

The logo for the Vlaams Supercomputer Centrum (VSC) consists of the letters 'VSC' in a white, bold, sans-serif font. The 'V' and 'S' are connected, and the 'C' is a simple circle. The logo is positioned on the left side of a large, light blue diamond shape that is composed of many thin, overlapping lines, creating a grid-like pattern.

Vlaams Supercomputer Centrum

# Jaarverslag 2016

[www.vscenrum.be](http://www.vscenrum.be)

# Inhoud

---

Voorwoord	3
Het VSC uitgelicht	4
Het Vlaams model kort toegelicht	4
Missie en doelstellingen	5
VSC Adviesorganen	6
Financiering van Tier-1 en Tier-2	8
De tweede Vlaamse Tier-1	9
Tier-1 Infrastructuur	10
Tier-1 aan de UGent	10
Tier-1 aan de KU Leuven	12
Rekenen op de Tier-1	13
Tier-2 Infrastructuur	
Beschikbare infrastructuur	21
Exploitatie en gebruik	26
Toekennen rekentijd Tier-2	32
Projecten	33
Gebruikersondersteuning	33
Personeel	37
Outreach naar Vlaamse bedrijven	40
Dienstverlening aan bedrijven	40
Gebruik Tier-1 door bedrijven	40
Bekendmaking naar bedrijven en andere kennisinstellingen	41
Opleidingen	42
Opleidingsprogramma	42
Communicatie en evenementen	45
Inauguratie BrENIAC	45
Deelname aan nationale, internationale evenementen, congressen en workshops	46
VSC ECHO	47
Internationale samenwerking	48
PRACE	48
EGI	48
SESAME Net	48
Contacten met andere HPC-centra	49
VSC Succesverhalen	51

# Voorwoord

---

Het VSC, het samenwerkingsverband tussen de Vlaamse universiteiten en het FWO, stapte in 2016 in een uitdagend jaar en in een nieuwe omgeving. Na jaren te hebben gewerkt onder de stimulerende hoede van de Herculesstichting is het VSC nu onderbracht bij het FWO (Fonds voor Wetenschappelijk onderzoek).

De inhuldiging van een nieuwe supercomputer aan de KU Leuven in oktober 2016 werd een nieuwe mijlpaal voor het VSC. Het toont het engagement van de Vlaamse overheid om te blijven investeren in state of the art infrastructuur voor onderzoek en innovatie. Een Tier-1 supercomputer is immers een springplank en stimulans voor de academische en de industriële vorsers om uitdagend onderzoek in R&D te initiëren.

Ook werd in 2016 veel aandacht besteed aan de uitbouw van de Tier-2 infrastructuur aan de Vlaamse universiteiten en werden bijkomende personeelsmiddelen voorzien voor opleiding en gebruikersondersteuning. Het VSC zorgt er immers voor dat de onderzoekers hun applicaties eenvoudig kunnen migreren tussen de universitaire clusters en de Tier-1 supercomputer zodat steeds de meest geschikte computer wordt gebruikt. Tevens werden het aantal opleidingen over het gebruik van de Tier-1 en de Tier-2 uitgebreid voor onderzoekers uit de Vlaamse universiteiten, de strategische onderzoekscentra en de andere publieke kennisinstellingen, maar ook voor de bedrijven.

Voor het toekennen van rekentijd op de Tier-1 keurde de raad van bestuur een licht aangepast reglement goed waarbij voor het evalueren van de aanvragen het internationaal panel van deskundigen opnieuw werd aangesteld. In 2016 werden op drie momenten aanvragen beoordeeld. In het totaal werden 198.490 nodedagen toegekend aan 74 projecten. Vanaf 2016 wordt aan de academische onderzoekers geen deel van de kosten meer aangerekend hetgeen een positief effect had op het aantal ingediende aanvragen.

De Gebruikerscommissie bracht ook in 2016 de noden van de gebruikers in kaart en formuleerde voorstellen om de dienstverlening van gebruikers te verbeteren.

Ook aan de samenwerking met bedrijven werd aandacht besteed. De Industrial Board werd in 2016 opnieuw samengesteld en ontwikkelde initiatieven om de voordelen van een samenwerking met het VSC duidelijk te maken: een professionele ondersteuning, waar nodig op maat gemaakte opleidingen, maar vooral de inbedding in een academische omgeving.

Kortom het werd een druk 2016 en het VSC is ook met het FWO verzekerd van een stralende toekomst!

**KU Leuven:** Leen Van Rentergem, Jan Ooghe

**UAntwerpen:** Annie Cuyt, Stefan Becuwe

**UGent:** Ewald Pauwels

**UHasselt:** Geert Jan Bex

**VUB:** Rosette Vandenbroucke, Stefan Weckx

**FWO:** Caroline Volckaert, Bart Van Beek

# Het VSC uitgelicht

## Het Vlaams model kort toegelicht

In het Europees model voor High Performance Computing (HPC) wordt een onderscheid gemaakt tussen drie niveaus: de rekencapaciteit waarover onderzoeksinstellingen beschikken (Tier-2), de rekencapaciteit waarvan de noden en de kosten een instelling overstijgen en die op het niveau van een regio of een land voorzien wordt (Tier-1) en de superzware rekeninfrastructuur (Tier-0).

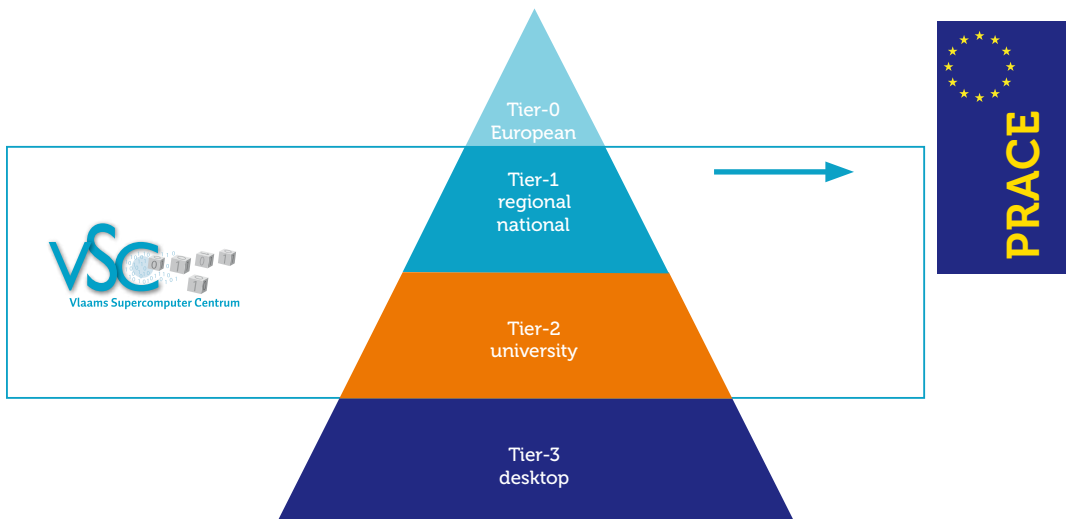
In het begin van deze eeuw had Vlaanderen een achterstand in HPC. De universiteiten hadden weliswaar geïnvesteerd in lokale rekencapaciteit en de overheid had financiering toegekend maar een globale visie ontbrak. Onder impuls van het 'Advies van de Koninklijke Vlaamse Academie van België voor Wetenschappen en Kunsten (KVAB) over High Performance Computing in Vlaanderen' werd het Vlaams Supercomputer Centrum opgericht.

Het Vlaams Supercomputer Centrum (VSC) is een samenwerkingsverband tussen de vijf Vlaamse universiteiten en hun associaties: Associatie Universiteit & Hogescholen Antwer-

pen, Universitaire Associatie Brussel, Associatie Universiteit Gent, Associatie KU Leuven en Associatie Universiteit-Hogescholen Limburg. Dit consortium groepeert knowhow in wetenschappelijk en technisch rekenen (scientific/technical computing, met inbegrip van high performance computing, high throughput computing, cloud computing en data processing) in Vlaanderen en huisvest infrastructuur in vier hubs: UAntwerpen, Vrije Universiteit Brussel, UGent en KU Leuven. Het VSC wordt beheerd door het FWO, Fonds Wetenschappelijk Onderzoek Vlaanderen.

Eind 2012 werd de eerste Tier-1 supercomputer, gehuisvest aan de UGent, in gebruik genomen. Deze is toegankelijk voor publieke onderzoeksinstellingen zoals o.m. de universiteiten, de strategische onderzoekscentra en instellingen van het postinitieel onderwijs en bedrijven in Vlaanderen. In oktober 2016 werd de tweede Tier-1 supercomputer in gebruik genomen, ditmaal gehuisvest aan de KU Leuven. Investeren in een Tier-1 is echter pas zinvol als er tegelijkertijd over gewaakt wordt dat elke universiteit over een eigen performante Tier-2 capaciteit beschikt.

Voor de uitbouw van HPC in Vlaanderen biedt het Vlaams consortiummodel belangrijke voordelen en bovendien drukt het de kosten. De Tier-1 en Tier-2 computers zijn via BELNET, het federaal onderzoeksnetwerk, onderling met elkaar verbonden en applicaties kunnen migreren naar de machine die hiervoor het



best geschikt is. De medewerkers zijn aangesteld aan de vijf Vlaamse universiteiten maar vormen een geïntegreerd team dat instaat voor de opleiding en de ondersteuning van gebruikers. Voor gespecialiseerde ondersteuning kan elke instelling beroep doen op dé specialist waar hij of zij ook tewerkgesteld is. Alleen hard- en software volstaan immers niet. Het is minstens even belangrijk in te zetten op voldoende competente medewerkers die de onderzoekers opleiden en ondersteunen. Grote rekencapaciteit wordt immers gebruikt door vorsers uit de meest diverse disciplines. Het gaat over personen die vertrouwd zijn met hun vakgebied maar niet noodzakelijk met de geavanceerde technieken die nodig zijn om software optimaal te gebruiken op grote computers.

Universiteiten investeren met eigen middelen mee in de HPC- infrastructuur en men kan beroep doen op de centrale diensten van deze instellingen. Bovendien biedt de inbedding in een academische omgeving opportuniteiten voor de samenwerking met industriële partners.

Tenslotte wordt ook de internationale ontwikkelingen en mogelijkheden die de toepassingen op Tier-0 machines voor Vlaamse onderzoekers bieden opgevolgd. Zo is België ook lid van PRACE (Partnership for Advanced Computing in Europe), een project van strategisch belang voor Europa en opgenomen op de roadmap van het European Strategy Forum for Research Infrastructure (ESFRI).

## Missie en Doelstellingen VSC

### Missie van het VSC

Het VSC stimuleert het gebruik van wetenschappelijk en technisch rekenen in het Vlaamse academisch en industrieel landschap. Daartoe biedt ze infrastructuur, training en dienstverlening aan. Tevens fungeert VSC als hefboom om het belang en de maatschappelijke meerwaarde van wetenschappelijk en technisch rekenen te promoten.

### Doelstellingen van het VSC

De strategische doelstellingen worden als volgt samengevat:

- Toegang aanbieden aan het academisch en industrieel landschap tot diverse ICT- infrastructuur die is aangepast aan de noden van wetenschappelijk/technisch rekenen.
- Voorzien in een uniforme gebruikersomgeving op de rekeninfrastructuur die beschikbaar is in de vier hubs.
- Ondersteuning bieden aan haar gebruikers zodat die hun onderzoek of ontwikkeling op gebied van wetenschappelijk/technisch rekenen naar een hoger niveau kunnen tillen.
- Informeren over de recente ontwikkelingen van wetenschappelijk/technisch rekenen en de meerwaarde die het kan bieden.
- Uitwisseling bevorderen van ideeën en expertise tussen publieke onderzoeksinstellingen en industrie.
- Aanbieden van een divers en gecoördineerd opleidingsprogramma doorheen het hele VSC-consortium om het gebruik van wetenschappelijk/technisch rekenen te bevorderen bij nieuwe en bestaande gebruikers.
- Betrokken zijn bij en actief deelnemen aan internationale initiatieven zoals PRACE en Horizon2020 en samenwerken met andere centra die zich richten op wetenschappelijk /technisch rekenen.



# VSC Adviesorganen

Om de werking van het VSC vlot te laten verlopen, werden er een aantal adviesorganen opgericht.

## VSC Stuurgroep

De VSC Stuurgroep - die bestaat uit de medewerkers van het FWO en de personen die aan elke universiteit belast zijn met de coördinatie van de HPC-activiteiten- staat in voor de inhoudelijke aansturing van de werking van het VSC. Ze vergadert maandelijks. Tijdens deze meetings worden niet alleen operationele afspraken gemaakt maar wordt ook strategisch advies aan de raad van bestuur van het FWO gegeven.

### VSC Stuurgroep 2016

instelling/organisatie	vertegenwoordiger(s)	
KU Leuven	Leen Van Rentergem	Jan Ooghe
UGent	Ewald Pauwels	
UAntwerpen	Annie Cuyt	Stefan Becuwe
VUB	Rosette Vandembroucke	Stefan Weckx (vanaf 01/12)
UHasselt	Geert Jan Bex	
FWO	Caroline Volckaert	Bart Van Beek

## VSC Industrial Board

Om de samenwerking met de bedrijven maar ook de non-profit sector uit te bouwen werd een Industrial Board opgericht.

- De Industrial Board dient als communicatiekanaal tussen het VSC en de Vlaamse industrie en heeft tot doel om de uitwisseling van ideeën en expertise tussen publieke onderzoeksinstituten en de industrie te versterken.
- De Industrial Board ontwikkelt initiatieven om bedrijven en non-profit instellingen 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.
- Deze raad helpt dus mee een beleid uit te stippelen om de betrokkenheid van de Vlaamse industrie in HPC en de samenwerking met het VSC te vergroten, en om effectief het gebruik van supercomputing te promoten bij het ontwikkelen van innovatieve producten en diensten.

Op 19 oktober 2016 benoemde de raad van bestuur van het FWO de VSC Industrial Board voor een mandaat van twee jaren met volgende samenstelling:

### leden VSC Industrial Board 2016

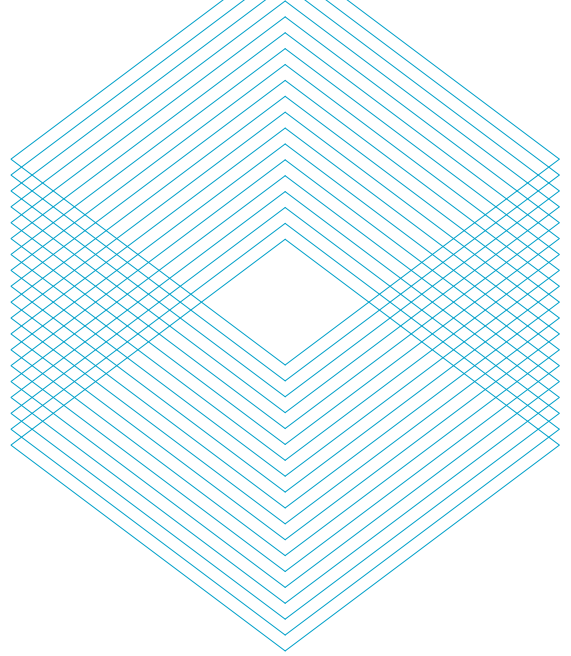
Mia Vanstraelen	IBM
Charles Hirsch	Numeca
Herman Vander Auweraer	LMS Siemens
Benny Westaedt	Van Havermaet
Marc Engels	Flanders Make
Marcus Drosson	Umicore
Sabien Vulsteke	Bayer Crop Science
Birgitta Brys	Wordline

Mevrouw Mia Vanstraelen werd voor het eerste werkjaar als voorzitter benoemd. Voor de volgende jaren wordt de voorzitter onder de leden aangesteld.

## VSC Gebruikerscommissie

Om te adviseren over de behoeften van de gebruikers en voorstellen te formuleren om de dienstverlening met inbegrip van de opleiding van gebruikers te verbeteren, stelde de raad van bestuur van het FWO een Gebruikerscommissie in van minstens zeventien leden, op voordracht van de associaties universiteit-hogescholen, de strategische onderzoekscentra en de Vlaamse Regering. Daarnaast heeft elke universiteit een eigen gebruikerscommissie.

De leden zijn benoemd voor een periode van drie kalenderjaren, ingaand op 26 juni 2014. Om voeling te houden bij de noden van nieuwe gebruikers is het wenselijk dat periodiek een aantal leden kunnen worden vervangen. Bij de overdracht van de activiteiten naar het FWO begin 2016 werd aan alle leden gevraagd of ze bereid waren hun mandaat verder op te nemen onder de nieuwe structuur. Als reactie hierop werd vanuit iMinds de vertegenwoordiging gewijzigd en zal Jan Fostier vanaf 2016 participeren in de Gebruikerscommissie. Vanuit de UGent treedt Marie-Françoise Reyniers op ter vervanging van Veronique Hoste.



### Leden Gebruikerscommissie 2016

voorgedragen door	naam	instelling/organisatie
Vlaamse Regering	Francisco Hernandez	VUZ
Associatie Leuven	Dirk Roose	KU Leuven
	Nicole van Lipzig	KU Leuven
	Nele Moelans	KU Leuven
Associatie Gent	Veronique Van Speybroeck	UGent
	Dirk Van den Poel	UGent
	Veronique Hoste / Marie-Françoise Reyniers	UGent
Associatie Antwerpen	Michele Giugliano	UA
	Wouter Herrebout	UA
Associatie Brussel	Frank De Proft	VUB
Associatie Limburg	Niel Hens	UHasselt
SOC	Clemens Mensink	VITO
	Steven Maere	VIB
	Piet Demeester / Jan Fostier	iMinds
	Wilfried Verachtert	IMEC

## Financiering van Tier-1 en Tier-2

In 2016 werd de Tier-2 infrastructuur voor 4.270.800 euro gefinancierd door het FWO. FWO investeerde tevens 776.000 euro in het personeel en de energiekosten voor de eerste Tier-1 en de opstart van de tweede Tier-1 en deed een eenmalige investering van 5,5 miljoen euro in de hardware van de tweede Tier-1.

Deze middelen werden aangewend voor het financieren van:

- personeelskosten voor de exploitatie van de eerste Tier-1 (190.000 euro) en de opstart van de tweede Tier-1 (190.000 euro);
- personeelskosten voor de opleiding en ondersteuning van gebruikers op zowel Tier-1 als Tier-2 (1.425.000 euro); (Met dit bedrag kunnen aan de vijf Vlaamse universiteiten in totaal het equivalent van 15 VTE's gesubsidieerd worden.)
- de energiekosten van de Tier-1 (216.000 euro) en een deel van de energiekosten van de tweede Tier-1 (180.000 euro);
- investeringen en werkingskosten voor de Tier-2 infrastructuur (2.845.800 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 de Tier-2.)

In onderstaande tabel wordt een overzicht gegeven van de verdeling van deze bedragen over de vijf Vlaamse universiteiten.

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

Overzicht middelen Tier-1 en Tier-2 in 2016

Rubriek	KU Leuven	UHasselt	UGent	VUB	UAntwerpen	Totaal	Tier-1a	Tier-1b
Personeel in FTE	5	1	4	2	3	15	2	2
Personeel in Euro	€ 475.000	€ 95.000	€ 380.000	€ 190.000	€ 285.000	€ 1.425.000	€ 190.000	€ 190.000
Herculesleu-tel 2014	0,4316	0,0324	0,3187	0,1008	0,1165	1,000		
CAPEX en werking Tier-2	€ 1.228.247	€ 92.204	€ 906.956	€ 286.857	€ 331.536	€ 2.845.800		
werking Tier-1 (energie)							€ 216.000	€ 180.000
Belnet-connectie	€ 35.000							
<b>totaal 2016</b>	<b>€ 1.738.247</b>	<b>€ 187.204</b>	<b>€ 1.286.956</b>	<b>€ 476.857</b>	<b>€ 616.536</b>	<b>€ 4.270.800</b>	<b>€ 406.000</b>	<b>€ 370.000</b>



# De tweede Vlaamse Tier-1

De eerste Vlaamse Tier-1 supercomputer werd in de eerste helft van 2013 in productie genomen en was dringend aan vervanging toe.

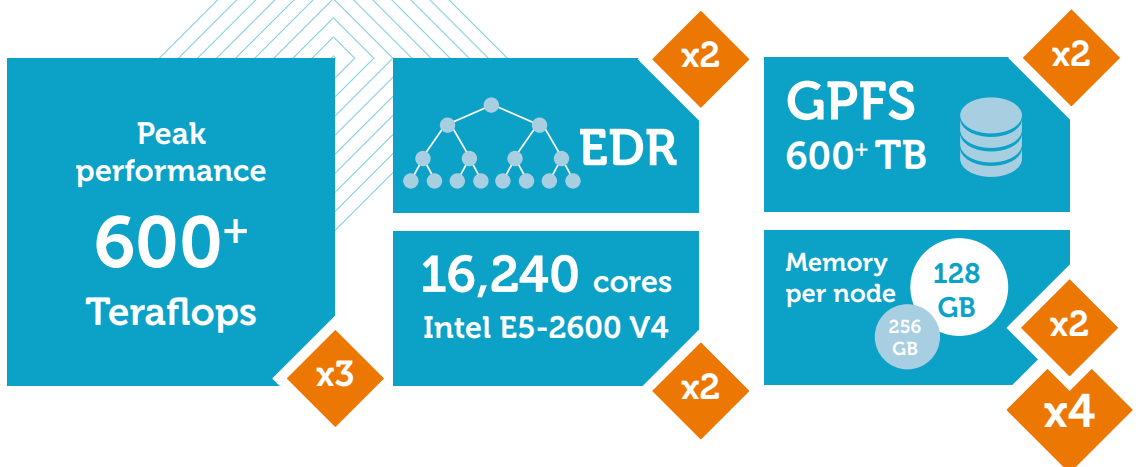
De tweede Vlaamse Tier-1 supercomputer werd eind oktober 2016 ingehuldigd in het datacenter van de KU Leuven en is goed voor een investering van 5,5 miljoen euro. Via een openbare aanbesteding werd de firma NEC geselecteerd om de machine te bouwen.

De tweede supercomputer heeft een rekenkracht van meer dan 600 TFlop/s, dit komt overeen met 2000 snelle PC's. Daarmee heeft de machine drie keer zoveel capaciteit als de eerste Vlaamse supercomputer. De tweede Tier-1 supercomputer werd uitgerust met de nieuwste Intel processoren en ook het geheugen, het interne netwerk en de opslagcapaciteit werden aangepast opdat de supercomputer efficiënt complexe berekeningen kan uitvoeren. De nieuwe supercomputer was op het moment van de inauguratie in oktober 2016 één van de 200 snelste computers ter wereld.

De supercomputer in Leuven zal onderzoek ondersteunen naar bijvoorbeeld hernieuwbare energiebronnen, de ontwikkeling van nieuwe materialen of nieuwe medicijnen. De supercomputer zal wetenschappers ook toelaten om bijvoorbeeld nog nauwkeuriger klimaatmodellen te berekenen of om het klimaat op andere planeten in kaart te brengen. Ook voor fundamenteel onderzoek, belangrijk op middellange termijn, opent de supercomputer nieuwe horizons.

Vlaams minister Philippe Muylers: *“De Vlaamse Regering wil consequent inzetten op nieuwe investeringen in onderzoek en innovatie. Wij behoren met onze onderzoeksinstellingen tot de top van de wereld. Alleen door te blijven investeren, kunnen we die positie behouden en versterken. De supercomputer kan in de meest diverse domeinen een cruciale rol spelen. Ik ben dan ook trots dat de Vlaamse overheid hier haar rol ten volle speelt.”*

## From Tier-1a to Tier-1b



# 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 tevens de financiering van de huisvesting voor haar rekening. Het onderhoudscontract op deze machine liep af in november 2016, en deze supercomputer werd gede-commissioneerd op 31 december 2016, enkele maanden nadat de nieuwe Tier-1 supercomputer aan KU Leuven in productie ging. Alle gebruikers van de 'oude' Tier-1 werden tijdig en meermaals geïnformeerd over de 'end of term' regelingen en konden nog gedurende de eerste twee maanden van 2017 hun data van de storage halen vooraleer ook deze inactief werd.

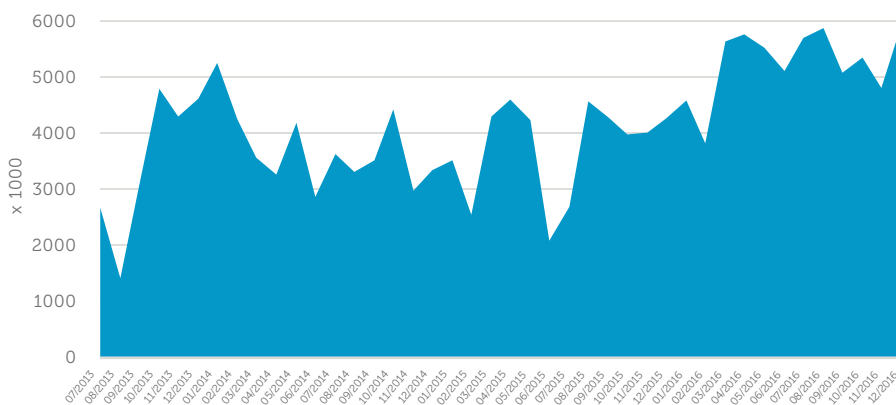
Na een kostenbatenanalyse werd besloten om de nog bruikbare hardware van deze machine te herconfigureren als on-demand cluster, waarbij evenwel niet dezelfde service level als een volwaardige Tier-1 of Tier-2 cluster kan worden

geboden. Delen van de hardware kunnen, per chassis, worden gehuurd tegen betaling door onderzoekers van Vlaamse kennisinstellingen en eventueel industrie. Dit vereist uitvoerig reconversiewerk, waarmee zal aangevangen worden eenmaal alle onderzoekers hun data van de storage hebben gehaald. Verdere gebruiks- en verhuurmodaliteiten zullen worden bepaald nadat de reconversie is voltooid.

Het VSC heeft een fors leertraject doorlopen bij de exploitatie van deze machine. UGent nam weliswaar alle technische onderhouds- en aanpassings aspecten voor rekening, maar alle VSC sites werkten intens samen om een allocation board aan te stellen, om een projectaanvraag procedure en -reglement op te stellen en meermaals bij te sturen, om gebruikers op te leiden en te stimuleren om Tier-1 projecten te initiëren, ... Mede dankzij deze leerschool kon de overdracht van de 'oude' naar de 'nieuwe' Tier-1, eind 2016, zeer vlot verlopen.

Vlaanderen's eerste Tier-1 machine werd ook zeer goed gebruikt. Onderstaande grafiek geeft een beeld van het gebruik sinds de machine in productie ging. In totaal liepen er 144 projecten op deze Tier-1, goed voor 7.163.200 core-dagen rekentijd. Dit zou overeenkomen met ruim 9.800 jaar rekenen op een doordeweekse laptop (met 2 cores). Op deze Tier-1 werd tevens voor 435.000 core-dagen rekentijd gereser-

### Gebruikte CPU core uren op Tier-1 @ UGent



Afbeelding 1

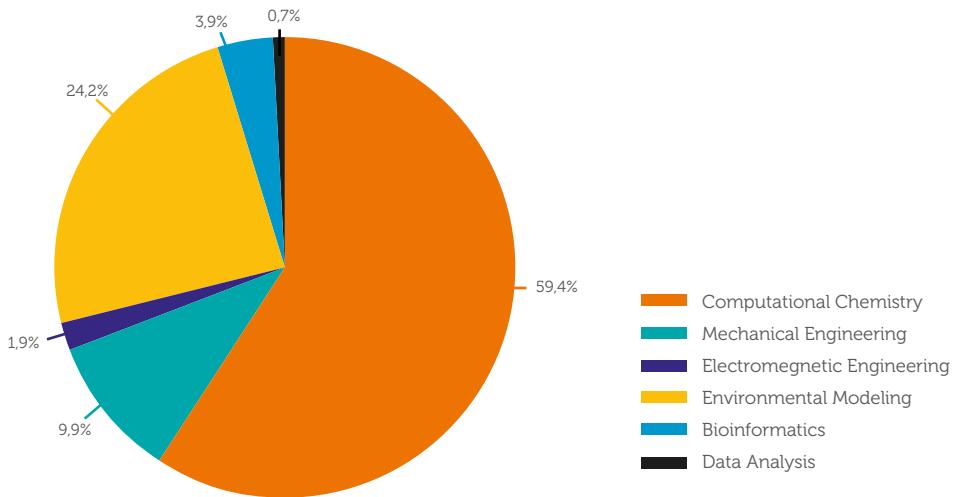
Gebruikte CPU core uren op Tier-1 @ UGent

veerd voor bedrijven, binnen de sectoren van hernieuwbare energie, farmaceutica, medische technologie, elektrotechniek en materiaaltechnologie.

De aanwezigheid van een Tier-1 systeem heeft dan ook een mind-shift van onze Vlaamse onderzoekers in academia en industrie teweeggebracht. Dankzij een Tier-1 durven ze nog meer 'out-of-the-box' te denken en grotere uitdagingen aangaan in het wetenschappelijk onderzoek of binnen R&D.

Zoals blijkt uit onderstaande grafiek, was moleculaire modellering veruit het meest populaire wetenschapsdomein in de onderzoeksprojecten die op Tier-1 muk zijn afgewerkt, gevolgd door klimaatmodellering.

### Gebruikte rekentijd op Tier-1 @ UGent (muk) per wetenschapsgebied



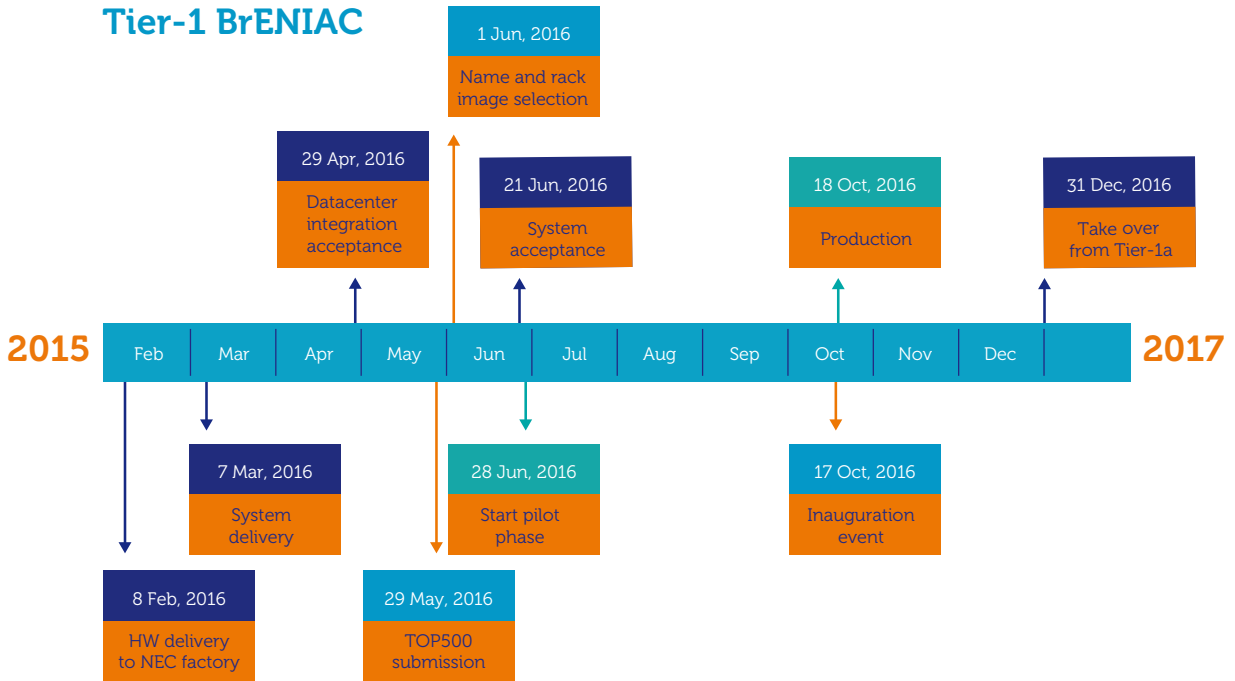
Afbeelding 2  
Gebruikte rekentijd op Tier-1 @ UGent (muk) per wetenschapsgebied

# Tier-1 aan de KU Leuven

De implementatie van de tweede Tier-1 was een belangrijk project in 2016. Het werd opgedeeld in verschillende fases:

- installatie en acceptatie
- testperiode
- productiefase

## Tier-1 BrENIAC



### Installatie en implementatie

De componenten van de machine werden afgeleverd in het datacenter op 7 maart 2016. In de eerste fase werden aanpassingen uitgevoerd aan het datacenter om de koeling en electriciteitsvoorzieningen af te stemmen op de nieuwe Tier-1. Op 29 april 2016 waren alle werken voltooid en geaccepteerd. Ondertussen was de opbouw van de machine gestart. Nadat de basissysteemsoftware geïnstalleerd was, werd de machine volledig geïntegreerd in de VSC HPC-omgeving. Vervolgens werden testen uitgevoerd conform het lastenboek. Er kon tijdig een Linpack benchmark uitgevoerd worden om de machine officieel te registreren in de Top 500. De machine behaalde plaats 196 met een score van 548 TFlop/s. Op 21 juni 2016 werd het systeem geaccepteerd.

Deze nieuwe Tier-1 heeft het dubbele aantal rekeneenheden ten opzichte van de vorige, maar hiermee kunnen wel 3 keer zoveel berekeningen uitgevoerd worden. Ook het snellere netwerk (maal 2) zorgt ervoor dat meer parallel rekenwerk kan verzet worden.

### Testperiode

Om de gebruikers kennis te laten maken met de nieuwe supercomputer en om deze ook te testen in een productie-benaderende omgeving werd een pilootfase gestart. Alle Tier-1 projecten die actief waren op de eerste Tier-1 supercomputer in juni 2016, kregen 1000 nodedagen toegekend op de nieuwe Tier-1. Daarnaast konden alle onderzoekers via een open call een project indienen om rektijd te krijgen op de nieuwe Tier-1 met als

doel software installaties te controleren en om benchmarks uit te voeren ter voorbereiding van nieuwe Tier-1 projectaanvragen. 23 projecten kregen hierdoor rekentijd toegekend. De deelnemers aan de pilootfase kwamen uit verschillende onderzoeksdomeinen, wat een goede afspiegeling was van het werkelijk gebruik.

Ter voorbereiding van de pilootfase werden infosessies georganiseerd aan alle universiteiten. De infosessie introduceerde BrENIAC voor het eerst aan alle VSC-gebruikers. De architectuur en configuratie van de machine werd toegelicht wat belangrijk was om een goede migratie van het werk op de eerste Tier-1 naar de tweede Tier-1 te brengen. Vermits binnen VSC gewerkt wordt met een uniforme gebruikersomgeving verliep de omschakeling vlot. Tijdens de pilootfase werd de meest gebruikte software geïnstalleerd en getest en werden kleine configuratie-aanpassingen nog doorgevoerd. Globaal gezien was het systeem stabiel en klaar voor productie. Sommige pilootgebruikers rapporteerden prestatiewinsten tot 30% of codes die op de snellere infrastructuur ook op een groter aantal cores (tot het dubbele) nog efficiënt schaalden.

### Productieperiode

Op 17 oktober 2016 werd de machine officieel ingehuldigd in het bijzijn van Minister Muylers. De inauguratie kreeg de nodige pers aandacht, waardoor HPC en VSC ook bij het grote publiek in de belangstelling stond.

De inauguratie luidde het einde in van de pilootfase en het begin van de productiefase van BrENIAC. De 3de oproep voor projecten voor rekentijd van 2016 was de eerste die volledig op BrENIAC toegekend werd. Er werden 27 projecten ingediend waarin een totaal van 90.000 nodedagen werd aangevraagd. Voor de eerste aanvraagronde op de nieuwe supercomputer- de derde call in 2016- waren 64.000 nodedagen beschikbaar. Dit betekende dat reeds van bij de eerste oproep projecten werden afgewezen.

Voor de volgende aanvraagronde ligt de beschikbare rekentijd lager, vermits er dan telkens projecten actief zijn van 2 aanvraagronde. Dit betekent dat in de toekomst nog een hoger percentage Tier-1 projectaanvragen geweigerd zal worden.

De bezetting van de machine toont aan dat de volle capaciteit reeds in gebruik is (cf afbeelding 4). De nieuwe investering wordt ten volle benut. De stijging in het aantal aangevraagde

projecten en aangevraagde rekentijd doet nu reeds vermoeden dat de onderzoekers nog niet verzadigd zijn.

## Rekenen op de Tier-1

### Toekennen rekentijd Tier-1

Er zijn een aantal manieren waarop onderzoekers rekentijd op Tier-1 kunnen bekomen, zoals gestipuleerd in het reglement.

Voor onderzoekers verbonden aan een universiteit, een SOC of een gelijkaardige onderzoeksinstelling 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 van een volwaardige projectaanvraag
  - Gratis
- Project access
  - Voor allocaties van 500-5000 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, welke wetenschappelijke resultaten werden bekomen met vorige Tier-1 project allocaties.
  - Projectaanvragen kunnen steeds ingediend worden, maar worden op 3 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. Hierin zetelen vier buitenlandse deskundigen:

- Walter Lioen, voorzitter (SURFsara, Nederland);
- Derek Groen (Computer Science, Brunel University London, UK);
- Sadaf Alam (CSCS, Zwitserland);
- Nicole Audiffren (Cines, Frankrijk).

Mevrouw 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.

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

Voor onderzoekers uit de industrie bestaan eveneens twee toegangskanalen om Tier-1 rekentijd te bekomen:

- 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 een overeenkomst sluiten met de Tier-1 huisvestende instelling en FWO om rekentijd af te nemen
  - Full cost aanrekening van verbruikte rekentijd en gebruikte storage

De tarieven waaraan industriële gebruikers Tier-1 rekentijd kunnen kopen, werden vastgelegd in het Toegangsreglement 2016. Daarnaast kunnen onderzoekers uit de industrie ook toegang krijgen tot Tier-1 in het kader van een onderzoeksproject in samenwerking met een publieke onderzoeksinstelling zoals bv. een Vlaamse universiteit.

## Tier-1 Starting grants/exploratory access

In 2016 werden 10 Starting Grants toegekend en liepen er 4 Exploratory Access projecten.

### Starting Grants 2016

Jos Teunissen	VUB	Computational Chemistry
Wilfried De Corte	UGent	Data Analysis
Tom Ruttink	ILVO	Bioinformatics
Wim Delva	UGent	Bioinformatics
Charlotte Vets	UAntwerpen	Computational Chemistry
Stefan Knippenberg	UHasselt	Computational Chemistry
Tatiana Woller	VUB	Computational Chemistry
Laura van Bergen	VUB	Computational Chemistry
Ehsan Moravveji	KU Leuven	Environmental Modeling
Jose Guillermo Rivera de la Cruz	UGent	Computational Chemistry

### Exploratory Access 2016

FEOPS	Medical engineering	Computational Chemistry
Bekaert nv	Mechanical engineering	Data Analysis
Siemens	Mechanical engineering	Bioinformatics
Umicore	Materials Design	Bioinformatics

## Goedgekeurde Tier-1 aanvragen

Hieronder worden alle goedgekeurde aanvragen van 2016 opgelijst, gegroepeerd per evaluatiemoment.

1 februari 2016

Aanvrager	Onthaalinstelling	Titel	Wetenschapsgebied	Toegekende rekentijd (nodedagen)	Toegekende storage SCRATCH (TB)
Reyniers Pieter	UGent	Computational Fluid Dynamics based run length simulations of enhanced 3D reactors (I)	Mechanical Engineering	4.000	2
Michael Sluydts	UGent	Shape tuning of CdSe nanostructures by ab initio determination of the anisotropic growth mechanism	Computational Chemistry	4.752	0,602
Simon Bailleul	UGent	Ab initio molecular dynamics study on the role of water in the reaction mechanism during methanol conversion in H-SAPO-34	Computational Chemistry	4.880	0,656
Thierry De Meyer	UGent	pKa calculation of Bromothymol Blue and modified derivatives	Computational Chemistry	3.180	0,047
Nasrin Sarmadian	UAntwerpen	The role of impurities in the gas sensing mechanism of the ZnO (10-10) surface	Computational Chemistry	4.173	0,264
Chiara Caratelli	UGent	Investigating active sites in hydroxylated and dehydroxylated UiO-66 for catalysis of Oppenauer-type oxidation	Computational Chemistry	2.110	0,334
Kristof De Wispelaere	UGent	Dynamical first principle modeling of ethene oligomerization in Ni-SSZ-24	Computational Chemistry	3.232	0,021
Wilfried De Corte	UGent	Robustness and Sensitivity of Pareto-optimal Selection Designs	Data Analysis	3.000	0,5
Giovanni Lapenta	KU Leuven	Kinetic SimulationS of the Magnetospheres of Mercury and the Earth (KISSMME)	Environmental Modeling	5.000	1
Piet Termonia	UGent	UGent EURO-CORDEX climate runs	Environmental Modeling	4.500	32
Pieter Verhees	UGent	Development of a one dimensional model for the evaporation of hydrocarbons based on 3D CFD simulations	Mechanical Engineering	1.500	0,9
Sam De Waele	UGent	Error estimates for ab initio predictions of surface energy and work function	Computational Chemistry	1.165	2,5
Geoffrey Pourtois	IMEC	Modeling of quantum transport of two-dimensional nanoelectronic devices	Computational Chemistry	1.000	0,281
Johan Meyers, Wim Munsters	KU Leuven	Optimal control of wind farm boundary layers	Environmental Modeling	4.320	9,21
Johan Meyers, Dries Allaerts	KU Leuven	Simulation of shallow and strongly stratified wind-farm boundary layers	Environmental Modeling	4.960	1,3
Oriana De Vos	UGent	Study of oxygen diffusion through cell membranes	Computational Chemistry	1.125	0,54
Matthias Vandichel	UGent	Unraveling promoting elements in selective CO-oxidation	Computational Chemistry	3.744	1,488

6 juni 2016

Aanvrager	Onthaalinstelling	Titel	Wetenschapsgebied	Toegekende rekentijd (nodedagen)	Toegekende storage SCRATCH (TB)
Knippenberg Stefan	UHasselt	Atomistic picture of fluorescent probes into lipid bilayer membranes: probing lipid rafts through (non-) linear absorption spectroscopy	Computational Chemistry	1.040	0,52
Vanpoucke Danny	UHasselt	Breathing behavior of flexible Metal-Organic Frameworks with MIL-47/53 topology	Computational Chemistry	4.970	0,48
Pourtois Geoffrey	IMEC	Modeling of quantum transport of two-dimensional low power nanoelectronic devices	Computational Chemistry	4.800	0,281
Amini Mozhgan	UAntwerpen	Interaction of halides with Au-surfaces	Computational Chemistry	4.105	0,2
Sarmadian Nasrin	UAntwerpen	Project extension: The role of impurities in the gas sensing mechanism of the ZnO (10-10) surface	Computational Chemistry	4.528	0,306
Dabaghmanesh Samira	UAntwerpen	Cr2O3 as a p-type transparent conducting oxide: alloying with sulfur and selenium	Computational Chemistry	3.999	<b>0,2</b>
Jaeken Jan	UGent	Ab initio prediction of temperature-dependent acoustic anisotropy of iron in the Earth's inner core	Computational Chemistry	3.871	1
Saniz Rolando	UAntwerpen	Electronic properties of defects at the surface of CuInSe2	Computational Chemistry	3.024	0,018
Piet Termonia	UGent	UGent EURO-CORDEX climate runs	Environmental Modeling	3.600	34
De Wispe-laere Kristof	UGent	Dynamical first principle modeling of zeolite dealumination in H-SSZ-13	Computational Chemistry	3.624	0,156
Cnudde Pieter	UGent	DFT study of reaction paths in zeolite-catalyzed 2-hexene cracking	Computational Chemistry	4.536	1
Xia Chun	KU Leuven	Solar prominence eruption and the blending of solar wind and magnetosphere	Environmental Modeling	5.000	4
Vets Charlotte	UAntwerpen	Chirality controlled growth of carbon nanotubes on bi-metallic catalysts: the role of thermodynamics	Computational Chemistry	4.176	1
De Vos Arthur	UGent	Defect engineering in UiO-66: How linker defects affect the electronic structure.	Computational Chemistry	4.116	6,468
Reyniers Pieter	UGent	Computational Fluid Dynamics based run length simulations of enhanced 3D reactors (II)	Mechanical Engineering	4.000	2
Meyers Johan	KU Leuven	Controller design for wind-farm boundary layers	Mechanical Engineering	4.960	1,12
Meyers, Johan	KU Leuven	Simulation of fully finite wind-farm boundary layers	Mechanical Engineering	5.000	1,66
Lambrechts Diether	KU Leuven	Optimization of long-read sequencing mapping to discover biomarkers for cancer immunotherapy.	Bioinformatics	4.500	10
Vandenbrande Steven	UGent	Insight into the stacking of 2D COFs from ab initio and force-field calculations	Computational Chemistry	2.200	0,065
Moors Samuel	VUB	Model-guided design of novel cyclic peptidomimetics as binder of the human $\alpha_2$ adrenergic receptor	Computational Chemistry	1.892	0,115



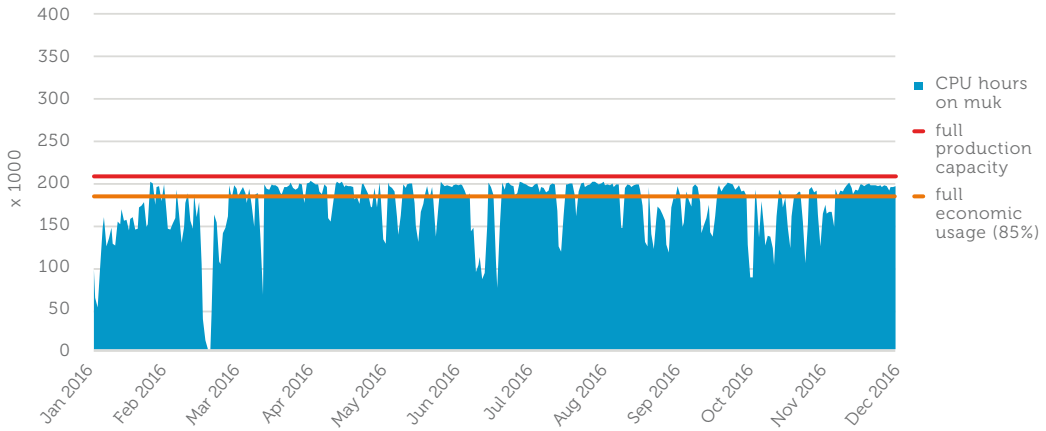
3 oktober 2016

Aanvrager	Onthaalinstelling	Titel	Wetenschapsgebied	Toegekende rekentijd (nodedagen)	Toegekende storage SCRATCH (TB)
Wilfried de Corte	UGent	Department of Data Analysis, Faculty of Psychology and Educational Sciences	Robustness and Sensitivity of Pareto-optimal Selection Designs under Various Types of Candidate Withdrawal	3255	0,025
Giovanni Lapenta and Jorge Amaya	KU Leuven	Centrum voor Plasma-Atofysica, Department Wiskunde	xPic3D : Next generation Particle-in-Cell algorithms for exascale HPC architectures	1900	1
Kurt Lejaeghere, Stefaan Cottenier and Veronique Van Speybroeck	UGent	EA17 / Center for Molecular Modeling	Assessing the accuracy of an efficient meta-GGA functional for property predictions of elemental solids	640	0,2
Michael Sluydts, Veronique Van Speybroeck and Stefaan Cottenier	UGent	Center for Molecular Modeling	High-throughput screening of an unknown quaternary crystal space	4056	0,86
Nasrin Sarmadian and Dirk Lamoen	UAntwerpen	EMAT / Departement Fysica	The role of humidity in the CO gas sensing mechanism of the clean and impurity modified ZnO surfaces	2374	0,204
Ehsan Moravveji and Conny Aerts	KU Leuven	Institute of Astronomy	Asteroseismic Grid for Massive Pulsating and Rotating Stars	3719	11
Krisztina Feher	UGent	NMRstr group, Department of Organic and Macromolecular Chemistry	Free energy of binding calculations on the complexes formed by peptidoglycan based immunostimulators and the Macrophage Mannose Receptor	100	0,18
Dimitrios Millas, Bart Ripperda and Rony Keppens	KU Leuven	CmPA, Department of Mathematics	Modeling outflows and particle evolution in relativistic astrophysics, solar eruptive flares, and solar wind-magnetosphere interaction	5000	6
Geoffrey Pourtois	IMEC	Modeling Simulation & Physics (MSP)/NCAIS/UPM/PT	Modeling of the impact of non-idealities on the performances of two-dimensional low power nanoelectronic devices	3554	0,16
Ruben Demuy-nck, Veronique Van Speybroeck and Jelle Wieme	UGent	Center for Molecular Modeling	Construction of ab initio free energy profile for metal-organic frameworks	4200	0,14
Pieter Reyniers, David Van Cauwenberge, Yu Zhang, Laurien Vandewalle and Jens Dedeyne	UGent	Department of Chemical Engineering and Technical Chemistry (EA12) Laboratory for Chemical Technology	Computational Fluid Dynamics based run length simulations of enhanced 3D reactors (III)	4000	1
Julianna Hajek, Kristof De Wispe-laere, Chiara Caratelli and Veronique Van Speybroeck	UGent	EA17, Center for Molecular Modeling	Ab initio umbrella sampling simulations of dehydration of UiO-66	3972	0,05
Jelle Wieme, Steven Vandenbrande and Veronique Van Speybroeck	UGent	EA17, Center for Molecular Modeling	Computational exploration of the free energy profile of guest-free M(bdp) (M=Co,Fe) (bdp2-=1,4-benzenedipyrazolate)	2940	0,52
Simon Bailleul, Pieter Cnudde and Veronique Van Speybroeck	UGent	EA17, Center for Molecular Modeling	Benchmark study of ab initio molecular dynamics simulations for the methylation of HMB	4812	0,05

Wim Munters and Johan Meyers	KU Leuven	Turbulent Flow Simulation & Optimization (TFSO) Research Group Mechanical Engineering Department	Optimal control of Lillgrund wind farm	4300	2.31
Dries Allaerts and Johan Meyers	KU Leuven	Turbulent Flow Simulation & Optimization (TFSO) Research Group Mechanical Engineering Department	Simulation of the GA-BLS3 diurnal cycle	4320	1.05
Piet Termonia, Steven Caluwaerts, Pieter De Meutter, Michiel Vanginderachter, Rozemien De Troch, Rafiq Hamdi and Lesley De Cruz	UGent	Department Physics and Astronomy	CORDEX.be high-resolution climate runs with ALARO-0	1400	16
Sam De Waele and Stefaan Cottenier	UGent	Center for Molecular Modeling (CMM)	Error estimates for ab initio predictions for point defects in the Fe-N system	3022	2.902
Jayson Gutiérrez Betancur and Steven Maere	UGent VIB	Evolutionary Systems Biology lab, Dept. of Plant Biotechnology and Bioinformatics (Ghent University) / Plant Systems Biology Dept. (VIB)	Modelling gene regulatory network evolution through gene duplication from mechanistic perspective	3240	0.18
An Ghysels and Oriana De Vos	UGent	Center for Molecular Modeling	Molecular dynamics simulations of oxygen transport through membranes	700	0.54
Rolando Saniz and Dirk Lamoen	UAntwerpen	Condensed Matter Theory / Departement Fysica	Finite size corrections to charged defect formation energies	2449	0.018

## Grafieken over het gebruik Tier-1

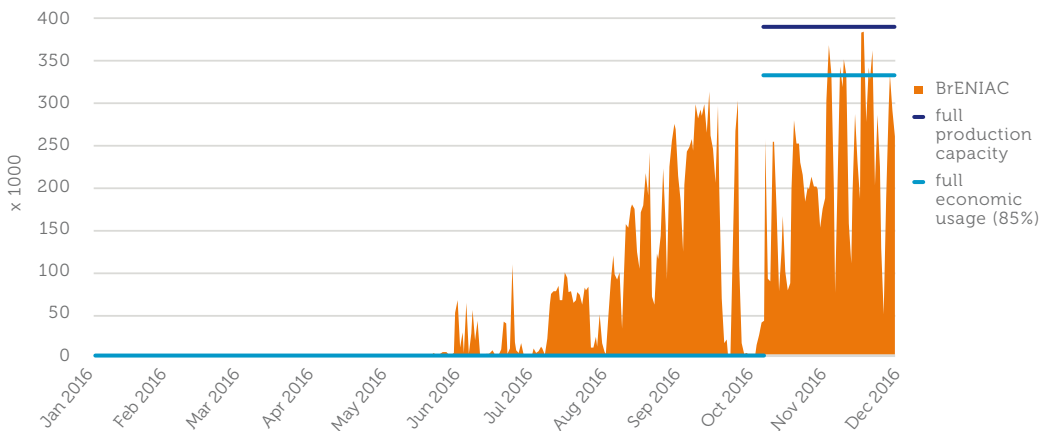
### Gebruikte CPU core uren op Tier-1 muk (UGent)



Afbeelding 3

Gebruikte CPU core uren op Tier-1 muk (UGent)

### Gebruikte CPU core uren op Tier-1 BrENIAC (KU Leuven)



Afbeelding 4

Gebruikte CPU core uren op Tier-1 BrENIAC (KU Leuven)

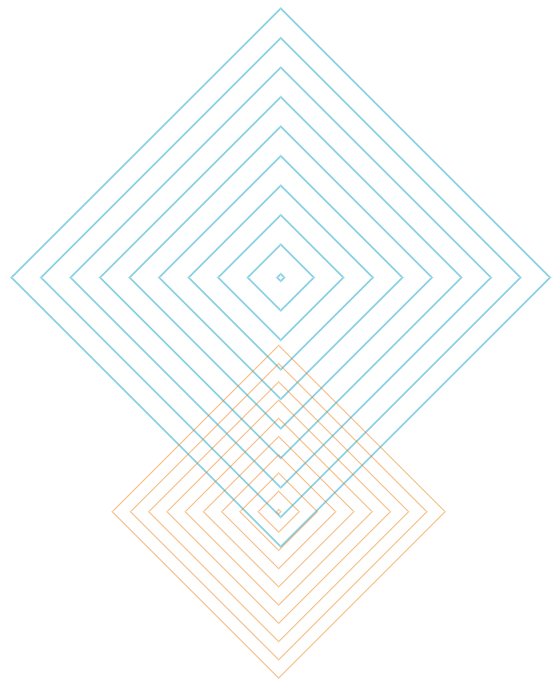
Bovenstaande grafieken bieden een beeld op de gebruikshistoriek van beide Tier-1, muk en BrENIAC in 2016. In beide grafieken is telkens de theoretische maximale capaciteit vermeld (full production capacity), maar 85% van dat

aantal wordt beschouwd als 'volledig economisch' gebruik van de cluster.

Tier-1 muk werd in 2016 zeer goed gebruikt, met een gemiddelde bezettingsgraad van 85%

en uitschieters tot zelfs 99%. Schommelingen in gebruik zijn nog steeds zichtbaar, afhankelijk van de rekeninspanningen van de gebruikers, maar geringe tijdelijke bezettingsgraden bleven uit. Het dal in de periode 22-26 februari 2016 reflecteert een laatste reeks noodzakelijke onderhoudswerkzaamheden, tijdens dewelke de machine even werd stilgelegd.

De piloot fase van Tier-1 verliep van juli tot eind oktober. Na de beëindiging is het systeem leeggelopen. De productieperiode begon dan met de projecten die werden toegekend in de 3de allocatie ronde van 2016. Op dit moment waren beide Tier-1 clusters actief. Na een tweetal weken bereikte het systeem ook al een bezettingsgraad van meer dan 80%. Het toont aan dat alle onderzoekers meteen goed gestart zijn op het systeem, de softwarestacks beschikbaar waren door de testen in de pilootfase en er geen technische problemen opgetreden zijn.



# Tier-2 infrastructuur

## Beschikbare infrastructuur

In deze sectie wordt een overzicht gegeven van de Tier-2 infrastructuur die binnen de verschillende Vlaamse universiteiten beschikbaar is. Het gebruik ervan wordt eveneens geïllustreerd.

### KU Leuven en Universiteit Hasselt

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

De infrastructuur bestaat uit:

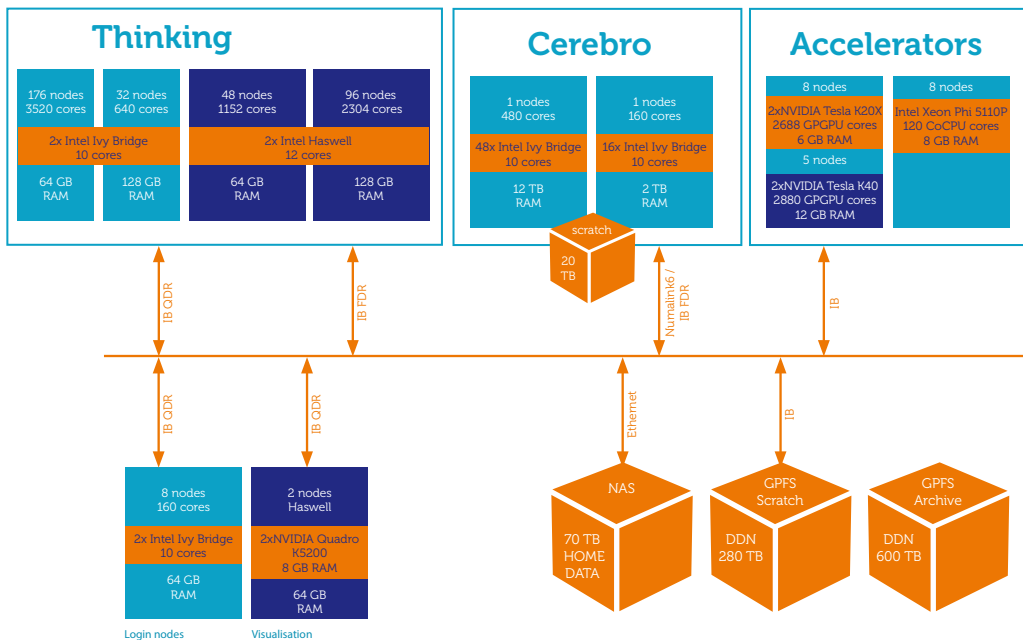
- 2 clusters, 7 partities
- 244 TF
- 8256 CPU / 71808 accelerator cores
- 44 TB geheugen

De thin node cluster *Thinking* werd in maart 2016 uitgebreid met 96 nodes in de Haswell sectie. Dit verhoogde de capaciteit met 90 TFlops.

In 2016 werd begonnen met de vernieuwing van de gedeelde GPFS scratch infrastructuur. Dit verliep in verschillende fases. Het doel was om:

- Vervanging van het DDN 10K-systeem dat aan het einde van zijn levensduur was gekomen
- Verhoging van de capaciteit om ook een toekomstige cluster mee te kunnen bedienen
- archiefsysteem te ontkoppelen uit het GPFS-clusterfilestelsel om zo meer flexibiliteit te bekomen.

Dit moet toelaten om in de toekomst het archiefsysteem beschikbaar te houden wanneer er werken zijn aan het GPFS-scratchfilestelsel en geeft ook meer mogelijkheden om het archiefsysteem op andere computers aan te bieden.



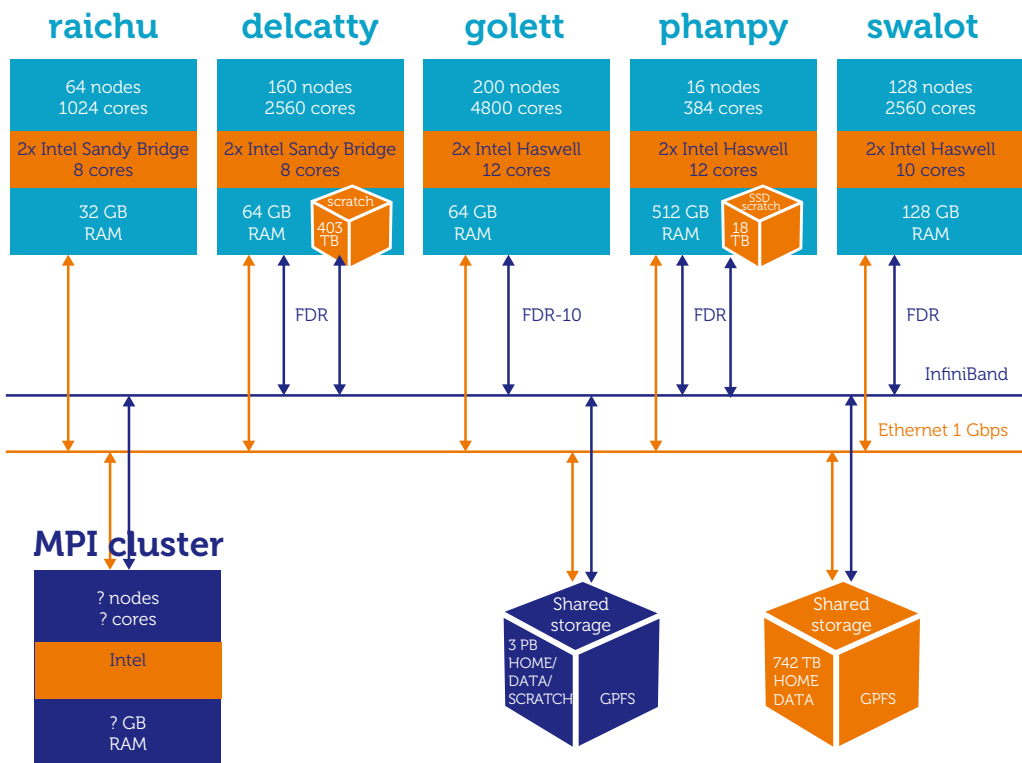
Afbeelding 5 - Tier-2 infrastructuur KU Leuven

## Universiteit Gent

UGent investeert reeds sedert meerdere jaren in de uitbouw van een performante infrastructuur. Deze bestaat thans uit:

- 5 clusters
- 226 TF
- 11.328 CPU cores
- 50 TB geheugen

De Tier-2 infrastructuur is opgebouwd uit verschillende clusters, in functie van specifieke kenmerken. In de loop van 2016 ging cluster *swalot* (aangekocht bij Dell) in productie, een nieuwe MPI-cluster om multi-node jobs te faciliteren. In de loop van 2017 zal een nieuwe shared storage (t.b.v. 3 PB) in productie worden genomen. Ook zal de Tier-2 infrastructuur worden uitgebreid met een nieuwe MPI-cluster, dit met het oog op de vervanging van standaard cluster *delcatty* en cluster *raichu*.



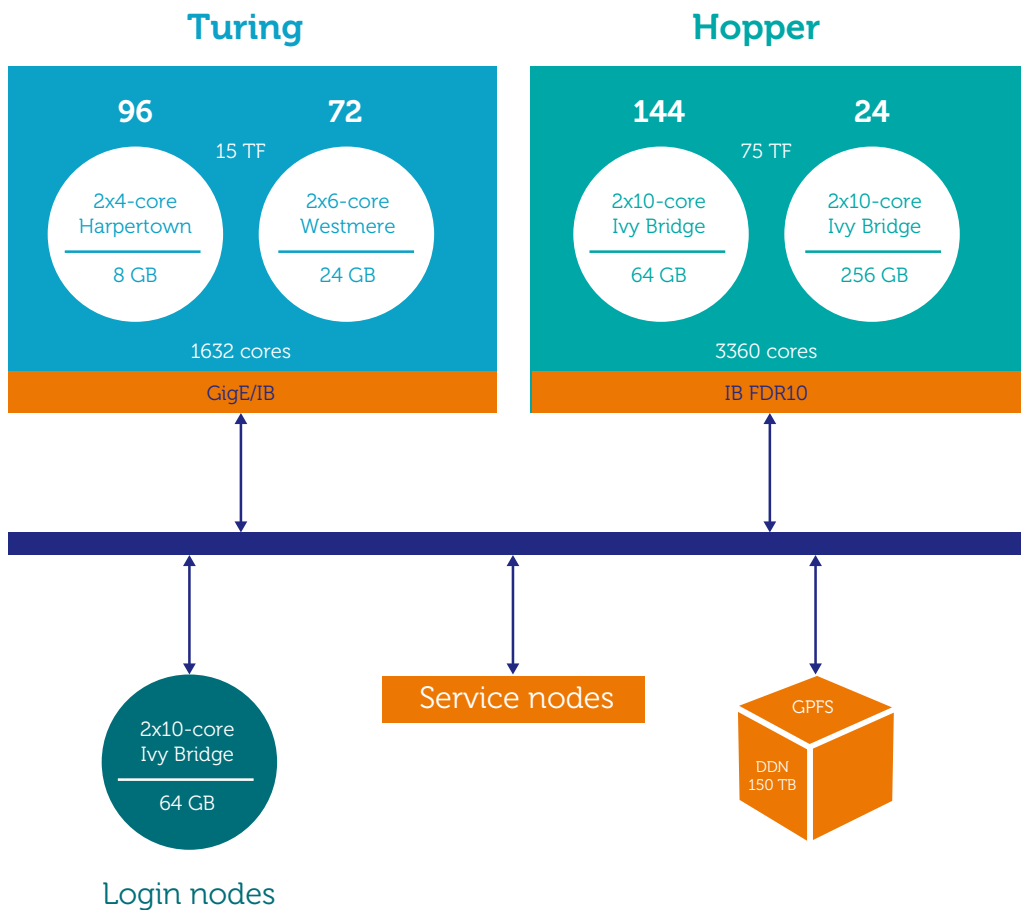
Afbeelding 6 - Tier-2 infrastructuur UGent

## Universiteit Antwerpen

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

- 2 clusters (Turing en Hopper), verdeeld in 4 partities
- 90 TF
- 4992 CPU cores
- 12 TB geheugen

In 2016 is een aanbesteding uitgeschreven voor de vervanging van de oudste van beide clusters, Turing. In de loop van 2017 wordt Leibniz, de nieuwe cluster, in gebruik genomen.



Afbeelding 7 - Tier-2 infrastructuur Universiteit Antwerpen

## Vrije Universiteit Brussel

De Tier-2-infrastructuur aan de Vrije Universiteit Brussel (VUB) ziet er als volgt uit:

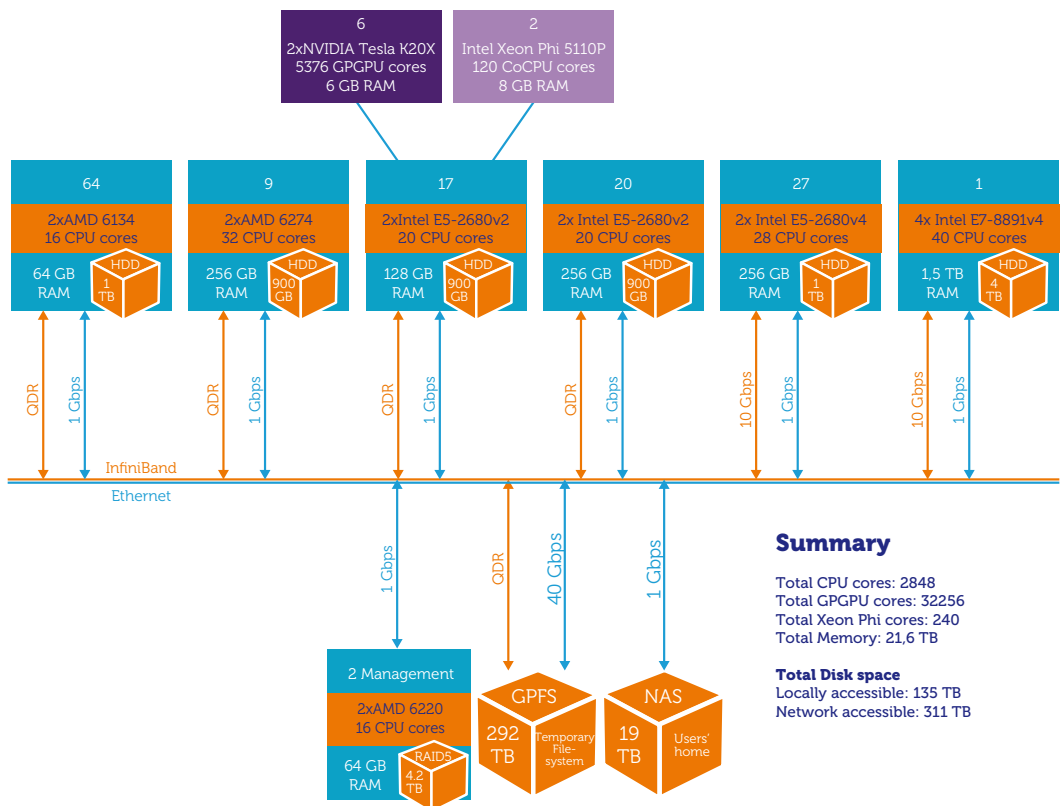
- 1 cluster / 6 partities
- 16 TF
- 2848 CPU cores / 32256 GPGPU cores
- 21.6 TB geheugen

Aan de VUB werd gekozen om uitbreidingen steeds binnen dezelfde Hydra-omgeving te doen, wat efficiënter is voor zowel de gebruikers als het management-team. Dit heeft dan wel een heterogenere cluster tot gevolg, de cluster beantwoordt op die manier aan specifieke noden van verschillende onderzoeksgroepen. In de loop van 2016 werden de oude AMD Shang-

hai nodes uit productie genomen, en werden 28 nieuwe Intel Broadwell nodes toegevoegd, waarvan 1 node een high memory node is met 1.5 Tb geheugen en 4 Tb opslagruimte, om zo te voldoen aan de vraag van gebruikers.

Naast haar eigen Tier-2-infrastructuur beheert de VUB - samen met de ULB - ook de grid-infrastructuur, die onder meer gebruikt wordt voor het verwerken van de gegevens die worden verzameld bij het uitvoeren van experimenten met de Large Hydron Collider (HPC) aan het CERN, maar ook binnen de Vlaamse onderzoeksgemeenschap gebruikt wordt.

Tenslotte beschikt de VUB over een testopstelling voor de cloud-infrastructuur.



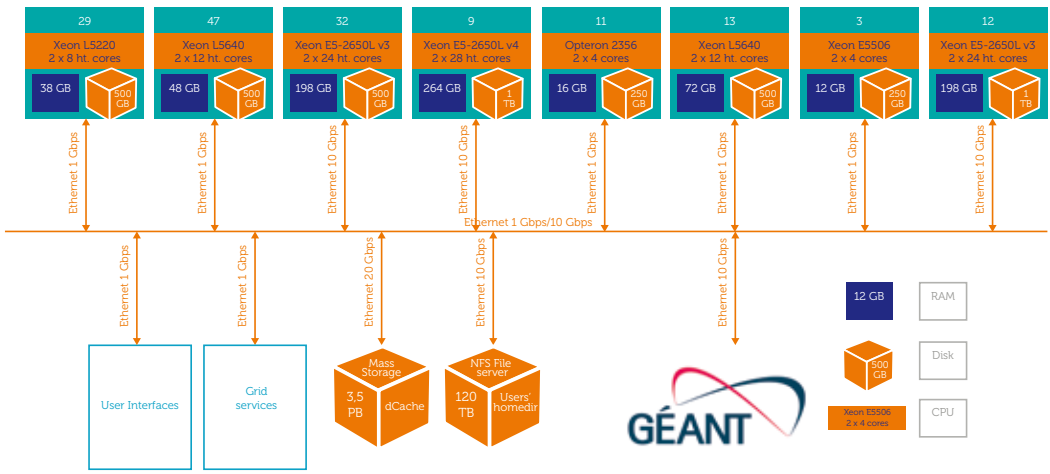
### Summary

Total CPU cores: 2848  
 Total GPGPU cores: 32256  
 Total Xeon Phi cores: 240  
 Total Memory: 21,6 TB

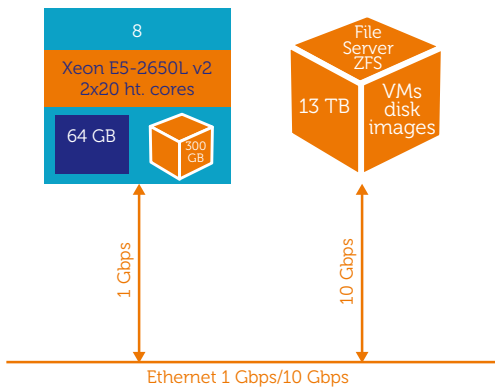
**Total Disk space**  
 Locally accessible: 135 TB  
 Network accessible: 311 TB

Afbeelding 8 - Tier-2 infrastructuur VUB





Afbeelding 9 - Grid infrastructuur VUB



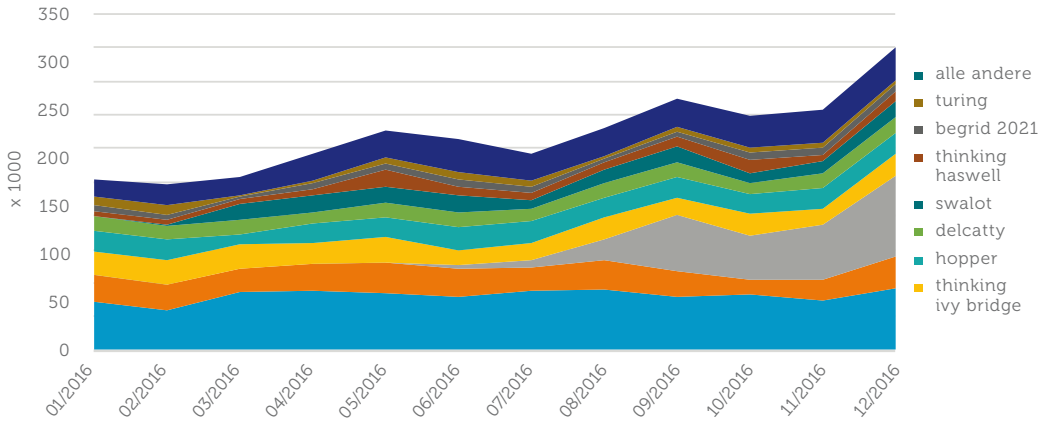
Afbeelding 10 - Cloud infrastructuur VUB

# Exploitatie en gebruik

Na de beschrijving van de infrastructuur, wordt vervolgens een overzicht gegeven van het gebruik van de Tier-1 en de Tier-2.

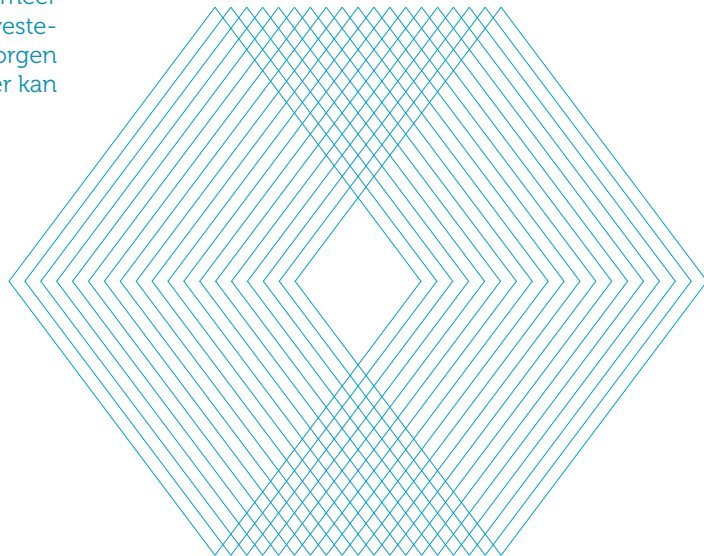
Voor het rapporteren van het gebruik beschikt VSC over een centrale XDMoD infrastructuur die alle data van de verschillende clusters verzamelt en de nodige overzichten genereert.

## CPU core uren: Alle VSC resources

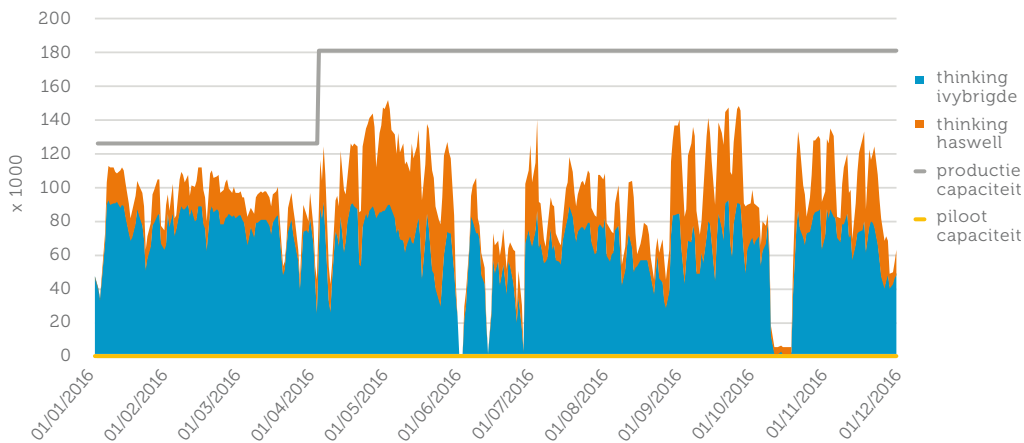


Afbeelding 11  
Gebruik uitgedrukt in core-uren van alle VSC clusters

Afbeelding 11 geeft het gecumuleerde gebruik weer van de Tier-1 (muk en BrENIAC) en Tier-2 infrastructuur. Er is een duidelijk stijging merkbaar tussen het begin en het einde van het jaar. Eind 2016 werd 78% meer rekentijd gebruikt. Dit is grotendeels veroorzaakt door het inzetten van de nieuwe Tier-1 BrENIAC. Volgend jaar zal de oude Tier-1 muk niet meer verschijnen in de rapporten, maar de investeringen op Tier-2 niveau zullen ervoor zorgen dat het totaal aantal core-uren toch verder kan blijven stijgen.



### Gebruikte CPU-uren op thin node clusters KU Leuven

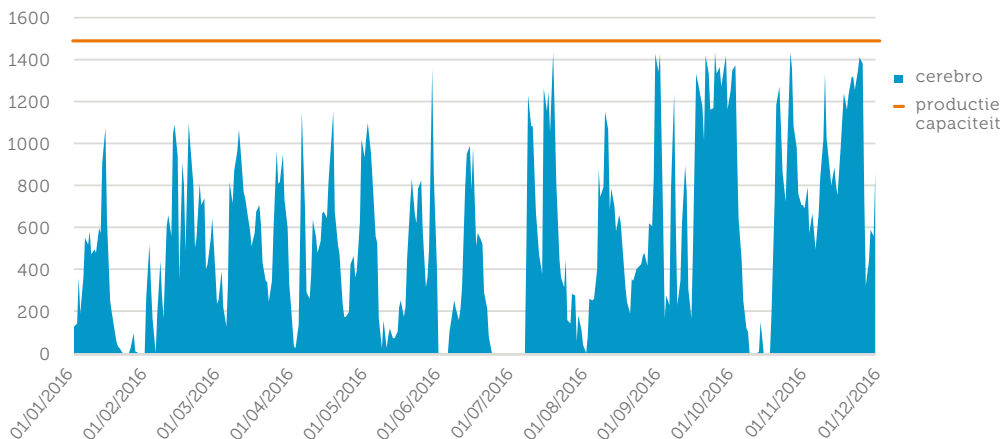


Afbeelding 12  
Gebruikte core uren op de KU Leuven

Afbeelding 12 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. De cluster bestaat uit een partitie met Ivy Bridge processoren en een partitie met Haswell processoren die in 2016 werd uitgebreid. Dit is duidelijk te zien in de stijging van gebruikte rekestijd in mei. Vanaf eind juni werden operaties uitgevoerd om de gedeelde parallelle filesystem te vervangen. In juni was er een eerste geplande downtime. Er werden echter onvoorziene com-

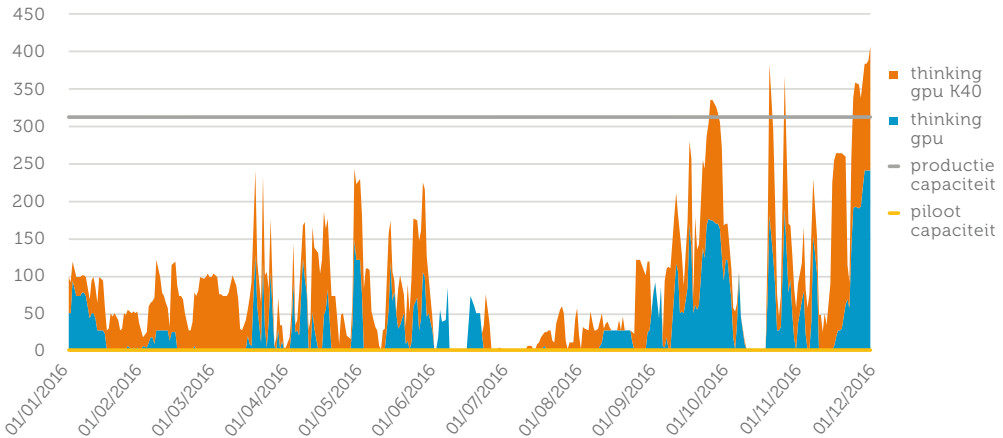
patibiliteitsproblemen vastgesteld waardoor de downtime langer duurde en de aanpassingen niet konden voltooid worden. Samen met de leverancier werd naar een oplossing gezocht. Tussen juli en oktober werd de definitieve ingebruikname voorbereid. Hiervoor werd ook een rack in de cluster gereserveerd voor testen en uitvoeren van data migraties. Midden november werd dan tijdens een langere downtime het filesystem volledig vernieuwd. Hierbij werden wel data van het bestaande filesystem bewaard, waardoor een langere periode nodig was.

### Gebruikte node-uren op shared memory cluster KU Leuven - UHasselt



Afbeelding 13  
Gebruik van shared memory

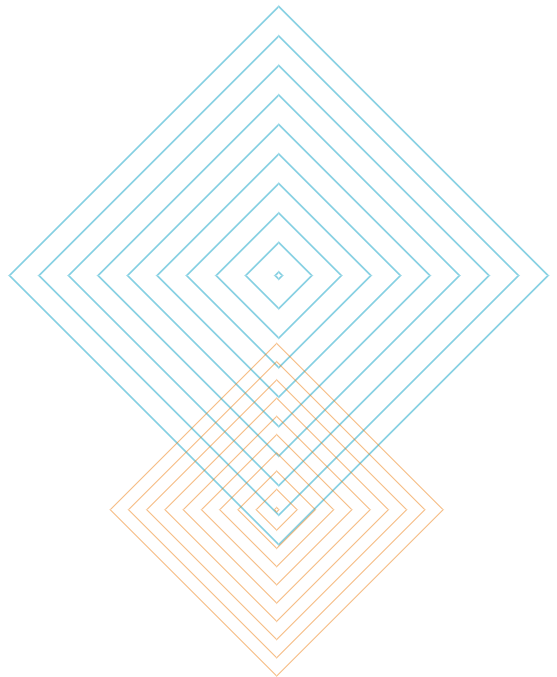
## Gebruikte node-uren op shared memory cluster KU Leuven - UHasselt



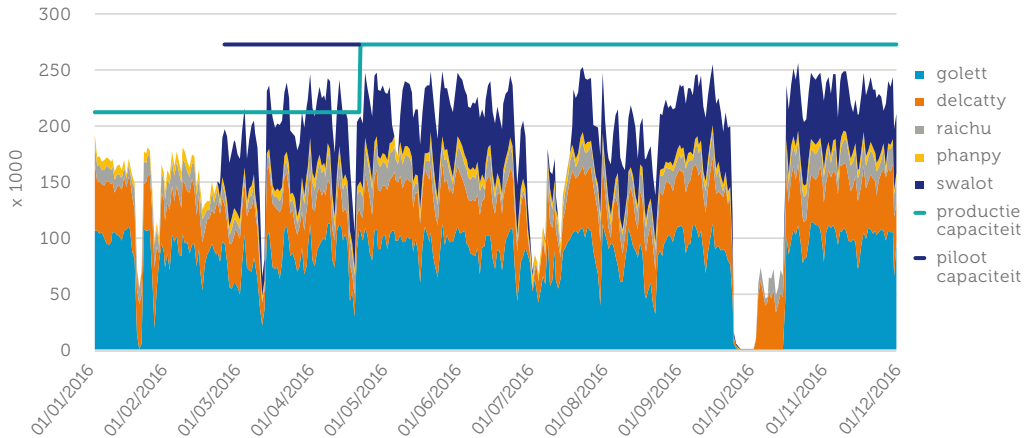
Afbeelding 14  
Gebruik van acceleratoren

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. Dit komt omdat dikwijls de volledige node wordt gebruikt omwille van het geheugen dat nodig is of omwille van de acceleratoren; en dit zonder dat alle CPU-cores in de machine daarom noodzakelijk benut worden.

De shared memory machine wordt minder intensief gebruikt dan de thin node cluster, maar is toch ook regelmatig goed bezet. Het wordt hoofdzakelijk gebruikt binnen de domeinen van scheikunde en bioinformatica. Vooral binnen dit laatste domein heeft men in 2016 meer gebruik gemaakt van de shared memory machine.



## Gebruikte CPU-uren op rekeninfrastructuur UGent



Afbeelding 15

Gebruik van de infrastructuur aan de Universiteit Gent

Afbeelding 15 geeft het cumulatieve gebruik in 2016 weer van alle rekenclusters aan de Universiteit Gent.

De ingebruikname van nieuwe cluster swalot leidde tot een verhoging van de productiecapaciteit met 29%. Na een pilootfase van twee maand, waarin de machine uitvoerig werd getest onder sterke belasting van enkele powerusers, werd deze nieuwe machine opengesteld voor alle gebruikers. Die hebben zich evenwel bijna onmiddellijk aangepast aan de nieuwe situatie en meer uitdagende computationele projecten aangevat: het gemiddeld gebruik van de clusters is tijdens 2016 nagenoeg ongewijzigd gebleven rond de 77%.

De centrale SCRATCH-storage, die gedeeld wordt door alle Tier-2 compute nodes en cruciaal is voor bv. MPI rekentaken, was helaas onbeschikbaar gedurende twee weken in de periode oktober-november. Hierdoor waren ook de rekenclusters onbruikbaar (en zeker voor MPI taken), hoewel clusters delcatty en raichu uiteindelijk reeds na één week werden vrijgegeven voor uitsluitend single-node taken. Verscheidene factoren hebben bijgedragen aan deze 'perfect storm'-onbeschikbaarheid:

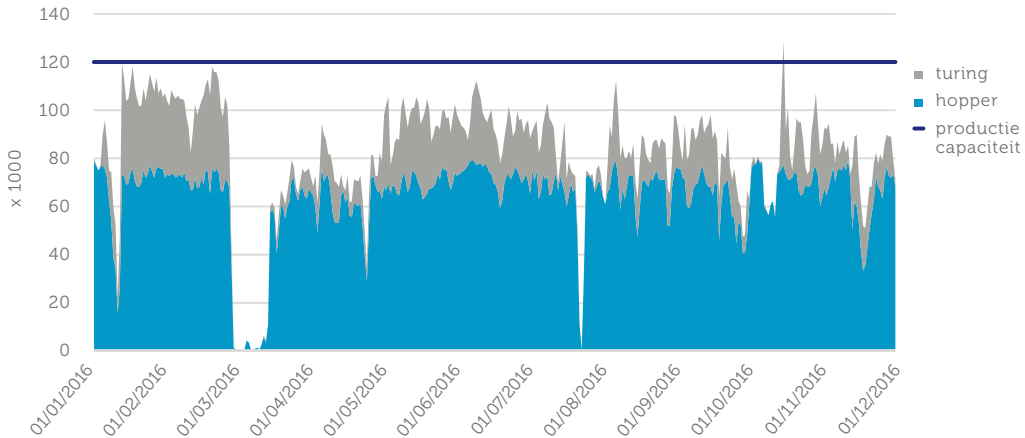
- quasi simultaan falen van 12 schijven in het SCRATCH-opslagsysteem veroorzaaken onbeschikbaarheid van het bestandsysteem, met risico op data-corruptie;

- fouten in de management tools van het parallel GPFS-bestandssysteem zorgen voor ernstige vertraging, vermits de software-ontwikkelaar deze fouten eerst moet patchen;
- de 'Dirty Cow'-beveiligingslek in Linux vereist dat het HPC-UGent team op 27 oktober de aandacht verschuift om eerst de login- en werkernodes te updaten en te patchen;
- een korte stroomstoring op diezelfde dag laat alle werkernodes uitvallen, en vereist opnieuw kostbare tijd van het team om al deze nodes te herstarten en te herstellen;
- hardwarefalen van een opslagcontroller begin november tast de integriteit van het bestandssysteem niet aan, maar vertraagt nogmaals de uiteindelijke vrijgave van de SCRATCH-partitie.

Uiteindelijk kon door de inspanningen van het HPC-UGent team dataverlies worden voorkomen.

Enkele kleinere dalen in bovenstaande grafiek verwijzen naar downtimes als gevolg van stroomstoringen of geplande onderhoudswerkzaamheden. Tijdens dit jaar werd aangevangen met het geregeld gebruik van 'rolling updates', waarbij noodzakelijke software-updates gra- dueel worden uitgevoerd op de nodes van de clusters, telkens wanneer die beschikbaar komen. Dit beperkt de onbeschikbaarheid voor de gebruiker.

## Gebruikte CPU-uren op thin node clusters UAntwerpen

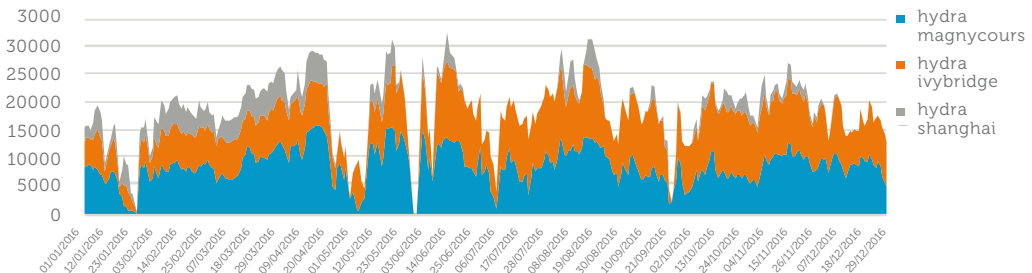


Afbeelding 16  
Gebruik van de infrastructuur van de UAntwerpen

De grafiek van Afbeelding 16 stelt het cumulatieve gebruik voor van de clusters Turing en Hopper aan de Universiteit Antwerpen. Enkele onderbrekingen zijn merkbaar in de grafiek. Zo zijn er werken uitgevoerd aan de datacenterinfrastructuur in maart en aan de elektrische installatie op campus in augustus. Er zijn enkele korte onderbrekingen geweest ten gevolge van stroompannes in januari en mei. Eind oktober

was er een onderbreking omwille van de "dirty cow" security patch. Vermits die voor Turing pas later beschikbaar was, is die cluster ook iets langer buiten dienst geweest. Die onderbrekingen buiten beschouwing gelaten, zijn de clusters zeer goed bezet. Door de manier van rapporteren (gerelateerd aan zogenaamde hyperthreading) wordt soms een belasting van meer dan 100% getoond.

## Gebruikte CPU-uren op thin node clusters VUB

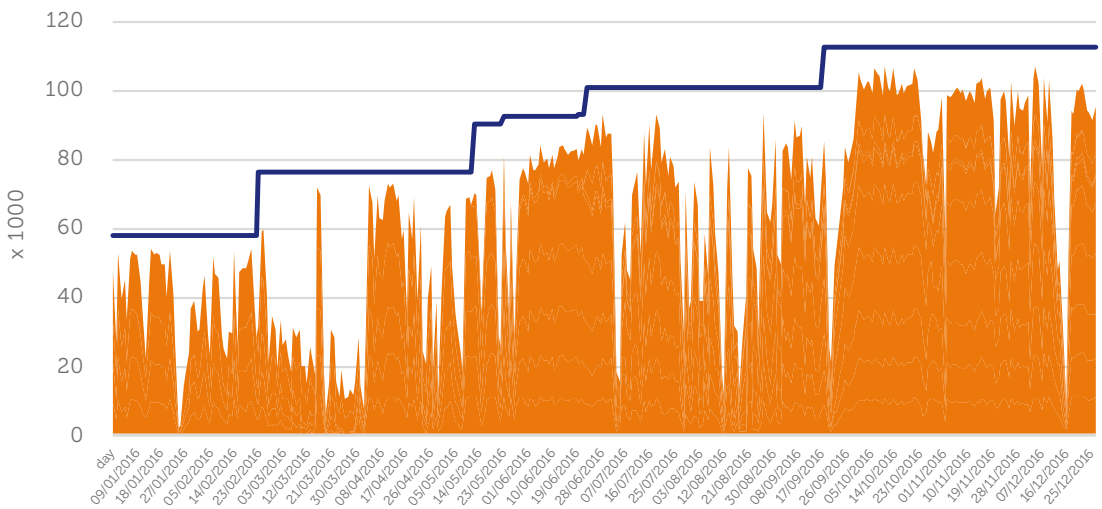


Afbeelding 17  
Gebruik van de VUB infrastructuur

In 2016 waren enkel de Magnycours en Ivy Bridge nodes in gebruik, de nieuwe Intel Broadwell nodes zaten in een pilootfase omdat de netwerkconnectiviteit diende geoptimaliseerd te worden. Er waren twee geplande, korte downtimes, met name voor de migratie naar de nieuwe storage (mei 2016) en voor een omschakeling van elektriciteitsvoorziening (van 5.5 kV naar 11 kV, september 2016). Er waren ook twee korte niet-geplande downtimes, te wijten aan een technisch falen van het koelsysteem in het datacentre (januari 2016) en een probleem met de storage (juni 2016).

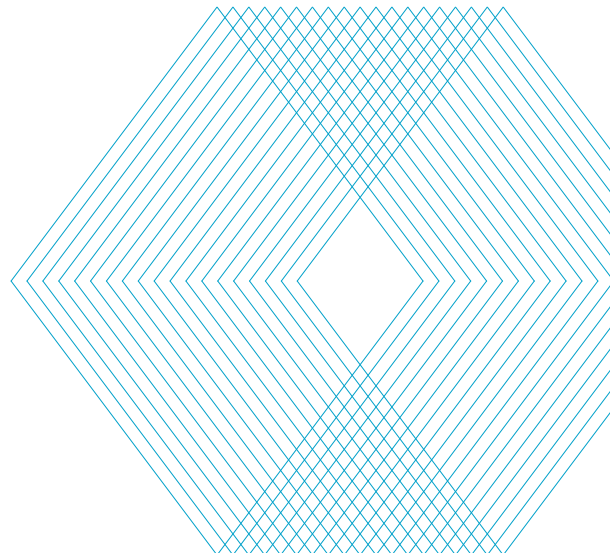
Op de Hydra-cluster worden zowel jobs uitgevoerd die alle rekernelen in een node gebruiken als jobs die niet alle cores gebruiken, maar wel de volledige node nodig hebben omwille van de geheugenvereisten. Omdat een dergelijke mix een vertekening geeft in de bezettingsgraad volgens core uren of nodedagen,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

### Gebruikte CPU-uren op de BEGrid clusters VUB



Afbeelding 18  
Gebruik van BEGrid cluster aan de VUB (blauwe lijn: productiecapaciteit)

BEgrid 19, BEgrid 20-21 en BEgrid 22 zijn de drie delen van de BEgrid cluster aan de VUB. In de loop van 2016 werden in meerdere fasen bijkomende workernodes toegevoegd en werd de standalone-cluster voor het IceCube-project geïntegreerd in de BEgrid-cluster. Er waren enkele geplande downtimes, onder meer voor geplande elektriciteitswerken (januari en juli 2016) maar er waren ook enkel niet-geplande downtimes, onder meer omwille van problemen met NFS (december 2016).



## 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/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-userid te beschikken. Die kan worden aangevraagd op <https://account.vscntium.be>. Deze website en database centraliseert tevens alle gebruikersinformatie over de instellingen heen over storage quota, lidmaatschap van gebruikersgroepen, virtuele organisaties, etc. De onderzoekers van 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 hun daartoe toegang werd verleend door het rekencentrum. De gridcluster is beschikbaar na aanvraag bij de verantwoordelijke van deze infrastructuur. Het gebruik van de Tier-2 infrastructuur is kosteloos. De onderzoekers van 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-invest een (iets) hogere fairshare.

Op de clusters van KU Leuven/UHasselt wordt gewerkt met een credit accounting systeem dat vervat zit in de scheduling software. Nieuwe gebruikers krijgen rekentijd om vertrouwd te worden met het systeem en om eerste testen uit te voeren. Hiermee is de instapdrempel 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 kost. De credits verdelen 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 beheerder van het project. Hij kan onderzoekers toegang geven tot de rekentijd en ook de gebruikte rekentijd opvolgen.

Door gebruik te maken van centrale accounts, kunnen gebruikers ook op andere sites rekenen, rekening houdend met modaliteiten die van toepassing zijn. Hieronder wordt een beknopt overzicht gegeven.

Aan UAntwerpen is gerekend door twee onderzoekers van UGent: bijna 3000 jobs in 73 nodedagen.

Aan VUB is gerekend door één onderzoeker van UAntwerpen: 11 jobs in 8 nodedagen.

Aan UGent werd gerekend door verscheidene onderzoekers van andere instellingen: één gebruiker van UAntwerpen (55.928 core-uren), 4 gebruikers van VUB (8.672 core-uren) en 14 gebruikers van KU Leuven (180.165 core-uren). Deze rekentijd (totaal 244.765 core-uren) werd kosteloos verstrekt.

Aan KU Leuven is gerekend door 1 onderzoeker van VUB voor 4 node uren op de GPU nodes, 3 onderzoekers van UAntwerpen op Thinking en Cerebro voor 3,2 nodedagen en door UGent onderzoekers verspreid over de systemen, 1 onderzoeker voor 411 nodedagen op Cerebro, 8 onderzoekers op Thinkng voor 33,8 nodedagen en door 4 onderzoekers op de GPU systemen voor 58,7 nodedagen.

Dit zogenaamde "cross-site" gebruik wordt nauwgezet opgevolgd.

Naast het "cross-site" gebruik van Tier-2-infrastructuur, wordt ook de grid-infrastructuur, beheerd door VUB/ULB, intensief gebruikt door onderzoekers van verschillende instellingen:

UGent	23,19 %
UAntwerpen	13,04 %
VUB	11,63 %

De overige rekentijd op de grid-infrastructuur wordt gebruikt door onderzoekers van ULB en UCL.

De meeste onderzoekers maken gebruik van het zogenaamde "glide in" mechanisme. Hierbij worden "pilot jobs" gesubmit die, eens actief op een worker node, elders de "payload" gaan halen. Voor de berekening van de hierboven vermelde percentages is alleen rekening gehouden met rekentijd van de "pilot jobs", niet van de individuele "payloads". Bovendien dient opgemerkt te worden dat bij grid, een workflow van een gebruiker verspreid kan zijn over



verschillende sites in verschillende landen en bovenstaande percentages dus maar een deel weergeven van de werkelijk gebruikte rekentijd.

accountpagina gingen de resultaten van dit project in september 2016 in productie.

## Projecten

In deze sectie geven we een overzicht van de projecten van 2016.

### Website en marketing

Op de website werd het user portal gedeelte grotendeels nagelezen en verbeterd waar nodig. Ook werden suggesties van een externe review verder geïmplementeerd. Analyse van de statistieken van de website leert dat in het Nederlandstalige gedeelte "Wat is een supercomputer" zowat de populairste pagina is, buiten de contactinformatie. In het Engelstalige gedeelte voeren het user portal, de systeemstatuspagina en de opleidingen de lijst aan.

De grootste aandacht op marketingvlak is uitgegaan naar de lancering van BrENIAC, zie ook p.12 in dit jaarverslag. De nodige informatie rond BrENIAC heeft ook z'n weg naar de website gevonden.

### Gedraglijn

Vermits alle VSC-sites onderling verbonden zijn en gebruikers de mogelijkheid hebben om "cross-site" te rekenen, zorgt dit ervoor dat er een gedraglijn moet zijn voor die gebruikers. Deze gedraglijn komt bovenop de regels die al van toepassing zijn aan de respectievelijke instellingen. Het document beschrijft doel en toepassingsgebied, ongeoorloofd gebruik, verantwoordelijkheden van de VSC-gebruikers, toezicht en controle, en wat er gebeurt bij inbreuk. In de loop van 2017 wordt deze gedraglijn gefinaliseerd.

### Toegang niet-academische gebruikers

Niet-academische gebruikers (bv. uit industrie, overheden, ...) maken in toenemende mate gebruik van de VSC-rekeninfrastructuur. In dit project werd de toegangsprocedure voor dergelijke gebruikers geoptimaliseerd. Dankzij een duidelijke en simpele procedure kan deze gebruiker nu op eenvoudige wijze een VSC-gebruikersid aanvragen en in een paar kliks toegang krijgen tot de VSC-infrastructuur. Na noodzakelijke aanpassingen aan de VSC-

## Gebruikersondersteuning

De gebruikersondersteuning bestaat uit verschillende componenten:

- het beantwoorden van vragen van gebruikers (helpdesk);
- bijeenkomsten met gebruikers / specifieke ondersteuning;
- opleiding en outreach.

Het laatste punt wordt besproken in secties over "Opleidingen" en "Outreach naar Vlaamse bedrijven".

### Beantwoorden van vragen van gebruikers

Hieronder volgt een overzicht van de tickets die bij de helpdesk terecht komen. 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 van externe gebruikers die gebruikmaken van de VSC-infrastructuur. Indien nodig wordt voor vragen met betrekking tot de Tier-1 contact opgenomen met de helpdesk aan de Universiteit Gent (voor de eerste Tier-1) of KU Leuven (voor de tweede Tier-1). Bij de vragen wordt onderscheid gemaakt tussen

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

In onderstaande tabel wordt een overzicht gegeven van het aantal behandelde tickets, per categorie en per instelling.

	KU Leuven / UHasselt	UGent	UAntwerpen	VUB
<b>Tier-2 + grid</b>				
Accounts	722	141	46	121
Software	596	42	49	159
Overig	741	634	300	517
<hr/>				
<b>Tier-1</b>				
Accounts	36	3		
Software	37	1		
Overig	59	124		
<b>Totaal</b>	<b>2191</b>	<b>945</b>	<b>395</b>	<b>797</b>

### Bijeenkomsten met gebruikers / specifieke ondersteuning

Enerzijds wordt geprobeerd zoveel mogelijk onderzoekers te betrekken bij het HPC-verhaal door te kijken of en hoe ze de overstap kunnen maken van hun desktop naar de HPC-infrastructuur of hun eigen desktop gewoon 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 geven.

Enkele voorbeelden:

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

Daarnaast vinden er aan elke instelling nog gebruikersbijeenkomsten plaats waarin een afvaardiging van de gebruikers vertegenwoordigd is. Hier maken we, per instelling, een selectie van de hierboven vermelde ondersteuning.

### KU Leuven en Universiteit Hasselt

De dagdagelijkse support behandelt vragen i.v.m. accounts, basisgebruik van de cluster en software-installaties. Deze vragen komen van gebruikers uit groepen die reeds lange tijd de cluster gebruiken. De VSC-infrastructuur ken-

baar maken aan nieuwe onderzoeksgroepen is een blijvend werk. Maar ook binnen groepen die de cluster al gebruiken kunnen specifieke acties helpen het clustergebruik te stimuleren. Hiermee kan meer computationeel werk efficiënter op een kortere tijd uitgevoerd worden, vergeleken met lokale infrastructuur zoals workstations en desktops. Nieuwe onderzoekers worden vertrouwd gemaakt met het gebruik van de cluster in de reguliere introductie sessies of door middel van een een-op-een consult. Deze laatste zijn zeer belangrijk om gedurende het hele jaar door nieuwe onderzoekers te helpen met de start. Na een consult van een tweetal uur heeft de onderzoeker meestal al voldoende informatie om productief te zijn op de cluster, mits enige algemene voorkennis van Linux en HPC. Indien een nieuwe groep wenst te starten op de cluster worden er ook specifieke workshops georganiseerd. In 2016 waren er bv. workshops voor een groep van Biomechanica en een groep binnen chemische ingenieurstechnieken.

In 2016 werden specifieke acties ondernomen voor verschillende groepen in het brede onderzoeksdomein van bioinformatica. Een nieuwe kracht werd ingezet om deze acties te ondernemen. Eén van die groepen is de Genomics Core van UZ Leuven. Ze biedt technologische en intellectuele ondersteuning van nieuwe genomische technologieën en ondersteunt hiermee verschillende onder-

zoeksgroepen. In 2016 organiseerde de groep 2 workshops om een brede groep gebruikers meer te introduceren in HPC. Deze workshop werd door de VSC-staf ondersteund. Voor het uitvoeren van genoomanalyses werd hulp geboden om de gebruikte software pijplijnen op te zetten op de cluster. De sequencing apparatuur evolueert immers snel, waardoor ook meer rekentijd voor analyses nodig is. Door gebruik van de VSC HPC-rekenkracht moet het mogelijk zijn om deze groei te bestendigen. De ondersteuning loopt verder in 2017.

Verder werden er in 2016 2 specifieke software omgevingen, genepattern en jupyterhub, opgezet die verschillende bioinformatici kunnen gebruiken. Hiermee kan de uitvoering van grotere rekentaken via een webinterface die binnen het vakgebied wordt gebruikt uitgevoerd worden op de cluster. Dit moet helpen om grote rekenkracht beter te ontsluiten naar deze gebruikersgroepen.

De onderzoeksgroep Plasma-astrofysica is betrokken bij het Virtual Space Weather Modelling Centre (VSWMC). In het kader van een Europees project wordt gewerkt aan een geïntegreerd systeem om resultaten van verschillende modellen te combineren om betere voorspellingen te bekomen. Dit betekende enerzijds hulp bij het installeren en configureren van de software die deze integratie voorziet en anderzijds ook bij de installatie van nieuwe voorspellingsmodellen (Euphoria) die binnen dit kader gebruikt worden.

Ook binnen humane wetenschappen werden acties ondernomen. Voor het Facultair Onderzoekscentrum ECOOM werd specifieke ondersteuning gegeven voor het uitvoeren van Hadoop en Spark analyses op de cluster. De onderzoeksgroep Kwantitatieve Lexicologie en Variatielinguïstiek (QLVL) heeft een softwarepijplijn voor analyses uit om grote gegevensbanken met woorden. Er werd hulp geboden bij het overzetten van deze pijplijn op de cluster.

Voor Universiteit Hasselt lag de klemtoon vooral op het aantrekken van nieuwe gebruikersgroepen. De inspanningen naar de faculteit Bedrijfseconomische Wetenschappen werden verdergezet, wat zijn vruchten afleverde. De onderzoeksgroep Logistiek werd in 2016 de tweede grootste gebruikersgroep wat betreft

rekentijd. De faculteit Ingenieurswetenschappen kreeg ook de nodige aandacht, zodat een tweetal onderzoeksgroepen gebruik maken van de VSC-infrastructuur.

Voor de groep CenStat werd een nieuwe software tool ontwikkeld die toelaat veelgebruikte workflows efficiënt te draaien op de eigen infrastructuur, maar ook op Amazon EC2.

### Universiteit Gent

Verscheidene specifieke gebruikersmeetings werden georganiseerd, waaraan onderzoekers uit verschillende onderzoeksgroepen van de Universiteit Gent deelnamen:

- Marinazzo Lab, departement Data-Analyse, faculteit Psychologie en Pedagogische Wetenschappen
- Cancer Research Institute Ghent
- Vakgroep voortplanting, verloskunde en bedrijfsdiergeneeskunde, faculteit Diergeneeskunde
- Center for Molecular Modeling, faculteit Wetenschappen & Ingenieurswetenschappen en Architectuur
- Laboratory of Functional Plant Biology, faculteit Wetenschappen
- Data Science Lab, faculteit Ingenieurswetenschappen en Architectuur
- Research Group Evolutionary morphology of vertebrates, faculteit Wetenschappen
- Data Mining and Modelling for Biomedicine (Dambi) research group, faculteit Geneeskunde en Gezondheidswetenschappen & VIB
- Theoretical Nuclear and Statistical Physics group, faculteit Wetenschappen
- Evolutionary Systems Biology lab, department of Plant Systems Biology, faculteit Wetenschappen & VIB
- Department of Flow, heat and combustion mechanics, faculteit Ingenieurswetenschappen en Architectuur
- Vakgroep Toegepaste biowetenschappen, faculteit Bio-Ingenieurswetenschappen
- Vakgroep Dierlijke Productie, faculteit Bio-Ingenieurswetenschappen

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

- 10 mei 2016, 30 studenten 3de jaar industrieel ingenieur elektronica-ICT, in

het kader van de cursus geavanceerde computersystemen

- 10 oktober 2016, rondleiding voor Zeus werkgroep UGent

Daarnaast werden ook met (potentiële) gebruikers van buiten de Universiteit Gent gebruikersmeetings georganiseerd:

- Centrum Medische Genetica Gent, UZGent
- Vrouwenkliniek, UZGent
- Multimedia Technologies departement, iMinds
- KMI
- ILVO

Op 12-13 september 2016 co-organiseerde het HPC-UGent team de BeneLearn 2016 conferentie, de jaarlijkse machine learning conferentie van België en Nederland, voor een interuniversitair en internationaal publiek. Dit kaderde in de Big Data specialisatie van de UGent binnen het VSC, vermits de focus op deze conferentie zeer sterk op 'large-scale data analysis' lag. Er waren meer dan 100 deelnemers, waarvan een significant deel uit een 15-tal bedrijven.

### Universiteit Antwerpen

Eenzijds behandelen we vragen van reeds bestaande gebruikers en proberen dat rekenwerk zo optimaal mogelijk te organiseren, anderzijds trachten we het VSC ook kenbaar te maken bij andere onderzoekers om hen te wijzen op de mogelijke voordelen van het gebruik van de centrale infrastructuur. Hiervoor gaan we de onderzoekers/onderzoeksgroepen specifiek opzoeken. Jaarlijks worden ook twee intro-sessies georganiseerd, die vanaf 2016 bestaan uit 3 delen: "Linux introduction", "Supercomputers for starters" en "HPC introduction". Het is immers niet alleen noodzakelijk te kunnen werken met de omgeving, maar ook te beschikken over de nodige achtergrondkennis. In 2016 hebben we onderzoekers uit Toegepaste Ingenieurswetenschappen op weg gezet richting HPC. Ze maken inmiddels sterk gebruik van de infrastructuur. Daarnaast hebben ook andere onderzoeksgroepen uit departementen die reeds actief zijn op de infrastructuur zoals Biologie, Fysica, Geneeskunde en Gezondheidswetenschappen, en Wiskunde de weg gevonden. Het aantal gebruikers groeit dus zowel in de breedte als in de diepte. Enkele voorbeelden van specifieke ondersteuning:

- In opvolging van de Tips & Tricks sessies rond "code modernisation" is advies gegeven rond verdere ontwikkeling van software. In een tweede geval is er een volledige analyse van de code uitgevoerd met suggesties tot verbetering en te verwachten winst. Met een andere onderzoeker werd besproken hoe de oplossing van specifieke lineaire systemen zo goed mogelijk kon gebeuren.
- Ontwikkeling van een jobmonitor om de performantie van jobs op te volgen. Dit laat ons toe gebruikers gericht tips te geven voor een efficiënter gebruik van de machine en te kijken hoe we veel voorkomende problemen kunnen oplossen of welke programma's extra aandacht vereisen.
- Voorbereidend werk om de haalbaarheid van een gezamenlijk project na te gaan met een bedrijf.
- Samenwerking in kader van masterproef: visualisatie van resultaten gegenereerd met FINE-Marine d.m.v. TurboVNC
- Samenwerking in het kader van een afstudeerwerk: shared memory parallelisatie met OpenMP en parallel aanroepen van een extern programma
- Ondersteuning bij de aanvragen voor rekentijd op Tier-1.
- Ondersteuning bij (interuniversitaire) projectaanvragen.

Naast de opleidingen binnen het VSC, worden 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 12 groepen en richtingen.

### Vrije Universiteit Brussel

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 en om hen in eerste instantie te stimuleren omeenstartinggrant voor rekentijd aan te vragen. Voor het Tier-2 niveau werd blijvend ingezet op onderzoekers van vooral de humane wetenschappen voor wie het gebruik van Tier-2 infrastructuur een grote stap zou betekenen. Omwille van 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 omvat leden uit alle faculteiten, uit het rekencentrum en vanuit het departement onderzoeksbeleid. Qua cursussen worden tweemaal per jaar de cursussen "Introduction to Linux" en "Introduction to the use of HPC at the VUB" georganiseerd.

## Personeel

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

### Subsidiëring

Enerzijds heeft elke universiteit personeel nodig voor de exploitatie van de Tier-2 infrastructuur en de ondersteuning van de eindgebruikers. Hiervoor worden 15 VTE gesubsidieerd. Anderzijds worden aan de instelling die de Tier-1 supercomputer huisvest, 2 bijkomende VTE gesubsidieerd. Hiertoe werden in 2016 2 VTE toegekend voor de exploitatie van de eerste Tier-1 en 2 VTE toegekend voor de tweede Tier-1.

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 voor Tier-2 exploitatie en ondersteuning
UGent	4
UAntwerpen	3
VUB	2
UHasselt	1
KU Leuven	5
<b>Totaal</b>	<b>15</b>

Instelling	Aantal gesubsidieerde VTE voor Tier-1 exploitatie
UGent	2
KU Leuven	2

### Effectieve personeelsinzet

Om de verschillende Tier-2 en Tier-1 opstellingen te exploiteren, 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 beroep doen op andere experts die werken in de ICT-diensten van de verschillende universiteiten. De universiteiten zetten samen 29,35 VTE in voor de HPC-exploitatie en ondersteuning. Eén persoon werkt in het kader van het SESAME Net project rechtstreeks onder het FWO. We merken hierbij op dat, wegens een instellingsbrede regeling, de VTE die aan de Universiteit Antwerpen ingezet worden en die niet ten laste van de FWO-financiering komen, slechts voor een voorgeschreven en geplafonneerde fractie van de inzet in deze tabel kunnen opgenomen worden.

Instelling	Aantal VTE ingezet voor HPC	Aantal medewerkers betrokken bij de HPC-exploitatie en ondersteuning
UGent	10,5	16
UAntwerpen	4,35	8
VUB	3,75	8
UHasselt	1	1
KU Leuven	9,75	16
<b>Totaal</b>	<b>29,35</b>	<b>49</b>

### Profielen

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

#### 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 eveneens 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 in het universiteitsnetwerk en het intranet. Zij 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. Dit gaat van het operating systeem tot de scheduling software. Zij staan in voor de dagelijkse monitoring van HPC-systemen. Zij ontwikkelen software voor het efficiënt beheren van de HPC-systemen. Ze werken mee aan de aankoopdossiers rond de architectuur van de HPC-machine en de beheersoftware.

### Gebruikersondersteuners

Deze personen staan in 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 efficiënt 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 een langere tijd samen met één gebruiker en geven gevorderde opleidingen. Deze personen staan ook in voor het bijsturen van de scheduler software zodat die beantwoordt aan de noden van de gebruikers. Ze staan in voor het opzetten van acties met als doel het bewustmaken van de meerwaarde van HPC en het aantrekken van nieuwe gebruikers. Ze werken mee aan de aankoopdossiers 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 staan in 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. Zij doen dat door infosessies te geven binnen de academische context maar gaan ook naar de bedrijven. Zij zorgen voor pers aandacht of promoten het wetenschappelijk rekenen en VSC op verschillende congressen en andere activiteiten. Daarnaast verzorgen zij de website en zorgen voor materiaal dat op de verschillende events kan worden gebruikt.

Het aantal personen die betrokken zijn in de verschillende activiteiten kan u hieronder vinden.

	Infrastructuurbeheer	Systeembeheer	Basis gebruikers-ondersteuning	Wetenschappelijke of gevorderde ondersteuning	Management	Outreach
UGent	5	7	7	6	3	3
UAntwerpen	1	3	5	3	2	1
VUB	2	4	4	2	0	1
UHasselt			1	1	1	1
KU Leuven	2	7	5	5	7	3
FWO			1	1		1
<b>Totaal</b>	<b>10</b>	<b>21</b>	<b>23</b>	<b>18</b>	<b>14</b>	<b>10</b>

### Gevorderde ondersteuning

Om gevorderde en wetenschappelijke ondersteuning te kunnen leveren 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 beroep kunnen doen op gevorderde expertise wanneer ze deze nodig hebben.

### Computational Chemistry

4 personen met wetenschappelijke ervaring in dit domein

### Physics

4 personen met wetenschappelijke ervaring in dit domein

## Engineering

2 personen met wetenschappelijke ervaring in dit domein

## Mathematics (Numerical Methods)

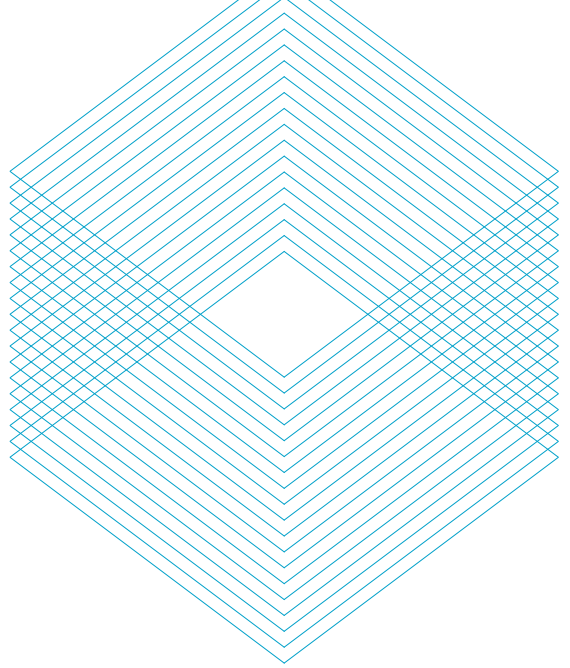
4 personen met wetenschappelijke ervaring in dit domein

## Computer science

7 personen met wetenschappelijke ervaring in dit domein

## Bioinformatics

1 persoon met wetenschappelijke ervaring in dit domein



## Personeelslijst

Naam	Instelling	% tewerkgesteld voor HPC-exploitatie en ondersteuning
Stefan Becuwe	UAntwerpen	100%
Franky Backeljauw	UAntwerpen	100%
Bert Tijskens	UAntwerpen	100%
Kurt Lust	UAntwerpen	100%
Koen Decauwsemacker	UAntwerpen	10%
Muriel Dejonghe	UAntwerpen	10%
Herwig Kersschot	UAntwerpen	10%
Annie Cuyt	UAntwerpen	5%
Leen Van Rentergem	KU Leuven	20%
Herman Moons	KU Leuven	10%
Ingrid Barcana	KU Leuven	100%
Jan Ooghe	KU Leuven	100%
Martijn Oldenhof	KU Leuven	100%
Mag Selwa	KU Leuven	100%
Alexander Vapirev	KU Leuven	70%
Jo Vanvoorden	KU Leuven	100%
Jo Vandeginste	KU Leuven	100%
Tom Leuse	KU Leuven	100%
Yorick Poels	KU Leuven	15%
Rudy Rys	KU Leuven	60%
Tom Vanmierlo	KU Leuven	60%
Sofie Pieraerd	KU Leuven	10%
Tom Vanhout	KU Leuven	20%
Philip Brusten	KU Leuven	10%
Wouter Depypere	UGent	100%

Stijn De Weirdt	UGent	100%
Alvaro Simon Garcia	UGent	100%
Andy Georges	UGent	100%
Ewan Higgs	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%
Luk Claes	UGent	20%
Wim Waeyaert	UGent	20%
Werend Brantegem	UGent	10%
Bruno Cardon	UGent	10%
Dieter Roefs	UGent	50%
Ward Poelmans	FWO	100%
Geert Jan Bex	UHasselt	100%
Stéphane Gérard	VUB	100%
Balázs Hagató	VUB	100%
Rosette Vandembroucke	VUB	50%
Olivier Devroede	VUB	25%
Johan D'Hondt	VUB	20%
Peter Van Rossem	VUB	20%
Dirk Heyvaert	VUB	30%
Philippe Leemans	VUB	30%

# Outreach naar Vlaamse bedrijven

Eén van de opdrachten die aan het VSC toegerekend werd, is het informeren van bedrijven en instellingen uit de non-profit sector over de toegevoegde waarde die HPC levert bij het ontwikkelen en optimaliseren van diensten en producten. Een andere opdracht bestaat erin hen te ondersteunen bij het gebruik van deze nieuwe technologie

## Dienstverlening aan bedrijven

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

### Consultancy

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

### Onderzoekssamenwerking

Het VSC fungeert als HPC-aanspreekpunt en kan de vraag van een bedrijf voor 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 als bemiddelaar fungeren.

### Training

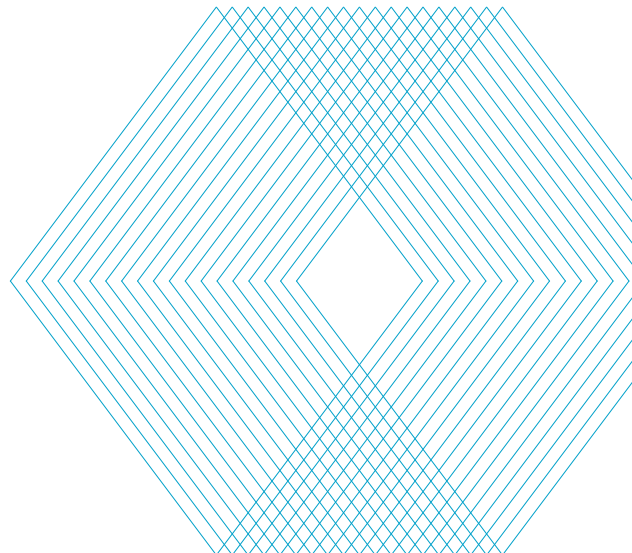
Het VSC organiseert op regelmatige basis training events die ook openstaan voor industriële gebruikers. Topics omvatten Linux, (parallele) programmeertalen en -paradigma's, codeoptimalisatie, maar ook toepassingsgerichte training zoals materiaalkunde, numerieke stromingsleer (computational fluid dynamics) ... Ook trainingen op maat van de eindgebruiker kunnen worden voorzien.

### 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 gebruiksgerelateerde vragen op te lossen en de gebruikers bij te staan bij de installatie van specifieke software.

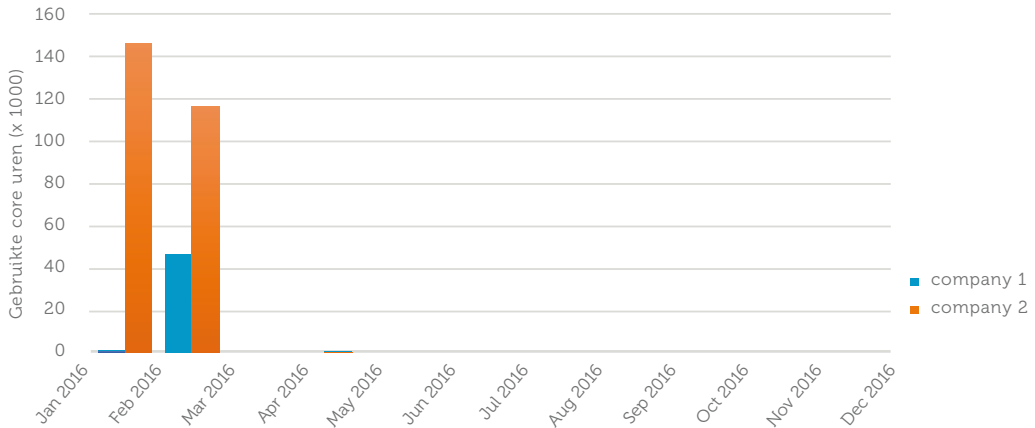
## Gebruik Tier-1 door bedrijven

In 2016 maakten twee bedrijven die in Vlaanderen gevestigd zijn gebruik van de Tier-1 in Gent. De gebruiksovereenkomsten werden contractueel vastgelegd tussen FWO, de Universiteit Gent en het betrokken bedrijf. Vier andere bedrijven gebruikten de Tier-1 in een exploratief regime. Deze bedrijven zijn actief in sectoren van hernieuwbare energie, farmaceutica, medische technologie, elektrotechniek en materiaaltechnologie. Onderstaande afbeelding biedt een (geanonimiseerd) zicht op het gebruik van rekentijd op Tier-1 muk door industrie in 2016. Vanaf medio 2016 is de industriële activiteit nagenoeg stilgevallen. Enkele bedrijven begonnen namelijk reeds over te schakelen naar Tier-1 BrENIAC, die ondertussen in pilootfase beschikbaar kwam; andere bedrijven verplaatsten hun rekenwerk naar Tier-2 clusters binnen het VSC netwerk, omdat die ondertussen krachtiger waren geworden dan Tier-1 muk.





## Gebruik van Tier-1 muk in 2016 door industrie



Afbeelding 19

Gebruik van Tier-1 muk in 2016 door industrie

## Bekendmaking naar bedrijven en andere kennisinstellingen

Een nieuwe editie van de VSC Industry Day werd op touw gezet en ingepland voor begin april 2016. Verscheidene keynote sprekers moesten echter, in de nasleep van de bomaanslagen in Brussel op 23 maart, hun reisplannen afzeggen. Er werd besloten om het event uit te stellen en de inauguratie van de nieuwe Tier-1 BrENIAC aan te grijpen als optimaal moment om op grotere schaal supercomputing en de activiteiten van het VSC bekend te maken bij Vlaamse industrie.

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 industrie centraal staan, bedrijven beter kunnen worden overtuigd van de meerwaarde van supercomputing. Verscheidene user meetings en kickstart events werden, veelal on-site, georganiseerd:

- 3E, 8 januari en 20 april 2016 (UGent)
- FEOPS, 16 maart 2016 (UGent)
- Haalbaarheidsstudie voor spinoff, 25 maart en 27 mei 2016 (UAntwerpen)
- IMDC, 13 mei 2016 (UAntwerpen)
- UMICORE, 16 september 2016 (UGent)
- Outreach naar IOF business developers @ UGent, 26 januari 2016 (UGent)
- Diabatix, 13 april 2016 (KU Leuven)

VSC was ook actief aanwezig op verscheidene netwerkevents om supercomputing te promoten (zie p 46 voor een overzicht van alle deelnames). Verder werden verscheidene industrie use cases opgesteld en gepubliceerd op de VSC website, en verspreid via o.m. het SESAME Net kanaal.

# 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 dit de wetenschappelijke competitieve positie van de universiteiten in het internationale onderzoekslandschap verhoogt.

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

De opleidingen kunnen ondergebracht worden 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 wanneer men nog niet over de vereiste vaardigheden beschikt. Deze sessies worden door de plaatselijke VSC-medewerkers geleid. Dit biedt onderzoekers ook de kans om kennis te maken met de personen die de vragen beantwoorden die aan de helpdesk worden gesteld. Hierdoor wordt het onpersoonlijke en anonieme karakter dat eigen is aan e-mailverkeer, weggenomen.

Om de sessies op het intermediate niveau te volgen, wordt als vereiste voorkennis gevraagd dat men de introductory cursussen gevolgd heeft. Deze sessies zijn dan ook meer specifiek in de onderwerpen die ze behandelen. De meerderheid van deze cursussen zijn bedoeld voor gebruikers die zelf software ontwikkelen, hetzij voor rekenintensieve toepassingen, hetzij voor pre- en postprocessing van data. Vermits deze opleidingen meer gespecialiseerd en intensiever zijn dan de introductory opleidingen, worden ze niet op elke VSC-site

gegeven. Gebruikers worden dan ook aangeemoedigd de opleidingen op een andere site bij te wonen.

Opleidingen op advanced niveau vereisen nog meer ervaring en zijn meer domeinspecifiek dan de intermediate opleidingen. Voor deze cursussen doet het VSC beroep op externe lesgevers. Vaak zijn ze verbonden aan een PRACE Advanced Training Centers (PATC) of komen ze uit de industrie. Jaarlijks worden slechts twee of drie van dergelijke cursussen ingericht. Sommige opleidingen passen echter in geen van de drie niveaus die hierboven vermeld worden. Dit kan zijn omdat ze te domeinspecifiek zijn of omdat ze het volledige introductory tot advanced niveau omvatten.

Het opleidingsaanbod wordt bekendgemaakt via de website van het VSC 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 wanneer die nuttig kunnen zijn voor een beperkte doelgroep of voor potentiële gebruikers.

Een overzicht van de geplande opleidingen wordt ook opgenomen in elk nummer van de VSC Echo, en jaarlijks wordt een themanummer hieraan gewijd.

## Opleidingsprogramma

Hieronder wordt per maand een overzicht gegeven van het opleidingsaanbod:

### Februari

- Python introduction, part I, 8 & 9 februari, 8 uur, KU Leuven/Universiteit Hasselt niveau: intermediate
- Linux introduction, 9 februari, 7 uur, KU Leuven/Universiteit Hasselt niveau: introductory
- Matlab part 1: intermediate, 11, 12, 18 & 19 februari, 16 uur, Universiteit Leuven niveau: introductory
- HPC@KU Leuven introduction, 12 februari, 6 uur, KU Leuven/Universiteit Hasselt niveau: introductory

- C introduction, 16, 17, 23 & 24 februari, 12 uur, KU Leuven/Universiteit Hasselt
- HPC@KU Leuven introduction, 19 februari, 6 uur, KU Leuven/Universiteit Hasselt  
niveau: introductory
- Python introduction, part II, 22 & 23 februari, 8 uur, KU Leuven/Universiteit Hasselt  
niveau: intermediate
- HPC@UGent introduction, 23 februari, 6 uur, Universiteit Gent  
niveau: introductory
- supercomputers for starters, 25 februari, 3,5 uur, Universiteit Antwerpen  
niveau: introductory
- Matlab part 2: intermediate, 25 & 26 februari, 8 uur, Universiteit Leuven  
niveau: introductory

### Maart

- HPC@UAntwerpen introduction, 3 maart, 4 uur, Universiteit Antwerpen  
niveau: introductory

### April

- Introduction to Linux, 13 april, 6 uur, Universiteit Gent  
niveau: introductory
- Message Passing Interface (MPI), 20 april, 7 uur, Universiteit Gent  
trainer: prof. Dr. Jan Fostier (UGent)  
organisatie: VSC, doctoral schools  
niveau: intermediate
- HPC@UGent introduction, 26 april, 6 uur, Universiteit Gent  
niveau: introductory
- Introduction to Scientific Visualization, 28 april, KU Leuven/Universiteit Hasselt  
organisatie: VSC, doctoral schools  
trainer: Hamish Carr (Leeds University,UK)  
niveau: introductory

### Mei

- High performance Python, 2 mei, 4 uur, KU Leuven/Universiteit Hasselt  
niveau: intermediate
- OpenFOAM, 3 & 4 mei, 14 uur, Universiteit Gent  
trainer: prof. dr. Hrvoje Jasak (Wikki Ltd., Zagreb University, Croatia)  
organisatie: VSC, doctoral schools  
link naar videos: <https://www.youtube.com/playlist?list=PLqXHj6bcnY9RoIgzef6xDh5L9bbeK3BL>

niveau: specialist

- Python course, 9, 10, 18 & 19 mei, 16 uur, KU Leuven/Universiteit Hasselt  
niveau: introductory
- Lunchbox session Tier-2@KU Leuven, 12 mei, 2 uur, KU Leuven/Universiteit Hasselt  
niveau: introductory
- High performance Python, 25 mei, 4 uur, KU Leuven/Universiteit Hasselt  
niveau: intermediate
- Introduction to multithreading and OpenMP, 26 & 27 mei, 14 uur  
trainer: dr. Reinhold Bader (LRZ, Garching, Germany)  
organisatie: VSC, doctoral schools  
niveau: intermediate
- Getting Started with HPC, 25-27 mei en 1-3 juni, 36 uur, UGent  
organisatie: Prof. Peter Dawyndt, doctoral schools  
niveau: introductory

### Juni

- Tier-1 infosession, 13 juni, 2 uur, Universiteit Hasselt  
niveau: introductory
- Visualization with VTK and Visit, 16 & 17 juni, 14 uur, KU Leuven/Universiteit Hasselt  
trainer: prof. dr. Hank Childs (University of Oregon, US)  
organisatie: VSC, doctoral schools  
niveau: intermediate
- Tier-1 infosession, 23 juni, 2 uur, Universiteit Gent  
niveau: introductory
- Tier-1 infosession, 24 juni, 2 uur, KU Leuven  
niveau: introductory
- Tier-1 infosession, 24 juni, 2 uur, Universiteit Antwerpen  
niveau: introductory
- Tier-1 infosession, 27 juni, 2 uur, Vrije Universiteit Brussel  
niveau: introductory
- HPC@UGent introduction, 3 juni, 6 uur, Universiteit Gent  
niveau: introductory  
on demand voor het departement Data Analyse (Faculteit Psychologische en Pedagogische Wetenschappen)

### September

- HPC@UGent introduction, 16 september, 6 uur, Universiteit Gent  
niveau: introductory

## Oktober

- Introduction to Fortran, 3, 4 & 5 oktober, 24 uur, Universiteit Gent  
trainer: dr. Reinhold Bader (LRZ, Garching, Germany)  
organisatie: VSC, doctoral schools  
niveau: introductory
- Linux introduction, 6 oktober, 4 uur, KU Leuven/Universiteit Hasselt  
niveau: introductory
- Linux introduction, 10 & 11 oktober, 8 uur, Universiteit Antwerpen  
niveau: introductory
- Matlab, 13, 14, 20, 21, 27 & 28 oktober, 24 uur, Universiteit Leuven  
niveau: introductory
- HPC@KU Leuven introduction, 11 oktober, 6 uur, KU Leuven/Universiteit Hasselt  
niveau: introductory
- supercomputers for starters, 17 oktober, 3,5 uur, Universiteit Antwerpen  
niveau: introductory
- HPC@UAntwerpen introduction, 18 oktober, 4 uur, Universiteit Antwerpen  
niveau: introductory
- Linux for HPC, 18 oktober, 4 uur, KU Leuven/Universiteit Hasselt  
niveau: intermediate
- Leveraging Big Data Tools on HPC with HOD, 6 uur, Universiteit Gent  
niveau: intermediate

## November

- HPC Tips & Tricks 4: Code modernisation - Two real world case studies and Intel tools for finding performance bottlenecks, 7 november, 2 uur, Universiteit Antwerpen  
niveau: intermediate
- Linux introduction, 9 november, 6 uur, KU Leuven  
niveau: introductory
- Python as a second language, 7 & 8 november, 14 & 15 november, 16 uur, KU Leuven/Universiteit Hasselt  
niveau: introductory
- Introduction to Linux, 18 november, 6 uur, Universiteit Gent  
niveau: introductory
- Linux for beginners, 18 november, 6 uur, Vrije Universiteit Brussel  
niveau: introductory
- Scaling your data analysis in Python with Pandas and Dask, 6 uur, Universiteit Gent

trainer: dr. Joris Van den Bossche (Continuum Analytics, VUB)  
organisatie: VSC, doctoral schools  
niveau: intermediate

- Introduction to High Performance Computing, 28 november, 6 uur, Vrije Universiteit Brussel  
niveau: introductory
- MPI course, 28 & 29 november, 15 uur, VSC  
plaats: KU Leuven  
based on PATC course by dr. Rolf Rabenseifner (HLRS, Stuttgart, Germany)  
niveau: intermediate

## December

- Debugging techniques, 1 december, 4 uur, KU Leuven  
niveau: introductory
- Lunchbox session storage overview HPC@KU Leuven, 3 december, 2 uur, KU Leuven/Universiteit Hasselt  
niveau: introductory
- OpenMP, 5 december, 7 uur, VSC  
plaats: KU Leuven  
based on PATC course by dr. Rolf Rabenseifner (HLRS, Stuttgart, Germany)  
niveau: intermediate
- Linux@UHasselt introduction, 9 december, 4 uur, Universiteit Hasselt  
niveau: introductory
- Version control with git, 13 december, 3 uur, Universiteit Hasselt  
niveau: introductory
- HPC@UHasselt, 16 december, 4 uur, Universiteit Hasselt  
niveau: introductory
- Fortran for programmers, 19 december, 4 uur, KU Leuven/Universiteit Hasselt  
niveau: intermediate

Het is interessant op te merken dat naast de jaarlijks wisselende thema's met trainingen door externen, visualisatie en OpenFOAM in 2016, er telkens ook weer nieuwe, eigen trainingen ontwikkeld worden. Er wordt gestreefd naar een zo volledig en gebalanceerd mogelijk trainingsprogramma.

# Communi- catie en evenementen

## Inauguratie BrENIAC

In 2016 werd in Leuven BrENIAC, de nieuwste HPC Tier-1 infrastructuur van Vlaanderen, uitgebouwd met de steun van de Vlaamse overheid. Deze supercomputer is de opvolger van MUC, de Tier-1 die de afgelopen vier jaar werd gehost aan de UGent. Ook dit keer zal het VSC de volledige infrastructuur beheren. De KU Leuven treedt op als host.

De naam BrENIAC die aan het Leuvense cluster werd toegekend, heeft een speciale betekenis. Het is een samensmelting van de woorden 'Brain' en 'ENIAC', één van de eerste elektronische computers voor algemeen gebruik in de wereld, uitgekomen in 1946 en geprogrammeerd door 6 vrouwen.

Om deze nieuwe infrastructuur gepast in te wijden werd op maandag 17 oktober 2016 een plechtige inauguratie georganiseerd aan de KU Leuven in aanwezigheid van Vlaams Minister Philippe Muyters, Rector van de KU Leuven Rik Torfs, Algemeen beheerder van de KU Leuven Koenraad Debackere, Directeur ICTS van de KU Leuven, Annemie Depuydt en een 140 tal gasten vanuit de verschillende betrokken Vlaamse universitaire associaties, de industriële partners en het FWO.



Foto 1

Rob Stevens, KU Leuven. Vlnr: Christel Maeyaert (directeur Dienst Onderzoekscóördinatie), Annemie Depuydt (directeur ICTS), Hans Willems (FWO), Liliane Schoofs (vicerector Onderzoekbeleid) en Ileen Van Rentergem (hoofd Dienst Faciliteiten voor Onderzoek, Communicatie en Samenwerking).

Het evenement zelf bestond uit twee delen: een academische sessie en de officiële inauguratie.

Tijdens de academische sessie werd de gasten een gevarieerd programma aangeboden met de volgende sprekers en onderwerpen:

- **Introductie:** professor Dirk Roose (voorzitter VSC gebruikerscommissie)
- **Sessie 1:** The virtual spectrometer: theory supports experiment door professor Wouter Herrebout (Universiteit Antwerpen)
- **Sessie 2:** Why climate science needs high-performance computing: Demonstrations, prospects and challenges door professor Nicole van Lipzig (KU Leuven)
- **Sessie 3:** The good, the bad and the ugly: Chemical engineering meets high-performance computing door professor Kevin Van Geem (UGent)
- **Sessie 4:** High-performance computing in health care door dr. ir. Wilfried Verachtert (Imec)
- Nadien volgde het inauguratie-moment, met korte toespraken van:
  - Professor Koenraad Debackere, Algemeen Beheerder KU Leuven
  - Mr. Kimihiko Fukuda, Executive Vice President, NEC Corporation
  - Minister Philippe Muylers, Vlaams Minister van Werk, Economie, Innovatie en Sport
  - Professor Rik Torfs, rector KU Leuven

Het geheel werd afgesloten door minister Muylers die de eer kreeg om het officiële startschot te geven via de opstart van een time lapse video waarin de opbouw van de nieuwe infrastructuur werd getoond. Vervolgens werd iedereen verwelkomd om te klinken op de nieuwe Tier-1 tijdens een uitgebreide receptie.

Het gehele evenement kon rekenen op uitgebreide aandacht van de pers, die op deze dag ook uitgenodigd werd op een rondleiding in het datacentrum in Heverlee met de mogelijkheid tot het afnemen van interviews en het nemen van de eerste beelden van de nieuwste supercomputer. Hierdoor verscheen de supercomputer zowel op VRT, VTM, ROB als Kanaal Z en werd er ook verslag uitgebracht in De Morgen, De Tijd, Datanews en Zdnet en later ook TechPulse

Gezien dit evenement ook het startschot betekende van een uitgebreidere campagne rond HPC werden tevens een campagnebeeld en

campagnevideo ontworpen voor BrENIAC, die onthuld werden tijdens de inauguratie. Het campagnebeeld is van de hand van huis-cartoonist van de KU Leuven en tevens cartoonist van De Standaard, Joris Snaet en prijkt ook op de volledige voorkant van de supercomputer. De campagnevideo is een productie van Limel, de videoproducent van de KU Leuven. Hopelijk kunnen we hiermee BrENIAC en supercomputing in het algemeen vier jaar lang de aandacht geven die het verdient!

## Deelname aan nationale, internationale evenementen, congressen en workshops

### Georganiseerd door VSC

- 21th Quattor Workshop – UGent  
22-24 maart 2016 – Brussel en na 23/3 Gent  
<http://www.quattor.org/meeting/2016/03/22/bruxelles-workshop.html>
- BeneLearn 2016 – UGent  
12-13 september 2016 – KULAK, Kortrijk  
<https://www.kuleuven-kulak.be/benelearn/>
- Big Data & Data Science devroom – UGent  
Devroom (30/01) binnen FOSDEM 2016, georganiseerd door HPC-UGent  
30-31/01/2016 – Brussel  
[https://archive.fosdem.org/2016/schedule/track/hpc\\_big\\_data\\_and\\_data\\_science](https://archive.fosdem.org/2016/schedule/track/hpc_big_data_and_data_science)

### Georganiseerd door andere organisaties

- BeGeo 2016  
3 maart 2016 – Brussel  
Contributie: talk 'Hanythingondemand - easily creating on-the-fly Hadoop clusters (and more) on HPC systems' (UGent)
- HPC Advisory Council meeting  
21-23 maart 2016 – Lugano, Zwitserland  
Contributie: EasyBuild tutorial (UGent)  
<http://insidehpc.com/2016/03/easybuild/>
- iMinds The Conference  
28 april 2016 – Brussel
- Spectrum Scale user group  
17-18 mei 2016 – London, UK
- Big N2N Annual Symposium 2016  
19 mei 2016 – Gent  
Contributie: invited talk 'HPC-UGent:

empowering researchers with super-computing' (UGent)  
<http://www.bign2n.ugent.be/node/644>

- Elixir Belgium training meeting  
28 september 2016 – Brussel
- BRUCON 2016 security conference  
27-28 oktober 2016 – Brussel
- 22nd Quattor workshop  
4-6 oktober 2016 – London, UK
- OpenNebulaConf 2016  
24-26 oktober 2016 – Barcelona, Spanje  
Contributie: talk 'OpenNebula Sunstone integration with FreeIPA using Single Sign On' (UGent)  
<http://2016.opennebulaconf.com>
- Meeting met de Taipei Representative Office in the EU and Belgium (UGent)  
2 maart 2016 – Gent
- Dag rond samenwerking met SCK.CEN georganiseerd door UA Antwerpen  
11/02/2016 – Antwerpen
- HTCondor - ARC Workshop at ALBA Synchrotron  
29 februari – 4 maart 2016 – Barcelona, Spanje
- Data Innovation Summit (DIS 2016)  
23/03/2016 – Brussel
- EGI Conference 2016  
6-8 april 2016 – Amsterdam, Nederland
- IOF-dag georganiseerd door UHasselt  
17/05/2016 – Hasselt
- Vortech mini symposium, VUB  
14 juni 2016 – Brussel
- ISC 2016  
20/06-22/06 2016 – Frankfurt, Germany
- Digital Infrastructures for Research 2016  
27-30 september 2016 – Krakow, Polen
- Belnet Networking Conference 2016  
25 oktober 2016 – Brussel
- HP Cast  
11-12 november – Utah USA
- Supercomputing 2016  
13-17 november – Utah USA

**Jaargang .1000 Diepenbeek woensdag 2 maart**

Voor leerlingen, studenten en afgestudeerden in teams van 3	Plaats van afspraak
Prijzen voor de beste teams in elke categorie	Technologiecentrum Wetenschapspark 27 3590 Diepenbeek
Registratie & ontvangst vanaf 13u Begin wedstrijd om 14u30 stopt Prijzuitreiking 18u30 tot 19u.	
Programmeer in C, C#, C++, Java, Haskell, Python, Javascript (node.js), Pascal, Perl, Prolog, Clojure, Ruby, Scala, Scheme of Visual Basic.	Inschrijven voor 16/02/2016 via <a href="http://www.vlaamseprogrammeerwedstrijd.be">www.vlaamseprogrammeerwedstrijd.be</a>

Organiseerd door: KU Leuven, UGent, AACA IT-Solutions, HoGent, etc.

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

## VSC ECHO

In 2016 verscheen de VSC Echo, de nieuwsbrief van het VSC, midden januari en eind oktober. De uitgave van januari 2016, VSC Echo 9, was gefocust op het aangepast reglement voor aanvragen Tier-1, de geplande opleidingen en kondigde de nieuwe Tier-1 supercomputer aan. Traditioneel werd het najaar nummer, VSC Echo 10, gewijd aan de komende opleidingen en evenementen, waarbij er ook aandacht besteed wordt aan de opleidingen verzorgd door CÉCI, de Waalse tegenhanger van het VSC.

Elke VSC Echo bevat ook nieuws in verband met het gebruik van Tier-1. Zo werd er informatie gebracht over de indiening van projectvoorstellen rond het gebruik van rekentijd op Tier-1, over de afsluitdata voor het indienen van de voorstellen, ... De VSC Echo wordt elektronisch verstuurd naar meer dan 2000 adressen en een papieren versie is beschikbaar bij evenementen, vergaderingen, ... en is ook beschikbaar op de VSC-website.

# Internationale samenwerking

## PRACE

Het VSC maakt, via het Belgisch lidmaatschap, deel uit van het PRACE-gebeuren. PRACE biedt de mogelijkheid om Tier-0 rekentijd te gebruiken. 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. Vlaamse onderzoekers worden attent gemaakt op het bestaan van deze oproepen door middel van berichten op de VSC-website en aankondigingen in de VSC Echo. PRACE biedt ook interessante opleidingen die door het VSC gepromoot worden.

Het kostenmodel voor PRACE wordt momenteel op Europees niveau herzien. Een nieuw financieringsmodel PRACE 2.0 werd uitgewerkt waarbij men uitgaat van een kostprijs van 3,3 miljoen euro, te verdelen onder leden. Voor België wordt geopteerd voor het standaard lidmaatschap.

Deze bijdragen moeten de kosten dekken voor de zgn. high-level support teams die ondersteuning zullen bieden en zich bevinden op de Tier-0 sites. Op deze wijze blijven Vlaamse onderzoekers toegang hebben tot grootschalige supercomputerinfrastructuur die de mogelijkheden van een land/regio overstijgen.

## EGI

Het VSC is actief aanwezig bij het European Grid Infrastructure-gebeuren (EGI). De VUB grid-cluster 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-energie-fysici van de UAntwerpen, de UGent en de VUB maken hiervan

gebruik. Zo heeft de VUB-onderzoeksgroep "Icecube" besloten om deze grid-infrastructuur te gebruiken ter vervanging van hun eigen infrastructuur. Een nieuwe internationale onderzoeksgroep "Solid", met onderzoekers van onder meer UGent, UAntwerpen en VUB die neutrino-oscillaties bestudeert op een heel korte afstand van de kern van een reactor in het SCK-CEN te Mol werd opgestart. Deze onderzoeksgroep maakt, met ondersteuning vanuit het VUB-grid-team, gebruik van de EGI grid middleware om op een eenvoudige manier gegevens te delen over de deelnemende universiteiten heen. VUB is actief in de EGI core-activiteit om the "long tail of science" (LToS) te ondersteunen, een initiatief om individuele onderzoekers en kleinere onderzoeksgroepen te ondersteunen die, in tegenstelling tot grote laboratoria en samenwerkingsverbanden, geen toegang hebben tot specifieke reken- en opslaginstructuur. Vanuit VUB werden inspanningen geleverd om toe te treden tot het EGI FedCloud-project als een gecertificeerde site met als doel om de gefedereerde cloud-infrastructuur toegankelijk te maken voor alle VSC-gebruikers.

## SESAME Net

Het VSC is partner in het SESAME Net project (<http://sesamenet.eu>) 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' en heeft als voornaamste 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.

Eén van de bijzondere kenmerken van SESAME Net is het consortium: het bestaat uit een mix van nationale en regionale HPC-groepen aangevuld met private partners. Er zijn 14 partners uit 12 EU-landen: HPC-Wales (UK), ICHEC (Ierland), Fraunhofer institute (Duitsland), PSNC (Polen), GRNET (Griekenland), CESGA (Spanje), IT4Innovations (Tsjechische Republiek), Yotta (Kroatië), UVT (Roemenië), IICT (Bulgarije), RBI (Kroatië), FWO/VSC (België) en Vilnius University (Litouwen). Het project is officieel gestart op 1 juni 2015 en loopt voor 2 jaar.



Het project is in 2016 op kruissnelheid gekomen. De activiteit van het VSC zit voornamelijk in Work Package 3 (Competency Centre Best Practice) en Work Package 4 (Awareness Raising). VSC heeft bijvoorbeeld een best practice over EasyBuild en HanythingOnDemand gedeeld met alle SESAME Net partners. Omgekeerd hebben, bijvoorbeeld, HPC Wales en ICHEC getoond hoe zij omgaan met commerciële gebruikers en wat hun SLA's zijn. Bij Work Package 4 is het zeer nuttig gebleken om ervaringen te delen onder de partners. Zo blijkt immers dat nagenoeg alle HPC Centers moeite hebben met het vinden van KMO's die interesse hebben in supercomputing en klaar zijn om deze methodologie te gaan hanteren.

In juni 2016 is de tussentijdse review van het SESAME Net project gehouden in Gent. Het review panel had een aantal bedenkingen bij de directe impact van het project maar na enige discussie kreeg het project groen licht om door te gaan. In september 2016 heeft de coördinator van het project, HPC-Wales, laten weten dat ze zich terugtrekken uit het project. HPC-Wales bestond op dat ogenblik al niet meer doordat de overheid het budget had stopgezet. Bangor University had weliswaar de SESAME Net-taken van HPC-Wales overgenomen maar heeft uiteindelijk beslist dat het project niet meer prioritair was voor hen. Met unanieme goedkeuring heeft de Kroatische partner Yotta/Arctur de coördinatorrol overgenomen. Onder hun impuls is er een nieuwe doelstelling aan het project toegevoegd: een self-assessment tool voor KMO's (HPC4SME). De bedoeling van deze tool is om het HPC potentieel van een KMO in te schatten en al dan niet verdere gesprekken aan te kunnen knopen. De tool zal begin 2017 operationeel worden. Ward Poelmans (FWO) is tijdelijk tewerkgesteld op deze projectmiddelen (tot en met december 2016) en voert alle SESAME Net-gerelateerde taken uit. In dit verband legt hij onder meer proactief contact met potentieel geïnteresseerde bedrijven, en volgt hij hen op wanneer ze effectief de overstap maken en de VSC-services aanwenden.

## Contacten met andere HPC-centra

Het VSC onderhoudt op regelmatige basis contacten met andere HPC-centra: om op de hoogte te blijven van ontwikkelingen op

HPC vlak, maar ook om best practices uit te wisselen. Aan velerlei HPC-centra globaal worden immers verscheidene hard- en software oplossingen gebruikt om recurrente problemen op te lossen. Deze informatie uitwisselen is dan ook van onschatbare waarde voor de werking van elk HPC-centrum.

- Rutherford Appleton Laboratory (UK)  
6-8 december 2016 – Gent  
Samenwerking en overleg rond Quattor
- Texas Advanced Computing Center (TACC, USA)  
25-26 januari 2016 – Gent  
1-2 februari 2016 – Gent  
23-28 juni 2016 – Gent  
Samenwerking rond Lmod en XALT  
Presentatie door Robert McClay van XALT aan alle VSC admins (28 juni)
- Uppsala Multidisciplinary Center for Advanced Computational Science (UPPMAX, Zweden)  
9 mei 2016 – Gent  
Overleg met Prof. Anders Hast
- SurfSARA (Nederland)  
20 oktober 2016 – Gent  
Overleg omtrent visualisatie
- OKAN university (Turkey)  
3 mei 2016 – Gent  
Netwerking

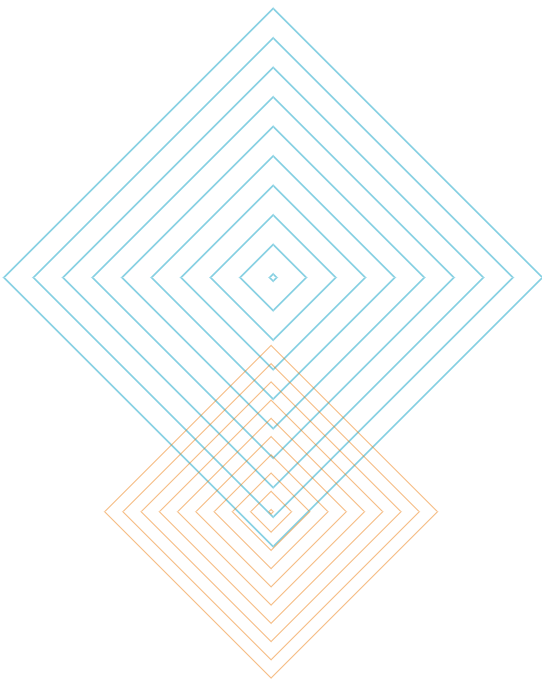
Het Grid-team (VUB) heeft verder contacten met collega's van Louvain-La-Neuve en door de participatie in EGI en projecten als Longtail of Science, FedCloud, etc. contacten met mensen van vele andere HPC/HTC/Cloud sites in Europa.

Verscheidene internationale contacten vonden plaats in het kader van samenwerking rond EasyBuild (<http://hpcugent.github.io/easybuild/>). Dit is een 'killer tech' software-oplossing om makkelijk, efficiënt en reproduceerbaar wetenschappelijke software te installeren op HPC-systemen. Initieel werd deze software ontwikkeld binnen het VSC. Maar vandaag zijn er heel wat HPC-centra over de hele wereld die het nut van deze open source tool waarderen en die steeds meer meewerken aan het verder ontwikkelen en onderhouden van de code. Binnen het EasyBuild netwerk zijn er geregeld contacten met JSC (Duitsland), CSCS (Zwitserland), TACC (USA), Ottawa Hospital Research Institute (Canada), The Francis Crick Institute London (UK).



Volgende specifieke events werden georganiseerd rond EasyBuild:

- 1st EasyBuild User Meeting – UGent  
27-29 januari 2016 – Gent  
<https://github.com/hpcugent/easybuild/wiki/1st-EasyBuild-User-Meeting>
- 11th EasyBuild hackathon – UGent  
24-25 maart 2016 – CSCS, Lugano, Zwitserland  
<https://github.com/hpcugent/easybuild/wiki/11th-EasyBuild-hackathon>
- 'Introduction to EasyBuild' voor delegatie  
Cubaanse universiteiten (University of Informatic Sciences UCI - Havana, Central University of Las Villas - Santa Clara, University of Santiago de Cuba)  
9, 14 november 2016 – Gent



# VSC Succesverhalen

## **dr. Wim Thiery – Prof. Nicole Van Lipzig (Departement Aard- en Omgevingswetenschappen, KU Leuven): Klimaatverandering versterkt nachtelijke stormen boven Victoriameer**

Het Victoriameer in Oost-Afrika zal door de klimaatverandering een hotspot voor zware stormen worden. Dat blijkt uit een internationale studie onder leiding van de Wim Thiery en Nicole van Lipzig van het departement aard- en omgevingswetenschappen, gepubliceerd in Nature Communications.

Het Victoriameer ligt tussen Oeganda, Kenia en Tanzania en is met zijn oppervlakte van bijna 70.000 vierkante kilometer het grootste meer van Afrika. Daarnaast staat het bekend als een gevaarlijke plek voor de 200.000 mensen die er 's nachts vissen. Het Internationale Rode Kruis schat dat er jaarlijks 3.000 tot 5.000 vissers om het leven komen in de zware stormen die het meer teisteren. Dat het Victoriameer 's nachts zo stormachtig kan zijn, heeft te maken met de circulatie in de atmosfeer boven het enorme wateroppervlak. Wim Thiery: "Overdag ontstaat er een bries die van het koele water naar het warme land stroomt. 's Nachts zien we een omgekeerde beweging: de landbries verplaatst zich van het afkoelende land in de richting van het warmere meer. Omdat het meer cirkelvormig is, komen die landbriezen uit alle richtingen samen boven het meer. Voeg daarbij de verdamping en je krijgt veel stormen, regen, wind en golven." Dit patroon werd bevestigd door analyse van NASA satelliet observaties in de periode tussen 2005 en 2013. Om na te gaan hoe de klimaatverandering dat proces zal beïnvloeden werden klimaatsimulaties uitgevoerd met een geavanceerd computermodel, geïmplementeerd met COSMO-CLM<sup>2</sup>. Hierbij werd een

koppeling van het non-hydrostatic regionaal klimaat model COSMO-CLM versie 4.8, het "Community Land Model version 3.5 (CLM3.5)" en het "Freshwater Lake model (FLake)" uitgevoerd. Uitgaande van een blijvende stijging van broeikasgassen zal de extreme neerslag dubbel zo snel toenemen als die boven het omgevende land, wat aanleiding geeft to meer nachtelijke stormen. Superstormen die nu slechts eenmaal om de 15 jaar voorkomen, zullen dat tegen het einde van de eeuw bijna jaarlijks doen. Verder onderzoek moet leiden tot een verbetering van het waarschuwingssysteem om de kwetsbaarheid van lokale vissers te verminderen.

## **Prof. Daniele Marinazzo (UGent): modellering van gezonde en verstoorde hersendynamiek met behulp van supercomputers**

### **Marinazzo onderzoekslab, vakgroep Data-Analyse, UGent**

Prof. Daniele Marinazzo leidt een onderzoekslab binnen de vakgroep Data-Analyse, gevestigd in de faculteit Psychologische en Pedagogische Wetenschappen van de Universiteit Gent.

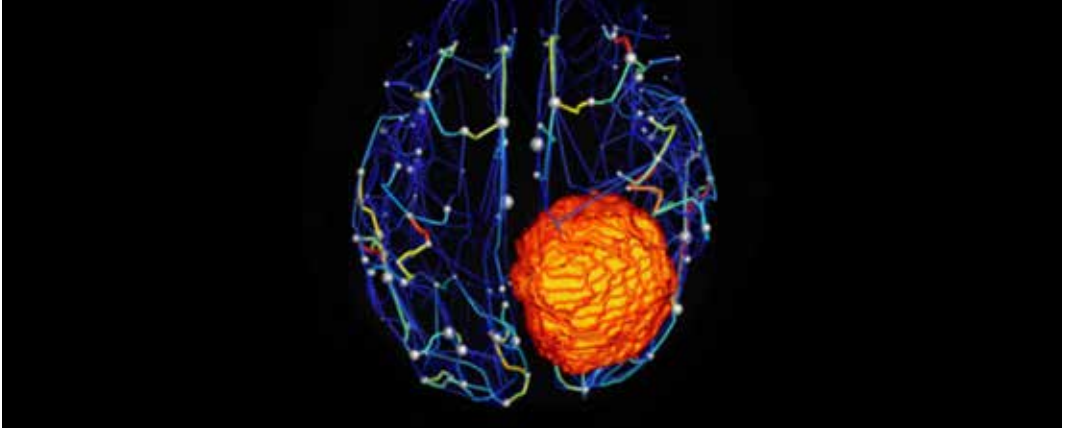
Zijn groep richt zich op de methodologische en computationele aspecten van neurowetenschappelijk onderzoek. Specifiek onderzoeken ze hoe de hersenen werken en hoe de collectieve dynamiek en wisselwerking van hersengebieden aanleiding geven tot functie.

Marinazzo's lab maakt deel uit van het multidisciplinaire onderzoeksplatform 'Neuroscience' aan de Universiteit Gent.

### **Computationeel onderzoek en toepassingen**

Het menselijke brein kan worden beschouwd als een complex netwerk, een zogenaamd 'connectome', waaruit alle functie en gedrag in principe kan worden afgeleid. Een computationeel model van zo'n connectome is daarom een zeer krachtig instrument, met voorspellende kracht en veel medische en klinische toepassingen.





Prof. Marinazzo's groep ontwikkelt nieuwe technieken om te bepalen in hoeverre hersengebieden structureel verbonden of functioneel gerelateerd zijn. Hiervoor baseren ze zich op data van neurale beeldvormingsmethodes, zoals magnetic resonance imaging (MRI), en passen ze data-gedreven en biologisch-dynamische causale modellering toe, naast modelvrije theoretische kaders, zoals transfer entropie.

Dankzij deze ontwikkelingen en met behulp van supercomputers kan Marinazzo's onderzoeksgroep een uitgebreide hersenkaart opbouwen van de structurele en functionele verbindingen binnen de hersenen van een individuele patiënt.

Dynamische netwerkanalyse van deze 'hersenskaarten' bij patiënten met epilepsie heeft geleid tot een ongekende karakterisering van de epileptische aandoening. Dit maakt een meer objectieve diagnose en controle mogelijk van herstelprocessen. Bovendien biedt het de mogelijkheid om een epileptische aanval bij een patiënt te voorspellen, en kan het zo worden gebruikt om deze patiënt aan te leren hoe het begin van zo'n aanval te identificeren, om tijdig een remediërende behandeling te kunnen ondergaan.

Virtuele hersenmodellen kunnen ook gebruikt worden om de mechanismen van hersenziektes te bestuderen, en bieden het potentieel om direct behandelingen te ondersteunen. Hannelore Aerts, één van de promovendi van Prof. Marinazzo, heeft onlangs deze nieuwe technieken toegepast om de algemene hersendynamiek te onderzoeken van patiënten met een hersentumor. Het uiteindelijke doel van het project is om neurochirurgen bij pre-chirurgische planning te helpen: met behulp van een virtueel hersenmodel kunnen ze simuleren wat het effect is van de chirurgische verwijdering

van een tumor op het functioneren en de dynamiek van de hersenen van de patiënt.

#### VSC faciliteert computationeel onderzoek

"Aanzienlijke computerkracht is nodig om uit neurale beeldvormingsgegevens af te leiden hoe hersenregios met elkaar zijn verbonden.", aldus prof. Marinazzo.

"Maar ook onze analyses moeten op supercomputers gebeuren. De beschikbaarheid van meerdere rekenclusters aan de Universiteit Gent en binnen het VSC-netwerk stelt ons in staat om snel meerdere modellen tegelijkertijd te testen. Dit versnelt echt ons onderzoek."

"Ten slotte is de gebruikersspecifieke aanpak en de snelle responstijd van de helpdesk van het HPC-UGent team een geweldige hulp."

#### Links

- Vakgroep Data-Analyse (<http://www.da.ugent.be/index.html>)
- Prof. Daniele Marinazzo's lab (<http://users.ugent.be/~dmarinaz/index.html>)

#### Reference

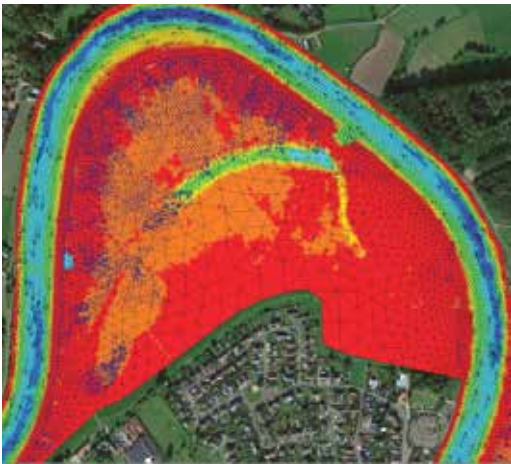
- 'Brain networks under attack: robustness properties and the impact of lesions', Hannelore Aerts, Wim Fias, Karen Caeyenberghs and Daniele Marinazzo, *Brain*, 2016, 139, 3063-3083. (<https://www.ncbi.nlm.nih.gov/pubmed/27497487>)
- 'Modeling global brain dynamics in brain tumor patients using The Virtual Brain', Hannelore Aerts and Daniele Marinazzo, *Front. Neurosci. Conference Abstract: 12th National Congress of the Belgian Society for Neuroscience*. doi: 10.3389/conf.fnins.2017.94.00101 ([http://www.frontiersin.org/10.3389/conf.fnins.2017.94.00101/event\\_abstract](http://www.frontiersin.org/10.3389/conf.fnins.2017.94.00101/event_abstract))

## Waterbouwkundig labo

Het Waterbouw Laboratorium is het expertisecentrum van het Departement Mobiliteit en Openbare Werken op het vlak van Waterwegen, Kust en watergebonden kunstwerken. Het adviseert de Vlaamse Overheid met betrekking tot de bevaarbaarheid en de veiligheid van waterwegen en Belgische Kust. Het Waterbouwkundig Laboratorium doet onderzoek naar de invloed van de menselijke activiteiten op de watersystemen en de gevolgen hiervan op de slibhuishouding, morfologische ontwikkelingen, natuur en toegankelijkheid voor de scheepvaart. Om haar taken uit te kunnen voeren en om innovatieve oplossingen te ontwikkelen beschikt het labo over een breed gamma aan fysische modelinstallaties, in situ meetinstrumenten en numerieke modellen. De numerieke modellen beschrijven in 1D, 2D of 3D de getij- en golfgedreven stromingen, sedimenttransporten en bodemveranderingen op basis van de shallow water vergelijkingen (een vereenvoudiging van de Navier-Stokes vergelijkingen voor stromingen met een vrij oppervlak). Tevens worden er 3D CFD modellen ingezet voor de complexe stromingen in en rond kunstwerken, maar ook voor scheepsrompen en scheepsroeren. Naast de in-house reken capaciteit wordt gebruik gemaakt van de VSC infrastructuur om grotere modellen te berekenen. Eén van die modellen is het Scal-

dismodel. Dit is een 3D eindige elementen model opgebouwd in TELEMAC-MASCARET dat de volledige kust en het Schelde estuarium bevat ( $\approx 900\,000$  elementen horizontaal en 5 -layers  $\approx 4\,500\,000$  elementen). Het model wordt momenteel ingezet om de effecten op de getijslag en slibhuishouding van potentiële toekomstige menselijke ingrepen in de Boven-Zeeschelde te bestuderen. Daartoe worden verschillende combinaties van mogelijke ingrepen gesimuleerd en geanalyseerd. Op de VSC cluster wordt per modelrun typisch 9 nodes gebruikt (180 cores). Per scenario wordt een periode van 3 maand gesimuleerd. De rekentijd op de VSC cluster bedraagt gemiddeld 11 dagen per scenario.

Quote: "De toegang tot de VSC infrastructuur laat ons toe om het groot aantal potentiële scenario's nodig voor onze adviezen naar de Vlaamse Overheid toe efficiënt door te kunnen rekenen en te analyseren op effecten naar getij, stroming, natuur en scheepvaart"



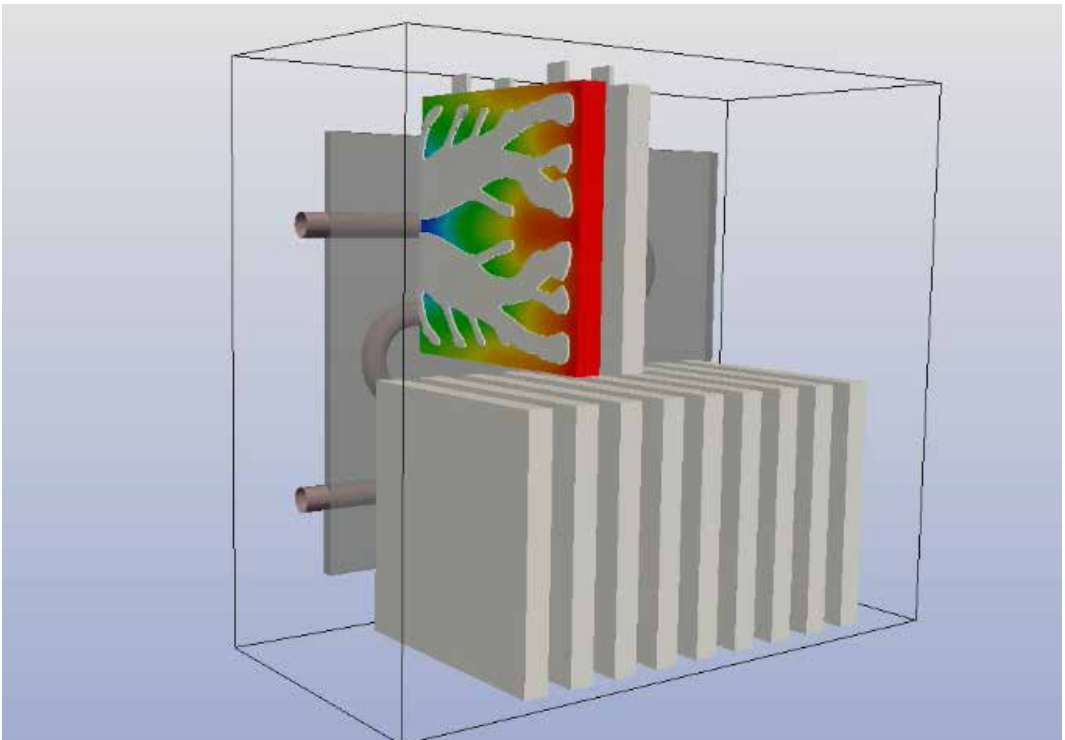
*Detail van het Scaldismodel: Ebstroom in Schelde en Gereduceerd Getij Gebied (GGG) Bergenmeersen. De vectoren geven de stroming weer, de kleur de diepte van de bodem. Het volledige model bevat de volledige kust en Oosterschelde en het volledige Schelde estuarium van monding tot Melle. Rechts een luchtfoto van het gebied bij stormtij (6/6/2017 – Sinterklaas-storm)*

## Diabatix – handig toegankelijk maken van efficiënt thermisch ontwerp

Diabatix is een Vlaamse start-up die zich richt op het ontwerpen, simuleren en optimaliseren van koelcomponenten. Denk hierbij aan koeling van lasers, (vermogen)electronica, batterijen in elektrische wagens, verbrandingsmotoren, enz. Fabrikanten werken samen met Diabatix om hun machines, toestellen en installaties efficiënter, compacter en milieuvriendelijker te maken. Diabatix is vernieuwend met zijn toegankelijke platformoplossing, die elke ingenieur begeleidt in het sneller en beter ontwerpen van kritische thermische toepassingen. De toegepaste generatieve ontwerp-methode neemt de typische hindernissen weg van trial-and-error engineering, wat leidt tot disruptieve koelperformantie-verbeteringen tot zelfs 30%. Voor het platform dat Diabatix aanbiedt wordt

eigen ontwikkelde software gebruikt. Het geeft de klant op een eenvoudige manier toegang tot het diepgaand capteren van de complexe fysica van warmte-overdracht in vloeistoffen, vaste stoffen en gasstromen in het ontwerp. Deze manier van werken vereist niet dat klanten experts zijn in thermisch design, en biedt hen bovendien een geoptimaliseerd wetenschappelijk onderbouwd ontwerp.

De berekeningen achter het ontwerpen, simuleren en optimaliseren vergen bijzonder veel rekenkracht, waarvoor de VSC cluster uitstekend van pas komt. Met behulp van HPC kan Diabatix complexere thermische toepassingen sneller en diepgaander de baas. Diabatix oprichters Lieven Verdecken en Joris Coddé: "Reeds tijdens ons doctoraatsonderzoeks hebben we ervaring opgedaan met het gebruik van HPC, ook in het VSC. Hierdoor kunnen we thermische ontwerpstudies laten doorrekenen op honderden processoren, wat de rekentijd typisch 50 maal korter maakt."



Warmte-verspreider voor indirecte batterij-koeling

## 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, Ward Poelmans  
Geert Jan Bex  
Rosette Vandebroucke  
Caroline Volckaert  
Stefan Weckx

### **Creatie en vormgeving**

Billie Bonkers

Uitgegeven in juni 2017

**fwo**  
Opening  
new  
horizons