

# AP3: Koordination von Softwareumgebung und Rechnerbetrieb

Dr. Robert Schade (vertreten durch Dipl.-Ing. Andreas Krawinkel)  
HPC Advisor  
Paderborn Center for Parallel Computing  
University Paderborn

Ein Kooperations-  
vorhaben der:

**DH-NRW**

Gefördert durch:  
**Ministerium für  
Kultur und Wissenschaft  
des Landes Nordrhein-Westfalen**



Paderborn  
Center for  
Parallel  
Computing

October, 29nd 2019

## A) HPC-Software Ökosystem

1. Verfügbarkeits-, Bedarfs- und Nutzungserhebung
2. Nutzbarmachung der erhobenen Daten

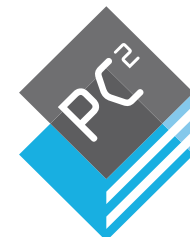
## B) Kompetenznetzwerk für Betriebsfragen

1. Erfassung der Systemkonfigurationen (Batch-Systeme, Nutzerumgebung, Dateisysteme) und Anforderungen
2. Best Practices Guide
3. Administratorentreffen als Basis für Diskussion und Erfahrungsaustausch

Ein Kooperations-  
vorhaben der:

**DH-NRW**

Gefördert durch:  
**Ministerium für  
Kultur und Wissenschaft  
des Landes Nordrhein-Westfalen**



**Paderborn  
Center for  
Parallel  
Computing**

## A) HPC-Software Ökosystem

1. Verfügbarkeits-, Bedarfs- und Nutzungserhebung
2. Nutzbarmachung der erhobenen Daten

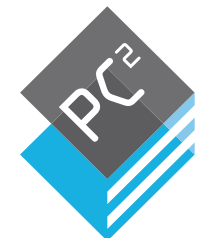
### **Verfügbarkeitserhebung:**

- erste Tests zur automatisierten Datensammlung von verfügbarer Software durchgeführt
- Kontakt zur Gauß-Allianz und GA-Softwareverzeichnis evaluiert

Ein Kooperations-  
vorhaben der:

**DH-NRW**

Gefördert durch:  
**Ministerium für  
Kultur und Wissenschaft  
des Landes Nordrhein-Westfalen**



**Paderborn  
Center for  
Parallel  
Computing**

## A) HPC-Software Ökosystem

1. Verfügbarkeits-, Bedarfs- und Nutzungserhebung
2. Nutzbarmachung der Daten

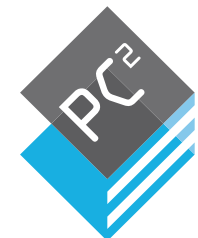
### **Bedarfserhebung:**

- Compiler, MPI, numerische Bibliotheken, Performance Analyse und Debugging Tools
  - 1. Kandidatenumfrage:**
    - Mitte Juli bis Anfang August, Rechenzentren aber offen auch für Nutzer
  - 2. Eigentliche Bedarfsumfrage**
    1. Mitte August bis Mitte September, Rechenzentren
    2. (letzte Antworten erst Anfang Oktober)
    3. Begleitet von Umfragen bei den Nutzern wenn vom jeweiligen RZ gewünscht

Ein Kooperations-  
vorhaben der:

**DH-NRW**

Gefördert durch:  
**Ministerium für  
Kultur und Wissenschaft  
des Landes Nordrhein-Westfalen**



**Paderborn  
Center for  
Parallel  
Computing**

## Eigentliche Bedarfserhebung:

- Bewertungsmatrix und Detailinformationen abgefragt
- **Umfrageformulare:**

\*Bitte bewerten Sie den Bedarf der jeweiligen Software (je höher die Zahl desto wichtiger der Bedarf, 0 bedeutet keinen Bedarf). Sie können insgesamt maximal 55 Punkte vergeben. Wenn, wie im Fall von Intel-Software, ein Kandidat einen anderen Kandidat enthalten würde, braucht nur der umfassendere Kandidat als Bedarf ausgewählt werden. Wir würden dann implizit annehmen, dass für Sie der kleinere Kandidat nicht ausreichen würde.

🔴 Bitte wählen Sie 21 Antworten aus.

🔵 Sie dürfen maximal 55 Punkte verteilen.

	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
PGI Professional Edition/PGI Compiler Suite	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>
NEC Compiler Suite/MPI	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>
NAG Compiler Suite	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>
NAG Libraries	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>
IMSL Numerical Libraries	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>
Goopax	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>
Understand for Fortran	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>
Coverity for Fortran	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>
arm DDT	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>

Ein Kooperations-  
vorhaben der:

**DH-NRW**

Gefördert durch:  
**Ministerium für  
Kultur und Wissenschaft  
des Landes Nordrhein-Westfalen**



Paderborn  
Center for  
Parallel  
Computing

## Eigentliche Bedarfserhebung:

- Bewertungsmatrix und Detailinformationen abgefragt
- **Umfrageformulare:**

\*Bitte bewerten Sie den Bedarf der jeweiligen Software (je höher die Zahl desto wichtiger der Bedarf, 0 bedeutet keinen Bedarf). Sie können insgesamt maximal 55 Punkte vergeben. Wenn, wie im Fall von Intel-Software, ein Kandidat einen anderen Kandidat enthalten würde, braucht nur der umfassendere Kandidat als Bedarf ausgewählt werden. Wir würden dann implizit annehmen, dass für Sie der kleinere Kandidat nicht ausreichen würde.

🔴 Bitte wählen Sie 21 Antworten aus.

🔵 Sie dürfen maximal 55 Punkte verteilen.

	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
PGI Professional Edition/PGI Compiler Suite	<input type="radio"/>	<input checked="" type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>
NEC Compiler Suite/MPI	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>
NAG Compiler Suite	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>
NAG Libraries	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>
IMSL Numerical Libraries	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>
Goopax	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>
Understand for Fortran	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>
Coverity for Fortran	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>
arm DDT	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>

Ein Kooperations-  
vorhaben der:

**DH-NRW**

Gefördert durch:  
**Ministerium für  
Kultur und Wissenschaft  
des Landes Nordrhein-Westfalen**



**Paderborn  
Center for  
Parallel  
Computing**

## Eigentliche Bedarfserhebung:

- Bewertungsmatrix und Detailinformationen abgefragt
- Umfrageformulare:

\*Bitte bewerten Sie den Bedarf der jeweiligen Software (je höher die Zahl desto wichtiger der Bedarf, 0 bedeutet keinen Bedarf). Sie können insgesamt maximal 55 Punkte vergeben. Wenn, wie im Fall von Intel-Software, ein Kandidat einen anderen Kandidat enthalten würde, braucht nur der umfassendere Kandidat als Bedarf ausgewählt werden. Wir würden dann implizit annehmen, dass für Sie der kleinere Kandidat nicht ausreichen würde.

• Bitte wählen Sie 21 Antworten aus.  
• Sie dürfen maximal 55 Punkte verteilen.

	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
PGI Professional Edition/PGI Compiler Suite	<input type="radio"/>	<input checked="" type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>
NEC Compiler Suite/MPI	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>
NAG Compiler Suite	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>
NAG Libraries	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>
IMSL Numerical Libraries	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>
Goopax	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>
Understand for Fortran	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>
Coverity for Fortran	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>
arm DDT	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>

\*Ab wann benötigen Sie die einjährige, akademische Lizenz für dieses Produkt?

25.10.2019



Format: tt.mm.jjjj

\*Typ der Lizenz/en:

• Bitte wählen Sie eine der folgenden Antworten:

named

floating

Sonstiges:

\*Anzahl der benötigten Lizenzeinheiten:

• Ihre Antwort muss mindestens 0 sein.

• In diesem Feld darf nur ein ganzzahliger Wert eingetragen werden.

\*Kommentar/Anmerkung, z.B. Werden andere als Linux x86\_64-Lizenzen benötigt? Ist die obige Lizenzauswahl nicht ausreichend für Ihre Zwecke? Wird eine bestimmte Version/Variante der Software benötigt (inkl. Grund)?

Ein Kooperations-  
vorhaben der:

**DH-NRW**

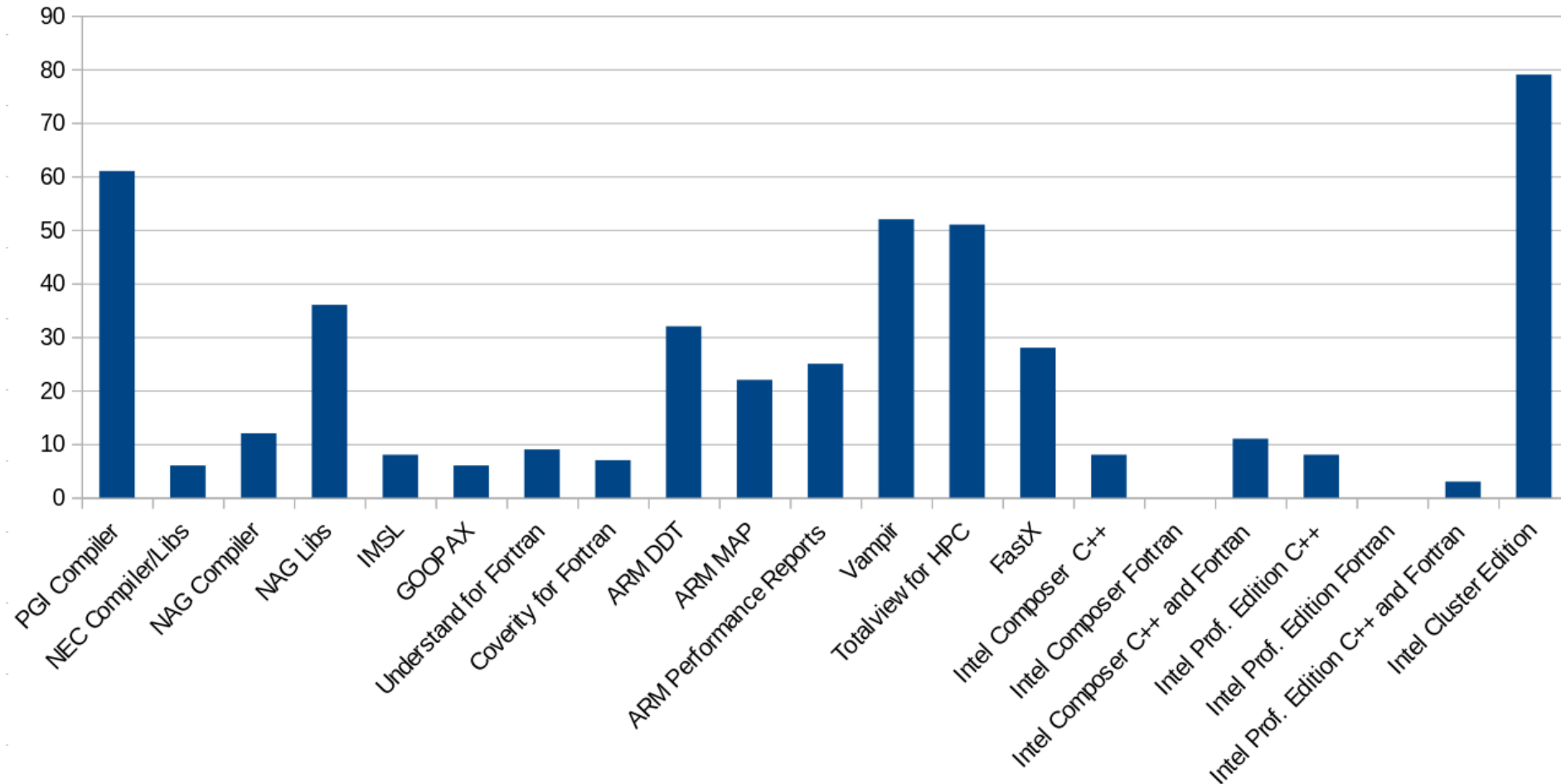
Gefördert durch:  
**Ministerium für  
Kultur und Wissenschaft  
des Landes Nordrhein-Westfalen**



**Paderborn  
Center for  
Parallel  
Computing**

# Bedarfserhebung: resultierende Wichtigkeiten

Compiler, MPI, numerische Bibliotheken, Performance Analyse und Debugging Tools



Ein Kooperations-  
vorhaben der:

**DH-NRW**

Gefördert durch:  
**Ministerium für  
Kultur und Wissenschaft  
des Landes Nordrhein-Westfalen**



Paderborn  
Center for  
Parallel  
Computing



## A) HPC-Software Ökosystem

1. Verfügbarkeits-, Bedarfs- und Nutzungserhebung
2. Nutzbarmachung der Daten

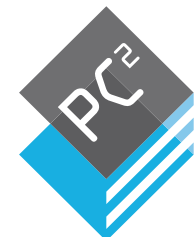
### **Nutzungserhebung:**

- Evaluation der verschiedenen Ansätze zur Nutzungserhebung auf Clustern
  - Modulnutzungserhebungsmechanismen evaluiert
  - Proof-of-concept Tool zur automatisierten Analyse und Identifikation laufender Programme entwickelt

Ein Kooperations-  
vorhaben der:

**DH-NRW**

Gefördert durch:  
**Ministerium für  
Kultur und Wissenschaft  
des Landes Nordrhein-Westfalen**



**Paderborn  
Center for  
Parallel  
Computing**

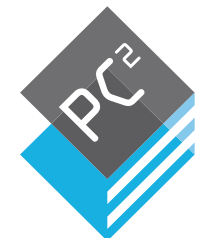
## B) Kompetenznetzwerk für Betriebsfragen

1. Erfassung der Systemkonfigurationen (Batch-Systeme, Nutzerumgebung, Dateisysteme) und Anforderungen  
--> wegen Personalmangel noch in der Planungsphase
2. Best Practices Guide  
--> noch im Aufbau von Infrastruktur
3. Administratorentreffen als Basis für Diskussion und Erfahrungsaustausch

Ein Kooperations-  
vorhaben der:

**DH-NRW**

Gefördert durch:  
**Ministerium für  
Kultur und Wissenschaft  
des Landes Nordrhein-Westfalen**



Paderborn  
Center for  
Parallel  
Computing

Alle erhobenen Daten sind für alle im hpc.nrw beteiligten RZ verfügbar.

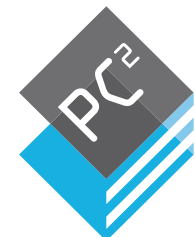
**Wie kann man Mitmachen:**

- Gerne auch wenn Sie nichts direkt mit hpc.nrw zu tun haben!
- Bei Interesse bitte an Robert Schade ([robert.schade@uni-paderborn.de](mailto:robert.schade@uni-paderborn.de)) wenden
- Einladung zur Mailingliste: <https://pc2.de/go/ap3mail>
- Wir haben offene Stellen <https://pc2.de/go/jobs> !!!!

Ein Kooperations-  
vorhaben der:

**DH-NRW**

Gefördert durch:  
**Ministerium für  
Kultur und Wissenschaft  
des Landes Nordrhein-Westfalen**



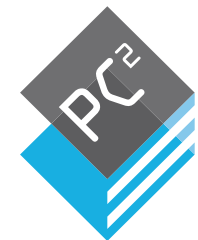
**Paderborn  
Center for  
Parallel  
Computing**

# BACKUP

Ein Kooperations-  
vorhaben der:

**DH-NRW**

Gefördert durch:  
**Ministerium für  
Kultur und Wissenschaft  
des Landes Nordrhein-Westfalen**



Paderborn  
Center for  
Parallel  
Computing

## Eigentliche Bedarfserhebung:

- begleitet von Nutzerumfragen, damit Rechenzentren den Bedarf direkt bei den Nutzern erfragen können

## Beispiel für Nutzerumfrage:

\*Please enter your project acronym (e.g. hpc-prf-mdft) at PC<sup>2</sup>

🔗 If you are a member in more than one project, please enter the acronym of the project that you use most.

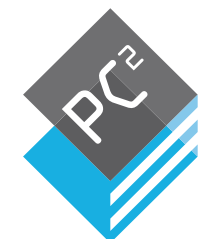
\*Please fill out the following table

	PGI Professional Edition/PGI Compiler Suite	NEC Compiler Suite/MPI	NAG Compiler Suite	NAG Libraries	IMSL Numerical Libraries
I am <b>not interested</b> in this software.	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>
The software is <b>interesting</b> to me, but do <b>not plan to use</b> it.	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>
The software is <b>interesting</b> to me and would like to <b>try it</b> .	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>
I have <b>used</b> the software in the past but do <b>not plan to use</b> it again.	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>
I have <b>used</b> the software in the past and would <b>like to use</b> it at PC <sup>2</sup> .	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>
I am <b>currently using</b> the software and would <b>like to use</b> it at PC <sup>2</sup> .	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>

Ein Kooperations-  
vorhaben der:

**DH-NRW**

Gefördert durch:  
**Ministerium für  
Kultur und Wissenschaft  
des Landes Nordrhein-Westfalen**



**Paderborn  
Center for  
Parallel  
Computing**