

VERFAHRENSORDNUNG EINES NHR-WEITEN VERGABEVERFAHRENS

11. MÄRZ 2024 (ÄNDERUNG NACH NUTZUNGSAUSSCHUSS-SITZUNG)

INHALTSVERZEICHNIS

1. Einleitung	2
2. Strukturelemente des Vergabeverfahrens zur Nutzung der NHR-Ressourcen	3
3. Kriterien zur Nutzung der NHR-Ressourcen.....	4
4. Vergabeverfahren	5
4.1 Ablauf des Vergabeverfahrens	5
4.2 Vereinfachte Verfahren	7
4.3 Anforderungen an technische Prüfung, wissenschaftliche Begutachtung und Vergabeentscheidung	8
Anhang	
A. Projekt- und Begutachtungsdatenbanken, Antragsportal.....	11
B. Notwendige Antragsdaten zur Vergabe von NHR-Ressourcen.....	12
C. Vorlage für „Detaillierte Projektbeschreibung“	13
D. Standardfragen/-formular für die wissenschaftliche Begutachtung	13
E. Anerkannte Bewilligungs-/Begutachtungsverfahren (Whitelist)	14

1. EINLEITUNG

Die Zentren des Vereins für Nationales Hochleistungsrechnen (NHR) stellen gemeinsam deutschlandweit Ebene-2-Hochleistungsrechenressourcen für Wissenschaftler*innen der deutschen Hochschulen und Universitäten zur wissenschaftlichen Nutzung zur Verfügung.

Die gemeinsame Verfahrensordnung zur Vergabe der NHR-Ressourcen schafft die Grundlage für ein faires, wissenschaftsgeleitetes nationales Vergabeverfahren. Sie wurde vom NHR-Nutzungsausschuss im Einvernehmen mit dem NHR-Betreiberausschuss verabschiedet. Wissenschaftler*innen erhalten somit schneller und flexibler Zugang zu den Hochleistungsrechnerressourcen. Gleichzeitig wird eine effiziente Nutzung der Ressourcen erzielt. Eine einfache Migration von Projekten an andere Zentren und eine effiziente Auslastung wird, trotz Anpassungsmöglichkeiten an die lokalen Bedingungen der Zentren, durch die Festlegung gemeinsamer Standards ermöglicht. Durch die Anerkennung gleichwertiger Begutachtungsverfahren wird der Begutachtungsaufwand reduziert und das Verfahren auch für die Antragstellenden erleichtert und verkürzt.

Mit der Verständigung auf notwendige Antragsdaten und Begutachtungsformulare ist die Voraussetzung zur Einrichtung eines zentralen Projektportales (zur Beantragung, Begutachtung und Berichterstellung) mit zentraler Datenbank geschaffen – die technische Realisierung liegt in der Verantwortung des Betreiberausschusses.

Die vorliegende Vergabeordnung beschreibt zunächst die Strukturelemente des Vergabeverfahrens, anschließend die Kriterien zur Nutzung und im Folgenden das Vergabeverfahren mit den einzelnen Schritten sowie die Anforderungen an technische Prüfung, wissenschaftliche Begutachtung und Vergabeentscheidung.

In der Anlage befinden sich die Anforderungen an das Projektportal bzw. -datenbank mit Rollenzuweisung, notwendigen Antragsdaten, einer Vorlage für einen detaillierten Projektantrag sowie Standardfragen zur Begutachtung (Begutachtungsformular) und eine Auflistung anerkannter Bewilligungs-/Begutachtungsverfahren.

Mit der hier vorliegenden Vergabeordnung wird die Ressourcenvergabe für Rechenzeitprojekte geregelt. In diesen Projekten können große Datenmengen generiert werden, die gegebenenfalls auch über die Projektlaufzeit hinaus zur Nachnutzung oder für einen öffentlichen Zugriff gespeichert werden müssen. Es wird empfohlen, dass der NHR-Verbund, gegebenenfalls in Absprache mit „Gauss Centre for Supercomputing, GCS“, ein zentrumsseitiges Konzept zum Umgang mit solchen Datenprojekten entwickelt und diese Vergabeordnung um die Behandlung solcher Projekte im Rahmen der Ressourcenvergabe erweitert wird.

Diese Verfahrensordnung beruht auf den *„Kriterien für das Antrags- und Auswahlverfahren hinsichtlich der Anträge auf Nutzung der NHR-Zentren“*, *Empfehlungen des Strategiausschusses für NHR der GWK vom 20. August 2020* und wurde am 11. April 2022 vom Nutzungsausschuss des NHR verabschiedet. Entsprechend den Empfehlungen des Strategiausschusses wird die Verfahrensordnung bei Bedarf vom Nutzungsausschuss in Abstimmung mit dem Betreiber- und dem Strategiausschuss angepasst.

2. STRUKTURELEMENTE DES VERGABEVERFAHRENS ZUR NUTZUNG DER NHR-RESSOURCEN

- (1) **NHR-Verbund und -Zentren:** Die von der GWK in die NHR-Förderung aufgenommenen Zentren bilden den NHR-Verbund. Die NHR-Zentren stellen die NHR-Ressourcen zur Verfügung.
- (2) **Antragstellende/Projektverantwortliche (PI):** Die Ressourcenvergabe erfolgt projektbezogen auf Basis eines Antrags. Antragstellende können mehrere Projekte an unterschiedlichen Zentren zeitgleich beantragen und bearbeiten, sofern sich diese inhaltlich unterscheiden. Nach Ressourcenzusage sind die Antragsteller*innen die Projektverantwortlichen.
- (3) **Nutzungsausschuss (zentrales Entscheidungsgremium):** Der NHR-Verbund richtet „... einen Nutzungsausschuss zur Sicherstellung eines fairen, wissenschaftsgeleiteten und nationalen Vergabeverfahrens für Rechenzeiten“ ein (§ 12 (2) AV-FGH). Nach der Satzung des Vereins für Nationales Hochleistungsrechnen – NHR-Verein e.V. §18 (2) entsendet jedes NHR-Zentrum eine Vertretung in den Nutzungsausschuss, welche Mitglied in dem lokalen NHR-Rechenzeitvergabegremium des Zentrums ist. Im Nutzungsausschuss sollten alle NHR-relevanten Anwendungsdisziplinen abgedeckt sein. Der Nutzungsausschuss regelt im Einvernehmen mit dem Betreiberausschuss die Vergabe von NHR-Ressourcen in einer Verfahrensordnung und überwacht deren Durchführung nach einheitlichen Standards.¹
- (4) **Lokale Vergabeausschüsse (lokale Entscheidungsgremien):** An den NHR-Zentren sind lokale Vergabeausschüsse für die lokale NHR-Ressourcenvergabe, unter Maßgabe lokaler Vergaberichtlinien, verantwortlich. Die lokalen Vergabeausschüsse entsenden je ein Mitglied (möglichst den Vorsitzenden) in den Nutzungsausschuss. Die lokalen Vergaberichtlinien müssen der NHR-Verfahrensordnung entsprechen und die enthaltenen Kriterien gewährleisten. Darüber hinaus sind die lokalen Verfahren nicht durch diese NHR-Verfahrensordnung geregelt, z.B. Häufigkeit der Sitzungen, Bestimmung von Obpersonen.
- (5) **Technische Prüfung:** Die technische Prüfung wird unter Verantwortung des Zentrums vorgenommen, in dem das Projekt durchgeführt werden soll. Anforderungen an die Prüfung sind in Abschnitt 4.3 Punkt (1) dargestellt.
- (6) **Wissenschaftliches Gutachten:** Die wissenschaftlichen Gutachten werden von den lokalen Vergabeausschüssen angefordert. Gutachter*innen müssen fachlich geeignet und mindestens promoviert sein. Anforderungen an die wissenschaftliche Begutachtung sind in Abschnitt 4.3 Punkt (2) dargestellt, Standardfragen im Anhang C.
- (7) **Geschäftsstelle:** Die Geschäftsstelle (GS) koordiniert die zentralen Prozesse und unterstützt den Nutzungsausschuss insbesondere bei der Durchführung des Vergabeprozesses sowie der Berichterstattung über die Ressourcennutzung und ist Ansprechstelle für Antragstellende im Falle von Unklarheiten oder Antragsproblemen.
- (8) **Zentrale Antrags- und Berichtsdatenbank/Antragsportal:** ² Der NHR-Verbund betreibt ein zentrales Portal, über das alle Anträge zur Nutzung von NHR-Ressourcen gestellt werden können und das mit einer zentralen Datenbank zur Erfassung aller relevanten Antrags-, Projekt und Begutachtungsdaten verbunden ist. Die Zugriffsberechtigungen auf die gespeicherten Daten sind in Anhang A beschrieben.
- (9) **Begutachtungsdatenbank/„Gutachterpool“:** Der NHR-Verbund betreibt eine Datenbank, in der dienstliche Kontaktdaten potentieller Gutachter*innen mit Verweis auf ihre fachliche Ausrichtung, auf begutachtete Projekte sowie den Zeitpunkt der

¹ Entnommen aus: Kriterien für das Antrags- und Auswahlverfahren hinsichtlich der Anträge auf Nutzung der NHR-Zentren. Empfehlungen des NHR-Strategieausschusses vom 20.08.2020

² Unter Berücksichtigung der Datenschutzgrundverordnung (DSGVO)

erstellten Gutachten gespeichert werden. Zugriff auf die Datenbank haben die Entscheidungsgremien (s. auch Anhang A).

- (10) **Projektkategorien:** Im NHR-Verbund wird zwischen **Test-/Entwicklungsprojekten**, **Normalprojekten** und **Großprojekten** (Test, Regular, Large Scale Projects) unterschieden. Die Grenzen zwischen den Projektkategorien, insbesondere zwischen Normal- und Großprojekten, werden separat für jedes Zentrum vom Betreiber Ausschuss in Absprache mit dem Nutzungsausschuss festgelegt. Die Grenzen werden regelmäßig überprüft und an technologische Entwicklungen der lokalen Infrastruktur angepasst. Für die jeweilige Projektkategorie sind mit diesem Dokument verbindliche Mindestanforderungen bzgl. Antrag, Begutachtung und Bewertung für Normal- und Großprojekte festgelegt. Test-/Entwicklungsprojekte dienen der Vorbereitung von Projekten und sind bzgl. Ressourcen und Projektdauer stark begrenzt. Die Zentren können Rechenzeit an Test-/Entwicklungsprojekte vergeben. Der Strategieausschuss hat hierzu empfohlen, dass als Ausnahme bis zu 5 % der Rechenkapazität zur Vergabe durch das jeweilige NHR-Zentrum für die Vorbereitung von Nutzungsanträgen (Testprojekte) und für Aus- und Weiterbildungszwecke zur Verfügung gestellt werden können.
- (11) **Projektstart, Projektlaufzeiten**
- a) **Taktung:** Getaktete Projekte im NHR-Verbund starten vierteljährlich. Damit einher gehen vier Antragsfristen pro Jahr, die maximal drei Monate vor Projektstart liegen. Die Taktung erfolgt im NHR-Verbund synchronisiert.
 - b) **Großprojekte** im NHR-Verbund starten ausschließlich getaktet, also viermal im Jahr.
 - c) **Normalprojekte** können, je nach lokalem Verfahren, getaktet oder kontinuierlich starten. Wichtig ist, dass zwischen dem Zeitpunkt der Antragseinreichung/-annahme (mit allen notwendigen Unterlagen) und der Ressourcenvergabeentscheidung in der Regel nicht mehr als drei Monate liegen dürfen.
 - d) **Projektlaufzeit:** Der Bewilligungszeitraum für alle Projekte beträgt ein Jahr. Fortsetzungsanträge (s. auch 4.2 (2)) sind möglich. Eine Bewilligung mehrjähriger Projekte (Bedingungen s. 4.2 (3)), z.B. im Rahmen drittmittelgeförderter Projekte, wird zunächst von einigen Zentren getestet.

3. KRITERIEN ZUR NUTZUNG DER NHR-RESSOURCEN

- (1) **Förderwürdigkeit:** Entsprechend den Empfehlungen des Strategieausschusses kann die Nutzung der NHR-Ressourcen ausschließlich für Projekte bewilligt werden, die folgende Kriterien erfüllen:
- a. Die Förderwürdigkeit der wissenschaftlichen Fragestellung ist ausgewiesen durch
 - i. die wissenschaftliche Qualität des Vorhabens,
 - ii. die Ziele des Vorhabens und die Plausibilität des vorgesehenen Arbeitsprogramms, welches auch High-Risk-Forschung enthalten kann,
 - iii. die fachliche Qualifikation der Antragstellenden und deren Erfahrung zur fachlichen HPC-Nutzung. Die Inanspruchnahme ausführlicher Beratung kann bereits als HPC-Erfahrung gewertet werden.
 - b. Der Ressourcenbedarf erfordert einen Hochleistungsrechner der Ebene 2, d.h.
 - i. die Projektgröße ist angemessen,
 - ii. die beantragten Ressourcen sind plausibel (Hardware und Software),
 - iii. die HPC-Nutzung trägt zur Beantwortung der wissenschaftlichen Fragestellung bei.
 - c. Das Vorhaben ist methodisch und technisch für die effiziente Bearbeitung auf einem NHR-System geeignet, dies gilt insbesondere für
 - i. die verwendete Software,
 - ii. die verwendeten Algorithmen und Methoden.

Diese Voraussetzungen sind im Antrag nachzuweisen und werden in dem wissenschaftsgeleiteten Vergabeverfahren geprüft (s. auch Abschnitt 4.3 Punkt (2)). Bei der Verwendung von Programmen und Simulationsverfahren, deren Effizienz dokumentiert ist bzw. die im NHR-Verbund unterstützt werden, muss lediglich nachgewiesen werden, dass bei der geplanten Anwendung der Komplexitätsgrad, bei der das Programm bekannterweise skaliert, nicht überschritten wird.

- (2) **Ressourcenverfügbarkeit und Passfähigkeit des Projektes zum gewählten Rechner:** Die Passfähigkeit zu dem gewählten Rechner muss gewährleistet sein und die angeforderten Kapazitäten müssen auf dem Rechner zur Verfügung stehen. Falls das nicht zutrifft, wird gegebenenfalls den Antragstellenden durch den NHR-Verbund ein anderes NHR-Zentrum vorgeschlagen oder es kann durch den zuständigen Vergabeausschuss eine gekürzte Ressourcenmenge bewilligt werden.
- (3) **Antragsberechtigung:** Antragsberechtigt zur Nutzung der Ressourcen des NHR-Verbundes sind promovierte Wissenschaftler*innen, die einer staatlichen oder staatlich anerkannten, institutionell akkreditierten deutschen Hochschule angehören.

4 . VERGABEVERFAHREN

4.1 ABLAUF DES VERGABEVERFAHRENS

Im Hinblick auf die Nutzung von NHR-Ressourcen lässt sich der Verlauf eines Projektes in die Schritte (1) Antragsvorbereitung, (2) Antragseinreichung, (3) technische Prüfung, (4) wissenschaftliche Begutachtung, (5) Vergabeentscheidung, (6) Projektdurchführung und (7) Projektbericht einteilen.

- (1) Die **Antragsvorbereitung** obliegt den Antragstellenden. Von dem NHR-Verbund werden zur Antragsvorbereitung Informationen über die Ressourcen der Zentren und die Antragsmodalitäten und Hinweise zu Beratungsangeboten veröffentlicht sowie umfassende Beratung für Antragstellende angeboten. Das Angebot umfasst u.a. Beratungen zur Auswahl der passenden Zentren und zur Ausarbeitung beziehungsweise Nachbesserung des Antrags auf NHR-Ressourcen. Zur Antragsvorbereitung ermöglichen die Zentren einen einfachen und schnellen Zugang zu Testprojekten.
- (2) Die **Antragseinreichung** erfolgt von den Antragstellenden über ein einheitliches NHR-Portal. Ein Antrag gilt als eingereicht, wenn alle Unterlagen in der letzten Version eingereicht wurden. Direkt nach Antragseinreichung wird der Antrag formal (von der GS) überprüft und gegebenenfalls - mit Hinweis auf eine Beratungsmöglichkeit - zurückgewiesen.
- (3) Die **technische Prüfung** wird durch das im Antrag ausgewählte NHR-Zentrum durchgeführt und ist unter Abschnitt 4.3 Punkt (1) beschrieben. Die technische Prüfung soll zeitnah zum Einreichungsdatum stattfinden.
- (4) Die **wissenschaftliche Begutachtung** wird von dem im Antrag ausgewähltem Zentrum, gegebenenfalls mit Unterstützung durch die GS organisiert. Details zur wissenschaftlichen Begutachtung sind im Abschnitt 4.3 Punkt (2) beschrieben.
- (5) Die **Vergabeentscheidung** für Normalprojekte wird von den lokalen Vergabeausschüssen unter Berücksichtigung der hier vorliegenden Richtlinien getroffen. Die Vergabeentscheidung von Großprojekten wird vom Nutzungsausschuss unter Berücksichtigung der Voten der lokalen Vergabeausschüsse und der hier vorliegenden Richtlinien möglichst einvernehmlich getroffen³.
- (6) Die **Projektdurchführung** obliegt den Projektverantwortlichen. Während der Projektlaufzeit werden die Projektnutzungsdaten seitens der NHR-Zentren beobachtet

³ Diese Regelung ist nach zwei Jahren vom Betreiber- und Nutzungsausschuss gemeinsam zu überprüfen.

(Monitoring) und die Verbrauchsdaten regelmäßig – mindestens monatlich - den Projektverantwortlichen kumuliert zur Verfügung gestellt.

- (7) **Projektbericht:** Jedes Projekt muss jährlich einen Projektbericht erstellen, bei dem die genutzten Ressourcen, wissenschaftliche Ergebnisse sowie ggf. Publikationen dargestellt werden und der eine populärwissenschaftliche Darstellung des Projektvorhabens und der Ergebnisse zur Veröffentlichung enthält. Im Falle einer geplanten Weiterführung des Projektes ist der Zwischenbericht Bestandteil des Folgeantrags.
- (8) **Acknowledgement:** Der Beitrag des NHR-Verbundes muss in wissenschaftlichen Publikationen geeignet gewürdigt werden.

Die Durchführung der lokalen Prozesse liegt in der Verantwortung der NHR-Zentren bzw. ihrer Ausschüsse, d.h. es können auch mehrere Schritte von einem Gremium geleistet werden (z.B. Begutachtung und Vergabe).

Zwischen Beantragung und Vergabeentscheidung sollten nicht mehr als drei Monate liegen. Für getaktete Verfahren beginnt die Frist mit dem Stichtag der Einreichungsfrist. Nachbesserungen müssen bis zum Stichtag der Einreichungsfrist wieder eingereicht werden, andernfalls wird der Antrag in den nächsten Bewilligungszeitraum eingereicht.

Für Normalprojekte läuft der gesamte Prozess lokal ab. Für Großprojekte wird von dem im Antrag gewählten Zentrum der Vergabeprozess bis zur Begutachtung organisiert und die lokalen Vergabeausschüsse geben an den Nutzungsausschuss, der über die Vergabe entscheidet, ihre Voten zu den einzelnen Großprojektanträgen spätestens eine Woche vor der Nutzungsausschusssitzung ab.

Um die Einheitlichkeit der Verfahren und die Durchlässigkeit von Anträgen innerhalb des NHR-Verbunds herzustellen, werden für die Antragseinreichung, wissenschaftliche Begutachtung und den Projektbericht vom NHR-Verbund einheitliche Vorlagen zur Verfügung gestellt, die um lokale Punkte erweitert werden können.

	Antragsvorbereitung	Antragsprüfung und Begutachtung	Ressourcenvergabe	Projektdurchführung (inkl. Bericht)
Projektverantwortliche/r (PI)	<ul style="list-style-type: none"> ggf. Beratungsangebot wahrnehmen Antrag erstellen und einreichen 			<ul style="list-style-type: none"> Projekt durchführen notwendige Berichte erstellen
NHR-Geschäftsstelle	<ul style="list-style-type: none"> Beratungsangebot zu formalen Fragen und zur Wahl des Zentrums 	<ul style="list-style-type: none"> formale Prüfung ggf. Unterstützung bei Gutachtenbeauftragung 	<ul style="list-style-type: none"> ¼-jährlich: Nutzungsausschusssitzung organisieren (Großprojekte) 	<ul style="list-style-type: none"> Projektberichte sammeln und veröffentlichen Nutzungsbericht erstellen
NHR-Zentren	<ul style="list-style-type: none"> fachliches Beratungsangebot Testaccount zur Antragsvorbereitung bereitstellen 	<ul style="list-style-type: none"> technische Prüfung wissenschaftliche Begutachtung im Auftrag des lokalen Vergabeausschusses organisieren 	<ul style="list-style-type: none"> lokale Vergabeausschusssitzungen organisieren 	<ul style="list-style-type: none"> Ressourcen zur Verfügung stellen Monitoring der Nutzung Nutzungsdaten verfügbar machen
lokale Vergabeausschüsse			<ul style="list-style-type: none"> lokales Vergabeverfahren festlegen und gewährleisten Vergabeentscheidung für normale Projekte ¼-jährlich: Vergabeempfehlung für große Projekte 	
NHR-Nutzungsausschuss			<ul style="list-style-type: none"> NHR-Verfahrensordnung zur Vergabe festlegen und Einhaltung überprüfen ¼-jährlich: Vergabeentscheidung für große Projekte 	

Abbildung 1: Aufgabenverteilung zum Prozess der Ressourcenvergabe innerhalb des NHR-Verbundes

4.2 VEREINFACHTE VERFAHREN

- (1) **Kurzfristige Erhöhung der Projektressourcen:** Eine kurzfristige Aufstockung ist prinzipiell ohne Neuantrag bis zu einem Viertel der bewilligten Ressourcen realisierbar, dies schließt auch eine mögliche Verlängerung um drei Monate ein. Die Entscheidung darüber liegt bei den lokalen Vergabegremien.
- (2) **Fortsetzungsanträge**⁴ sollen nicht die vollständige wissenschaftliche Begründung des Erstantrags haben, sondern den gesamten Projektverlauf wiedergeben und die

⁴ Im Idealfall sollen Folgeanträge von denselben Gutachter*innen begutachtet werden wie der Erstantrag. Ferner sollten die Antragstellenden beim Erstantrag zustimmen, dass Gutachter*innen Zugriff auf alle Daten des Projekts bekommen. Begutachtende Personen müssen in geeigneter Form Zugriff auf die vorausgegangenen Anträge haben.

Arbeitsplanung mit den benötigten Ressourcen für den Zeitraum des Fortsetzungsprojektes darstellen. Bestandteil des Fortsetzungsantrags sind die vorausgegangenen Anträge und Bescheide, die von den Antragstellenden für die Gutachter*innen und das Entscheidungsgremium freigegeben werden müssen. Der Ressourcenbedarf kann bei Fortsetzungsanträgen dem aktuellen Projektverlauf angepasst werden. Zur Entscheidung über Fortsetzungsprojekte ist nicht die allgemeine wissenschaftliche Förderwürdigkeit Gegenstand der Bewertung, sondern der Projektverlauf und das geplante Vorhaben.

Ein erneuter Nachweis der Skalierbarkeit ist im Rahmen von Fortsetzungsanträgen nicht erforderlich, sofern sich die Komplexität des Projekts und die anzuwendenden numerischen Verfahren nicht geändert haben.

- (3) **Mehrjährige Projekte**, z.B. für Drittmittelprojekte, können unter folgenden Voraussetzungen ermöglicht werden:
 - a. Ressourcen werden nur wie beantragt bewilligt, ohne Änderung während der Laufzeit,
 - b. eine Änderung begutachteter bzw. geprüfter Aspekte des Projektes ist ausgeschlossen,
 - c. Zwischenberichte müssen erstellt werden,
 - d. der lokale Vergabeausschuss bewertet jährlich das Projekt und fordert gegebenenfalls eine wissenschaftliche Begutachtung ein.
- (4) **Projekttransfer** innerhalb des **NHR**-Verbunds: Sollte ein Projekt begründet an ein anderes Zentrum wechseln wollen, so erkennen die Zentren untereinander die bereits eingeholten Gutachten und getroffenen Entscheidungen, unter Berücksichtigung der technischen Realisierbarkeit im Zielzentrum, an. Der Projektantrag muss nicht geändert eingereicht werden. Der Vergabeausschuss des aufnehmenden Zentrums entscheidet final über die Vergabe.
- (5) **Projekttransfer von Tier 1**: Für Projekte, die vom Gauss Centre for Supercomputing (GCS) ausschließlich aufgrund der beantragten/benötigten Projektressourcen abgelehnt wurden, gelten die gleichen Regeln wie beim Transfer innerhalb von NHR.⁵
- (6) **Normalprojekte**, die bereits in einem anerkannten Verfahren⁶ positiv bewertet wurden: In dem Fall ist nur ein wissenschaftliches Gutachten notwendig um insb. die inhaltliche Passfähigkeit des vorgelagerten Bewilligungsverfahren und die Angemessenheit der beantragten Rechenressourcen zu beurteilen. Darüber hinaus muss die Passfähigkeit des Projektes bezgl. erforderlicher Hard- und Software zu dem Zentrum sichergestellt werden.
Bei Großprojekten kann die Whitelist nicht angewendet werden.

4.3 ANFORDERUNGEN AN TECHNISCHE PRÜFUNG, WISSENSCHAFTLICHE BEGUTACHTUNG UND VERGABEENTSCHEIDUNG

- (1) **Anforderungen an die technische Prüfung.** Die technische Prüfung wird durch das jeweilige NHR-Zentrum durchgeführt. Im Rahmen der technischen Prüfung ist unter anderem festzustellen:
 - a. Passfähigkeit zum System,
 - b. technische Fehlerfreiheit des Antrags (z.B. korrekte Berechnung des Gesamtressourcenbedarfs auf Basis der Arbeitspakete),
 - c. ob der Skalierungsnachweis benötigt wird und vorhanden ist,
 - d. ob die Skalierungsrechnungen auf einem System durchgeführt wurden, welches vergleichbar ist mit dem System des Zentrums, auf dem das Projekt durchgeführt werden soll,

⁵ Details müssen noch mit GCS geklärt werden.

⁶ s. Whitelist

- e. ob die Komplexität des verwendeten Testproblems vergleichbar ist mit dem beantragten Projekt.

Der technische Prüfbericht sollte zeitnah zur Antragstellung erstellt werden um zum einen im Falle technischer Mängel des Antrags die Antragstellenden im Hinblick auf eine Nachbesserung des Antrages beraten zu können, zum anderen soll der technische Prüfbericht der wissenschaftlich begutachtenden Person zur Verfügung gestellt werden.

(2) Anforderungen an die wissenschaftliche Begutachtung

- a. **Kriterien:** Es sind folgende Kriterien zu bewerten:
- Die unter Abschnitt 3 Punkt (1) aufgelisteten Kriterien.
 - Ob die Komplexität des verwendeten Testproblems vergleichbar ist mit dem beantragten Projekt.
 - Ob die nachgewiesene Skalierbarkeit für das beantragte Projekt hinreichend ist. Insbesondere ist zu prüfen, ob ein hinreichender Parallelisierungsgrad erreicht werden konnte. Bei der Prüfung soll der Stand der Technik der jeweiligen Disziplin bzw. des jeweiligen Anwendungsbereiches Berücksichtigung finden.
- b. **Anzahl der wissenschaftlichen Gutachten:** In der Regel sollten für Normalprojekte zwei und für Großprojekte mindestens zwei Gutachten eingeholt werden.
- c. **Bei bereits begutachteten Projekten,** sollen die vorausgegangenen wissenschaftlichen Begutachtungen berücksichtigt werden. Die allgemeine Wissenschaftliche Qualität muss bei anerkannten Verfahren nicht erneut bewertet werden ⁷ - das wissenschaftliche Gutachten kann auch bei Vorliegen einer vorausgegangen positiven Begutachtung eine Stellungnahme zur allgemeinen Wissenschaftlichkeit enthalten. Der im Antrag beschriebene Ressourcenbedarf sowie die methodische und technische Umsetzung auf einem Hochleistungsrechner können auch im Fall vorausgegangener anderer Begutachtungen ein wesentlicher Aspekt der wissenschaftlichen Begutachtung für die NHR-Ressourcenvergabe sein.
- d. Eine Formularvorlage für die Fragen und Bewertungen zur Begutachtung ist im Anhang D.

(3) Vergabeentscheidung

- a. Die **Vergabeentscheidung** wird auf Basis der Gutachten, technischen Eignung und Ressourcenverfügbarkeit des gewählten Zentrums getroffen.
- b. **Förderabhängigkeiten:** Bei Projekten, die in einem anerkannten Verfahren (s. Anhang E, insbesondere DFG) bewilligt wurden, darf die allgemeine wissenschaftliche Förderwürdigkeit nicht abgesprochen werden. Für bereits wissenschaftlich positiv begutachtete Aspekte müssen für die Vergabe keine weiteren wissenschaftlichen Gutachten eingeholt werden. **Der Nachweis über die Bewilligung sowie eine Zusammenfassung des entsprechenden vorausgegangenen Antrags** müssen dem Antrag auf Nutzung von NHR-Ressourcen beigelegt sein. Die technische Passfähigkeit und Ressourcenverfügbarkeit sowie ggf. die Angemessenheit der beantragten Ressourcen muss für die Vergabe jedoch geprüft sein. Sollte die Verfügbarkeit der Ressourcen für die Bewilligung eines Drittmittelantrags Voraussetzung sein, dann bieten die NHR-Zentren die Klärung bezgl. technischer Passfähigkeit und Ressourcenverfügbarkeit im Vorfeld der Drittmittelantragstellung an und würden hierfür eine entsprechende Zusage, für den Fall einer positiven Begutachtung durch den Drittmittelgeber, machen.
- b. **Umgang mit Kapazitätsengpässen und Auslastung der NHR-Zentren:** Kürzungen bei der Bewilligung bzw. Ablehnungen sollten nur aus wissenschaftlichen oder

⁷ Die Angaben dazu werden standardmäßig bei Antragstellung abgefragt. Im NHR-Verbund wird eine Whitelist anerkannter Verfahren erstellt (z.B. DFG, BMBF, GCS).

technischen, möglichst nicht aus Kapazitätsgründen erfolgen. Im Falle lokaler Kapazitätsengpässe können Anträge in Absprache mit den Antragsteller*innen an andere geeignete Zentren weitergeleitet werden. Ggf. können Antragstellende auch auf die Nutzung von Tier-1-Zentren verwiesen werden. Des Weiteren sollen bei Kapazitätsengpässen Projekte den Vorrang haben, bei denen eine Förderabhängigkeit besteht oder die aus technischen Gründen nur an diesem Zentrum durchgeführt werden können. Ziel dabei ist auch eine optimale Auslastung aller Rechenressourcen im NHR-Verbund. Ein Ranking unter positiv begutachteten Projekten zur Festlegung kapazitätsbedingter Kürzungen soll nicht vorgenommen werden, denn eine Vergleichbarkeit von Projekten unterschiedlicher Fachdisziplinen ist nicht gegeben. Sollten Kürzungen aus Kapazitätsgründen unvermeidlich sein, dann müssen diese dokumentiert und an die Zuwendungsgeber kommuniziert werden.

Anhang

A. Projekt- und Begutachtungsdatenbanken, Antragsportal

Die Implementierung von Antrags-, Begutachtungs- und Bewilligungsverfahren sowie die Projektberichterstattung soll möglichst einheitlich organisiert werden und den Zugriff auf eine zentrale Datenbank sowie das einfache Verschieben von Anträgen und Projekten zwischen den Zentren - mit Einverständnis der Antragstellenden - erlauben. Die technische Realisierung obliegt dem Betreiberausschuss.

Über das Portal sollen nach Tabelle 1 die folgenden Daten für die entsprechenden Personengruppen zur Verfügung gestellt werden. Involvierte Mitarbeiter*innen, die Entscheidungen vorbereiten oder das System administrieren, sind hier nicht extra aufgeführt. Die Daten sollten so lange wie nach DSGVO möglich und mindestens 5 Jahre nach Projektende zur Verfügung stehen.

TABELLE 1: FÜR DEN VERGABEPROZESS NOTWENDIGE DOKUMENTE UND ZUGRIFFSRECHTE. ABKÜRZUNGEN: PI – PROJEKTVERANTWORTLICHE/R (ANTRAGSTELLER*IN), TP – TECHNISCHE/R PRÜFER/IN, GA – WISSENSCHAFTLICHE/R GUTACHTER/IN, LVA – LOKALER VERGABEAUSSCHUSS, NA -NUTZUNGSAUSSCHUSS, GS - GESCHÄFTSSTELLE

Dokumente	Zugriff
Aktueller Projektantrag und ggf. alle zugehörigen Vorläuferprojekte	
Antrag	PI, tP, GA, LVA, NA
technischer Prüfbericht	tP, GA, LVA, NA
wissenschaftliches Gutachten	GA (nur eigene), LVA, NA
Nachweis über die Bewilligung inkl. Zusammenfassung der Gutachten	PI, tP, GA, LVA, NA
ggf. Zwischenberichte	PI, tP, GA, LVA, NA
Alle beantragten NHR-Projekte des/der antragstellenden PI	
Antrag	PI, LVA, NA
technischer Prüfbericht	tP (nur eigene)
wissenschaftliches Gutachten	GA (nur eigene)
Nachweis über die Bewilligung inkl. Zusammenfassung der Gutachten und der technischen Prüfung	PI, GA, LVA, NA
Zwischenberichte, Abschlussberichte	PI, GA, LVA, NA
Alle NHR-Projekte	
Anträge	PI (nur eigene), NA, GS
wissenschaftliche Gutachten	GA (nur eigene), GS
technischer Prüfbericht	tP (nur eigene), GS
Nachweis über die Bewilligung inkl. Zusammenfassung der Gutachten	PI (nur eigene), NA, GS
Zwischenberichte, Abschlussberichte	PI (nur eigene), NA, GS

B. **Notwendige Antragsdaten zur Vergabe von NHR-Ressourcen**

Folgende Daten sollten mindestens im Antrag enthalten sein (mit * beginnende Punkte gelten nicht für Testprojekte):

1. Allgemeine Angaben

- a) Projektmanager*in = technische*r Ansprechpartner*in (ausschließlich dienstliche Kontaktdaten, private Daten werden nicht akzeptiert),
- b) Verantwortliche*r Wissenschaftler*in - in der Regel Professor*in, mindestens Postdoc (dienstliche Kontaktdaten),
- c) Institution,
- d) Bundesland,
- e) Wissenschaftsfeld (DFG-Systematik),
- f) Falls Wissenschaftler*innen anderer Einrichtungen Rechnerkapazitäten dieses Projektes nutzen: Angabe des Bundeslandes,
- g) Angaben zu HPC-Nutzungsanträgen mit gleichem Thema an anderen HPC-Zentren,
- h) *HPC-Erfahrung der am Antrag beteiligten Personen (z.B. relevante Veröffentlichungen der letzten 5 Jahre, genutzte Beratungsangebote).

2. Projekt-Formalia

- a) „gewünschtes Zentrum“, mögliche alternative Zentren bei Kapazitätsengpässen,
- b) Geplanter Projektzeitraum (insgesamt und mit diesem Antrag beantragter Zeitraum),
- c) Neu- oder Folgeprojekt (im NHR-Verbund) – wenn Folgeprojekt: Projekt-ID,
- d) Projekttyp nach Größe,
- e) ereits vorhandenes Gutachten für das Projekt (NHR-Verbund oder externes Gutachten, z.B. BMBF, DFG),
- f) Angaben über Geheimhaltung/Sensibilität von Projektdaten,
- g) Ist ein ähnlicher Antrag an anderen Rechenzentren eingereicht worden? Ggf. die Unterschiede und woanders beantragte Rechenzeit angeben.

3. Technische Projektbeschreibung

- a) Beantragte Ressourcen,
- b) Benötigte Bibliotheken, Lizenzen,
- c) Technische Anforderungen und Randbedingungen (Architektur, Speicherplatz, Jobgrößen, Bandbreiten, Bibliotheken, Softwarelizenzen...),
- d) Nennung oder Beschreibung der Software, die auf dem Hochleistungsrechner im Batchbetrieb genutzt werden soll,
- e) *Begründung der Notwendigkeit der Nutzung von HPC-Ressourcen, inkl. Nutzungszeitplan mit Bezug zu 4.d und mathematischer Abschätzung der beantragten Ressourcen,
- f) *Nachweis der HPC-Eignung des Projektes (Skalierungsnachweis etc.).

4. Wissenschaftliche Projektbeschreibung (evtl. PDF)

- a) Projektübersicht (Kurzbeschreibung - abstract),
- b) *Stand der Forschung,
- c) *Eigene Vorarbeiten,
- d) *Projektziele, zu erwartender wissenschaftlicher Einfluss und Abgrenzung zu existierenden Projekten,

- e) *Detaillierte wissenschaftliche Projektbeschreibung inkl. numerischer Methoden sowie der technischen Umsetzung,
- f) *Projektplan mit Arbeitspaketen, inkl. wissenschaftliche, projektbasierte Begründung der Ressourcenschätzung, nachvollziehbar,
- g) *Bibliographische Übersicht projektrelevanter Publikationen.

5. Bei Folgeprojekten im NHR-Verbund:

- a) Darstellung der bisher im Projekt genutzten Ressourcen,
- b) Allgemeinverständlicher Zwischenbericht (zur Veröffentlichung auf NHR-Verbund Webseite),
- c) Darstellung bisher erzielter Ergebnisse, z.B. durch Publikationen,
- d) Begründung des Folgeantrags (unter Berücksichtigung des ursprünglichen Antrags).

6. Erklärungen

- a) Verpflichtungserklärung, in Publikationen die Nutzung der NHR-Ressourcen zu würdigen,
- b) Datenschutzerklärung, inkl. Genehmigung zur Weitergabe der Daten an Gutachter*innen und an andere NHR-Zentren,
- c) * Bitte: Erklärung zur Bereitschaft als Gutachter*in zu fungieren und um Erlaubnis zum Eintrag in Gutachter*innen-Datenbank (mindestens Dr./PhD) – mit dazugehöriger Erklärung zum Datenschutz,
- d) Erklärung, dass zum Projektabschluss ein Bericht erstellt wird.

7. Optional

- a) Vorschlag von Gutachter*inne*n,
- b) Zentrumsspezifische Angaben.

C. Vorlage für „Detaillierte Projektbeschreibung“

Die Vorlagen der detaillierten Projektbeschreibungen sollen die notwendigen Antragsdaten Anhang B 4.a)-g) abfragen und sich an der Struktur der GCS-Vorlage⁸ orientieren.

D. Standardfragen/-formular für die wissenschaftliche Begutachtung

Um Standards für die Begutachtung einzuhalten, verwenden die NHR-Zentren Formulare mit dem die wissenschaftlichen Gutachten abgefragt werden. Die Formulare enthalten folgende Fragen - die auch von den GCS verwendet werden - und die noch um lokale Besonderheiten ergänzt werden können:

1. *Reviewer's summary of project: (free text field)*
2. *Reviewer's judgement including a detailed justification for reviewer's computing time recommendations: (free text field)*
3. *Feedback for the applicant (to improve the quality of future applications): (free text field)*
4. *Overall judgement: (free text field)*
5. *Quality (excellent/very good/ average/ below average/ no comment)*
6. *Priority (excellent/very good/ average/ below average/ no comment)*

⁸ https://www.gauss-centre.eu/fileadmin/user_upload/generic_fotos/Documentation/GCS-Template-project-application.pdf

7. *Scientific relevance (excellent/very good/ average/ below average/ no comment)*
8. *Experience of PI (excellent/very good/ average/ below average/ no comment)*
9. *Soundness of technical program (excellent/very good/ good/ fair/ not sound/ no comment)*
10. *High-performance-computing approach (excellent/very good/ average/ below average/ no comment)*
11. *Realistic time frame (excellent/very good/ good/ fair/ not realistic/ no comment)*
12. *Are the requested resources adequately justified in the project description? (yes/no/no comment)*
13. *Please estimate for the proposed project:*
 - a. *Minimum resources, i.e., the least amount of computing time for each resource applied for to be still useful for the project.*
 - b. *Recommended resources, i.e., the amount of resources you would recommend to approach the proposed tasks.*

*Please justify your estimates in the field **Reviewer's judgement** above*

E. Anerkannte Bewilligungs-/Begutachtungsverfahren (Whitelist)

Die folgenden Begutachtungsverfahren werden vom NHR-Verbund anerkannt.

alle BM*, DFG, EU-Projekte, NHR, GCS

Der Nachweis über die Bewilligung sowie eine Zusammenfassung des entsprechenden vorausgegangen Antrags ist dem Antrag auf NHR-Ressourcennutzung beizufügen:

Handlungsempfehlungen für die Whitelist-Anwendung:

Wenn die Wissenschaftlichkeit und Qualifikation des Vorhabens vom Zuwendungsgeber positiv beschieden worden ist, der HPC-Ressourcenbedarf jedoch kein Gegenstand des Antrags war, dann sind ein zusätzliches wissenschaftliches Gutachten; z.B. durch eine(n) promovierte(n) lokale(n) Fachberater:in, zur Beurteilung des HPC-Ressourcenbedarfs sowie die Beurteilung der technischen Passfähigkeit durch lokale technische Prüfer:innen notwendig. Es wird empfohlen, dass der gesamte wissenschaftliche Antrag dem NHR Antrag in dem Fall nicht beigefügt werden muss – eine inhaltliche Zusammenfassung ist ausreichend. Die diesbezüglich letztendliche Umsetzung liegt aber im Entscheidungsbereich des entsprechenden Zentrums.