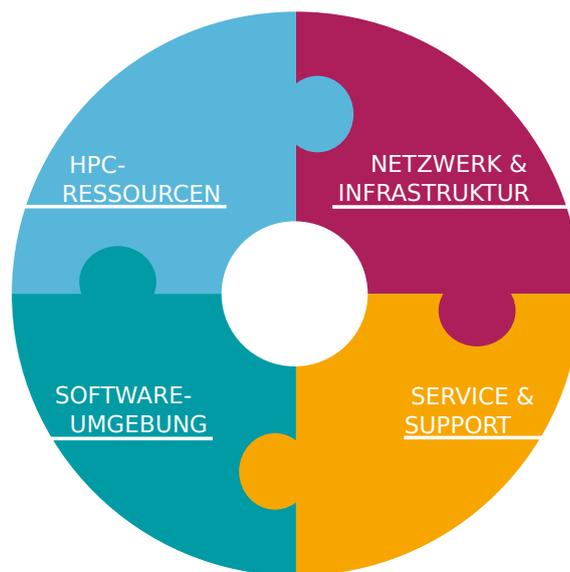


Auswertung der HPC.NRW Nutzendenbefragung

HPC.NRW*

2020



*Kontakt: contact-ap2@hpc.nrw

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	2
2	Überblick über die teilnehmenden Rechenzentren	4
3	Allgemeine Auswertung	5
4	Durchlässigkeit der Ebenen	8
5	Programmierung	10
6	HPC-Rechnungen	13
7	Performance-Analyse und Debugging	20
8	HPC-Basissoftware	24
9	Wissenschaftliche Software	32
10	HPC Ressourcen	39
11	Support	42
12	Schulungen	46
13	Erkenntnisse und Maßnahmen einzelner Standorte	51
14	Zusammenfassung	61

1 Einleitung

High-Performance Computing (HPC) wird als elementarer Bestandteil für Forschung und Entwicklung gesehen. Darum ist es wichtig, dass für die betreffenden Nutzendengruppen ausreichend Ressourcen bereitstehen und die Nutzung dieser Ressourcen optimal von technischer Seite betreut wird.

Im Rahmen des Projektes HPC.NRW wurde daher vom 01.06.2020 – 03.07.2020 eine HPC-Nutzendenumfrage durchgeführt. Ziel der Umfrage war es herauszufinden, wo und im welchem Umfang Bedarf für HPC-Support, HPC-Software oder HPC-Anwenderschulungen in NRW besteht. Auf Basis der Ergebnisse sollen zukünftig Support, Software, Tools und Schulungen an die Bedürfnisse der Nutzenden angepasst und optimiert werden. Langfristig sollen dadurch Barrieren bezüglich der Nutzung von HPC-Ressourcen abgebaut und die Arbeit der Anwender effizienter gestaltet werden.

Initiator der Umfrage war das Kompetenznetzwerk HPC.NRW, ein Verbund aller Universitäten in Nordrhein-Westfalen. Hierzu zählen im Detail die drei Tier-2 Zentren Aachen, Köln und Paderborn und die neun Tier-3 Zentren Bielefeld, Bochum, Bonn, Dortmund, Duisburg-Essen, Düsseldorf, Münster, Siegen und Wuppertal.

Zielgruppe der Umfrage waren alle HPC-Nutzenden in den Rechenzentren der jeweiligen Universitäten.

Der Fragenkatalog wurde in gemeinsamer Arbeit aller Standorte entwickelt. Jedes Rechenzentrum war für die Versendung der Umfrage an seine Nutzenden über interne Verteiler selbst verantwortlich. Durchgeführt wurde die Umfrage mit LimeSurvey, einer freien Online-Umfrage-Applikation, die es ermöglicht, anwenderfreundlich Online-Umfragen zu entwickeln, zu veröffentlichen und deren Ergebnisse datenbankseitig zu erfassen. Die Limesurvey-Installation der Universität Paderborn wurde dafür genutzt.

Die Rohdaten der Umfrage stehen allen Partnern im Kompetenznetzwerk zur Verfügung, sodass fachbereichs-, standort- oder softwarespezifische Auswertungen und Korrelationsanalysen, die über die in diesem Dokument beschriebene Auswertung hinausgehen, durchgeführt werden können.

In der Auswertung werden auch standortspezifische Statistiken gezeigt, da hohe Teilnahmequoten aus einigen Standorten die Gesamtangaben sonst stark verzerren würden. Außerdem sollte beachtet werden, dass durch die teilweise sehr geringe Anzahl an teilnehmenden Nutzenden, insbesondere für die Standorte Bochum, Duisburg-Essen und Wuppertal, deren Ergebnisse in Bezug auf die Repräsentativität hinterfragt werden müssen.

Um standortspezifische Auswertungen zu erzeugen, sind zwei verschiedene Wege denkbar, Teilnehmende der Umfrage einzelnen Standorten zuzuordnen: Eine Zuordnung basierend auf der Angabe zum physikalischen Standort oder eine Zuordnung basierend auf den Angaben zu genutzten HPC-Systemen. In dieser Auswertung wird der physikalische Standort gewählt, da es dabei sehr viel weniger Mehrfachnennungen gab als bei der Nutzung von HPC-Systemen.

Eine typische standortspezifische Auswertung als zweidimensionales Gitter ist in Abbildung 1 am Beispiel der Systemnutzung gezeigt. Dabei ist auf der vertikalen Achse der Standort des Umfrageteilnehmenden aufgetragen. Die Zahl in Klammern hinter dem Standort gibt die Anzahl an Teilnehmenden von diesem Standort an. Auf der horizontalen Achse sind die Antworten, hier die genutzten Typen von HPC-Systemen, aufgetragen. Jedes Feld enthält zum einen die prozentuale Anzahl wie oft diese Antwortmöglichkeit bezogen auf die Anzahl an Teilnehmenden von diesem Standort ausgewählt worden ist. Zum zweiten enthält ein Feld auch die absolute Anzahl an Antworten in Klammern. Da Mehrfachnennungen in Antworten sehr oft möglich waren, können die relativen Angaben in einer Spalte zu mehr als 100% aufsummieren. Die Spalte "Alle" repräsentiert die Summe über alle Standorte. Aus sprachlichen Gründen werden in dieser Auswertung an einigen Stellen Nutzende der HPC-Systeme und Teilnehmende der Nutzendenbefragung gleichgesetzt was jedoch keine direkte Repräsentativität der Nutzendenbefragung implizieren soll.

Die Daten der Auswertung wurden bereits von allen Standorten genutzt, um eigene Auswertungen durchzuführen und zukünftige Maßnahmen daraus abzuleiten. Diese wurden von den Standorten zusammengefasst und sind in Kapitel 13 dargestellt.

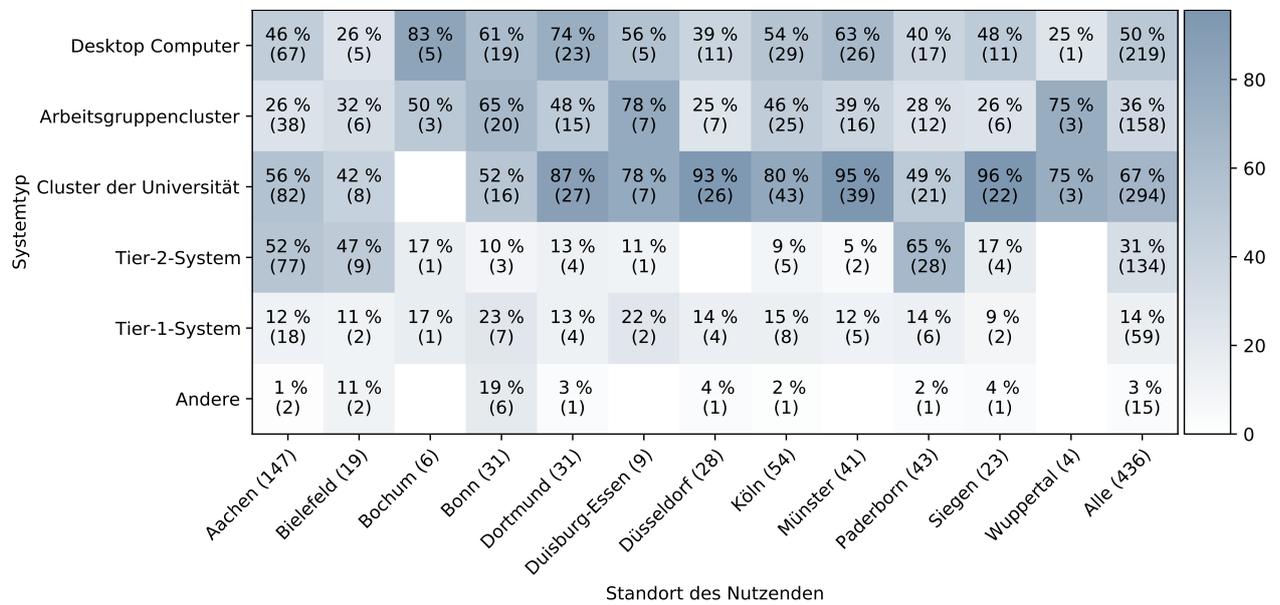


Abbildung 1: Nutzung von Cluster-Typen nach Standorten. Die Darstellung ist in [Sektion 1](#) genauer beschrieben.

2 Überblick über die teilnehmenden Rechenzentren

Die folgende Tabelle liefert einen Überblick über die Rechenzentren (beginnend mit Tier-2), deren zugehörige Cluster mit den entsprechenden technischen Ausprägungen sowie derzeit aktive Nutzende auf den Systemen. Bochum verfügt derzeit noch nicht über ein lokales zentrales Cluster, weshalb hier noch keine Angaben gemacht werden können.

Standort	Systemname	Systemgröße	Spezielle Architekturen	Anzahl Nutzende
Tier-2				
Aachen	CLAIX	CLX16-MPI: ~600 Knoten CLX16-SMP: 8 Knoten CLX18-MPI: ~1250 Knoten	CLX16-GPU: 9 Knoten (je 2 Pascal) CLX18-GPU: 54 Knoten (je 2 Volta) SX-Aurora: 1 Knoten (8 VEs)	~300
Köln	CHEOPS	~800 Knoten: 24x(32 Kerne/500 GB), 592x(12 Kerne/24-48 GB), 180x(8 Kerne/24-48 GB)	keine	115
Paderborn	Noctua	256 Knoten (10240 CPU Kerne)	FPGA Knoten: 16 640 CPU Kerne und 32 Intel Stratix 10 FPGAs	352
Paderborn	OCuLUS	576 Knoten (9280 CPU Kerne)	GPU Knoten: 43 Knoten (688 CPU Kerne und 65 Nvidia GPUs)	561
Tier-3				
Bielefeld	-	28 Knoten (560 Kerne) mit 384 GB	8x NVIDIA Tesla V100 je Knoten	~30
Bochum	N/A			
Bonn	Bonna	70 Knoten (2240 Kerne)	-	~50
Dortmund	LiDO3	366 Knoten (14880 Kerne): 316x (40 Kerne/64 GB) 28x (48 Kerne/256 GB) 2x (48 Kerne/1024 GB) 20x (40 Kerne/64 GB) 2x K40	20 Knoten mit je 2 K40 28 mit 48 Kernen/256 GB 2 mit 48 Kernen/1024 GB	~100
Duisburg-Essen	magnitUDE	492 (64GB)	72 FatNodes (128 GB) 60 SuperFatNodes (256 GB)	~31
Düsseldorf	Hilbert	~ 200 Knoten (24 Kerne, 128/192 GB)	5 FatNodes (1.5 Tb/3 TB) 15 GPU Knoten (10 GPU, 20 Kerne, 256GB)	~100
Münster	PALMA	520 Knoten	12 Knoten mit RTX 2080 Ti, einige mit V100, TitanRTX und TitanXP	153
Siegen	HoRUS	134 Knoten	20 FatNodes, 2 HTC Knoten, 2 Aurora	~60
Wuppertal	Pleiades	162 Knoten		~100

3 Allgemeine Auswertung

An der Umfrage haben insgesamt 456 Personen teilgenommen. Diese ordneten sich folgenden Standorten zu¹: Aachen (147), Bielefeld (19), Bochum (6), Bonn (31), Dortmund (31), Duisburg-Essen (9), Düsseldorf (28), Jülich (12), Köln (54), Münster (41), Paderborn (43), Siegen (23), Wuppertal (4), andere (national/international) 8. Damit hat sich nach Einschätzung der Rechenzentren nur ein geringer bis mittlerer Anteil der aktiven Nutzenden an der Umfrage beteiligt (<20%).

Die Befragten arbeiten, wie in Abbildung 2 zu erkennen, meist auf dem lokal verfügbaren HPC-System und sind nur sehr vereinzelt auch auf Systemen anderer Standorte unterwegs. Die Hälfte nutzt für ihre Arbeit die Workstation, 36% ein eigenes Cluster innerhalb der Arbeitsgruppe, 67% das lokale Universitätscluster und 31% ein Tier-2, bzw. 14% ein Tier-1 System. Bochum verfügt derzeit noch nicht über ein lokales zentrales Cluster, dort arbeiten die Befragten auf eigenen Workstations und Arbeitsgruppenrechnern. Auch in Bonn werden noch überwiegend dezentrale Systeme für wissenschaftliche Rechnungen eingesetzt, nur die Hälfte der Befragten macht vom lokalen Cluster Gebrauch.

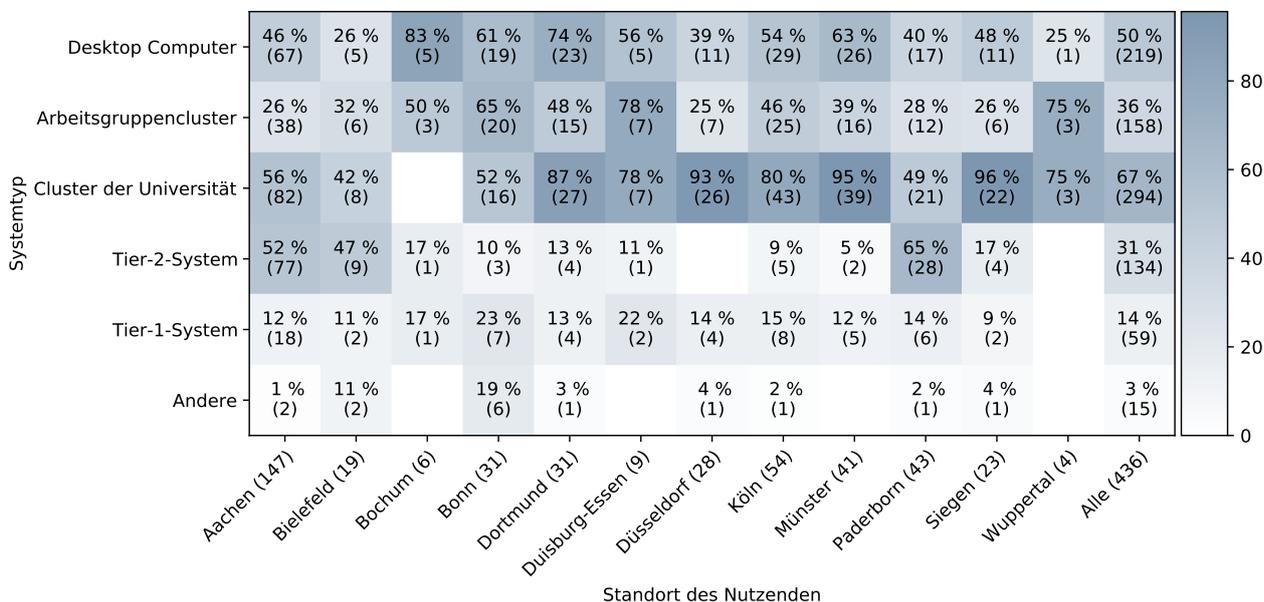


Abbildung 2: Nutzung von Cluster-Typen nach Standorten. Die Darstellung ist in Sektion 1 genauer beschrieben.

Der akademische Grad der Befragten war, wie in Abbildung 3 gezeigt, zur Hälfte Master/Diplom, ein Viertel Dr./PhD. und jeweils 10% Bachelor und Professoren. Überdurchschnittlich hoch, mit teilweise über 50%, ist der Anteil von Befragten mit Dr./PhD in Bielefeld, Bonn, Duisburg-Essen und Köln.

In den primären Forschungsgebieten waren die Fachbereiche Physik (106) und Informatik, System- und Elektrotechnik (101) führend, gefolgt von Chemie (55), Biologie (42) und Maschinenbau und Wirtschaftsingenieurwesen (40). In geringerem Umfang waren folgende Fachbereiche vertreten: Wärme- und Verfahrenstechnik und (27), Mathematik (22), Geowissenschaften (15), Materialwissenschaft und Werkstofftechnik (14), Medizin (14), Sozial- und Verhaltenswissenschaften (14), Geisteswissenschaften (3), Landwirtschaft, Forstwirtschaft und Veterinärmedizin (2), Bauingenieurwesen und Architektur (1).

Der innerhalb des Projekts HPC.NRW angedachte Aufbau von fachspezifischen Clustern macht vorrangig dort Sinn, wo unter anderem auch schon Nutzende des jeweiligen Fachbereichs aktiv sind. Die Verteilung der Fachbereiche ist in Abbildung 4 gezeigt.

¹Eine Mehrfachauswahl war möglich.

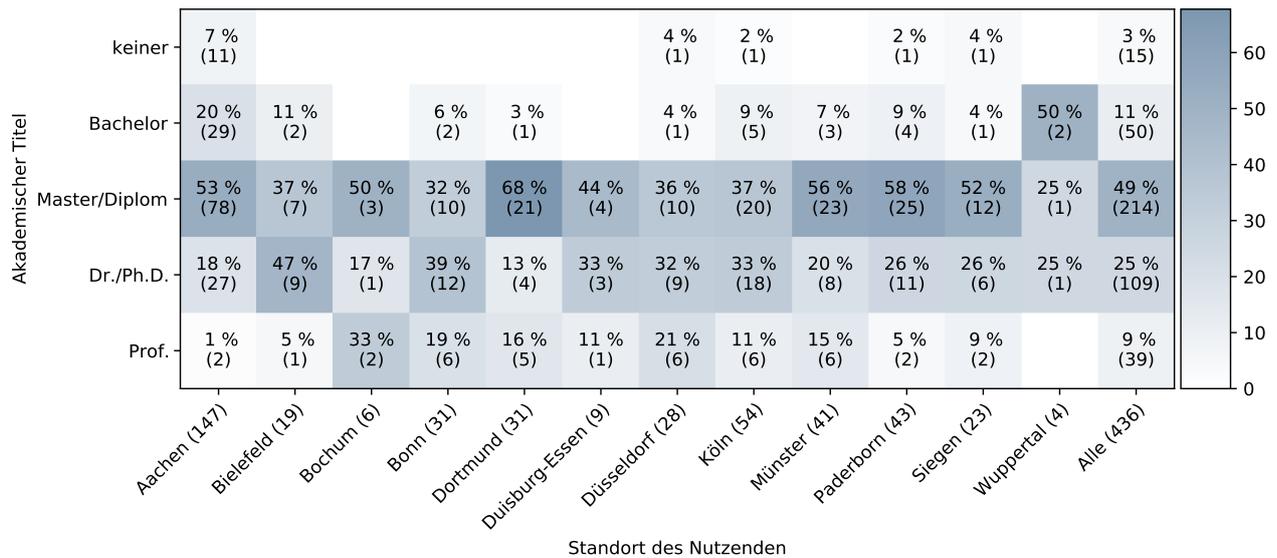


Abbildung 3: Verteilung der akademischen Grade unter den Befragten nach Standorten. Die Darstellung ist in Sektion 1 genauer beschrieben.

Was die sekundären Forschungsgebiete betrifft, war auffällig, dass diese meist im gleichen Fachbereich lagen, wie die primären Forschungsgebiete, lediglich mit anderen Themenschwerpunkten. Auffällig waren auch beidseitige Abhängigkeiten zwischen den Fachbereichen Biologie (4 im Bereich Medizin) und Medizin (4 im Bereich Biologie) und zwischen den Fachbereichen Mathematik (5 im Bereich Informatik, System- und Elektrotechnik) und Informatik, System- und Elektrotechnik (3 im Bereich Mathematik).

Beeindruckend ist die Relevanz von HPC in der Forschung. Rund 74% aller Nutzenden gaben an, dass HPC von größter Wichtigkeit für ihre Arbeit ist und weitere 23% erwähnten, dass HPC nicht erforderlich ist, aber die Arbeit in hohem Maße unterstützt. Lediglich 3% aller Befragten haben den Eindruck, dass HPC nicht wirklich relevant ist, allerdings ein Trend dorthin zu verzeichnen sei (1,7%) oder aber gar keine Rolle in der Forschung spielt, da es ein sehr spezielles Thema ist (1,3%).

In der Lehre ist das Thema allerdings noch nicht sehr verbreitet. Jeweils knapp 30% aller Befragten gaben an, dass das Thema HPC keine Rolle spielt, da es ein sehr spezielles Thema ist; dass es noch keine Rolle spielt, aber ein Trend dorthin zu verzeichnen ist oder dass es eine untergeordnete Rolle spielt und bislang nur in speziellen Veranstaltungen vermittelt wird (insgesamt 88%). Lediglich 12% der Befragten beschrieben HPC als fest im Lehrplan integriert.

Etwas mehr als die Hälfte der Befragten (242), haben innerhalb der letzten 18 Monate bereits einen Beitrag in einem Journal, einer Konferenz oder einem Workshop veröffentlicht, der auf Ergebnissen basiert, welche mithilfe eines Clusters erzielt wurden. Gut 2/3 der Befragten (310) gaben an, dass eine solche Veröffentlichung derzeit in Vorbereitung ist oder sich bereits in einem Review-Prozess befindet.

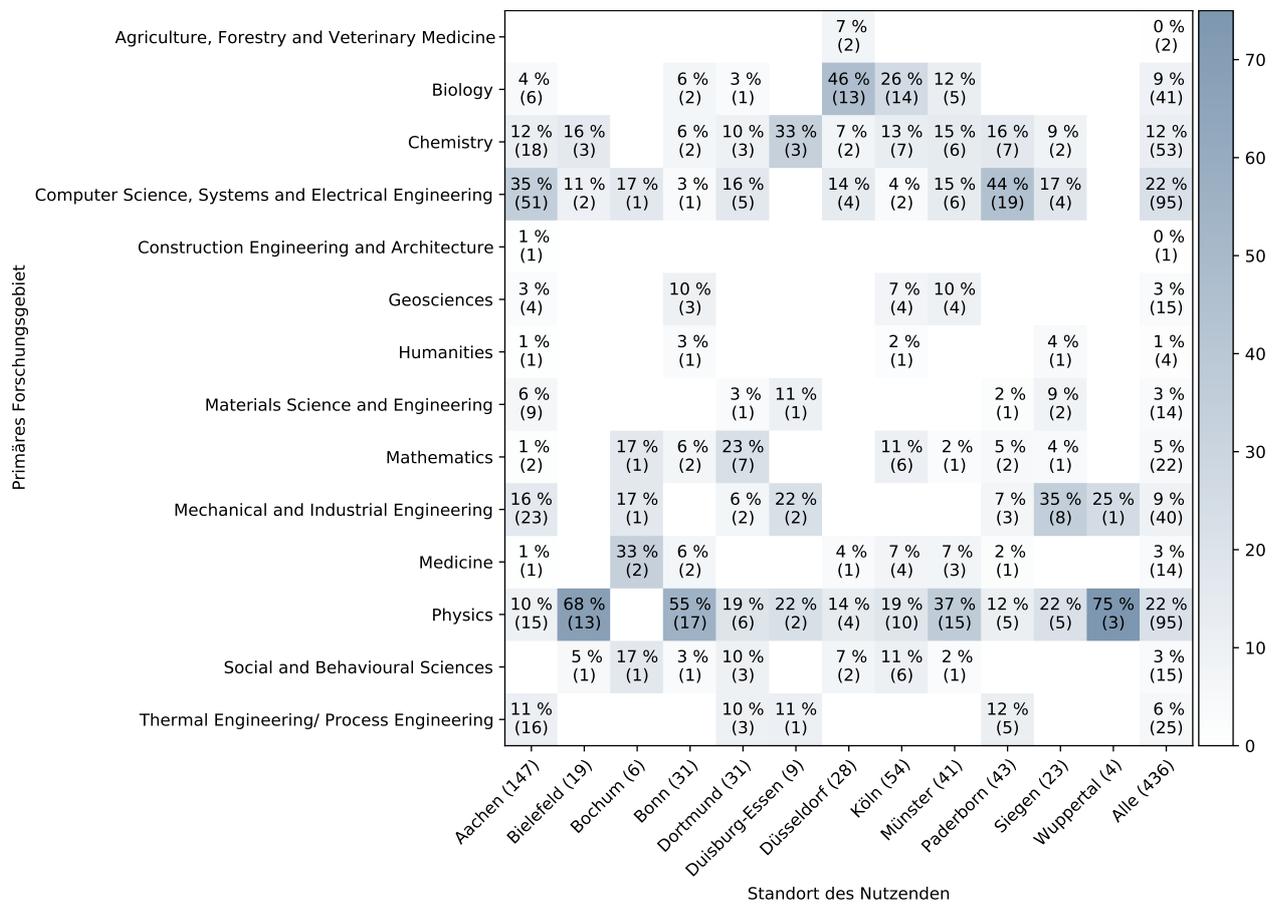


Abbildung 4: Verteilung der Fachbereiche pro Standort. Die Darstellung ist in Sektion 1 genauer beschrieben.

4 Durchlässigkeit der Ebenen

Eine weitere wichtige Fragestellung von HPC.NRW beschäftigt sich mit der Durchlässigkeit zwischen den Ebenen. Ziel hierbei ist es, Nutzenden mit erhöhtem Rechenbedarf Hilfestellungen bei der Beantragung höherer Ebenen zu geben. Abbildung 5 zeigt die Nutzenden-Mobilität zwischen den einzelnen Zentren.

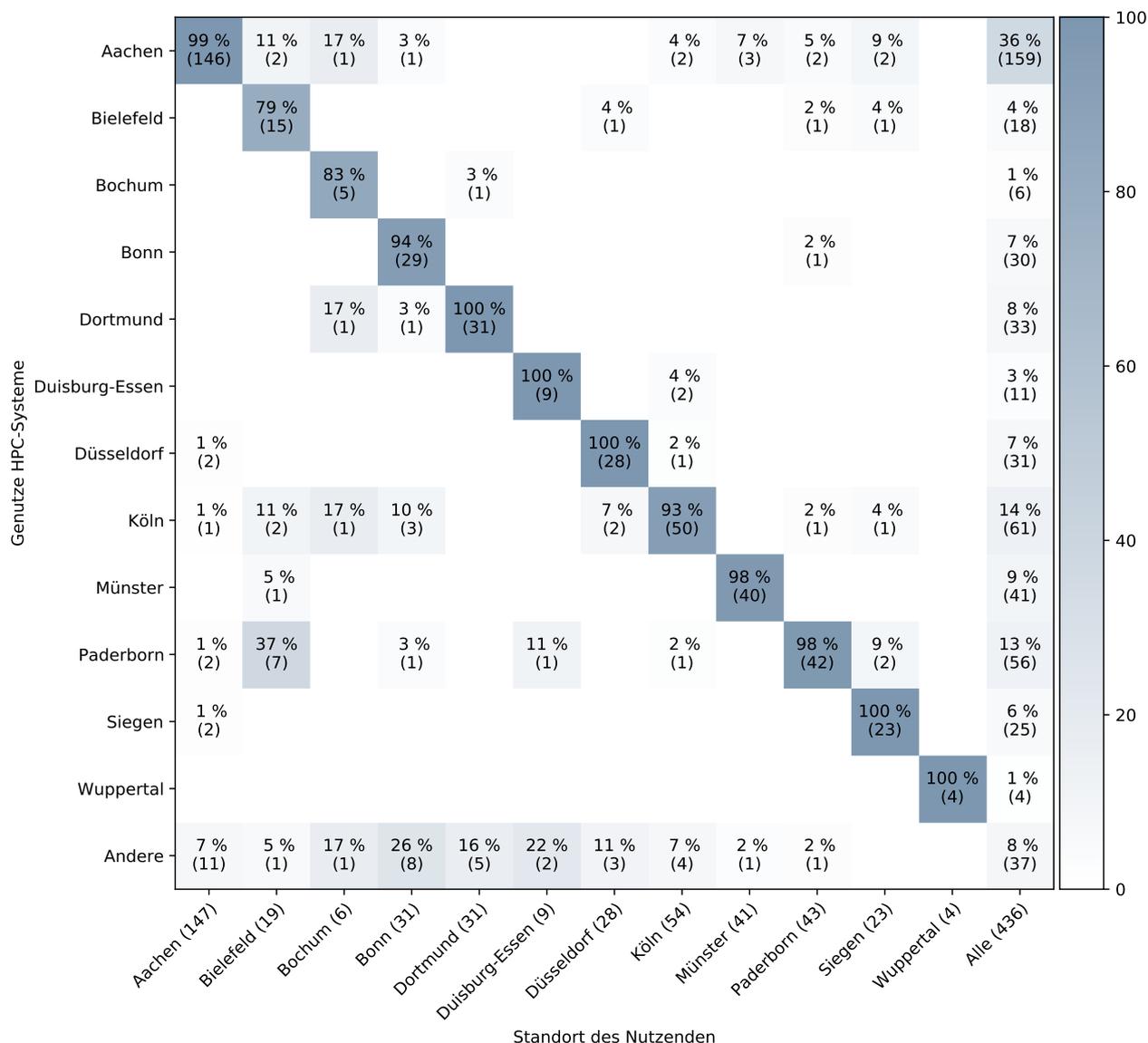


Abbildung 5: User-Mobilität zwischen den HPC-Zentren innerhalb und außerhalb von HPC.NRW. Die Darstellung ist in [Sektion 1](#) genauer beschrieben.

Tier-3 zu Tier-2 Am Beispiel des Tier-3-Standorts Bielefeld sieht man, dass 79% aller Nutzenden (7 von 15) zwar die lokalen Ressourcen verwenden, allerdings zusätzliche 37% auch das System des Tier-2-Standorts in Paderborn und je 11% die Systeme in Köln und Aachen. Prozentual gesehen zeigt sich hier die größte Mobilität der Nutzenden zwischen der Ebene 2 und 3.

Ähnlich verhält es sich mit anderen Standorten, an denen sich die zentrale HPC-Infrastruktur noch im Aufbau bzw. in der Beschaffung befindet. So sieht man, dass Nutzende aus Bochum und Bonn vor allem auf die Standorte Aachen, Köln, Paderborn oder Zentren außerhalb des HPC.NRW-Konsortiums ausweichen. Obwohl einzelne Nutzende auch auf die Ressourcen des Tier-3-Zentrums in Dortmund ausweichen, ist klar erkennbar, dass bevorzugt Zentren der Ebene 2 verwendet wer-

den, so wie es auch in der HPC-Landesstrategie vorgesehen ist. Insbesondere in Bonn, aber auch beispielsweise in Duisburg-Essen, gibt es einen relativ großen Anteil an Nutzenden, die Zentren der Ebene 1 (enthalten in “Other”) anlaufen. Insgesamt ist die Mobilität zwischen den Ebenen 2 und 3 relativ gering. Ob dies an den ausreichend vorhandenen Tier-3 Ressourcen oder der höheren Einstiegshürde für die Tier-2-Ebene liegt, geht aus der Umfrage nicht hervor. Im Rahmen von HPC.NRW wird versucht, letzteres durch gezielte Maßnahmen wie Intensivberatungen, vereinfachte Projektkategorien, einheitliche Beantragungs-/Begutachtungssysteme, Tutorials und verbesserte Dokumentation zu adressieren.

Tier-2 zu Tier-1 Insgesamt wurden in der Umfrage von Nutzenden, die HPC.NRW-Standorten zuzuordnen sind, 37 mal die Nutzung von Zentren auch außerhalb HPC.NRW genannt (Freitextangaben in Kategorie “Other”). Bei der Analyse zeigt sich hier ein besonderer Fokus auf die Tier-1-Zentren. Hierbei werden die Tier-1-Systeme des Forschungszentrums Jülich besonders häufig genannt. Ein Grund hierfür ist sicher die gemeinsame Antragschiene der RWTH Aachen University mit dem Forschungszentrum Jülich und die geographische Nähe innerhalb NRW. Es zeigt sich aber auch, dass Forschenden der Standorte Bochum, Bonn, Bielefeld, Dortmund, Duisburg-Essen, Düsseldorf, Köln und Paderborn ebenfalls Rechenzeit in Jülich bewilligt worden ist.

Darüber hinaus werden auch die Tier-1-Zentren HLRS (8 Nennungen) und LRZ (7 Nennungen) verwendet. Es gibt insgesamt 5 Nennungen für weitere europäische Tier-0-Zentren (CSCS und CINECA) sowie 7 weitere Nennungen für Zentren außerhalb Europas (z.B. TACC). Diese Auswertung zeigt, dass eine Durchlässigkeit der Ebenen grundsätzlich gegeben ist, jedoch noch verbessert werden kann.

5 Programmierung

Auf die Frage, ob die Befragten ihre Anwendungen selbst bauen/kompilieren, antworteten 60% mit ja und 40% mit nein wie in Abbildung 6 gezeigt.

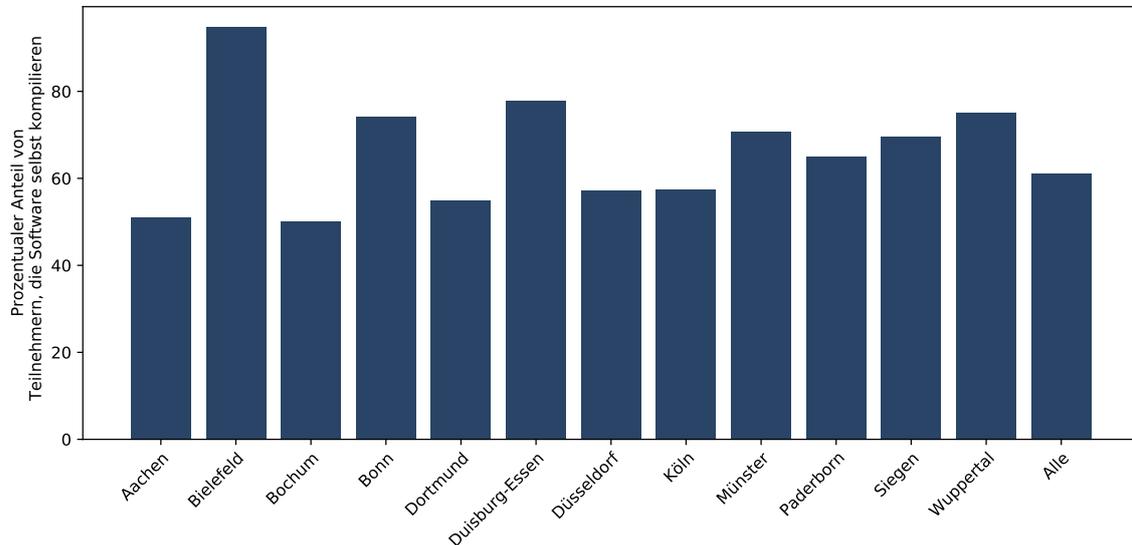


Abbildung 6: Prozentualer Anteil der Nutzenden, die Programme zur Nutzung auf HPC-Clustern selbst kompilieren.

In die Entwicklung von Programmen sind durchschnittlich 68% der Befragten direkt involviert und die Verteilung nach Standorten ist in Abbildung 7 zu sehen. Weitere 10% würden gerne oder werden demnächst selbst Entwicklungstätigkeit übernehmen. Nur 14% gaben an, ausschließlich bestehende Programme zu verwenden, bei 8% davon findet die Entwicklung der Software in derselben Arbeitsgruppe statt. Besonders hoch ist der Anteil von Eigenentwicklungen in Bielefeld, wo 18/19 Befragten ihre Anwendungen selbst kompilieren und 17/19 an der Entwicklung der Software beteiligt sind.

Zusätzlich zu typischen Entwicklungsaufgaben, wie die Erweiterung der Programmfunktionalität (57%), Fehlerbehebung/Bug fixing (51%), Erstellen neuer Programme (54%) und Performanceoptimierung (44%), siehe Abb. 7, führen die Befragten, die selbst Programme entwickeln, auch vereinzelt folgende Aufgaben aus: Parallelisierung, Software-Paketierung, Erstellen von Skripten und Wrappern zur Abbildung von Arbeitsprozessen und Portierung.

Programmiersprachenkenntnisse sind in Abbildung 8 ausgewertet und am weitesten verbreitet sind Python (85%), C/C++ (82%), Matlab (65%) und Java (49%). Bei diesen wurde jeweils etwa $\frac{1}{3}$ Basiskenntnisse, $\frac{1}{3}$ intermediäre und $\frac{1}{3}$ fortgeschrittene Kenntnisse angegeben. Als weitere vorgegebene Antworten wurden Fortran mit 43% (besonders in Duisburg-Essen), R (33%, vermehrt in Düsseldorf), Mathematica (33%, besonders in Bielefeld und Duisburg-Essen) und Julia (16%) angegeben. In diesen Sprachen sind bei den Befragten überwiegend Basiskenntnisse vorhanden. Bei den Freitextantworten wurden ergänzend vermehrt bash (6%), C# (4%) und Perl (1%) genannt. Die Befragten konnten sich auch dazu äußern, welche Sprachen sie zudem erlernen oder vertiefen möchten und haben hier Python (11%), Julia (6%) und C/C++ (3%) als signifikanteste Nennungen aufgeführt.

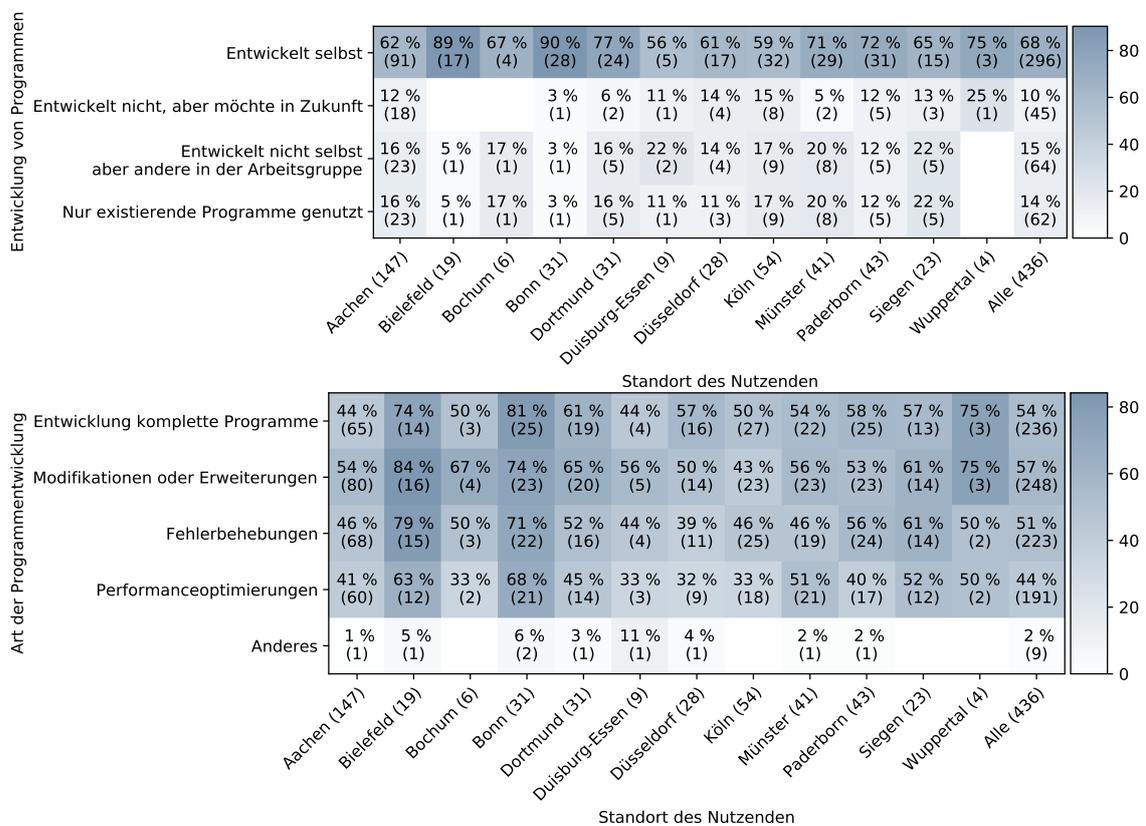


Abbildung 7: Verteilung der Antworten zur Entwicklung von Programmen (oben) und Art der Entwicklung (unten) nach Standorten. Die Darstellung ist in [Sektion 1](#) genauer beschrieben.

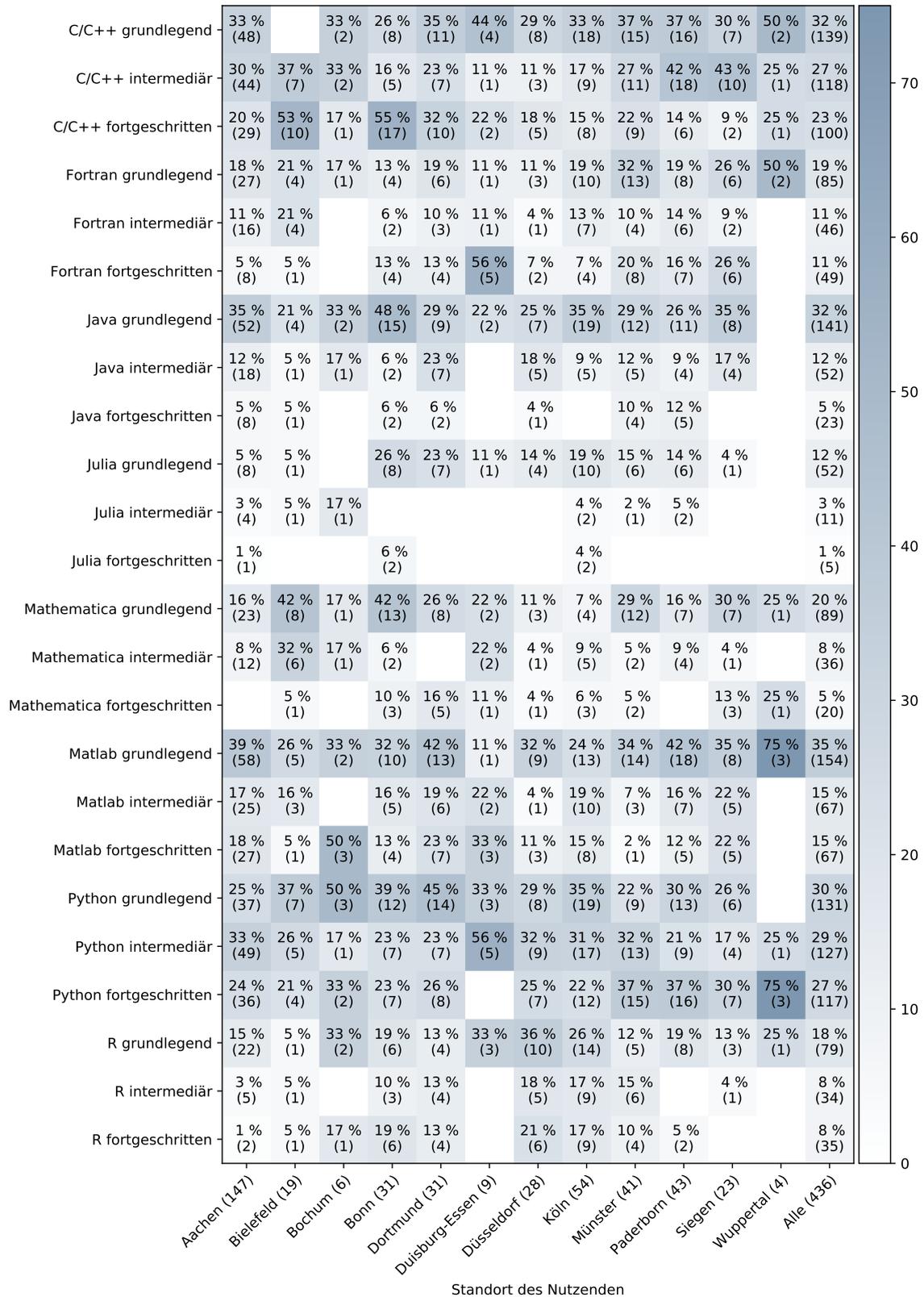


Abbildung 8: Verteilung der Programmiersprachenkenntnisse nach Standorten. Die Darstellung ist in Sektion 1 genauer beschrieben.

6 HPC-Rechnungen

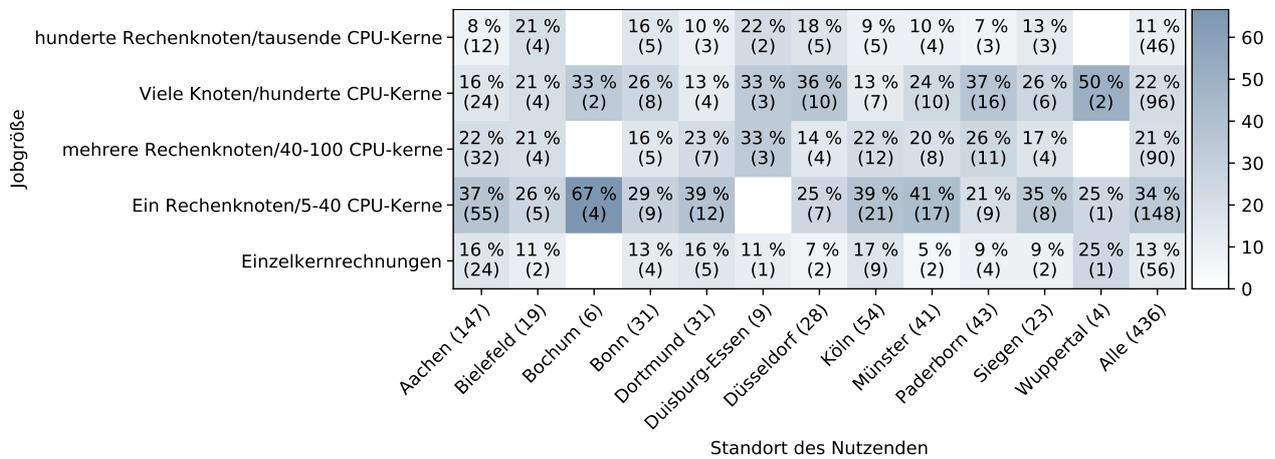


Abbildung 9: Jobgrößen der Befragten nach Standort. Die Darstellung ist in [Sektion 1](#) genauer beschrieben.

Ein erstaunlich hoher Anteil an Befragten (13%) führt hauptsächlich serielle Berechnungen aus wie in [Abbildung 9](#) zu erkennen. Parallele Rechnungen im kleinen Stil (5-40 CPU-Kerne oder alle Kerne eines Knotens) führen 34% der Befragten regelmäßig durch. Im unteren mittleren Bereich (mehrere Knoten oder mehr als 40 Kerne) bewegen sich 21% und im oberen mittleren Bereich (<100 Rechenknoten oder hunderte CPU-Kerne) 22%. Überwiegend auf größeren Systemen (hunderte Knoten oder tausende Kerne) bewegen sich 11%. Ein leicht anderes Verhältnis der Jobgrößen ist in Paderborn und Düsseldorf erkennbar, wo die durchschnittliche Jobgröße höher als der NRW-weite Durchschnitt ist und mehr Nutzende im oberen Mittel unterwegs sind (37% und 36%).

Zu Zwecken der Parallelisierung wird von 51% der Befragten MPI, 39% OpenMP, 24% CUDA, 9% PThreads, 6% OpenCL, 2% OpenACC und 2% Intel TBB eingesetzt. Weiterhin wurden vereinzelt C++ Threads, Matlab PCT und Python Pakete genannt. Keine Parallelisierung zu nutzen gaben 8% an, während 19% keine Angaben dazu machen konnten. Eine standortspezifische Auswertung ist in [Abbildung 10](#) gezeigt. Besonders häufig wurde in Bochum (3/6) und Düsseldorf (10/28) angegeben, dass man nicht wisse, welche Parallelisierungstechnik zum Einsatz kommt.

Bei der Anzahl der maximal verwendeten CPU-Kerne pro Job ist wie in [Abbildung 11](#) zu sehen keine klare Verteilung ersichtlich. Sie liegt bei 29% der Befragten im Bereich zwischen 2-24, gefolgt von 27% mit mittleren Jobgrößen von 49-512 Kernen, 27% mit 25-48 Kernen, 14% großen Allokationen mit >1024 Kernen und 4% im Bereich zwischen 512-1024 Kernen. Serielle Jobs werden ausschließlich von 5% der Nutzenden ausgeführt. Weitere 5% konnten hierzu keine Angaben machen.

Bei den Angaben zum Hauptspeicher pro CPU-Kern in [Abbildung 12](#) ergibt sich dagegen eine sehr klarer Trend zu größeren Speicherkapazitäten. So benötigen 13% der Befragten weniger als 1 GB pro Kern, 22% zwischen 1-2 GB, 25% schon 2-3 GB und im oberen Bereich über 4 GB sind es 26%. Keine Angaben dazu kamen von 13% der Befragten. Als Erklärungen für den hohen Speicherbedarf wurden zusammenfassend neben den großen zu verarbeitende Datenmengen, z.B. bei der Genomanalyse, der Bildverarbeitung und Operationen auf großen Matrizen, auch die Ineffizienz mancher Programme (Gaussian, ORCA, R, CASTEP, STAR) angeführt.

Der Bedarf an Festplattenspeicher pro Job ([Abb. 13](#)) verteilt sich sehr gleichmäßig auf unterschiedliche Gruppen. So gibt es etwa ähnlich viele Befragte, die mit wenig Speicher (<1 GB) auskommen (19%), verglichen mit Befragten mit mäßigem Platzbedarf (21% im Bereich 1-5 GB), hohem Bedarf (26% bei 5-20 GB) und sehr hohen Speicherkapazitäten (22% bei >20 GB). Die Befragten gaben an, dass besonders Anwendungen aus dem Bereich Lebenswissenschaften (Genomanalysen, Mikroskopievideodaten, Bewegungserfassung) und Strömungssimulationen (Fahrzeug-

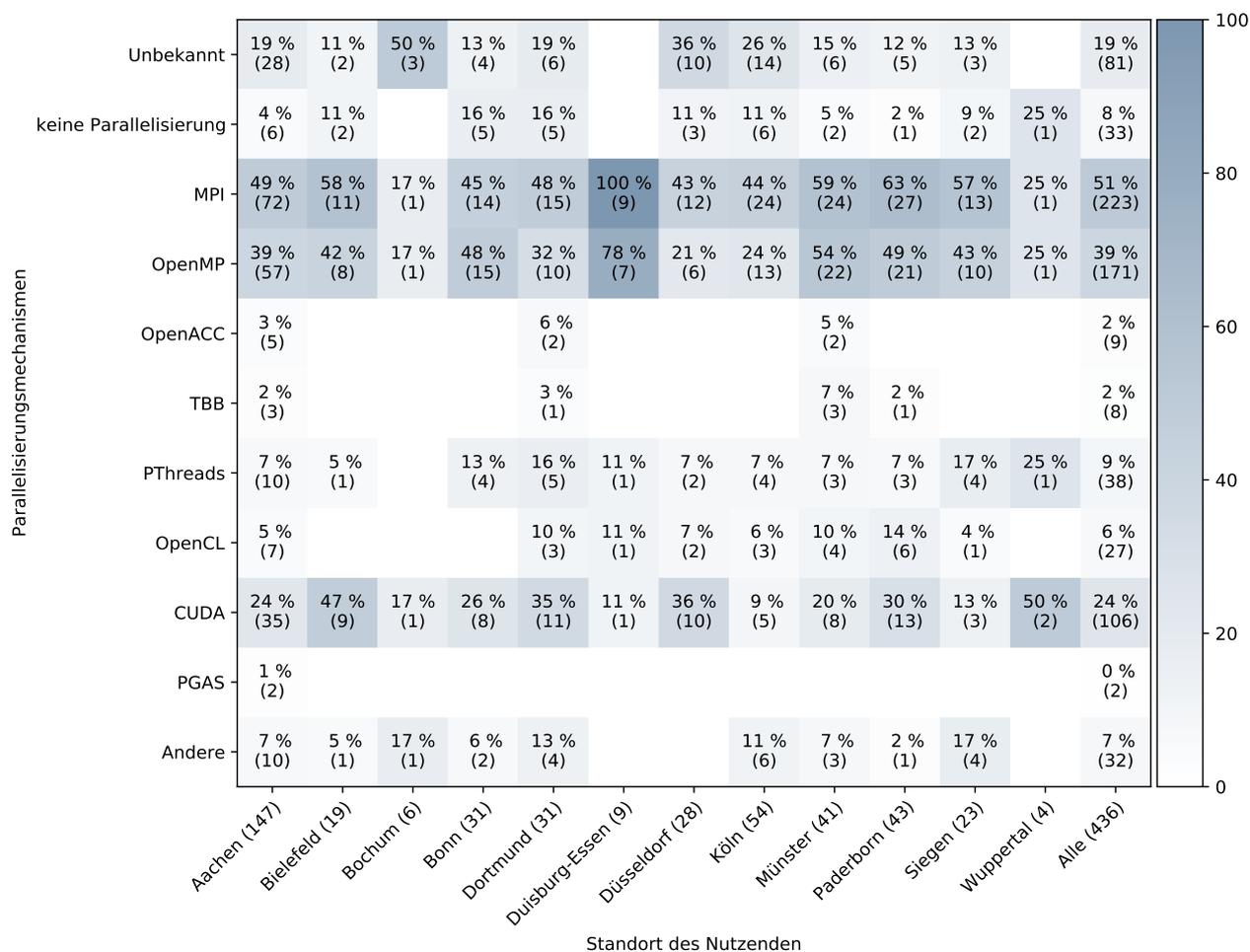


Abbildung 10: Nutzung von Parallelisierungsmechanismen der Befragten nach Standort. Die Darstellung ist in [Sektion 1](#) genauer beschrieben.

bau, Meteorologie), sowie die Programme Ansys Fluent, Quantum Espressos/Critic2, VASP, Gaussian, OpenFOAM, Abaqus und cellranger sehr große Datenmengen erzeugen.

Nicht alle Systeme im HPC.NRW-Verbund verfügen über ein systematisches Job-Monitoring. Um einen Einblick zu bekommen, welche Anforderungen die Anwendungen an das System stellen, wurden auch Fragen zu typischen Anwendungscharakteristiken gestellt. Diese sind in [Abbildung 14](#) ausgewertet. Dabei gaben 2/3 der Befragten an, darüber zu wissen, welche Systemgrenzen (Bottlenecks) sie mit ihren Anwendungen erreichen. Dazu führten 21% entsprechende Analysen durch. Die übrigen haben entweder eine konkrete Vermutung (31%) oder zumindest eine ungefähre Ahnung (15%) wo es Engpässe gibt.

Konkret gaben die Befragten als Bottleneck am häufigsten die Größe des Hauptspeichers (31%) an. Dies ist nicht verwunderlich, da das die einzige Systemgröße ist, die von den Nutzenden durch Programmabbrüche direkt erkennbar ist. Andere Systemgrößen sind lediglich aus Performance-Sicht relevant, behindern aber nicht die Ausführung der Anwendungen. Von daher stellt die Größe des Hauptspeichers ein essenzielles Problem dar.

Erst mit 18% folgten jeweils Hauptspeicherbandbreite, Dateizugriffe und Gleitkommazahlendurchsatz. Die Cache-/Hauptspeicherlatenz sehen nur 11% als ein Problem, Netzwerklatenz und -bandbreite wirken sich für 11% bzw 10% der Befragten auf das Verhalten ihrer Anwendungen aus.

Bemerkenswert hoch ist die Unkenntnis der Nutzenden über das parallele Dateisystem. Fast 50% gaben an, nicht zu wissen, welche parallelen Dateisysteme auf den genutzten HPC Systemen im Einsatz sind. Diese Wissenslücke hat in der Praxis aber kaum Auswirkungen, da über generische Bibliotheken darauf zugegriffen wird und ein Dateisystem-spezifisches Tuning erst ab Tier2/Tier1

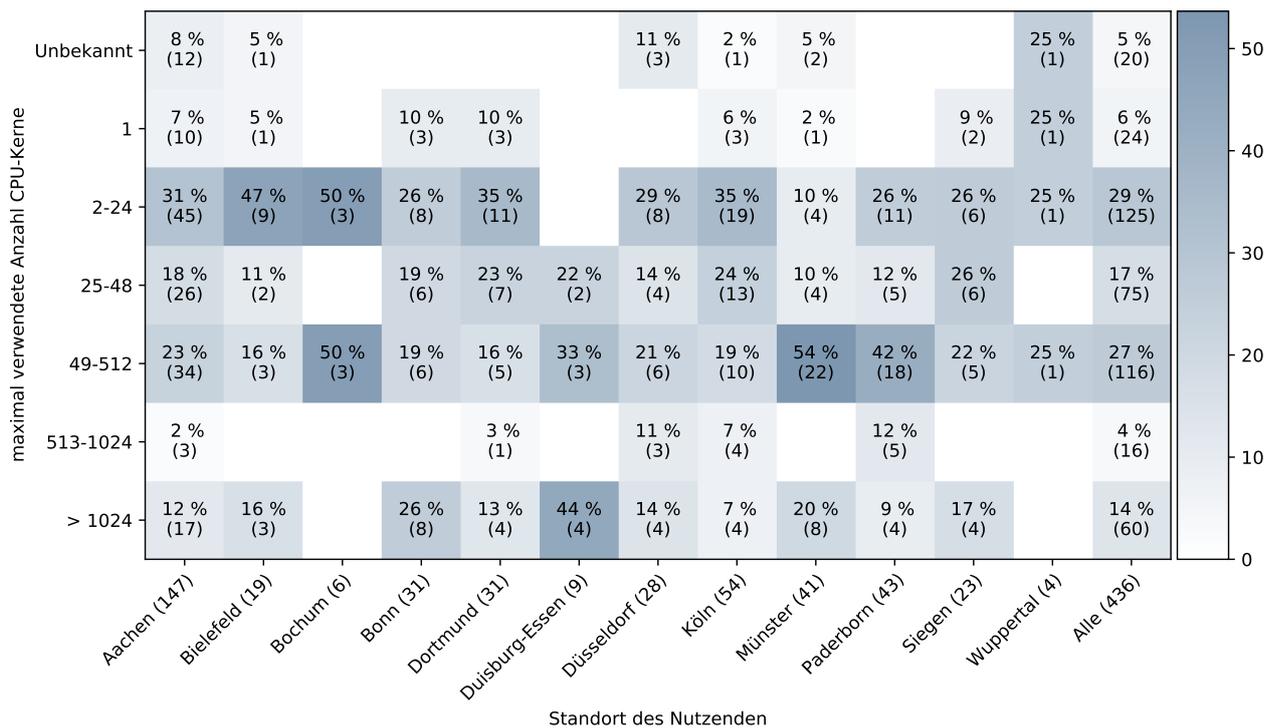


Abbildung 11: Maximal genutzte Anzahl CPU-Kerne pro Job der Befragten nach Standort. Die Darstellung ist in [Sektion 1](#) genauer beschrieben.

Ebene durchgeführt wird. Zudem sind gerade an den kleineren Zentren oft mehrere Systeme im Einsatz und die Dokumentationen darüber mangelhaft.

Die Verbreitung von Beschleunigern (GPUs, FPGAs usw.) hat in den letzten Jahren stark zugenommen. Von den Befragten setzen indes 15% Nvidia Tesla GPUs und 13% Nvidia GTX/RTX GPUs routinemäßig ein wie in [Abbildung 15](#) zu sehen ist. In Bielefeld und Paderborn ist der Anteil an GPU-Nutzenden unter den Befragten mit >50% und >25% besonders hoch. An anderen Standorten werden wiederum noch keine Beschleuniger verwendet (z.B. Bochum, Duisburg-Essen, Wuppertal). Der Bedarf an Beschleunigern im HPC Kontext wird auch daran deutlich, dass die Befragten von Zentren ohne GPUs dezentral diese Technologie schon im großen Stil einsetzen, z.B. in Siegen (17%).

Auch bei den Multibeschleunigern (z.B. mehrere GPUs mit P2P, Nvidia NVLINK, FPGAs mit direktem Interconnect) ist das Interesse an der Technologie ausgeprägt ([abb. 16](#)). Eingesetzt werden Multibeschleuniger bereits bei 8% der Befragten. Vorreiter sind hier Bielefeld und Bonn mit 42% und 19%. NRW-weit arbeiten zudem 5% der Befragten an der Entwicklung von Multibeschleunigerfähigen Programmen und weitere 23% würden diese Technologie gerne einsetzen. Natürlich sind nicht alle Anwendungen hierfür geeignet und so antworteten 26%, dass der Einsatz von Multibeschleunigern bei ihnen keinen Sinn machen würde. Etwa 1/3 der Befragten ist mit dieser Technologie noch nicht vertraut.

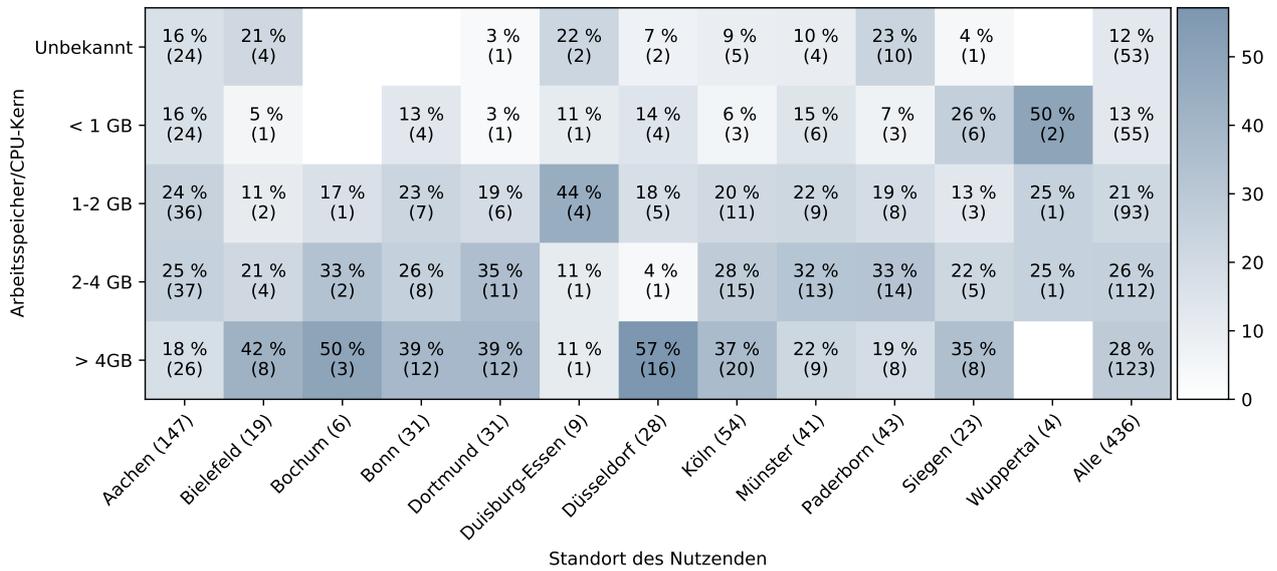


Abbildung 12: Benötigter Arbeitsspeicher je CPU-Kern nach Standort. Die Darstellung ist in Sektion 1 genauer beschrieben.

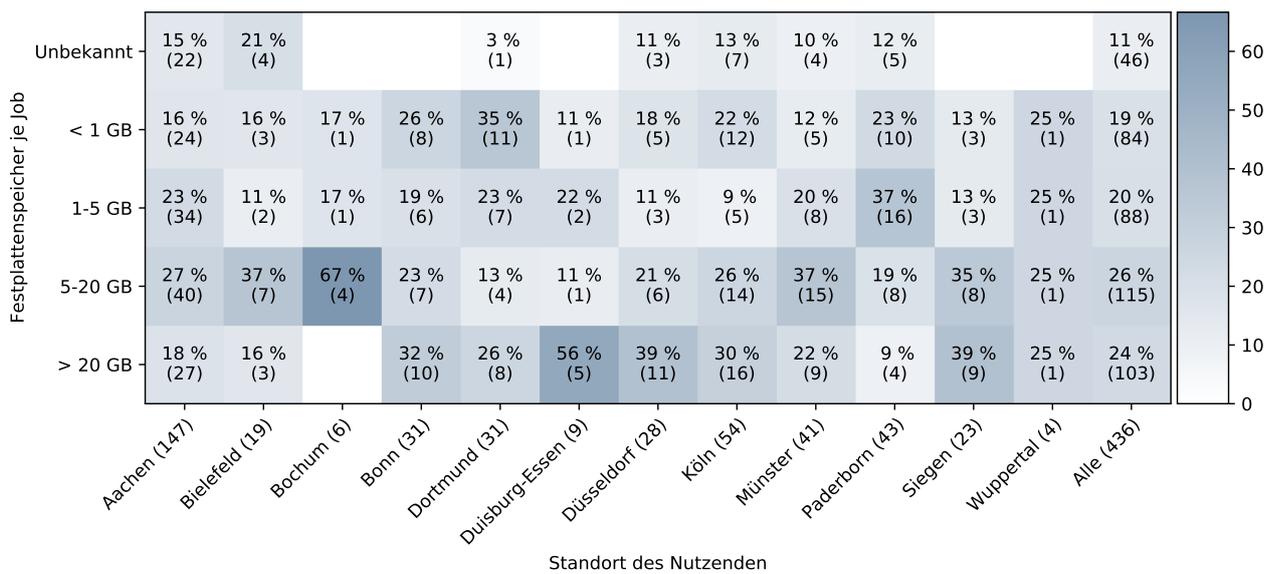


Abbildung 13: Benötigter Festplattenspeicher je Job nach Standort. Die Darstellung ist in Sektion 1 genauer beschrieben.

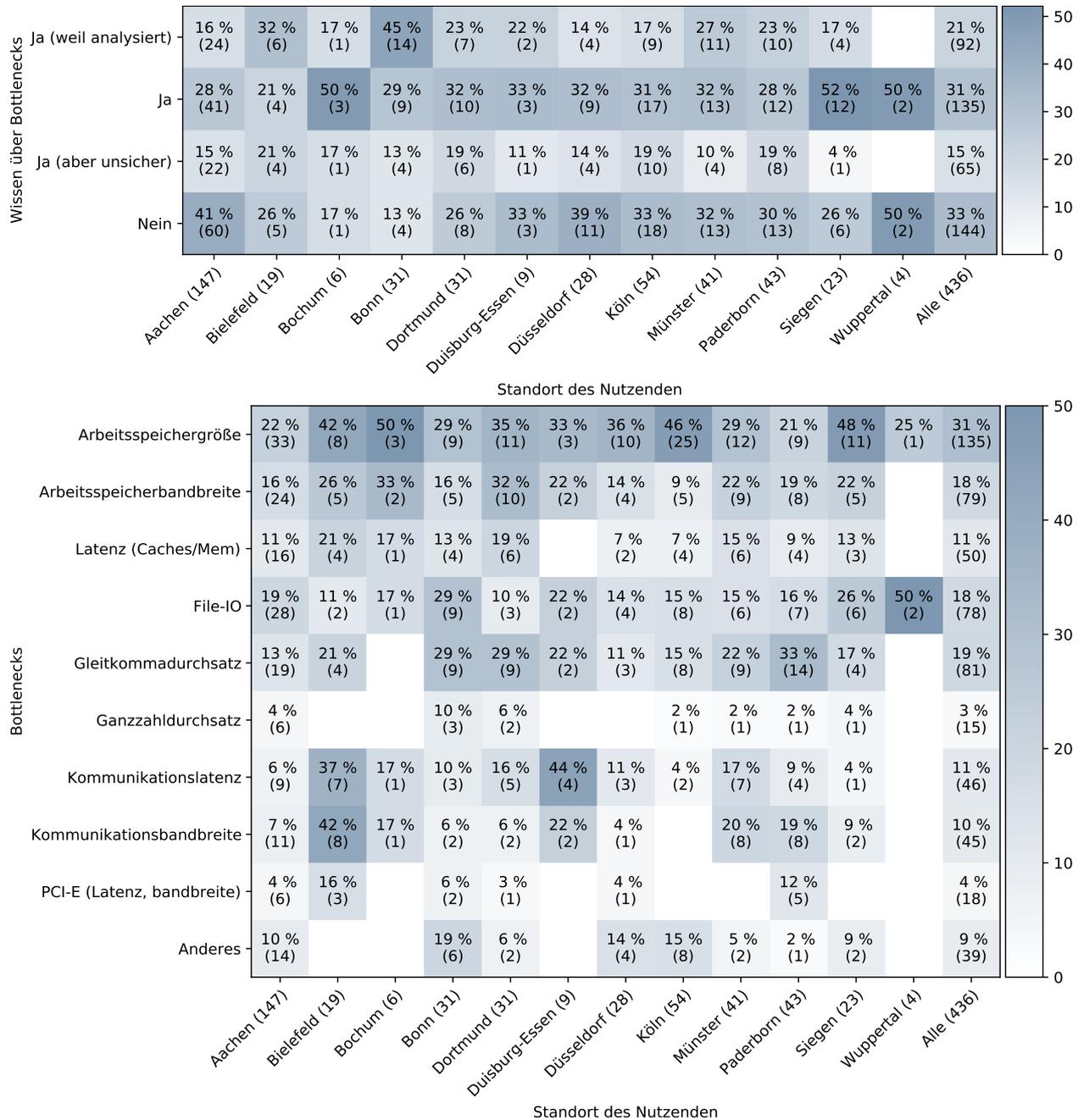


Abbildung 14: Wissen über Bottlenecks (oben) und Bottlenecks der Befragten nach Standort. Die Darstellung ist in [Sektion 1](#) genauer beschrieben.



Abbildung 15: Verwendung von Beschleunigern der Befragten nach Standort. Die Darstellung ist in Sektion 1 genauer beschrieben.

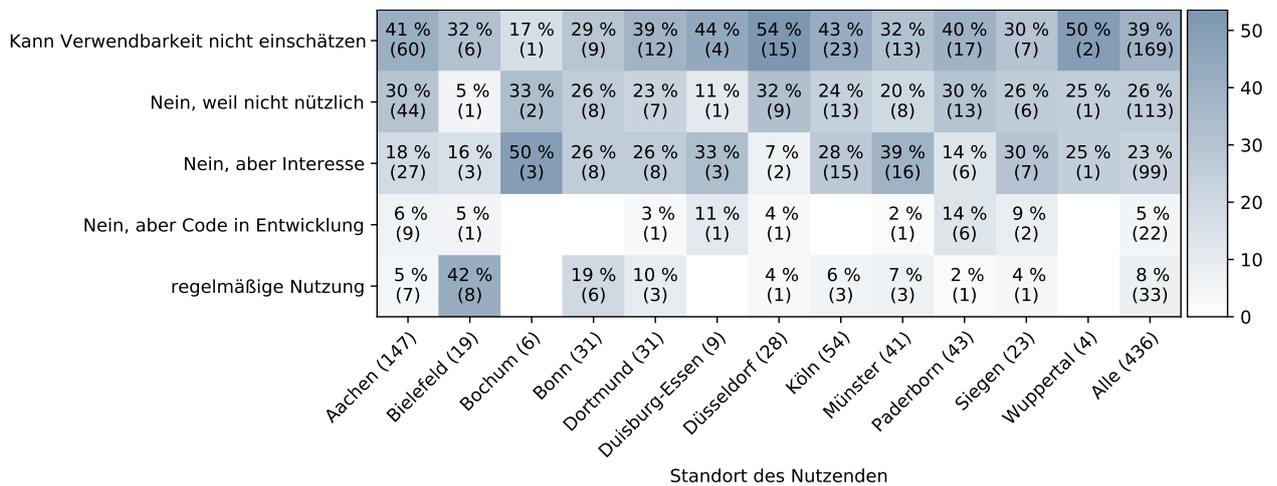


Abbildung 16: Verwendung oder Interesse an Nutzung von mehreren Beschleunigern nach Standort. Die Darstellung ist in [Sektion 1](#) genauer beschrieben.

7 Performance-Analyse und Debugging

Etwa ein Drittel der Befragten (36%) führt keine Performance-Analysen oder Profiling durch, weil sie entweder mit entsprechenden Tools und Techniken nicht vertraut sind (57%), es nicht für notwendig halten (26%) oder wissen, dass sich jemand anderes darum kümmert (5%). Die übrigen gaben an, (noch) keine Zeit dafür gehabt zu haben oder bereits hoch optimierte Software einzusetzen. Dagegen werden elementare Analysen von 42% der Befragten durchgeführt und 23% setzen gezielt Tools für die Performance-Analyse ein.

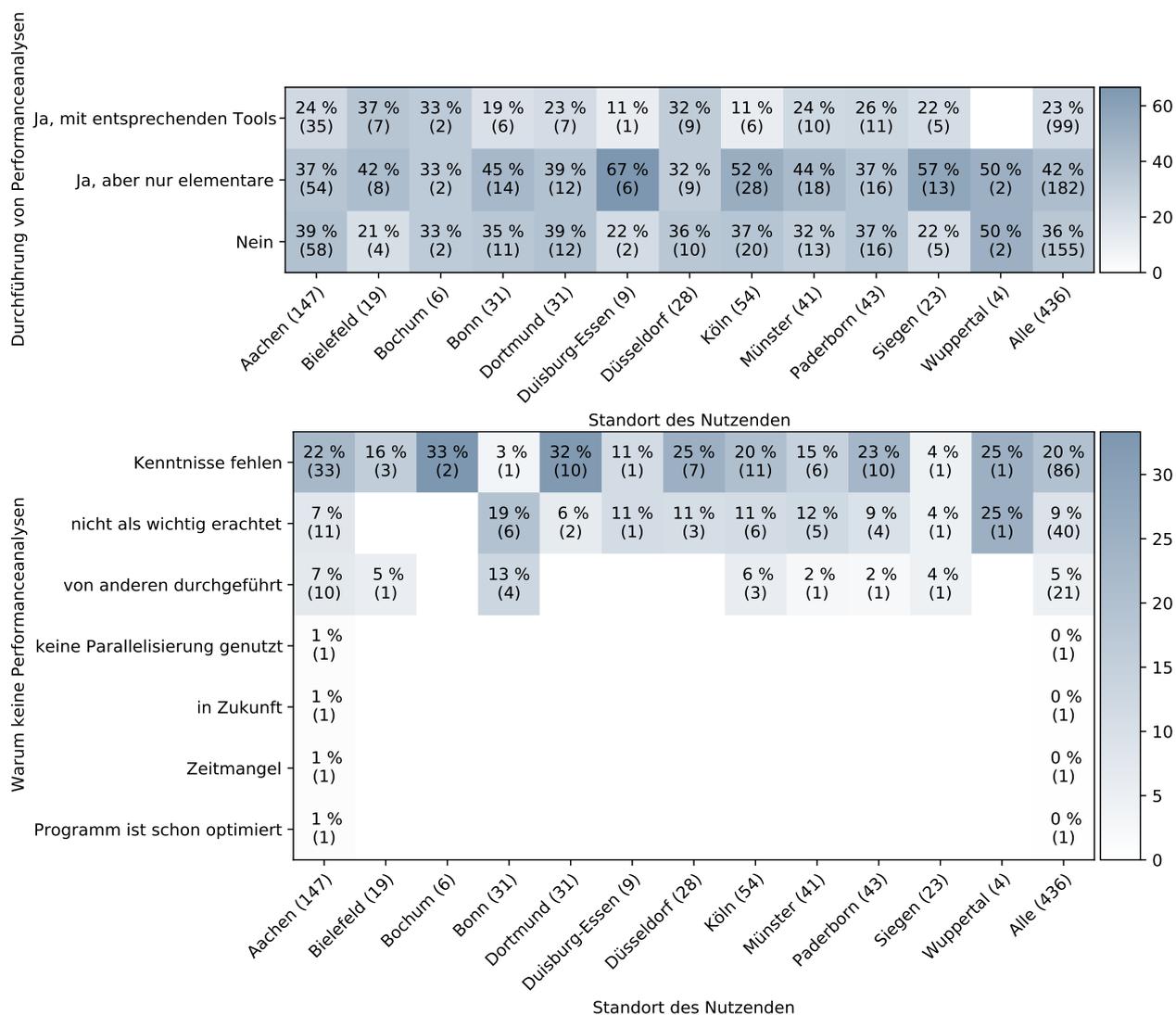


Abbildung 17: Durchführung von Performance-Analysen und Gründe. Die Darstellung ist in [Sektion 1](#) genauer beschrieben.

Auf die Frage, wie in parallelen Programmen die Fehlersuche und -behebung durchgeführt wird ([Abb. 18](#)), gaben 27% der Antwortenden an, eine Fehlersuche (Debugging) nicht zu benötigen. Aufgrund fehlender Kenntnisse zu Tools und Techniken führen 38% der Befragten keine Fehlersuche in parallelen Programmen durch. Somit sind nur ein Drittel der Befragten mit dem Debugging vertraut. Davon verwenden $\frac{2}{3}$ (23% aller Befragten) einfache textuelle Ausgaben (print-Statements) und $\frac{1}{3}$ (10%) setzen auch entsprechende Tools ein.

Wie in [Abbildung 19](#) zu sehen werden als häufigste HPC-Tools der GNU-Debugger (14%) und Valgrind (13%) verwendet. Weitere Tools wie Intel Performance Tools (8%), Gprof (7%) und Totalview (6%) wurden nur selten genannt. Zusätzlich zu den vorgegebenen Antwortmöglichkeiten, die alle weniger als 16 Nennungen ($\hat{=}$ 3%) hatten, wurden im zugehörigen Freitextfeld noch ver-

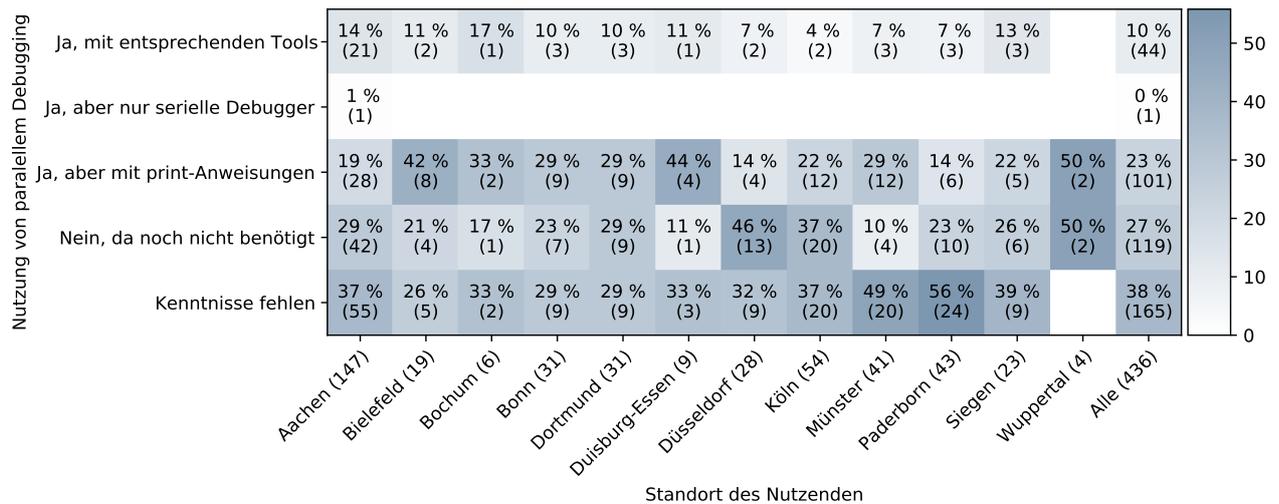


Abbildung 18: Nutzung von (parallelem) Debugging. Die Darstellung ist in [Sektion 1](#) genauer beschrieben.

schiedene GPU Profiler oft genannt (Nvidia NSight, Nvidia Visual Profiler, CUDA Profiling Tools Interface).

Etwa 47% der Befragten wollen in Zukunft keine weiteren Tools nutzen, da sie nach eigener Einschätzung keine weiteren Werkzeuge benötigen ([Abb. 20](#)). Etwa 11% der Befragten möchten in Zukunft zusätzlich Intel-Tools zur Performanceanalyse zusätzlich nutzen sowie 10% den GNU-Debugger und 8% Valgrind. Insgesamt haben aber 6% zusätzlich im Freitext angegeben, dass sie keine Kenntnisse über die aufgeführten Tools haben oder sich unsicher sind, welche Tools für ihre Anwendungen geeignet sind, und somit keine Auswahl treffen konnten. Es empfehlen sich also Überblicksveranstaltungen in denen viele Tools kurz besprochen werden um bei den Nutzenden Bewusstsein für die Existenz und die Möglichkeiten zu schaffen.

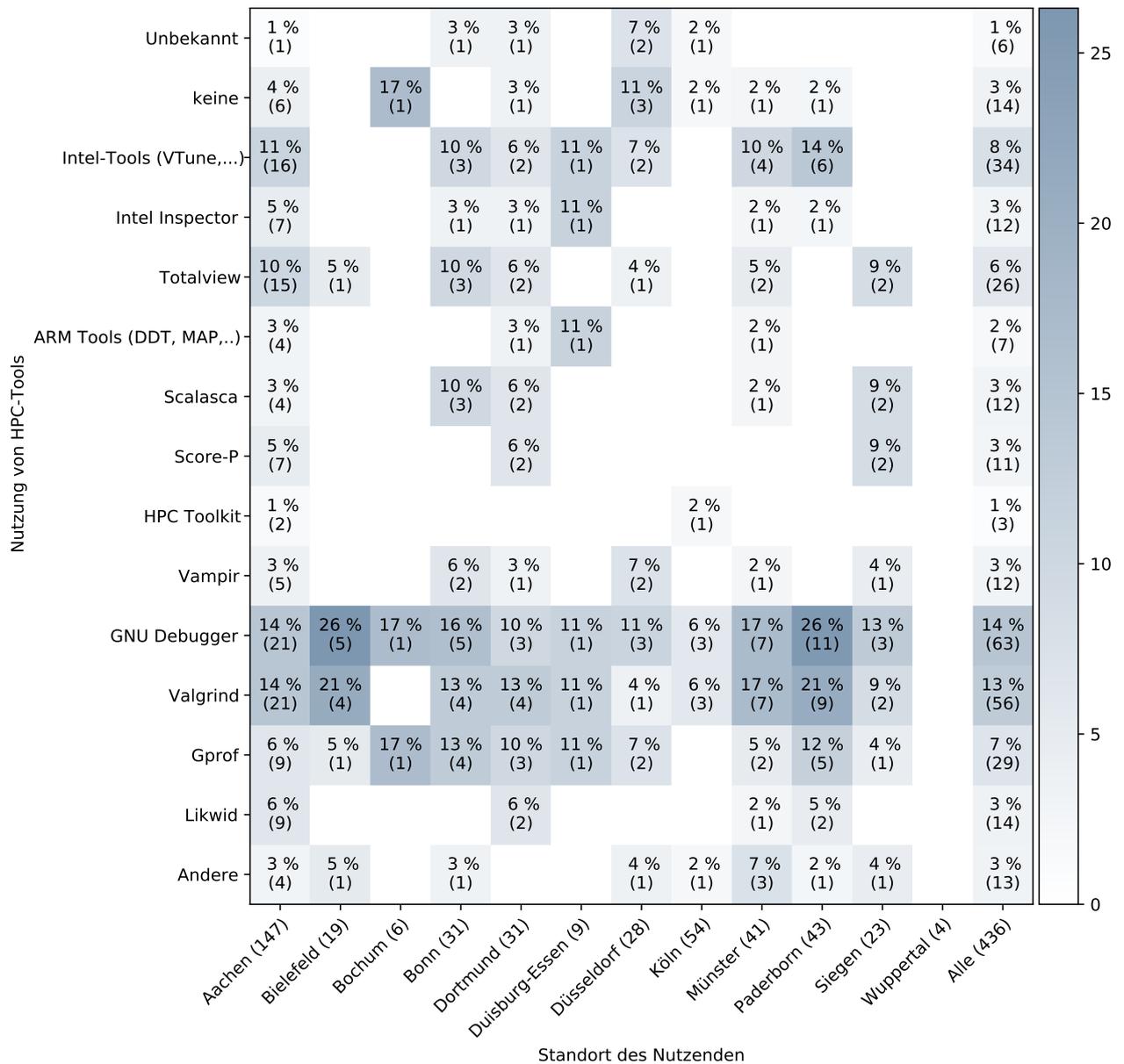


Abbildung 19: Nutzung von HPC-Tools durch die Befragten. Die Darstellung ist in Sektion 1 genauer beschrieben.

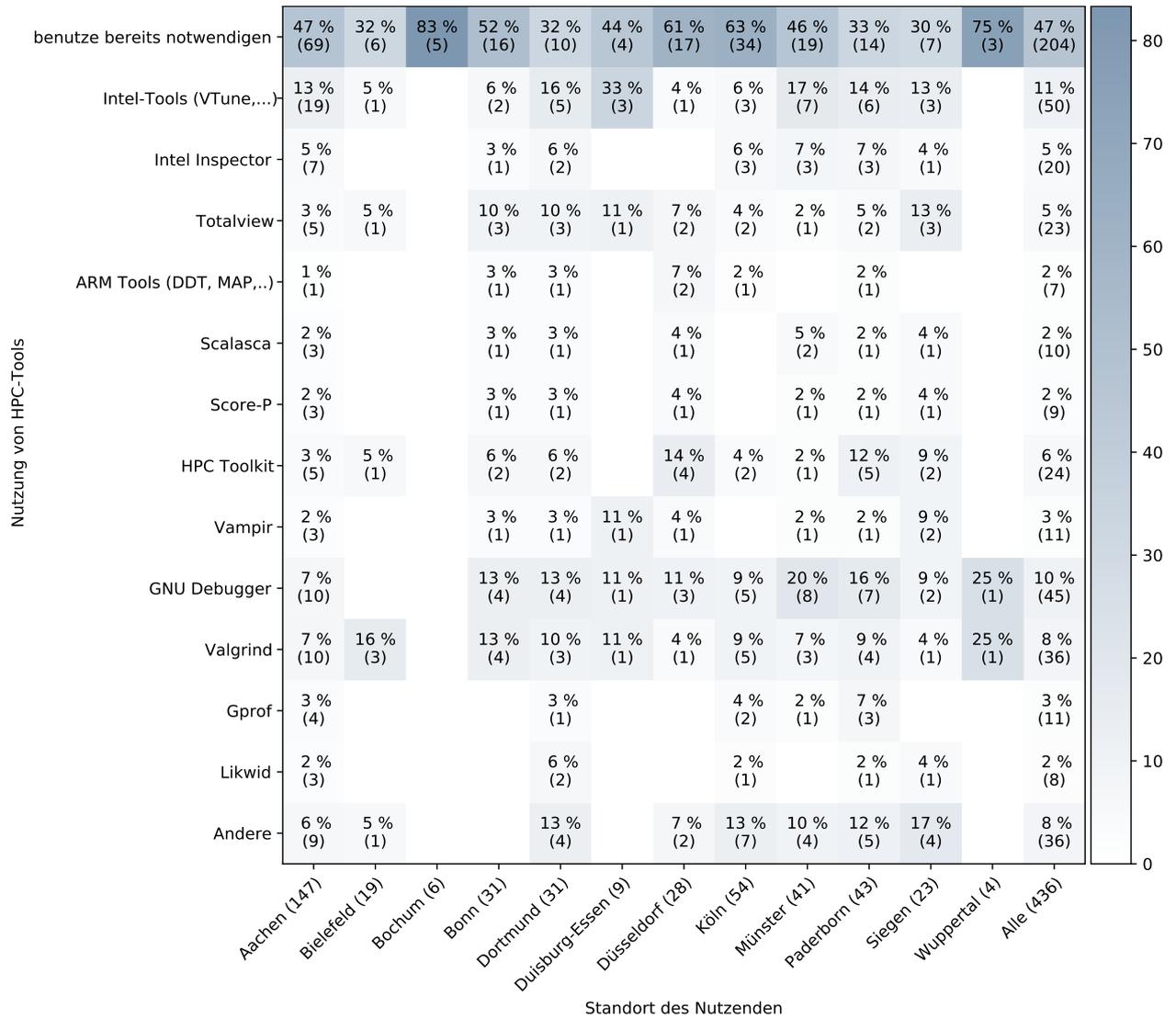


Abbildung 20: Gewünschte Nutzung von HPC-Tools durch die Befragten. Die Darstellung ist in Sektion 1 genauer beschrieben.

8 HPC-Basissoftware

Compiler und MPI

Zusätzlich zur Nutzung von HPC-Tools, die bereits in Kapitel 7 beschrieben worden ist, wurde die Nutzung von HPC-Basissoftware wie Compiler, Bibliotheken und Werkzeuge in Multiple-Choice und optionalen zusätzlichen Freitextfeldern in der Befragung erfasst. In diesem Bereich ist die erste relevante Frage zur Nutzung von Software, ob Nutzende selbst Software zur Nutzung auf den HPC-Systemen kompilieren. Die Statistik der Antworten ist in Abbildung 6 gezeigt. Im Durchschnitt kompilieren 50%-95% der Befragten Software zur Nutzung auf den HPC-Systemen (auch) selbst. Dies zeigt, wie wichtig die Bereitstellung einer Bandbreite von verschiedenen Compilern, Bibliotheken und Entwicklungswerkzeugen auf HPC-Clustern ist. Besonders Nutzende des Bielefelder HPC-Systems fallen in dieser Auswertung durch eine hohe Rate auf. Ein wahrscheinlicher Grund dafür ist die spezielle Architektur dieses Clusters als reines GPU-Cluster (<https://www2.physik.uni-bielefeld.de/gpu-cluster.html>) und die starke anwendungsspezifische Ausrichtung des Systems.

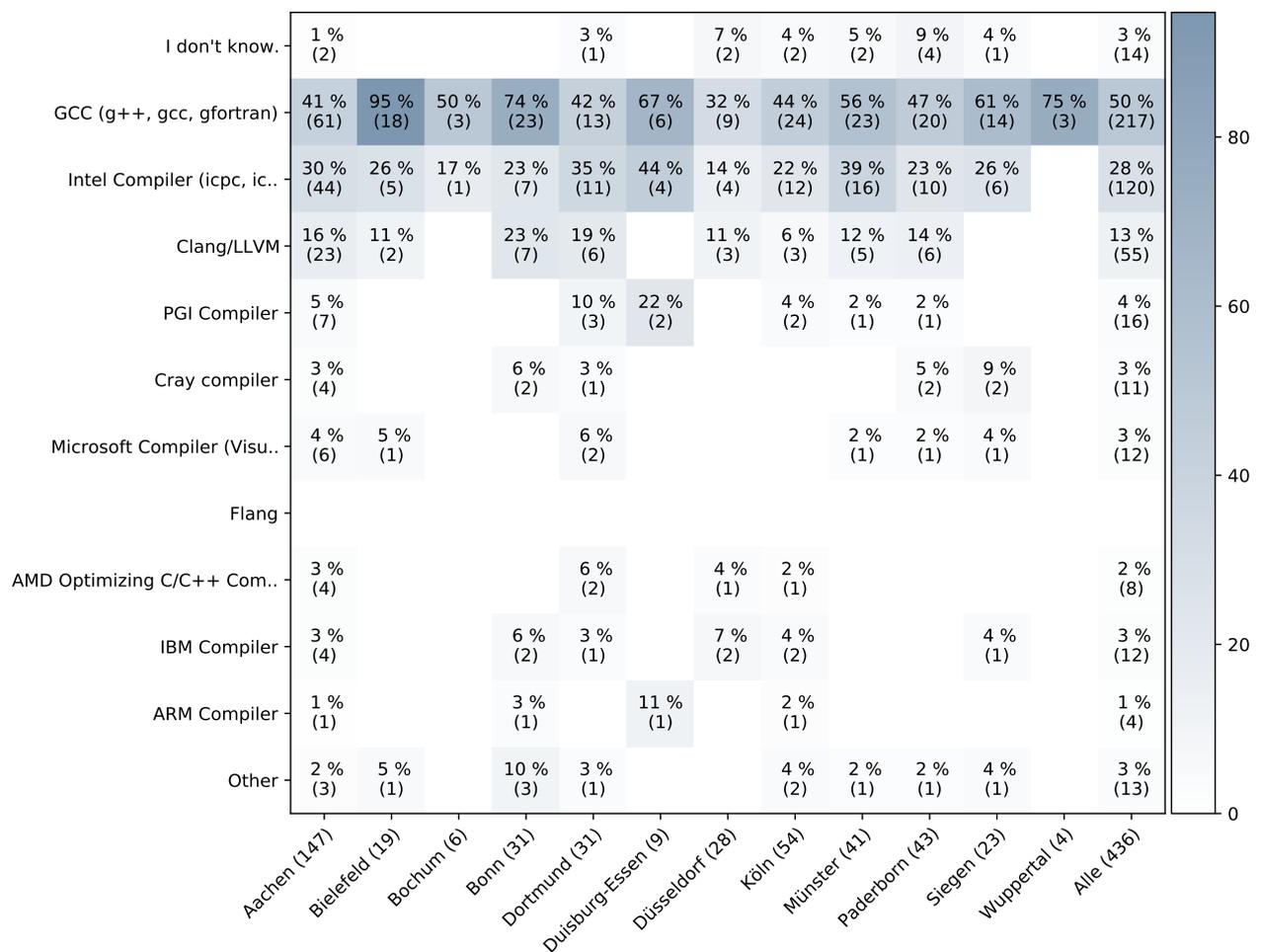


Abbildung 21: Von Befragten angegebene Nutzung von Compilern.

In Abbildung 21 sind die Angaben zur Nutzung von Compilern zusammengefasst. Dabei sind die Compiler der GNU Compiler Collection (GNU, gcc, g++, gfortran) klar dominant in der Nutzung, gefolgt von Intel Compilern und Clang als LLVM-basierten Compiler, der im HPC-Umfeld noch relativ neu ist.

Insbesondere durch die wieder wachsende Bedeutung von AMD-CPU's und ARM-basierten Systemen im HPC-Umfeld, wird die Bedeutung des GCC-Compilers sowie von Clang als auch anderen auf LLVM-basierenden Compilern, wie dem AMD Optimizing C/C++ Compiler (aocc) und Flang

voraussichtlich weiter wachsen. Außerdem erzeugt die wachsende Verwendung von nicht-Intel-CPU's wichtige performancekritische Herausforderungen an die korrekte Verwendung von Intel-Compilern, sodass diese auch auf anderen Architekturen effizienten Code generieren. Für die Herausforderungen muss zuerst ein allgemeines Bewusstsein geschaffen und diese dann vor allem im HPC-Support adressiert werden.

In Bezug auf die Verwendung von MPI-Implementierungen ergibt sich ein ähnliches Muster: eine freie Implementation, hier OpenMPI mit insgesamt 38%, führt die Statistik an. Dem schließt sich eine Implementation von Intel (Intel MPI) mit insgesamt 22% an, gefolgt von MPICH mit 10 %.

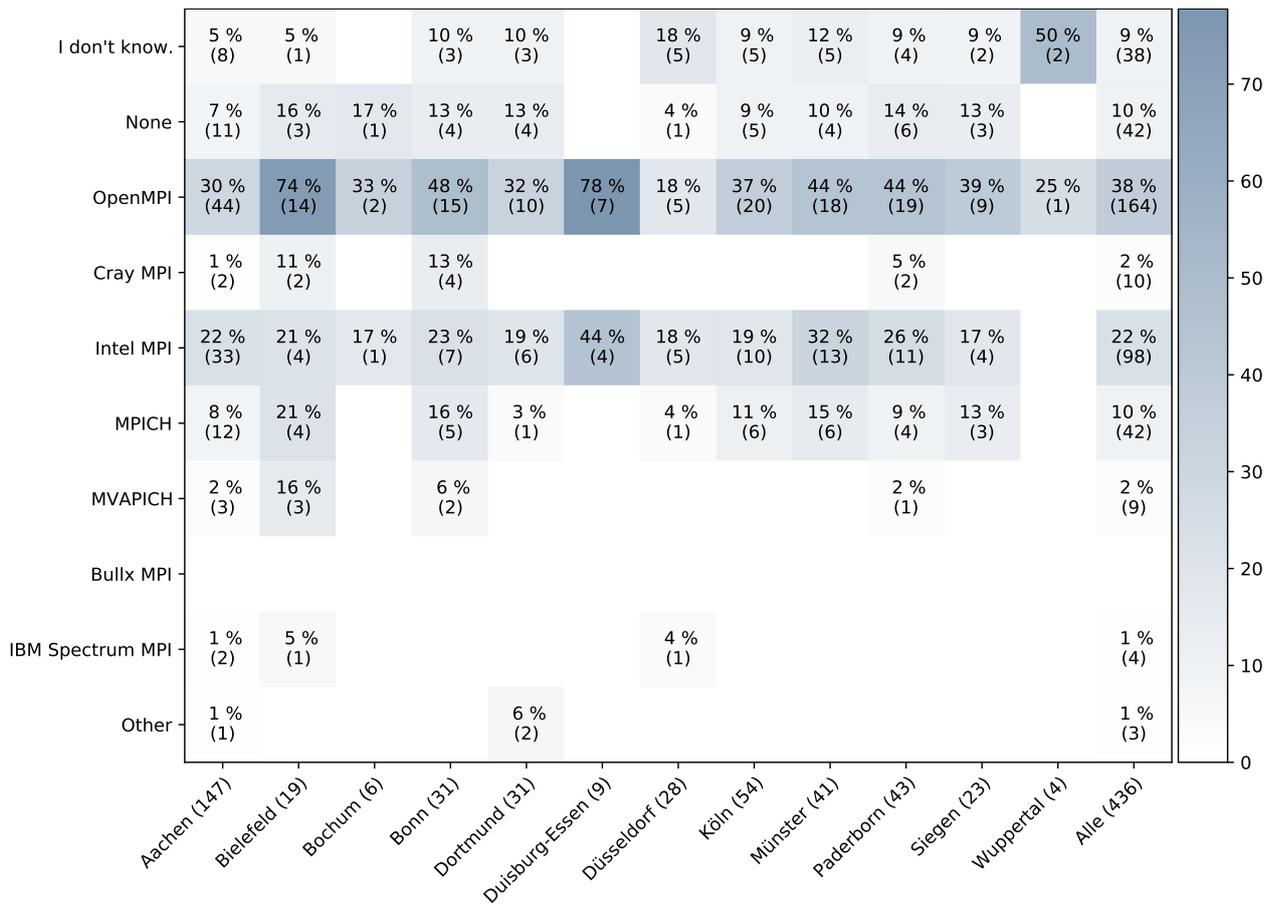


Abbildung 22: Von Befragten angegebene Nutzung von MPI-Implementierungen.

Bibliotheken

Neben Fragen zur Nutzung von Compilern und MPI-Implementationen, enthielt die Nutzendenbefragung auch Fragen zur Verwendung von Bibliotheken. Dabei waren die in Abbildung 23 gelisteten Antworten vorgegeben und es wurden hier auch viele weitere im zugehörigen Freitextfeld angegeben. Für CPU-Systeme werden vor allem die MKL, OpenBLAS, FFTW und Eigen benutzt. Ähnlich viele Befragte, die angaben, die Intel MKL zu nutzen, führten auf, die numerischen Bibliotheken von Nvidia (cuBLAS,...) zu nutzen. Jedoch kamen diese Angaben vorwiegend von Clustern, die GPU ausschließlich, wie das Bielefelder Cluster, oder in großem Umfang, wie Aachen oder Paderborn, zur Verfügung haben. In den Freitextantworten wurden vor allem HDF5, netcdf5, GSL, Trilinos und ELPA genannt.

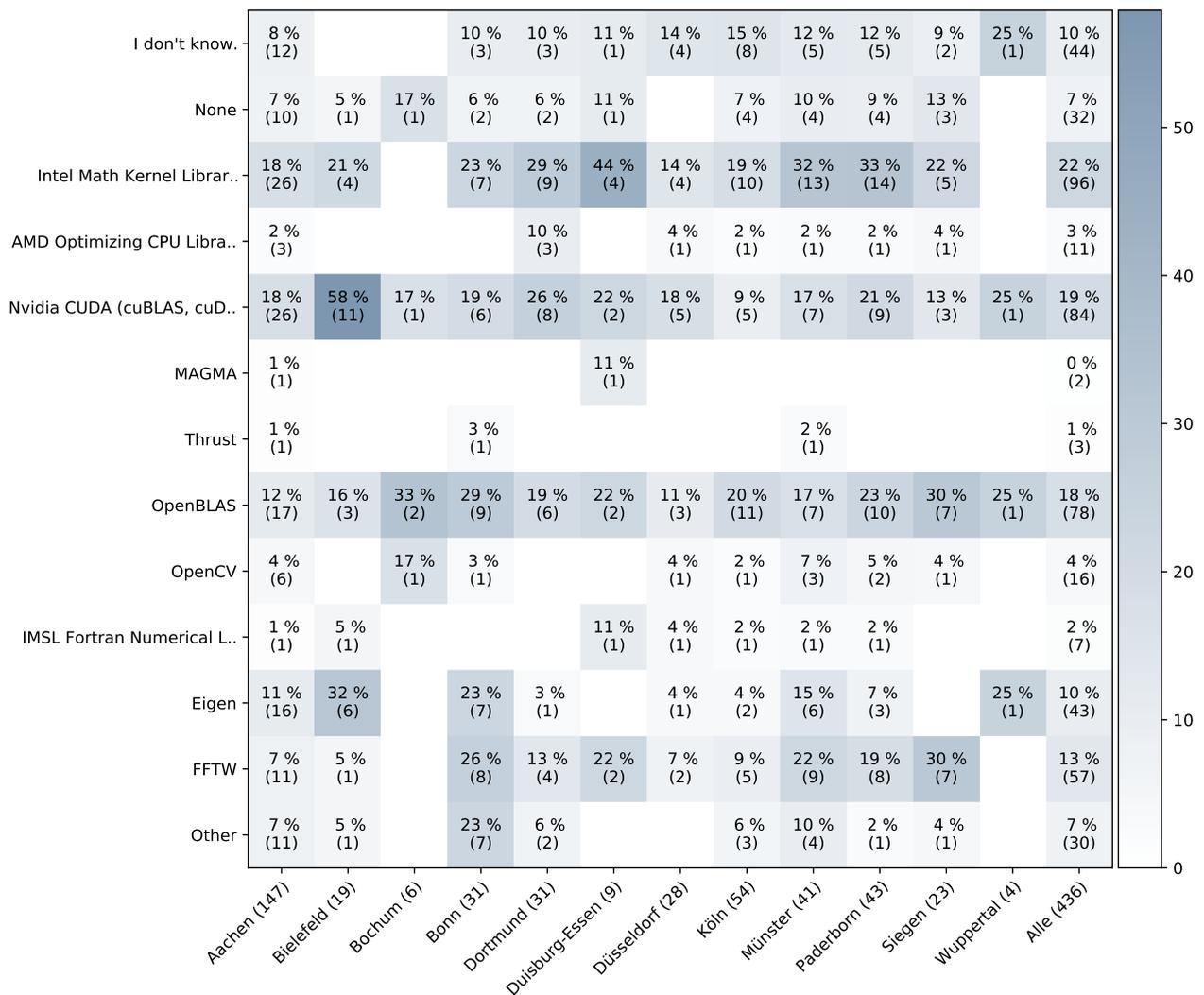


Abbildung 23: Von Befragten angegebene Nutzung von Bibliotheken. Die Darstellung ist in Sektion 1 genauer beschrieben.

Nutzung von Zugangssoftware

Die Erstellung und Submittierung von Compute-Jobs bilden die Kerninteraktion von Nutzenden mit einem HPC-System. Abbildung 24 zeigt die von den Teilnehmenden dafür verwendeten Programme/Wege. Wie erwartet, bilden kommandozeilenbasierte und graphische SSH-Clients den Hauptzugangsweg. Insbesondere Nutzende des Aachener Systems verwenden jedoch auch in signifikantem Maße Remote-Desktop-Lösungen. Die Job-Submittierung über Anwendungen wie Matlab, Ansys und ähnliche, mit denen direkt vom Desktop des Nutzenden Jobs zum HPC-System übermittelt werden können, sind in der Unterzahl bei der Nutzung. Bei den in Zukunft gewünschten Zugangswegen sind diese Mechanismen jedoch zusammen mit Remote-Desktop-Lösungen sehr stark vertreten, wie in Abbildung 25 deutlich wird. Das zeigt, dass Betriebskonzepte für HPC-Systeme solche Wege zukünftig mehr in den Fokus rücken müssen. Bezüglich des Zugangs zum HPC-System gaben die Befragten im Freitextfeld an, dass das Arbeiten mit der Kommandozeile sehr mühselig sei und viel Einarbeitungszeit bedarf. Auch die schlechte Verfügbarkeit von graphischen Clients, wie x2go, stabilen ssh Verbindungen und die längere Sperrung der Zugänge nach dem Sicherheitsvorfall, ist ein Thema bei den Befragten.

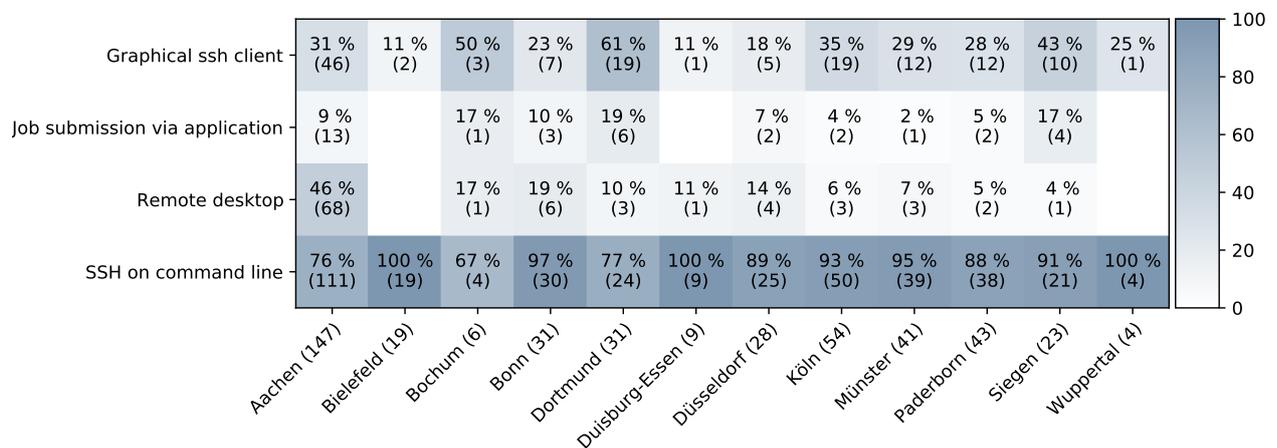


Abbildung 24: Für die Job-Submittierung genutzte Software. Die Darstellung ist in [Sektion 1](#) genauer beschrieben.

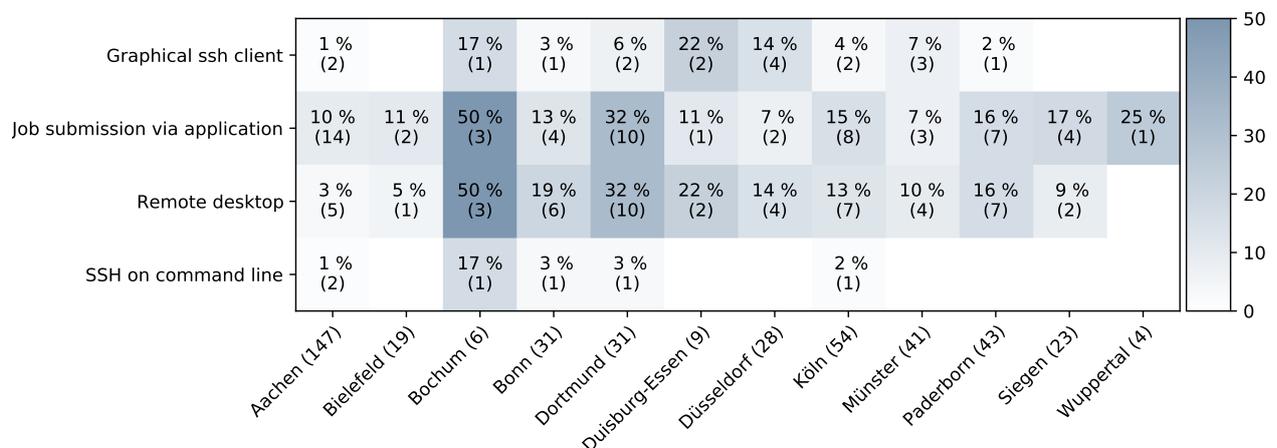


Abbildung 25: Für die Job-Submittierung gewünschte Software. Die Darstellung ist in [Sektion 1](#) genauer beschrieben.

Für den Zugang zu Daten auf dem HPC-System werden laut [Abbildung 26](#) vorwiegend SCP oder die direkte Bearbeitung der Daten auf dem HPC-System verwendet. Spezielle NFS/CIFS/SMB Exports, die von einigen HPC-Systemen angeboten werden (z.B. Paderborn), werden nur im ein-

stelligen Prozentbereich genutzt. Dabei ist klar, ob dies an technischen Herausforderungen für die Nutzenden liegt oder die Bekanntheit solcher Wege verbessert werden muss. In der gewünschten zukünftigen Nutzung liegen die Exports (Abb. 27) im oberen Bereich des ansonsten recht homogen verteilten Spektrums von Antworten. Interessanterweise sind Lösungen wie SSHFS durchaus von den Befragten noch gewünscht. Die Befragten gaben als weitere Software, die sie für den Datentransfer nutzen, noch sftp, rsync und XRootD/WebDAV an. Einige beschrieben nicht den Zugriff auf die Daten als Problem, sondern vielmehr das Austauschen der Daten mit Personen anderer Institutionen. Hier werden Lösungen wie GridFTP oder Globus gewünscht. Seitdem ein Zugang zu vielen HPC-Systemen nur noch über VPN möglich ist, erfahren die Befragten nach eigenen Angaben längere Transferzeiten.

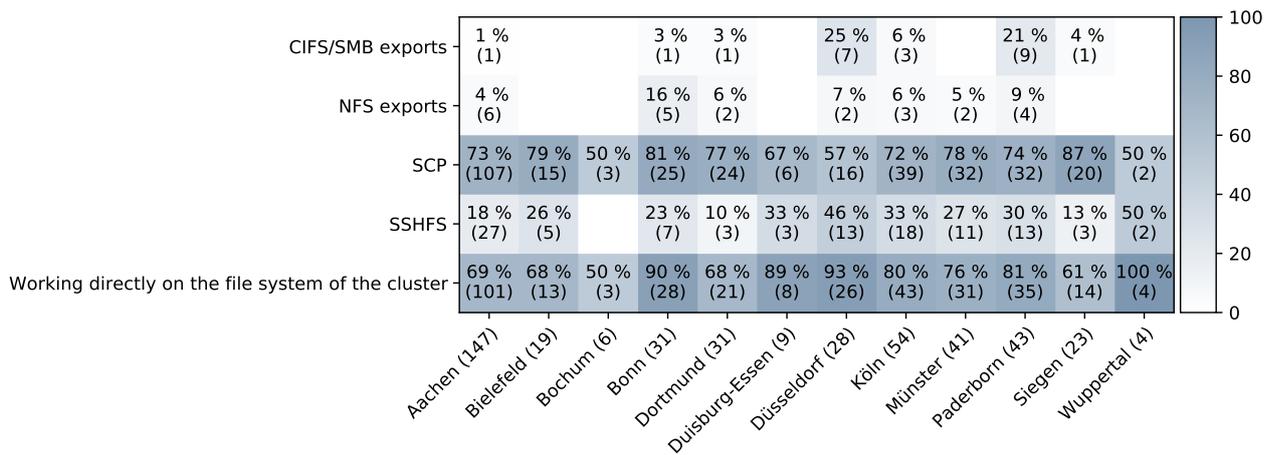


Abbildung 26: Für den Zugang zu Daten genutzte Software. Die Darstellung ist in [Sektion 1](#) genauer beschrieben.

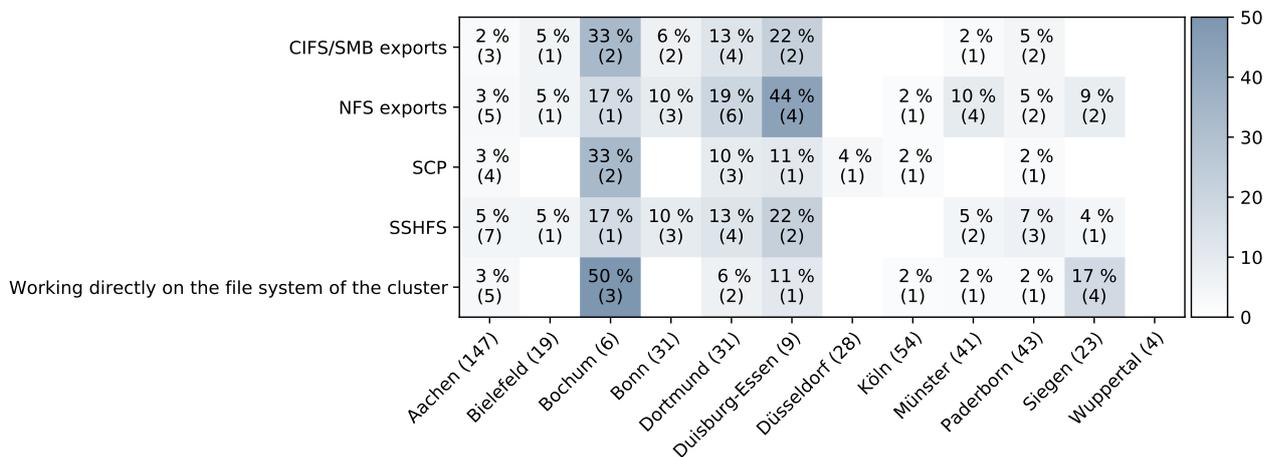


Abbildung 27: Für den Zugang zu Daten gewünschte Software. Die Darstellung ist in [Sektion 1](#) genauer beschrieben.

Nutzung von Jupyter-Notebooks

Jupyter Notebooks stellen einen modernen und flexiblen Weg dar HPC-Systeme mit Sprachen wie Python, Julia oder anderen zu benutzen. Wie Abbildung 28 zeigt, ist die Etablierung solcher Dienste und die effiziente Integration in HPC-Systeme noch am Anfang, da die Nutzung von Jupyter-Notebooks an den meisten Standorten im einstelligen Prozentbereich rangiert. Diese jetzige geringe Nutzung steht im starken Kontrast zur von den Teilnehmenden gewünschten zukünftigen Nutzung in Abb. 29. Zwischen etwa 20% und 50% der Befragten (variiert nach Standort) wünschen sich solche Dienste oder den Ausbau von existierenden Diensten.

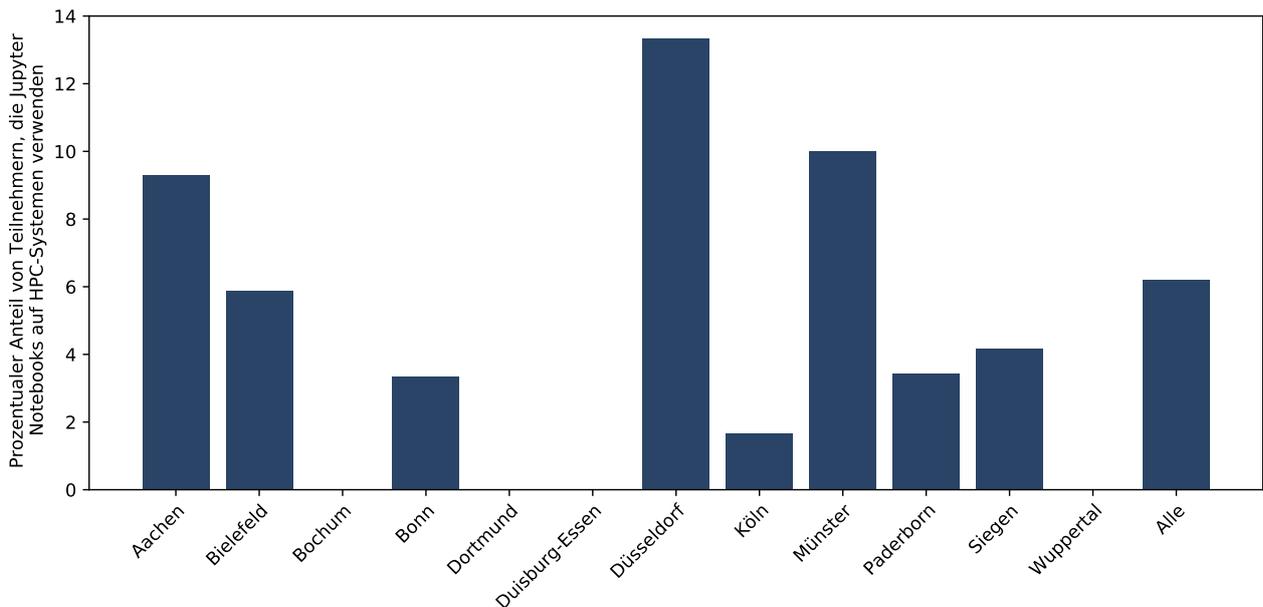


Abbildung 28: Nutzung von Jupyter-Notebooks auf HPC-Systemen.

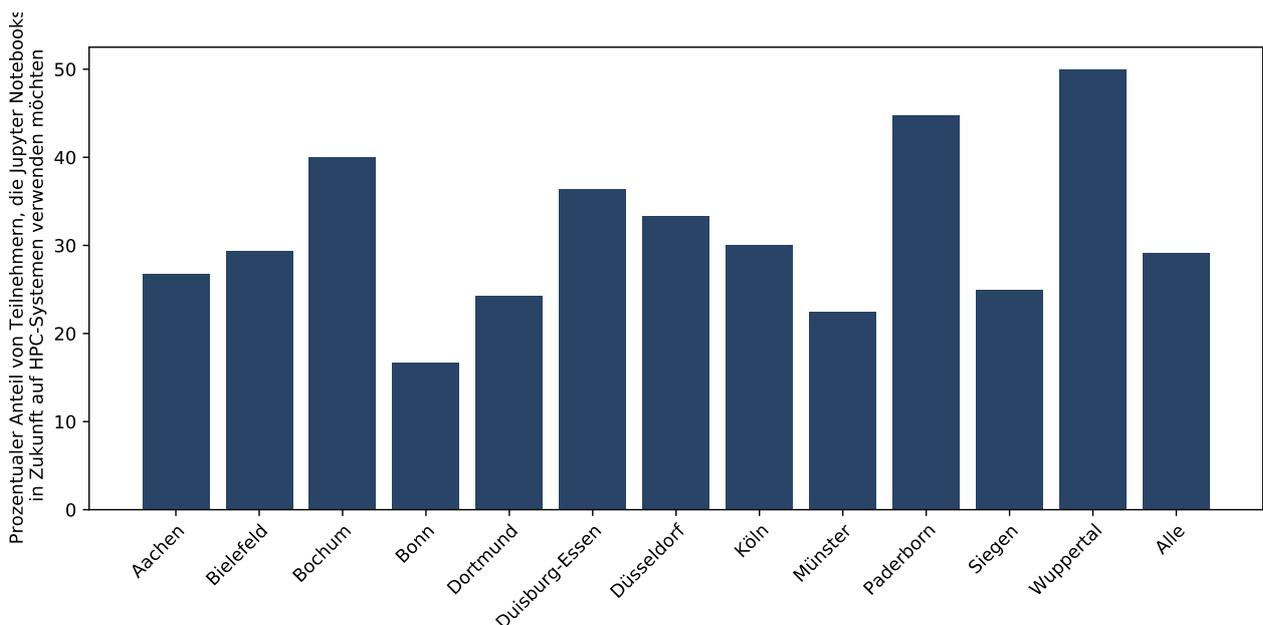


Abbildung 29: Gewünschte Nutzbarkeit von Jupyter-Notebooks auf HPC-Systemen.

Nutzung von Softwarecontainern

Eine ähnlich disruptive Technologie wie Jupyter Notebooks sind Softwarecontainer. Diese können das Deployment von Software und insbesondere die Reproduzierbarkeit von wissenschaftlichen Simulationen stark verbessern, bringen jedoch auch interessante neue Herausforderungen mit sich. Die Verteilung der Nutzung auf die bekannten Softwarecontainerlösungen ist in Abbildung 30 gezeigt. Dabei dominieren Singularity und Docker die derzeitige Nutzung klar. Gefragt nach der zukünftigen gewünschten Nutzung, die in Abbildung 31 dargestellt ist, legen die Teilnehmenden eine Priorität auf Docker-basierte Container, die in der Auswertung von Singularity und Kubernetes gefolgt wird. Da konventionelle Docker-Container für das HPC-Umfeld ungeeignet sind, sollten die Standorte mit hoher Nachfrage nach Docker-Containern entweder vollständig unprivilegierte Docker-Container auf den HPC-Systemen ermöglichen oder die Nutzenden über die Konvertierung von Docker- zu Singularity-Containern schulen.

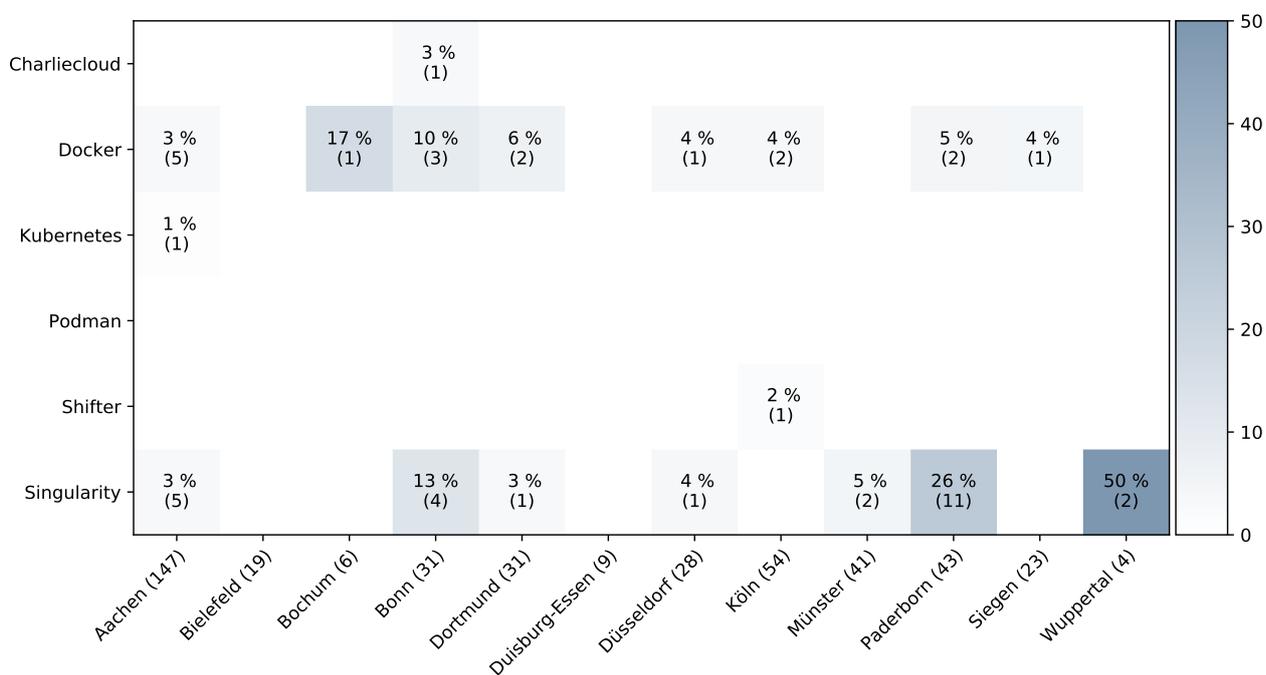


Abbildung 30: Nutzung von Softwarecontainern auf HPC-Systemen.

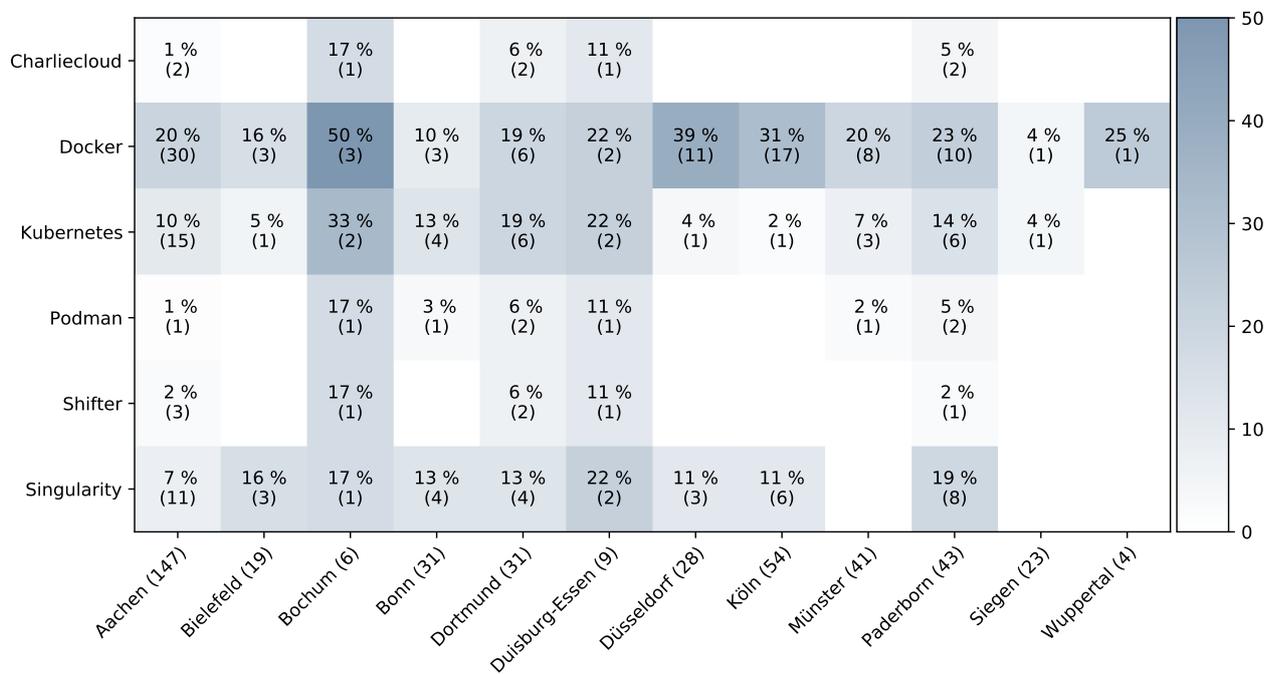


Abbildung 31: Gewünschte Nutzung von Softwarecontainern auf HPC-Systemen.

9 Wissenschaftliche Software

Softwaretypen

Gefragt nach der Nutzung von In-house, Open Source oder kommerzieller Software gaben die meisten Befragten an, Open Source Software (69%) zu nutzen, gefolgt von self-developed/In-house Software (58%) und kommerzieller Software (31%). Hierbei sind die Fluktuationen nach Standorten gering. Auch die relativ geringe Abhängigkeit von kommerzieller Software ist erwähnenswert. Die Verwendung von viel selbst entwickelter oder In-House-Software stellt hohe Anforderungen an die Programmier- und Optimierungskennnisse der Nutzenden, was damit auch sehr hohe Ansprüche an die HPC-Weiterbildungsprogramme der Standorte stellt.

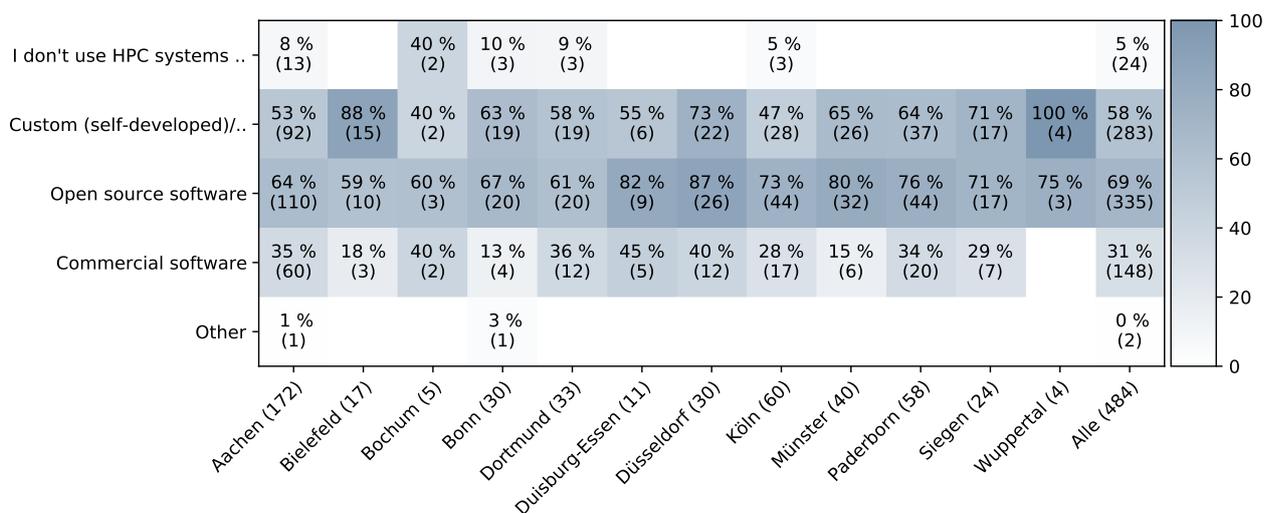


Abbildung 32: Nutzung von verschiedenen Software-Typen. Die Darstellung ist in [Sektion 1](#) genauer beschrieben.

Erhebung

Die Erfassung der Nutzung von wissenschaftlicher Software über die Nutzendenbefragung ist wegen der Vielzahl an denkbarer Software eine große Herausforderung. Hier hatten wir uns für ein großes Freitextfeld entschieden, was den Teilnehmenden der Umfrage das Ausfüllen leicht machte, da nicht lange Listen oder Untermenüs von Software durchsucht werden mussten, jedoch den Aufwand auf die Auswertung verschob.

Nutzung

In der Analyse der Antworten wurden 263 verschiedene Softwares gefunden. Die Statistik der 25 meistgenannten Softwares ist in Abbildung 34 dargestellt. Insgesamt die meisten Angaben entfielen dabei auf Tensorflow, Matlab und Pytorch. Diesen folgten Programmen für Quantenchemie und Festkörperphysik (VASP, Gaussian, ORCA, LAMMPS, Gromacs, CP2K und Quantum Espresso) sowie Software der Ingenieurwissenschaften wie OpenFOAM und Abaqus. Weitere Hot-Spots außer Tensorflow, Matlab und Pytorch sind erkennbar. Zum Beispiel:

- Turbomole in Münster,
- ROOT in Bonn und Wuppertal,
- Abaqus in Siegen.

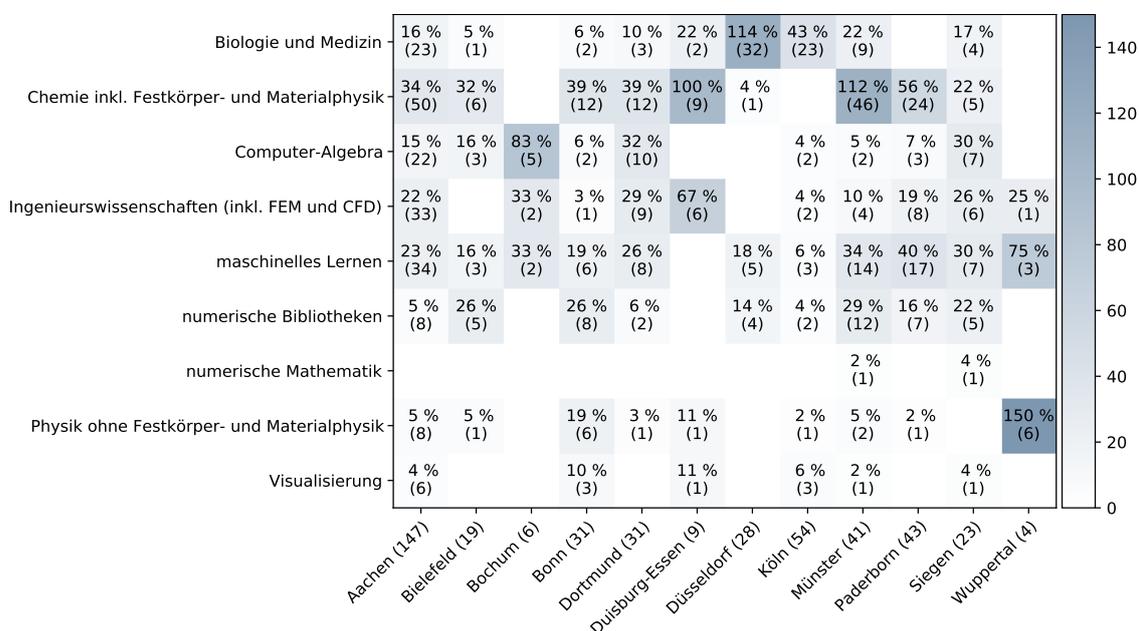


Abbildung 33: Von Befragten genutzte wissenschaftliche Software nach Bereichen. Die Darstellung ist in [Sektion 1](#) genauer beschrieben.

Zusätzlich zur Einzelaufistung wurden die in der Umfrage genannten Programme in Bereiche eingeordnet. Dadurch ergibt sich die in [Abbildung 33](#) gezeigte Verteilung der Angaben zu Nutzung von HPC-Software nach Bereichen. Hier sind Schwerpunkte erkennbar, zum Beispiel:

- Biologie und Medizin in Düsseldorf und Köln,
- Chemie in Münster, Duisburg-Essen, Paderborn und weiteren
- sowie Physik, außer Festkörper- und Materialphyik, in Wuppertal und Bonn.

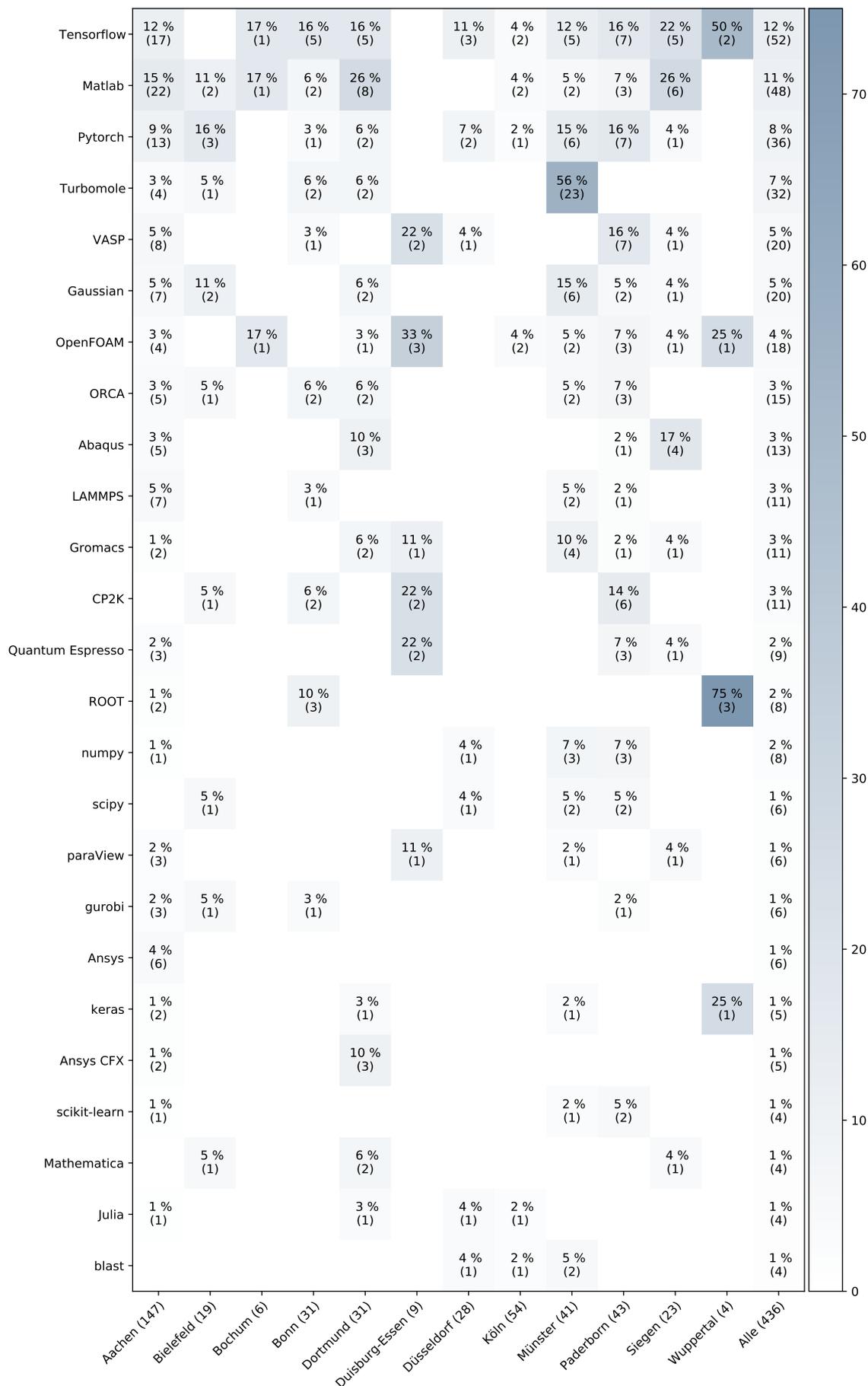


Abbildung 34: Von Teilnehmern genutzte wissenschaftliche Software (Top 25). Die Darstellung ist in Sektion 1 genauer beschrieben.

Nutzungs- und Supportwünsche

Zusätzlich zur jetzigen Nutzung von wissenschaftlicher Software auf HPC-Systemen wurde auch die gewünschte zukünftige Nutzung/Verfügbarkeit in der Nutzendenbefragung betrachtet. Dabei ergibt sich die in Abbildung 36 gezeigte Top-20 von gewünschten Programmen nach Standort. Auffällig ist hier, dass die Befragten besonders Programme zum maschinellen Lernen (Tensorflow, Pytorch) in Zukunft nutzen wollen. Danach folgen Matlab und Programme der Quantenchemie und Ingenieurwissenschaften. Diese Wünsche können von den einzelnen Standorten direkt als Impuls genutzt werden, die betreffenden Programme systemweit zur Verfügung zustellen und die Nutzenden darauf hinzuweisen. Die Auswertung der gewünschten Programme nach Bereichen, die in Abb. 35 gezeigt ist, stellt diese Beobachtung nochmals zusammengefasst dar.

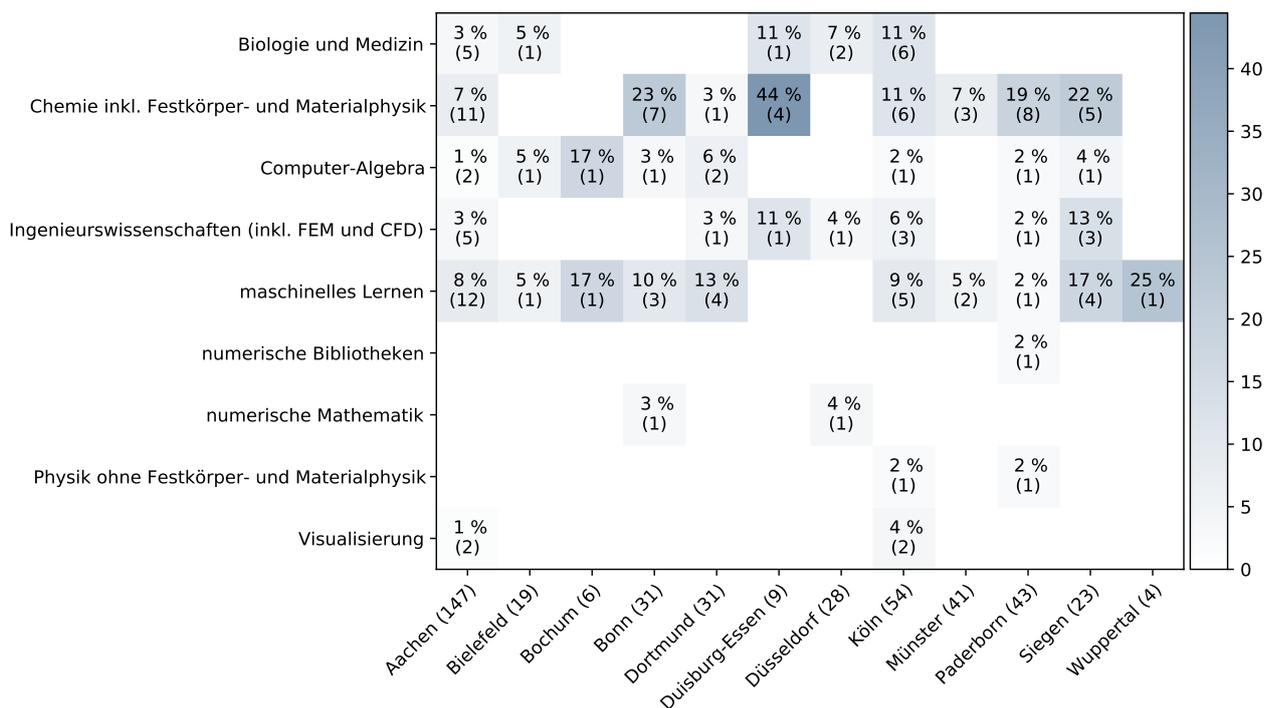


Abbildung 35: Von Befragten gewünschte wissenschaftliche Software nach Bereichen. Die Darstellung ist in Sektion 1 genauer beschrieben.

Gefragt, für welche Programme mehr Support und Unterstützung gewünscht wird, wurden, wie in Abbildungen 37 und 38 zu erkennen, vorwiegend Programme der Chemie inkl. Festkörper- und Materialphysik genannt. Mit Simulationen, die mit diesen Programmen durchgeführt werden, wird auf vielen HPC-Systemen ein großer Teil der zur Verfügung stehenden Rechenzeit genutzt. Deshalb sind Optimierungen oder effizientere Nutzungen dort besonders wirksam.

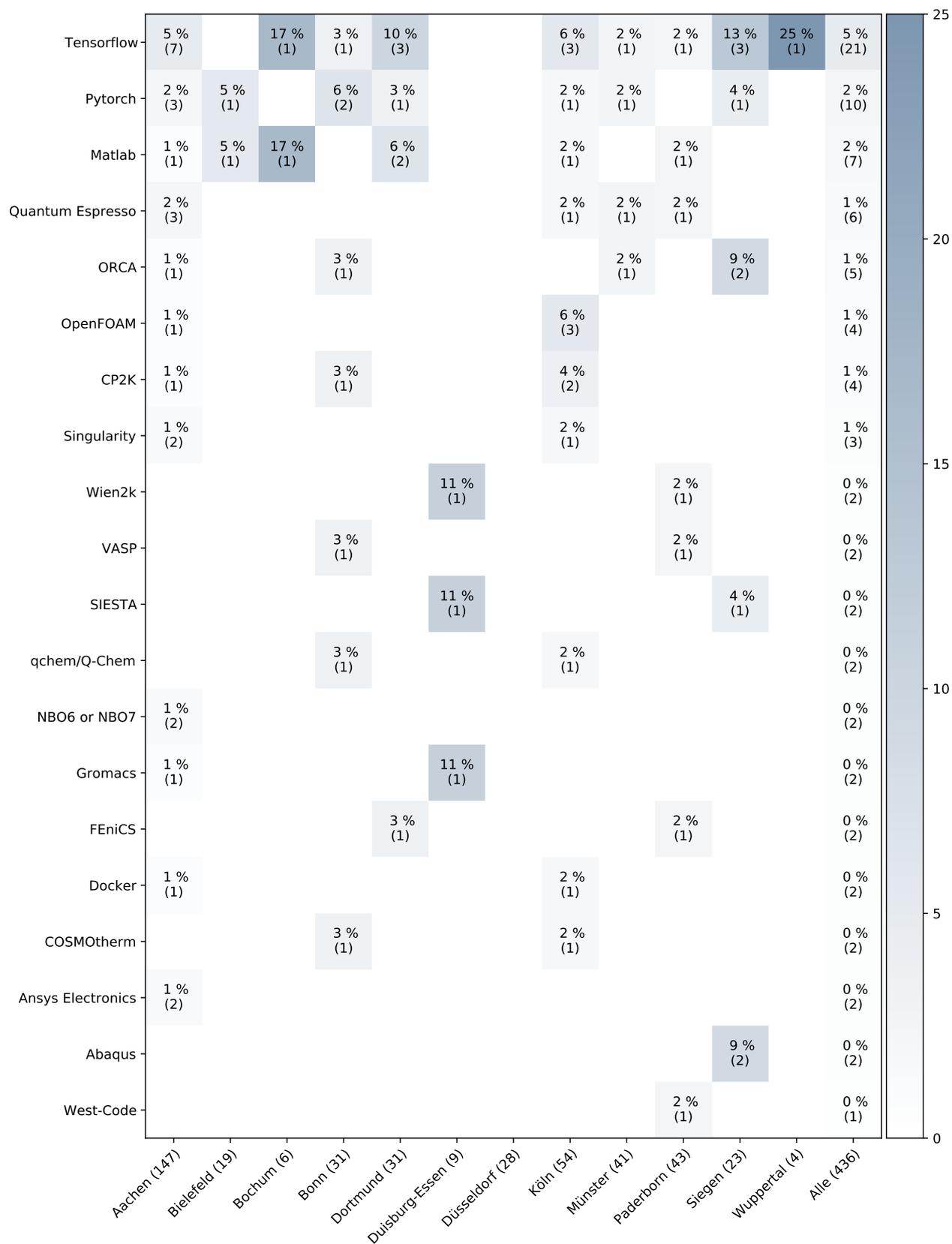


Abbildung 36: Von Befragten gewünschte wissenschaftliche Software (Top 20). Die Darstellung ist in Sektion 1 genauer beschrieben.

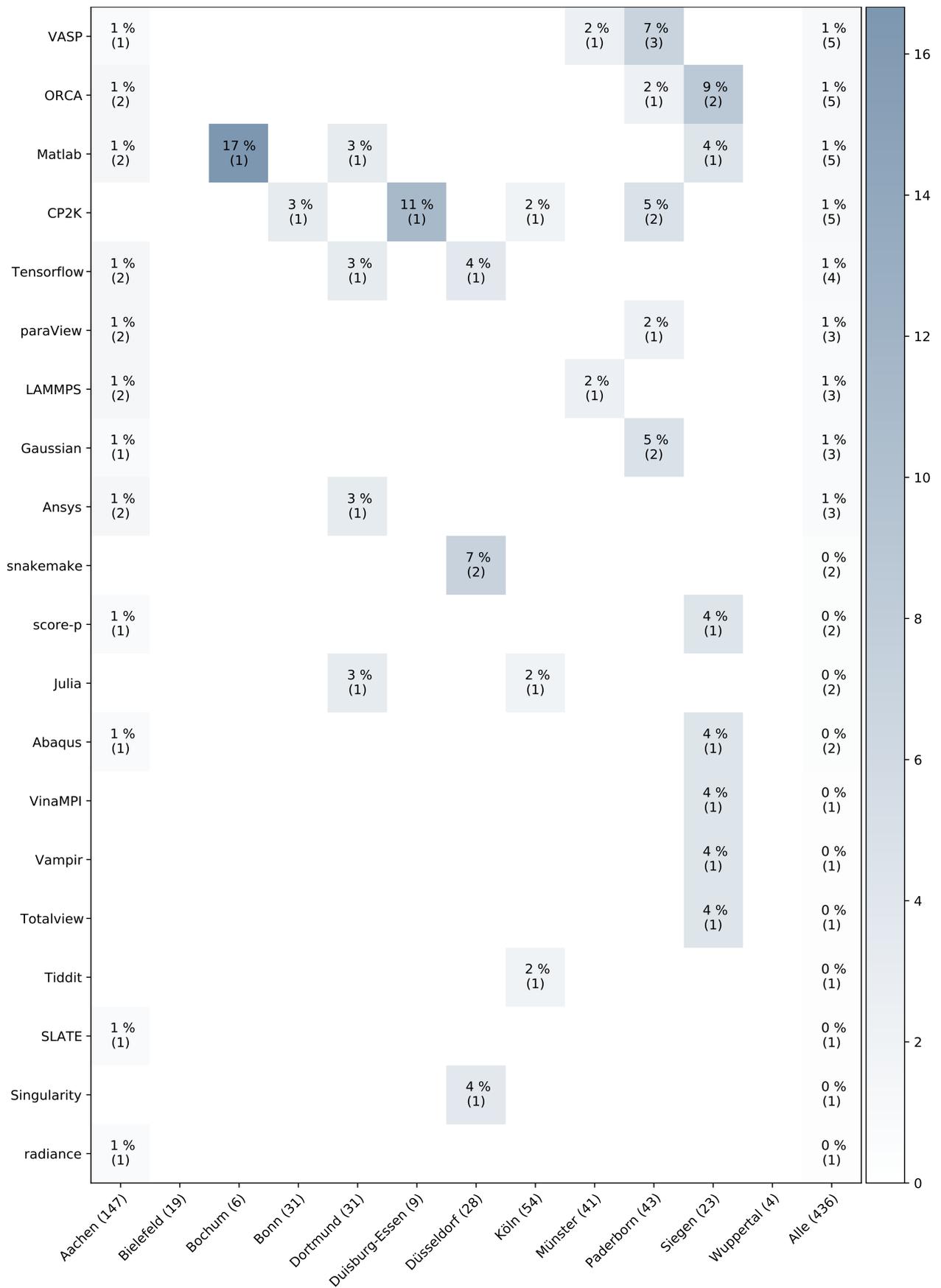


Abbildung 37: Wissenschaftliche Software (Top 20), für die verstärkter Support gewünscht wird. Die Darstellung ist in [Sektion 1](#) genauer beschrieben.

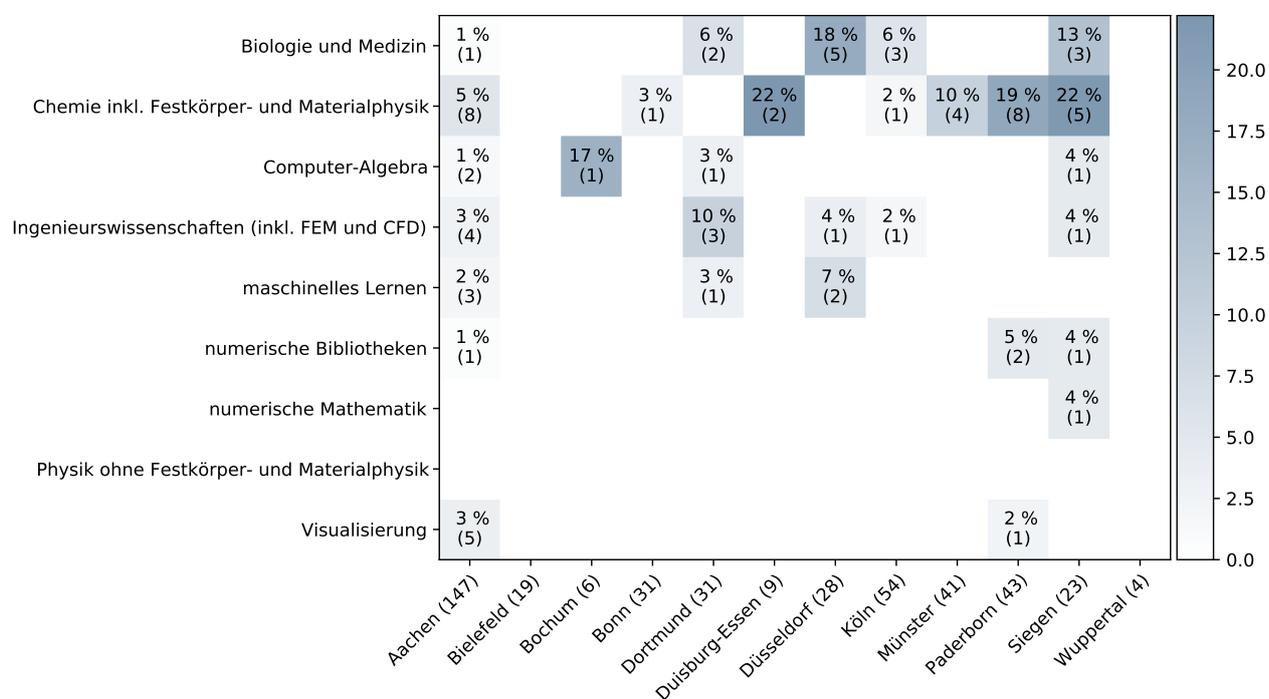


Abbildung 38: Wissenschaftliche Software, für die verstärkter Support gewünscht wird, nach Bereichen. Die Darstellung ist in Sektion 1 genauer beschrieben.

10 HPC Ressourcen

Die verfügbaren **Infrastrukturen und Dienste** bewerten 72% der Befragten als ausreichend (Abb. 39). Sie können effizient arbeiten. Weitere 15% kommen über Umwege zurecht. In Bochum ist der Bedarf nach einer Verbesserung der Infrastruktur und der Dienste mit 50% deutlich über dem sonst sehr niedrigen Durchschnitt von 14% und wird durch Neuanschaffungen bereits adressiert. Dort müssen viele Nutzende auf andere Systeme ausweichen, obwohl sie ihre Arbeit lieber auf einem HPC-Cluster durchführen würden. Aus den Freitextantworten zur Infrastruktur wird ersichtlich, dass die hohen Ausfallzeiten in Düsseldorf zur Nutzung dezentraler Systeme führen. Auch in Aachen wurde die eingeschränkte Verfügbarkeit des Systems (auch am Wochenende) mehrfach kritisiert.

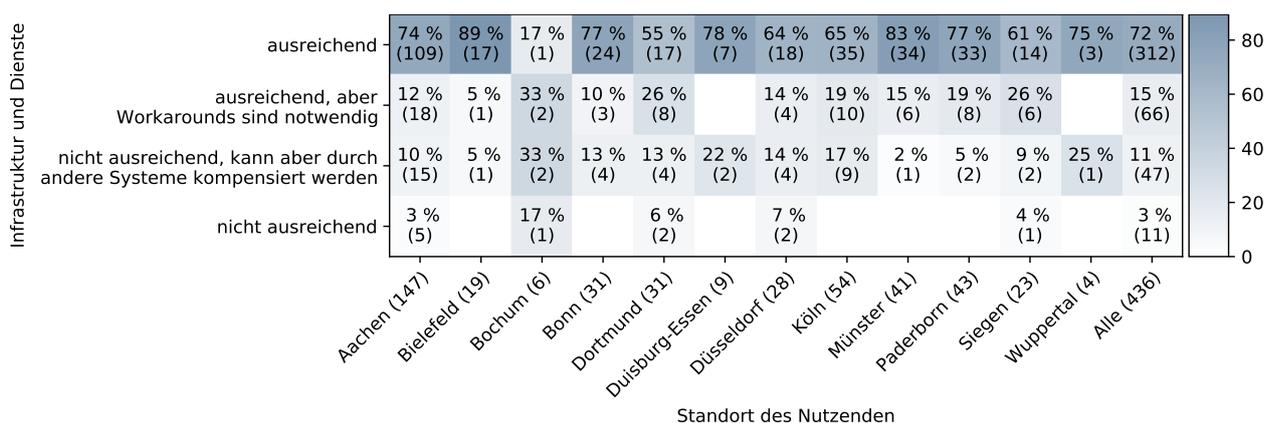


Abbildung 39: Einschätzung der vorhandenen Infrastruktur und Dienste. Die Darstellung ist in Sektion 1 genauer beschrieben.

Zusammenfassend werden folgende Punkte von den Befragten als verbesserungswürdig angemerkt, wobei natürlich nicht jeder Punkt auf jeden Standort zutrifft:

- Aktualität und Verfügbarkeit von Software
 - Veraltete Versionen von GNU Compiler, R, terminfo, Python, powershell
 - Software wird nicht mit den gewünschten Optionen bereitgestellt (git, python3)
 - Software nicht verfügbar (Ansys Electromagnetics, Visualisierungsmöglichkeiten, Anaconda, Globus, Nix-Paketmanager, Jupyter Notebook, bestimmte Kompiler, Valgrind)
 - Ältere Versionen nicht mehr verfügbar, dadurch laufen manche Programme nicht mehr (Tensorflow/CUDA)
- Verfügbarkeit von Ressourcen (Knoten, Dateisystem)
- Qualität der Ressourcen
 - Zugriff auf das Dateisystem zu langsam
 - Datentransfer nach außerhalb des Clusters zu langsam (auch wegen VPN) und zu umständlich, schlechte Verbindung (z.B. zum NCBI Server), zu geringe Bandbreite von den Compute-Knoten nach außen
 - Compute-Knoten zu langsam, Knoten haben zu wenig Speicher
 - Graphische Leistung der Frontends zu langsam (z.B. mit Uni Bonn VPN sind Totalview und Vampir nicht mehr nutzbar, Texteditoren nur eingeschränkt)
 - Stabilität von ssh Verbindungen
- Lange Wartezeiten/Scheduling:
 - Zu lange Wartezeiten für MPI-Jobs, Langzeit-Jobs und Jobs mit speziellen Anforderungen
 - Kleinere Jobs sollten nicht auf zu viele Knoten verteilt werden, damit auch für größere Jobs genügend Knoten zur Verfügung stehen (Köln).

- Möglichkeit, nur einzelne Kerne zu reservieren, statt ganze Knoten
- Jobs mit besonderen Anforderungen sollten auch, wenn möglich, auf andere Ressourcen ausgelagert werden können, um Wartezeiten zu reduzieren (FPGA/CPU Jobs, GPU Jobs)
- Mehr interaktive Knoten
- Flexiblere Laufzeiten (Jobs ohne feste Länge)
- Maximale Joblänge zu kurz
- Maximale Anzahl von Jobs zu niedrig

Man erkennt an den Antworten der Befragten zwei Richtungen: Nutzende mit shared-memory-parallelen Anwendungen benötigen oft keine ganzen Compute-Knoten und erwarten dadurch geringe Wartezeiten. Dagegen ist die Toleranz für Wartezeiten bei Jobs, die mehrere Knoten nutzen, höher. Dafür beklagen die Nutzenden, dass diese Jobs aufgrund des gleichen Accountings wie für einzelne Knoten viel Rechenzeit (Quota) verbrauchen. Folgerechnungen, die wegen der oft zu kurzen maximalen Joblänge notwendig sind, laufen dann erst mit steigender Wartezeit an und führen zur Verzögerung beim Erreichen von Ergebnissen. Mögliche alternative Betriebskonzepte werden im Arbeitspaket 3 des HPC.NRW diskutiert und evaluiert.

- Besserer Wissenstransfer:
 - Nachfrage nach Basiswissen/Einführungskursen
 - Workflow/Arbeitsschritte sind oft unstrukturiert und unorganisiert
 - Job Submittierung
 - anwendungsspezifischer Support (z.B. ORCA)
 - Bessere Inhalte/Dokumentationen auf der Webseite
 - Einarbeitungszeit für Studierende/Mitarbeiter zu lang
 - mehr Schulungen und Integration von HPC in die Lehrpläne nötig
- Möglichkeit, Rechenzeit ohne großen Aufwand (Antrag) zu bekommen
- Graphische Darstellung der Systemauslastung

Die verfügbare **Hardware** (HPC-Ressourcen, Abb. 40) ist für 67% der Befragten ausreichend. Bei weiteren 10% mussten zeitaufwendige Optimierungen vorgenommen werden, um mit den verfügbaren HPC-Ressourcen auszukommen. Ein anderes Bild zeigt sich in Bochum, wo 5 von 6 Befragte die HPC-Ressourcen nicht genügen. Auch in Siegen und Münster ist bei 43% bzw. 34% ein Mehrbedarf vorhanden. In den Freitextantworten ist mit 5% aller Antworten die Nachfrage nach GPUs beson-

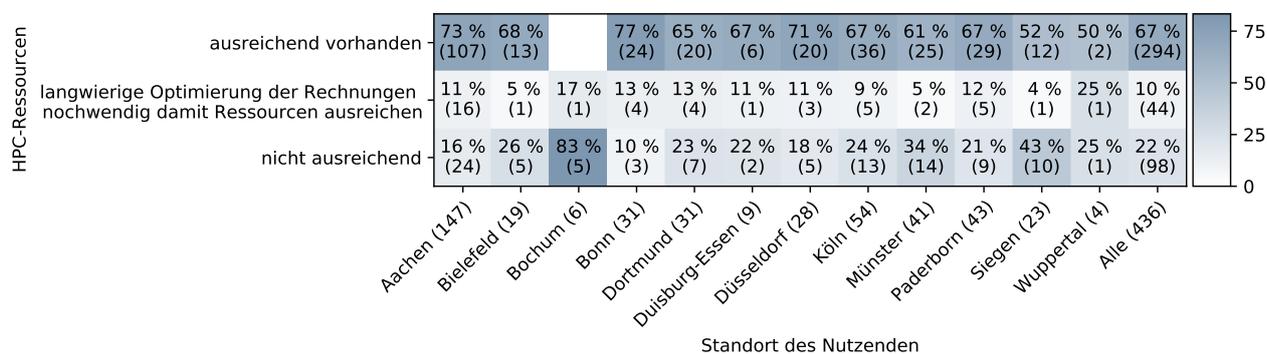


Abbildung 40: Einschätzung der vorhandenen Hardware-HPC-Ressourcen. Die Darstellung ist in Sektion 1 genauer beschrieben.

ders stark. Falls GPUs schon vorhanden sind, wünschen sich die Befragten mehr dieser Ressourcen, sowie neuere Modelle und Ausführungen mit mehr GPU-Speicher. Ebenfalls häufig werden insgesamt mehr Rechenknoten und Knoten mit mehr Arbeitsspeicher (>4 GB/CPU-Kern) gewünscht, bei letzteren sind den Nutzenden die Wartezeiten oft zu lang. Ebenfalls erwähnt wurden neuere Prozessoren, mehr Rechenzeit, mehr permanenter Speicher im Dateisystem oder ein Dateisystem

zum Archivieren sowie Containerlösungen, mehr Support und eine sichere Umgebung, um auch sensitive Daten verarbeiten zu können (z.B. mit Verschlüsselung).

11 Support

Die Bekanntheit des lokalen HPC-Supportes, Nutzung des HPC-Supportes und weitere Fragestellungen wurden in der Nutzendenbefragung ebenfalls abgedeckt. Wie in Abbildung 41 zu sehen, wissen nicht alle Befragten wie sie den lokalen HPC-Support kontaktieren können. Vor allem in Aachen und Bochum ist mehr als den durchschnittlichen 6% nicht bekannt, dass es einen HPC-Support gibt und wie dieser zu erreichen ist. Vom Support Gebrauch gemacht (Abb. 42) haben bisher 67% der Befragten. Weitere 27% wissen, wie sie den Support erreichen können, haben ihn aber bisher nicht benötigt.

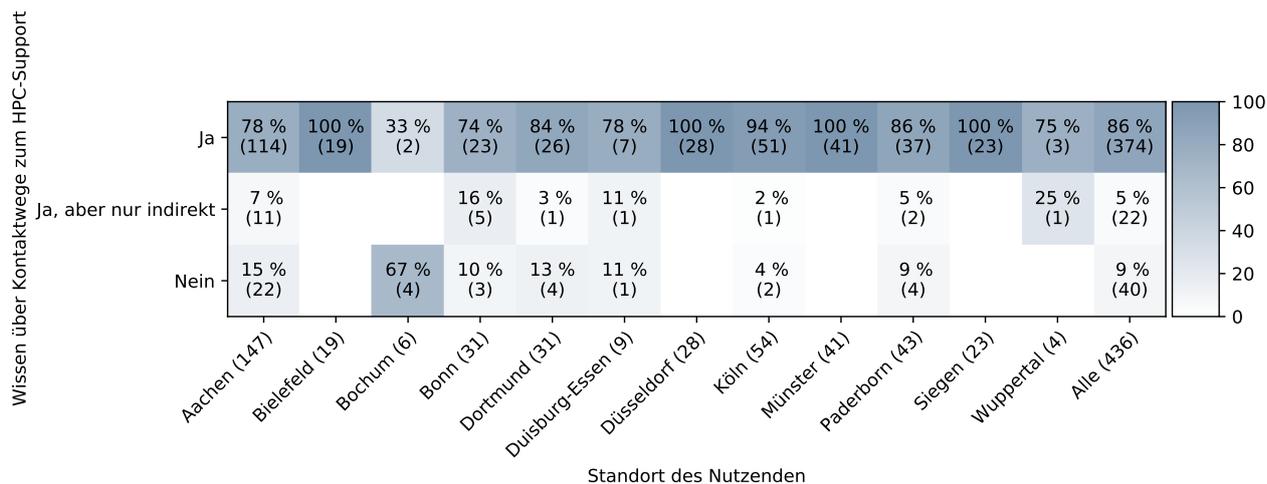


Abbildung 41: Anteile der Befragten, die wissen wie sie den lokalen HPC-Support kontaktieren können. Die Darstellung ist in Sektion 1 genauer beschrieben.

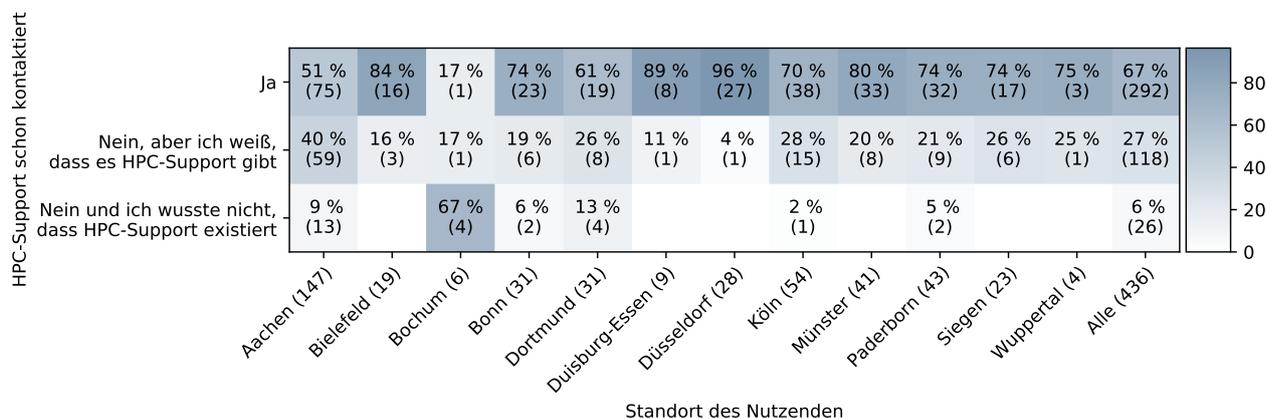


Abbildung 42: Anteile der Befragten, die den lokalen HPC-Support schon genutzt haben. Die Darstellung ist in Sektion 1 genauer beschrieben.

Die häufigsten Gründe, den Support zu kontaktieren sind, wie in Abbildung 43 gezeigt, Fragen zur Job Submittierung (33%), anwendungsspezifische Probleme (33%) und Fragen zum Cluster-Zugang (31%), gefolgt von Problemen mit Daten oder dem Dateisystem (24%) und Schwierigkeiten beim Kompilieren (22%)². In Düsseldorf (61%), Bielefeld (47%) und einigen weiteren Standorten gibt es überdurchschnittlich viele Anfragen zu anwendungsspezifischen Problemen, während sich in Duisburg-Essen der Bedarf an Unterstützung für Rechenzeitanträge im Verhältnis zur Anzahl der Antworten hervorhebt (44%). Siegen und Bonn haben vermehrt Anfragen zum Cluster-Zugang (52% und 48%).

²Mehrfachnennungen möglich.

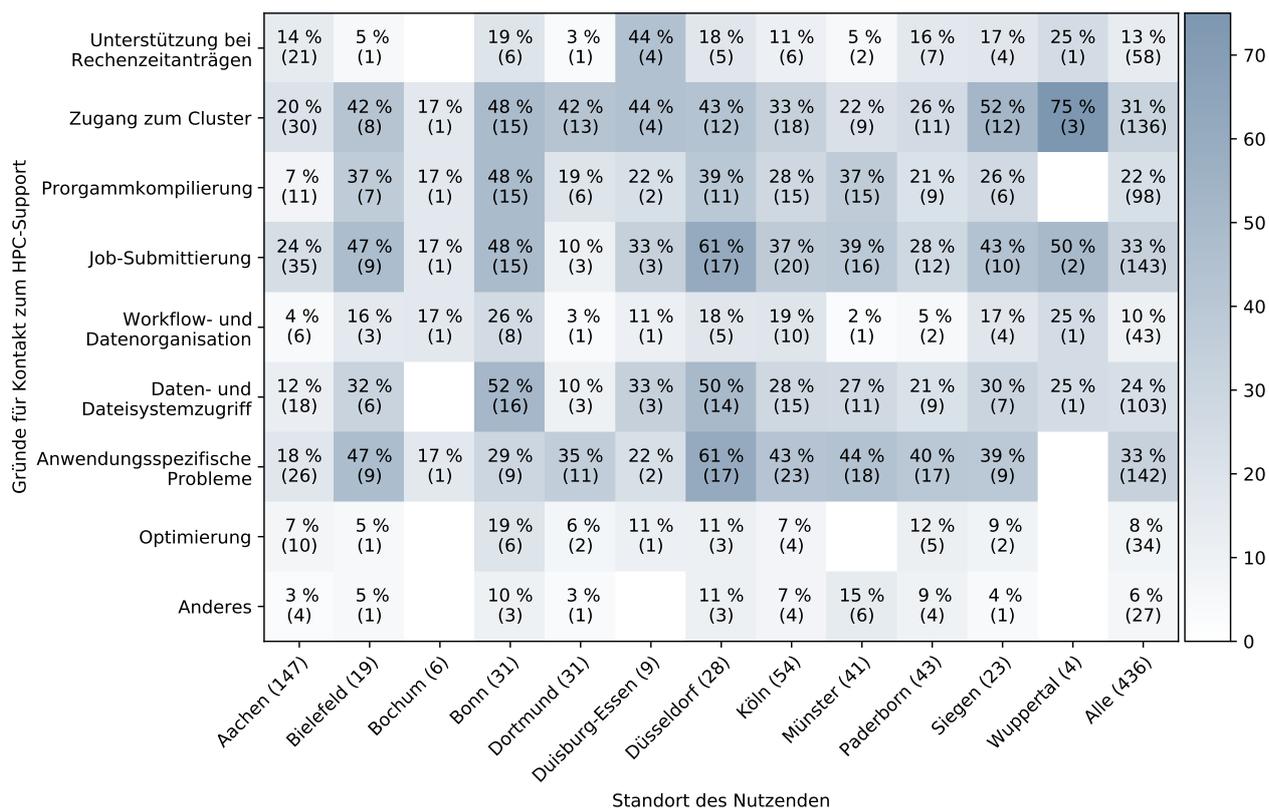


Abbildung 43: Gründe warum die Befragten den lokalen HPC-Support kontaktiert haben. Die Darstellung ist in Sektion 1 genauer beschrieben.

Derzeit haben 66% (Abb. 44) der Befragten keinen akuten Support-Bedarf. Von den wenigen Rückmeldungen aus Bochum haben verhältnismäßig viele (5 von 6) Beratungsbedarf.

Die Befragten sind zu 44% mit dem Support zufrieden und benötigen keine Verbesserung oder Ausbau des Supports (Abb. 45). Einen Ausbau des Schulungsangebots wünschen sich 55%, davon 30% allgemeine Schulungen und 25% auf fortgeschrittenem Niveau. Anwendungsspezifische Hilfestellung, z.B. bei Code- und Performanceoptimierung, sollten laut 29% der Befragten ausgebaut werden und 21% sehen zusätzlichen Bedarf beim individuellen Support bei HPC-Problemen. In Dortmund und Düsseldorf besteht erhöhter Bedarf am Ausbau des Supports, nur 13% bzw. 14% der Befragten dort haben keine Verbesserungshinweise. Sowohl Schulungen als auch individueller und anwendungsspezifischer Support sollten hier nach Angaben der Befragten ausgebaut werden.

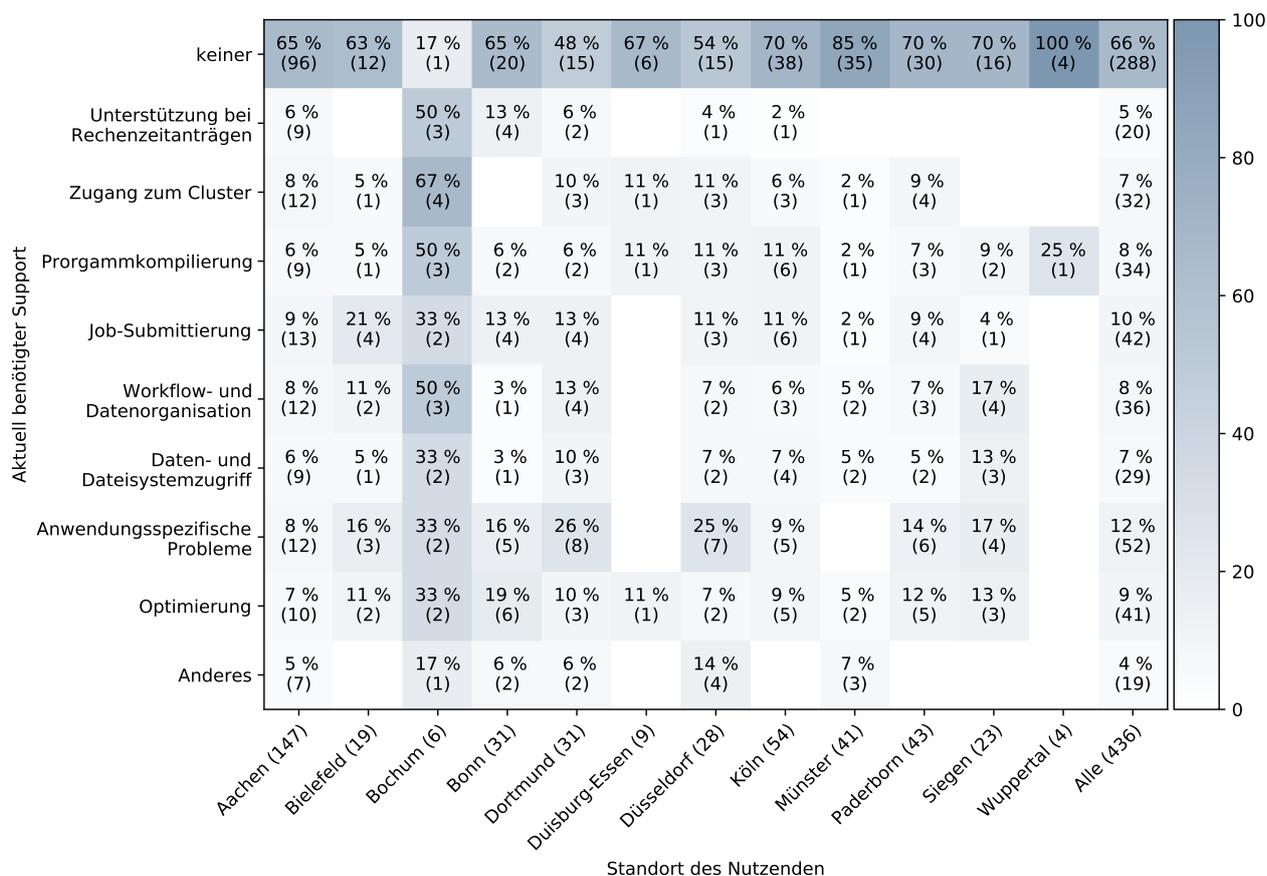


Abbildung 44: Zur Zeit benötigte Hilfestellungen der Befragten. Die Darstellung ist in Sektion 1 genauer beschrieben.

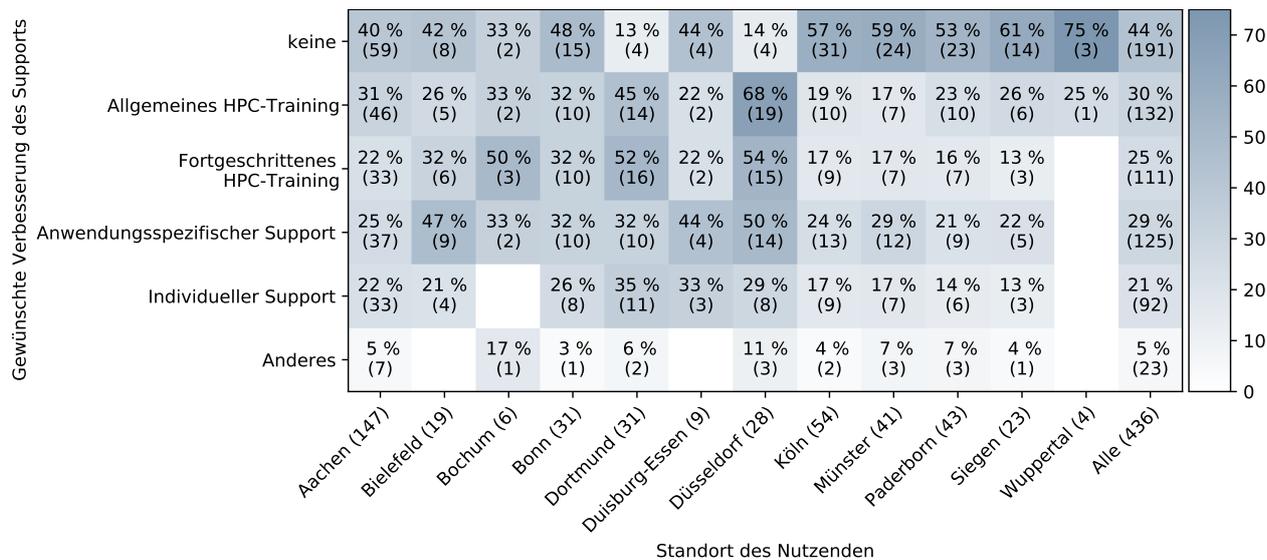


Abbildung 45: Von Befragten gewünschte Verbesserungen/Erweiterungen im lokalen HPC-Support. Die Darstellung ist in Sektion 1 genauer beschrieben.

Die Freitextantworten aller Standorte lassen sich in folgende Themen gruppieren:

- **Allgemeiner Eindruck:** Es wurde flächendeckend **sehr viel Lob und Anerkennung** gegenüber dem bestehenden Support geäußert.
- **Wissenstransfer:** Es werden mehr (Online-)Schulungen (Einführungsveranstaltungen/Basics, Parallelisierung, auch in Skriptsprachen wie Python, Julia, R) und eine Verbesserung der Dokumentation gewünscht. Die Einstiegshürde muss niedriger werden. Nicht jeder Nutzende möchte zum HPC-Experten werden, aber doch HPC für seine Arbeit nutzen. Einige Nutzende benötigen nur sehr temporär HPC-Ressourcen und empfinden die Einarbeitungszeit als zu lange, um deren Verwendung zu rechtfertigen. Gerade für Unix-Neulinge ist die Nutzung der Systeme sehr frustrierend. Hier könne nach Meinung des Befragten ein Manual für primitive Aufgaben oder eine Onlineplattform zum Austausch helfen.
- **Fachberatung:** Es wurde der Wunsch nach einem **HPC-Ansprechpartner in den Fachbereichen** geäußert, um so mit Fachvorkenntnissen zu verwendeter Software, Methoden und typischen Fallstricken die Nutzenden besser abholen zu können. Auch in diesem Kontext wurde angemerkt, dass fachspezifische Probleme nicht immer vom lokalen Support behoben werden können. Es sollte dafür einen spezifischeren Support ("Linkmen"), gern mit festen Beratungszeiten, geben.
- **Hemmschwelle:** Es wird angeregt, mit den Nutzenden in Kontakt zu treten und zu fragen, was benötigt wird. Eine **Hemmschwelle, den Support zu kontaktieren**, ist aus den Antworten klar erkennbar. Einige Nutzende trauen sich nicht Fragen, z.B. zur **Softwareinstallation**, zu stellen, weil sie das Gefühl haben, den Support zu sehr in Anspruch zu nehmen. Ein weiterer Vorschlag ist die Implementierung eines persönlichen Gesprächs zu Projektbeginn, damit Bedarfe und Anforderungen an System/Software und Support besprochen werden können. Durch einen Austausch über Software, die anfänglich nur von einer Gruppe zur zentralen Installation angefragt wird, könnten künftig mehrere Gruppen profitieren, die zwar mit ähnlichem Kontext arbeiten, aber die Software noch nicht kennen.
- **Support-Ressourcen:** Viele der Befragten fordern **mehr Ressourcen im Support**. Teilweise wird über lange Wartezeiten für die Beantwortung von Tickets berichtet. Auf der anderen Seite haben einige Nutzende Sorge um die Work-Life-Balance der Mitarbeiter im Support, da eine Bearbeitung/Behebung von Problemen auch außerhalb üblicher Arbeitszeiten (Nachts und am Wochenende) geschieht, und befürworten mehr Ressourcen. Vereinzelt haben Nutzende darauf hingewiesen, dass aufgrund der knappen Ressourcen im Support gelegentlich die Freundlichkeit und der Respekt gegenüber unerfahrenen Nutzenden verbessert werden kann. Gelegentlich entsteht zudem der Eindruck, dass man nur mit dringenden Notfällen beim Support aufschlagen sollte und keine Ressourcen für ausführliche Beratung und Codeanalysen vorhanden sind. Es wird angemerkt, dass ein enger Kontakt zum Support nötig ist, um nicht nur Programme laufen zu lassen, sondern auch eine Optimierung der Anwendungen und Arbeitsprozesse stattfinden muss.

12 Schulungen

Aus der Umfrage (Abb. 46) wird ersichtlich, dass 34% der Befragten bisher an einem HPC-Kurs oder einem Tutorial teilgenommen haben. Mangelnde Informationen über angebotene Kurse sind der Hauptgrund, warum von den Befragten noch keine Schulung besucht wurde. Als weitere Gründe werden mangelndes lokales Kursangebot, Angst vor oder Ausfall von Kursen aufgrund der COVID-19 Pandemie, der Besuch von Kursen an anderen Institutionen und ein unzureichendes Kursangebot (zu schnell ausgebucht, nur auf deutsch, Kurs findet nur einmal im Jahr statt) aufgeführt.

Am häufigsten gaben die Befragten an, bisher an Cluster Einführungskursen (9%), MPI Kursen (8%) und OpenMP Kursen (7%) teilgenommen zu haben. Ebenfalls häufiger genannt wurden (in dieser Reihenfolge) Kurse zur folgenden Themen: Parallele Programmierung, Parallele Code Optimierung/Performance Analyse, CUDA/GPU Programmierung, Supercomputing allgemein und weitere architektur-spezifische Kurse.

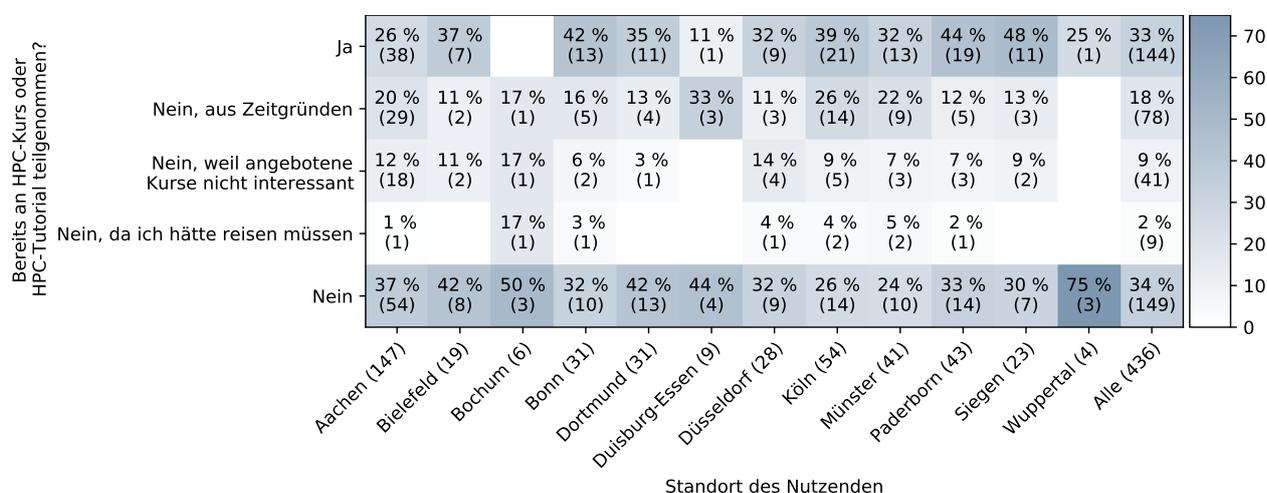


Abbildung 46: Anteile der Befragten, die bereits an einem HPC-Kurs/Tutorial teilgenommen haben inkl. Gründe falls noch nicht. Die Darstellung ist in Sektion 1 genauer beschrieben.

Die Präferenz der Befragten für das Format einer Weiterbildung ist in Abbildung 47 ausgewertet. Dominant sind dabei kurze Onlinetutorials mit kurzen Videos, Texten und interaktiven Elementen wie sie auch bereits im Arbeitspaket 2 entwickelt werden.

Die Reisebereitschaft der Befragten für HPC-Kurse ist leider recht gering (Abb. 48). Bereit zu Reisen, um einen Kurs an einem anderen Standort innerhalb NRWs zu besuchen, sind 20% der Befragten. Für weitere 51% kommt das nur für besonders interessante Kurse in Betracht. Dagegen würden 23% nur lokale Kurse besuchen und 6% gaben keine Antwort. Daraus ergibt sich die Notwendigkeit viele Kurse lokal anzubieten bzw. in der Corona-Pandemie die virtuellen Angebote weiter auszubauen.

Die Nachfrage nach Schulungen ist groß. Durchschnittlich 80% der Befragten interessieren sich für Grundlagen- und/oder Fortgeschrittenenkurse.

Als beliebte Basis-Themen wurden Einführungen ins Profiling/HPC-Code-Optimierung (53%), zur effizienten Datenspeicherung (39%), Debugging (39%) und Softwarecontainer (38%) angegeben. Weitere Antworten sind in Abbildung 49 dargestellt. Als zusätzliche Freitextantworten (other 3%) wurden überwiegend GPU Kurse benannt.

Bei den fortgeschrittenen Kursen gaben die Befragten an, dass Techniken zur Code-Optimierung (54%), zum parallelen Debugging (47%), zu Kompilern und Bibliotheken (44%) sowie zum parallelen Profiling (44%) vorrangig interessant sind (siehe Abbildung 50).

Das Interesse an Programmiergrundlagenkursen ist für alle vorgegebenen Sprachen/Konzepte mit >15%³ durchweg hoch. Die Antworten der Befragten verteilen sich wie folgt auf die Themen:

³15% entsprechen etwa 70 Antworten

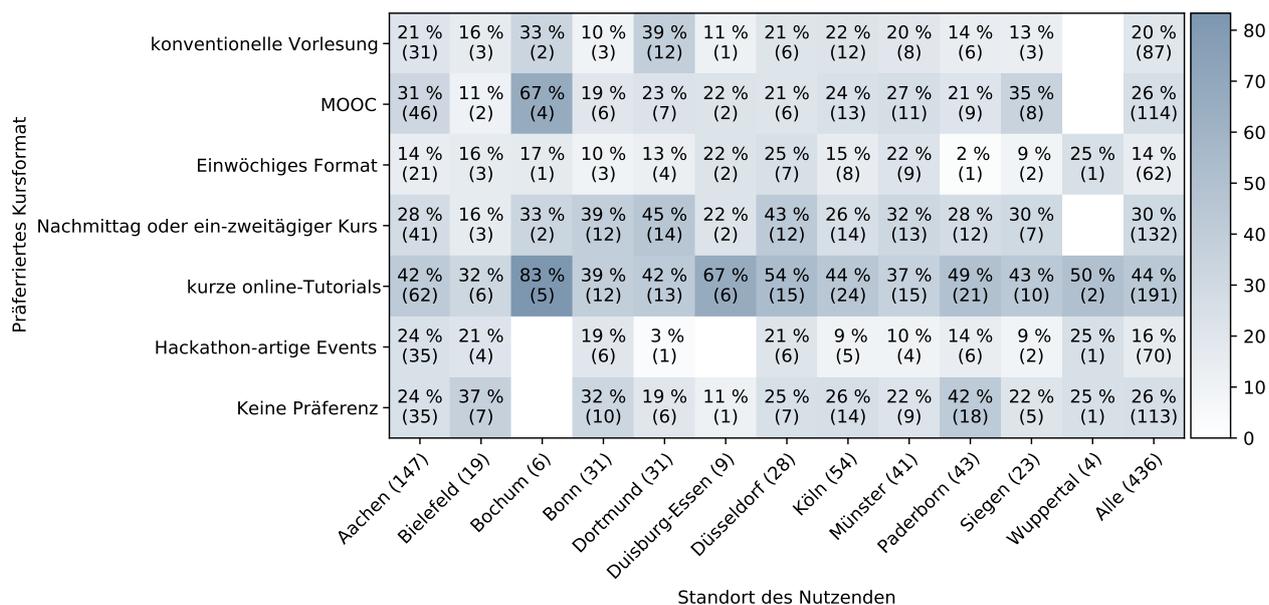


Abbildung 47: Präferenz der Befragten für verschiedene Kursformate. Die Darstellung ist in [Sektion 1](#) genauer beschrieben.

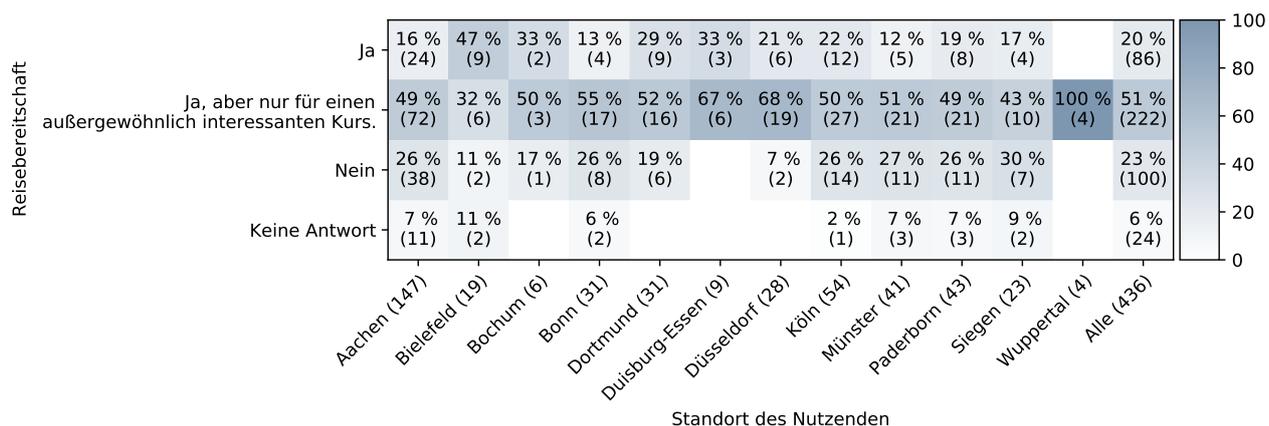


Abbildung 48: Reisebereitschaft der Befragten. Die Darstellung ist in [Sektion 1](#) genauer beschrieben.

GPU-Programmierung mit CUDA (36%), MPI (32%), Python (28%), OpenMP (25%) und C/C++ (24%). Kein Interesse an Grundlagenkursen haben 28% der Befragten (siehe [Abbildung 51](#)).

Etwas deutlicher heben sich bei den fortgeschrittenen Programmierkursen die Themen Python (50%) und C/C++ (43%) ab. Aber auch GPU-Optimierung (31%), MPI (30%) und OpenMP (25%) würden mehrere Kurse füllen.

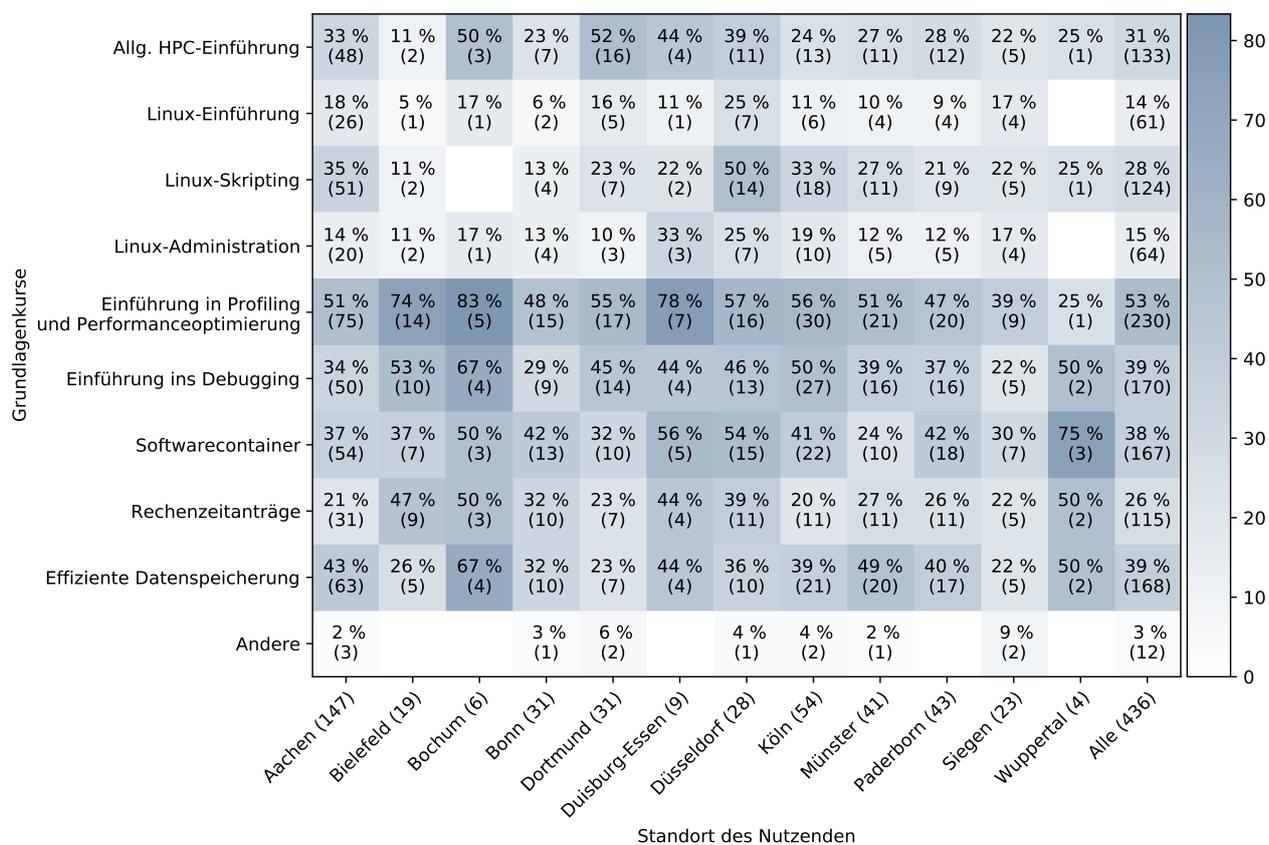


Abbildung 49: Interesse der Befragten an Grundlagenkursen. Die Darstellung ist in [Sektion 1](#) genauer beschrieben.

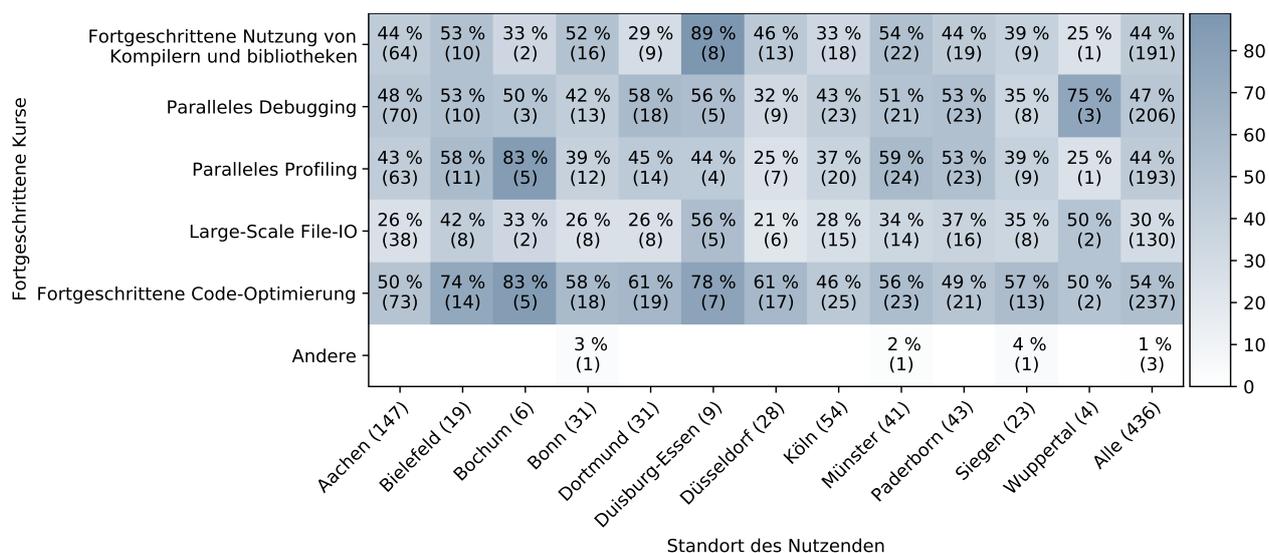


Abbildung 50: Interesse der Befragten an fortgeschrittenen Kursen. Die Darstellung ist in [Sektion 1](#) genauer beschrieben.

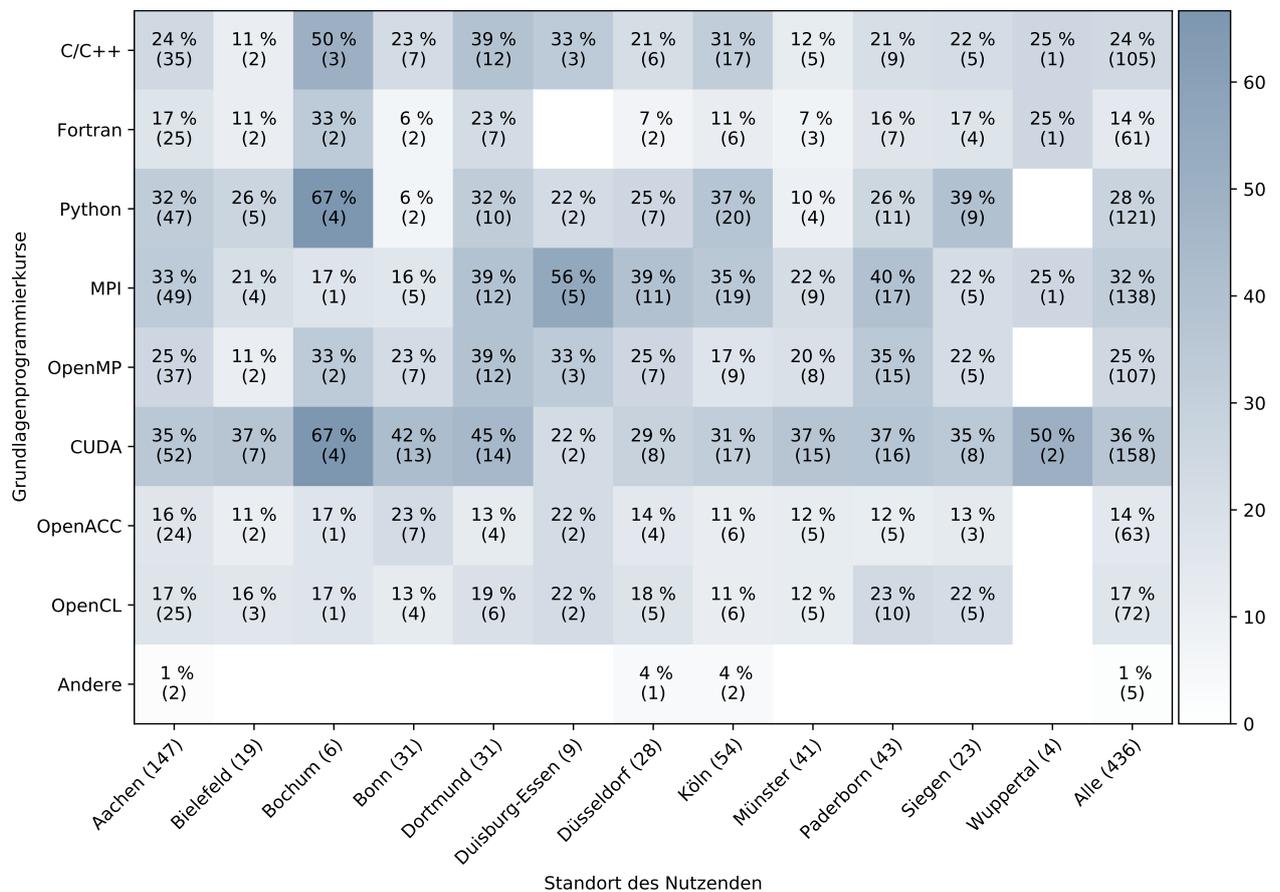


Abbildung 51: Interesse der Befragten an Grundlagen-Programmierkursen. Die Darstellung ist in Sektion 1 genauer beschrieben.

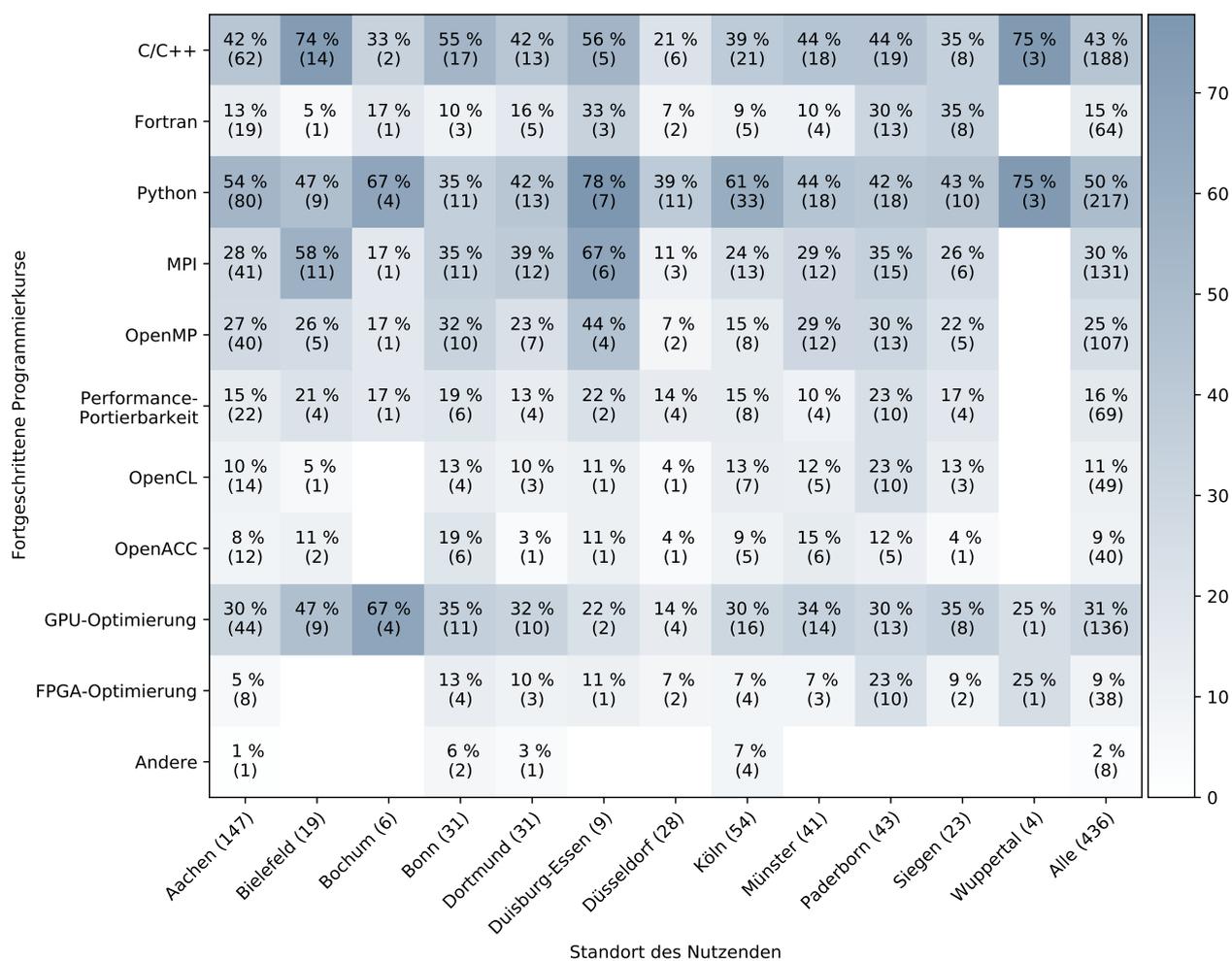


Abbildung 52: Interesse der Befragten an fortgeschrittenen Programmierkursen. Die Darstellung ist in Sektion 1 genauer beschrieben.

13 Erkenntnisse und Maßnahmen einzelner Standorte

Die Daten der Auswertung wurden bereits von allen Standorten genutzt, um eigene Auswertungen durchzuführen und zukünftige Maßnahmen daraus abzuleiten. Diese wurden von den Standorten zusammengefasst und werden in den folgenden Abschnitten unbearbeitet wiedergegeben.

13.1 Standortspezifische Auswertung - Aachen

In der Umfrage gaben 147 Nutzende den Cluster in Aachen (CLAIX) als primäres System an (176 insgesamt). Hierbei kamen die meisten Befragten aus den Bereichen “Computer Science, Systems and Electrical Engineering” (36 %), “Mechanical and Industrial Engineering” (17 %), “Physics” (15 %), “Chemistry” (14 %) und “Thermal Engineering/Process Engineering” (12 %). Nur sehr wenige Nutzende verwenden Systeme außerhalb von Aachen. Es werden nur vereinzelt andere Systeme des HPC.NRW-Konsortiums verwendet. Häufiger werden Systeme der Ebene 0 oder 1 verwendet (25 %).

CLAIX wird primär von Forschenden benutzt, so haben über 70 % der Nutzenden mindestens einen Masterabschluss und weitere 17 % einen Bachelorabschluss. 55 % aller Teilnehmenden haben in den letzten 18 Monate einen Beitrag zu einem Journal, einer Konferenz oder einem Workshop (peer-reviewed) basierend auf den mit CLAIX erzielten Ergebnissen veröffentlicht oder planen dies. Um unser Reporting und die Erfassung aller Veröffentlichungen hier mittelfristig weiter zu verbessern, ist die Einführung von *JARDS.projects* für 2021 als konkrete Maßnahme geplant.

Da über die Hälfte aller Nutzenden angibt, ihre Anwendung selber zu bauen oder sogar zu entwickeln, spielt die Auswahl des Compilers eine entscheidende Rolle für die effiziente Nutzung. Da sich herausgestellt hat, dass der Intel Compiler für viele Codes performanteren Code erzeugt, wird in Aachen des entsprechende Modul standardmäßig vorgeladen. Dennoch zeigt die Umfrage, dass ca 40 % aller Befragten den GNU Compiler verwenden und nur 34 % den Intel Compiler. Ob diese Entscheidung auf Leistungsanalysen, benötigten Sprach-Features oder Gewohnheit der Nutzenden beruht, geht aus der Umfrage leider nicht hervor. Als Maßnahme wird in zukünftigen Schulungen/ Workshops für die Bedeutung der Compiler-Wahl in Bezug auf die Performance weiter sensibilisiert.

Der hohe Anteil an Nutzenden, die hochoptimierte Libraries wie Intel MKL, cuBLAS/cuDNN, OpenBLAS, FFTW oder Eigen verwenden, zeigt jedoch ein Bewusstsein der Nutzenden für die Bedeutung der Performance in HPC-Systemen. Dies zeigt sich auch in der Tatsache, dass fast die Hälfte aller Befragten angaben, bereits Performance-Optimierungen durchgeführt zu haben. Immerhin ca. 25 % verwenden hierzu entsprechende Performancanalyse-Tools. Um diese Quote weiter zu erhöhen, werden wir auch in Zukunft verstärkt entsprechende Schulungen durchführen. Dies ist insbesondere von Bedeutung, da ca. 20 % sich nicht mit diesen Werkzeugen auskennen und ca. 37 % angeben, die Bottlenecks ihrer Anwendungen nicht zu kennen. Von den Nutzenden, die die Bottlenecks ihrer Anwendungen kennen, wird die Speichergröße, gefolgt von File-IO als Haupt-Bottleneck genannt, wobei bei letzterem unklar ist, ob die Datenmenge oder die Performance gemeint ist. Da wir immer wieder größere Lustre-Ausfälle zu verzeichnen haben, werden für zukünftige Beschaffungen alternative Technologien evaluiert. Noch deutlicher zeigt sich, dass Schulungen im Bereich des parallelen Debuggens notwendig sind, da 35 % fehlende Integration entsprechender Tools bei der Anwendungsentwicklung mit fehlenden Kenntnissen über diese Tools begründen.

Das Interesse an Container-Lösungen ist insgesamt sehr gering, wobei sehr wenige bereits Singularity erfolgreich verwenden und Docker insgesamt mit 13 % das höchste Interesse erreicht. Jupyter Notebooks erzeugen hier erheblich mehr Interesse mit etwa 8 %, die sie bereits verwenden und weiteren 25 %, die dies gerne tun würden.

Auffällig ist, dass über die Hälfte aller Nutzenden nicht wissen, welches parallele Dateisystem sie verwenden. Hier müssen wir nicht nur die entsprechende Dokumentation verbessern, sondern insbesondere in unseren Schulungen aufklären. Des Weiteren geben nur ca. 5 % der Nutzenden an, serielle Jobs auszuführen, jedoch ist der Anteil von Nutzenden mit Ein-Knoten-Jobs relativ hoch (43 %). In der Auswertung der tatsächlichen Nutzung in Bezug auf die verbrauchten Core-h zeigt

sich jedoch, dass der Anteil an größeren Jobs signifikanter ist, so dass hier kein akuter Handlungsbedarf besteht. Für Beschaffungen zukünftiger Systeme stellt sich immer die Frage nach dem Bedarf der Speicherausstattung pro Core. Ca. 17 % der Befragten benötigen mehr als 4 GB/Core, was vom aktuellen System nicht gedeckt wird. Ein signifikanter Anteil benötigt mehr als 2 GB/Core. Diese und weitere Erkenntnissen aus dem Job-Monitoring fließen in den Beschaffungsprozess ein.

Äußerst erfreulich ist, dass über 84 % der Befragtenangaben, ohne Einschränkungen effizient mit dem System arbeiten zu können, wobei lediglich 14 % hierfür einige Workarounds verwenden müssen. Nur ca. 4 % gaben an, nicht effizient mit dem System arbeiten zu können. Über 60 % der Nutzenden geben an, dass sie z.Zt. keinen HPC Support benötigen. Thematisch ist die benötigte Unterstützung für die anderen unspezifisch, da die Umfrage hier kein klares Bild liefert.

Bei den Parallelisierungstechniken zeigt sich, dass der Fokus vor allem auf MPI und OpenMP liegt. Somit werden bisherige Schwerpunktsetzungen in den HPC-Schulungen wie der PPCES als zutreffend bestätigt. Allerdings zeigt die Umfrage auch, dass (trotz regelmäßigem großen Interesse) kaum jemand OpenACC verwendet. Dies liegt zum einen daran, dass der GPU-Teil von CLAIX in Relation zur Gesamtleistung relativ klein ist, zum anderen muss aber auch das Konzept der GPU-Schulungen überdacht werden. Insbesondere da sich zeigt, dass der Anteil der Nutzenden die CUDA verwenden (was z.Zt. nicht Bestandteil der Schulungen ist) deutlich höher ist (ca. 25 %). Ebenfalls wird ein hoher Bedarf an Schulungen für Linux Scripting (sed, awk, etc.) identifiziert, welcher ebenfalls bisher nicht abgedeckt wird. Der hohe Anteil an Nutzenden, der sich Online-Tutorials wünscht, wird in HPC.NRW durch die geplanten Tutorials in HPC.NRW adressiert.

13.2 Standortsspezifische Auswertung - Bielefeld

In Bielefeld haben 19 Nutzende an der Umfrage teilgenommen. Mit einem Anteil von 71% kommen die weitaus meisten der Nutzenden des Bielefelder GPU-Clusters aus der Physik, gefolgt von der Informatik (18%), Biologie (6%) und Chemie (6%). Dies ist dadurch zu erklären, dass ein Teil des Bielefelder GPU-Clusters traditionell ein Arbeitsgruppenrechner (AG Computersimulationen und Gitterfeldtheorie) der Fakultät für Physik ist. Durch eine Erweiterung ist er seit Anfang 2019 auch offen für andere Fakultäten. Auch in Bielefeld wird der Rechner überwiegend von Forschenden und weniger von Studierenden genutzt: Mit 47% der Nutzenden stellen Promovierende die größte Gruppe, gefolgt von Postdocs mit 29%. Immerhin 12% der Nutzer sind Master-Studierende. Etwa ein Viertel der Nutzenden rechnet zusätzlich noch auf Tier-1 und Tier-2 Systemen.

Die überwiegende Mehrheit der Programme ist parallelisiert und nutzt die GPUs als Beschleuniger. Dementsprechend gaben zwei Drittel der Nutzenden an, CUDA oder MPI als Parallelisierungswerkzeug zu benutzen. Auch OpenMP wird von ca. 20% der Nutzenden verwendet. Allerdings wird von der Hälfte der Nutzenden keine oder nur eine rudimentäre Performanceanalyse durchgeführt. Als Grund wird angegeben, die entsprechenden Werkzeuge nicht zu kennen. Auch zum Debuggen des Quellcodes werden hauptsächlich Print-Statements verwendet. Parallele Debugging-Werkzeuge sind weitgehend unbekannt.

Es werden mehr wissenschaftlicher Support und Tutorials über Performance-Analyse, OpenMP und MPI gewünscht. Kurse im Rahmen von HPC.NRW und das bereits vor Ort bestehende Angebot müssen offensichtlich bekannter gemacht werden. Weiterhin wünschen sich die Nutzenden den Support von Jupyter Notebooks, mehr Intel-Werkzeugen und Compilern, Matlab, Hardoop und Spark. Wir evaluieren, inwieweit wir diese Wünsche umsetzen können. Schließlich wurden noch einige *fat-nodes* mit mehr RAM gefordert.

Als Reaktion auf die Umfrage haben wir auf der Webseite des Rechners bereits einen Abschnitt über mögliche Kurse und Tutorials veröffentlicht. Die auf dem Cluster installierten Debugging- und Analyse-Werkzeuge werden nun expliziter beworben. Die gewünschten Intel-Werkzeuge und Compiler wurden bereits über HPC.NRW angeschafft und in Bielefeld installiert.

13.3 Standortspezifische Auswertung - Bochum

In Bochum haben lediglich sechs Nutzende an der Umfrage teilgenommen, vermutlich aufgrund der fehlenden Infrastruktur (da noch kein Tier-3 Cluster). Die Befragten kamen aus den Themengebieten der Medizin, Mathematik, Geisteswissenschaften, Ingenieurwesen und Informatik. Es stellte sich heraus, dass HPC für ihre Forschung wichtig ist, aber noch keine Rolle in der Lehre spielt. Ebenfalls wurde klar, dass es nicht ausreichend HPC-Ressourcen in Bochum gibt, da die Nutzenden auf Arbeitsplatzrechner und kleinere Arbeitsgruppenrechencluster ausweichen müssen. Die Umfrage ergab, dass die Nutzenden hauptsächlich kleine bis mittelgroße Jobs (bis zu 512 Kernen) laufen lassen, allerdings fehlten eindeutig Knoten mit Beschleunigern (GPUs) und sogenannten Fat-Knoten mit mehr als 1TB RAM. Daher beantragt Bochum gerade ein Tier-3 Rechencluster mit einer heterogenen Architektur, um die Bedarfe der Forschenden vor Ort abzudecken.

Es gab mehrere Themengebiete in der Umfrage, in denen Unsicherheiten auftraten, z.B. HPC-Werkzeuge, Methode der Parallelisierung, Multi-Beschleuniger. Der allgemeine HPC-Support muss bekannter gemacht werden und Unterstützung für viele (grundlegende) Themen wird benötigt, z.B. beim Kompilieren von Codes. Hierzu wird das Rechenzentrum der RUB Gespräche mit den zukünftigen Nutzenden führen und HPC-spezifische Schulungen und Tutorials regelmäßig anbieten. So wird ein schneller Einstieg für verschiedenste Gruppen ermöglicht.

Viele Nutzende programmieren und kompilieren ihre (Open Source) Programme selbst. Allerdings scheint nicht ausreichend Wissen über Debugging und Performance Analysis vorhanden zu sein; hierzu möchten die Nutzenden mehr Infos zu den verfügbaren Tools und mögliche Kurse bekommen. Die Umfrage ergab auch, dass es keine Nachfrage nach Jupyter Notebooks und Containern gibt. Außerdem sind die Bottlenecks der Rechnungen anscheinend den Befragten bekannt. Dies sind unzureichender RAM und das Fehlen einer schnellen Vernetzung zwischen den Knoten. Kurse zu den folgenden Themengebieten sind von den Nutzenden gewünscht:

- *Basic HPC topics:* Introduction to Profiling and HPC code optimization, Introduction to efficient data storage in HPC, Introduction to Debugging
- *Advanced HPC topics:* Advanced techniques for code optimization, Parallel Profiling, Parallel Debugging
- *Basic programming:* GPU Programming with CUDA, Basic Python programming, Basic C/C++ programming
- *Advanced programming:* Advanced Python programming, GPU code optimization, Advanced C/C++ programming

13.4 Standortspezifische Auswertung - Bonn

Am Standort Bonn haben 31 Nutzende auf die Nutzendenumfrage reagiert, was in Relation zur noch relativ kleinen aktiven Nutzerschaft auf dem zentralen Rechencluster zwar ein signifikanter Anteil, relativ zur Gesamtgröße der HPC-affinen Community an der Universität Bonn jedoch nicht repräsentativ ist. Die Ergebnisse der Umfrage sind des Weiteren stark davon geprägt, dass über die Hälfte der Antworten aus der Physik stammt, während jeweils etwa zwei Befragte sich den Fachbereichen Biologie, Chemie, Informatik, Geowissenschaften, Mathematik, Lebenswissenschaften sowie Sozial-, Verhaltens- und Geisteswissenschaften zuordneten. Bei der nächsten HPC.NRW-Umfrage wird versucht werden, die Nutzenden früher und inklusiver zur Teilnahme einzuladen, was dank der wachsenden Bekanntheit und Vernetzung des High Performance Computing & Analytics (HPC/A) Labs möglich sein sollte.

Größtenteils (40%) stammen die Antworten von Promovierten, Nutzenden mit Masterabschluss (35%) und Habilitierten (20%). Auffällig für Bonn ist eine rege Nutzung externer Rechenzentren (26%) auch außerhalb von NRW und eine relativ geringe Nutzung des zentralen Rechenclusters von nur etwa der Hälfte der Befragten. Dies ist aufgrund der noch kleinen Größe des zentralen Systems sowie aufgrund der Tatsache, dass 60% angaben, (auch) dezentrale Cluster oder Arbeitsgruppenrechner nutzen zu können, jedoch auch nicht überraschend. Tier-2-Systeme werden nur von 10%

genutzt, dafür werden Tier-1 und Tier-0-Systeme von jeweils etwa 20% der Nutzenden in Anspruch genommen. Fast $\frac{2}{3}$ der Befragten haben bereits Publikationen mit HPC-Bezug und 80% bereiten welche vor.

Programmierkenntnisse bestehen in C/C++ (94%), Python (74%), Java (60%), Matlab (59%), Mathematica (58%), R (48%), Fortran (34%) und Julia (32%). 90% der Befragten gaben an, ihre Software (auch) selbst zu schreiben. Fast 90% gaben außerdem an, Parallelisierung zu nutzen, wobei über einzelne Knoten parallelisierte Programme (30%) zwar die Mehrheit bilden, jedoch auch mittel (16%), stark (32%) und extrem (16%) parallelisierte Aufgaben eine Rolle spielen. Bei der Parallelisierung kommen vor allem OpenMP (48%), MPI (45%) und CUDA (26%) zum Einsatz. Einige Befragte haben darauf hingewiesen, dass Fragen zur Parallelisierung und Jobgröße schwer zu beantworten sind, da selbst innerhalb eines Tätigkeitsbereichs Jobs aller Größenordnungen benötigt werden können.

Die meisten Befragten (75%) gaben an, die Flaschenhalse ihrer Anwendungen zu kennen während 65% diese auch analysiert haben. Arbeitsspeichergöße (30%), Gleitkomma- (30%) und Datendurchsatz (30%) sowie Bandbreite des Arbeitsspeichers (20%) werden in den meisten Fällen als dominant angegeben. 40% der Befragten gaben an, mehr als 4 GB Arbeitsspeicher pro Rechenkern zu benötigen und auch aus den Freitextantworten ist ein hoher Bedarf ersichtlich. Bei der geplanten Erweiterung des zentralen Clusters im Laufe des Jahres 2021 wird dieser Aspekt durch die Bereitstellung von SMP- und FatNode-Partitionen Berücksichtigung finden, ebenso wie der von mehr als 50% der Befragten angegebene Bedarf an über 5 GB Speicherplatz pro Job, worauf einerseits kurzfristig durch die Bereitstellung von Scratch-SSDs auf den existierenden Rechenknoten und mittelfristig mit einem großen und performanten parallelen Dateisystems reagiert werden wird. Auch bei Fragen zu Flaschenhälsen gaben einige der Befragten zu bedenken, dass sich solche Bedarfe nur schwer pauschalisieren lassen.

Bei Lehangeboten sind vor allem kurze Präsenz- (40%) oder Online-Tutorials (40%) gefragt und es besteht lediglich bei 13% eine allgemeine Bereitschaft für Kurse zu reisen, die allerdings auf 55% steigt, wenn es sich um besonders interessante Angebote handelt. Ein Bedarf besteht vor allem an Einführungen zu Performance-Profiling (48%), Software-Containern im HPC (42%), der Erstellung von Rechenzeitanträgen (32%), dem effizienten Umgang mit Daten (32%) und Debugging (29%). Einführende Kurse zur GPU-Programmierung mit CUDA sind gefragt (42%), aber auch Einführungen in C/C++ (23%), OpenMP (23%), OpenACC (23%) sowie MPI (16%) und OpenCL (13%).

Fortgeschrittenenkurse zur Performance-Optimierung wünschen sich 58% der Befragten, während Lehangebote zu Compiler- und Bibliothekennutzung von 52% nachgefragt werden und sich 42% bzw. 39% Kurse zu parallelem Debugging sowie Profiling wünschen. Programmierkurse für Fortgeschrittene sind vor allem in C/C++ (55%), MPI (35%), Python (35%) und OpenMP (32%) gefragt, wobei 35% sich generelle Kurse zur Performanceoptimierung auf GPUs wünschen.

Die Ergebnisse der Nutzendenbefragung gehen in die Ausrichtung lokaler Angebote ein und werden zusammen mit weiteren Bedarfserhebungen verwendet, um der Nutzerschaft einen verbesserten Überblick zu passenden Kursangeboten zu geben. Dieses setzt sich aus lokalen Lehangeboten mit HPC-Bezug in den Fachbereichen, dem Kursangebot von HPC.NRW, sowie überregionalen und Online-Angeboten zusammen. Des Weiteren wird das HPC/A-Lab sich bemühen, in regelmäßigen Newslettern auf diese sowie die im Kalender der Gauss-Allianz beworbenen Kursangebote hinzuweisen.

13.5 Standortspezifische Auswertung - Dortmund

32 Nutzende des LiDO3 Clusters der TU Dortmund haben vollständig an der Umfrage teilgenommen. Dies entspricht etwa 30% der aktiven Nutzenden. Das Feedback der Befragten war größtenteils positiv. Jedoch sind einige Probleme verdeutlicht worden, die in der Art dem Administrationsteam bisher noch nicht in diesem Umfang aufgefallen sind und die erst nach der Umfrage bei genauerer Betrachtung wirklich bewusst wurden. Als größtes Problem wurden teilweise ungewöhnlich lange

Wartezeiten genannt, obwohl die Auslastung des Clusters nicht hoch war. Als Ursache hierfür wurde ein problematisches Backfilling von SLURM mit 1 Core Jobs identifiziert, welches dazu geführt hat, dass sehr viele Nodes nur mit einigen wenigen Cores ausgelastet waren und sehr viele Ressourcen frei waren. Für SLURM-Jobs, die vollständige oder gar mehrere Nodes anfordern, ist dies natürlich ein Problem. Als Lösung hierfür evaluieren wir derzeit mehrere Ansätze. Eine Umstellung auf eine Node-weise Allokierung innerhalb von SLURM würde das Problem zwar schnell lösen, stößt jedoch bei einem Teil der Nutzerschaft auf begründete Bedenken. Als Alternative hierzu haben wir zwei weitere Ansätze mithilfe des hpc.nrw Kompetenznetzwerkes für unseren Standort entwickelt. Zum einen wird derzeit ein hybrides Modell aus Single Core und Node-weise Allokierung erprobt, zum anderen testen wir erweiterte Backfilling-Optionen in der SLURM Konfiguration.

Als weiterer oft genannter Wunsch war eine Effizienzanalyse für die Nutzenden. Hierfür wurde das SLURM-interne Seff Tool auf dem Cluster konfiguriert und in die automatische Mailbenachrichtigung von SLURM mit integriert. Weitere Maßnahmen werden mit dem Kompetenznetzwerk koordiniert.

Desweiteren wurde oftmals der Wunsch nach Schulungen in Bereichen der Performance Analyse und der parallelen Debugger gewünscht, da ein Großteil der Nutzenden keine oder nur sehr rudimentäre Erfahrungen damit haben. Diesen Punkt werden wir im Nachspiel des Train-the-Trainer Programmes von TotalView für die parallelen Debugger in Angriff nehmen.

13.6 Standortsspezifische Auswertung - Düsseldorf

Obwohl auf dem Düsseldorfer HPC Cluster "Hilbert" sehr viele Forschende aktiv sind, haben lediglich 28 von ihnen die Nutzendumfrage vollständig ausgefüllt. Mit großem Abstand kommen diese Befragten aus dem Gebiet der Biologie, gefolgt von Informatik, Physik und nicht zuletzt auch aus den Bereichen Chemie, Medizin und Sozialwissenschaften. Die meisten Nutzer/innen haben einen Master- oder Dokortitel, aber auch viele Professoren rechnen selber; nur die wenigsten starten direkt schon im Bachelor mit HPC durch. Die Allermeisten rechnen ausschließlich hier in Düsseldorf und keinen anderen HPC System. Obwohl die Meisten direkt auf dem HPC Cluster rechnen, gibt es auch noch Nutzende, die (zusätzlich) auf kleineren Arbeitsgruppensystemen rechnen. Nur vier der Befragten geben an, dass HPC sie bei Ihrer Arbeit lediglich unterstützt - für alle anderen ist HPC absolut wichtig für ihre Forschung. Spezielle Vorlesungen zu HPC gibt es nur sporadisch, aber immer häufiger. Stolze 68 % der Befragten haben durch die Nutzung des HPC Clusters in letzter Zeit mindestens eine Veröffentlichung erzielt und noch mehr sind in Arbeit. Nur etwa ein Drittel der Befragten baut ihre Software selber und nutzt dafür hauptsächlich einen GNU Compiler und teilweise auch einen Intel Compiler. Die meistgenutzten MPIs sind IntelMPI und OpenMPI. Vielgenutzte Bibliotheken sind CUDA, Intel MKL, OpenBLAS und FFTW. Ganze 61 % der Befragten entwickeln selber Anwendungen, geben aber an, dass ihre Programmiersprachenkenntnisse oft nur mittelmäßig sind. Fast alle Programme sind parallel, wobei die meisten CUDA, MPI und/oder OpenMPI dafür einsetzen. Die wenigsten Anwender haben Erfahrungen mit Tools, um die Performance ihrer Anwendungen zu untersuchen und auch nicht mit Debuggern. Es werden auch keine weiteren Tools gewünscht. Die eingesetzte Software ist zu 45 % Open-Source, zu 36 % selbstentwickelt und nur zu 19 % kommerziell verfügbar. Die wenigsten wünschen sich mehr Software in der Zukunft. Die meisten Nutzenden verwenden ssh, aber es gibt auch Fälle mit graphischen Nutzeroberflächen. Mit großem Abstand arbeiten die meisten Anwender direkt mit den Daten innerhalb des HPCs und in Fällen, wo doch ein Datenaustausch passieren muss, wird dies in erster Linie mittels scp/sshfs oder per Netzlaufwerk erledigt. Bezüglich Container gaben fast alle an, dass sie daran kein Interesse haben. Lediglich ein Viertel der Befragten nutzt Jupyter oder möchte dies tun. Die wenigsten wissen, wo ihre Performance-Bottlenecks sind - nur 32 % haben eine grobe Ahnung. Als das Hauptbottleneck wird die Größe des Arbeitsspeichers angesehen. Das wird auch daran ersichtlich, weil die meisten nur bis zu 24 Cores, also nur einen einzigen Knoten, verwen-

den. Mit Verbrauch an Arbeits- und Festplattenspeicher sind die Düsseldorfer scheinbar recht weit vorne. Fast alle sind dennoch zufrieden, können effizient in Düsseldorf arbeiten und haben ausreichend Ressourcen zur Verfügung. 100 % der Befragten wissen, wie sie Kontakt zum Nutzersupport aufbauen können und fast alle haben dies auch schonmal getan. In den meisten Fällen geht es dann um anwendungsspezifische Probleme, um die Jobs oder den Zugriff auf Daten. Viele wünschen sich mehr HPC Workshops, haben aber auch noch nie einen besucht. Bevorzugt werden dafür kurze Online-Tutorials oder lokale Nachmittagskurse. Eine Reisebereitschaft ist da, aber nur wenn die Kurse wirklich interessant sind. In erster Linie geht es dabei um Einführungskurse und nur seltener um fortgeschrittene Themen wie Code-Optimierung. In den Freifeldantworten werden unzählige Anwendungen aufgelistet. Als größtes Problem wird die lange Ausfallzeit sowie der Datenverlust angegeben, aber auch die Einschränkungen aufgrund der Cyber-Angriffe werden kritisch gesehen. Gefordert werden mehr Knoten mit sehr viel Ram (mehr als 1 TB), eine höhere Verfügbarkeit & Zuverlässigkeit und dringend mehr Leute für das viel zu kleine HPC-Team. Als Maßnahmen forciert Düsseldorf eine Strategieumstellung von bisher maximaler Leistung pro Euro auf mehr Verfügbarkeit und Redundanz, um HPC als Basisdienst zu etablieren. Auch werden mehr Knoten mit viel Arbeitsspeicher angeschafft. Sehr zufrieden sind die Düsseldorfer HPC Nutzenden mit dem HPC Support. Daher schließe ich mit folgendem Zitat aus der Nutzerumfrage: “I would like to emphasize the extraordinary good support of the local HPC support, which is always available and helpful.”

13.7 Standortspezifische Auswertung - Duisburg-Essen

An der Umfrage haben nur 11 Nutzende des HPC-Clusters magnitUDE der Universität Duisburg-Essen teilgenommen und stellen damit lediglich ca. 30% der aktiven Nutzenden dar. Diese geringe Teilnahme erklärt sich auch damit, dass der Zeitpunkt der Umfrage in die Downtime fiel, welche aufgrund des Sicherheitsvorfalls bestand. Die Ergebnisse der Umfrage für den Standort zeigen, dass die zur Verfügung stehenden Ressourcen grundsätzlich ausreichend sind für den überwiegenden Teil der Befragten. Zufrieden mit dem Support sind ca. 2/3 der Befragten. Diese beiden Aspekte zeigen, dass die Ausstattung grundsätzlich mit den Anforderungen der Nutzenden im Einklang ist. Jedoch gibt es ein paar Einzelaspekte, welche besonders in den Freitextantworten geäußert wurden. Diese werden im Folgenden vorgestellt und mögliche Maßnahmen genannt.

Einige Befragte merkten an, dass die zur Verfügung stehenden SLURM-Partitionen keine ausreichend lange Laufzeiten⁴ aufweisen. Die Einführung von neuen Partitionen mit längeren maximalen Laufzeiten lässt sich mit dem aktuellen Cluster-Konzept nicht vereinbaren. Dadurch würden sich u.a. die Wartezeiten der Jobs mit einer hohen Kernanzahl stark vergrößern. Aus diesem Grund soll die Evaluation von software-unabhängigen Check-Point-Bibliotheken/Softwareumgebungen durchgeführt werden, um grundsätzlich den Einsatz von Job-Arrays für sogenannte Langläufer zu vereinfachen. Gleichzeitig soll aber auch bei der Nutzendenberatung gezielter auf ein software-seitiges Check-Pointing hingewiesen werden, soweit es die jeweils eingesetzte Software bereitstellt.

Der Wunsch nach interaktiven Jobs zur Visualisierung von HPC-Ergebnissen wurde geäußert, um die massiven Datenmengen effizient zu verarbeiten. Die Möglichkeiten dieser Job-Arten sollen im Rahmen des aktuellen Cluster-Konzepts getestet werden. Bei zukünftigen HPC-Systemen an der UDE soll diese Nutzungsart von Beginn an berücksichtigt werden.

Mehrere Antworten zeigen, dass die Menge an vorinstallierten HPC-Softwarepaketen, Bibliotheken und Compilern ausbaufähig ist. Dabei spielen nicht nur unterschiedliche Produkte, sondern auch die Diversität an Versionen eines Produkts eine wichtige Rolle. Hierzu soll eine erneute Befragung der Nutzenden stattfinden, um konkrete Softwareproduktwünsche zu erheben.

⁴längste allgemeine Job-Laufzeit: 4 Tage bei max. 432 Kerne/Job

13.8 Standortspezifische Auswertung - Köln

In den 54 ausgefüllten Fragebögen aus Köln sind Nutzende aus den Lebenswissenschaften stark vertreten (Bio+Chem+Med: 25, Math+Phys: 16). Die Befragten gaben an, überwiegend am Standort Köln zu rechnen, ein paar wenige noch in Aachen, einzelne Angaben verteilen sich auf viele Standorte in NRW. Die akademische Ausbildung der Nutzenden ist - wie bei den meisten anderen HPC Sites - gehoben (Dr.: 18, Master: 20).

Primär genutzt wird das HPC System für Forschung, wobei für die Befragten HPC für ihre Arbeit wichtig bis unabdingbar ist. Über die Hälfte (29) der Befragten veröffentlichten Peer Reviewed Artikel in den letzten 18 Monaten, 35 planen Artikel bald zu veröffentlichen. Für Lehre wird HPC eher weniger genutzt, lediglich bei wenigen (8) ist es sehr wichtig.

Die Mehrheit der Befragten (31) gaben an, ihren Code selbst zu entwickeln und zu bauen, wobei vornehmlich Open Source (40) oder selbst entwickelte (28) Software zum Einsatz kommt. Die am häufigsten eingesetzten Programmiersprachen sind dabei Python, C/C++, Matlab und R, wobei Java, Fortran und Julia in bestimmten Nutzergruppen stark zum Einsatz kommen. Die Software wird meist per MPI und OpenMP parallelisiert und auf einer mittleren (5-40 Cores) bis hohen (ab 41) Anzahl von Cores eingesetzt, mit meist über 4 GB (20) RAM per Core (2-3 GB: 15). Positiv bemerkt wird die Shared Node Usage und dass auch lange Joblaufzeiten auf CHEOPS unterstützt werden.

Aufgrund des Alters des gegenwärtigen HPC Systems CHEOPS am RRZK sind einige Beschränkungen in der Hardware und Software zu erwarten. Das System ist meist sehr gut ausgelastet, was sich leider auch in längerer Wartezeit bei Jobs niederschlägt. Zum Beispiel wurde die IO Performance des alten /scratch Filesystems bemängelt, weshalb im Jahr 2020 ein neues Storage System mit SSD Cache beschafft und installiert wurde.

Einige Nutzende wünschen sich aktuelle Softwaretechnologien wie Docker (18), Singularity (8) oder neuere Versionen von wissenschaftlicher Software wie R. Ein Update des CHEOPS Clusters auf Centos7 ist derzeit in Arbeit und aktuelle wissenschaftliche Software ist über den Modulbaum verfügbar. Auch wünschen sich die Nutzenden meist Hardwareerweiterungen wie Nodes mit viel RAM (25) oder GPGPUs (6), welche aber erst mit dem Nachfolger CHEOPS2 der Allgemeinheit bereitgestellt werden können. In einigen Fällen wurden für CHEOPS auch Special Purpose Nodes beschafft, meist mit GPGPUs, welche mit Centos7 betrieben werden, aber nur speziellen Arbeitsgruppen zur Verfügung stehen. In einigen Fällen (13 Nennungen) reichen die von CHEOPS bereitgestellten HPC Ressourcen nicht. Gerade die größten Ressourcenanforderungen wird nur das Nachfolgesystem CHEOPS2 erfüllen können, welches sich gerade in der Beschaffung befindet. Trotzdem äußern sich die meisten Befragten (34) positiv zur Frage, ob man auf CHEOPS effizient arbeiten kann, mit weiteren Befragten, dass dies mit Workarounds (10) oder mit Einschränkungen (9) möglich ist. Ähnlich wurde die Frage beantwortet, ob CHEOPS noch genug HPC Ressourcen bereit stellt.

Der Support durch die HPC Mitarbeiter des RRZK ist den Nutzenden bekannt und wird für alle Arten von Themen (z.B. Fragen zu Optimierungen, Filesystemen, Job Submission) in Anspruch genommen. Mehrfach wurde das HPC Team für den exzellenten Support gelobt. Im Allgemeinen wurden mehr HPC Kurse, gerne auch online, angefragt. Die gewünschten Themen sind dabei Debugging und Profiling, insb. paralleles Debugging und Optimierungen und die Einführung in Programmiersprachen wie Python, C/C++, CUDA. Die gegenwärtig angebotenen Kurse (z.B. zur Parallelisierung) werden von den Nutzenden gerne besucht. Neue Kursformen, auch mit externen Experten, werden vom RRZK entwickelt und immer wieder angeboten. Um dieses Angebot auszubauen, ist aber das Einstellen von mehr HPC Personal unabdingbar. In diesem Jahr wurde bereits ein Mitarbeiter eingestellt, welcher den HPC Support von lebenswissenschaftlichen Anwendungen und Nutzenden übernimmt und ausbaut. Auch möchten wir hierzu die Nutzenden in Zukunft auf die Dokumentationen und Kurse, welche im Rahmen von HPC.NRW entwickelt werden, verweisen.

13.9 Standortspezifische Auswertung - Münster

Der größere Teil der 40 ausgefüllten Fragebögen aus Münster stammt mit 15 aus der Physik. Andere Naturwissenschaften, namentlich Chemie, Biologie und Geowissenschaften sind mit zusammen 15 Fragebögen aber genauso stark vertreten. Weitere Antworten kamen aus der Medizin, Mathematik und den Sozialwissenschaften.

40% der befragten sind zufrieden mit dem Umfang des Supports, die anderen wünschen sich mehr individuellen Support (12%) oder mehr Unterstützung in Form von Trainings und Tutorials.

An diesen haben bisher 32% teilgenommen. Für zukünftige Veranstaltungen ist kein klarer Wunsch nach einem bestimmten Format zu erkennen, da sowohl kurze als auch ausführlichere Onlinetutorials gewünscht werden, viele sich aber auch lokale Veranstaltungen von unterschiedlicher Länge wünschen.

Eine der häufiger geäußerten Rückmeldungen waren zu lange Wartezeiten im Batchsystem. Da nicht kurzfristig signifikant mehr Hardware beschafft werden kann, soll diesem Missstand mit verschiedenen anderen Maßnahmen begegnet werden.

Wichtig ist zum einen eine bessere Schulung der Nutzenden, damit einer ineffizienten Nutzung von Hardware, bei der Teile der reservierten Hardware ungenutzt bleiben, begegnet werden kann. Dazu wird in der Dokumentation eine FAQ-Liste angelegt, die die häufigsten Fragen (auch aus der Nutzendenbefragung selbst) und Probleme in verständlicher Weise beantworten, beziehungsweise lösen soll. Weiterhin sind gezielte Beratungsgespräche, sofern von den Nutzenden gewünscht, geplant. Dabei sollen sowohl unerfahrene Nutzende besser in die Nutzung des Cluster eingewiesen werden als auch erfahrene Nutzende in der effizienten Nutzung des Clusters beraten werden.

Um einen besseren Überblick über das Verhältnis von angeforderter und tatsächlich genutzter Hardware besser erkennbar zu machen, wurde eine automatische Verwendung des Tools *seff* in das Prologskript des Batchsystems des Münsteraner Clusters eingebaut. Dadurch werden automatisch Emails nach Abschluss eines Jobs verschickt, die die genannten Informationen enthalten.

Ein Teil der Nutzenden ist weniger durch die Anzahl der CPUs, sondern eher durch den zur Verfügung stehenden Hauptspeicher limitiert. Für diesen Use-Case wird über einen Ausbau des Angebots an Maschinen mit besonders großem Hauptspeicher (1,5 und 3 TB) nachgedacht.

Ein weiteres Ergebnis der Befragung war Kritik an der maximal möglichen Laufzeit von Jobs von sieben Tagen. Da durch eine wesentlich ausgedehnte maximale Laufzeit kurzfristig geplante Wartungsarbeiten so gut wie unmöglich werden und dadurch insbesondere eine schnelle Zuteilung von Rechenressourcen erschwert wird, was wiederum mit dem Ziel möglichst kurzer Wartezeiten im Batchsystem kollidiert, soll dies anders gelöst werden. Ein Mechanismus zum Pausieren und Fortführen von Jobs, sogenanntes Snapshotting soll eingeführt werden, um damit prinzipiell beliebig lange Laufzeiten einzelner Rechnungen zu ermöglichen.

13.10 Standortspezifische Auswertung - Paderborn

Von den insgesamt etwa 450 Personen, die an der Nutzendenbefragung teilgenommen haben, nutzen 58 eines der Paderborner HPC-Systeme (Noctua oder Oculus). Das repräsentiert knapp 10 % der Nutzenden mit Zugriffsberechtigung. In den Zugehörigkeiten zu Fachbereichen spiegeln sich die Schwerpunkte des PC², sprich atomistische Simulationen, Optoelektronik und Quantenphotonik, sowie intelligente Systeme wieder. Die Befragten aus Paderborn nutzen vor allem (zu 98 %) die Systeme, die das PC² anbietet und nur in geringen Maße andere Tier-3- oder Tier-2-Zentren in NRW. Die Ausnahme bilden Tier-1 Systeme, die von 14 % zusätzlich genutzt werden. In der Umfrage haben etwa 90 % der Befragten aus Paderborn angegeben, einen Weg zu kennen, mit dem HPC-Support bei Problemen oder Fragen in Kontakt treten zu können. Etwa 74 % haben angegeben, den Support schon einmal genutzt zu haben. In den Wünschen zum Ausbau des HPC-Supports sind allgemeine HPC-Kurse und Anwendungs- bzw. Fachbereichsspezifischer Support die Prioritäten. Dies bestärkt das PC² in der Weiterführung des 2019 initiierten fünfgliedrigen allgemeinen HPC-Kursprogramms (<https://pc2.uni-paderborn.de/teaching/trainings/hpc-user-trainings>) und im Ausbau der Fachberatung in den Schwerpunkten. Etwa 44 % der Befragten aus Paderborn haben bereits an

HPC-Kursen oder HPC-Tutorials teilgenommen. Die Antworten zeigen auch erneut einen großen Bedarf an Schulung der Nutzenden zur effizienten Nutzung von existierenden Softwarepaketen, v.a. aus der Quantenchemie und Festkörperphysik (VASP, CP2K, Gaussian, ORCA, Crystal,...). Im Rahmen des Ausbaus der Fachberatung zu diesen Themen wurde dazu schon im Februar 2020 eine einwöchige Winterschool vom PC² organisiert (<https://pc2.uni-paderborn.de/winterschool>) und weitere sind in Planung.

Um diesen Bedarf abzudecken, wurde bereits mit der Ausarbeitung eines Kurses für die Python-Nutzung im HPC-Umfeld am PC² begonnen, der noch in 2020 durchgeführt werden soll.

Die große Nachfrage nach Jupyter Notebooks, die auch in der Umfrage deutlich wird, wird am PC² durch zwei Integrationswege ins HPC-Betriebskonzept aufgenommen: Zum einen wurde ein Wrapper (<https://wikis.uni-paderborn.de/pc2doc/Jupyter>) erarbeitet, der es jedem Nutzenden erlaubt, auf Oculus Jupyter-Notebooks auf Rechenknoten inkl. GPU- und Container-Unterstützung zu benutzen. Zum anderen wird das in Zusammenarbeit zwischen dem PC² und der Fachhochschule Südwestfalen entwickelte System zur effizienten Integration von Jupyter in HPC Systeme (<https://www.uni-paderborn.de/lehre/lehrinnovationen/fellowship/>) demnächst auf den Paderborner HPC-Systemen zum Einsatz kommen.

Als spezifische Probleme wurden in der Umfrage Probleme mit Dateitransfer per scp und ähnlichen Programmen genannt, woraufhin die Anleitungen dazu in der Nutzerdokumentation des PC² überarbeitet wurden. Auch Probleme bei der Nutzung von Softwarecontainern wurden genannt, sodass diese als weiteres Kapitel in die HPC-Kurse mit aufgenommen wurden.

Die auch in der Umfrage geäußerten Engpässe bei der Verfügbarkeit von (Consumer)-GPUs für maschinelles Lernen wurden durch ein Investitionsprogramm adressiert, in dem schon neue Rechenknoten mit Consumer-GPUs angeschafft und in die Clusterinfrastruktur integriert werden konnten. Im September 2020 wurde zusätzlich ein neues Scheduling-Verfahren für die Verteilung der GPU-Ressourcen konfiguriert, das eine fairere und gleichmäßigere Auslastung erreichen soll.

13.11 Standortspezifische Auswertung - Siegen

In Siegen haben nur ca. 10% der berechtigten Nutzenden an der Umfrage teilgenommen. Wir gehen davon aus, dass dies auch unsere aktivsten und fortgeschrittensten Nutzenden sind, deren Nutzungsverhalten uns im Großen und Ganzen bekannt ist. Auffallend war, dass die durchschnittliche Jobgröße geringer ist als erwartet. Diesbezüglich werden wir Gespräche mit den Nutzenden zur Ursachenfindung und Befähigung zur Vergrößerung der Jobs initiieren.

Auch die Verwendung eines parallelen Dateisystems wird von uns bisher noch unzureichend kommuniziert. Aufgrund der auch in der Umfrage hohen Nachfrage nach Jupyter Notebooks haben wir kurzfristig eine Umsetzung auf dem Nachfolgersystem (Start Ende 2020) vorgesehen. Auch der dann mögliche Einsatz von GPUs soll anhand der Umfrageergebnisse systematisch kommuniziert werden, damit die doch größer ausfallende Gruppe an interessierten Nutzenden diese auch zeitnah einsetzen können.

Die Umfrage zeigt aber auch, dass der HPC-Support ausreichend bekannt und auch gut ist. Leider sind HPC-Themen bisher kaum in den Lehrplänen verankert. Mit einer regelmäßigen Clustereinführung und weiteren HPC spezifischen Kursen schafft das Rechenzentrum (ZIMT) hier schon einen offenen Einstieg für verschiedenste Anwendergruppen. Ausgerichtet an der durch die Umfrage bestätigte Nachfrage nach Programmier- und Software-Entwicklungs-Kursen sowie Tutorials zur Fehleranalyse und Leistungsverbesserung, erweitern wir unser Schulungsangebot zeitnah.

13.12 Standortspezifische Auswertung - Wuppertal

In Wuppertal wurde die Nutzungsumfrage leider nur von vier Personen ausgefüllt, weshalb alle Schlussfolgerungen vor diesem Hintergrund zu sehen sind.

Die Antworten kommen von Wissenschaftlern aus der Physik (3) und dem Maschinenbau (1). Alle gaben an, dass HPC eine sehr zentrale Rolle in ihrer Forschung spielt, die HPC Ausbildung jedoch keine oder nur eine geringe Rolle in dem jeweiligem Studium spielt.

Die verwendete Software besteht aus projekteigenen Programmen und open-source Tools. Es gibt ein Interesse an Tensorflow, CUDA und Containern im HPC Kontext. Bei zwei Befragten kommt bereits Singularity zum Einsatz, wobei angegeben wird, dass es zu Problemen kommt. Eine nutzende Person wünscht sich, dass neuere GCC Versionen schneller auf dem Cluster zur Verfügung gestellt werden.

Zwei der Befragten gaben an, ihre Jobs nicht zu profilieren und entsprechend nicht zu wissen, wo die Bottlenecks ihrer Programme liegen. Für die weiteren Nutzer scheint ausreichend Know-How mit Profiling Tools vorhanden zu sein. Es besteht Interesse an Fortbildungen zu dem generellen Umgang mit Linux, parallelem Debugging, fortgeschrittener Umgang mit C++ oder Python und effizienter Datenspeicherung. Dabei werden vor allem kurze online Tutorials bevorzugt.

Die Kontaktmöglichkeiten zum lokalen HPC Support sind bekannt und werden hauptsächlich für den Cluster Zugang und die Job Submission in Anspruch genommen.

Unter Berücksichtigung unserer lokalen Einsichten, resultieren diese Ergebnisse in den folgenden Maßnahmen:

Das bestehende und zukünftige Software- und Tutorial-Angebot von HPC.NRW wird weiterhin lokal bekannt gemacht. Gerade der Zugang zu profiling Tools und dem entsprechenden Know-How dürfte von einigen Nutzenden gut angenommen werden.

Nach der erfolgten Beschaffung eines neuen Clusters in 2021 möchten wir außerdem das Software Angebot durch die Verwendung eines Modulsystems, wie z.B. Easybuild, untersuchen. Damit ließen sich z.B. mehrere Versionen des GCC Compilers anbieten, womit neuere Versionen eher zur Verfügung stehen dürften.

Mit der neuen Beschaffung planen wir außerdem das Support Angebot zu formalisieren, indem ein Ticketsystem, eine regelmäßige HPC Sprechstunde, sowie ein Kontakt für GPU- und MPI-Optimierungsfragen eingerichtet werden.

14 Zusammenfassung

Zusammenfassend ist zu sagen, dass die NRW-weite Nutzendenbefragung, obwohl nur etwa 10%-20% der aktiven Nutzenden jedes Standortes teilgenommen haben, mit insgesamt etwa 450 Befragten doch teilweise repräsentative und verwertbare Ergebnisse zu Tage gefördert hat. Eine allgemeine Auswertung wurde in diesem Dokument präsentiert. Die Rohdaten stehen den Partnern im Kompetenznetzwerk HPC.NRW für weitere Analysen wie zum Beispiel Korrelationsanalysen, die Angaben über Fachbereiche mit anderen Antworten wie zum Beispiel Ressourcen oder Supportanforderungen verbinden, zur Verfügung.

Insgesamt zeigen die Antworten, dass der HPC-Support in den HPC-Zentren in NRW schon gut aufgestellt ist, jedoch an wichtigen Stellen noch nachgebessert werden kann, um die Systeme einfacher und effizienter nutzbar zu machen. Etwa ein Jahr nach dem Start des Kompetenznetzwerkes HPC.NRW konnten eine Vielzahl von lokalen und NRW-weiten Maßnahmen bereits etabliert werden. Es ist geplant die Nutzendenbefragung regelmäßig zu wiederholen. Dies ermöglicht eine Abbildung von langfristigen Entwicklungen und die Evaluation der Wirkung von neuen Maßnahmen.