

# Nutzungs- und Betriebsordnung für den Höchstleistungsrechner am Leibniz-Rechenzentrum (SuperMUC)

(Stand 1. August 2012)

## Präambel

Mit dem Höchstleistungsrechner SuperMUC soll der Wissenschaft und Forschung in Deutschland und Europa ein Werkzeug zur Erschließung neuer Möglichkeiten für das technisch-wissenschaftliche Höchstleistungsrechnen geboten werden. Die Governancestrukturen sind im *Organisationskonzept für den Höchstleistungsrechner am Leibniz-Rechenzentrum (SuperMUC)* beschrieben. Der Betrieb des SuperMUC erfolgt durch das Leibniz-Rechenzentrum der Bayerischen Akademie der Wissenschaften in Abstimmung und Koordination mit dem Gauss Centre for Supercomputing e.V. (GCS).

Soweit Nutzungs- und Betriebsaspekte des SuperMUC nicht in dieser Nutzungs- und Betriebsordnung eigens geregelt sind (beispielsweise für den zugelassenen Benutzerkreis, siehe §§ 1 und 3), gelten die

- Benutzungsrichtlinien für Informationsverarbeitungssysteme des Leibniz-Rechenzentrums der Bayerischen Akademie der Wissenschaften

in der aktuellen Fassung. Insbesondere gelten die §§ 3 bis 8 der Benutzungsrichtlinien für Informationsverarbeitungssysteme des Leibniz-Rechenzentrums der Bayerischen Akademie der Wissenschaften uneingeschränkt:

- § 3 Formale Benutzungsberechtigung
- § 4 Pflichten des Benutzers
- § 5 Haftung des Benutzers
- § 6 Rechte und Pflichten des LRZ
- § 7 Haftung des LRZ
- § 8 Sonstige Regelungen.

Für die Nutzung der Einrichtungen des Kommunikationsnetzes und der Archivierungssysteme am LRZ gelten die Regelungen in den

- Richtlinien zum Betrieb des Münchner Wissenschaftsnetzes (MWN)
- Benutzungsordnung des DFN-Vereins zum Betrieb des Wissenschaftsnetzes,
- Richtlinien zur Nutzung des Archiv- und Backupsystems

in der jeweils aktuellen Fassung.

## §1 Betriebsziele

Der Höchstleistungsrechner am LRZ dient dem Ziel, rechenintensive Aufgaben im Grenzbereich des heute technisch Machbaren bearbeiten zu können. Er steht in erster Linie der Wissenschaft zur Verfügung, soll aber bei Bedarf im Rahmen der GCS-Regularien auch für die

Industrie zugänglich sein, um die internationale Wettbewerbsfähigkeit in diesen Bereichen sicherzustellen.

Wegen der hohen Kosten ist eine sachgemäße und strenge Auswahl der auf diesem Rechner zu bearbeitenden Aufgaben notwendig. Gleichzeitig sollte den Nutzern eine möglichst weitgehende Unterstützung gewährt werden, um einen optimalen Nutzen zu erzielen.

Folgende **Kriterien** sind dabei maßgebend:

1. Die Aufgabenstellung muss wissenschaftlich anspruchsvoll und ihre Bearbeitung muss von großem Interesse sein.
2. Die Aufgabenstellung muss auf dem SuperMUC technisch durchführbar sein und der Leistungsfähigkeit des Rechners entsprechen.
3. Die Bearbeiter müssen wissenschaftlich ausgewiesen und zu einer erfolgreichen Bearbeitung der Aufgabenstellung in der Lage sein. Insbesondere müssen Antragsteller die erforderlichen Spezialkenntnisse zur effektiven Nutzung von Höchstleistungsrechnern besitzen. Dies ist im Antrag nachzuweisen.
4. Vorbereitende Entwicklungsarbeiten, kleinere abtrennbare Aufgabenteile und auch Auswertungen sollen möglichst auf Rechnern geringerer Leistungsfähigkeit durchgeführt werden.
5. Die Programme zur Bearbeitung der Aufgabe müssen die spezifische Eigenschaft des Rechners in möglichst optimaler Weise nutzen. Dies ist während der Projektlaufzeit regelmäßig zu überprüfen.
6. Die für die Aufgabe erforderliche Software und die notwendigen Softwarewerkzeuge müssen zur Verfügung stehen. Notwendige Beschaffungen und Lizenzierungen sind im Vorfeld mit dem LRZ abzusprechen.
7. Das Betriebskonzept des Rechners muss auf das zu erwartende Aufgabenprofil hin angepasst werden können.

## § 2 Betriebsregelungen

### 1. Nutzerbetreuung

Die Beteiligung der Benutzer bei grundsätzlichen organisatorischen Entscheidungen zum SuperMUC ist durch den Lenkungsausschuss gewährleistet.

Alle SuperMUC-Projekte werden von wissenschaftlichen Mitarbeitern des LRZ aus der Gruppe Applikationsunterstützung während der gesamten Laufzeit betreut. Der Betreuer berät vom Lenkungsausschuss zugelassene Nutzer während der Bearbeitungszeit des Projekts. Er setzt die vom Lenkungsausschuss aufgestellten Vorgaben für das Projekt um, wie etwa die Organisation der für die Bearbeitung genehmigten Betriebsmittel. Er sichert die Einhaltung der Kriterien 2 und 4 bis 7 aus § 1.

Die Betreuergruppe veranstaltet (ggf. in enger Zusammenarbeit mit dem Kompetenznetzwerk) Kurse und Fortbildungsmaßnahmen, um den Aufwand für Einzelbetreuung zu minimieren. Diese Kurse können auch als Präsentation über Internet zur Verfügung gestellt werden, so dass eine zeitlich und örtlich entkoppelte Kursteilnahme möglich ist.

Die Betreuergruppe ist erster Ansprechpartner in allen Fragen der Benutzer, die das installierte Rechensystem, die auf ihm installierte Anwendersoftware, die Fehlerverfolgung und -korrektur, die Erstellung von Dokumentationen, die rechner-spezifischen Programmoptimierung-

gen sowie die Kooperationsmöglichkeiten zwischen Benutzern unterschiedlicher Fachbereiche (Synergie) betreffen.

In allen methodischen, fachspezifischen und wissenschaftlichen Fragen vermittelt das LRZ die Benutzer an das Kompetenznetzwerk bzw. geeignete wissenschaftliche Institutionen weiter. Diese beraten vertieft in methodischen und fachlichen Fragen des Hochleistungsrechnens sowie in Fragen der Programmanpassungen an die verschiedenen Rechnertypen, die in Deutschland bzw. in Europa zur Verfügung stehen. Auf Hinweise aus der Betreuergruppe leitet das LRZ Synergieeffekte zwischen Projekten ein.

Im Gegensatz zu der wissenschaftlichen Ausrichtung des Kompetenznetzwerks sind die Aufgaben der LRZ-Betreuergruppe rechnernah und service-orientiert. Im Einzelnen sind es:

- die Beratung von Benutzern im Vorfeld eines Projektes, z.B. zur Einschätzung der auf dem vorhandenen Rechner benötigten bzw. vorhandenen Ressourcen,
- die Zuteilung von Benutzerberechtigungen und Rechnerressourcen nach Maßgabe der vom Lenkungsausschuss aufgestellten Regeln und der festgestellten Bewertung des Projekts,
- die Betreuung in allen rechner-spezifischen und rechner-nahen Fragen, insbesondere Fragen zur effizienten Nutzung der vorliegenden Rechnerarchitektur und der vorhandenen Speichermedien,
- Qualitätskontrolle der Programme, Anleitung zur Minimierung des Ressourcenverbrauchs und entsprechende Beratung der Kunden, Entwicklung der hierzu notwendigen Werkzeuge,
- Evaluierung, Auswahl, Lizenzierung, Installation, Test und Pflege von Compilern, Hochleistungstools, Bibliotheken und allgemeiner Anwender-Software,
- die Softwareinstallation und deren finanzielle Abwicklung,
- die konkrete Fehlerverfolgung und -dokumentation bei Compilern und Anwender-Software,
- die Unterstützung der Benutzer bei der graphischen Darstellung ihrer Ergebnisse ("Visualisierungsservice") und bei der Vor- und Nachbearbeitung der Daten,
- die Dokumentation der Betriebs- und Softwareumgebung,
- eine Bindegliedsfunktion: Kontakt zu Endbenutzern, um die Mittlerrolle des LRZ in Bezug auf das Kompetenznetzwerk und andere unterstützende Institutionen erfüllen zu können, und organisatorische Koordination des LRZ mit denselben,
- die Organisation von Benutzertreffen, Kursen, Seminaren und (virtuellen) Workshops, mit dem Ziel, das erworbene Wissen direkt in die praktische Arbeit einfließen lassen zu können.

Schließlich obliegt es der Betreuergruppe in Zusammenarbeit mit dem Kompetenznetzwerk, regelmäßige Berichte über die Arbeiten am SuperMUC zu erstellen.

## **2. System- und Rechnerbetrieb**

Der Gruppe HPC Server und Dienste obliegen die Einstellung der Betriebsparameter und die laufende Überwachung des Betriebs. Die sorgfältige Durchführung der operativen Aufgaben ist für einen effizienten Betrieb unerlässlich und zahlt sich durch optimale Ressourcennutzung aus.

Es fallen im Einzelnen folgende Aufgaben an:

- Das LRZ stellt Räumlichkeiten, Energie, Klimatisierung/Kühlung und die Kommunikationsnetz-Anbindung zur Verfügung.
- Das LRZ betreibt und administriert den SuperMUC eigenverantwortlich nach den vom Lenkungsausschuss erlassenen Regeln. Dazu gehören:
  - Betriebsplanung: Rechnerkonfiguration, Betriebsmodelle,
  - Konzepte zum optimalen Betriebsablauf,
  - Konzepte zur Betriebssteuerung (Blockbetrieb, Stapelbetrieb, Interaktivbetrieb, Warteschlangenverwaltung),
  - Konfigurationsmanagement, Engpass-Analysen, Planung und Realisierung von Erweiterungsbeschaffungen wie der 2. Ausbaustufe des SuperMUC,
  - Administration und Operating (24-Stunden-Betrieb),
  - Technische Realisierung und Überwachung der Betriebsvorgaben,
  - Fehlerverfolgung und -behebung,
  - Gewährleistung der erforderlichen Sicherheitsvorgaben (evtl. auch durch zusätzliche Hardware wie etwa Firewall-Rechner):
  - Zugang vom Kommunikationsnetz nur über zugelassene Hostrechner (z.B. keine Netzrouten, keine Default-Route)
  - Zugang zum SuperMUC nur über die hinreichend sichere Mechanismen (z.B. ssh, scp, GSISSH usw. Kein telnet, rsh, rcp oder ftp)
  - Implementierung aller zweckmäßigen neuen Verfahren zur Aufrechterhaltung und Erhöhung der Sicherheit.
  - Einbettung des Rechners in eine Benutzerverwaltung, die Sicherheit und Schutz vor missbräuchlichem Zugriff auf Daten anderer bzw. vor Veränderung von Programmen bietet.

Folgende Aufgaben werden von der Betriebs- und Betreuergruppe gemeinsam durchgeführt:

- Das LRZ ist verantwortlich für die effiziente Nutzung des Rechners, soweit dies betrieblich beeinflussbar ist. Dies betrifft insbesondere auch die Fälle, in denen auf Grund von Beobachtungen im Betrieb Rücksprachen mit Benutzern erforderlich werden (schlechte Programm-Performance, Betriebsprobleme durch Programme, Benutzerberatung wegen offensichtlich ungünstiger Verfahren usw.).
- Das LRZ organisiert den aktuellen Betrieb (wann Blockzeiten, wann Durchsatzbetrieb, wann kann trotz Blockzeit noch ein Programm nebenher gerechnet werden usw.).
- Das LRZ führt die Betriebsstatistiken des SuperMUC und die Abrechnung der verbrauchten Ressourcen durch. Davon abgeleitet werden die Prioritäten der Auftragsabwicklung gesetzt.
- Das LRZ führt Standards am SuperMUC ein (bzw. betreibt deren schnelle Einführung durch den Hersteller), die für ein problemloses Zusammenspiel von Rechnern und die reibungslose Nutzung des SuperMUC notwendig sind.
- Das LRZ sorgt für die Zusammenarbeit mit anderen deutschen und internationalen Höchst- und Hochleistungsrechenzentren im Rahmen des Gauss Centre for Supercomputing (GCS) und der Gauß-Allianz sowie durch die Mitarbeit bei Projekten des BMBF und der EU.
- Erstellung des jährlichen SuperMUC-Betriebsberichts für den Lenkungsausschuss.

### **3. Datenspeicherung**

Der Betrieb der Speicher-, Backup- und Archivierungssystem erfolgt durch die Gruppe HPC Server und Dienste und die Gruppe Datenhaltung. Dies umfasst

- Administration der Speichersysteme
- Wahrung der Sicherheitsaspekte
- Kapazitätsplanung
- Monitoring und Reporting
- Überwachung der Quotierung des Speicherplatzes

Das LRZ kann die Unversehrtheit (z.B. Zerstörung, Manipulation, aber auch unbeabsichtigtes Löschen durch den Benutzer selbst) und Vertraulichkeit der bei ihm gespeicherten Daten nicht garantieren. Gleichwohl bemüht es sich nach Kräften um einen qualitativ hochstehenden System- und Dienstbetrieb sowie um geeignete technische Maßnahmen zur Erhöhung der Datensicherheit (z.B. Snapshots, Backups, Sicherung in unterschiedlichen Brandabschnitten). Der Umfang und die Art der Datensicherheit können jedoch je nach Einsatzszenario und Charakteristik der Speichersysteme sehr unterschiedlich gestaltet sein. Die Benutzer werden auf den Grad der Datensicherheit der einzelnen Filesysteme hingewiesen.

Für die Inhalte der gespeicherten Daten ist alleinig der Nutzer verantwortlich. Es liegt in der Verantwortung des Benutzers, von wichtigen Daten Sicherungskopien auf anderen Rechnern bzw. Bandkopien im Archivsystem zu erstellen.

Die Quotierung des Plattenplatzes erfolgt aufgrund von Vorgaben bei der Projektbegutachtung. Daten auf den Plattensystemen werden nach Ende eines Projektes gelöscht. Die Archivierung von über das Normalmaß hinausgehenden Datenmengen ist mit LRZ abzusprechen. Die Aufbewahrungsdauer von Archivdaten auf Band beträgt 10 Jahre.

#### **4. Kommunikationsnetz-Anschluss**

Die Netzbetriebsgruppe am LRZ sorgt für die erforderliche hochwertige Anbindung des SuperMUC an das weltweite Kommunikationsnetz. Im Einzelnen beinhaltet dies

- bestmögliche Anbindung an das Backbone-Netz des LRZ zur Nutzung anderer Dienste des LRZ und für die Archivierung, Nachbearbeitung und Visualisierung von Daten,
- bestmöglichen Anschluss an das deutsche Wissenschaftsnetz des DFN, damit der bundesweite Austausch von Daten der Nutzer möglichst unbehindert vonstattengehen kann,
- Wahrung aller Sicherheitsaspekte, die mit dem Anschluss des SuperMUC ans Kommunikationsnetz zusammenhängen und durch Maßnahmen im Kommunikationsnetz abgedeckt werden müssen.

### **§ 3 Nutzerkreis**

Am SuperMUC grundsätzlich zulässig sind Projekte aus

1. Forschung und Lehre an staatlichen deutschen Hochschulen,
2. Forschung und Lehre anderer deutscher Institutionen, die überwiegend von der öffentlichen Hand getragen werden,
3. Forschung und Lehre europäischer Institutionen, die überwiegend von der öffentlichen Hand getragen werden im Rahmen europäischer Projekte und Kooperationen,
4. der europäischen Industrie im Rahmen der staatlichen Vorgaben,

sofern sie den in § 1 festgelegten Betriebszielen entsprechen.

Für Nutzer aus den obigen Gruppen 1., 2. und 3. ist die Nutzung des SuperMUC bis auf Widerruf unentgeltlich.

## § 4 Zulassungsverfahren

Soweit es sich nicht um Großprojekte (mit mehr als eines vom GCS-Lenkungsausschuss festzulegenden Prozentsatzes der jährlichen Core Cycles) für den SuperMUC handelt, die im Rahmen von GCS- bzw. PRACE-Calls einzureichen sind, werden Projektanträge auf Nutzung des SuperMUC in elektronischer Form an das LRZ gestellt (über <https://www.lrz.de/services/compute/supermuc/projectproposal/>).

Ein Antrag muss folgende Angaben enthalten:

- Projekttitle
- Angaben zur beantragenden Institution und deren Leitung
- Angaben zur Person des Projektverantwortlichen  
*Der Projektverantwortliche ist für die administrativen Aufgaben innerhalb des Projektes zuständig, z.B. Vergabe, Verwaltung und Überwachung der zugewiesenen Nutzungskennzeichen und Ressourcen.*
- Nationalitäten, Telefonnummern und E-Mail-Adressen aller Personen, die im Rahmen des Projekts Zugang zum SuperMUC erhalten sollen
- gegebenenfalls Angaben zu Projektpartnern außerhalb der beantragenden Institution
- Beschreibung des Projektes
- Einordnung des Anwendungsgebietes (Biologie, Chemie, Fluidodynamik, Physik etc.)
- Kurzbeschreibung des Projektes (ca. 300 Worte)  
*Die Kurzbeschreibung des Projektes sollte in der Regel in Englisch erfolgen, da diese zur Darstellung der Arbeiten am SuperMUC veröffentlicht werden soll.*
- ausführliche Beschreibung des Projektes (Stand der Technik, verwendete Verfahren, Referenzen über bisherige Arbeiten, etc.)
- Dauer des Projekts
- Angaben zu den benötigten Ressourcen
- Rechenzeit des Gesamtprojektes (Parallele Laufzeit \* Anzahl Prozessoren)
- Plattenplatz für das Gesamtprojekt (permanent und temporär)
- Ressourcenbedarf eines typischen Einzellaufes und des Bedarfs bei Interaktiv-Nutzung (maximale Anzahl der Prozessoren, Hauptspeicher, Rechenzeit, Plattenplatz etc.)
- Angaben zum benötigten Archivbedarf (Größe, Häufigkeit des Zugriffs auf das Archiv etc.)
- Angaben über die zu verwendende Software (Compiler, Bibliotheken, Tools, etc.)
- Angaben zu speziellen Anforderungen (Blockbetrieb, zeitkritische Durchführung von Projekten, Bedarf an Visualisierungskapazität etc.)
- Angaben zum Umfang und zur Häufigkeit des Datentransfers zwischen Endbenutzer und LRZ
- IP-Adressen der Endgeräte (keine Subnetze) in öffentlichen Netzen, von denen aus der Zugriff auf den SuperMUC erfolgen soll
- Angaben zur Nutzung anderer Supercomputer für das beantragte Projekt
- Zusicherung, bei einem länger laufenden Projekt jährlich einen Zwischenbericht bzw. in jedem Fall einen Abschlussbericht zu liefern und die erhaltenen Ergebnisse in geeigneter Form zu veröffentlichen (bei begründetem Interesse des Antragstellers kann davon auf Antrag abgesehen werden)
- Zusicherung, die Betriebsregeln des SuperMUC und LRZ einzuhalten.

- Zustimmung zur Weitergabe der wesentlichen Angaben des Projektantrags (Antragsteller, Projekttitel, beantragte CPU-Zeit) an andere Höchstleistungsrechenzentren.

Die Zulassung von Projekten zum SuperMUC und die Festlegung von deren Rechnerressourcen obliegt dem Lenkungsausschuss. Das LRZ leitet Projektanträge unverzüglich zur Entscheidung an den Lenkungsausschuss weiter.

Die Zulassung eines Projekts zum SuperMUC kann vom Lenkungsausschuss widerrufen werden, wenn

- die Angaben im Projektantrag nicht oder nicht mehr zutreffen,
- die Voraussetzungen für eine ordnungsgemäße Nutzung des SuperMUC nicht (mehr) gegeben sind,
- Verstöße vorliegen, die zu einem Entzug der Rechenberechtigung am LRZ führen.

## § 5 Ressourcennutzung

Das LRZ stellt für bewilligte Projekte DV-Ressourcen im Rahmen der vom Lenkungsausschuss festgelegten Grenzwerte (maximale Knotenanzahl, Rechenzeit, Hauptspeicher, Plattenspeicher, Archivspeicher, auch Zeitdauer des Projekts) und entsprechend der am SuperMUC gegebenen Möglichkeiten bereit. Es sorgt auch bestmöglich für die betriebliche Umsetzung eventuell vom Lenkungsausschuss festgelegter Prioritätsanforderungen. Darüber hinausgehende Ansprüche von Nutzern auf Nutzung von Rechnerressourcen am SuperMUC bestehen nicht.

SuperMUC-Nutzer, die nicht zum satzungsmäßigen Nutzerkreis des LRZ (§ 1 der *Benutzungsrichtlinien für Informationsverarbeitungssysteme des Leibniz-Rechenzentrums der Bayerischen Akademie der Wissenschaften*) gehören, können andere IT-Einrichtungen des LRZ (z.B. Archivsysteme und Visualisierungs-Einrichtungen) mitbenutzen, sofern dadurch der satzungsmäßige Nutzerkreis nicht in deren Nutzung beeinträchtigt wird bzw. die dadurch entstehende Kosten gedeckt sind.

## § 6 Inkrafttreten

Diese *Nutzungs- und Betriebsordnung für den Höchstleistungsrechner am Leibniz-Rechenzentrum (SuperMUC)* tritt mit der Billigung durch den Lenkungsausschuss und das Bayerische Staatsministerium für Wissenschaft, Forschung und Kunst am 01.08.2012 in Kraft.