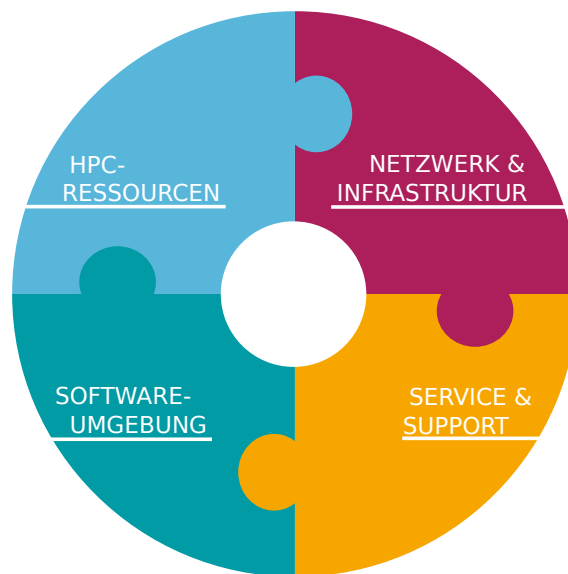


HPC.NRW Bericht AP4

HPC.NRW*

2023



*Kontakt: contact-ap4@hpc.nrw

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
2	Aspekte der Harmonisierung der HPC-Umgebung	1
3	Projektbewirtschaftung	1
4	Reporting	8
5	Supportinfrastruktur HPC.NRW	11
6	Identity Management	12

1 Einleitung

Dieses Dokument ist im Rahmen des Projekts „HPC.NRW“ entstanden und fasst die wichtigsten Maßnahmen des Arbeitspakets 4 zur „Strukturierung des Zugangs zu HPC Ressourcen“ zusammen. Das Ziel ist insbesondere die Darstellung der Durchlässigkeit der Ebenen Tier-3 und Tier-2. Es beinhalten darüber hinaus insbesondere eine Beschreibung der Umsetzung an den Tier-2 Zentren mit Hinblick auf die NHR-Anforderungen und die Durchlässigkeit bis hin zur Tier-2 Ebene. Es werden die Aspekte zur Projektbewirtschaftung und organisatorische Maßnahmen erläutert. Die Evaluierungen zu einem föderiertem Identity Management hingegen werden in einem separaten Dokument behandelt.

2 Aspekte der Harmonisierung der HPC-Umgebung

Die Umsetzung einer harmonisierten HPC-Umgebung zwischen den beteiligten Universitäten in NRW durch das HPC.NRW Kompetenznetzwerk wird in drei Arbeitspaketen behandelt.

In Arbeitspaket 2 wird eine Support-Infrastruktur geschaffen, die durch gemeinsame Lehrinhalte, einen Austausch über die Umsetzung lokaler Supportstrukturen, sowie ein geteiltes Ticketsystem das Beratungsangebot für Nutzende verbessert.

Arbeitspaket 3 behandelt Aspekte der Systemadministration von HPC Systemen und schafft Möglichkeiten für einen Erfahrungsaustausch und die Etablierung von „Best Practices“. Des Weiteren wird das lokale Softwareangebot über gemeinsame Beschaffungen, sowie einem Austausch über die lokale Modul-Organisation vereinheitlicht.

In Arbeitspaket 4 wird eine Harmonisierung bezüglich des Zugangs zu vorhandenen HPC Systemen angestrebt. Mithilfe von Quick-Reference-Cards (vgl. Kapitel 3.3) werden die Zugangsvoraussetzungen aller Standorte in NRW auf eine einheitliche Art und Weise kommuniziert. An einigen Standorten, insbesondere Tier-2 Zentren, kommt JARDS zum Einsatz, womit Forschende ihre Projektanträge stellen können. Desweiteren wird untersucht, ob sich das Identity Management standortübergreifend vereinheitlichen lässt, sodass Nutzende in Zukunft nach Möglichkeit ihre Accounts an mehreren Standorten in NRW einsetzen könnten.

3 Projektbewirtschaftung

Im folgenden Abschnitt werden die in HPC.NRW getroffenen Maßnahmen und erzielten Erfolge in Bezug auf die Projektbewirtschaftung erläutert. Diese erfolgt zunächst getrennt nach den Ebene-2- (vgl. Kapitel 3.1) und Ebene-3-Zentren (vgl. Kapitel 3.2).

3.1 Ebene-2-Zentren

Eine funktionierende HPC-Landesstrategie beinhaltet nicht nur die lokale Bereitstellung angemessener Rechenkapazitäten sowie Hilfestellungen zur optimalen Nutzung der gewählten Ressourcen, sondern insbesondere auch die Unterstützung der Nutzenden bei der Auswahl der passenden Ebene der HPC-Pyramide und der Rechenzeitbeantragung. Insbesondere für die Tier-2-Zentren des Landes wird im Rahmen des Projekts ein einheitliches und wissenschaftsgeleitete Beantragungs- und Bewilligungsverfahren angestrebt, um die Durchlässigkeit zwischen Ebene 2 und 3 zu erhöhen.

Zur Realisierung eines strukturierten Zugangs zu Ebene-2-Zentren wurden zunächst die elektronischen Beantragungs- und Bewilligungsverfahren der NHR-Zentren Aachen und Paderborn in Bezug auf die anerkannten Empfehlungen der Gauß-Allianz¹ untersucht und wo nötig angepasst. Bei sämtlichen Anpassung wurden die durch die NHR-AG-Ressourcenvergabe erarbeiteten Ergebnisse sowie die am 11.04.2022 durch den NHR-Nutzungsausschuss verabschiedete „Verfahrensordnung eines NHR-weiten Vergabeverfahrens“ berücksichtigt. Die Harmonisierung dieses Verfahrens am dritten Ebene-2-Standort Köln wird hierbei im Zuge der Umstellung auf eine einheitliche Software vervollständigt. Hierbei hat sich das Konsortium auf den Einsatz der im GCS entwickelten und bereits etablierten Plattform JARDS (s. Kapitel 3.1.2) geeinigt.

Zur Realisierung eines NRW-weiten einheitlich strukturierten Verfahrens wurde im Rahmen des Projekts insbesondere eine Vereinheitlichung der zugrundeliegenden wissenschaftsgeleiteten Verfahren erwirkt. Eine gemeinsame (zentrale) Rechenzeitvergabe ist hierbei nicht vorgesehen. Hierbei wurden insbesondere die NHR-Anforderungen berücksichtigt, die u.a. ein zentrales Portal für alle NHR-Zentren vorsehen, was eine gemeinsames Portal aller Tier-2-Zentren NRW widersprochen hätte. Um dennoch ein größtmögliche Transparenz für die Nutzenden in NRW zu schaffen wurden die Antrags-/Nutzungsberechtigungen aller Standorte (Tier-2 und Tier-3) auf der Webseite dokumentiert (s. Tabelle):

		Angehörige deutscher öffentlicher oder staatlich anerkannter Hochschulen / Forschungseinrichtungen	Mitglieder der lokalen Uni lokalen FH		Kooperations- partner in Projekten
Tier-2	Aachen	x	x	x	x
	Köln	x	x	x	x
	Paderborn	x	x	x	x
Tier-3	Bielefeld		x		x
	Bochum		x	x	x
	Bonn		x		x
	Dortmund		x	x	x
	Düsseldorf		x		x
	Duisburg-Essen		x		x
	Münster	o	x	x	x
	Siegen	o	x		x
	Wuppertal	o	x		x

x = Antrags-/Nutzungsberechtigt

o = Nutzung im geringen Umfang möglich

Die genauen Details sind dann den jeweiligen Quick Reference Cards (QRC, s. Kapitel 3.3) zu entnehmen.

¹https://gauss-allianz.de/files/pdf/GA-Empfehlungen_Beantragungs_Bewilligungsverfahren_201709.pdf



Abbildung 1: Schritte zur Beantragung von Rechenzeitprojekten.

3.1.1 Beantragungs- und Begutachtungsprozess

Der gesamte Beantragungs- und Begutachtungsprozess ist in Abbildung 1 dargestellt. Für interessierte Nutzende sind insbesondere die **Zugangsvoraussetzungen** von Bedeutung, da diese in der heterogenen HPC-Landschaft in NRW nicht einheitlich geregelt sind, wobei mindestens die Zentren der Ebene-2 landes- bzw. bundesweit Angehörigen deutscher öffentlicher oder staatlich anerkannter Hochschulen offen stehen.

Die Phase der **Projektvorbereitung** ist die aus Sicht der Antragsstellende arbeitsintensivste Phase, da hier eine detailliert Projektbeschreibung erforderlich ist. Insbesondere die Abschätzung des Ressourcenbedarfs in Core-h oder Speicherplatz fällt Einsteigern häufig schwer. Hier bietet das Kompetenznetzwerk gezielt Hilfestellung (vgl. Kapitel 5). Gezielte Maßnahmen sind hier beispielsweise die Durchführung von Workshops für Angehörige der Fachhochschulen des Landes. Hierbei ist zu betonen, dass es an allen Zentren der Ebene 2 möglich ist Testaccounts oder -projekte zu beantragen. Wenn sich die Antragsstellenden über den Bedarf im Klaren sind, können sie eine geeignete Projektkategorie auswählen. Eine weitere Herausforderung ist häufig der benötigte Skalierbarkeitsnachweis. Für die zielgerichtete Unterstützung wurde hierbei ein Benchmarking & Skalierungstutorial im HPC-Wiki² veröffentlicht. Hierbei wird nicht nur der theoretische Hintergrund erläutert, sondern es werden auch praxisorientierte Anleitungen und Tipps zum Benchmarking gegeben.

In der nächsten Phase (**Projekteinreichung**) kann der Antrag über das entsprechende Online-Portal (vgl. Kapitel 3.1.2) an des entsprechende Zentrum geleitet werden. Hierzu ist in der Regel die Unterschrift des antragsberechtigten Projektleiters erforderlich.

Während der **formalen Evaluation** wird beispielsweise diese Antragsberechtigung geprüft. Im **technischen Review** prüfen die HPC-Experten des Standorts ob die technischen Angaben zu dem Antrag passen.

Im **wissenschaftlichen Review** hingegen werden in der Regel externe Experten hinzugezogen, um die Wissenschaftlichkeit des Vorhabens zu prüfen. Dieser Prozess dauert je nach Geschwindigkeit der externen Gutachtenden bis zu drei Monate. Auf Grundlage der wissenschaftlichen Gutachten kann das lokale Vergabegremium eine fundierte Entscheidung über die Ressourcen fällen. Um die Qualität des wissenschaftsgeleiteten Begutachtungsverfahrens an allen Zentren zu sichern und weiter zu erhöhen, wurde ursprünglich die Umsetzung eines gemeinsamen Gutachterpools im Laufe der zweiten Projekthälfte geplant. Die technische Umsetzbarkeit auch über mehrere JARDS-Instanzen wurde hierbei frühzeitig geprüft, und stellt somit auch eine Vorarbeit für die NHR-Zentren dar. Die Umsetzung eines gemeinsamen Gutachterpools wird jetzt entgegen der ursprünglichen Planung im NHR-Kontext in einer zentralen Instanz realisiert.

In der letzten Phase (**Ressourcenzuweisung und Monitoring**) werden im Falle eines erfolgreichen Antrags die HPC-Accounts und Rechenzeitprojekte in das Zielsystem provisioniert. Die PIs und technischen Ansprechpartner*innen können hier das Projekt verwalten und die verbrauchten Rechenzeitprojekte kontrollieren. Darüber hinaus gibt es bei großen Projekten entsprechende Berichtspflichten zu den Projekten.

3.1.2 Beantragungsportal JARDS

Überblick Die Beantragung von Rechenressourcen ist für die meisten Nutzenden der erste Berührungspunkt mit HPC und Rechenzentren. Daher ist eine Harmonisierung vor allem auch im Hinblick auf den NHR-Verbund und das GCS erstrebenswert. Dies dient vor allem dazu den Forschenden den Antragsprozess und den Wechsel zwischen HPC-Ebene so einfach wie möglich zu machen. Es können

²https://hpc-wiki.info/hpc/Benchmarking_%26_Scaling_Tutorial

im Grunde zwei verschiedene Konzepte der Rechenzeitvergabe unterschieden werden: die kontingentierte Rechenzeitvergabe und die projektbasierte Rechenzeitvergabe.

Die kontingentierte Rechenzeitvergabe wird meist von Tier-3 Rechenzentren benutzt und hat im Kern die Kontingentierung der Rechenzeitressourcen je nach z.B. Beitrag zur Anschaffung durch die beteiligten wissenschaftlichen Institute. Nutzende werden dabei Instituten zugeordnet und können die Kontingente dann in einen Fair-Share-Sinne nutzen.

Die projektbasierte Rechenzeitvergabe zeichnet sich dadurch aus, dass jedes Rechenzeitprojekt (mit definierten Rechenressourcen und Mitgliedern) vom Projektleiter (Principal Investigator, PI) beantragt werden muss und durch das lokale oder zentrale Vergabegremium (z.B. Ressource Allocation Board) bewilligt werden muss. Dieses Verfahren wird durch Tier-2/1-Zentren angewendet, da so Forschungsvorhaben absolute Ressourcenzusagen gemacht werden können und nicht nur relative Zusagen in einem Fair-Share-Sinne. Dabei sind hauptsächlich folgende Prozesse notwendig:

1. Beantragung des Rechenzeitprojektes mit allen notwendigen Angaben und Dokumenten,
2. die formale Prüfung der Antragsberechtigung,
3. die technische Prüfung der Eignung des Rechenzeitvorhabens für die beantragten Ressourcen,
4. die wissenschaftliche Begutachtung des Vorhabens,
5. die Bewertung der Prüfungen durch die Rechenzeitvergabekommission,
6. die Bewilligung/Kürzung/... des Antrages,
7. die Einrichtung des Rechenzeitprojektes,
8. die Einrichtung von Benutzeraccounts sowie Hinzufügen/Entfernen von Nutzenden zu Projekten,
9. das Monitoring der verwendeten Rechenzeit,
10. das Schließen von Rechenzeitprojekten,
11. und das Einholen von Projektberichten und Publikationen.

JARDS, das Joint Application, Review and Dispatch Service wurde zu diesem Zweck vom Jülich Supercomputing Center (JSC) zur Verwendung im GCS entwickelt. Es ist auf die Schritte bis zur Bewilligung des Rechenzeitantrags fokussiert. Es wird jedoch auch versucht in der neuen JARDS.projects-Komponente Aspekte wie das Monitoring der Ressourcennutzung und das Einholen von Projektberichten und Publikationen mit abzubilden. Schritte, die direkt die Infrastruktur des Rechenzentrums oder Clusters betreffen wie Benutzerverwaltung oder Einrichtung von Rechenzeitprojekten beinhaltet JARDS nicht.

JARDS bietet ein Formularentwicklungssystem an, auf dessen Basis individuell für den jeweiligen Standort geeignete Antragsformulare modelliert werden können, so dass auch die unterschiedlichen Bedürfnisse von Erstnutzer/innen bis Highend-Nutzer/innen berücksichtigt werden können. Für die Administratoren der HPC-Systeme und die Gutachter/innen der Anträge existiert eine Schnittstelle, die es ihnen ermöglicht, die Verwaltung der Anträge, hier etwa die Begutachtungs- und Genehmigungsprozesse nachvollziehbar zu gestalten. Zur Harmonisierung der Antragsprozesse der Tier-2 Rechenzentren mit dem GCS treibt HPC.NRW die Einführung von JARDS an den Zentren seit 2019 voran. Im Folgenden werden die Schritte zur Harmonisierung und zukünftige Planungen an den drei Standorten beschrieben.

Hamonisierung am Standort Aachen Die RWTH Aachen University setzt JARDS bereits seit sehr vielen Jahren für die Projektbewirtschaftung ein. Dies umfasst sowohl die Tier-3, als auch die Tier-2 Projekte. Im Rahmen der Umstellung auf das bundesweite NHR-Verfahren wurde zunächst der Übergang der alten Tier-2 Projektkategorien (RWTH Medium und JARA) geschaffen, indem eine neue Tier-2 JARDS-Instanz Mitte 2021 in Betrieb genommen wurden. Diese wurde insbesondere in Rücksprache mit dem Standort Paderborn, Darmstadt und den anderen NHR-Zentren so weiterentwickelt und vorbereitet, dass sie auch für alle anderen NHR-Standorten geöffnet werden kann. Die umfasst insbesondere nicht nur die Antragsstellung, sondern auch auch die JARDS-Komponenten zur Begutachtung und zum Berichtswesen (".project"). Darüber hinaus wurde sowohl den NHR-Zentren, als auch dem Standort Köln eine Testinstanz bereit gestellt, so dass die Harmonisierung standortübergreifend erfolgen kann. Für die lokalen Prozesse zur Prozesseinrichtung wurde eine entsprechende API (weiter-)entwickelt, so dass potentiell die gesamte JARDS-Community profitiert. Zur Vorbereitung eines alternativen Anmelde-Mechanismus mittels DFN-AAI wurden in enger Zusammenarbeit mit dem NHR die Identity-Proxies RegApp und der AcademicCloud aus Niedersachsen evaluiert und erfolgreich in das Testsystem integriert. Um den Einstieg mit JARDS zu erleichtern und anderen Zentren die Mitarbeit an dem Projekt zu ermöglichen wurde vom JSC ein JARDS Userforum eingerichtet, das zum Austausch und zur Schulung mit der Plattform verwendet werden kann. Hier hat die RWTH als langjähriger Verwender von JARDS beraten und unterstützt. Darüber hinaus wurden bisher drei Workshops für alle interessierten Nutzenden geplant und durchgeführt

Hamonisierung am Standort Paderborn Mit dem Übergang der PC2 (Paderborn Center for Parallel Computing) vom Tier-3 Rechenzentrum zum deutschlandweit offenen Tier-2 Rechenzentrum mit der Inbetriebnahme des Noctua-Clusters Ende 2018 mussten neue Antragspfade und Begutachtungsprozesse eingeführt werden. JARDS war auf Grund des Entwicklungsstandes damals keine relevante Option für das elektronische Beantragungssystem. Deshalb wurde basierend auf einem elektronischen Formularsysteme in flexibles Online-Rechenzeitantragssystem am PC2 implementiert. Dieses System wurde bis zum Übergang auf die lokale JARDS Instanz im Frühjahr 2021 reibungslos betrieben. Die Inbetriebnahme und Konfiguration von JARDS am PC2 war von einigen Herausforderungen begleitet, insbesondere mussten zusätzliche Mechanismen zur Exportbeschränkungsprüfung, zur Erfüllung von Datenschutzanforderungen und Hilfsfunktionen für Nutzende implementiert werden. Derzeit wird JARDS für Accountanträge, small-Anträge (Tier-3 und Tier-3 Ersatzversorgung), NHR-Normal- und Großanträge sowie für die Einholung von Projektbeschreibungen genutzt. Die JARDS-Begutachtungskomponente wird nicht genutzt und stattdessen das 2018 eingeführte System für die externen wissenschaftlichen Reviews weiter genutzt bis die NHR-JARDS-Zentralinstanz dafür zu Verfügung steht.

Harmonisierung am Standort Köln Seit Anschaffung des Kölner High Performance Clusters CHEOPS wurden Nutzungsanträge des Clusters individuell schriftlich gestellt, wobei ein/e Lehrbeauftragte/r der Universität zu Köln als PI bzw. als Antragsteller/in auftrat, die/der das im Antrag genannte Vorhaben bestätigte und dafür eine/n Mitarbeiter/in als Bearbeiter/in benannte. Für den Erhalt eines vollwertigen Nutzer/innen-Accounts wurde und wird eine Projektbeschreibung mit Angaben zum Vorhaben und den beanspruchten Ressourcen wie Knoten-/Core-Anzahl pro Job, Jobanzahl über das gesamte Projekt hinweg, Memory und Storagebedarf erwartet. Die/der Mitarbeiter/in erhält in der Regel nach Prüfung und der Genehmigung des Antrages durch den wissenschaftlichen Beirat des Regionalen Rechenzentrums eine Zugangsberechtigung zum High Performance Cluster der Universität zu Köln. Für Erstnutzer/innen eines Clusters wurde eine Möglichkeit geschaffen, sich mit sogenannten Schnupperaccounts mit dem Cluster und seiner Nutzerumgebung, insbesondere mit dem Batchsystem, vertraut zu machen und erste Erfahrungen auf dem Cluster zu sammeln. Für Erstnutzer/innen wurden und werden 1000 CoreH bereitgestellt. Für den Erhalt einer vollwertigen Zugangsberechtigung ist die Anfertigung einer Projektbeschreibung erforderlich, die vom Rechenzentrum oder dem Beirat geprüft und genehmigt wird.

Zur Vorbereitung auf die Inbetriebnahme des Nachfolgesystems CHEOPS2 am Ende des Jahres 2023 will die Universität zu Köln gemäß der Vorgaben der Gauß-Allianz ein Genehmigungsverfahren einführen. Entsprechend hat sich die Universität beim Forschungszentrum Jülich um eine Nutzungslizenz bemüht und die Software auf separaten Servern installiert. Das Forschungszentrum Jülich unterstützt alle Tier-2-Zentren u.a. durch die Veranstaltung von Nutzer/innen-Foren und -Workshops, Zugang zu den Quellen der Software, sowie persönliche Beratung. Mittlerweile wurden an der Universität zu Köln bereits erste Antragsformulare erstellt, die mit JARDS angeboten werden können, und die in den nächsten Monaten verfeinert werden sollen. Eine noch zu bewältigende Aufgabe wird die Ermittlung/Erfassung von potentiellen Gutachter/innen sein, die bereit sind, eine wissenschaftliche Beurteilung der gestellten Anträge durchzuführen.

NHR-JARDS-Zentralportal Im Rahmen des NHR-Verbundes wird ein zentrales auf JARDS basierendes Rechenzeitantragsportal zur Vereinheitlichung der Antragsprozesse der NHR Zentren aufgebaut und mit einem zentralen Gutachtenbenpool kombiniert. Produktivbetrieb für alle NHR Zentren ist ab Juni 2023 geplant. Die zwei NHR Zentren Aachen und Paderborn aus HPC.NRW werden ihre Tier-2/NHR Antragspfade (NHR-Testprojekte, NHR-Normalprojekte, NHR-Großprojekte) aus ihren lokalen JARDS-Instanzen in dieses zentrale System transferrieren. Die lokalen Instanzen werden für die Tier-3 Rechenzeitbewirtschaftung weiterbetrieben. Lokale Entwicklungen und Erweiterungen der zwei NHR Standorte wurden aktiv in das NHR-JARDS Zentralportal eingebracht.

3.2 Ebene-3-Zentren

Im Unterschied zu Tier-2-Standorten, sind die HPC Ressourcen von Tier-3-Standorten häufig durch die Mittel beteiligter Forschungsgruppen finanziert und sind entweder im lokalen Informationszentrum der Universität oder einer der Arbeitsgruppen angesiedelt. Daraus ergibt sich häufig, dass der Zugang nicht über Projektanträge gewährt wird, sondern durch eine Verbindung zu einer der Arbeitsgruppen begründet ist. Die HPC Ressourcen werden dann anteilig auf diese Arbeitsgruppen über FairShare Faktoren vergeben, wobei es je nach Absprachen auch exklusive Ressourcen geben kann. Daneben gibt es häufig ein gewisses „freies Kontingent“, über das z.B. Hochschulmitglieder an unbeteiligten Arbeitsgruppen Zugang zum HPC System bekommen können.

Da der Zugang seltener über Projektanträge gewährt wird, gibt es üblicherweise auch keine formellen Prüfungen von Forschungsvorhaben und dem entsprechenden Hardwarebedarf. Der Hardwarebedarf wird üblicherweise schon zum Zeitpunkt der Beschaffung zwischen den Arbeitsgruppen thematisiert. Ein informeller Austausch zwischen den Arbeitsgruppen, besonders aktiven Nutzenden und Administratoren ist hingegen üblich, um eine effiziente Ausnutzung des Systems zu erreichen.

Die Erstellung von neuen Accounts geschieht je nach Grad der Integration in allgemeine IT Systeme der Universität entweder über ein zentrales Identity Management oder über einen direkten Antrag bei den HPC Administratoren.

3.3 Quick Reference Cards (QRC)

Im Rahmen des Projekts wurden für alle Zentren einheitliche Leitfäden zur klaren Darstellung der Zugangswege in Form von Quick Reference Cards entwickelt und auf der Webseite veröffentlicht. Die Struktur der QRCs folgt hierbei den gemeinsamen und anerkannten Empfehlungen für Beantragungs- und Bewilligungsverfahren zur Realisierung eines strukturierten Zugangs der Gauß-Allianz³. Nutzende finden hier in vereinfachter und übersichtlicher Form die wesentlichen Aspekte der Nutzung von HPC-Systemen, der Projektklassen und der in HPC.NRW entstandenen Beantragungswege für Rechenzeit. Dies umfasst insbesondere die Zugangsvoraussetzungen, die Projektvorbereitung, die Einreichung von Anträgen, die Aspekte der formalen Bewertung, der technischen und

³https://gauss-allianz.de/files/pdf/GA-Empfehlungen_Beantragungs_Bewilligungsverfahren_201709.pdf

Einrichtung: Universität Standort der eigenen Einrichtung: Dortmund Größe des Rechenzeitprojekts: klein / mittel (z.B. weniger als 1-5 Mio Core)	Spezielle Hardware-Anforderungen: ☐ FPGAs ☒ GPUs ☐ Sehr großer Hauptspeicherbedarf (z.B. mehr als 1 TB pro Knoten) ☐ Vektorbeschleuniger
---	--

Abbildung 2: Filterfunktionen auf der HPC.NRW-Webseite.

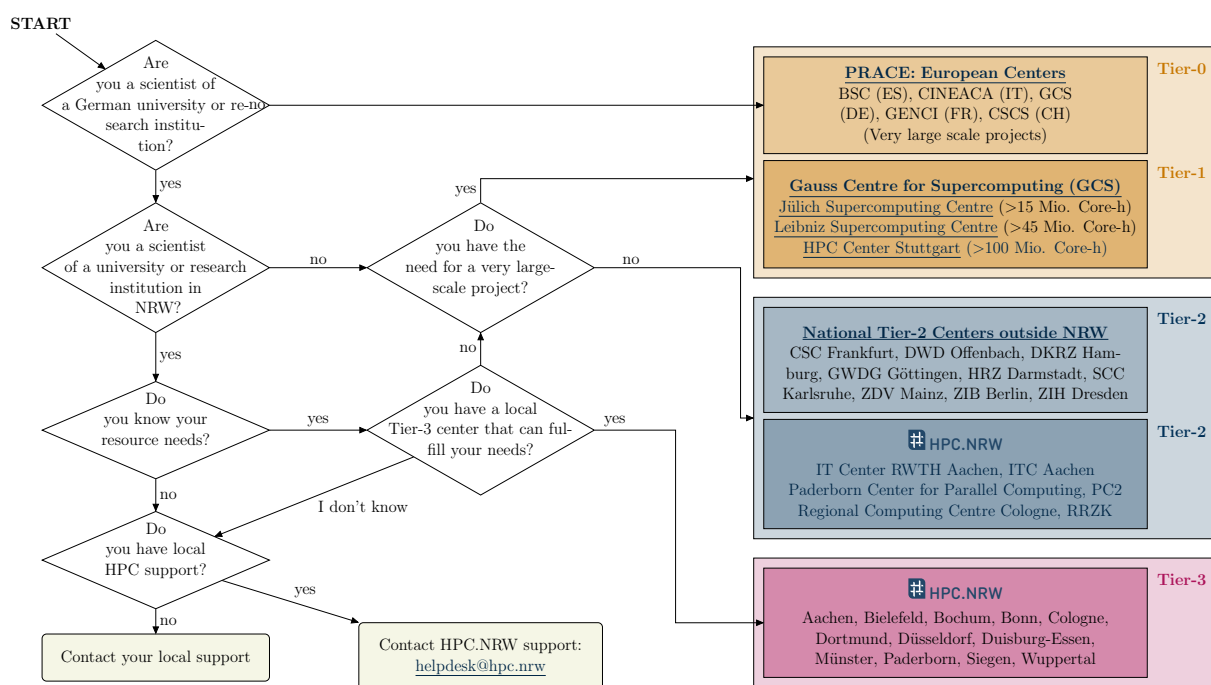


Abbildung 3: Allgemeine Übersicht HPC-Landschaft in Europa und Deutschland.

wissenschaftlichen Begutachtung sowie Ressourcenbereitstellung das Projekt-Monitoring (s. Abbildung 1). Diese einheitliche Darstellung stellt sowohl für neuen Nutzenden, als auch für erfahrenen Antragsstellende eine einfache und übersichtliche Hilfestellung dar und unterstützt so den leichten Wechsel zwischen den verschiedenen Zentren des Landes. Ebene-3-Nutzende, deren Rechenbedarf sich erhöht hat, erhalten einen schnellen Einblick in die höheren Beantragungsanforderungen der Ebene-2-Zentren sowie die konkreten Verfahren. Daher tragen die QRCs auch hier zur erhöhten Durchlässigkeit zwischen Ebene 2 und Ebene 3 bei.

Um insbesondere die verschiedenen Zugangsvoraussetzung, die sich aus der Finanzierung der Systeme ergibt, klar und transparent darzustellen wurden auf der HPC.NRW-Webseite weitere Hilfestellungen implimentiert. Hierzu gehört eine entsprechende Möglichkeit zum Filter der QRCs, basierend auf der Zugehörigkeit (Universität, Fachhochschule, außeruniversitären Einrichtung, etc.), dem Standort, der Größe des Rechenzeitprojekts sowie spezieller Hardware-Anforderungen (vgl. Abbildung 2).

Darüber hinaus wurde noch eine allgemeine QRC entwickelt. Diese bietet unter Berücksichtigung der verschiedenen Ebenen in Europa und Deutschland mittels eines entsprechenden Ablaufdia-



Abbildung 4: Übersicht der HPC-Ressourcen in NRW.

gramms weitere Unterstützung bei der Auswahl eines geeigneten Zentrums. In Abbildung 3 sieht man wie ein interessierter Nutzer anhand einfacher Fragen geleitet wird. Die Bandbreite der möglichen Zentren reicht hierbei von den europäischen Tier-0-Zentren (PRACE) über die deutschen Tier-1-Zentren des Gauss Centre for Supercomputing (GCS) und die Tier-2-Zentren innerhalb und außerhalb von NRW bis hin zu den Tier-3-Zentren des Landes. Somit dient diese allgemeine QRC nicht nur der Unterstützung der vorhandenen lokalen Nutzenden und HPC-Zentren, sondern adressiert auch gezielt Nutzende ohne eigenes HPC-Zentrum (FHs, Ebene-3-Ersatzversorgung) oder Nutzende deren Rechenbedarf nur von Zentren der Ebene 0 oder 1 gedeckt werden kann.

Die Arbeiten an den QRCs haben, zusätzlich zur Verbesserung der Dokumentation auch zur Vereinfachung einiger Projektkategorien geführt (z. B. Entfernung veralteter Kategorien, Anpassung der Projektzuschnitte). Die QRCs werden regelmäßig weiterentwickelt und angepasst, so dass insbesondere die Änderungen die sich aus dem NHR-Verfahren ergeben eingepflegt wurden. Abgerundet wird das Angebot auf der Webseite mit der Übersicht der Verfügbaren HPC-Ressourcen (vgl. Abbildung 4).

4 Reporting

Als Grundlage für ein vergleichbares Reporting wurde ein einheitliches Shell-/Python-basiertes Framework zur direkten Datenerhebung aus dem Batch-Betrieb entwickelt, welches bereits an allen Standorten zum Einsatz kommt. Dabei werden in festgelegten Zeitabschnitten anonymisierte Nutzungsdaten der Cluster automatisiert erfasst und zentral abgespeichert. Die Clusterdaten selber basieren auf Metriken, die in den lokalen Slurmdatenbanken vorhanden sind und mit Hilfe des Frameworks auf ein einheitliches Format reduziert und anonymisiert werden. Eine Integration des Schedulingssystems PBS für einen Standort steht derzeit noch aus. Als zusätzliche Information werden die User-Logins, ebenfalls anonymisiert und automatisiert, erfasst. Das Framework bietet hierbei eine einheitliche Schnittstelle zum Sammeln der Daten, welche über simple Cronjobs

gesteuert wird.

Neben dem Sammeln der Daten bietet das Framework die Möglichkeit, einheitliche Darstellungen der erfassten Daten für alle Standorte zu erstellen. Die Steuerung darüber welche Metriken graphisch dargestellt werden erfolgt über einfache Konfigurationsdateien. Insofern unterscheiden sich Ebene-2- und Ebene-3-Standorte hauptsächlich durch die gewählten Konfigurationen im Bericht.

Basierend auf der systematischen Erhebung des IST-Zustands, wurden gemeinsame Reporting-Kriterien für Ebenen 2 und 3 festgelegt. Hierbei sind die Kriterien der Ebene 3 eine Untermenge der umfangreicheren Ebene-2-Kriterien. Die Kriterien umfassen vor allem die fachliche Einordnung, basierend auf der DFG-Fachsystematik (nur Ebene 2), die Jobgrößenklassen, bezogen auf die verbrauchte Rechenzeit (Ebene 2 und 3), die Anzahl der Nutzenden sowie die Batch-Wartezeiten. Eine genaue Übersicht über alle Metriken ist in der unten eingefügten Tabelle zu finden. Hierbei wird der Verbrauch in abgerechneten Core-h angegeben. Dies bedeutet nicht zwangsläufig, dass auch die Kerne auch genutzt wurden, sondern nur ob die Nutzung durch eine / einen Nutzenden blockiert war. Wenn z.B. auf einem System mit 48 Kernen und 128 GB Hauptspeicher eine Anwendung über das Batch-System einen seriellen Job mit einem Speicherbedarf von 127 GB anfordert, so werden u.U. dennoch 48 Core-h abgerechnet, da die anderen Kerne ja nicht mehr für andere Nutzende zur Verfügung steht. Gleiches gilt für Jobs die exklusiv einen ganzen Knoten anfordern.

Metrik		Tier 2	Tier 3	Erläuterung
Clusternutzung nach Projektkategorie [abgerechnete Rechenzeit in Core-H]		o	o	Diese Kennzahl gibt auf Tagesbasis an, wie die durchschnittliche Nutzung der vorhandenen Cores im Batchsystem in Bezug auf die lokalen Projektkategorien war. Hierbei wird zwischen vergebener und verbrauchter Rechenzeit unterschieden. Die Darstellung erfolgt als Balkendiagramm für den aktuellen Monat und die letzten 12 Monate.
Clusternutzung nach primärer DFG-Fachkategorie [abgerechnete Rechenzeit in Core-H]		x		Verbrauchte Core-H aufgeschlüsselt nach DFG-Fachkategorien. Verwendet wird die dreistellige Oberkategorie. Für den Standort Köln werden statt der DFG-Fachkategorie die internen Fachbereiche verwendet. Die Zentren können bei sehr kleinem Anteil einzelne Kategorien nach eigenem Ermessen filtern, um den Report übersichtlicher zu gestalten. Die Daten werden als Histogramm für den aktuellen Monat, als Histogramm für die letzten zwölf Monate sowie als gestapeltes Balkendiagramm für die letzten 12 Monate dargestellt.
Clusternutzung nach Jobgrößenklasse [abgerechnete Rechenzeit in Core-H]		x	x	Diese Kennzahl gibt auf Tagesbasis nach Größenklassen sortiert die Summe der verbrauchten CPU-Stunden an, die in den Projekten auf dem Cluster gerechnet wurden. Die Größe eines Jobs wird hierbei durch die Menge der genutzten Cores definiert. Die Größenklassen erhöhen sich in Zweierpotenzen (1, 2, 4, 8, 16, ...). Die Darstellung erfolgt als gestapeltes Balkendiagramm und als Histogramm jeweils für den aktuellen Monat und die letzten 12 Monate.
Anzahl Nutzer*innen		x	x	Es werden alle eingeloggtten Nutzer*innen auf allen Frontends innerhalb eines Tages gezählt, wobei doppelte Zählungen vermieden werden.
Batch-Wartezeiten		x		Diese Kennzahl gibt auf Tagesbasis an, wie groß die durchschnittliche Wartezeit (in Sekunden) der angelaufenen Batchjobs war.
Verfügbarkeit Frontends		o		

x = Darstellung im Report umgesetzt

o = Darstellung im Report zum Teil umgesetzt / geplant

Ein erster gemeinsamer Report der Ebenen 2 und 3 befindet sich in Vorbereitung, wobei auch historische Clusternutzungsdaten mit einfließen werden. Da die benötigten Daten an 11 von 12 Standorten langfristig in den Slurmdatenbanken gespeichert werden, können diese mit Hilfe des Frameworks über einen (fast) beliebig definierbaren Zeitraum abgerufen werden. Lediglich die anonymisierten User-Logins können nicht für einen beliebig lange zurückliegenden Zeitraum ermittelt werden, da diese nur für eine begrenzte und an den Standorten unterschiedliche Zeit gespeichert werden.

Das Ziel ist es hier, dass (halb-)automatische monatliche Reports für alle HPC.NRW-Zentren generiert werden. In den generierten PDFs kann dann abhängig von der Metrik eine tagesgenaue Auswertung erfolgen. Darüber hinaus wird ein Überblick über die vergangenen zwölf Monate erstellt, so dass die längerfristige Entwicklung schnell analysiert werden kann. Zusätzlich zu den monatlich Reports können auch jederzeit weitere Reports erstellt werden. Mit Hilfe einfacher Konfigurationsdateien im JSON-Format könne beliebige Metriken für beliebige Standorte erstellt werden. Bei der Entwicklung des Frameworks wurde insbesondere auf die Erweiterbarkeit geachtet, so dass es in den Zentren auch in Zukunft als nützliches Werkzeug eingesetzt werden kann.

5 Supportinfrastruktur HPC.NRW

Ein Projektziel von HPC.NRW war die Einrichtung eines gemeinsamen, landesweiten Ticket-Systems. Hierfür wurde auf eine bereits bestehende Infrastruktur der Gauss-Allianz (GA) zurückgegriffen. Die Gauss-Allianz betreibt bisher ein OTRS-Ticketsystem für die Belange der Gauss-Allianz. Im DFG-Projekt ProPe wurde dieses Ticketsystem bereits im Kontext des Performance Engineering von der RWTH Aachen, der TU Dresden und der Friedrich-Alexander Universität Erlangen-Nürnberg genutzt. Ausgehend von den Erfahrungen des ProPE-Projektes, wurde für HPC.NRW entschieden, das Ticketsystem als eigenständiges Ticketsystem für den 3rd-Level-Support zu nutzen. Dies bedeutet, dass HPC-Nutzende der einzelnen Standorte weiterhin ihren lokalen Support in Anspruch nehmen, sodass einfache Support-Anfragen direkt am jeweiligen Standort gefiltert und bearbeitet werden. Erst, wenn weder 1st- noch 2nd-Level-Support an einem Standort ein Problem lösen können oder Rückfragen an andere Kollegen in dem Arbeitsbereich erwünscht sind, erstellt ein Supportmitglied des jeweiligen Standortes ein eigenes Ticket im GA-Ticketsystem. Hierfür wurde innerhalb des Ticketsystems eine feingliedrige Queue-Struktur geschaffen, nach welcher die eintreffenden Tickets einsortiert werden können, sodass Anfragen zielgerichtet an andere Experten des Kompetenznetzwerks gestellt werden. Um zu gewährleisten, dass eingehende Tickets zeitnah bearbeitet und in den Queues die richtigen Kontakte innerhalb des Kompetenznetzwerks erreicht werden, wurde ein Partner-on-Duty-System eingerichtet, bei dem Monat für Monat wechselnde HPC.NRW-Mitarbeitende die eingehenden Tickets beobachten und gegebenenfalls unterstützend eingreifen, falls ein Ticket zu lange auf eine Antwort wartet. Auch wurden die Erfahrungen aus dem ProPE-Projekt in einen internen Leitfaden für die Ticketbearbeitung eingearbeitet, sodass neue Mitarbeitende sich bei der Bearbeitung von Tickets daran orientieren können. Wichtig ist, dass der Service für alle verfügbar und kostenlos ist. Für HPC-Nutzende in NRW ohne eigenen Support, wie z.B. die Fachhochschulen, wurden zwei Wege für Support-Anfragen eingerichtet: Wenn Nutzende bereits an einem der HPC.NRW-Standorte die dortige Infrastruktur verwenden, kann und soll die dort verfügbare Support-Infrastruktur in Anspruch genommen werden. Wenn Nutzende bisher noch keines der HPC-Systeme der HPC.NRW-Partner nutzen, können sie sich an die allgemeine Support E-Mail-Adresse helpdesk@hpc.nrw wenden, welche in das OTRSTicketsystem weitergeleitet wird. In diesem Fall agiert das eingerichtete Ticketsystem als 1st-Level-Supportstruktur. Das Anliegen wird von der HPC.NRW-Geschäftsstelle evaluiert und an eine passende Einrichtung in NRW weitergeleitet. Auch ohne konkrete Anfragen von HPC-Nutzenden, wird das OTRS-Ticketsystem darüber hinaus gerne von HPC.NRW-Mitarbeitenden selbst genutzt. So wurde schon mehrfach auf die Expertise der anderen Standorten zurückgegriffen, um beispielsweise zu erfahren, wie dort ein bestimmtes Problem gelöst wird oder wie deren Erfahrungen zu einem bestimmten Thema sind, um den Nutzenden auch standortübergreifend noch schneller helfen können.

Ebenfalls von zentraler Bedeutung für den Support ist die HPC.NRW-Webseite. Hier werden neben allgemeinen Informationen zum Thema HPC auch die Kontaktadressen zu den lokalen Support-Teams aller zu HPC.NRW zugehörigen Standorte aufgeführt.

Innerhalb des ProPE-Projekts wurde das HPC-Wiki als HPC-Dokumentationsplattform aufgebaut, welches eine umfassende Plattform für HPC-Dokumentation in Deutschland und potentiell darüber hinaus bieten soll. Im Rahmen von HPC.NRW wurde entschieden, das Vorhaben aufzunehmen und weiterzuführen, um Nutzenden generell einen niederschweligen Zugang zu HPC-Themen

zu ermöglichen. Initiale Anstrengungen in diesem Bereich konzentrierten sich zunächst darauf, die Dokumentation im Bereich HPC-Admin auszubauen. Hier wurden mehrere Best-Practice-Guides für die Konfiguration und den Betrieb von HPC-Systemsoftware erarbeitet und dem Wiki hinzugefügt. Weiterführend wurden auch einige Einträge in den Bereichen HPC-User und HPC-Developer generiert, einen ganz wesentlichen Service bieten allerdings die verschiedenen HPC-Tutorials, die im Rahmen von HPC.NRW entstanden sind, um Nutzenden unabhängig von Service-Zeiten oder Schulungsangeboten jederzeit Informationsmöglichkeiten zu liefern.

Ein weiter Service, der im Rahmen von HPC.NRW für die Nutzenden erbracht wird, ist die Bereitstellung eines breiten Schulungsangebots. Dieses kann auf dem HPC-Kalender der Gauß-Allianz eingesehen werden, wobei hier auch weiterführende Schulungen außerhalb von HPC.NRW aufgeführt werden.

Zusätzlich zu normalen Beratungsleistungen bietet HPC.NRW eine spezielle Intensivberatung an. Die Anfragen werden, äquivalent zu normalen Support-Anfragen, im OTRS Ticket-System erfasst, der Service geht allerdings sehr viel weiter. Kommt eine konkrete Beratungsanfrage über das HPC.NRW-Helpdesk, wird der zuständige Bereich ermittelt. Zur Unterstützung bei der Zuordnung ist jeder Kompetenzbereich mit Keywords versehen. Für jeden Bereich sind Standorte als Koordinatoren festgelegt, welche dann die Aufgabe haben, eine bedarfsorientierte Arbeitsgruppe zu bilden. Diese Arbeitsgruppe wird abhängig von den individuellen Kompetenzen aus den Mitgliedern der HPC.NRW Standorte gebildet und bearbeitet dann die Anfrage des Forschungsvorhabens. Ein erstes Beispiel für eine gestartete Intensivberatung unter Nutzung dieser erfolgten Beratungscluster ist Flye. Auch die Heranführung an die Nutzung von HPC-Kapazitäten der nächsthöheren Ebene zur Deckung von notwendigen Ressourcen-Anforderungen ein Aufgabenbereich innerhalb dieser Intensivberatung.

6 Identity Management

Die Aspekte eines föderierten Identity Managements werden in einem separaten Dokument behandelt.