

1. Egy konkrét példán keresztül bemutatnád a jupyter/open ondemand feladatmegoldást?

A két rendszer működését a helyszínen bemutattuk, konkrét kérdés esetén keressen minket bizalommal, az alábbi email címen: hpc@kifu.gov.hu

2. Mintaprojektek elérhetőek lesznek?

Tervezünk mintaprojekteket feltölteni a dokumentációs oldalra, illetve a kódbázis oldalakra, a hírlevélben erről értesítjük a felhasználókat.

3. Az oktatási célú felhasználás kialakítása hol tart?

Az általunk tartott workshopokra már kidolgoztunk egy módszert, amely a portálon keresztül regisztrálja a Workshop résztvevőit. Ezt a módszert ki lehet terjeszteni hosszabb kurzusokra is megfelelő korlátozások mellett. A konkrét igény kapcsán kérem keressen meg minket, az alábbi email címen: hpc@kifu.gov.hu

4. Conda csomagkezelőt használni lehet?

Igen, alapvetően bármilyen csomagkezelőt vagy szoftvert lehet telepíteni, amihez nem kell rendszergazdai jogosultság (pl. saját home mappába kerül, stb).

5. Említés volt arról, hogy a másik user jobjáról látunk információkat. Mondjuk betegadatok esetén sérülhet az adatok bizalmassága és integritása? (edited)

Beállításra kerül a feladatok elrejtése a többi felhasználó elől. A filerendszer környezet kizárja azt, hogy más felhasználók hozzáférjenek a filejaihoz, ugyanakkor a GDPR-t minden felhasználónak a saját felelőssége betartani, aki védendő adatokat hoz a HPC-re. Ezzel kapcsolatos kérdés esetén állunk rendelkezésre.

6. Van-e olyan oldal ahol összefoglalóan naprakészen látható hogy milyen szoftver milyen licenszekkel elérhető vagy van beszerzés, telepítés alatt?

A docs.hpc.kifu.hu oldalra összefoglaló jelleggel is fel fog kerülni.

7. Esetleg el tudjátok küldeni az előadás diákat a regisztrált résztvevőknek? Sajnos hamarosan el kell mennem...

Az előadások a regisztrációs oldalra feltöltésre kerültek.

8. A kerekasztal fel lesz véve? Visszanézhető?

A kerekasztal beszélgetésről nem készült felvétel.

9. Mennyi az átlagos igényelt cpu/gpu idő?

Projektől függ, ha a historikus adatokat nézzük akkor egy többéves projekt esetében több millió CPU óráról beszélünk. A felhasználást ezért kell először tesztelni pilot vagy előkészítő projekt keretében, hiszen minden attól függ, hogy az adott szoftver mennyire tud jól skálázódni.

10. On demand oldalnak van-e API-ja? Scriptelhető-e?

Szeretnénk minél több funkcióval felruházni, amennyiben van különleges igény, kérem keressnek a hpc-support@kifu.hu címen.

11. Előkészítő projekt beadása folyamatos elbírálásban megy?

Igen

12. Amber PME MD outputja nem érhető el, cpptraj nem ad hibaüzenetet (valahol biztos van output file, de nem találjuk)

Kérjük keresse meg a konkrét problémával a kollégáinkat a hpc-support@kifu.hu email címen, hogy segíteni tudjunk.

13. Nagyobb memóriaigényű jobokhoz milyen beállításokat lenne érdemes alkalmazni? „Some of your process may have been killed by the cgroup out-of-memory handler.”

Több processzor kiosztása megoldást jelenthet, mert egy maghoz maximum 2000 Mb memória osztható ki. Több mag = több memória.

—cpus-per-task=n kell állítani magasabb core számra.

14. Egyedi szoftvereket ha készítünk(mert a projekt megköveteli) mit tudnak javasolni?

A singularity használata is megoldás, de van lehetőség a kódot az architektúrára fordítani is, érdemes lehet mindkettőt megpróbálni. Tervezünk egy mintaprojektet létrehozni a saját kódot fejlesztő felhasználóinknak.

15. Jól értettem, hogy Matlab per pill csak két egyetem licenszével érhető el?

Jelenleg 2 egyetemnek van felkonfigurálva, de minden egyetem amely rendelkezik Matlab Campus licenszsel dolgozhat a Komondoron. Minden esetben az adott egyetem IT osztályától kell megkérdezni, majd a KIFÜ IT-val kell egyeztetni a licensze file elérését.

16. Milyen lehetőség van kívánt program telepítésére?

Fordítás saját könyvtárakba, vagy konténerizált szoftvertelepítés, esetleg csomagkezelő használata (spack)

17. Van tapasztalat Dask használatával kapcsolatban?

Egyelőre nincs

18. Gaussian job átmeneti fileok hol érhetőek el?

Kérjük keresse meg a konkrét problémával a kollégáinkat a hpc-support@kifu.hu email címen, hogy segíteni tudjunk.

19. Júlia modulokat a netről betölthetjük, vagy honnan?

A Jupyterhubhoz bármilyen Julia kódot be lehet tölteni, például akár a google colab példakódjaiból is ki lehet indulni. Konkrét kérdés esetén forduljanak nyugodtan hozzánk.

20. Nemzetközi kollaboráció esetén van lehetősége a külföldi kutatónak csatlakozni a projecthez és belépni a gépre? (edited)

Van, meg kell hívni a kutatót a projektbe a HPC portálon keresztül. Ha nincs eduID-je akkor VHO-n keresztül férhet hozzá a géphez.

A külföldi felhasználóknak levélben kell megadni az IP címet, amit engedélyezünk majd a belépésre, mert alapesetben a gép külföldről nem elérhető.

21. Egy pár szóban ismertetnék a csomagkezelőket?

Egyelőre a spack van telepítve modul betöltése után (module load spack) lehet használni:

spack install {csomag neve}

https://spack-tutorial.readthedocs.io/en/latest/tutorial_basics.html#installing-packages

A jövőben tervezzük az easybuild telepítését is.