



Vlaanderen
is supercomputing

VSC | VLAAMS SUPERCOMPUTER CENTRUM

Jaarverslag 2019

Met steun van

fwo

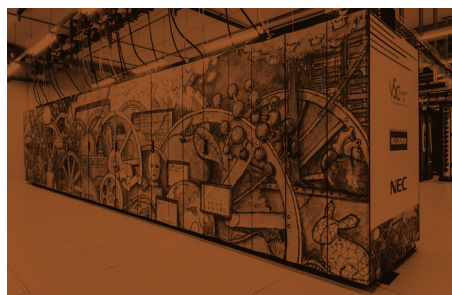
Inhoud

Voorwoord	4	Personeel	38
Het VSC uitgelicht	6	Subsidiëring	38
Ter inleiding	6	Effectieve personeelsinzet	38
Tiering model	6	Profielen	38
Nieuwe governance structuur	7	Gevorderde ondersteuning	40
Financiering van Tier-1 en Tier-2	8	Outreach naar bedrijven	42
Recurrente financiering	8	Plan van aanpak	42
Eenmalige investering SaaS	8	Digitale aanwezigheid	42
Het Tier-1 supercomputerplatform	11	Dienstverlening aan bedrijven	44
Activiteiten uitgevoerd in 2019	11	VSC industriële raad	44
Compute	12	Bekendmaking aan bedrijven en andere organisaties	45
Uitbreiding Tier-1b (BrENIAC)	12	Gebruik door niet-academici	45
Tier-1 uptime	12	Opleidingen	46
Toekennen van rekentijd	13	Evenementen	47
Tier-1 bezetting	16	VSC USERS DAY 2019	47
Tier-1c RFP en aankoop procedure	16	Deelname aan nationale en internationale evenementen, congressen en workshops	49
Data	17	Internationale samenwerking	50
Cloud	19	EuroHPC en PRACE	50
Gebruikersworkshops	21	EGI	52
Integratie	22	Succesverhalen	54
Tier-2 infrastructuur	24	Bijlagen	64
Beschikbare infrastructuur	24		
Exploitatie en gebruik	28		
Toekennen rekentijd Tier-2	33		
Gebruikersondersteuning	34		
Beantwoorden van vragen van gebruikers	34		
Bijeenkomsten met gebruikers/ specifieke ondersteuning	35		



07 NIEUWE GOVERNANCE STRUCTUUR

Een High-End Computing (HEC) raad – Vlaanderen stuurt voortaan de werking aan, stippelt het langetermijnbeleid voor het VSC uit en definieert een aantal strategische doelstellingen.



11 UPGRADE TIER-1 INFRASTRUCTUUR

Het VSC investeerde in de zomer van 2019 vijf miljoen euro in de upgrade van zijn supercomputer BrENIAC.



54 SUCCESVERHALEN

In een reeks succesverhalen op VSC's YouTube kanaal kan je HPC gebruikers hun verhalen bekijken.

Voorwoord

Het VSC, een samenwerkingsverband tussen de Vlaamse universiteiten en FWO, maakte in 2019 een belangrijke transformatie door. Deze verandering had o.a. te maken met een verhoogde inzet op leiderschap en strategie, met de verdere uitbreiding van het HPC-aanbod, en met oog voor toekomstige internationalisering.

Zo tekende VSC een nieuwe governance structuur uit. Dit om tegemoet te komen aan een groeiend aantal stakeholders. Een High-End Computing (HEC) raad werd opgericht, voorgezeten door een onafhankelijk voorzitter, Peter Michielse, CTO bij SURFsara BV, en is verder samengesteld uit vertegenwoordigers van de universiteiten, van de strategische onderzoeksinstellingen, van de Vlaams wetenschappelijke instellingen, vanuit de industrie en de raad van bestuur van het FWO.

Ook verdubbelde BrENIAC (Tier-1 infrastructuur) in rekencapaciteit. Er werd daarvoor 5 miljoen euro geïnvesteerd in deze upgrade. Het uitgebreide systeem heeft nu 988 nodes en een peak performantie van 1,5 PFlop/s (double-precision). Dit geeft VSC-gebruikers de mogelijkheid om hun code op te schalen en meer complexe problemen op te lossen.

Een hedendaags Tier-1 “supercomputing platform” biedt echter niet enkel rekenkracht. Zowel compute, data als cloud technologieën moeten complementair met elkaar beschikbaar zijn. VSC boekte veel vooruitgang in de opzet van Supercomputing as a Service (SaaS), met in 2019 een aantal afgewerkte pilootprojecten.

Via de vijf Vlaamse universiteiten neemt VSCook deel aan EuroHPC, een initiatief van de EU om een “World Class Supercomputing Ecosystem” in Europa uit te bouwen. België behoort tot het Finse LUMI-consortium, en diende een projectvoorstel in voor de oprichting van een ‘National Competence Center’ rond HPC.

Tenslotte maakte VSC in 2019 verder werk van z'n ambitie om als een dienstencentrum te opereren waar bedrijven terecht kunnen wanneer ze vernieuwende computationele technieken willen incorporeren in hun business.



KU LEUVEN

Leen Van Rentergem
Jan Ooghe
Ingrid Barcena

 **Universiteit
Antwerpen**

Annie Cuyt
Stefan Becuwe



**UNIVERSITEIT
GENT**

Ewald Pauwels
Stijn De Weirdt

 **UHASSELT**

Geert Jan Bex
Rafal Al-Tekreeti

 **VRIJE
UNIVERSITEIT
BRUSSEL**

Stefan Weckx
Ward Poelmans

 **fwo**
Research Foundation
Flanders
Opening new horizons

Caroline Volckaert
Tim Jaenen

Het VSC uitgelicht

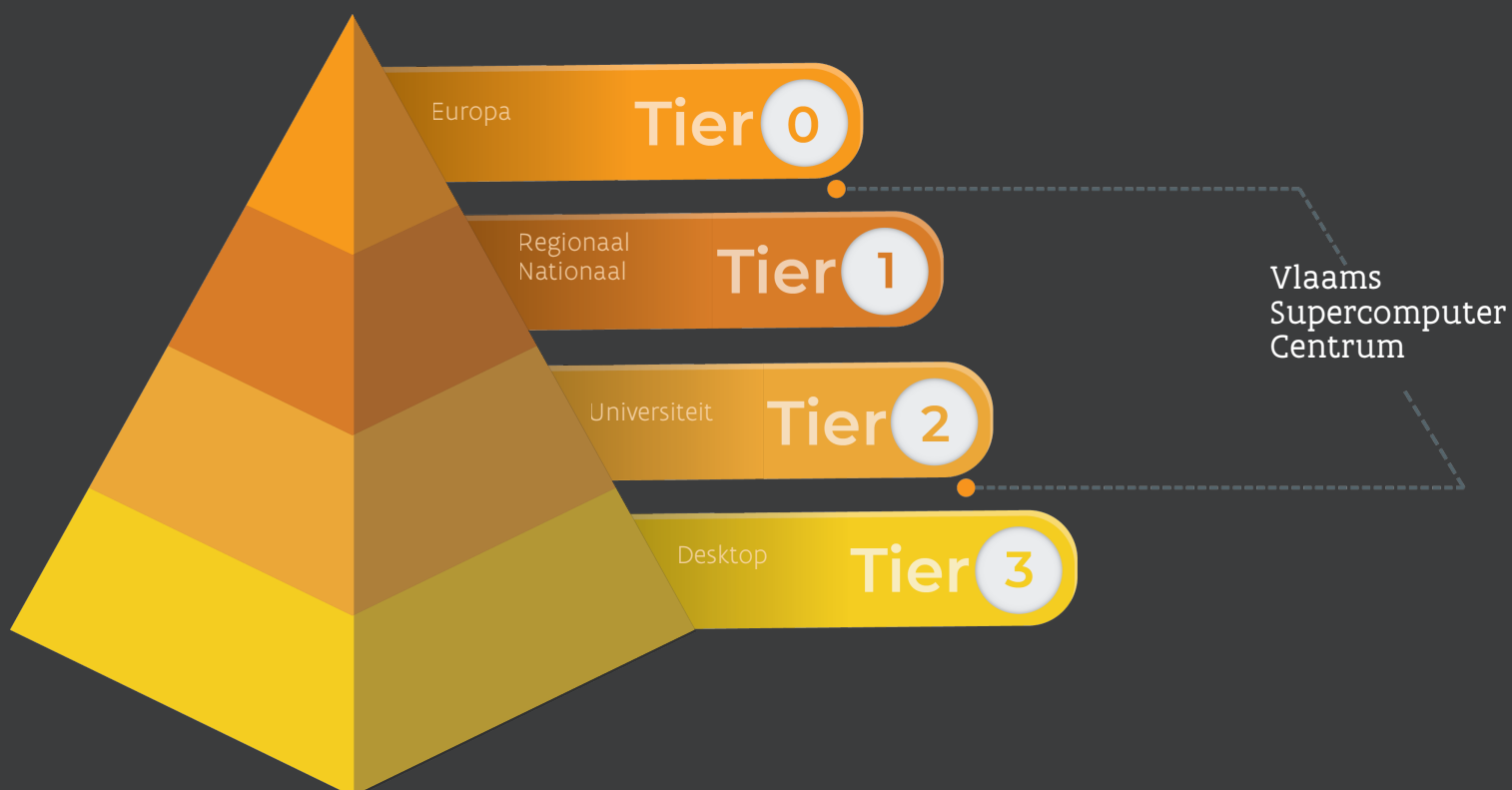
Ter inleiding

De ondersteuning en uitbating van High Performance Computing (HPC) is in Vlaanderen georganiseerd binnen het Vlaams Supercomputing Centrum, het VSC. Het VSC is een consortium waarin de 5 Vlaamse associaties de krachten bundelen om HPC-infrastructuur en ondersteuning aan te bieden aan de brede onderzoeksgemeenschap in Vlaanderen, zowel uit universiteiten, kennisinstellingen, bedrijven en overheid. Daarnaast biedt het VSC binnen haar opdracht als dienstverlener een waaier aan opleidingen aan die het gebruik van de infrastructuur moeten bevorderen. Het huisvest infrastructuur in vier hubs: UAntwerpen, Vrije Universiteit Brussel, UGent en KU Leuven.

Het VSC wordt beheerd door het FWO, Fonds Wetenschappelijk Onderzoek – Vlaanderen.

Tiering model

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). Het VSC richt zich vooral op de lagen Tier-2 en Tier-1, en poogt zo een getrapte brug te vormen tussen Tier-3 en Tier-0.



Afbeelding 1. Tiering model

Nieuwe governance structuur

Om de werking van het VSC te optimaliseren, de VSC organisatie daadkrachtiger te maken en tegemoet te komen aan de (toekomstige) noden van een groeiend aantal stakeholders, werd in 2019 de governance structuur van het VSC hertekend, gesteund op een meer doorgedreven samenwerking tussen alle partners.

Een High-End Computing (HEC) raad – Vlaanderen stuurt voortaan de werking aan, stippelt het langetermijnbeleid voor het VSC uit en definieert een aantal strategische doelstellingen. Voor de komende jaren zullen de noden van de (toekomstige) gebruikers (HPC, cloud, data en nieuwe disciplines) immers bepalend zijn voor de toekomst en de rol van het VSC. De positionering t.o.v. EuroHPC zal hierbij ook een rol spelen. Een langetermijnfinanciering dient dan ook verder bepleit te worden.



Peter Michielse

De HEC-raad wordt voorgezeten door een onafhankelijk voorzitter, Peter Michielse, CTO bij SURFsara BV, het Nederlands nationaal HPC en big data center, en is verder samengesteld uit vertegenwoordigers van de universiteiten, van de strategische onderzoeksinstellingen, van de Vlaams wetenschappelijke instellingen, vanuit de industrie en de raad van bestuur van het FWO. Bovendien wonen vertegenwoordigers van het departement EWI en FWO als waarnemers de vergaderingen bij.

HEC raad - Vlaanderen

	effectief lid	plaatsvervanger
UGent	Johan Van Camp	Danny Schellemans
UAntwerpen	Annie Cuyt	Wouter Herrebout
KU Leuven	Leen Van Rentergem	Annemie Depuydt
VUB	Stefan Weckx	Frank De Proft
UHasselt	Niel Hens	Jan Aerts
SOC	Rinaldo Beck (VIB)	Wilfried Verachtert (imec)
VWI	Frederik Leliaert (PI. Meise)	Steven Dessein (PI. Meise)
Afgevaardigde RvB FWO	An Van de Vel (Umicore)	
Voorzitter	Peter Michielse (SURFsara NL)	
Industriële raad Vz	Mia Vanstraelen	
EWI waarnemer	Michele Oleo	
FWO waarnemer	Hans Willems	
secretariaat	FWO	

Tabel 1. HEC raad - Vlaanderen

"OP HET GEBIED VAN HIGH PERFORMANCE COMPUTING STAAT ER VEEL TE GEBEUREN, ZOWEL IN VLAANDEREN ALS IN EUROPA. HET VSC WERKT AAN EEN NIEUW TIER-1 SYSTEEM VOOR ONDERZOEKERS IN VLAANDEREN EN MET DE KOMST VAN EUROHPC WIL DE EUROPESE COMMISSIE DE KOMENDE JAREN EN DECENNIA OP HET GEBIED VAN HIGH PERFORMANCE COMPUTING ONAFHANKELIJK WORDEN VAN DE VS, CHINA EN JAPAN. DEZE ONTWIKKELINGEN ZIJN EEN BELANGRIJKE DRIJFVEER OM DE STRATEGISCHE ROL VAN HET VSC TE VERSTERKEN. ALS VOORZITTER VAN DE HIGH-END COMPUTING RAAD IN VLAANDEREN HOOP IK EEN BIJDRAGE TE KUNNEN LEVEREN AAN DE GEWENSTE ROL VAN HET VSC, NU EN VOOR DE TOEKOMST."

Peter Michielse
CTO | SURFsara BV
voorzitter HEC-Raad

Financiering van Tier-1 en Tier-2

De financiering van de Tier-1 en Tier-2 infrastructuur verloopt momenteel via twee geldstromen. Enerzijds is er een recurrent budget van 6.381.000 euro jaarlijks beschikbaar waarmee voornamelijk Tier-2 investeringen en het personeel gefinancierd worden. Daarnaast wordt via een eenmalige opstartfinanciering van 30.000.000 euro voor de periode 2018-2022 het Tier-1 Supercomputing as a Service met de drie componenten compute, cloud en data gefinancierd. Een structureel budget voor alle VSC financiering is wenselijk om een langetermijnstrategie uit te werken en klaar te staan voor nieuwe uitdagingen.

Recurrente financiering

In 2019 werd de Tier-2 infrastructuur voor 5.821.000 euro gefinancierd door het FWO verdeeld over 3.921.000 euro investeringen in hardware en 1.900.000 euro in personeel. Daarnaast investeerde het FWO 380.000 euro in het personeel voor de twee Tier-1's en de energiekost (180.000 euro) van de tweede Tier-1.

Deze middelen werden aangewend voor het financieren van:

- ▶ personeelskosten voor de exploitatie van de eerste en de tweede Tier-1 (380.000 euro);
- ▶ personeelskosten voor de opleiding en ondersteuning van gebruikers op zowel Tier-1 als Tier-2 (1.900.000 euro); (Met dit bedrag kunnen aan de vijf Vlaamse universiteiten in totaal het equivalent van 20 VTE's gesubsidieerd worden.)
- ▶ de energiekosten van de tweede Tier-1 (180.000 euro);
- ▶ investeringen en werkingskosten voor de Tier-2 infrastructuur (3.921.000 euro); (De universiteiten hebben deze middelen vooral gebruikt voor bijkomende investeringen in Tier-2. Deze instellingen financieren met eigen middelen de energie- en exploitatiekosten van de Tier-2.)

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

Rubriek	KU Leuven	UHasselt	UGent	VUB	UAntwerpen	Subtotaal Tier-2	Tier-1a	Tier-1b	Totaal
Personeel in FTE	6	2	5	3	4	20	2	2	24
Capital Totaal	€ 570 000	€ 190 000	€ 475 000	€ 285 000	€ 380 000	€ 1 900 000	€ 190 000	€ 190 000	€ 2 280 000
CAPEX en werking Tier-2	€ 1 601 341	€ 150 388	€ 1 247 557	€ 400 999	€ 485 714	€ 3 886 000			€ 3 886 000
Energiekosten Tier-1	€ 180 000					€ 180 000			€ 180 000
Belnet	€ 35 000					€ 35 000			€ 35 000
Totaal	€ 2 386 341	€ 340 388	€ 1 722 557	€ 685 999	€ 865 714	€ 6 001 000	€ 190 000	€ 190 000	€ 6 381 000

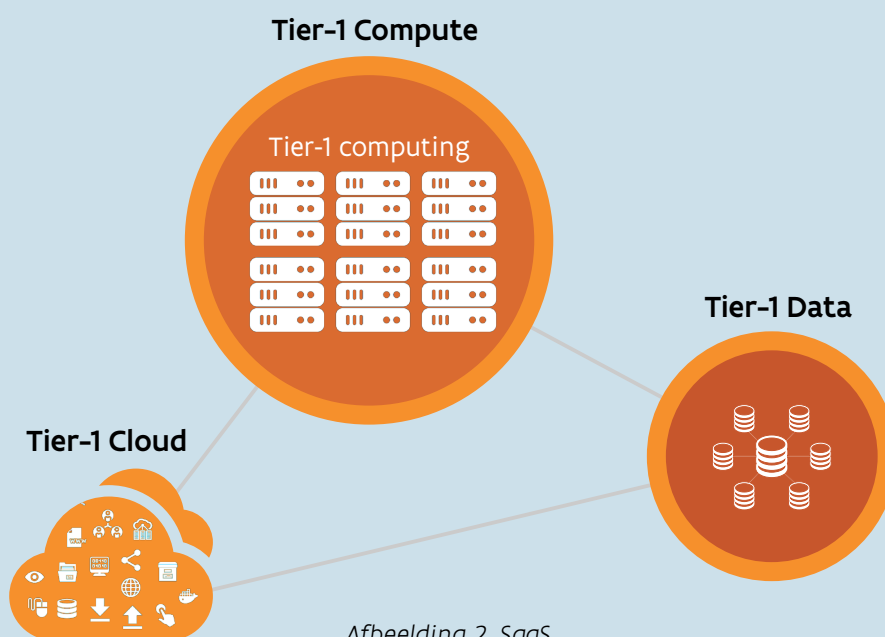
Tabel 2. verdeling recurrent budget 2019

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

Eenmalige investering SaaS

De Tier-1 supercomputing infrastructuur in Vlaanderen was tot nog toe vooral gericht op gebruikers met zware rekenvraagstukken (typische HPC/HTC workloads). Hoewel dit platform in zijn huidige vorm reeds erg succesvol is, komt de huidige focus op compute evenwel niet langer tegemoet aan alle noden van vele onderzoekers. Ook bij de industrie is er de vraag naar meer dataverwerking, ontsluiting en gebruiksomgevingen op maat.

Het VSC biedt daarom een nieuw conceptueel Tier-1 model aan: Supercomputing as a Service. Binnen dit model kunnen we verschillende infrastructuurcomponenten onderscheiden, die het samen mogelijk maken om een verhoogd service level aan te bieden aan de gebruikers van het VSC.



Afbeelding 2. SaaS

1. De belangrijkste component in dit model blijft de compute infrastructuur: klassieke rekenclusters die zware of een veelvoud aan rekentaken kunnen verwerken.
2. Onlosmakelijk daaraan verbonden is een data component. Steeds meer gebruikers hebben immers computationeel werk dat intensief gebruik maakt van grote datasets. Het migreren van deze data van en naar de compute infrastructuur telkens deze voor een berekening moet worden gebruikt is omwille van de schaal zeer inefficiënt. Het is dan ook noodzakelijk een data component toe te voegen waar grote datasets gedurende een langere tijd kunnen opgeslagen worden en van daaruit ook op een efficiënte manier worden verwerkt.
3. Onderzoek met deze datasets vraagt veelal ook een flexibele gebruiksomgeving: een omgeving waar op een interactieve manier, op maat van de toepassingen en van de gebruikers analyses kunnen gebeuren; een omgeving waar pre- en postprocessing kan worden uitgevoerd; een omgeving waar de data op een web-gebaseerde manier kan ontsloten worden voor de gebruikers, kan gevisualiseerd worden of kan geraadpleegd worden door medewerkers, geïnteresseerden of gebruikers van het onderzoek of de onderzoeksresultaten. Hiertoe wordt een infrastructuur voorzien die niet de focus legt op compute maar eerder op 'op-maat' ontsluiting en gebruik van de data. Hier kan een model worden gehanteerd dat sterk aanleunt bij dat van cloud-providers.

Een hedendaags Tier-1 “supercomputing platform” biedt dus zowel compute, data als cloud technologieën complementair met elkaar aan. Toekomstige investeringen in Tier-1 moeten deze focus dan ook reflecteren. Dit houdt in dat blijvende investeringen worden gedaan in de ‘klassieke’ Tier-1 compute infrastructuur, doch dat daarnaast ook een centraal beheerde Tier-1 data omgeving wordt opgebouwd en cloud services kunnen worden aangeboden.

De laatste twee componenten zijn nieuw op het Tier-1 niveau. Onderstaande impulsfinanciering voor het opbouwen van deze omgevingen zorgt ervoor dat gedurende de komende 5 jaar een volledig model en infrastructuur kunnen worden uitgebouwd om het Supercomputing as a Service concept te verwezenlijken.

	2018	2019	2020	2021	2022	Totaal
Tier-1 compute						
Tier-1b uitbreiding	€ 5 000 000					€ 5 000 000
Tier-1c (derde Tier-1)			€ 6 000 000		€ 6 000 000	€ 12 000 000
Tier-1 cloud						
Tier-1 Cloud		€ 435 000	€ 125 000	€ 395 000	€ 125 000	€ 1 080 000
Tier-1 data						
Tier-1 data		€ 360 000	€ 1 360 000	€ 2 050 000	€ 2 050 000	€ 5 820 000
Tier-1 perifere install		€ 45 000	€ 175 000	€ 405 000	€ 125 000	€ 750 000
Stroom- en personeelskosten						
Tier-1 stroom		€ 230 000	€ 700 000	€ 1 010 000	€ 1 130 000	€ 3 070 000
Tier-1 personeel	€ 190 000	€ 380 000	€ 570 000	€ 570 000	€ 570 000	€ 2 280 000
totaal	€ 5 190 000	€ 1 450 000	€ 8 930 000	€ 4 430 000	€ 10 000 000	€ 30 000 000

Tabel 3. Details impulsfinanciering

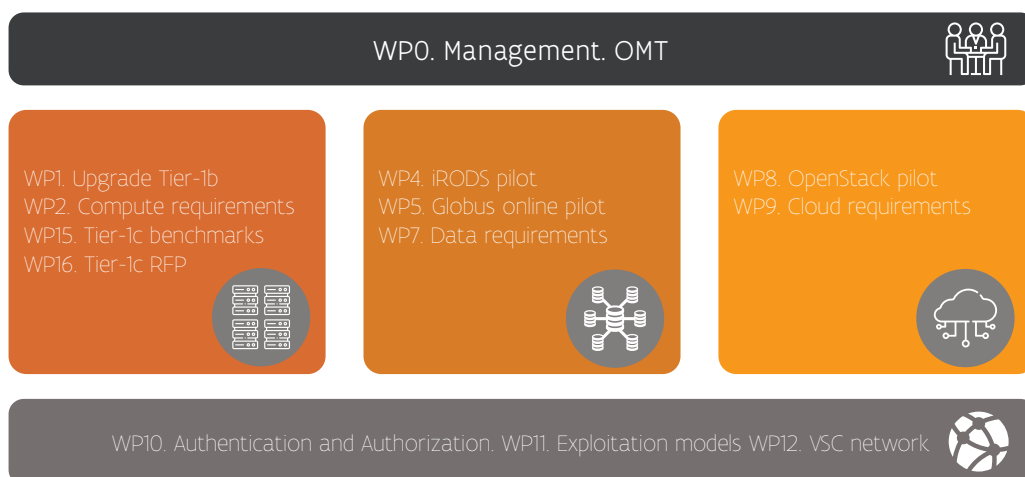
Aangezien de Tier-1 financiering afloopt in 2022, moeten nu reeds stappen gezet worden voor een vervolgtraject zodat ook na 2022 de toegang tot HPC kan gecontinueerd worden. Niet alleen het compute luik, maar ook de data/cloud component dienen verder uitgebouwd te worden. Daarvoor kunnen investeringen in datavoorzieningen en archivering (langetermijnopslag) overwogen worden in het toekomstige budget.

Het Tier-1 supercomputerplatform

Sinds 2018 leidt een operationeel managementteam (OMT) het Tier-1 project. Het OMT heeft als opdracht een concreet operationeel plan uit te werken voor de volledige looptijd van dit project en is ook verantwoordelijk voor de implementatie en de communicatie naar de stakeholders (leveranciers, VSC gebruikerscommissie, VSC Industriële raad en eindgebruikers).

Activiteiten uitgevoerd in 2019

In 2019 stelde het OMT een nieuw Tier-1 SaaS investeringsplan op voor de periode 2020-2022 en maakte een concreet actieplan om dit investeringsplan uit te voeren. Het werk werd opgesplitst in 13 werkpakketten met heel concrete doelen. Alle werkgroepen zijn samengesteld met personeel uit alle instellingen om de samenwerking tussen de VSC instellingen te promoten en te garanderen dat de kennis wordt gedeeld.



16 work packages with concrete goals

Multisite VSC Workgroups to promote collaboration and knowledge sharing WP3/WP6/WP13/WP14 finished or stopped

Afbeelding 3. Tier-1 actieplan

In 2019 lag de focus op versterking van de Compute component enerzijds en anderzijds de verderzetting van de data en cloud pilotstudies.

Volgende acties werden in 2019 uitgevoerd:

- De uitbreiding van de huidige Tier-1 omgeving (Tier-1b, BrENIAC);
- De start van de aankoopprocedure van het volgende systeem voor de Tier-1 compute component (Tier-1c);
- Het verder experimenteren met een aantal pilotimplementaties voor de data en cloud componenten;
- Het identificeren van de gebruikersnoden voor de drie componenten.

Compute

Uitbreiding Tier-1b (BrENIAC)

In februari werd het Tier-1b systeem (BrENIAC) uitgebreid met extra 408 rekennodes met elk twee Intel Gold 6132 (Skylake) processoren, 28 cores en 192 GB geheugen en een Infiniband EDR netwerk met een 2:1 fat tree configuratie. Het GPFS storage systeem werd ook uitgebreid met 696 TB netto extra capaciteit.

Met deze uitbreiding heeft BrENIAC een piekprestatie van 1,5 PFlop/s en een totale scratch capaciteit van 1,2 PB. De installatie van de nieuwe nodes gebeurde in maart en tijdens de acceptatietesten voerde het VSC team ook een HPLinpack benchmark uit met alle nodes van het systeem met een resultaat (Rmax) van 1 PFlop/s.

Na de acceptatietesten gebeurde er een gesloten pilootfase met toegang tot de uitgebreide BrENIAC capaciteit met focus op Large Scale projecten. Een aantal gebruikers van verschillende instellingen dienden een projectvoorstel in met de volgende voorwaarden:

- > 15.000 nodedagen
- Zes tot acht weken om de rekentijd te gebruiken

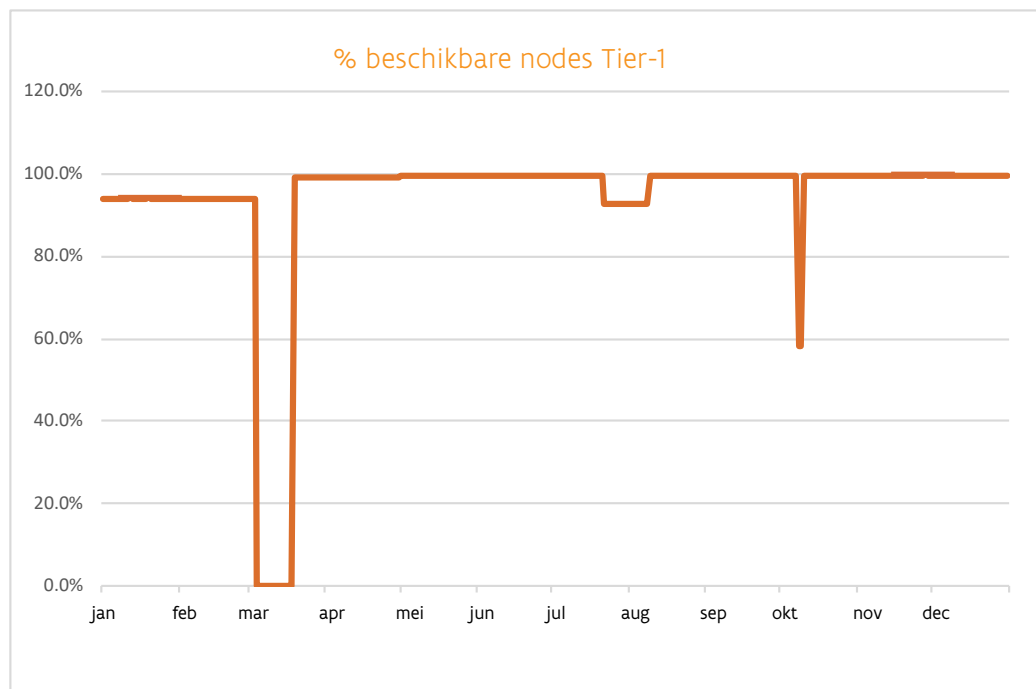
VSC ontving in totaal zes aanvragen voor grote projecten voor de pilootfase van de uitgebreide BrENIAC capaciteit. Deze werden allen goedgekeurd met de gevraagde rekentijd met aanvang van de rekenperiode vanaf begin mei en einde in september 2019, i.e. voor de start van de derde cutoff van 2019.

In deze periode werden bijna 25.000 nodedagen gebruikt door de pilootprojecten waarvan 60% door jobs met meer dan 50 compute nodes simultaan. In september werden de nieuwe nodes in productie gebracht.

Tier-1 Uptime

Er was in 2019 over het algemeen een goede beschikbaarheid van de Tier-1 infrastructuur, dit willen zeggen uptime percentages tussen 92,7 en 99,6%. Er waren echter ook drie momenten met een significante downtime.

1. De downtime in maart was nodig voor de installatie van de uitbreiding van BrENIAC. Dit omvatte de installatie van nieuwe nodes, netwerkconfiguratie en uitbreiding van de storage.
2. Eind juli, begin augustus was er in 1 rack een probleem met de PDU, die de stroomvoorziening in een rack regelt. Die nodes werden vervolgens ook gebruikt om een update van de Linux Kernel te testen.
3. Tenslotte was er in oktober een externe stroompanne waardoor één deel van de cluster zonder stroom zat.



Afbeelding 4. Tier-1 Uptime 2019

Toekennen van rekestijd

Er zijn een aantal manieren waarop onderzoekers rekestijd op Tier-1 kunnen bekomen. Daarbij wordt een onderscheid gemaakt tussen academische en niet-academische gebruikers.

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

Starting Grant

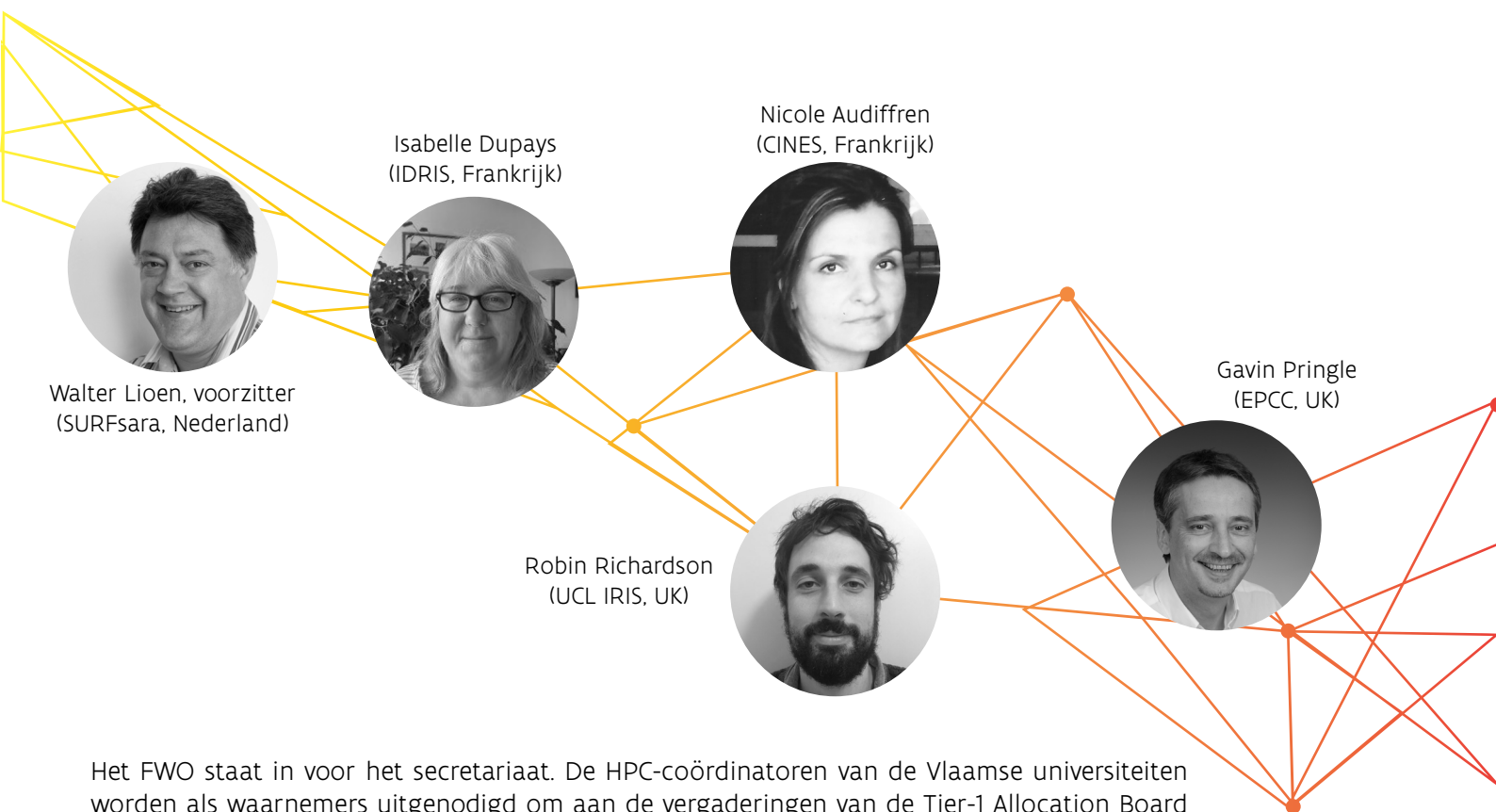
- Maximaal 500 nodedagen rekestijd
- Kan op elk ogenblik aangevraagd worden, met snelle doorlooptijd
- Om Tier-1 uit te proberen en benchmarks of softwaretests uit te voeren, als voorbereiding van een volwaardige projectaanvraag
- Gratis

Er zijn in 2019 in totaal vijftig starting grants uitgereikt, waarvan 12 in astronomie en astrofysica, acht in chemie, één in computerwetenschappen, vier in earth sciences, twee in levenswetenschappen, vier in moleculaire modelering, zeven in fysica, en twaalf in technologie. De verdeling per universiteit zag er als volgt uit: KU Leuven: 22, UGent: 11, VUB: 9, UAntwerpen: 5, UHasselt: 1. Verder kregen ook imec en het von Karman Instituut elk één starting grants.

Project access

- Voor allocaties van 500 tot 5.000 nodedagen rekestijd
- Projectaanvragen beschrijven:
 - het kaderend wetenschappelijk project;
 - het consortium van gebruikers dat de berekeningen zal uitvoeren;
 - het financierend kanaal;
 - de rekestaken die zullen worden uitgevoerd (technisch);
 - de software die zal worden aangewend;
 - desgevallend, welke wetenschappelijke resultaten werden bekomen met vorige Tier-1 project allocaties.
- Projectaanvragen kunnen steeds ingediend worden, maar worden op 3 momenten in het jaar geëvalueerd door de Tier-1 Allocation Board
- Gratis

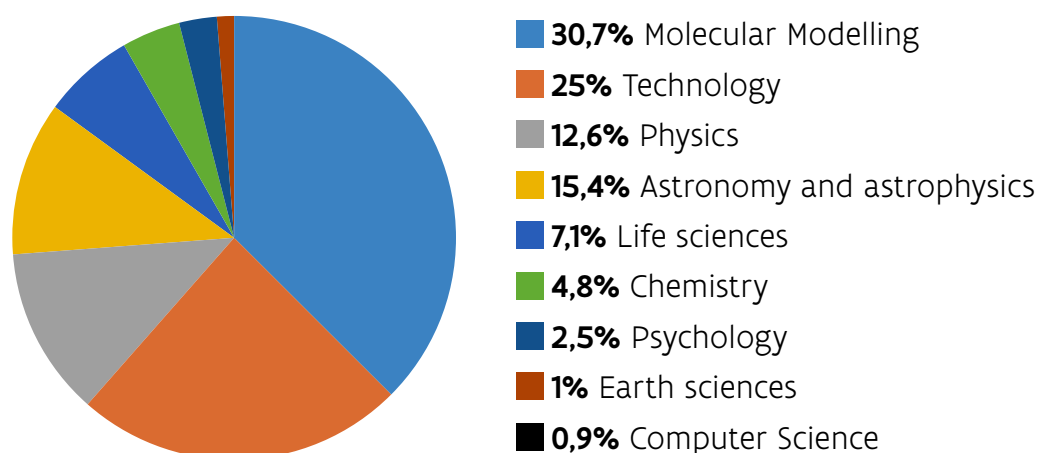
Voor het beoordelen van de Tier-1 projectaanvragen werd een 'Tier-1 Allocation Board' ingesteld. Hierin zetelen vijf buitenlandse deskundigen:



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

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

In drie ronden zijn er in 2019 in totaal 68 projecten ingediend voor een totaal van 259.240 nodedagen. 64 projecten werden toegekend voor een totaal van 241.439 nodedagen. Over de verschillende projectronden die tijdens 2019 zijn geëindigd, werd gemiddeld 89% van de toegekende tijd opgebruikt. Net zoals bij HPC clusters in het buitenland zijn chemie, fysica en de ingenieursdomeinen goed vertegenwoordigd.



Afbeelding 5. Verdeling gebruik Tier-1 per wetenschappelijk domein

In de bijlagen is een overzichtslijst te vinden van de toegekende projectaanvragen en starting grants in 2019.

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

Exploratory Access

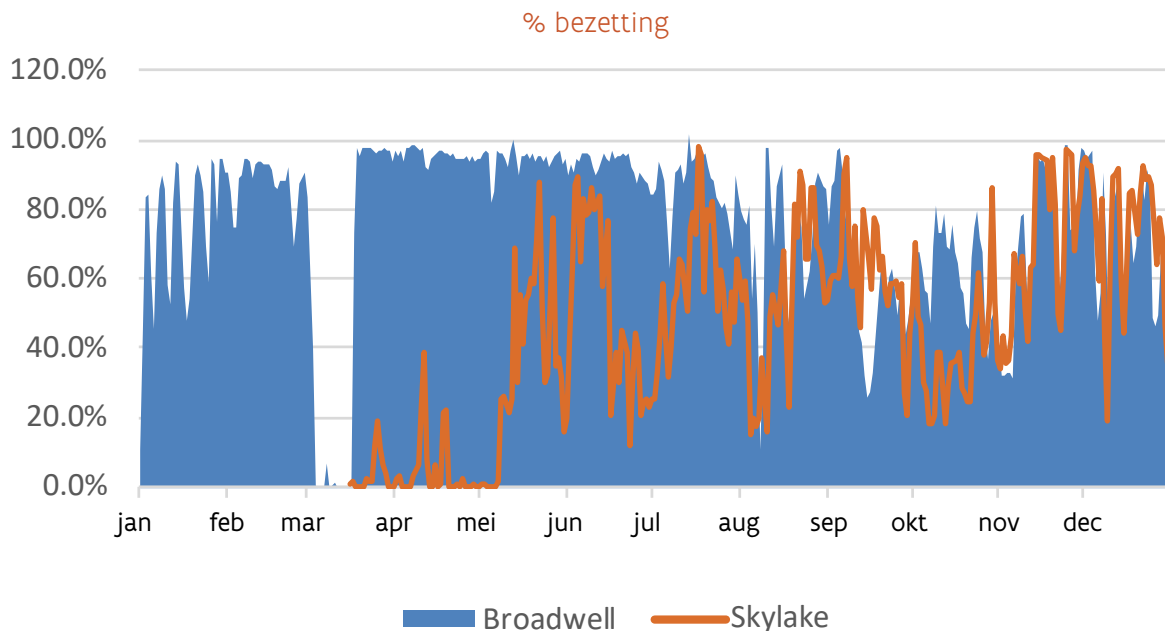
- Maximaal 500 nodedagen rekentijd
- Om de Tier-1 gebruikersomgeving uit te proberen, benchmarks of softwaretests uit te voeren
- Gratis

Full Access

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

De tarieven waaraan industriële gebruikers Tier-1 rekentijd kunnen kopen, werden vastgelegd in het Toegangsreglement 2019. Daarnaast kunnen onderzoekers uit de industrie ook toegang krijgen tot Tier-1 in het kader van een onderzoeksproject in samenwerking met een publieke onderzoeksinstituting zoals bv. een Vlaamse universiteit. Voor een overzicht van het industrieel gebruik op de VSC infrastructuur zie 'Outreach naar bedrijven'.

Tier-1 bezetting

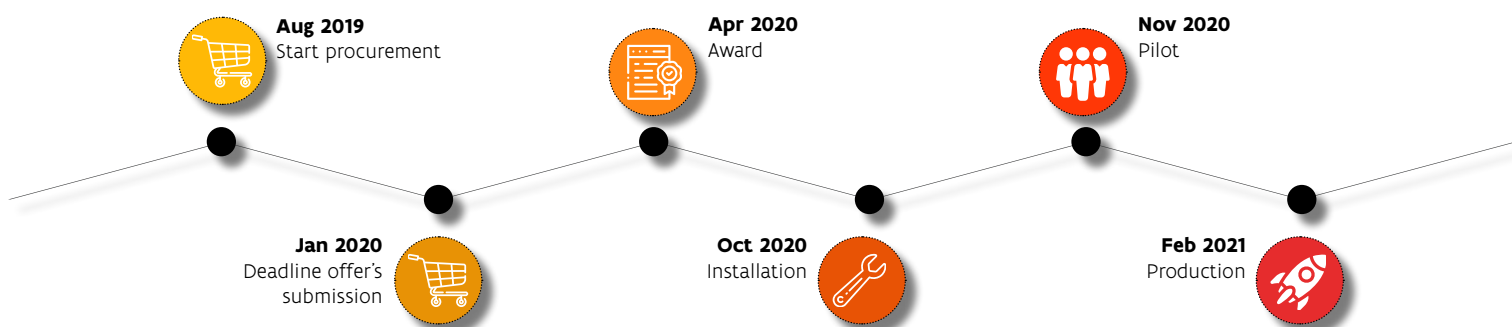


Afbeelding 6. Tier-1 bezetting in 2019

Vanaf februari konden de eerste testprojecten worden uitgevoerd op de BrENIAC Skylake nodes, in november zijn die nodes dan in productie gegaan. De BrENIAC Broadwell nodes werd in maart ook een tijdje stilgelegd. Opvallend waren er minder aanvragen ingediend in de tweede call van 2019, hetgeen tot een lagere bezetting in de herfst leidde. Het aantal aanvragen steeg weer in de derde call.

Tier-1c RFP en aankoop procedure

Op 30 januari 2019 koos het FWO het datacenter van Universiteit Gent als hosting site voor de derde Vlaamse Tier-1 supercomputer, die van 2020 tot 2026 in productie zal zijn. Binnen het VSC kwam men ook overeen dat de Universiteit Gent als aanbestedende instelling voor de aankoop optreedt. Het FWO zal de nodige middelen voor de aankoop vrijmaken en deze via een subsidieovereenkomst ter beschikking stellen aan de UGent.



Afbeelding 7. Aankoopprocedure Tier-1c

De UGent kondigde op 17 mei 2019 een opdracht aan voor het afsluiten van een raamovereenkomst met het oog op de aankoop, levering en het in bedrijf stellen van Tier-1 HPC rekeninfrastructuur, scratch storage en diensten voor gebruik binnen het VSC. Deze raamovereenkomst omvatte tevens de levering van aanvullende onderdelen, software en onderhoudscontracten, en bijkomende services en ad hoc consultancy opdrachten voor de Tier-1.

Binnen deze raamovereenkomst zullen twee Tier-1 supercomputers worden aangekocht en in productie gebracht: één tegen eind 2020 en een uitbreiding tegen eind 2022.

De selectie- en gunningscommissie is in overleg met het VSC samengesteld en bestaat uit de volgende vertegenwoordigers: Ewald Pauwels, Dieter Roefs, Stijn De Weirdt (UGent), Stefan Becuwe (UAntwerpen), Ward Poelmans (VUB) en Ingrid Barcena (KU Leuven).

In het voorjaar bereidde men het bestek voor met als startpunt de Tier-1b (BrENIAC) RFP en de KU Leuven Tier-2 RFP voor "Genius". April 2020 is de beoogde afrondingsperiode voor de aanbestedingsprocedure.

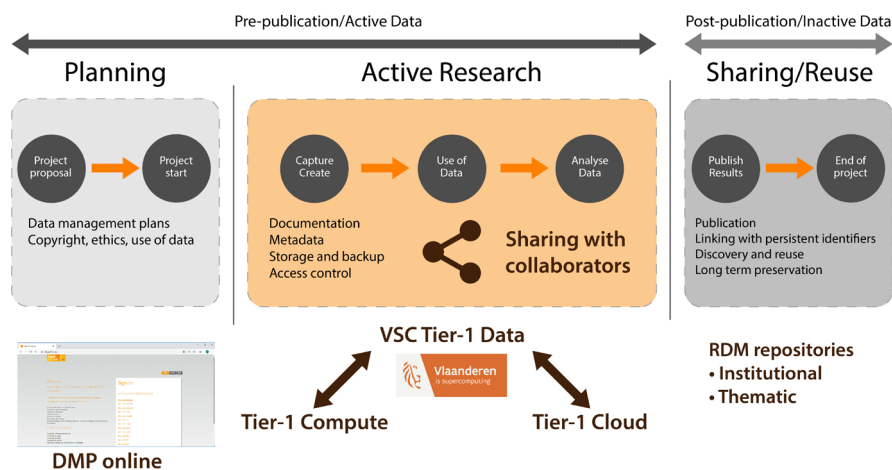
Data

Meer en meer HPC gebruikers hebben rekentaken die intensief gebruikmaken van grote datasets. Het migreren van grote datasets van en naar de rekeninfrastructuur wanneer ze nodig zijn, is inefficiënt en soms onmogelijk omwille van de grote schaal. Daarom is het nodig om een dataluk dichterbij de rekeninfrastructuur te zetten waarin grote datasets kunnen opgeslagen worden voor langere periodes.

In 2018 startten twee pilootprojecten als oplossingen voor de Tier-1 Data component. Enerzijds een piloot voor een data management platform gebaseerd op iRODS en anderzijds een piloot van data transfer services op basis van Globus.

iRODS piloot

Deze Research Data Management (RDM) service heeft als doel een platform aan te bieden om onderzoeksdata op te slaan tijdens de actieve fase van de research data life cycle, wanneer data is verzameld en geanalyseerd, maar nog niet gepubliceerd. Deze service is toegankelijk voor onderzoekers die ook de VSC Tier-1 Compute infrastructuur gebruiken.



Afbeelding 8. Tier-1 Data component

Globus

De nieuwe Tier-1 Data service is gebaseerd op de Open Source software iRODS (<https://irods.org/>). Deze nieuwe service zal onderzoekers helpen om vanaf het begin van hun onderzoek hun projectdata volgens de FAIR (Findable, Accessible, Interoperable, Reusable) principes te behandelen. Dat kan hen helpen om later hun onderzoeksdata te migreren naar de eigen instelling of naar domeinspecifieke repositories om ze te publiceren of te archiveren en, indien mogelijk, publiek toegankelijk (open access) te maken.

Bovendien zal dit platform onderzoekers ook helpen om hun wetenschappelijke workflows op een meer efficiënte manier uit te voeren door het gebruik van tools om de verzameling van data, data kwaliteitscontroles en de migratie van data van en naar de HPC systemen te automatiseren.

De pilootinfrastructuur kende een initiële start geïnstalleerd aan de UGent waar een aantal testen plaatsvonden. In augustus migreerde de pilootinfrastructuur naar KU Leuven en wordt een volledige nieuwe iRODS omgeving geïnstalleerd met het oog op een productieomgeving.

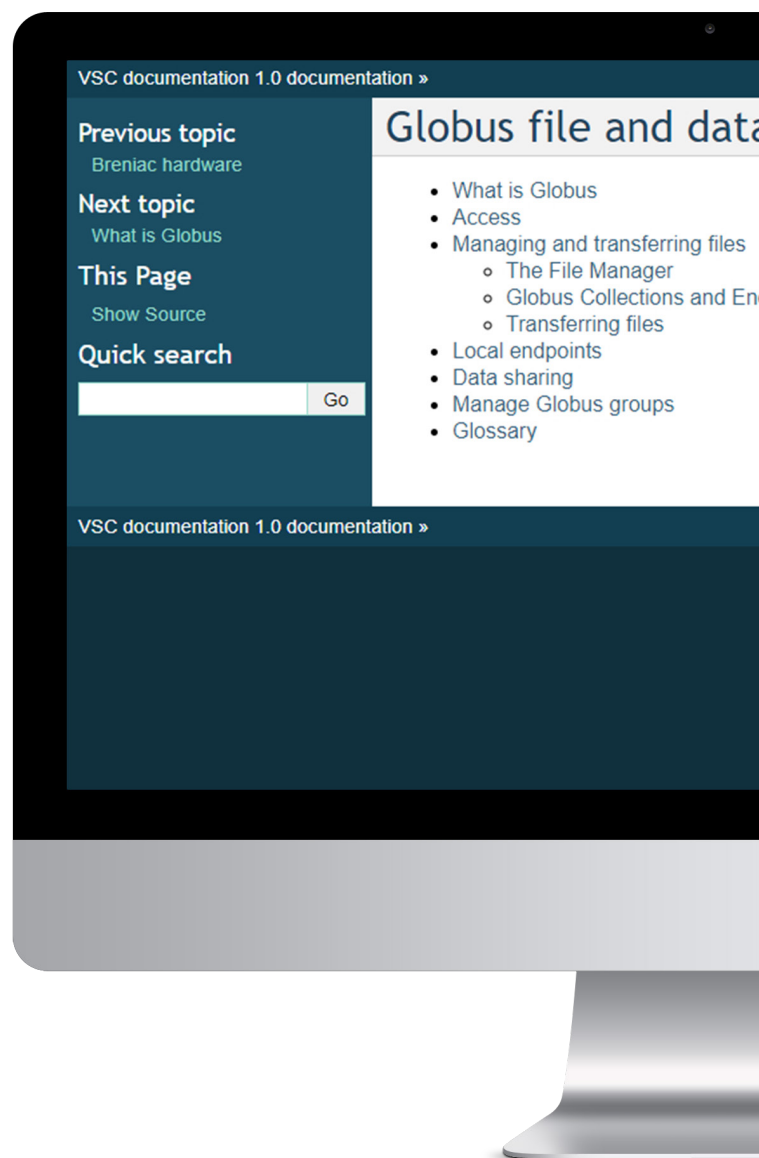
In december kocht VSC 3,6 PB storage capaciteit: 2 POSIX systemen met 1,5 PB bruto plus een Ceph gebaseerd systeem met 600 TB bruto. Deze capaciteit dient om een aantal pilootprojecten met verschillende onderzoeksgroepen te kunnen starten.

Het eerste pilootproject is een samenwerkingsproject tussen 5 onderzoeksgroepen van drie Vlaamse universiteiten (UGent, VUB en KU Leuven) rond klimaatveranderingsstudies. De implementatie van dit pilootproject vindt in de eerste helft van 2020 plaats en zal als referentie dienen om vier of vijf extra pilootprojecten van onderzoekers van verschillende wetenschappelijke domeinen te starten in de loop van het daaropvolgende jaar.

In oktober werd KU Leuven ten behoeve van VSC lid van het iRODS consortium met een "sustained" subscriptie. Dankzij dit lidmaatschap zal VSC consulting en training van iRODS experts kunnen krijgen. Bovendien is het ook een opportuniteit om ervaring en kennis te delen met andere instellingen ter wereld die ook gelijkaardige RDM oplossingen op basis van iRODS aan te bouwen zijn.

Een Globus testbed is geïnstalleerd op alle VSC HPC Tier-1 en Tier-2 systemen. Globus is software die data transfer services tussen verschillende data endpoints biedt. Alle Tier-1 en Tier-2 systemen zijn beschikbaar als een Globus data endpoint met de compute storage areas (Tier-2/Tier-1 scratch, HOME en DATA). De Globus endpoints zijn beschikbaar voor alle gebruikers.

De documentatie om dit te configureren en te gebruiken staat op de VSC documentatie website, [link](#).



Cloud

Onderzoekers die de VSC Tier-1 HPC services gebruiken, hebben ook vaak nood aan een meer flexibele omgeving waarin ze kunnen gebruikmaken van software of services die niet geschikt zijn voor een grootschalig HPC-systeem, denk dan bijvoorbeeld aan op maat gemaakte softwarepakketten, interactieve data analyse-tools, workflow portals, data-visualisatie en specifieke pre- en postprocessing pakketten.

De Tier-1 Cloud component heeft de ambitie om deze nood in te lossen door een cloud service gebaseerd op OpenStack te implementeren die 'on demand' resources kan aanbieden op een meer flexibele en cloud-like manier. Dit nieuwe platform zal aan de ene kant over Infrastructuur as a Service (IaaS) capaciteiten beschikken om resources in te kunnen zetten zoals virtual machines (VMs), en "storage-of-network" met volledige controle door de gebruikers van deze resources. Aan de andere kant zal het cloudplatform ook een aantal high-level diensten aanbieden via een ready-to-use catalogus van templates die het eenvoudig maakt om databanken of webservers met slechts een paar muisklikken op te zetten.

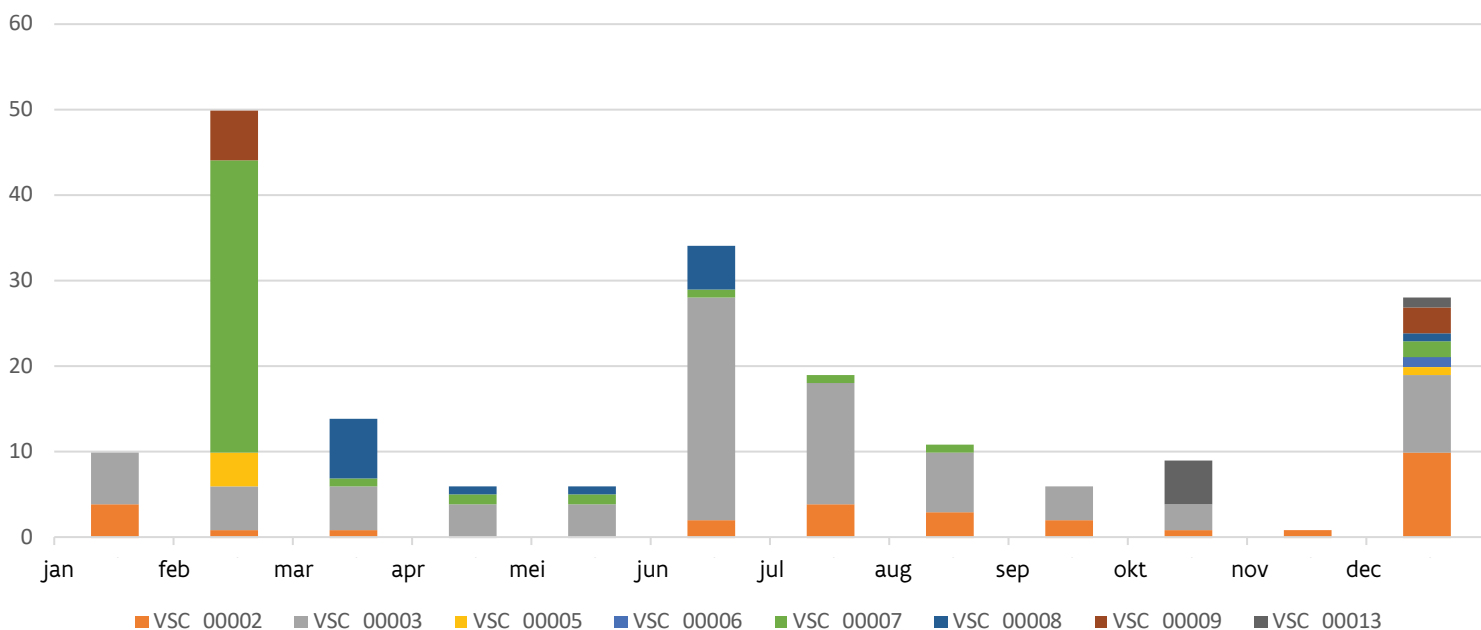
De bestaande pilootopstelling op basis van OpenStack werd in 2019 verder uitgebouwd en gebruikt. In 2019 werd ook gestart met de opbouw van een productieomgeving.

Op 6 maart 2019 vond een eerste cloud (piloot)gebruikersmeeting plaats waar de reeds actieve en ook enkele nieuwe gebruikers hun plannen en ervaringen presenteerden. In totaal werden 8 cases voorgesteld. Een stand van zaken met betrekking tot de pilootomgeving kwam daar aan bod inclusief een korte demo, en ook de lancering van de documentatie, samen met het nieuwe centrale ondersteuningcontactadres cloud@vscentrum.be

In 2019 hadden dertien projecten toegang tot het cloud platform waarvan acht de infrastructuur regelmatig gebruikten.

Er werden 70 tickets opgelost via het centrale ondersteuningssysteem.

Aantal actieve servers per project



Afbeelding 9. Overzicht actieve projecten Tier-1 Cloud

Een aantal tools zijn in 2019 ontwikkeld om het platform aan te passen aan de noden van de gebruikers.

Bv. een tool op basis van de OpenStack API om projectgebaseerd resource management mogelijk te maken. Per project worden de quota op aantal VMs, totaal geheugen, totale opslag en toegang tot publieke IPs beheerd op basis van een eenvoudige configfile. De tool zorgt er ook voor dat de publieke ssh keys die reeds gekend zijn voor de VSC gebruikersaccounts ook bruikbaar worden in OpenStack, wat de integratie en gebruiksgemak sterk ten goede komt.

Er werd verder overgeschakeld naar OpenStack port-forwarding ter vervanging van een typische “jump host” met een publiek IP of beschikbaar maken van meerdere publieke IPs per VM, wat ons toelaat om de huidige policy van 1 publiek IP per project aan te houden. De tool werd ook uitgebreid om het beheer van port-forwarding te vereenvoudigen voor de gebruikers zelf.

Het standaard OpenStack dashboard onderging ook een vereenvoudiging, waarbij een groot deel van de standaardopties verwijderd of verborgen werden, omdat ze meestal onnodig zijn voor gebruikers. Indien nodig, kunnen deze verwijderde opties eenvoudig later worden teruggezet.

Naast de bestaande pilootomgeving werd een piloottestomgeving opgezet die toelaat om nieuwe diensten, aanpassingen en upgrades te testen ter voorbereiding van dezelfde acties op een productie(piloot)omgeving. Hiervoor werd nog meer hardware van de oude Tier-1a hergebruikt (maart 2019). De bestaande cloud piloot op basis van OpenStack Rocky (RDO) werd geüpdatet naar “Stein” release (oktober 2019).

Nog ter voorbereiding van een productieomgeving werd met RedHat een contract voor 4 jaar (t.e.m. oktober 2023) afgesloten. Naast de OpenStack en “Ceph Storage” subscriptions kocht VSC 25 dagen consultancy aan bij Devoteam. Deze consultancy moet toelaten om sneller van start te kunnen gaan met het “RedHat OpenStack Platform” product en diende ook om een aantal designkeuzes af te toetsen.

Er werd ook nieuwe hardware aangekocht voor de storage, het netwerk en de centrale services van OpenStack in de productieomgeving (inclusief een minimale testomgeving). De dataopslag bedraagt 44 TB flash based (raw, geschatte bruikbare capaciteit tussen de 30 en 15 TB) voor snelle disks voor de VMs en 450 TB disk based (raw, geschatte bruikbare capaciteit tussen 300 en 150 TB) voor gewone disks voor VMs en een gedeelde storage tussen de VMs op basis van NFS.

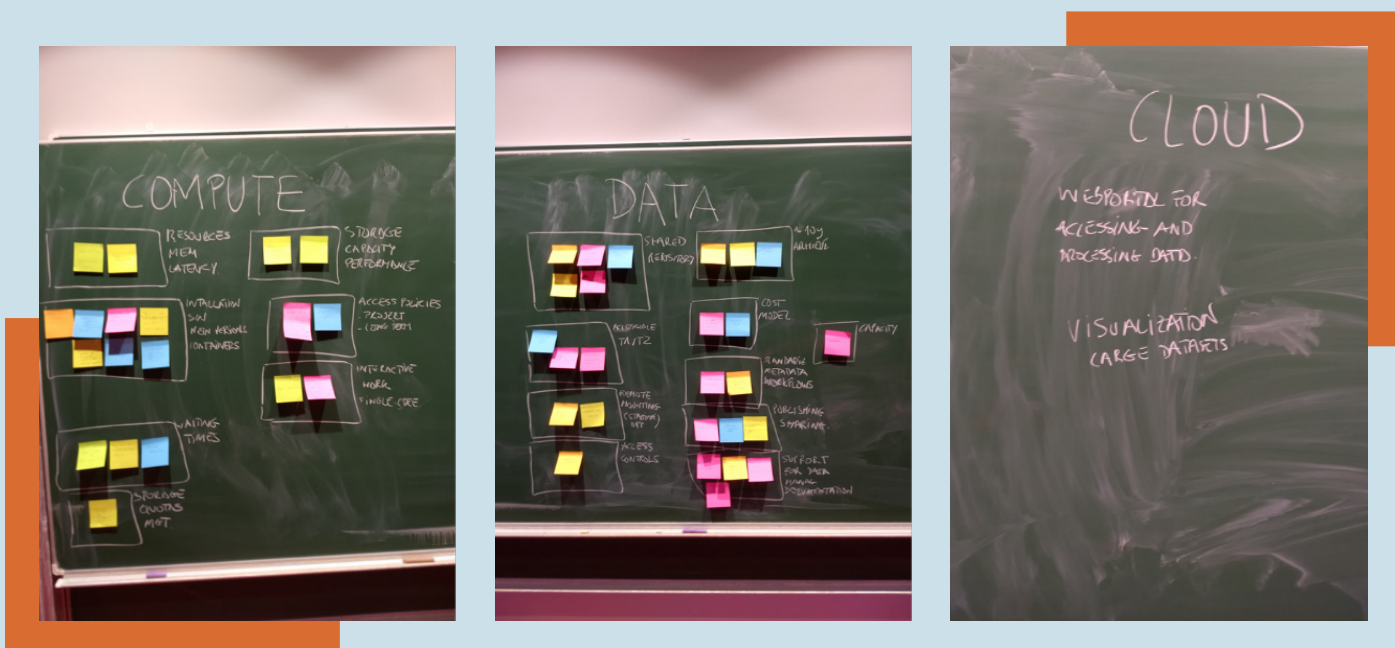
De aankoop ging er nog steeds van uit dat het overgrote deel van het nodige materiaal (de hypervisor servers) zou bestaan uit oude rekenodes van de Tier-1a. Daarvoor werden 96 hypervisors voorbereid bestaande uit telkens 1 oude rekenode en het geheugen van een andere rekenode, voor een totaal van 16 cores en 128GB per server. De originele infiniband aansluitingen werden vervangen door redundante 10 GbE links.

In december 2019 startte VSC met het testen en het opzetten van de testomgeving op basis van RHOSP15, om reeds wat ervaring op te doen en een aantal eerste vereisten na te gaan vooraleer met de consultants van start werd gegaan (januari 2020).

Gebruikersworkshops

De in 2018 naar gebruikers uitgestuurde enquêtes gaven een te beperkt beeld op hun noden. Daarom werd in de tweede helft van 2019 een reeks workshops ingericht om met geselecteerde gebruikers te praten over hun HPC behoeften en daaruit hun vereisten voor de het Supercomputing as a Service platform te kunnen destilleren. De workshops werden ingedeeld volgens zes domeinen:

- Computational Chemistry/Physics/Material Sciences
- Life sciences/Medical Sciences/Hospitals/Bioinformatics/Biology
- Social Sciences/Humanities
- Earth sciences: geology, climate, weather
- Engineering/Technology/Astrophysics
- VIB (workshop in 2020)



Afbeelding 10. VSC Gebruikersworkshop rond Supercomputing as a Service

Deze workshops leverden duidelijkere en concretere informatie op over hoe gebruikers hun onderzoek organiseren, wat gebruikers werkelijk nodig hebben, welke componenten van het Tier-1-platform ze willen gebruiken en de verwachte behoeften aan rekencapaciteit, cloud services en volumes en snelheden van het dataluk. Tijdens de workshops kwamen er ook problemen en beperkingen die gebruikers ervaren wanneer ze de systemen gebruiken, aan bod.

Integratie

In 2019 werkte OMT een aantal aspecten rond integratie uit.

Eerst vonden een aantal netwerkperformantietesten van de Belnet-connecties tussen de vijf universiteiten plaats. In een volgende fase volgt de implementatie van een monitoringtool om een beter inzicht te krijgen op het netwerkverkeer tussen de verschillende componenten van het Tier-1 platform.

Ten tweede is er nu een werkgroep samengesteld om exploitatie- en toegangsmodellen op te bouwen die nodig zijn om de nieuwe diensten naar productie te brengen. Deze modellen zijn niet alleen nodig om de duurzaamheid van deze diensten te garanderen, maar

ook kunnen ze eventueel worden gebruikt door de gebruikers wanneer ze financiering willen aanvragen (FWO, EWI, EU, ...). Deze werkgroep heeft als doel enerzijds de kost van de verschillende componenten te analyseren (CTO analyse) en anderzijds de mogelijke financieringsmodellen te onderzoeken en een voorstel op te stellen aan FWO.

Ten slotte is er een consulting opdracht afgesloten met het consultancybedrijf Deloitte. Bedoeling is om advies te krijgen omtrent het behalen van een ISO 27001 certificaat voor de Tier-1 Compute infrastructuur. Deze opdracht zal in de eerste helft van 2020 worden uitgevoerd.

“

Het onderzoek bij CMM (Center for Molecular Modeling) zou zonder twijfel onmogelijk zijn zonder de HPC-infrastructuur van VSC. Ik kan het VSC daarom sterk aanbevelen voor het uitvoeren van zwaar rekenwerk.

”

SVEN ROGGE

Postdoctoraal onderzoeker
Universiteit Gent.



Tier-2 infrastructuur

Beschikbare infrastructuur

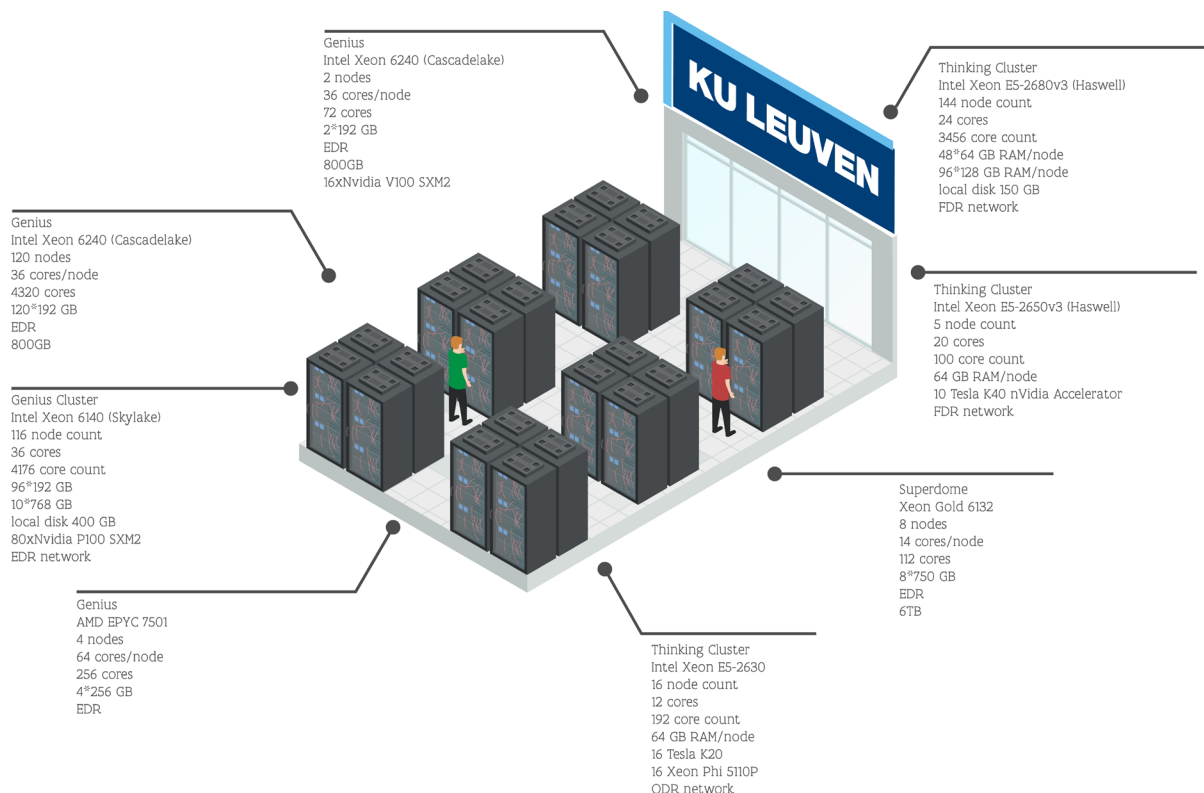
In deze sectie wordt een overzicht gegeven van de Tier-2 infrastructuur die binnen de verschillende Vlaamse universiteiten beschikbaar is. Het gebruik ervan wordt eveneens geïllustreerd.

KU Leuven en Universiteit Hasselt

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

De infrastructuur bestaat uit:

- 2 clusters, 7 partities
- 897 TF
- 15692 CPU /
- 74 TB geheugen



Afbeelding 11. Tier-2 infrastructuur KU Leuven - UHasselt

In 2019 werd Genius, de meest recente cluster, meer dan verdubbeld wat betreft CPU-capaciteit. 120 nodes met een nieuwe generatie processoren (Intel Cascade Lake) werden toegevoegd en in gebruik genomen. Met deze uitbreiding kan de uitfasering van de oude ThinKing cluster opgevangen worden. Verder is de reeds aanzienlijke GPU-sectie uitgebreid met 2 nodes die elk 8 GPU-devices per node bevatten. Dit kan bijkomende functionaliteiten bieden aan toepassingen die goed schalen over meerdere GPU's binnen 1 node. En tenslotte zijn ook 4 nodes toegevoegd met AMD CPU's. Dit geeft de gebruikers de mogelijkheid om deze CPU's grondig te testen en kan helpen bij het voorbereiden van toekomstige aankopen.

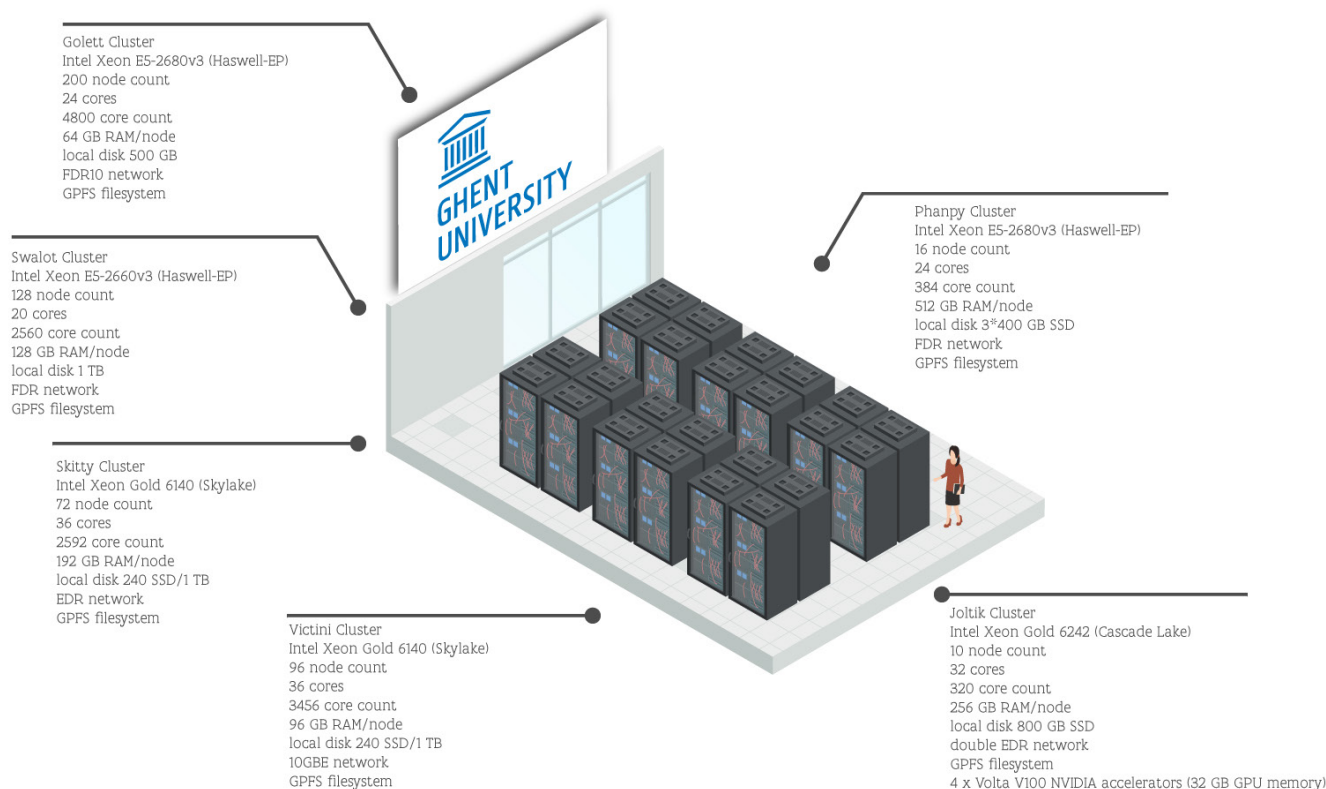
De shared memory machine Cerebro (SGI UV 2000) werd in 2019 uit dienst genomen. Toepassingen die nood hebben aan zeer grote hoeveelheden geheugen kunnen uitgevoerd worden op een nieuwe shared memory machine (Superdome, 6TB RAM). Deze is in de Genius cluster opgenomen.

- De belangrijkste kenmerken van de uitbreiding zijn:
- 360 TFlops/s piek performantie
- 120 nodes met Intel Xeon 6240 (Cascade Lake) (36 Cores, 2.6 Ghz, 192 GB)
- 2 nodes met elk 8 V100 NVIDIA GPU's
- EDR interconnect
- Integratie met het bestaande parallel filesysteem

Universiteit Gent

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

- 6 clusters
- 582 TF
- 15.760 CPU cores
- 67 TB geheugen



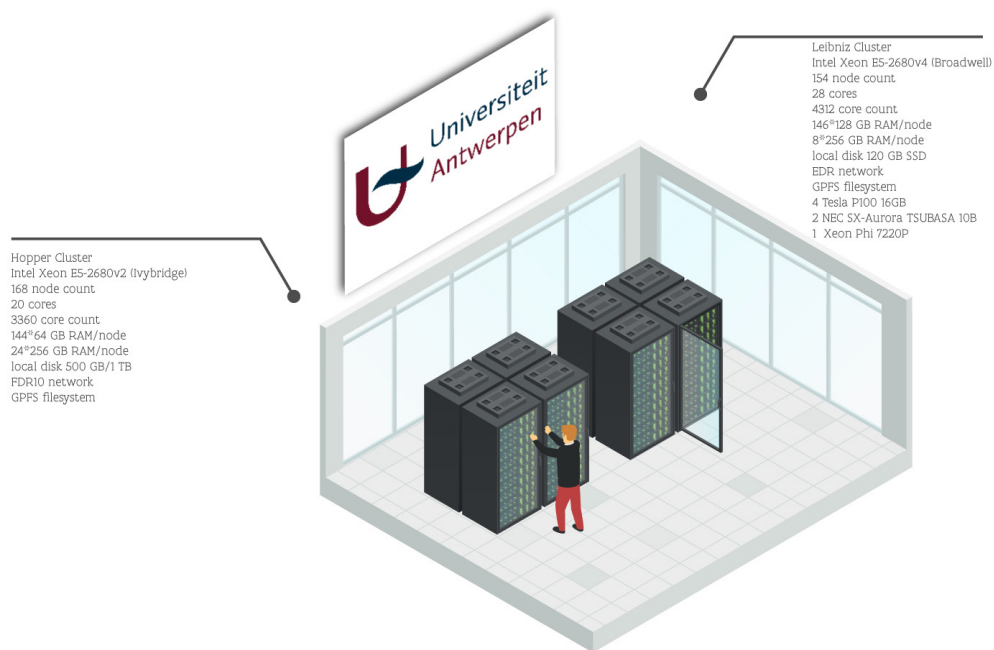
Afbeelding 12. Tier-2 infrastructuur UGent

De Tier-2 infrastructuur bij UGent is opgebouwd uit verschillende clusters, in functie van specifieke kenmerken. In de loop van 2019 werd cluster delcatty gedecommissioneerd. Tevens werd gewerkt aan de installatie van een GPU cluster, die in de loop van 2020 in productie zal komen.

Universiteit Antwerpen

De Tier-2 infrastructuur bestaat uit:

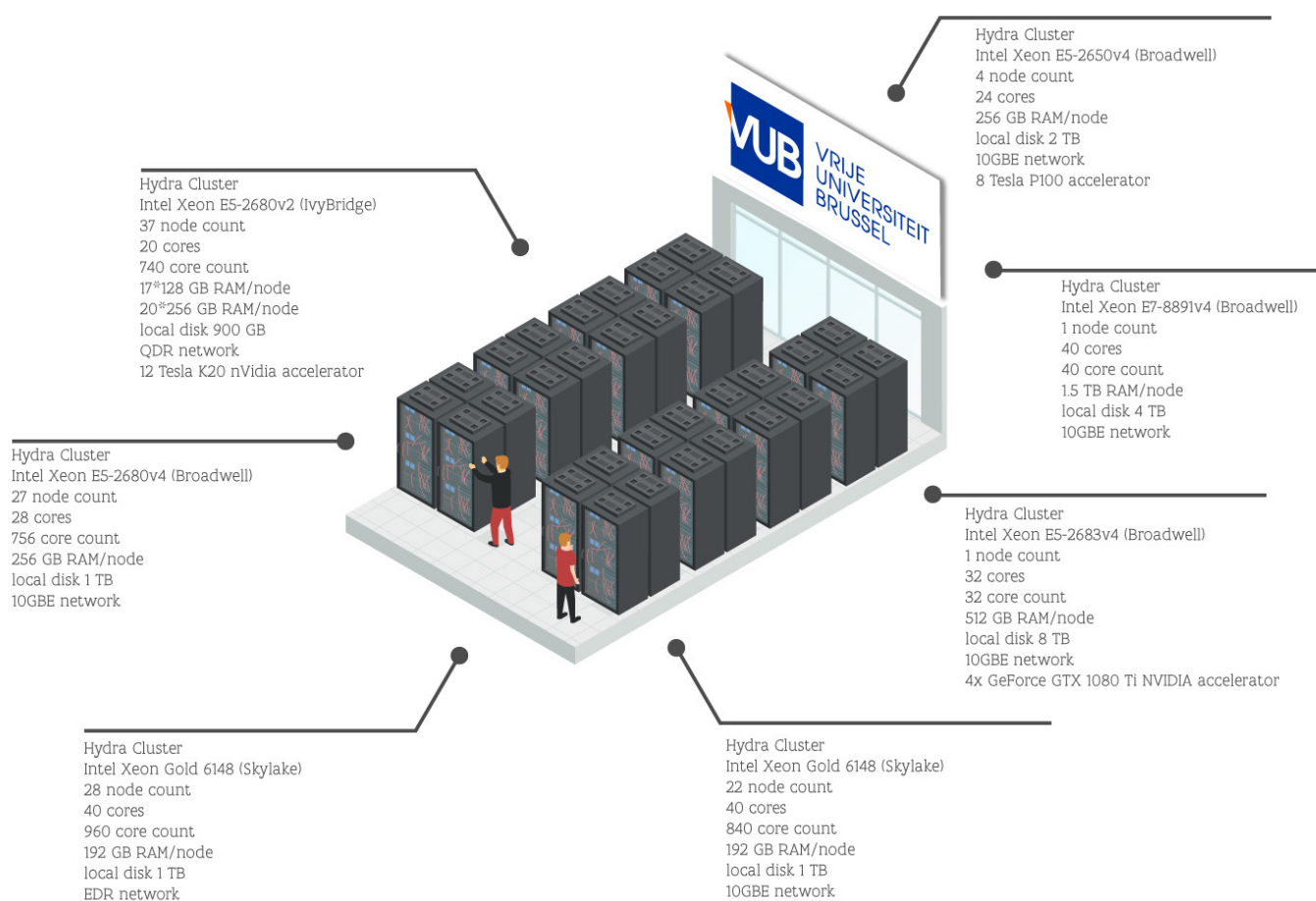
- 2 clusters (Hopper en Leibniz), verdeeld in 4 partities
- 238 TF
- 7672 CPU cores, 7236 accelerator cores (Tesla P100, NEC SX-Aurora TSUBASA 10B en Xeon Phi 7220P)
- 36 TB geheugen



Afbeelding 13. Tier-2 infrastructuur UAntwerpen

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

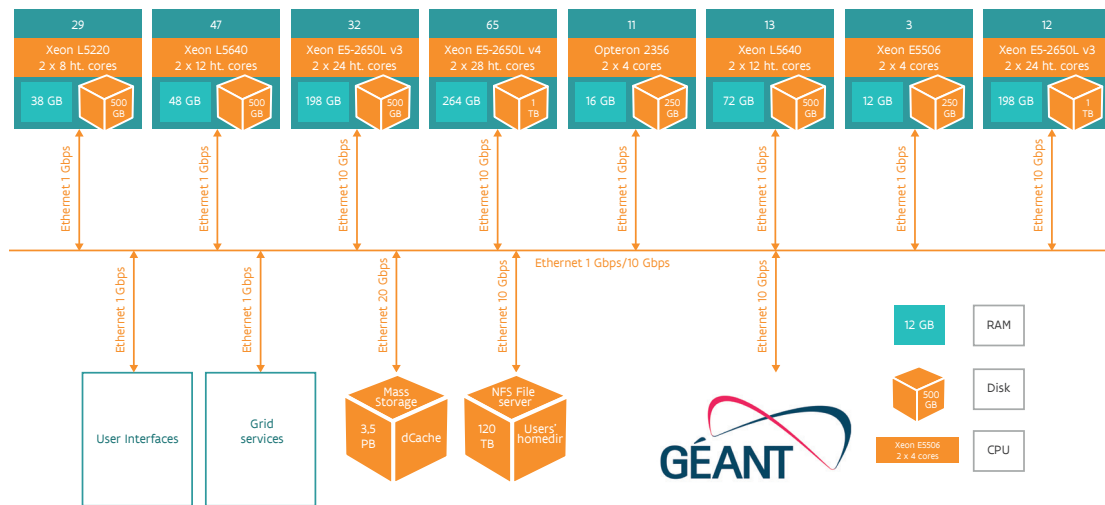
- 1 cluster / 6 partities
- 17,1 TF
- 3336 CPU cores / 32256 GPGPU cores
- 22,2 TB geheugen



Afbeelding 14. TIER-2 infrastructuur VUB

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

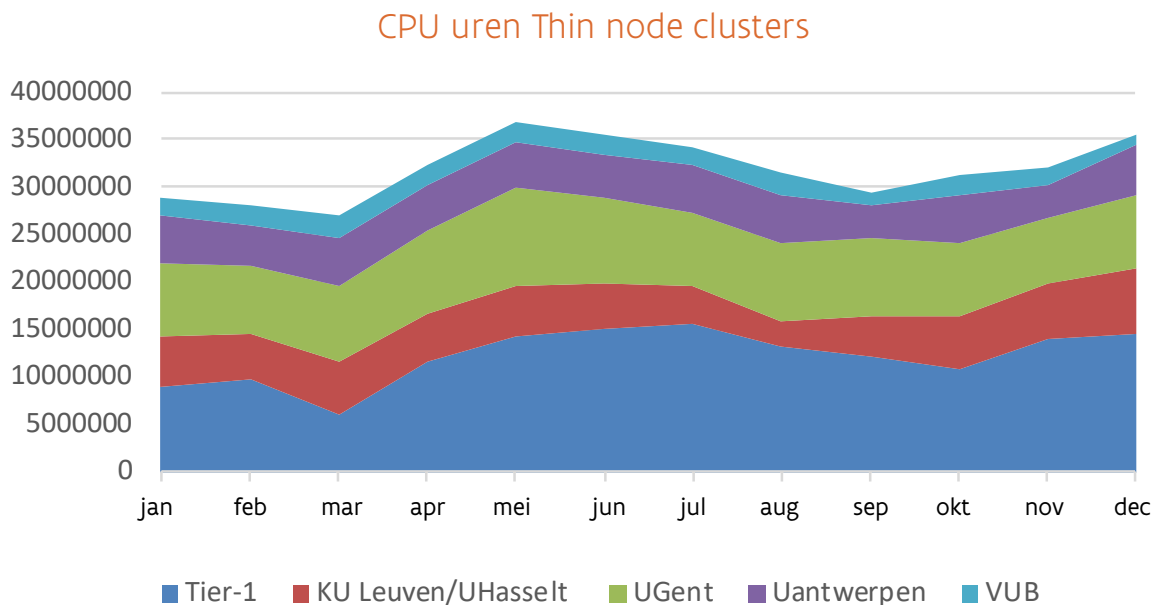
Naast haar eigen Tier-2-infrastructuur beheert de VUB - samen met de ULB - ook de grid-infrastructuur, die onder meer gebruikt wordt voor het verwerken van de gegevens die worden verzameld bij het uitvoeren van experimenten met de Large Hydron Collider (HPC) aan het CERN, maar ook binnen de Vlaamse onderzoeksgemeenschap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



Afbeelding 15. GRID infrastructuur VUB

Exploitatie en gebruik

Na de beschrijving van de infrastructuur volgt hier een overzicht van het gebruik van de Tier-2. Voor het rapporteren van het gebruik beschikt VSC over een centrale XDMoD infrastructuur die alle data van de verschillende clusters verzamelt en de nodige overzichten genereert.

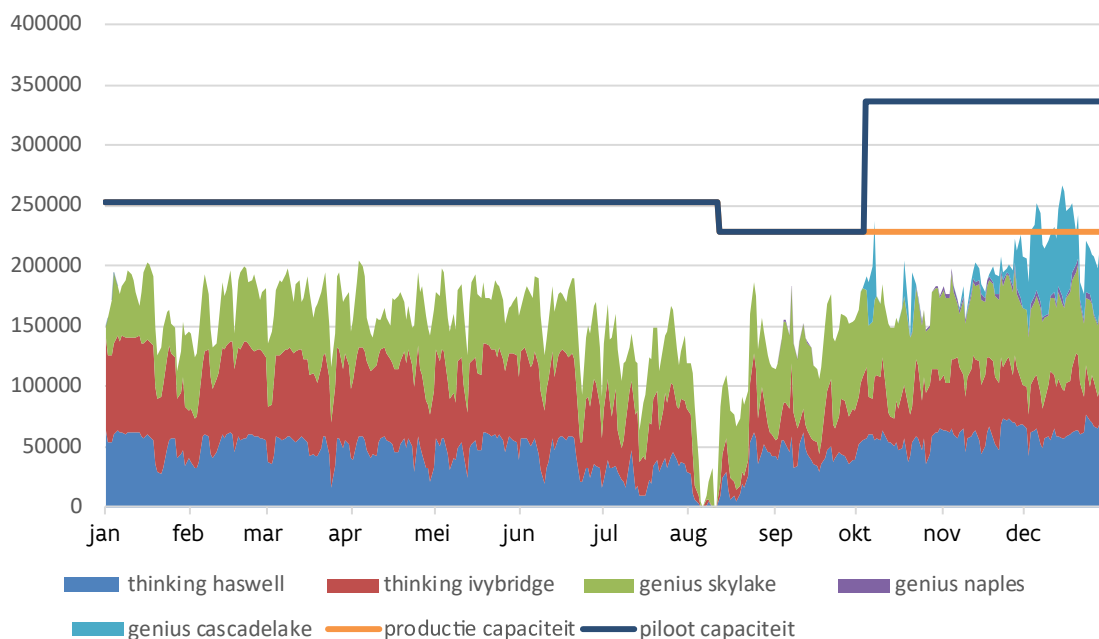


Afbeelding 16. Gebruik uitgedrukt in core-uren van alle VSC clusters

Afbeelding 16 geeft het gecumuleerde gebruik weer van de Tier-1 en Tier-2 infrastructuur. Er is een duidelijk stijging merkbaar. Het totaal aantal core-uren blijft verder stijgen in 2019. De Tier-2 infrastructuur bij de verschillende instellingen werd vernieuwd en/of uitgebreid. De verdubbeling van de Tier-1 capaciteit die in de zomer periode door piloot projecten werd gebruikt en vanaf november in productie fase is gegaan, is ook duidelijk zichtbaar.

De kaap van 35 miljoen core-uren werd regelmatig overschreden. Deze cijfers bevatten enkel de thin node clusters en niet de GPU-computing of grid-computing.

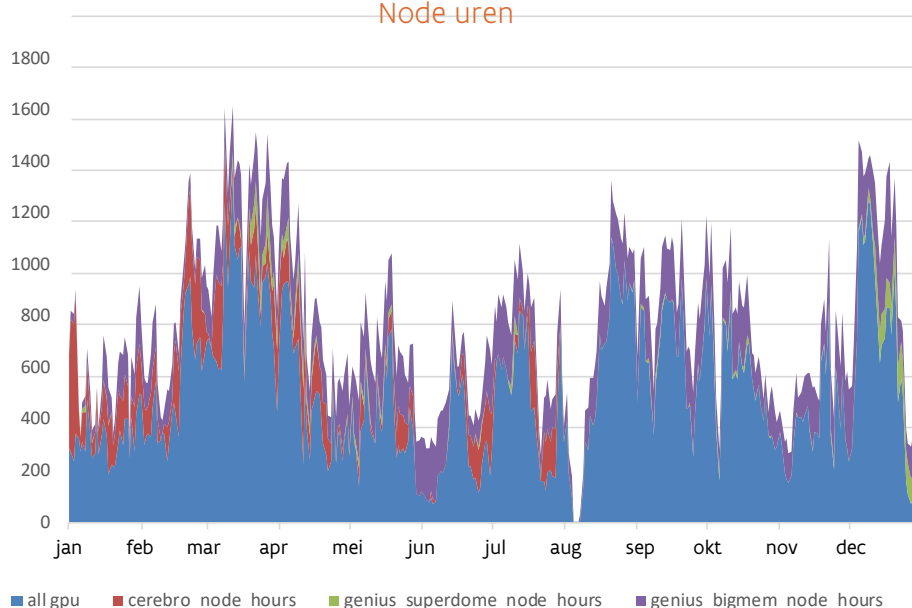
Gebruikte CPU-uren op thin node clusters KU Leuven & UHasselt



Afbeelding 17. Gebruikte core-uren op de KU Leuven/U Hasselt thin node cluster

Afbeelding 17 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. In de grafiek is er in de zomerperiode een belangrijke onderbreking te zien. Tijdens deze periode installeerde VSC het OS van Thinking naar een nieuwere versie, verwijderde VSC Cerebro en migreerde de langetermijnopslag naar een nieuw systeem. Ook installeerde het team de nieuwe Cascade Lake nodes die vanaf november door de onderzoekers gebruikt konden worden in een pilootfase.

Node uren



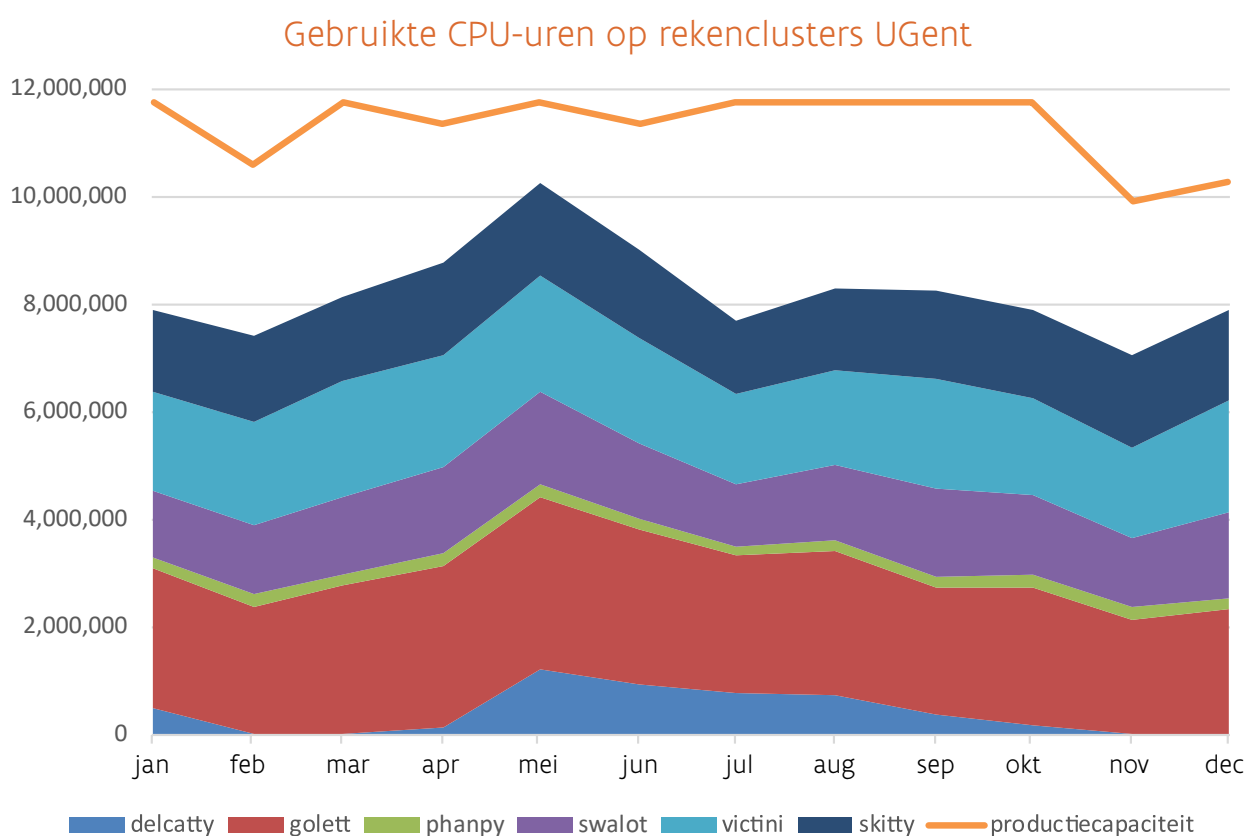
Afbeelding 18. Gebruik van shared memory & acceleratoren aan de KU Leuven

Buiten de thin node rekencluster is er aan de KU Leuven ook nog een shared memory machine en een opstelling met acceleratoren. Het gebruik van deze machines wordt uitgedrukt in node-uren en niet in core-uren. Dit komt omdat dikwijls de volledige node wordt gebruikt omwille van het geheugen dat nodig is of omwille van de acceleratoren. In 2019 is Superdome in gebruik genomen. Deze machine moet de workload van Cerebro kunnen opvangen.

Verder bevat de Genus cluster ook een aantal nodes met meer geheugen (Big Mem in de grafiek).

De bezetting van de GPU nodes zoals getoond in Afbeelding 22 heeft betrekking op de 80 GPU devices die beschikbaar zijn in de Genius cluster. In 2019 zijn hier nog 16 nieuwere generatie GPU's aan toegevoegd.

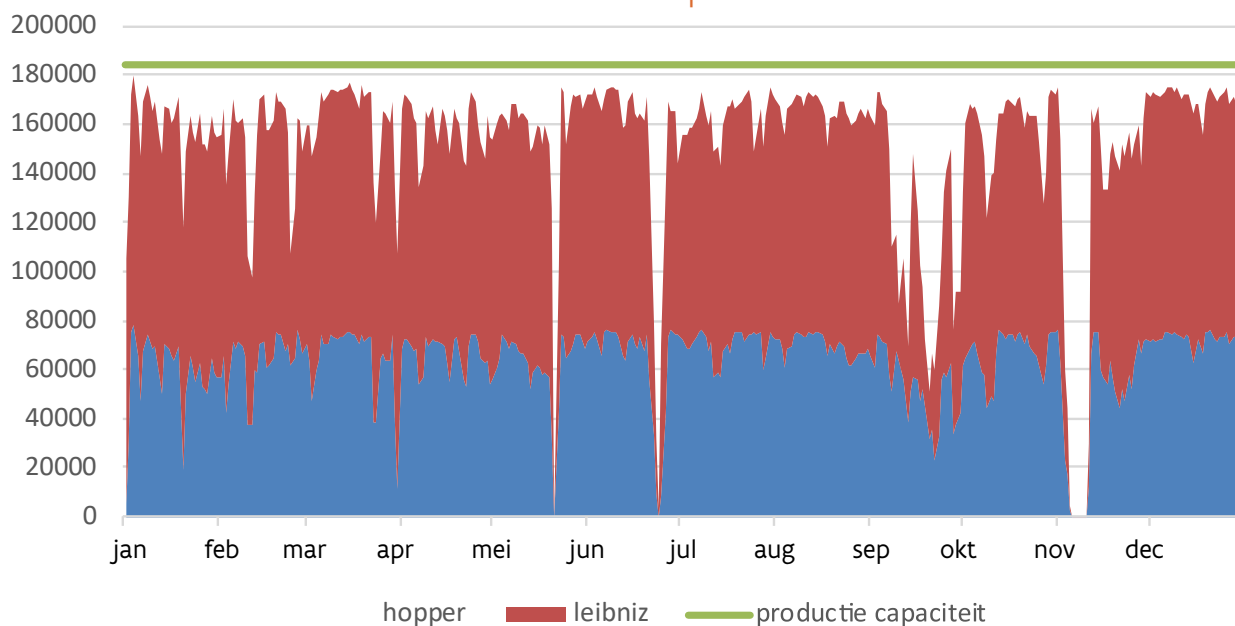
Deze meer gespecialiseerde secties worden ook vaker cross-site gebruikt.



Afbeelding 19. Gebruik van de Tier-2 infrastructuur aan de Universiteit Gent

In 2019 werden in totaal 95.559.679 core-uren verbruikt op de Tier-2-rekenclusters van de Universiteit Gent. Dit zou overeenkomen met 10.933 jaar rekenwerk op één enkele core. Het gemiddelde effectieve gebruikspercentage bedraagt 73% voor alle clusters aan UGent in 2019. Dit percentage geeft aan hoeveel van het theoretisch beschikbare rekenvermogen in één jaar is gebruikt (hierbij is geen rekening gehouden met uitvaltijden, dus de werkelijke waarde is hoger).

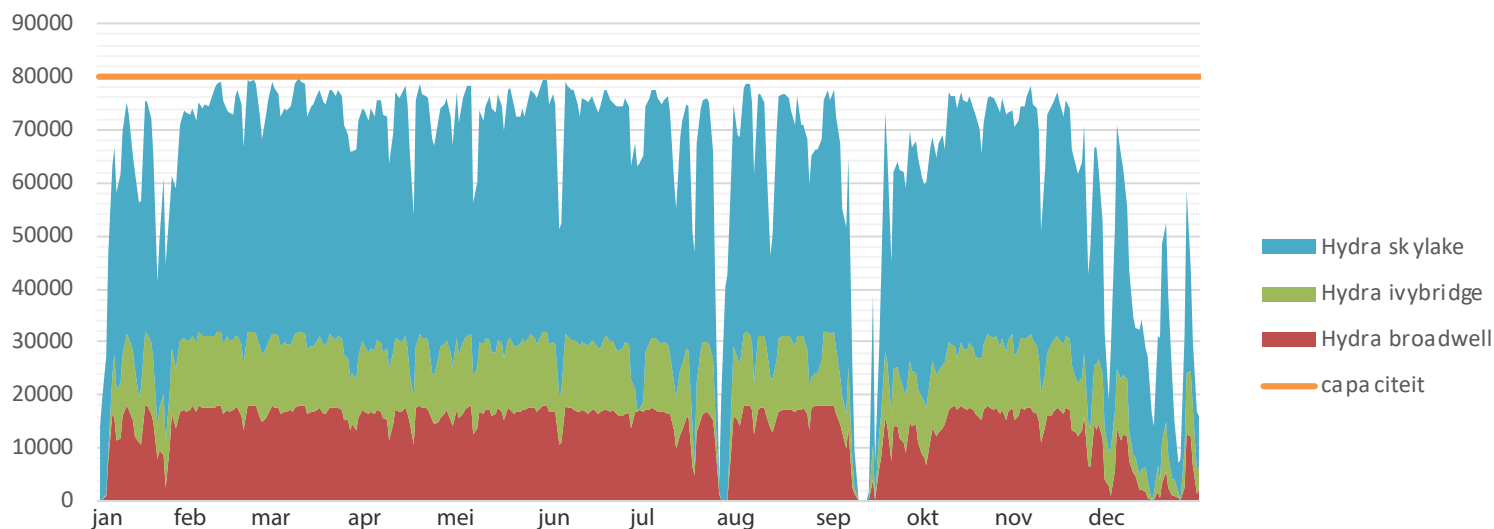
Gebruikte CPU-uren op thin node clusters UAntwerpen



Afbeelding 20. Gebruik van de Tier-2 infrastructuur aan de UAntwerpen

De grafiek van afbeelding 20 stelt het cumulatieve gebruik in 2019 voor van de clusters Hopper en Leibniz aan de Universiteit Antwerpen. Behalve een aangekondigde onderbreking in juni, waren er nog onvoorziene onderbrekingen in mei (één dag, probleem met koelinstallatie) en november (één week, probleem met UPS infrastructuur). In de mate van het mogelijke worden "rolling upgrades" toegepast om de impact voor de gebruikers tot een minimum te beperken. Die onderbrekingen buiten beschouwing gelaten, zijn de clusters zeer goed bezet. Eind 2019 werden bestellingen geplaatst voor een nieuw storage systeem en de vervanging van Hopper.

Gebruikte CPU-uren op thin node clusters VUB

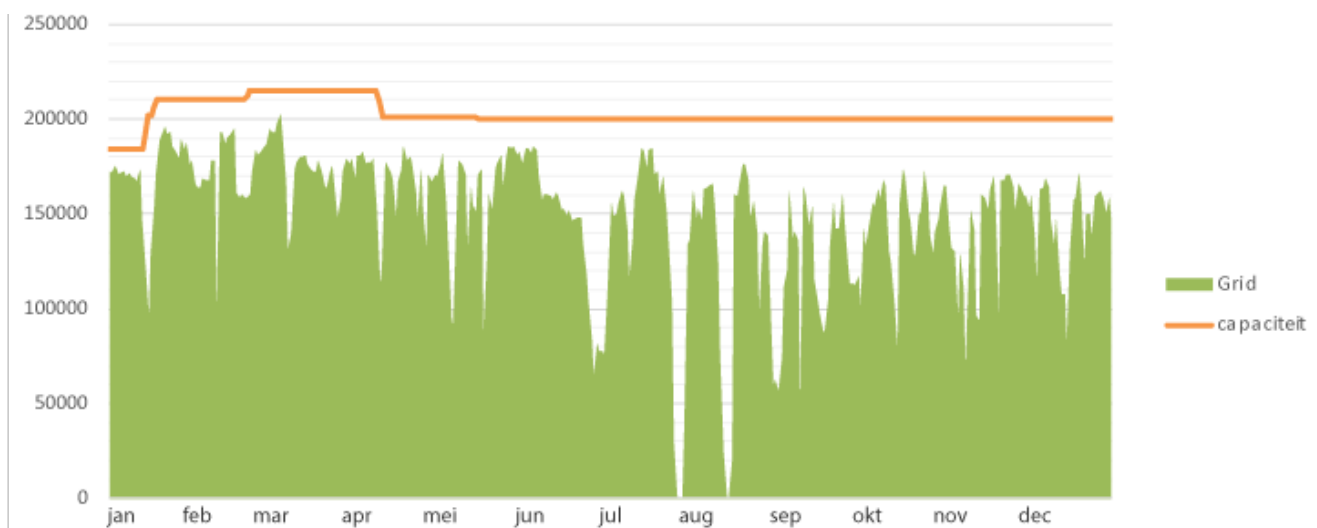


Afbeelding 21. Gebruik van de Tier-2 VUB infrastructuur

In 2019 werd er geen hardware toegevoegd of verwijderd uit Hydra. Het gemiddelde gebruik lag op 81,18% wat aanzienlijk beter is dan vorig jaar. Er was één gepland onderhoud begin september alsook een paar keren problemen met de koeling. In juli is de koeling van het datacenter even kopje onder gegaan op de warmste dag van het jaar. Er zijn verschillende maatregelen genomen om een herhaling van dit voorval te voorkomen. Daarnaast worden een aantal componenten van de koelinstallatie vervangen. In september is er een grootschalig onderhoud geweest aan Hydra: we zijn overgeschakeld op een nieuw systeem om de cluster te beheren (met behulp van de collega's van de UGent). Dit maakt dat we in de toekomst veel sneller en efficiënter kunnen werken. Daarnaast zijn er ook talloze kleine verbeteringen gebeurd die de algemene stabiliteit en het gebruiksgemak van de cluster moeten verbeteren.

Om historische redenen bestonden er op Hydra ook nog VUB specifiek accounts naast VSC accounts. In december hebben we alle VUB gebruikers gemigreerd naar VSC accounts. Dit verklaart deels het fors lagere gebruik van de cluster in december.

Gebruikte CPU-uren op grid cluster VUB



Afbeelding 22. Gebruik van BEGrid cluster aan de VUB

De Begrid cluster is heterogeen: de cluster bestaat uit verschillende series van workernodes met verschillende generaties Intel CPUs (voornamelijk Haswell en Broadwell). Het doel van de cluster is voornamelijk om data intensive, single-core berekeningen te doen en de grote van de cluster wordt uitgedrukt in job slots wat overeenkomt met 1 hyper-threaded CPU core. Het gemiddelde gebruik van de cluster is ongeveer 75%.

In begin 2019 werd de capaciteit van de cluster uitgebreid tot 8320 job slots. Er werden 24 Xeon Silver worker nodes en 4 Xeon Gold workernodes toegevoegd. In juni werd de capaciteit van het dCache opslag systeem werd uitgebreid tot 7 PB. Er was een gepland onderhoud op 9 februari wegens een aanpassing aan het netwerk en het jaarlijkse onderhoud was van 12 tot 16 augustus. Daarnaast was er het falen van de koeling in de periode 25-29 juli.

Toekennen rekentijd Tier-2

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

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

De onderzoekers van VUB en haar associatie hebben volledig vrije toegang tot de eigen Tier-2 infrastructuur. De gridcluster is beschikbaar na aanvraag bij de verantwoordelijke van deze infrastructuur. Het gebruik van de Tier-2 infrastructuur is kosteloos.

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

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

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

Instelling	Compute time in corehours			
	UAntwerpen	VUB	UGent	KU Leuven/UHasselt
@KU Leuven/UHasselt	50	7 323	248 859	
@UGent	1 910 544	49 648		199 824
@UAntwerpen		92	0,06	0,17
@VUB	0,00		111 317	1,43

Tabel 4. Overzicht van het cross-site rekenen op de VSC infrastructuur

Dit zogenaamde “cross-site” gebruik wordt nauwgezet opgevolgd.

Naast het “cross-site” gebruik van Tier-2-infrastructuur, wordt ook de grid-infrastructuur, beheerd door VUB/ULB, intensief gebruikt door onderzoekers van verschillende instellingen: VUB, UAntwerpen en UGent.

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

Gebruikersondersteuning

De gebruikersondersteuning bestaat uit verschillende componenten:

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

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

Beantwoorden van vragen van gebruikers

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

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

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

	KU Leuven / UHasselt	UGent	UAntwerpen	VUB
Tier-2 + grid				
Accounts	834	339	70	297
Software	620	247	296	406
Overig	1027	963	120	297
Tier-1				
Accounts	31			
Software	89			
Overig	128	101	8	
Totaal	2729	1650	494	1000

Tabel 5. Overzicht helpdesk per instelling voor Tier-1 en Tier-2





Bijeenkomsten met gebruikers / specifieke ondersteuning

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

Enkele voorbeelden:

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

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

KU Leuven en Universiteit Hasselt

De dagdagelijkse support behandelt vragen i.v.m. accounts, basisgebruik van de cluster en software-installaties. Deze vragen komen van gebruikers uit groepen die reeds lange tijd de cluster gebruiken. De VSC-infrastructuur kenbaar maken aan nieuwe onderzoeksgroepen is een blijvend werk. Maar ook binnen groepen die de cluster al gebruiken kunnen specifieke acties helpen het clustergebruik te stimuleren. Hiermee kan meer computationeel werk efficiënter op een kortere tijd uitgevoerd worden, vergeleken met lokale infrastructuur zoals workstations en desktops. Nieuwe onderzoekers worden vertrouwd gemaakt met het gebruik van de cluster in de reguliere introductie sessies of door middel van een een-op-een consult. Deze laatste zijn zeer belangrijk om gedurende het hele jaar door nieuwe onderzoekers te helpen met de start. Na een consult van een tweetal uur heeft de onderzoeker meestal al voldoende informatie om productief te zijn op de cluster, mits enige algemene voorkennis van Linux en HPC. Indien een nieuwe groep wenst te starten op de cluster worden er ook specifieke workshops georganiseerd.

In 2019 zijn een aantal specifieke ondersteuning verder gezet.

Voor Universiteit Hasselt lag de klemtoon vooral op het aantrekken van nieuwe gebruikersgroepen en enkele faculteiten kregen bijzondere ondersteuning.

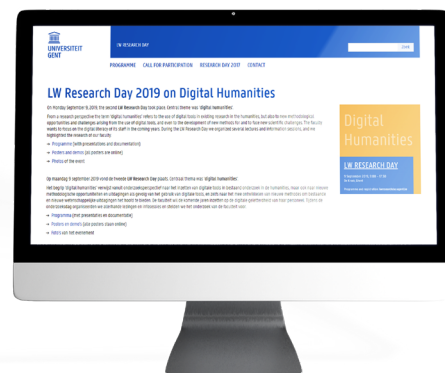
Universiteit Gent

Doorheen het jaar werden verscheidene gebruikersmeetings georganiseerd in respons op specifieke vragen van onderzoekers.

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

- 16/01/2019, algemene presentatie en rondleiding voor studenten accounting/informatics on Big Data (Bernardustechnicum, Oudenaarde)
- 5/02/2019, Informatiesessie FWO call 2019 voor Research Grants, Research Projects and SBO
- 30/04/2019, algemene presentatie en rondleiding voor studenten Bachelor of Science in Engineering Technology (UGent)
- 14/05/2019, algemene presentatie en rondleiding voor studenten 'Technology and networks' (Scholengroep Leiepoort, Campus Sint-Vincentius, Deinze)

Op 9 september 2019 organiseerde de faculteit Letteren en Wijsbegeerte van de UGent een onderzoeksdag rond 'Digital Humanities' (De Krook, Gent). Met dit evenement gaf de faculteit duidelijk aan de komende jaren te willen focussen op de digitale geletterdheid van haar medewerkers (<https://www.lwresearchday.ugent.be>). HPC-UGent presenteerde een poster en verzamelde feedback van deelnemers.



Universiteit Antwerpen

Eenzijds behandelen we vragen van reeds bestaande gebruikers en proberen dat rekenwerk zo optimaal mogelijk te organiseren en zo efficiënt mogelijk uit te voeren door pro-actief te werken. Een goed onderhouden softwarestack en ondersteunende tools spelen hierbij een belangrijke rol. Zo is er actieve monitoring van de jobs. Jobs met een, op het eerste zicht, lagere efficiëntie worden in overleg met de gebruiker opgevolgd en, indien nodig, aangepast. Anderzijds maken we het VSC ook kenbaar bij andere onderzoekers om hen te wijzen op de mogelijke voordelen van het gebruik van de centrale infrastructuur. Hiervoor gaan we de onderzoekers/onderzoeksgroepen specifiek opzoeken. Inmiddels hebben onderzoekers uit acht van de negen faculteiten hun weg gevonden naar de Tier-2 infrastructuur. In het afgelopen jaar zien we een duidelijke toename van gebruikers uit het departement biologie en vanuit het Instituut voor Tropische Geneeskunde. Met onderzoekers die een Tier-1 aanvraag willen indienen, wordt het projectvoorstel doorgenomen en worden, indien gewenst, suggesties tot aanpassingen gedaan.

Jaarlijks worden ook twee intro-sessies georganiseerd (februari/maart en oktober) die bestaan uit 3 delen: "Linux introduction" (2 halve dagen), "Supercomputers for starters" (1 halve dag) en "HPC@UAntwerp introduction" (2 halve dagen). Het is immers niet alleen noodzakelijk te kunnen werken met de omgeving, maar ook te beschikken over de nodige achtergrondkennis. Daarnaast was er ook in 2019 een sessie over "Scientific Python".

Naast de infosessies met onderzoekers van onderzoeksgroepen uit departementen die reeds actief zijn, hebben we bv. ook rond de tafel gezeten met de VIB groep binnen UAntwerpen. Door een grotere nadruk die daar gelegd zal worden op het computationele, hebben we de mogelijkheden van het VSC en de infrastructuur in Antwerpen toegelicht.

Daarnaast is er de begeleiding van masterstudenten bij het gebruik van de infrastructuur, en ondersteuning bij de aanvragen voor rekentijd op Tier-1 en bij computationele aspecten van (interuniversitaire) projectaanvragen. En is er de actieve medewerking binnen Europese projecten als PRACE en EuroHPC.

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

Aan de UAntwerpen is sinds 2006 een gebruikersgroep actief die twee keer per jaar samenkomt. De gebruikersgroep bestaat uit afgevaardigden van 13 groepen.

Vrije Universiteit Brussel

Naast het blijven volgen van de bestaande gebruikers op Tier-2 en Tier-1 niveau werd ingezet op het actief identificeren van nieuwe potentiële Tier-1 gebruikers en om hen in eerste instantie te stimuleren om een starting grant voor rekentijd aan te vragen. Dit leidde tot een stijging van het aantal Tier 1 aanvragen van VUB onderzoekers. Daarnaast blijven we sterk inzetten op ondersteuning van de gebruikers: de onderzoekers vinden ook steeds makkelijker hun weg naar de HPC ondersteuning voor allerlei vragen. We zijn ook begonnen met actief de gebruikers contacteren als we merken dat hun jobs niet efficiënt gebruik maken van de cluster.

De VUB heeft een HPC-gebruikerscommissie die elk half jaar samenkomt, waarin wordt teruggekoppeld vanuit het VSC, en die het gebruik en de noden voor HPC opvolgt. De gebruikerscommissie omvat leden uit alle faculteiten, uit het rekencentrum en vanuit het departement onderzoeksbeleid. Qua cursussen worden tweemaal per jaar de cursussen "Introduction to Linux", "Introduction to the use of HPC at the VUB" en "Introduction to GRID computing" georganiseerd. Er werden ook gebruikersmeetings georganiseerd met een aantal groepen om hun specifieke noden en/of problemen met HPC in kaart te brengen:

- Dept. Of Mechanics of Materials and Constructions
- B2 institute
- IRIBHM institute
- Climate group
- Quantum Chemistry group
- Dept. of Astronomy and Astrophysics

Personeel

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

Subsidiëring

Eenzijds heeft elke universiteit personeel nodig voor de exploitatie van de Tier-2 infrastructuur en de ondersteuning van de eindgebruikers. Hiervoor worden 20 VTE gesubsidieerd. Anderzijds worden aan de instelling die Tier-1 infrastructuur huisvest, VTE toegekend. Hiertoe werden in 2016 2 VTE toegekend voor de exploitatie van de Tier-1a (UGent) en 2 VTE toegekend voor Tier-1b (KU Leuven). Daarenboven worden voor de uitbreiding van de Tier-1 services 2 VTE toegevoegd. In 2019 werden deze VTE ingezet om het operationeel management team te bemannen. Dit team staat in 2019 in voor de concretisering van het Tier-1 project, "Supercomputing as a service". Daarenboven werd in 2019 binnen dit Tier-1 SaaS project 2 VTE toegewezen aan de domeinen Cloud en Data. Deze VTE werden toegewezen aan UGent en KU Leuven.

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	5
UAntwerpen	4
VUB	3
UHasselt	2,5
KU Leuven	6

Instelling	aantal gesubsidieerde VTE voor Tier-1 exploitatie en operationeel management
UGent	2,6
UAntwerpen	0,6
KU Leuven	3,6

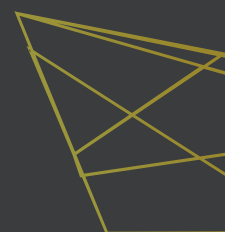
Tabel 6. Aantal gesubsidieerde VTE voor Tier-1 en Tier-2

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 34,9 VTE in voor de HPC-exploitatie en ondersteuning. Een volledige personeelslijst is toegevoegd als bijlage.

Instelling	Aantal VTE ingezet voor HPC	Aantal koppen betrokken bij de HPC-exploitatie en ondersteuning
UGent	10,4	15
UAntwerpen	5,4	9
VUB	5,2	15
UHasselt	1,5	2
KU Leuven	12,5	20
Totaal	34,9	61

Tabel 7. Aantal VTE per instelling



Profielen

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

Infrastructuurbeheerders

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

Systeembeheerders

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

Gebruikersondersteuners

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

Wetenschappelijke of gevorderde ondersteuners

Deze personen staan in voor het optimaliseren van de gebruikerssoftware op de HPC-machines. Hiervoor werken ze dikwijls een langere tijd samen met één gebruiker en geven gevorderde opleidingen. Deze personen staan ook in voor het bijsturen van de scheduler software zodat die beantwoordt aan de noden van de gebruikers. Ze staan in voor het opzetten van acties met als doel het bewustmaken van de meerwaarde van HPC en het aantrekken van nieuwe gebruikers. Ze werken mee aan de aankoopdossiers rond de user requirements en de benchmarks.

Projectleiders

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

Outreach

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

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

	Infrastructuurbeheer	Systeembeheer	Basis gebruikerondersteuning	Wetenschappelijke of gevorderde ondersteuning	Management	Outreach
KU Leuven	5	6	6	6	4	7
UAntwerpen	1	3	6	4	2	2
UGent	6	8	5	5	3	4
UHasselt			1	1	2	1
VUB	5	4	9	5	4	3
Totaal	17	21	27	21	14	18

Tabel 8. Aantal personen per activiteit

Gevorderde ondersteuning

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

Computational Chemistry

6 personen

Physics

8 personen

Engineering

4 personen

Mathematics (Numerical Methods)

4 personen

Computer science

10 personen

Bioinformatics

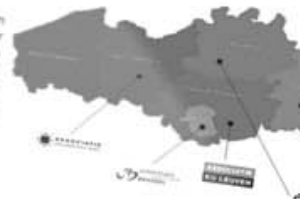
4 personen



Vlaams Supercomputer Cent

Who we are?

The Flemish Supercomputer Center (Vlaams Supercomputer Centrum - VSC) is a partnership between the five Flemish universities and their university associations: Associatie Universiteit & Hogescholen Antwerpen, Associatie Universiteit & Hogescholen Gent, Associatie KU Leuven and Associatie Universiteit-Hogescholen Limburg. This consortium brings together knowhow in scientific and technical computing including high performance computing, high throughput computing, cloud computing and data processing in Flanders, and houses infrastructure in four hubs: the datacenters of the universities of Antwerp, Brussels, Ghent and Leuven. The VSC is managed by the Research Fund - Flanders (FWO).



Our Mission & Vision

The VSC encourages the use of scientific and technical computing in the Flemish academic and industry. To this end, it offers infrastructure, training and services. In addition, VSC acts as a lever to promote scientific and technical computing and its added value to society.

Outreach naar bedrijven

Het VSC maakte in 2019 verder werk van z'n ambitie om als een dienstencentrum te opereren waar bedrijven terecht kunnen wanneer ze vernieuwende computationele technieken willen incorporeren in hun business.

Plan van aanpak

Een belangrijke doelstelling van het VSC is de kennis over en het gebruik van HPC te stimuleren bij de Vlaamse bedrijfswereld. Om die doelstelling te realiseren, werkte het VSC een plan van aanpak uit.

In de uitbouw van dit plan hield het VSC rekening met de reeds gelegde contacten, de haalbaarheid van nieuwe initiatieven en efficiënte manieren om impact te creëren.

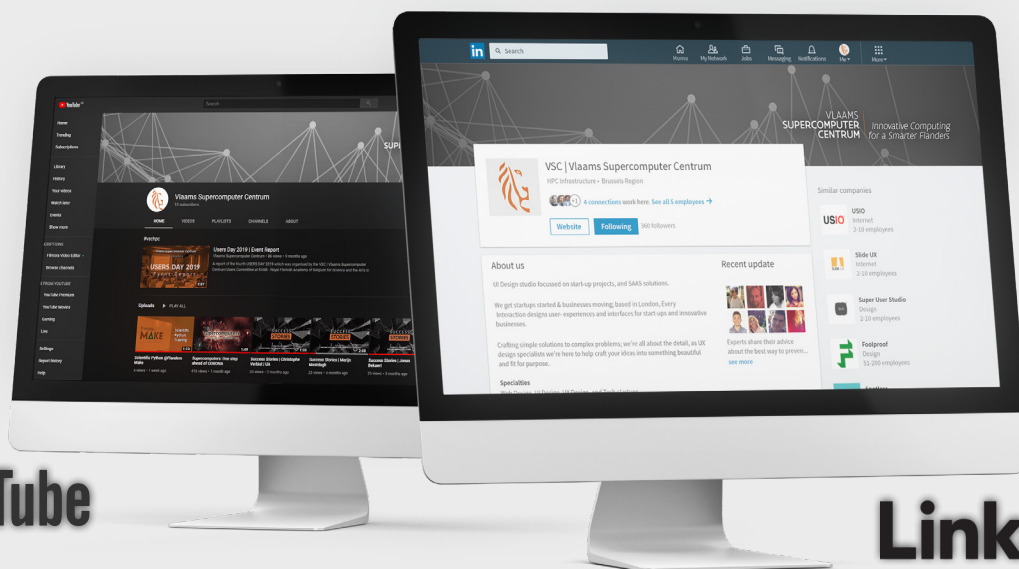
Concreet werd er gekozen om via online marketing ([Digitale aanwezigheid](#)), netwerking ([Evenementen](#)), en individuele afspraken ([Bekendmaking aan bedrijven en andere organisaties](#)) bedrijven te informeren over de mogelijke dienstverlening van het VSC ([Dienstverlening aan bedrijven](#)).

Digitale aanwezigheid

Het online marketing gedeelte bevat de aanmaak van een geheel nieuwe website www.vscentrum.be. Gelijktijdig kon ook de VSC Branding worden aangepast en is er nu ook een merkuids beschikbaar met duidelijke richtlijnen voor allerlei marketingmaterialen.



Verder kwam er ook een LinkedIn pagina (www.linkedin.com/company/vschpc) en een YouTube-kanaal (@vschpc). Het LinkedIn-kanaal heeft met regelmatige posts al een geëngageerd publiek kunnen bereiken. Op het YouTube-kanaal staan er een twintigtal filmpjes met getuigenissen.



Er is eind 2019 ook gestart met een elektronische nieuwsbrief.



Het VSC introduceerde tevens een CRM-systeem in haar werking, om alle contacten beter te kunnen bijhouden en meer systematisch op te volgen. Hiervoor gebruikt VSC nu Hubspot.

Dienstverlening aan bedrijven

Als basis heeft het Vlaams Supercomputer Centrum een gedifferentieerde infrastructuur uitgebouwd die ze ter beschikking kan stellen van de bedrijfswereld. Die gedeelde infrastructuur wordt in de dienstverlening naar de industrie ingezet als een opstap om eigen investeringen of het inpassen van High Performance Computing in het productieproces voor te bereiden. Zoals bij academische centra wordt de infrastructuur aan de industrie ter beschikking gesteld om proof-of-concepts uit te werken, om te experimenteren, te leren, om een invoering van technisch rekenen in het bedrijf ten gronde te kunnen voorbereiden en de nodige investeringen te kunnen inschatten. In enkele gevallen, en dat veelal door start-ups en scale-ups, wordt de VSC-infrastructuur gebruikt voor productieruns. Het VSC heeft verder de ambitie om de noden van bedrijven in kaart te brengen betreffende de inrichting van een VSC-cloud en data-omgeving.

Een tweede en derde pijler van de VSC-dienstverlening zijn consulting en training. Dit is van groot belang omdat dit kan worden ingezet in de exploratiefase. Heel wat bedrijven die evolueren naar de Industrie 4.0 of start-ups die vernieuwende ideeën willen implementeren, hebben noch de technische kennis, noch de middelen om met de mogelijkheden van het computationeel werken te experimenteren. Of het nu gaat om IoT-producten, om productontwikkeling die ondersteund is door klassieke simulatietechnieken of AI-gebaseerde producten, het VSC wil de bedrijven ondersteunen in hun innovatietraject door de ruime expertise ten dienste te stellen van de industrie.

Kortom, het VSC had ook in 2019 de ambitie om te opereren als een dienstencentrum waar bedrijven terecht kunnen wanneer ze vernieuwende computationele technieken willen incorporeren in hun business. In 2020 zullen verder de concrete verwachtingen vanuit de industrie worden opgelijst door de Industriële raad.

VSC Industriële raad

Vanaf 2019 werd de samenstelling van de industriële raad opnieuw bepaald. Mia Vanstraelen (IBM) werd opnieuw voorzitter. De overige leden zijn: Benny Westaedt (Van Havermaet), Marc Engels (Flanders Make), Marcus Drosson (Umicore), Sabien Vulsteke (BASF – Agricultural Solutions Belgium), Martine Lewi (J&J), Rudi Lauwereins (imec) en Bart Meert (Agoria).

De VSC Industriële raad heeft in 2019 ook z'n missie scherper gesteld.

- ➔ De Industriële Raad (IR) ontwikkelt initiatieven om bedrijven en non-profit instellingen te informeren over de toegevoegde waarde die HPC levert bij het ontwikkelen en optimaliseren van hun diensten en producten.
- ➔ De Industriële Raad promoot de diensten, die het VSC aan bedrijven levert zoals consultancy, onderzoekssamenwerking, training en rekenkracht.
- ➔ De Industriële Raad zal nieuwe en bestaande contacten van het VSC met de industrie monitoren en uitbouwen.
- ➔ Verder engageert de Industriële Raad zich ook om gepast advies te verlenen ter bevordering van de interne werking van het Vlaams Supercomputer Centrum.

Bekendmaking aan bedrijven en andere organisaties

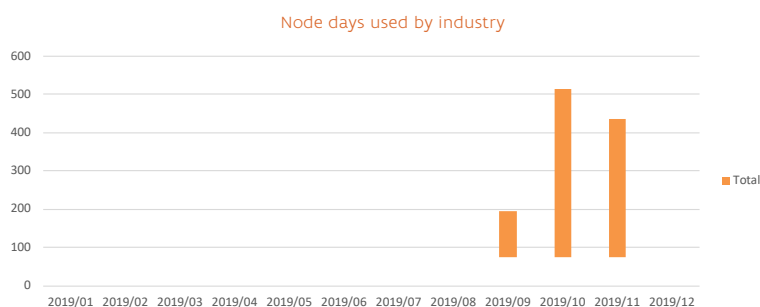
In 2019 zijn er verder een heel aantal individuele gesprekken met bedrijven geweest. Bedoeling was telkens om een meer gedetailleerd beeld te geven over de mogelijke dienstverlening van VSC. Tijdens deze gesprekken konden ook al de meer technische aspecten aan bod komen. Dit zijn organisaties waarmee gesprekken zijn doorgegaan: Colruyt, BASF, BeCode, Green Energy Park, Flux50, Digipolis, Umicore, Catalisti, DoseVue, Van Havermaet, Sirris, Voxdale, Antea Group, Sirris, ILVO, vision++, Nort Sea Porth, Total, ArcelorMittal, De Watergroep, ILVO, Flanders Make, Coolscape, Voka VZW, EIT Food, VIB, Advania, Piros, Microsoft, Verhaert, VLAIO, G4S, Atlas Copco, Motulus, Datacamp, Yields.io, EY, CWS Automation, UZ Leuven, ZOL Genk, Lasea, VITO, imec, SCK-Cen, VLIZ.

Verder zijn er ook een aantal bedrijven/organisaties gecontacteerd, maar konden er (nog) geen afspraken worden vastgelegd. Overzicht van overige contacten: Sandbox Vlaanderen, Statistiek Vlaanderen, AE, Cegeka, Flanders bio, Agoria, Multronic, CNHI, robovision, Amazon, Ocas, NVIDIA, Kingspan, Colt Group, Maes Industries, Rucon, VK Group, Metallo, Inspyro, Ivens CB, Helvoet, Comate, Arcade Eng, Aperam, IMBR Sea, Openbedrijvendag, Woestijnvis, Flanders Food, The Beacon, AM Team, Studio Dott, Lemon Companies, Airobot, Epontentia, UZ Brussel, Etex Group, Barco, Maritech, Fluves, Beltug, VIL, Telenet, Cronos, J&J, CMI group, AB Inbev, P&G, VRT, Boltzman, PMV, Haystack international, Statik, Ninatrans, Puratos, Hack Belgium, KBC, ING, ThingIt, Robovision, Deloitte, Buffl, Pepsico, Belfius, Settlemint, Collibra, The CoFoundry, FlandersDC, Lineas, Adshot, FIT, Mediahuis, Orange, Madkings, bpost Future Lab, LG Technology, Siemens, Nokia, Ivex.ai, dataroots, Duval Union, proximus, deme group, Sentiance, Glickman, EDF Luminus, Bekaert, Brainjar, BMW, McKinsey, Ontex Global, Coca Cola, DataShift, Clearchannel, Athlon car lease, Kinopolis, Radix.AI, AVEVE, Bosal, Recticel, Danone, Nestle, Spott.ai, PickIt 3D, The DOW Chemical company, GSK, Watt Factory, Safeshops, Cargill, Sioen, Essencia, Nike, Centexbel, Groen Licht Vlaanderen.

Gebruik door niet-academici

De verhoogde focus van VSC naar de industrie vertaalt zich in de eerste plaats in een grotere VSC -visibiliteit en de bewustwording van de meerwaarde van HPC. Op termijn zal vermoedelijk een verhoogd gebruik in VSC diensten zichtbaar worden. Door een meer algemene bekendmaking van VSC diensten probeert VSC een duidelijker beeld te krijgen op de noden vanuit de industrie, en meer organisaties te kunnen helpen met HPC. Feedback wijst op een grote meerwaarde via het verlagen van de drempel en opstart met HPC, het leveren van expertise (bv. in uitwerken van HPC-opportunities), de bevordering van samenwerkingen in onderzoek, het beschikbare trainingsaanbod en de uitgebreide ondersteuningsmogelijkheden.

De nieuwe partitie van Tier-1 biedt duidelijke voordelen voor de industriële gebruikers. Het gebruik nam toe wanneer dit deel in productie werd gebracht. De huidige industriële gebruikers hebben dan ook hun overeenkomst met VSC verlengd voor meerdere jaren, en voorzien een groter gebruik. De toepassing die gebruikt werd door één van de bedrijven biedt de mogelijkheid om vanuit de standaard interface op hun eigen machine, rechtstreeks jobs te versturen naar de Tier-1 cluster. Deze configuratie werd opgezet, zodat de gebruikers een consistente gebruikerservaring hebben.



Afbeelding 23. Nodedagen gebruikt door de industrie

Verder ziet het ernaar uit dat de verhoging van het aantal contacten met bedrijven en inleidende presentatie in 2020 zal leiden tot een aantal bijkomende overeenkomsten en samenwerkingen.

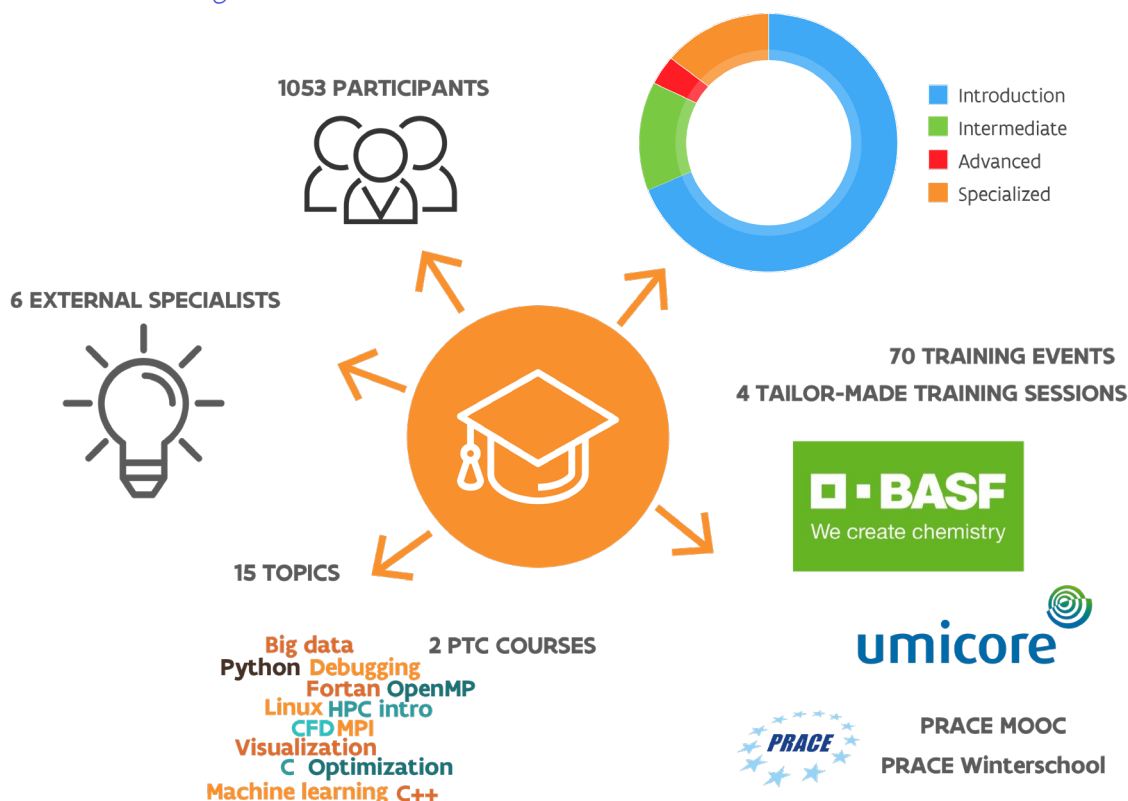
Opleidingen

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 om zo de wetenschappelijke competitieve positie van de universiteiten in het internationale onderzoekslandschap te vergroten. Opleidingen door het VSC georganiseerd zijn niet alleen bedoeld voor onderzoekers verbonden aan Vlaamse universiteiten en hun respectievelijke associaties, maar ook voor onderzoekers die werken in de Strategische Onderzoekscentra, de Vlaamse wetenschappelijke onderzoeksinstituten en de industrie.

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

- Introductory
- Intermediate
- Advanced
- Specialist courses & workshops

Het VSC biedt ook opleidingen op maat aan, zowel voor onderzoeksgroepen als voor kennisinstellingen en industrie. Het gaat in dit geval meestal om een standaard opleiding, aangevuld met domeinspecifieke modules die hiervoor speciaal ontwikkeld worden. Er wordt ook gebruik gemaakt van nieuwe leervormen zoals MOOC's ([Internationale Samenwerking](#)).



Afbeelding 36. Overzicht VSC trainingen



Evenementen

VSC USER DAY 2019

Op 4 juni 2019 organiseerde VSC met veel succes een jaarlijkse User Day in het Paleis der Academiën in Brussel. VSC gebruikers komen dan samen, alsook partners en VSC medewerkers, om informatie over de laatste ontwikkelingen te delen, met elkaar te netwerken, verdere plannen en trends te bespreken, ervaringen uit te wisselen, etc.

Het programma in de voormiddag bestond uit een plenair gedeelte met verschillende internationale sprekers. Een overzicht:



Dr. Joost Vandevondele

CSCS, ETH Zürich

Developing scientific software for modern high performance computing



Prof. Dr. Francesco Contino

VUB

Robust Optimisation: challenges to find optimum under uncertainties



Prof. Dr. Geert Jan Bex

HPC analyst/consultant - K.U.Leuven & Hasselt University VSC Coordinator

Shared memory programming in C++ with Threading Building Blocks



Dr. Alexander Vapirev

HPC Analyst and Consultant - KU Leuven

VSC Cloud Data & Platform



Dr. Ehsan Moravveji

HPC Consultant - KU Leuven

Start2GPU



Dr. Luca Marsella

HPC Application Specialist - CSCS

PRACE Project Access: Peer Review Process and Proposal Template



Ik ben er om gebruikers aan te moedigen hun toepassingen met behulp van GPU-geaccelereerde computers te verbeteren en zo hoogwaardige wetenschap op te leveren.

DR. JOOST VANDEVONDELE
CSCS, ETH Zürich

Er werden op de User day verder ook een veertigtal posters gepresenteerd.

In totaal schreven een 150-tal deelnemers zich in. Na afloop vulden de aanwezigen ook een evaluatieformulier in, en die waren unaniem positief.

Deelname aan nationale en internationale evenementen, congressen en workshops

Om het aanbod van het Vlaams Supercomputer Centrum in de kijker te zetten, selecteerden we in 2019 een beperkt aantal evenementen waar VSC kon worden voorgesteld.

Op SIM User Forum & Meeting Materials 2019 presenteerde VSC in een pitch van één minuut de VSC Supercomputing Business day. Een gelijkaardige actie kwam er op een A.I. Cross Industry pitching event van The Growcery/scale-ups.eu.

Bij een infosessie van De Blauwe Cluster gaven VSC medewerkers een overzicht van relevante supercompute use cases.

Om ook een breder publiek aan te spreken over impact van supercomputing, nam VSC deel aan Dag Van De Wetenschap in Gent met een algemene presentatie over High Performance Computing.

Bij een paar evenementen kon VSC beschikken over een beursstand (alle bovenstaande evenementen plus KU Leuven – LCIE, VUB TechTransfer Week, Aviation KU Leuven).

Tijdens andere netwerkevents was VSC aanwezig als deelnemer om bedrijven individueel aan te spreken, te netwerken en verdere HPC kennis op te doen. Concreet gaat het over volgende evenementen:

Innov8, KU Leuven PIP Gala, Marine Science meets Maritime Industry 2019, The Banking Scene 2019, Vivatech, AI4Belgium – ethics guidelines, Voka Vlaams-Brabant Business Innovation club, DISummit 2019, EIT Digital Conference, AI Talks, Vlaanderen Versnelt, FIT – Leeuw van de export, B.R.A.I.N.S., WleetJenschap, European Research and Innovation Days, Digital Twin Meetup, TTO Flanders, The Big Score, Data Science Pioneers Screening, VUB Experience Lab, Trefdag Digitaal Vlaanderen, AI4Growth sessions, 4th EasyBuild User Meeting, FOSDEM'19 Co-organisation of HPC, Big Data and Data Science, CÉCI Scientific Day, EuroHPC Summit Week 2019, Nec User Group (NUG) meeting 2019, PRACE 6IP Kick-off meeting, HP-Cast, ISC High Performance 2019, iRods user group, Technopolis Wetenschappen tentoonstelling, PRACE 6IP Kick-off meeting WP7, Supercomputing 2019, iRods workshop Surfsara, dCache Workshop 2019, HEPIx Autumn 2019, European HTCondor Workshop 2019.



Internationale samenwerking

PRACE en EuroHPC

Het VSC maakt, via het Belgische lidmaatschap, deel uit van PRACE (Partnership for Advanced Computing in Europe). PRACE biedt de mogelijkheid om Tier-0 rekentijd te gebruiken. Daarnaast biedt PRACE ook een uitgebreide waaier aan opleidingen en is er, via projectaanvragen, ondersteuning voor onderzoekers en bedrijven die van de infrastructuur willen gebruikmaken.

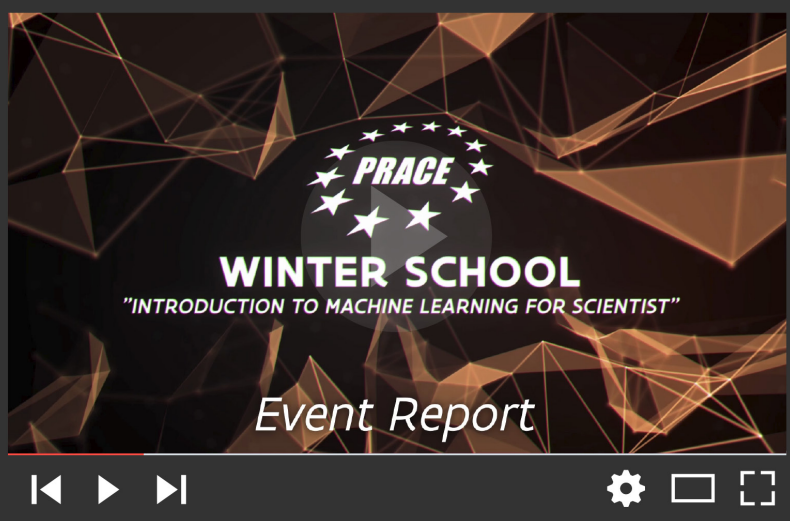
Toegang tot Tier-0 rekentijd wordt georganiseerd door middel van oproepen tot het indienen van projectvoorstellen. Deze voorstellen worden beoordeeld volgens "excellent science" normen. De projecten die het best gerangschikt zijn, krijgen de gevraagde rekentijd. Bij de 18de en 19de oproep is er geen rekentijd toegekend aan projecten van onderzoekers uit Vlaamse universiteiten.

Van 4 tot 8 maart 2019 hebben UHasselt en KU Leuven "PRACE Winter School 2019 - Introduction to Machine Learning for scientists" georganiseerd. Ook werd de MOOC "Defensive Programming

and Debugging" herhaald. Deze MOOC werd in 2018 ontwikkeld door UHasselt en KU Leuven, in samenwerking met Future Learn. Zowel de winter school als de MOOC kaderen in de bijdrage aan het "PRACE vijfde implementatiefase project", kortweg PRACE 5IP. In dit project zijn Cenaero en KU Leuven de Belgische deelnemers.

In 2019 is PRACE 6IP van start gegaan. De Belgische deelnemers zijn UAntwerpen, KU Leuven, Cenaero en ULiège. UAntwerpen is betrokken in WP 7 (Applications Enabling and Support), KU Leuven in WP 4 (Training). UAntwerpen zal onderzoekers ondersteunen van wie een "preparatory access" aanvraag werd goedgekeurd en meewerken aan de Unified European Application Benchmark Suite (UEABS). KU Leuven zal o.a. een nieuwe seasonal school organiseren rond OpenFOAM en de MOOC herhalen.

EuroHPC is een initiatief van de EU om een "World Class Supercomputing Ecosystem" in Europa uit te bouwen. Het budget bedraagt ongeveer 1 miljard euro. In het kader daarvan wil Europa tegen eind 2020 (begin 2021) o.a. drie zogenaamde "pre-exascale" machines hebben draaien (minstens 150 Pflop). Daarvoor zijn drie hosting sites, met elk een consortium, geselecteerd: CSC (Finland), BSC (Spanje), Cineca (Italië). De EU participeert voor 50% in elke machine. België heeft begin 2019 beslist om deel te nemen aan het consortium rond het Finse CSC. Dit zijn de landen en hun respectievelijke bijdrage tot het Finse LUMI consortium:



Finland	50,0 M€	Tsjechië	5,0 M€
België	15,5 M€	Polen	5,0 M€
Zwitserland	10,0 M€	Noorwegen	4,0 M€
Zweden	7,0 M€	Estland	2,0 M€
Denemarken	6,0 M€	EU	102,5 M€

Tabel. Details LUMI-consortium



PRACE Winter School, georganiseerd door PRACE en gehost door VSC, is de perfecte kans om deel te nemen aan een event met een zeer divers publiek

MARIO VACKIER
DE NATIONALE BANK



België levert, na Finland, dus de grootste bijdrage. Binnen België is de verdeling als volgt, samen met het overeenkomstige aandeel rekentijd op LUMI (binnen het 50% deel van het consortium):

Federaal	5,0 M€	4,8 %
Wallonië	5,0 M€	4,8 %
Vlaanderen	3,5 M€	3,3 %
Brussel	2,0 M€	1,9 %

Tabel 10. LUMI-bijdrage per gewest

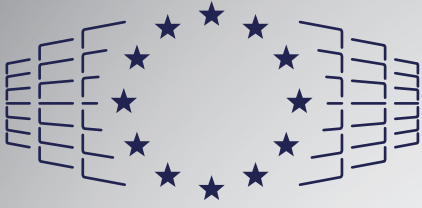
In de loop van 2020 worden de nodige afspraken gemaakt hoe deze rekentijd toegekend zal worden. Het aandeel rekentijd van de EU zal grotendeels beschikbaar komen voor iedereen via projectaanvragen, zoals nu ook bij PRACE gebeurt. Dit biedt onderzoekers de mogelijkheid om, buiten het Vlaamse aandeel, nog extra rekentijd aan te vragen.

In 2019 hebben de 5 Vlaamse en 5 Waalse universiteiten, samen met Cenaero en Innoviris, een projectvoorstel ingediend voor de oprichting van een "National Competence Center" rond HPC. Dit kadert binnen de projecten rond EuroHPC. Een eventuele toekenning van dit project wordt in maart 2020 verwacht.

EGI

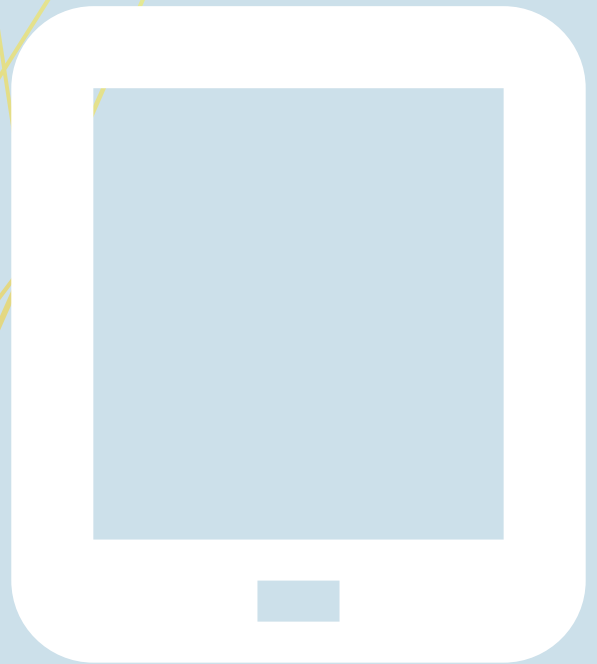
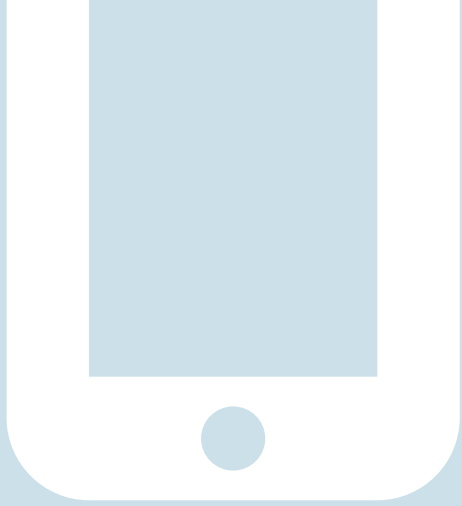
Het VSC is actief aanwezig bij het European Grid Infrastructure-gebeuren (EGI). De VUB grid-cluster is geïntegreerd in de EGI federated e-Infrastructure en door de steun van internationale virtuele organisaties biedt het op deze manier de mogelijkheid aan onderzoekers uit Vlaanderen om deze Europese rekeninfrastructuur te gebruiken. Vooral hoge-energie-fysici van de UAntwerpen, de UGent en de VUB maken hiervan gebruik. Enkele voorbeelden zijn:

- De grid-cluster ondersteunt de internationale samenwerking "IceCube". Onderzoekers van de VUB en de UGent zijn hierin actief.
- De internationale onderzoeksgroep "SoLid", met onderzoekers van onder meer UGent, UAntwerpen en VUB die neutrino-oscillaties bestudeert op een heel korte afstand van de kern van een reactor in het SCK-CEN te Mol werd opgestart. Deze onderzoeksgroep maakt, met ondersteuning vanuit het VUB-grid-team, gebruik van de EGI grid middleware om op een eenvoudige manier gegevens te delen over de deelnemende universiteiten heen.
- Daarnaast zijn de projecten WeNMR (NMR spectroscopie), LOFAR (lage frequentie radio astronomie) en AUGER (hoge energie kosmische straling) ook actieve gebruikers van de grid-cluster.
- In 2019 zijn er ook 2 nieuwe projecten bijgekomen uit de astrofysica: ARA (neutrino detector op de zuidpool) en RADAR (ook neutrino detector maar via radiogolven).



EuroHPC
Joint Undertaking







Succesverhalen

Hierna volgen enkele getuigenissen over het gebruik van supercomputers voor onderzoek, industrie, innovatie en maatschappelijke voordelen. We tonen voorbeelden van hoe universiteiten en bedrijven, private en publieke organisaties supercomputers gebruiken om doorbraken van groot wetenschappelijk of economisch belang te bereiken. Deze prestaties, waarvan vele werden bereikt dankzij toegang tot zeer krachtige supercomputers en HPC-experts bij het Vlaams Supercomputercentrum (VSC), hebben al geruime tijd onderzoekers en bedrijven immense efficiëntie, zowel in werkuren als in euro's, opgeleverd.



Joris Vanlede

Scaldis Model

Waterbouwkundig Laboratorium

Joris Vanlede van het Waterbouwkundig Laboratorium van Vlaanderen gebruikt de supercomputer van VSC ter ondersteuning van de Vlaamse overheid. Hij bouwt wetenschappelijke kennis op over watersystemen door het bestuderen van de monding van de Zeeschelde. Dit doet hij via verschillende scenario's van klimaatverandering met behulp van het SCALDIS-model. Zijn succesverhaal vertelt je meer.

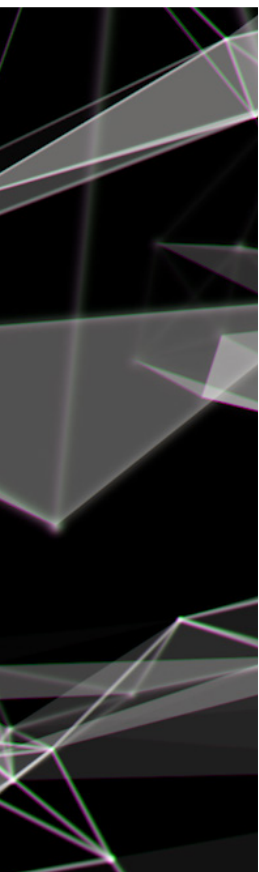


Waterbouwkundig
Laboratorium



Vlaanderen
is wetenschap





“

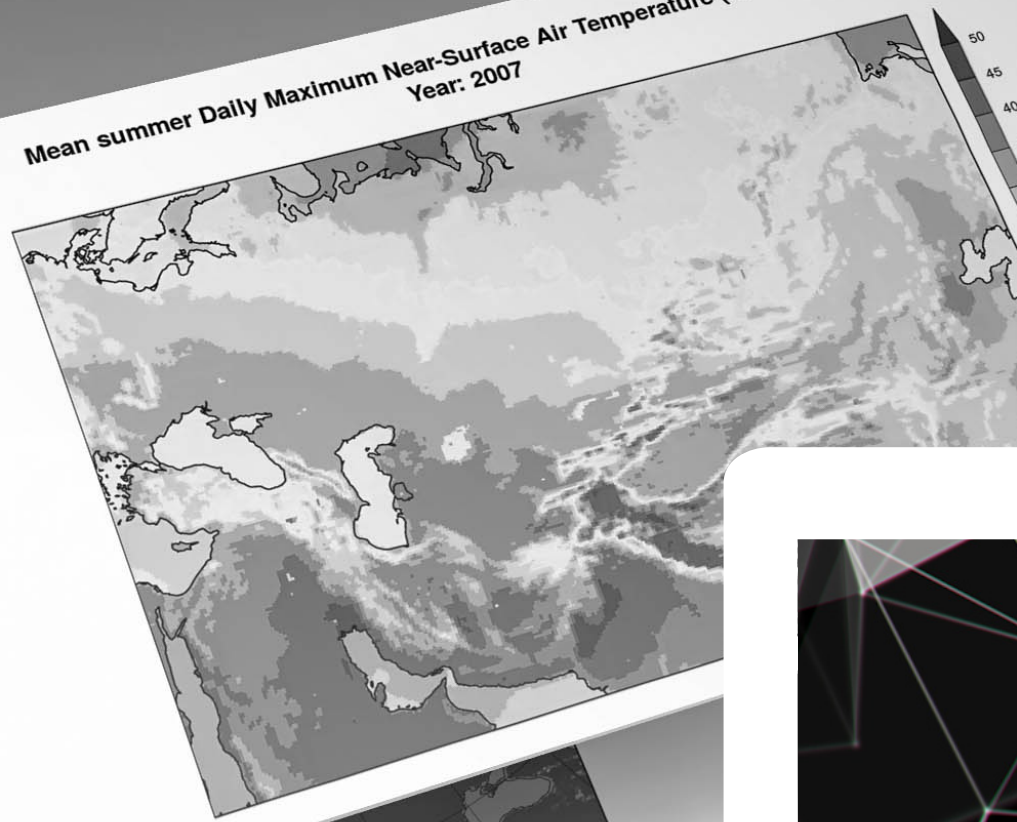
De infrastructuur van VSC stelt ons in staat om simulaties uit te voeren die ons helpen het Schelde-estuarium beter te begrijpen en om de beste strategieën uit te werken om het estuarium te beheren. Met High Performance Computing kunnen we de nodige tools ontwikkelen om beter samen te werken rond een visie voor estuarijnbeheer in de 21e eeuw.

”

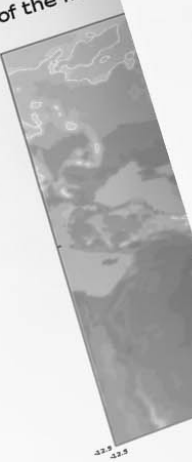
JORIS VANLEDE
Het Waterbouwkundig Labo



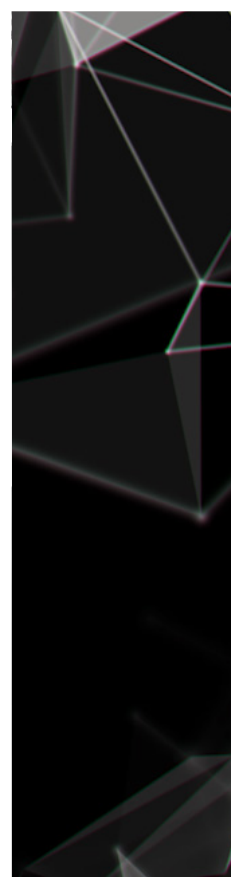
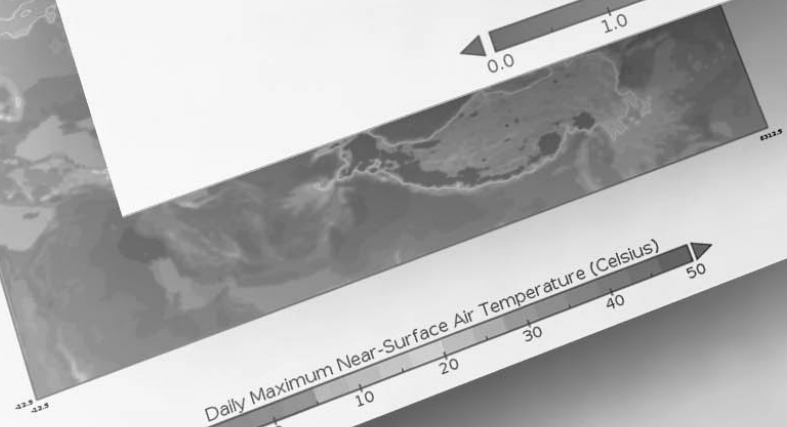
Mean summer Daily Maximum Near-Surface Air Temperature (K) In Central-Asia
Year: 2007



Evolution of the mont



Daily Maximum Near-Surface Air Temperature (Celsius)



Rozemien De Troch

Regional Climate Modelling

KMI

Postdoctoraal onderzoeker Rozemien De Troch van de Universiteit Gent en Het Koninklijk Meteorologisch Instituut van België (KMI) detecteert en modelleert regionale klimaatverandering met behulp van de supercomputers van VSC. Haar succesverhaal geeft je een overzicht.

The graphic features the words 'SUCCESS' and 'STORIES' in a white, sans-serif font. 'SUCCESS' is positioned above 'STORIES'. The word 'STORIES' is contained within a dark orange rectangular box that has a white play button icon centered on it. The background is a dark, abstract geometric pattern of interconnected lines and polygons in shades of grey and white.

SUCCESS STORIES

Koninklijk Meteorologisch Instituut (KMI)
REGIONAL CLIMATE MODELLING



Merijn Mestdagh

Emotions & Behaviour Using Mathematical Models
KU Leuven

Dr. Merijn Mestdagh van de onderzoeksgroep Kwantitatieve Psychologie aan de KU Leuven gebruikt wiskundige modellen om het gedrag en de emoties van individuen te bestuderen met behulp van onze supercomputers. Deze modellen worden dan toegankelijk gemaakt voor alle onderzoekers via de website www.prepaidestimation.org. Meer info vindt u in het succesverhaal.

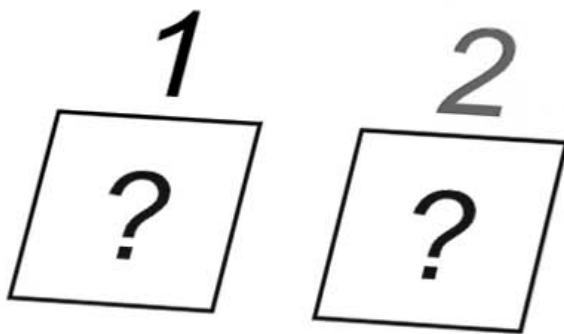


KU LEUVEN

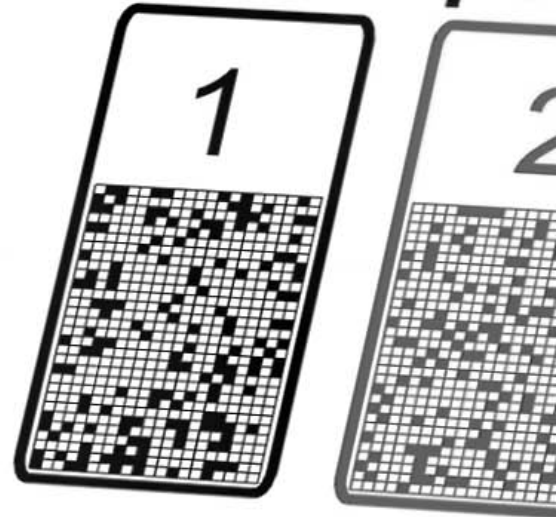


experiment

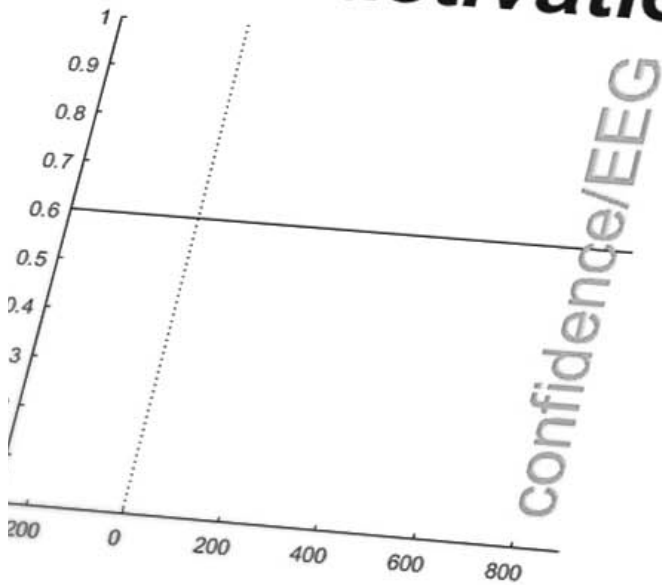
waiting for stimulus
-270 ms



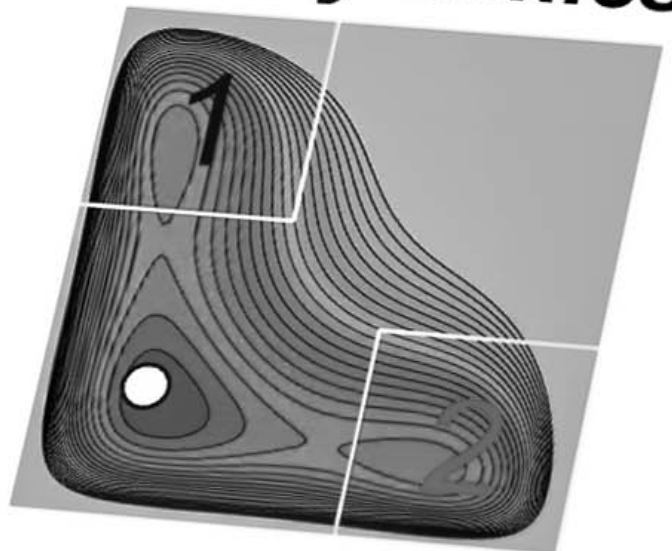
neural po

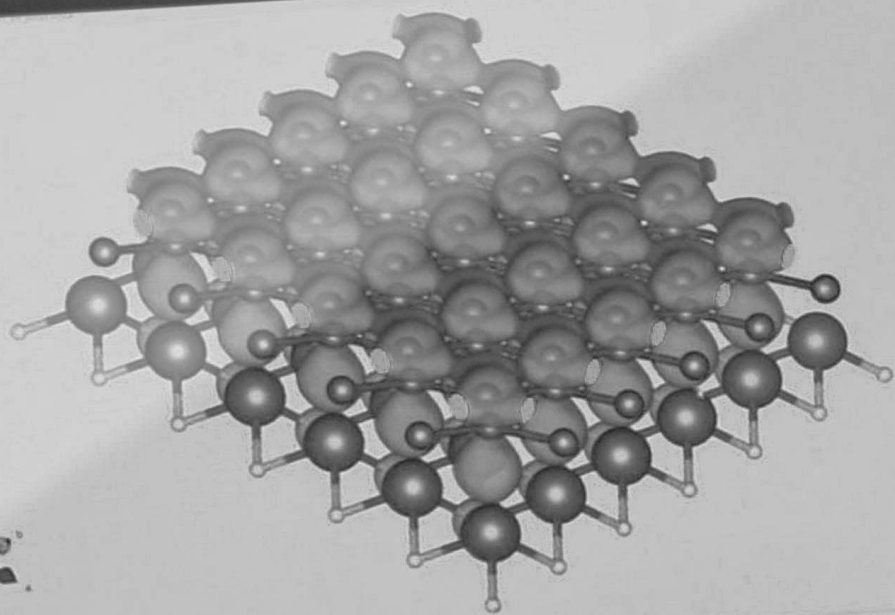
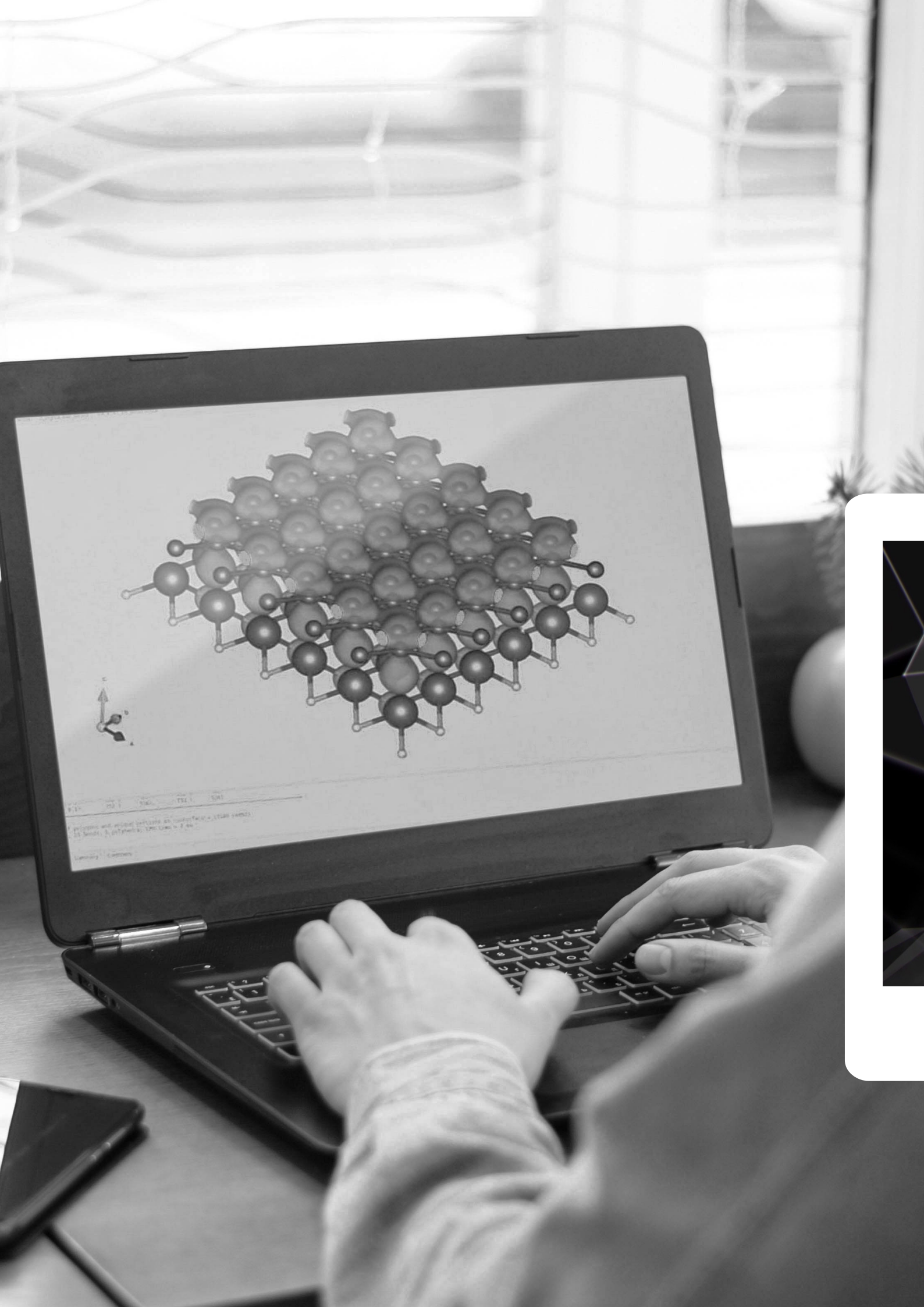


mean activation



2D dynamics





File Edit View Help
1. prepared with original resolution 4000x4000 (1280x800)
2. Size: 3.00x3.00 (1000x1000) 2.00x2.00



Jonas Bekaert

Future Energy Solutions

Universiteit Antwerpen

Dr. Jonas Bekaert van de departement Fysica aan de Universiteit Antwerpen gebruikt de supercomputers van VSC om innovatieve ultradunne materialen voor toekomstige energieoplossingen te maken. In het succesverhaal vindt u meer informatie.



Bijlagen

Personeelslijst

Instelling	Naam	% tewerkstelling in het kader van HPC
UGent	Wouter Depypere	100%
UGent	Stijn De Weirdt	100%
UGent	Alvaro Simon Garcia	100%
UGent	Andy Georges	100%
UGent	Kenneth Hoste	100%
UGent	Ewald Pauwels	100%
UGent	Balazs Hajgato	91.67%
UGent	Kenneth Waegeman	100%
UGent	Bart Verheyde	41.67%
UGent	Danny Schellemans	10%
UGent	Johan Van Camp	30%
UGent	Frédéric De Leersnijder	20%
UGent	Wim Waeyaert	20%
UGent	Werend Brantegem	10%
UGent	Dieter Roefs	50%
KU Leuven	Herman Moons	20%
KU Leuven	Leen Van Rentergem	30%
KU Leuven	Jan Ooghe	100%
KU Leuven	Martijn Oldenhof	50%
KU Leuven	Mag Selwa	100%
KU Leuven	Alexander vapirev	100%
KU Leuven	Ingrid Barcena	100%
KU Leuven	Ehsan Moravveji	100%
KU Leuven	Jo Vandeginste	100%
KU Leuven	Tom Leuse	50%
KU Leuven	Yorick Poels	100%
KU Leuven	Peter veraedt	100%
KU Leuven	Yuri Moens	50%
KU Leuven	Rudy Rys	40%
KU Leuven	Tom van Mierlo	100%
KU Leuven	Tom Vanhout	20%
KU Leuven	Yves Daniels	50%
KU Leuven	Sofie Pieraerd	10%
KU Leuven	Els veraverbeke	20%
KU Leuven	Philip Brusten	10%
UAntwerpen	Stefan Becuwe	100%
UAntwerpen	Franky Backeljauw	100%
UAntwerpen	Bert Tijskens	100%
UAntwerpen	Kurt Lust	100%
UAntwerpen	Thomas Danckaert	100%
UAntwerpen	Koen Decauwsemaecker	10%
UAntwerpen	Muriel Dejonghe	10%
UAntwerpen	Herwig Kersschot	10%
UAntwerpen	Annie Cuyt	5%
UHasselt	Rafal Al-Takreeti	50%

Instelling	Naam	% tewerkstelling in het kader van HPC
UHasselt	Geert Jan Bex	100%
VUB	Balázs Hagató	8.33%
VUB	Samuel Moors	100%
VUB	Stéphane Gérard	100%
VUB	Alex Domingo Toro	70.83%
VUB	Ward Poelmans	100%
VUB	Dirk Heyvaert	15%
VUB	Philippe Leemans	25%
VUB	Eddy Haulet	25%
VUB	Olivier Devroede	20%
VUB	Johan D'Hondt	15%
VUB	Steven Opstaele	10%
VUB	Robert Jansen	10%
VUB	Stefan Weckx	10%
VUB	Veerle De Rademaeker	2%
VUB	Nina De Bruyne	5%

Tier-1 toekenningen 2019

februari

Number	Title	Applicant	Institution	Department	Nodedays awarded	Diskspace awarded (GiB)
2019_01	Elucidating the surface-dopant interactions of the negative electron affinity diamond surfaces.	Danny Vanpoucke	UHasselt – Hasselt University	Materials physics (IMOMAF)	3050	500 Gb + 10000 files
2019_02	Enhanced sampling study of the collective variable influence on the methylation of ethene in H-ZSM-5	Simon Bailleul, Pieter Cnudde and Veronique Van Speybroeck	Ghent University	Center for Molecular Modeling	4000	100 GB scratch space – 60000 files
2019_03	Mechanical deformation of a metal-organic framework using advanced electronic structure calculations	Kurt Lejaeghere, Jelle Wieme, Arthur De Vos and Veronique Van Speybroeck	Ghent University	Center for Molecular Modeling	4830	1760 GiB (742 files)
2019_04	Computational investigation of the binding thermodynamics and kinetics between prolyl carboxypeptidase (PRCP) and the GFP substrate	Hans De Winter	University of Antwerp	Laboratory of Medicinal Chemistry, Department of Pharmaceutical Sciences	4468	302 GiB and 6462 files
2019_05	A reference flow database for wind-farm control and optimization II	Wim Munters, Pieter Bauweraerts, Ishaan Sood and Johan Meyers	KU Leuven	Turbulent Flow Simulation & Optimization (TFSO) Research Group/Mechanical Engineering Department	4944	48800 GiB
2019_06	Operando study of post synthetic structural modifications in UiO-66	Chiara Caratelli, Julianna Hajek and Veronique Van Speybroeck	Ghent University	Center for Molecular Modeling	4176	313.2 GiB + 12528 files
2019_07	Oxidative coupling of methane in a novel rotating bed reactor (OXMET)	Laurien Vandewalle, Jens Dedeys, Kevin Van Geem and Guy Marin	Ghent University	Department of Materials, Textiles and Chemical Engineering (EAT1) Laboratory for Chemical Technology	4000	3000 GiB (1000 GiB SCRATCH and 2000 GiB DATA) and 25,000 files
2019_08	The influence of ternary alloying elements on the thermodynamic balance between iron-nitride compounds in nitrided steels.	Sam De Waele and Stefaan Cottenier	Ghent University	Center for Molecular Modeling	4491	0.6 TB
2019_09	Unraveling the effect of strain on the phases of an opto-electronic perovskite material	Tom Braeckvelt and Kurt Lejaeghere	Ghent University	Center for Molecular Modeling	672	50 GiB and 1680 files
2019_10	Expedition MARS: Next-Generation Experimental Designs for Product and Process Innovation	Jose Nunez Ares and Peter Goos	KU Leuven	BIOSYSTEMS DEPARTMENT – MEBIOS DIVISION – BIOSTATISTICS GROUP	9432	600GiB, 50000 files
2019_11	Effects of dark matter charge on plasma accretion flows at the Galactic Centre	Fabio Bacchini, Bart Ripperda, Bert Vercoocke and Thomas Hertog	KU Leuven	Theoretical Physics / Physics Centre for mathematical Plasma-Astrophysics / Mathematics	5040	1350 GiB, 1550 files
2019_12	Determining temperature-dependent migration barriers during the formation of a neutral defect complex.	Michael Sluydts, Michiel Larmuseau and Stefaan Cottenier	Ghent University	Center for Molecular Modeling / Department of Electrical Energy, Metals, Mechanical Constructions & Systems	4198	4096 GiB + 4096 files

2019_13	Investigating the Interplanetary propagation of Coronal Mass Ejections and Solar Energetic Particles	Christine Verbeke, Nicolas Wijssen and Camilla Scolini	KU Leuven	Centre for mathematical Plasma Astrophysics (CmPA), Dept. of Mathematics	2303	30500 GiB (30.5 TB), 676000 files
2019_14	Understanding π -cation interactions in living cationic ring-opening polymerization of unsaturated alkyl-2-oxazolines.	Elias Van Den Broeck and Veronique Van Speybroeck	Ghent University	Center for Molecular Modeling	4224	803.52 GiB + 109680 files
2019_15	First-principles mechanistic study of alkylphenols dealkylation catalyzed by acidic zeolites	Massimo Bocus and Julianna Hajek	Ghent University	Center for Molecular Modeling	3816	514.5 GiB (27750 files)
2019_16	Mobility and carbenium ion stability of polyene intermediates formed under MTO conditions	Kristof De Wispelaere	Ghent University	Center for Molecular Modeling	2736	17 GiB scratch space – ca. 177 GiB long-term storage (provided by UGent) – 7700
2019_17	Computational study of the lattice dynamics in MIL-47	Alexander Hoffman, Aran Lamaire and Veronique Van Speybroeck	Ghent University	Center for Molecular Modeling	1260	148 GiB + 24840 files
2019_18	Influence of water on the phase stability of flexible nanoporous materials	Aran Lamaire, Sander Borgmans, Jelle Wieme and Veronique Van Speybroeck	Ghent University	Center for Molecular Modeling	4896	234 GiB, 5880 files
2019_19	Numerical investigation of a turbulent spray flame	Alessandro D'Ausilio	Ghent University	Combustion, Fire & Fire Safety / Department of Flow, Heat and Combustion Mechanics	837	750 GiB (530 GiB SCRATCH and 220 GiB DATA)
2019_20	Large eddy simulations of underexpanded jets	Lucas Delcour, Alireza Rasekh and Joris Degroote	Ghent University	Department of Flow, Heat and Combustion Mechanics	3456	400 GiB, 4000 files
2019_21	Stability of the oxygen framework in Li-rich layered oxides	Marnik Bercx	University of Antwerp	EMAT / Department of Physics	4312	60
2019_22	Ab initio study of superconductivity in graphene decorated with alkali atoms	Jonas Bekaert, Milorad Milosevic and Bart Partoens	University of Antwerp	Condensed Matter Theory (CMT) / Physics	4661	293 GB ~ 4700 files

Starting grants 2019

Naam	Onderzoeker	Instituut	Domein
starter_83	Danny Van Poucke	UHasselt	Chemie
starter_84	Nicolas Wijzen	KU Leuven	Astronomie en astrofysica
starter_85	Niels Claes	KU Leuven	Astronomie en astrofysica
starter_86	Jose Nunes Ares	KU Leuven	Technologie
starter_87	Camilla Scolini	KU Leuven	Astronomie en astrofysica
starter_88	Mikhail Petrov	UAntwerpen	Fysica
starter_89	Francesco Pucci	KU Leuven	Astronomie en astrofysica
starter_90	Lilla Koloszar	VKI	Technologie
starter_91	Xavier Deraet	VUB	Chemie
starter_92	Ruben Van Lommel	VUB	Chemie
starter_93	Sepeher Madani Kashani	UGent	Technologie
starter_94	Jan Turek	VUB	Chemie
starter_95	Yang Sheng	UGent	Fysica
starter_96	Mesfin Haile Mamme	VUB	Technologie
starter_97	Xing Liu	VUB	Technologie
starter_98	Mitchel Perez	VUB	Computerwetenschappen
starter_99	Dimitrios Millas	KU Leuven	Astronomie en astrofysica
starter_100	Jelle Vekeman	VUB	Chemie
starter_101	Chrstina Siakati	KU Leuven	Moleculaire modelering
starter_103	Ruben Goeminne	UGent	Moleculaire modelering
starter_104	Andres Ricardo Leon Garzon	UGent	Technologie
starter_105	Prashant Kumar	KU Leuven	Chemie
starter_106	Ileyk El Mellah	KU Leuven	Astronomie en astrofysica
starter_107	Michiel Van Setten	imec	Technologie
starter_108	Alireza Rasekh	UGent	Technologie
starter_109	calum hawcroft	KU Leuven	Astronomie en astrofysica
starter_110	Michal Wyszynski	UAntwerpen	Fysica
starter_111	Jan Bolte	KU Leuven	Astronomie en astrofysica
starter_112	Emmanuel Chané	KU Leuven	Astronomie en astrofysica
starter_113	Michail Petrov	UAntwerpen	Fysica
starter_114	Ruishen Meng	KU Leuven	Fysica
starter_115	Tribhuvan Pandey	UAntwerpen	Fysica
starter_116	Johan Lauwaert	UGent	Technologie
starter_117	Lucas Delcour	UGent	Technologie
starter_118	Louis Vermote	VUB	Levenswetenschappen
starter_119	Francesco Pucci	KU Leuven	Astronomie en astrofysica
starter_120	Aryan Afzalian	KU Leuven	Technologie
starter_121	Yuhao Zhou	KU Leuven	Astronomie en astrofysica
starter_122	Boris Kruljevic	UGent	Technologie
starter_123	Andrea Daru	KU Leuven	Chemie
starter_124	Konstantinos Karamelas	KU Leuven	Astronomie en astrofysica
starter_125	Xiaoyong Zhang	KU Leuven	Chemie
starter_126	Jonas Van De Walle	KU Leuven	Earth sciences
starter_127	Steven De Hertog	VUB	Earth sciences
starter_128	Karen Dorothy Dedecker	UGent	Moleculaire modelering
starter_129	Ruben Goeminne	UGent	Moleculaire modelering
starter_130	Gabrielle Delannoy	KU Leuven	Earth sciences
starter_131	Alexander Gruber	KU Leuven	Earth sciences
starter_132	Ine Arts	UAntwerpen	Fysica
starter_133	Matthieu Salamone	UGent	Levenswetenschappen

Tier-1 toekenningen 2019

juni

Number	Title	Applicant	Institution	Department	Nodedays awarded	Diskspace awarded (GiB)
2019-24	A conceptual periodic DFT approach towards the fundamental understanding of the reactivity of single atom catalysts on amorphous silica.	Xavier Deraet, Frank De Proft, Jan Turek, Mercedes Alonso Giner and Frederik Tielsens	Vrije Universiteit Brussel	Algemene Chemie (ALGC) / Vakgroep Chemie	1452	3789 GiB
2019-25	Evaluation of Robust Pareto-Optimal (PO) Selection Systems Based on Finite Sample Formulas for Computing the Selection Objectives	Wilfried De Corte	Ghent University	Department of Data Analysis, Faculty of Psychology and Educational Sciences	3218	100 GiB
2019-26	Vibrational analysis of H ₂ O/ZnO and carboxylic acid/ZnO interfaces.	Turek Jan	Vrije Universiteit Brussel	Department of Chemistry, General Chemistry research group (ALGC)	2543	750 GiB
2019-27	Stacking silver differently for improved surface properties	Arthur De Vos, Kurt Lejaeghere and Veronique Van Speybroeck	Ghent University	Center for Molecular Modeling	4440	1990 GiB
2019-28	Modeling the influence of zeolite acidity on key reactions in the MTO process	Cnudde, Pieter	Ghent University	Center for Molecular Modeling	4960	116 GB
2019-29	Unravelling the effect of strain on the phases of an opto-electronic perovskite material.	Braeckvelt Tom	Ghent University	Center for Molecular Modeling	4032	300 GiB
2019-30	Determining temperature-dependent migration barriers during the formation of a charged defect complex.	Michael Sluydts, Michiel Larmuseau and Stefaan Cottenier	Ghent University	Center for Molecular Modeling / Department of Electrical Energy, Metals, Mechanical Constructions & Systems	4198	4096 GiB
2019-31	Influence of nanoconfined water on the phase stability of flexible nanoporous materials	Aran Lamaire, Sander Borgmans, Jelle Wieme and Veronique Van Speybroeck	Ghent University	Center for Molecular Modeling	3264	156 GiB
2019-32	Oxidative coupling of methane in a novel rotating bed reactor (OXMET)	Vandewalle Laurien	Ghent University	Department of Materials, Textiles and Chemical Engineering (EA11) Laboratory for Chemical Technology	4000	3000 GiB
2019-33	Numerical investigation of the forces in a 90° bend subjected to an air/water slug flow	De Moerloose, Laurent	Ghent University	Department of Flow, Heat and Combustion Mechanics	2304	500 GiB
2019-34	Numerical study of Turbulent spray jet flame with advanced/detailed chemistry mechanism	Alessandro D'Ausilio	Ghent University	Combustion, Fire & Fire Safety Engineering	1173	600 GiB
2019-35	Unraveling the MTO process using Raman spectroscopy	Hoffman Alexander	Ghent University	Center for Molecular Modeling	2880	104 GiB
2019-36	Electrophilic Halogen Addition to Alkenes Revised using Enhanced Sampling ab-initio Molecular Dynamics	Ruben Van Lommel and Jan Turek	Vrije Universiteit Brussel	General Chemistry Group / Department of Chemistry	1911	150 GiB
2019-37	Modelling Fast Solar Wind Streams and Solar Energetic Particle Transport at Large Heliocentric Latitudes	Nicolas Wijzen and Evangelia Samara	KU Leuven	Centre for mathematical Plasma Astrophysics (CmPA), Dept. of Mathematics	894	26,6 TB

2019-38	Turbulent flow field data assimilation using LES based 4D-Var with lidar measurements	Pieter Bauweraerts and Johan Meyers	KU Leuven	"Turbulent Flow Simulation & Optimization (TFSO) Research Group Mechanical Engineering Department"	4968	45 600 GiB
2019-39	Instabilities in relativistic, astrophysical jets	Dimitrios Millas	KU Leuven	Centre for mathematical Plasma Astrophysics, Department of Mathematics	1300	2600 GiB

Tier-1 toekenningen 2019

oktober

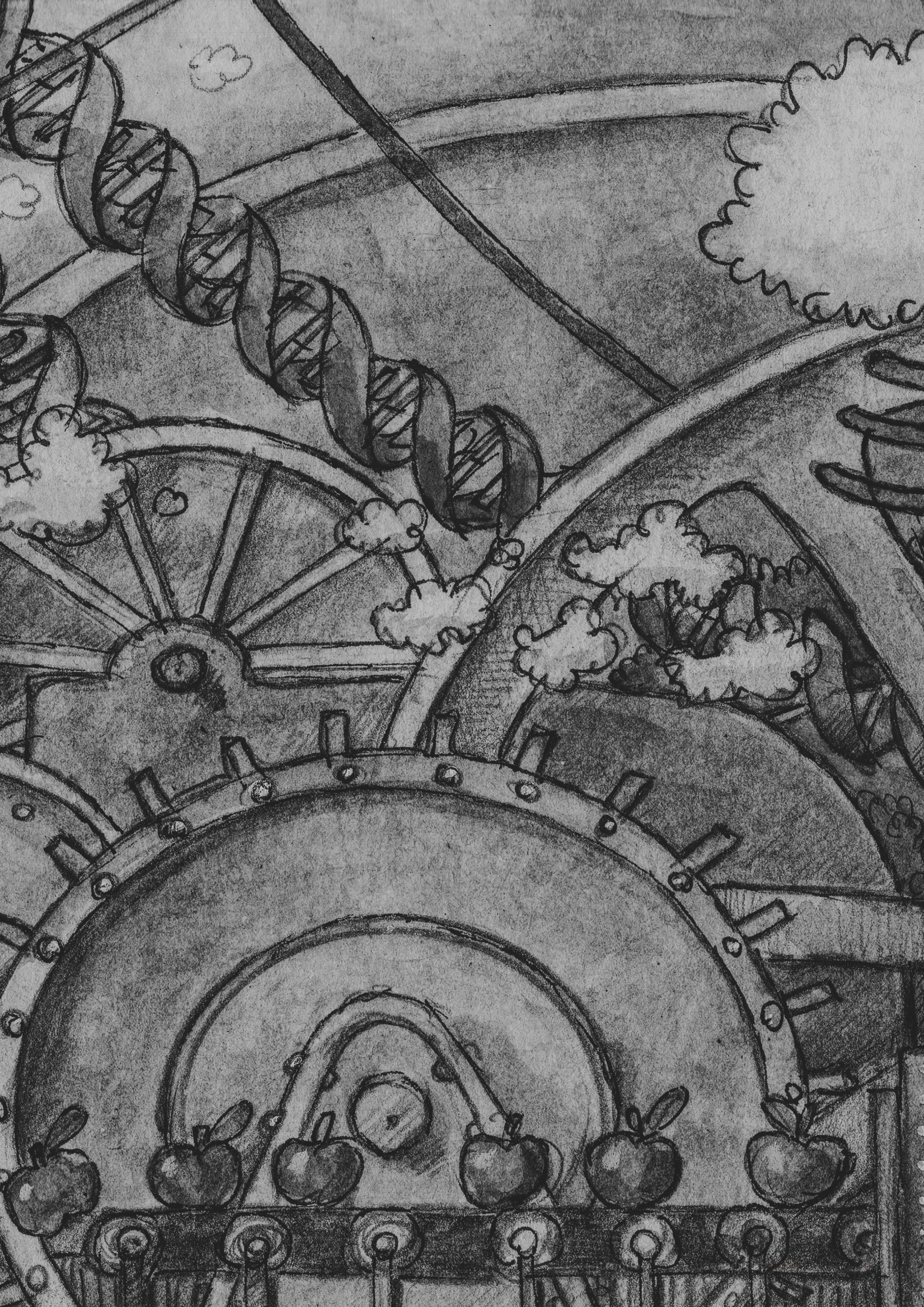
Number	Title	Applicant	Institution	Diskspace requested (GiB)	Files	Nodedays awarded
2019-40	Localising and resolving current sheets in black hole magnetospheres	Bart Ripperda and Rony Keppens	KU Leuven	440	440	11520
2019-41	Investigation of the water role in zeolite-catalysed alkylphenols dealkylation through first-principles molecular dynamics simulations	Massimo Bocus and Tobias Verdonshot	Ghent University	220.5	11244	4124
2019-42	Computational investigation of the relative binding strengths between prolyl carboxypeptidase (PRCP) and a series of 10 ligands	Hans De Winter	University of Antwerp	850	12120	10500
2019-43	Particle acceleration and energisation in relativistic outflows	Fabio Bacchini and Rony Keppens	KU Leuven	4000	260	10240
2019-44	Computational characterization of acid site positions in zeolites	Siebe Vanlommel, Alexander Hoffman and Veronique Van Speybroeck	Ghent University	10	1000	2340
2019-45	Si based luminescent centres in diamond: First principles study of the pressure dependence and impact of native defects.	Danny Vanpoucke	U Hasselt	900	25000	3150
2019-46	Ab initio investigations of amorphous materials for nano electronics applications	Michiel van Setten and Geoffrey Pourtois	imec	100	75000	4500
2019-47	Large eddy simulations of underexpanded jets acting on a yarn	Lucas Delcour and Joris Degroote	Ghent University	600	2000 scratch - 20000 data	2296
2019-48	Application form: Compute component of the Flemish Tier-1 "supercomputing platform"	Sheng Yang and Johan Lauwaert	Ghent University	200	2000	1000
2019-51	CFD simulations of the relay nozzle and the yarn inside the reed channel in the air-jet weaving machine	Alireza Rasekh and Joris Degroote	Ghent University	216	1200	4500
2019-52	Wind morphology around evolved cool stars	Ileyk El mellah	KU Leuven	503	208	3240
2019-53	First-principles study of superconductivity in alkali-decorated boron nitride	Jonas Bekaert, Milorad Milosevic and Bart Partoens	University of Antwerp	293	4700	4894
2019-54	Metagenomic data analysis to unravel food fermentation processes	Stefan Weckx	Vrije Universiteit Brussel	500	2800	3800

Number	Title	Applicant	Institution	Diskspace requested (GiB)	Files	Nodedays awarded
2019-55	Ab initio study of neutral seed formation in germanium substrates	Michael Sluydts, Michiel Larmuseau and Stefaan Cottenier	Ghent University	3840	3840	4502
2019-56	Theoretical study of mixed-linker configurations in ZIFs using vibrational spectroscopy	Alexander Hoffman, Sven Rogge and Veronique Van Speybroeck	Ghent University	60	1500	4914
2019-57	Ab initio study of the superconducting properties of Mo ₂ C	Mikhail Petrov	University of Antwerp	2379.7	8520	500
2019-58	Searching for novel two-dimensional magnetic materials based on first-principles calculations	Michel Houssa	KU Leuven	1760	11200	4375
2019-59	Tier 1 Application - A Genetic Algorithm to Model Massive Stars & Outflows	Calum Hawcroft	KU Leuven	2000	1890000	2815
2019-60	Modelling Solar Wind at the vicinity of Earth and Gradual Solar Energetic Particle Events	Evangelia Samara and Nicolas Wijzen	KU Leuven	15600	722952	1837
2019-61	Investigating light matter interactions in transition metal dichalcogenides	Tribhuvan Pandey	University of Antwerp	1365	1900	3600
2019-62	Bimetallic Clusters Supported in a Silicon Oxide Pore as a DeNox Catalyst	Jelle Vekeman and Frederik Tielens	Vrije Universiteit Brussel	300	294	2772
2019-63	Plasmoid release in the magnetosphere of Saturn	Emmanuel Chané	KU Leuven	100	6250	0
2019-64	Simulations of binary-induced complex outflow patterns from oxygen-rich AGB stars	Jan Bolte	KU Leuven	2000	9000	4480
2019-65	Decay-less oscillations of coronal loops as a self-oscillating process	Konstantinos Karpelas and Tom Van Doorsselaere	KU Leuven	500	320	1000
2019-66	Computational rational design of a CO ₂ hydrogenation catalysts for carbon capture and utilization technologies	Andrés-Ricardo León-Garzón	Ghent University	1500	2175	4901
2019-67	Understanding the collision between supernova remnants & astrophysical jets	Dimitrios Millas, Niels Claes and Rony Keppens	KU Leuven	3500	3300	1300
2019-68	DFT-NEGF electron transport in low-dimensional and topological-insulator materials for next-generation electronic devices	Aryan Afzalian	IMEC	100	10000	5000





*INNOVATIVE COMPUTING
FOR A SMARTER FLANDERS*



 vscentrum.be

 @vschpc

 vschpc

Colofon

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

Fonds Wetenschappelijk Onderzoek-Vlaanderen

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

Verantwoordelijke uitgever

dr Hans Willems
secretaris-generaal FWO

Copyright

Fonds Wetenschappelijk
Onderzoek-Vlaanderen

Teksten

Leen Van Rentergem,
Jan Ooghe,
Ingrid Barcena Roig,
Annie Cuyt, Stefan Becuwe,
Ewald Pauwels,
Geert Jan Bex,
Stefan Weckx, Ward Poelmans,
Caroline Volckaert, Tim Jaenen,

Creatie en vormgeving

Rafal Al-Tekreeti

Uitgegeven in **juni 2020**