

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 slightly larger and positioned to the right. The logo is set against a background of a large, light blue diamond shape composed of many thin, overlapping lines that create a grid-like pattern.

Vlaams Supercomputer Centrum

Jaarverslag 2015

www.vscentrum.be

Inhoud

Voorwoord	3
Het VSC uitgelicht	4
Een kort overzicht van HPC in Vlaanderen	4
Het Vlaamse model	6
Financiering van Tier-1 en Tier-2	8
Strategisch plan voor grote rekencapaciteit voor onderzoek en innovatie in Vlaanderen – 2015-2020	8
De tweede Vlaamse Tier-1	9
Tier-2 Infrastructuur en projecten per instelling	11
Exploitatie en gebruik	11
KU Leuven en Universiteit Hasselt	11
Universiteit Gent	12
Universiteit Antwerpen	13
Gebruik	16
Projecten	22
Gebruikersondersteuning	23
Beantwoorden van vragen van gebruikers	23
Bijeenkomsten met gebruikers / specifieke ondersteuning	24
Personeel	27
Subsidiëring	27
Effectieve personeelsinzet	27
Profielen	27
Gevorderde ondersteuning	28
Personeelslijst	29
Rekenen op de VSC infrastructuur	30
Toekennen rekentijd Tier-1	30
Toekennen rekentijd Tier-2	31
Tier-1 Starting Grants / Exploratory Access	32
Goedgekeurde Tier-1 aanvragen	33
Grafieken over het gebruik van Tier-1	36
Outreach naar Vlaamse bedrijven	38
Dienstverlening aan bedrijven	38
Gebruik van Tier-1 door bedrijven	38
Bekendmaking naar bedrijven en andere kennisinstellingen	39
Opleidingen	41
Organisatie en bekendmaking van opleidingen	41
Opleidingsprogramma	41
Communicatie en evenementen	44
VSC ECHO	44
Gebruikersdag 2015	44
Deelname aan (inter)nationale evenementen	45
Deelname aan nationale evenementen	45
Georganiseerd door andere organisaties	45
Internationale samenwerking	46
PRACE	46
EGI	46
SESAME Net	46
Contacten met andere HPC centra	46
Deelname congressen en workshops	47
Succesverhalen VSC	49
Bekaert nv: modeling wire manufacturing	49
Evolutionary Systems Biology lab (UGent, VIB)	50
Het VSC-werkplan 2016	51

Voorwoord

Het VSC, het samenwerkingsverband tussen de Vlaamse universiteiten en de Herculesstichting, kwam in 2015 op kruissnelheid.

De Vlaamse universiteiten bouwden hun Tier-2 capaciteit verder uit. Het VSC zorgt ervoor 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.

Om de zichtbaarheid van het VSC te vergroten, werd de VSC-website grondig vernieuwd waarbij de informatie doelgericht wordt aangeboden aan academici en de industrie. Het aantal opleidingen over het gebruik van de Tier-1 en de Tier-2 dat georganiseerd wordt voor onderzoekers uit de Vlaamse universiteiten, de strategische onderzoekscentra en de andere publieke kennisinstellingen, maar ook voor de bedrijven, werd uitgebreid. Ook in de VSC Echo, de elektronische nieuwsbrief van het VSC, wordt de informatie hierover op ruime schaal verspreid.

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 2015 werden op drie momenten aanvragen beoordeeld. In het totaal werden 109.704 nodedagen toegekend aan 32 projecten. Aan de onderzoekers wordt een beperkt deel van de kosten aangerekend om iedereen bewust te maken welke belangrijke investeringen de Vlaamse overheid in de HPC infrastructuur doet. Ook worden kosten aangerekend voor het gebruik van scratch schijfruimte waarbij 1 TB per aanvraag gratis ter beschikking wordt gesteld.

De Gebruikerscommissie brengt de noden van de gebruikers in kaart en organiseerde een succesvolle Gebruikersdag eind 2015.

Ook aan de samenwerking met bedrijven werd aandacht besteed. Met de hulp van de Industrial Board werden initiatieven ontwikkeld 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. De eerste Industry Day begin 2015 kende dan ook een talrijke opkomst.

2016 wordt een uitdagend jaar voor het VSC. Het wordt immers het jaar waarin de structurele hervormingen, aangekondigd in het regeerakkoord en de beleidsnota van de voogdijminister Philippe Muyters, vorm krijgen. Niet alleen worden de activiteiten van de Herculesstichting overgenomen door het FWO waarbij continuïteit van prioritair belang wordt. Ook wordt reikhalzend de ingebruikname van de nieuwe supercomputer aan de KU Leuven afgewacht die vanaf midden 2016 operationeel wordt. Wij kijken er alvast naar uit!

KU Leuven: Leen Van Rentergem, Jan Ooghe

UAntwerpen: Annie Cuyt, Stefan Becuwe

UGent: Ewald Pauwels

UHasselt: Geert Jan Bex

VUB: Rosette Vandenbroucke

Herculesstichting: Bart De Moor, Marc Luwel

Het VSC uitgelicht

Een kort overzicht van HPC in Vlaanderen

De voorbije halve eeuw hebben onderzoek en technologische innovatie ervoor gezorgd dat de informatie- en communicatietechnologieën (ICT) zich razendsnel konden ontwikkelen. Daarenboven heeft ICT door onder meer de ontwikkeling van krachtige computers een grote impact op onderzoek en innovatie. Grote rekencapaciteit (High Performance Computing - HPC) maakt het mogelijk uit de steeds grotere volumes data waardevolle informatie te distilleren en zware rekentaken binnen een haalbare tijdspanne uit te voeren.

Naast theoretisch werk en experimenten heeft HPC ook de weg geopend om op een derde manier onderzoek te verrichten: het simuleren van de werkelijkheid in silico. Grote numerieke simulaties worden niet alleen in fundamenteel onderzoek gebruikt; ze hebben alsmaar een grotere impact op de innovatieve capaciteit van een bedrijf, een sector of een land omdat ze aan de basis liggen van de ontwikkeling van nieuwe producten en diensten of het verbeteren van bestaande producten en diensten. Voorbeelden zijn legio: van nauwkeurigere weersvoorspellingen en gepersonaliseerde geneesmiddelen tot veiligere, goedkopere auto's en aantrekkelijke animatiefilms.

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. In 2007 wees de Koninklijke Vlaamse Academie van België voor Wetenschappen en Kunsten (KVAB) in het rapport 'Advies van de KVAB over High Performance Computing (HPC) in Vlaanderen' op het groeiend belang van HPC en de noodzaak dat Vlaanderen snel een initiatief zou nemen om aansluiting te vinden bij de internationale ontwikkelingen.

In het Europees model voor 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 rapport van de KVAB werd aanbevolen in Vlaanderen een Tier-1 supercomputer te installeren die toegankelijk moet zijn voor de universiteiten, de publieke kennisinstellingen en de bedrijven. Er werd benadrukt dat investeren in een Tier-1 maar zinvol is als er tegelijkertijd over gewaakt wordt dat elke universiteit over een eigen performante Tier-2 capaciteit beschikt. Er werd ook aangegeven dat hard- en software alleen niet volstaan.

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 krachtige computers.

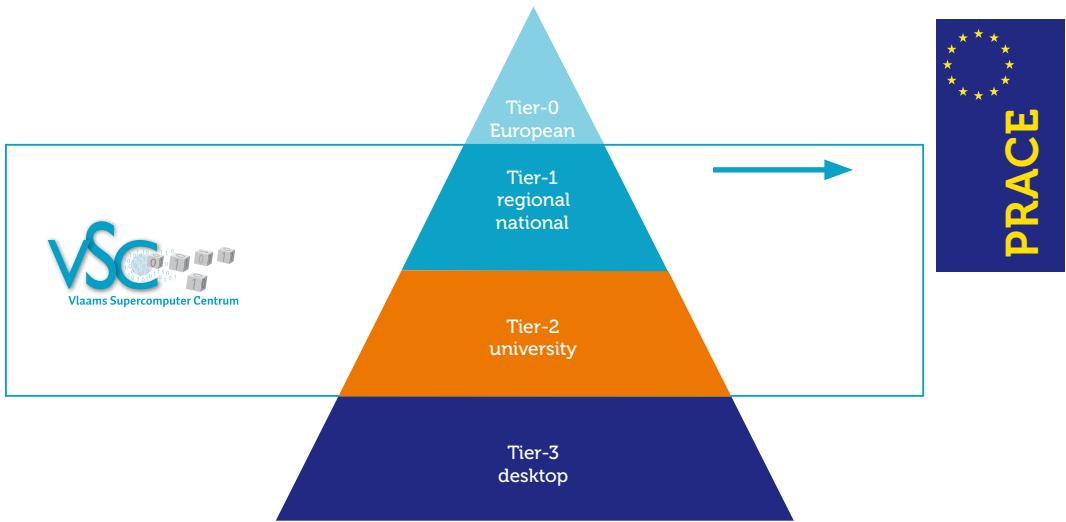
Tenslotte werd in het rapport ook gewezen op de internationale ontwikkelingen en mogelijkheden die de toepassingen op Tier-0 machines voor Vlaamse onderzoekers bieden.

Ongeveer gelijktijdig met dit advies besliste het Strategisch Forum voor Onderzoeksinfrastructuur¹ (ESFRI) om het voorstel Partnership for Advanced Computing in Europe (PRACE) van strategisch belang voor de Europese Unie te beschouwen en op te nemen in de ESFRI-roadmap.

In de volgende jaren werden de aanbevelingen van de KVAB grotendeels gerealiseerd. In 2006 kende de Vlaamse minister bevoegd voor Wetenschap en Innovatie, aan het Vlaams Supercomputercentrum (VSC), een consortium van alle Vlaamse universiteiten, projectmatige financiering toe om de Tier-2 capaciteit aan deze instellingen te vernieuwen en uit te breiden. Er werden eveneens middelen vrijgemaakt voor het bezoldigen van medewerkers die de gebruikers ondersteunen en voor het uitvoeren van een studie over de installatie van een Tier-1 supercomputer in Vlaanderen.

¹ ESFRI: voor meer informatie, ga naar http://ec.europa.eu/research/infrastructures/index_en.cfm?pg=esfri





In het kader van de eerste oproep voor zware onderzoeksinfrastructuur die de pas opgerichte Herculesstichting in 2007 publiceerde, diende het VSC een aanvraag in voor bijkomende financiering voor de Tier-2 infrastructuur. De Commissie Hercules-Science die de raad van bestuur van de Stichting over de wetenschappelijke kwaliteit van aanvragen adviseert, beoordeelde dit dossier positief maar adviseerde de bevoegde Vlaamse minister de nodige middelen te voorzien voor de installatie van een Tier-1. Op basis hiervan besliste de Vlaamse regering een eenmalige financiering toe te kennen voor de aankoop van een Tier-1 supercomputer.

De Universiteit Gent was bereid om met eigen middelen voor de huisvesting te zorgen. Eind 2012 werd de Tier-1 supercomputer dan ook officieel in gebruik genomen. Dit gebeurde met de middelen die in 2008 toegekend werden en aangevuld werden met een deel van de financiering van de Herculesstichting. Hiermee werden aan elke universiteit medewerkers gefinancierd voor de opleiding en de ondersteuning van gebruikers. Ter aanvulling van de overheidssubsidies, financieren deze instellingen met eigen middelen een belangrijk deel van de kosten en bijkomend personeel. De universiteiten beschouwen immers de uitbouw van grote reken capaciteit van strategisch belang.

Het in stand houden en verder uitbouwen van een performante HPC-infrastructuur op

basis van projectmatige financiering liep eind 2011 tegen z'n limieten aan. Vanaf 2012 kende de Vlaamse overheid aan de Herculesstichting 1,5 miljoen euro structurele financiering toe voor het subsidiëren van HPC aan de kennisinstellingen. Vanaf 2013 werd dit verhoogd tot 4 miljoen euro.

Supercomputer infrastructuur kent echter maar een beperkte levensduur. Zo zal het onderhoudscontract voor de eerste Tier-1 supercomputer aan de UGent aflopen eind 2016. Continuïteit is echter voorzien want vanaf eind 2016 wordt de tweede Tier-1 in Vlaanderen, geïnstalleerd aan de KU Leuven, operationeel.

Het Vlaamse model

Voor de uitbouw van HPC in Vlaanderen biedt het consortium model belangrijke voordelen en bovendien drukt het de kosten. De Tier-1 en de 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. Zoals reeds aangegeven werd, investeren de universiteiten met eigen middelen mee in de HPC- infrastructuur en kan men beroep doen op de centrale diensten van deze instellingen. Bovendien biedt de inbedding in een academische omgeving opportuniteiten voor de samenwerking met industriële partners.

Het ontbreken van structurele financiering bleek niet het enige pijnpunt bij het verder uitbouwen van HPC in Vlaanderen. Er was ook nood aan een meer gestructureerd kader voor overleg tussen de universiteiten en aan een grotere betrokkenheid van de strategische onderzoekscentra en de andere Vlaamse publieke kennisinstellingen. Er was behoefte aan een duidelijk aanspreekpunt voor de overheid en aan bijkomende initiatieven om bedrijven te informeren over de mogelijkheden van HPC en deze te ondersteunen zodat ze er effectief gebruik kunnen van maken.

Op voorstel van de bevoegde Vlaamse minister keurde het Vlaamse Parlement hiervoor een regelgevend kader goed. Het decreet van 5 juli 2013 betreffende een structurele regeling voor grote reken capaciteit voor onderzoek en innovatie en betreffende de coördinatie van de regelgeving inzake wetenschaps- en innovatiebeleid (HPC-decreet) behoudt de voordelen van het universitair consortium maar legt ook de basis om de werking ervan te verbeteren.

De opdracht van de Herculesstichting werd verruimd met de structurele financiering van HPC en het beheer van de Tier-1. In uitvoering van deze decretale bepalingen keurde de raad van bestuur een aanpassing van de statuten van de Herculesstichting goed. Om de rol van

de strategische onderzoekscentra te vergroten werd de samenstelling van de raad van bestuur van de Herculesstichting, waarvan het mandaat begin 2014 afliep, gewijzigd.

Na de goedkeuring van dit decreet besliste de raad van bestuur van de Herculesstichting de rol van de werkgroep - die bestaat uit de medewerkers van de Stichting en de personen die aan elke universiteit belast zijn met de coördinatie van de HPC-activiteiten - te versterken. De **VSC stuurgroep** vergadert maandelijks. Tijdens deze meetings worden niet alleen operationele afspraken gemaakt maar wordt ook strategisch advies aan de raad van bestuur gegeven.

Om de samenwerking met de bedrijven maar ook de non-profit sector uit te bouwen voorziet het decreet dat een **Industrial Board** opgericht wordt waarvan de voorzitter uit het bedrijfsleven komt en tevens lid is van de raad van bestuur van de Stichting.

Deze raad helpt mee een beleid uit te stippelen om de betrokkenheid van de Vlaamse industrie in High Performance Computing 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 21 februari 2014 werden de leden van deze adviesraad benoemd door de Vlaamse regering: Mia Vanstraelen (voorzitster), Herman Van der Auweraer, Ludo Lauwers, Christian Van de Sande, Saskia Van Uffelen, Charles Hirsch. In verscheidene brainstormsessies met de HPC-coördinatoren werd vorm en richting gegeven aan een VSC-beleid dat meer en beter gericht is op Vlaamse bedrijven en KMO's. Onder meer de concrete voorstelling van het aanbod van het VSC en de VSC Industry Day in Technopolis (op 27 januari 2015) waren hiervan een rechtstreeks gevolg.

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, stelt de raad van bestuur van de Herculesstichting een **Gebruikerscommissie** in van minstens zeventien leden, op voordracht van de associaties universiteit-hogescholen, de strategische onderzoekscentra en de Industrial Board.



Eén lid wordt aangeduid door de Vlaamse minister, bevoegd voor wetenschap en innovatie. Daarnaast heeft elke universiteit een eigen gebruikerscommissie.

De leden werden benoemd voor een periode van drie kalenderjaren, ingaand op 26 juni 2014.

Leden Gebruikerscommissie 2015

voorgedragen door	naam	instelling / organisatie
Vlaamse Regering	Francisco Hernandez	VLIZ
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	UGent
Associatie Antwerpen	Michele Giugliano	UAntwerpen
	Wouter Herrebout	UAntwerpen
Associatie Brussel	Frank De Proft	VUB
Associatie Limburg	Niel Hens	UHasselt
SOC	Clemens Mensink	VITO
	Steven Maere	VIB
	Piet Demeester	iMinds
	Wilfried Verachtert	IMEC

Om voeling te houden bij de noden van nieuwe gebruikers is het wenselijk dat periodiek een aantal leden kunnen worden vervangen.

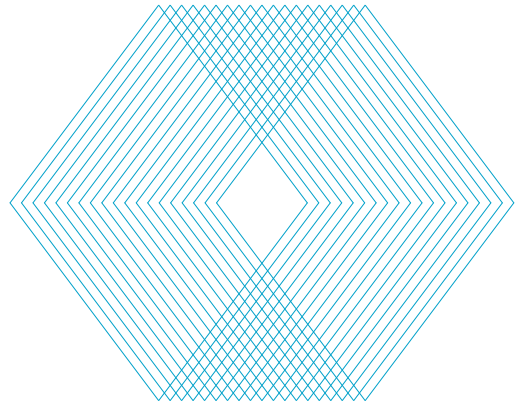
In 2015 gaf de Gebruikerscommissie advies rond het reglement van toepassing op de Tier-1 en organiseerde een geslaagde Gebruikersdag op 30 november 2015.

Financiering van Tier-1 en Tier-2

In 2012 kende Vlaamse regering aan de universiteiten een eenmalige toelage van 5 miljoen euro toe voor het vernieuwen en uitbreiden van hun Tier-2 infrastructuur. Vanaf 2012 beschikte de Herculesstichting over een structurele financiering voor HPC. In 2013, 2014 en 2015 was hiervoor 4 miljoen euro beschikbaar.

Deze middelen werden aangewend voor het financieren van:

- personeelskosten voor de exploitatie van de 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.)
- een deel van de energiekosten van de Tier-1 (175.000 euro);
- investeringen en werkingskosten voor de Tier-2 infrastructuur (2.210.000 euro); (De universiteiten hebben deze middelen vooral gebruikt voor bijkomende investeringen in Tier-2. Deze instellingen financieren met eigen middelen de energien en exploitatiekosten van de Tier-2.)



In onderstaande tabel wordt een overzicht gegeven van de verdeling van dit bedrag van 4 miljoen euro over de vijf Vlaamse universiteiten.

Rubriek	Tier1	KU Leuven	UHasselt	UGent	VUB	UAntwerpen	Totaal
Personeel in FTEs	2,0	5,0	1,0	4,0	2,0	3,0	17
Personeel in €	€ 190.000	€ 475.000	€ 95.000	€ 380.000	€ 190.000	€ 285.000	€ 1.615.000
Werking Tier-1	€ 175.000						€ 175.000
Herculesleutel 2013		0,4354	0,0300	0,3190	0,1004	0,1152	1,0000
Werking Tier-2		€ 962.234	€ 66.300	€ 704.990	€ 221.884	€ 254.592	€ 2.210.000
Totaal	€ 365.000	€ 1.437.234	€ 161.300	€ 1.084.990	€ 411.884	€ 539.592	€ 4.000.000

Voor de toekenning van de subsidies sloot de Herculesstichting 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.

Strategisch plan voor grote rekencapaciteit voor onderzoek en innovatie in Vlaanderen – 2015-2020

In de aanloop naar de verkiezingen voor het Vlaams Parlement van mei 2014 stelde de raad van bestuur van de Herculesstichting een strategisch plan op voor grote rekencapaciteit

voor onderzoek en innovatie in Vlaanderen en dit voor de periode 2015-2020. Jaarlijks wordt dit plan van een aanpassing voorzien om het uitgetekend pad te consolideren en verder uit te bouwen.

Deze aanpak is gebaseerd op de volgende vaststellingen:

- De ontwikkelingen binnen de ICT-sector gaan zo snel dat er om de 2 tot 3 jaar zowel voor Tier-1 als Tier-2 middelen nodig zijn om de infrastructuur te vernieuwen of uit te breiden;
- Investerings in hard- en software hebben maar zin als ze op een efficiënte manier gebruikt worden. Hiervoor is hooggekwalificeerd personeel nodig om de onderzoekers op te leiden en te ondersteunen;
- Er is een beperkte maar opgeleide staf nodig om de Vlaamse bedrijven maar ook de non-profit organisaties te informeren over de mogelijkheden die HPC biedt om hun competitieve positie te verbeteren en hen te ondersteunen en om gebruik te maken van al deze mogelijkheden;
- Vlaanderen dient zich verder in te schakelen in de internationale HPC-gemeenschap, waaronder PRACE zodat van de geboden mogelijkheden beter gebruik kan gemaakt worden (vb. opvolging technologische ontwikkelingen, modellen om samen te werken met bedrijven, opleidingen, ...).

Om op deze uitdagingen een antwoord te bieden zijn bijkomende investeringen nodig in zowel Tier-1 als Tier-2. Maar er is eveneens een uitbreiding van de VSC-staf nodig om de groeiende vraag aan opleiding en ondersteuning op een kwalitatief hoogstaande manier te kunnen invullen. Het bedrag van 4 miljoen euro waarover de Herculesstichting in 2015 beschikte, moet worden verhoogd tot 10 miljoen euro per jaar. De investering in nieuwe hardware wordt over twee begrotingsjaren gespreid nl. 2015 en 2016. In vergelijking met de buitenlandse HPC-centra gaat het nog steeds om een bescheiden financiering.

De tweede Vlaamse Tier-1

De eerste Vlaamse Tier-1 supercomputer, geïnstalleerd aan de UGent, werd in de eerste helft van 2013 in productie genomen en is stilaan aan vervanging toe. Op 20 juli 2012 legde de Vlaamse regering de werkwijze vast voor de

selectie van de universiteit die zou instaan voor de huisvesting van de tweede Tier-1. De raad van bestuur van de Herculesstichting besliste op 21 oktober 2014 een overeenkomst met de KU Leuven af te sluiten voor de huisvesting van de tweede Vlaamse Tier-1.

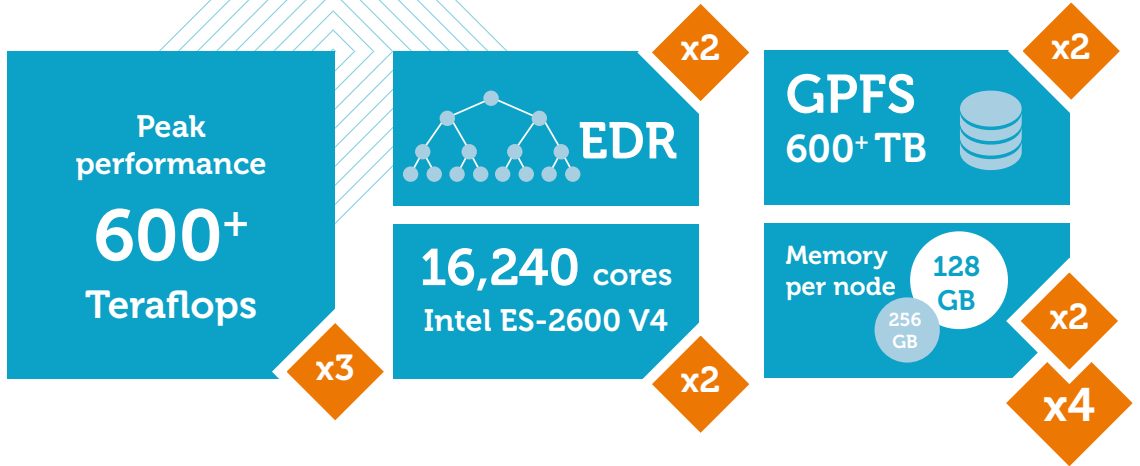
Bij de aanpassing van de begroting voor 2015 van de Herculesstichting besliste de raad van bestuur uit de investeringsdotatie voor de aankoop en de installatie van de tweede Tier-1 een bedrag van 5.5 miljoen euro toe te kennen: 1.950.000 euro in 2015 en 3.550.000 euro in 2016. Dit laatste onder de voorwaarde dat de Vlaamse Uitgavenbegroting 2016 wordt goedgekeurd. Een niet onbelangrijk feit is dat de KU Leuven gratis een uitgeruste zaal ter beschikking stelt voor het huisvesten van deze machine.

De nieuwe Tier-1 supercomputer is dus goed voor een investering van 5.5 miljoen euro. Via een openbare aanbesteding werd de firma NEC geselecteerd om de machine te bouwen. De supercomputer zal een theoretische piekperformance hebben van meer dan 600 TFlop/s. Daarmee zal de machine drie keer zo snel zijn als de eerste Vlaamse supercomputer in UGent, die inmiddels 3 jaar oud is. De supercomputer wordt uitgerust met de nieuwste Intel processoren en ook het geheugen, het interne netwerk en de opslagcapaciteit worden aangepast aan de complexe problemen die de computer zal moeten oplossen. De nieuwe machine wordt midden 2016 aan de KU Leuven geïnstalleerd en zal één van de 200 snelste computers ter wereld zijn.

De nieuwe Tier-1 supercomputer zal onderzoek ondersteunen naar bijvoorbeeld hernieuwbare energiebronnen, de ontwikkeling van nieuwe materialen of nieuwe medicijnen. De computer 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 computer 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-1 to Tier-1b



Tier-2 Infrastructuur en projecten per instelling

Exploitatie en gebruik

In deze sectie geven we een overzicht van de Tier-2 infrastructuur die binnen de verschillende Vlaamse universiteiten beschikbaar is. We illustreren eveneens het gebruik ervan.

KU Leuven en Universiteit Hasselt

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

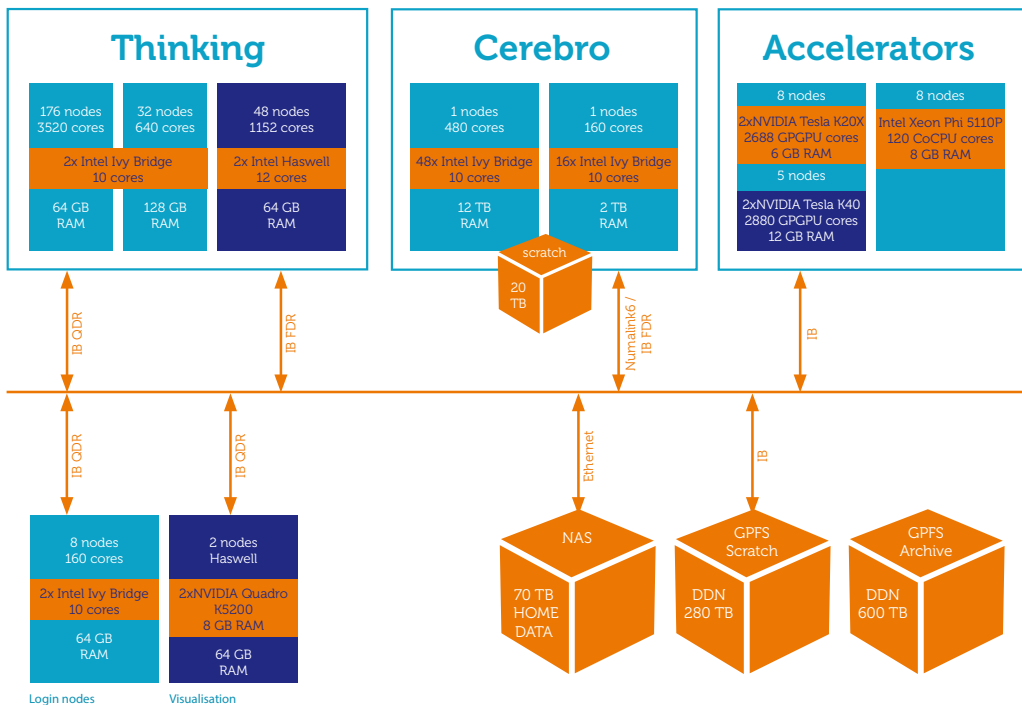
De infrastructuur bestaat uit:

- 2 clusters, 7 partities
- 150 TF
- 5312 CPU / 71808 accelerator cores
- 32 TB geheugen

De thin node cluster Thinking, werd eind december 2013 door HP geleverd. Het systeem is op 15 juli 2014 in productie gegaan. In maart 2015 werden 48 nodes toegevoegd, met een nieuwe generatie processoren (Haswell). Dit bracht het systeem op 256 nodes en een totale capaciteit van 138 Tflops.

In 2015 werd de accelerator sectie met 5 nodes uitgebreid. Deze nieuwe nodes bevatten 2 GPU kaarten van de laatste generatie (NVIDIA K40). De accelerator sectie is nog altijd een meer experimentele omgeving. Het beschikt niet over de capaciteit om grootschalig rekenwerk uit te voeren. De verwachting is dat er meer applicatie software, specifieke libraries of implementaties van nieuwe algoritmes beschikbaar worden die GPU versnelling gebruiken. De accelerator sectie geeft de onderzoekers de kans om deze zaken te evalueren.

In 2015 werden 2 specifieke visualisatie nodes toegevoegd aan de cluster. De GPU's (NVIDIA Quadro K5200) in deze nodes worden gebruikt voor visualisaties, niet voor general purpose computing.



Afbeelding 1 - Tier-2 infrastructuur KU Leuven

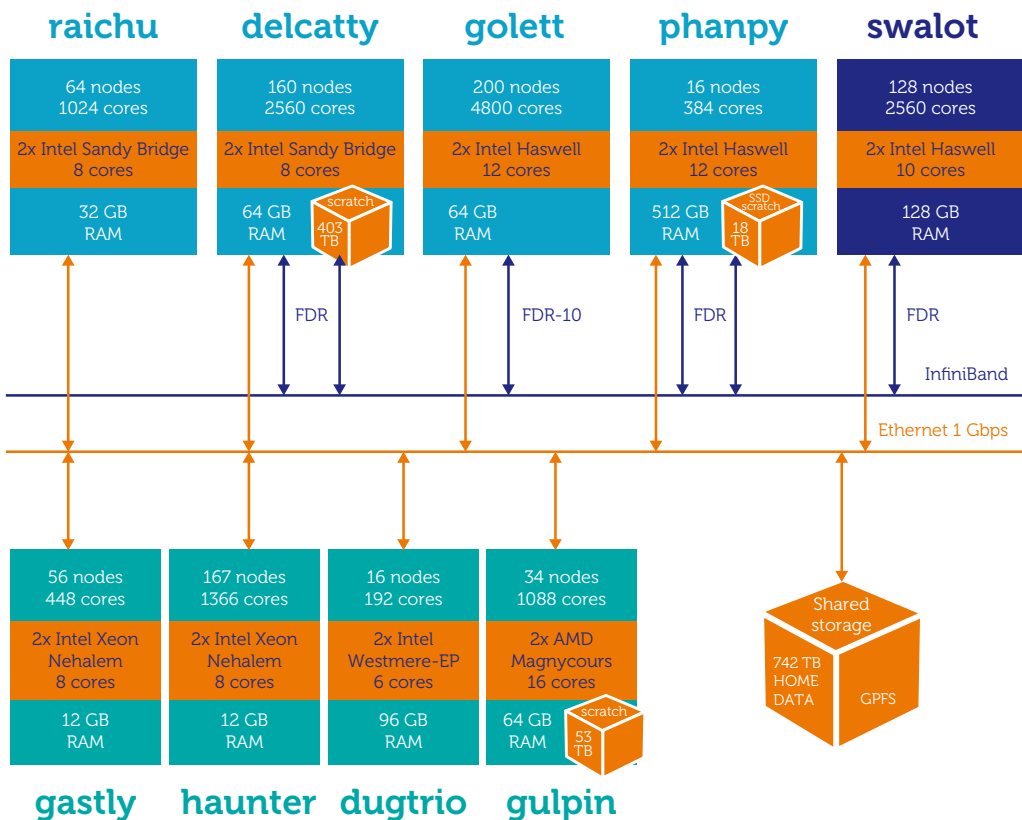
Universiteit Gent

UGent investeert reeds sedert meerdere jaren in de uitbouw van een performante Tier-2 infrastructuur. Deze bestaat thans uit:

- 5 clusters
- 174 TF
- 8768 CPU cores
- 49 TB geheugen

De Tier-2 infrastructuur is opgebouwd uit verschillende clusters, in functie van specifieke kenmerken. In de loop van 2015 werden vier oudere clusters uit dienst genomen: batch clusters *haunter* en *gastly*, MPI cluster *gulpin* en cluster *dugtrio*. Met de vervanging werd proactief begonnen in 2014 met de aankoop van clusters *golett* en *phanpy*. Beiden gingen in productie in juni 2015.

Eind 2015 werd *swalot* aangekocht (Dell), een nieuwe MPI cluster om multi-node jobs te faciliteren. Deze zal in productie gaan tegen juni 2016.



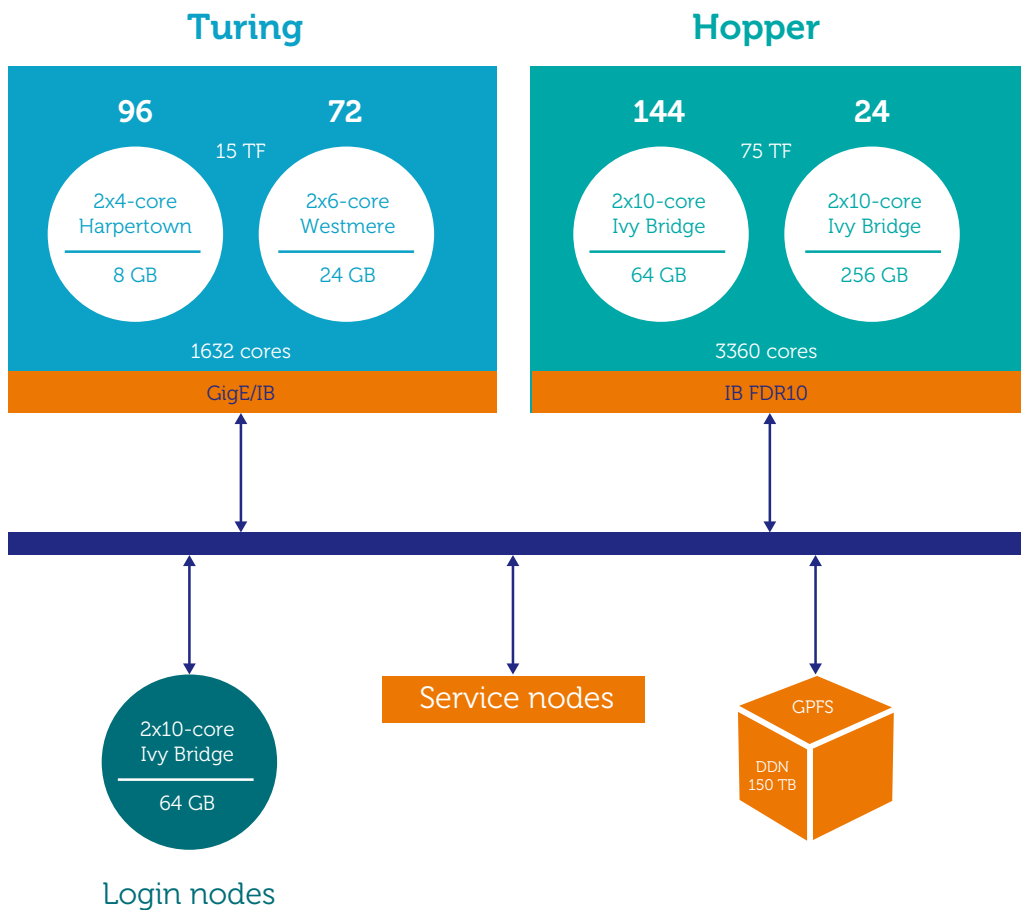
Afbeelding 2 - Tier-2 infrastructuur UGENT

Universiteit Antwerpen

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

- 2 clusters / 4 partities
- 90 TF
- 4992 CPU cores
- 12 TB geheugen

In de loop van 2014 is aan de Universiteit Antwerpen de cluster *Hopper* geleverd door HP. Initieel bestond de cluster uit 120 nodes. Daarvan zijn er 24 zogenaamde *fat nodes*, met 256 GB geheugen. Dit laat onderzoekers met grotere geheugenvereisten toe de cluster efficiënter te gebruiken. In het najaar werden nog 48 nodes toegevoegd. Zo beschikte de UAntwerpen begin 2015 over een cluster met een theoretische rekenkracht die vijf keer groter is dan *Turing*, de vorige cluster die nog steeds in gebruik is. Samen met *Hopper* werd ook een nieuw storage systeem in gebruik genomen.



Afbeelding 3 - Tier-2 infrastructuur Universiteit Antwerpen

Vrije Universiteit Brussel

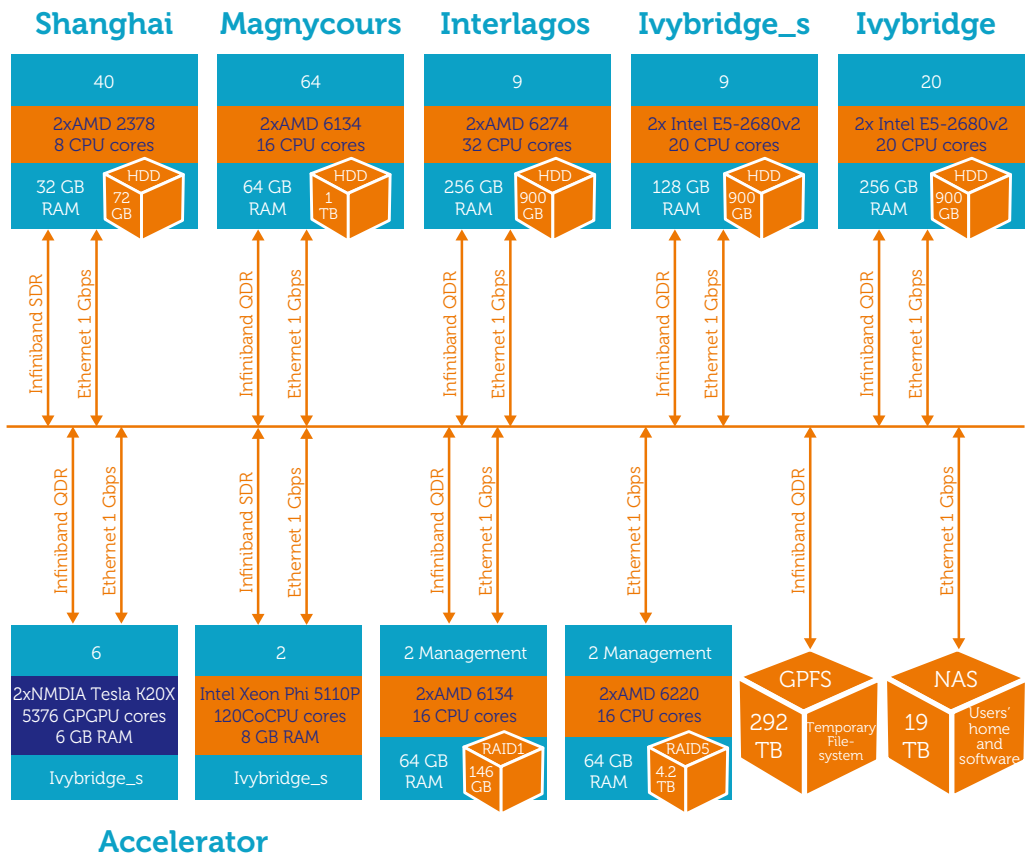
De Tier-2 omgeving aan de VUB ziet er uit als volgt:

- 1 cluster / 5 partities
- 16 TF
- 2436 CPU cores / 32496 accelerator cores
- 14 TB geheugen

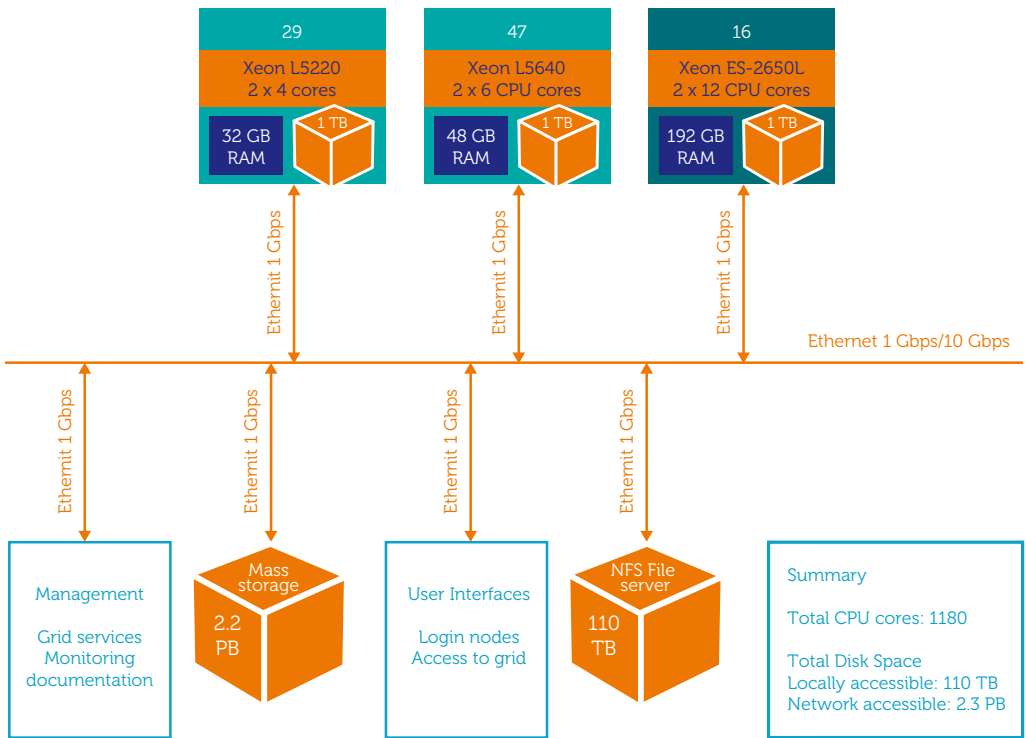
Aan de VUB werd er gekozen om uitbreidingen steeds binnen dezelfde Hydra omgeving te doen. Dit heeft een zeer heterogene cluster tot gevolg, die beantwoordt aan de verschillende noden van de verschillende onderzoeksgroepen. In 2015 werden een aantal van de oudste partitie (Shanghai) buiten werking gesteld. Er werd 292 TB aan opslagruimte bijgevoegd.

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. De extra opslagcapaciteit van 1.2 PB storage werd in 2015 in gebruik genomen zodat nu 2.3 PB opslag beschikbaar is. Een aantal oude nodes werden uit gebruik genomen. Toevoeging van meer rekencapaciteit is gepland in 2016.

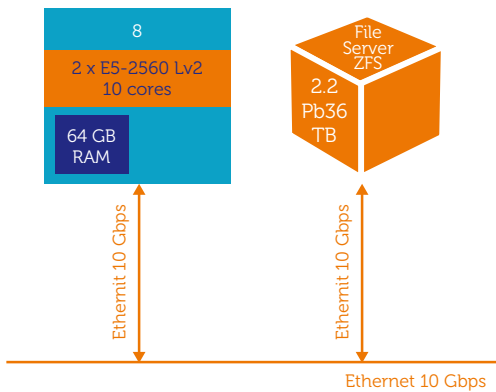
Tenslotte beschikt de VUB over een testopstelling voor de cloud-infrastructuur.



Afbeelding 4 - Tier-2 infrastructuur VUB



Afbeelding 5 - Grid infrastructuur VUB



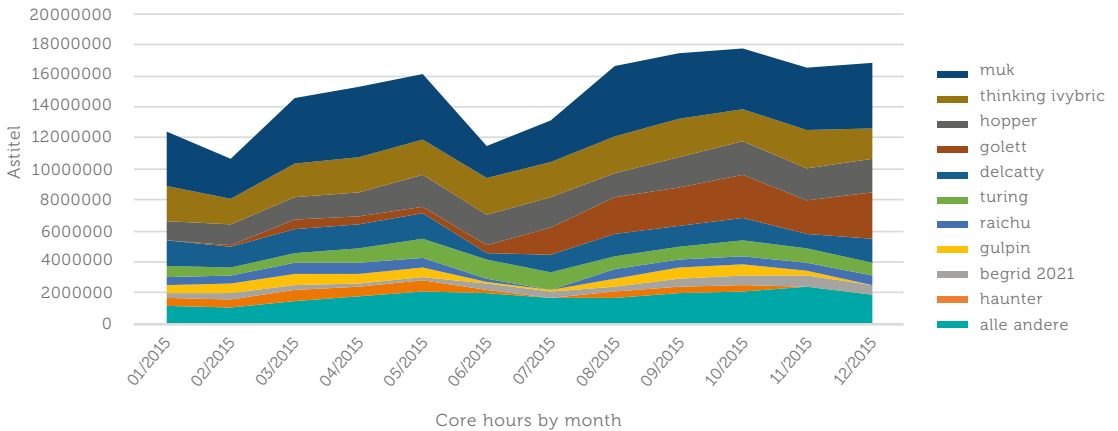
Afbeelding 6 - Cloud infrastructuur VUB

Gebruik

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

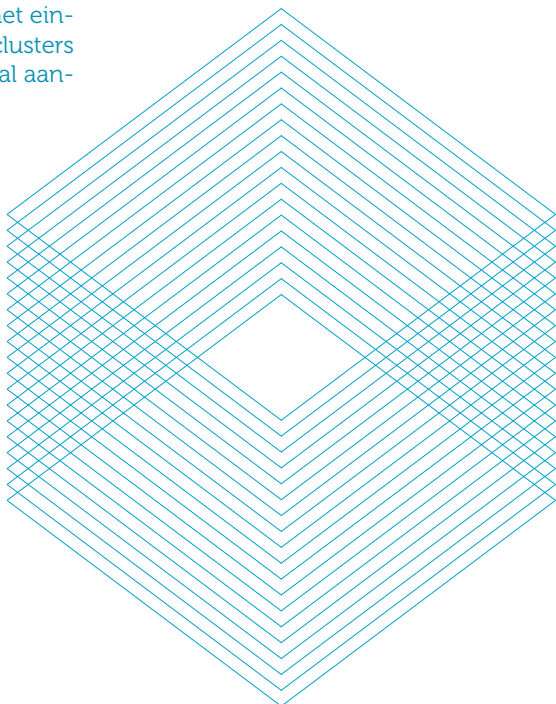
Voor het rapporteren over het gebruik beschikt VSC over een centrale XDMoD infrastructuur die alle data van de verschillende clusters verzamelt en de nodige overzichten genereert.

CPU core uren: Alle VSC resources

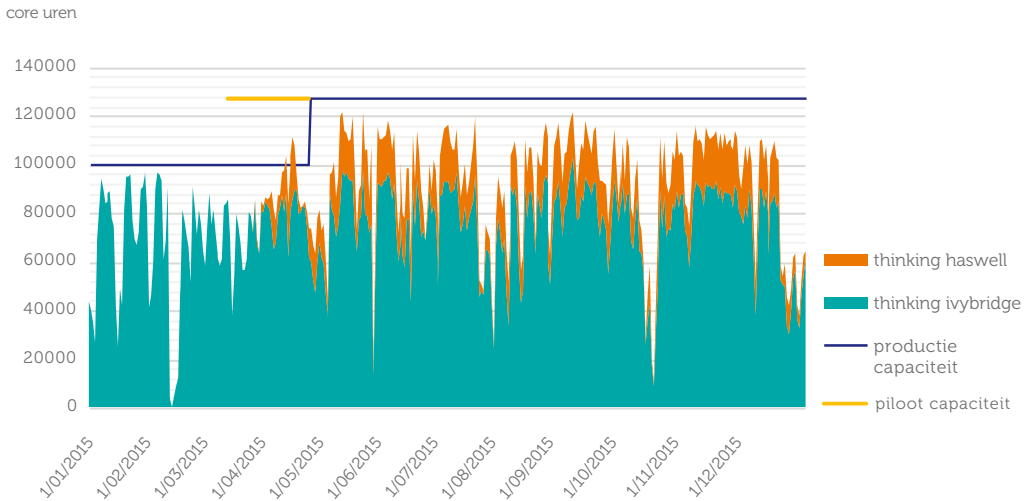


Afbeelding 7 - Gecumuleerd gebruik van de Tier-1 en Tier-2 infrastructuur

Afbeelding 7 geeft het gecumuleerde gebruik weer van de Tier-1 (muk) en Tier-2 infrastructuur. Er is een duidelijk verschil merkbaar tussen het begin en het einde van het jaar. Tegen het einde van 2014 zijn enkele nieuwe Tier-2 clusters volledig operationeel waardoor het totaal aandeel van Tier-2 toeneemt.



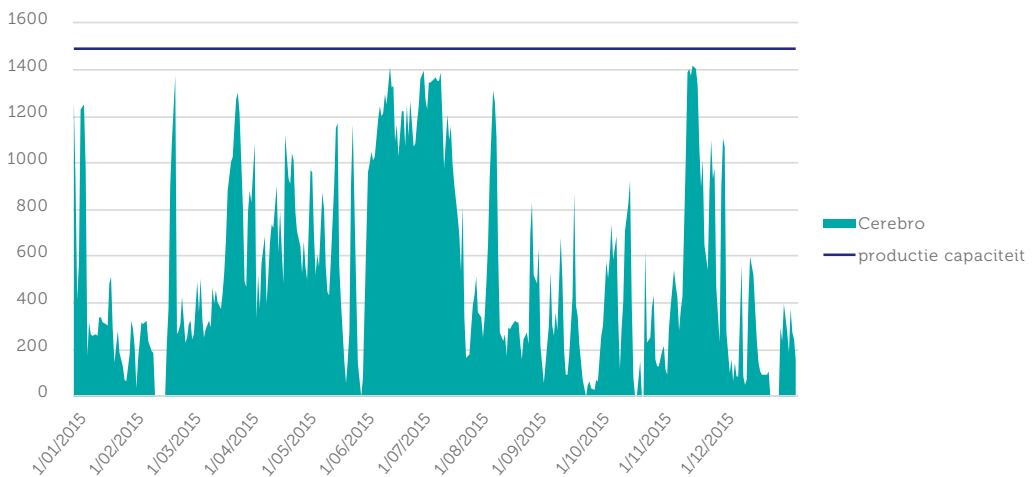
Gebruikte CPU-uren op thin node clusters KU Leuven



Afbeelding 8 - Gebruik van de KU Leuven infrastructuur

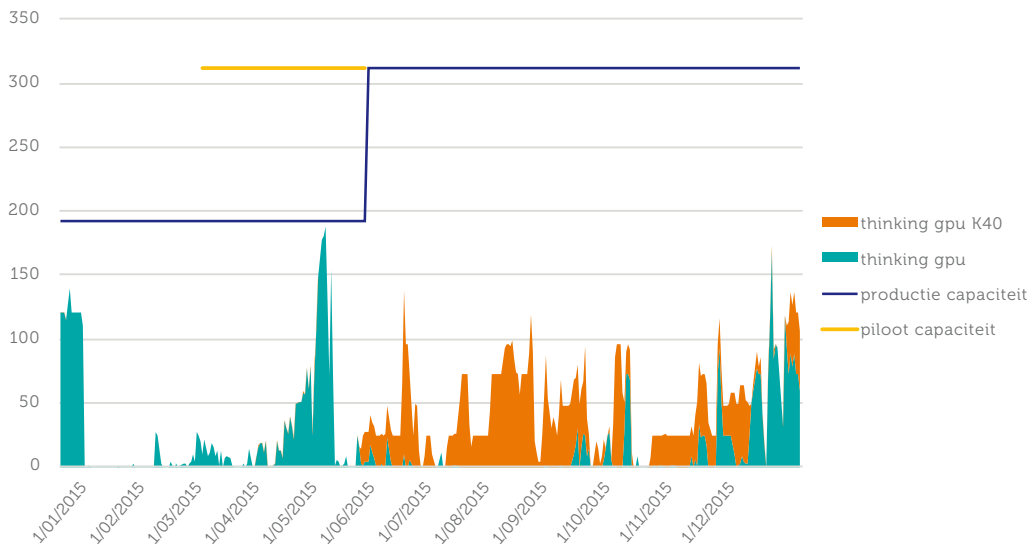
Afbeelding 8 geeft een overzicht van het gebruik van de infrastructuur aan de KU Leuven. De grafiek stelt het cumulatieve gebruik voor van de verschillende thin node clusters aan de KU Leuven. De cluster bestaat uit een partitie met Ivy-Bridge processoren en een nieuwe, kleinere, partitie met Haswell processoren. De ivy-bridge partitie is op dagbasis regelmatig 80-90% bezet en na de inloop periode heeft de Haswell partitie ook een goede bezetting. Midden oktober was er een langere downtime van de cluster. Deze werd gebruikt om het filesysteem te reorganiseren.

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



Afbeelding 9 - Gebruik van shared memory

Gebruikte node-uren op GPU cluster KU Leuven - UHasselt



Afbeelding 10 - Gebruik van acceleratoren

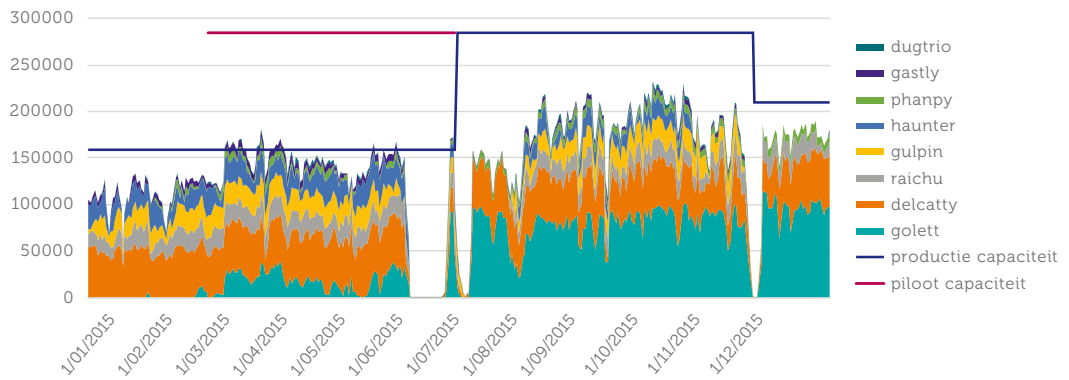
Buiten de thin node rekencluster is er aan de KU Leuven ook nog een shared memory machine en een opstelling met GPU en Xeon Phi acceleratoren. Het gebruik van deze machines wordt uitgedrukt in node-uren en niet in core-uren. Dit komt omdat dikwijls de volledige node wordt gebruikt omwille van het geheugen 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. Door de grote geheugencapaciteit kunnen hier jobs lopen die minder of niet geschikt zijn voor de thin node cluster.

In 2015 was het GPU gebruik nog steeds beperkt. Eind 2015 zien we echter wel meer interesses voor de GPU's, en dat is een trend die zich alvast doorzet begin 2016.

De Xeon Phi acceleratoren zijn niet opgenomen in de grafiek. Dat er nog niet veel code ontwikkeld is voor de Xeon Phi acceleratoren, blijkt ook uit het zeer lage gebruik. Met de toekomstige generatie Intel processoren kan dit wel veranderen.

Gebruikte CPU-uren op thin node clusters UGent



Afbeelding 11 - Gebruik van de infrastructuur aan de Universiteit Gent

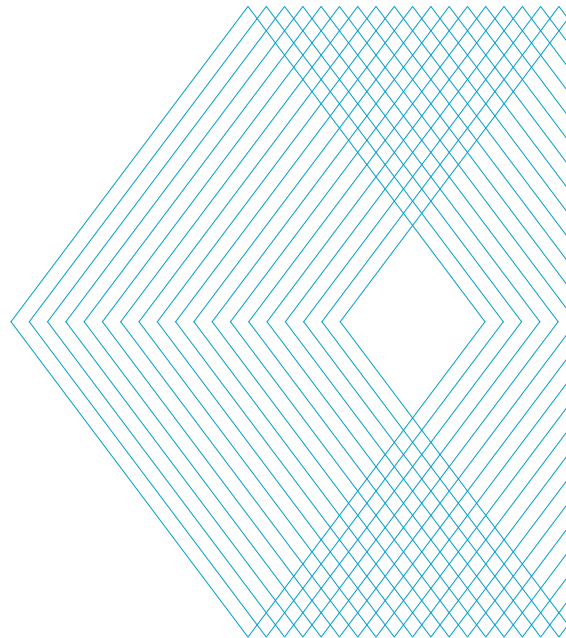
Afbeelding 11 geeft het cumulatieve gebruik in 2015 weer van alle HPC-clusters aan de Universiteit Gent.

Een tweede dip in de capaciteit in november 2015 is te wijten aan een gepland onderhoudsvenster van enkele dagen.

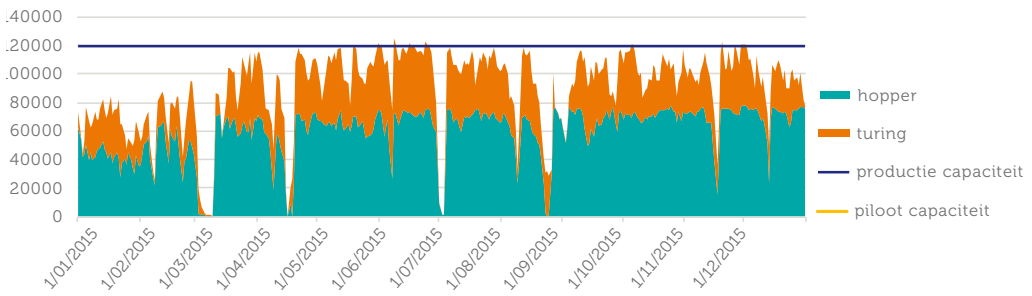
In de loop van 2015 werden twee nieuwe clusters (golett en phanpy) in productie genomen. Gedurende enkele maanden draaiden deze in parallel met de vier oudere clusters die ze vervangen, met bijna een verdubbeling tot gevolg van de totale capaciteit van de rekeninfrastructuur aan de UGent. Nadat de oudere clusters uit dienst werden genomen, stabiliseerde de capaciteit op 130% van het niveau begin 2015 – een netto toename in capaciteit van 30% dus.

Op gemiddelde basis is 75% van de totale rekeninfrastructuur aan de UGent in gebruik. Twee dips in gebruik zijn zichtbaar in bovenstaande afbeelding.

Door een ernstig hardware falen in de centrale HOME/DATA storage eenheid begin juni 2015, waren alle Tier-2 compute nodes voor langere tijd niet bruikbaar. Het probleem werd, in samenspraak met de leverancier, zo snel mogelijk opgelost. Door het hardware falen was een deel van de centrale storage data corrupt geworden en deze moest herbouwd worden uit een emergency copy. Gezien de grootte van de storage (737 TB) nam dit proces veel tijd in beslag. Alle clusters werden gefaseerd vrijgegeven in juli 2015. Door de inspanningen van ons team had uiteindelijk geen enkele gebruiker dataverlies geleden.



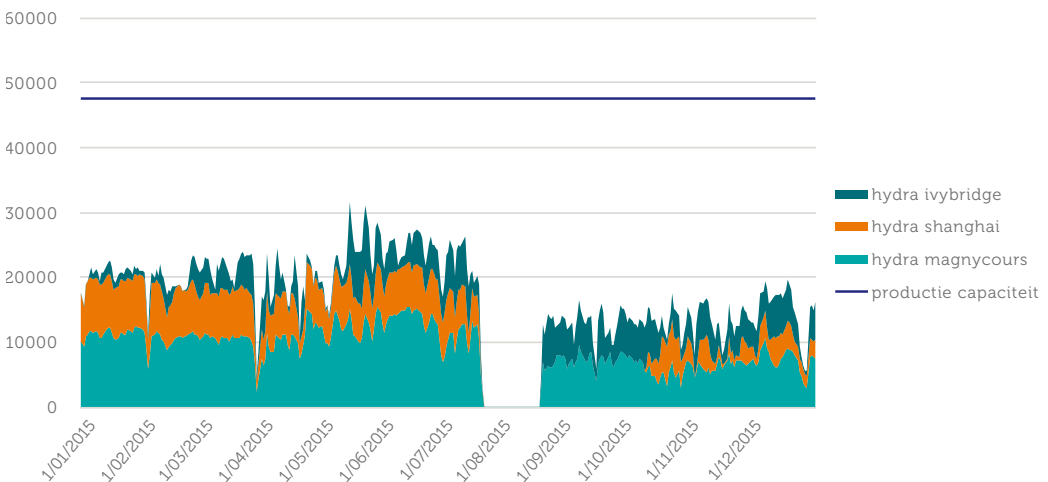
Gebruikte CPU-uren op thin node clusters UAntwerpen



Afbeelding 12 - Gebruik van de infrastructuur van de Universiteit Antwerpen

De grafiek van Afbeelding 12 telt 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, april en augustus, was er een voorzien onderhoudsvenster eind juni-begin juli, en zijn er enkele korte onderbrekingen geweest ten gevolge van stroompannes. 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 13 - Gebruik van de VUB infrastructuur

In de zomerperiode werd een langere onderhoudsperiode uitgevoerd voor het VUB-ULB datacenter. Grote electriciteitswerken op de ULB campus en electriciteitswerken in het datacenter maakten het noodzakelijk om een periode van enkele weken met complete downtime in te lassen. In deze periode werden ook firmware- en besturingssysteemupgrades uitgevoerd op de cluster en werd een nieuw storage systeem toegevoegd. In augustus werd de cluster terug beschikbaar, maar was het job logging systeem niet operationeel, vandaar een langere periode waarover geen cijfers kunnen gerapporteerd worden.

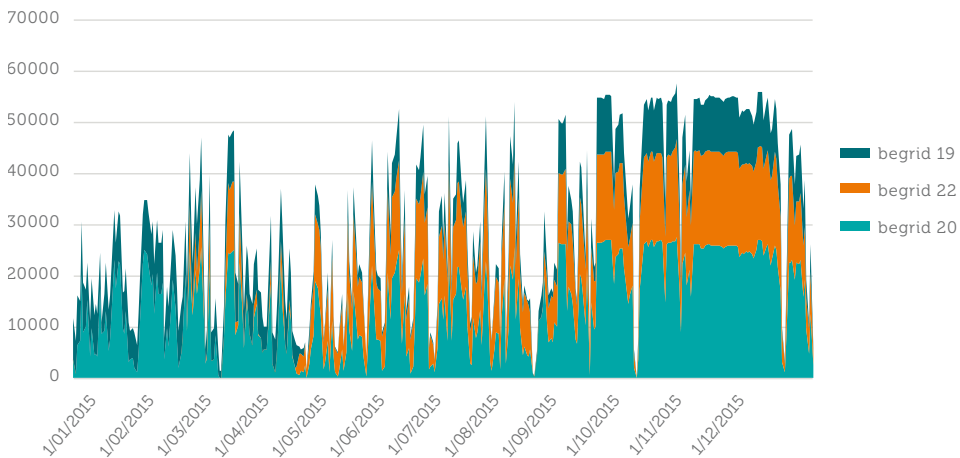
Na de opstart in september zijn de Shanghai nodes niet aanwezig in de rapportering. Deze werden zoals gepland uit productie genomen, maar omwille van opdrachten die de rekenkracht vereisten werden ze terug in productie genomen.

Na de opstart is er een daling in het gebruik, deze is te wijten aan een "bug" in de nieuwe versie van de scheduling software, waarvoor de leverancier nog geen oplossing voorzien heeft.

Op de Hydra clusters worden zowel jobs uitgevoerd die alle rekernelen in een node gebruiken als jobs niet alle cores gebruiken maar wel de volledige node nodig hebben omwille van de geheugenvereisten. Deze mix geeft een vertekening in bezettingsgraad volgens core uren of node, daarom werd het totaal aantal beschikbare core uren niet aangeduid op de grafiek.

BEgrid 19, BEgrid 20-21 en BEgrid 22 zijn de drie delen van de BEgrid cluster aan de VUB. De BEgrid 22 nodes werden in maart 2015 in gebruik genomen. De belasting van de grid-cluster gaat in stijgende lijn en een uitbreiding is voorzien in 2016.

Gebruikte CPU-uren op de BEgrid clusters VUB



Afbeelding 14 - Gebruik van BEGrid cluster aan de VUB

Projecten

Voor de uitbouw van de grote rekencapaciteit voor onderzoek wordt binnen het VSC projectmatig gewerkt.

In deze sectie geven we een overzicht van de projecten van 2015.

Accountpagina

Op de accountpagina moeten nieuwe gebruikers hun publieke sleutel opladen en kunnen bestaande gebruikers sleutels en andere kenmerken wijzigen. De accountpagina is ook het centrale beheerspunt om toegang tot de Tier-1 te regelen. Deze pagina speelt dan ook een belangrijke rol in het VSC-verhaal. De accountpagina is inmiddels volledig operationeel. De interface werd herwerkt, wetenschapsdomeinen en storage quota per gebruiker werden toegevoegd en onderliggend werd de overgang naar versie 1.8 van het django framework doorgevoerd.

Security logging en policies

Dit project heeft zich in 2015 hoofdzakelijk toegespitst op de Tier-1, in het kader van besprekingen met een industriële gebruiker. Hierbij zijn o.a. volgende elementen aan bod gekomen: beveiliging van het huisvestende datacenter, beschrijvende security policies, doorlichting en beschrijving van de systeemsetup en de netwerkconnectiviteit, en data encryptie. Wat hieruit geleerd is, zal ook worden toegepast op de nieuwe Tier-1 machine.

Monitoring en reporting: XDMoD

Monitoring van (het gebruik van) de infrastructuur is een sleutelaspect van degelijk systeembeheer. Zo is het mogelijk om problemen met scheduling, suboptimaal gebruik van machines, noden van gebruikers, etc. te identificeren. Deze informatie is tevens erg belangrijk in het kader van toekomstige aankopen van machines en software. Na de testfase in 2014, is XDMoD nu volledig operationeel en wordt alle beschikbare data verwerkt. De omgeving wordt gebruikt om de gebruiksstatistieken te genereren die in dit jaarverslag zijn opgenomen. In 2016 worden onder andere wetenschapsdomeinen ingevoerd om gedetailleerdere rapportering mogelijk te maken.

Website en marketing

De vernieuwde VSC-website is operationeel! Niet alleen de structuur werd helemaal hertekend, ook de inhoud werd bijgewerkt. Om het beheer zo transparant mogelijk te houden, is de verantwoordelijkheid voor de verschillende onderdelen van de website verdeeld over enkele medewerkers.

Tier-1b

In het afgelopen jaar is de aankoop van de tweede Vlaamse supercomputer grondig voorbereid. De aankoopprocedure omvatte onder meer de selectie van de kandidaten, het schrijven van het lastenboek en de finale keuze. In de herfst van 2015 is de bestelling geplaatst.

Common user environment

In dit project worden voor elke machine die toegankelijk is voor VSC-gebruikers, gemeenschappelijke kenmerken van de softwareomgeving ontwikkeld, geïmplementeerd en gedocumenteerd. De resultaten van dit project worden elke dag gebruikt door onze gebruikers. Het blijft een actief project waarvan de status regelmatig geëvalueerd wordt. Dit alles reflecteert zich ook in het beschikbare trainingsmateriaal.

Trainingsmateriaal

Binnen het VSC worden verschillende opleidingen gegeven. Het merendeel van deze opleidingen staan open voor alle VSC-gebruikers. De "Introduction to HPC" tekst wordt voortdurend bijgewerkt en up-to-date gehouden. Naast het specifieke cursusmateriaal dat, indien mogelijk, terug te vinden is op de VSC-website bij de beschrijving van het event, wordt ook het "user portal" gedeelte op de website steeds verder up-to-date gehouden en uitgebreid.

Profiling en performantie-analyse

Beschikken over veel rekenkracht is nuttig, maar essentieel is dat de beschikbare rekenkracht efficiënt wordt gebruikt. De nodige tips en tricks worden dan ook aan de gebruikers via enkele seminaries aangereikt. Daarnaast worden aan de gebruikers technieken aangeleerd om de softwarecodes te optimaliseren. Tegelijkertijd worden gebruikers vertrouwd gemaakt met beschikbare tools.

Gebruikersondersteuning

De gebruikersondersteuning valt uiteen in 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

Hier bekijken we de tickets die bij de helpdesk terechtkomen. Er is geen centrale VSC-helpdesk. Elke instelling lost de vragen en problemen van de eigen gebruikers op, zowel wat betreft de eigen Tier-2 infrastructuur als de centrale Tier-1. Indien nodig worden vragen met betrekking tot de Tier-1 doorgestuurd naar de helpdesk aan de Universiteit Gent. Bij de vragen maken we een onderscheid tussen

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

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

	KU Leuven / UHasselt	UGent	UAntwerpen	VUB	Totaal
Tier-2 + grid					
accounts	508	175	28	123	834
software	332	42	77	638	1.089
overig	592	1688	265	477	3.022
Tier-1					
accounts		17			17
software		0			0
overig		154			154
Totaal	1.432	2.076	370	1.238	5.116

Bijeenkomsten met gebruikers / specifieke ondersteuning

Eenzijds proberen we 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. Anderzijds proberen we onderzoekers specifieke ondersteuning te geven.

Enkele voorbeelden:

- optimaliseren van bestaande workflows;
- 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 dagelijkse support behandelt vragen i.v.m. accounts, basisgebruik van de cluster en softwareinstallaties. Deze vragen komen van gebruikers uit groepen die reeds lange tijd de cluster gebruiken. De VSC-infrastructuur kenbaar 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 één-op-één consult waar men in een tweetal uur al voldoende informatie kan overdragen om productief te zijn op de cluster, mits enige algemene voorkennis van Linux en HPC.

Specifieke acties en workshops in 2015 waren gericht op diverse groepen. Een groep onderzoekers binnen het departement van mechanica gebruikte reeds lang de lokale cluster die ondertussen verouderd was. Een overstap op de centrale VSC-infrastructuur was aangewezen. Er werd een workshop georganiseerd om de transitie van de lokale cluster naar de centrale cluster te vergemakkelijken.

Het labo van Dierenfysiologie en Neurobiologie zette ook zijn eerste stappen naar de cluster. In deze groep wordt voornamelijk met lokale workstations gewerkt. Voor deze onderzoekers is de drempel hoger vermits er eerst een basiskennis Linux moet verworven worden. De adaptatie van het clustergebruik verloopt langzamer en kan enkel succesvol zijn indien er binnen de groep een "HPC-champion" is.

Onderzoek uitgevoerd binnen het VIB vereist veel rekenkracht. Specifiek werd gefocust op rekenwerk dat veel geheugencapaciteit vereist. De shared memory machine is hiervoor het beste geschikt. Om de gebruikers kennis te laten maken met de mogelijkheden werd de software stack geïnstalleerd op Cerebro.

Het Waterbouwkundig Laboratorium, een afdeling van de Technisch Ondersteunende Diensten van het departement Mobiliteit en Openbare Werken van de Vlaamse overheid, was op zoek naar meer rekenkracht om aanvullende studies te kunnen uitvoeren. Hiervoor was de in huis beschikbare rekencapaciteit niet voldoende. De onderzoekers van WL kregen een infosessie over het gebruik van de VSC-cluster. Hun software werd geïnstalleerd en wordt ondertussen intensief gebruikt.

In 2015 werd er ook meegewerkt aan een aantal cursussen die door onderzoekers werd georganiseerd, maar waar ook HPC wordt gebruikt. Binnen de opleiding van master studenten bio-informatica waren 2 sessies gericht op HPC algemeen en specifiek HPC-gebruik op VSC infrastructuur. Dit moet drempelverlagend werken wanneer deze jonge onderzoekers HPC kunnen gebruiken voor hun master thesis of later in hun onderzoekscarrière.

Het departement Computerwetenschappen organiseerde een cursus "Coping with Big Data" die ook door niet-universiteitsonderzoekers gevolgd kon worden. Voor de oefeningen en voorbeelden werd gebruik gemaakt van de HPC cluster.

Het departement Quantummechanica organiseerde "Intensive course on computational and theoretical chemistry for Erasmus Mundus Masters". De HPC medewerkers gaven in deze cursus een introductie in het gebruik van HPC voor quantumchemisten.

Om te informeren over VSC naar een bredere groep wordt VSC ook voorgesteld op events zoals bv. de Aviation day - "Workshop facilitating the contacts between KU Leuven and aviation industry in Flanders" en het symposium voor de studenten ea-ict op technologiecampus De Nayer.

De basisondersteuning van de onderzoekers die werken aan de Universiteit Hasselt verloopt via de HPC-helpdesk van de KU Leuven aangezien de onderzoekers van deze infrastructuur gebruikmaken.

Meer gespecialiseerde support wordt op een one-on-one basis door Geert Jan Bex geleverd. De onderzoeksgroepen CenStat, Centrum van Moleculair en Materiaal Modelleren, Centrum voor Milieukunde, het Instituut voor Mobiliteit, Beleidsinformatica en Theoretische Fysica deden het voorbije jaar hierop beroep. Hierbij valt op te merken dat een aantal onderzoeksgroepen in 2015 actief werden op de HPC-infrastructuur, hetgeen een gunstige evolutie is.

Universiteit Gent

In 2015 organiseerde het HPC-UGent team introductiecurssussen 'Introduction to HPC @ UGent' on demand voor specifieke vakgroepen:

- Toegepaste Materiaalwetenschappen (Faculteit Ingenieurswetenschappen en Architectuur)
- Data-Analyse (Faculteit Psychologie en Pedagogische Wetenschappen)
- Toegepaste Ecologie en Milieubiologie (Faculteit Bio-Ingenieurswetenschappen)
- Vakgroep Biochemie en Microbiologie (Faculteit Wetenschappen)
- Vakgroep Sociologie (Faculteit Politieke en Sociale Wetenschappen)
- Onderzoeksgroep Biofluid, Tissue and Solid Mechanics for Medical Applications (bioMMeda, Faculteit Ingenieurswetenschappen en Architectuur)

Daarnaast waren er ook nog meer algemene gebruikersmeetings waaraan onderzoekers uit verschillende onderzoeksgroepen van de Universiteit Gent deelnamen:

- Vakgroep architectuur en stedenbouw (faculteit Ingenieurswetenschappen en Architectuur)
- Department of Information Technology (INTEC, faculteit Ingenieurswetenschappen en Architectuur)

- Department of Electrical Energy, Systems and Automation (faculteit Ingenieurswetenschappen en Architectuur)
- Department of Marketing (faculteit Economie en Bedrijfskunde)
- Laboratory of Hydrology and Water Management (faculteit Bio-ingenieurswetenschappen)
- Terrestrial Ecology Unit (TEREC, faculteit Wetenschappen)
- Department of Reproduction, Obstetrics and Herd Health (faculteit Diergeneeskunde)
- Center for Molecular Modeling (faculteit Wetenschappen & Ingenieurswetenschappen en Architectuur)
- Onderzoeksgroep Computatieve Biologie (faculteit Wetenschappen & Bio-ingenieurswetenschappen)
- Department of Medical Protein Research (faculteit Wetenschappen & VIB)
- Centre for X-ray Tomography (faculteit Wetenschappen & Bio-ingenieurswetenschappen)
- Data Mining and Modelling for Biomedicine (Dambi) research group (faculteit Geneeskunde en Gezondheidswetenschappen & VIB)
- BigN2N consortium (Bioinformatics Institute Ghent from nucleotides to networks)
- Evolutionary Systems Biology lab, department of Plant Systems Biology (faculteit Wetenschappen & VIB)
- Biomarked valorisation consortium Ghent University

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

- Bayer Cropscience
- J&J
- Siemens
- Umicore
- FEOps NV (een spin-off van de Universiteit Gent)
- Bekaert NV

Op 4 mei 2015 organiseerde het HPC-UGent team de workshop 'Big Data@UGent in practice'. Dit kaderde in de Big Data specialisatie van de UGent binnen het VSC. Deze workshop had tot algemeen doel om alle onderzoekers binnen het netwerk van de Universiteit Gent samen te brengen die betrokken zijn bij Big Data-projecten, ongeacht hun wetenschappelijke

lijke achtergrond. De specifieke doelstellingen omvatten:

- de oprichting van een Big Data gemeenschap aan de UGent, en daarbuiten
- bijleren over het onderwerp, voor ervaren onderzoekers zowel als voor beginners
- een (eerste) gelegenheid te bieden om ervaringen uit te wisselen, problemen te bespreken, toepassingen te demonstreren
- alle deelnemers in staat te stellen om in hands-on sessie een Big Data-analyse uit te voeren op de Tier-2 infrastructuur van het VSC.

De wetenschappelijke stuurgroep van deze workshop was breed samengesteld uit verscheidene onderzoekers uit UGent en VIB, uit de faculteiten Ingenieurswetenschappen en Architectuur, Wetenschappen, en Letteren en Wijsbegeerte. De workshop werd bijgewoond door ruim 200 onderzoekers.

In navolging van deze workshop zal in 2016 een editie van de jaarlijkse BeNeLearn conferentie, met als onderwerp Machine Learning en Big Data, worden georganiseerd voor een interuniversitair en internationaal publiek.

Universiteit Antwerpen

Enerzijds 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.

In 2015 hebben we onderzoekers uit Farmaceutische Wetenschappen en Productontwikkeling op weg gezet richting HPC. Ze maken inmiddels sterk gebruik van de infrastructuur. Daarnaast hebben ook andere onderzoeksgroepen uit bv. Biomedische wetenschappen, Bio-ingenieurswetenschappen en Chemie de weg gevonden.

Enkele voorbeelden van specifieke ondersteuning:

- Optimalisatie van workflow voor het verwerken van filmpjes die wormen volgen.
- Optimalisatie van workflow bij grote batches van jobs die enorm veel kleine

bestandjes aanmaakten. Niet alleen betekende dit een grote belasting voor het bestandensysteem (en dus nadelig voor alle gebruikers), er ging ook heel veel nuttige opslagruimte verloren.

- Invoeren van checkpointing bij langlopende berekeningen. Dit laat toe de infrastructuur efficiënter te gebruiken en zorgt ervoor dat, bij eventuele problemen, berekeningen herstart kunnen worden en er dus zo weinig mogelijk gebruikte rekestijd verloren gaat.
- Ondersteuning bij de aanvragen voor rekestijd op Tier-1.
- Ondersteuning bij (interuniversitaire) projectaanvragen.

We hebben met de VITO onderzoeksgroep "Environmental Modelling" samengezeten om te bekijken hoe enerzijds de computationele expertise kan worden ingezet bij de VITO projecten en hoe anderzijds gebruik kan worden gemaakt van VSC rekenkracht.

Om ook buiten de instelling te informeren over het VSC, hebben we op 17 maart 2015 deelgenomen aan het event "UAntwerpen backstage". Op een doorlopende kennismarkt konden de bedrijven kennismaken met het aanbod van UAntwerpen (en het VSC) en zo contacten leggen.

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 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 er hulp geboden aan nieuwe potentiële Tier-1 gebruikers om een voorstel voor rekestijd in te dienen of om een "starting grant" aan te vragen.

Er werd ook aandacht gegeven aan onderzoekers uit de humane wetenschappen die ook gebaat zouden zijn met het gebruik van meer reken capaciteit dan deze die beschikbaar is op hun PC. Deze onderzoekers hebben meestal

geen enkele ervaring met het gebruik van Tier-2 systemen. De beste oplossing bleek om deze mensen te begeleiden naar het gebruik van extra rekenkracht in een cloudomgeving. Inmiddels zijn een aantal onderzoekers van de vakgroep psychologie deze weg ingeslagen.

Qua cursussen worden tweemaal per jaar de cursussen "Introduction to Linux" en "Introduction to the use of HPC at the VUB" georganiseerd.

De VUB heeft een HPC gebruikerscommissie die ongeveer tweemaandelijks bijeenkomt en die het gebruik en de noden voor HPC opvolgt. De gebruikerscommissie omvat leden uit alle faculteiten.

Personeel

Gezien de infrastructuur van het VSC (Tier-2 en Tier-1 infrastructuur) geïnstalleerd is in de verschillende universitaire datacentra, is 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 Tier-1 supercomputer huisvest, 2 VTE toegekend voor de exploitatie ervan.

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
Totaal	15

Instelling	aantal gesubsidieerde VTE voor Tier-1 exploitatie
UGent	2
KU Leuven	0,8

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 28 VTE in voor de HPC-exploitatie en ondersteuning. 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 Hercules-tichting komen, slechts voor een voorgeschreven en geplafondeerde fractie van de inzet in deze tabel kunnen opgenomen worden.

Instelling	Aantal VTE ingezet voor HPC	Aantal koppen betrokken bij de HPC-exploitatie en ondersteuning
UGent	10,6	16
UAntwerpen	4,35	8
VUB	4	9
UHasselt	1	1
KU Leuven	8,25	16
Totaal	28,2	49

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 ge-

koppeld 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.

Systembeheerders

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 beheerssoftware.

Gebruikersondersteuners

Deze personen staan in voor de basis ondersteuning 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 het aankoopdossier rond de user requirements en de benchmarks.

Projectleiders

Deze personen hebben de directe leiding over de HPC-teams of leiden grotere HPC-projecten. Ze staan in voor de inbedding van de lokale HPC in de omgeving van het VSC. Ze 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 eind-

verantwoordelijkheid in aankoopdossiers.

De procentuele verdeling van de inzet van de voorgenoemde profielen over de verschillende instellingen ziet er als volgt uit:

	Infrastructuurbeheer	Systeembeheer	Basis gebruikersondersteuning	Wetenschappelijke of gevorderde ondersteuning	Projectleiding
UGent	13%	40%	19%	20%	8%
UAntwerpen	2%	22%	29%	30%	17%
VUB	15%	31%	30%	11%	13%
UHasselt	0%	0%	45%	50%	5%
KU Leuven	15%	31%	19%	20%	13%

Outreach

Daarnaast zijn heel wat personen een deel van hun tijd bezig met de outreach van HPC in Vlaanderen. Dit zowel naar academische en andere onderzoekscentra als naar industrie. Er worden onderzoeksgroepen en bedrijven bezocht, er wordt deelgenomen aan verschillende events.

Daarnaast is in 2015 heel veel aandacht gegaan naar het bijwerken van de nieuwe website, het aanmaken van documentatie en het voorzien van promotiemateriaal.

Mensen uit diverse profielen dragen hiertoe bij, van medewerkers die zich bezighouden met gebruikersondersteuning tot leidinggevenden. Over het hele VSC kan gesteld worden dat 1,5 VTE nodig is geweest om de outreach van het VSC te verzorgen.

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 groot 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

3 personen met wetenschappelijke ervaring in dit domein

Physics

4 personen met wetenschappelijke ervaring in dit domein

Engineering

1 persoon met wetenschappelijke ervaring in dit domein

Mathematics (Numerical Methods)

4 personen met wetenschappelijke ervaring in dit domein

Computer science

9 personen met wetenschappelijke ervaring in dit domein

Personeelslijst

Naam	Instelling	% tewerkgesteld voor HPC-exploitatie en ondersteuning
Wouter Depypere	UGent	100%
Stijn De Weirdt	UGent	100%
Andy Georges	UGent	100%
Kenneth Hoste	UGent	100%
Ewan Higgs	UGent	100%
Ewald Pauwels	UGent	100%
Alvaro Simon Garcia	UGent	100%
Jens Timmerman	UGent	100%
Kenneth Waegeman	UGent	100%
Danny Schellemans	UGent	20%
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%
Stefan Becuwe	UAntwerpen	100%
Franky Backeljauw	UAntwerpen	100%
Bert Tijskens	UAntwerpen	100%
Kurt Lust	UAntwerpen	100%
Koen Decauwsemaecker	UAntwerpen	10%
Muriel Dejonghe	UAntwerpen	10%
Herwig Kersschot	UAntwerpen	10%
Annie Cuyt	UAntwerpen	5%
Stéphane Gérard	VUB	100%
Balázs Hagató	VUB	100%
Bart Verleye	VUB	25%
Rosette Vandenbroucke	VUB	50%
Olivier Devroede	VUB	25%
Johan D'Hondt	VUB	20%
Peter Van Rossem	VUB	20%
Dirk Heyvaert	VUB	30%
Philippe Leemans	VUB	30%
Geert-Jan Bex	UHasselt	100%
Jan Ooghe	KU Leuven	90%
Ingrid Barcena	KU Leuven	100%
Mag Selwa	KU Leuven	100%
Martijn Oldenhof	KU Leuven	100%
Leen van Rentergem	KU Leuven	20%
Kim Paulissen	KU Leuven	10%
Jo Vanvoorden	KU Leuven	80%
Jo Vandeginste	KU Leuven	100%
Tom Leuse	KU Leuven	65%
Herman Moons	KU Leuven	10%
Rudy Rys	KU Leuven	20%
Tom Vanmierlo	KU Leuven	100%
Sofie Pieraerd	KU Leuven	10%
Philip Brusten	KU Leuven	10%
Tom Vanhout	KU Leuven	10%

Rekenen op de VSC infrastructuur

Toekennen rekestijd Tier-1

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

Voor onderzoekers uit een academische instelling, SOC, of gelijkaardige onderzoeksinstelling bestaan de volgende toegangskanalen:

- Starting Grant
 - Maximaal 100 nodedagen rekestijd
 - Kan op elk ogenblik aangevraagd worden, met snelle doorlooptijd
 - Om Tier-1 uit te proberen en benchmarks of software tests uit te voeren, als voorbereiding van een volwaardige projectaanvraag
 - Gratis
- Project access
 - Voor allocaties van 500-5000 nodedagen rekestijd
 - Projectaanvragen beschrijven
 - het kaderend wetenschappelijk project
 - het consortium dat de berekeningen zal uitvoeren
 - het financierend kanaal
 - de rekestaken die zullen worden uitgevoerd (technisch)
 - de software die zal worden aangevend
 - 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
- Tot eind 2015: betalend gebruik

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 de Herculesstichting staat in voor het secretariaat. De HPC-coördinatoren van de Vlaamse universiteiten kunnen als waarnemers uitgenodigd worden om aan de vergaderingen van de Evaluatiecommissie deel te nemen.

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

In het reglement van 2015 is bepaald dat voor het gebruik van Tier-1 middels project access een beperkt deel van de kosten aangerekend wordt aan academische onderzoekers: typisch 5% van de full cost. Per Tier-1 project wordt het verschuldigde bedrag voor de gebruikte rekestijd aangerekend nadat het geplande werk uitgevoerd is. De Universiteit Gent stelt de nodige verantwoordingsstukken ter beschikking en de bedragen worden geïnd door de Herculesstichting.

In de loop van 2015 is dit kostenverhaal evenwel negatief geëvalueerd door de HPC-coördinatoren en Tier-1 Allocation Board. Ongeacht de (geringe) hoogte van de aangerekende kostprijs vormt dit toch een duidelijke hinderpaal voor onderzoekers. Tevens speelt een zeker mattheuseffect, en fruikt het de toegang van minder ervaren onderzoeksgroepen en nieuw, uitdagend maar risicovol onderzoek op het Tier-1 rekenplatform. Anderzijds is de geleverde centrale inspanning t.b.v. individuele facturatie en verantwoording weinig in verhouding met de inkomsten. Om deze redenen is besloten om vanaf 2016 niet langer kosten aan te rekenen voor Tier-1 projecten toegekend aan academische onderzoekers.

Voor onderzoekers uit de industrie bestaan eveneens twee toegangskanalen voor Tier-1 rekentijd:

- Exploratory Access
 - Maximaal 100 nodedagen rekentijd
 - Om de Tier-1 gebruikersomgeving uit te proberen, benchmarks of software tests uit te voeren
 - Gratis
- Full Access
 - Bedrijven kunnen een overeenkomst sluiten met Tier-1 huisvestende instelling en Herculesstichting 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 door de raad van bestuur van de Herculesstichting. Daarnaast kunnen onderzoekers uit de industrie ook toegang krijgen tot Tier-1 in het kader van een onderzoeksproject dat in samenwerking met een Vlaamse universiteit of kennisinstelling.

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.vscentrum.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.

Tier-1 Starting Grants / Exploratory Access

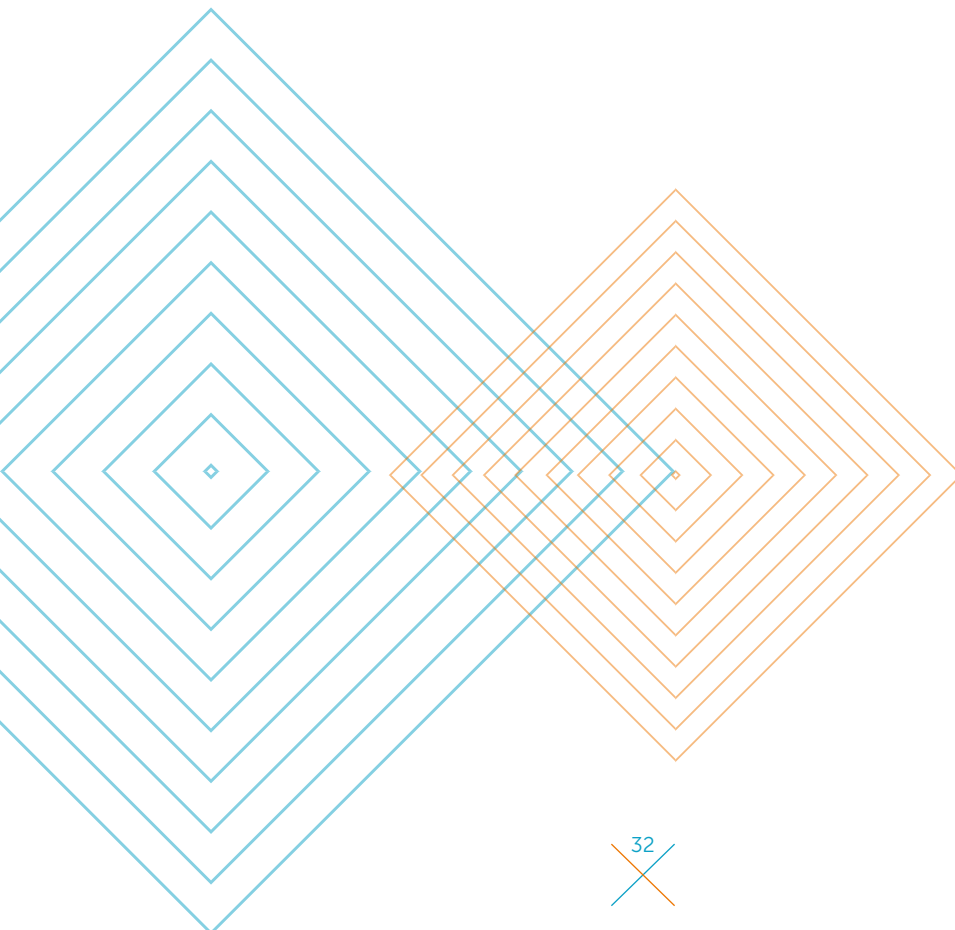
In 2015 werden 11 Starting Grants en
3 Exploratory Access projecten toegekend.

Starting Grants 2015

Samuel Moors	VUB	Computational Chemistry
Stefan Weckx	VUB	Bioinformatics
Setareh Tasdighian	UGent	Bioinformatics
Nele Moelans	KU Leuven	Mechanical Engineering
Matthias Demuzere	KU Leuven	Environmental Modeling
Sam Vanden Broucke	KU Leuven	Environmental Modeling
Norbert Magyar	KU Leuven	Environmental Modeling
Jonas Bekaert	UAntwerpen	Computational Chemistry
Nikolaos Stergiannis	VUB	Environmental Modeling
Oriana De Vos	UGent	Computational Chemistry
Petar Marendic	VUB	Electromagnetic Engineering

Exploratory Access 2015

FEOPS	Medical Engineering
Bekaert nv	Mechanical Engineering
Siemens	Mechanical Engineering



Goedgekeurde Tier-1 aanvragen

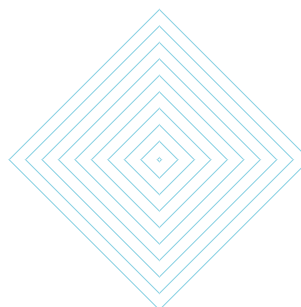
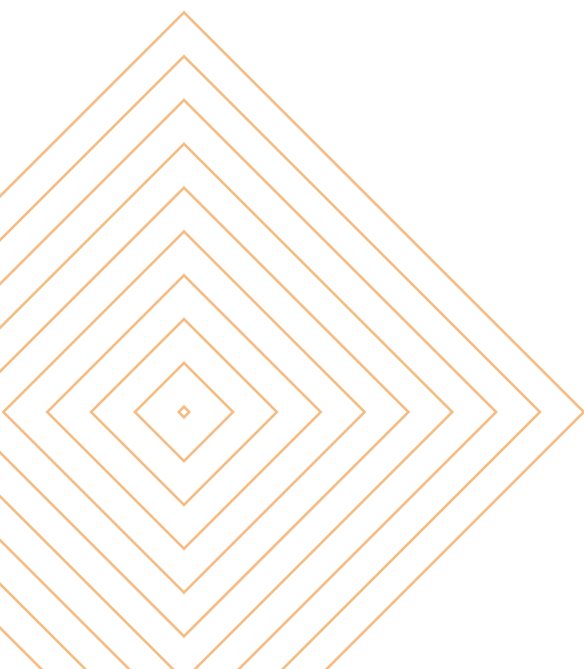
Hieronder worden alle goedgekeurde aanvragen van 2015 opgelijst, gegroepeerd per evaluatiemoment.

2 FEBRUARI 2015

Aanvrager	Onthaalinstelling	Titel	Wetenschapsgebied	Toegekende rekentijd (nodedagen)	Toegekende storage SCRATCH (TB)
Kurt Lejaeghere	UGent	Assessing the accuracy of a screened hybrid functional for property predictions of elemental solids	Computational Chemistry	1.742	0.163
Rony Keppens	KU Leuven	Solar and astrophysical dynamics: simulating to the resolution limits.	Environmental Modeling	3.100	2.3
Matthias Vandichel	UGent	Structural transformations during dehydroxylation reactions of UiO-66 type metal-organic frameworks; an extension with normal mode analysis	Computational Chemistry	2.726	0.48
Pieter Reyniers	UGent	Computational Fluid Dynamics based design of 3D reactors	Mechanical Engineering	4.000	1
Karel Dumon	UGent	Hunting for new quaternary Zintl phases of the 1:1:1:4 stoichiometry	Computational Chemistry	1.000	1.843
Johan Meyers	KU Leuven	Simulation and optimal control of wind-farm boundary layers	Environmental Modeling	5.000	9.85
Jan Jaeken	UGent	Ab initio prediction of acoustic anisotropy of Fe, Ni, and FeNi in the Earth's inner core	Computational Chemistry	3.106	1.2
Samuel Moors	VUB	Modeling the electrophilic aromatic substitution reaction with ab initio molecular dynamics	Computational Chemistry	2.160	0.018
Ben Brigou	VUB	Modeling the nucleophilic aromatic substitution reaction with ab initio molecular dynamics	Computational Chemistry	2.160	0.018
Piet Termonia	UGent	UGent EURO-CORDEX climate runs	Environmental Modeling	10.000	0.3
Marcel Ameloot	UHasselt	Atomistic picture of fluorescent probes into lipid bilayer membranes: probing lipid rafts	Computational Chemistry	690	1.38

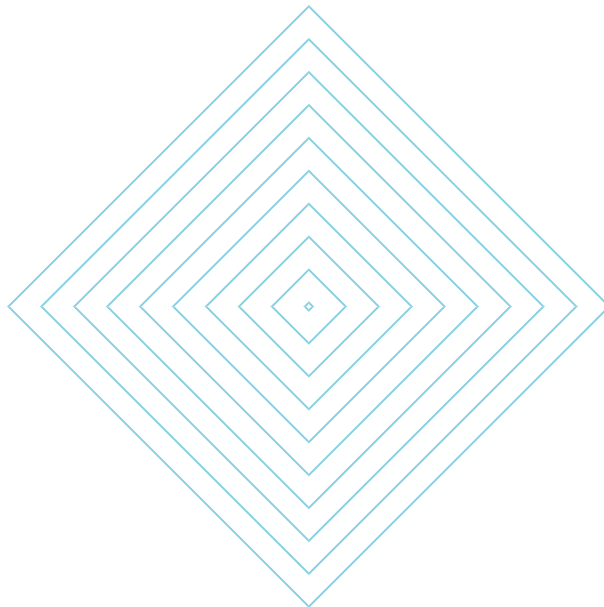
1 JUNI 2015

Aanvrager	Onthaalinstelling	Titel	Wetenschapsgebied	Toegekende rekestijd (nodedagen)	Toegekende storage SCRATCH (TB)
Vanpoucke Danny Eric Paul	UHasselt	The electronic structure of functionalized luminescent Metal-Organic Frameworks	Computational Chemistry	2.905	0.109
Thierry De Meyer	UGent	Accurate pKa calculations of pH-sensitive dye molecules	Computational Chemistry	5.280	1
Sam Vanden Broucke, Hendrik Wouters	KU Leuven	CORDEX.be: Combining Regional Downscaling Expertise in Belgium: CORDEX and beyond. Part I	Environmental Modeling	1.650	3
Jan Fostier	UGent	Resolving numerical instabilities when dealing with electromagnetic simulations involving billions of unknowns	Electromagnetic Engineering	2.176	2
Bart Partoens, Erik Neyts	UAntwerpen	Ab initio study of adsorption of polymer molecules on α -Cr ₂ O ₃ , α -Fe ₂ O ₃ , and α -Al ₂ O ₃ surfaces: the role of Van der Waals functionals	Computational Chemistry	4.539	0.2
Pieter Cnudde	UGent	Characterizing adsorption properties of C ₄ – C ₆ alkenes on H-ZSM-5 using molecular dynamics simulations	Computational Chemistry	4.260	0.378
Titus Crepain	UGent	Computational Discovery of Quaternary Zintl Phases	Computational Chemistry	3.076	3.5
Julianna Hajek	UGent	Unraveling dehydroxylation pathways on UiO-66 type systems with metadynamics	Computational Chemistry	3.304	0.498
Nele Moelans	KU Leuven	3D microstructure evolution simulations of the effect of grain boundary diffusion on the growth velocity of intermetallic compound layers in Cu-Sn solder joints	Computational Chemistry	2.250	0.02
Pieter Reyniers	UGent	Computational Fluid Dynamics based design of 3D reactors (II)	Mechanical Engineering	2.000	1
Maere Steven	UGent	A stochastic birth-death model for evolution of gene family copy numbers along a phylogeny	Bioinformatics	1.538	0.006
Giovanni Lapenta	KU Leuven	KISIOPPE: Kinetic Simulations of the Planetary Plasma Environment	Environmental Modeling	3.500	1.5



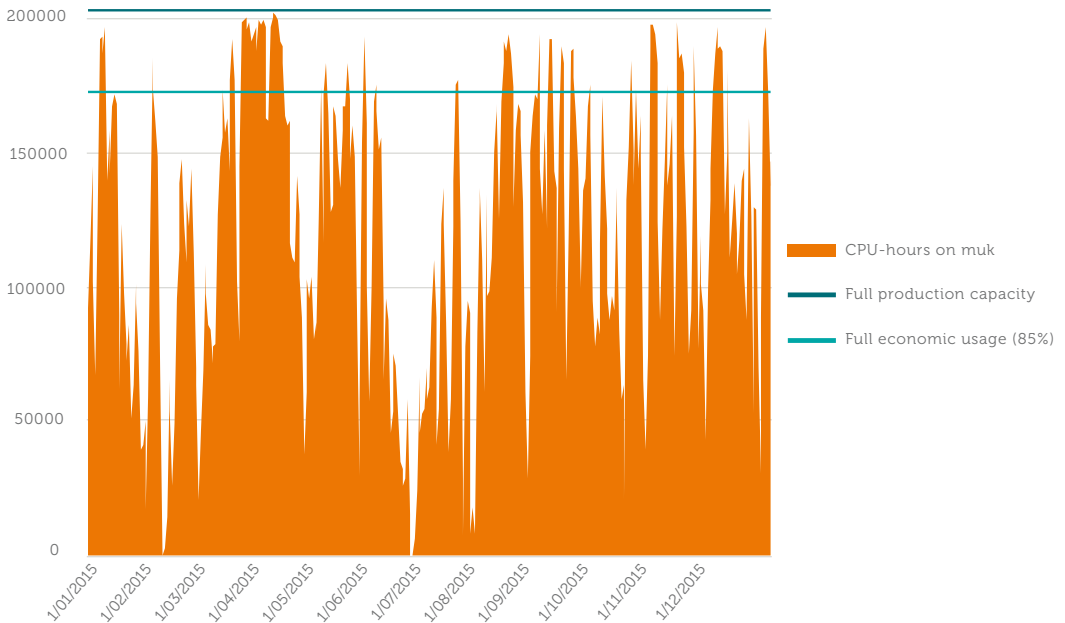
5 OKTOBER 2015

Aanvrager	Onthaalinstelling	Titel	Wetenschapsgebied	Toegekende rekentijd (nodedagen)	Toegekende storage SCRATCH (TB)
Dimitrios Millas, Bart Ripperda	KU Leuven	Outflow and Particle Evolution in Relativistic Astrophysics (OPERA)	Environmental Modeling	2.500	3.2
Rolando Saniz	UAntwerpen	Electronic properties of defect complexes in Sigma3 CIGS grain boundaries	Computational Chemistry	4.140	0.065
Kristof De Wispelaere	UGent	Confidential	Computational Chemistry	1.400	0.125
Jelle Wieme	UGent	Confidential	Computational Chemistry	4.644	0.484
Johan Meyers	KU Leuven	Simulation and optimization of wind farm boundary layers (II)	Environmental Modeling	5.000	9.85
Pieter Reyniers	UGent	Computational Fluid Dynamics based design of 3D reactors (III): enhanced reactors	Mechanical Engineering	4.000	1.5
Nikolaos Stergiannis	VUB	Confidential	Mechanical Engineering	858	1
Hendrik Wouters, Sam Vanden Broucke	KU Leuven	CORDEX.be: Combining Regional Downscaling Expertise in Belgium: CORDEX and beyond. Part II.	Environmental Modeling	10.000	3
Piet Termonia	UGent	UGent EURO-CORDEX climate runs II	Environmental Modeling	5.000	42000



Grafieken over het gebruik van Tier-1

Gebruikte CPU-uren op Tier-1



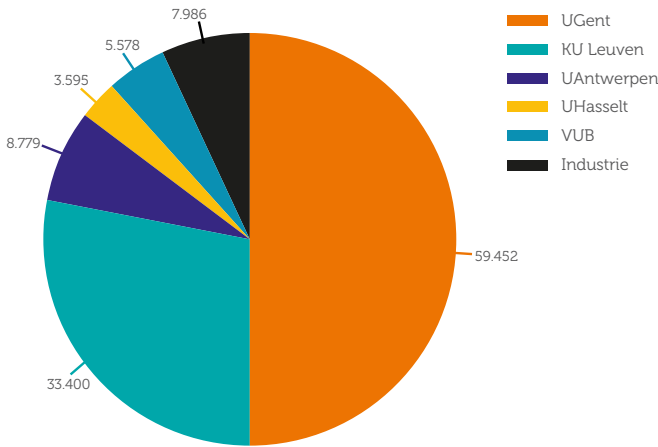
Afbeelding 15
Gebruik van Tier-1 cluster (muk), geïnstalleerd aan de
Universiteit Gent

Bovenstaande grafiek biedt een algemeen overzicht van het historische Tier-1 gebruik in 2015. Het volledige Tier-1 gebruik stemt overeen met 202.752 CPU-uur per dag, maar 85% van dat aantal wordt beschouwd als 'volledig economisch' gebruik van de cluster. Beide cijfers worden getoond in de grafiek.

Het gebruik van Tier-1 is onderhevig aan forse variatie die afhankelijk is van de rekeninspanningen van de gebruikers.

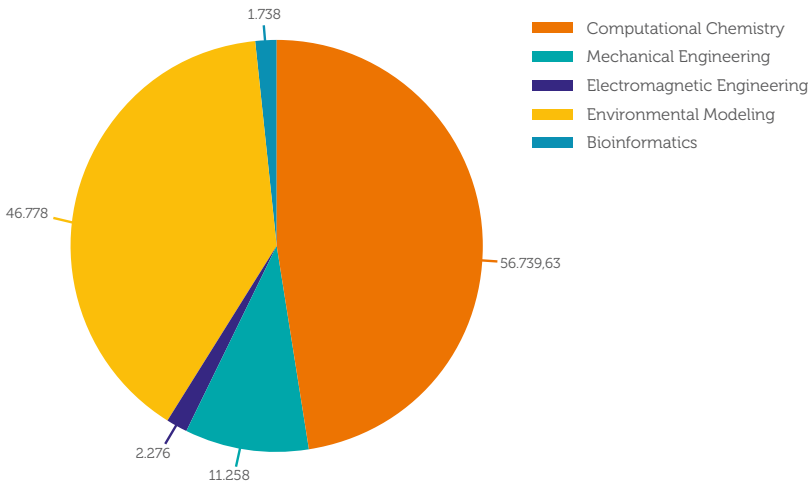
De zichtbare dips in gebruikte CPU-uren in 2015 zijn het gevolg van maintenance windows. Tijdens die periodes werd de machine volledig uitgeschakeld en werden onderhoudswerkzaamheden uitgevoerd.

Toegewezen rekentijd in 2015 per instelling



Afbeelding 16
Verdeling van toegewezen Tier-1 rekentijd in 2015 over de instellingen. Uitgedrukt in nodedagen

Toegewezen rekentijd in 2015 per wetenschapsgebied



Afbeelding 17
Verdeling van toegewezen Tier-1 rekentijd in 2015 over de verschillende wetenschapsdomeinen. Uitgedrukt in nodedagen

Bovenstaande grafieken illustreren de verdeling van de Tier-1 rekentijd over de verschillende instellingen en wetenschapsgebieden heen. Het gaat hier over de Tier-1 rekentijd die door de Evaluatiecommissie in 2015 toegekend werd. Er werden niet alleen nodedagen aan academische allocaties toegekend. Bijna 8000 nodedagen werden toegewezen aan verscheidene industriële gebruikers van de Tier-1 infrastructuur.

Toepassingsgebieden situeren zich voornamelijk in de computationele chemie en klimaatmodellering.

Outreach naar Vlaamse bedrijven

Eén van de opdrachten die volgens het HPC-decreet aan het Vlaams Supercomputer Centrum (VSC) toegekend 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 experts 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, code optimalisatie, maar ook toepassingsgerichte training zoals materiaalkunde, numerieke stromingsleer (computational fluid dynamics) ...

Ook trainingen op maat van de eindgebruiker kunnen worden voorzien.

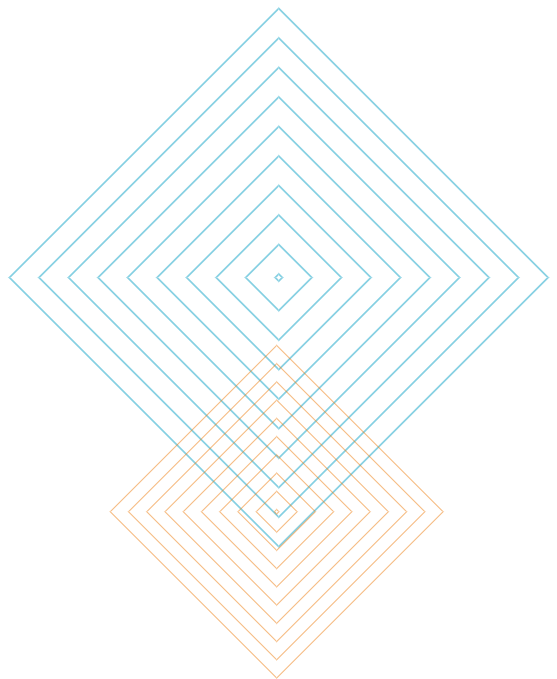
Rekenkracht

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

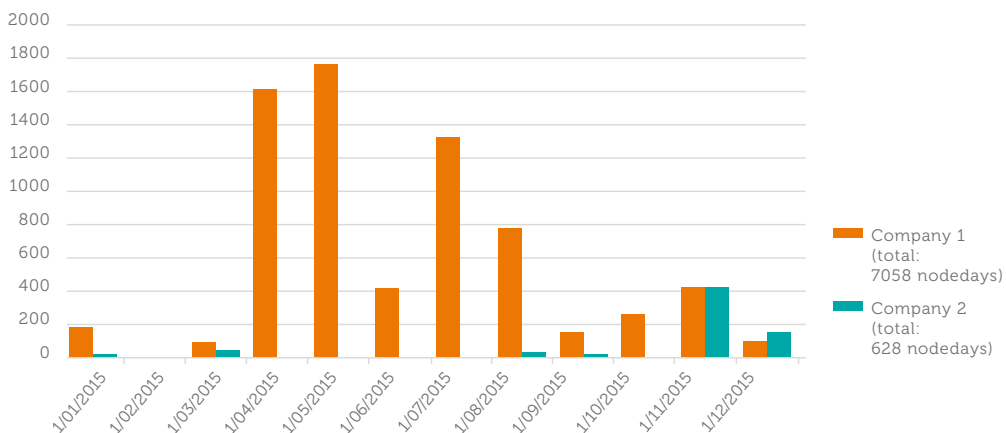
Gebruik van Tier-1 door bedrijven

In 2015 maakten twee bedrijven die in Vlaanderen gevestigd zijn, op regelmatige basis gebruik van Tier-1. De gebruiksovereenkomsten werden contractueel vastgelegd tussen de Herculesstichting, de Universiteit Gent en het betrokken bedrijf. Verscheidene andere bedrijven hebben reeds interesse getoond in Tier-1 gebruik, maar zijn nog steeds in een exploratieve fase.

Afbeelding 18 biedt een (geanonimiseerd) zicht op de gebruikte rekentijd doorheen het jaar



Industry Tier-1 usage 2015



Afbeelding 18 Gebruikte rekentijd doorheen het jaar door bedrijven

Bekendmaking naar bedrijven en andere kennisinstellingen

De VSC Industry Day is één van de initiatieven om de industrie te bereiken.

Op 27 januari 2015 organiseerde het VSC in Technopolis (Mechelen) een evenement rond industriële HPC-toepassingen. Dit succesvolle event was specifiek bedoeld voor (potentiële) gebruikers van HPC in Vlaamse bedrijven. Belangrijkste doelstelling was om bedrijven bewust te maken van de mogelijkheden van grote reken capaciteit en van de diensten die het VSC biedt om efficiënter nieuwe producten of diensten te ontwikkelen of om bestaande te verbeteren.

Enkele Vlaamse bedrijven illustreerden aan de hand van voorbeelden het belang van HPC voor hun werking. Vertegenwoordigers van buitenlandse HPC-centra brachten succesverhalen over hun samenwerking met lokale bedrijven. Het VSC lichtte de Vlaamse aanpak toe en verduidelijkte de mogelijkheden en toegangsmodaliteiten voor Vlaamse bedrijven.

Dit evenement werd druk bijgewoond door deelnemers uit velerlei industriële takken, en was een uitgelezen gelegenheid voor netwer-

king tussen industriële en academische onderzoekers. Bovendien mochten we minister van werk, economie, innovatie en sport, Philippe Muyters, verwelkomen die het evenement plechtig afsloot.

Een honderdtal personen schreven zich in waaronder medewerkers van een twintigtal bedrijven. Zowel grote bedrijven, consultingkantoren, KMO's als spin-offs van Vlaamse universiteiten waren vertegenwoordigd.

Tijdens deze bijeenkomst werden heel wat spontane contacten gelegd. Op die manier kwamen de vragen naar boven om meer informatie over het VSC te krijgen en om testen te kunnen uitvoeren op de Tier-1. Aansluitend op dit evenement werden een aantal bedrijven gecontacteerd om de mogelijkheden van HPC en de ondersteuning door het VSC nader toe te lichten.

Met de Industrial Board werd ook overlegd welke de meest geschikte aanpak is om "contacten" te transformeren in "gebruikers van VSC-infrastructuren" en om de "unique selling proposition" van het VSC beter kenbaar te maken.

Verder werden verscheidene bedrijven en andere Vlaamse kennisinstellingen doorheen

2015 door VSC-partners gecontacteerd met als finaliteit het inschatten van het HPC-potentieel voor het bedrijf en het promoten van het gebruik van supercomputing en de VSC-services. Deze contactmomenten namen de vorm aan van user meetings en kickstart events on-site om (potentiële) industriële gebruikers zo optimaal mogelijk te overtuigen van de meerwaarde van HPC en van het VSC voor hun bedrijf. Daarnaast werden ook enkele volwaardige (veelal introductie) trainingen georganiseerd.

Trainings en kick-start events:

- Bayer Cropscience, VSC info, 23/01/2015 en 30/01/2015 (UGent)
- Siemens, VSC info en kick-start on-site, 23/03/2015 (UGent)
- Umicore, VSC info on-site, 10/07/2015 (UGent)
- FEOPS, training on-site, 11/12/2015 (UGent)

Usermeetings:

- KMI, 16/02/2015 (UGent)
- J&J, hands-on on-site, 23/02/2015 (UGent)
- VITO, 3/09/2015 (UAntwerpen)
- FEOPS, 22/09/2015 (UGent)
- Bekaert NV, 18/11/2015 (UGent, FWO)

Andere outreach events waarop (onrechtstreeks) bedrijven werden geïnformeerd over HPC in Vlaanderen:

- Het VSC sponsorde de Vlaamse Programmerwedstrijd editie 2015, met als doelstelling meer naambekendheid te verwerven voor het VSC bij studenten met een sterke interesse in programmeren.
- Op 17 maart 2015 heeft de kernfaciliteit CalcUA (UAntwerpen) deelgenomen aan "UAntwerpen backstage". Op een doorlopende kennismarkt konden de bedrijven kennismaken met het aanbod van UAntwerpen (en het VSC) en zo contacten leggen.



Opleidingen

Organisatie en bekendmaking van 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 onderzoeksinstituten 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 eerste 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, het-

zij 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 aangemoedigd 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 mailing lists 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:

Januari

- Linux introduction, 13 januari, 7 uur
plaats: KU Leuven/Universiteit Hasselt
niveau: introductory
- Python for data processing,
20 & 21 januari, 24 & 25 februari, 16 uur
plaats: KU Leuven/Universiteit Hasselt
niveau: intermediate
- HPC@UGent introduction,
30 januari, 6 uur
plaats: Universiteit Gent
niveau: introductory

Februari

- HPC@KU Leuven introduction, 11 februari, 6 uur
plaats: KU Leuven/Universiteit Hasselt
niveau: introductory
- Linux for beginners, 12 maart, 6 uur, Vrij
plaats: Universiteit Brussel
niveau: introductory
- Linux introduction, 26 februari, 5 & 12 maart, 9 uur
plaats: Universiteit Antwerpen
niveau: introductory
- Python for data processing (part III & IV), 25 & 27 februari, 8 uur
plaats: KU Leuven/Universiteit Hasselt
niveau: intermediate

Maart

- HPC@UGent introduction, 2 maart, 6 uur
plaats: Universiteit Gent
niveau: introductory
- Python for data processing, 23, 25, 29 & 31 maart, 16 uur
plaats: KU Leuven/Universiteit Hasselt
niveau: intermediate

April

- Introduction to HPC (for SCK-GEN researchers), 7 april, 3 uur
Universiteit Antwerpen
plaats: SCK-GEN
niveau: introductory
- Node-level performance engineering, 9 april, 14 uur
trainer: dr. Georg Hager (RRZE, Erlangen, Germany)
organisatie: VSC, doctoral schools
niveau: intermediate
- Spring School on Computational Tools for Materials Science, 13-17 april, 40 uur
plaats: Universiteit Gent
organisatie: VSC, doctoral schools, Center for Molecular Modeling (CMM)
plaats: Universiteit Gent
niveau: specialist
- Message Passing Interface (MPI), 22 april, 7 uur
plaats: Universiteit Gent
trainer: prof. Dr. Jan Fostier
organisatie: VSC, doctoral schools
niveau: intermediate
- Introduction to R: an open source statistical toolbox, 23 & 24 april, 8 uur
plaats: Vrije Universiteit Brussel
niveau: introductory

- Lunchbox session Cerebro, 23 april, 2 uur
plaats: KU Leuven/Universiteit Hasselt
niveau: introductory
- Guest lecture on HPC (ikv Information Technology and Data Processing), 28 april, 4 uur
plaats: Universiteit Gent
niveau: introductory
- Lunchbox session: new Thinking components — Spring 2015, 2 uur, 28 april, plaats: KU Leuven/Universiteit Hasselt
niveau: introductory

Mei

- Modern Fortran, 12 mei, 4 uur
niveau: intermediate
- Guest lecture on HPC (voor HOWest onderzoekers), 12 mei, 4 uur, plaats: Universiteit Gent
niveau: introductory
- Migrating old to modern Fortran code, 20 mei, 7 uur
trainer: dr. Reinhold Bader (LRZ, Garching, Germany)
organisatie: VSC, doctoral schools
niveau: intermediate
- Introduction to multithreading and OpenMP, 21 & 22 mei, 14 uur
plaats: Universiteit Gent
trainer: dr. Reinhold Bader (LRZ, Garching, Germany)
organisatie: VSC, doctoral schools
niveau: intermediate
- GUI launcher tutorial, 29 mei, 1 uur
plaats: Universiteit Antwerpen
niveau: introductory
- Getting started with high-performance computing, 27-29 mei, 1-3 juni, 36 uur
plaats: Universiteit Gent
niveau: introductory

Oktober

- Matlab, 1, 2, 8, 9, 15 & 16 oktober, 24 uur
plaats: Universiteit Leuven
niveau: introductory
- HPC@UGent introduction, 5 oktober, 6 uur
plaats: Universiteit Gent
niveau: introductory
- HPC@KU Leuven introduction, 8 oktober, 6 uur
plaats: KU Leuven/Universiteit Hasselt
niveau: introductory

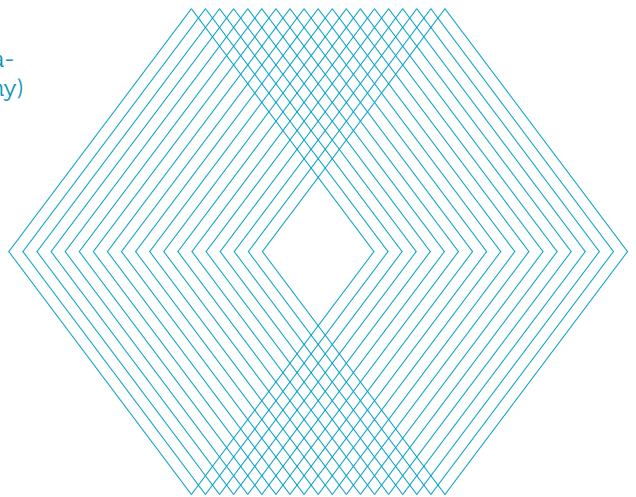
- HPC@UAntwerpen introduction, 12 oktober, 4 uur
plaats: Universiteit Antwerpen
niveau: introductory
- Linux introduction, 16 oktober, 7 uur
plaats: KU Leuven/Universiteit Hasselt
niveau: introductory
- Lunchbox session visualization HPC@KU Leuven, 27 oktober, 2 uur, KU Leuven/
plaats: Universiteit Hasselt
niveau: introductory
- Python course, 29 & 30 oktober, 10 & 11 november, 16 uur
plaats: KU Leuven/Universiteit Hasselt
niveau: introductory

November

- HPC@KU Leuven introduction, 5 november, 6 uur
plaats: KU Leuven
niveau: introductory
- Linux for beginners, 6 november, 6 uur
plaats: Vrije Universiteit Brussel
niveau: introductory
- HPC@UGent introduction, 10 november, 6 uur
plaats: Universiteit Gent
niveau: introductory
- Linux@UHasselt introduction, 13 november, 4 uur,
plaats: Universiteit Hasselt
niveau: introductory
- MPI course, 17 & 19 november, 15 uur, VSC
plaats: KU Leuven
based on PATC course by dr. Rolf Rabenseifner (HLRS, Stuttgart, Germany)
niveau: intermediate
- OpenMP, 24 november, 7 uur, VSC
plaats: KU Leuven
based on PATC course by dr. Rolf Rabenseifner (HLRS, Stuttgart, Germany)
niveau: intermediate
- Info session: version control with subversion/git, 26 november, 3 uur
plaats: KU Leuven
niveau: introductory
- HPC@UHasselt introduction, 27 november, 4 uur
plaats: Universiteit Hasselt
niveau: introductory
- Introduction to High Performance Computing, 27 november, 6 uur
plaats: Vrije Universiteit Brussel
niveau: introductory

December

- Debugging techniques, 1 december, 4 uur
plaats: KU Leuven
niveau: introductory
- Lunchbox session storage overview HPC@KU Leuven, 3 december, 2 uur
plaats: KU Leuven/Universiteit Hasselt
niveau: introductory
- Version control with git, 4 december, 3 uur
plaats: Universiteit Hasselt
niveau: introductory
- HPC tips & tricks 3: using checkpointing, 11 december, 2 uur
plaats: Universiteit Antwerpen
niveau: intermediate



Communicatie en evenementen

VSC ECHO

VSC Echo is de nieuwsbrief van het VSC en wordt een drietal keer per jaar uitgegeven. In 2015 verscheen de VSC Echo midden januari, eind juni en eind september. De uitgave van januari 2015, VSC Echo 6, was gefocust op de industriedag. VSC Echo 7 kondigde de aankoop van een nieuwe Tier-1 aan en kon ook de nieuwe VSC website adverteren. Traditioneel werd het september nummer, VSC Echo 8, gewijd aan de VSC opleidingen.

Elke VSC Echo bevat ook nieuws in verband met het gebruik van Tier-1. Zo werd er informatie gebracht over de aanpassingen aan het reglement, 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.

Gebruikersdag 2015

Op 30 november 2015 vond de tweede VSC Gebruikersdag plaats. Deze editie ging door aan de Universiteit Antwerpen. Voor het gevarieerde programma, samengesteld door de Gebruikerscommissie, schreven meer dan 90 deelnemers zich in. Zowel de voor- als de namiddag waren opgebouwd rond hetzelfde stramien: een plenaire sessie gevolgd door een keuze uit één van de 4 workshops. De onderwerpen die besproken werden in de workshops waren: "VSC for starters", "Specialized Tier-2 infrastructure: shared memory", "Big data" en "Cloud and grid access". Er was interesse van de deelnemers voor alle workshops. In de lezing "High performance and multiscale computing: blood, clay, stars and humans" legde Derek Groen "multiscale computing" uit en toonde hoe hij dit in verschillende onderzoeksdomeinen heeft toegepast. In de namiddag liet Johan Meyers ons in "High-performance computing of wind farms in the atmospheric boundary layer" kennismaken met simulaties van windmolenparken. Vervolgens heeft hij een kijk gegeven op de in-house ontwikkelde code en de parallelisatie ervan. Op het einde stelden onderzoekers hun HPC gerelateerd onderzoek voor in een postersessie, waarvoor het publiek via 1 minuut-presentaties warm werd gemaakt. Deze aanpak heeft er mee voor gezorgd dat vele deelnemers duidelijk geïnteresseerd waren voor de talrijke posters. De gesprekken werden voortgezet met een lekker drankje in de hand. De ingevulde evaluatieformulieren waren unaniem positief.



Deelname aan (inter)nationale evenementen

Deelname aan nationale evenementen

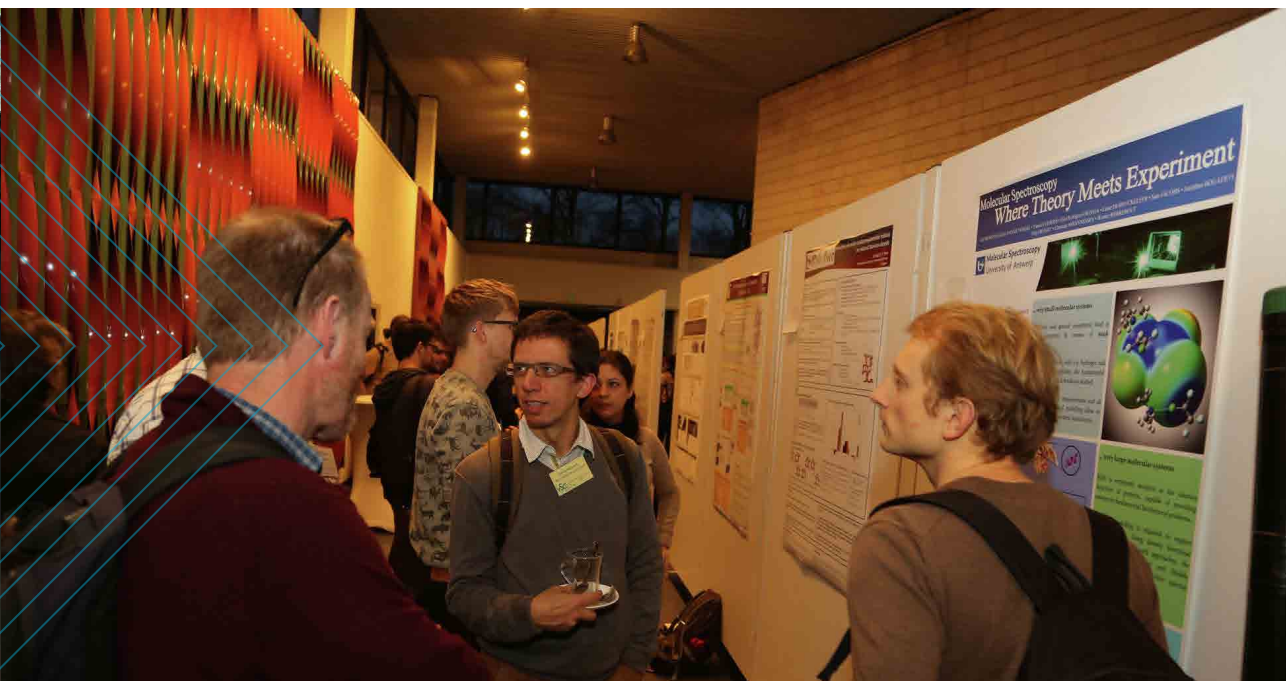
Georganiseerd door VSC

- Tacc_Stats and salt – UGent
29 januari 2015 – UGent
Bijgewoond door Engelbert Tijskens, Ingrid Barcena, Geert Jan Bex, Andy Georges, Kenneth Hoste,
- Tools for Computational Materials – UGent
13-17 april 2015 – UGent
Bijgewoond door Engelbert Tijskens, Geert Jan Bex, Jens Timmerman
- Migrating old to modern Fortran code – KU Leuven
20 mei 2015 – Leuven
Bijgewoond door Engelbert Tijskens
- Introduction to multithreading and OpenMP – KU Leuven
21-22 mei 2015 – Leuven
Bijgewoond door Engelbert Tijskens, Andy Georges
- Intensive course on computational and theoretical chemistry for Erasmus Mundus Masters
- Departement Scheikunde KU Leuven
9 september 2015 – Leuven
Bijgewoond door Ingrid Barcena

- Data science in practice – Computerwetenschappen KU Leuven
14-15 september 2015 – Leuven
Bijgewoond door Mag Selwa, Martijn Oldenhof

Georganiseerd door andere organisaties

- Big on Data, FLAMES annual meeting 2015
13 mei 2015 – Gent
Hands-on sessie 'Using the Flemish supercomputer by the Flemish Supercomputer Center' georganiseerd door VSC
Bijgewoond door Ewan Higgs, Andy Georges, Kenneth Hoste, Stijn De Weirdt, Jens Timmerman, Kenneth Waegeman, Alvaro Simon Garcia, Geert Jan Bex
- Aviation Research Day
19 oktober 2015 – Leuven
Bijgewoond door Geert Jan Bex, Ingrid Barcena, Jan Ooghe
- Belnet networking conference
22 oktober 2015 – Brussel
Bijgewoond door Stefan Becuwe, Kurt Lust
- e-Infrastructures in Belgium day
14 december 2015 – Brussel
Lecture 'Flemish Supercomputer Center: Tier-1 services in Flanders' gepresenteerd door Ewald Pauwels
Lecture 'VSC: The Flemish supercomputing infrastructure' gepresenteerd door Stefan Becuwe
Bijgewoond door Stefan Becuwe, Stéphane Gérard, Kurt Lust, Jan Ooghe, Ewald Pauwels, Rosette Vandenbroucke, Bart Verleye



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 geschikt 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.

EGI

Het VSC is actief aanwezig bij het European Grid Infrastructure-gebeuren (EGI). De VUB gridcluster maakt deel uit van EGI en biedt op deze manier de mogelijkheid aan onderzoekers uit gans Vlaanderen om deze Europese rekeninfrastructuur te gebruiken. Vooral hoge energie fysici van de Universiteit Antwerpen, de Universiteit Gent en de VUB maken hiervan gebruik. De onderzoeksgroep "Icecube" heeft ook besloten om deze rekeninfrastructuur te gebruiken ter vervanging van hun eigen rekenmiddelen. EGI heeft ook een "federated cloud" opgezet waar ook het VSC-toegang zal hebben via de VUB-cloud. De eerste gebruikers die belangstelling hebben voor deze rekenmogelijkheid zijn onderzoekers uit de humane wetenschappen.

SESAME Net

Het VSC is partner in het SESAME Net project dat toegekend werd aan het consortium binnen het Horizon 2020 programma van de EU. SESAME Net staat voor 'Supercomputing Exper-

tise 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. Een 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 15 partners uit 13 EU-landen: HPC-Wales (UK), ICHEC (Ierland), Fraunhofer Institute (Duitsland), PSNC (Polen), GRNET (Griekenland), CESGA (Spanje), PT Cloud (Portugal), IT4Innovations (Tsjechische Republiek), Yotta (Kroatië), UVT (Roemenië), ICT (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 VSC is voornamelijk actief bij work package 4: Awareness Raising. In de periode juni-december zijn er 2 fysieke vergaderingen geweest (in Brussel en Lissabon) en verschillende conference calls. De algemene structuur is op poten gezet en er zijn duidelijk afspraken gemaakt rond de manier van werken en de kwaliteitscontrole. Bij work package 4 zijn er succesvolle gebruikersverhalen van HPC bij KMO's verzameld en op de website geplaatst. De voorbereiding voor een enquête bij KMO's over hun noden en wensen (in termen van HPC) is gestart, evenals die voor de eerste nieuwsbrief.

Ward Poelmans (FWO) is tijdelijk tewerkgesteld op deze projectmiddelen (tot november 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.

Website: <http://sesamenet.eu>

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 oplos-

singen gebruikt om recurrente problemen op te lossen. Deze informatie uitwisselen is dan ook van onschatbare waarde voor de werking van elk HPC centrum.

- Texas Advanced Computing Center (TACC, US)
29 januari - 3 februari 2015 – Gent
Overleg met Robert McLay
- Jülich Supercomputing Center (Duitsland)
28-29 april 2015 – Gent
Overleg met Bernd Mohr, Marcus Geimer
- Rutherford Appleton Laboratory (UK)
11-13 augustus 2015 – Daresbury, UK
Overleg ter plaatste, bijgewoond door Wouter Depypere, Kenneth Waegeman
- Overleg met delegatie Cubaanse universiteiten
24 september, 7 oktober 2015 – Gent
Contact met University of Informatic Sciences (UCI, Havana), Central University of Las Villas (Santa Clara), University of Santiago de Cuba
- 3TU.Datacentrum
23 oktober 2015 – Delft
Bijgewoond door Ewan Higgs

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.

- 8th EasyBuild hackathon
9-11 februari 2015 – Basel, Zwitserland
<https://github.com/hpcugent/easybuild/wiki/8th-EasyBuild-hackathon>
Co-organisatie door Kenneth Hoste, Jens Timmerman

- 9th EasyBuild hackathon
4-5 mei 2015 – Espoo, Finland
Onderdeel van de Nordic e-Infrastructure Collaboration workshop NeIC 2015
<https://github.com/hpcugent/easybuild/wiki/9th-EasyBuild-hackathon>
Co-organisatie door Kenneth Hoste
- Internal hackathon @ CSCS (Swiss National Supercomputing Centre)
7-9 september 2015
Co-organisatie door Kenneth Hoste
- 10th EasyBuild hackathon
11-13 november 2015 – TACC Austin Texas, USA
<https://github.com/hpcugent/easybuild/wiki/10th-EasyBuild-hackathon>
Co-organisatie door Kenneth Hoste

Deelname congressen en workshops

Om het VSC internationaal zichtbaar te maken, informatie te verzamelen die nuttig is voor de verdere uitbouw van de HPC capaciteit in Vlaanderen en om internationale samenwerkingen op te zetten nemen medewerkers van het VSC deel aan internationale conferenties en wetenschappelijke bijeenkomsten. Hieronder wordt hiervan een overzicht gegeven:

- FOSDEM 2015
31 januari - 1 februari 2015 – Brussel
Bijgewoond door Kenneth Hoste, Andy Georges, Alvaro Simon Garcia, Ewan Higgs
- 19th Quattor Workshop
3-5 maart 2015 – Grenoble, Frankrijk
Bijgewoond door Kenneth Waegeman, Stijn De Weirdt, Wouter Depypere (UGent)
- Parallele I/O – Jülich Prace
16-18 maart 2015 – Jülich, Duitsland
Bijgewoond door Geert Jan Bex
- Intel EMEA HPC Roundtable
17-18 maart 2015 – Oxford, UK
Bijgewoond door Ingrid Barcena en Jan Ooghe



- Storage Expo / info security
25 maart 2015 – Brussel
Bijgewoond door Jens Timmerman,
Wouter Depypere
- The Sixth International Conference on
Cloud Computing, GRIDs, and Virtualization
22-27 maart 2015 – Nice, France
Bijgewoond door Rosette Vandenbroucke
- Big Data Science Symposium (FLAMES)
11 mei 2015 – Gent
Bijdrage aan panelgesprek door Ewald
Pauwels
- EGI Conference 2015
18-22 mei 2015 – Lisbon, Portugal
Bijgewoond door Stéphane Gérard en
Rosette Vandenbroucke
- Intel Phi dev conference
6-7 mei 2015 – Munchen, Duitsland
Bijgewoond door Martijn Oldenhof
- Intel Phi dev conference
17-18 juni 2015 – Amsterdam, Nederland
Bijgewoond door Kurt Lust
- Summer school visualisation Hartree
Centre
14-19 juni 2015 – Warrington, VK
Bijgewoond door Geert Jan Bex
- ISC 2015
12-16 juli 2015 – Frankfurt Am Main,
Duitsland
Birds-of-a-feather session 'Getting Scientific
Software Installed: Tools & Best Practices'
Gepresenteerd door Andy Georges
Bijgewoond door Jens Timmerman
- IEEE eScience conference 2015
31 augustus, 1-4 september 2015 – Mün-
chen, Duitsland
Bijgewoond door Rosette Vandenbroucke
- 20th Quattor Workshop
29 september – 1 oktober 2015 – Parijs,
Frankrijk
Bijgewoond door Stijn De Weirdt,
Kenneth Waegeman
- ICT 2015
19-22 oktober 2015 – Lissabon, Portugal
Bijgewoond door Rosette Vandenbroucke
- OpenNebulaConf 2015
20-22 oktober 2015 – Barcelona, Spanje
Lecture 'OpenNebula Automated
Deployments with Quattor Toolkit' door
Alvaro Simon Garcia
Bijgewoond door Andy Georges en
Alvaro Simon Garcia
- Advanced MPI @ EPCC
28-29 oktober 2015 – Edinburgh, VK
Bijgewoond door Geert Jan Bex
- 29th Large Installation System Adminis-
tration conference (LISA15)
8-13 november 2015 – Washington DC,
United States
Bijgewoond door Andy Georges
- EGI Community Forum 2015
10-13 november 2015 – Bari, Italy
Bijgewoond door Stéphane Gérard, Bart
Verleye en Rosette Vandenbroucke
- Supercomputing Austin
15-20 november 2015 – Austin, Texas, VSA
Birds-of-a-feather session 'Getting Scien-
tific Software Installed: Tools & Best Prac-
tices' mee gepresenteerd door Kenneth
Hoste
Bijgewoond door Ingrid Barcena, Jan
Ooghe, Ewan Higgs, Kenneth Hoste

Succes- verhalen VSC

Bekaert nv: modeling wire manufacturing

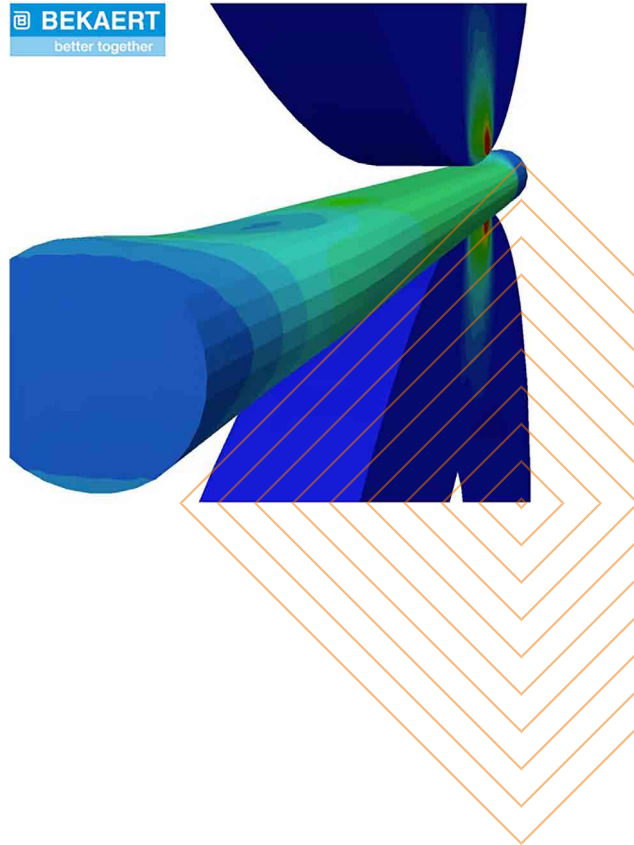
Bekaert is a world market and technology leader in steel wire transformation and coating technologies. Headquartered in Flanders, it is a global company with almost 30.000 employees worldwide. Bekaert is a prime supplier of steel cord products for tire reinforcement and steel fiber for concrete reinforcements. But it offers a very wide range of advanced steel wire products for other applications and to many sectors.

Peter De Jaeger, Team Leader Modelling, explains how Bekaert benefits from supercomputing:

"We use computational models to predict the behavior of steel wire during different transformation processes (e.g. wire rolling, wire drawing, rope manufacturing, ...). Such calculations are much faster and more economic than relying on physical tests on proofing samples. In this way, supercomputing allows us to drastically enhance the speed of product development and improve development processes."

"But this modeling approach requires proper software implementation and ample computational resources." For both, Bekaert relies on the services of the VSC. A tailor-made version of the OpenFOAM-extend software was installed and made available on all clusters by the VSC support team. All Bekaert's computational models now run in an efficient manner on the Tier-1 and Tier-2 infrastructure of the VSC.

Peter De Jaeger: "The VSC team offers world-class supported computational infrastructure which makes high performance computing feasible from an industry perspective."



Evolutionary Systems Biology lab (UGent, VIB)

The Evolutionary Systems Biology lab is a young and dynamic research laboratory at the Plant Systems Biology department of VIB and Ghent University, led by Prof. Dr. Ir. Steven Maere. Its main goal is to understand how plant developmental systems work and how they evolve. Dr. Jayson Gutiérrez is a postdoc at the lab and describes his research.

“The way in which cellular organisms behave is determined by a set of genes that interact with each other in a so-called regulatory network. The main components of this network are DNA-binding proteins, which have evolved to fully control the expression of genetic information into the phenotype. Over evolutionary time scales, changes in the regulatory wiring of these networks provide a major source of functional innovation, potentially mediating the adaptation of organisms to changing environmental conditions.”

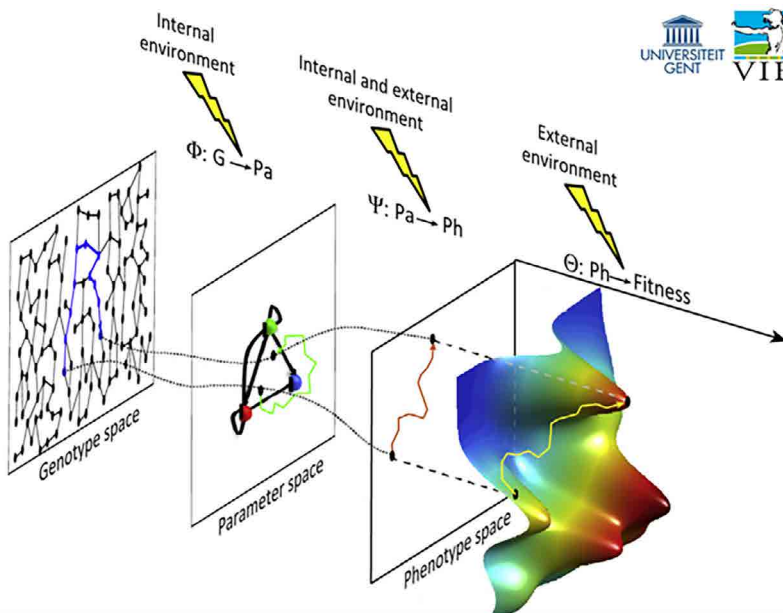
Dr. Gutiérrez is one of the researchers in Prof. Maere’s group that try to understand these regulatory networks at the mechanistic level by developing an elaborate computational model. “Using different types of evolutionary algorithms, and by relying on the supercomputing infrastructure of the VSC, we have gathered

massive amounts of information on how the network model reacts. This allows us to test existing hypotheses, and to formulate new ones. Our simulation results offer exciting new insights on the evolution and function of complex biological systems.”

But that is not all. A fully functioning mechanistic network model of this kind could eventually be used as a computer-aided design tool for synthetic biology, an interdisciplinary field that relies on genetic engineering and systems biology-inspired modeling approaches to engineer different types of biological circuits, including regulatory networks.

“For instance, our model could potentially give cues on how to design regulatory networks with the ability to perform specific biological tasks, such as the regulation of the expression of particular proteins whose intracellular concentration is required to change periodically over time.”

“The execution of this project would not have been possible without the use of the massive computer resources provided by the VSC infrastructure and the fantastic IT support!”



Het VSC-werkplan 2016

Vanaf 2016 worden de activiteiten van de Herculesstichting overgenomen door het Fonds voor Wetenschappelijk onderzoek Vlaanderen (FWO). Het FWO draagt zorg voor een continuïteit van alle taken voorheen toebehorende aan de Herculesstichting. Het Vlaams Supercomputer Centrum blijft een samenwerkingsverband tussen de vijf Vlaamse universiteiten en het FWO. Operationeel wordt dit centrum aangestuurd door de VSC Stuurgroep die uit medewerkers van het FWO en de HPC-coördinatoren van de universiteiten bestaat. Het HPC-decreet bepaalt dat het FWO blijvend instaat voor de financiering van de grote rekeninfrastructuur voor onderzoek en innovatie en voor het beheer van Tier-1.

In 2016 wordt er enerzijds verder gebouwd op de initiatieven die reeds in de vorige jaren werden genomen. Anderzijds worden er ook een aanzienlijk aantal nieuwe activiteiten gepland:

Financiering recurrente kosten

Zoals in 2015 beschikt het FWO in 2016 over een bedrag van 4 miljoen euro voor de structurele financiering van:

- 17 VTE aan medewerkers. Naast de technische exploitatie van Tier-1, staan deze medewerkers in voor de opleiding en de ondersteuning van gebruikers van zowel Tier-2 als Tier-1;
- een deel van de werkings- en investeringskosten van de Tier-1 en Tier-2 computers.
- Hiervoor sluit het FWO jaarlijks subsidieovereenkomsten af met de universiteiten. Naast de subsidies die het FWO toekent, dragen de universiteiten met eigen middelen bij voor het financieren van bijkomend personeel, werkings- en huisvestingskosten en investeringen.

Bekendmaking, opleiding en ondersteuning

Om de aangereikte mogelijkheden bekend te maken, de (potentiële) gebruikers te informeren en een gebruikersgemeenschap te creëren wordt:

- in de tweede helft van 2016 de derde HPC-Gebruikersdag georganiseerd;

- periodiek op grote schaal de nieuwsbrief 'VSC Echo' elektronisch verspreid;
- een brochure opgemaakt gericht naar de industriële gebruikers;
- een lanceringsevenement voor de tweede Tier-1 georganiseerd in oktober 2016.

Het VSC biedt opleidingen aan aangepast aan het niveau en de noden van gebruikers. Zowel standaardopleidingen als meer gespecialiseerde cursussen worden georganiseerd. Hiervan wordt regelmatig een overzicht verspreid via de VSC website. Verder worden de gebruikers geïnformeerd over de opleidingen die door buitenlandse centra ingericht worden en waaraan ze kunnen deelnemen. De opleidingen die in het kader van het VSC georganiseerd worden, staan in de mate van het mogelijke ook open voor gebruikers uit het bedrijfsleven.

De ondersteuning van gebruikers gaat van helpdesk voor het oplossen van kleine, vrij routinematige problemen tot individuele begeleiding van onderzoekers door experts die goed geplaatst zijn om software te optimaliseren en softwarepakketten op een gevorderd niveau te gebruiken.

Toewijzen en beheren van rekentijd Tier-1

Op basis van een evaluatie werd het reglement betreffende aanvragen voor het gebruik van de Vlaamse Supercomputer op een aantal punten bijgesteld. De nieuwe versie is vanaf 1 januari 2016 van toepassing. Het mandaat van de buitenlandse leden die in de Evaluatiecommissie zetelen, werd bevestigd.

Zoals in 2015 wordt ook in 2016 op basis van drie beoordelingsmomenten gewerkt: 1 februari, 6 juni en 3 oktober.

HPC en industrie

Eén van de opdrachten die in het HPC-decreet aan het VSC gegeven werd, is bedrijven en instellingen uit de non-profit sector te informeren over het belang van HPC voor het ontwikkelen van nieuwe en het verbeteren van bestaande diensten en producten en hen te ondersteunen bij het gebruik van deze nieuwe technologie.

Sedert 2014 werden de eerste contracten met Vlaamse bedrijven afgesloten voor het afnemen van rekentijd. Om bedrijven over de mogelijkheden te informeren en hun via concrete cases deze mogelijkheden op een tastbare manier te illustreren, wordt opnieuw een evenement gepland in 2016. Getuigenissen van Vlaamse bedrijven die reeds de weg naar het VSC hebben gevonden maar ook sprekers uit buitenlandse supercomputercentra die veel ervaring hebben met samenwerking met het bedrijfsleven, zullen eraan deelnemen.

Ook neemt het VSC deel aan het Europese Horizon 2020 SESAME- Net project. In SESAME-Net (Supercomputing Expertise for Small and Medium Enterprises) wordt de meerwaarde van supercomputing aan KMO's gepromoot en wordt de toegang tot HPC infrastructuur gefaciliteerd.

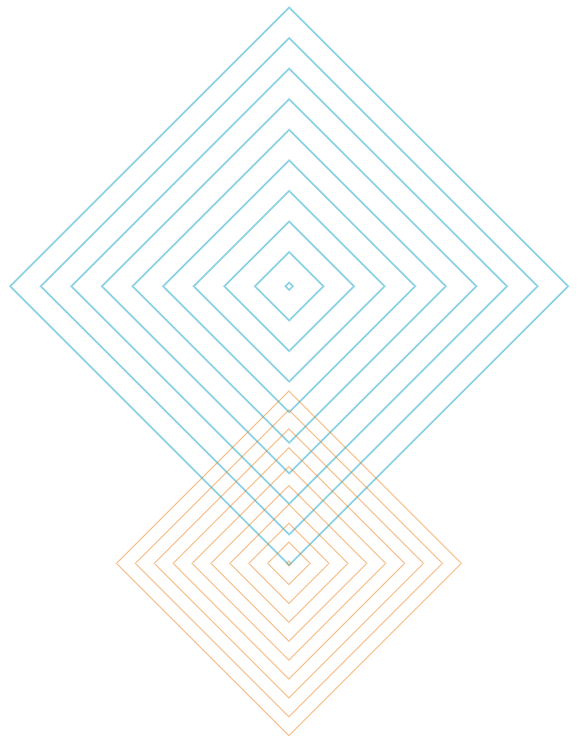
De tweede Vlaamse Tier-1

In 2014 besliste de Herculesstichting de huisvesting en de technische exploitatie van de tweede Vlaamse Tier-1 toe te wijzen aan de KU Leuven. Via een openbare aanbesteding werd de firma NEC geselecteerd om de machine te bouwen.

De nieuwe machine wordt midden 2016 aan de KU Leuven geïnstalleerd en zal één van de 200 snelste computers ter wereld zijn. Een lanceringsevenement is voorzien in oktober 2016 en talrijke initiatieven zullen ontwikkeld worden om de nodige bekendheid aan de nieuwe supercomputer te geven.

Verbeteren van de dienstverlening

Sinds 2014 definiëren de HPC-coördinatoren een aantal projecten waaraan prioritair zal gewerkt worden om de dienstverlening van Tier-1 en Tier-2 te verbeteren. Sommige projecten worden in een jaar afgerond, andere zijn nog in uitvoering. Voor 2016 worden enkele aanvullende projecten opgesteld. In maart 2016 wordt voor de tweede keer een all-hands meeting georganiseerd waaraan alle personen deelnemen die aan de universiteiten instaan voor de exploitatie van de HPC-infrastructuur en de ondersteuning van de gebruikers. Op die dag wordt een stand van zaken opgemaakt over de uitvoering van de projecten en wordt de planning besproken en worden de werkgroepen voor de implementatie ervan vastgelegd.



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

Waarnemend secretariaat-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 Vandenbroucke
Caroline Volckaert

Creatie en vormgeving

CIBE Communicatie coach in communicatie

Uitgegeven in juni 2016

