



**Vlaanderen**  
is O&O Infrastructuur



**HERCULESSTICHTING**  
AGENTSCHAP VOOR  
ONDERZOEKSINFRASTRUCTUUR

# Jaarverslag 2014

<b>Voorwoord</b>	<b>4</b>
<b>Het VSC uitgelicht</b>	<b>6</b>
Een kort overzicht van HPC in Vlaanderen	6
Het Vlaamse model	8
Financiering van Tier-1 en Tier-2	9
Strategisch plan voor grote rekencapaciteit voor onderzoek en innovatie in Vlaanderen – 2015-2020	10
Beslissing i.v.m. de huisvesting voor de tweede Tier-1	11
<b>Tier-2 infrastructuur en projecten per instelling</b>	<b>12</b>
Exploitatie en gebruik	12
KU Leuven en Universiteit Hasselt	12
Universiteit Gent	13
Universiteit Antwerpen	15
Vrije Universiteit Brussel	16
Gebruik	18
Projecten	24
Projecten van dichtbij	25
Pilotprojecten	26
Gebruikersondersteuning	27
Beantwoorden van vragen van gebruikers	27
Bijeenkomsten met gebruikers / specifieke ondersteuning	28
Personeel	33
Subsidiëring	33
Effectieve personeelsinzet	34
Profielen	34
Gevorderde ondersteuning	36
Personeelslijst	37
<b>Rekenen op de VSC-cluster</b>	<b>39</b>
Werkwijze voor het toekennen van rekestijd op Tier-1 en de Tier-2	39
Aanrekenen van kosten	41
Preparatory access	41
Goedgekeurde aanvragen	42
Grafieken over het gebruik van Tier-1	45

<b>Outreach naar Vlaamse bedrijven</b>	<b>47</b>
Industrial Board	47
Dienstverlening aan bedrijven	47
Gebruik van Tier-1 door bedrijven	49
Bekendmaking naar bedrijven en andere kennisinstellingen toe	50
<b>Opleidingen</b>	<b>52</b>
Organisatie en bekendmaking van opleidingen	52
Opleidingsprogramma	54
<b>Communicatie en events</b>	<b>59</b>
VSC ECHO	59
Gebruikersdag 2014	59
<b>Internationale samenwerking</b>	<b>60</b>
PRACE	60
EGI 60	
EU project	60
Contacten met andere HPC-centra	61
Deelname aan congressen	62
<b>Succesverhalen van het VSC</b>	<b>64</b>
R&D Department Janssen Pharmaceutica	64
Laboratorium voor chemische technologie (Universiteit Gent)	65
Windenergiesimulaties bij 3E NV	66
<b>Het VSC-werkplan 2015</b>	<b>67</b>

# VOORWOORD

Beste onderzoekers,  
Beste lezer,

2014 was het jaar waarin het VSC haar definitieve structuur kreeg als een samenwerkingsverband tussen de Vlaamse universiteiten en de Herculesstichting.

De Vlaamse universiteiten bouwden hun Tier-2 capaciteit verder uit. Via het computernetwerk dat Belnet beheert, zijn de universitaire clusters onderling en met de Tier-1 verbonden. Het VSC zorgt ervoor dat de onderzoekers hun applicaties eenvoudig kunnen migreren tussen deze machines zodat steeds de meest geschikte computer wordt gebruikt. Het aantal opleidingen over het gebruik van de Tier-1 en de Tier-2 dat wordt aangeboden aan onderzoekers uit de Vlaamse universiteiten, de strategische onderzoekscentra en de andere publieke kennisinstellingen, maar ook aan de bedrijven, werd uitgebreid. Met de VSC Echo, de elektronische nieuwsbrief van het VSC, wordt de informatie hierover op ruime schaal verspreid.

Voor het toekennen van rekestijd op de Tier-1 keurde de Raad van Bestuur een reglement goed waarbij voor het evalueren van de aanvragen een panel van internationale deskundigen werd ingesteld. In 2014 werden op drie momenten aanvragen beoordeeld. In het totaal werden 123.000 nodedagen toegekend aan 36 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.

Om de noden van de gebruikers in kaart te brengen en de ontwikkelingen te bespreken is er een Gebruikerscommissie Tier-1 ingesteld.

2014 was ook het jaar waarin de samenwerking met bedrijven vorm kreeg. De eerste contracten voor het afnemen van rekestijd werden afgesloten en er werden contacten gelegd met potentieel geïnteresseerde industriële gebruikers. De Industrial Board speelde een belangrijke rol bij het uittekenen van een strategie naar de bedrijven toe om de voordelen van een samenwerking met het VSC duidelijk te maken: een professionele ondersteuning bij het gebruik van deze complexe infrastructuur, waar nodig op maat gemaakte opleidingen, maar vooral de inbedding in een academische omgeving.

Maar de ontwikkelingen gaan erg snel. Na een rigoureuze selectieprocedure besliste de Raad van Bestuur van de Herculesstichting eind 2014 met de KU Leuven een overeenkomst af te sluiten voor de aankoop, de huisvesting en de technische exploitatie van de tweede Vlaamse Tier-1 supercomputer. Deze universiteit stelt een hiervoor speciaal ingerichte ruimte ter beschikking. Midden 2016 zal deze machine in gebruik worden genomen.

KU Leuven: Jan Ooghe, Leen Van Rentergem

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 (HPC) maakt het mogelijk uit de steeds grotere volumes data waardevolle informatie te distilleren.

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 punctueel financiering toegekend maar een globale visie ontbrak. In 2007 wees de Koninklijke Vlaamse Academie van België voor Wetenschap 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 onderzoeksinstituten 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 grote computers.

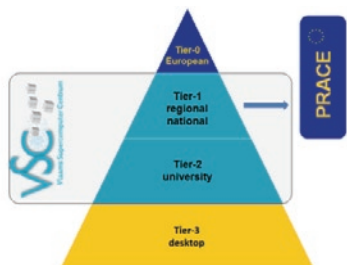
Tenslotte werd in het rapport ook gewezen op de internationale ontwikkelingen en mogelijkheden die de toepassingen op Tier-0 machines voor Vlaamse onderzoekers bieden. Ongeveer gelijktijdig met dit advies besliste het Strategisch Forum voor Onderzoeksinfrastructuur (ESFRI) om het voorstel Partnership 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.

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. Als aanvulling van de overheids subsidies, financieren deze instellingen met eigen middelen een belangrijk deel van de kosten en bijkomend personeel. De universiteiten beschouwen immers de uitbouw van grote rekencapaciteit 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. In 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.



## 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 onafhankelijk 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 gebrek aan 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 bevoegde Vlaamse minister keurde het Vlaamse Parlement hiervoor een regelgevend kader goed. Het decreet van 5 juli 2013 betreffende een structurele regeling voor grote rekencapaciteit 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 wordt 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.

Om de samenwerking met de bedrijven maar ook met 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. Daarnaast voorziet men dat een Tier-1 Gebruikerscommissie en een Internationale Wetenschappelijke Adviesraad ingericht wordt. Op 21 februari 2014 keurde de Vlaamse Regering de wijzigingen\*\* die de Raad van Bestuur aan de Statuten voorstelde, goed en benoemde de leden van de nieuwe Raad van Bestuur en deze van de Industrial Board.

\* Voor meer informatie, ga naar (<http://www.belnet.be/nl>).

\*\* Voor meer informatie, ga naar [http://www.herculesstichting.be/download/BVR\\_Benoeming\\_RVB-2014.pdf](http://www.herculesstichting.be/download/BVR_Benoeming_RVB-2014.pdf).



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 Werkgroep HPC vergadert maandelijks. Tijdens deze meetings worden niet alleen operationele afspraken gemaakt maar wordt ook strategisch advies aan de Raad van Bestuur gegeven.

## Financiering van Tier-1 en Tier-2

In 2012 kende Vlaamse Regering aan de universiteiten een eenmalige toelage van 5 miljoen euro toe voor de het vernieuwen en uitbreiden van hun Tier-2 infrastructuur.

Zoals reeds aangegeven werd, beschikte de Herculesstichting in 2012 voor het eerst over een structurele financiering voor HPC. In 2013 en 2014 was hiervoor 4 miljoen euro beschikbaar.

Deze middelen werden in beide jaren aangewend voor het financieren van:

- personeelskosten voor de exploitatie van de Tier-1 (190.000 euro);
- een deel van de energiekosten van de Tier-1 (175.000 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.)
- investeringen en werkingskosten voor de Tier-2 infrastructuur (2.210.000 euro);

(De universiteiten hebben dit laatste bedrag vooral gebruikt voor bijkomende investeringen in Tier-2. Deze instellingen financieren met eigen middelen de energie- en exploitatiekosten van de Tier-2.)

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

	Tier-1		Tier-2			Totaal	
		KU Leuven	UHasselt	UGent	VUB	UAntwerpen	
Personeel in FTEs	2,0	5,0	1,0	4,0	2,0	3,0	17,0
Personeel in €	€ 190.000	€ 475.000	€ 95.000	€ 380.000	€ 190.000	€ 285.000	€ 1.615.000
Werking	€ 175.000	€ 964.886	€ 65.195	€ 708.084	€ 218.569	€ 253.266	€ 2.385.000
Totaal	€ 365.000	€ 1.439.886	€ 160.195	€ 1.088.084	€ 408.569	€ 538.266	€ 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. Hierin werd een pad uitgetekend om gedurende deze periode te consolideren wat in de afgelopen legislatuur gerealiseerd werd en dit 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 en 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. In de eerste plaats in 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 2014 beschikte, moet worden verhoogd tot 10 miljoen euro per jaar. In vergelijking met de buitenlandse HPC-centra gaat het nog steeds om een bescheiden financiering. Het strategisch plan\* werd overgemaakt aan alle politieke partijen en na het aantreden van de Vlaamse Regering werd dit plan besproken met de nieuwe Vlaamse minister bevoegd voor wetenschap en innovatie.

<sup>1</sup> Voor meer details, ga naar [http://www.herculesstichting.be/download/Strategisch\\_plan\\_2015-2020\\_HPC\\_in\\_Vlaanderen.pdf](http://www.herculesstichting.be/download/Strategisch_plan_2015-2020_HPC_in_Vlaanderen.pdf).

## Beslissing i.v.m. de huisvesting voor de tweede Tier-1

De eerste Vlaamse Tier-1 supercomputer werd in de eerste helft van 2013 in productie genomen en is 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 Herculesstichting stelde een eisenplan op waaraan deze huisvesting moest voldoen en nodigde op 28 maart 2014 de vijf Associaties Universiteiten & Hogescholen uit om uiterlijk op 1 juli 2014 hun voorstellen in te dienen.

Alleen de Associatie KU Leuven diende een voorstel in. Dit werd positief beoordeeld door een ad-hoc panel van onafhankelijke deskundigen. Dit panel formuleerde tevens een aantal aanbevelingen. Op basis hiervan en op basis van het positief advies van het College van Voorzitters van de Associaties - dat in uitvoering van de beslissing van de Vlaamse Regering gevraagd moest worden - besliste de Raad van Bestuur van de Herculesstichting op 21 oktober 2014 een overeenkomst met de KU Leuven af te sluiten voor de aankoop en de huisvesting van de tweede Vlaamse Tier-1.

Bij de opstelling van de Vlaamse Uitgavenbegroting 2015 werd het bijkomend bedrag dat voor het financieren van deze supercomputer gevraagd werd, niet toegekend. 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 toe te kennen: 1.950.00 euro in 2015 en 3.550.00 euro in het jaar nadien. 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.

# 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

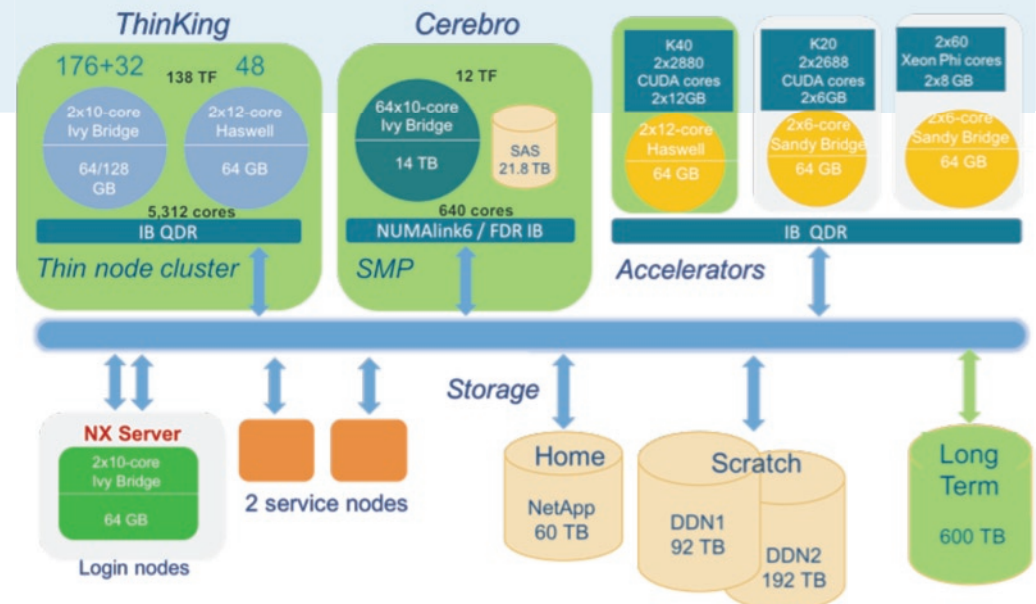
Voor de Tier-2 infrastructuur werken de KU Leuven en de UHasselt samen.

De infrastructuur bestaat uit:

- 2 clusters, 6 partities
- 150 TF
- 5312 CPU / 2972 accelerator cores
- 29 TB geheugen



Tier-2 infrastructuur van KU Leuven



De thin node cluster ThinkKing, werd eind december 2013 door HP geleverd. De installatie werd opgeleverd in februari 2014. Na een gesloten pilootperiode die tot 22 april liep en die gevolgd werd door een open piloot periode, heeft het systeem op 15 juli de status 'productie' gekregen. In oktober werd het systeem verder uitgebreid van 144 naar 208 rekennodes. Dit bracht de totale capaciteit van ThinkKing op meer dan 90 Tflops. Dit komt neer op 3 keer zoveel capaciteit als waarover de oude cluster beschikte. Naast de thin node cluster zijn er nog kleinere opstellingen met Xeon Phi en GPU nodes.

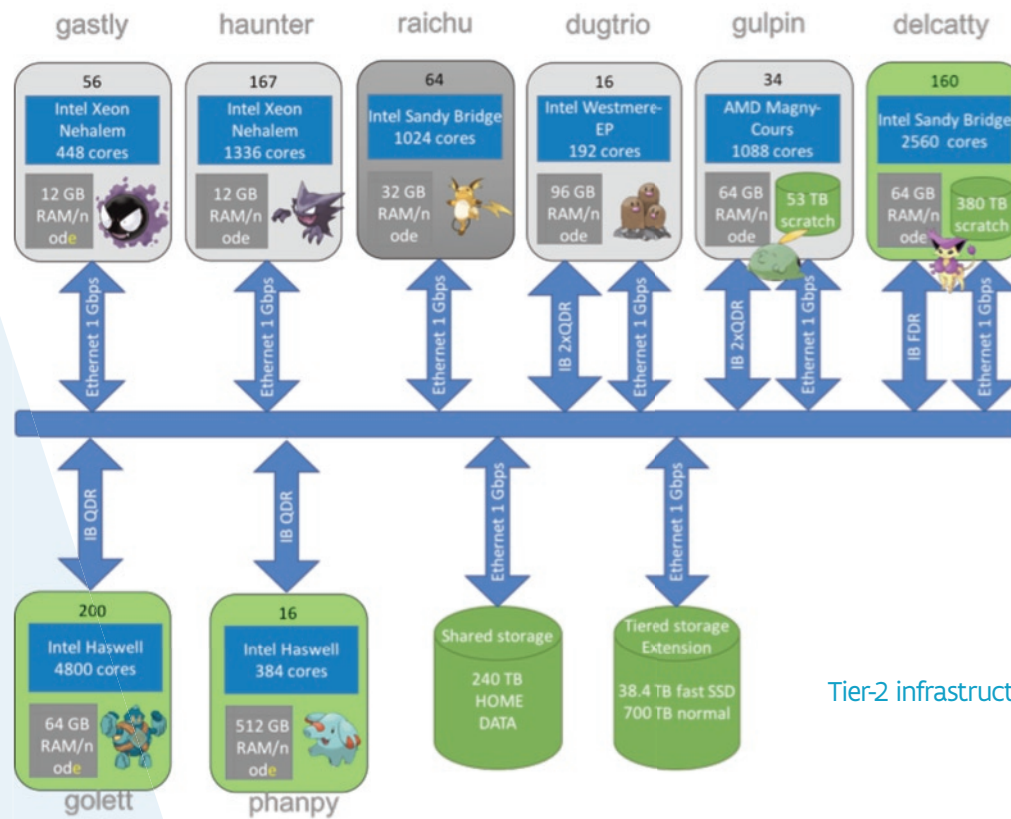
De shared memory machine, een SGI UV 2000 die de naam Cerebro draagt, werd in maart geleverd. Dit type infrastructuur was voorheen niet beschikbaar binnen het VSC. Deze machine is uitermate geschikt voor rekenwerk dat veel geheugen per core vergt of voor rekenwerk waarbij de parallelisatie nog niet gedistribueerd kan verlopen. Vermits dit type machine zowel voor de ondersteuner als voor de onderzoekers nieuw was, werd geopteerd voor een langere pilootperiode. Waar op de thin node cluster de kleinste eenheid die een onderzoeker kan reserveren een node is (met 2 CPU's), is dit op Cerebro 1 CPU. De shared memory machine voorziet een betere systeembescherming van het geheugengebruik die interferentie van verschillende gebruikers uitsluit. Sinds 2 december is de machine in een open pilootperiode getreden waardoor ze voor alle onderzoekers beschikbaar is.

Naast rekenkracht is ook een derde storage Tier in gebruik genomen. Na een aanbestedingsprocedure werd er gekozen voor DDN WOS Dit is een systeem dat voor de effectieve opslag van archiveringsdata gebruik maakt van een object storage omgeving. Deze heeft een capaciteit van 1,2PB. De implementatie van de nieuwe storage Tier biedt meer mogelijkheden voor onderzoekers die grote volumes data moeten verwerken. Verschillende onderzoeksdomeinen kunnen hiervan gebruik maken. Genoomanalyses van bio-informatici, klimaatdata van geografen, beeldanalyse data. Dit zijn enkele voorbeelden van gegevens waarvan de hoeveelheden snel blijven toenemen. De eerste gebruikers maken sinds eind 2014 als piloot gebruik van het systeem via de WOS Access.

## Universiteit Gent

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

- 8 clusters
- 228 TF
- 11832 CPU cores
- 39 TB geheugen



Tier-2 infrastructuur Universiteit Gent

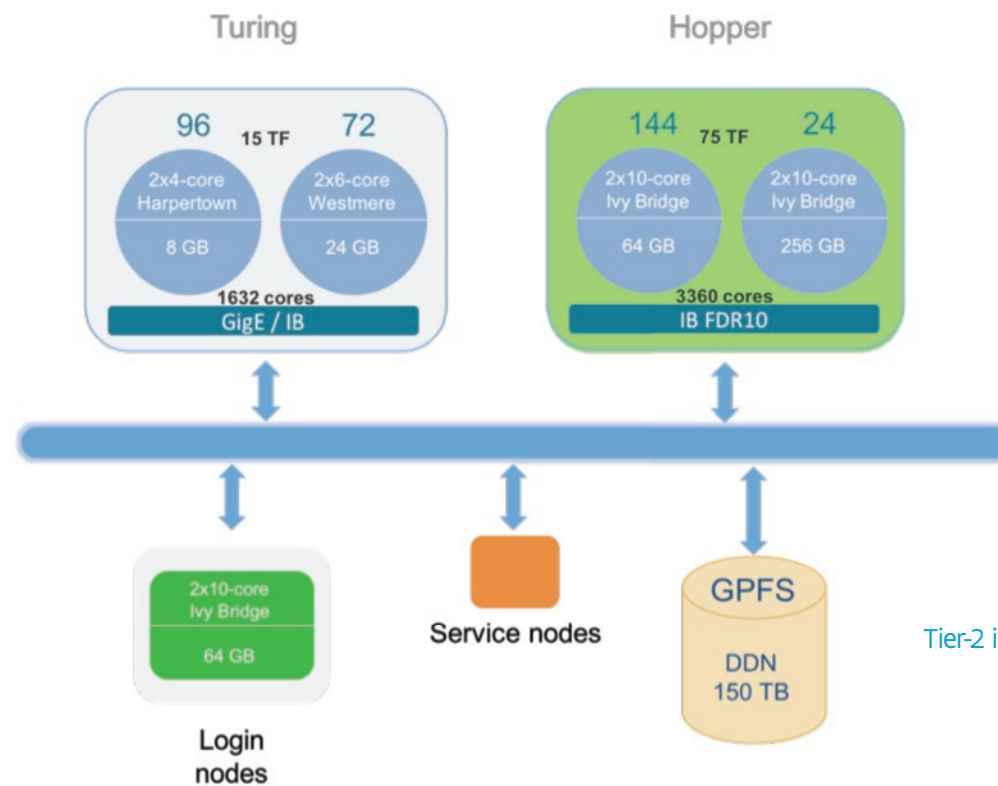
De Tier-2 infrastructuur is opgebouwd uit verschillende clusters, in functie van specifieke kenmerken. In de loop van 2014 werd de oudste MPI cluster gengar uit dienst genomen. Ter vervanging, kwam in een eerste fase de nieuwe cluster delcatty operationeel in augustus 2013 (Dell). In een tweede fase vervulde de Cluster golett (HP) de vervangingsoperatie. De hardware voor deze cluster werd eind 2014 geleverd en gaat in de eerste helft van 2015 in productie.

Daarnaast is ook phanpy aangekocht (HP), een cluster specifiek gericht op Big Data toepassingen. Tevens werd een storage extension geïnstalleerd (Dell), waarbij snelle (SSD) schijfopslag gecombineerd wordt met traditionele storage. Ook deze cluster zal in de eerste helft van 2015 in productie gaan. Zowel golett als phanpy zijn door het HPC-UGent team zelf geïnstalleerd.

## Universiteit Antwerpen

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

- 2 clusters / 4 partities
- 90 TF
- 2400 CPU cores
- 12 TB geheugen



Tier-2 infrastructuur Universiteit Antwerpen

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 node, 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 eind 2014 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.

Naast een specifieke Big Data cluster, is ook een vSMP oplossing beschikbaar, de cluster dugtrio. Deze cluster zal in de loop van 2015 een nieuwe bestemming krijgen, vermits cluster phanpy nodes met veel geheugen eerder een hardware dan een software oplossing is.

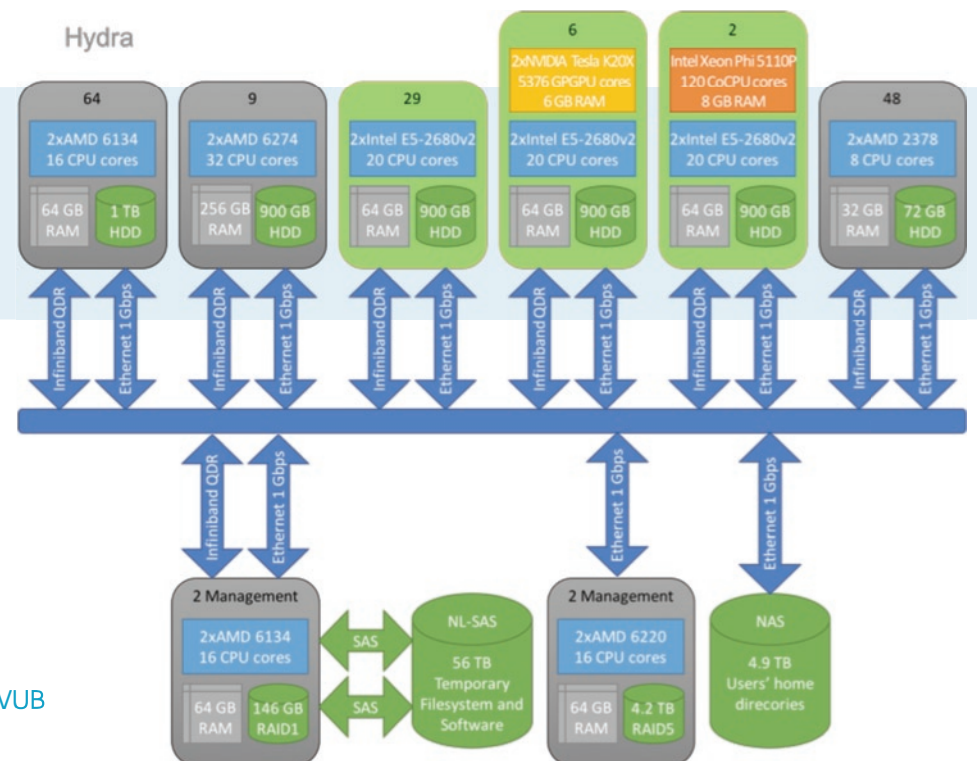
## Vrije Universiteit Brussel

Ook de VUB beschikt over een krachtige Tier-2 omgeving:

- 1 cluster / 6 partities
- 16 TF
- 2436 CPU cores
- 10 TB geheugen



Tier-2 infrastructuur VUB



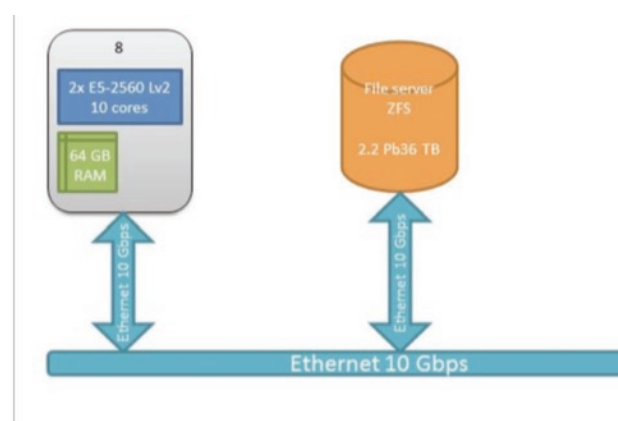




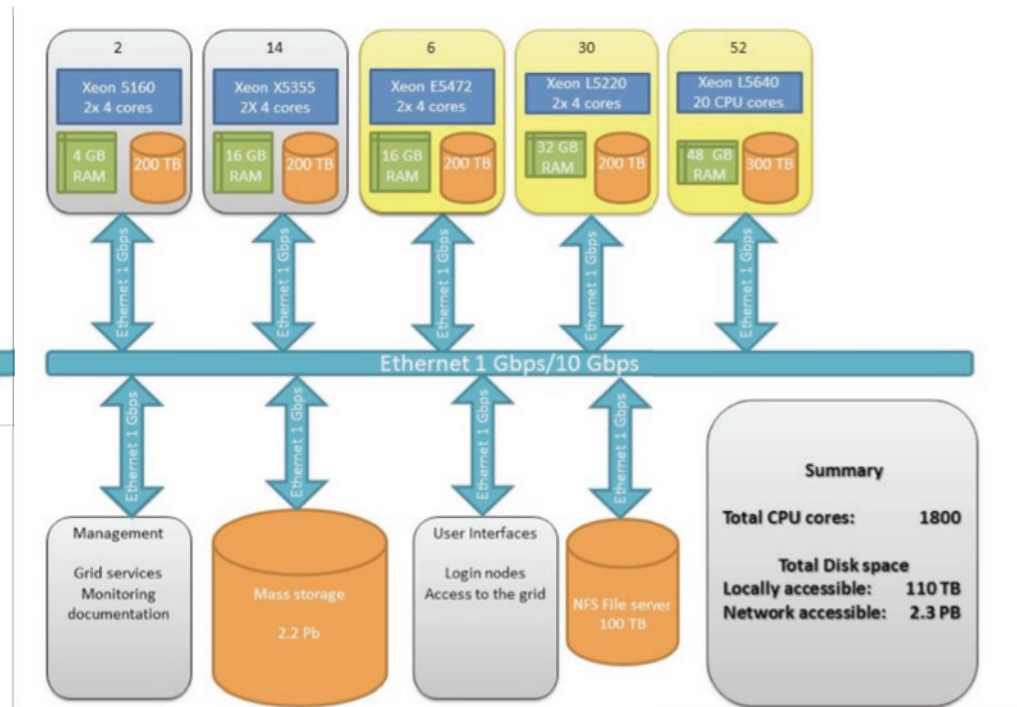
In tegenstelling tot de Tier-2 infrastructuur aan de andere instellingen, werd er aan de VUB voor gekozen om uitbreidingen steeds binnen dezelfde Hydra omgeving te doen. Dit heeft tot gevolg dat dit een zeer heterogeen cluster is. Zo is de cluster in 2014 verder uitgebreid met enerzijds 6 nodes met elk 2 GPGPU en anderzijds 2 nodes met elk 2 Xeon Phi.

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. Hier werd een uitbreiding van de opslagcapaciteit met 1.2 PB storage voorzien.

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



Cloud-infrastructuur VUB

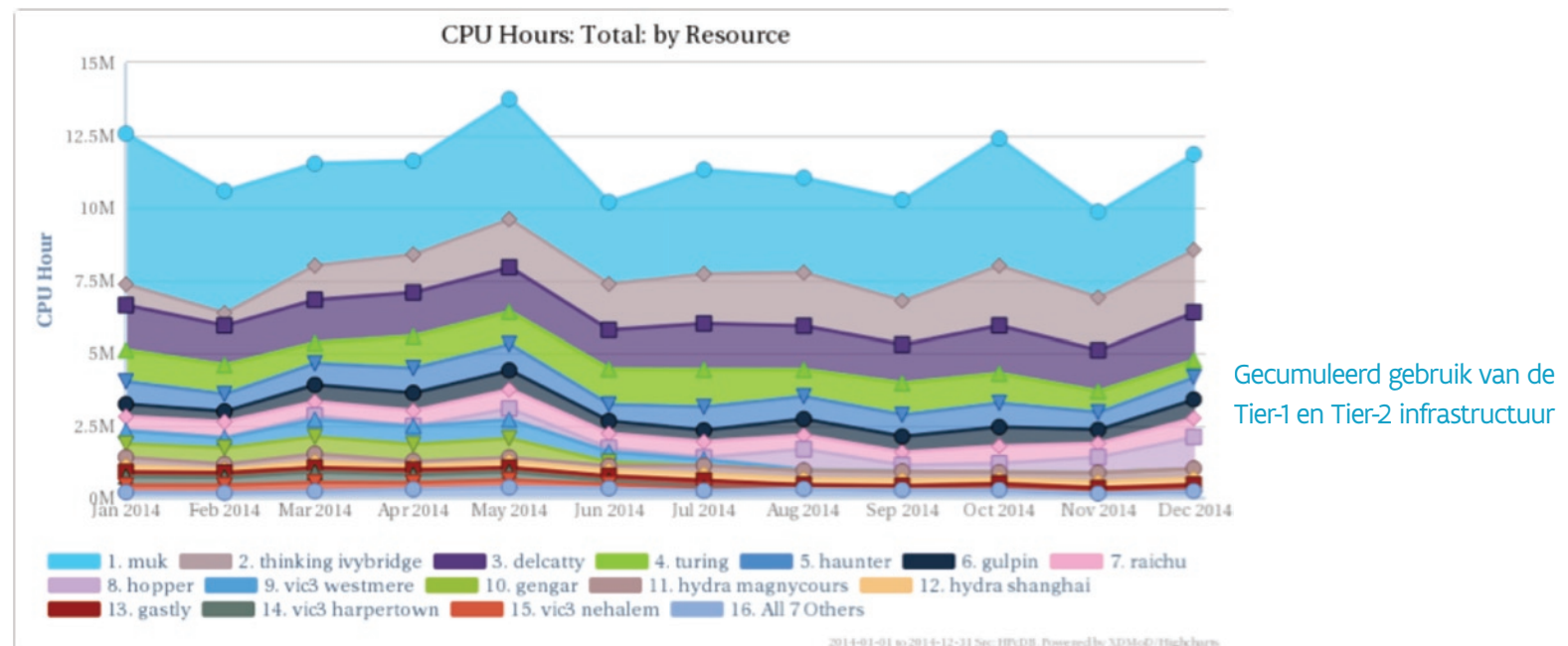


Grid-infrastructuur VUB

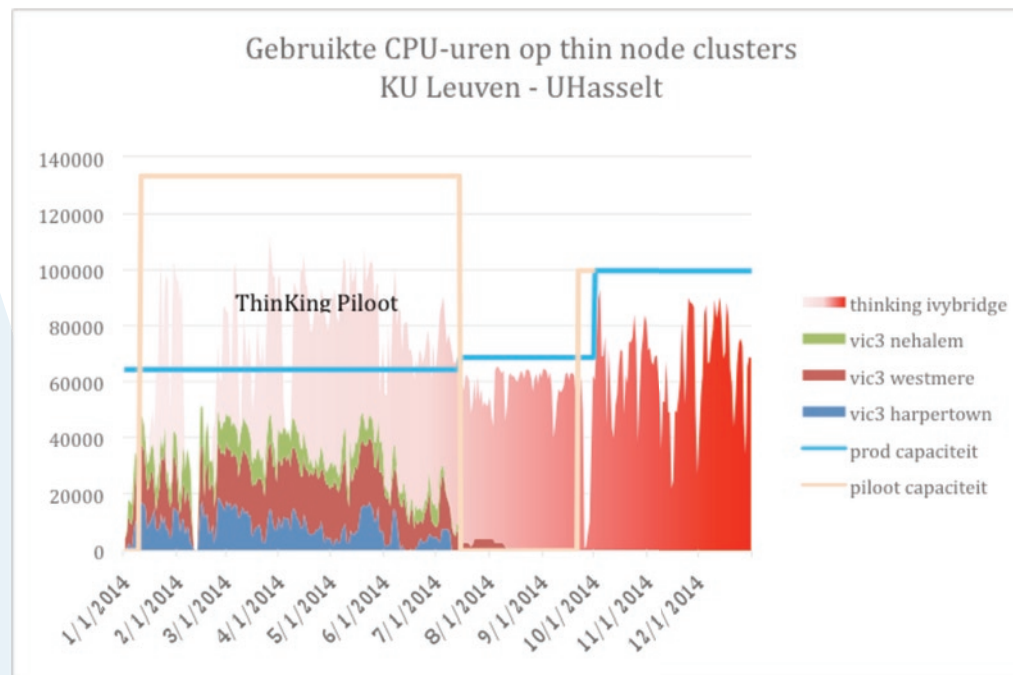
## Gebruik

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

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

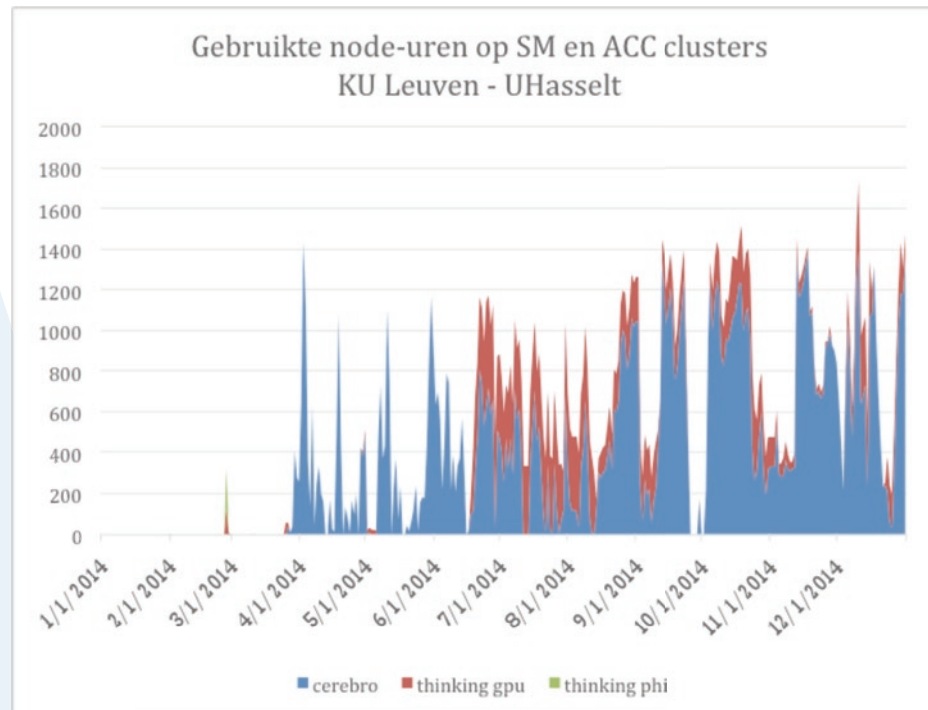


Bovenstaande afbeelding geeft het gecumuleerde gebruik weer van de Tier-1 (muk) en Tier-2 infrastructuur. Er is een duidelijk verschil merkbaar tussen het begin en het einde van het jaar. Tegen het einde van 2014 zijn enkele nieuwe Tier-2 clusters volledig operationeel waardoor het totaal aandeel van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



Gebruik van de KU Leuven infrastructuur

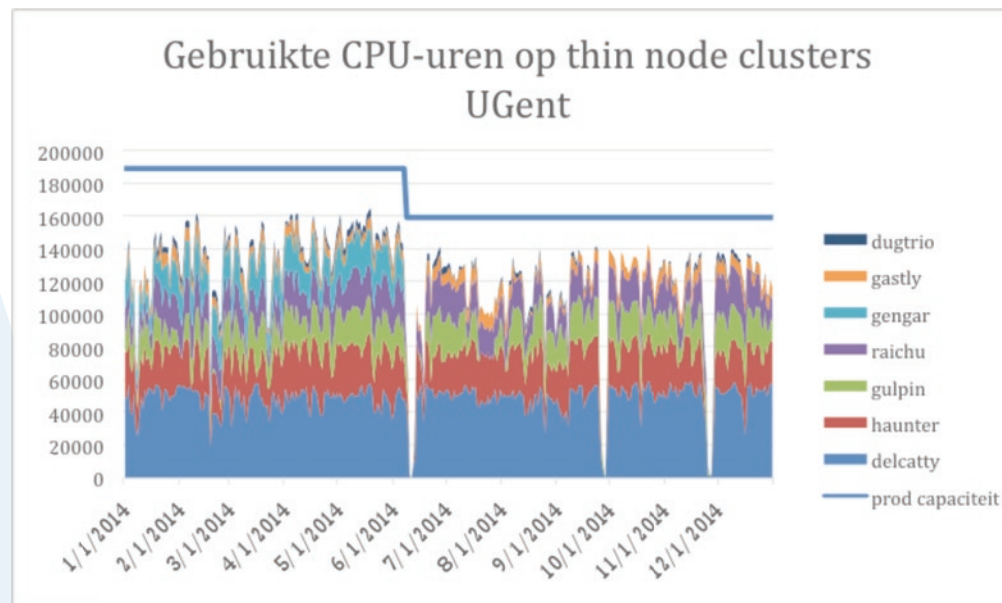
Bovenstaande afbeelding geeft een overzicht van het gebruik van de infrastructuur aan de KU Leuven. De grafiek stelt het cumulatieve gebruik voor van de verschillende thin node clusters aan de KU Leuven. Zoals duidelijk te zien is, werd de Vic3 cluster die uit verschillende delen bestaat (Harpertown, Nehalem en Westmere) half 2014 uit productie genomen. ThinKing is de nieuwe cluster die het werkt overnam. In het begin van het jaar werd deze voor het eerst in pilootgebruik genomen. Vanaf juli nam ThinKing het productiewerk over van Vic3. In oktober werd ThinKing verder uitgebreid met 64 extra reken-nodes. Om dit deel te activeren was een volledige downtime van de cluster nodig. Dit verklaart de dip in de grafiek.



Gebruik van shared memory en 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.

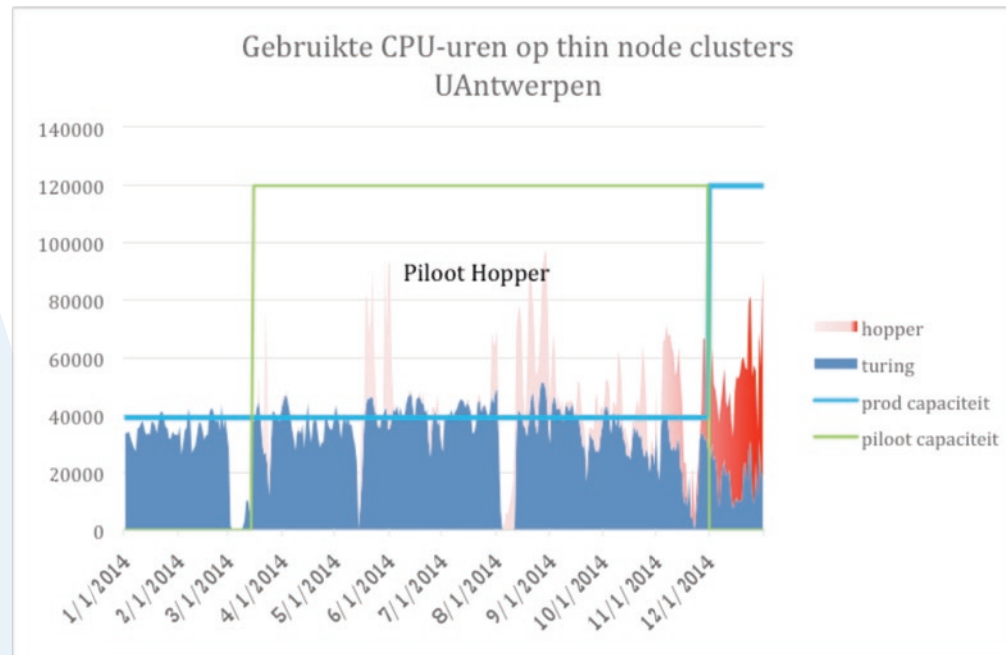
Ook op deze grafiek is dezelfde downtime die nodig was voor een uitbreiding, zichtbaar eind september. De shared memory machine is in 2014 door verschillende onderzoeksgroepen op pilootbasis gebruikt. Het gebruik van acceleratoren is nog sterk afhankelijk van de beschikbaarheid van software. De systemen zijn echter beperkt maar moeten aangeboden worden aan de onderzoekers als een optie voor het uitvoeren van gespecialiseerde rekenopdrachten.



Deze afbeelding geeft het cumulatieve gebruik in 2014 weer van alle HPC-clusters aan de Universiteit Gent. De totale capaciteit die gebruikt werd, benadert 72% van de theoretische productie capaciteit en – hoewel er enige fluctuatie is – is het gebruik van de individuele clusters behoorlijk vlak en constant.

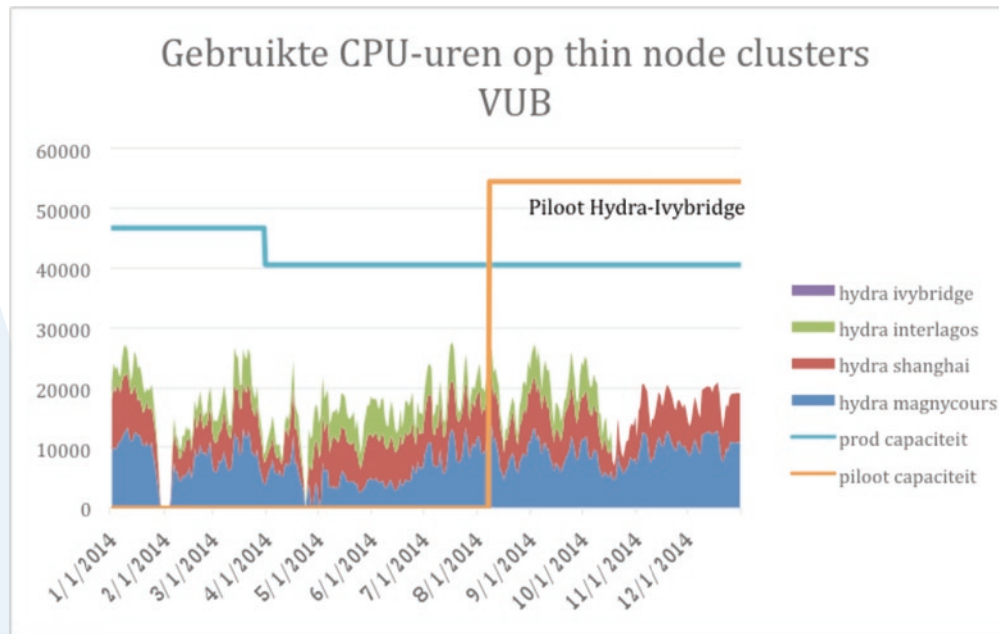
Wat het meest in het oog springt, is wellicht de daling van de totale productiecapaciteit in de tweede helft van het jaar: de cluster gengar – de oudste cluster van de infrastructuur van de Universiteit Gent – werd toen immers uit dienst genomen. In de loop van 2013 werd de vervangende cluster delcatty reeds aangekocht en in productie genomen, maar het gebruik van beide clusters heeft elkaar een tijd overlapt doordat ze allebei nog gretig benut werden.

Jaarlijks worden twee maintenance windows gepland, waarbij meer ingrijpende software en hardware updates uitgevoerd worden op de clusters. Lichtere security patches en updates worden op regelmatige basis doorgevoerd. In de mate van het mogelijk gebeurt dit zonder enige hinder voor de gebruikers te veroorzaken. De maintenance windows in 2014 vonden plaats in juni en november, waarbij telkens alle clusters voor een viertal dagen in downtime werden geplaatst. Dit is duidelijk zichtbaar in de grafiek. De dip van eind september 2014 was het gevolg van een emergency shutdown, om de zogenaamde shellshock kwetsbaarheid in het Linux besturingssysteem zo snel mogelijk te patchen.



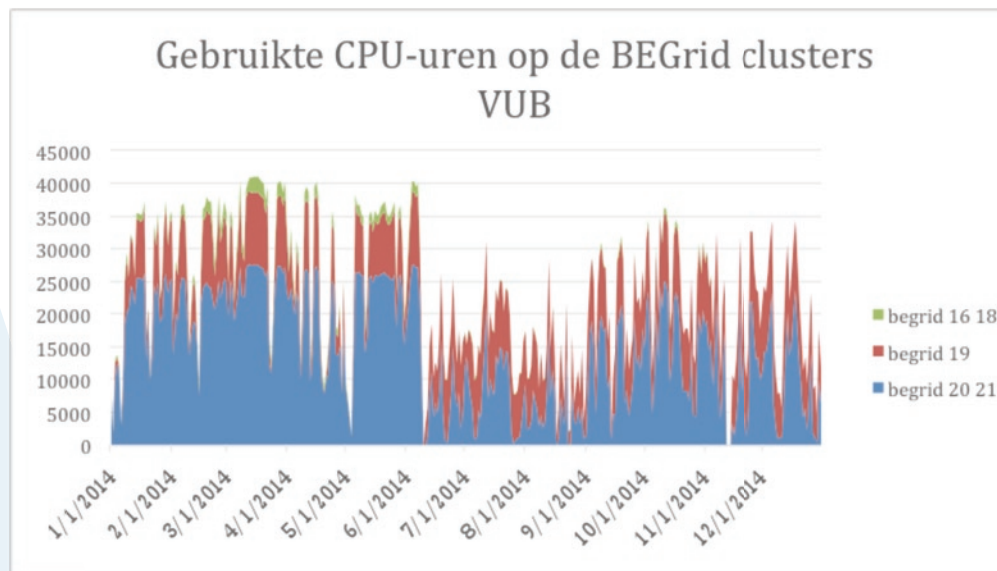
Gebruik van de infrastructuur van de Universiteit Antwerpen

Bovenstaande afbeelding geeft het cumulatieve gebruik in 2014 weer van de clusters Turing en Hopper aan de Universiteit Antwerpen. De cluster Hopper is, na een lange pilotperiode, tegen het einde van het jaar in productie gegaan. Dit kwam enerzijds door aanpassingen aan de computerzaal waarin beide clusters zich bevinden en anderzijds door de integratie met de cluster Turing. Enkele onderbrekingen zijn dan ook merkbaar in de grafiek. Sinds begin 2015 worden beide clusters volledig benut.



Gebruik van de VUB infrastructuur

De verschillende deelclusters geven de opeenvolgende uitbreidingen weer van de HYDRA-cluster aan de VUB. Het aandeel van het rekenen op de Ivybridge deelcluster is hier niet inbegrepen omdat deze in 2014 voorbehouden werd voor een specifiek project dat onder meer heel veel geheugen per node nodig had.



Gebruik van BEGrid cluster aan de VUB

BEgrid 16-18, BEgrid 19 en BEgrid 20-21 zijn de drie delen van de BEgrid cluster aan de VUB. Ze weerspiegelen de verschillende CPU-types die in deze cluster gebruikt worden. De verschillende nodes werden gebruikt volgens de default toekenningswijze van de Maui- scheduler waarbij workernodes steeds in dezelfde orde volgens een gedefinieerde lijst toegekend worden. Ondertussen is een nieuwe workernode toekenningswijze gestart die ook rekening houdt met de CPU-bezetting van de node.

## Projecten

De uitbouw van de grote reken capaciteit voor onderzoek wordt binnen het VSC projectmatig aangepakt.

In deze sectie geven we een overzicht van de projecten waaraan in 2014 gewerkt is. Sommige projecten zijn pilootprojecten. Pilootprojecten worden meestal aan één instelling uitgevoerd omdat, tijdens de verkennende fase, de overhead om aan zo'n project op interuniversitaire basis te werken in verhouding te groot is. Wanneer een pilootproject succesvol blijkt, kan het later wel een interuniversitair project worden.



## Projecten van dichtbij

### **Accountpagina**

Op de accountpagina moeten nieuwe gebruikers hun publieke sleutel opladen en kunnen bestaande gebruikers sleutels en andere kenmerken wijzigen. Deze sleutels zijn nodig om gebruik te kunnen maken van de machines. Deze pagina speelt dan ook een belangrijke rol in het VSC-verhaal. In 2014 werd de pagina en alles wat erbij hoort, volledig herwerkt en dit samen met de onderliggende database. Als gevolg van de nieuwe pagina, zijn ook op de verschillende sites de nodige aanpassingen moeten gebeuren. In 2015 wordt aan dit project verder gewerkt om enkele uitbreidingen te realiseren.

### **Security logging en policies**

Vermits de VSC-infrastructuur nauw met elkaar verbonden is, is het veiligheidsaspect een belangrijk gegeven. Door besprekingen met een industriële gebruiker van de Tier-1 machine, is de oorspronkelijke planning aangepast. Uit die besprekingen zijn immers vele security gerelateerde aspecten naar voren gekomen. De kennis die hieruit voortvloeit, wordt - waar nodig - op andere sites toegepast. Die lessen zijn immers niet alleen nuttig voor de Tier-1 machine, maar ook voor de Tier-2 machines. Dit project blijft ook in 2015 op de agenda staan. Er zal onder meer een inventaris gemaakt worden van alle zogenaamde security assets.

### **Monitoring en reporting: XDMoD, TACC stats en MAM**

Het monitoren van het gebruik van de machines is zeer belangrijk. Zo kunnen problemen met scheduling en suboptimaal gebruik van een machine gedetecteerd worden, alsook het identificeren van bepaalde noden waarmee bij volgende aankopen rekening gehouden kan worden. Daarnaast kunnen de data ook helpen bij het ondersteunen van gebruikers. Hiervoor is in 2014 XDMoD geïnstalleerd. In een eerste fase zijn hierbij data beschikbaar van de Tier-1 machine aan de UGent en de Tier-2 machines aan de KU Leuven en de UAntwerpen. Het programma wordt gebruikt om de gebruiksstatistieken te genereren die in dit jaarverslag zijn opgenomen. In 2015 wordt dit opvolgingssysteem onder andere uitgebreid met data die betrekking hebben op de volledige Tier-2 infrastructuur.

### **Website en marketing**

De VSC-website ([www.vscentrum.be](http://www.vscentrum.be)) bestaat reeds verschillende jaren. Naast het up-to-date houden van de bestaande website met informatie over gebruikersdocumentatie en nieuwe systemen, werd beslist om een volledig nieuwe website te ontwikkelen. Hiervoor werd in 2014 een lastenboek samengesteld. In de loop van 2015 zal de nieuwe website operationeel worden.

**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. Dit laat gebruikers toe op een eenvoudige manier toegang te krijgen tot de verschillende machines aan de Vlaamse universiteiten. In 2014 werden volgende kenmerken uitgewerkt: toolchains (compilers en essentiële bibliotheken om software te kunnen installeren), gemeenschappelijke software stack met toolchains en specifieke commando's, queues, variabelen, node features ... In 2015 wordt onder meer de lijst van gemeenschappelijke software verder uitgebreid. Voor dit project is een up-to-date website zeer belangrijk.

**Teamwork tools**

Een goede samenwerking wordt gekenmerkt door het gebruik van gemeenschappelijke tools. Hiervoor werden in 2014 Redmine en Sharepoint opgezet en wordt github actief gebruikt.

**Training materiaal**

Binnen het VSC worden verschillende opleidingen gegeven. Deze opleidingen staan, enkele uitzonderingen niet te na gesproken, open voor alle VSC-gebruikers. Sommige opleidingen worden op één locatie gegeven, andere op meerdere locaties. Daarom werd er een overzicht gemaakt van het beschikbare trainingsmateriaal en werd er gestart met het samenstellen van gemeenschappelijk materiaal. De eerste documenten die beschikbaar zijn, heten 'Introduction to HPC' en 'An introduction to PerfExpert'.

**Profiling en performantie-analyse**

Veel rekenkracht beschikbaar hebben is nuttig maar daarnaast is de beschikbare rekenkracht efficiënt gebruiken, absoluut noodzakelijk. De nodige tips en tricks worden dan ook aan de gebruikers via enkele seminaries aangereikt. Daarnaast worden aan de gebruikers technieken aangeleerd om de software codes te optimaliseren.

## Pilootprojecten

**Visualisatie**

Gebruikers werken soms met grote datasets die gevisualiseerd moeten worden. Binnen dit project wordt onderzocht welke de mogelijkheden zijn.

**Big data**

Naast het visualiseren van grote hoeveelheden data, zijn er natuurlijk de data zelf. Hoe kunnen we hier zo efficiënt mogelijk mee werken?

**Cloud**

Dit project bekijkt hoe clouddiensten ten goede kunnen komen aan de onderzoekers die omwille van diverse redenen hun rekenwerk niet kunnen uitvoeren op de 'klassieke' Tier-2's.

**Authorisation**

In dit pilootproject wordt onderzocht hoe gebruikers vanuit uiteenlopende infrastructuur gebruik kunnen maken van bijvoorbeeld de storage die gekoppeld is aan de HPC- infrastructuur.

## Gebruikersondersteuning

De gebruikersondersteuning valt uiteen in verschillende componenten:

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

### 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
<b>Tier-2 + grid</b>					
accounts	587	179	11	75	852
software	97	55	30	135	317
overig	649	909	308	221	2087
<b>Tier-1</b>					
accounts		12			12
software		3			3
overig		116	6		122
<b>Totaal</b>	<b>1333</b>	<b>1274</b>	<b>355</b>	<b>431</b>	<b>3393</b>

## 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**

Naast de doorsnee support is de doelstelling niet alleen om de VSC-infrastructuur bekend te maken, maar ook om in te zetten op het onderzoekswerk van groepen die het potentieel van de VSC-infrastructuur nog niet ten volle benutten. In 2014 werd er speciale aandacht besteed aan onderzoeksgroepen in de Scheikunde. In deze discipline is er reeds lang een computationele traditie, maar dan vooral op kleinere computers die vaak door de onderzoeksgroepen zelf werden beheerd.

De VSC-infrastructuur biedt veel meer mogelijkheden: het kan grotere workloads aan en heeft gespecialiseerde partities die lokaal niet beschikbaar zijn. Voor een groep die van een lokale naar de VSC infrastructuur overstapt, is het zeer belangrijk dat er een vertrouwen is in de langetermijnvisie en in de ondersteuning. Het eerste werd ondersteund door de toekenning van de recurrente financiering. Het aanpassen en optimaliseren van codes is immers een arbeidsintensief proces en van deze investering wordt een maximaal rendement verwacht.

Voor de ondersteuning werden sessies georganiseerd met een expert die een scheikundige achtergrond had en over een grote HPC-ervaring beschikte. Gelijktijdig met de sessies werd de nodige software geïnstalleerd en geoptimaliseerd op de clusters van de KU Leuven. Testen en vergelijkingen van reketijden op de thin node cluster toonden al snel het voordeel van de centrale infrastructuur. De groep maakte ook uitgebreid gebruik van de shared memory machine waar veel meer geheugen per core gebruikt kan worden. Hiermee werd reeds rekenwerk uitgevoerd dat vroeger niet mogelijk was.

Bij een andere groep werd een langere consultancy uitgevoerd om de eigen ontwikkelde code verder te optimaliseren. Het doel was de code verder op te schalen zodat deze ook op Tier-1 niveau met hogere parallellisatie een voldoende efficiëntie bereikte. Verschillende scenario's werden uitgevoerd in nauwe samenwerking met de onderzoeker om het beste internode communicatieschema te selecteren.

De basis ondersteuning van de onderzoekers die werken aan de Universiteit Hasselt verloopt via de HPC-helppdesk 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, IMOB en het Centrum voor Milieukunde doen geregeld beroep op ondersteuning om workflows op de HPC-infrastructuur te optimaliseren of om software – zoals bijvoorbeeld IFDM – te optimaliseren of te parallelliseren. Het gebeurt ook dat ze zelf nieuwe applicaties – zoals bijvoorbeeld GrayNorm – ontwikkelen.

Voor nieuwe gebruikers wordt hulp op maat geboden. Deze hulp is in principe binnen een termijn van twee uur productief. Voor bepaalde groepen gebruikers worden ook informatiesessies georganiseerd waarin gespecialiseerde onderwerpen aan bod komen.

### **Universiteit Gent**

In 2014 organiseerde het HPC-UGent team 3 introductiecurssussen 'Introduction to HPC @ UGent' on demand en dit voor specifieke doelgroepen: onderzoeksgroep Industrial management, het laboratorium voor Chemische Technologie (beiden van de Faculteit Ingenieurswetenschappen en Architectuur) en ook voor onderzoekers van het Instituut voor Natuur- en Bosonderzoek (INBO). Het INBO is een Vlaamse wetenschappelijke instelling en maakt gebruik van de HPC-UGent infrastructuur.

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

- Biocatalysis and Enzyme Engineering (faculteit Bio-ingenieurswetenschappen);
- Toegepaste Wiskunde, Informatica en Statistiek (faculteit Wetenschappen);
- Fysica en Sterrenkunde (faculteit Wetenschappen);
- Laboratorium voor Chemische Technologie (faculteit Ingenieurswetenschappen en Architectuur);
- Center for Molecular Modeling (faculteit Wetenschappen & Ingenieurswetenschappen en Architectuur);
- NMR en Structuuranalyse (faculteit Wetenschappen);
- Wiskundige modellering, Statistiek en Bio-informatica (faculteit Bio-ingenieurswetenschappen);
- Wireless en Cable (WiCa), iMinds (faculteit Ingenieurswetenschappen en Architectuur); en
- Department of Medical Protein Research, een departement van het Vlaams Instituut voor Biotechnologie (VIB) dat aan de UGent is gevestigd,

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

- Instituut voor Landbouw- en Visserijonderzoek (ILVO);
- Bekaert NV;
- J&J;
- FEOps NV (een spin-off van de Universiteit Gent);
- Bayer Cropscience.

Behalve de laatste gebruiken al deze organisaties de HPC-UGent infrastructuur. Met deze gebruikersmeetings komen we tegemoet aan vragen die actueel zijn. Ze vormen tegelijkertijd een instrument waarmee we de rekenprojecten van de onderzoekers op de centrale HPC-infrastructuur initiëren en versnellen.

In het kader van het BigData-project werden in een eerste fase specifieke onderzoeksgroepen binnen de Universiteit Gent aangesproken:

- Datamining and Modeling for Biomedicine unit, Inflammation Research Centre (VIB);
- IBCN research group, department of Information Technology (UGent – iMinds);
- Department of Telecommunications and Information Processing (faculteit Ingenieurswetenschappen en Architectuur);
- LT3 Language and Translation Technology Team (faculteit Letteren en Wijsbegeerte);
- Plant Biotechnology and Bioinformatics (faculteit Wetenschappen);
- Plant Systems Biology (VIB) ;
- Flanders Training Network for Methodology and Statistics (FLAMES).

Al deze inspanningen culminereren binnenkort in een gezamenlijke workshop rond BigData.

Er werden ook inspanningen geleverd om de centrale rekeninfrastructuur te promoten. Dit kadert binnen een beweging om de bestaande decentrale en verouderde computerclusters af te bouwen. Zo werd er in 2014 een oude cluster buiten gebruik gesteld in het Instituut Nucleaire Wetenschappen ten voordele van de centrale HPC-UGent infrastructuur (IceCube onderzoeksgroep). Er werd ook een gebruikersmeeting met de onderzoeksgroep Flow, Heat and Combustion Mechanics (floheacom) georganiseerd. Deze groep beschikt thans over een eigen cluster, die vooral voor interactieve visualisatie van stromingsprocessen wordt ingezet. Dit is een feature waaraan de centrale infrastructuur duidelijk (nog) niet tegemoet kan komen.

Tenslotte werd er op 25 maart 2014 ook een gebruikersdag georganiseerd voor en door de gebruikers van de centrale HPC-UGent rekeninfrastructuur. Op deze dag werden de investeringsplannen toegelicht. Er waren enkele gebruikers die hun onderzoek voorstelden en er was ruimschoots gelegenheid om feedback te geven.

### Universiteit Antwerpen

In 2014 werden er onderzoekers uit onder andere Taalkunde, Bio-ingenieurswetenschappen, Transporteconomie, Biologie en Infectieziekten op weg gezet richting HPC. Er waren ook onderzoekers verbonden aan externe onderzoeksinstituten, die gebruik zijn gaan maken van de infrastructuur.

Enkele voorbeelden van het optimaliseren van code:

- Revisie van Fortran-code waarbij de omzetting van het  $O(N^2)$  algoritme naar  $O(N)$  voor sommige veel voorkomende problemen een grote snelheidswinst opgeleverd heeft.
- Doorlichting van een gesloten wetenschappelijke Fortran-code die gebruikt wordt aan een onderzoeksinstelling.

- De performantieproblemen zijn geïdentificeerd en er werd een voorstel voor een efficiënte oplossing geformuleerd.
- Identificatie van performantieproblemen in een onderzoekscode om de verspreiding van ziektes tegen te gaan.
  - Revisie van een Fortran-code voor de berekening van bulk ferromagnetische eigenschappen bij eindige temperaturen. De automatische keuze van de optimale initiële schatting werd toegevoegd. Constructies die vectorisatie beletten, werden verwijderd als ook inefficiënte constructies met dynamische arrays. Dit alles heeft een snelheidswinst van een factor 40 opgeleverd.
  - Revisie van C-codes voor kwantum transport van ladingsdragers. Dit werk is nog in uitvoering.
  - Ondersteuning van een DocPro en IOF-SBO project dat plaatsvindt aan de Universiteit Antwerpen.

De gebruikersgroep komt twee keer per jaar samen en bestaat uit afgevaardigden van 12 groepen en richtingen.

#### **Vrije Universiteit Brussel**

De HPC-gebruikersgroep van de Vrije Universiteit Brussel werd samengesteld uit afgevaardigden van alle faculteiten. Deze groep komt ongeveer om de drie maanden samen. Overleg in deze groep over het gebruik van Tier-1 en Tier-2 infrastructuur resulteerde in twee gerichte acties: het verlenen van hulp aan de moleculaire biologie vakgroep om over te stappen naar Tier-1 en het inrichten van een opleiding en het verlenen van hulp aan vakgroepen in de humane wetenschappen zodat zij Tier-2 kunnen gebruiken.

Deze gerichte acties leverden een goed resultaat op. De moleculaire biologie vakgroep kreeg een preparatory access project. De hieruit verkregen informatie werd gebruikt om een aanvraag voor rektijd op de Tier-1 in te dienen die werd goedgekeurd. Onderzoekers uit de humane wetenschappen namen deel aan de cursussen 'Introduction to Linux' en 'Introduction to HPC'. Er volgde ook een aantal vragen voor Tier-2 gebruik. Onderzoekers uit de medische faculteit bereiden een gridgebruik voor in het kader van een specifiek project.



## Personeel

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

## Subsidiëring

Eenzijds 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
<b>Totaal</b>	15

Instelling	Aantal gesubsidieerde VTE voor Tier-1 exploitatie
UGent	2

## Effectieve personeelsinzet

Om de verschillende Tier-2 en Tier-1 opstellingen te exploiteren, te onderhouden en om de gebruikers te ondersteunen, is enerzijds meer mankracht nodig dan binnen de subsidiëring voorzien wordt. Anderzijds is een waaier aan expertises nodig die niet binnen één beperkt team opgebouwd kunnen worden. Om hieraan tegemoet te komen kunnen de HPC-technici en ondersteuners beroep doen op andere experts die werken in de ICT-diensten van de verschillende universiteiten. De universiteiten zetten samen 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 Herculesstichting komen, slechts voor een voorgeschreven en geplafonneerde 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	10,60	16,00
UAntwerpen	4,35	8,00
VUB	3,75	8,00
UHasselt	1,00	1,00
KU Leuven	8,00	17,00
Totaal	27,70	50,00

## Profielen

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

**Infrastructuurbeheerders**

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

**Systeembeheerders**

Deze personen staan in voor het installeren en beheren van de basissoftware op de HPC machines. Dit gaat van het operating systeem tot de scheduling software. Zij staan in voor de dagelijkse monitoring van HPC-systemen. Zij ontwikkelen software voor het efficiënt beheren van de HPC-systemen. Ze werken mee aan de aankoopdossiers rond de architectuur van de HPC-machine en de 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 de 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 eindverantwoordelijkheid in aankoopdossiers.

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

	Infrastructuur-beheer	Systeem-beheer	Basis gebruikers-ondersteuning	Wetenschappelijke of gevorderde ondersteuning	Management
UGent	13%	40%	19%	20%	8%
UAntwerpen	2%	24%	28%	29%	17%
VUB	16%	33%	32%	5%	13%
UHasselt	0%	0%	45%	50%	5%
KU Leuven	15%	28%	30%	15%	13%

## Gevorderde ondersteuning

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

<b>Computational Chemistry</b>	3 personen met wetenschappelijke ervaring in dit domein
<b>Physics</b>	4 personen met wetenschappelijke ervaring in dit domein
<b>Engineering</b>	1 persoon met wetenschappelijke ervaring in dit domein
<b>Mathematics (Numerical Methods)</b>	3 personen met wetenschappelijke ervaring in dit domein
<b>Computer science</b>	5 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%
Geert Borstlap	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%
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	55%
Martijn Oldenhof	KU Leuven	100%
Frank Van Puyvelde	KU Leuven	60%
Leen van Rentergem	KU Leuven	20%
Kim Paulissen	KU Leuven	10%
Jo Vanvoorden	KU Leuven	35%
Jo Vandeginste	KU Leuven	100%
Tom Leuse	KU Leuven	65%
Herman Moons	KU Leuven	10%
Rudy Rys	KU Leuven	20%
Tom Vanmierlo	KU Leuven	80%
Sofie Pieraerd	KU Leuven	10%
Kurt Lust	KU Leuven	25%
Philip Brusten	KU Leuven	10%
Tom Vanhout	KU Leuven	10%

## REKENEN OP DE VSC-CLUSTER

### Werkwijze voor het toekennen van rekestijd op Tier-1 en de Tier-2

**Voor de Tier-1 supercomputer** was 2013 een opstartjaar waarin de laatste technische problemen opgelost werden en de staf ervaring opdeed met de exploitatie van de eerste Vlaamse supercomputer. Tijdens deze experimentele fase werden enkele grote gebruikers uitgenodigd om toepassingen op Tier-1 te laten uitvoeren.

Vervolgens werd een voorlopig reglement voor het aanvragen van rekestijd opgesteld en bij de universiteiten bekendgemaakt. Onderzoekers werden uitgenodigd om voorstellen in te dienen waarvoor twee beoordelingsmomenten voorzien werden: 30 juni en 30 september 2013. Binnen het voorlopig reglement werd de rekestijd gratis beschikbaar gesteld.

Aan de hand van de resultaten van deze experimentele oproepen keurde de Raad van Bestuur op 17 oktober 2013 het reglement betreffende de aanvragen voor het gebruik van de Vlaamse supercomputer goed. Tevens werden de data voor 2014 vastgelegd waarop de aanvragen beoordeeld werden: 3 maart 2014, 2 juni 2014 en 29 september 2014.

Voor het beoordelen van deze aanvragen stelde de Raad van Bestuur op 12 maart 2014 een Evaluatiecommissie in. Naast de HPC-directeur zetelen hierin vier buitenlandse deskundigen:

- Mr. Walter Lioen (SURFsara, Nederland);
- Dr. Derek Groen (Molecular Biology, UCL, UK);
- Dr. Sadaf Alam (CSCS, Switzerland);
- Dr. Nicole Audiffren (CINES, France).

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



De Herculesstichting stelt de promotoren in kennis van de beslissing van de Evaluatiecommissie. De Universiteit Gent die instaat voor de technische exploitatie van Tier-1, verleent de promotoren van de goedgekeurde aanvragen toegang tot de supercomputer en houdt hen op de hoogte over het gebruik van de toegekende rekentijd. Maandelijks bereidt de Universiteit Gent een overzicht voor waarin de gebruikte rekentijd gespecificeerd wordt als ook de opvolging die aan de uitvoering van de goedgekeurde aanvragen gegeven wordt. Dit rapport wordt besproken door de Werkgroep HPC en de Raad van Bestuur. Deze informatie wordt eveneens overgemaakt aan de leden van de Evaluatiecommissie. Indien er zich problemen stellen, wordt er zo snel mogelijk naar een oplossing gezocht.

Daarnaast heeft elke universiteit een eigen procedure voor het toekennen van rekentijd op de Tier-2 infrastructuur. Onderzoekers aan de **VUB** die de Tier-2 infrastructuur wensen te gebruiken dienen een aanvraag in voor het verkrijgen van toegang bij het rekencentrum tot de HYDRA cluster en bij de verantwoordelijke van de gridcluster voor het gebruik van deze laatste. Aan het gebruik van de Tier-2 infrastructuur zijn voor de onderzoeker geen kosten verbonden.

De onderzoekers van de **UAntwerpen en haar associatie** hebben volledig vrije toegang tot de Tier-2 infrastructuur. Tot vorig jaar is aan de promotoren van het HPC project aan de UAntwerpen wel gevraagd om, in de mate van het mogelijke, een substantiële financiële bijdrage aan het project te willen leveren en het zo verder te steunen. Voor het academiejaar 2014-2015 is beslist om, bij wijze van test, iedereen vrij te laten rekenen, dus zonder financiële vergoeding. Dit wordt later geëvalueerd. De UAntwerpen kijkt alvast uit naar een meer uniforme regeling voor het Tier-2 gebruik aan alle instellingen door onderzoekers. Voor externen wordt het schema gevolgd zoals opgesteld door de Herculesstichting en wordt alle rekentijd aangerekend.

HPC rekentijd vergt veel investeringen en hoewel er veel rekenkracht beschikbaar is, is deze ook niet onbeperkt. Een onderzoeker dient dus met de nodige zorg om te springen met de rekentijd. Een duidelijk systeem dat het gebruik van rekentijd beheert en rapporteert, is hierbij een belangrijk hulpmiddel. Op de clusters van **KU Leuven/UHasselt** wordt gewerkt met het credit accounting systeem dat vervat zit in de scheduling software. Dit systeem laat toe om rekentijd toe te kennen aan projecten. De hoofdonderzoeker is beheerder van het project. Hij kan onderzoekers toegang geven tot de rekentijd en het gebruik van de rekentijd ook opvolgen. Bij het uitvoeren van een rekentaak wordt het project aangegeven waarop de credits aangerekend worden.

Het aanvragen van credits voor een bestaand of nieuw project gebeurt via een eenvoudige procedure. Aan KU Leuven wordt een kleine kost doorgerekend voor de rekentijd. 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 gaan van het rekenen op eigen, lokale, minder krachtige infrastructuur naar Tier-2 infrastructuren zo laag mogelijk.



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 prioriteit in de wachtrij.

## Aanrekenen van kosten

In het reglement betreffende de aanvragen voor het gebruik van de Vlaamse supercomputer werd bepaald dat voor het gebruik van Tier-1 een beperkt deel van de kosten aangerekend wordt aan onderzoekers die werkzaam zijn aan universiteiten en Vlaamse publieke kennisinstellingen. Het is immers belangrijk dat onderzoekers zich bewust zijn dat - net zoals bij experimenteel onderzoek - ook aan rekentijd een kost verbonden is.

In 2014 werd het verschuldigd bedrag voor de gebruikte rekentijd aangerekend nadat het geplande werk uitgevoerd was. De Universiteit Gent stelde de nodige verantwoordingsstukken hiervoor ter beschikking. Deze bedragen worden geïnd door de Herculesstichting en zijn bestemd voor het financieren van de HPC-infrastructuur. Industriële gebruikers kunnen ofwel in het kader van een onderzoeksproject dat in samenwerking met een Vlaamse universiteit of kennisinstelling loopt, toegang krijgen tot Tier-1 ofwel kunnen ze rekentijd kopen. De Raad van Bestuur legde hiervoor eveneens de tarieven vast.

## Starting grants

In de loop van 2014 werden de starting grants projecten ingevoerd. Via een eenvoudige aanvraagprocedure kunnen onderzoekers tot 100 nodedagen krijgen om een realistische schatting te maken van de rekentijd die zij nodig hebben zodat ze deze schatting later kunnen gebruiken bij hun aanvraag voor Tier-1 rekentijd. Deze aanvragen kunnen steeds worden ingediend en zijn kostenloos. In 2014 werden 5 starting grants projecten toegekend.

Kirsten Govaerts	UAntwerpen	Computational Chemistry	14/07/2014
Nasrin Sarmadian	UAntwerpen	Computational Chemistry	14/07/2014
Daryna Smyrnova	KULeuven	Computational Chemistry	14/07/2014
Sam Roelants	UAntwerpen	Computational Chemistry	01/09/2014
Mathias Demuzere	KULeuven	Environmental Modeling	04/10/2014

## Goedgekeurde aanvragen

Naast de starting grants projecten kunnen onderzoekers ook een grotere hoeveelheid rekentijd aanvragen op Tier-1. Zo'n aanvraag gaat tenminste over het equivalent van 500 nodedagen en ten hoogste over het equivalent van 5.000 nodedagen met 250 GiB schijfopslag.

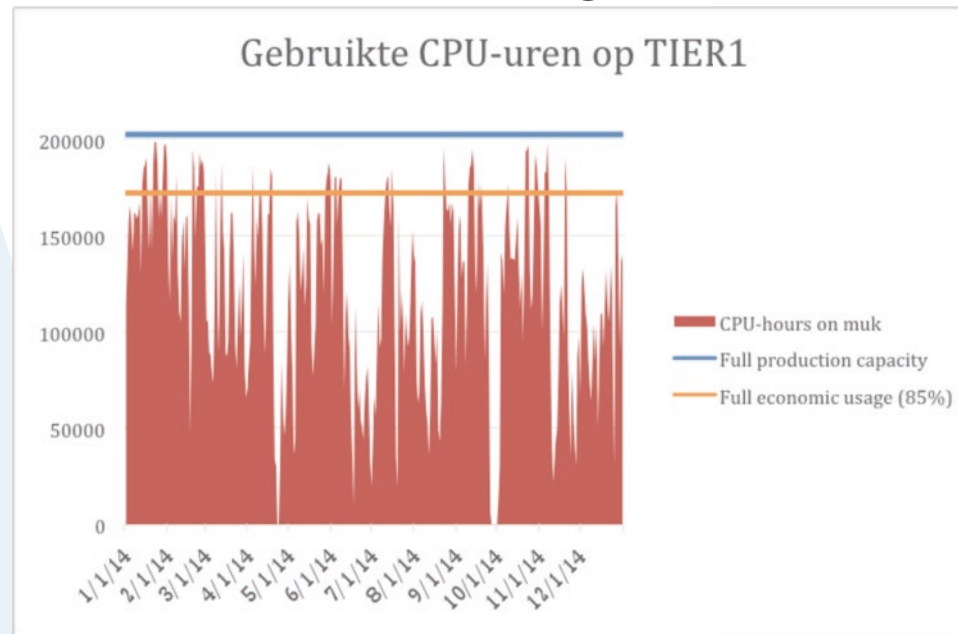
Hieronder geven we per periode een overzicht van de goedgekeurde aanvragen in 2014.

3 MAART 2014					
Applicant	Onthaalin- stelling	Titel	Science Field	Toegekende rekentijd (nodedagen)	Toegekende storage SCRATCH (TB)
Rony Keppens	KU Leuven	Plasma-astrophysical challenges (continued)	Environmental Modeling	3500	1,00
Bart Partoens	UAntwerpen	First-principles study of defect complexes in ZnO	Computational Chemistry	3000	0,25
Bart Partoens	UAntwerpen	Generating ab initio data for the development of a Cr2O3+C, H, N force field	Computational Chemistry	3000	0,25
Bart Partoens	UAntwerpen	Structural and electronic properties of the homologous Sn-O series	Computational Chemistry	1352	0,25
Emmanuel Chané	KU Leuven	Jupiter's Magnetosphere: on the importance of the dipole tilt	Environmental Modeling	3500	1,00
Carl Schietekat	UGent	Computational Fluid Dynamics based design of steam cracking units	Mechanical Engineering	500	1,00
Kristine Pierloot	KU Leuven	Computational Study of the Nonlinear Optical Properties of Coordination Compounds	Computational Chemistry	750	5,00
Piet Termonia	UGent	UGent Euro-CORDEX climate runs	Environmental Modeling	10000	1,00

2 JUNI 2014					
Applicant	Onthaalin- stelling	Titel	Science Field	Toegekende rekening (nodedagen)	Toegekende storage SCRATCH (TB)
Vanpoucke Danny Eric Paul	UGent	The electronic and magnetic structure of Breathing Metal-Organic Frameworks	Computational Chemistry	4725	0,25
Lejaeghere Kurt	UGent	High-throughput screening of ternary tungsten alloys with DFT	Computational Chemistry	4000	0,18
Meyers Johan	KU Leuven	Simulation of large wind-farms in the atmospheric boundary layer	Environmental Modeling	5000	1,10
Carone Ludmila, Rony Keppens, Leen Decin	KU Leuven	Weather on strange new worlds	Environmental Modeling	1400	0,15
Rolando Saniz	UAntwerpen	Van der Waals interaction between an electron-positron pair and the surface of topological insulators	Computational Chemistry	3150	0,04
Rolando Saniz	UAntwerpen	Grain boundaries in thin films for photovoltaic applications: Si, CuInSe <sub>2</sub> , and CuGaSe <sub>2</sub>	Computational Chemistry	4247	0,03
FosTier-Jan	UGent	Electromagnetic simulations of realistic structures involving billions of unknowns	Mechanical Engineering	3584	10,00
Partoens Bart	UAntwerpen	The effect of Bi and Sb bilayers on topological insulators Bi <sub>2</sub> Se <sub>3</sub> , Bi <sub>2</sub> Te <sub>3</sub> and Sb <sub>2</sub> Te <sub>3</sub>	Computational Chemistry	3780	0,25
Bart Partoens, Erik Neyts	UAntwerpen	Density functional calculations on Fe <sub>2</sub> O <sub>3</sub> : towards force field potential development and molecule adsorption.	Computational Chemistry	4712	0,20
Partoens Bart	UAntwerpen	Electronic structure, Fermi level position and defect study in ZnO using first-principles calculations	Computational Chemistry	4032	0,20
De Wispelaere Kristof	UGent	Dynamical kinetic study of zeolite-catalyzed reactions	Computational Chemistry	4371	2,00
Wouters Sebastian	UGent	Quantum contributions to the polarizability	Computational Chemistry	1568	0,30
Hajek Julianna	UGent	Modeling aldol condensations in metal-organic frameworks with hybrid functional calculations	Computational Chemistry	2304	0,50
Ghysels An	UGent	Diffusion of hydrocarbons in porous frameworks	Computational Chemistry	4320	0,72

29 SEPTEMBER 2014					
Applicant	Onthaalinstelling	Titel	Science Field	Toegekende rekestijd (nodedagen)	Toegekende storage SCRATCH (TB)
Karen Hemelsoet	UGent	Vibrational spectra of Mo-exchanged zeolite materials	Computational Chemistry	3660	0,93
Michael Sluydts	UGent	High-throughput determination of vacancy trapping enthalpies for the improvement of electronic device production	Computational Chemistry	4420	1,00
Jeroen Van der Mynsbrugge	UGent	Exploring the kinetics and selectivity of butene cracking using molecular dynamics simulations	Computational Chemistry	4864	1,00
Dietmar Hertsen	UGent	Dynamics of poly(2-oxazoline)s	Computational Chemistry	2900	1,00
Bart Partoens	UAntwerpen	Quantification of target surfaces	Computational Chemistry	4320	0,20
Dirk Lamoen	UAntwerpen	Studying intrinsic conductivity in p-type TCOs using first-principles calculations	Computational Chemistry	3090	0,20
Bart Partoens, Erik Neyts	UAntwerpen	Force field potential development and molecule adsorption on Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub> : A density functional study	Computational Chemistry	4093	0,20
Bart Partoens	UAntwerpen	Different stacking sequences of the topological insulators Bi <sub>2</sub> Se <sub>3</sub> , Bi <sub>2</sub> Te <sub>3</sub> and Sb <sub>2</sub> Te <sub>3</sub>	Computational Chemistry	3456	0,25
Rolando Saniz	UAntwerpen	Positron work function of metals and insulators	Computational Chemistry	1800	0,04
Johan Meyers	KU Leuven	Simulation and optimization of wind-farm atmospheric boundary layer interactions	Environmental Modeling	5000	20,60
Hendrik Wouters, Matthias Demuzere	KU Leuven	How does urbanisation influence precipitation characteristics? A case-study for Belgium and Singapore.	Environmental Modeling	1990	1,00
Nikolaos Stergiannis	VUB	Advanced Computational Fluid Dynamics (CFD) Simulations of the MEXICO Experiment Wind Turbine Rotor using Large Eddy Simulation (LES)	Environmental Modeling	1000	1,00
Matthias Vandichel	UGent	Structural transformations during dehydroxylation reactions of UiO-66 type metal-organic frameworks	Computational Chemistry	4720	2,14

## Grafieken over het gebruik van Tier-1

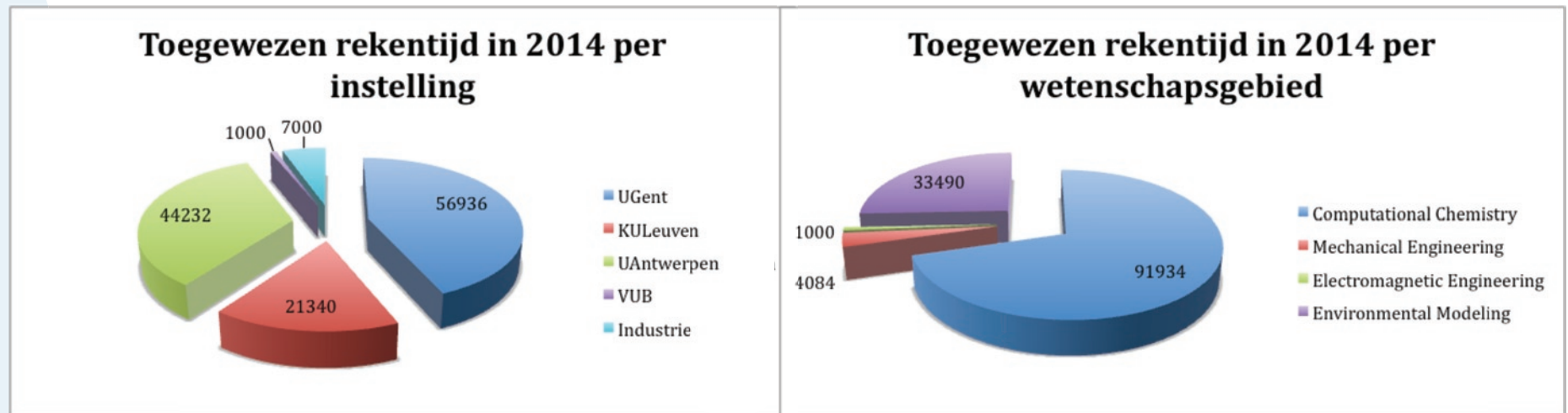


Gebruik van Tier-1 cluster (muk), geïnstalleerd aan de Universiteit Gent

Bovenstaande grafiek biedt een algemeen overzicht van het historische Tier-1 gebruik in 2014. 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 reken-inspanningen van de gebruikers. Juli en augustus zijn doorgaans rustige maanden, maar buiten die periode wordt vaak het niveau van 85% bereikt. De wachttijd voor rekentaken is doorgaans zeer gering tot nihil. Behalve aan het einde van een allocatieperiode wanneer gebruikers vaak last-minute rekentaken uitvoeren binnen de nog beschikbare rekentijd van hun project.

De zichtbare dip in gebruikte CPU-uren in april 2014 is het gevolg van een korte maintenance window. Tijdens die periode werd de machine volledig uitgeschakeld. In oktober werd gedurende vier volledige dagen een meer ingrijpend onderhoud uitgevoerd.



Verdeling van toegewezen Tier-1 rekentijd in 2014 over de instellingen  
Uitgedrukt in nodedagen

Verdeling van toegewezen Tier-1 rekentijd in 2014 over de verschillende wetenschapsdomeinen  
Uitgedrukt in nodedagen

De 2 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 2014 toegekend werd. Er werden niet alleen nodedagen aan academische allocaties toegekend. Ook 7.000 nodedagen werden toegewezen aan twee industriële gebruikers van de Tier-1 infrastructuur.

Toepassingsgebieden situeren zich voornamelijk in de computationele chemie (met terugkerende softwarepakketten Gaussian, VASP, CP2K) en environmental modeling (met een breed scala aan software zoals OpenFOAM, MPI-AMRVAC, ALARO, MITgcm, SP-Wind, COSMO-clm).

# OUTREACH NAAR VLAAMSE BEDRIJVEN

## Industrial Board

In het HPC-decreet voorzag de Vlaamse Regering in de oprichting van een Industrial Board als adviesraad voor de Herculesstichting en het VSC. 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 organisatie van de VSC Industry Day in Technopolis op 27 januari 2015 waren hiervan een rechtstreeks gevolg.

## Dienstverlening aan bedrijven

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

### **Consultancy**

De VSC experts analyseren de specifieke noden van het bedrijf en gaan na hoe High Performance Computing toegevoegde waarde voor dit bedrijf kan bieden. Ze gaan vooral na hoe het VSC kan helpen bij het optimaliseren van targets en het reduceren van kosten tijdens de ontwikkeling en productie. Het VSC biedt een gratis intake interview om na te gaan welke voordelen HPC kan bieden voor het bedrijf en welke diensten in het VSC-netwerk best bij die noden aansluiten.

### Onderzoekssamenwerking

Het VSC fungeert als HPG-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 in contact brengen met een geschikte top-level onderzoekspartner in het Vlaamse academische landschap en als bemiddelaar fungeren.

### Training

Het VSC organiseert op regelmatige basis opleidingen 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 gebruiksgelateerde vragen op te lossen en de gebruikers bij te staan bij de installatie van specifieke software.

Consultancy

Onderzoekssamenwerking



Dienstverlening  
aan bedrijven

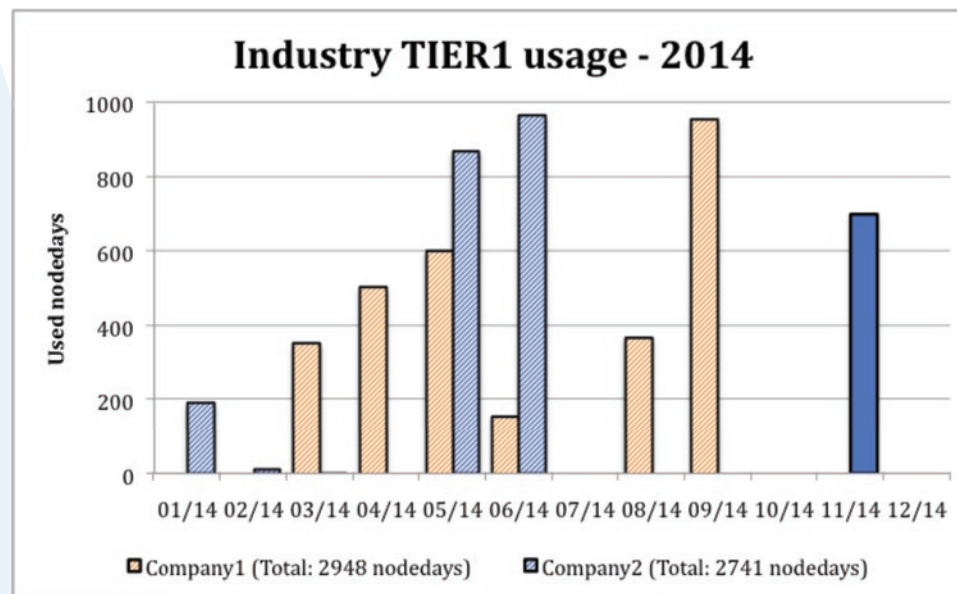
Rekentijd

Training



## Gebruik van Tier-1 door bedrijven

Na de goedkeuring van het HPC decreet in 2013 werd grotere nadruk gelegd op contacten met bedrijven. In 2014 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.



De bovenstaande grafiek biedt een (geanoniseerd) zicht op de gebruikte rekestijd doorheen het jaar. De gearceerde balkjes representeren het pilootgebruik, waarbij het betrokken bedrijf tegen een zeer voordelig tarief gebruik kon maken van Tier-1. De wederdienst hiervoor bestond onder andere uit het doorlichten voor het VSC van de juridische aspecten, de gangbare procedures en de betrokken veiligheidsprotocols van Tier-1. Vanaf november 2014 is dit gunsttarief niet langer van toepassing voor dit bedrijf, en wordt de volledige kostprijs aangerekend.

## Bekendmaking naar bedrijven en andere kennisinstellingen toe

Verscheidene bedrijven en andere Vlaamse kennisinstellingen werden in 2014 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 gebruikersbijeenkomsten 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.

Trainingen en kick-start events:

- SCK-CEN, VSC infosessies on-site, 27/2/2014 (UAntwerpen)
- J&J (gebruiker van de Tier-1 infrastructuur), kick-start event on-site, 4/3/2014 (UGent)
- IMEC, HPC Tips and Tricks sessie on-site, 20/3/2014 (UAntwerpen)
- SCK-CEN, training, 7/4/2014 (UAntwerpen, KU Leuven, UHasselt)
- ITG, training, 28/4/2014 (UAntwerpen)
- Instituut voor Natuur- en Bosonderzoek (INBO, gebruiker van de HPC-UGent infrastructuur), Introductie tot HPC kickstart event, 15/5/2014 (UGent)

Gebruikersbijeenkomsten:

- SCK-CEN, 28/1/2014 (UAntwerpen);
- Instituut voor Landbouw- en Visserijonderzoek (ILVO, gebruiker van de HPC-UGent infrastructuur), 14/2/2014 (UGent);
- VITO, 7/2/2014 (UAntwerpen);
- Bekaert NV (gebruiker van de HPC-UGent infrastructuur), 12/3/2014 (UGent);
- Bayer Cropscience, 14/5/2014 (UGent);
- J&J (gebruiker van de Tier-1 infrastructuur), 20/3/2014, 7/7/2014, 22/8/2014, 17/12/2014 (UGent);
- FEOps NV (gebruiker van de HPC-UGent infrastructuur), 18/3/2014 (UGent);
- Waterbouwkundig labo (gebruiker van de KU Leuven Tier-2 infrastructuur), verscheidene contactnames doorheen 2014 (UAntwerpen, KU Leuven, UGent).

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

- VSC-gebruikersdag (16/01/2014), met aanwezigheid van en presentaties door een beperkt aantal Vlaamse bedrijven;
- Het VSC contacteerde de organisatoren van de Vlaamse Programmeerwedstrijd om op te treden als één van de sponsors van de wedstrijd 2015. De doelstelling is het VSC meer naambekendheid te geven bij (potentiële) studenten wetenschappen.

**#VPWedstrijd**

Woensdag 25 februari 2015, van 14 tot 19 uur  
@ Campus De Nayer, Sint-Katelijne-Waver

- Voor **leerlingen, studenten** en **afgestudeerden** in teams van 3 personen
- Programmeer in C, C#, C++, Java, Python, Javascript (node.js), Pascal, PHP, Perl, Prolog, Ruby, Scala, Scheme of Visual Basic
- Prijzen voor de beste teams in elke categorie
- Inschrijven voor **15 februari 2015** via <http://www.vlaamseprogrammeerwedstrijd.be>
- Deelname is **gratis**

Consultancy en onderzoekssamenwerkingen:

- SCK-CEN, doorlichting door het VSC van een gesloten wetenschappelijke Fortran-code, identificatie van performantieproblemen en voorstel tot resolutie (UAntwerpen);
- Samenwerking tussen Intergewestelijke Cel voor het Leefmilieu (IRCEL, gebruiker van de KU Leuven Tier-2 infrastructuur), Centrum voor Milieukunde (Universiteit Hasselt) en het VITO, gedeeld gebruik van data in verband met luchtvervuiling berekend met behulp van IFDM software, overeenkomst voor de optimalisatie en parallelisatie van IFDM-software (UHasselt).

## 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 help desk worden gesteld. Hierdoor wordt het onpersoonlijke en anonieme karakter dat eigen is aan e-mail verkeer, weggenomen.

Om de sessies op het **intermediate** niveau te volgen, wordt als vereiste voorkennis gevraagd dat men de **introductory** cursussen gevolgd heeft. Deze sessies zijn dan ook meer specifiek in de onderwerpen die ze behandelen. De meerderheid van deze cursussen zijn bedoeld voor gebruikers die zelf software ontwikkelen, hetzij voor rekenintensieve toepassingen, hetzij voor pre- en postprocessing van data. Vermits deze opleidingen meer gespecialiseerd en intensiever zijn dan de **introductory** opleidingen, worden ze niet op elke VSC-site gegeven. Gebruikers worden dan ook 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. Gerichtte 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 2014

Hieronder wordt per maand een overzicht gegeven van het opleidingsaanbod:

### Januari

- HPC TNT 1: tips & tricks for improving your code, 30 januari, 2 uur, Universiteit Antwerpen  
niveau: intermediate
- Introductie tot HPC, 28 januari, 6 uur, Universiteit Gent  
niveau: introductory
- Python for data processing (part I & II), 28 & 30 januari, 8 uur, KU Leuven/Universiteit Hasselt  
niveau: intermediate
- Basic HPC training (voor Medical imaging onderzoekers), 31 januari, 8 uur, Universiteit Gent  
niveau: introductory
- Python introduction for biologists, januari-maart, 20 uur, Universiteit Hasselt  
niveau: introductory

### Februari

- Introduction to HPC (for IMOB researchers), 7 februari 3 uur, Universiteit Hasselt  
niveau: introductory
- Python for data processing (part I & II), 10 & 12 februari, 8 uur, KU Leuven/Universiteit Hasselt  
niveau: intermediate
- Introduction to Turing/HPC@UA, 19 februari, 3 uur, Universiteit Antwerpen  
niveau: introductory
- Python for data processing (part III & IV), 25 & 27 februari, 8 uur, KU Leuven/Universiteit Hasselt  
niveau: intermediate
- Xeon Phi introduction day, 26 februari, 5 uur  
organisatie: VSC, Intel, HP  
niveau: specialist

### Maart

- Python for data processing (part III & IV), 10 & 12 maart, 8 uur, KU Leuven/Universiteit Hasselt  
niveau: intermediate

- Thinking info session, 12, 19 & 26 maart, 2 uur, KU Leuven  
niveau: introductory
- Introduction to Linux, 10, 17 & 18 maart, 5 uur, Universiteit Antwerpen  
niveau: introductory
- HPC tips and tricks, 20 maart, 3 uur, Universiteit Antwerpen  
plaats: IMEC, Leuven  
niveau: intermediate

#### **April**

- Introduction to HPC (for SCK-GEN researchers), 7 april, 3 uur, Universiteit Antwerpen plaats: SCK-GEN  
niveau: introductory
- Introduction to multithreading and OpenMP, 14-15 april, 14 uur  
trainer: dr. Reinhold Bader (LRZ, Garching, Germany)  
organisatie: VSC, doctoral schools  
niveau: intermediate
- Performance tuning of OpenMP programs, 16 april, 7 uur, VSC  
trainer: dr. Reinhold Bader (LRZ, Garching, Germany)  
organisatie: VSC, doctoral schools  
niveau: advanced
- Message Passing Interface (MPI), 22 april, 7 uur, VSC  
organisatie: VSC, doctoral schools  
niveau: intermediate
- Thinking info session, 23 & 30 april, 2 uur, KU Leuven  
niveau: introductory
- Thinking info session, 24 april, 2 uur, Universiteit Hasselt  
niveau: introductory
- HPC @ UGent – an overview (outreach voor leerlingen Sint-Vincentius Deinze), 25 april, 3 uur, Universiteit Gent  
niveau: introductory
- Introduction to HPC (for BIOMINA researchers), 24 april, 3 uur, Universiteit Antwerpen  
niveau: introductory
- Introduction to HPC (for ITG researchers), 28 april, 3 uur, Universiteit Antwerpen  
plaats: ITG  
niveau: introductory

### Mei

- Performance optimization training + labo trainer: dr. Leonardo Fialho (TACC, Austin, TX, USA)  
5 & 6 mei, 14 uur, Universiteit Antwerpen  
7 & 8 mei, 14 uur, Universiteit Gent  
12 & 13 mei, 14 uur, Vrije Universiteit Brussel  
14 & 15 mei, 14 uur, KU Leuven/Universiteit Hasselt  
niveau: intermediate
- Guest lecture on HPC (voor HOWest onderzoekers), 14 mei, 4 uur, Universiteit Gent  
niveau: introductory
- Introductie tot HPC (voor onderzoekers van Instituut voor Natuur- en Bosonderzoek INBO), 15 mei, 6 uur, Universiteit Gent  
niveau: introductory
- Tier--1 project proposal info session, 16 mei, 1 uur, Universiteit Gent
- Introductie tot HPC (voor Industrial Management onderzoekers), 19 mei, 6 uur, Universiteit Gent  
niveau: introductory
- Introductie tot HPC, 20 mei, 6 uur, Universiteit Gent  
niveau: introductory
- Getting started with high-performance computing, 26-28 mei, 2-4 juni, 36 uur, Universiteit Gent  
niveau: introductory

### Juni

- Talk on Imod, 12 juni, 2 uur, Universiteit Gent  
trainer: dr. Robert McLay (TACC, Austin, TX, USA)  
niveau: introductory
- Testing your software, 13 juni, 2 uur, Universiteit Gent  
trainer: dr. Robert McLay (TACC, Austin, TX, USA)  
niveau: introductory

### September

- Tier--1 project proposal info session, 11 september, 1 uur, KU Leuven
- Introductie tot HPC, 22 september, 6 uur, Universiteit Gent  
niveau: introductory
- Linux introduction, 30 september, 7 uur, KU Leuven/Universiteit Hasselt  
niveau: introductory



## Oktober

- GASPI tutorial, 1 oktober, 7 uur  
organisatie: ExaScience Life Lab, VSC, imec academy  
trainer: dr. Christian Simmendinger (T-Systems Solutions for Research, GmbH)  
niveau: specialist
- Lunchbox session NX, 2 oktober, 2 uur, KU Leuven/Universiteit Hasselt  
niveau: introductory
- HPC @ UGent – an overview (voor Zeus werkgroep informatica UGent), 2 oktober, 4 uur, Universiteit Gent  
niveau: introductory
- HPC introduction, 7 oktober, 7 uur, KU Leuven/Universiteit Hasselt  
niveau: introductory
- Matlab, 9, 10, 16, 17, 23 & 24 oktober, 24 uur, Universiteit Leuven  
niveau: introductory
- Linux introduction, 10 oktober, 7 uur, Universiteit Hasselt  
niveau: introductory
- Introduction to HPC, 13 oktober, 3 uur, Universiteit Antwerpen  
niveau: introductory
- Matlab master classes, 13 oktober, 5 uur, KU Leuven  
organizer: MathWorks, VSC  
trainer: dr. Loren Shure (MathWorks)  
niveau: intermediate
- HPC introduction, 17 oktober, 7 uur, Universiteit Hasselt  
niveau: introductory
- Introductie tot HPC (voor onderzoekers van laboratorium Chemische Technologie), 21 oktober, 6 uur, Universiteit Gent  
niveau: introductory
- HPC introduction, 23 oktober, 7 uur, KU Leuven/Universiteit Hasselt  
niveau: introductory
- Specialist course on efficient use of VASP, 23 & 24 oktober, 8 uur, Universiteit Antwerpen  
trainer: dr. Peter Larsson (NSC, Linköping, Sweden)  
niveau: specialist

**November**

- MPI course, 3 & 4 november, 15 uur, VSC  
plaats: KU Leuven  
based on PATC course by dr. Rolf Rabenseifner (HLRS, Stuttgart, Germany)  
niveau: intermediate
- BIG Usergroup – HPC @ KU Leuven, 4 november, 2 uur, KU Leuven  
plaats: KU Leuven  
niveau: introductory
- HPC @ KU Leuven, 6 november, 2 uur, KU Leuven  
plaats: Hogeschool Leuven  
niveau: introductory
- Specialist course on Fortran, 5-7 november, 21 uur  
trainer: dr. Reinhold Bader (LRZ, Garching, Germany)  
organisatie: VSC, doctoral schools  
plaats: Universiteit Gent  
niveau: intermediate
- Info session: version control with subversion/git, 12 november, 3 uur, KU Leuven/Universiteit Hasselt  
niveau: introductory
- OpenMP, 25 november, 7 uur, VSC  
plaats: KU Leuven  
based on PATC course by dr. Rolf Rabenseifner (HLRS, Stuttgart, Germany)  
niveau: intermediate

**December**

- Lunchbox session Cerebro, 4 december, 2 uur, KU Leuven/Universiteit Hasselt  
plaats: KU Leuven/Universiteit Hasselt  
niveau: introductory
- VSC introduction – ESAT Stadius, 17 december, 2 uur  
plaats: KU Leuven  
niveau: introductory
- HPC tips & tricks 2: vectorization approaches to efficient code, 18 december, 2 uur, Universiteit Antwerpen  
niveau: intermediate

## COMMUNICATIE EN EVENTS

### VSC ECHO

VSC Echo is de nieuwsbrief van het VSC en wordt een drietal keer per jaar uitgegeven. In 2014 verscheen de VSC Echo in januari, juni en september. De uitgave van januari 2014, VSC Echo 3, was gefocust op de gebruikersdag. VSC Echo 4 gaf een gedetailleerde beschrijving van de Tier-2 infrastructuren van de Vlaamse universiteiten. Het september nummer, VSC Echo 5, ging in op de opleidingen die beschikbaar zijn via het VSC.

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 2.000 adressen en een papieren versie is beschikbaar bij evenementen, vergaderingen, ...

### Gebruikersdag 2014

In 2014 startte het VSC met een gebruikersdag die plaatsvond op 16 januari in het Internationaal Auditorium in Brussel. De 131 deelnemers luisterden naar de uiteenzetting over het VSC en kregen presentaties over het gebruik van Tier-1. Deze presentaties werden gegeven door drie onderzoekers van Vlaamse universiteiten en door één industriële gebruiker. Er werd ook informatie gegeven over de werking van PRACE. Na elke presentatie was er de gelegenheid om vragen te stellen.



De meningen en verwachtingen van de gebruikers zijn uiterst belangrijk. Daarom werd het grootste gedeelte van de namiddag besteed aan drie discussiesessies met als onderwerpen 'industrie en onderzoek', 'strategie op lange termijn - informatie, documentatie en informatieverbreiding' en 'opleidingen en ondersteuning/integratie van gegevens en rekenen'. Bart De Moor kreeg, als voorzitter van de Herculesstichting, het laatste woord. Daarna volgden aangename en nuttige gesprekken terwijl men van een lekker drankje kon genieten. De ingevulde evaluatieformulieren waren unaniem positief. Er was ook een duidelijke vraag om de discussiesessies nog beter te organiseren.

## INTERNATIONALE SAMENWERKING



### PRACE

Het VSC maakt, via het Belgisch lidmaatschap, deel uit van het PRACE-gebeuren. PRACE biedt de mogelijkheid om Tier-0 rekentijd te gebruiken. Toegang tot Tier-0 rekentijd wordt georganiseerd door middel van oproepen tot het indienen van projectvoorstellen. Deze voorstellen worden beoordeeld volgens 'excellent science' normen. De projecten die het best gerangschikt zijn, krijgen de gevraagde rekentijd. Vlaamse onderzoekers worden attent gemaakt op het bestaan van deze oproepen door middel van berichten op de VSC-website en aankondigingen in de VSC Echo. PRACE biedt ook interessante opleidingen die door het VSC gepromoot worden.



### 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.

### EU project



Het VSC is partner in het SESAME-NET-project dat toegekend werd aan het consortium binnen het Horizon 2020 programma van de EU. SESAME-NET staat voor 'Supercomputing Expertise for SmAll and Medium Enterprise Network' 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. Hierbij wordt vooral aan kmo's gedacht. Het project werd in september 2014 ingediend en werd in januari 2015 goedgekeurd. Het consortium brengt 14 partners samen: HPC-Wales (UK), ICHEC (Ierland), Fraunhofer institute (Duitsland), PSNC (Polen), GRNET (Griekenland), CESA (Spanje), PT Cloud (Portugal), VSC (Tsjechische Republiek), Yotta (Kroatië), UVT (Roemenië), IICT (Bulgarije), RBI (Kroatië), Herculesstichting/VSC (België) en Vilnius University (Litouwen).

## Contacten met andere HPC-centra

Er was contact met HLRS Stuttgart en LRZ, Garching inzake opleidingen. Er vonden verscheidene internationale contacten plaats in het kader van een samenwerking rond EasyBuild\*. De doelstelling van deze software is 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.

- EasyBuild workshop
  - Jülich Supercomputing Center (Duitsland)
  - 21-22 Oktober 2014
  - Georganiseerd door Kenneth Hoste en Jens Timmerman (UGent)
- EasyBuild hackathon
  - Gregor Mendel Institute – Vienna, Austria
  - 18-20 Juni 2014
  - Georganiseerd door Kenneth Hoste en Jens Timmerman (UGent)

\* Voor meer informatie, ga naar <http://hpcugent.github.io/easybuild/>

## Deelname aan congressen

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 een overzicht gegeven

- HPC Knowledge Portal meeting
  - 13-14 Januari 2014
  - Barcelona, Spanje
  - Lecture 'EasyBuild : Getting Scientific Software Installed' gepresenteerd door Jens Timmerman (UGent)
- FOSDEM 2014
  - 1-2 Februari 2014
  - Brussels
  - Devroom 'HPC and computational science' georganiseerd door Kenneth Hoste (UGent) met ondersteuning van hele HPC-UGent team
  - Lightning talk 'EasyBuild: Building Software With Ease' gepresenteerd door Jens Timmerman (UGent)
  - Bijgewoond door Andy Georges, Ewan Higgs, Ewald Pauwels, Stijn De Weirdt (UGent)
- 17th Quattor workshop
  - 17-19 Maart 2014
  - Amsterdam, Nederland
  - Bijgewoond door Kenneth Waegeman, Stijn De Weirdt, Wouter Depypere (UGent)
- HPC PPP InfoDay
  - 9 April 2014
  - Parijs, Frankrijk
  - Bijgewoond door Ewald Pauwels (UGent)
- GPFS User meeting
  - 29 April 2014
  - London, United Kingdom
  - Bijgewoond door Stijn De Weirdt, Kenneth Waegeman (UGent)
- EGI Community Forum 2014,
  - Helsinki, Finland
  - 19-23 Mei 2014
  - Bijgewoond door Stéphane Gérard en Rosette Vandenbroucke (VUB)

- International Supercomputing Conference (ISC14)
  - 22-26 Juni 2014
  - Leipzig, Duitsland
  - Bijgewoond door Jens Timmerman, Ewan Higgs (UGent)
  - Birds-of-a-Feather session 'Getting Scientific Software Installed: Tools & Best Practices' gepresenteerd door Kenneth Hoste (UGent)
- 18th Quattor workshop
  - 30 September – 2 Oktober 2014
  - Madrid, Spanje
  - Bijgewoond door Stijn De Weirdt en Kenneth Waegeman (UGent)
- HEPIX Fall 2014 workshop
  - 13-17 Oktober 2014
  - University of Nebraska – Lincoln, United States
  - Bijgewoond door Alvaro Simon Garcia (UGent)
- Supercomputer conference SC14
  - New Orleans, United States
  - 16-21 November 2014
  - Bijgewoond door Leen Van Rentergem, Ingrid Barcena-Roig, Jo Vanvoorden, Rudy Rys (KU Leuven), Geert Jan Bex (Universiteit Hasselt), Andy Georges en Jens Timmerman (UGent)
- International Workshop on HPC User Support Tools (HUST-14)
  - New Orleans, United States
  - 21 November 2014
  - Deze workshop werd georganiseerd door HPC-UGent in het kader van SC14
  - Co-organisatoren Andy Georges en Jens Timmerman (UGent)
- Belnet Belgian Internet Security Conference
  - 27 November 2014
  - Brussel, België
  - Bijgewoond door Stijn De Weirdt (UGent)
- Opennebula conf – 2014
  - 2-4 December 2014
  - Berlijn, Duitsland
  - Bijgewoond door Alvaro Simon Garcia (UGent)

## SUCCEsverhalen VAN HET VSC

### R&D Department Janssen Pharmaceutica



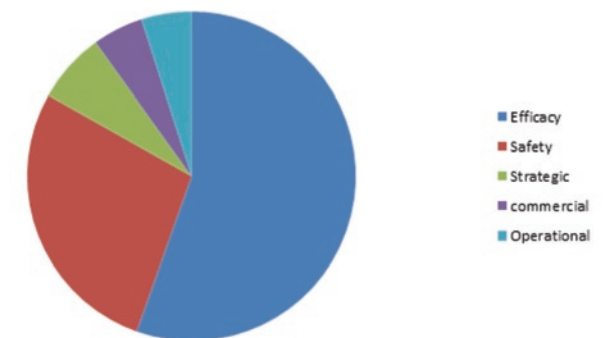
Jörg Wegner, Senior Scientist at Janssen Pharmaceutica, points out the difference in computation requirements when confronted with huge amounts of data: “As in any other scientific environment, our R&D is facing an exponential data growth. It may be easy to count within a file with 10.000 lines, but it is really difficult to do so in a file with 100 million entries. And, typically, tasks in R&D are far more complex.

Computation in itself becomes more critical since most computational tasks do not scale linearly, but many scale in a quadratic, cubic, or even in an exponential way with the growing amount of data. In other words, a doubling in the amount of data does not increase the computation requirements by a factor of 2 but by a factor of 4 (quadratic), 9 (cubic), or 10 and more (exponential). This requires careful analysis and change in the way data is processed by using the expertise of large-scale computing experts.”

At least three supercomputing projects are ongoing at Janssen Pharmaceutica. They are done in collaboration with multiple partners such as the VSC (Flemish Supercomputer Center), IMEC (Interuniversity Microelectronics Center), Intel or other academic partners. The projects cover:

- large-scale next-generation sequencing (NGS) analysis;
- high-content imaging (HCI) analysis;
- large-scale machine learning (ML).

Jörg Wegner: “The progress in sequencing is producing TB amounts of NGS and HCS data. Both will help to get a better understanding of the patients’ biological details and complex biological phenotypic systems. To judge the relevance and impact of these data sets for R&D, large-scale machine learning approaches can be utilized for understanding and supporting novel experimental designs and especially their risk estimations. A simple example is the attrition rate of drugs in the clinic phase II. A situation everyone in the pharma industry is facing.”



Attrition rate clinic II in the pharma industry



“The HPC efforts with the VSC aim to reduce the risks of progressing lead compounds to drugs and patient-disease sequencing data by understanding and analyzing such large data sets. **By utilizing large-scale computations on the data being available and produced by Janssen and all of our partners, we finally hope to reduce the failure rate in the clinic II phase.** We also aim at unraveling new paths for unmet medical needs of patients for whom no treatment options might exist at this point in time.”

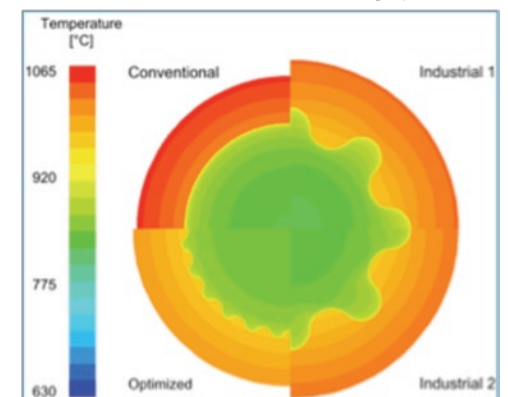
## Laboratorium voor chemische technologie (Universiteit Gent)



Carl Schietekat is a PhD fellow of the Laboratory for Chemical Technology (LCT) at Ghent University (promotors: prof. dr. ir. Guy B. Marin, prof. dr. ir. Kevin M. Van Geem). The research at the LCT is focused on the design of new and the optimization of existing industrial processes in the field of transport fuels, energy carriers and functional materials. Carl's research concentrates on computational fluid dynamics (CFD) simulations of steam cracking reactors.

Steam cracking of hydrocarbons is the predominant commercial process for producing many platform chemicals such as light olefins. These platform chemicals are the building blocks for most polymers and the starting molecules for the production of many additives, solvents and other high-value chemicals. A major factor for the steam cracking process energy efficiency is the formation of a carbonaceous coke layer on the inner wall of the tubular reactors.

Carl Schietekat: “In my research the application of three-dimensional reactor configurations to decrease the coking rate is investigated. The performance of different reactor geometries is evaluated using CFD-simulations accounting for the gas-phase chemistry and coke formation. **The incorporation of detailed chemistry within complex flow simulations requires extremely long computing times, but thanks to parallelization on the VSC Tier-1 infrastructure it is possible to complete the simulations in a timely manner.** A study on finned reactor tubes resulted in an optimal design, denoted SmallFins. As shown in the figure below the metal temperature in the SmallFins reactor is lower than in the conventional bare tube and two industrially applied designs, resulting in the lowest coking rate.”

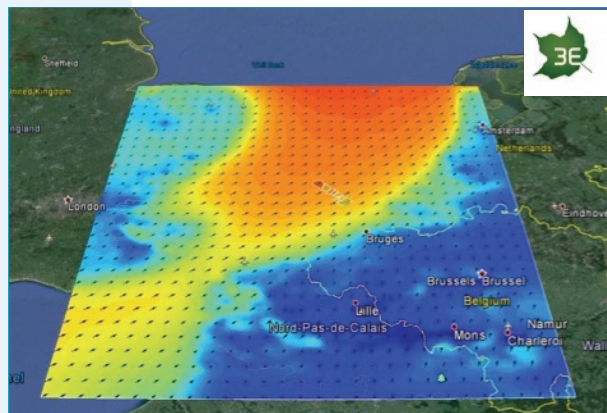


## Windenergiesimulaties bij 3E NV

3E NV is a Belgian renewable energy consultancy firm, delivering advisory services and software solutions for sustainable energy project developments and operations worldwide. Several research projects are going on in which supercomputing plays an indispensable role. One prominent example concerns 3E's wind energy branch.

Rory Donnelly, Program Manager Wind Simulations at 3E, explains: "3E utilizes the mesoscale research and forecasting (WRF) modeling software to simulate atmospheric conditions over areas such as the Belgian onshore and offshore region (see figure below) for a period of several decades. These simulations yield a representation of the long-term wind resource, which we can use in power generation predictions for the benefit of wind park development studies. By assessing the risk profile and viability of wind farms in this way, developers and owners can increase performance and return on their projects, and can attract and inform investors."

"Over the last few years, **3E has been able to rely on the (human) resources of the Flemish Supercomputer Center (VSC)**. This has allowed us to streamline our procedure and to deliver mesoscale assessments in a cost-effective way, both in terms of FTE's and computer time. Access to the vast and reliable HPG-infrastructure of the VSC – first at Ghent University, then on Flanders' own Tier-1 supercomputer – has been an absolute advantage and has helped us considerably to make a difference in a competitive market. The availability and the expertise of the dedicated helpdesk has also been a great asset.



Simulation of the atmospheric conditions over Belgian onshore and offshore regions

## HET VSC-WERKPLAN 2015

Zoals reeds aangegeven werd, is het VSC een samenwerkingsverband tussen de Herculesstichting en de vijf Vlaamse universiteiten. De Tier-2 infrastructuur van elke instelling en de Tier-1 supercomputer zijn in een netwerk samengebracht. Operationeel wordt dit centrum aangestuurd door de Werkgroep HPC die bestaat uit medewerkers van de Herculesstichting en de HPC-coördinatoren van de universiteiten. Het HPC-decreet bepaalt dat de Herculesstichting instaat voor de financiering van de grote rekeninfrastructuur voor onderzoek en innovatie en voor het beheer van Tier-1.

In 2015 wordt er enerzijds verder gebouwd op de initiatieven die reeds in 2014 genomen werden. Anderzijds worden er ook een aanzienlijk aantal nieuwe activiteiten gepland:

### **Financiering recurrente kosten**

Zoals in 2014 beschikt de Herculesstichting in 2015 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 de Herculesstichting subsidieovereenkomsten af met de universiteiten. Naast de subsidies die de Herculesstichting 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 2015 de tweede HPC-gebruikersdag georganiseerd;
- periodiek op grote schaal de nieuwsbrief 'VSC Echo' elektronisch verspreid.

Aangepast aan het niveau en de noden van gebruikers biedt het VSC opleidingen aan. Hiervan wordt regelmatig een overzicht verspreid. Standaardcursussen worden in elke universiteit meerdere keren per jaar aangeboden. Meer gespecialiseerde opleidingen worden interuniversitair georganiseerd. Deze worden gegeven door specialisten die verbonden zijn aan de Vlaamse universiteiten. Maar het kan ook dat hiervoor externe specialisten aangetrokken worden. Verder worden de gebruikers geïnformeerd over de opleidingen die door buitenlandse centra ingericht worden en waaraan ze kunnen deelnemen. Er wordt onderzocht of er een massive open online course (MOOC) rond HPC ontwikkeld kan worden.

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. Voor de ondersteuning van gebruikers maakt men onderscheid tussen verschillende niveaus. Deze gaan 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.

Op vraag van de Herculesstichting werden de profielen van de experts die instaan voor begeleiding, op hoog niveau in kaart gebracht. Hierdoor kunnen onderzoekers binnen het netwerk doorverwezen worden naar de meest geschikte persoon die hen kan helpen. Om de noden van de gebruikers in kaart te brengen en de ontwikkelingen te bespreken, heeft de Herculesstichting een Gebruikerscommissie Tier-1 ingesteld. Daarnaast heeft elke universiteit een eigen gebruikerscommissie die zich meer focust op Tier-2.

#### **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 2015 van toepassing.

Het mandaat van de buitenlandse leden die in de Evaluatiecommissie zetelen, werd bevestigd. Deze commissie is als volgt samengesteld:

- Walter Lioen, voorzitter (SURFsara, Nederland);
- Derek Groen (Molecular Biology, UCL, VK);
- Sadaf Alam (CSCS, Zwitserland);
- Nicole Audiffren (CINES, Frankrijk).

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

Naast het aanrekenen van kosten voor de rekentijd worden vanaf 2015 ook kosten aangerekend voor het gebruik van het scratch geheugen wanneer dit gebruik hoger ligt dan het minimum waarvan de kosten gedekt worden door de bijdrage voor rekentijd.

Zoals in 2014 wordt ook in 2015 op basis van drie beoordelingsmomenten gewerkt : 2 februari, 1 juni en 5 oktober.

\* Voor meer informatie, ga naar: <https://vscentrum.be/nl/tier1-rekenen/reglement-tier1-rekentijd-aanvragen-2015>.

**HPC en industrie**

Eén van de opdrachten die in het HPG-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. Om het VSC hierbij op een deskundige manier te adviseren heeft de decreetgever bepaald dat bij de Herculesstichting een Industrial Board ingesteld wordt.

In 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, werd op 27 januari 2015 een HPG-event georganiseerd. Hieraan namen sprekers uit Vlaamse bedrijven deel maar ook sprekers uit buitenlandse supercomputercentra die veel ervaring hebben met samenwerking met het bedrijfsleven. Als opvolging van dit event zal de Werkgroep HPC in overleg met de Industrial Board een aantal initiatieven voorbereiden.

**De tweede Vlaamse Tier-1**

In 2014 besliste de Raad van Bestuur de huisvesting en de technische exploitatie van de tweede Vlaamse Tier-1 toe te wijzen aan de KU Leuven. Aangezien in de Vlaamse Uitgavenbegroting 2015 geen bijkomende middelen toegekend werden voor de aankoop van de tweede Vlaamse Tier-1, besliste de Raad van Bestuur hiervoor uit de investeringsdotatie voor bijzondere onderzoeksinfrastructuur een bedrag van 5,5 miljoen te voorzien.

Om de technische specificaties van de tweede Vlaamse Tier-1 vast te leggen werd eind 2014 een bevraging van (potentiële) gebruikers van Tier-1 en Tier-2 georganiseerd. Het opzet was om over een tijdshorizon van 3 tot 4 jaar te peilen naar hun noden. Ondermeer op basis van de resultaten van deze bevraging werd het lastenboek opgesteld. De procedure voor de aankoop van de nieuwe Tier-1 loopt momenteel en er wordt naar gestreefd deze tegen eind 2015 af te ronden zodat in de eerste helft van 2016 de machine kan worden geïnstalleerd en getest.

**Vernieuwing van de website VSC**

De website van het VSC voldoet niet meer aan de huidige noden. Het is dan ook noodzakelijk dat er een nieuwe website ontwikkeld wordt. In samenspraak met de HPG-coördinatoren werd een lastenboek met de vereisten opgesteld. Momenteel wordt de nieuwe website ontwikkeld. Deze site zal medio 2015 gelanceerd worden.

### **Verbeteren van de dienstverlening**

Met de beperkte middelen die beschikbaar zijn, hebben de HPC-coördinatoren in 2014 een aantal projecten voor zowel Tier-1 als Tier-2 opgestart waarvan sommige nog in uitvoering zijn.

Voor 2015 werden enkele aanvullende projecten opgesteld. In maart 2015 werd voor de tweede keer een hands-on meeting georganiseerd waaraan alle personen deelnamen die aan de universiteiten instaan voor de exploitatie van de HPC-infrastructuur en de ondersteuning van de gebruikers. Gedurende een volledige dag werd een stand van zaken opgemaakt over de uitvoering van de projecten. Eveneens werd de planning besproken zodat de verdere uitvoering van de lopende en de nieuwe projecten duidelijk werd. Ook wisselden de medewerkers van de verschillende universiteiten informatie uit over hun activiteiten.