

NAVODILA ZA DELOVANJE IN UPORABO AŽMANOVEGA RAČUNSKEGA CENTRA

1. Splošno

S temi navodili se uredi delovanje in način uporabe Ažmanovega računskega centra (ARC).

Navodila zavezujejo vse posameznike oz. odseke, ki uporabljajo ARC. Odsek pristopi h koriščenju ARC s sprejemom določil tega pravilnika, kar vodja odseka potrdi s podpisom. Podpisni list je priloga tem navodilom. Navodila se objavijo na spletni strani Kemijskega inštituta (KI). Administrator ARC poskrbi, da so z navodili seznanjeni vsi uporabniki, še posebej novi uporabniki.

Za sprejem in spreminjanje teh navodil je pristojen koordinacijski odbor ARC, ki vodi delovanje centra. Koordinacijski odbor je sklepčen in veljavno odloča, kadar je na sestanku navzoča večina vseh članov. Koordinacijski odbor praviloma sprejema odločitve soglasno. Kadar ni mogoče doseči soglasja, sprejema odločitve z večino glasov navzočih članov. Koordinacijski odbor se lahko sestaja in sprejema odločitve tudi dopisno ali z drugimi sredstvi (prek elektronske pošte).

2. Oprema

V ARC je vključena naslednja multiračunalniška strojna oprema:

Ime čakalne vrste	Število vozlišč	Model procesorja	Število jeder na vozlišče	Skupno število jeder	Količina pomnilnika	Disk	Leto nakupa	drugo
I01.q	20	2x Intel Xeon E5-2650v2 @ 2.60 GHz	16	320	32GB	1TB	2014	/
I01-amd.q	6	2x AMD Opteron 6128 @ 2.00 GHz	16	96	16GB	2TB	2013	/
I03.q	20	2x Intel Xeon E5-2660 @ 2.20 GHz	16	320	64GB	1TB	2014	/
I14.q	17	4x AMD Opteron 6128 @ 2.00 GHz	32	544	32GB	2TB	2013	/
rack3.q	16	2x Intel Xeon E5-2660v3 @ 2.60 GHz	20	320	64GB	1TB	2016	/
rack3-gpu.q	4	2x INTEL Xeon Silver 4110 2.1GHz 8C/16T	32	128	32 GB	4TB	2018 2019	8 kos NVidia GTX1080Ti 8 kos NVidia RTX2080Ti
rack4.q	17	2x AMD Epyc 7401 2.00 Ghz	48	816	64 GB	500 GB SSD	2019	/
rack4-gpu.q	5	2x AMD Epyc 7401 2.00 Ghz	48	240	64 GB	500 GB SSD	2019	GPU v planu

Na računalnikih v okviru ARC je nameščena naslednja programska oprema:

- AMBER
- Blender
- CHARMM
- Cuda
- Discovery Studio
- Quantum Espresso
- Gaussian 09
- Gaussian 16
- Gnuplot
- Goldsuite
- Gnuoctave
- Gromacs
- Miniconda
- Molaris
- Molden
- NAMD
- Ocaml
- Orca
- perlMol
- python
- Q
- R
- Relion
- Scalapack
- VASP
- VMD

Dostop do programske opreme je lahko omejen z licenčnimi pravicami za posamezne programe (npr. licenca omejena na uporabnika ali raziskovalno skupino). Za navodila in informacije iz tega naslova je pristojen administrator ARC.

3. Člani koordinacijskega odbora in administratorji

Delovanje ARC vodi in nadzira koordinacijski odbor. Člani koordinacijskega odbora ARC so:

- dr. Marjana Novič (vodja ARC), marjana.novic@ki.si, 031 834 202
- dr. Jernej Stare, jernei.stare@ki.si, 031 444 023
- dr. Franci Merzel, franci.merzel@ki.si, 031 227 830
- dr. Matej Praprotnik, matej.praprotnik@ki.si, 031 338 056
- dr. Matej Huš, matej.hus@ki.si, 040 776 935

Osebe, ki imajo administratorska pooblastila, so:

- Aleš Petan (vodja administratorjev), ales.petan@ki.si, 041 634 667
- Enej Bačić (administrator, študent), enej.bacic@ki.si, 031 551 748
- Boris Virc (administrator, zunanji sodelavec), boris.virc@add.si, 041 203 361

Priporočeno je, da se uporabniki v zadevah, ki se tičejo uporabe ARC, najprej obrnejo na izkušene kolege, preden kontaktirajo administratorja. Večina nevšečnosti je rešljivih brez administratorjevih posegov in se jih da urediti hitreje ob pomoči izkušenega raziskovalca. Priporočilo še zlasti velja za zadeve, ki so povezane s specifično posameznih programov ter z ustreznimi strokovnimi znanji (teoretične osnove, parametrizacija simulacij ipd.) – v teh primerih je najbolje kontaktirati raziskovalce KI z ustreznega področja ali člane koordinacijskega odbora ARC.

Člani koordinacijskega odbora so pristojni za vprašanja, ki presegajo raven administrativnih posegov (npr. odobritev večje količine računskega časa, nakup oz. zahtevnejša namestitvev programske opreme, večji vzdrževalni posegi, sodelovanje v zunanjih povezavah, nadaljnji razvoj in širjenje ARC ipd.).

4. Uporabniki

Uporabnik je oseba (raziskovalec, študent, praktikant), ki koristi ARC pri raziskovalnem delu. Uporabnik je dolžan koristiti ARC izključno za namen raziskav, pri čemer mora upoštevati vsa administratorjeva navodila.

Pravico do uporabe ARC imajo po padajoči prioriteti:

- a) vsi zaposleni sodelavci Teoretičnega odseka ter njegovi zunanji sodelavci (gostujoči raziskovalci, študentje);
- b) drugi sodelavci KI;
- c) zunanji uporabniki z izjemo tistih iz alinee a), ki niso zaposleni na KI in ki želijo v okviru sodelovanja s KI uporabljati računske metode.

Administrator ARC ustvari uporabniški račun in omogoči dostop v primeru a) na zahtevo vodje ustreznega laboratorija v okviru Teoretičnega odseka, v primeru b) na zahtevo vodje odseka, iz katerega prihaja sodelavec, v primeru c) pa na zahtevo vodje odseka, s katerim sodeluje zunanji uporabnik.

Administrator ARC skrbi za avtomatizirano evidenco uporabnikov, pri čemer se za vsakega uporabnika navede laboratorij ali odsek inštituta, s katerega prihaja oz. v primeru zunanjega uporabnika laboratorij ali odsek, s katerim sodeluje. Za vsakega uporabnika se beleži računski čas (jedrne ure, »core-hours«), ki ga je porabil pri računanju. Pregled porabljenega računskega časa se opravlja na tri mesece (januar-marec, april-junij, julij-september, oktober-december) in je osnova za obračun stroškov uporabe ARC (točka 6).

Zaposlenim sodelavcem Teoretičnega odseka je status uporabnika vezan na njihovo delovno razmerje pri KI. Zaposlenim v drugih odsekih ter zunanjim sodelavcem status uporabnika preneha, ko obvestijo koordinacijski odbor ali administratorja ARC, da so zaključili z računskim delom, če tega ne storijo, pa v enem letu po prenehanju aktivne uporabe ARC. Administrator pred izbrisom uporabniškega računa in podatkov pravočasno obvesti uporabnika, da lahko uporabnik naredi kopijo svojih podatkov.

Evidenca uporabnika in njegovega porabljenega računskega časa se hrani še najmanj tri leta po izbrisu njegovega uporabniškega računa.

5. Varnost

Vsak uporabnik je odgovoren za varnost svojih osebnih gesel (kompleksnost gesla, občasna menjava gesla), ki mu omogočajo dostop na računalnike v okviru ARC, ter za varnost svojih podatkov in za izdelavo varnostnih kopij.

Za varnost administratorskih gesel («root passwords») je pristojen administrator ARC. Kadar je oseb s pooblastili administratorja več, pristojnega administratorja za gesla določi koordinacijski odbor. Pravico uporabe administratorskih gesel imajo osebe s pooblastili administratorja ter vodja ARC. Vsakokratna administratorska gesla računalnikov v okviru ARC se hranijo v pisni obliki v zapečateni ovojnici v prostoru, ki je ustrezno zaščiten pred nepooblaščenim dostopom.

6. Obračunavanje in plačevanje stroškov uporabe

Uporabniki ARC oz. ustrezni odseki in laboratoriji krijejo sorazmerni del stroškov uporabe računskih kapacitet glede na porabljen računski čas. Stroški uporabe se obračunajo tako, da se iz plačil najmanj pokrijejo stroški vzdrževanja, hkrati pa se ne ustvari večjega presežka. Morebitni presežek se lahko porabi le za materialne stroške, nakup nove opreme v ARC ali za izboljšave pri delovanju in vzdrževanju.

Na podlagi predvidenih stroškov vzdrževanja ARC (stroški dela in storitev ter materialni stroški) koordinacijski odbor do konca leta določi višino sredstev, ki naj se v naslednjem letu zberejo za ta namen. Znesek, ki ga določi koordinacijski odbor, se zbere v štirih enakih (četrletnih) obrokih. Na podlagi trimesečne evidence o koriščenju ARC (točka 4) se na koncu vsakega četrletja ugotovi, kolikšen delež procesorskega časa je bilo porabljenega s strani uporabnikov po posameznih laboratorijih oziroma odsekih. Za vsak laboratorij oziroma odsek se določi višino četrletnega plačila tako, da se višina celotnega četrletnega obroka pomnoži z ustreznim deležem porabljenega računskega časa. Laboratorij oziroma odsek plača izračunani znesek na stroškovno mesto, ki ga za namen plačevanja stroškov uporabe ARC vodi računovodstvo KI. Tako zbrana sredstva se namenjajo za plačevanje stroškov vzdrževanja ARC ter za materialne stroške.

Kadar sredstev na stroškovnem mestu ni dovolj, razliko do celotnega zneska za vzdrževanje in materialne stroške krije Teoretični odsek. Morebitni presežek se prenese v naslednje četrletje ali porabi za materialne stroške, nakup nove opreme v ARC ali za izboljšave pri delovanju in vzdrževanju. O porabi presežnih sredstev odloči koordinacijski odbor.

Vodje sodelujočih odsekov oz. laboratorijev ali od njih pooblašcene osebe imajo pravico, da v sodelovanju z administratorjem sproti preverjajo trenutno porabo in delež procesorskega časa v tekočem in prejšnjih četrletjih.

Za zadnje trimesečje v letu 2019 (oktober-december) je za vzdrževanje ARC določen znesek 5.000,00 EUR. Obračun uporabe po posameznih odsekih oz. laboratorijih bo po določilih te točke napravljen v začetku januarja 2020.

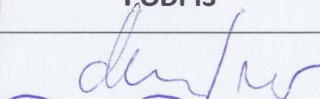
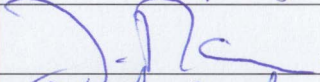
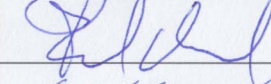
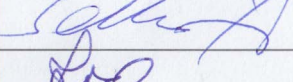
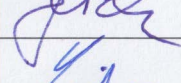
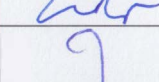
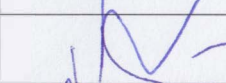
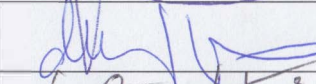
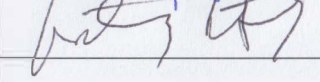
Odsekom oz. laboratorijem, ki intenzivno uporabljajo ARC, lahko koordinacijski odbor prizna popust pri stroških uporabe, pri čemer upošteva njihove morebitne prispevke za nabavo opreme, ki je vključena v ARC.

Kadar ima uporabnik posebne zahteve, zaradi katerih pride do posegov, ki znatno presegajo okvir rednega vzdrževanja (npr. zahtevna namestitvev programske opreme), se za ustrezni laboratorij ali odsek stroški takšnih posegov prištejejo strošku, izračunanemu iz porabljenega procesorskega časa.

Navedeni način kritja stroškov bo v veljavi do uvedbe celostnega financiranja delovanja ARC (npr. vključitev centra v infrastrukturni program KI).

Priloga k Navodilom za delovanje in uporabo ARC: podpisni list za pristop h koriščenju ARC.

Podpisani vodje odsekov smo seznanjeni z Navodili za delovanje in uporabo ARC in jih v celoti sprejemamo. Prilagamo tudi številko delovnega naloga za plačilo stroškov uporabe ARC po točki 6 Navodil.

ODSEK ALI LABORATORIJ	VODJA	DELOVNI NALOG	DATUM PRISTOPA	PODPIS
D01/L03	MARJANA NOVIČ	34 017	7.10.2019	
D01/L01	J. DANČI	14012	7.10.2019	
D01/L14	F. MEZEL	141705	7.10.2019	
D16-CVTA	SARNO ANDREJŠEK	DN 16601	07.10.2019	
D12	ROMAN ŠERAC	124176	7.10.2019	
D13	BLAŽ LIKOZAR	134152	7.10.2019	
D09	N. ZABUKOVEC LOGAR	94021	7.10.2019	
D10	MIRAN GABERJČEK	104393	9.10.2019	
D11	MARJETA PODOSNUK	114391	10.10.2019	
D01/L17	MATEJ PRAPROTHNIK	174002	23.10.2019	