



# KIFÜ HPC FELMÉRÉS

## AKADÉMIAI FELHASZNÁLÓK

### 2020



**HPC @hu**  
Competence Centre



2020 második negyedében a KIFÜ HPC-CC Koordinációs Iroda felmérést végzett a már meglévő felhasználói körben az akadémiai szférából. A válaszadókat arra kértük, hogy értékeljék a KIFÜ HPC szolgáltatásának különböző aspektusait, valamint adjanak visszajelzést a fejlesztendő területekkel kapcsolatban. Ezeket az inputokat beépítjük a munkatervünkbe, és definiáljuk, hogy milyen konkrét tevékenységekkel kezelhetjük azokat.

A kérdőív 23 kérdésből állt, egyes kérdések pontosító alkérdéseket is tartalmaztak. A KIFÜ több mint 800 címre küldte ki a kérdőívet. Ezen a címlistán aktív és passzív HPC felhasználók is megtalálhatók. Így összesen 129 kitöltés érkezett, amelynek az 56%-a teljes, 44%-a pedig részleges kitöltés volt.

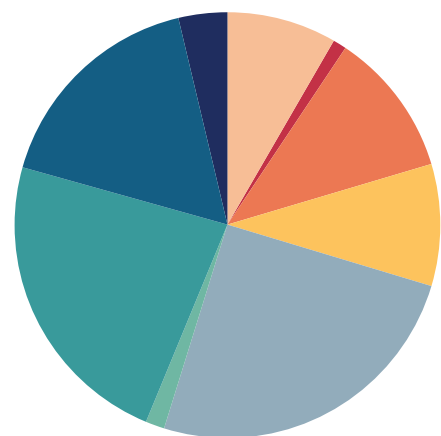
## FELHASZNÁLÁSI ADATOK, ELÉGEDETTSÉG FELMÉRÉSE

A kérdőív első részeként a felhasználás általánosabb aspektusait vizsgáltuk meg (milyen intézetből, milyen tudományterületeken használják főként az erőforrásokat). A HPC kapacitásainkat az akadémiai szektorból főként felsőoktatási intézmények veszik igénybe (71%). A felhasználók másik nagy csoportját a kutatóintézetek alkotják, 29%-os részvétellel.

Számítási kapacitásainkat legnagyobb arányban (53%) folyamatban lévő kutatásokban veszik igénybe. A felhasznált erőforrások az esetek 27%-ban járultak hozzá jelentős eredmény eléréséhez az adott tudományterületen. A felhasználók kisebb mértékben számoltak be előkészítő (12%), illetve nemzetközi visszhangot kiváltó tudományos áttöréssel járó (5%) kutatásról.

A tudományterületi megoszlást a lenti kördiagram illusztrálja:

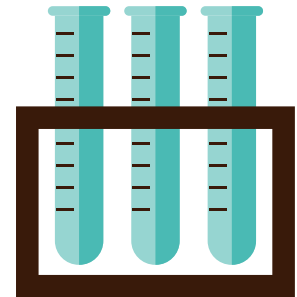
### TUDOMÁNYTERÜLETEK MEGOSZLÁSOK %-BAN



A fentiek alapján megállapítható, hogy a HPC-s számítások leginkább természettudományi területekhez köthetők, ezek közül is a kémiai, és a fizikai kutatások kapcsán magas az igénybevétel, amely a szoftveres igényeken (molekuladinamikai, molekuláris modellezési, kvantumkémiai szoftverek) is visszaköszön a kérdőívünk későbbi szakaszában. Azt láthatjuk, hogy döntően a STEM, valamint az orvosi tudományterületek használják a HPC erőforrásokat, más tudományterületek is megjelennek, mint például az agrár- és a nyelv- és irodalomtudományok.



A felmérés következő részében a felhasználóink a HPC infrastruktúrával kapcsolatos elégedettségét mértük fel, hogy lássuk melyek azok a területek, amelyek kiemelt figyelmekkel kezelendők. A „KIFÜ által jelenleg biztosított HPC számítási kapacitásai elegendőek a kutatásaim támogatásához” kérdésre csupán a felhasználók 11%-a volt teljesen elégedett, míg nagyobb részük (38% és 34%) egyetért, vagy csak részben egyetért választ adott. 11% és 6% nem ért egyet, és egyáltalán nem ért egyet. Ezekből az adatokból látszik, hogy a jelenlegi HPC erőforrásainkat elkezdjük kinőni, erre a területre fokozottan figyelniünk kell.



A KIFÜ által biztosított HPC szoftverek esetében is hasonló képet kapunk, mint a számítási kapacitások tekintetében. Zömében elégedettek a felhasználók, de úgy tűnik, hogy a szoftveres fejlesztésekre is lenne igény. 9% teljesen elégedett, 36% elégedett, 38% részben elégedett míg 7% nem elégedett, és 10% abszolút nem elégedett.

Ezek alapján a HPC alkalmazások fejlesztése, valamint a szupergépeken lévő programok rendszerezése egy fejlesztendő terület a jövőre nézve.

Szoftverekkel kapcsolatban megkérdeztük, hogy lenne-e igény részletesebb útmutatókra/segédletekre a HPC portálon elősegítendő azok alkalmazását. Az visszajelzések alapján (18% - Teljesen egyetért és 37% - Egyetért) úgy tűnik, hogy erre is szívesen támaszkodnának a felhasználók. A válaszok jelentős hányada szerint (35%) erre nem biztos, hogy teljesen szükség lenne, míg a válaszok 9% és 1%-a alapján erre nem lenne nagy igény. A szuperszámítógépeken található leírások, a HPC szoftverekhez tartozó futtatási segédletek fejlesztése nem elhanyagolható: a felhasználói élmény javításán a felhasználóink szerint is dolgozni kell. A fenti eredmények arra engednek következtetni, hogy különböző tapasztalati szinttel rendelkező felhasználók használják a HPC infrastruktúrát, és amíg a tapasztalt user könnyebben elboldogul a különböző szoftverek világában, úgy egy kezdő felhasználó, vagy egy újabb szoftver esetében szükség van támogatásra a fenti segédletek formájában.

A HPC futtatásokhoz projekteket kell létrehozni, amelyet megelőz egy projekt elbírálási folyamat. A kapott adatok alapján a felhasználók nagy része elégedett az elbírálás gyorsaságával (29% és 51%), míg kisebb arányban (15%, 3% és 2%-ban) kritika érte a folyamatot, A projekt elbírálási folyamat fejlesztése a HPC-CC Koordinációs Iroda munkatervében nevesítve van.

A HPC használata során a beküldött job-ok sokszor várnak erőforrásra, mert a most meglévő gépek kihasználtsága meglehetősen magas. Ismerve ezt a jelenséget, felmértük a várakozási idővel kapcsolatos tapasztalatokat is. Itt jól látszik, hogy a várakozási időt szükséges csökkenteni, melyet legfőképpen a számítási kapacitások bővítésével tudnánk elérni. Csak 9%-nak megfelelő teljesen a várakozási idő, 22%-nak megfelelő, még legnagyobb arányban 51% csak részben megfelelő a várakozási idő. Kisebb arányban 12% és 6%-nak pedig nem vagy abszolút nem megfelelő a várakozási idő. A HPC kapacitás esetében a közeljövőben fejlesztések várhatók, hiszen a 'GINOP 3.1.5-20 Szuperszámítástechnikai szolgáltatások kialakítása a hazai IKT vállalkozásoknak' projekt keretében lehetőség lesz a KIFÜ-nek a HPC infrastruktúra bővítésére.



A kérdések következő szakaszában a felhasználók által fontosnak tartott egyéb HPC szolgáltatásokra fókuszáltunk. Felhasználóink körében kiemelkedően fontos az alapvető IT támogatás/technikai szupport és a hibakezelés (54% nagyon fontos, 33% fontos, 11% részben fontos míg 1-1% nem vagy egyáltalán nem fontos). Ezekből látszik, hogy a felhasználóinkat rendszeresen támogatni kell, és erre igényük is van (rosszul beküldött job debugja, futtatás előtti segítségnyújtás stb.).

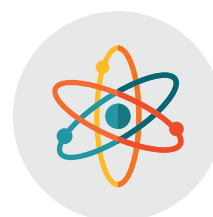
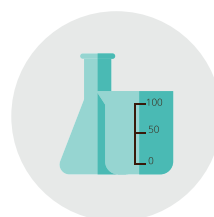
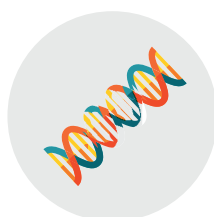
Fontosnak tartják továbbá az alkalmazás szupportot, segítségnyújtást a telepítések, konfigurálások, futtatások során. 40%-40% tartja nagyon fontosnak, illetve fontosnak ezt a területet. 16% csak részben, és 2-2% nem vagy egyáltalán nem tartja fontosnak. A kérdésre adott válaszokból látszik, hogy a felhasználóink igénylik az ilyenfajta segítséget, feltehetőleg a HPC-s és a hagyományos asztali alkalmazásoktól való jelentős eltérés miatt.

Az alkalmazások, HPC megoldások fejlesztéséhez szükséges támogatásra is lenne kereslet: 18% és 39% tartja nagyon fontosnak, illetve fontosnak. Kisebb része a válaszadóknak 29%, 13 és 1% tartja részben, nem és egyáltalán nem fontosnak. A fejlesztések egy része jelentheti a már kész szoftverek optimalizálását/extra könyvtárakkal való fordítását is például: BLAS, LAPACK, FFTW könyvtárakkal való gyorsítást vagy Intel MKL-el való fordítást. Ide tartozna továbbá a felhasználók által fejlesztett szoftverek támogatása is.

A tréningeket, oktatásokat tekintve a válaszadók 21%-a nagyon fontosnak, 36%-a fontosnak tartja ennek a területnek a fejlesztését. A felhasználók többi része viszont csak részben 34%, nem 7% és 2% egyáltalán nem tartja fontosnak. Ezek a mérőszámok rámutatnak arra, hogy a userek egy része már tapasztaltabb lehet HPC-s felhasználóként, de még így is elég nagy az igény arra, hogy a jelenlegi felhasználóink részére oktatásokat tartsunk.

Dedikált támogató erőforrásra („A felhasználó számára dedikált támogató erőforrás biztosítása az igényelt CPU/GPU idő használata során”) a válaszadók egy részének szüksége lenne. 12% és 36% szerint ez egy nagyon fontos, és fontos terület. 33%-ban pedig erre csak részben lenne igény, míg 16%-ban nem vagy 3%-ban egyáltalán nem lenne rá igény.

A szuperszámítógépeket, mint szolgáltatást, azaz a HPC projektek közvetlen futtatását a KIFÜ által a válaszadók 10%-a tartaná nagyon fontosnak, és 30% pedig fontosnak. 38%, 11% és 11% pedig részben nem vagy egyáltalán nem tartaná fontosnak. Erre a kérdésre adott válaszokból látszik, hogy a felhasználók nagyobb hányada szeretne HPC-s tudást megszerezni, és a gépeken saját kezűleg futtatni, vagyis nem igényli, hogy ezt egy tőle független szervezet tegye meg helyette.

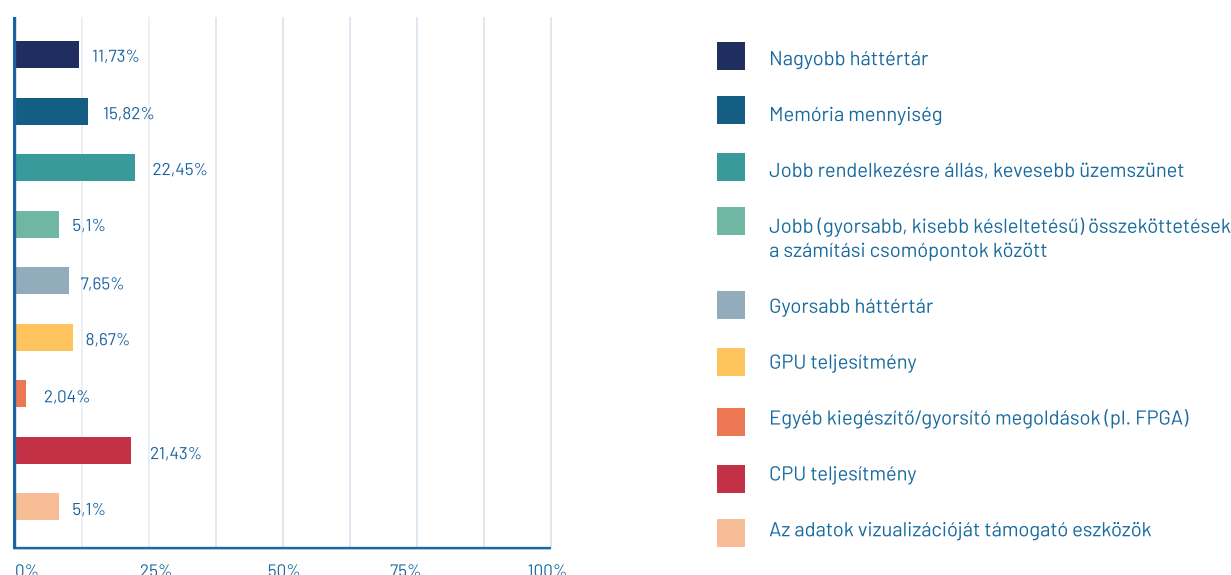


## FEJLESZTENDŐ TERÜLETEK

A felhasználók által fejlesztendő kategóriába sorolt területeket tekintve elmondhatjuk, hogy elvárás a jobb rendelkezésre állás és a kevesebb üzemszünet. A válaszadók felhasználók fele úgy gondolta, hogy erre a területre jobban ügyelnünk kell (22%-szerint erre a területre kiemelt figyelmet kell szentelni).

A felmérésben résztvevők szintén jelentős része (21%) vélte úgy, hogy a CPU teljesítményen növelni kellene. Memória mennyiségével kapcsolatban a felhasználók nagyobb része (16% szerint kellene fejleszteni) elégedett. A nagyobb memóriaméretet a genomikai számítások kapcsán lenne érdemes gondolkodni.

### 5. AMENNYIBEN ÚGY ÉRZI, FEJLESZTENI SZÜKSÉGES A HPC HARDVER ERŐFORRÁSAIT, MELY TERÜLETEKET EMELNÉ KI?



Erőforrásaink GPU teljesítménye a felmérés alapján megfelelő (9% szerint szükséges fejlesztés). Itt viszont fontos megjegyezni a CPU teljesítmény növelésével kapcsolatos eredményt. A válaszok valószínűleg arra utalnak, hogy a kérdőívet kitöltők között több olyan felhasználó van, aki CPU intenzív job-ot futtat, és a GPU-k megfelelő felhasználása még nem megoldott.

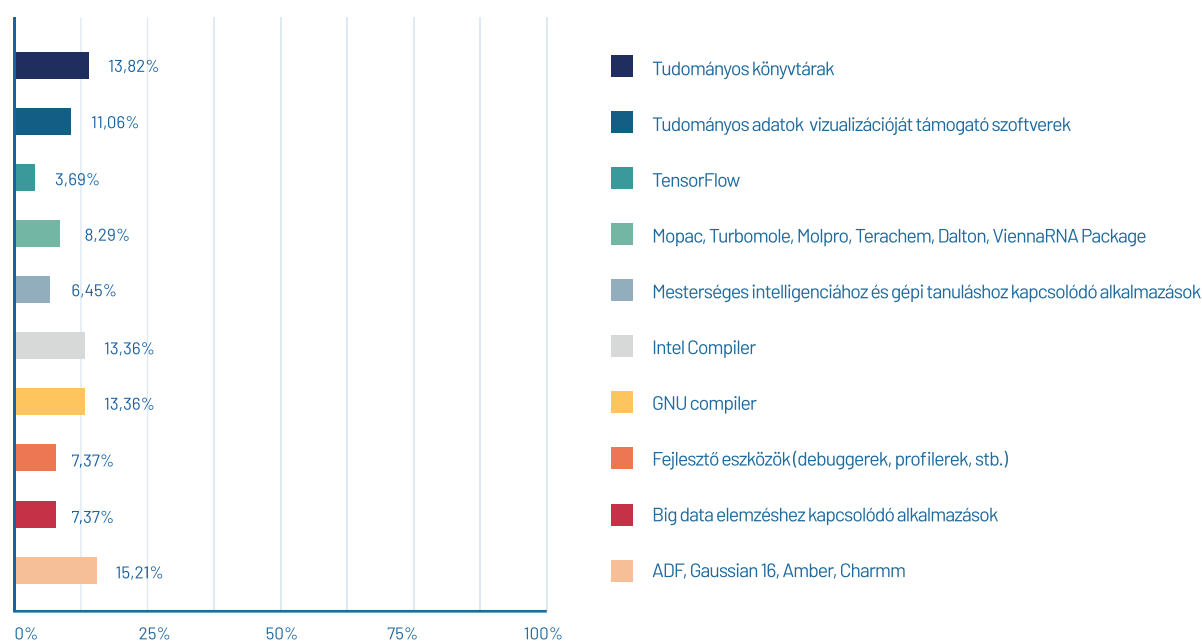
Egyéb kiegészítő gyorsító megoldásra (FPGA) kevés igény van (2% szerint kellene fejleszteni). A háttértárainkkal kapcsolatos kérdések alapján az elérési sebesség megfelelőnek tűnik (8% szerint kellene fejleszteni), viszont a tárhely méretével kapcsolatban a felhasználóink szeretnének bővítéseket (12% szerint kellene fejleszteni).

A node összeköttetések sebességével nagyrészt (5% szerint kellene fejleszteni) elégedettek a felhasználók. Végül az adatok vizualizációját támogató eszközökkel kapcsolatos igényt mértük fel, a felhasználók nagy része (5% szerint kellene fejleszteni) elégedett, ezeket nem tekintik fejlesztendő területnek.

## SZOFTVEREK

Szuperszámítógépjeinken számos alkalmazás van használatban, ezen szoftverek fejlesztésével/frissítésével kapcsolatban is elvégeztük az igények felmérését. Az ADF, Gaussian16, AMBER, CHARMM esetében a válaszadók 15%-a szükségesnek tartaná a frissítéseket. Bár ez az érték nem tűnik magasnak, az adatsor többi grafikonjából látszik, hogy a 15%-os igen arány a többi szoftverhez képest a legjelentősebb. Ez tovább erősíti a tudományterületi besorolások kapcsán kapott eredményeket.

### 8. A LENTEBB TALÁLHATÓ LISTÁBÓL MELY SZOFTVEREK FRISSÍTÉSÉT TARTJA SZÜKSÉGESNEK?



A többi kémiai/fizikai/biológiai csomag (Mopac, Turbomole, Molpro, Terachem, Dalton, ViennaRNA Package) kapcsán a válaszadók 8%-a szerint szükséges volna a frissítés. Egyedül a tudományos könyvtárak (14%) és az Intel (13%) /GNU (13%) fordítók frissítésének igénye, illetve a tudományos adatok vizualizációját támogató szoftverek (11%) haladja meg a 10% fölötti arányt. Ez az eredmény összefüggésben lehet a HPC alkalmazások kapcsán kapott eredményekkel. A felhasználók egy része úgy tűnik, hogy frissebb csomagokkal fejlesztené a használt programokat. A tudományos könyvtárak jól jönnek például a használt molekuladinamikai csomagok gyorsításához például: FFTW, LAPACK /ez látszik is a 14%-os arányon).

A TensorFlow (mesterséges intelligencia) esetében pedig igen csekély (4%) a frissítésre való igény, amely összefüggésben állhat azzal, hogy a kérdőívek alapján a GPU kapacitásunk megfelelő (más programok is használhatják a GPU-t, illetve a mesterséges intelligenciával való munkák feltehetőleg még nem annyira elterjedtek). A Big data (8%) és mesterséges intelligencia/gépi tanuláshoz kapcsolatos szoftverek (6%) frissítésével kapcsolatos igény aránylag kicsi. A fejlesztői eszközök, debuggerek esetében a 8%-os arány arra utalhat, hogy felhasználóink nagyobb arányban már „kész” szoftvereket használnak, saját fejlesztésű szoftverek készítéséhez szükséges eszközökre kicsinek tűnik az igény.

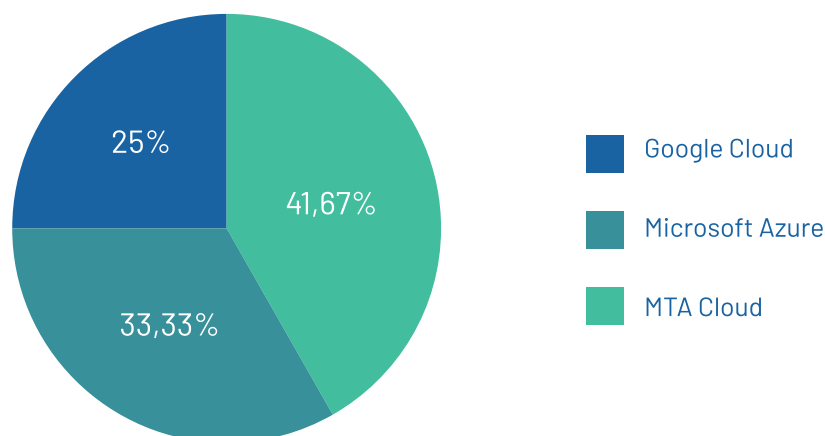
## EGYÉB KÉRDÉSEK

A felmérés további részében arra voltunk kíváncsiak, hogy milyen típusú rendezvényen vennének részt felhasználóink HPC témában. Első helyen, 28%-os igen aránnyal a workshop végzett. Hasonlóan magas a webinarium iránti érdeklődés is (26%). A meetup és a konferencia aránylag hasonló érdeklődést mutatott (13% és 15%). Ezek alapján a későbbiekben érdemesnek tartjuk szakmai workshop-ok és webinariumok szervezésén gondolkozni. A válaszadók csupán 18%-a gondolta úgy, hogy nincs szüksége ilyesmire.

A továbbiakban azt szeretnénk volna kideríteni, hogy milyen témában szeretnének tájékozódni a kérdőívet kitöltők. A felmérés alapján a jelenlegi felhasználóink főként a futtatás és optimalizálás HPC környezetben témában szeretnének tájékozódni (19%) HPC működésének alapismereteiről (13%), tudományos felhasználási területekről (11%), HPC alkalmazások használatáról (11%) szeretnének bővebb ismereteket szerezni. Mérsékeltőbb az érdeklődés a hibakezelés (10%), a HPC környezetben való szoftverfejlesztés (10%), a tudományos adatok vizualizációja (8%), illetve az alkalmazás portolás, és kódoptimalizálás (9%) tekintetében. A legkisebb érdeklődés övezte a HPC sikertörténetekről (4%), illetve az ipari felhasználási területekről történő (5%) tájékoztatást. Ezekből az adatokból is látszik, hogy a jelenlegi felhasználóink a már meglévő szoftverek futtatásaink optimalizálására szeretnének nagyobb hangsúlyt fektetni, valamint elmondhatjuk, hogy fő fókuszuk az akadémiai felhasználás.

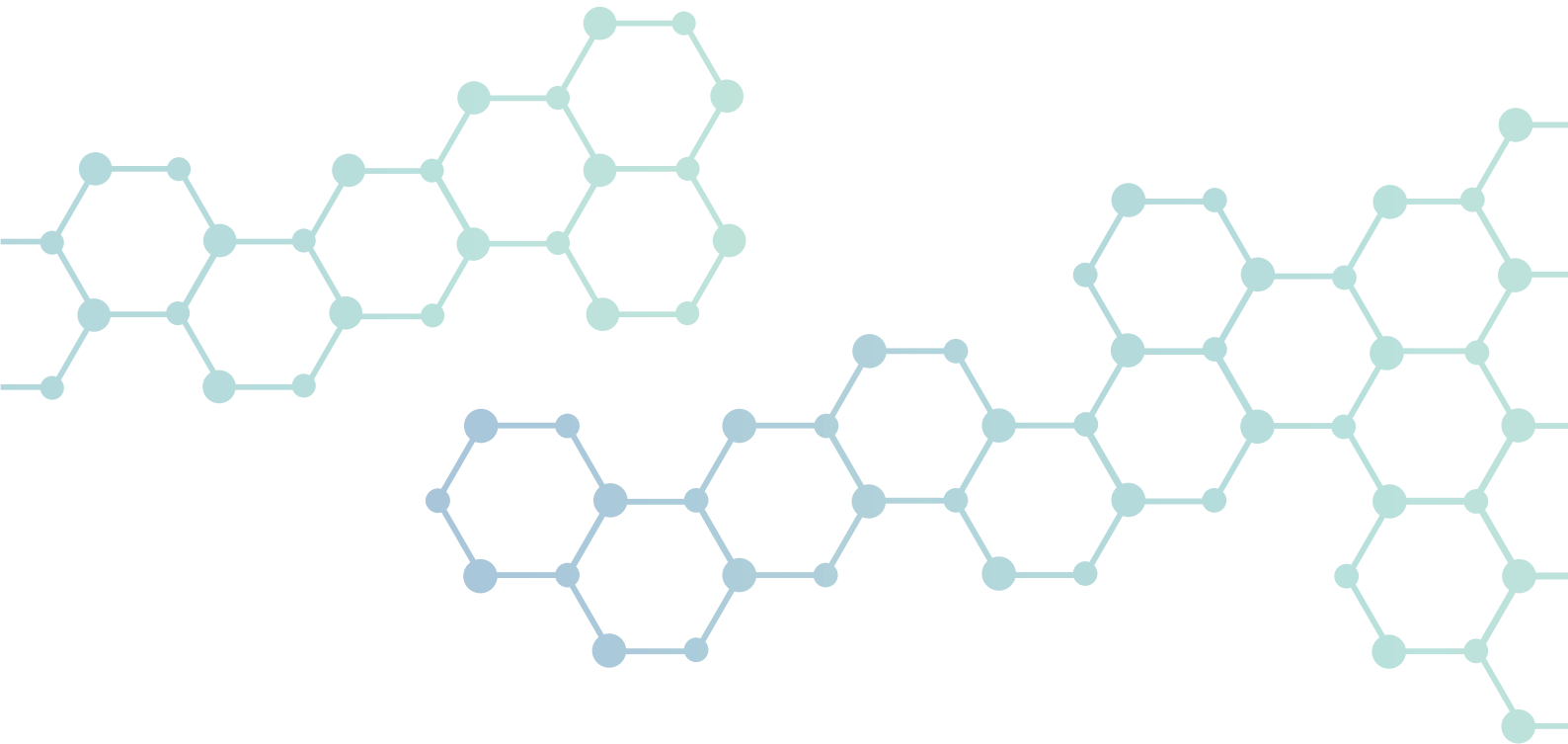
Kíváncsiak voltunk továbbá arra is, hogy felhasználóink rendelkeznek-e további fizikai vagy virtuális HPC kapacitásokkal. A felhasználók 24%-a rendelkezik kisebb (1-2 számítási node-ból álló erőforrással), illetve 24% rendelkezik nagyobb (5-20 node) erőforrással. A legtöbben (36%) rendelkezik 20 node-nál nagyobb számítási kapacitással, míg 16% rendelkezik 2-5 számítási node-ból álló erőforrással. Cloud alapú HPC szolgáltatások közül az MTA Cloud (42%) és a Microsoft Azure a használatosabbak (33%). Google Cloud Service-t pedig a megkérdezettek 25%-a használ. A cloud alapú HPC szolgáltatások használata nem tűnik elterjedtnek.

VAN-E OLYAN EGYÉB FIZIKAI VAGY VIRTUÁLIS (CLOUD) HPC KÖRNYEZET, AHOL SZÁMÍTÁSOKAT FUTTAT? HA VAN, KÉRJÜK NEVEZZE MEG, MELY SZOLGÁLTATÓTÓL VESZI IGÉNYBE!





Legvégül arra a kérdésre vártuk a választ, hogy a felhasználóink hajlandóak volnának-e bekapcsolódni a HPC szakmai közösség munkájába. A felhasználók több mint fele (56%) érdeklődését fejezte ki ez iránt. A projektigénylések kapcsán pedig szeretnénk független szakértőket bevonni, a válaszok alapján a felhasználók 49%-a lenne hajlandó lenne részt venni a KIFÜ-vel közös munkában. Ezek az arányok meglehetősen magasak, ami szerencsés számunkra, hiszen így valid felhasználói visszajelzések alapján, maguk a felhasználók bevonásával tudjuk a HPC szolgáltatásainkat fejleszteni a későbbiekben.







## KORMÁNYZATI INFORMATIKAI FEJLESZTÉSI ÜGYNÖKSÉG

Bővebb információért látogasson  
el a [hpc.kifu.hu](http://hpc.kifu.hu) weboldalra!

Kérdéseiket a [hpc-cc@kifu.hu](mailto:hpc-cc@kifu.hu)  
email címre várjuk.



**HPC @ hu**  
Competence Centre