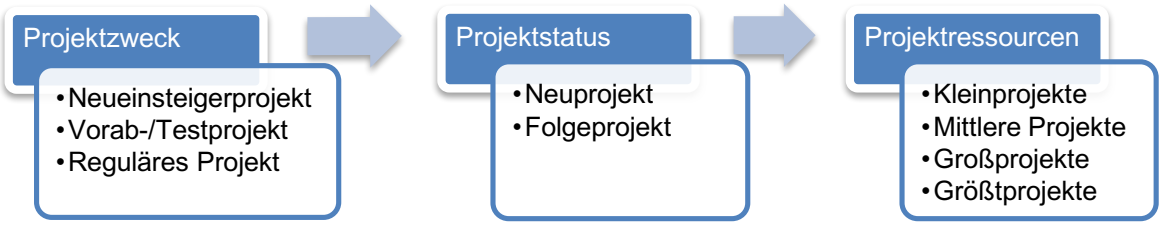

Abbildung 2: Klassifizierung von Projektanträgen nach Zweck, Status und Größe

Definition 1 (Projekttypen):

- **Neueinsteigerprojekte** (bisher: Schnupperaccounts/-kennungen | Kleinstprojekte): Insbesondere geeignet für einen vereinfachten Zugang für HPC-Neueinsteiger auf Ebene 3 und 2.
- **Vorab-/Testprojekt** (auch: Vorab-Accounts | Testaccounts): Insbesondere zur Vorbereitung von (größeren) Projektanträgen, z. B. für Skalierungstests auf Ebene 2 und 1.
- **Kleinprojekte | small projects:** Für Nutzer mit einem geringen Bedarf an HPC-Ressourcen.
- **Mittlere Projekte | medium projects:** Für Nutzer mit einem mittleren Bedarf an HPC-Ressourcen.
- **Großprojekte | large projects:** Für Nutzer mit einem hohen Bedarf an HPC-Ressourcen.
- **Größtprojekte | capability projects:** Für Nutzer mit einem außerordentlich hohen Bedarf an HPC-Ressourcen.

Die in Definition 1 beschriebenen Projekttypen, decken zum einen das gesamte Spektrum aller bisher vorhandenen Projekttypen ab und zum anderen sind diese sowohl universell innerhalb eines HPC-Zentrums wie auch über alle Ebenen der HPC-Pyramide einsetzbar. Die Notwendigkeit zur Klassifizierung bzw. Unterscheidung der Projekte ist dabei abhängig von den jeweiligen Rahmenbedingungen sowie des individuellen Versorgungsauftrags.

Beispiel: *Auf Ebene des GCS (nationales Höchstleistungsrechnen) werden nur Großprojekte mit einem Bedarf von derzeit mehr als 35 Mio. Core-Stunden akzeptiert und begutachtet. Der Nachweis der effizienten Nutzung der Hardware sowie Erfahrungen mit Systemen kleinerer Größe ist Voraussetzung für eine Nutzung der Ebene-1-Zentren. Auf der Ebene 2 dagegen wird meist stärker zwischen den Projekten differenziert.*

Mit der Implementierung verschiedener Projekttypen im lokalen Beantragungsverfahren wird für jedes HPC-Zentrum ein individueller Detailierungsgrad bei der Projektklassifizierung festgelegt. Die Vor-/Nachteile sowie eine Anwendungsempfehlung sind in Tabelle 1 dargestellt.

Aufbau und Metriken eines einheitlichen Projektantrags
Ein strukturierter und vereinheitlichter Aufbau eines Projektantrags im Hinblick auf die für einen Projekttyp erforderlichen Daten und Informationen, welche im Vorfeld geeignet veröffentlicht werden sollten, fördert die Durchschaubarkeit der Antragsstellung sowie Vergleichbarkeit zwischen verschiedenen Projekttypen. Darüber hinaus unterstützt eine Vereinheitlichung die Arbeit der Gutachter im Bewilligungsverfahren.

In Abhängigkeit vom jeweiligen Projekttyp kann der Projektantrag mehr oder weniger umfangreich sein und sollte daher modular gestaltet werden. Weiterhin ermöglicht eine Modularisierung auch eine Begutachtung durch verschiedene Begutachtungsrollen sowie die flexible Anpassung an regionale Randbedingungen für HPC-Projekte.

	Klassifizierung	Vorteile	Nachteile	Anwendungs-empfehlung
1	keine Differenzierung zwischen den Projekten	geringer formaler Aufwand; gleiche Kriterien für alle Projekte;	evtl. (gleich) hoher Begutachtungsaufwand insb. für kleinere Projekte; keine Steuerung des Begutachtungsaufwands möglich;	bei homogenen Projekttypen / Anwendergruppen
2 - 4	einige wenige Projekttypen	Differenzierung zwischen Projekten möglich	mittlerer formaler Aufwand; Prozesse müssen entsprechend definiert werden	bei unterschiedlichen Anwendergruppen; häufigste Klassifizierung im System
> 4	umfangreiche Differenzierung zwischen den Projekten	unterschiedliche Anforderungen in Abhängigkeit von der Projektgröße bzw. der Ressourcenanfrage; Steuerung des Begutachtungs-aufwands möglich;	hoher formaler Aufwand; komplex	bei sehr diversen Projekttypen / Anwendergruppen zur Steuerung des Begutachtungs-aufwands

Tabelle 1: Darstellung des Detailierungsgrads bei der Klassifizierung der Projekttypen

Basierend auf der bisherigen Untersuchung der Metriken der bestehenden Projektanträge durch die Umfrage an den HPC-Zentren der GA wird empfohlen den Antrag in neun unabhängige Bereiche zu unterteilen. Der Aufbau der Bereiche sowie der auszuwählenden Metriken in jedem Bereich ist modular gestaltet, so dass der Antrag durch Auswahl der relevanten Bereiche und deren Metriken sowohl an die in Definition 1 festgelegten Projekttypen wie auch an regionale Randbedingungen angepasst werden kann. In jedem Fall bleibt eine gemeinsame Grundstruktur und Sprache für alle Anträge erhalten.
Abbildung 3 gibt einen Überblick über die neun Bereiche des Antrags. Eine detaillierte Tabelle mit den entsprechenden Metriken befindet sich im Anhang.

Anmerkung: *Sofern Anträge nach ihrer Größe miteinander verglichen werden sollen, muss aufgrund der unterschiedlichen Leistungsfähigkeit und der Diversität der HPC-Ressourcen eine normierte Einheit verwendet werden. Eine Einheit, die diese Thematik adressiert ist die NPL (Norddeutsche Parallelrechner-Leistungseinheit). Auch die Einbeziehung von betriebswirtschaftlichen Faktoren in eine vergleichende Metrik wäre an dieser Stelle denkbar.*

Empfehlung: *Es wird empfohlen die Projekte gemäß der jeweiligen Rahmenbedingungen zu klassifizieren und anschließend für jeden Projekttyp anhand der Strukturierung des Projektantrags (siehe Abbildung 3) die benötigten Bereiche und Kriterien festzulegen.*

Abbildung *3*: Aufbau eines Projektantrags in neun Bereiche

3 Zentrumsspezifische Bewilligungsverfahren

Die gegenseitige Begutachtung zur Bewertung der wissenschaftlichen Aspekte eines Antrags und zur Sicherung der Qualität ist ein Grundsatz in der Wissenschaft. Die einzige dafür international anerkannte Methode in diesem Prozess ist das peer review-Verfahren. Jedoch ist dieses Verfahren per Definition nicht objektiv und fehlerfrei und steht dafür auch immer wieder in der Kritik, z. B. innovative Projekte zu unterschätzen ([4] S. 14, [5] S. 6). Durch den Einsatz einer geeigneten Organisation sowie entsprechender Verfahren und Mechanismen können sowohl Objektivität wie auch Fairness im Bewilligungsverfahren und somit das Vertrauen der Antragssteller in das Verfahren gesichert werden. Bei der Bewertung der Organisation und Mechanismen der Verfahren leiten sich unter anderem die folgenden Fragestellungen ab (vergleiche [4]):

- Welche Regelungsstrukturen sind geeignet um das Vertrauen aller Beteiligten zu gewährleisten?
- Nach welchen Kriterien wird über die HPC-Ressourcenanträge entschieden?
- Welchen Einfluss haben die am Verfahren beteiligten Akteure?
- Welche Mechanismen, Regeln und Strukturen existieren, um die Verlässlichkeit der Auswahlverfahren zu sichern?
- Welche Mechanismen existieren, um die Qualität der Entscheidungen zu sichern?

Ziel der Verfahren ist eine effiziente wissenschaftliche Beurteilung der Qualität des Antrags nach einheitlichen Kriterien mit einer abschließenden Entscheidung über die Vergabe der vorhandenen Ressourcen. Dieser Abschnitt beschreibt die verschiedenen Aspekte im Rahmen eines zentrumsspezifischen Bewilligungsverfahrens. Dazu gehören die verschiedenen Ebenen der Begutachtung, die Auswahl der Gutachter, die Begutachtungszeitpunkte – die sich aus den Projekttypen ergeben –, den Rechten der Antragssteller sowie den verschiedenen Rollen und deren Einfluss im Verfahren.

Anmerkung: Im gesamten Verfahren ist auf die Vertraulichkeit aller Daten besonders zu achten.

Im Rahmen eines zentrumsspezifischen Bewilligungsverfahrens sind in Abhängigkeit der jeweiligen Rahmenbedingungen der formale, technische sowie wissenschaftliche Aspekt des Antrags zu überprüfen. Das Verfahren kann daher in die folgenden vier Bereiche gegliedert werden:

1. **Formale Prüfung (obligatorisch):** Überprüfung der formalen Bedingungen eines Projektantrags. Je nach Umsetzbarkeit wird empfohlen, dies technisch zu automatisieren, z. B. implizit durch Einsatz von Self-Service-Portalen und entsprechender Authentifizierungs- und Autorisierungsinfrastrukturen. Zur formalen Begutachtung gehören unter anderem die Überprüfung der jeweiligen Zugangskriterien (z. B. Lokalität, Disziplinarität, ...).
2. **Technische Prüfung:** Dient der Überprüfung der HPC-Eignung sowie der Eignung für die Systeme und Architekturen sowie der Prüfung der Softwarevoraussetzungen.
3. **Wissenschaftsgeleitete Begutachtung:** Begutachtung nach wissenschaftlichen Aspekten, welche in Abhängigkeit des Projekttyps unterschiedlich umfangreich durchgeführt werden muss.
4. **Bewertung, Vergabe und Kontrolle:** Auf Basis der Gutachten müssen die Anträge bewertet und bei Bedarf untereinander verglichen werden. Abschließend erfolgt eine Vergabe der Ressourcen. Nach Ablauf des Projektes sollte eine Abschlussbegutachtung mit einem Soll-/Ist-Vergleich erfolgen.

Es wird empfohlen, mit einer formalen Überprüfung der Anträge zur Sicherstellung der formalen Bedingungen (z. B. Zugangskriterien wie Lokalität oder Fachzugehörigkeit bei thematisch-dedizierten Zentren) und einer anschließenden technischen Überprüfung der Anträge im Bewilligungsverfahren zu beginnen. Damit kann sichergestellt werden, dass nur formal und technisch erfolgreich geprüfte und somit für das Zentrum relevante Anträge wissenschaftlich begutachtet werden. Eine gut abgestimmte Begleitung der Projektvorbereitung (siehe Abschnitt 2.1) kann dabei sowohl die formale als auch die technische Überprüfung stark verkürzen oder gar ersetzen.
Kernphase in dem Bewilligungsverfahren ist die wissenschaftliche Begutachtung nach im Vorfeld festgelegten und veröffentlichten Kriterien. Auf Basis der Gutachten wird anschließend eine Bewertung der Anträge erstellt sowie bei Bedarf miteinander verglichen und eine Ordnung erstellt. Abschließend erfolgt die Vergabe der HPC-Ressourcen. Nach einer festgelegten Periode bzw. nach Abschluss des Projektes sollte eine Zwischen-/Abschlussbegutachtung mit einem Soll-/Ist-Vergleich erfolgen.

Die in Abschnitt 2.2 vorgestellten Projekttypen unterscheiden sich unter anderem im Umfang der benötigten Ressourcen, der Erfahrung der Antragssteller im HPC sowie im Zweck. Zur Steuerung des Begutachtungsaufwands sollte für jeden Projekttyp geprüft werden, ob alle vier Phasen des Bewilligungsverfahrens erforderlich sind. Eine formale Prüfung sollte aber in jedem Fall obligatorisch sein.
Insbesondere bei Neueinsteiger-Projekten sowie Vorab- und Testprojekte könnte je nach Möglichkeit auf eine (aufwändige) wissenschaftliche Begutachtung verzichtet werden.

Empfehlung: *Je nach Rahmenbedingung und Versorgungsauftrag sollte für jeden Projekttyp der entsprechende Begutachtungsumfang definiert werden. Insbesondere für Neueinsteiger-/ Kleinprojekte sollte geprüft werden, ob der Begutachtungsaufwand – wo möglich in Abhängigkeit von den Rahmenbedingungen – minimiert werden kann.*

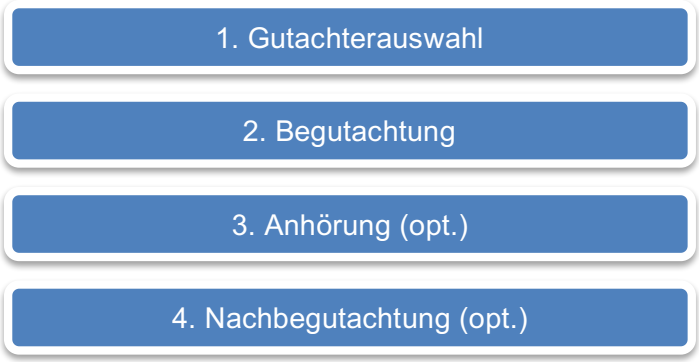

Abbildung 4: Prozessablauf der wissenschaftlichen Begutachtung für die Vergabe von HPC-Ressourcen

3.1 Wissenschaftliche Begutachtung

Die wissenschaftliche Begutachtung schließt sich einer erfolgreichen formalen sowie technischen Prüfung an. Diese kann schematisch wie in Abbildung 4 dargestellt erfolgen. Der Ablauf orientiert sich an den Verfahren der DFG, ANR sowie ERC (siehe [4]) und ist auch vergleichbar mit dem Prozess in einem Begutachtungsverfahren für wissenschaftliche Publikationen[1].

3.1.1 Gutachterauswahl

Eine Säule eines wissenschaftsgeleiteten Begutachtungsverfahren ist die Auswahl und Verfügbarkeit von Wissenschaftlern mit ausgewiesener disziplinärer Expertise. Bei der Auswahl

[1] Siehe https://www.elsevier.com/reviewers/what-is-peer-review (Stand: 20. Januar 2017)

der Gutachter kann dabei generell zwischen einem festen Gutachterstamm oder einer dynamischen Auswahl von Gutachtern für einzelne Anträge oder Begutachtungsphasen unterschieden werden. Oftmals stellt für einige Zentren jedoch schon die Verfügbarkeit von disziplinären Gutachtern eine Herausforderung bei der Auswahl der Gutachter dar.
Während bei einem festen zentrumsspezifischen Gutachterstamm meist die Verfügbarkeit, die Bereitschaft der Gutachter zur Erstellung von Gutachten sowie die gleichbleibende Qualität der Gutachten besser sichergestellt werden kann, so besteht jedoch die Gefahr, dass ein zu kleiner Gutachterpool schnell zur Überlastung der Gutachter führen kann.
Durch den Einsatz von größeren, dynamischen Gutachterpools innerhalb eines Zentrums steigt die Wahrscheinlichkeit, dass ausreichend disziplinäre Gutachter zur Verfügung stehen und zur Steigerung der Objektivität des Verfahrens beitragen können. Jedoch kann die Vergleichbarkeit der Gutachten aufgrund unterschiedlicher Qualität erschwert werden. Durch verschiedene Maßnahmen wie z. B. den in der DFG verfügbaren Hinweisen zur schriftlichen Begutachtung[2] und weiteren Kontrollfunktionen zur Wahrung der Qualität der Gutachten kann diese zumindest in einem gewissen Maß gesichert werden. Darüber hinaus kann ein dynamischer Gutachterpool zur Reduzierung der Arbeitsbelastung beitragen. Jedoch stellt der Aufbau eines solchen Pools insbesondere im Hinblick auf den damit verbundenen Aufwand für viele Zentren eine Herausforderung dar.
Zur stetigen Erweiterung der Gutachterpools sowie zur Steigerung des Vertrauens der Antragssteller in das Bewilligungsverfahren sollte die Möglichkeit zur Implementierung eines Prozesses zum Vorschlagen und zur Zulassung eines Gutachters evaluiert werden. Zwar könnte dadurch die Gefahr von sogenannten Gutachterzirkeln erhöht werden, sofern aber mindestens zwei und bei Unstimmigkeit weitere Gutachter in die Begutachtung einbezogen werden, könnte die Wirksamkeit des Verfahrens trotzdem gewährleistet werden. Zudem sollte darauf geachtet werden, dass feste Gutachterpools einer angemessenen Fluktuation unterliegen, die ein Gleichgewicht zwischen Kontinuität und Objektivität sicherstellt.

Die Auswahl der Gutachter selbst sollte nach allgemein gültigen Kriterien erfolgen. Als Referenz kann hierbei die Befragung der Fachkollegiaten der DFG dienen, für die die folgenden Kriterien bei der Auswahl der Gutachter am wichtigsten sind [5]:

1. „Vertrautheit mit dem Forschungsfeld sowie HPC-Erfahrung (Algorithmen, Anwendungen, Architektur)“
2. „Distanz zum Antragssteller“
3. „Möglichst breiter Überblick über das Forschungsfeld“

Darüber hinaus könnten noch die „Arbeitsbelastung“, „Einbeziehung von Jung-Wissenschaftlern“ sowie „Internationale Wissenschaftler“ als erweiterte Kriterien hinzugezogen werden. Insbesondere die fortlaufende Einbindung von Nachwuchswissenschaftlern unter Berücksichtigung der Ausgewogenheit ist von hoher Bedeutung, um langfristig die Verfügbarkeit von qualifizierten Gutachtern zu sichern. Speziell für kleinere Fachdisziplinen in denen es sehr schwierig ist adäquate Gutachter zu finden, sind zudem Gutachten von internationalen Wissenschaftlern als Ergänzung sehr wichtig.

Zur Sicherung der Distanz zum Antragssteller und zur Überprüfung der Befangenheit können die Hinweise der DFG zu Fragen der Befangenheit dienen[3]. Die Überprüfung der Befangenheit kann sowohl als Selbstkontrolle der Gutachter oder mit einer zusätzlichen Kontrollinstanz erfolgen, welche aber mit nicht unerheblichen Aufwand verbunden sein wird und darüber hinaus wird nicht in allen Fällen eine hundertprozentige Kontrolle möglich sein. Die Selbstkontrolle ist gängige Praxis bei verschiedenen Förderorganisationen, wie z. B. der DFG, und das Vertrauen

[2] DFG, Hinweise zur schriftlichen Begutachtung: http://www.dfg.de/formulare/10_20/10_20_de.pdf
[3] DFG, Hinweise zu Fragen der Befangenheit: http://www.dfg.de/formulare/10_201/10_201_de.pdf

basiert auf der Einhaltung der Verhaltensnormen zur Sicherung guter wissenschaftlicher Praxis[4].
Zur Sicherung der Transparenz bei der Gutachterauswahl sollte klar festgelegt werden, welches Gremium oder welcher Personenkreis anhand welcher Kriterien die Gutachter auswählt. Dies sollte auch entsprechend protokolliert und geeignet dargestellt werden. Da die Auswahl der Gutachter einen signifikanten Einfluss auf das Verfahren hat, sollte eine Möglichkeit zur unabhängigen Kontrolle der Entscheidung im Prozess implementiert werden.

Die Bereitschaft der Gutachter eine Rolle im Bewilligungsverfahren zu übernehmen ist unter anderem stark abhängig von der Anzahl der zu begutachtenden Anträge, d. h. der bisherigen, aktuellen und zu erwartenden Arbeitsbelastung. In verschiedenen Förderorganisationen werden dabei oftmals zuerst monetäre Aspekte zur Belohnung angebracht. Innerhalb der Fachkollegiaten der DFG wird dies aber deutlich abgelehnt ([6] S. 4). Zum einen ist die Beurteilung von Anträgen reputationsfördernd und zudem bietet es die Möglichkeit der Einflussnahme auf die Entwicklung einer Disziplin ([4], S. 59). Um die Gutachtertätigkeit stärker zu würdigen, sollte unter Berücksichtigung des Datenschutzes und der Geheimhaltung im Verfahren evaluiert werden, inwiefern reputationsfördernde Maßnahmen, z. B. durch Veröffentlichung der Gutachter zu festgelegten Zeitpunkten und an einer geeigneten Stelle, umgesetzt werden können. In jedem Fall sollten Verfahren zur Übernahme von Unkosten im Rahmen der Gutachtertätigkeit (z. B. Reisekosten) entwickelt und umgesetzt werden.

Empfehlung: *Bei der Festlegung auf eine Variante zur Umsetzung eines Gutachterpools sollten die Zeitpunkte der Begutachtung wie auch die weiteren Rahmenbedingungen berücksichtigt werden. Insbesondere wird bei einer kontinuierlichen Begutachtung aufgrund der Kurzfristigkeit der Begutachtung eher ein Verfahren mit einem festen Gutachterstamm in Frage kommen. Ein fester Gutachterpool kann eine kontinuierliche Qualität sicherstellen, sollte aber eine hinreichende Fluktuation zulassen und sich bei der Anzahl der Mitglieder an der Größe des HPC-Zentrums und der Anzahl der zu erwartenden Anträge orientieren. Zur Sicherung von Akzeptanz und Vertrauen in das Bewilligungsverfahren sollte auf Transparenz, anerkannte Kriterien bei der Gutachterauswahl, auf die Vermeidung von Gutachterzirkeln sowie auf die Belohnung der Gutachter geachtet werden.*

3.1.2 Begutachtung

Zu Beginn der Begutachtung sind durch den Gutachter die folgenden Aspekte (vergleiche die Hinweise der DFG zur schriftlichen Begutachtung[2]) zu überprüfen:

1. Prüfung der eigenen fachlichen Zuständigkeit
2. Ausschluss der Befangenheit

Innerhalb der Begutachtung der Projektanträge muss mit Hilfe von im Vorfeld festgelegten Kriterien die wissenschaftliche Qualität der Anträge beurteilt werden. Im Gegensatz zur Begutachtung von wissenschaftlichen Publikationen basiert die Begutachtung von Projektanträgen zum Zugang zu HPC-Ressourcen auf der prognostischen Bewertung eines Antrags sowie den bisherigen Leistungen der Antragssteller. Darüber hinaus muss bei der Gestaltung der Kriterien für Projekte aus dem Bereich der Grundlagenforschung berücksichtigt werden, dass ein etabliertes Wissen, aus dem sich eindeutige Kriterien für die Beurteilung der Qualität ergeben, fehlt ([4] S. 167).

Als Grundlage für eine abgestimmte Begutachtung werden die folgenden vier Hauptkriterien empfohlen, die sich an den Kriterien der DFG bei der schriftlichen Begutachtung im Einzelverfahren orientieren sowie aus den Antworten der bisherigen Verfahren hervorgehen:

[4] DFG, Sicherung guter wissenschaftlicher Praxis: http://www.dfg.de/foerderung/grundlagen_rahmenbedingungen/gwp/

1. **Kriterium „Wissenschaftliche Qualität“**
   - Wissenschaftliche Bedeutung | Scientific relevance
   - Qualität des HPC-Ansatzes (z. B. Algorithmen und Methoden) | HPC approach (algorithms and methods) bzw. auf Ebene 1: Exzellenz des HPC-Ansatzes | Excellence in HPC approach
   - Mehrwert und Abgrenzung zu existierenden Projekten | Additional value compared to other projects
   - Originalität | Originality or Genuineness
   - Besondere Bedeutung aus anderen Gründen (wissenschafts-politisch, gesellsch.-politisch, ...) | Particular relevance (science-political, socio-political, ...)

2. **Kriterium „Qualifikation der Antragstellenden sowie Projektmitarbeiter“**
   - Erfahrung des Antragsstellenden sowohl fachlich als auch im Bereich HPC | Experience and professional qualification of the PI in HPC
   - Hinreichende Expertise bei Projektmitarbeitern | Sufficient expertise of project team members

3. **Kriterium „HPC-Notwendigkeit und Eignung“**
   - Notwendigkeit zur Nutzung von HPC-Ressourcen | Need for utilisation of HPC resources
   - Nachweis der Skalierung bzw. der effizienten Nutzung der HPC-Ressourcen | Scalability and efficiency of resource usage
   - Angemessener Ressourcenbedarf | Requested resources adequately justified

   Anmerkung: Insbesondere geht es bei diesem Kriterium nicht um die Eignung und Umsetzbarkeit für das konkrete HPC-System des Zentrums an dem der Antrag gestellt wird, sondern um die Notwendigkeit und Eignung der wissenschaftlichen Aufgabe für die Umsetzung mit HPC-Ressourcen im Allgemeinen und die Beurteilung der angeforderten Ressourcen in Bezug auf die Projektziele.

4. **Kriterium „Ziele und Arbeitsprogramm“**
   - Klarheit der Hypothesen und Eingrenzung der Thematik | Clarity of hypotheses and narrowing of the topic
   - Angemessenes Arbeitsprogramm | Soundness of the technical program
   - Durchführbarkeit sowohl zeitlich als auch personell | realistic timeframe

Aufgrund der Schwierigkeit „Qualität zu messen“ können bei der Begutachtungsempfehlung oftmals nur Nominalskalen eingesetzt werden. Dabei wird im Wesentlichen zwischen einigen wenigen Merkmalen unterschieden, z. B.: (A) Eindeutige Förderempfehlung; (B) Unklare Fälle; (C) Eindeutige Ablehnung. Zur Erleichterung des Rankings während der (inter-)disziplinären Bewertung könnte zusätzliche eine unterstützende numerische Beurteilung implementiert werden, welche auch eine Gewichtung zulässt. Mit dieser könnte zum Beispiel der „Wissenschaftlichen Qualität“ eine höhere Bedeutung gegeben werden.

Bei der Begutachtung können sowohl die unabhängige Begutachtung im peer review-Verfahren oder eine vergleichende Bewertung von Einzelanträgen durch Gutachtergruppen (panel review) angewendet werden. Das panel review-Verfahren erleichtert zwar das Ranking zwischen den Anträgen, aber die Stärke eines Antrags kann zur stärkeren (nicht gewollten) Abwertung eines anderen Antrags führen, so dass unter Umständen eine objektive Beurteilung nicht gewährleistet ist. Beim peer review-Verfahren wird zwar eine unabhängige Beurteilung ermöglicht, jedoch stellt die vergleichende Bewertung der Anträge in einem anschließenden Ranking auch bedingt durch unterschiedliche Gutachtenqualitäten eine Herausforderung dar.

In Abhängigkeit der Anonymität der Beteiligten im peer review-Verfahren kann zwischen

- **Single blind peer review:** „Gutachter sind den Antragsstellern nicht bekannt“
- **Double blind peer review:** „Antragssteller und Gutachter sind anonym”
- **Open peer review:** “Sowohl Antragssteller als auch Gutachter sind untereinander bekannt”

unterschieden werden. Zur Sicherung der Qualität der Gutachten und der Neutralität der Gutachter halten die Fachkollegiaten der DFG die Wahrung der Anonymität für sehr wichtig ([5] S. 51/52). Die Sicherstellung der Anonymität der Antragsstellenden im double blind peer review-Verfahren ist jedoch mit einem hohen Zeitaufwand verbunden.

Falls ein Antrag bereits positiv durch andere Förderorganisationen wie zum Beispiel DFG oder BMBF begutachtet wurde, sollte die Möglichkeit zur Berücksichtigung bzw. Einbeziehung der Gutachten bzw. deren Ergebnisse im Bewilligungsprozess überprüft werden. Unter Umständen muss dadurch nur noch ein technisches Gutachten bzw. wissenschaftliche Gutachten mit einem reduzierten Umfang erstellt werden. Zwar kann aus diesem Grund die Arbeitslast reduziert werden, jedoch sollte aber besonders Wert auf die Überprüfung der Gutachtenqualität gelegt werden. Weiterhin muss bei vorbegutachteten Projekten auf deren HPC-Eignung geachtet und die Aussagen der bestehenden Gutachten unter diesem Aspekt neu beurteilt werden.
Darüber hinaus sollte geprüft werden, inwiefern durch eine Zusammenarbeit mit den verschiedenen Förderorganisationen in Zukunft die HPC-Aspekte in deren bestehenden Verfahren mit begutachtet und bewertet werden können, um somit eine Doppelbegutachtung – wo möglich – zu vermeiden.

Um die Objektivität und Fairness im Bewilligungsverfahren zu sichern, stehen verschiedene Kontrollmechanismen zur Verfügung:

1. angemessene Auswahl an Gutachtern (Doppel-/Dreifachbegutachtung),
2. mehrfach-gestuftes Auswahlverfahren (Trennung zwischen Begutachtung, Bewertung und Beschlussfassung),
3. Rotation und Internationalisierung der Gutachter.

Zur Sicherung der Objektivität innerhalb eines (Standard-)Begutachtungsprozesses sollten mindestens zwei unabhängige Gutachten erstellt werden, die dann als Entscheidungsgrundlage dienen bzw. bei Uneinigkeit zu einem weiteren unabhängigen Nachgutachten führen.
Zur Förderung der Transparenz des Bewilligungsverfahrens sollten Informationen über den Ablauf und die Kriterien an geeigneten Stellen veröffentlicht werden. Darüber hinaus kann die Veröffentlichung der Namen der Gutachter – nach Ablauf der Begutachtung – dazu beitragen, das Vertrauen in das Verfahren zu stärken. Es sollte zudem geprüft werden, in welchem Umfang die Gutachten den Antragsstellern unter Berücksichtigung der Anonymität der Gutachter zur Verfügung gestellt werden können.

Empfehlung: *Eine im Vorfeld festgelegte Definition des Ablaufs und die Etablierung gemeinsamer Kriterien sowie eine transparente und klare Darstellung dieser nach außen bilden die Grundlage eines wissenschaftlichen Begutachtungsverfahrens und fördern das Vertrauen und die Akzeptanz in dieses. Zudem wird unter Berücksichtigung des Arbeitsaufwands ein single blind peer review, die Erstellung von mindestens zwei unabhängigen Gutachten, sowie die Überprüfung von Einbeziehung bestehender Gutachten empfohlen.*

3.1.3 Anhörung (opt.)

Mit der Anhörung kann eine Möglichkeit für die Antragssteller implementiert werden auf Fragen bzw. Kritik der Gutachter vor der Bewertung und Vergabe zu reagieren. Die Einräumung dieses Rechts des Antragsstellenden erhöht die Transparenz und somit auch das Vertrauen in das Verfahren. Um Verzögerungen im weiteren Verlauf des Verfahrens durch die Anhörung

zu vermeiden, wird in [3] empfohlen im Vorfeld feste Fristen festzulegen und geeignet darzustellen bzw. zu kommunizieren.

3.1.4 Nachbegutachtung (opt.)

Eine Nachbegutachtung wird erforderlich, sofern Uneinigkeit zwischen den Gutachten besteht oder Antworten des Antragsstellenden aus der Anhörung vorliegen. Auch in der Nachbegutachtung ist auf die Unabhängigkeit und die Objektivität der Gutachter zu achten.

3.2 Bewertung, Vergabe, Kontrolle

Im Anschluss an die Begutachtung erfolgt wie in Abbildung 5 dargestellt, die vergleichende Bewertung der Anträge sowie die Zuteilung von HPC-Ressourcen innerhalb der Beschlussfassung. Bei Bedarf könnte bei einer kapazitätsbedingten negativen Zusage eine Migrationsempfehlung zur Vermeidung von Doppelbegutachtungen ausgestellt werden.

Abbildung 5: Ablauf der Bewertung und Vergabe von Anträgen auf HPC-Ressourcen

3.2.1 Bewertung

Aufgabe dieser Phase ist die (inter-)disziplinäre Bewertung der Projektanträge auf Grundlage der erstellten Gutachten sowie der Prüfung des Begutachtungsvorgangs. Insbesondere die Erstellung eines vergleichenden Rankings stellt oftmals eine (zeit-)aufwändige Herausforderung dar. Zur Unterstützung des Rankings stehen sowohl die Mittel zur Kategorisierung der Anträge in Klassen wie auch der numerischen Beurteilung der Begutachtungskriterien mit einer Gewichtung dieser zur Verfügung.
Bei der Prüfung des Begutachtungsvorgangs sind unter den Aspekten der eigenen fachlichen Zuständigkeit und dem Ausschluss der Befangenheit, die angemessene Auswahl der Gutachter sowie die Qualität des Antrags und der Gutachten zu prüfen.

***Empfehlung**: Zur Sicherung der Objektivität wird eine Trennung zwischen Begutachtung und Bewertung empfohlen. Darüber hinaus sollte zur Unterstützung der (inter-)disziplinären Bewertung die Implementierung einer numerischen Beurteilung in Ergänzung zu den bestehenden Nominalskalen evaluiert werden.*

3.2.2 Beschlussfassung

Auf Basis der Bewertung und des Rankings der Anträge sowie der zur Verfügung stehenden HPC-Kapazität erfolgt die Zuteilung der HPC-Ressourcen. Dabei sollten nur Anträge mit einer im Vorfeld festgelegten Mindestqualität unabhängig von der zur Verfügung stehenden Kapazität berücksichtigt werden. D. h. selbst wenn ausreichend Ressourcen für alle Anträge zur Verfügung stehen würden, dürfen Ressourcen nur an qualitative Anträge vergeben werden. Darüber hinaus sollten in dieser Phase die Beurteilung der Gutachter zur adäquaten Ressourcenausstattung berücksichtigt und gegebenenfalls die Ressourcenzusage angepasst werden. Oftmals ist eine Reduktion im geringen Umfang ohne Folgeeffekte für die Anträge möglich. Bei einer geplanten Reduktion in signifikantem Umfang, welche die Durchführbarkeit des Projektes in Frage stellt, sollten Migrationsmöglichkeiten evaluiert werden.
Die Ressourcenzu-/absagen sollten den Antragsstellern zeitnah mit hinreichend aussagekräftigen Informationen zur Begutachtung, Bewertung sowie der Beschlussfassung zugesendet werden.

3.2.3 Migrationsempfehlung (opt.)

Insbesondere bei Projektanträgen mit einer positiven Förderempfehlung, die aufgrund von Ressourcenknappheit, keine positive Zuweisung erhalten und somit eventuell an andere Zentren ausweichen bzw. verwiesen werden müssen, sollten Möglichkeiten zur Vermeidung von Doppelbegutachtungen gefunden werden.

Variante 1: „Transfer bei open peer review“: Veröffentlichung des Gutachtens mit der Möglichkeit der Einreichung und Zulassung bei einem anderen (fachspezifischen) HPC-Zentrum.

Variante 2: „Erstellung einer Migrationsempfehlung“: Die Migrationsempfehlung kann an einem anderen (fachspezifischen) HPC-Zentrum mit eingereicht werden. Diese wird in der Begutachtungsphase mitberücksichtigt und unter Umständen könnte damit nur eine erneute wissenschaftliche Plausibilitätsprüfung erforderlich werden. Somit könnte der notwendige Begutachtungsaufwand entsprechend reduziert werden.

3.2.4 Durchführung und Kontrolle

Zur Sicherung der nachhaltigen und effizienten Nutzung der verfügbaren HPC-Ressourcen sollte während der Durchführung bewilligter Projekte eine adäquate quantitative und qualitative Bewertung der projektspezifischen Nutzung durch die lokalen HPC-Zentren eingerichtet und sichergestellt werden. Damit können ein Soll/Ist-Vergleich sowohl während der Laufzeit wie auch am Ende des Projektes erstellt werden und bei Bedarf die Anwender geeignet bei der Lösung ihrer Herausforderungen (z. B. Identifikation von Engpässen, ...) unterstützt werden. Darüber hinaus können die Ergebnisse und Erfahrungen in zukünftigen Folgeanträgen sowie Ausschreibeverfahren mit einbezogen und für die Verbesserung und Anpassung dieser vorliegenden Empfehlungen genutzt werden.

3.3 Begutachtungszeitpunkte

In Abhängigkeit des Versorgungsauftrags sowie der Projekttypen existieren im nationalen HPC-Ökosystem verschiedene Verfahren mit unterschiedlichen Begutachtungszeitpunkten. Eine Begutachtung kann prinzipiell entweder kontinuierlich oder zu festgelegten Zeitpunkten stattfinden. Je nach Umfang der Begutachtung und Menge der Anträge bietet sich einer der beiden Ansätze an. Die Vor- und Nachteile dieser beiden Ansätze werden in Tabelle 2 dargestellt.

	Vorteile	Nachteile
Kontinuierliche Begutachtung	1. Flexiblere Verteilung von HPC-Ressourcenressourcen 2. Nutzerorientiert	1. Verfügbarkeit der Gutachter 2. Schlechtere Planbarkeit der Auslastung 3. Ranking zwischen Anträgen nur bedingt möglich
Begutachtung zu festen Zeitpunkten	1. Bessere Planbarkeit der Auslastung 2. Verfügbarkeit der Gutachter 3. Ranking zwischen Anträgen	1. Geringere Flexibilität für die Nutzer (Einhaltung von Fristen)

Tabelle 2: Gegenüberstellung Vor- und Nachteile einer kontinuierlichen Begutachtung zu einer Begutachtung zu festen Zeitpunkten

Empfehlung: *Für kleinere bis mittlere Projekte, die nur eine technische Prüfung oder eine einfache Begutachtung mit maximal einem Gutachten benötigen, wird eine kontinuierliche Begutachtung empfohlen. Der Zeithorizont für die Begutachtung sollte dabei vier Wochen nicht überschreiten. Für mittlere bis große Projekte muss hingegen eine Begutachtung zu festen Zeitpunkten implementiert werden. Die Begutachtung kann in diesem Fall viertel- oder halbjährlich stattfinden, sollte aber für den eigentlichen Begutachtungsprozess einen Zeithorizont von zwei Monaten nicht überschreiten.*

3.4 Rollen, Rechte und Verfahrensregeln

Aus der Organisation und Verfahrensweise eines Bewilligungsverfahrens können für die verschiedenen Phasen entsprechende Rollen abgeleitet sowie deren Einfluss auf das Verfahren definiert werden (siehe Tabelle 3).

Die Implementierung und adäquate Darstellung der Rollen- und Rechteverteilung im Verfahren sowie der Einsatz von Kontrollmechanismen gewährleisten die Objektivität und die Fairness im Verfahren und fördern das Vertrauen der Antragssteller. In Abhängigkeit der jeweiligen Rahmenbedingungen können verschiedene Szenarien für die Aufgaben- und Rollenverteilung etabliert werden.

	Rolle	Aufgabe	Zu definieren
1	Prüfer - formale Kriterien	Prüfung der formalen Kriterien	1. Welches Gremium oder welcher Personenkreis prüft die formalen Kriterien? 2. Welches Gremium oder welcher Personenkreis bzw. welche Verwaltungsvorschrift / Statuten bestimmt die Prüfer und nach welchen Kriterien? 3. Welche Aspekte können durch technische Hilfsmittel automatisiert werden? 4. Ist eine Kontrolle der Prüfung notwendig?
2	Prüfer für die technische Überprüfung	Prüfung der HPC-Eignung und der technischen Aspekte des Antrags	1. Welches Gremium oder welcher Personenkreis übernimmt die technische Prüfung? 2. Welches Gremium oder welcher Personenkreis bzw. welche Verwaltungsvorschrift / Statuten bestimmt die Prüfer? 3. Ist eine Kontrolle der Prüfung notwendig?
3	Gutachter	Wissenschaftliche Beurteilung der Anträge	1. Welches Gremium oder welcher Personenkreis bzw. welche Verwaltungsvorschrift / Statuten bestimmt die Gutachter? 2. Welche Kriterien werden bei der wissenschaftlichen Begutachtung verwendet?
4	Bewerter	Prüfung der angemessenen Gutachterauswahl Prüfung Qualität der Gutachten Bewertung der Anträge	1. Welches Gremium oder welcher Personenkreis übernimmt die Bewertung der Anträge? 2. Welches Gremium oder welcher Personenkreis bzw. welche Verwaltungsvorschrift / Statuten bestimmen das Bewertergremium?
5	Entscheider	Ressourcenvergabe / Antragsverschiebung	1. Welches Gremium oder welcher Personenkreis übernimmt die Entscheidung? (*Anmerkung: In der Regel ist dies schon in den Geschäftsordnungen der Zentren geregelt*)
6	Kontroll-Gutachter	Kontrolle der Zwischen-/Endberichte	1. Welches Gremium oder welcher Personenkreis bzw. welche Verwaltungsvorschrift / Statuten bestimmt die Gutachter?
7	Lenkung	Auswahl der am Bewilligungs-verfahren beteiligten Personen Einhaltung der Verfahrensregeln	1. Welches Gremium oder welcher Personenkreis übernimmt die Auswahl der am Verfahren beteiligten Personen? 2. Welche Kriterien werden bei der Auswahl verwendet?

Tabelle 3: Rollen und deren Aufgaben im Bewilligungsverfahren

Empfehlung: *Eine Rollenverteilung sollte unter Berücksichtigung der jeweiligen Rahmenbedingungen, der Projekttypen, der Begutachtungszeitpunkte sowie bei Zusammenlegung von Rollen auf eine Person/Gremium aus der daraus resultierenden Arbeitsbelastung erfolgen. Insbesondere bei Verfahren mit einer kontinuierlichen Begutachtung ist eine strikte Rollentrennung aufgrund des begrenzten Zeithorizonts oftmals nicht realisierbar und empfehlenswert. Jedoch sollte mindestens eine Trennung der Rollen Gutachter und Bewerter zur Sicherung der Objektivität implementiert werden.*

Verfahrensregeln
Zur Sicherstellung des Vertrauens der Antragssteller in das Verfahren und in die Entscheidungsfindung sollte auf die **Transparenz** in den verschiedenen Phasen geachtet werden. Insbesondere müssen die Beurteilungen, Bewertungen sowie die finale Entscheidung protokolliert werden. Daraus leitet sich ab, welche Informationen den Antragsstellern über das Verfahren unter Sicherstellung der Anonymität zur Verfügung gestellt werden.
Des Weiteren muss in dem Verfahren festgelegt werden, welche Rechte den Antragsstellern innerhalb des Verfahrens eingeräumt werden. Während die Implementierung eines Rechts zur Stellung eines **Befangenheit**santrags aufgrund der Wahrung der Anonymität der Gutachter eher schwierig umgesetzt werden kann und somit eher auf die Kontrollfunktion der Bewerter vertraut werden muss, sollte evaluiert werden inwiefern zumindest den Antragsstellern die Möglichkeit eingeräumt werden kann auf die Entscheidung bzw. Beurteilung geeignet zu reagieren.

4 Antrags- und Bewilligungsverfahren in einem föderierten HPC-Ökosystem

Im aktuellen föderierten nationalen HPC-Ökosystem ist jedes HPC-Zentrum für sich eigenständig und unterliegt verschiedenen Verordnungen und Rahmenbedingungen. Aus diesen leiten sich unterschiedliche Organisationsstrukturen ab, welche die Grundlage für die aktuellen zentrums- bzw. verbundsspezifischen Beantragungs- und Begutachtungsverfahren bilden.
Bei der deutschlandweiten Abstimmung föderierter Beantragungs- und Begutachtungsverfahren zur Umsetzung von „... *gemeinsam getragenen Kriterien für die Vergabe von Rechenzeit und die Bewertung der wissenschaftlichen Qualität der Nutzungsanträge ...*“ [2] besteht die Herausforderung in der Berücksichtigung der lokalen und regionalen Rahmenbedingungen, der individuellen Aspekte und Diversität der HPC-Zentren innerhalb wie auch zwischen den Ebenen, der Organisation und des Zusammenwirkens der einzelnen Akteure sowie der Sicherung der Durchlässigkeit und Balance des HPC-Ökosystems. Darüber hinaus muss in einem HPC-Ökosystem mit weit mehr als tausend pro Jahr zu begutachtenden Projektanträgen die zu erwartende Arbeitsbelastung mit beachtet werden. Während eine Zusammenführung der föderierten Verfahren in ein globales Verfahren in der Regel Vorteile bei der Umsetzung gleicher Kriterien und Verfahrensweisen besitzt, bietet ein auf den bestehenden Strukturen basierendes föderiertes Verfahren unter anderem Vorteile bei der Arbeitsteilung und -belastung, Individualität und Parallelität.
Die Profilierung der HPC-Zentren sowie die Organisation und das Zusammenwirken der einzelnen Verfahren, Instanzen und Akteure sind wesentliche Aspekte zur Etablierung und Bewertung eines Gesamtsystems mit abgestimmten föderierten Beantragungs- und Bewilligungsverfahren. Sie haben einen Einfluss auf die Balance des Systems sowie auf die Fairness und Objektivität zwischen den Verfahren und somit letztendlich auf das Vertrauen und die Wirksamkeit des Gesamtsystems. Zum Beispiel können unterschiedliche Kriterien bzw. Regeln und Mechanismen die Balance zu Ungunsten eines Akteurs verschieben sowie einzelne Aspekte des Verfahrens unwirksam werden lassen.
Neben den Fragestellungen zur Bewertung von Organisation und Mechanismen von Bewilligungsverfahren (siehe Abschnitt 3, S. 13) müssen die folgenden Fragen – auch im Hinblick für einen möglichen Umgang von systemunabhängigen Anträgen, d. h. HPC-Anträge ohne Angabe einer speziellen HPC-Ressource – für das Gesamtsystem betrachtet werden:

- *Wo erfolgt die Einreichung des Antrags?*
- *Wer übernimmt und wie erfolgt die Zuordnung, Begutachtung und Bewertung von (systemunabhängigen) Anträgen?*
- *Wie und wann im Verfahren ist ein Zusammenwirken der Akteure notwendig?*
- *Wie kann Fairness zwischen systemspezifischen und systemunabhängigen Anträgen garantiert werden?*
- *Wie können Doppelanträge und -begutachtungen vermieden werden?*

Anmerkung: Die Zentren der Ebene 1 verfügen bereits über ein etabliertes Verfahren, so dass im Weiteren diese Empfehlung nur die Zentren der Ebene 3 sowie der Ebene 2 im Besonderen betrachtet. Insbesondere im Hinblick auf die Durchlässigkeit der Ebenen könnte bei Bedarf das Verfahren um die Zentren der Ebene 1 erweitert werden.

4.1 Koordiniert, Hierarchisch und Föderiert

Die unterschiedlichen Ausrichtungen der Zentren im Bereich der Methoden- und Anwendungswissenschaften sowie die Heterogenität von HPC-Ressourcen und lokaler HPC-Expertise sind wesentliche Stärken des HPC-Ökosystems in Deutschland. Die Sicherung der wissenschaftlichen Qualität im Zusammenhang mit einem einfachen und effizienten Zugang zu HPC-Ressourcen für Wissenschaftler aus den unterschiedlichsten Fachgebieten benötigt dafür eine entsprechende Zugangsstruktur, die koordiniert, hierarchisch und föderiert zugleich ist.

Koordination ist an den Stellen nötig, wo eine eindeutige Zuordnung oder Umsetzung eines Antrags zu einem Zentrum aus verschiedenen Gründen nicht möglich ist. Dazu gehören unter anderem Unterschiede in der Verfügbarkeit und Notwendigkeit von HPC-Ressourcen oder die Nachfrage nach fachspezifischer Unterstützung. Eine Koordination ist zudem notwendig, um systemunabhängige Anträge zu ermöglichen. *Hierarchie* in der Zugangsstruktur ermöglicht einen effizienten Umgang mit den unterschiedlichen Leistungsanforderungen der verschiedenen Projekttypen. Nicht jeder Projekttyp ist für jedes HPC-System geeignet und benötigt auch nicht im gleichen Umfang die Koordination des Gesamtsystems. Die Umsetzung als *föderiertes* System ermöglicht letztendlich die flexible Anpassung des Gesamtsystems an die lokalen Randbedingungen und setzt dabei die hierarchischen und koordinativen Anforderungen innerhalb des HPC-Ökosystems um.
Grundlagen dieses koordinierten hierarchischen föderierten Verfahrens sind das gegenseitige Vertrauen, Objektivität der Konsensus-Verfahren, vergleichbare Kriterien sowie die Berücksichtigung der Individualität und Diversität.

Abbildung 6 stellt schematisch eine Variante eines solchen Beantragungs- und Bewilligungsverfahren mit eigenständigen zentrumsspezifischen Kommissionen und einer nationalen Kommission bestehend aus einer Wissenschaftlichen Kommission und einem Technischen Ausschuss dar. Während der Technische Ausschuss unterstützende Aufgaben in Vorbereitung der wissenschaftlichen Bewilligung (formale und technische Überprüfung, Ermittlung passender Systeme, ...) übernehmen kann, übernimmt die Wissenschaftliche Kommission zentrale Aufgaben und Rollen des wissenschaftlichen Bewilligungsverfahrens und begleitet diese. Alle kleinen und mittleren systemspezifischen Anträge, welche den größten Anteil der zu begutachtenden Projekte stellen, werden dezentral und somit parallel in den zentrumsspezifischen Kommissionen begutachtet, bewertet und bewilligt. Systemunabhängige Anträge und alle großen Anträge (über einer im Vorfeld festgelegten und geeignet kommunizierten Schwelle L) durchlaufen die Phasen des nationalen Bewilligungsverfahren. Die Schwelle L kann dabei flexibel festgelegt werden, z. B. mittels eines 50%-Perzentils auf Basis der beantragten Projektrechenzeit in der letzten Periode. Kleine und mittlere Anträge, welche unabhängig vom System sind, werden im nationalen Verfahren technisch begutachtet, per Konsensus-Verfahren einem Zentrum zugeordnet und anschließend lokal wissenschaftlich begutachtet, vergleichend bewertet sowie bewilligt.

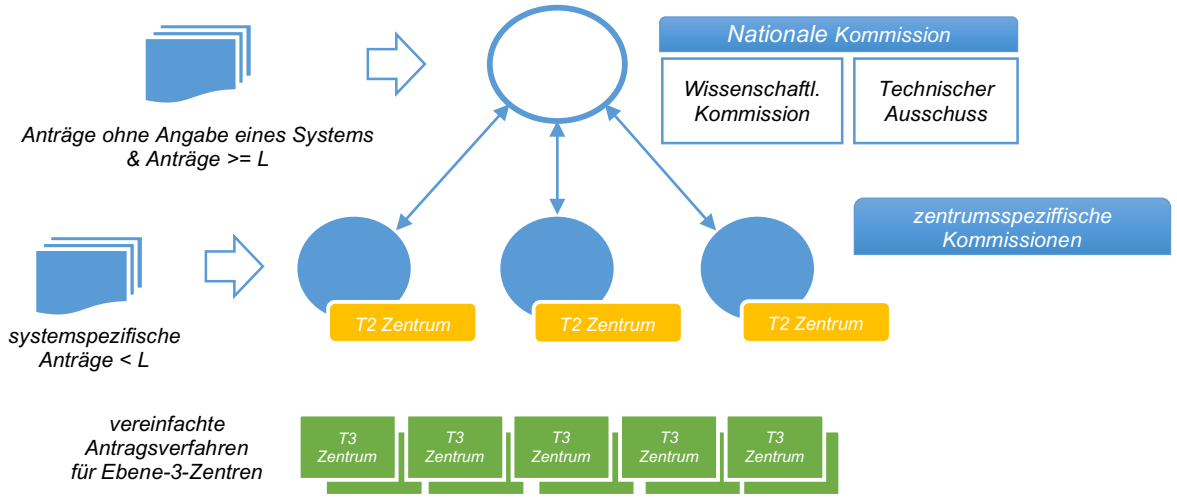

Abbildung 6: Schematische Darstellung eines koordinierten föderierten hierarchischen Beantragungs- und Bewilligungsverfahrens

Ein zentraler Aspekt dieses föderierten Verfahrens ist der bidirektionale Austausch zwischen dem nationalen Verfahren und den zentrumsspezifischen Verfahren zu den verschiedenen

Phasen der Verfahren. Dieser ermöglicht unter anderem die Migration von positiv begutachteten Projekten, die aufgrund von Ressourcenknappheit von einem Zentrum über einen nationalen Pool mittels eines Konsensus-Verfahrens an andere Zentren vermittelt werden könnten.
Um eine größtmögliche Nebenläufigkeit und Effizienz des Verfahrens zu ermöglichen, sollte – wenn möglich – auf global synchronisierende Ereignisse verzichtet werden. Zu notwendigen Synchronisierungspunkten führen unter anderem verschiedene Begutachtungszeitpunkte der lokalen Zentren und die zentrenübergreifende vergleichende Bewertung von systemunabhängigen oder im nationalen Pool begutachteten Anträgen. Eine transparente und differenzierte Profilierung der einzelnen Zentren kann hierbei helfen, den globalen Synchronisierungsaufwand zu minimieren. Eine vollständige Vermeidung von Abstimmung in einem solchen System, welches die Durchlässigkeit der Ebenen, die Möglichkeit von systemunabhängigen Anträgen und eine Berücksichtigung lokaler Randbedingungen beachten soll, ist allerdings nicht möglich.
Die Ebene 3 nimmt in diesem Kontext eine besondere Rolle ein. Sie leistet einen wesentlichen Beitrag zur Grundversorgung lokaler bzw. regionaler Nutzer/Projekte mit HPC-Ressourcen als Voraussetzung für herausragende Forschung von nationaler Bedeutung. Die wissenschaftliche Qualität, die Angemessenheit des Nutzerkreises sowie die Nutzungskonzepte werden bereits bei der Antragsstellung zur Beschaffung dieser Systeme, z. B. bei Anträgen zu Forschungsgroßgeräten bei der DFG, begutachtet und bewertet. Auch die mit den Ressourcen erzielten Ergebnisse werden nach einer festgelegten zeitlichen Periode begutachtet. Somit können und sollten auf Ebene 3 allenfalls vereinfachte Antragsverfahren, z. B. mit einer formalen Prüfung, Anwendung finden.

In den folgenden Abschnitten werden Empfehlungen zu den verschiedenen Aspekten des koordinierten hierarchischen föderierten Verfahrens im Detail betrachtet und erläutert.

4.2 Beantragungsverfahren

Während der Vorbereitungsphase benötigt der Antragssteller Informationen zu den zur Verfügung stehenden HPC-Ressourcen, den Zugangskriterien und Verfahren, den Details der Ausschreibungen sowie den Kontaktmöglichkeiten zu den HPC-Beratern und deren Beratungsangebot. In einem föderierten System wird daher eine zentrale Informations- und Anlaufstelle – wie das HPC-Portal der Gauß-Allianz – benötigt, welches die Vorbereitungsphase durch Bereitstellung von Informationen in enger Kooperation mit den HPC-Beratern unterstützt (Strategiepapier [1], Abschnitt 5.2.1). Begleitet wird dies durch einen abgestimmten, transparenten nationalen HPC-Servicekatalog.
Im Weiteren sollte durch den Antragssteller in enger Abstimmung mit den HPC-Beratern geklärt werden, ob ein Antrag spezifisch für ein HPC-System oder systemunabhängig ausgerichtet wird (ohne Angabe eines konkreten Systems), d. h. auf einer Teilmenge der zur Verfügung stehenden HPC-Systeme technisch realisierbar ist. Insbesondere bei der Beratung von systemunabhängigen Anträgen muss ein faires und objektives Governance-Modell eingerichtet werden.
Eine abgestimmte und vergleichbare Struktur für systemspezifische wie auch systemunabhängige Anträge kann mit dem in Abschnitt 2.2 beschriebenen modularen Aufbau eines Projektantrags und innerhalb einer Ebene des HPC-Ökosystems abgestimmter Kriterien realisiert werden.

Zur Unterstützung der Antragsverfahren in einem föderierten System wird benötigt:

1. Zentrale Informations- und Anlaufstelle,
2. Abgestimmter, transparenter nationaler HPC-Servicekatalog,
3. Faires und objektives Governance-Modell bei der Beratung,
4. National abgestimmte Mindest-Kriterien für die jeweiligen Antragsklassen sowie regelmäßige Evaluation und Anpassung an die zukünftigen Gegebenheiten.

4.3 Bewilligungsverfahren

In einem nationalen System mit föderierten Begutachtungs- und Bewilligungsstrukturen haben die Organisation und das Zusammenwirken der einzelnen Instanzen mit deren Akteuren einen Einfluss auf die Wirksamkeit und Balance des gesamten Verfahrens. Eine Grundlage für die Fairness im System bilden dabei national abgestimmte Kriterien, Regeln sowie Maßnahmen zur Qualitätssicherung der Begutachtungen innerhalb der jeweiligen Antragsklassen. Wesentliche Aspekte bei der Gestaltung der Organisation und Mechanismen eines HPC-Bewilligungssystems sowie beim Zusammenwirken der am System beteiligten Akteure sind: Begutachtungszeitpunkte, Durchlässigkeit im System, Diversität der Architekturen, Fairness, Vertrauen, Migration, Gutachterpool.

Begutachtungszeitpunkte

In einem föderierten System mit unterschiedlichen Begutachtungszeitpunkten der einzelnen Bewilligungsverfahren und einer nationalen Instanz, müssen die Begutachtungszeitpunkte der nationalen Wissenschaftlichen Kommission entsprechend definiert werden. Eine Divergenz zwischen den regionalen und den nationalen Begutachtungszeitpunkten kann zu einem Ungleichgewicht im System führen. Zur Sicherstellung der Verfügbarkeit der Gutachten zu den Bewertungs- und Entscheidungsphasen der zentrumsspezifischen respektive nationalen Vergabekommissionen sollten die Zeitpunkte der Begutachtungsphasen der nationalen Wissenschaftlichen Kommission versetzt zu den übrigen zentrumsspezifischen Begutachtungsaufgaben gewählt und Fristen im Vorfeld festgelegt werden.

Durchlässigkeit im System

Im Hinblick auf die Durchlässigkeit zwischen den Ebenen sollte ein Austausch zwischen den nationalen Kommissionen und den am Verfahren beteiligten Zentren ebenen-übergreifend erfolgen.

Diversität der Architekturen

Bedingt durch die Heterogenität der HPC-Ressourcen und die Diversität der Architekturen wird für einen nationalen intra- und inter-ebenen Vergleich sowie für die jeweilige Ressourcenplanung eine normierte Metrik benötigt, die diese Thematik im geeigneten Maße adressiert. Auch die Einbeziehung von betriebswirtschaftlichen Faktoren in diese vergleichende Metrik sollte geprüft werden.

Fairness

In einem föderierten System ist es erforderlich, dass innerhalb einer Antragsklasse und unabhängig vom Antragstyp äquivalente Mindest-Kriterien bei der Begutachtung und Beurteilung verwendet werden. Die in Abschnitt 3.1.2 vorgeschlagenen Kriterien bilden dafür die Grundlage. Eine vergleichbare Qualität der Gutachten kann in einem föderierten System durch national abgestimmte Maßnahmen (wie in Abschnitt 3.1.1 beschrieben) und Trennung der Rollen Begutachtung und Bewertung realisiert werden.

Vertrauen in eine nationale Instanz

Vertrauen in eine nationale Instanz wird zum einen durch eine klare Aufgabendefinition, objektive Auswahlkriterien sowie Transparenz gefördert. Insbesondere könnte die Einbeziehung von Delegierten aller zentrumsspezifischen Lenkungsgremien in eine nationale Wissenschaftliche Kommission die Transparenz und das Vertrauen in eine übergeordnete Instanz stärken.

Migration

Sollte aufgrund von Ressourcenknappheit für einen positiv begutachteten Ressourcenantrag keine positive Bewilligung erfolgen können bzw. eine signifikante Kürzung der beantragten HPC-Ressourcen relevant werden, so könnte dem Antragsstellenden die Möglichkeit einer Migration zu einem anderen Zentrum ermöglicht werden. Die Einrichtung eines nationalen

Pools und eines Migrations-Konsensus könnten dabei die Verteilung der Projektanträge unterstützen.

Gutachterpool
Die Suche nach adäquaten Gutachtern ist aktuell schon in vielen Verfahren der einzelnen Zentren eine schwierige Aufgabe und wird voraussichtlich auch zukünftig für die Gremien in einem koordinierten föderierten System eine Herausforderung darstellen. Durch den Aufbau eines nationalen Gutachterpools könnten ausreichend disziplinäre Gutachter zur Verfügung stehen, so dass auch die Einsatzmöglichkeit der Rotation von Gutachtern verbessert werden kann. Darüber hinaus würde ein nationaler Gutachterpool die Berücksichtigung der bisherigen sowie aktuellen Arbeitsbelastung eines Gutachters im gesamten HPC-Ökosystem ermöglichen. Somit könnte sichergestellt werden, dass einzelne Gutachter nicht von verschiedenen Zentren durch zu viele Anfragen überlastet werden. Die Transparenz eines Gutachterpools steigert somit langfristig auch die Bereitschaft von Fachgutachtern, Begutachtungsprozesse zu begleiten. Ein nationaler Gutachterpool innerhalb eines föderierten Bewilligungssystems ist dabei Chance und Herausforderung zugleich.
Eine wesentliche Herausforderung besteht in der organisatorischen Umsetzung eines deutschlandweiten Gutachterpools unter Berücksichtigung lokaler Strukturen und Rahmenbedingungen. Hierbei muss unter anderem evaluiert werden, welche Informationen über die Anträge und Gutachter geteilt und in welcher Form diese zur Verfügung gestellt werden können. Die Verwaltung des Gutachterpools und die Begutachtung über eine zentrale oder vereinheitlichte Plattform könnte dabei Prozesse vereinfachen und beschleunigen sowie die Arbeitsbelastung der Gutachter steuern und reduzieren. Dies kann zum Beispiel durch geteilte Informationen über bereits begutachtete, aktuelle und zukünftig zu begutachtende Anträge der einzelnen Gutachter sowie die Umsetzung eines vereinheitlichten Prozesses und zugehöriger Kriterien bei der Begutachtung realisiert werden. Allerdings muss überprüft werden, inwiefern eine solche Umsetzung innerhalb der lokalen Rahmenbedingungen und Grenzen des Datenschutzes möglich ist.

Zur Unterstützung der Bewilligungsverfahren in einem föderierten System wird benötigt:
1. Nationale Wissenschaftliche Kommission und Technischer Ausschuss,
2. Nationaler Gutachterpool,
3. Mindest-Kriterien für die dezentrale Begutachtung,
4. Normierte Metrik zur Berücksichtigung der Diversität der Architekturen,
5. Abgestimmte Antrags- und Begutachtungszeitpunkte,
6. Verteilungs- und Migrationskonsensus.

4.4 Durchführung und Abwicklung
Wie bei lokalen und systemspezifischen Anträgen ist eine adäquate quantitative und qualitative Begleitung der HPC-Projekte auch in einem föderierten Verfahren notwendig, um Erfahrungen und Ergebnisse der Projekte in die Bewilligung von etwaigen Folgeanträgen einzubinden und die Empfehlungen, Prozesse und Ausschreibeverfahren innerhalb des föderierten Verfahrens kontinuierlich zu verbessern. Dabei ist auf eine effektive und transparente Zusammenarbeit mit den lokalen Zentren und deren Austausch über Erfahrungen und Ergebnisse der Projekte mit der nationalen Kommission zu achten. Insbesondere muss über einen effektiven Prozess zur Speicherung und Verwertung der Projekt-Ergebnisse und des Solls/Ist-Vergleichs nachgedacht werden.

Literaturverzeichnis

[1] Gauß-Allianz e.V., **Hoch- und Höchstleistungsrechnen in Deutschland: Strategische Aufgaben der Gauß-Allianz in einem nationalen HPC-Konzept**, Berlin, August 2016, https://gauss-allianz.de/de/ga-hpc-strategie/

[2] Wissenschaftsrat, **Positionspapier „Strategische Weiterentwicklung des Hoch- und Höchstleistungsrechnen in Deutschland“,** Drs.1838-12, Berlin, Januar 2012, http://www.wissenschaftsrat.de/download/archiv/1838-12.pdf

[3] HPCWorld Consortium , **Handbook of HPC e-Science Infrastructure Allocation Reviewing, Selection and Management**, 2011, https://www.fp7.cz/cs/storage/34f6c329e00c4f974321d27d859f07b23a7f3376?uid=34f6c329e00c4f974321d27d859f07b23a7f3376

[4] Thomas Groß, Remzi N. Karaalp, Anke Wilden, **Regelungsstrukturen der Forschungsförderung**, Staatliche Projektfinanzierung mittels Peer-Review in Deutschland, Frankreich und der EU, Interdisziplinäre Schriften zur Wissenschaftsforschung, Nomos Verlagsgesellschaft, Baden-Baden, 2010.

[5] Stefan Hornbostel, Meike Olbrecht, **Peer Review in der DFG: Die Fachkollegiaten**, iFQ-Working Paper No. 2, November 2007

[6] Deutsche Forschungsgemeinschaft, **Die Fachkollegien in der DFG – Eine Reform zeigt Wirkung**, Stellungnahme zur Studie „Peer Review in der DFG: Die Fachkollegiaten“,http://dfg.de/dfg_profil/zahlen_fakten/evaluation_studien_monitoring/studien/studie_fachkollegiaten

Anhang

Metriken für einen einheitlichen Projektantrag

1) Einordnung

- Neu- bzw. Folgeantrag
- Neueinsteiger- oder reguläres Projekt
- Projekt-Typ nach Größe

Die Einordnung zu Beginn dient der Auswahl der Metriken im späteren Teil des Antrags

2) Metadaten

- Name und Institut des Antragsstellers
- Unterschriftsberechtigte Kontaktperson
- Verantwortlicher Wissenschaftler
- Technischer Ansprechpartner
- Wissenschaftsfeld
- Angaben über Geheimhaltung / Sensibilität der Daten
- Bereits vorhandene externe Gutachten für das Projekt (z. B. BMBF, DFG, etc.)

3) Projekt-Beschreibung

- Projektübersicht (Abstrakt)
- Projektziele, zu erwartender wissenschaftlicher Einfluss und Abgrenzung von existierenden Projekten
- Detaillierte Beschreibung des Projektes inkl. mathematischer, algorithmischer und numerischer Methoden und Lösungsverfahren, sowie der technischen Umsetzung (u. a. Ressourcen-Monitoring)
- Beschreibung des Projektplans und der einzelnen Arbeitspakete
- Kurze Beschreibung der Qualifikation der beteiligten Wissenschaftler (Publikationen, CV über die letzten 5 Jahre, Ergebnisse früherer Projekte, HPC-Expertise)
- Bibliographische Übersicht von relevanten Publikationen für das Projekt

4) Technische Aspekte

- Beantragte Rechenzeit (inkl. mathematischer Abschätzung als Begründung)
- Technische Anforderungen und Randbedingungen (Architektur, Speicherplatz, Jobgrößen, Bandbreiten, …)
- Angaben zur benötigten / verwendeten Software und Lizenzen (ggf. Nachweis für Lizenzen, Programmierparadigmen, …)
- Begründung der Nutzung von HPC-Ressourcen (Eignung und Notwendigkeit)
- Nachweis der Skalierbarkeit der Anwendung

5) Angabe über weitere Anträge / Förderungen

- Angabe von vergangenen und aktuellen Anträgen an anderen Zentren
- Angabe über weitere Förderungen durch andere Organisationen

6) Optional: Vorschlag von Gutachtern

- Angabe von Experten auf dem zugehörigen Wissenschaftsgebiet

7) Optional: Benötigte Unterstützung

- Kurze Beschreibung der benötigten Unterstützung durch lokale Mitarbeiter und Wissenschaftler des Rechenzentrums

8) Bei Folgeantrag: Begründung / Fortschritts-Nachweis

- Nachweis des bisherigen Fortschritts durch Publikationen
- Begründung des Folgeantrags

9) Projektbedingungen

- Ethische, rechtliche und lokale Rahmenbedingungen
    - z. B. Erwähnung des Rechenzentrums in Publikationen
    - Waffengesetze und Schurkenstaatenregelungen (BAFA)

Zentrumsspezifisches Beantragungs- und Bewilligungsverfahren

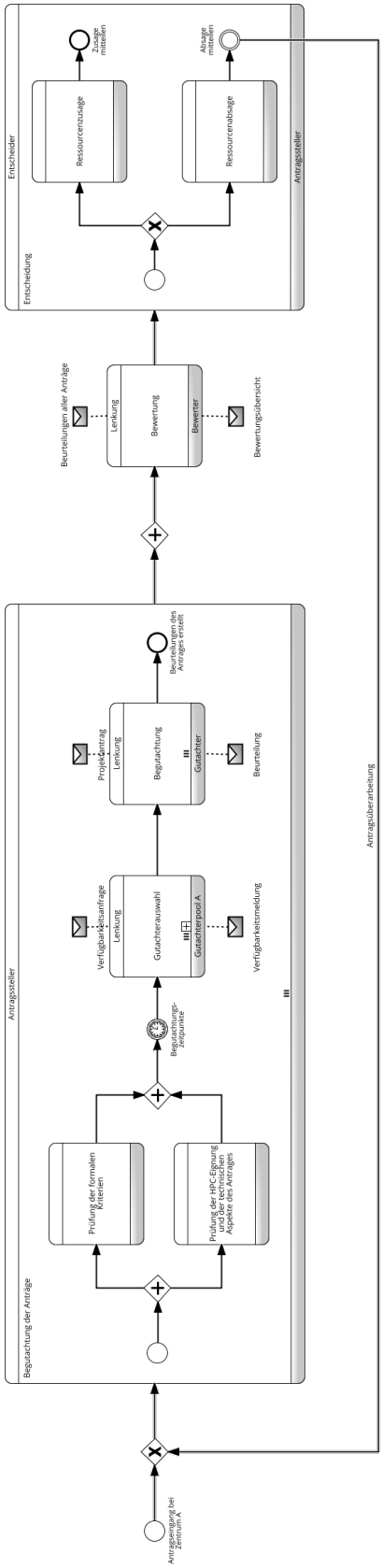

Abbildung 7: Vereinfachte, schematische Darstellung eines zentrumsspezifischen Beantragungs- und Bewilligungsverfahrens und beteiligter Rollen mittels eines BPMN 2.0 Choreographie-Modells

GA
Gauß-Allianz

Deutscher Wetterdienst

Deutsches Elektronen-Synchrotron

Deutsches Klimarechenzentrum GmbH

Friedrich-Alexander-Universität Erlangen-Nürnberg, **Regionales Rechenzentrum Erlangen**

Gauss Centre for Supercomputing e. V.

Goethe-Universität Frankfurt am Main, **Center for Scientific Computing**

Johannes Gutenberg-Universität Mainz, **Zentrum für Datenverarbeitung**

Karlsruher Institut für Technologie, **Steinbuch Centre for Computing**

Leibniz Universität, **Leibniz Universität IT Services**

Max-Planck-Gesellschaft, **Max Planck Computing and Data Facility**

RWTH Aachen University, **IT Center**

Science Alliance Kaiserslautern e. V.

Technische Universität Darmstadt, **Hochschulrechenzentrum**

Technische Universität Dresden, **Zentrum für Informationsdienste und Hochleistungsrechnen**

Universität Paderborn, **Paderborn Center for Parallel Computing**

Universität zu Köln, **Regionales Rechenzentrum der Universität zu Köln**

Verein zur Förderung eines Deutschen Forschungsnetzes e. V.

Zuse Institute Berlin

Gauß-Allianz e. V.
Alexanderplatz 1 • 10178 Berlin • Germany
Telefon: 030-263935930 • E-Mail: service@gauss-allianz.de
Registernummer: VR 28849 B (AG Berlin-Charlottenburg)
Vorstand: Prof. Dr. Wolfgang E. Nagel (Vorsitzender)
Prof. Dr. Thomas Ludwig (Stellvertreter)
Prof. Dr.-Ing. Dr. h.c. mult. Michael M. Resch (Stellvertreter)

www.gauss-allianz.de