



Vlaanderen
is computing

JAARVERSLAG 2017

COLOFON

Het Vlaams Supercomputer Centrum (VSC) is een virtueel supercomputercentrum voor zowel academici als de industrie. Het wordt door het FWO, in samenwerking met de vijf Vlaamse universitaire associaties, beheerd.

Fonds Wetenschappelijk Onderzoek - Vlaanderen

Egmontstraat 5
1000 Brussel
T 02 512 91 10
info@vscentrum.be
www.vscentrum.be

Verantwoordelijke uitgever

Dr. Hans Willems
Secretaris-generaal FWO

Copyright

Fonds Wetenschappelijk Onderzoek - Vlaanderen

Teksten

Leen Van Rentergem
Jan Ooghe
Annie Cuyt
Stefan Becuwe
Ewald Pauwels
Geert Jan Bex
Stefan Weckx
Ward Poelmans
Caroline Volckaert

Creatie en vormgeving

Pantarein Publishing
Rafal Al-Tekreeti

Uitgegeven in juli 2018

VOORWOORD

Het Vlaams Supercomputer Centrum (VSC), het samenwerkingsverband tussen de Vlaamse universiteiten en het FWO, kwam in 2017 op kruissnelheid. We boden de brede Vlaamse onderzoeksgemeenschap infrastructuur en ondersteuning aan voor High Performance Computing.

BrENIAC, de Vlaamse Tier-1-machine, was in 2017 quasi ononderbroken beschikbaar en de gebruikscijfers tonen aan dat de Tier-1 goed ingeburgerd is bij onze onderzoekers. Er kwamen 77 aanvragen binnen voor Tier-1-rekentijd. Voor het evalueren van die aanvragen werd onze internationale commissie met een extra lid uitgebreid. Er werden 54 aanvragen goedgekeurd en 164.886 nodedagen toegekend. We organiseerden ook voor de derde keer een succesvolle Gebruikersdag met binnen- en buitenlandse sprekers, workshops en een zeer gesmaakte postersessie. Het event lokte meer dan 120 deelnemers.

De Vlaamse universiteiten bouwden hun Tier-2-capaciteit verder uit en er werden bijkomende personeelsmiddelen voorzien voor opleidingen en gebruikersondersteuning. Het VSC zorgt er immers voor dat onderzoekers hun applicaties eenvoudig kunnen migreren tussen de universitaire clusters en de Tier-1-supercomputer, zodat ze steeds de meest geschikte infrastructuur gebruiken.

De opleidingen over het gebruik van de Tier-1 en Tier-2 zijn trouwens niet alleen toegankelijk voor onderzoekers aan Vlaamse universiteiten, strategische onderzoekscentra en andere publieke

kennisinstellingen, maar ook voor bedrijven. Samenwerken met het VSC biedt heel wat voordelen aan bedrijven en andere kennisinstellingen: professionele ondersteuning, waar nodig opleidingen op maat, maar vooral de inbedding in een academische omgeving. Om alle mogelijkheden onder de aandacht te brengen, ontwikkelde onze Industrial Board verschillende initiatieven.

Het VSC blijft waakzaam voor de noden van zijn gebruikers. De ontwikkelingen gaan immers snel en uitdagingen in het onderzoekslandschap kunnen niet zonder passende antwoorden blijven. Daarom ontwikkelen we vanaf 2018 een nieuw Tier-1-supercomputing-platform, 'supercomputing as a service', waar we een geïntegreerde service aanbieden van Tier-1-compute-, data- en cloudinfrastructuur. Eind 2017 ontving het VSC hiervoor 30 miljoen euro. Het toont het engagement van de Vlaamse overheid om te blijven investeren in state-of-the-art infrastructuur voor onderzoek en innovatie.

Het mag duidelijk zijn: het VSC is verzekerd van een uitdagende, maar stralende toekomst!

KU Leuven: Leen Van Rentergem, Jan Ooghe

UAntwerpen: Annie Cuyt, Stefan Becuwe

UGent: Ewald Pauwels

UHasselt: Geert Jan Bex

VUB: Stefan Weckx, Ward Poelmans

FWO: Caroline Volckaert, Bart van Beek

HET VSC UITGELICHT

Ter inleiding

De ondersteuning en uitbating van High Performance Computing (HPC) is in Vlaanderen georganiseerd binnen het Vlaams Supercomputer Centrum (VSC). Het VSC is een consortium waarin de vijf Vlaamse universiteiten de krachten bundelen om HPC-infrastructuur en ondersteuning aan te bieden aan de brede onderzoeksgemeenschap in Vlaanderen. Het VSC heeft ook als doel via verschillende initiatieven de onderzoekers uit universiteiten, SOC's en industrie te inspireren, te informeren en te ondersteunen bij het incorporeren van computationele modellen in hun business. Daarnaast biedt het VSC binnen zijn opdracht als dienstverlener een waaier aan opleidingen aan die het gebruik van de infrastructuur moeten bevorderen. Het VSC wordt beheerd door het Fonds voor Wetenschappelijk Onderzoek (FWO).

Financiering van Tier-1 en Tier-2

In 2017 werd de Tier-2-infrastructuur voor 5.606.000 euro gefinancierd door het FWO, verdeeld over 3.706.000 euro investeringen in hardware en 1.900.000 euro in personeel. In vergelijking met de vorige jaren

werden dus 5 vte's bijkomend ondersteund door het FWO. Daarnaast investeerde het FWO 380.000 euro in het personeel voor de twee Tier-1's en 360.000 euro in de energiekosten van de tweede Tier-1.

Deze middelen werden aangewend voor het financieren van:

- personeelskosten voor de exploitatie van de eerste en de tweede Tier-1 (380.000 euro);
- personeelskosten voor de opleiding en ondersteuning van gebruikers van zowel Tier-1 als Tier-2 (1.900.000 euro). Met dit bedrag kan aan de vijf Vlaamse universiteiten in totaal het equivalent van 20 vte's gesubsidieerd worden;
- de energiekosten van de tweede Tier-1 (360.000 euro);
- investeringen en werkingskosten voor de Tier-2-infrastructuur (3.706.000 euro).

De universiteiten hebben deze middelen vooral gebruikt voor bijkomende investeringen in Tier-2. Deze instellingen financieren met eigen middelen de energie- en exploitatiekosten van Tier-2. De tabel hiernaast geeft een overzicht van de verdeling van deze bedragen over de vijf Vlaamse universiteiten.

Overzicht middelen Tier-1 en Tier-2 in 2017

Rubriek	KU Leuven	UHasselt	UGent	VUB	UAntwerpen	Subtotaal Tier-2	Tier-1a	Tier-1b	Totaal
Personeel in fte	5	1	4	2	3	15	2	2	19
Personeel in euro	€ 475.000	€ 95.000	€ 380.000	€ 190.000	€ 285.000	€ 1.425.000	€ 190.000	€ 190.000	€ 1.805.000
Bijkomend personeel	€ 95.000	€ 95.000	95.000	€ 95.000	€ 95.000	€ 475.000			€ 475.000
Totaal personeel	€ 570.000	€ 190.000	€ 475.000	€ 285.000	€ 380.000	€ 1.900.000			€ 2.280.000
Hercules-sleutel 2015	0,4209	0,0341	0,3233	0,1011	0,1206	1,000			
CAPEX en werking Tier-2	€ 1.559.855	€ 126.375	€ 1.198.150	€ 374.677	€ 446.944	€ 3.706.000			€ 3.706.000
Energiekosten Tier-1								€ 360.000	€ 360.000
Belnet	€ 35.000					€ 35.000			€ 35.000

Voor de toekenning van de subsidies sloot het FWO met elke universiteit een overeenkomst af waarin staat dat de besteding van de toegekende middelen gespreid kan worden over twee begrotingsjaren. De uitgaven van de toegekende middelen moeten met bewijsstukken verantwoord worden. Over de aanwending moet een bestedingsrapport ingediend worden, met onder meer informatie over het gebruik van de Tier-1- en de Tier-2-infrastructuur.

CASE

MAKEN COMPUTERS DIERENPROEVEN STRAKS OVERBODIG?

Prof. dr. Hans De Winter

Departement Farmaceutische Wetenschappen,
UAntwerpen



Supercomputers nemen een steeds grotere plaats in bij de zoektocht naar nieuwe en verbeterde medicijnen. “Mede dankzij het toenemende gebruik van computersimulaties is het aantal dierproeven in farmaceutisch onderzoek de voorbije tien jaar significant gedaald”, weet prof. dr. Hans De Winter van de Universiteit Antwerpen.

In de farmaceutische industrie en academische wereld werken onderzoekers dag in dag uit aan verbeterde en nieuwe medicijnen. Om de interacties te simuleren tussen een potentieel geneesmiddel en het eiwit dat gelinkt wordt aan een bepaald ziektebeeld, maakt de ‘computationele chemicus’ gebruik van algoritmen die grotendeels gebaseerd zijn op Newtons tweede wet. Die simulaties – in het vakjargon ‘moleculaire dynamica-berekeningen’ – geven de onderzoeker een gedetailleerd beeld van de kinetiek en thermodynamica van de interacties binnen het modelsysteem.

Het belang van computerkracht

Tot tien jaar terug was het gebruik van moleculaire dynamicasimulaties bij het onderzoek naar nieuwe medicijnen quasi onbestaande, omdat de computerkracht ontbrak. Onderzoekers maakten toen vooral gebruik van proefdieren en dure experimenten. “Vandaag voeren we simulaties uit die tot op 1 seconde de biologische kinetiek kunnen simuleren”, vertelt Hans De Winter. “Dat is te danken aan snelle computerclusters zoals het Vlaamse Tier-1-systeem en de CalCUA-cluster aan de UAntwerpen, in combinatie met het stijgende gebruik van grafische processors en meer efficiënte parallelisatie-algoritmen van de moleculaire dynamicasoftware. Processen die van nature uit sequentieel zijn, worden opgesplitst in een groot aantal parallele computersimulaties. En door gebruik te maken van *Markov state models* en de statistische analyse daarvan, kunnen we uit de resultaten van deze parallele simulaties kinetische en thermodynamische parameters berekenen die het proces beschrijven.” Recent verschenen een aantal resultaten van dat onderzoek in *Nature Communications* en *Scientific Reports*.

Naar een wereld zonder dierproeven?

Of dit onderzoek het einde van dierproeven inluidt? Hans De Winter: “Op korte tot middellange termijn is dat nog een utopie. De kloof tussen de reageerbuis en de complexiteit van een dier is nog te groot. Maar het aantal dierproeven in farmaceutisch onderzoek is in vergelijking met tien jaar geleden al significant teruggeschroefd, mede dankzij het toenemende gebruik van computersimulaties. We zullen dierproeven, net als klinische proeven op mensen, nooit helemaal kunnen vermijden, maar het streefdoel is om ze op termijn zoveel mogelijk te beperken.”

Toekomstperspectieven

Het gebruik van computersimulaties binnen farmaceutisch onderzoek staat niet stil. “De komende jaren zullen nieuwe algoritmen, in combinatie met alsnar snellere computersystemen, de lat steeds hoger leggen voor het geneesmiddelenonderzoek”, besluit Hans De Winter.

TIER-1-INFRASTRUCTUUR

Tier-1 aan de UGent

De eerste Vlaamse Tier-1 ging in 2013 in productie. De aankoop van deze supercomputer werd gefinancierd met FFEU-middelen. De UGent stond in voor de technische exploitatie van deze machine, en nam ook de financiering van de huisvesting voor haar rekening. Het onderhoudscontract voor deze machine liep af in november 2016. Deze supercomputer werd officieel gedecommissioneerd op 31 december 2016, enkele maanden nadat de nieuwe Tier-1-supercomputer aan de KU Leuven in productie ging. Alle gebruikers van de 'oude' Tier-1 werden tijdig en meermaals geïnformeerd over de 'end of term'-regelingen. Ze konden nog gedurende de eerste drie maanden van 2017 hun data van de storage halen vooraleer ook die inactief werd.

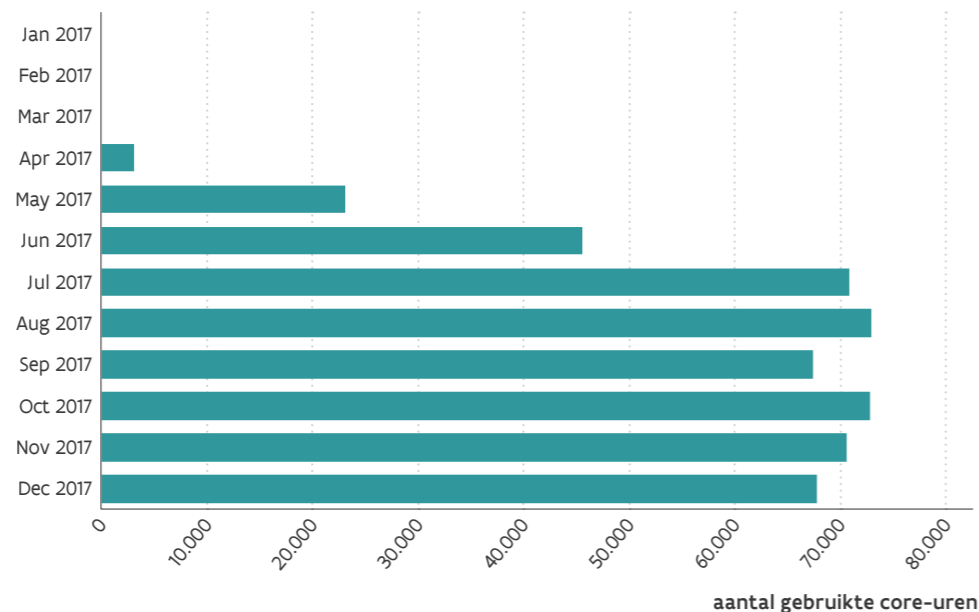
Na een kosten-batenanalyse werd besloten om de nog bruikbare hardware van deze machine te herconfigureren tot een on demand cloudcluster, als deel van een pilootopstelling ter voorbereiding van een nieuw Tier-1-'supercomputing as a service'-concept dat in 2018 door VSC wordt voorgesteld. Zodra alle onderzoekers

hun data van de storage hadden gehaald, werd begonnen met het uitvoerige reconversiewerk, inclusief:

- het herwerken van de netwerkconnectiviteit Tier-1a binnen het datacenter;
- de opruiming van defecte hardware;
- de consolidatie van nog werkende hardware;
- de herconfiguratie van alle switches, management nodes en servers;
- de uitrol van de on demand installatie;
- het onderhoud van de configuratie;
- piloot-user support.

De pilootopstelling heeft tot doel ervaring met cloudoplossingen op te doen binnen het VSC en om met deze technologie te experimenteren, om de noden van gebruikers beter in kaart te brengen en om mogelijke uitdagingen zo vroeg mogelijk te identificeren. Onderstaande grafiek geeft een beeld van het verbruik door pilootgebruikers in 2017.

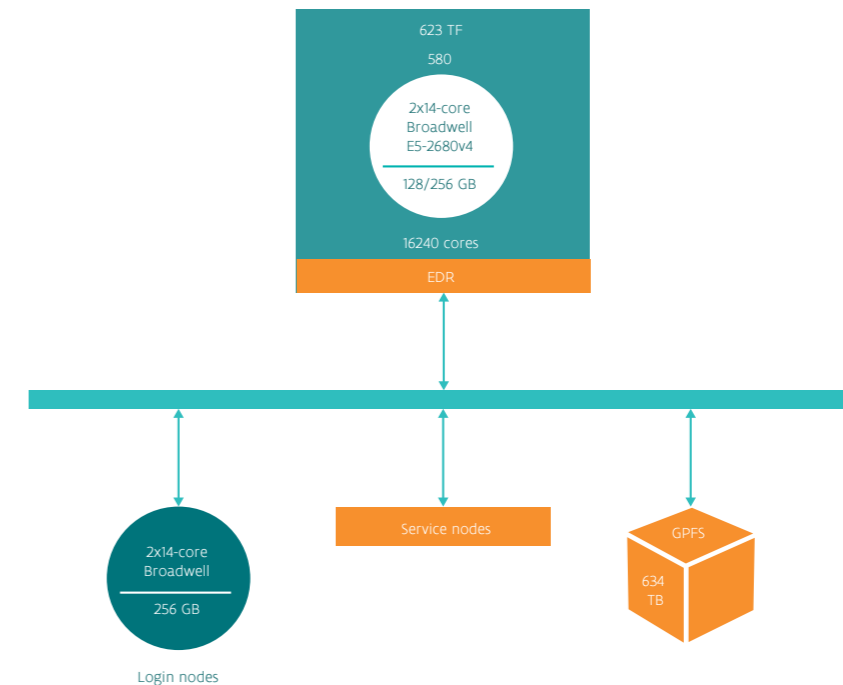
Ook na 2017 blijft de gedecommissioneerde Tier-1a zijn nut bewijzen. Na de pilootfase zal deze machine in 2018 als cloudinfrastructuur in productie worden aangeboden aan eindgebruikers.



Afbeelding 1 - Tier-1-gebruik aan de UGent in 2017 - compute

Tier-1 aan de KU Leuven

BrENIAC, de tweede Vlaamse Tier-1-machine, is in productie sinds oktober 2016.

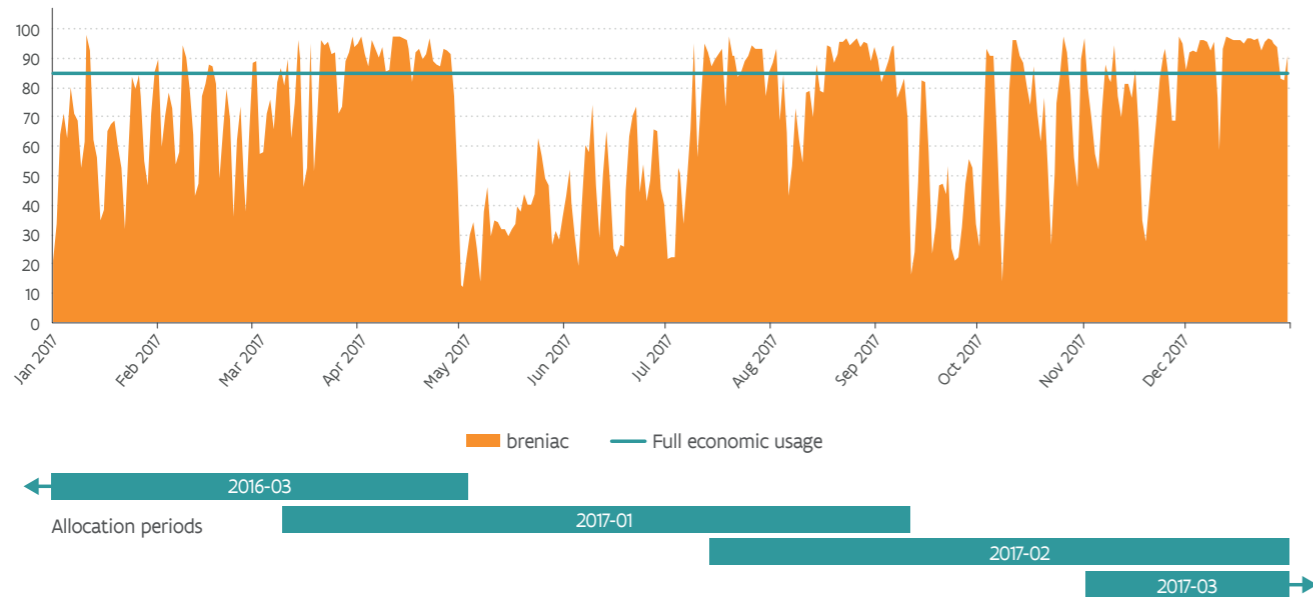


Afbeelding 2 - Tier-1 BrENIAC

De machine liep stabiel in 2017: de tijdsgrafiek toont dat ze zo goed als ononderbroken beschikbaar is geweest. Er was 1 korte ongeplande onderbreking door een algemene elektriciteitspanne.

In 3 projectrondes was er een totaal van 77 aanvragen voor de Tier-1-rekentijd. Hiervan werden er 54 goedgekeurd. Projecten van 4 verschillende allocatierondes waren actief in 2017 (2016-3, 2017-1, 2017-2 en 2017-3). Er was in mei en in mindere mate in september een

lagere bezetting, telkens nadat een allocatieperiode beëindigd was en er gedurende 2 maanden slechts 1 allocatieronde actief was. Hierop werd besloten om voor 2018 de allocatieperiodes te verlengen tot 8 maanden, zodat er continu projecten van 2 allocatierondes actief zijn. Dat geeft een betere spreiding van de rekestijd. De toegekende rekestijd werd in 2017 ook zo goed als volledig opgebruikt (2016-3: 93%; 2017-1: 96%; 2017-2: 91%).



Afbeelding 3 - BrENIAC % CPU Used 2017

De Tier-1-gebruikers werden na 2017 ondervraagd. 30% heeft geantwoord. Deze 30% heeft meegewerkt aan 40 van de 73 projecten die actief waren in 2017.

Hieruit bleek dat de algemene tevredenheid groot was:

Wat is je globale tevredenheid over het gebruik van de Tier-1?

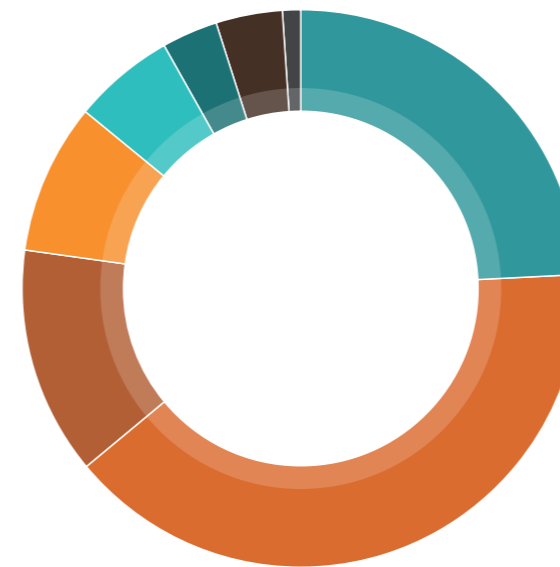
ZEER TEVREDEN	45%
TEVREDEN	50%
NEUTRAAL	5%

Voor veel onderzoekers is de Tier-1-infrastructuur nodig om de normale, dagelijkse onderzoeksvragen te kunnen analyseren.

Hoe belangrijk zijn de Tier-1-resources voor je onderzoek?

TOEGANG TOT DE VSC TIER-1 IS ESSENTIEEL VOOR ONS ONDERZOEK, ONZE NORMALE WORKLOAD OVERSTIJGT DE CAPACITEIT VAN DE HUIDIGE TIER-2-OMGEVING.	77%
TOEGANG TOT DE VSC TIER-1-INFRASTRUCTUUR IS NODIG OM SPECIFIEKE ONDERZOEKSVRAGEN OP TE LOSSEN, DE NORMALE WORKLOAD KAN MET DE TIER-2 AFGEHANDELD WORDEN.	23%

95% van de gebruikers die antwoordden, gaven dan ook aan dat ze in de toekomst Tier-1-projecten zullen blijven indienen. Het gebruik van Tier-1 toont aan dat die goed ingeburgerd is in de bestaande onderzoeksgemeenschap. De verdeling hiernaast toont dat deze verschillende onderzoeksdomeinen goed vertegenwoordigd zijn. Net zoals bij HPC-clusters in het buitenland zijn scheikunde, natuurkunde en de ingenieursdomeinen goed vertegenwoordigd. Natuurlijk blijft het belangrijk om in de toekomst verder uit te breiden naar zoveel mogelijk onderzoeksdomeinen.



- 24% > Technology
- 40% > Molecular Modelling
- 13% > Physics
- 9% > Astronomy and astrophysics
- 6% > Life sciences
- 3% > Psychology
- 4% > Chemistry
- 1% > Earth sciences

Afbeelding 4 - Gebruikte rekentijd per onderzoeksdomein

Rekenen op de Tier-1

TOEKENNEN REKENTIJD TIER-1

Onderzoekers kunnen op verschillende manieren rekentijd verkrijgen op Tier-1, zoals gestipuleerd in het reglement.

Voor onderzoekers verbonden aan een universiteit, een SOC of een gelijkaardige onderzoeksinstituten bestaan de volgende toegangskanalen:

- Starting Grant:
 - ✓ maximaal 100 nodedagen rekentijd;
 - ✓ kan op elk ogenblik aangevraagd worden, met snelle doorlooptijd;
 - ✓ om Tier-1 uit te proberen en benchmarks of softwaretests uit te voeren, als voorbereiding op een volwaardige projectaanvraag;
 - ✓ gratis.
- Project Access:
 - ✓ voor allocaties van 500 tot 5000 nodedagen rekentijd;
 - ✓ projectaanvragen beschrijven: het kaderend wetenschappelijk project; het consortium van gebruikers dat de berekeningen zal uitvoeren; het financierend kanaal; de rekentaken die zullen worden uitgevoerd (technisch); de software die zal worden aangewend; desgevallend de wetenschappelijke resultaten die werden verkregen met vorige Tier-1-projectallocaties;
 - ✓ projectaanvragen kunnen altijd ingediend worden, maar worden op drie momenten in het jaar geëvalueerd door de Tier-1 Allocation Board;
 - ✓ gratis.

Voor het beoordelen van de Tier-1-projectaanvragen werd een Tier-1 Allocation Board ingesteld. Sinds 2017 werd de Evaluatiecommissie uitgebreid met één lid en zetelen hierin vijf buitenlandse deskundigen:

- Walter Lioen, voorzitter (SURFsara, Nederland);
- Derek Groen (Computer Science, Brunel University London, UK);
- Sadaf Alam (CSCS, Zwitserland);
- Nicole Audiffren (CINES, Frankrijk);
- Gavin Pringle (EPCC, Edinburgh University, Schotland).

Caroline Volckaert van het FWO staat in voor het secretariaat. De HPC-coördinatoren van de Vlaamse universiteiten kunnen als waarnemers uitgenodigd worden om aan de vergaderingen van de Tier-1 Allocation Board deel te nemen.

De commissie evalueert de aanvragen en beslist of de gevraagde rekentijd geheel, gedeeltelijk of helemaal niet toegekend wordt.

Sinds 2016 worden niet langer kosten aangerekend voor Tier-1-projecten toegekend aan academische onderzoekers. Ondanks de (geringe) hoogte van de aangerekende kostprijs vormde die toch een duidelijke hinderpaal voor onderzoekers, en belemmerde dat de toegang van minder ervaren onderzoeksgroepen naar nieuw, uitdagend maar risicovol onderzoek op de Tier-1-supercomputer.

Voor onderzoekers uit de industrie bestaan er ook twee toegangskanalen om Tier-1-rekentijd te verkrijgen:

- Exploratory Access:
 - ✓ maximaal 100 nodedagen rekentijd;
 - ✓ om de Tier-1-gebruikersomgeving uit te proberen, benchmarks of softwaretests uit te voeren;
 - ✓ gratis.

- Full Access:
 - ✓ bedrijven kunnen om rekentijd af te nemen een overeenkomst sluiten met de instelling die de Tier-1 huisvest en met het FWO;
 - ✓ full cost-aanrekening van de verbruikte rekentijd en de gebruikte storage.

De tarieven waarvoor industriële gebruikers Tier-1-rekentijd kunnen kopen, werden vastgelegd in het Toegangsreglement 2017. Daarnaast kunnen onderzoekers uit de industrie ook toegang krijgen tot Tier-1 in het kader van een onderzoeksproject in samenwerking met een publieke onderzoeksinstituut zoals een Vlaamse universiteit.

TIER-1 STARTING GRANTS/EXPLORATORY ACCESS

In 2017 werden 40 Starting Grants toegekend en liepen er 2 Exploratory Access-projecten.

Starting Grants 2017

Aanvrager	Onthaalinstelling	Vakgebied
Tatiana Woller	VUB	Theoretical chemistry
Stefan Knippenberg	UHasselt	Biophysics
Bercx Marnik	UAntwerpen	Nanophysics/technology
Camila Scolini	KU Leuven	Astronomy and astrophysics
Christine Verbeke	KU Leuven	Astronomy and astrophysics
Stefan Weckx	VUB	Bioinformatics/biostatistics
Bonan Bertrand	KU Leuven	Earth sciences
Darko Stosic	UAntwerpen	Physics
Charlotte Vets	UAntwerpen	Theoretical chemistry
Emmanuel Chané	KU Leuven	Astronomy and astrophysics
Chrils Ulens	KU Leuven	Neurobiology
Lucas Delcou	UGent	Mechanical engineering
Laurent DeMoerloose	UGent	Civil engineering
Matthieu LeRoy	KU Leuven	Astronomy and astrophysics
Niels Souverijns	KU Leuven	Environmental science
Ileyk Elmellah	KU Leuven	Astronomy and astrophysics
Siegfried Cools	UAntwerpen	Unknown
Kirit Makwana	KU Leuven	Astronomy and astrophysics
dimitrios millas	KU Leuven	Astronomy and astrophysics
Juan Jose Gutierrez Sevillano	UGent	Physical chemistry
Krisztina Fehér	UGent	Chemistry
Hui Zhao	KU Leuven	Bioinformatics/biostatistics
Toon Verstraelen	UGent	Theoretical chemistry

Diego Gonzalez	KU Leuven	Astronomy and astrophysics
Norbert Magyar	KU Leuven	Astronomy and astrophysics
David Gobrecht	KU Leuven	Astronomy and astrophysics
Cole Johnston	KU leuven	Astronomy and astrophysics
Francesco Contino	VUB	Mechanical engineering
Elisabetta Boella	KU Leuven	Astronomy and astrophysics
Pierre De Buyl	KU Leuven	Theoretical physics
Dries Allaerts	KU Leuven	Mechanical engineering
Athanasios Vitsas	KU Leuven	Mechanical engineering
Panos Tsirikoglou	VUB	Mechanical engineering
Wim Munters	KU Leuven	Mechanical engineering
Maarten Vanloo	KU Leuven	Geography
Wenzhi Ruan	KU Leuven	Astronomy and astrophysics
Hans De Winter	UAntwerpen	Bioinformatics/biostatistics
Abhishek Dutta	KU Leuven	Materials technology
Jan Turek	VUB	Chemistry
Frederik Tielens	VUB	Chemistry

Exploratory Access

Aanvrager	Bedrijf
Marcus Drosson	Umicore
Gareth Linsmith	ApheaBio

GOEDGEKEURDE TIER-1-AANVRAGEN

Dit is de lijst van alle goedgekeurde aanvragen van 2017, gegroepeerd per evaluatiemoment.

6 februari 2017

Aanvrager	Onthaalinstelling	Departement	Titel	Toegekende nodedagen	Toegekende storage
Danny Vanpoucke	UHasselt	Materials physics (IMOMAF)	Breathing behavior of flexible mixed metal Metal-Organic Frameworks	3100	0,85
Jolan Wauters	UGent	Department of Flow, Heat and Combustion Mechanics	Optimization of a dual feather wing tip geometry using CFD	2460	2,5
Pieter Reyniers, David Van Cauwenberge, Laurien Vandewalle	UGent	Laboratory for Chemical Technology	Computational Fluid Dynamics based design of a novel reactor technology for the Oxidative Coupling of Methane	2000	1
Gilberto Santo	UGent	Department of Flow, Heat and Combustion Mechanics	Computational Fluid Dynamics simulation of wind turbines	2379	0,175

Wilfried de Corte	UGent	Department of Data Analysis, Faculty of Psychology and Educational Sciences	Targeting Key Features that Determine the Robustness and Sensitivity of Pareto-optimal (PO) Selection Designs	4044	0,025
Oriana De Vos, An Ghysels	UGent	Center for Molecular Modeling	Effect of periodic boundary conditions on simulations of oxygen transport through membranes	1260	0,02
Arthur De Vos, Veronique Van Speybroeck, Kurt Lejaeghere	UGent	Center for Molecular Modeling	Electronic properties of 3D nitrogen-containing Covalent organic Frameworks from First-Principles Simulations	4140	2,71
Sven Rogge, Ruben Demuyndck, Steven Vandenbrande, Veronique Van Speybroeck	UGent	Center for Molecular Modeling	Full quantum mechanical study of the influence of functionalization and temperature on phase transformations in metal-organic frameworks	2450	0,245
Jelle Wieme, Kurt Lejaeghere, Steven Vandenbrande, Veronique Van Speybroeck	UGent	Center for Molecular Modeling	Assessing the accuracy of hybrid functionals for the relative stability of a flexible MOF	3420	0,21
Jonas Bekaert, Milorad Milosevic, Bart Partoens	UAntwerpen	Condensed Matter Theory / Physics Department	First-principles study of the superconducting properties of ultrathin transition metal dichalcogenides	4802	0,25
Marnik Bercx	UAntwerpen	EMAT / Department of Physics	Study of redox reactions in Li-Rich layered oxides	3742	0,06
Johan Meyers, Ali Emre Yilmaz	KU Leuven	Turbulent Flow Simulation & Optimization (TFSO) Research Group Mechanical Engineering Department	LES-Based Optimal Control Studies of Wind Farms with Advanced Turbine Models	4964	90
Johan Meyers, Dries Allaerts, Athanasios Vitsas	KU Leuven	Turbulent Flow Simulation & Optimization (TFSO) Research Group Mechanical Engineering Department	Simulation of operational offshore wind farms for comparison with experimental data	4920	7,5
Samuel Moors, Tatiana Woller	VUB	Department of Chemistry, group ALGC	Modeling aromatic chlorination reactions with ab initio molecular dynamics	3233	0,021
Stefan Weckx	VUB	Research Group of Industrial Microbiology and Food Biotechnology, Faculty of Sciences and Bioengineering Sciences	Metagenomic data analysis to unravel food fermentation processes	1500	1

5 juni 2017

Aanvrager	Onthaalinstelling	Departement	Titel	Toegekende nodedagen	Toegekende storage
Charlotte Vets, Erik Neyts	UAntwerpen	Research group Plasmant, Department of Chemistry	Adsorption energies of carbon nanotubes on bimetallic catalysts: impact for chirality-selective growth	4980	1
Jelle Wieme, Aran Lamaire, Veronique Van Speybroeck	UGent	Center for Molecular Modeling	Understanding the high-pressure behavior of a flexible nanoporous material	2430	0,81
Arthur De Vos, Veronique Van Speybroeck, Kurt Lejaeghere	UGent	Center for Molecular Modeling	Electronic properties of 2D nitrogen-containing Covalent organic Frameworks from First-Principles Simulations	2128	1,5
Oriana De Vos, An Ghysels	UGent	Center for Molecular Modeling	Simulating oxygen transport through membranes with various lipid compositions	985	0,005
Sam De Waele, Stefaan Cottenier, Kurt Lejaeghere	UGent	Center for Molecular Modeling	Analysis of the off-stoichiometry of Fe ₃ N _{1+y} with Density-Functional Theory	3456	4,378
Darko Stosic, Milorad Milosevic	UAntwerpen	Condensed Matter Theory / Physics Department	Large-scale Ginzburg-Landau simulations of Single-Photon Detectors	5000	1
Ruben Demuyndck, Sven Rogge, Veronique Van Speybroeck	UGent	Center for Molecular Modeling	Studying the mechanical and thermal stability of UiO-66 with a full quantum mechanical description	4320	0,27
Michael Sluydts, Stefaan Cottenier, Veronique Van Speybroeck	UGent	Center for Molecular Modeling	Determining temperature-dependent formation energies for point defects in Ge using the HSE06 functional [resubmit]	4895	4,096
Pieter Cnudde, Simon Bailleul, Kristof De Wispelaere, Veronique Van Speybroeck	UGent	Center for Molecular Modeling	Ab initio study on the stability of cracking intermediates	4920	0,081
Steven Vandenbrande, Toon Verstraelen, Veronique Van Speybroeck	UGent	Center for Molecular Modeling	Ab initio calculation of the Henry constant of methane in (functionalized) UiO-67	2400	1,008
Ileyk El Mellah, Jannis Teunissen	KU Leuven	Centre for mathematical Plasma Astrophysics / Department of Mathematics	Wind accretion on to compact objects in Supergiant X-ray binaries	1468	0,8

Kristof De Wispelaere, Veronique Van Speybroeck	UGent	Astrophysics / Department of Mathematics	Mechanistic investigation of the early stages of the methanol-to-hydrocarbons conversion	3640	0,9
Chiara Caratelli, Julianna Hajek, Veronique Van Speybroeck	UGent	Center for Molecular Modeling	Probing the strength of basic sites on UiO-66 using pKa calculations [Resubmit]	4450	0,9
Dimitrios Millas, Bart Ripperda, Rony Keppens	KU Leuven	CmPA, Department of Mathematics	Outflows and particle evolution in relativistic astrophysics (OPERA) IV	1250	2,5
Frank Peelman, Ewald Pauwels	UGent/VIB	VIB-UGent Center for Medical Biotechnology	In silico study of lymphoma-related MyD88 mutations and their effect on protein actions and mechanism.	1677	0,015
Christine Verbeke, Camilla Scolini, Stefaan Poedts	KU Leuven	CmPA, Department of Mathematics	Modeling the evolution of interplanetary Coronal Mass Ejections: inclusion of a magnetic flux rope and coupling to a magnetospheric model	1144	2,6
Pieter Reyniers, Laurien Vandewalle	UGent	Department of Materials, Textiles and Chemical Engineering (EA11); Laboratory for Chemical Technology	Computational Fluid Dynamics based design of a novel reactor technology for the Oxidative Coupling of Methane (II)	3700	2
Jonas Bekaert, Milorad Milosevic, Bart Partoens	UAntwerpen	Condensed Matter Theory / Physics Department	Ab initio study of the influence of atomic defects and strain on superconductivity in ultrathin transition metal dichalcogenides	4729	0,25
Eliot Boulanger	KU Leuven	Theoretical and Computational Chemistry Group / Chemistry Department	Linking Protein Motion and Function: A Combined Molecular Dynamics and QM/MM Study	1000	1
Alexandra Gossart, Niels Souverijns, Nicole van Lipzig, Jan Ooghe	KU Leuven	Regional Climate Studies / Department of Earth and Environmental Sciences	Long-term hindcast climate simulation over Antarctica, using the coupled COSMO-CLM model	572	0,1
Matthieu Leroy	KU Leuven	CmPA, Department of Mathematics	The Kelvin-Helmholtz instability at the magnetosphere : impact of the environmental parameters on the penetration of high energy plasma	835	1

2 oktober 2017

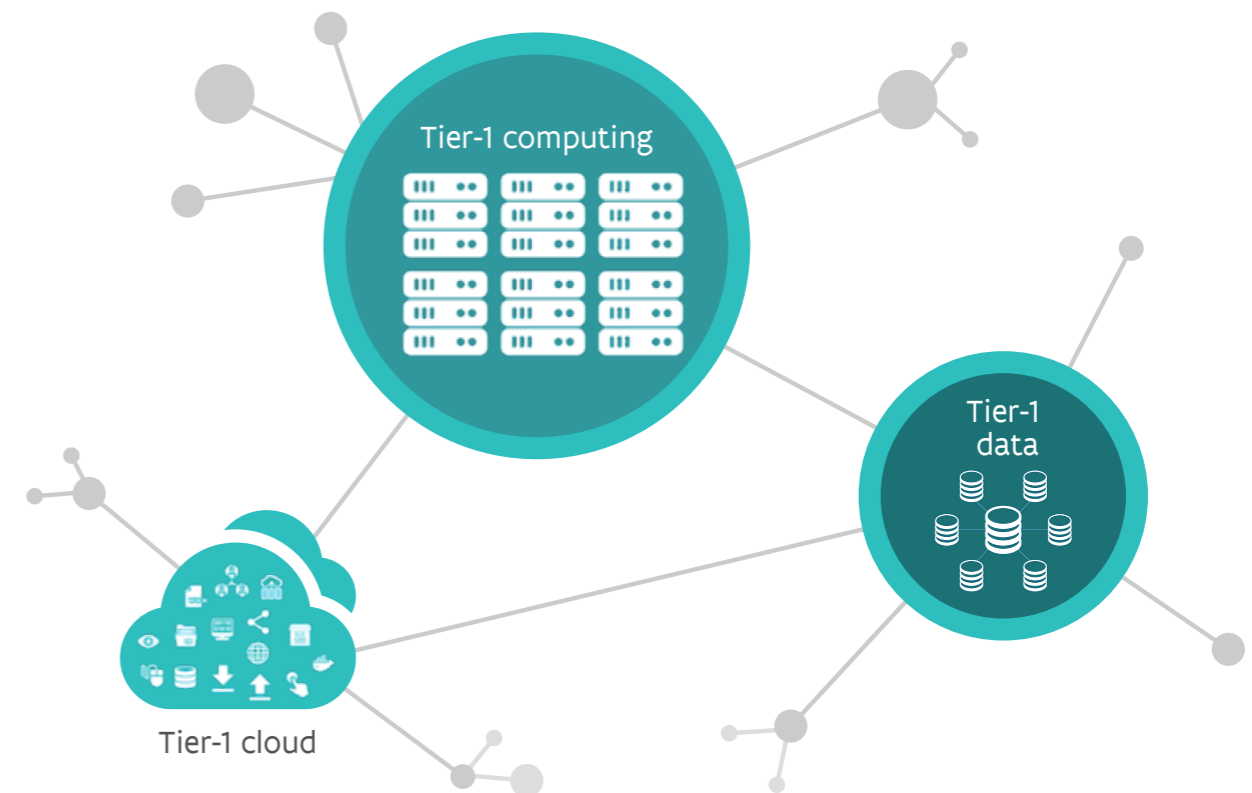
Aanvrager	Onthaalinstelling	Departement	Titel	Toegekende nodedagen	Toegekende storage
Norbert Magyar	KU Leuven	CmPA (Centre for mathematical Plasma Astrophysics)	Wave heating and turbulence in the solar atmosphere	2500	0,5
Diego Gonzalez Herrero	KU Leuven	CmPA (Centre for mathematical Plasma Astrophysics)	Study of magnetic cusp properties with Particle In Cell simulations.	2200	1
Chun Xia	KU Leuven	CmPA (Centre for mathematical Plasma Astrophysics)	Formation and eruption of solar prominences	1700	1,2
Wilfried De Corte	UGent	Department of Data Analysis, Faculty of Psychology and Educational Sciences	A Sample to Population Cross-Validation Approach to Assess the Robustness and Sensitivity of Pareto-optimal (PO) Selection Designs	3888	0,025
Michael Sluydts	UGent	Center for Molecular Modeling	Discovering the temperature dependence of charged defect concentrations in Ge using HSE06.	3887	3,072
Pieter Reyniers	UGent	Department of Materials, Textiles and Chemical Engineering (EA11), Laboratory for Chemical Technology	Computational fluid dynamics based design of a novel reactor technology for the oxidative coupling of methane (III)	3700	1
Jolan Wauters	UGent	Department of Flow, Heat and Combustion Mechanics	Robust Game Theory based optimization of a wing fence geometry using CFD	3600	1
Jonas Bekaert	UAntwerpen	Condensed Matter Theory / Physics Department	The quest for superconductivity in atomically thin noble metals	4928	0,218
Jelle Wieme	UGent	Center for Molecular Modeling	Benchmarking elastic properties of a metal-organic framework	1296	0,158
Simon Bailleul	UGent	Center for Molecular Modeling	Enhanced sampling study of the methylation of ethene, propene and trans-2-butene.	3300	0,0795

Johan Meyers	KU Leuven	Turbulent Flow Simulation & Optimization (TFSO) Research Group Mechanical Engineering Department	Annual energy production (AEP) estimates of Cabauw and Finol based on large eddy simulations	4992	3,4
Johan Meyers	KU Leuven	Turbulent Flow Simulation & Optimization (TFSO) Research Group Mechanical Engineering Department	Optimal dynamic induction and yaw control of wind farms in the atmospheric boundary layer	4912	6,35
Johan Meyers	KU Leuven	Turbulent Flow Simulation & Optimization (TFSO) Research Group Mechanical Engineering Department	Simulation of the Lillgrund offshore wind farm for loads analysis	4560	10,545
Eliot Boulanger	KU Leuven	Theoretical and Computational Chemistry Group / Chemistry Department	Linking Protein Motion and Function: A Combined Molecular Dynamics and QM/MM Study	4000	1
Diether Lambrechts	KU Leuven/VIB	Laboratory of Translational Genetics / Faculty of Medicine	Optimization of long-read sequencing mapping to discover biomarkers for cancer immunotherapy	5255	15
Oriana De Vos	UGent	Center for Molecular Modeling	Simulating oxygen transport through membranes at various temperatures	660	0,003
Elisabetta Boella	KU Leuven	CmPA / Department of Mathematics	First principles simulations of magnetic reconnection in the solar corona	0	1
Kirit Makwana, Bart Ripperda, Dimitros Millas, Ronny Keppens	KU Leuven	CmPA, Department of Mathematics	Fluid to kinetic modeling of the magnetic island coalescence problem	1115	0,86

Het Tier-1-supercomputing-platform vanaf 2018

Naast de structurele financiering voor de Tier-2 besliste de Vlaamse Regering eind 2017 om een bedrag van 30 miljoen euro vrij te maken voor de verwezenlijking van een Vlaams Tier-1-supercomputing-platform vanaf 2018. Het VSC wil met de implementatie van een nieuw platform voor HPC 'supercomputing as a service' ook nieuwe gebruikers aantrekken en een meer geïntegreerde service aanbieden aan de bestaande gebruikers.

Het nieuwe platform zal drie gekoppelde omgevingen omvatten, met name een Tier-1-compute-infrastructuur, een Tier-1-datainfrastructuur en een Tier-1-cloud-infrastructuur. Hierdoor moet de HPC-infrastructuur in haar geheel inzetbaarder en toegankelijker worden voor alle gebruikers. Door deze impulsfinanciering zal het gebruik nog verbreden, en zal het vertrouwen in de aanwezigheid van een dergelijke HPC-infrastructuur in Vlaanderen nog toenemen. Als de volgende jaren ook de ondersteuning verder uitgebouwd kan worden, zal deze financiële injectie de inbedding van computationeel onderzoek zeker bevorderen.



Afbeelding 5 - Tier-1-supercomputing-platform

CASE

INNOVATIEF VIDEOWATERMERK SPOORT DIGITALE PIRATEN OP

PhD-onderzoeker Hannes Mareen
IDLab, imec – UGent



De economische impact van digitale piraterij wordt op miljarden euro's geschat. Onderzoeker Hannes Mareen van IDLab (imec – UGent) bedacht een methode om digitale piraten die illegaal video's delen te identificeren.

Digitale piraterij is een grote zorg voor de filmindustrie. Naast de economische impact schrikt piraterij makers ook af om in nieuwe content te investeren. "En dat resulteert uiteindelijk in minder keuze voor consumenten", aldus Hannes Mareen van IDLab.

Mareen bedacht een methode om digitale piraten beter op te sporen. Als de makers een video legaal aan een klant of recensent bezorgen (bijvoorbeeld een preview voor een recensie), wordt er een unieke vingerafdruk of watermerk aan toegevoegd. Aan de hand van dat watermerk kan achteraf achterhaald worden wie de video illegaal online heeft verspreid.

Uniek watermerk

Hannes Mareen: "Ik heb een nieuwe methode ontwikkeld die ervoor zorgt dat het watermerk onzichtbaar is en niet kan worden verwijderd. Op het moment dat de encoder de video comprimeert tot een beheersbare opslag grootte, worden tijdens het coderingsproces opzettelijk wijzigingen toegevoegd. Dat leidt tot een unieke combinatie van kleine fouten verspreid over de hele video. Het aantal fouten is enorm, maar ze zijn zo

subtiel dat kijkers het watermerk niet kunnen herkennen, laat staan verwijderen. Wordt de video illegaal gedeeld, dan kan een computer de unieke combinatie van coderingsfouten gemakkelijk uitlezen en zo achterhalen wie de dader is."

Een slimme encoder zorgt er bovendien voor dat het watermerk snel kan worden toegevoegd, waardoor de methode op grote schaal bruikbaar is. Hannes Mareen: "Momenteel ben ik deze techniek verder aan het verfijnen, als onderdeel van mijn PhD-beurs strategisch basisonderzoek bij het FWO."

422.000 computeruren

Voor de ontwikkeling van zijn nieuwe watermerktechniek maakte Hannes Mareen gebruik van de uitgebreide computationele capaciteit van het VSC. Hij testte nieuwe compressie-algoritmen en bestudeerde efficiënte detectiemethoden. In totaal gebruikte hij bijna 422.000 core-uren aan computertijd op de Tier-2-clusters van de VSC-UGent-hub. Dat komt overeen met meer dan twaalf jaar non-stop een hedendaagse laptop gebruiken.

Onderscheidingen

Mareen voerde zijn onderzoek uit in het kader van zijn masterproef *A novel video watermarking approach based on implicit distortions*, onder toezicht van prof. Peter Lambert, Glenn Van Wallendael en Johan De Praeter (UGent). Hij ontving er meerdere onderscheidingen voor:

- Best Poster Award 2018 op het onderzoekssymposium van de faculteit Ingenieurswetenschappen en Architectuur aan de UGent;
- winnaar van de Agoriaprijs 2017 (als onderdeel van de Vlaamse Scriptieprijs). Deze prijs wordt uitgereikt aan de student met de beste masterproef in technologie.

<http://idlab.technology>

PUBLICATIES

'Piraten gekielhaald', *EOS Magazine*, 2018, p. 58-59 (<https://hdl.handle.net/1854/LU-8557646>)
A novel video watermarking approach based on implicit distortions, ICCE2018, p. 543-544 (<https://hdl.handle.net/1854/LU-8546255>)

TIER-2-INFRASTRUCTUUR

Beschikbare infrastructuur

Deze sectie geeft een overzicht van de Tier-2-infrastructuur die binnen de verschillende Vlaamse universiteiten beschikbaar is. Ook het gebruik ervan wordt geïllustreerd.

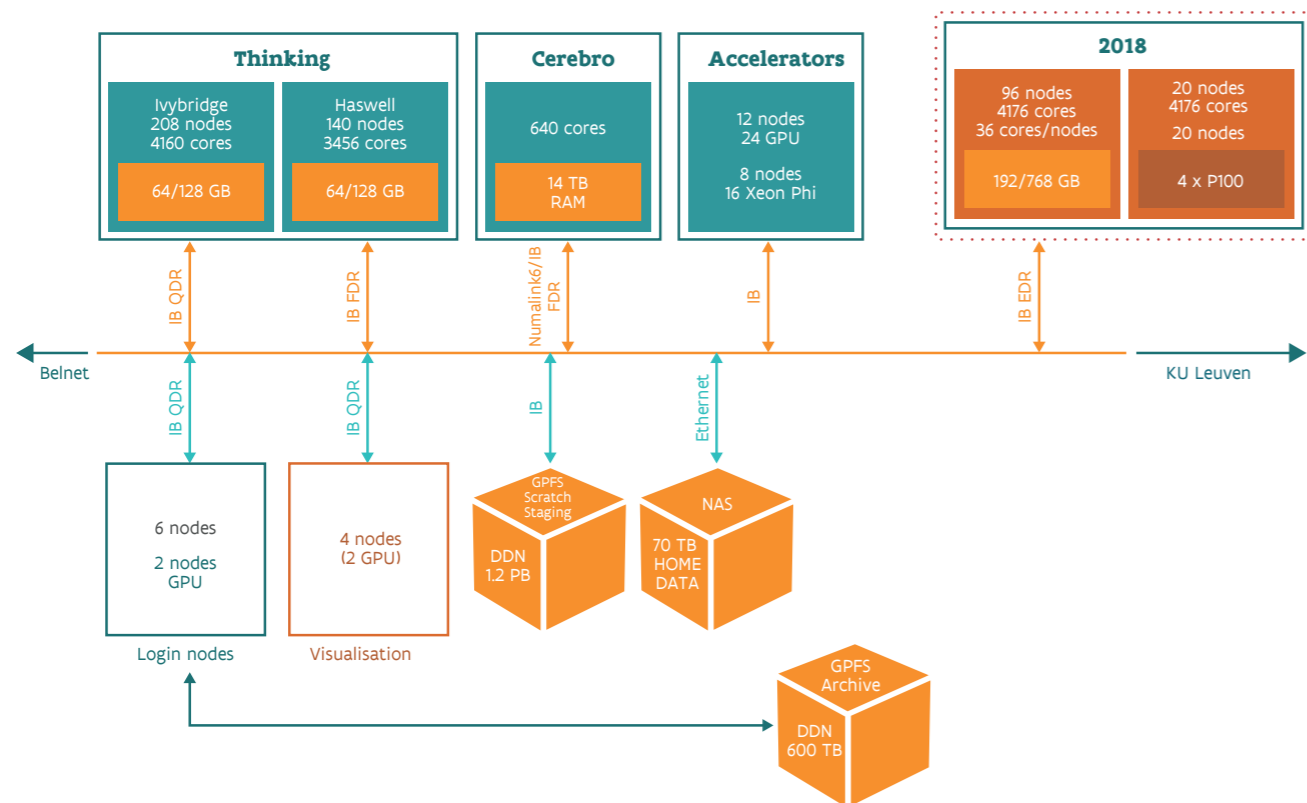
KU LEUVEN EN UNIVERSITEIT HASSELT

Voor de Tier-2-infrastructuur werken de KU Leuven en de UHasselt samen.

De infrastructuur bestaat uit:

- 2 clusters, 7 partities;
- 244 TF;
- 8256 CPU / 71.808 accelerator cores;
- 44 TB geheugen.

De nieuwe cluster op het schema werd in 2017 aangekocht, maar de implementatie is voor 2018.



Afbeelding 6 - Tier-2-infrastructuur KU Leuven - UHasselt

In 2017 waren er geen noemenswaardige aanpassingen aan de Tier-2-infrastructuur. Er werd wel een aankoop-procedure gevoerd voor een volledig nieuwe Tier-2-cluster. HPE diende de beste offerte in. De belangrijkste kenmerken van de nieuwe cluster zijn:

- 307 TFlops/s piekperformantie;
- 10 nodes met meer geheugen (768 GB);
- 20 nodes met elk 4 P100 nVidia GPU's;
- EDR interconnect;
- integratie met het bestaande parallele filesysteem.

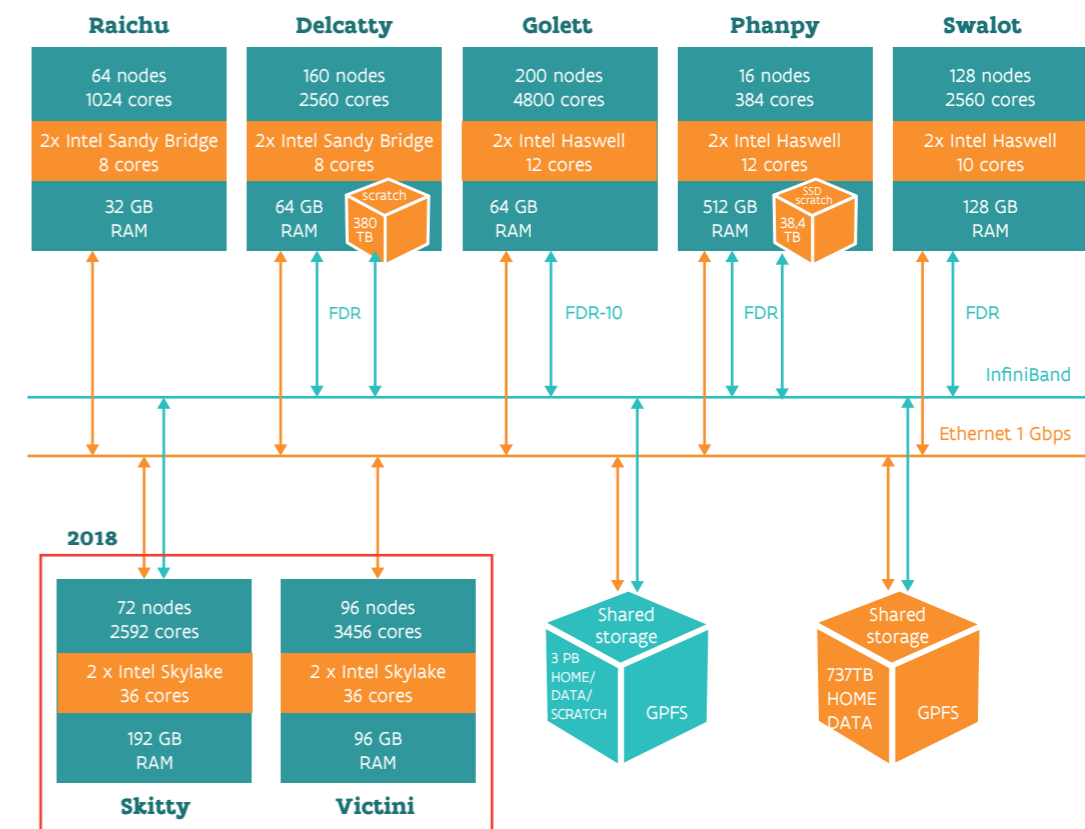
De nieuwe machine werd besteld in oktober 2017 en zal in 2018 in gebruik genomen worden.

UNIVERSITEIT GENT

De UGent investeert al meerdere jaren in de uitbouw van een performante infrastructuur. Die bestaat nu uit:

- 5 clusters;
- 218 TF;
- 10.960 CPU cores;
- 49 TB geheugen.

De Tier-2-infrastructuur is opgebouwd uit verschillende clusters, in functie van specifieke kenmerken. In de loop van 2017 werd een nieuwe shared DATA en SCRATCH storage (t.b.v. 2 PB) in productie genomen. Ook werd het order geplaatst om de Tier-2-infrastructuur uit te breiden met twee nieuwe clusters. Die zullen in productie komen in 2018.



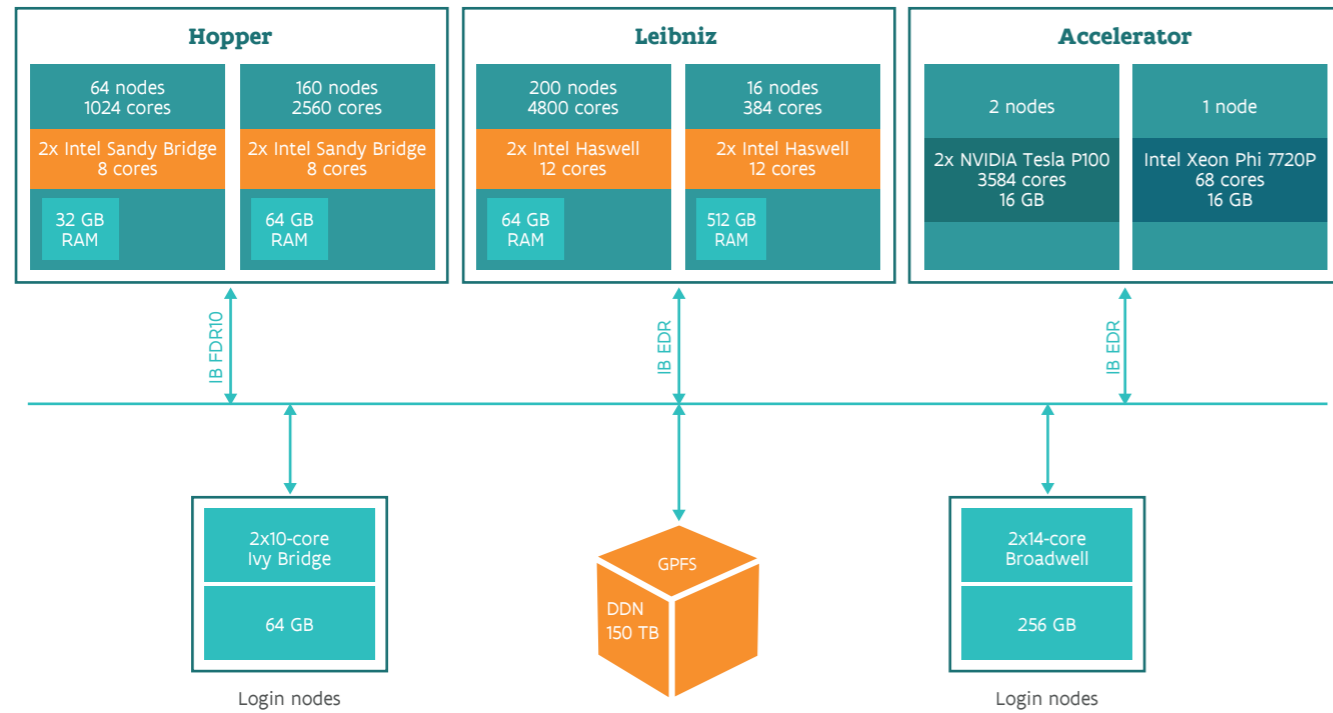
Afbeelding 7 - Tier-2-infrastructuur UGent

UNIVERSITEIT ANTWERPEN

Voor de UAntwerpen vormt een grote rekencapaciteit voor onderzoek een strategische prioriteit. De Tier-2-infrastructuur bestaat uit:

- 2 clusters, 4 partities;
- 239 TF;
- 7616 CPU cores;
- 36 TB geheugen.

In de loop van 2017 werd Leibniz, de nieuwste cluster, in gebruik genomen.



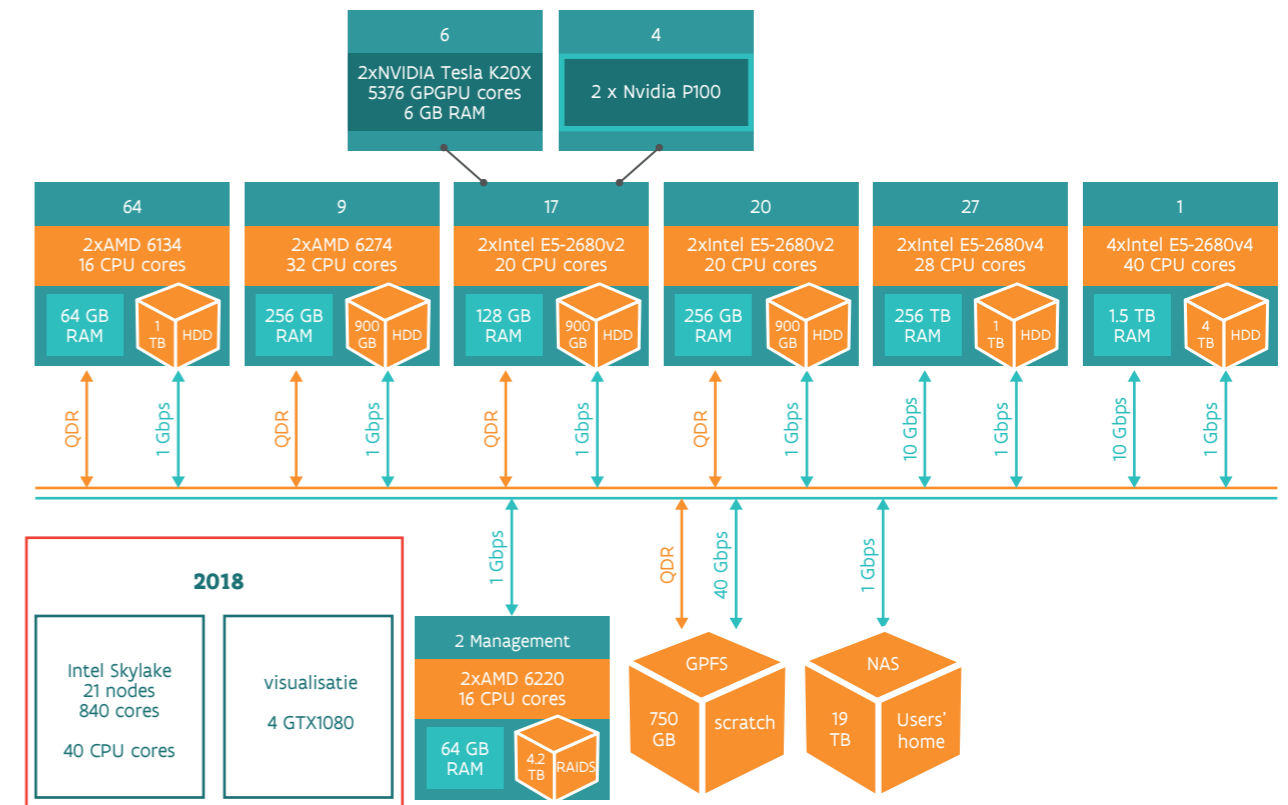
Afbeelding 8 - Tier-2-infrastructuur UAntwerpen

VRIJE UNIVERSITEIT BRUSSEL

De Tier-2-infrastructuur aan de VUB ziet er als volgt uit:

- 1 cluster, 6 partities;
- 16 TF;
- 2848 CPU cores / 32.256 GPGPU cores;
- 21,6 TB geheugen.

De VUB koos ervoor om uitbreidingen steeds te doen binnen dezelfde Hydra-omgeving, wat efficiënter is voor zowel de gebruikers als het managementteam. Dat heeft dan wel een heterogenere cluster tot gevolg. De cluster beantwoordt op die manier aan de specifieke noden van verschillende onderzoeksgroepen.



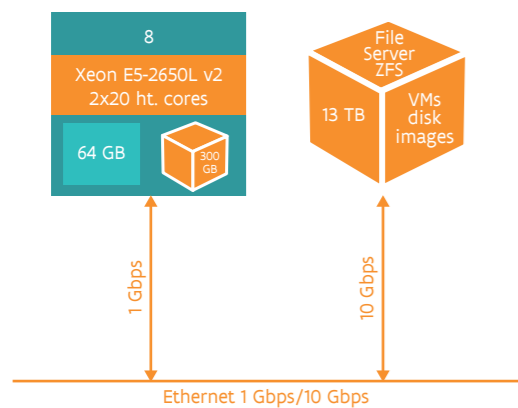
Afbeelding 9 - Tier-2-infrastructuur VUB

Naast haar eigen Tier-2-infrastructuur beheert de VUB – samen met de ULB – ook de gridinfrastructuur, die onder meer gebruikt wordt voor het verwerken van de gegevens verzameld bij het uitvoeren van experimenten met de Large Hadron Collider (LHC) aan het CERN, en die ook binnen de Vlaamse onderzoeksgemeenschap gebruikt wordt.



Afbeelding 10 - Gridinfrastructuur VUB

Ten slotte beschikt de VUB over een testopstelling voor cloudinfrastructuur.

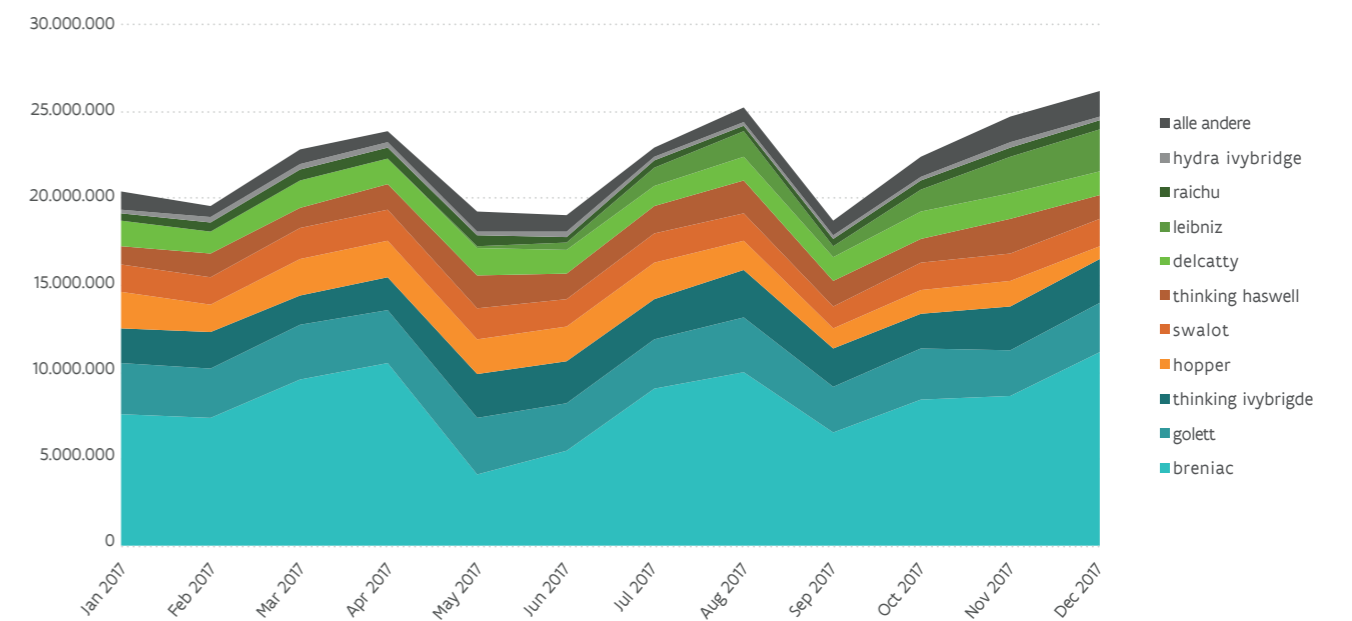


Afbeelding 11 - Cloudinfrastructuur VUB

Exploitatie en gebruik

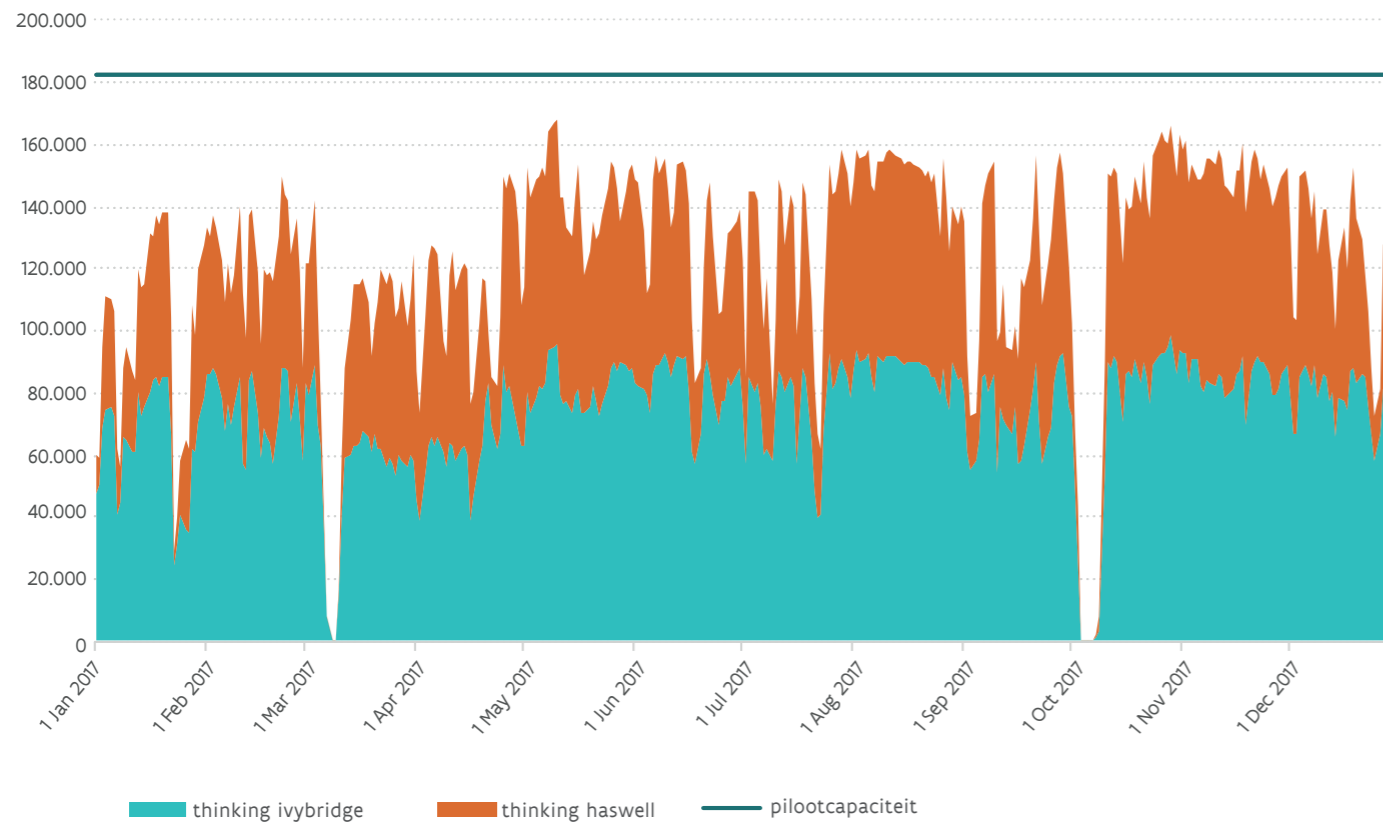
Na de beschrijving van de infrastructuur volgt hier een overzicht van het gebruik van de Tier-1 en de Tier-2.

Voor het rapporteren van het gebruik beschikt het VSC over een centrale XDMoD-infrastructuur, die alle data van de verschillende clusters verzamelt en de nodige overzichten genereert.



Afbeelding 12 - Gebruik uitgedrukt in core-uren van alle VSC-clusters

Afbeelding 12 geeft het gecumuleerde gebruik weer van de Tier-1- en de Tier-2-infrastructuur. Er is een duidelijke stijging merkbaar. Het totaal aantal core-uren blijft verder stijgen in 2017 door het inzetten van de nieuwe Tier-1 BrENIAC en het vernieuwen van de Tier-2-infrastructuur in de verschillende instellingen.

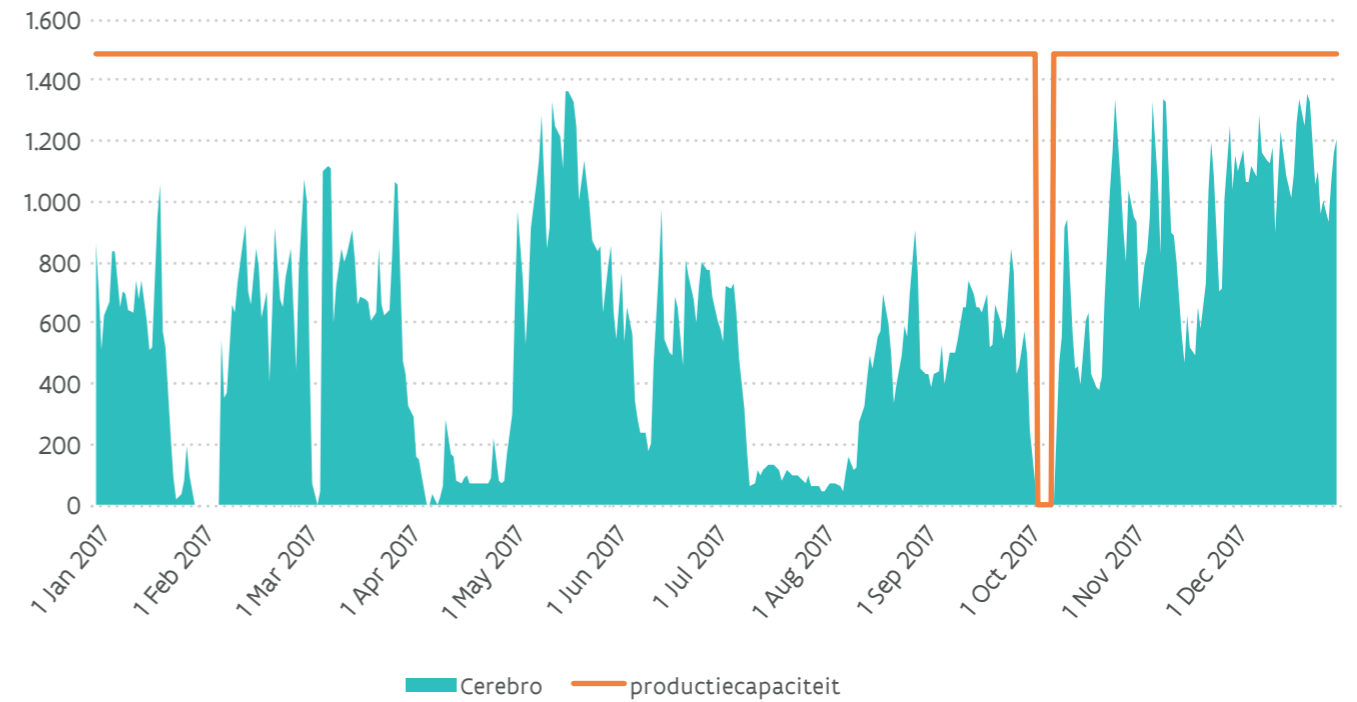


Afbeelding 13 - Gebruik van de KU Leuven/UHasselt-infrastructuur (thin node)

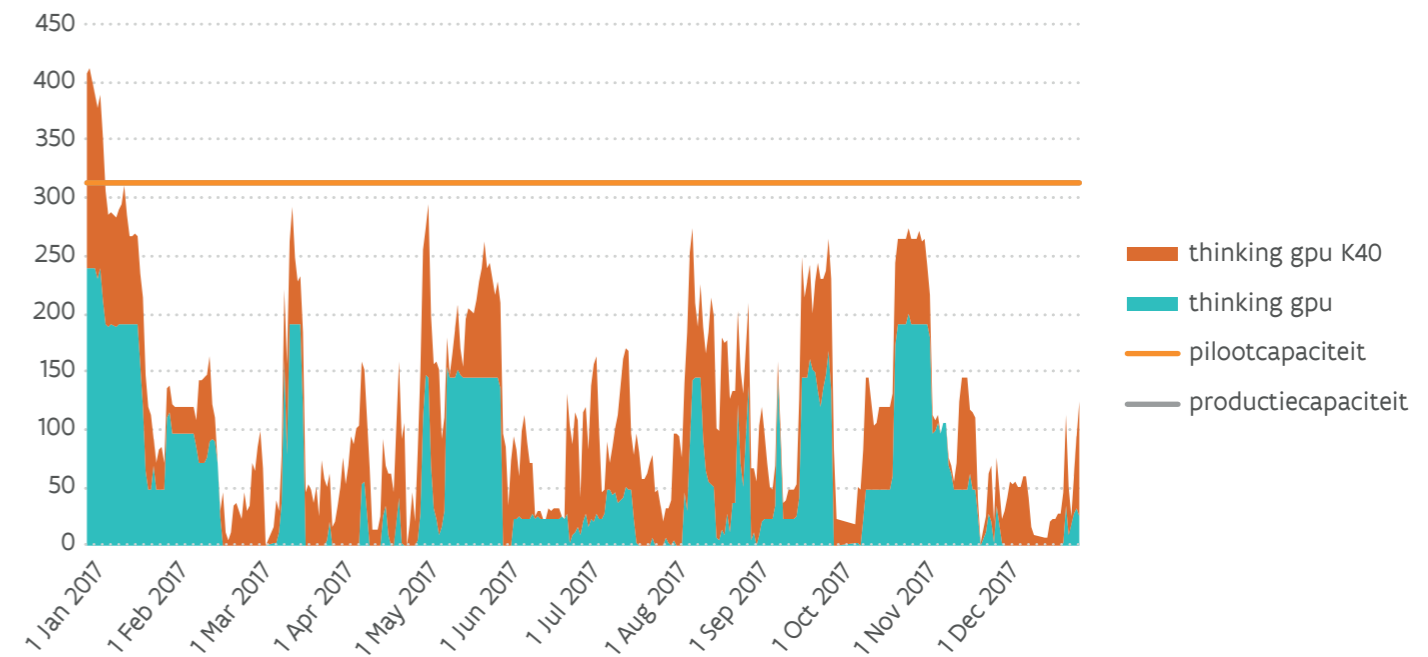
Afbeelding 13 geeft een overzicht van het gebruik van de infrastructuur aan de KU Leuven. De grafiek stelt het cumulatieve gebruik voor van de verschillende thin node clusters aan de KU Leuven. In de grafiek zijn twee onderbrekingen te zien. Beide houden verband met werken aan het parallelle filesystem. Vermits dit intensief wordt gebruikt in de meeste compute jobs, is het niet mogelijk om de cluster operationeel te houden tijdens het onderhoud.

Eind 2016 werd bijkomende storage aangekocht. Die werd in maart 2017 geïnstalleerd. De geaggregeerde bandbreedte werd verhoogd en de capaciteit werd uitgebreid naar 1,1 PB. Hiermee is het storagestelsel klaar om in de toekomst een tweede cluster te ondersteunen. In oktober gebeurde er vervolgens een noodzakelijk update aan de besturings-elementen van het storagestelsel.

De rest van het jaar kende de cluster een hoge bezettingsgraad.



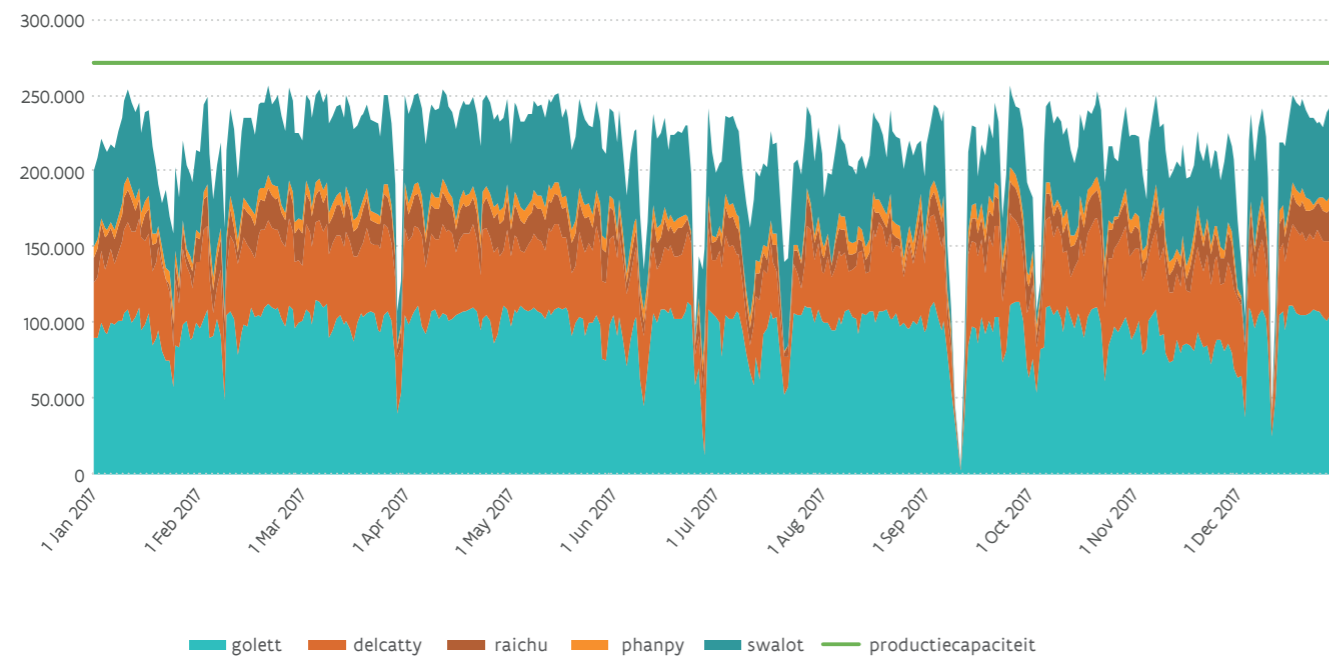
Afbeelding 14 - Gebruik van de KU Leuven/UHasselt-infrastructuur (shared memory)



Afbeelding 15 - Gebruik van de KU Leuven/UHasselt-infrastructuur (acceleratoren)

Buiten de thin node-rekencluster is er aan de KU Leuven ook nog een shared memory-machine en een opstelling met acceleratoren. Het gebruik van deze machines wordt uitgedrukt in node-uren en niet in core-uren. Dat komt omdat vaak de volledige node wordt gebruikt omwille van het vereiste geheugen of omwille van de acceleratoren. Cerebro kende typische gebruikspieken. De belangrijkste gebruikers van deze machine zijn scheikundigen en bio-informatici. Beiden werken met software die meer geheugen vraagt dan beschikbaar is op de standaard compute nodes.

De GPU-nodes werden ingezet bij de ontwikkeling voor data analyze codes, bij een hackaton georganiseerd door sterrenkundigen en bij meerdere opleidingen. Gebruikers die voordeel kunnen hebben bij GPU's bleven in 2017 nog op CPU's rekenen omdat de totale capaciteit van de beschikbare CPU's veel hoger ligt dan die van de GPU's. Door de vraag naar meer machine learning-toepassingen kan wel verwacht worden dat het GPU-gebruik ook zal stijgen.



Afbeelding 16 - Gebruik van de UGent-infrastructuur

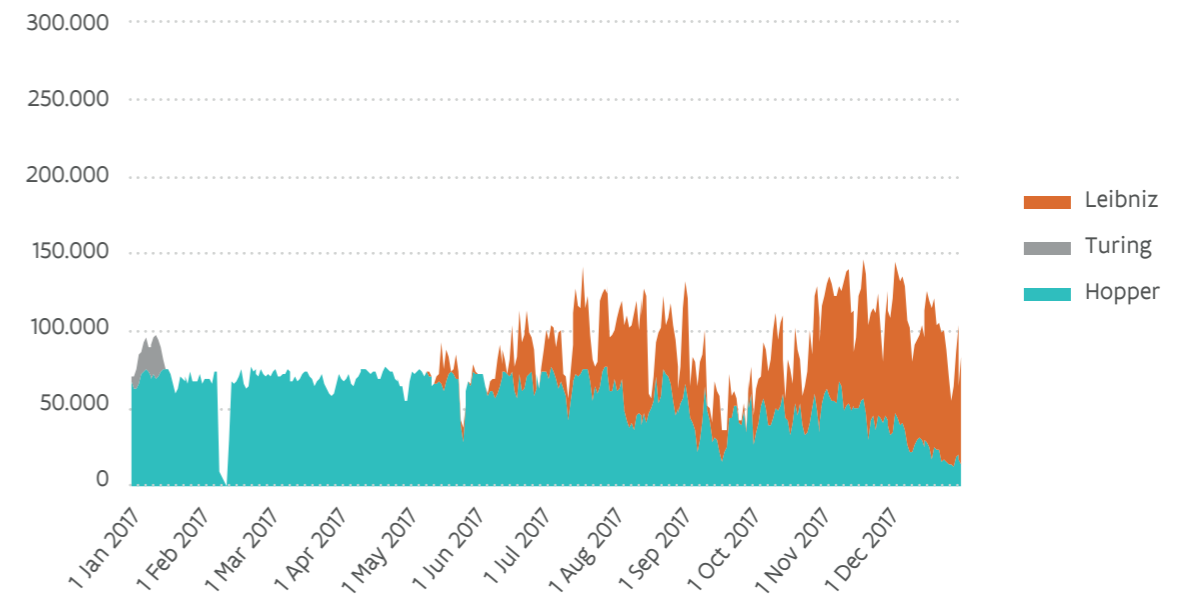
Afbeelding 16 geeft het cumulatieve gebruik in 2017 weer van alle rekenclusters aan de Universiteit Gent.

In 2017 werden in totaal 73.656.948 core-uren verbruikt op de Tier-2-rekenclusters van de UGent. Dat zou overeenkomen met 8.408 jaar rekenwerk op één enkele core.

Het gemiddelde effectieve gebruikpercentage bedroeg 77% voor alle clusters in 2017. Dit percentage geeft aan

hoeveel er van het theoretisch beschikbare rekenvermogen in één jaar werd gebruikt (hierbij werd geen rekening gehouden met uitvaltijden, dus de werkelijke waarde ligt hoger). Het effectieve gebruikpercentage is vrij hoog in vergelijking met typische HPC-systemen en wijst op een goed economisch gebruik van de infrastructuur.

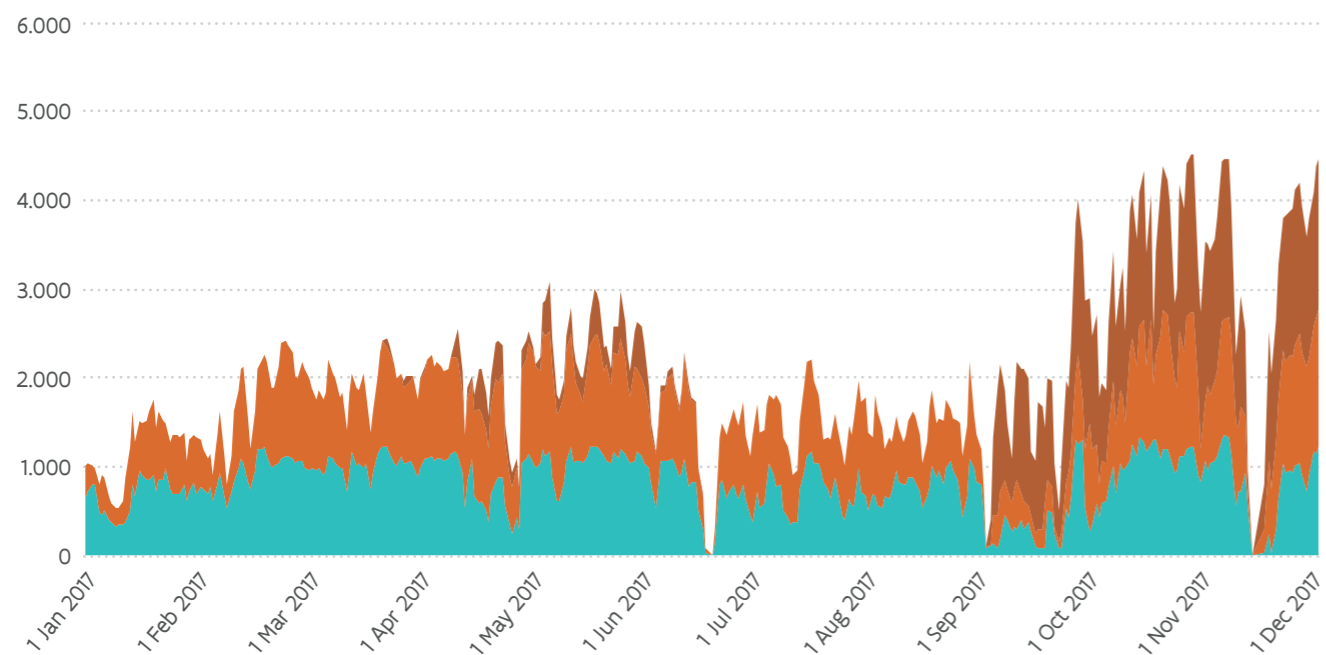
De dalen in afbeelding 16 verwijzen naar downtimes als gevolg van geplande onderhoudswerken.



Afbeelding 17 - Gebruik van de UAntwerpen-infrastructuur

De grafiek van afbeelding 17 stelt het cumulatieve gebruik voor van de clusters Turing (eind januari 2017 uit dienst genomen), Hopper en Leibniz aan de UAntwerpen. De grafiek toont ook enkele onderbrekingen.

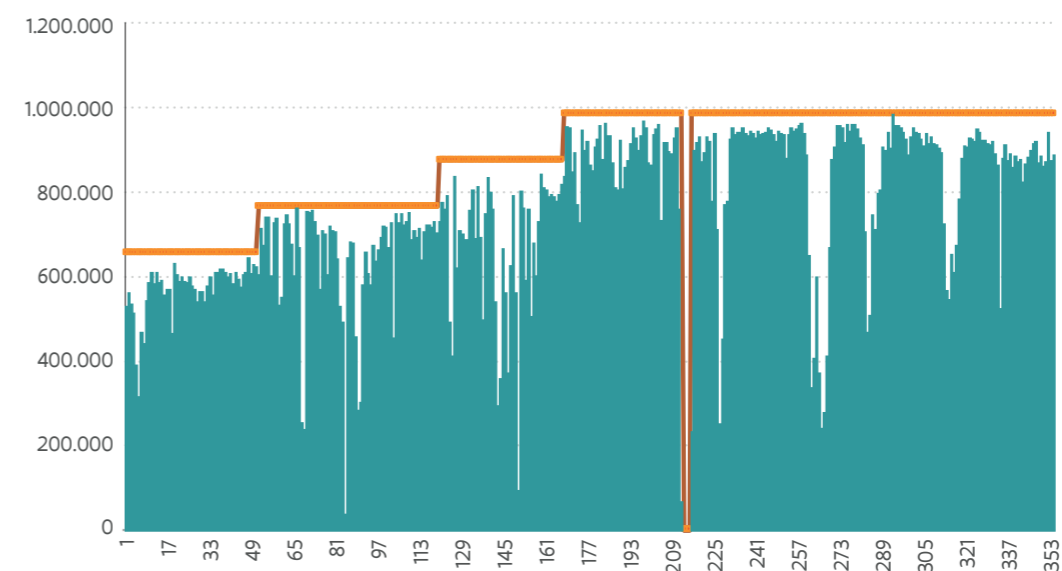
In februari werd het storage-systeem geüpgraded om de installatie van Leibniz voor te bereiden. Hierdoor was Hopper tijdelijk niet beschikbaar. In het tweede kwartaal kwam Leibniz beschikbaar voor pilootgebruik. In het laatste kwartaal werden de nodes van Hopper geleidelijk op hetzelfde besturingssysteem als Leibniz overgezet om het onderhoud te vereenvoudigen. Hoewel de 'vernieuwde' nodes meteen beschikbaar waren voor de gebruikers, is dit niet zichtbaar in de grafiek. Die onderbrekingen buiten beschouwing gelaten zijn de clusters zeer goed bezet. Door de manier van rapporteren (gerelateerd aan zogenaamde hyper-threading) wordt soms een belasting van meer dan 100% getoond.



Afbeelding 18 - Gebruik van de VUB-infrastructuur

In 2017 werden de nieuwe Intel Broadwell nodes officieel in gebruik genomen nadat de netwerkproblemen waren opgelost. Dat viel samen met één uur downtime. Daarnaast waren er twee geplande maintenance windows in juli en december: onder meer het netwerk binnen Hydra is volledig vervangen door een performantere versie. Er was ook een korte niet-geplande onderbreking door het falen van de koeling in mei.

Op de Hydra-cluster worden zowel jobs uitgevoerd die alle rekencores in een node gebruiken als jobs die niet alle cores gebruiken, maar wel de volledige node nodig hebben omwille van de geheugenvereisten. Daarnaast is een aantal nodes gereserveerd voor interactief werk van bepaalde onderzoeksgroepen. Omdat een dergelijke mix een vertekening geeft van de bezettingsgraad volgens core-uren of nodedagen – de standaard rapporteringswijze voor de andere universiteiten – werd het totaal aantal beschikbare core-uren niet aangeduid op de grafiek.



Afbeelding 19 - Gebruik van de BEgrid-cluster aan de VUB (blauw: productiecapaciteit)

BEgrid 20-27 en BEgrid 47-50 zijn de verschillende delen van de BEgrid-cluster aan de VUB. In de loop van 2017 werden in meerdere fasen bijkomende worker nodes toegevoegd. Er was een geplande downtime voor routine-onderhoudswerken in augustus. Daarnaast waren er ook enkele niet-geplande downtimes, onder meer door problemen met de fileserver (juli) en door koelingsproblemen (mei).

Toekennen rekentijd Tier-2

Elke universiteit hanteert een eigen procedure voor het toekennen van rekentijd op de Tier-2-infrastructuur, en rekent al dan niet een klein deel van de kosten door aan de academische onderzoeker. Voor industriële en andere externe gebruikers wordt alle verbruikte rekentijd steeds volledig aangerekend. Om toegang te kunnen krijgen tot één van de Tier-2-rekenclusters in de vier VSC-hubs (Antwerpen, Brussel, Gent, Leuven) dient de gebruiker over een VSC-user ID te beschikken. Die kan worden aangevraagd op <https://account.vscenrum.be>. Deze website en database centraliseert ook alle gebruikersinformatie over de instellingen heen over storagequota, lidmaatschap van gebruikersgroepen, virtuele organisaties, etc.

De onderzoekers van de UAntwerpen en haar associatie hebben volledig vrije toegang tot de Tier-2-infrastructuur. Onderzoeksgroepen kunnen wel op vrijwillige basis een financiële bijdrage leveren.

Onderzoekers aan de VUB kunnen rekenen op de Hydra-cluster nadat het rekencentrum hun daartoe toegang verleende. De gridcluster is beschikbaar na aanvraag bij de verantwoordelijke van deze infrastructuur. Het gebruik van de Tier-2-infrastructuur is kosteloos.

De onderzoekers van de UGent en haar associatie hebben volledig vrije toegang tot de eigen Tier-2-infrastructuur. Onderzoeksgroepen kunnen wel op vrijwillige basis een financiële bijdrage leveren, met als rechtstreekse return on investment een (iets) hogere fair share.

Op de clusters van de KU Leuven/UHasselt wordt gewerkt met een credit accounting-systeem dat vervat zit in de scheduling software. Nieuwe gebruikers krijgen rekentijd om vertrouwd te raken met het systeem en om de eerste tests uit te voeren. Hiermee is de drempel voor onderzoekers om over te stappen naar de Tier-2-infrastructuur zo laag mogelijk. Vervolgens kunnen credits aangevraagd worden via een eenvoudige procedure en tegen minimale kosten. De credits verdeelen de beschikbare rekentijd over verschillende projecten en werken responsabiliserend. Bij het uitvoeren van een rekentaak wordt het project aangegeven waarop de credits aangerekend worden. De hoofdonderzoeker is de beheerder van het project. Hij kan onderzoekers toegang geven tot de rekentijd en ook de gebruikte rekentijd opvolgen.

Door centrale accounts kunnen gebruikers ook rekenen op andere sites, de modaliteiten in acht nemend die van toepassing zijn. Hieronder volgt een beknopt overzicht van het cross-site rekenen.

Cross-site rekenen

Site	Overzicht	Compute time in core hours					
		UAntwerpen	VUB	UGent	KU Leuven/ UHasselt	Other research institutes	Industry
@KU Leuven/ UHasselt	52 gebruikers/665 nodedagen	88.346	0	165.835	47.678.343	1.149.130	431.070
@UGent	21 gebruikers / 47 core jaar	190.879	10.651	7.900.2512	204.544	6.147	0
@UAntwerpen	0 gebruikers/0 nodedagen						
@VUB	6 gebruikers/886 jobs/2826 dagen	140.787		0	0	0	0

Dit zogenaamde cross-site gebruik wordt nauwgezet opgevolgd.

Naast het cross-site gebruik van de Tier-2-infrastructuur wordt ook de gridinfrastructuur, beheerd door de VUB/ULB, intensief gebruikt door onderzoekers van verschillende instellingen: VUB, UAntwerpen en UGent. De overige rekentijd op de gridinfrastructuur wordt gebruikt door onderzoekers van de ULB en UCL.

Gebruikersondersteuning

De gebruikersondersteuning bestaat uit verschillende componenten:

- het beantwoorden van vragen van gebruikers (helpdesk);
- bijeenkomsten met gebruikers / specifieke ondersteuning;
- opleiding en outreach. Dit punt wordt besproken op p. 43 en p. 50.

BEANTWOORDEN VAN VRAGEN VAN GEBRUIKERS

Hierna volgt een overzicht van de tickets die bij de helpdesk terechtkomen. Er is geen centrale VSC-helpdesk. Elke instelling beantwoordt de vragen en problemen van de eigen gebruikers (d.w.z. gebruikers die een account hebben aangevraagd in de betrokken instelling), zowel wat betreft de eigen Tier-2-infrastructuur als de centrale Tier-1, maar ook de vragen en problemen van externe gebruikers van de VSC-infrastructuur. Indien nodig wordt voor vragen met betrekking tot de Tier-1 contact opgenomen met de helpdesk aan de UGent (voor de eerste Tier-1) of aan de KU Leuven (voor de tweede Tier-1). Er wordt een onderscheid gemaakt tussen:

- vragen over accounts;
- vragen over software;
- overige vragen.

De volgende tabel geeft een overzicht van het aantal behandelde tickets per categorie en per instelling.

Tier-2 + grid	KU Leuven UHasselt	UGent	UAntwerpen	VUB
Accounts	1040	191	35	180
Software	168	180	96	157
Overig	604	535	257	610

Tier-1	KU Leuven UHasselt	UGent	UAntwerpen	VUB
Accounts	12	0		
Software	21	0		
Overig	183	24		

BIJEENKOMSTEN MET GEBRUIKERS / SPECIFIEKE ONDERSTEUNING

Eenzijds wordt geprobeerd om zoveel mogelijk onderzoekers te betrekken bij het HPC-verhaal. Dat gebeurt door te kijken of en hoe ze de overstap kunnen maken van hun desktop naar de HPC-infrastructuur, of hoe ze hun eigen desktop efficiënter kunnen gebruiken. Voor bestaande gebruikers kan dit ook hulp betekenen bij de overstap van Tier-2 naar Tier-1 en eventueel naar Tier-0. Anderzijds wordt geprobeerd om onderzoekers specifieke ondersteuning te bieden.

Enkele voorbeelden:

- optimaliseren van bestaande workflows;
- analyse/optimaliseren van code;
- input geven aan het schrijven van onderzoeksprojecten.

Daarnaast vinden er aan elke instelling nog gebruikers-bijeenkomsten plaats waarin een afvaardiging van de gebruikers vertegenwoordigd is. Op de volgende pagina's maken we, per instelling, een selectie van de hierboven vermelde ondersteuning.

KU Leuven en UHasselt

De dagelijkse support behandelt vragen i.v.m. accounts, basisgebruik van de cluster en software-installaties. Deze vragen komen van gebruikers uit groepen die al lange tijd de cluster gebruiken.

De VSC-infrastructuur bekendmaken bij nieuwe onderzoeksgroepen is een blijvend werk. Maar ook binnen groepen die de cluster al gebruiken kunnen specifieke acties helpen om het clustergebruik te stimuleren. Hiermee kan meer computationeel werk efficiënter en op een kortere tijd uitgevoerd worden in vergelijking met de lokale infrastructuur, zoals workstations en desktops.

Nieuwe onderzoekers worden vertrouwd gemaakt met het gebruik van de cluster in de reguliere introductiesessies. Een een-op-eenconsult is belangrijk om het hele jaar door nieuwe onderzoekers te helpen met de start. Na een consult van een tweetal uur heeft de onderzoeker meestal voldoende informatie om productief te zijn op de cluster, als hij al enige algemene voorkennis had van Linux en HPC.

Als er een nieuwe groep wil starten op de cluster, worden er ook specifieke workshops georganiseerd.

In 2017 werd een aantal specifieke ondersteuning voortgezet.

Voor Genomics Core werden de whole genome pipelines geïmplementeerd, waaronder de nieuwe versie van GATK en Halvade. De ondersteuners van Genomics Core zetten samen met de HPC-ondersteuning bijkomende infosessies op voor hun onderzoekers.

Voor de Nucleomics Core werd GenePattern opgezet. Dat is een webapplicatie die toelaat om specifieke analyses uit te voeren van genexpressies, waaronder sequentievariëaties, copy number en proteomics-analyse. Analyses die niet veel rekenkracht vereisen kunnen gebeuren op de server, maar de meer intense analyses worden door de HPC-cluster berekend.

Voor het Laboratorium voor Computationale Biologie werd ook ondersteuning geleverd om zowel de kracht van de HPC te kunnen gebruiken als interactiever te werken met dezelfde data. Specifieke workflows die bestaan uit interactief werk met korte CPU-belasting van slechts een beperkte capaciteit van een node, kunnen op gedeelde nodes uitgevoerd worden. Het is zinvol om dit werk ook binnen de HPC-omgeving te doen, omdat zowel de software als de data binnen deze omgeving beschikbaar zijn.

Voor de onderzoeksgroep Plasma-astrofysica ontwikkeld bij het Virtual Space Weather Modelling Centre (VSWMC) werd hulp geboden bij het installeren en configureren van de software, en bij de installatie van nieuwe voorspellingsmodellen (Euphoria) die binnen dit kader gebruikt worden.

Binnen de afdeling Bodem- en Waterbeheer is er een nieuwe groep. Deze groep gebruikt het software-framework ondersteund door NASA: Land Information System (LIS) en Land Data Assimilation Systems (LDAS), en ook bijkomende GIS-software voor visualisaties. Dit werd opgezet op Tier-2, en de nieuwe onderzoekers in de groep werden vertrouwd gemaakt met de cluster.

Voor het Laboratorium Klinische en Epidemiologische Virologie werd een assembly pipeline opgebouwd die verschillende modules combineert voor het onderzoek van virussen. Door het gebruik van HPC hebben de onderzoekers toegang tot veel meer rekencores met voldoende RAM, wat de doorlooptijd van hun onderzoek sterk kan inkorten. Bijkomend kunnen ze voor sommige modules simultaan gebruikmaken van verschillende rekenodes met behulp van Hadoop.

Voor de Afdeling Sterrenkunde en de Afdeling Geografie was er specifieke ondersteuning ter voorbereiding van Tier-1-projectaanvragen.

Verder werden er specifieke sessies ingericht ter ondersteuning van Astrohack, een hackaton georganiseerd door Data Science Ghent aan de UGent met de GPU's van de KU Leuven. Gedurende het hele hackatonweekend was er ondersteuning voor de deelnemers die de HPC wilden gebruiken.

Voor het Von Karman Institute (VKI) werd een opleiding georganiseerd ter introductie van het gebruik van de HPC-cluster. De cluster kan worden gebruikt om prestaties op nieuwe HPC-architecturen te evalueren.

Voor het Departement Elektrotechniek werden voorbereidende sessies georganiseerd. Deze groep gebruikt een heterogene samenstelling van verschillende GPU-machines die ze in eigen beheer heeft. Met de nieuwe Tier-2 die in 2017 werd aangekocht, is een aanzienlijke GPU-capaciteit beschikbaar binnen het VSC.

De KU Leuven organiseerde in 2017 de NEC Users Group-meeting. De KU Leuven Tier-1 is een NEC-machine. Via de NUG worden andere NEC users samengebracht om ervaringen te delen en om feedback te geven aan de leverancier, ook voor nieuwe ontwikkelingen. De meeting werd bezocht door een 40-tal deelnemers uit verschillende Europese landen en Japan.

Voor de UHasselt lag de klemtoon vooral op het aantrekken van nieuwe gebruikersgroepen. De faculteit Ingenieurswetenschappen kreeg de nodige aandacht, waardoor het aantal onderzoekers dat de VSC-infrastructuur gebruikt steeg, zowel voor onderzoek als voor onderwijs. Ook het Centrum voor Milieukunde (CMK) kreeg extra ondersteuning.

UGent

Doorheen het jaar werden verscheidene gebruikersmeetings georganiseerd, als reactie op specifieke vragen van onderzoekers.

Om zoveel mogelijk (potentiële) gebruikers te overtuigen van het belang en de meerwaarde van supercomputing, werd het VSC intern voorgesteld en werden verscheidene rondleidingen georganiseerd in het datacentrum van de UGent:

- 6 februari 2017, informatiesessie FWO call 2017 voor Research Grants, Research Projects en SBO;
- 9 mei 2017, algemene presentatie en rondleiding voor studenten van het vak Computer Systems (UGent);
- 8 november 2017, rondleiding voor studenten van de faculteit Economics and Business Administration (UGent);
- 5 december 2017, algemene presentatie en rondleiding voor studenten Bachelor of Science in Engineering Technology (UGent).

In 2017 werd ook een eerste OpenFOAM gebruikersmeeting gehouden (13/09/2017). Die had tot doel verschillende onderzoeksgroepen samen te brengen die gebruikmaken van de populaire Open Source CFD-software OpenFOAM op de VSC-infrastructuur. De deelnemers presenteerden hun werk en deelden best practices voor het gebruik van deze software op HPC-clusters. De deelnemende onderzoeksgroepen:

- Bekaert;
- Department of Civil Engineering, UGent en KU Leuven;
- Laboratory for Chemical Technology, UGent;
- Department of Flow, Heat and Combustion Mechanics, UGent.



UAntwerpen

De UAntwerpen behandelde enerzijds vragen van bestaande gebruikers. Daarbij werd het rekenwerk zo optimaal mogelijk georganiseerd en uitgevoerd door proactief te werken. Een goed onderhouden software stack en ondersteunende tools spelen hierbij een belangrijke rol. Anderzijds werden andere onderzoekers gewezen op de mogelijke voordelen van het gebruik van de centrale VSC-infrastructuur. Hiervoor zocht de UAntwerpen de onderzoekers/onderzoeksgroepen op.

Jaarlijks worden ook twee introductiesessies georganiseerd. Sinds 2016 bestaan die uit drie delen: 'Linux introduction', 'Supercomputers for starters' en 'HPC introduction'. Het is immers noodzakelijk om te kunnen werken met de omgeving maar ook om de nodige achtergrondkennis te hebben. Daarnaast wordt ook aandacht besteed aan het up-to-date houden van de documentatie op de VSC-website.

In 2017 gebruikten onderzoekers van het Instituut voor Tropische Geneeskunde en VITO voor het eerst HPC. Daarnaast hebben ook andere onderzoeksgroepen uit departementen die al actief zijn op de infrastructuur de weg gevonden, zoals Biologie, Bio-ingenieurswetenschappen, Fysica, Geneeskunde en Gezondheidswetenschappen, Wiskunde en Toegepaste Ingenieurswetenschappen.

Enkele voorbeelden van specifieke ondersteuning:

- lunchseminarie rond supercomputing voor de Biomina-groep;
- begeleiden van de masterproef *From sequential MATLAB to parallel Julia: a toolbox study*;
- ondersteuning bij de aanvragen voor rekentijd op Tier-1;
- ondersteuning bij (interuniversitaire) projectaanvragen.

Naast de opleidingen binnen het VSC worden er ook cursussen in het reguliere programma verzorgd, nl. 'Wetenschappelijke rekenomgevingen' en '(Parallel) programmeren'.

Aan de UAntwerpen is sinds 2006 een gebruikersgroep actief die twee keer per jaar samenkomt. De gebruikersgroep bestaat uit afgevaardigden van twaalf groepen en richtingen.

VUB

Naast het blijven volgen van de bestaande gebruikers op Tier-2- en Tier-1-niveau werd ingezet op het actief identificeren van nieuwe potentiële Tier-1-gebruikers. In eerste instantie werden ze gestimuleerd om een Starting Grant voor rekentijd aan te vragen. Voor het Tier-2-niveau werd blijvend ingezet op onderzoekers uit vooral de humane wetenschappen, voor wie het gebruik van Tier-2-infrastructuur een grote stap zou betekenen. Wegens specifieke, Windows-gebaseerde software werd voor deze onderzoekers een oplossing aangeboden binnen de cloudomgeving.

De VUB heeft een HPC-gebruikerscommissie die tweemaandelijks samenkomt, waarin wordt teruggekoppeld vanuit het VSC, en die het gebruik en de noden voor HPC opvolgt. De gebruikerscommissie telt leden uit alle faculteiten, uit het rekencentrum en uit het Departement Onderzoeksbeleid.

Tweemaal per jaar worden de cursussen 'Introduction to Linux' en 'Introduction to the use of HPC at the VUB' georganiseerd.

Er werden ook gebruikersmeetings georganiseerd met een aantal groepen om hun specifieke noden en/of problemen met HPC in kaart te brengen:

- Department of General Chemistry;
- Department of Mechanical Engineering, Combustion and Robust optimization;
- VIB-Center for Structural Biology;
- Department of Electronics and Informatics;
- BRIGHTcore;
- Interuniversity Institute of Bioinformatics.

Personeel

Omdat de infrastructuur van het VSC (Tier-2- en Tier-1-infrastructuur) geïnstalleerd is in de verschillende universitaire datacentra, is ook het personeel tewerkgesteld aan de verschillende universiteiten.

SUBSIDIERING

Eenzijds heeft elke universiteit personeel nodig voor de exploitatie van de Tier-2-infrastructuur en de ondersteuning van de eindgebruikers. Hiervoor worden 20 vte's gesubsidieerd. Anderzijds wordt aan de instelling die de Tier-1-supercomputer huisvest, personeel toegekend: in 2017 twee vte's voor de exploitatie van de Tier-1a en twee vte's voor de Tier-1b.

Omdat elke universiteit een ander personeelsbeleid voert en verschillende verloningsprincipes hanteert, wordt voor elke vte een vast bedrag van 95.000 euro uitgekeerd.

Instelling	Aantal gesubsidieerde vte's voor Tier-2-exploitatie en -ondersteuning
UGent	5
UAntwerpen	4
VUB	3
UHasselt	2
KU Leuven	6

Instelling	Aantal gesubsidieerde vte's voor Tier-1-exploitatie
UGent	2
KU Leuven	2

EFFECTIEVE PERSONEELSINZET

Om de verschillende Tier-2- en Tier-1-opstellingen te exploiteren en te onderhouden en om de gebruikers te ondersteunen, is enerzijds meer mankracht nodig dan binnen de subsidiëring voorzien wordt. Anderzijds is een waaier aan expertises nodig die niet binnen één beperkt team opgebouwd kunnen worden. Om hieraan tegemoet te komen kunnen de HPC-technici en -ondersteuners een beroep doen op andere experts binnen de ICT-diensten van de verschillende universiteiten. De universiteiten zetten samen 31,9 vte's in voor de HPC-exploitatie en -ondersteuning.

Door een instellingsbrede regeling kunnen de vte's die ingezet worden aan de UAntwerpen en die niet ten laste zijn van de FWO-financiering slechts opgenomen worden in deze tabel voor een voorgeschreven en geplafonneerde fractie van de inzet.

Instelling	Aantal vte's ingezet voor HPC	Aantal koppen betrokken bij de HPC-exploitatie en -ondersteuning
UGent	9,5	15
UAntwerpen	4,35	8
VUB	4,31	11
UHasselt	1,16	3
KU Leuven	12,6	19
Totaal	31,91	56

PROFIELEN

Om een HPC-infrastructuur effectief te exploiteren en te ondersteunen zijn er verschillende ICT-profielen nodig. In grote lijnen gaat het over de volgende functies:

Infrastructuurbeheerders

Deze personen zijn verantwoordelijk voor het inpassen van de HPC-infrastructuur in de datacentra. Zij installeren de infrastructuur in het datacentrum. Ze installeren en beheren ook de specifieke storage die aan de HPC gekoppeld is. Daarnaast installeren en beheren ze het interne netwerk van de HPC en koppelen ze de HPC aan het universiteitsnetwerk en het intranet. Ze staan in voor de beveiliging van de infrastructuur en de dagelijkse monitoring ervan. Ze werken mee aan de aankoopdossiers rond de integratie van de infrastructuur in het datacentrum.

Systeembeheerders

Deze personen staan in voor het installeren en beheren van de basissoftware op de HPC-machines. Dat gaat van het operatingsysteem tot de scheduling software. Ze zorgen voor de dagelijkse monitoring van HPC-systemen. Ze ontwikkelen software voor het efficiënte beheer van de HPC-systemen. Ze werken mee aan de aankoopdossiers rond de architectuur van de HPC-machine en de beheerssoftware.

Gebruikersondersteuners

Deze personen zorgen voor de basisondersteuning van de gebruikers. Ze bemannen de eerstelijns-helpdesk en helpen gebruikers bij hun eerste kennismaking met de machine. Ze installeren de gebruikerssoftware en helpen de gebruikers bij het efficiënte gebruik van de machine. Ze staan in voor de documentatie en geven basisopleidingen.

Wetenschappelijke of gevorderde ondersteuners

Deze personen staan in voor het optimaliseren van de gebruikerssoftware op de HPC-machines. Hiervoor werken ze dikwijls langere tijd samen met één gebruiker en geven ze opleidingen voor gevorderden. Deze personen sturen ook de scheduler software bij, zodat die beantwoordt aan de noden van de gebruikers. Ze zetten acties op met als doel de bewustmaking van de meerwaarde van HPC en het aantrekken van nieuwe gebruikers. Ze werken mee aan het aankoopdossier rond de user requirements en de benchmarks.

Projectleiders

Deze personen hebben de directe leiding over de HPC-teams of leiden grotere HPC-projecten. Ze staan in voor de inbedding van de lokale HPC in de omgeving van het VSC. Ze zorgen voor de coördinatie van HPC-initiatieven en gebruikersgroepen binnen de eigen instelling. Ze zijn verantwoordelijk voor de rapportering aan de subsidieverleners. Ze hebben een eindverantwoordelijkheid in aankoopdossiers.

Outreach

Heel wat personen die betrokken zijn bij het VSC spenderen een deel van hun tijd aan het promoten van wetenschappelijk rekenen en HPC. Ze doen dat door infosessies te geven binnen de academische context, maar ze gaan ook naar bedrijven. Ze zorgen voor pers-aandacht of promoten het wetenschappelijk rekenen en het VSC op verschillende congressen en bij andere activiteiten. Daarnaast onderhouden ze de website en zorgen ze voor materiaal dat op verschillende events kan worden gebruikt.

Het aantal personen met deze profielen:

	Infrastructuurbeheer	Systeembeheer	Basis-gebruikersondersteuning	Wetenschappelijke of gevorderde ondersteuning	Management	Outreach
UGent	5	7	6	5	3	2
UAntwerpen	1	3	5	3	2	1
VUB	3	4	5	4	3	3
UHasselt	0	0	2	2	1	2
KU Leuven	5	6	6	6	5	7
Totaal	14	20	24	20	14	15

GEVORDERDE ONDERSTEUNING

Om gevorderde en wetenschappelijke ondersteuning te kunnen geven aan de eindgebruikers is domeinexpertise meestal een pluspunt. Het is echter onmogelijk om binnen elke instelling domeinexpertise op te bouwen voor een breed aantal specifieke gebieden. Daarom is het goed een overzicht te behouden van de verschillende expertises die binnen het VSC aanwezig zijn, zodat over de instellingen heen gebruikers een beroep kunnen doen op gevorderde expertise als ze die nodig hebben.

Computational Chemistry

4 personen met wetenschappelijke ervaring in dit domein

Physics

6 personen met wetenschappelijke ervaring in dit domein

Engineering

2 personen met wetenschappelijke ervaring in dit domein

Mathematics (Numerical Methods)

4 personen met wetenschappelijke ervaring in dit domein

Computer Science

9 personen met wetenschappelijke ervaring in dit domein

Bioinformatics

4 personen met wetenschappelijke ervaring in dit domein

PERSONEELSLIJST

Naam		Percentage werkzaam in het kader van HPC
Wouter Depypere	UGent	100%
Stijn De Weirdt	UGent	100%
Alvaro Simon Garcia	UGent	100%
Andy Georges	UGent	100%
Kenneth Hoste	UGent	100%
Ewald Pauwels	UGent	100%
Jens Timmerman	UGent	100%
Kenneth Waegeman	UGent	100%
Danny Schellemans	UGent	10%
Johan Van Camp	UGent	30%
Frédéric De Leersnijder	UGent	20%
Wim Waeyaert	UGent	20%
Werend Brantegem	UGent	10%
Bruno Cardon	UGent	10%
Dieter Roefs	UGent	50%
Balázs Hagató	VUB	100%

Samuel Moors	VUB	50%
Stéphane Gérard	VUB	100%
Ward Poelmans	VUB	80%
Dirk Heyvaert	VUB	15%
Philippe Leemans	VUB	20%
Eddy Haulet	VUB	10%
Olivier Devroede	VUB	25%
Johan D'Hondt	VUB	15%
Steven Opstaele	VUB	10%
Stefan Weckx	VUB	5%
Stefan Becuwe	UAntwerpen	100%
Franky Backeljauw	UAntwerpen	100%
Bert Tijskens	UAntwerpen	100%
Kurt Lust	UAntwerpen	100%
Koen Decauwsemaecker	UAntwerpen	10%
Muriel Dejonghe	UAntwerpen	10%
Herwig Kersschot	UAntwerpen	10%
Annie Cuyt	UAntwerpen	5%
Herman Moons	KU Leuven	20%
Leen Van Rentergem	KU Leuven	30%
Jan Ooghe	KU Leuven	100%
Martijn Oldenhof	KU Leuven	100%
Mag Selwa	KU Leuven	100%
Alexander Vapirev	KU Leuven	100%
Ingrid Barcena	KU Leuven	100%
Ehsan Moravveji	KU Leuven	60%
Jo Vanvoorden	KU Leuven	100%
Jo Vandeginste	KU Leuven	100%
Tom Leuse	KU Leuven	100%
Yorick Poels	KU Leuven	100%
Peter Veraedt	KU Leuven	50%
Rudy Rys	KU Leuven	40%
Tom van Mierlo	KU Leuven	100%
Tom Vanhout	KU Leuven	20%
Sofie Pieraerd	KU Leuven	10%
Els Veraverbeke	KU Leuven	20%
Philip Brusten	KU Leuven	10%
Rafal Al-Takreeti	UHasselt	8%
Geert Jan Bex	UHasselt	100%
Alexander Jaust	UHasselt	8%

OUTREACH NAAR VLAAMSE BEDRIJVEN

Sinds het begin staan de services en de infrastructuur van het VSC open voor het gebruik door onderzoekers die niet rechtstreeks betrokken zijn bij het VSC-consortium. Tot nog toe waren technische toegangsmodaliteiten voor gebruikers 'extern' aan de universitaire associaties evenwel niet altijd eenvoudig. De succesvolle afronding van het VSC-project 'Toegang niet-academische gebruikers' (2017) maakt dat nu gemakkelijker.

Tegelijk zien we ook een toegenomen vraag van buiten het VSC-consortium. Dat heeft ongetwijfeld te maken met een verhoogde visibiliteit van het VSC in de afgelopen jaren. In het kader van de implementatie van het Tier-1-supercomputing-platform kan verwacht worden dat deze vraag nog verder zal stijgen.

Verscheidene instellingen gebruiken momenteel VSC-diensten en -infrastructuur. Dat blijft niet altijd beperkt tot de consumptie van rekentijd en de bijbehorende standaard gebruikersondersteuning (inclusief training). Af en toe wordt een uitgebreidere dienstverlening geleverd, zoals specifieke softwareoptimalisatie.

Dienstverlening aan bedrijven

De waaier aan services die het VSC levert aan bedrijven omvat vier pijlers: consultancy, onderzoekssamenwerking, training en rekenkracht.

Consultancy

VSC-experts analyseren de specifieke noden van een bedrijf en gaan na hoe supercomputing een toegevoegde waarde kan geven. Het VSC biedt een gratis intake-interview om na te gaan welke services in het VSC-netwerk het best bij die noden aansluiten.

Onderzoekssamenwerking

Het VSC fungeert als HPC-aanspreekpunt en kan de vraag van een bedrijf voor een onderzoekssamenwerking (bv. in het kader van een O&O-project) kanaliseren.

Binnen het netwerk kan het VSC het bedrijf connecteren met een geschikte top-level onderzoekspartner in het Vlaamse academische landschap en fungeren als bemiddelaar.

Training

Het VSC organiseert op regelmatige basis training-events die ook openstaan voor industriële gebruikers. De topics zijn onder meer Linux, (parallele) programmeertalen en -paradigma's, codeoptimalisatie, maar ook toepassingsgerichte training zoals materiaalkunde en numerieke stromingsleer (computational fluid dynamics). Er kunnen ook trainingen op maat van de eindgebruiker worden gegeven.

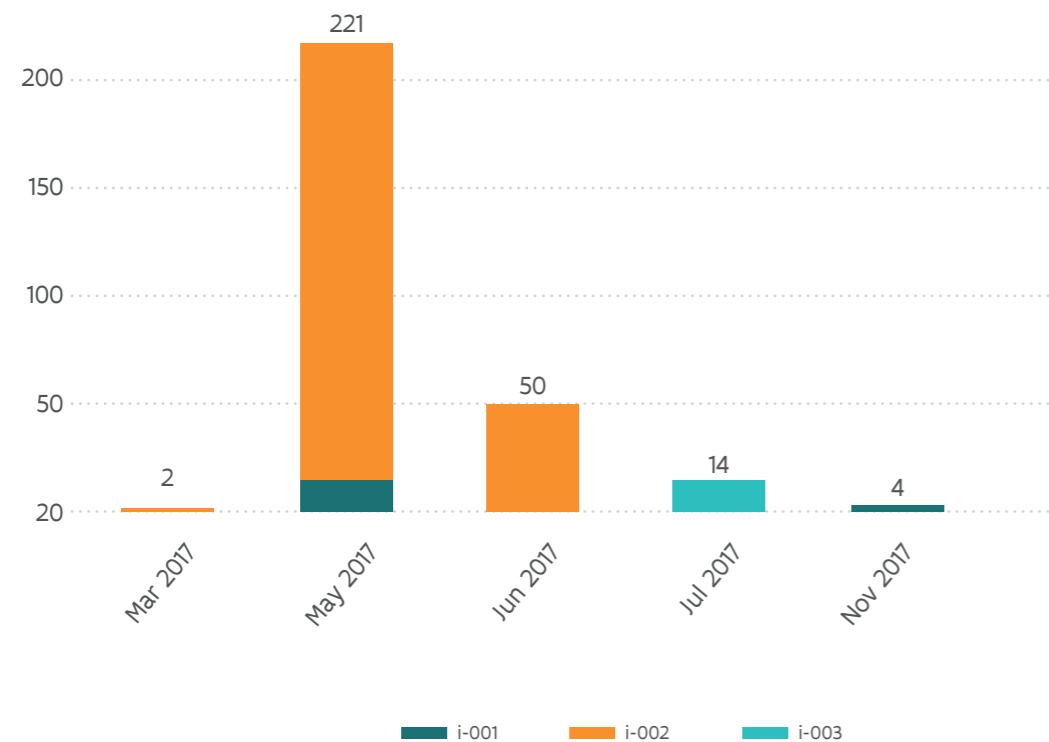
Rekenkracht

Bedrijven kunnen tegen internationaal competitieve prijzen rekentijd aankopen op de state-of-the-art supercomputing-infrastructuur binnen het VSC-netwerk. Gebruikers krijgen stap voor stap ondersteuning om computationele taken te starten, en een speciale helpdesk staat klaar om gebruiksgerateerde vragen op te lossen en de gebruikers bij te staan bij de installatie van specifieke software.

Gebruik Tier-1 door bedrijven

In 2017 maakten drie in Vlaanderen gevestigde bedrijven gebruik van de Tier-1 in Leuven. De gebruiksovereenkomsten werden contractueel vastgelegd tussen het FWO, de KU Leuven en het betrokken bedrijf. Twee bedrijven gebruikten de Tier-1 in een exploratief regime. Voor één bedrijf was dit een test om de overgang tussen de oude en nieuwe Tier-1 te evalueren. Het bedrijf is daarna overgegaan tot een gebruikersovereenkomst. De bedrijven zijn actief in de sectoren van hernieuwbare energie, landbouwtechnologie en materiaaltechnologie.

Afbeelding 20 geeft een (geanonimiseerd) zicht op het gebruik van de rekentijd op de Tier-1 BrENIAC door de industrie in 2017.



Afbeelding 20 - Rekentijd op Tier-1 BrENIAC door industrie in 2017

Gebruik Tier-2 door externe gebruikers

Niet alleen onderzoekers van de instellingen van het VSC-consortium maken gebruik van de Tier-2-infrastructuur. Hierna worden de verschillende categorieën van VSC-gebruikers vermeld, waarbij telkens wordt aangegeven welke instellingen momenteel al actief zijn (of actief zijn geweest in 2017), en via welke VSC-partner welke infrastructuur of diensten worden gebruikt.

STRATEGISCHE ONDERZOEKSCENTRA

Betrokken instelling	VSC-partner	Geleverde diensten door VSC
VITO (Vlaamse Instelling voor Technologisch Onderzoek)	UHasselt & KU Leuven UAntwerpen	Rekentijd Tier-2 Softwareoptimalisatie en parallelisatie Rekentijd Tier-2
VIB (Vlaams Instituut voor Biotechnologie)	UGent KU Leuven UAntwerpen	Rekentijd Tier-2 Rekentijd Tier-2 Rekentijd Tier-2
imec	UGent KU Leuven UAntwerpen	Rekentijd Tier-2 Rekentijd Tier-2 Rekentijd Tier-2
Flanders Make	KU Leuven	Rekentijd Tier-2

ANDERE ERKENDE VLAAMSE WETENSCHAPPELIJKE INSTELLINGEN

Betrokken instelling	VSC-partner	Geleverde diensten
ITG (Instituut voor Tropische Geneeskunde)	UAntwerpen	Rekentijd Tier-2
ILVO (Instituut voor Landbouw- en Visserij-onderzoek)	UGent	Rekentijd Tier-2
INBO (Instituut voor Natuur- en Bosonderzoek)	UGent	Rekentijd Tier-2

FEDERALE WETENSCHAPSINSTELLINGEN

Betrokken instelling	VSC-partner	Geleverde diensten
IRCEL (Intergewestelijke Cel voor het Leefmilieu)	UHasselt & KU Leuven	Rekentijd Tier-2 Softwareoptimalisatie en parallelisatie
KMI (Koninklijk Meteorologisch Instituut van België)	VUB KU Leuven UGent	Rekentijd Tier-2 Rekentijd Tier-1 (in samenwerkingsverband met UGent)
KBIN (Koninklijk Belgisch Instituut voor Natuurwetenschappen)	UGent	Rekentijd Tier-2
KMMA (Koninklijk Museum voor Midden-Afrika)	UGent	Rekentijd Tier-2
VKI (Von Karman Instituut)	KU Leuven	Rekentijd Tier-2 (exploratief)

VLAAMSE OVERHEIDSORGANEN

Betrokken instelling	VSC-partner	Geleverde diensten
WL (Waterbouwkundig Laboratorium)	KU Leuven	Rekentijd Tier-2
VMM (Vlaamse Milieu-maatschappij)	UGent	Rekentijd Tier-2 (exploratief)

FEDERALE OVERHEIDSORGANEN

Betrokken instelling	VSC-partner	Geleverde diensten
Federale Politie	KU Leuven	Rekentijd Tier-2

BEDRIJVEN

Betrokken instelling	VSC-partner	Geleverde diensten
IMDC (International Marine and Dredging Consultants)	UAntwerpen	Rekentijd Tier-2
Diabatix	KU Leuven	Rekentijd Tier-2
3E	UGent	Rekentijd Tier-2
Bekaert	UGent	Rekentijd Tier-2
Inbiose	UGent	Rekentijd Tier-2

VSC Industrial Board

De Industrial Board dient als communicatiekanaal tussen het VSC en de Vlaamse industrie. Het VSC biedt op grote schaal wetenschappelijk/technisch rekenen (HPC) aan de Vlaamse onderzoekswereld en industrie aan. De Industrial Board kan de uitwisseling van ideeën en expertise tussen kennisinstellingen en industrie versterken. De raad ontwikkelt initiatieven om bedrijven en non-profitinstellingen te informeren over de toegevoegde waarde die HPC levert bij het ontwikkelen en optimaliseren van diensten en producten, en promoot de diensten die het VSC aan bedrijven levert, zoals consultancy, onderzoekssamenwerking, training en rekenkracht.

In 2017 startte de Industrial Board het 'Start to VSC'-project op. Er kwam een stappenplan dat doorlopen kan worden met nieuwe industriële gebruikers. Dat bestaat uit een initieel contact tussen de industriële partner en het VSC, ondersteund met een FAQ-lijst voor gebruikers en een checklist voor het IT-personeel. De FAQ-lijst moet helpen om een business use case uit te werken. De checklist geeft al een overzicht van de technische specificaties, zodat de IT-afdeling de veiligheid van de connectie, datatransfer en dataopslag kan evalueren. Als de inschatting van de businesscase positief is, kan een contract worden opgesteld dat vertrekt van een standaard contract. De use case wordt in eerste instantie volledig uitgewerkt, en met die ervaring kan in een opleiding voorzien worden voor een grotere groep gebruikers in het bedrijf. Dit moet dan het gebruik van HPC binnen het bedrijf bestendigen. Ter ondersteuning van het stappenplan dienen een aantal hulpmiddelen uitgewerkt te worden: een standaard contract, FAQ voor gebruikers, een checklist voor IT-afdelingen, een document met de belangrijkste veiligheidsspecificaties, een lijst van gebruikte software en een overzicht van use cases. Dit 'Start to VSC'-project werd al ten dele gerealiseerd in 2017 en wordt in 2018 verder uitgewerkt.

Bekendmaking aan bedrijven en andere kennisinstellingen

Tegelijk werd ook onverkort ingezet op het rechtstreeks contacteren en enthousiasmeren van bedrijven om supercomputing en de VSC-services te gebruiken. Bij het uitwisselen van best practices tussen de HPC-centra van het SESAME Net-consortium is immers gebleken dat via dit soort kleinere events, waarin persoonlijke contacten met de industrie centraal staan, bedrijven beter kunnen worden overtuigd van de meerwaarde van supercomputing. Verscheidene gebruikersmeetings en kickstartevents werden georganiseerd, meestal on-site.

Het VSC was ook actief aanwezig op verscheidene netwerkevents om supercomputing te promoten. Verder werden verscheidene use cases uit de industrie opgesteld en gepubliceerd op de VSC-website, en verspreid via o.m. het SESAME Net-kanaal.

Concrete outreach events voor industrie en beleidsmakers:

- 24/01/2017, algemene HPC-presentatie en bezoek aan het UGent-datacenter door MEP's van Europese parlementaire commissie ITRE (Industry, Technology, Research and Energy), Europese commissie en vertegenwoordigers van het Europese netwerk en de lobbyverenigingen op het gebied van R&D&I;
- 8/03/2017, presentatie van het VSC op de raad van bestuur van BiR&D (Belgian Industrial Research and Development Association) - 'Supercomputing for academics & industry - Flemish Supercomputer Center (VSC)', Vilvoorde (<http://birdbelgium.com/>);
- 27/04/2017, stand van VSC op TechBoost! 2017 'Innovations in Big Data Analytics', Gent (<https://aig.ugent.be/event-2017/techboost-voor-ingenieurs>).

CASE

COMPUTER-SIMULATIES BIEDEN INZICHT IN VERSPREIDING VAN INFECTIEZIEKTEN

Prof. dr. Niel Hens

Centrum voor Statistiek, I-BioStat, UHasselt
Centrum voor Gezondheidseconomie en
Infectieziekten, UAntwerpen



Hoe verspreiden infectieziekten zich en hoe roepen we ze doeltreffend een halt toe? Dat onderzoekt prof. dr. Niel Hens van de Universiteit Hasselt. Met zijn onderzoek informeert hij beleidsmakers hoe de verspreiding van infectieziekten ingedijkt kan worden.

Niel Hens heeft statistische en wiskundige methoden ontwikkeld om de overdracht van ziekten te voorspellen en beter te begrijpen. Hij onderzoekt daarnaast hoe efficiënt interventies als vaccinatie en quarantaine zijn. Daarvoor deed hij een beroep op Tier-1 en Tier-2. "Die rekenkracht hadden mijn collega's en ik nodig om meerdere vaccinatiescenario's te simuleren en tegen elkaar af te wegen. Bijvoorbeeld: moeten we kinderen vaccineren tegen griep om zo ouderen te beschermen? Daarvoor doorliep de VSC-infrastructuur 5600 vaccinatiescenario's. De conclusie: het vaccineren van kinderen om ouderen te beschermen is een zinvol idee, maar op dit moment nog te duur."

Windpokken

Niel Hens gebruikte de supercomputer ook om nieuwe modellen te ontwikkelen: "Om de verspreiding van het varicella-zostervirus – wind- of waterpokken – in kaart te brengen, hebben we een model ontwikkeld dat immunologische mechanismen binnen de gastheer blootlegt, net als de besmetting tussen gastheren. Die modellering is noodzakelijk om de verspreiding van het virus beter te begrijpen."

Ten slotte zette Niel Hens nieuwe computationele technieken in om partiële differentiaalvergelijkingen (PDE's) op te lossen. Bijvoorbeeld: het oplossen van PDE's op *graphics processing units* (GPU's). "Die berekeningen laten toe om PDE's te integreren in een statistisch model om aan de hand van data belangrijke

transmissieparameters te schatten. Kortom, zonder de supercomputerinfrastructuur van het VSC was dit onderzoek niet haalbaar geweest", besluit Hens.

RSV en kinkhoest

Realtime verspreidingsmodellen ontwikkelen, de impact van vaccinatie op griep onderzoeken, het respiratoir syncytieel virus (RSV) en kinkhoest bestuderen, methoden ontwikkelen om het uitbraakrisico van mazelen beter in te schatten ... Dankzij het onderzoek van Niel Hens behoort het allemaal tot de mogelijkheden. "Bovendien willen we de opzet van studies die data verzamelen over de verspreiding van infectieziekten verbeteren."

OPLEIDINGEN

Het VSC besteedt de nodige tijd aan het ondersteunen en opleiden van onderzoekers die gebruikmaken van de infrastructuur. Het is belangrijk dat berekeningen efficiënt uitgevoerd worden omdat dat de wetenschappelijke competitieve positie van de universiteiten in het internationale onderzoekslandschap vergroot.

Opleidingen door het VSC georganiseerd zijn niet alleen bedoeld voor onderzoekers verbonden aan Vlaamse universiteiten en hun respectievelijke associaties, maar ook voor onderzoekers die werken in de Strategische Onderzoekscentra, de Vlaamse wetenschappelijke onderzoeksinstellingen en de industrie.

De opleidingen kunnen worden ondergebracht in vier categorieën die ofwel de vereiste voorkennis aangeven, ofwel verduidelijken dat het om domeinspecifieke onderwerpen gaat:

- 1 Introductory
- 2 Intermediate
- 3 Advanced
- 4 Specialist courses & workshops

Introductory-cursussen zijn bedoeld voor alle gebruikers van de infrastructuur en worden ten zeerste aanbevolen aan wie nog niet over de vereiste vaardigheden beschikt. De plaatselijke VSC-medewerkers leiden deze sessies. Dat biedt onderzoekers ook de kans om kennis te maken met de personen die de vragen beantwoorden die aan de helpdesk worden gesteld. Dat neemt het onpersoonlijke en anonieme karakter van het e-mailverkeer weg.

Om de sessies op het intermediate niveau te volgen, zijn de introductory-cursussen als voorkennis vereist. Deze sessies behandelen dan ook specifiekere onderwerpen. De meerderheid van deze cursussen is bedoeld voor gebruikers die zelf software ontwikkelen, hetzij voor rekenintensieve toepassingen, hetzij voor

pre- en postprocessing van data. Omdat deze opleidingen gespecialiseerder en intensiever zijn dan de introductory-opleidingen, worden ze niet op elke VSC-site gegeven. Gebruikers worden dan ook aangemoedigd de opleidingen op een andere site bij te wonen.

Opleidingen op advanced niveau vereisen nog meer ervaring en zijn domeinspecifieker dan de intermediate opleidingen. Voor deze cursussen doet het VSC een beroep op externe lesgevers. Vaak zijn ze verbonden aan PRACE Advanced Training Centers (PATC) of komen ze uit de industrie. Jaarlijks worden slechts twee of drie dergelijke cursussen ingericht.

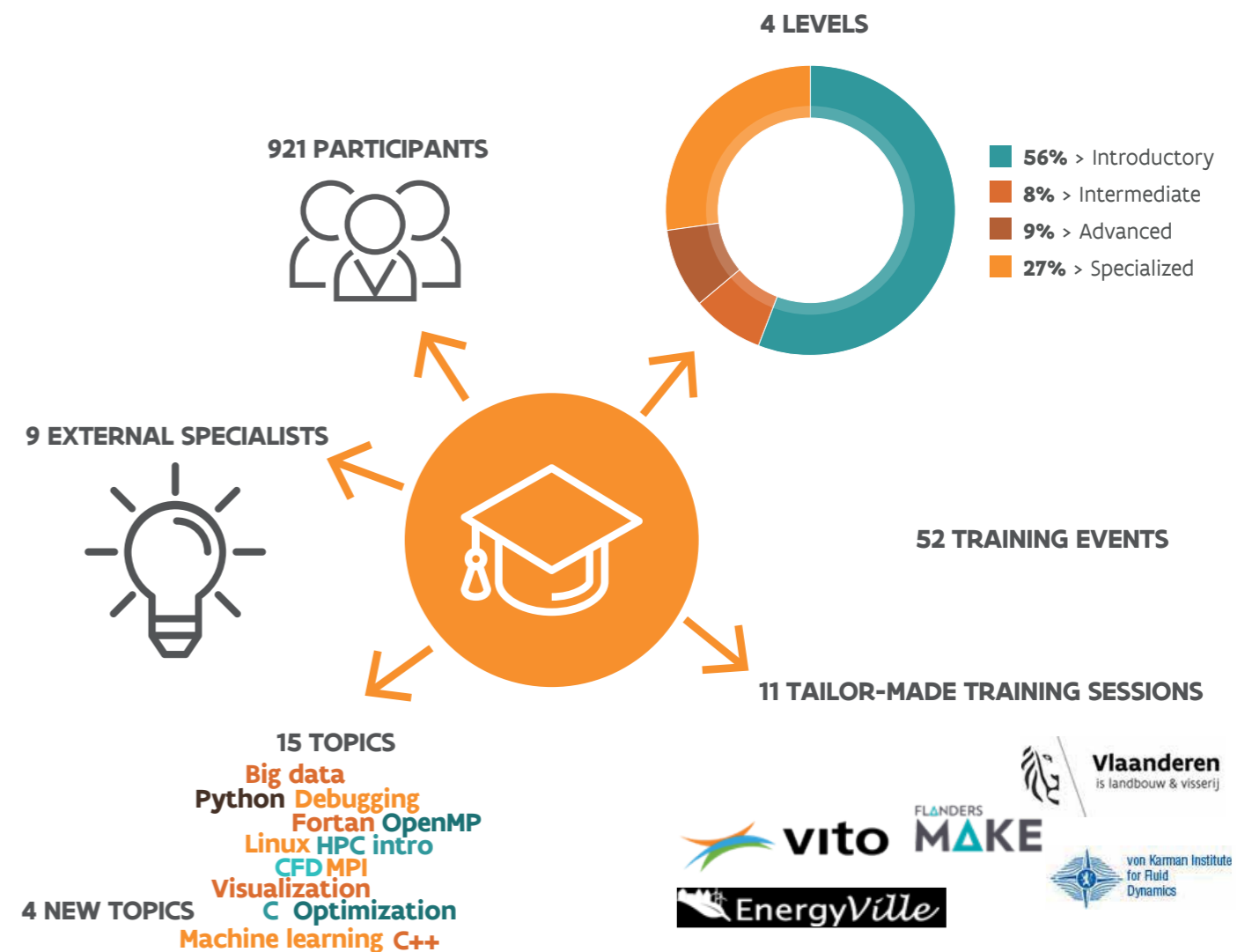
Sommige opleidingen passen in geen van deze drie niveaus: ofwel zijn ze te domeinspecifiek, ofwel omvatten ze het volledige introductory tot advanced niveau.

Het VSC biedt ook opleidingen op maat aan, zowel voor onderzoeksgroepen als voor kennisinstellingen en industrie. Het gaat in dit geval meestal om een standaard opleiding, aangevuld met domeinspecifieke modules die hiervoor speciaal ontwikkeld worden.

Uiteraard worden de bestaande opleidingen steeds up-to-date gehouden met recente ontwikkelingen, maar er worden ook jaarlijks nieuwe onderwerpen voor training geselecteerd en uitgewerkt.

De website van het VSC maakt het opleidingsaanbod bekend, zodat de informatie voor alle geïnteresseerden beschikbaar is. Via interne mailinglists worden de aankondigingen verspreid onder de gebruikers van de infrastructuur. Gerichte mailings vestigen de aandacht op specifieke opleidingen als die nuttig kunnen zijn voor een beperkte doelgroep of voor potentiële gebruikers.

Deze infografiek geeft een bondig overzicht van het opleidingsaanbod in 2017.



Afbeelding 21 - Opleidingsaanbod 2017

CASE

GROOTSCHALIGE MEDISCHE BEELDANALYSE VOOR DIAGNOSE EN PATIËNTEN-OPVOLGING

Onderzoeker Mathias Polfliet

Departement voor Elektronica en Informatica (ETRO), VUB



De groei van een tumor opvolgen of de bewegingen van gewrichten vergelijken voor en na een operatie: de groepsgewijze verwerking van radiologische beelden biedt een schat aan informatie. Onderzoeker Mathias Polfliet van de VUB doet een beroep op de Tier-1- en Tier-2- infrastructuur voor zijn onderzoek naar de schaalbaarheid van medische beeldverwerking.

Terabytes aan data

Tot voor kort was een radiologisch beeld enkele megabytes groot. Vandaag kunnen sequenties meerdere gigabytes tellen, en dat voor één acquisitie van één patiënt. Voor analyses van groepen patiënten zijn zelfs terabytes aan medische beelden nodig. Om al die beelden tot nuttige medische informatie te verwerken, zijn schaalbare algoritmes en machines die dergelijke hoeveelheden data aan kunnen essentieel.

Binnen het departement voor Elektronica en Informatica (ETRO) van de Vrije Universiteit Brussel (VUB) en onder leiding van prof. Jef Vandemeulebroucke doet Mathias Polfliet onderzoek naar schaalbare medische beeldverwerking. Hij doet daarvoor een beroep op de Tier-1- en Tier-2-infrastructuur aan de VUB en werkt samen met het Erasmus Medical Center in Rotterdam, het grootste ziekenhuis in de Benelux.

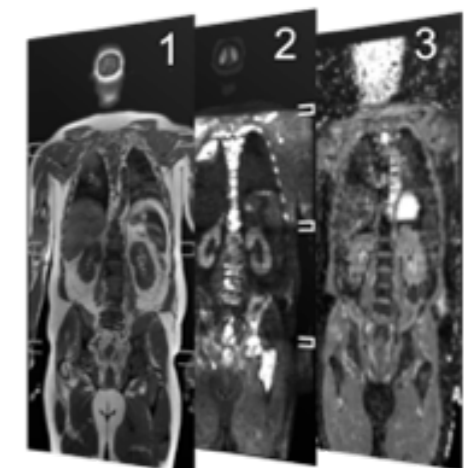
Beeldregistratie

Het onderzoek focust voornamelijk op de registratie van meerdere beelden tegelijk. Mathias Polfliet: "Beeldregistratie laat toe om minieme wijzigingen tussen verschillende beelden te detecteren. In een medische context heeft dat veel toepassingen. Zo kan je het gebruiken om de groei van een tumor op te volgen, anatomische variaties ten opzichte van de populatie op te sporen of verdachte letsels in vergelijking met eerdere scans van dezelfde patiënt te detecteren."

Wat betekent dit voor de toekomst?

Groepsgewijze registratie biedt een schat aan diagnostische informatie. Mathias Polfliet: "Zo kan je de leeftijd van de hersenen schatten op basis van een MRI-scan en bewegingen van gewrichten vergelijken

voor en na een operatie. Dat kan kwantitatief bewijs leveren voor het al dan niet slagen van een operatie. Momenteel is de hoge computationele kost nog een struikelblok voor veel onderzoeksgroepen. Door onze schaalbare software open source te maken als deel van een groter pakket (<https://github.com/SuperElastix/elastix>), hopen we in de toekomst meer mensen van onze werkwijze te overtuigen."



EVENEMENTEN

VSC Users Day 2017

De VSC Gebruikerscommissie organiseerde op 2 juni 2017 de derde VSC Gebruikersdag in Brussel, in het Paleis der Academiën. Voor het gevarieerde programma schreven meer dan 120 deelnemers zich in. Voor- en namiddag verliepen volgens hetzelfde stramien: op de plenaire sessie volgde een keuze uit één van de vier workshops. De onderwerpen van de workshops waren: 'VSC for starters', 'Profiler and debugging', 'Programming GPU's' en 'Feedback from Tier-1 Allocation Board'.

Dr. Achim Basermann van het German Aerospace Center – de buitenlandse spreker – gaf een lezing over 'High Performance Computing with Aeronautics and Space Applications'.

De dag werd afgesloten met een postersessie. Onderzoekers stelden er hun HPC-gerelateerde onderzoek voor, waarvoor het publiek via eenminuutpresentaties warm werd gemaakt. Deze aanpak zorgde er mee voor dat heel wat deelnemers duidelijk geïnteresseerd waren in de talrijke posters.

De ingevulde evaluatieformulieren waren unaniem positief.



Deelname aan nationale en internationale evenementen, congressen en workshops

GEORGANISEERD DOOR HET VSC

- Singularity: Containers in HPC
7 februari 2017, UGent

GEORGANISEERD DOOR ANDERE ORGANISATIES

- FOSDEM'17
Co-organisation of 'HPC, Big Data and Data Science' devroom
4-5 februari 2017, Brussel
https://archive.fosdem.org/2017/schedule/track/hpc,_big_data_and_data_science
- ELIXIR Belgium Launch
9 februari 2017, VIB, Gent
- Presentation 'Supercomputing for academics & industry - Flemish Supercomputer Center (VSC)' on board of directors of BIR&D (Belgian Industrial Research and Development association)
8 maart 2017, Vilvoorde
<http://birdbelgium.com>



- 23rd Quattor workshop
21-22 maart 2017, Annecy, Frankrijk
<https://www.quattor.org/meeting/2017/03/21/annecy-workshop.html>
- CECI Users Day
21 april 2017, Louvain-la-Neuve
- PRACE 2017 Spring School - System Administration and Data/Computational Services for Scientific Communities
Lecture 'Modern Scientific Software Management using EasyBuild & co'
25-27 april 2017, The Cyprus Institute, Nicosia, Cyprus
<https://events.prace-ri.eu/event/601>
- TechBoost! 2017 - Innovations in Big Data Analytics
27 april 2017, Gent
<https://aig.ugent.be/event-2017/techboost-voor-ingenieurs>
- EGI Conference
9-12 mei, Catania, Italië
- SESAMENET partner meeting
17-18 mei 2017, Barcelona, Spanje
<https://sesamenet.eu>
- NEC Users Group
22-24 mei, Leuven
- iRODS User Group Meeting 2017
13-15 juni 2017, Utrecht, Nederland
<https://irods.org/ugm2017/>



- ISC 2017
18-22 juni, Frankfurt, Duitsland
- HPC Knowledge Meeting '17
Lecture '5 Years of Getting Scientific Software Installed Using EasyBuild'
15-16 juni 2017, San Sebastián, Spanje
<http://www.hpckp.org/index.php/annual-meeting/hpckp-17>
- Iedereen UGent - 'Try out the supercomputer!' experiment market
8 oktober 2017, Gent
<https://iedereenugent.be/en/activities/try-out-the-supercomputer>
- 2nd EasyBuild User Meeting
Lecture 'EasyBuild: past, present & future'
Tutorial 'Implementing easyblocks'
8-10 oktober 2017, Jülich Supercomputing Centre, Duitsland
<https://indico-jsc.fz-juelich.de/event/30>
- OpenNebula Conf 2017
Lecture 'Transforming an Old Supercomputer into a Cloud Platform'
23-24 oktober 2017, Madrid, Spanje
<http://2017eu.opennebulaconf.com>
- SPLASH 2017
22-27 oktober 2017, Vancouver, Canada
<https://2017.splashcon.org/attending/splash-awards>
- Supercomputing 2017
12-17 november 2017, Colorado, VS
- EasyBuild hands-on meeting
13-14 november 2017, SurfSARA, Amsterdam, Nederland
- Discover 2017 (HP/HPE)
27-29 november, Madrid, Spanje
- Digital Infrastructures for Research
30 november-1 december 2017, Brussel

Het VSC sponsorde naar jaarlijkse gewoonte de Vlaamse Programmeerwedstrijd. Het doel hiervan is het vergroten van de naambekendheid bij studenten en stafleden, vooral bij de associatiepartners. Het VSC had dit jaar een informatiestand op het event.

INTERNATIONALE SAMENWERKING

PRACE en EuroHPC

Het VSC maakt via het Belgische lidmaatschap deel uit van het PRACE-gebeuren. PRACE biedt de mogelijkheid om Tier-0-rekentijd te gebruiken. De toegang tot Tier-0-rekentijd wordt georganiseerd door middel van oproepen tot het indienen van projectvoorstellen. Deze voorstellen worden beoordeeld volgens excellent science-normen. De projecten die het best gerangschikt zijn, krijgen de gevraagde rekentijd. Bij de 15de oproep zat een onderzoeker van de KU Leuven als lid van een consortium (onder leiding van CNRS) dat 15 miljoen core-uren toegekend kreeg op de Franse Curie-supercomputer. Daarnaast kreeg een onderzoeker van de UGent in het Preparatory Access-programma in totaal 200.000 core-uren toegekend voor code scalability testing op de Italiaanse Marconi- en de Franse Curie-supercomputers.

Berichten op de VSC-website maken Vlaamse onderzoekers attent op het bestaan van deze oproepen. PRACE biedt ook interessante opleidingen die door het VSC gepromoot worden.

Het nieuwe financieringsmodel PRACE 2.0 werd uitgewerkt sinds 2016. Dat gaat uit van een kostprijs van 3,3 miljoen euro, te verdelen onder de leden. Voor België werd geopteerd voor het standaard lidmaatschap. Deze bijdragen moeten de kosten dekken voor de high-level support teams die ondersteuning zullen bieden en zich bevinden op de Tier-0-sites. Op die manier blijven Vlaamse onderzoekers toegang hebben tot grootschalige supercomputerinfrastructuur die de mogelijkheden van een land of regio overstijgt.

Om Europa tegen 2022-2023 op de exascale kaart te zetten, heeft de EU EuroHPC in het leven geroepen. Dit programma behelst niet alleen de installatie van exascale supercomputers, maar ook de ontwikkeling van de nodige technologie (processoren, architectuur, tools en programma's). Op 23 maart 2017 ondertekenden de ministers van zeven Europese landen de EuroHPC-verklaring. Op 9 juni 2017 volgde België dit voorbeeld. In 2018 en 2019 zal duidelijk worden of en hoe de verschillende landen aan het EuroHPC-programma zullen deelnemen.

<http://www.prace-ri.eu>
<http://www.eurohpc.eu>

EGI

Het VSC is actief aanwezig bij het European Grid Infrastructure-gebeuren (EGI). De VUB-gridcluster maakt deel uit van EGI als een resource center, en door de steun van internationale virtuele organisaties biedt het op deze manier de mogelijkheid aan onderzoekers uit Vlaanderen om deze Europese rekeninfrastructuur te gebruiken. Vooral hoge-energiefysici van de UAntwerpen, UGent en VUB maken hiervan gebruik. De gridcluster ondersteunt de internationale samenwerking IceCube. Onderzoekers van de VUB en UGent zijn hierin actief. De nieuwe internationale onderzoeksgroep SoLid werd opgestart, met onderzoekers van onder meer de UGent, UAntwerpen en VUB, die neutrino-oscillaties bestudeert op een heel korte afstand van de kern van een reactor in het SCK-CEN in Mol. Deze onderzoeksgroep maakt, met ondersteuning vanuit het VUB-gridteam, gebruik van de EGI-grid middleware om op een eenvoudige manier gegevens te delen over de deelnemende universiteiten heen. Daarnaast gebruikt het WeNMR-project ook de gridcluster. De VUB ondersteunt in het kader van de EGI-core-activiteit 'the Long Tail of Science' (LToS), een initiatief om individuele onderzoekers en kleinere onderzoeksgroepen te helpen die geen toegang hebben tot specifieke reken- en opslaginfrastructuur, in tegenstelling tot grote laboratoria en samenwerkingsverbanden. De VUB deed inspanningen om toe te treden tot het EGI FedCloud-project, een gecertificeerde site met als doel de gefedereerde cloudinfrastructuur toegankelijk te maken voor alle VSC-gebruikers.

<https://www.egi.eu>

Partners van SESAME Net

Het VSC is partner in het SESAME Net-project dat toegekend werd aan het consortium binnen het Horizon 2020-programma van de EU. SESAME Net staat voor 'Supercomputing Expertise for Small and Medium Enterprise Network'. Het heeft als belangrijkste doelstellingen het ondersteunen, uitbouwen en promoten van een netwerk van HPC-kennis en HPC-ervaring in Europa. Het staat ook in voor het verspreiden van best practices rond HPC-gebruik door de industrie. De primaire doelgroep zijn kmo's.

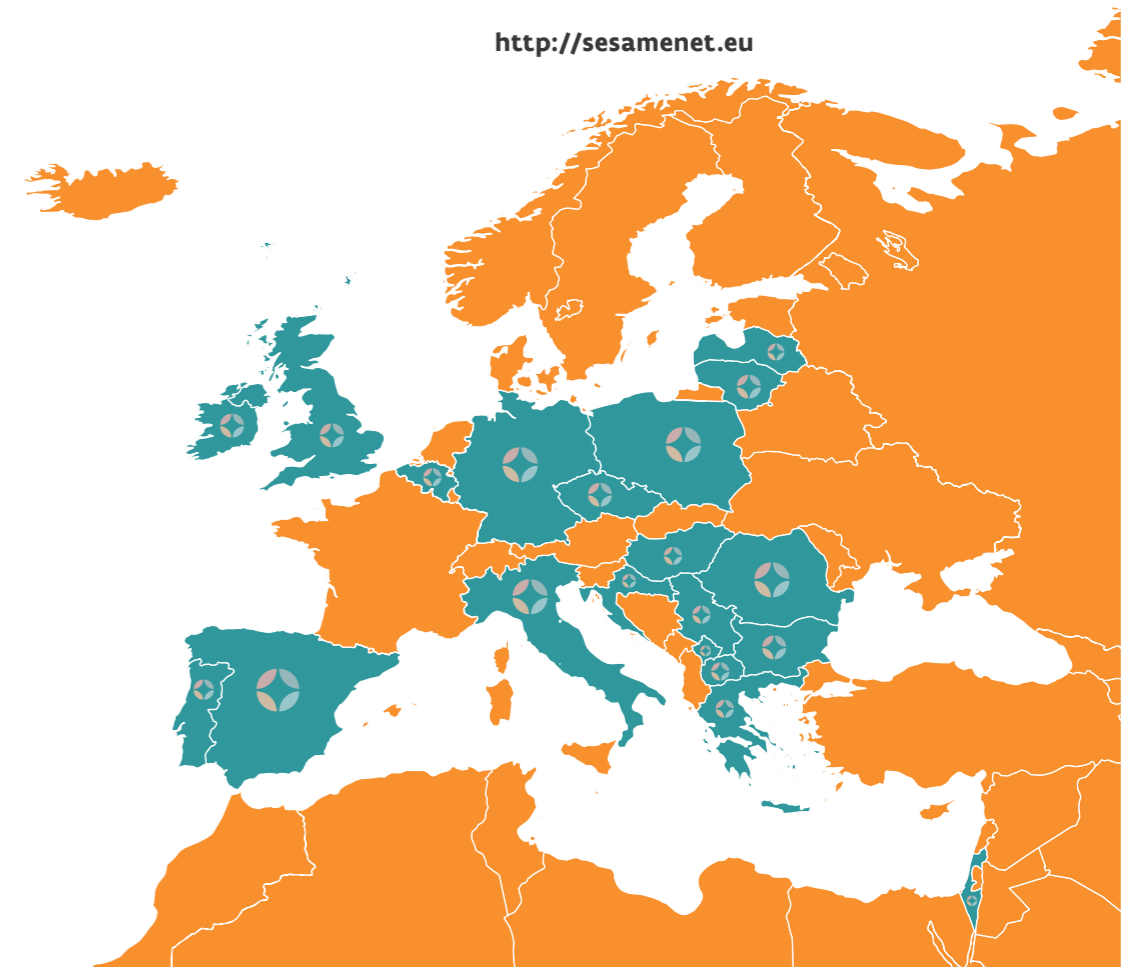
Partners van het SESAME-netwerk

Het project startte officieel op 1 juni 2015 en werd op 31 mei 2017 voltooid. Bij de finale projectreview door de EC waren de reviewers zeer enthousiast over de voortgang en de verwezenlijkingen van dit project, waaronder:

- de ontwikkeling en lancering van de HPC4SME-zelfevaluatietool;
- de publicatie en verspreiding van 'EU Roadmap for SME to uptake the HPC';
- deelname aan verscheidene belangrijke evenementen (Digital Day Rome, HPC Forum Stuttgart, HPC Summit Barcelona, Hannover Messe, en vele andere lokale evenementen).

Hoewel het project officieel is beëindigd, zijn alle huidige SESAME Net-partners overeengekomen om door te gaan met de netwerk- en communityactiviteiten.

<http://sesamenet.eu>



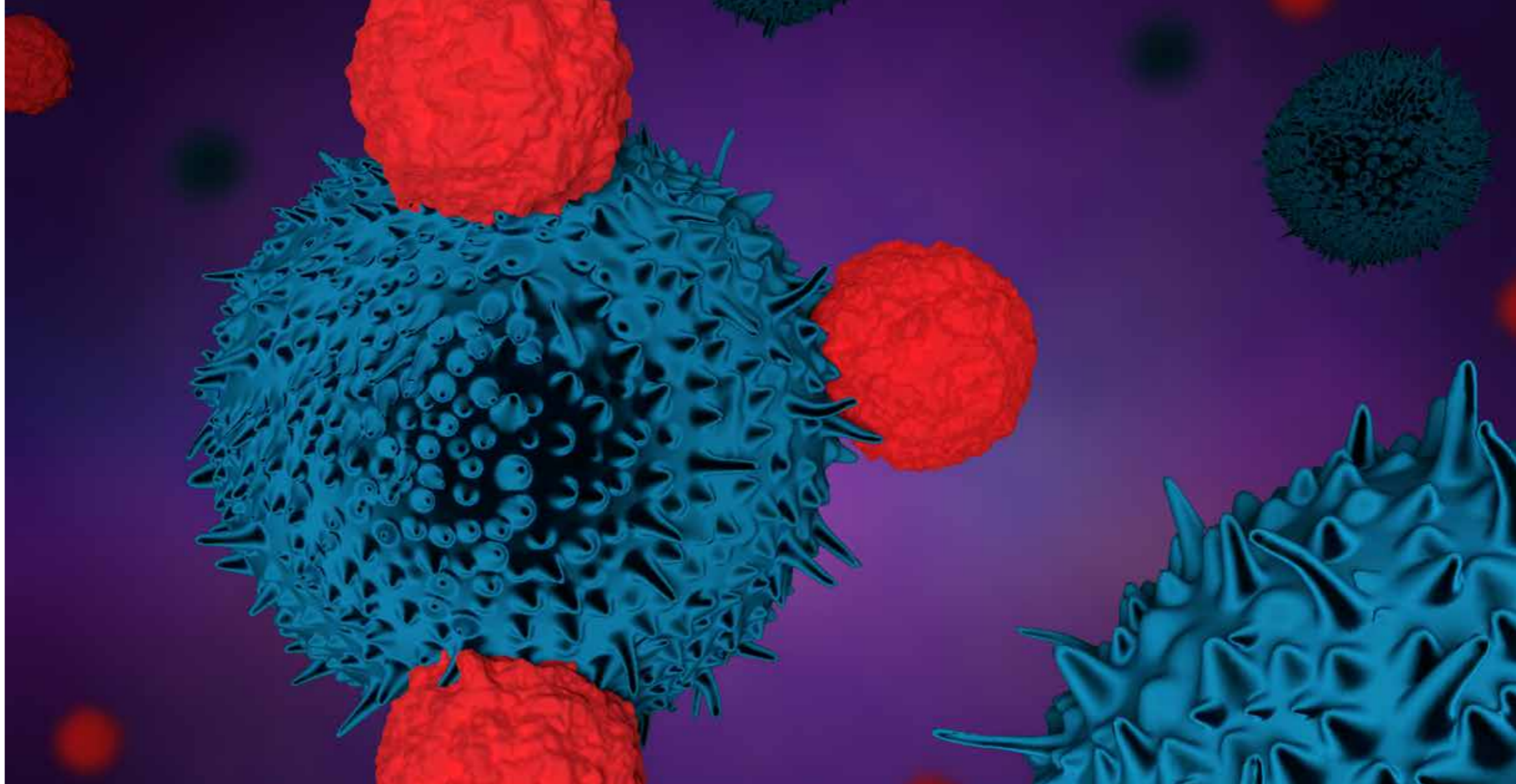
Afbeelding 22 - Partners van SESAME Net

CASE

EFFECTIVITEIT VAN IMMUNOTHERAPIE BETER VOORSPELLEN

Dr. Hui Zhao

Laboratorium voor Translationele Genetica, KU Leuven



Voor de behandeling van kanker wordt steeds vaker immunotherapie toegepast. Dr. Hui Zhao van de KU Leuven onderzoekt hoe het succes van die therapie beter kan worden voorspeld.

Immunotherapie stimuleert de natuurlijke afweer zodat ons eigen immuunsysteem kankercellen aanvalt en opruimt. Verschillende kankers, zoals longkanker en huidkanker, reageren erg goed op de therapie. Maar immunotherapie is niet bij alle patiënten even succesvol en is bovendien zeer duur. Dr. Hui Zhao van het Laboratorium voor Translationele Genetica van prof. Diether Lambrechts (KU Leuven): "Om onnodige kosten en nevenwerkingen te vermijden is het essentieel om de werking van de therapie vooraf te kunnen voorspellen. Met behulp van goed gekozen biomarkers en betere technologieën om die te detecteren, zoeken we nieuwe methodes om de efficiëntie van de therapie beter te voorspellen."

Terabytes

Concreet gaat Hui Zhao in haar onderzoek op zoek naar genen die het meest geschikt zijn als biomarker voor immunotherapie. "We spitsen ons toe op het ontdekken van verschillen in genexpressie van immunogelateerde genen in het tumorweefsel en gezond weefsel", licht Zhao toe.

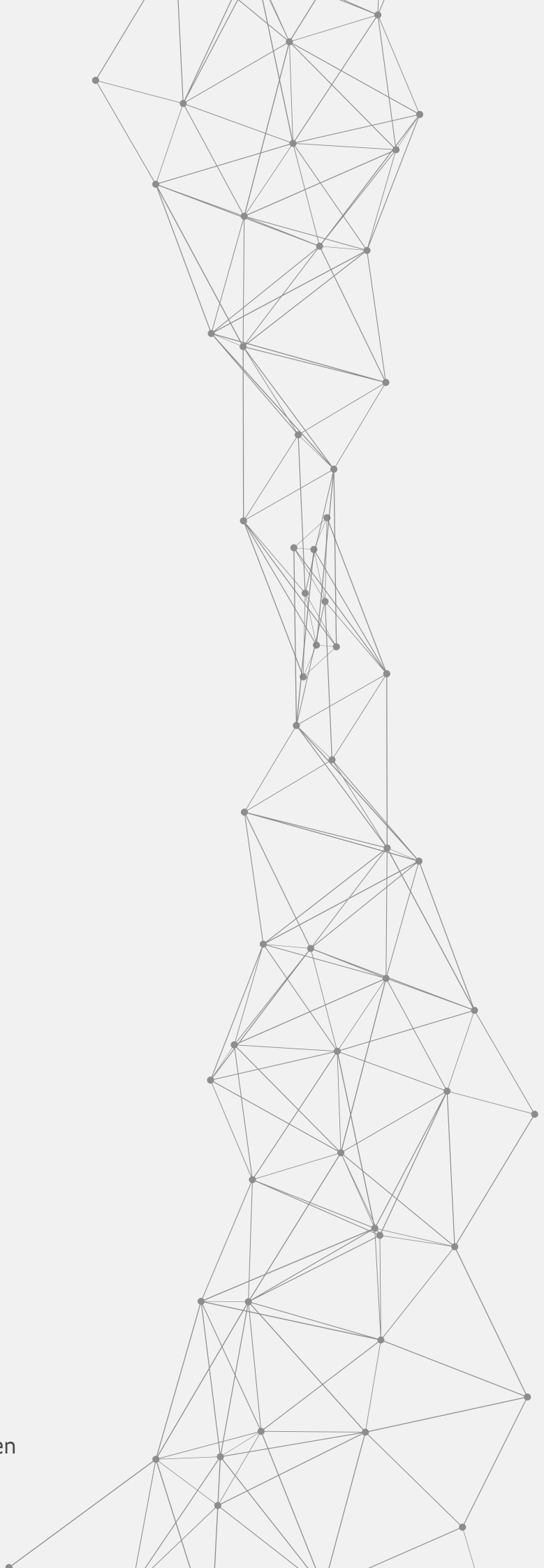
Daarnaast zette de onderzoekster *long-read sequencing* in om retrovirale sequenties in de tumor te detecteren. Hui Zhao: "De data van verschillende kankertypes halen we uit TCGA, The Cancer Genome Atlas. De analyse van een staal neemt ongeveer 24 uur in beslag op één Tier-1-rekennode. Om een statistisch relevante uitspraak te bekommen, heb je veel stalen nodig. In ons onderzoek zijn ongeveer zeventuizend stalen gebruikt. Aangezien één staal tussen 5 en 10 gigabyte groot is en je ongeveer dubbel zoveel ruimte nodig hebt tijdens het verwerken, hebben we veel rekentijd en vele terabytes aan opslag nodig. Deze data worden uiteindelijk vergeleken met gegevens van patiënten die positief reageren op immunotherapie."

Nieuwe technieken, verfijndere analyses

In de toekomst zullen onderzoekers meer en meer gebruikmaken van nieuwe sequentietechnologieën om het expressieprofiel van individuele cellen te onderzoeken. Hui Zhao: "Dat betekent dat we op een

stukje tumorweefsel met vijfduizend cellen vijfduizend analyses moeten uitvoeren op de afzonderlijke cellen. De analyse van een individuele cel vereist wat minder rekentijd en data dan de analyse van één tumor, maar vermits we de analyse vijfduizend keer herhalen, verwachten we dat we honderd keer meer rekentijd en opslag nodig zullen hebben. Maar het belangrijkste: die analyses zullen veel accuratere voorspellingen opleveren en tot betere behandelingen leiden."





FWO
Fonds Wetenschappelijk Onderzoek – Vlaanderen
Egmontstraat 5
1000 BRUSSEL
vscentrum.be