



Vlaanderen
is supercomputing

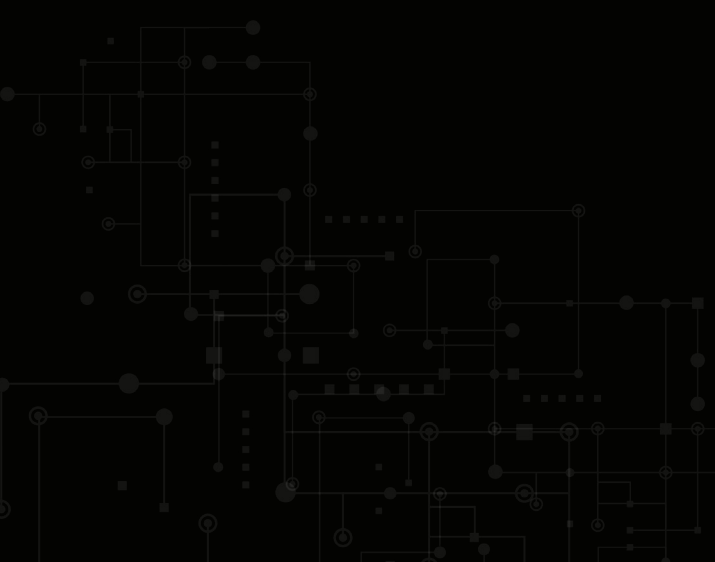


VSC | Vlaams Supercomputer Centrum

Jaarverslag

2020

Met steun van
fwo



Inhoudsopgave

Voorwoord	4	Personeel	48
In de kijker	6	Subsidiëring	48
COVID-19		Effectieve personeelsinzet	49
VSC User Council		Profielen	50
Hortense & Supercomputing as a Service		Gevorderde ondersteuning	52
Het VSC uitgelicht	8	Outreach naar bedrijven	53
VSC en het Tieringmodel	8	COVID-19	53
VSC Governance structuur	9	Testgebruikers	54
Financiering van het VSC	10	Bestaande en nieuwe klanten	55
Recurrente financiering	10	Partnerships	56
Eenmalige investering SaaS	11	VSC Industriële raad	56
COVID-19	13	Opleidingen	58
De VSC Infrastructuur	14	VSC in de media	62
Het Tier-1 supercomputerplatform	14	Succesverhalen	64
Activiteiten uitgevoerd in 2020	14	Internationale samenwerking	76
Toekennen van rekentijd	24	PRACE/LUMI/EuroCC/EuroHPC	76
Exploitatiemodellen voor Tier-1 SaaS platform	28	EGI	76
Tier-2 infrastructuur	30	Bijlagen	78
Tier-2 infrastructuur per instelling	30	Colofon	86
Exploitatie en gebruik	37		
Toekennen rekentijd Tier-2	42		
Gebruikersondersteuning	44		
Beantwoorden van vragen van gebruikers	44		
Bijeenkomsten met gebruikers / specifieke ondersteuning	45		



Voorwoord

In 2020 kreeg de wereld te maken met COVID-19. Het VSC nam in maart al de beslissing om extra reken capaciteit ter beschikking te stellen van onderzoekers voor specifiek COVID-19 onderzoek. Op die manier bevond VSC zich aan de frontlinie in de strijd tegen de pandemie, door de ondersteuning van onderzoek naar virusremmers, het berekenen van populatiemodellen, het effect van overheidsmaatregelen en meer.

Impact op excellent onderzoek blijft in de VSC dienstverlening een belangrijke drijfveer. Zo verbreedde men verder de organisatiestructuur door middel van het opzetten van een nieuwe User Council. Elf leden uit verschillende Vlaamse onderzoeksinstituten delen hun HPC ervaringen om de VSC werking verder te optimaliseren.

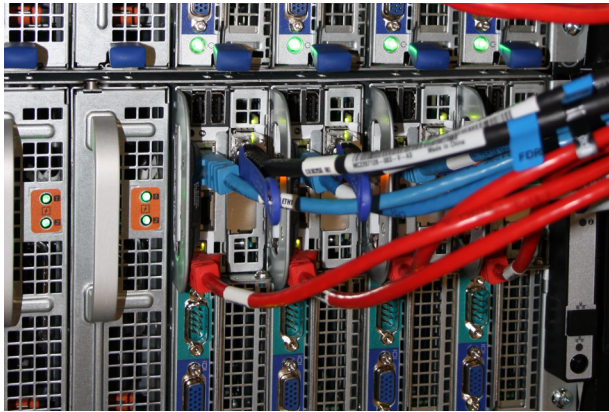
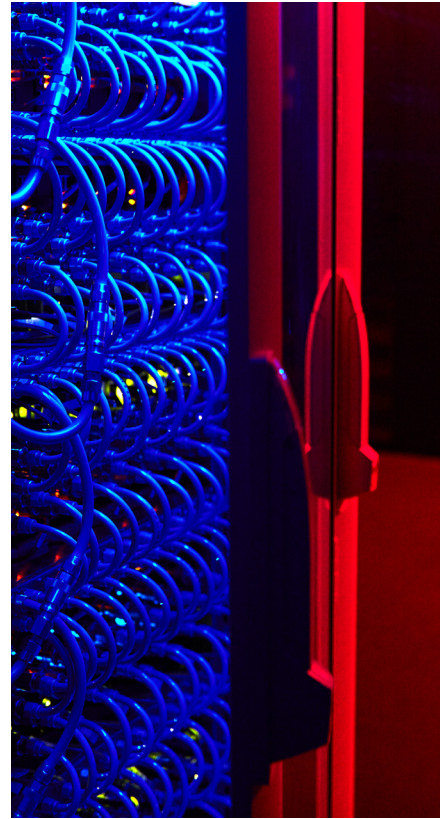
Naar de industrie zijn opnieuw verschillende initiatieven gelanceerd. Meer bedrijven konden met het VSC aanbod aan de slag, en bestaande klanten maakten meer gebruik van de VSC dienstverlening. Recent opgezette samenwerkingen kregen meer vorm.

Om alle gebruikers beter te kunnen bedienen, is in 2020 de aanbesteding voor een nieuwe Tier-1 infrastructuur afgerond. Deze infrastructuur vindt in 2021 onderdak in het datacenter van de Universiteit Gent. Hortense, naar Nicole-Reine Lepaute - één van de eerste bekende menselijke computers, beschikt over een RAM-geheugen van bijna 100 TB, piekprestaties tot 3,3 petaflops, en GPU capaciteit.

Op het huidige Supercomputing-as-a-Service platform liepen een aantal succesvolle pilootprojecten. Zo ontwierp LifeWatch Belgium 'Data Cloud voor Maritieme Industrie' voor het snel en efficiënt beschikbaar maken van Belgische mariene (biodiversiteits)

data aan kennisinstellingen en bedrijven. Usegalaxy is een ander voorbeeld. Hier bouwde VIB een analyseportal met een gebruiksvriendelijke interface om onderzoekers in de levenswetenschappen in staat te stellen data-intensieve analyses uit te voeren zonder geavanceerde computerskills. Een eerste data project is opgezet samen met 5 onderzoeksgroepen van 3 universiteiten (UGent, VUB en KU Leuven) die klimaatveranderingsstudies uitvoeren. Het samenwerkingsproject gebruikt soortgelijke datasets, vergelijkbare workflows en softwaretools. Vanaf het moment dat de data op het platform staan, kan de gebruiker de data openen, beheren, doorzoeken en delen en die datasets gebruiken als inputdata voor simulaties op VSC Tier-1 Compute.

Vanuit Europa verhoogt EuroHPC de aandacht voor HPC. België maakt deel uit van het LUMI consortium. Verder ging ook het nationaal HPC competentie centrum, onder leiding van Cenaero, van start met als doel HPC expertise verder te bundelen en impact van HPC op de samenleving te faciliteren.



KU LEUVEN

Leen Van Rentergem | Jan Ooghe | Ingrid Barcena Roig

Universiteit Antwerpen

Annie Cuyt | Stefan Becuwe | Bert Tijskens

UNIVERSITEIT GENT

Johan Van Camp | Ewald Pauwels | Stijn De Weirdt

VUB VRIJE UNIVERSITEIT BRUSSEL

Stefan Weckx | Ward Poelmans

UHASSELT

Geert Jan Bex | Rafal Al-Tekreeti

fwo

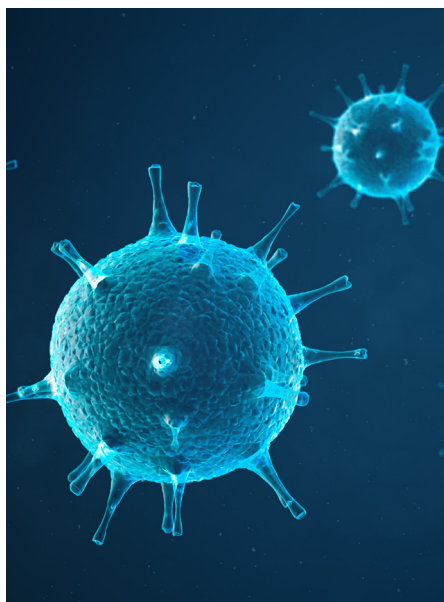
Caroline Volckaert | Tim Jaenen

VSC User Council



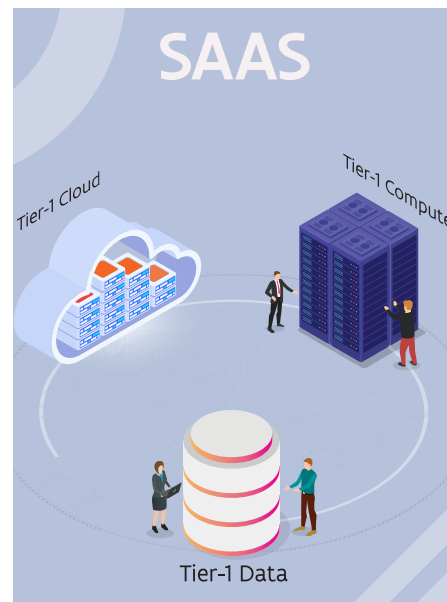
VSC User Council

Om de gebruikersbelangen binnen het brede Vlaamse onderzoekslandschap te behartigen, ging het VSC over tot een nieuwe inrichting van de User Council. Bij de samenstelling werd rekening gehouden met de concrete ervaring met HPC in de verschillende aspecten (compute, cloud, data/nationaal, EU/niet-EU, ...), en werd er op gelet dat verschillende aspecten uit het werkveld, en wetenschappelijke domeinen aan bod komen.



COVID-19

In maart opende VSC een speciale COVID-19 oproep voor academisch en industrieel onderzoek. VSC wilde als HPC-centrum de inspanningen ondersteunen om de pandemie te bestrijden door op een eenvoudige manier toegang tot supercompute resources op de VSC HPC-infrastructuur te verlenen.



Hortense & Supercomputing as a Service

In 2020 werden de details voor de nieuwe Tier-1 Compute component bekendgemaakt. In totaal bevat deze cluster meer dan 44.000 CPU-cores, 80 GPUs en bijna 100 TB aan RAM. Daarmee wordt dit de grootste en snelste supercomputer van Vlaanderen, met een geschatte piekperformantie van 3.3 petaflops. Als naam werd gekozen voor Hortense. Dat is een verwijzing naar Nicole-Reine Lepaute. Zij was één van de eerste notoire menselijke computers ('calculatrice'), die verscheidene zware astronomische berekeningen uitvoerde.

De Tier-1 data en cloud componenten werden verder uitgebouwd met een focus op verschillende piloot projecten.

9

13

16

“ Wat we waarderen aan VSC is de kwaliteit van de *infrastructuur* en de kwaliteit van de *technische ondersteuning* die we krijgen. Het VSC fungeert als een *katalysator* om imec-innovaties binnen zijn *ecosysteem* te ondersteunen.”

Geoffrey Pourtois*

Fellow | **imec**

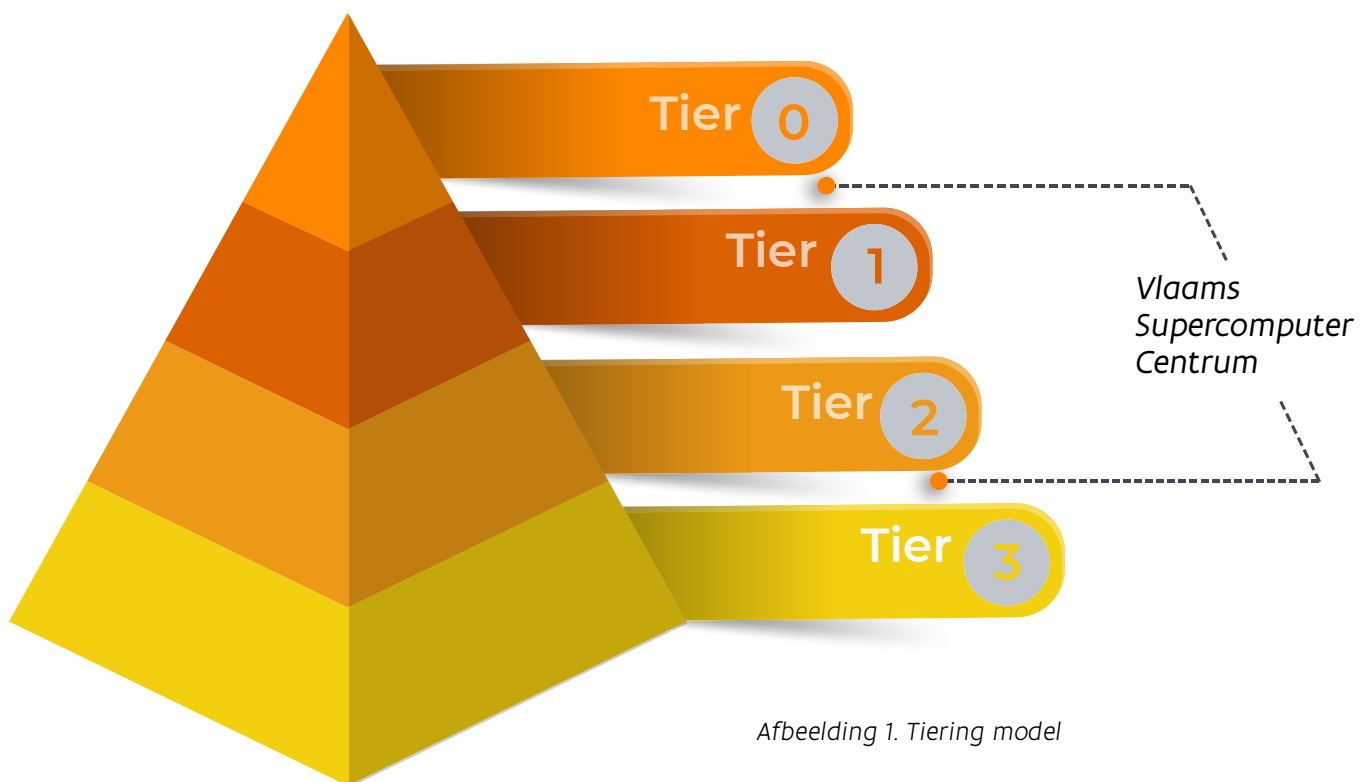
*bekijk zijn succesverhaal op pagina 75

Het VSC uitgelicht

VSC en het Tieringmodel

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.



Afbeelding 1. 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.

VSC Governance structuur

Sedert 2019 werd de governance-structuur van het VSC grondig hertekend, wat gepaard ging met een duidelijkere inbreng van meerdere stakeholders: kennisinstellingen, de Vlaamse wetenschappelijke instellingen (VWI's), de strategische onderzoekscentra (SOC's), en de industrie.

Een High-End Computing (HEC) raad – Vlaanderen stuurt 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 (compute, 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.

Een operationeel team zorgt o.m. voor een duurzame ondersteuning van gebruikers (advies en training), ook vanuit de industrie; samenstelling/architectuur van Tier-2 systemen; mogelijkheden voor federatie, expertise bundeling, training en specialisatie; uitwisseling van cycles voor een bepaalde omvang tussen de Tier-2 systemen.

De VSC Industriële raad ontwikkelt initiatieven om bedrijven en non-profit instellingen te informeren over de toegevoegde waarde die HPC levert bij het ontwikkelen en optimaliseren van diensten en producten en promoot de diensten die het VSC aan bedrijven levert zoals consultancy, onderzoekssamenwerking, training en rekenkracht.

Om de gebruikersbelangen binnen de Vlaamse kennisinstellingen, VWI's, en SOC's te behartigen, ging in 2020 het VSC over tot een nieuwe inrichting van de User Council. De zoektocht naar kandidaat-leden verliep via een open oproep. Bij de selectie werd rekening gehouden met de concrete ervaring met HPC in de verschillende facetten (compute, cloud, data/nationaal, EU/niet-EU, ...), en werd er op gelet dat verschillende aspecten uit het werkveld, en wetenschappelijke domeinen aan bod kwamen.

Samenstelling vanaf 2020 (aangesteld voor 2 jaren):

- Kurt De Grave | Flanders Make
- Jan Goedgebeur | UGent
- Álvaro Cortés Calabuig | KU Leuven/UZ Leuven Genomics Core
- Hans De Winter | UAntwerpen
- Jochen Schütz | UHasselt
- Catharina Olsen | UZ Brussel
- Francisco Tjess Hernandez | VLIZ (voorzitter)
- Frederik Coppens | VIB - UGent Center for Plant Systems Biology
- Hossein Ghorbanfekr | VITO
- Nele Moelans | KU Leuven
- Lander Willem | UAntwerpen

Financiering van het VSC

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, aangevuld met co-financiering vanuit de instellingen. 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 gerealiseerd. In 2021 gaat een voorstudie van start aangaande het uitwerken van een langetermijnfinancieringsplan voor de periode 2023-2027.

Recurrente financiering

In 2020 werd de Tier-2 infrastructuur voor 6.001.000 euro gecofinancierd door het FWO verdeeld over 4.066.000 euro investeringen in hardware, 1.900.000 euro in personeel en 35.000 euro voor de Belnet verbinding. Daarnaast investeerde het FWO 380.000 euro in het personeel voor de twee Tier-1's. Het gezamenlijk budget bedraagt dus 6.381.000 euro.

Deze middelen werden aangewend voor het financieren van:

- personeelskosten voor de exploitatie van 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.];
- Belnet kosten (35.000 euro);
- investeringen en werkingskosten voor de Tier-2 infrastructuur (4.066.000 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
Totaal personeel	€ 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	€ 1 665 434	€ 157 354	€ 1 316 977	€ 418 798	€ 507 437	€ 4 066 000			€ 4 066 000
Energiekosten Tier-1									
Belnet	€ 35 000					€ 35 000			€ 35 000
Totaal	€ 2 270 434	€ 347 354	€ 1 791 977	€ 703 798	€ 887 437	€ 6 001 000	€ 190 000	€ 190 000	€ 6 381 000

Tabel 1. 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.

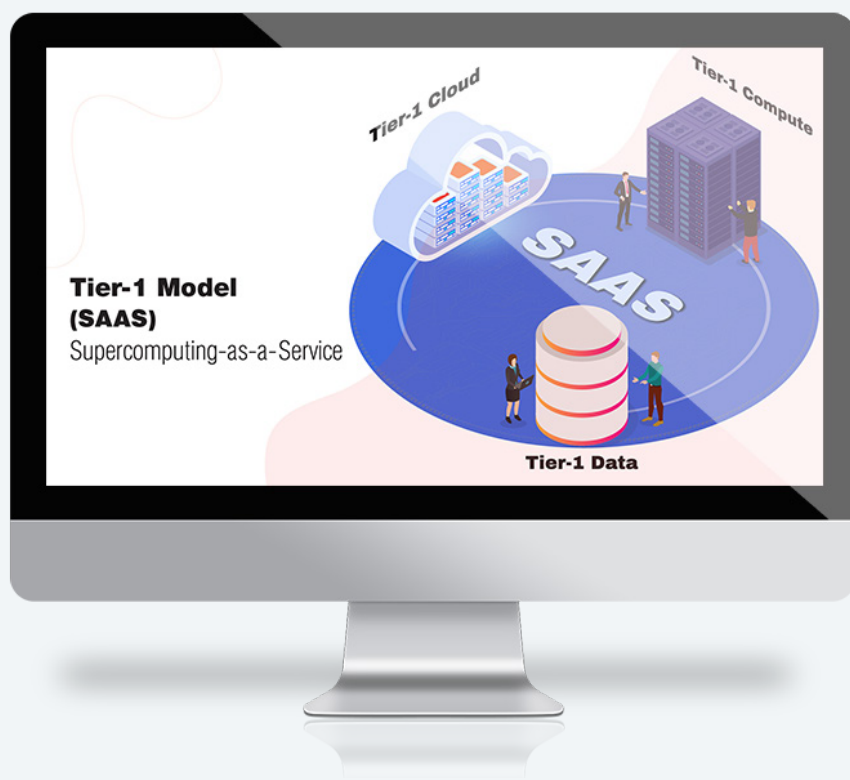
Enmalige investering SaaS

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 de vraag naar meer dataverwerking, ontsluiting en gebruiksomgevingen op maat groot.

Het VSC biedt daarom een nieuw conceptueel Tier-1 model aan: Supercomputing as a Service (SaaS).

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:

1. De belangrijkste component in dit model blijft de compute infrastructuur: klassieke rekenclusters die zware of een veelvoud aan reken-taken 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.



Afbeelding 2. SaaS

3. Onderzoek met deze datasets vraagt veelal ook een flexibele gebruiksomgeving: een omgeving waar op een interactieve manier, op maat van de toepassingen de gebruikersanalyses 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 gebruiker; 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 worden aangeboden.

De laatste twee componenten zijn nieuw op het Tier-1 niveau. Onderstaande impulsfinanciering voor het opbouwen van deze omgevingen zorgt ervoor dat in de periode 2018-2022 een volledig model en infrastructuur kunnen worden uitgebouwd om het Supercomputing as a Service concept te verwezenlijken:

	2018	2019	2020	2021	2022	Totaal (M)
Tier-1 compute	€ 5 000 000		€ 5 022 301	€ 1 320 500	€ 6 300 000	€ 17,6428
Tier-1b	€ 5 000 000			€ 142 780		
Tier-1c			€ 5 022 301	€ 1 177 699	€ 6 300 000	
Tier-1 cloud		€ 360 000	€ 46 970	€ 2 140 000	€ 800 000	€ 4,9970
Tier-1 data		€ 435 000	€ 475 000	€ 490 000	€ 800 000	€ 2,2000
Stroom en personeel	€ 190 000	€ 610 000	€ 966 294	€ 1 415 500	€ 1 465 165	€ 4,6470
Tier-1 stroom		€ 230 000	€ 396 294	€ 845 500	€ 895 165	€ 2,3670
Tier-1 personeel	€ 190 000	€ 380 000	€ 570 000	€ 570 000	€ 570 000	€ 2,2800
Tier-1 integratie		€ 45 000	€ 77 269	€ 293 000	€ 98 000	€ 0,5133
Totaal (M)	€ 5,19	€ 1,45	€ 6,59	€ 5,66	€ 11,11	€ 30,0000

Tabel 2. Details impulsfinanciering

Aangezien de Tier-1 financiering afloopt eind 2022, moeten nu stappen gezet worden voor een vervolgtraject zodat ook na 2022 de toegang tot HPC in Vlaanderen kan gecontinueerd worden. Niet alleen het compute luik, maar ook de data en cloud componenten dienen verder uitgebouwd te worden. Ook de veranderende Vlaamse en internationale context dienen meegenomen te worden in de verdere uitbouw van het VSC.

COVID-19

In maart opende VSC een speciale COVID-19 oproep voor academisch en industrieel onderzoek. Dit was een onmiddellijk gevolg van de perceptie dat een aantal onderzoeksgroepen al actief bezig waren om de epidemie op verschillende manieren te bestrijden. Verder hadden ook bedrijven baanbrekende ideeën rond het onderwerp. VSC wilde als HPC-centrum deze inspanningen ondersteunen door op een eenvoudige manier toegang tot supercompute resources op de VSC HPC-infrastructuur te verlenen.



Met de hulp van de VSC supercomputers, bieden we tijdige inbreng voor beleidsmakers en volksgezondheidsspecialisten om de verspreiding van het virus te bestrijden in Europa”

Niel Hens | Biostatisticus | UHasselt/UAntwerpen
(Zie pagina 68)

In één van die projecten hebben onderzoekers van de Antwerpse onderzoeksgroep UAMC (University of Antwerp Medicinal Chemistry), onder leiding van professor Hans De Winter, miljoenen chemische structuren op de Vlaamse Supercomputer geëvalueerd. De bedoeling is om tot de beste kandidaat-structuren te komen die de werking van het COVID-virus remmen en klaar te staan met actieve bestanddelen indien er in de toekomst nieuwe uitbraken komen van corona gerelateerde virussen. Dankzij de enorme computerkracht die beschikbaar is bij het VSC konden de kleinste details mee in rekening worden gebracht bij de simulaties. Voor de meest gedetailleerde en meest nauwkeurige settings die werden gesimuleerd, had de Vlaamse Tier-1 supercomputer 1.200 nodedagen nodig per compound, hetgeen overeenkomt met de rekenkracht van meer dan 30.000 gewone desktop computers gedurende een hele dag.

Ook het COVID-19 meta-population model doet beroep op de rekenkracht van het VSC. Dit meta-populatie model werd door het SIMID COVID-19

team onder leiding van professor Niel Hens en Lander Willem van de UHasselt en UAntwerpen ontwikkeld, en wordt dus gebruikt om de verspreiding van het COVID-19 virus in België in kaart te brengen en de impact van maatregelen in te schatten. Dit model is de afgelopen periode een heel belangrijk instrument geweest voor het Belgische en Vlaamse coronabeleid.

Ook het Rega Instituut aan de KU Leuven geeft aan dat de supercomputer infrastructuur hun toelaat om met genomische analyses de wereldwijde circulatie van SARS-CoV-2 in kaart te brengen. Dit helpt dan ook om de verspreiding van nieuwe varianten te traceren.

Tot slot hebben onderzoekers van de UGent-VIB, onder leiding van professor Yvan Saey, de immuunrespons in de longen en het bloed van gehospitaliseerde COVID-patiënten in kaart gebracht. Op basis van die data kon dan op moleculair niveau bestaande behandelingen geoptimaliseerd worden, of zelfs nieuwe geneesmiddelen ontwikkeld.

De VSC Infrastructuur

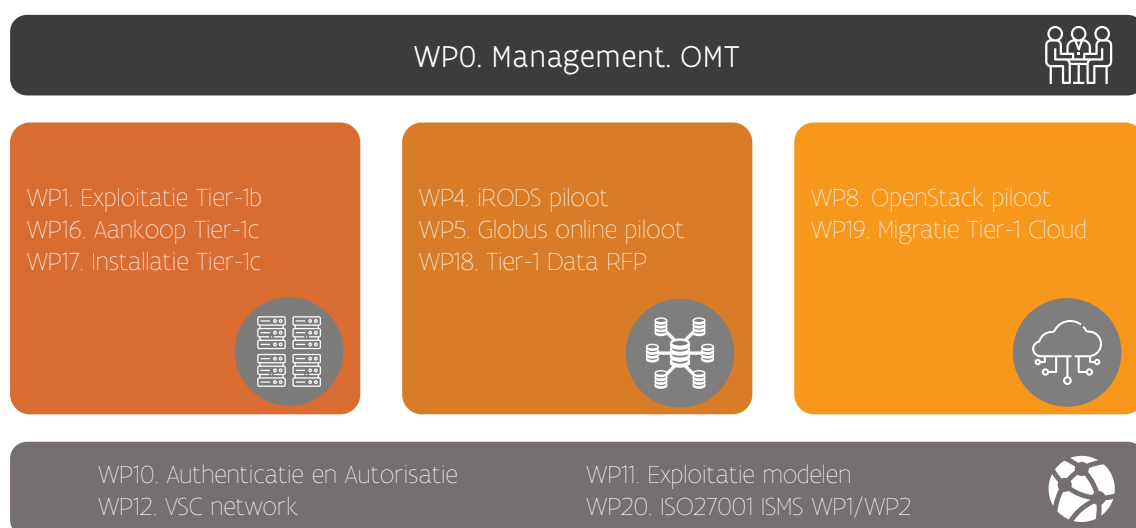
Het Tier-1 supercomputerplatform

Activiteiten uitgevoerd in 2020

Het Tier-1 SaaS project dat werd opgestart in maart 2018 leverde in 2020 verscheidene resultaten en infrastructuur componenten op, in overeenstemming met het investeringsplan.

In 2020 lag de focus op versterking van de compute component enerzijds en anderzijds de verderzetting van de data en cloud piloten.

Volgende acties werden in 2020 uitgevoerd voor de verschillende componenten van de Tier-1 SaaS: de aankoopprocedure van het volgende systeem voor de Tier-1 Compute component (Tier-1c) en de eerste fase van de installatie, het verder implementeren van de piloot infrastructuur voor de data component en het identificeren van de gebruikersnoden voor de productieomgeving, de installatie van de infrastructuur voor de productieomgeving van het Tier-1 Cloud component en de migratie van de Cloud piloten naar de nieuwe omgeving.



Afbeelding 3. Tier-1 actieplan

Bovendien werden een aantal taken uitgevoerd rond integratie: de definitie van toegang en exploitatie modellen voor de twee nieuwe componenten (data en cloud), de studie over de mogelijkheden om het VSC Belnet netwerk redundant te maken, en de eerste stappen voor de implementatie van een Information Security Management System (ISMS) framework in het kader van de ISO27001 specificaties.

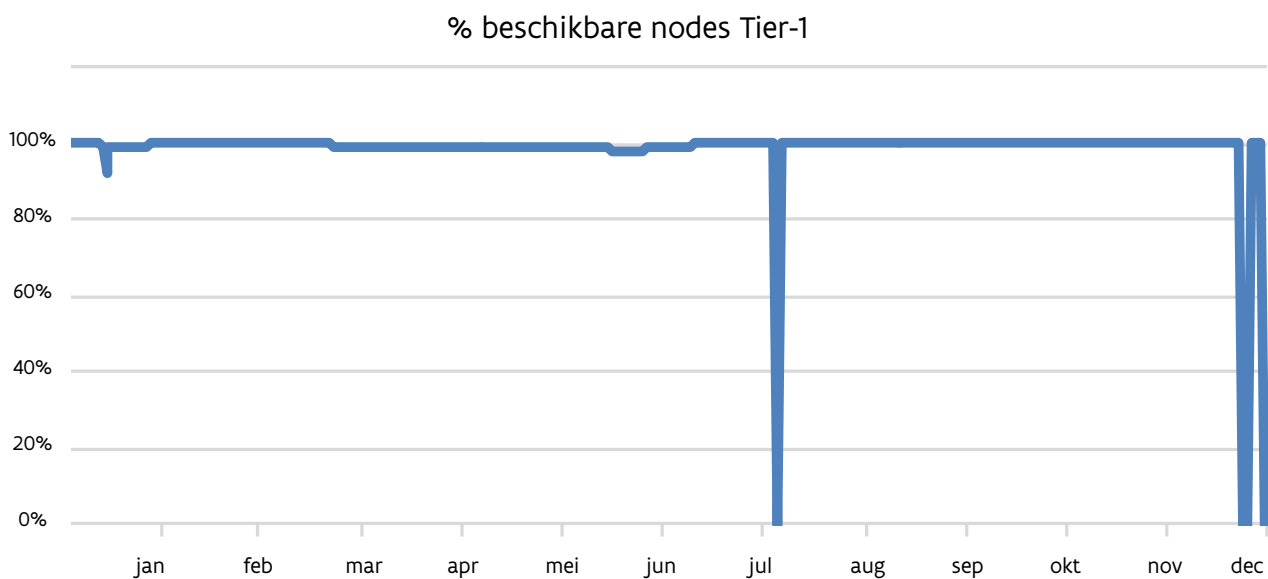
Compute

Voor de Tier-1 Compute component werden in 2020 de volgende taken uitgevoerd:

Exploitatie Tier-1b (BrENIAC)

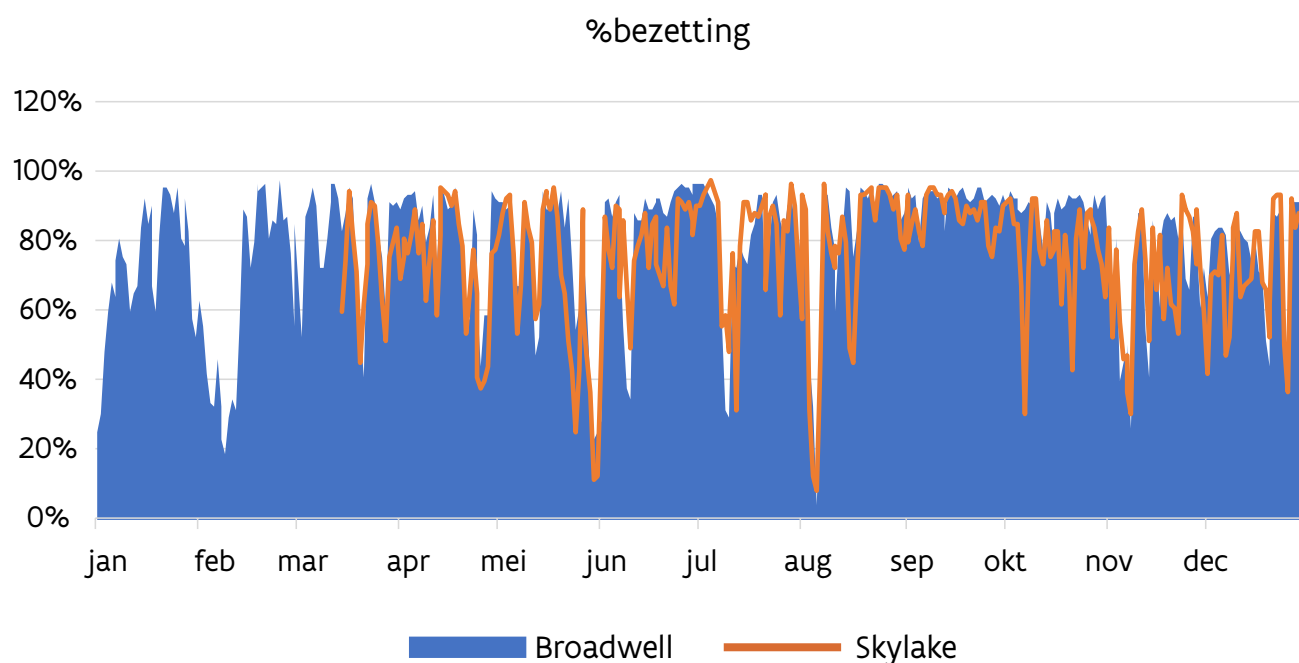
Er was in 2020 over het algemeen een goede beschikbaarheid van de Tier-1b Compute infrastructuur BrENIAC, met een gemiddelde uptime boven de 96%. Er waren echter ook momenten met een significante downtime: 1) een downtime in augustus om een update van het operating system en de software van het scratch bestandssysteem uit te voeren; 2) een downtime in december toen problemen met enkele slecht werkende InfiniBand kabels er voor zorgden dat de scratch storage instabiel was. Daardoor werd het systeem van 24 december tot 8 januari gesloten.

Bovendien waren er ook 2 momenten met gereduceerde bezetting omwille van onderhoudswerken in andere VSC hubs. BrENIAC was weliswaar volledig beschikbaar tijdens deze periodes maar kon tijdelijk niet worden gebruikt door gebruikers van deze hubs: twee downtime periodes van 1 week in Gent begin februari en begin november en een downtime van een week in Antwerpen in de tweede week van februari.



Afbeelding 4. Tier-1 Uptime 2020

Tier-1 bezetting



Afbeelding 5. Tier-1 bezetting

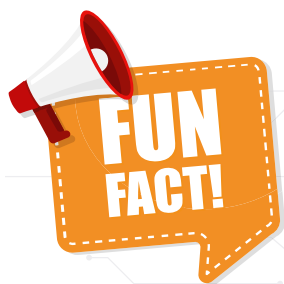
Installatie Tier-1c (Hortense)

In 2020 werd de aankoopprocedure van het volgende systeem voor de Tier-1 compute component (Tier-1c) afgerond. In 2019 werd Universiteit Gent gekozen als hosting site en aanbestedende instelling voor de derde Vlaamse Tier-1 supercomputer.

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. Op deze aankondiging dienden verscheidene leveranciers een aanvraag tot deelneming in. Na een toetsing aan selectiecriteria werden op 1 juli 2019 vervolgens 7 kandidaten geselecteerd en toegelaten om een offerte in te dienen op basis van het bestek.

Op 3 januari 2020 werd in een openbare zitting vastgesteld dat 5 leveranciers een offerte hadden ingediend. Na toelichting van deze offertes door alle leveranciers, werd vervolgens op basis van de gunningscriteria in de tussentijdse beslissing van 31 januari 2020 een shortlist van 3 kandidaten opgesteld. Deze kandidaten werden toegelaten tot het volgend stadium van de procedure, met name het indienen van een Best And Final Offer (BAFO).

Op 9 maart 2020 werden opnieuw 3 offertes ontvangen. Na andermaal een toelichting van deze aangepaste offertes door de leveranciers werd uiteindelijk op 30 maart 2020 overgegaan tot een finale selectie op basis van de gunningscriteria. Op 22 april 2020 werd de opdracht officieel toegewezen aan ATOS.



Fun facts over de aanbestedingsprocedure



97 pagina's bestek, richtlijnen en technische bijlagen, in 2 talen



>400 technische specificaties



3 selectierapporten



+10 meetings van de selectie- en gunningscommissie in 2020



+1000 email correspondenties gerelateerd aan aanbestedingsprocedure



+2300 pagina's aan offertes, technische tekeningen en annexen

ATOS zal binnen dit raamcontract twee supercomputers leveren als onderdeel van de Tier-1 Compute component. De tweede fase is gepland voor 2022, de eerste fase werd besteld op 30 april 2020.

3 PB multi-tier storage

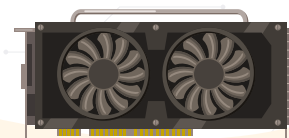
HDR Infiniband interconnect



294 CPU nodes
37.632 cores
256 GB RAM



42 CPU nodes
5.376 cores
512 GB RAM



20 accelerator nodes
80 GPUs - 40 GB RAM
256 GB RAM

Afbeelding 6. Configuratie van Tier-1c (Hortense)

De configuratie van deze eerste fase omvat de volgende elementen:

- een partitie met 294 nodes, elk uitgerust met twee 64-core AMD Rome 7H12 CPUs en 256 GB RAM
- een partitie met 42 nodes, elk uitgerust met twee 64-core AMD Rome 7H12 CPUs en 512 GB RAM
- een accelerator partitie met 20 nodes, elk met twee 24-core AMD Rome 7402 CPUs, 256 GB RAM, 4 NVIDIA Ampère A100 GPUs met 40 GB on-board RAM
- een multi-tier opslageenheid met ruim 3 PB aan bruikbare opslagruimte met een gedeeld bestandssysteem op basis van Lustre
- een InfiniBand HDR100 interconnect tussen alle nodes en opslageenheid

In totaal bevat deze cluster dus meer dan 44.000 CPU cores, 80 GPUs en bijna 100 TB aan RAM. Daarmee wordt dit de grootste en snelste supercomputer van Vlaanderen, met een geschatte piekperformantie van 3.3 petaflops.

Als naam voor deze Tier-1 Compute component werd gekozen voor “Hortense”. Dat is een verwijzing naar Nicole-Reine Lepaute – Hortense was een bijnaam – die werd geboren in 1723. Zij was één van de eerste notoire menselijke computers (‘calculatrice’), die verscheidene zware astronomische berekeningen uitvoerde. Eén van haar grootste prestaties was een nauwkeuriger voorspelling van de komst van de komeet van Halley. Helaas zegt haar verhaal ook veel over de historische onderwaardering van vrouwen in de wetenschap. Haar belangrijke bijdrage aan het berekenen van de baan van de komeet van Halley werd in de eerste publicatie ‘vergeten’.

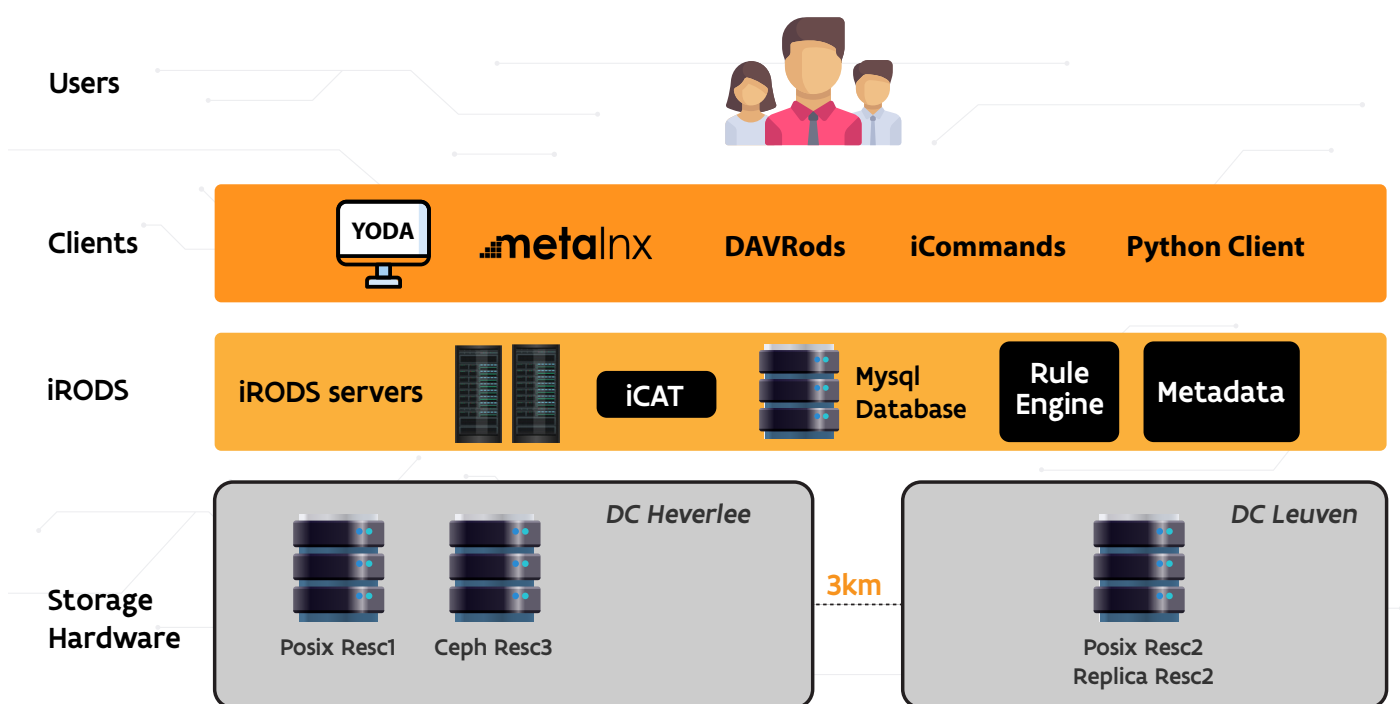
In de oorspronkelijke planning zou de pilootfase op de Hortense Tier-1 Compute component eind 2020 van start gaan. COVID-19 en dan vooral de reisbeperkingen ter bestrijding van de pandemie hebben evenwel voor ernstige vertragingen gezorgd. Op dit ogenblik is de pilootfase van de Hortense Tier-1 Compute component gepland voor juli-augustus 2021.

Data

De Tier-1 data component zorgt ervoor dat onderzoeksdata van VSC gebruikers tijdens de actieve fase van de data levenscyclus dicht bij de Compute en/of Cloud infrastructuur blijft. Tijdens de actieve fase wordt data aangemaakt, gewijzigd, gebruikt en hergebruikt, en dit gedurende de looptijd van het project (typisch 2 tot 4 jaar). Tegelijkertijd wordt het makkelijker om grote datasets van en naar VSC-infrastructuur te migreren.

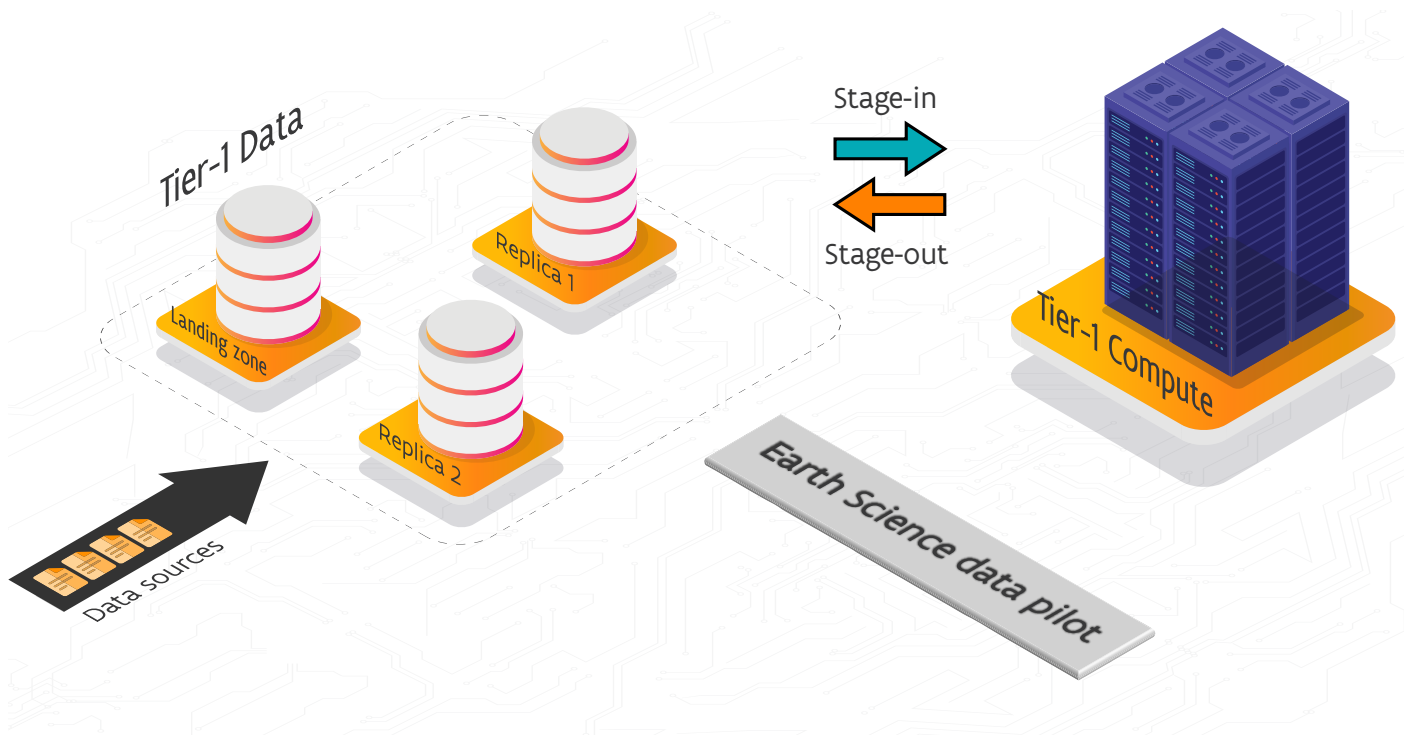
In 2020 lag de focus van de activiteiten voor de Tier-1 data component op de installatie en configuratie van de infrastructuur voor de piloot fase en de opstart van een aantal piloot projecten.

De Tier-1 data piloot infrastructuur is gebaseerd op de Open Source software **iRODS** en heeft een storage backend met 2 POSIX systems met een bruto capaciteit van 1,5 PB elk en een object storage systeem (Ceph) met 600 TB bruto capaciteit. Omwille van de COVID-19 pandemie was er een vertraging op de levering van de storage infrastructuur die eind december 2019 werd aangekocht. De werken voor de installatie van deze hardware konden, als gevolg hiervan, pas starten in de loop van april 2020. Na het afwerken van de installatie werd de iRODS middleware software geïnstalleerd, geconfigureerd en getest. Gebruikers krijgen hiermee verschillende user clients tot hun beschikking om met het platform te werken: van basis command line (CLI) en Python clients, die meer geschikt zijn voor gevorderde gebruikers, tot tools zoals Metalnx en YODA die een meer gebruikersvriendelijke Graphical User Interface (GUI) aanbieden.



Afbeelding 7. De Tier-1 Data piloot infrastructuur

In juni startte het eerste Tier-1 data pilootproject, een samenwerkingsproject tussen 5 onderzoeksgroepen van drie Vlaamse universiteiten (UGent, VUB en KU Leuven) rond klimaatverandering.

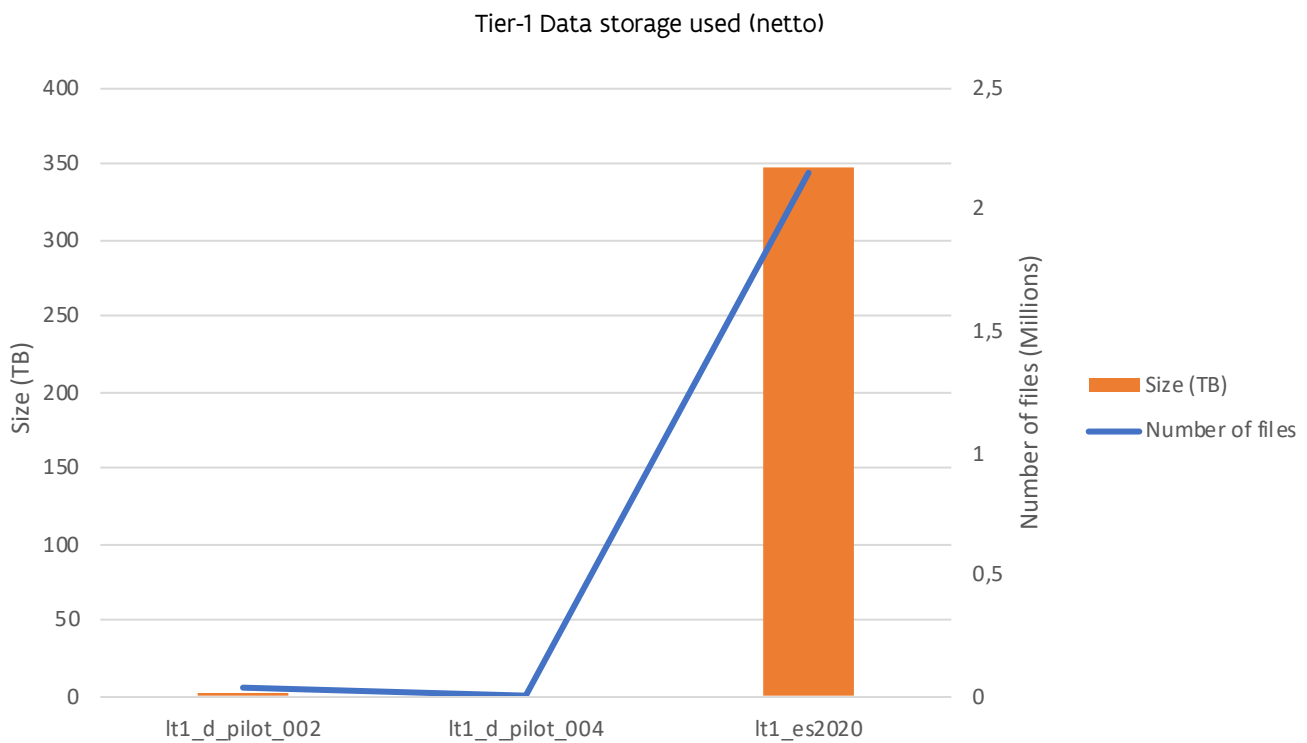


Afbeelding 8. Earth Science data pilot

In juli is een piloot gestart in het kader van het CLARIAH-VL consortium, de Open Humanities Service Infrastructure. CLARIAH-VL is een International Research Infrastructure (IRI) gefinancierd door het FWO die als doel heeft om het gebruik van geavanceerde digitale tools te bevorderen in het domein van humane- en sociale wetenschappen.

De piloot zal drie verschillende datasets hosten op de Tier-1 data infrastructuur: oude gedigitaliseerde Belgische kranten, getuigenverklaringen en verhoren van de XVII en XVIII eeuw bewaard bij Belgische rechtbanken en de SONAR dataset, een referentie corpus voor het Nederlands dat 500 miljoen woorden telt.

De Tier-1 Compute component zal gebruikt worden om deze datasets te analyseren met “Optical Character Recognition” of “Handwriting Text Recognition” tools en ook tools om m.b.v. machine learning een zogenaamd BERT (Bidirectional Encoder Representations from Transformers) model te trainen voor het Nederlands. In een tweede fase zal de Tier-1 Cloud component een portal hosten om deze datasets publiek beschikbaar te maken en tools aan te bieden voor de analyse van die datasets.



Afbeelding 9. Tier-1 data storage gebruik

In de laatste maanden van 2020 zijn er twee extra projecten gestart, in een voorbereide fase.

Een belangrijke taak van het Tier-1 data team tijdens 2020 was ook de ondersteuning van nieuwe gebruikers. Er werden meerdere trainingssessies georganiseerd om de gebruikers het systeem te leren kennen, er werd trainingmateriaal en gedetailleerde documentatie over het gebruik van de Tier-1 data component beschikbaar gemaakt en er werden in totaal 38 tickets opgelost in het centrale support systeem.

Cloud

Onderzoekers die de VSC Tier-1 HPC services gebruiken, hebben ook vaak nood aan meer flexibele gebruikersomgevingen waarin ze kunnen gebruikmaken van software of services die niet geschikt zijn voor gebruik op een grootschalig HPC-systeem zoals op maat softwarepakketten, interactieve data analyses, workflow portals, data visualisatie en specifieke pre- en postprocessing taken.

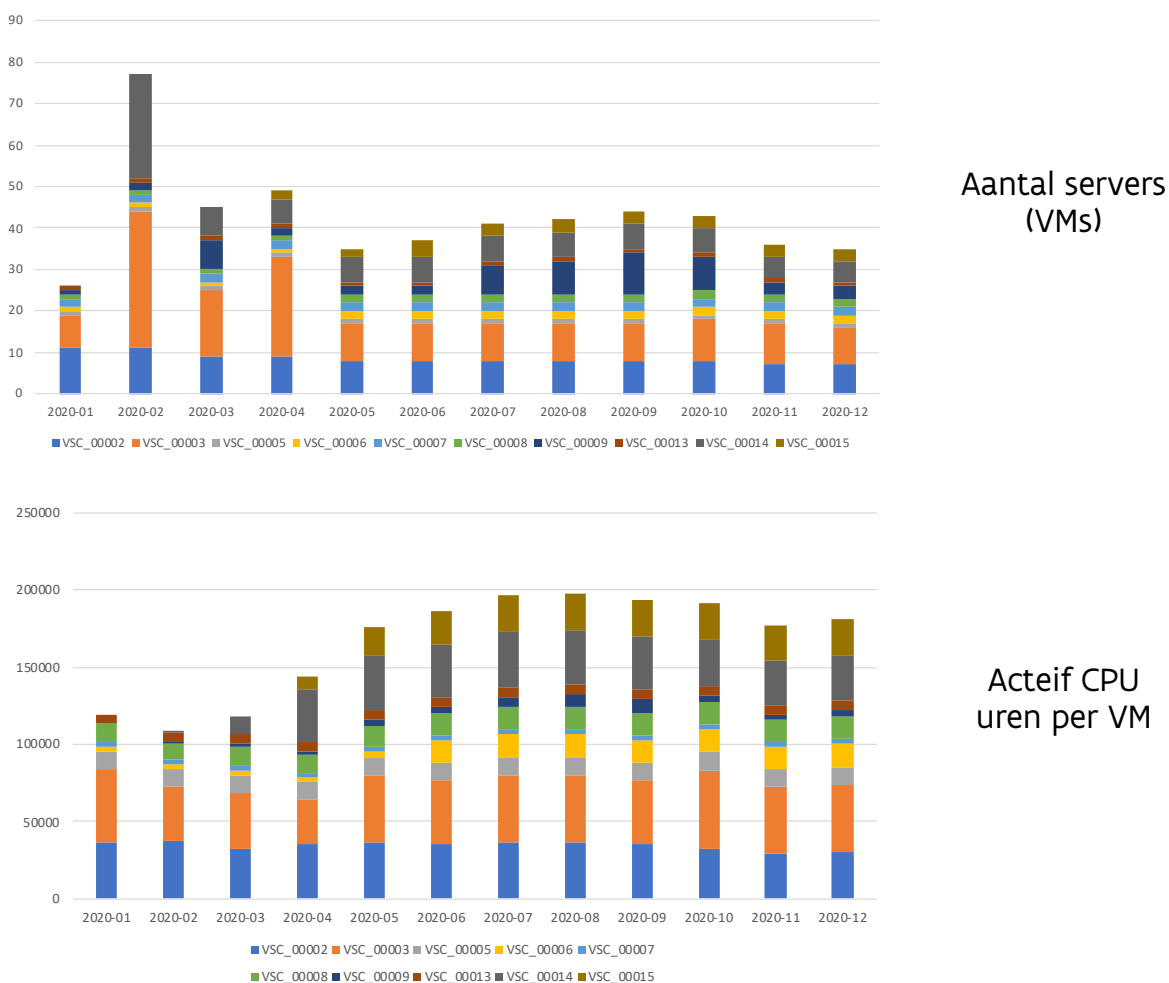
De Tier-1 Cloud component heeft de ambitie om deze nood te lenigen door een Cloud service gebaseerd op OpenStack te implementeren die 'on demand' resources zal aanbieden in een meer flexibele en cloud-like manier. De Tier-1 Cloud component biedt Infrastructure as a Service (IaaS) capaciteiten om resources in te zetten zoals virtual machines (VMs), storage of netwerk met volledige controle door de gebruikers van deze resources. In de toekomst zal het ook een aantal high level services aanbieden via een ready-to-use catalogoog van templates die het eenvoudig zullen maken om databanken of webservern met slechts een paar muisklikken op te zetten.

In 2020 werd hard gewerkt aan een eindtraject om de Tier-1 Cloud component in productie te brengen. Om deze 'final push' te verwezenlijken werd bijkomende hulp ingeroepen bij RedHat om het onderliggende OpenStack softwareproduct optimaal in te zetten. Consultancy hiervoor werd aangeleverd door Devoteam.

De Tier-1 Cloud testomgeving op basis van RedHat OpenStack Platform (RHOSP) v15 bleef immers significante stabiliteitsproblemen opleveren, inherent aan stabiliteitsproblemen in de software versie. In totaal werden hiervoor 70 development issues en bugs bij RedHat gerapporteerd. Pas na een tijdrovende migratie naar RHOSP16.1 (gestart in augustus 2020) kon volwaardige stabiliteit van het platform worden bekomen met behoud van alle features en integraties die in de piloot-setup waren opgenomen.

Om de hinder van die migratie voor pilootgebruikers van de Tier-1 Cloud omgeving zo minimaal mogelijk te houden, werd ervoor gekozen om de productieomgeving op te zetten op basis van RHOSP16.1, in parallel aan de bestaande pilootopstelling (op basis van RDO, de niet ondersteunde distributie van OpenStack voor CentOS). Vervolgens werden manueel 7 pilootprojecten gemigreerd naar de nieuwe opstelling, inclusief de reeds aangemaakte images, virtuele storage volumes en publieke IP-adressen. De gebruikers werden uiteraard steeds op de hoogte gehouden, en deze migratie werd ook ruim van tevoren aangekondigd. Tenslotte werd de pilootopstelling (en bijhorende testopstelling voor de pilootomgeving) ontmanteld.

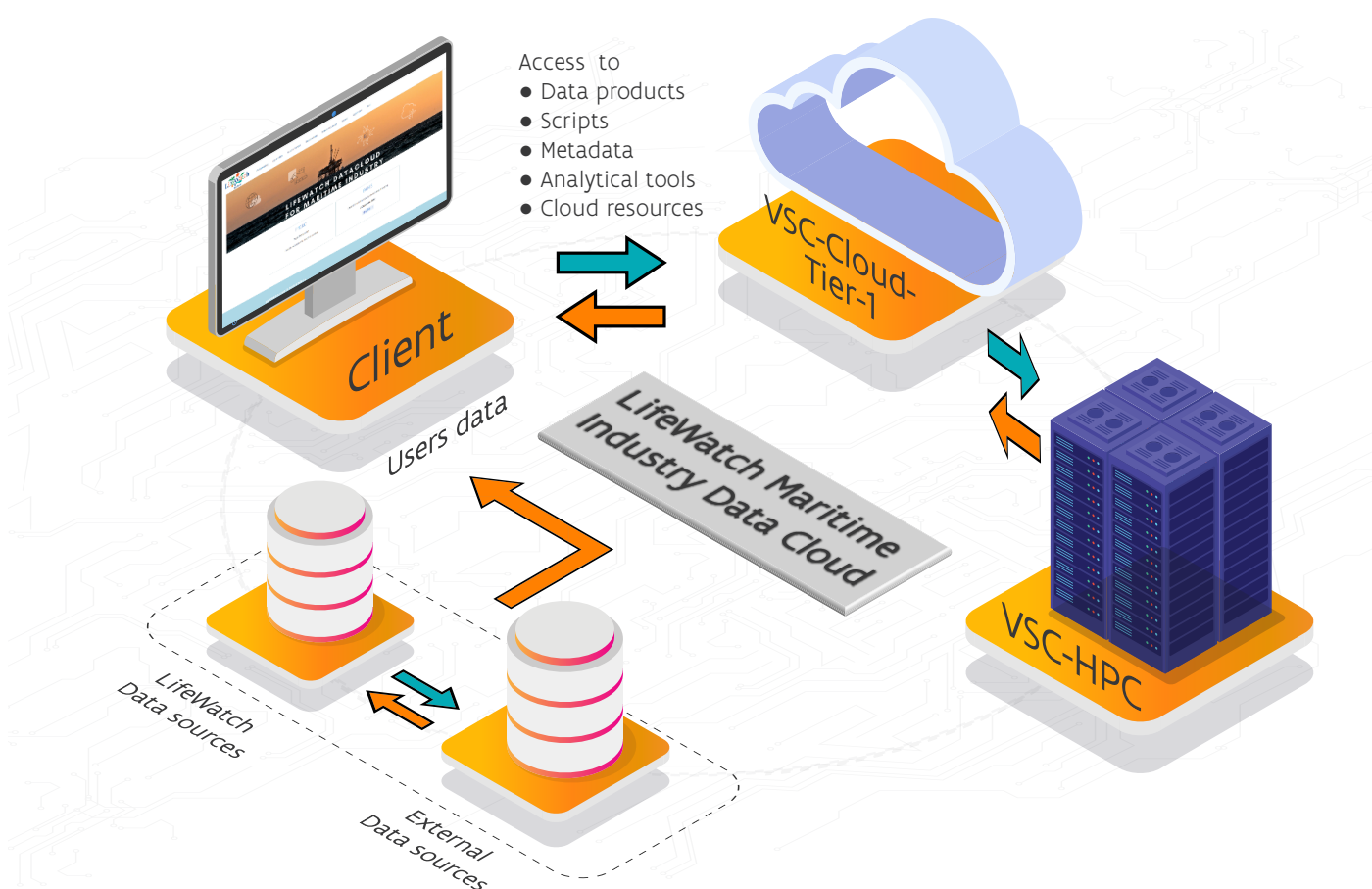
In 2020 werd de Tier-1 Cloud infrastructuur op regelmatige wijze gebruikt door de gebruikers binnen de pilootprojecten. Gemiddeld werden 5 VMs gecreëerd per project en die VMs waren actief gemiddeld 5.500 uren per maand, dat is ongeveer het 75% van de tijd.



Afbeelding 10 Gebruik Tier-1 cloud

In 2020 werden in het algemeen 57 gebruikerstickets aangaande het Tier-1 Cloud platform opgelost via het centrale ondersteuningssysteem.

Eén van de pilootprojecten is “Data Cloud for Maritime Industry” van het Vlaams Instituut voor de Zee (VLIZ). In dit project wordt een portal ontwikkeld om verschillende types van maritieme data (fysico-chemical, biodiversiteit, hydrometeo, akoestisch, etc) beschikbaar te maken aan maritieme onderzoekers en professionelen. Dit portal is gehost op de Tier-1 Cloud component en bestaat uit een galerij van “ready to use” producten (bijv. verspreiding en habitatgeschiktheidskaarten voor zeeviesoorten) en een “data explorer” waarmee gebruikers hun eigen of externe datasets kunnen uploaden om ze te analyseren met de Tier-1 Compute infrastructuur. Het platform wordt in 2021 gelanceerd.



Afbeelding 11. LifeWatch Maritime Industry Data Cloud

Op 10 maart 2020 werd ook een workshop georganiseerd rond proteomics activiteiten in Vlaanderen, specifiek toegespitst op potentiële toepassing in de Tier-1 Cloud. Aan deze workshop namen onderzoeksgroepen deel van UAntwerpen, VUB, UGent, UHasselt en VIB.

Toekennen van rekentijd

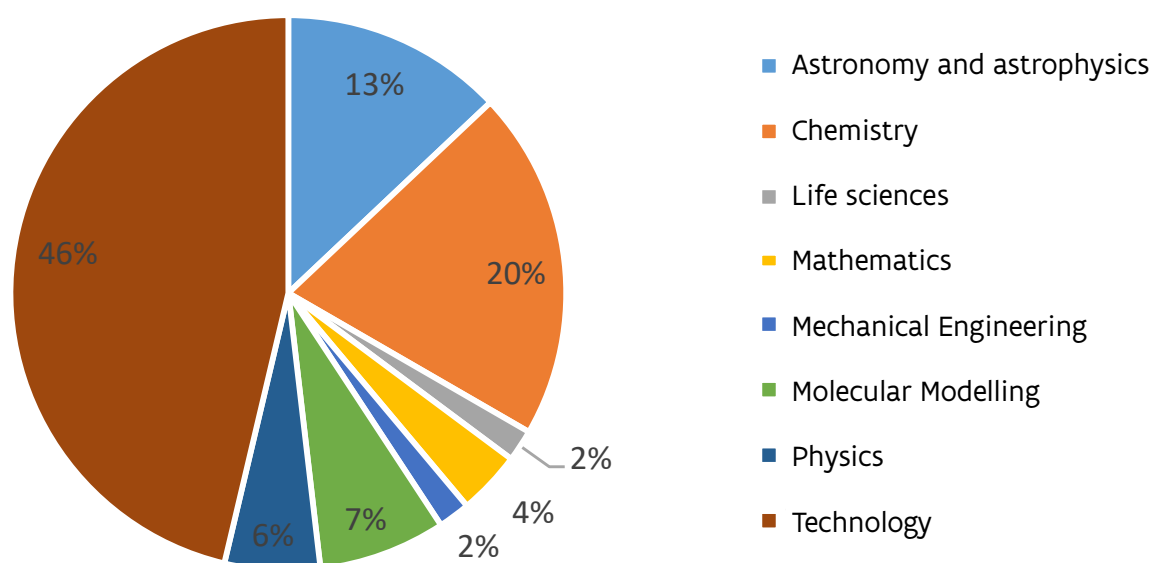
Er zijn een aantal manieren waarop onderzoekers rekentijd op Tier-1 Compute component kunnen bekomen. Daarbij wordt een onderscheid gemaakt tussen academische en niet-academische gebruikers.

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

Starting Grant

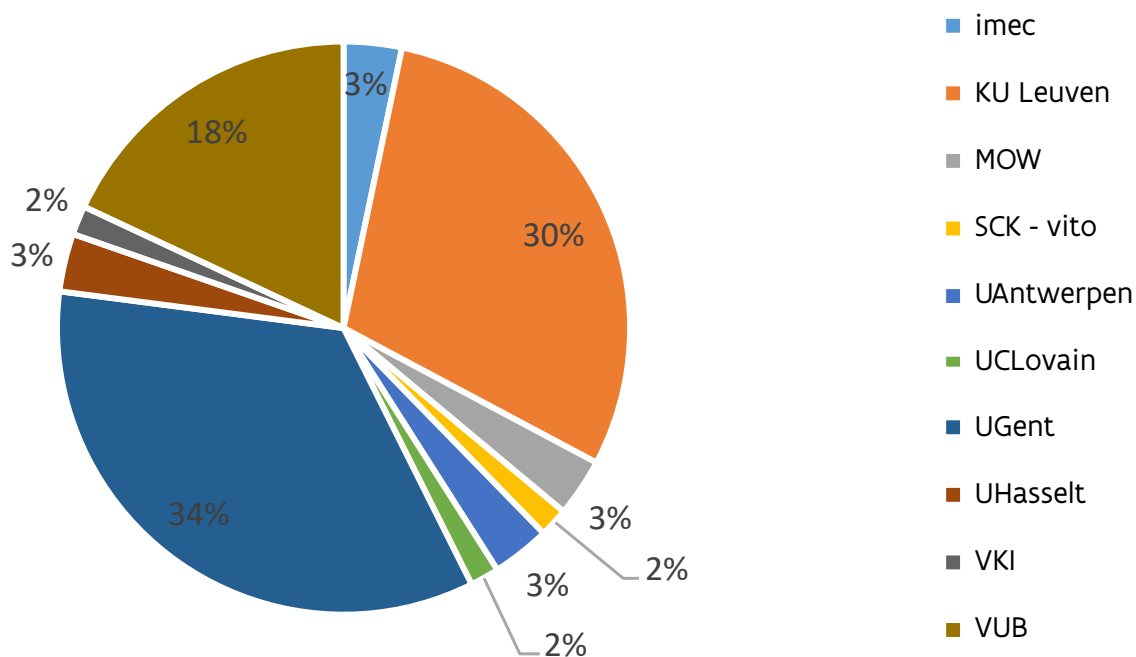
- Maximaal 500 nodedagen rekentijd
- Kan op elk ogenblik aangevraagd worden, met snelle doorlooptijd
- Om Tier-1 uit te proberen en benchmarks of softwaretests uit te voeren, als voorbereiding van een volwaardige projectaanvraag
- Gratis

Er zijn in 2020 in totaal 61 Starting Grants uitgereikt, waarvan 28 in Technologie, 11 in Chemie, 7 in Astronomie en Astrofysica, 6 in Moleculaire Modellering, 3 in Fysica, 2 in Aardwetenschappen, 2 in Wiskunde, 1 in Levenswetenschappen, en 1 in Werktuigkunde.



Afbeelding 12. Verdeling Starting Grants per onderzoeksdomein

De verdeling per universiteit zag er als volgt uit: UGent: 21, KU Leuven: 18, VUB: 11, UAntwerpen: 2, UHasselt: 2. Verder kregen ook imec (2), MOW (2), SCK CEN (samen met VITO – 1), UCLouvain (1) en het von Karman Instituut (1) Starting Grant(s).



Afbeelding 13. Verdeling Startings Grants per onderzoeksinstituut

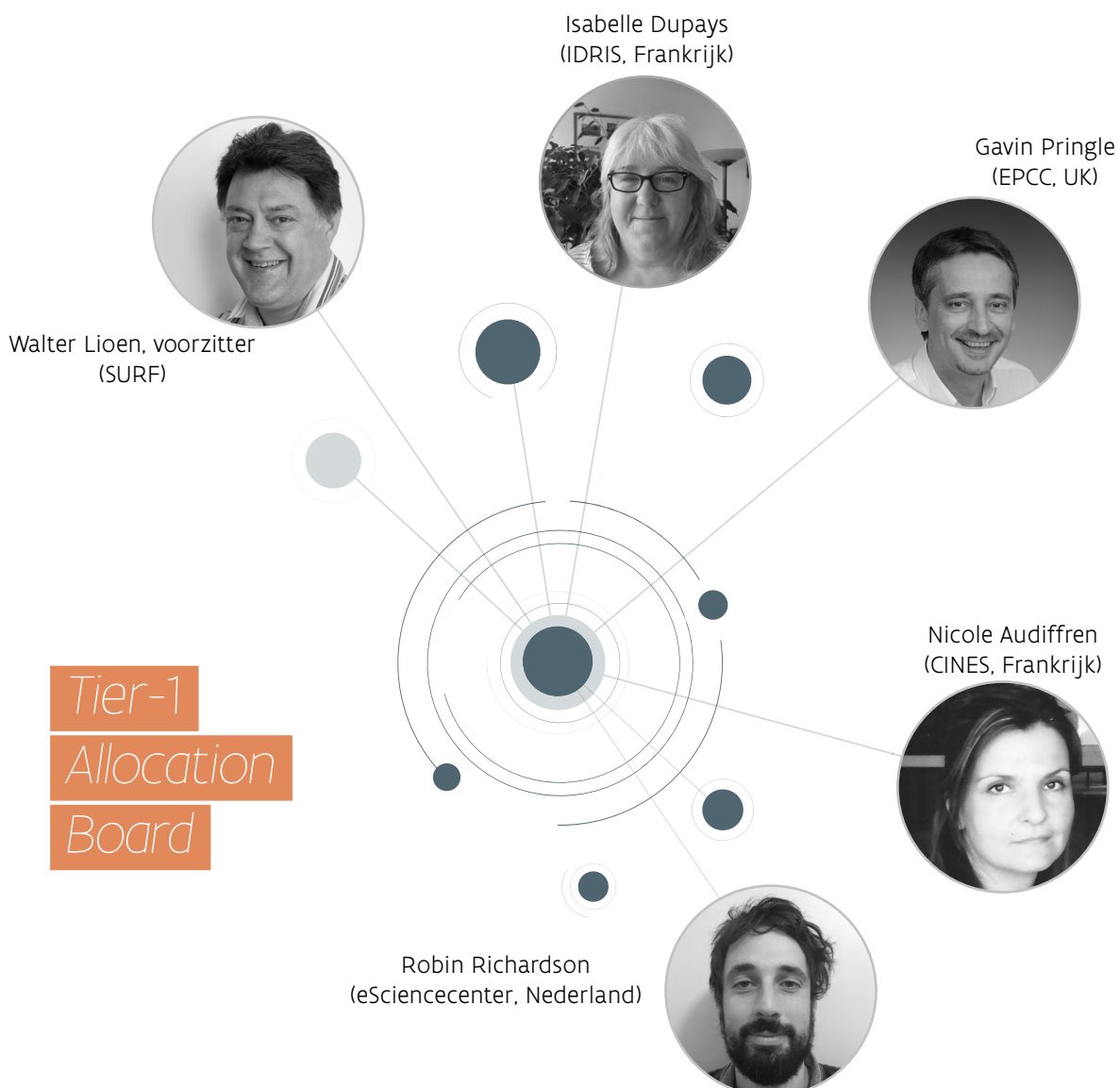
In de bijlage is een overzichtsluist te vinden van de aangevraagde Starting Grants in 2020.



Project access

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

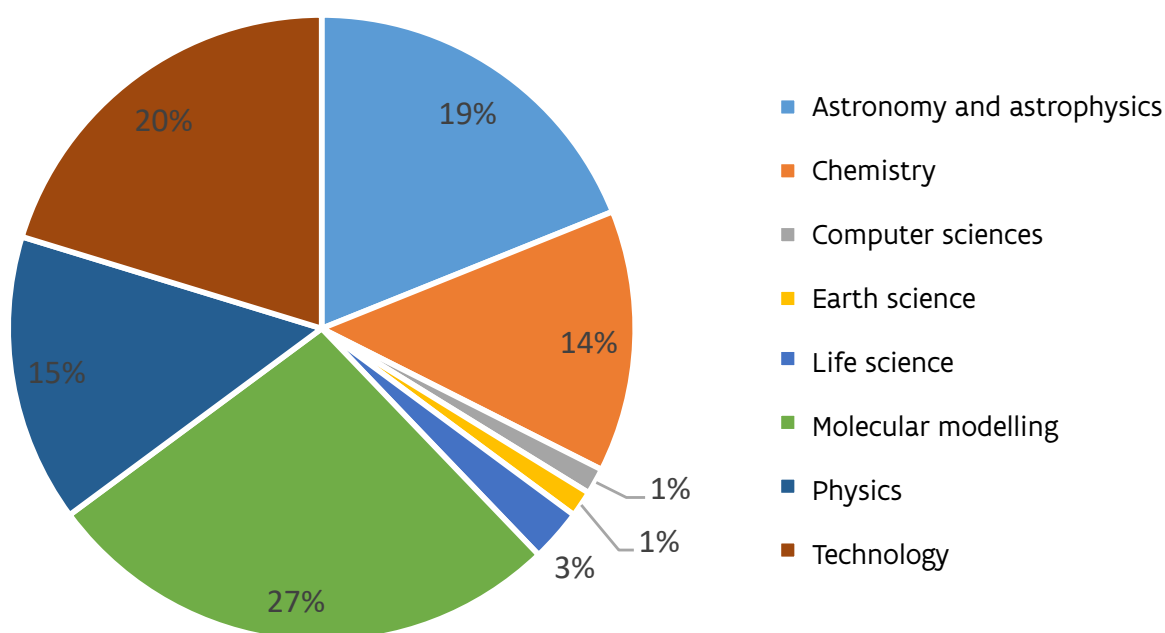
Voor het beoordelen van de Tier-1 projectaanvragen werd een 'Tier-1 Allocation Board' ingesteld. Hierin zetelen vijf buitenlandse deskundigen:



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 rekentijd geheel, gedeeltelijk of helemaal niet toegekend wordt.

In drie ronden zijn er in 2020 in totaal 85 projecten ingediend voor een totaal van 400.203,35 nodedagen. Daarvan werden 77 projecten toegekend voor een totaal van 316.362,4 nodedagen. Net zoals bij HPC clusters in het buitenland zijn chemie, natuurkunde en de ingenieursdomeinen goed vertegenwoordigd.



Afbeelding 14. Verdeling toegekende projecten in 2020 Tier-1 per wetenschappelijk domein

In de bijlage is een overzichtslIJst te vinden van de projecttoekenningen in 2020.

Voor onderzoekers uit de industrie bestaan eveneens twee toegangskanalen om Tier-1 Compute 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 en bleven ongewijzigd voor 2020. Daarnaast kunnen onderzoekers uit de industrie ook toegang krijgen tot Tier-1 in het kader van een onderzoeksproject in samenwerking met een publieke onderzoeksinstelling zoals bv. een Vlaamse universiteit.

Exploitatiemodellen voor Tier-1 SaaS platform

In 2020 werden ook een aantal aspecten rond integratie verder vorm gegeven.

Er werd een voorstel voor de exploitatie- en toegangsmodellen voor Tier-1 data en cloud componenten uitgewerkt. De toegangsmodellen voor data en cloud zullen zoals thans in het Compute model ook via projectaanvragen verlopen met de volgende bepalingen:

- **Toelatingsvoorwaarden:** Dezelfde toelatingsvoorwaarden van Compute zijn ook van toepassing voor data en cloud. Dat is: Publieke Onderzoeksinstellingen kunnen projecten aanvragen, zoals gedefinieerd in het Compute reglement, en commerciële gebruikers kunnen gebruikmaken van kosteloze Exploratory access en betalende Full access.
- **Looptijd van de projecten:** Data projecten zouden een minimale looptijd van acht maanden en van maximaal vier jaar kunnen krijgen. Cloud projecten zouden aangevraagd kunnen worden voor minimum één jaar en maximum twee jaar. Verlengingen met gelijke minimale en maximale looptijden zijn mogelijk via een nieuwe aanvraag.
- **Evaluatiecommissie:** Een evaluatiecommissie wordt ingericht om de data en cloud projecten te evalueren en toe te kennen. Die commissie evalueert de projecten alleen vanuit technisch perspectief en beoordeelt dus, naar analogie met Tier-1 Compute, niet de wetenschappelijke kwaliteit.
- **Beoordelingskalender:** In een eerste instantie zou een beoordelingskalender zoals voor Compute moeten kunnen worden opgezet met drie cut-off momenten per jaar die gealigneerd zullen zijn aan die van Compute. data en cloud Starting Grants aanvragen om testen of het voorbereiden voor een project aanvraag, worden ook opgezet. Deze aanvragen kunnen steeds ingediend worden. Voor commercieel gebruik kunnen zowel de Exploratory Grants aangevraagd als contracten opgesteld worden.

In de loop van 2021 zullen de nodige reglementen en formulieren voor data en cloud opgesteld worden.

Voor de periode 2021 t.e.m. 2022 wordt het free-of-charge model geselecteerd als exploitatiemodel voor academische gebruikers van de Tier-1 cloud en data componenten. Voor commerciële gebruikers wordt het full cost model geselecteerd. Bedrijven kunnen een overeenkomst sluiten met de instelling die de betreffende Tier-1 data en cloud infrastructuur huisvest en het FWO. Bedrijven zouden gratis Exploratory toegang tot cloud en data services (gelimiteerd) kunnen aanvragen.

Verder werden in samenwerking met de firma Deloitte de eerste stappen gezet voor de implementatie van een ISMS Framework voor de Tier-1 Compute component waarin de processen en activiteiten werden gealigneerd met de ISO/IEC 27001 standaard. Het doel van de ISMS implementatie is het identificeren, analyseren, evalueren en verminderen van informatie beveiliging risico's en zo veel mogelijk de kansen en de impact van een cyberveiligheidsincident te reduceren.

Tijdens 2020 werden twee werkpakketten van het volledig ISMS traject uitgevoerd. In het Werkpakket 1, ISMS Scope, werd het doel van de VSC ISMS gedefinieerd en beperkt tot de Tier-1 Compute component met de geassocieerde processen en infrastructuur. Daarna werd er in het Werkpakket 2, ISMS Risk Management, een analyse uitgevoerd om een aantal risico's te identificeren, classificeren en evalueren. Met deze informatie werden de mogelijke acties en controles om ze te verminderen gedefinieerd. Een totaal van 40 risico's werden geïdentificeerd waarvan slechts 10% als hoge risico's werden beschouwd. In 2021 zal de ISMS verder uitgevoerd worden met de implementatie van werkpakket 3, ISMS Framework, waarin de processen en procedures van de ISMS zullen ontworpen worden, een aantal KPI zullen gedefinieerd worden en de ISMS policy framework zal geïmplementeerd worden.

Ten slotte werd een analyse gemaakt van de mogelijkheden om de connectie voor de KU Leuven en UGent van de VSC Belnet hubs redundant te maken. Deze redundantie zal in de loop van 2021 geïmplementeerd worden.

Tier-2 infrastructuur

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

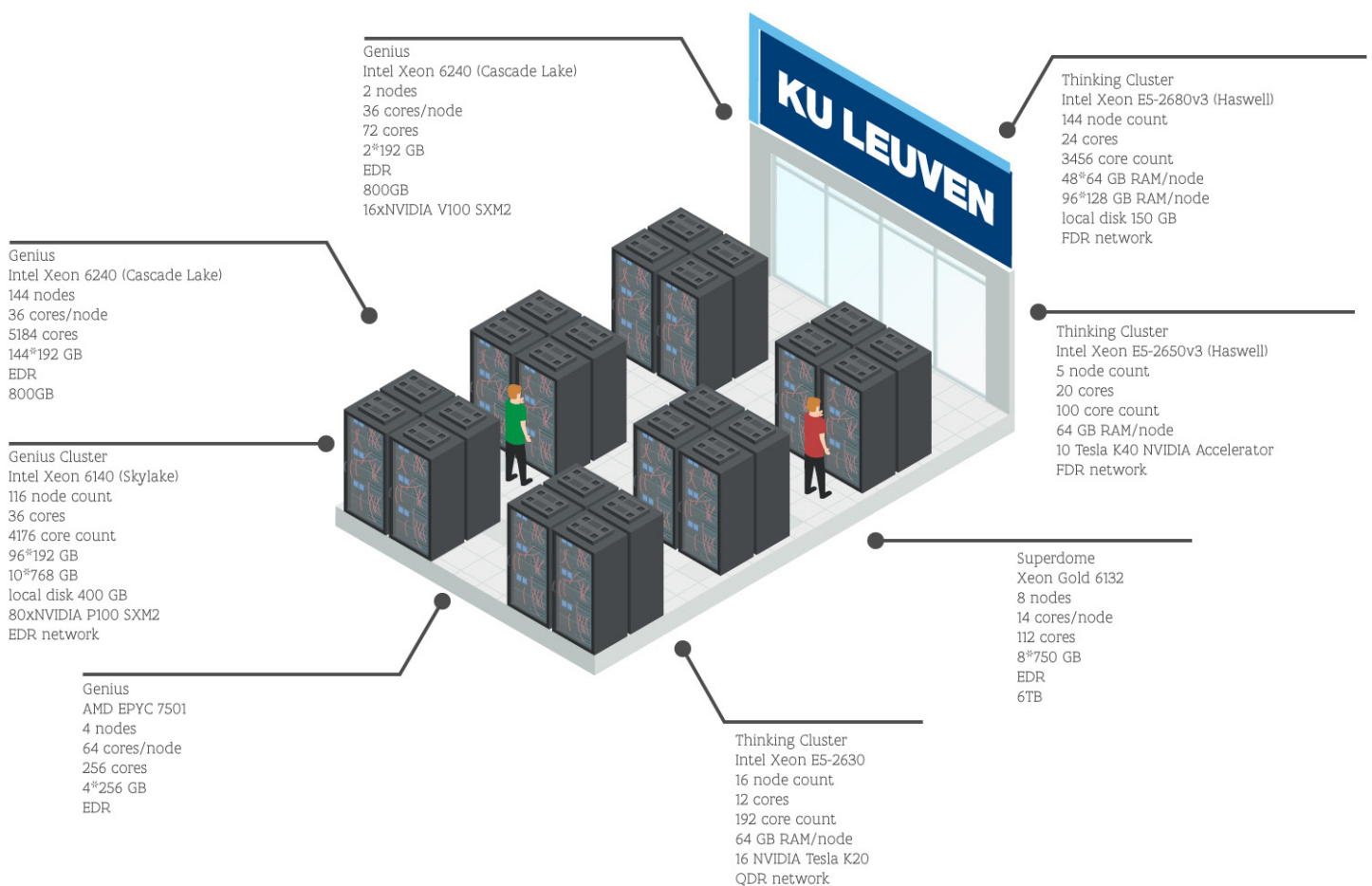
Tier-2 infrastructuur per instelling

► 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
- 969 TF
- 16.556 CPU cores
- 78 TB geheugen
- 96 GPU devices / 368.640 cuda cores



Afbeelding 15. Tier-2 infrastructuur KU Leuven – UHasselt

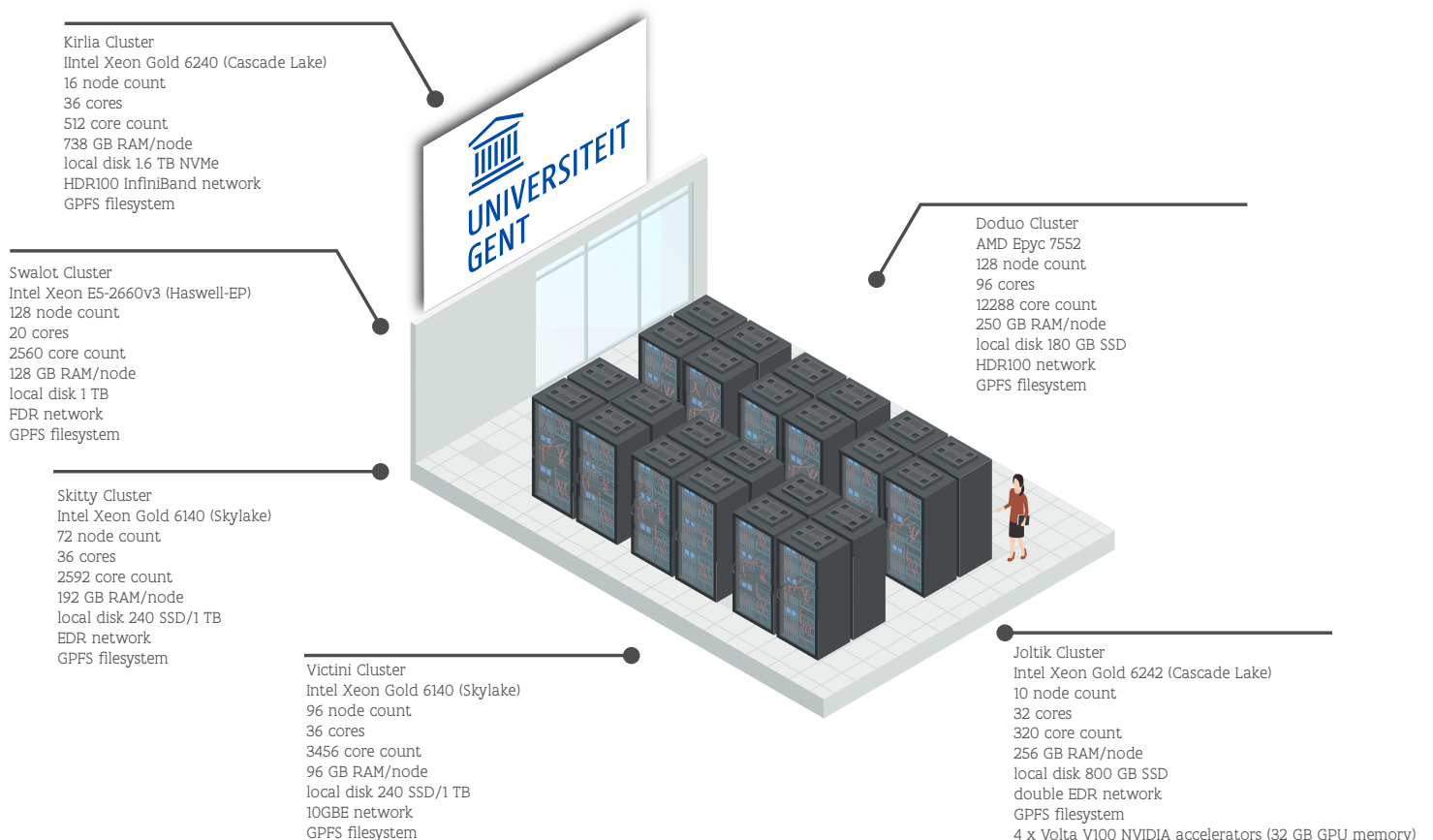
In 2020 is de uitfasering van Thinking begonnen. Deze cluster werd in 2014 voor het eerst in gebruik genomen en later nog uitgebreid. Het oudste deel van Thinking (Ivbridge nodes) werd op 21 april uit dienst genomen. Het meer recente gedeelte van Thinking (Haswell) zal nog een jaar langer in dienst blijven. In 2021 zal Thinking vervangen worden door een nieuwe cluster. Maar omdat al het werk volledig naar Genius zal verhuizen, werd de capaciteit van Genius nog uitgebreid met 24 nodes.

Thinking en Genius delen hetzelfde parallel filesysteem (DDN 14K) dat in 2016 in gebruik werd genomen. Eind 2020 is een vervanging voor dit systeem aangekocht. Met een nettocapaciteit van 3PB is het ongeveer 3 keer groter dan het huidige systeem. Hiermee kan een antwoord gegeven worden op de toegenomen data volume vanuit verschillende onderzoeksdomeinen. Het systeem wordt in 2021 in gebruik genomen en zal dus ook geïntegreerd worden met de toekomstige Tier-2 cluster.

► Universiteit Gent

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

- 7 clusters
- 1198 TF
- 22.176 CPU cores, 25.600 GPU Tensorcores
- 90 TB bruikbaar geheugen



Afbeelding 16 Tier-2 infrastructuur UGent

De Tier-2 infrastructuur is opgebouwd uit verschillende clusters, in functie van specifieke kenmerken. In de loop van 2020 werden volgende ingrijpende infrastructuur wijzigingen doorgevoerd:

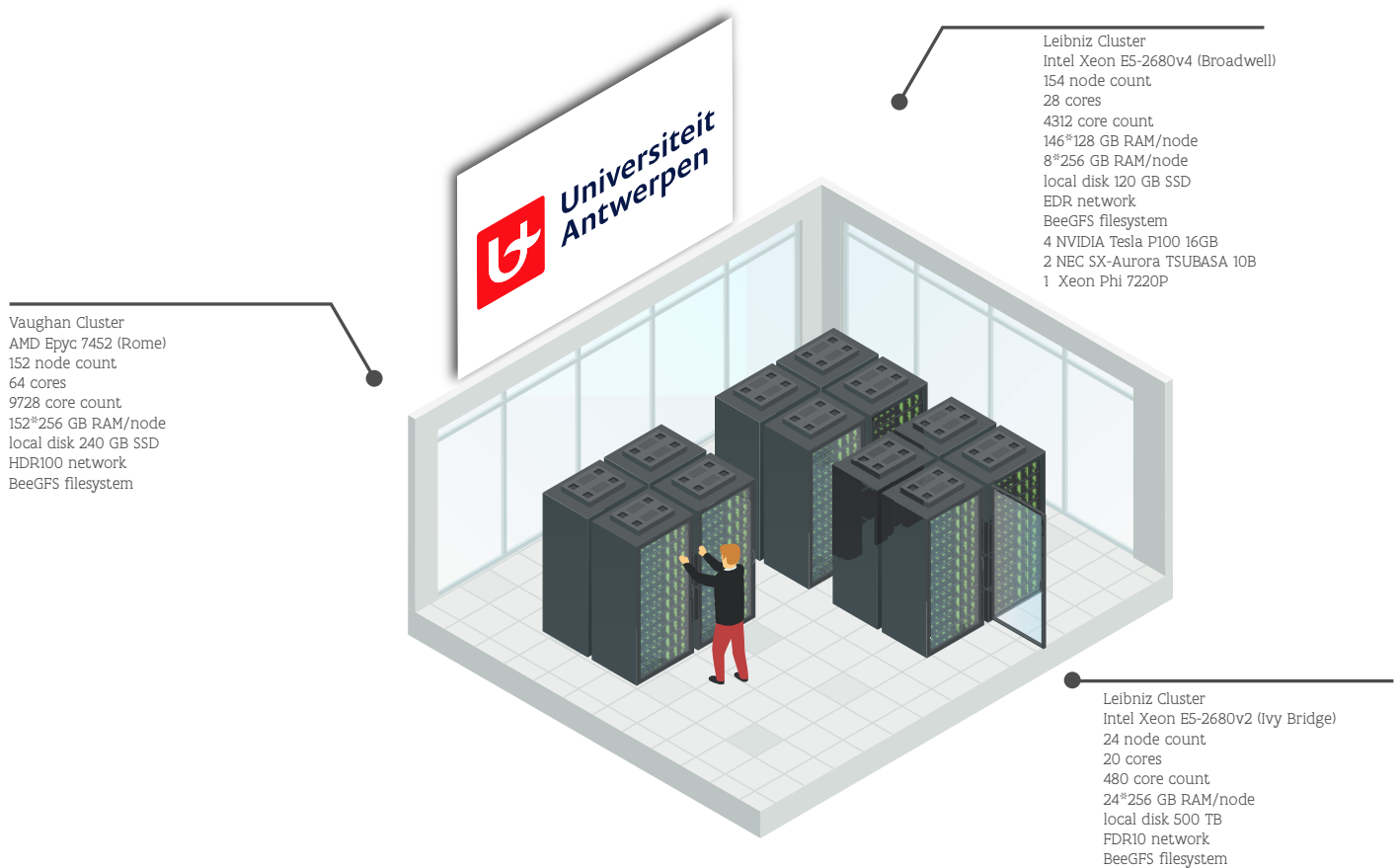
- Cluster golett werd gedecommissioneerd.
- GPU cluster joltik werd in productie genomen.
- Cluster kirlia werd in productie genomen. Dit is een nieuwe large-memory cluster ter vervanging van cluster phanpy, die begin 2021 uit dienst zal worden genomen.
- Snelle scratch arcanine werd in productie genomen. Totale opslag is 70 TB op NVME hardware, bedoeld als ultrasnelle tijdelijke opslag van 'live' data voor berekeningen en aangewezen voor I/O intensieve jobs. Arcanine vervangt de phanpy scratch ruimte, die eind 2020 werd uitgefaseerd.
- Alle gedeelde bestandssystemen (home, data, scratch) werden gemigreerd naar een nieuw, groter storage volume met een totale opslagcapaciteit van meer dan 3.75 PB.
- Nieuwe cluster doduo werd geïntroduceerd in pilootmodus (productie verwacht maart 2021).
- De interconnecties van het InfiniBand netwerk, dat de meeste clusters en het gedeelde bestandssysteem onderling verbindt, werden grondig gereviseerd en uitgebreid om de introductie van nieuwe HPC hardware mogelijk te maken.

► Universiteit Antwerpen

Op 31 juli werd de cluster Hopper na 6 jaar dienst uit gebruik genomen en vervangen door Vaughan. Hierdoor nam de rekenkracht met 85% toe, het aantal cores en hoeveelheid geheugen met bijna 50%.

De Tier-2 infrastructuur bestaat nu uit de clusters Leibniz en Vaughan:

- 440 TF
- 11.392 CPU cores, 7.236 accelerator cores (Tesla P100, NEC SX-Aurora TSUBASA 10B en Xeon Phi 7720P)
- 52 TB geheugen

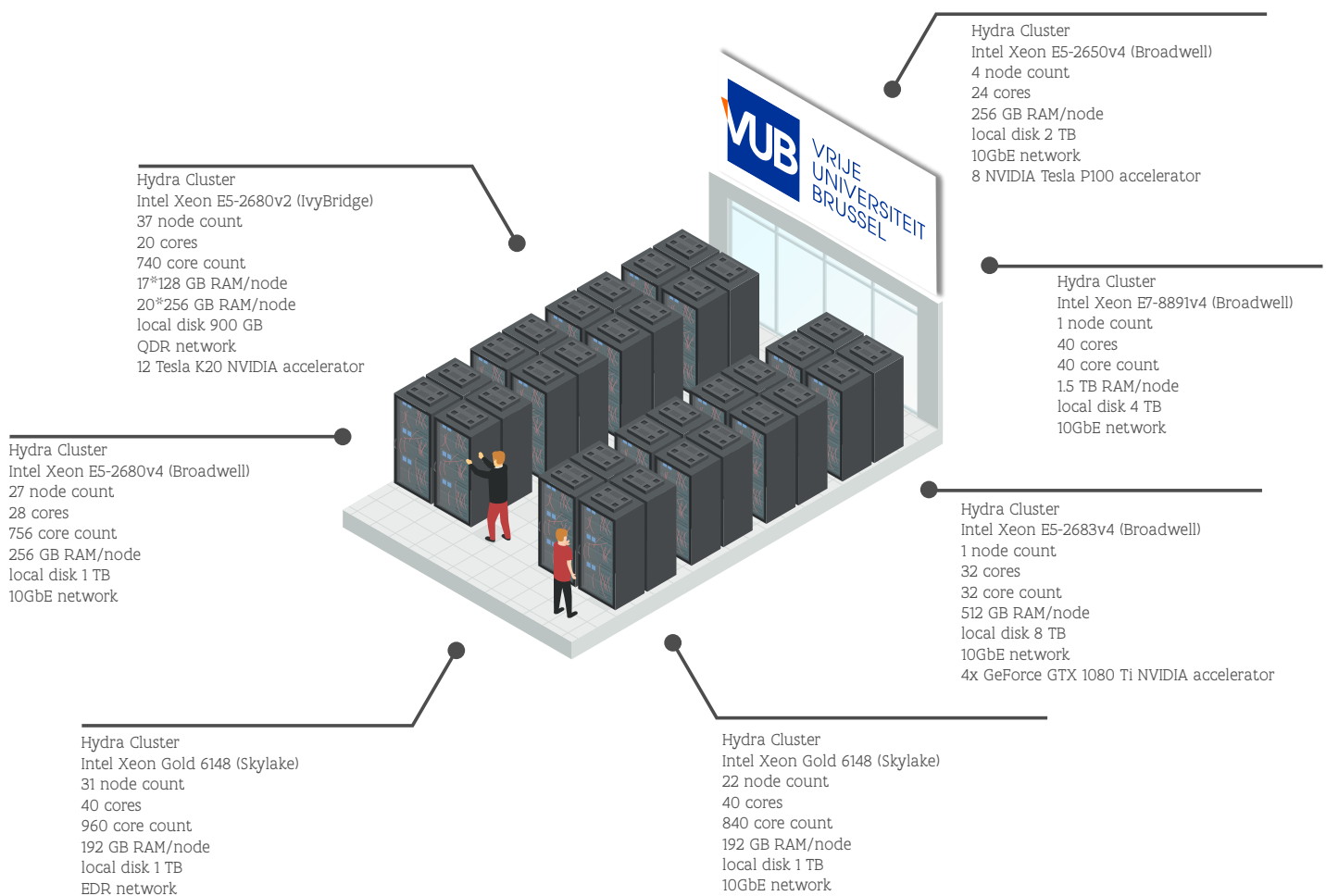


Afbeelding 17 Tier-2 infrastructuur UAntwerpen

► Vrije Universiteit Brussel

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

- 1 cluster / 6 partities
- 258 TF
- 3.456 CPU cores / 32.256 GPGPU cores
- 22,8 TB geheugen



Afbeelding 18. Tier-2 infrastructuur VUB

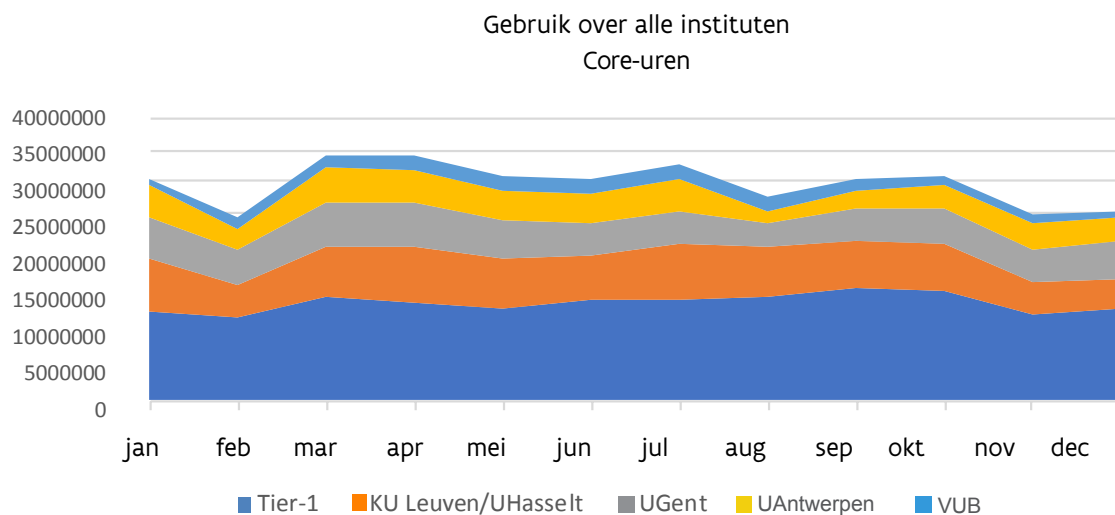
Aan de VUB werd gekozen om uitbreidingen steeds binnen dezelfde Hydra-omgeving te doen, wat efficiënter is voor zowel de gebruikers als het managementteam. Dit heeft dan wel een heterogenere cluster tot gevolg. De cluster beantwoordt op die manier aan specifieke noden van verschillende onderzoeksgroepen.



Exploitatie en gebruik

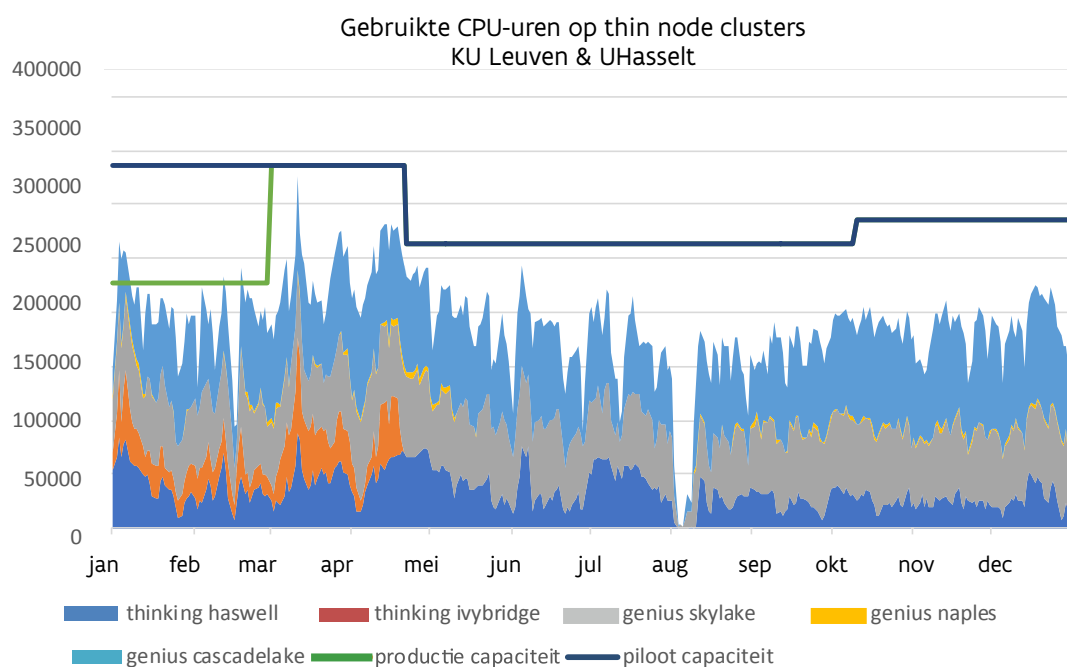
Na de beschrijving van de infrastructuur wordt vervolgens een overzicht gegeven van het gebruik van de Tier-1 en de Tier-2.

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



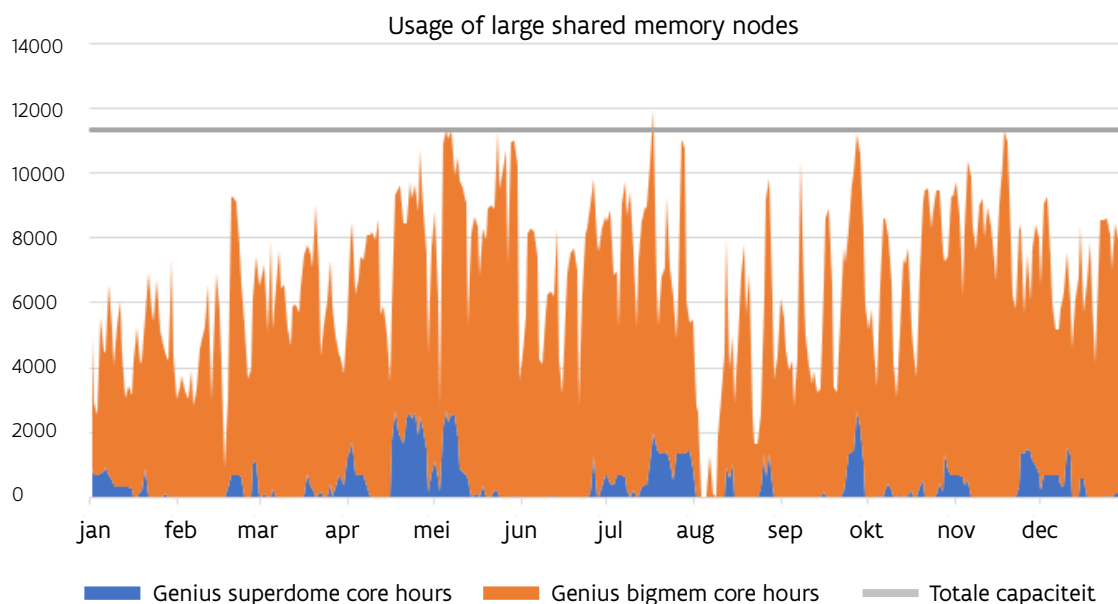
Afbeelding 19. Gebruik uitgedrukt in core-uren van alle VSC clusters

Afbeelding 19 geeft het gecumuleerde gebruik weer van de Tier-1 en Tier-2 infrastructuur. Het maandelijks gebruik ligt rond de kaap van 35 miljoen core uren. Dit ligt in dezelfde lijn als de cijfers van 2019. In 2021 wordt terug een stijging verwacht met de komst van de nieuwe Tier-1 en een aantal Tier-2 machines die in 2020 vervangen werden en in 2021 volledig operationeel zullen zijn. Deze grafiek bevat enkel de thin node clusters. In de sectie van de universiteiten zal blijken dat het aantal GPU uren toegenomen is. Deze trend zal zich in de toekomst verder doortrekken met de komst van GPU's in de nieuwe Tier-1.



Afbeelding 20. Gebruikte core-uren op de KU Leuven/UHasselt thin node cluster

Afbeelding 20 Gebruikte core uren op de KU Leuven/UHasselt thin node cluster geeft een overzicht van het gebruik van de infrastructuur aan de KU Leuven. De grafiek stelt het cumulatieve gebruik voor van de verschillende thin node clusters aan de KU Leuven. De Thinking Ivybridge nodes werden uit productie genomen, wat hier duidelijk te zien is. In de zomer had het parallel filesysteem een belangrijke maintenance, waardoor er downtime was op de clusters. Het gebruik van Thinking Haswell neemt langzaam af, alle gebruikers hebben ondertussen hun werk op de Genius cluster opgezet. Thinking Haswell wordt in 2021 uit dienst genomen. Ongeveer 900 gebruikers, gespreid over vele onderzoeksdomeinen hebben gerekend op deze Thin node clusters.

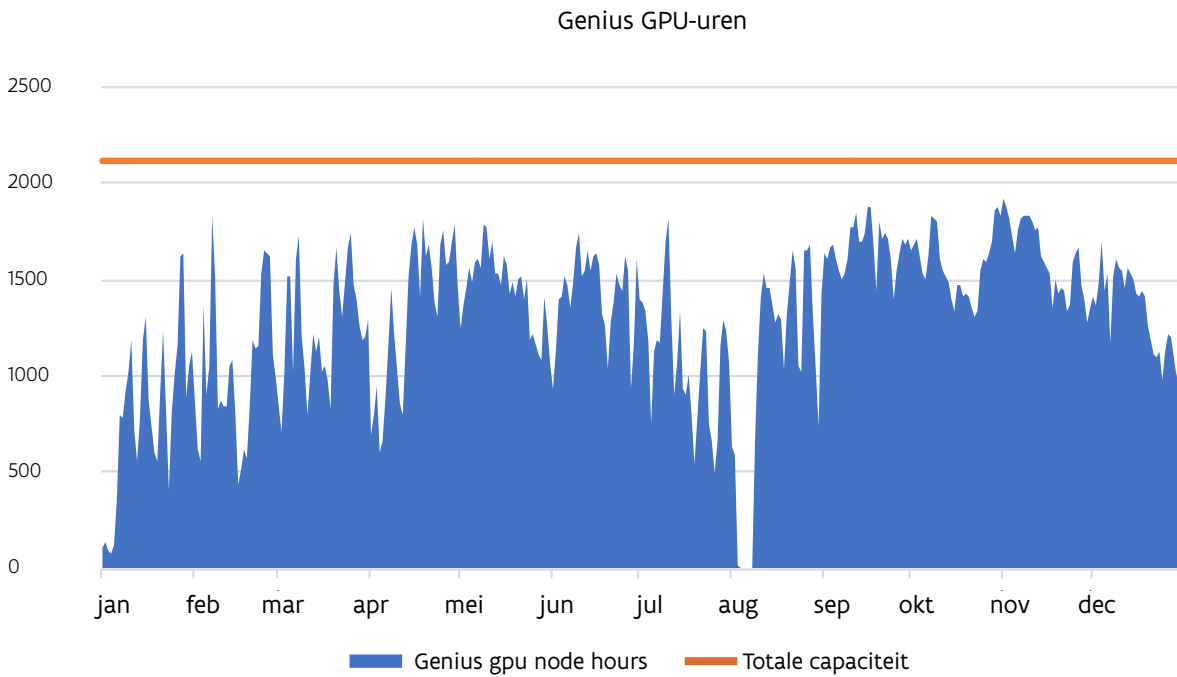


Afbeelding 21. Gebruik van shared memory

Buiten de thin node rekencluster zijn er aan de KU Leuven specifieke nodes met meer geheugen, een node met shared memory en nodes met GPU acceleratoren.

De Big memory en shared memory nodes gebruiken een hogere memory/core ratio, soms worden niet alle cores in de node gebruikt, maar wel het volledige geheugen. Dus we verwachten hier geen 100% bezetting. De grafiek toont aan dat er een constante bezetting van de big memory nodes is. Voor de shared memory machine Superdome is dit meer variabel, maar de workload die hierop loopt kan niet typisch op andere machines.

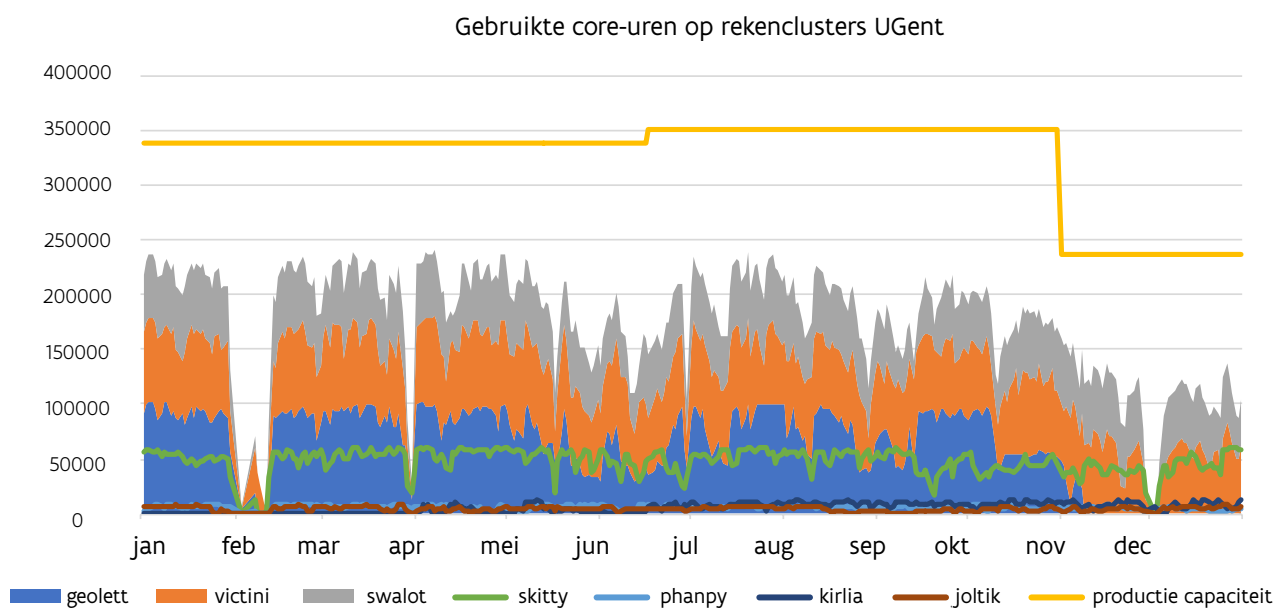
De hogere geheugen vereisten komen voor bij bepaalde analyses van bioInformatica, scheikunde en ook soms preprocessing werk voor simulaties.



Afbeelding 22. Gebruik van GPU nodes

De bezetting van de GPU nodes die wordt getoond heeft betrekking op de 96 GPU devices die beschikbaar zijn in de Genius cluster.

Het gebruik van de GPU nodes wordt niet uitgedrukt in CPU uren, omdat dit minder relevant is. Verdeeld over 22 nodes zijn er 96 GPU devices beschikbaar. Een aantal zijn gereserveerd voor ontwikkeling/debugging. De bezetting van de GPU nodes wordt dan ook als aantal uren dat het GPU device in gebruik is. Meestal zijn dan niet all CPU cores in gebruik. De bezetting van de GPU's is het afgelopen jaar hoog geweest. Het aantal onderzoekers die hiervan gebruik maakt is ook stijgend.

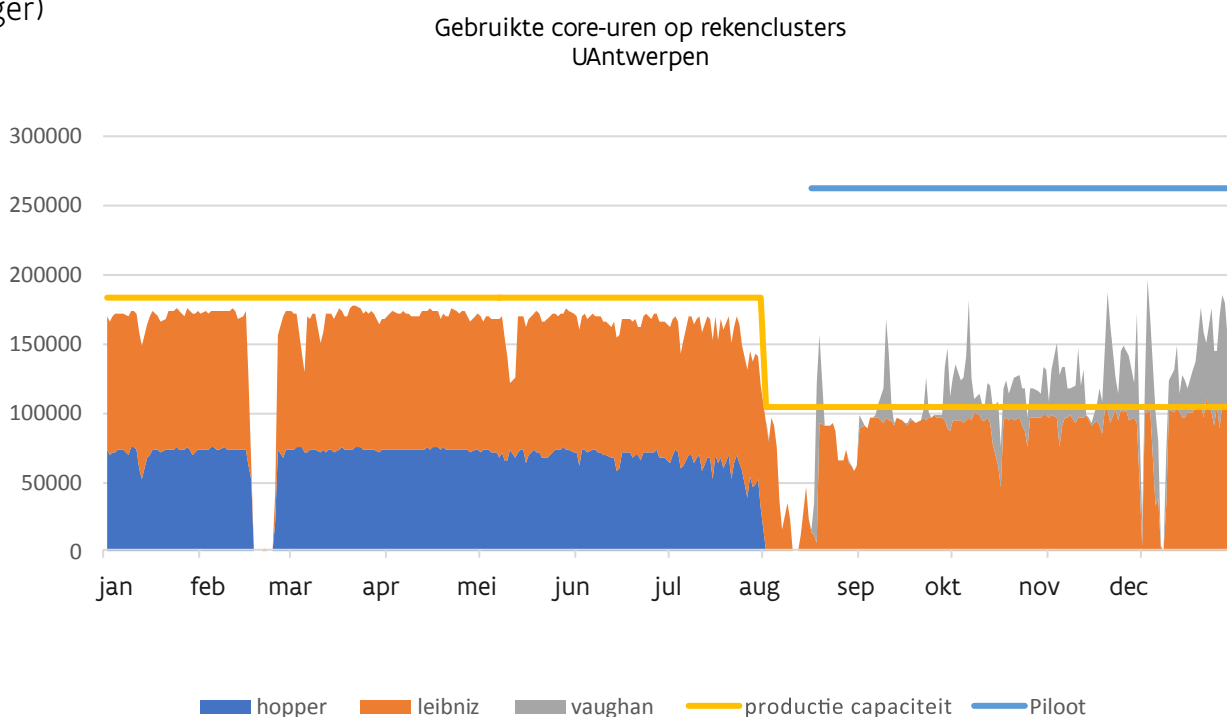


Afbeelding 23. Gebruik van de infrastructuur aan de Universiteit Gent

Afbeelding 23 geeft het cumulatieve gebruik in 2020 weer van alle rekenclusters in productie aan de Universiteit Gent.

In 2020 werden in totaal 86.170.428 core-uren verbruikt op de Tier-2-rekenclusters van de Universiteit Gent. Dit zou overeenkomen met 9.837 jaar rekenwerk op één enkele core. Op de GPU cluster joltik werd in totaal 229.124 aan GPU uren verbruikt.

Het gemiddelde effectieve gebruikspercentage bedraagt 73% voor alle clusters met CPU capaciteit in 2020. Voor GPU cluster joltik is het effectieve gebruikspercentage gemiddeld 67%. Deze percentages geven aan hoeveel van het theoretisch beschikbare rekenvermogen in één jaar werd gebruikt (hierbij werd geen rekening gehouden met uitvaltijden, dus de werkelijke waarde is hoger)



Afbeelding 24. Gebruik van de infrastructuur van de UAntwerpen

De grafiek van afbeelding 24 stelt het cumulatieve gebruik voor van de clusters Hopper en Leibniz aan de Universiteit Antwerpen. Hopper werd op 1 augustus uit dienst genomen. Vaughan, de opvolger van Hopper, werd in augustus geïnstalleerd. Deze installatie werd gevolgd door een pilootfase waarbij gebruikers uitgenodigd werden.

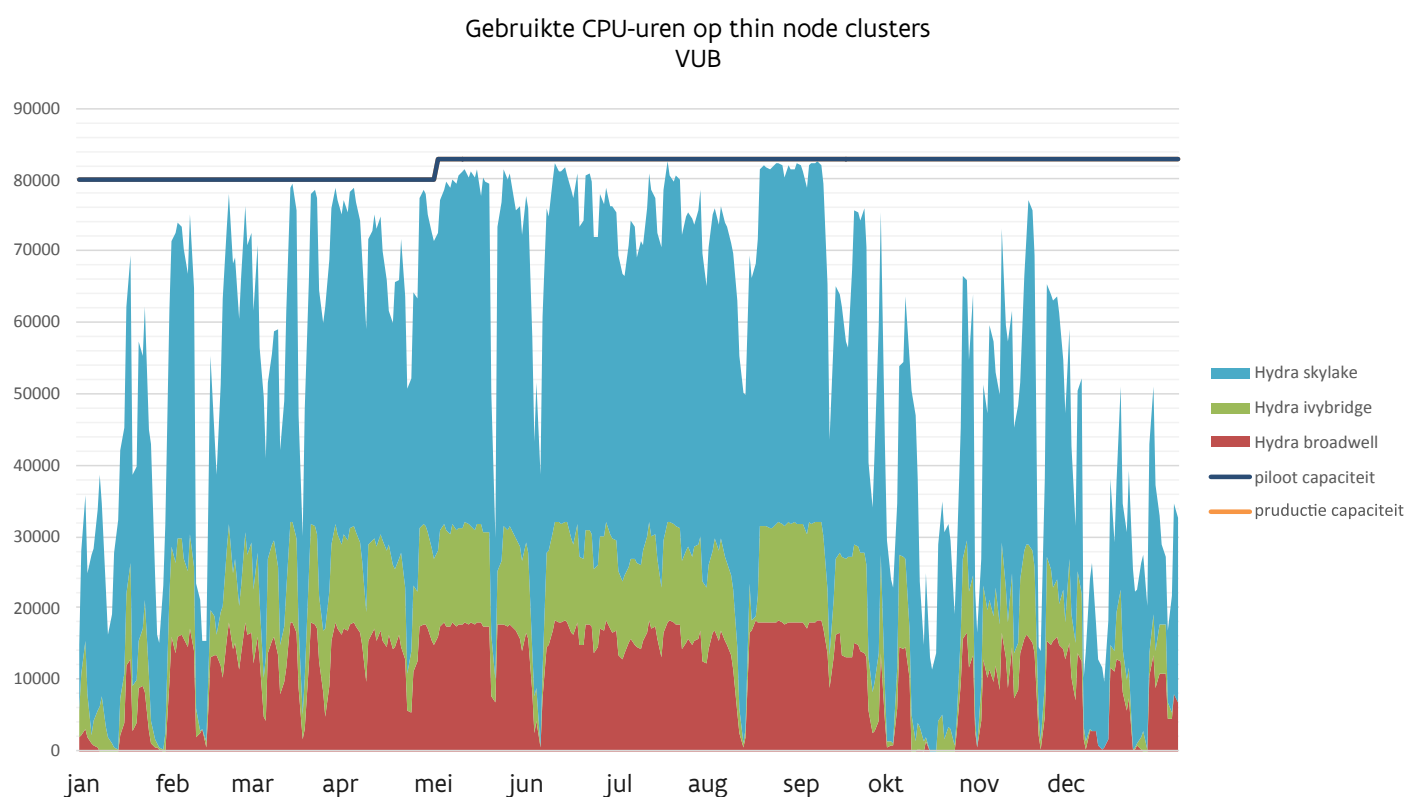
Naast de installatie van een nieuwe cluster in de tweede helft van het jaar, werd in februari een nieuw storage systeem geïnstalleerd, waarbij home/data enerzijds en scratch anderzijds nu volledig gescheiden zijn. De capaciteit op scratch werd ook gevoelig uitgebreid tot meer dan 550 TB.

Door stroomstoringen zijn er enkele onderbrekingen geweest in maart, mei en oktober. Ten slotte was er nog een geplande onderbreking om de uitbreiding van Vaughan (januari 2021) voor te bereiden.

De grafiek in afbeelding 25 stelt in 2020 werden er 3 extra Skylake nodes toegevoegd aan Hydra. Daarnaast werd er een klein virtualisatie systeem toegevoegd om alle management taken op te draaien en werden er dedicated nodes toegevoegd om de NFS export naar de rest van het VSC beter en sneller te laten werken. Het gemiddelde gebruik lag op 71,53%.

Er waren geen grote geplande maintenance op Hydra dit jaar: alle updates zijn rollende gedaan. De cluster bleef ten alle tijden online maar telkens werd een deeltje offline gehaald om te updaten.

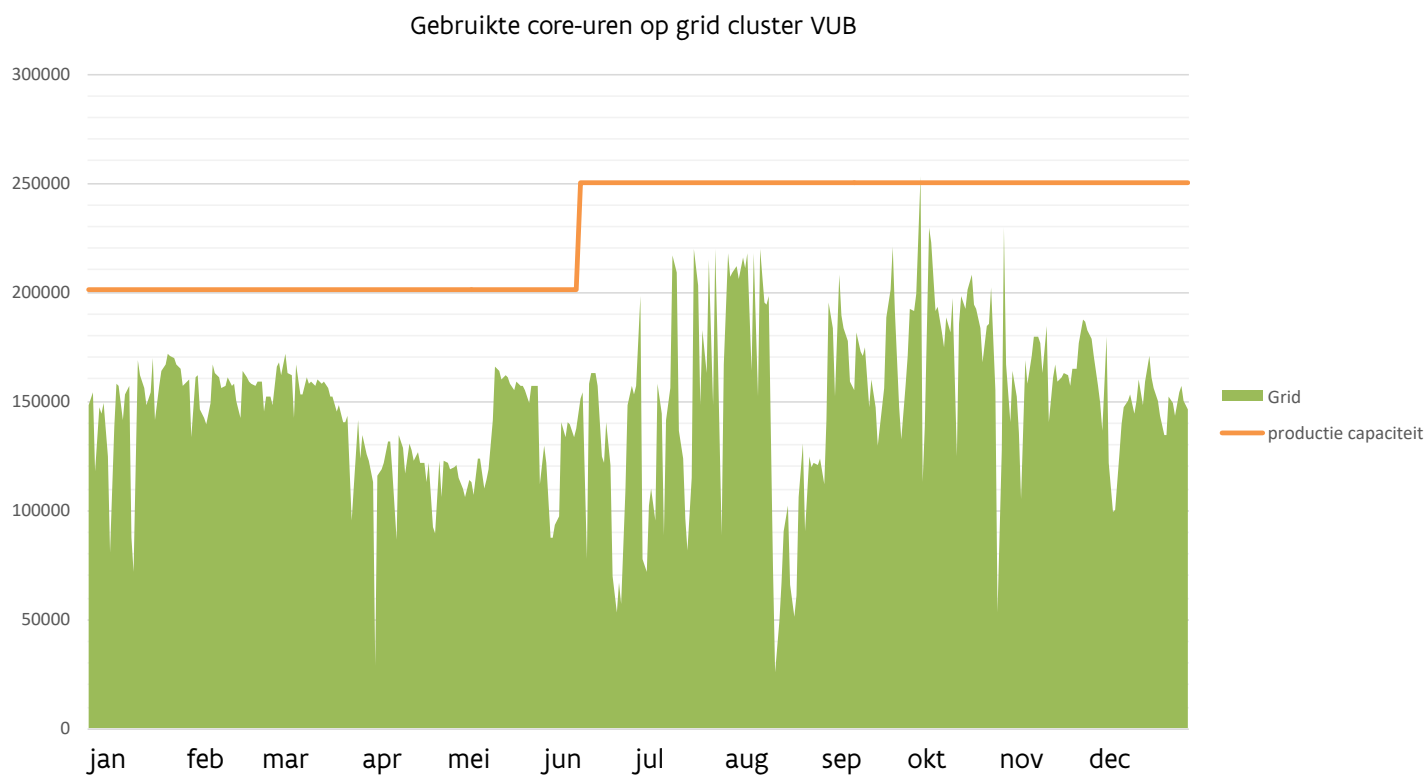
Begin februari is er een netwerk update gedaan die even de cluster onbeschikbaar heeft gemaakt. In het voorjaar waren er ook problemen met het storage systeem waardoor we op een aantal dagen de cluster op pauze hebben gezet. Eind mei waren er werken aan het koelingsysteem waardoor de cluster tijdelijk op lagere capaciteit moest draaien en in augustus hebben we preventief een deel van de cluster uitgezet tijdens de hittegolf.



Afbeelding 25. Gebruik van BEGrid cluster aan de VUB

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 (LHC) aan het CERN, maar ook binnen de Vlaamse onderzoeksgemeenschap gebruikt wordt. De gridinfrastructuur bestaat uit:

- 1 cluster
- 150 TF
- 5.080 CPU cores
- 41 TB geheugen



Afbeelding 26. Grid-infrastructuur VUB

De BEgrid cluster is heterogeen: de cluster bestaat uit verschillende series van workernodes met verschillende generaties van voornamelijk Intel CPU's. Het doel van de cluster is voornamelijk om data-intensive, single-core berekeningen te doen (zogenaamde High Throughput Computing) 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 2020 werd de capaciteit van de cluster uitgebreid naar 159 TFlops door 16 workernodes toe te voegen (voor een totaal van 1024 CPU-cores). Deze nieuwe nodes zijn uitgerust met een dual AMD

Epyc 7452 CPU. Er is gekozen om AMD CPU's te kopen vanwege de uitstekende prijs-performantie verhouding in vergelijking met Intel CPU's. De capaciteit van het dCache storage systeem is gelijk gebleven op ongeveer 7 PB. Begin februari was er een gepland netwerkonderhoud die enkele uren downtime heeft veroorzaakt. Het traditionele onderhoud in augustus is dit jaar niet doorgedaan. Daarnaast is het batch systeem gemigreerd van Torque naar HTCondor op het einde van augustus zonder downtime (maar wel met verlaagde capaciteit). Er zijn nog een paar dipjes in het gebruik door kleine incidenten:

- In juni is er een fileserver gecrasht
- In het voorjaar zijn er een paar keer problemen geweest met Torque
- In het najaar zijn er een paar dipjes door problemen met HTCondor

Toekennen rekentijd Tier-2

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

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

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, of kunnen rekentijd reserveren aan full cost.

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	5		2 161	
@UGent	46 646	145 750		8 117
@UAntwerpen		36		71 965
@VUB	10 875		94 865	287 190

Tabel 3. Cross-site rekenen in core-uren

Instelling	Compute time in GPUhours			
	UAntwerpen	VUB	UGent	KU Leuven/UHasselt
@KU Leuven/UHasselt	9 981		6 127	
@UGent	0,0031	12 631		
@UAntwerpen				
@VUB				

Tabel 4. Cross-site rekenen in GPU-uren

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.

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

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. 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	1 637	142	122	327
Software	718	245	246	309
Overig	450	1655	80	506
Tier-1				
Accounts	125			
Software	182			
Overig	75	7	7	
Totaal	3 187	2 049	455	1 142

Tabel 5. Behandelde tickets, per categorie en per instelling

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 of hun eigen desktop gewoon efficiënter kunnen gebruiken. Voor bestaande gebruikers kan dit ook hulp betekenen bij de overstap van Tier-2 naar Tier-1 en eventueel naar Tier-0. Anderzijds wordt geprobeerd om onderzoekers specifieke ondersteuning te geven.

Enkele voorbeelden:

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

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

► KU Leuven en Universiteit Hasselt

De VSC-infrastructuur kenbaar maken aan nieuwe onderzoeksgroepen is een blijvend werk. Nieuwe onderzoekers worden vertrouwd gemaakt met het gebruik van de cluster in de reguliere introductiesessies. Omdat het fysieke contact met gebruikers in 2020 is weggevallen werd de standaard introductie cursus opgesplitst in een serie korte video's. Nieuwe gebruikers kunnen deze gebruiken om gestart te geraken. Telkens er een voldoende grote groep nieuwe gebruikers was, werd een online sessie georganiseerd om alles nogmaals te overlopen. Gebruikers hadden dan ook de mogelijkheid om vragen te stellen.

Initiatieven van docenten om bachelor of masterstudenten vertrouwd te maken met de HPC worden actief ondersteund. Er werden sessies georganiseerd voor Bio-Ingenieur studenten en voor studenten Biologie.

Ook specifieke studentprojecten kunnen op ondersteuning rekenen. Zo werd het Solar team ondersteund om modellen van hun wagen te berekenen met HPC infrastructuur. Er werd ook de mogelijkheid geboden aan studenten die deelnamen aan de "Datathon" om HPC te gebruiken.

Ook contactmomenten voor beginnende ZAP-leden en workshops voor beginnende onderzoekers, bv. bioinformatici werden ondersteund zoals vorige jaren.

De dagdagelijkse support behandelt vragen i.v.m. accounts, basisgebruik van de cluster en software-installaties. Het ganse jaar door kon de gewone dienstverlening verder gaan. Alle afspraken met gebruikers werden online georganiseerd.

Ook de contacten met industrie partners werden onderhouden en nieuwe contacten konden gelegd worden.

Het team in Leuven werkt ook mee aan de VSC projecten in kader van het Tier-1 data platform,

PRACE 6IP en gaf ondersteuning aan de COVID-19 projecten.

Met geïnteresseerde onderzoekers werd een model opgestart waarbij leden van het HPC team diepgaande consultancy kunnen geven aan een onderzoeksgroep. Op deze manier wordt ook de kennis binnen het HPC team versterkt en kunnen best practices met andere groepen gedeeld worden.

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 en onderzoeksgroepen, o.a.:

- Biofluid, Tissue and Solid Mechanics for Medical Applications research group (bioMMeda), UGent
- Vakgroep Architectuur en Stedenbouw, UGent
- Cancer Research Institute Ghent (CRIG), UGent
- VIB Switch Lab, KU Leuven
- Vakgroepen Virologie, Parasitologie en Immunologie (faculteit Diergeneeskunde) en Inwendige ziekten en Pediatrie (Faculteit Geneeskunde en Gezondheidswetenschappen), UGent, rond een gemeenschappelijk COVID-project
- Research groups Combustion, fire & fire safety & Magnel Laboratory for Concrete Research, UGent
- Digital Humanities UGent & Royal Library of Belgium's Digital Research Lab
- Center for Molecular Modeling, UGent
- Vakgroep Plant en Gewas (Faculteit Bio-ingenieurswetenschappen)
- Sizing Servers Lab, HOWest

Om zoveel mogelijk (potentiële) gebruikers te overtuigen van het belang en de meerwaarde van supercomputing werd het VSC en het HPC-UGent team intern voorgesteld:

- 26/11/2020, faculteit Wetenschappen (UGent)
- 10/12/2020, ICT gebruikerscommissie van de UGent

Daarnaast valt op te merken dat het aantal vragen van gebruikers rond dataopslag en -beheer is toegenomen. Hieromtrent werden onder meer verscheidene specifieke acties gevoerd in de faculteit Economie en Bedrijfskunde, UGent:

- 7/02/2020: Datastorage@UGent and working with GitHub
- 9/11/2020: Datastorage@UGent Theory
- 8/12/2020: Datastorage@UGent Applied

► Universiteit Antwerpen

De ondersteuning van de gebruiker staat centraal. We denken hierbij aan tips voor het optimaliseren van workflows of berekeningen en het efficiënt gebruik van de infrastructuur door actieve monitoring van de jobs. Hierbij spelen een goed onderhouden softwarestack en ondersteunende tools een belangrijke rol.

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). Door de pandemie werden de laatste twee delen in de herfst online gegeven. De opnames, die per topic opgesplitst worden, staan online. Een maand later werd nog een Q&A sessie voorzien voor onderzoekers die de opnames achteraf bekeken hebben.

De “road show” waarbij we met onderzoeksgroepen rond de tafel zitten om het VSC en de infrastructuur en organisatie in Antwerpen toe te lichten, werd in 2020 vervangen door een online variant. Zo hebben we o.a. gesproken met het Centrum voor Medische Genetica.

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 was er ook specifieke ondersteuning voor de COVID-19 projecten

Ook is er de actieve medewerking binnen Europese projecten als PRACE en EuroHPC (LUMI en NCC). Zo wordt in het kader van PRACE 6IP gewerkt aan twee projecten met bedrijven.

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 en Tier-2 gebruikers. Voor de Tier-1 werd ingezet op het stimuleren van een starting grant voor rekentijd. 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 te contacteren als we merken dat hun jobs niet efficiënt gebruik maken van de cluster. Een bevraging onder de gebruikers leert ons dat men tevreden is over de aangeboden HPC diensten. Er kwamen ook een aantal vragen naar nieuwe functionaliteit voor de cluster. Een aantal van die vragen gaan we proberen op te lossen in 2021.

De VUB heeft een HPC-gebruikerscommissie die elk 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 “Introduction to Linux”, “Introduction to the use of HPC at the VUB” en “Introduction to GRID computing” georganiseerd. Er werden ook (online) gebruikersmeetings opgezet met specifieke groepen om hun noden en/of problemen in kaart te brengen.

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 supercomputer huisvest, VTE toegekend. Hiertoe werden in het verleden 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 ingezet. Dit team staat in voor de concretisering van het Tier-1 project, "Supercomputing as a service". In 2020 werden, zoals 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

Tabel 6. Aantal gesubsidieerde VTE voor Tier-2 exploitatie en ondersteuning

Instelling	Aantal gesubsidieerde VTE voor Tier-1 exploitatie en operationeel management
UGent	4,6
UAntwerpen	0,6
KU Leuven	4,6

Tabel 7. Aantal gesubsidieerde VTE voor Tier-1 exploitatie en operationeel management

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 39,62 VTE in voor de HPC-exploitatie en ondersteuning. Daarnaast doen universiteiten soms ook beroep op externe consultants of jobstudenten voor specifieke taken. Deze worden niet vermeld in de tabellen.

Instelling	Aantal VTE ingezet voor HPC	Aantal koppen betrokken bij de HPC-exploitatie en ondersteuning
UGent	10,4	15
UAntwerpen*	5,35	10
VUB	5,37	15
UHasselt	1,5	2
KU Leuven	17	24
Totaal	39,62	66

Tabel 8. Aantal VTE ingezet en koppen betrokken bij HPC via het VSC

* We merken hierbij op dat, wegens een instellingsbrede regeling, de VTE die aan de Universiteit Antwerpen ingezet worden en die niet ten laste van FWO komen, slechts voor een voorgeschreven en geplafonneerde fractie van de inzet in deze tabel kunnen opgenomen worden.

Profielen

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

Infrastructuurbeheerders

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

Systeembeheerders

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

Gebruikersondersteuners

Deze personen staan in voor de 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

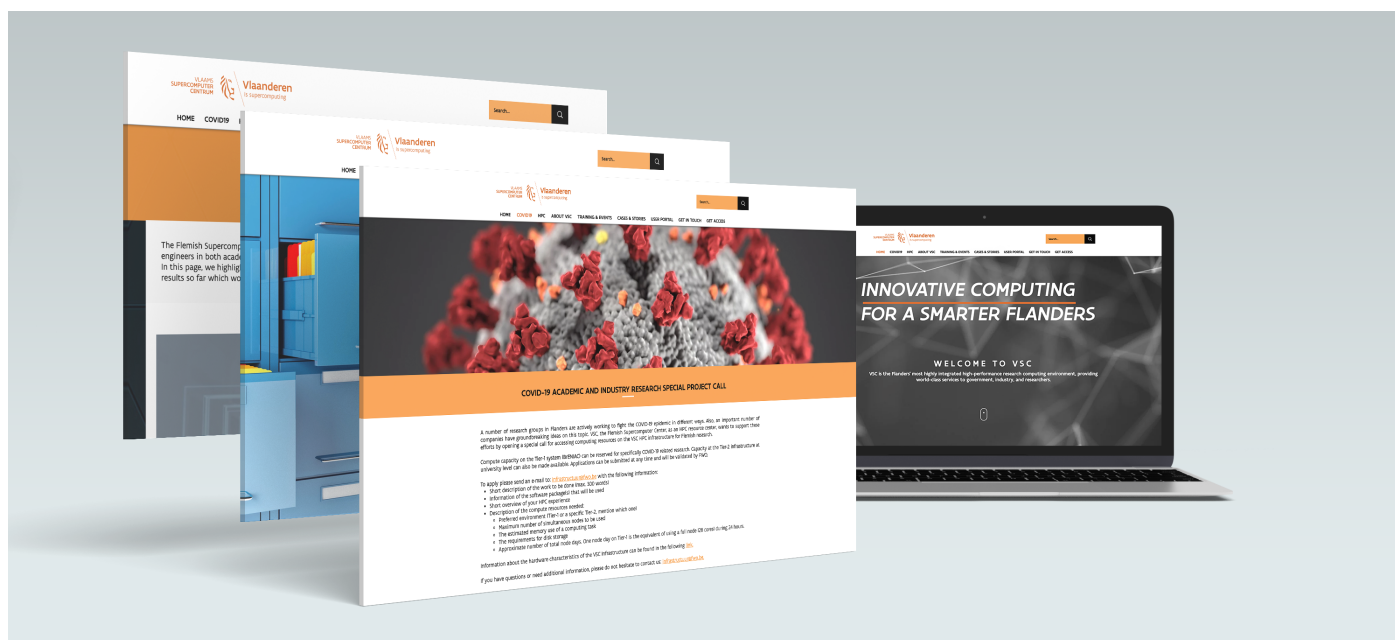
Deze personen hebben de directe leiding over de HPC-teams of leiden grotere HPC-projecten. Ze staan in voor de inbedding van de lokale HPC in de omgeving van het VSC. Ze staan in voor de coördinatie van HPC-initiatieven en gebruikersgroepen binnen de eigen instelling. Ze zijn verantwoordelijk voor de 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 gebruikersondersteuning	Wetenschappelijke of gevorderde ondersteuning	Management	Outreach
KU Leuven	6	7	7	6	4	6
UAntwerpen	5	3	5	5	3	2
UGent	6	8	5	5	4	3
UHasselt			1	1	1	1
VUB	5	3	7	4	4	4
Totaal	22	21	25	21	16	16

Tabel 9. Aantal personen die betrokken zijn per ICT-profiel



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

8 personen met wetenschappelijke ervaring in dit domein

Physics

10 personen met wetenschappelijke ervaring in dit domein

Engineering

4 personen met wetenschappelijke ervaring in dit domein

Mathematics (Numerical Methods)

6 personen met wetenschappelijke ervaring in dit domein

Computer science

5 personen met wetenschappelijke ervaring in dit domein

Bioinformatics

3 personen met wetenschappelijke ervaring in dit domein

Humanities

1 persoon met wetenschappelijke ervaring in dit domein

Outreach naar bedrijven

2020 was ook qua outreach naar bedrijven een bijzonder jaar. Individuele gesprekken met bedrijven moesten opeens online doorgaan, netwerken was plotseling niet meer evident en voor geplande evenementen moest een geheel nieuwe aanpak worden gezocht.

COVID-19

In maart lanceerde VSC een speciale COVID-19 call, en hoewel die voornamelijk op academische onderzoekers was gericht, zijn er ook specifieke contacten naar industrie gemaakt.

Concreet bestudeerden een zestal bedrijven hoe ze de VSC infrastructuur/expertise zouden kunnen gaan inzetten in hun COVID-19 onderzoek en toepassingen.

Deze zijn: Opal Solutions (Live monitoring of COVID-19 infections & resources in hospitals); ML6 (Model to detect fever based on heat cameras, Google trends data analysis, news item parsing based on NLP); Robovision (Applying AI to detect advanced cases of COVID-19); Yield.io (Model risk management applied to COVID-19); DNAnalytics (Data-driven precision medicine); SAVICS (DataToCare COVID-19 tracking system).

Dit leidde o.a. tot volgende samenwerking met ML6: <https://blog.ml6.eu/dutch-gpt2-autoregressive-language-modelling-on-a-budget-cff3942dd020>.

Dutch GPT2: Autoregressive Language Modelling on a budget



Thomas Dehaene [Follow](#)
Dec 18, 2020 · 9 min read



Finetuning pretrained English GPT2 models to Dutch with the OSCAR dataset, using Huggingface transformers and fastai.



In this blogpost, we outline our process and code on finetuning an existing GPT2 model towards an entirely different language using a large open Dutch corpus.

TLDR: you can try out the model for yourself here: <https://gpt2.ml6.eu/>

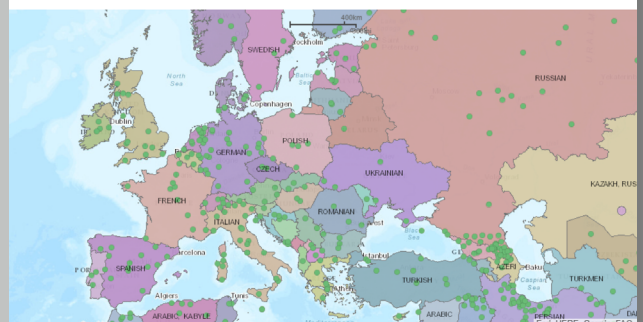
TLDR-2: just show me the code: [link](#)

Why: non-English NLP for the masses

A while ago, a sort of counter-movement started brewing in the NLP community...

The realization grew that NLP research and large language models were perhaps overly biased toward the English language. In many different aspects though, there is a bounty of reasons to research and work on NLP in other languages than English!

Some ground aspects are laid out very nicely in this [blogpost by Sebastian Ruder](#).



A visualization of the language variety in central Europe (source: <http://langscape.umd.edu/map/ohio>)

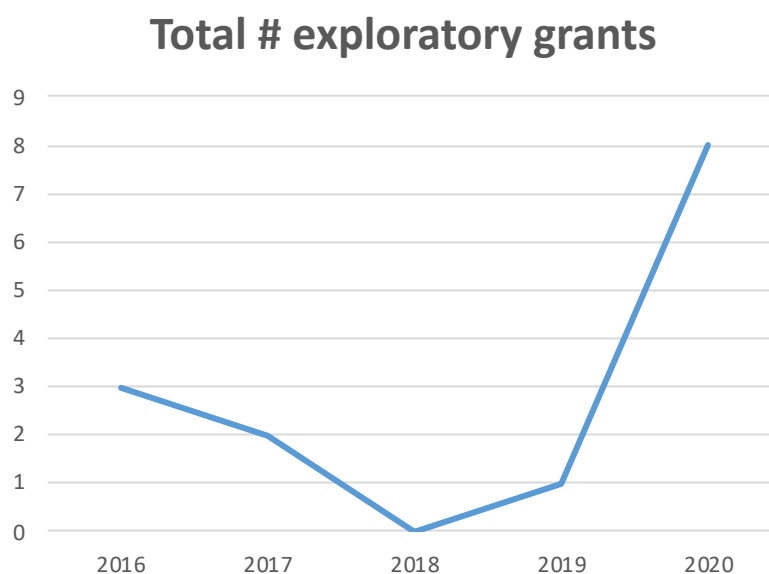
In our perspective as a for-profit consulting company, there is another aspect that comes into play as well: **the Business aspect.**

Being able to provide non-English and multilingual SOTA solutions to the NLP challenges we face in our project work is of huge value.

Testgebruikers

Bedrijven die in de VSC diensten en infrastructuur geïnteresseerd zijn, krijgen de mogelijkheid om tijdens een testfase na te gaan of het aanbod aansluit bij de noden. Nieuwe gebruikers kunnen zo gratis 500 node-dagen krijgen om een proof-of-concept uit te voeren en te verifiëren dat de infrastructuur en dienstverlening geschikt is voor hun applicaties. Bedrijven kunnen daarbij ook rekenen op de ondersteuning van het HPC-personeel.

In 2020 startten zo acht nieuwe bedrijven. Het gaat over vier start-ups, drie multinationals, en één KMO. Ze komen uit een verscheidenheid aan sectoren (maritieme sector, maakindustrie, consumentenonderzoek), met als gemene deler dat ze grote hoeveelheden data te verwerken hebben en/of complexe berekeningen doen.



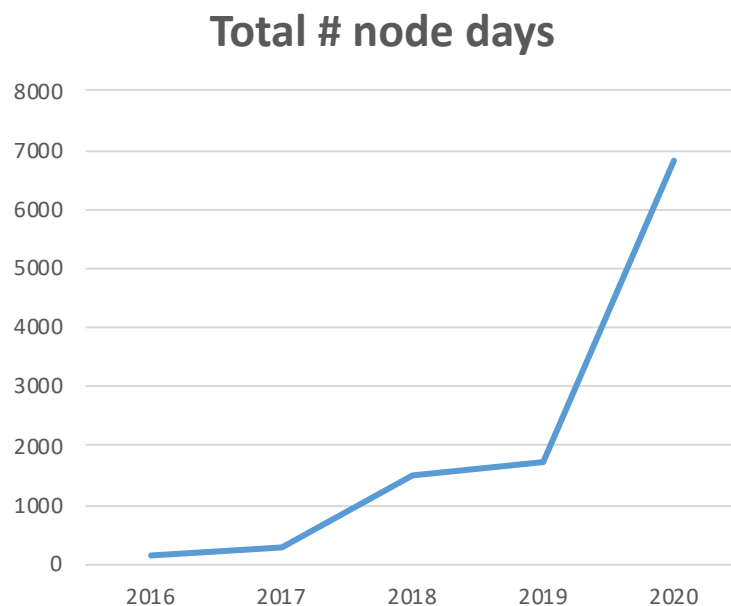
Afbeelding 27. Evolutie van het aantal testprojecten in industrie op Tier-1 Compute

Voor VSC biedt dit verder ook de mogelijkheid om het aanbod naar bedrijven te optimaliseren; om onboarding te vergemakkelijken; en om kennis op te doen rond het soort bedrijven waar VSC de meeste meerwaarde te bieden heeft. In outreach naar bedrijven blijken nieuwe partnerships (zie Partnerships) een positief effect te hebben, plus voorgaande ervaring met de VSC infrastructuur (bv. tijdens doctoraat) speelt ook een belangrijke rol.

Bestaande en nieuwe klanten

Na de testfase is er dan een juridische overeenkomst nodig tussen drie partijen met de exploitant van het Tier-1-systeem (voor BrENIAC bv. is dat KU Leuven) en het Fonds Wetenschappelijk Onderzoek - Vlaanderen (FWO) als juridische entiteiten. Gebruikers worden alleen gefactureerd voor de gebruikte rekestijd en gereserveerde schijfruimte, volgens vaste tarieven.

Hoewel het aantal nieuwe klanten in 2020 beperkt bleef, kende de totale rekestijd door de industrie op de VSC Tier-1 infrastructuur ten opzichte van voorgaande jaren een significante stijging. Eén van die nieuwe bedrijven is Mpacts. Zij ontwikkelen simulatiesoftware dat dient om industriële processen met korrelachtige materialen te helpen ontwerpen. Umicore, een wereldwijde groep gespecialiseerd in materiaaltechnologie en recyclage, is al langer klant. Zij maken bv. gebruik van de VSC-infrastructuur om complexe (CFD - computational fluid dynamics) simulaties te maken over hoe innovatieve materialen reageren onder een grote variatie aan omstandigheden.



Afbeelding 28. Totaal aantal gebruikte nodedagen op Tier-1 infrastructuur door industrie

Partnerships

In termen van partnerships werd er binnen Vlaanderen in eerste instantie gekeken naar de speerpuntclusters. Een belangrijke samenwerking met de Blauwe Cluster is daaruit al voortgekomen. Dit leidde tot:

- Een gezamenlijk event samen met De Blauwe Cluster, VLIZ, en bedrijven: https://www.lifewatch.be/sites/lifewatch.be/files/public/Verslag_LifeWatch_MIAB_25-09-2020_Beknopt.pdf
- Een data/cloud pilootproject op de VSC infrastructuur: <https://www.blauwecluster.be/nieuws/ontsluiten-van-mariene-datasets-voor-de-blauwe-economie>
- En een aantal geïnteresseerde bedrijven

Verder werden in de zomer van 2020 alle Vlaamse kandidaat-EDIH's aangeschreven (<https://www.ewi-vlaanderen.be/nieuws/european-digital-innovation-hubs-vlaamse-preselectie>).

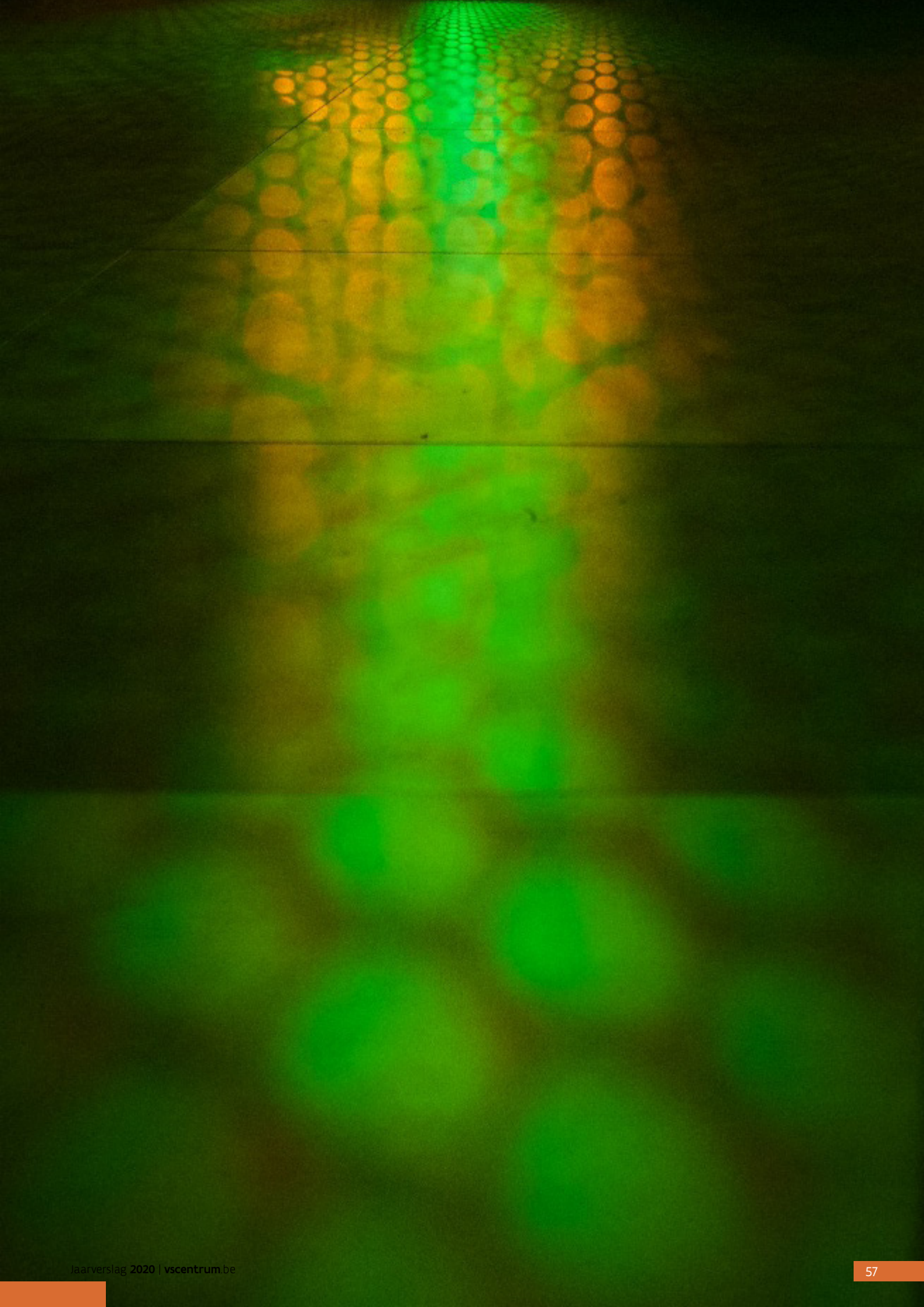
Uiteindelijk werden hierdoor vier *Letters-of-Support* (in [bijlage](#)) opgemaakt voor volgende projecten:

- Artificial Intelligence – trekker: IMEC
- EDIH@Agrifood – trekker: ILVO
- Energie in de bebouwde omgeving – trekker: Energyville
- Smart Cities and Smart Port & Logistics – trekker: The Beacon

Flanders Make wordt waarschijnlijk in een later stadium nog toegevoegd. Bedoeling is om via deze EDIH's de VSC dienstverlening dichterbij organisaties te krijgen.

VSC Industriële raad

In 2020 werd de samenstelling van de VSC Industriële raad niet gewijzigd. Mia Vanstraelen (The Brain Group; voorgaand IBM) zat de maandelijkse vergaderingen voor als voorzitter. Overige leden: Benny Westaedt (Van Havermaet), Marc Engels (FlandersMake), 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 2020 er z'n werk van gemaakt om de noden van de industrie te capteren en over te maken aan de VSC HEC raad.



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 onderzoeksinstellingen en de industrie.

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

- Introductory
- Intermediate
- Advanced
- Specialist courses & workshops

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

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





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

Opleidingen op advanced niveau vereisen nog meer ervaring en zijn domeinspecifieker dan de intermediate opleidingen. Voor deze cursussen doet het VSC een beroep op externe lesgevers. Vaak zijn ze verbonden aan PRACE Advanced Training Centers (PATC) of komen ze uit de industrie. In 2020 werden er geen advanced trainingen georganiseerd vanwege de COVID-19 pandemie.

Sinds januari 2020 heeft België een PRACE Training Center (PTC), een samenwerking tussen CECL en VSC. In juni organiseerde het VSC een PRACE training in samenwerking met SURFsara (Amsterdam). Deze training werd gegeven door VSC staf die deelnam aan het PRACE train-the-trainer programma. De training werd online georganiseerd. Er waren 28 deelnemers uit diverse Europese landen. De bevraging na afloop toonde zeer lovende beoordelingen.

Sommige opleidingen passen in geen van deze drie niveaus: ofwel zijn ze te domeinspecifiek, ofwel omvatten ze het volledige introductory tot advanced niveau. Dit verklaart de term "specialist", aangezien ook hiervoor vaak beroep gedaan wordt op externe specialisten.



Door de COVID-19 pandemie werden er in de lente van 2020 nogal wat trainingsessies geschrapt. Geleidelijk aan werd er overgeschakeld op online events, zodat het normale opleidingsaanbod beschikbaar was in de herfst van 2020. Voor een aantal trainingen werd videomateriaal gemaakt dat permanent ter beschikking staat via YouTube. Hoewel het totale aantal trainingsessies en deelnemers lager ligt dan de voorbije jaren merken we dat er een grotere participatie is van deelnemers van buiten de organiserende universiteiten.

Het VSC biedt ook opleidingen op maat aan, zowel voor onderzoeksgroepen als voor kennisinstellingen en industrie. Het gaat in dit geval meestal om een standaardopleiding, aangevuld met domeinspecifieke modules die hiervoor speciaal ontwikkeld worden. In 2020 bv. werden trainingen afgenomen door Flanders Make.

Een VSC medewerker werkte mee aan



de eerste Artificial Intelligence Data Analysis (AIDA) School for Heliophysicists met sessie over data pipelines en data reduction. Deze school ging door in januari 2020 bij Cineca, Bologna.

Een derde en vierde editie van de Massive Online Open Course (MOOC) “Defensive programming en Debugging” die VSC ontwikkelde voor PRACE 5IP (5de Implementation Phase, work package 4) gingen door in de lente en herfst van 2020 en telde 669 en 332 actieve deelnemers uit 131 en 93 landen. Een tweede MOOC “Fortran for scientific programming” is in voorbereiding voor 6IP en zal waarschijnlijk starten in mei 2021.

In het najaar organiseerde VSC, in samenwerking met IBM, ook een reeks sessies rond Quantum Computing. De ontwikkeling van de quantumcomputer is de laatste jaren in een stroomversnelling geraakt. Voor de klassieke computer is de kleinste informatie-eenheid de bit, die de waarde 0 of 1 heeft. Fysiek kan een bit een elektronisch schakelaartje zijn dat aan of uit staat. Elke moderne chip bevat er miljoenen. De quantumcomputer rekent echter met qubits, die – in

een variabele mix – de waarde 0 én 1 hebben. Voor het volledige programma, check: <https://www.vscentrum.be/quantum>. Er kwamen meer dan tweehonderd registraties binnen, waarvan ongeveer de helft alle sessies (vier in totaal) bijwoonden. Het publiek bestond voornamelijk uit academici, d.w.z. (doctoraats)studenten, post-docs, proffen aan de Vlaamse universiteiten. Daarnaast namen ook mensen uit het bedrijfsleven en uit overheidsinstellingen deel (+/- 15%).

Het VSC participeert sinds september 2020 ook in het EuroCC National Competence Center, onder meer voor het training work package. Hiervoor werd het HPC opleidingsaanbod in België in kaart gebracht.

VSC staf kan ook ondersteuning bieden aan docenten die voor reguliere cursussen gebruik willen maken van VSC infrastructuur. In 2020 was dit het geval voor vier cursussen. Uiteraard zijn er ook docenten die hun studenten zelf wegwijs maken.

Uiteraard worden de bestaande opleidingen steeds up-to-date gehouden met recente ontwikkelingen, maar er worden ook jaarlijks nieuwe onderwerpen voor training geselecteerd en uitgewerkt. De website van het VSC maakt het opleidingsaanbod bekend, zodat de informatie voor alle geïnteresseerden beschikbaar is. Via interne mailinglists worden de aankondigingen verspreid onder de gebruikers van de infrastructuur. Gerichte mailings vestigen de aandacht op specifieke opleidingen als die nuttig kunnen zijn voor een beperkte doelgroep of voor potentiële gebruikers.



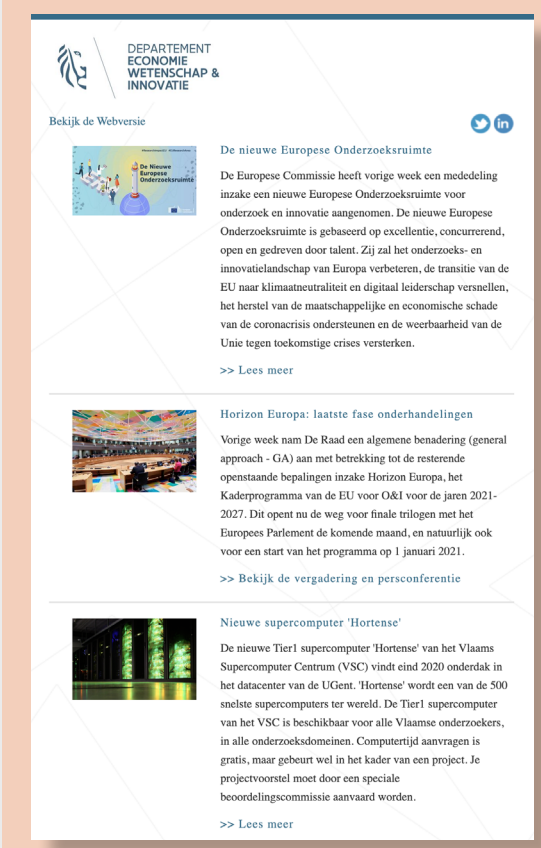
VSC in de media

In 2020 kwam het VSC diverse keren aan bod in de media. Het departement Economie, Wetenschap en Innovatie (EWI) berichtte de pers in oktober over "Hortense", de nieuwe Tier-1 high performance cluster die geïnstalleerd zal worden in het rekencentrum van de Universiteit Gent.

<http://departementewi.cmail20.com/t/ViewEmail/r/DF753F5B91EBD8B02540EF23F30FEDED>

In dezelfde maand verscheen op de nieuwssite van EWI een overzicht van onderzoek en innovatie in verband met de COVID-19 pandemie. Hierin werd gemeld dat het VSC rekentijd ter beschikking stelt voor onderzoek rond COVID-19, een aanbod waarop gretig ingegaan werd door Vlaamse onderzoekers.

<https://www.ewi-vlaanderen.be/nieuws/covid-19-een-overzicht-van-onderzoek-en-innovatie-vlaanderen>



DEPARTEMENT ECONOMIE WETENSCHAP & INNOVATIE

Bekijk de Webversie

De nieuwe Europese Onderzoeksruimte

De Europese Commissie heeft vorige week een mededeling inzake een nieuwe Europese Onderzoeksruimte voor onderzoek en innovatie aangenomen. De nieuwe Europese Onderzoeksruimte is gebaseerd op excellentie, concurrerend, open en gedreven door talent. Zij zal het onderzoeks- en innovatielandschap van Europa verbeteren, de transitie van de EU naar klimaatneutraliteit en digitaal leiderschap versnellen, het herstel van de maatschappelijke en economische schade van de coronacrisis ondersteunen en de weerbaarheid van de Unie tegen toekomstige crises versterken.

>> Lees meer

Horizon Europa: laatste fase onderhandelingen

Vorige week nam De Raad een algemene benadering (general approach - GA) aan met betrekking tot de resterende openstaande bepalingen inzake Horizon Europa, het Kaderprogramma van de EU voor O&I voor de jaren 2021-2027. Dit opent nu de weg voor finale trilogen met het Europees Parlement de komende maand, en natuurlijk ook voor een start van het programma op 1 januari 2021.

>> Bekijk de vergadering en persconferentie

Nieuwe supercomputer 'Hortense'

De nieuwe Tier1 supercomputer 'Hortense' van het Vlaams Supercomputing Centrum (VSC) vindt eind 2020 onderdak in het datacenter van de UGent. 'Hortense' wordt een van de 500 snelste supercomputers ter wereld. De Tier1 supercomputer van het VSC is beschikbaar voor alle Vlaamse onderzoekers, in alle onderzoeksdomeinen. Computertijd aanvragen is gratis, maar gebeurt wel in het kader van een project. Je projectvoorstel moet door een speciale beoordelingscommissie aanvaard worden.

>> Lees meer



De Blauwe Cluster is een onafhankelijke en neutrale partner die Vlaamse bedrijven ondersteunt bij het opzetten van partnerschappen met andere bedrijven, kenniscentra en overheidsinstellingen met het oog op de ontwikkeling en de bevordering van economische activiteiten op zee. Op hun nieuwssite schreef de Blauwe Cluster over de samenwerking tussen hen, het Vlaams Instituut voor de Zee (VLIZ) en het VSC om datasets te ontsluiten voor bedrijven die actief zijn in deze sector. Dit is één van de pilootprojecten voor data services aangeboden door het VSC.



<https://www.blauwecluster.be/nieuws/ontsluiten-van-mariene-datasets-voor-de-blauwe-economie>



Zoals in 2019 droeg het VSC in november bij aan de Dag van de Wetenschap met een podcast getiteld "Hoe werken supercomputers?" Het FWO berichtte hierover op zijn website.

<https://www.dagvandewetenschap.be/activiteiten/fwo-hoe-werken-supercomputers-on-demand>

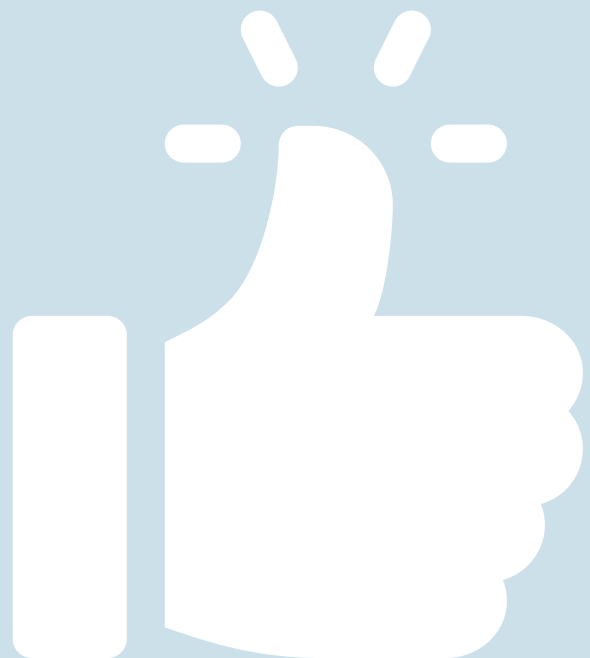
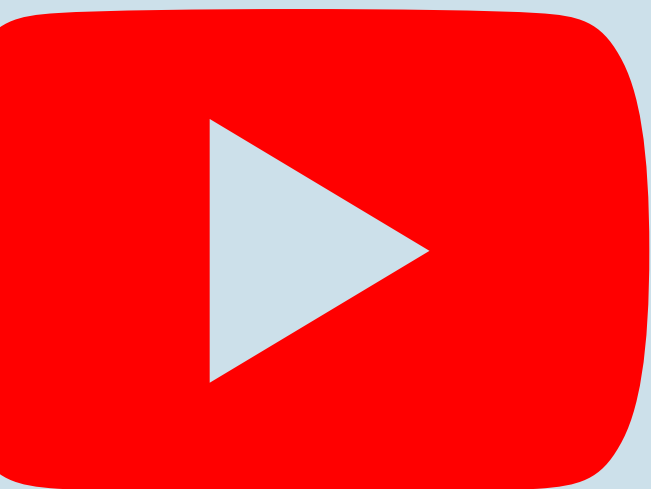
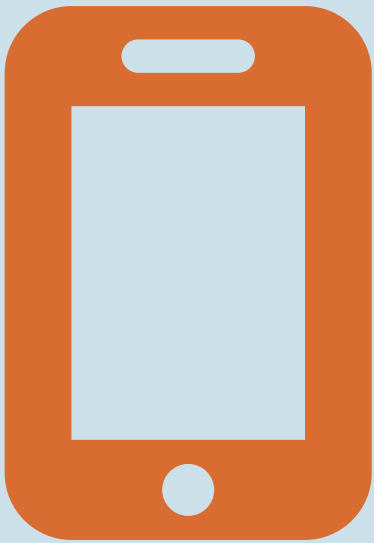
Artificiële intelligentie en machine learning zijn domeinen waarvoor grote hoeveelheden rekenkracht onontbeerlijk zijn. ML6, een team van A.I. experts met kantoren in Gent, Amsterdam, Londen en Berlijn, ontwikkelt zelflerende systemen met toepassingen in diverse sectoren. Het doel is de efficiëntie van hun klanten te helpen verhogen. In een blogpost van december op hun website belichten ze een project waarin een natuurlijk taalmodel voor het Engels aangepast wordt voor het Nederlands. Hiervoor deden ze beroep op de rekeninfrastructuur van het VSC.

<https://blog.ml6.eu/dutch-gpt2-autoregressive-language-modelling-on-a-budget-cff3942dd020>

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 Supercomputer Centrum, hebben al geruime tijd onderzoekers en bedrijven immense efficiëntie, zowel in werkuren als in euro's, opgeleverd.





Giovanni Lapenta | KU Leuven

Prof. Giovanni Lapenta is professor Plasmafysica aan de KU Leuven. Zijn onderzoek heeft Space Weather als onderwerp. Deze discipline probeert stormen - die worden veroorzaakt door zonne-uitbarstingen - en hun impact te voorspellen. Dergelijke simulaties zijn computationeel een grote uitdaging maar bijzonder interessant voor supercomputing.



**EuroHPC's
LUMI
kick-off event
in Belgium**

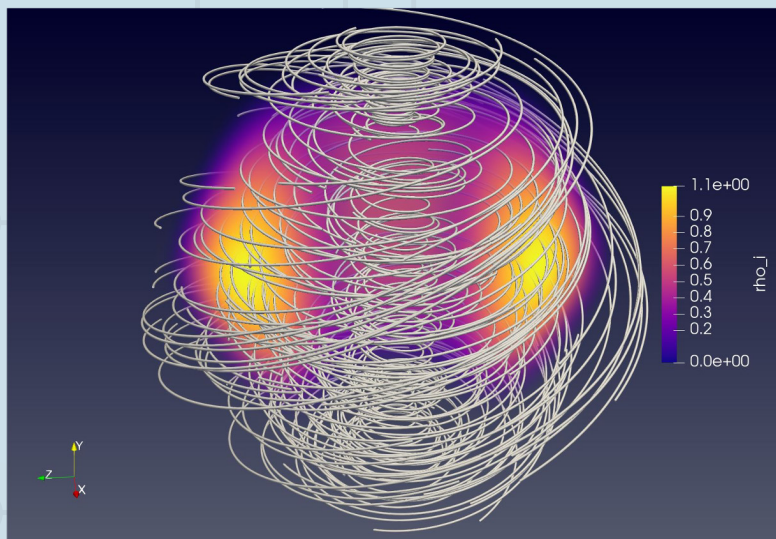
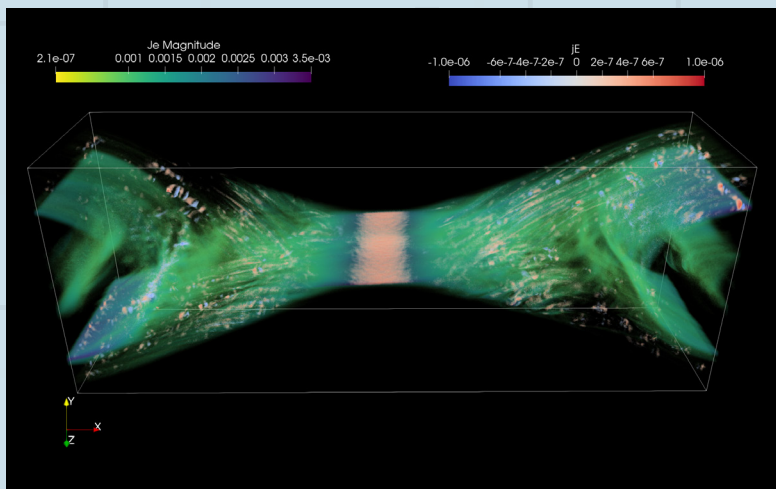
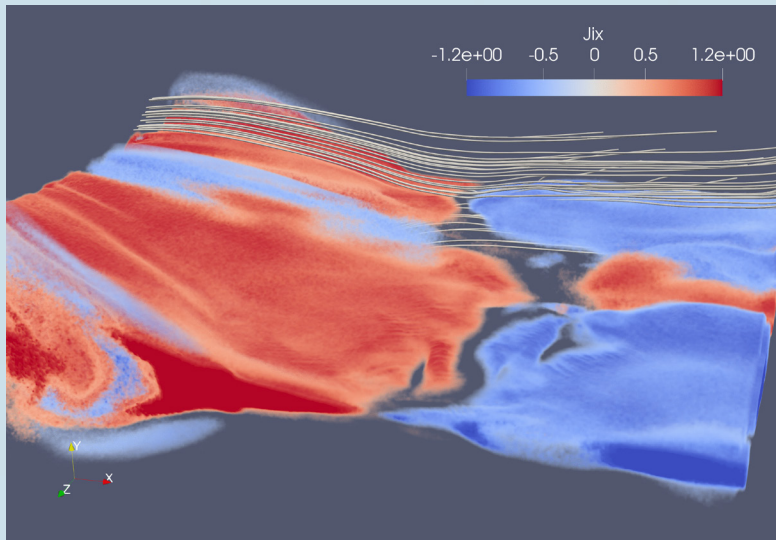
Giovanni Lapenta

Professor Plasma astrophysics at the KU



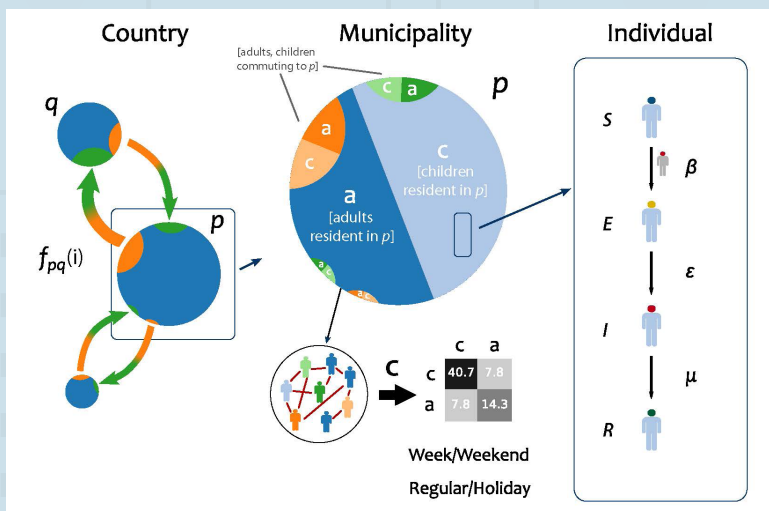
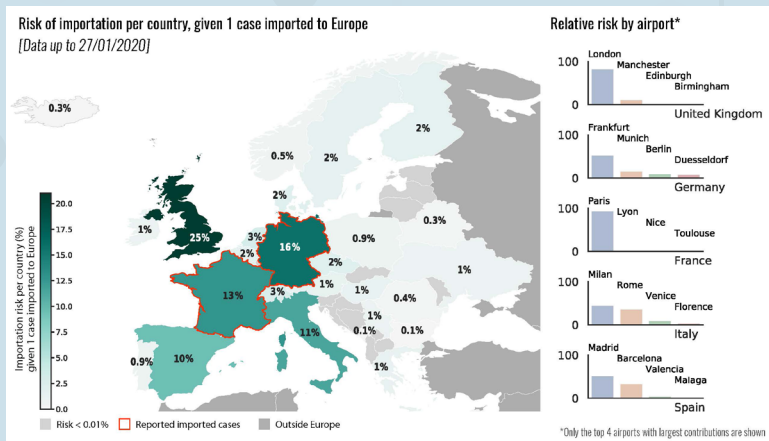


J Leuven



Supercomputers: One step ahead of CORONA

Succesverhaal in februari rond het toen nog nieuwe Coronavirus. Onderzoekers van de Universiteit Hasselt en de Sorbonne Universit  modelleren hoe interventiestrategie n de verspreiding van het virus in Europa kunnen tegengaan met behulp van onze supercomputers.





Scientific Python @Flanders Make

VSC trainde 35 medewerkers @FlandersMake, het Vlaams strategisch onderzoekscentrum voor de maakindustrie.

Onderwerp van onze tweedaagse opleiding was Python voor AI.



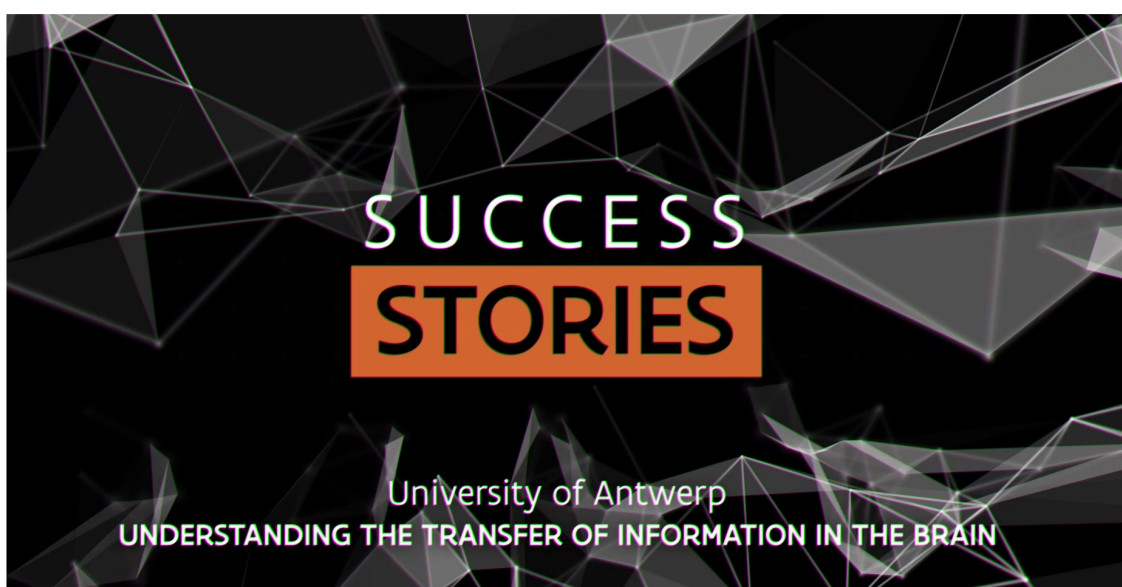
tific on ing



Christophe Verbist | UAntwerpen

Met behulp van onze supercomputers bestuderen onderzoekers van de Universiteit Antwerpen de overdracht van informatie in de hersenen en de relatie tussen neuronen en IQ.

Bekijk het succesverhaal van Christophe Verbist van het Molecular, Cellular and Network Excitability (MCNE).



Sven Rogge | UGent

Met behulp van onze supercomputers onderzoekt Sven Rogge van het Fonds Wetenschappelijk Onderzoek - FWO en de Universiteit Gent computationeel nieuwe soorten onconventionele materialen die kunnen worden gebruikt om water uit de woestijnlucht te oogsten, broeikasgassen op te vangen of de impact van mechanische schokken te verminderen.



Rony Keppens | KU Leuven

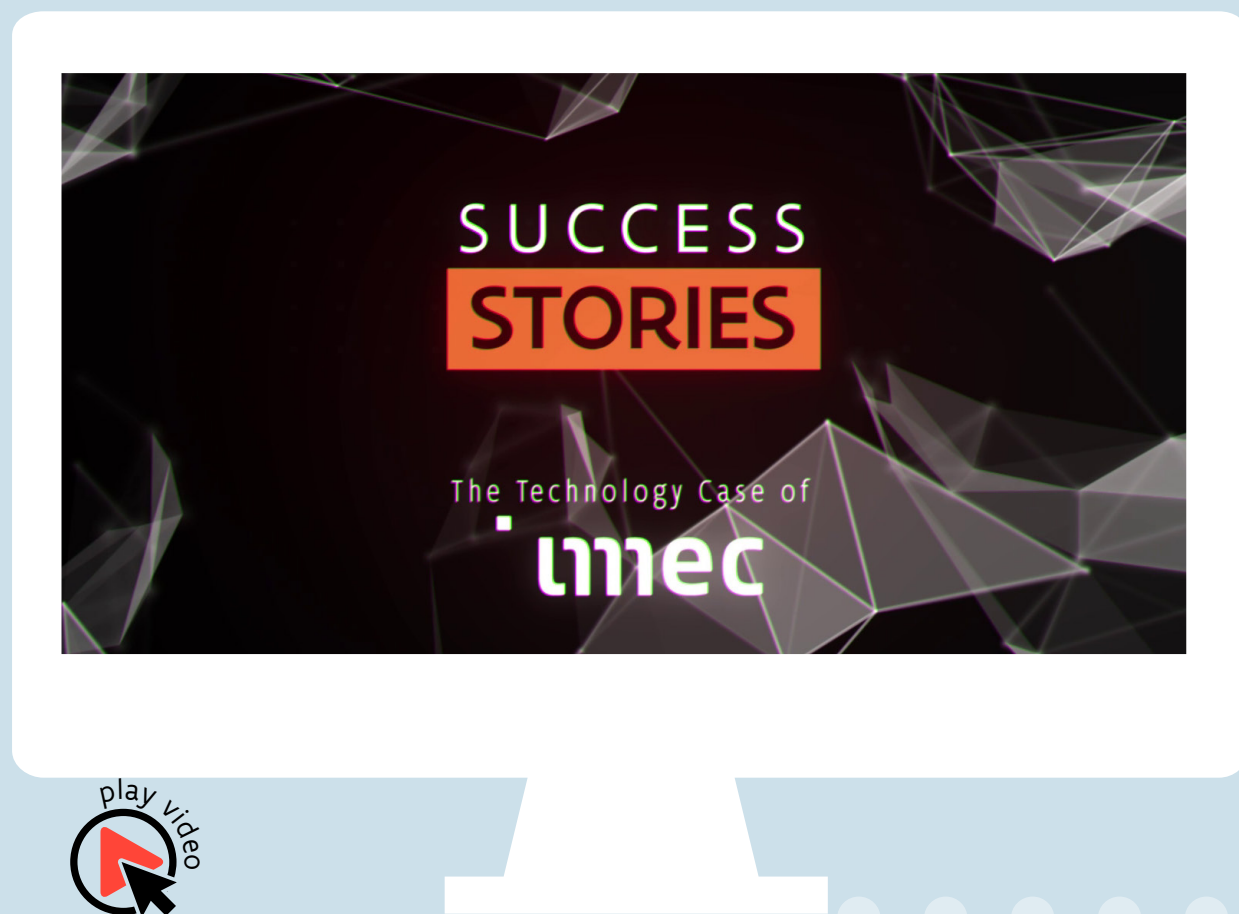
Een andere VSC Success Story bevat een video-interview met Rony Keppens van de KU Leuven over zijn onderzoek naar zonnefysica. Wat een genoegen om met hem te praten en uit te vinden hoe hij onze supercomputers gebruikt om hoge-resolutiesimulaties te maken.



Geoffrey Pourtois | imec

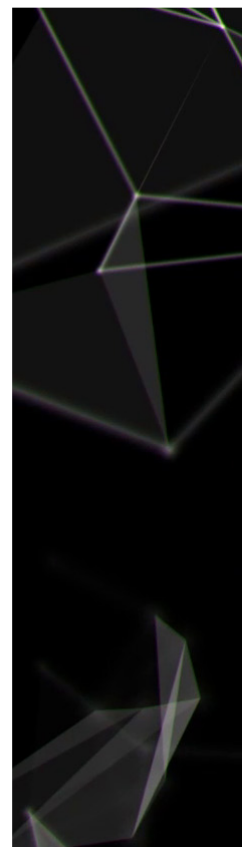
“Wat wij waarderen aan het VSC, is de kwaliteit van de infrastructuur en de technische ondersteuning die wij krijgen.”

Geoffrey Pourtois van imec deelde met veel plezier zijn verhaal over “atomistische simulaties”, een absolute must see video.



Success Stories | Benny Westaedt | Van Havermaet

Met behulp van onze supercomputers heeft het team van het Vlaams Supercomputer Centrum Van Havermaet geholpen een enorme hoeveelheid documenten te verwerken, een succesverhaal in een specifiek toepassingsgebied voor High-performance computing.





VAN HAVERMAET

UW RECHTERHAND

SUCCESS
STORIES

The Business Case of
VAN HAVERMAET

Internationale samenwerking

PRACE/LUMI/EuroCC/EuroHPC

VSC is ook actief in een aantal Europese projecten.

PRACE biedt in Europa ondersteuning om HPC in onderzoek te faciliteren en optimaliseren. Enerzijds is er, via het indienen van projecten, toegang tot Europese supercomputers voor academische en industriële gebruikers. Voorbeeld: onderzoekers van plasma-astrofysica van KU Leuven hebben zo al succesvol verschillende aanvragen ingediend. Anderzijds zijn er de PRACE IP projecten. Daarin wordt b.v. training ontwikkeld en wordt er geavanceerde ondersteuning aan gebruikers aangeboden. De universiteiten van Antwerpen en Leuven zijn de Vlaamse partners in het huidige PRACE 6IP project.

EuroHPC bundelt Europese inspanningen om een HPC-ecosysteem van wereldklasse te ontwikkelen.

Twee van de EuroHPC projecten waarin ook Vlaanderen betrokken is, zijn LUMI en EuroCC.

➤ LUMI is één van de drie pre-exascale supercomputers, gebouwd in Finland, waarin Vlaanderen participeert. De capaciteit die hierdoor beschikbaar komt, opent nieuwe mogelijkheden voor onderzoekers in Vlaanderen.

The logo for LUMI, consisting of the letters 'LUMI' in a bold, white, sans-serif font, centered within a black rectangular box.

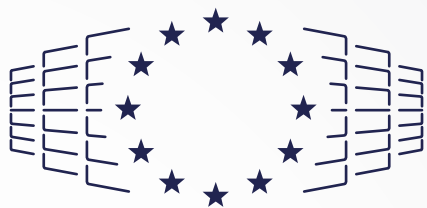
➤ EuroCC is het Nationale Competentie centrum rond HPC. Vlaamse universiteiten werken mee aan elk van de taken en kunnen daarbij rekenen op de steun van FWO. Een van de doelen is om industrie beter te betrekken bij HPC door hun noden goed te begrijpen en in kaart te brengen en hen te ondersteunen waar nodig.



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), AUGER (hoge energie kosmische straling), ARA (neutrino detector op de zuidpool) en RADAR (ook neutrino detector maar via radiogolven) ook een actieve gebruikers van de grid-cluster.



EuroHPC
Joint Undertaking



Bijlagen | Starting Grants 2020

Naam	Onderzoeker	Instelling	Wetenschapsveld
starter-135	Yi Ouyang	UGent	Technology
starter-136	Xavier Deraet	UGent	Molecular Modelling
starter-137	Elias Vanden Broeck	UGent	Molecular Modelling
starter-138	Ward Homan	KU Leuven	Astronomy and astrophysics
starter-139	Jose Nunez Ares	KU Leuven	Technology
starter-140	Robin Baeyens	KU Leuven	Astronomy and astrophysics
starter-141	Sergiu Clima	imec	Technology
starter-142	Kiroubanand Sankaran	imec	Technology
starter-143	Yannan Wang	UGent	Technology
starter-144	Boris Kruljevic	UGent	Technology
starter-145	Rolando Saniz	UAntwerpen	Physics
starter-146	Pietro Coletti	UHasselt	Mathematics
starter-148	Frank Lenaerts	SCK - vito	Technology
starter-149	Samuel Neale	UGent	Technology
starter-150	Thomas Tarnaud	UGent	Technology
starter-151	Mijie Shi	KU Leuven	Astronomy and astrophysics
starter-152	Oña Vera Andrea Carolina	UGent	Technology
starter-153	Sander Borgmans	UGent	Molecular Modelling
starter-154	Lies De Keer	UGent	Technology
starter-155	Charlotte Titeca	KU Leuven	Chemistry
starter-157	Lucas Delcour	UGent	Technology
starter-158	Yangyang Su	VUB	Chemistry
starter-161	Laurent De Moerloose	UGent	Technology
starter-163	Fan Zhang	KU Leuven	Astronomy and astrophysics
starter-164	Eline Louise Desmedt	VUB	Technology
starter-165	Mesfin Haile Mamme	VUB	Technology
starter-166	Ruben Van Lommel	VUB	Chemistry
starter-167	Mikhail Petrov	UAntwerpen	Physics
starter-168	Prashant Kumar	KU Leuven	Chemistry
starter-169	Karen Dorothy Dedecker	UGent	Molecular Modelling
starter-170	Jelle Wieme	UGent	Molecular Modelling
starter-171	Florian Wery	UGent	Technology
starter-172	Koen Veyts	KU Leuven	Life sciences
starter-173	Emerick Guillame	UHasselt	Technology
starter-174	Aran Lamaire	UGent	Molecular Modelling
starter-175	Wissam Barhdadi	UGent	Technology
starter-176	Jose Nunez Ares	KU Leuven	Technology
starter-177	Jan Turek	VUB	Chemistry
starter-178	Henri Dolfen	UGent	Technology
starter-179	Francesco Pucci	KU Leuven	Astronomy and astrophysics
starter-181	Piero Ferrari	KU Leuven	Chemistry
starter-182	Greeshma Boohalli Shivamallegowda	VUB	Technology
starter-183	Etienne Paul Hessou	VUB	Chemistry
starter-184	Sander Borgmans	UGent	Chemistry
starter-185	Santiago Lopez Castano	MOW	Technology
starter-186	Francois Klein	UCLovain	Earth sciences
starter-187	Zuo xiaojing	KU Leuven	Technology
starter-188	Gerasimos Kolokythas	MOW	Technology

Naam	Onderzoeker	Instelling	Wetenschapsveld
starter-189	Joris Van Bever	VUB	Earth sciences
starter-190	Ruishen Meng	KU Leuven	Astronomy and astrophysics
starter-191	Mats Denanyer	VUB	Chemistry
starter-192	Krishna Prasad	KU Leuven	Astronomy and astrophysics
starter-193	Ishaan Sood	KU Leuven	Technology
starter-194	Nicolas Moens	KU Leuven	Technology
starter-195	Umut Kaya	UGent	Mathematics
starter-197	Yang Yang Su	KU Leuven	Chemistry
starter-198	Sheng Yang	UGent	Physics
starter-199	Lilla Kapa Koloszar	VKI	Technology
starter-204	Flavio Siro Brigiao	VUB	Technology
starter-205	Xavier Deraet	VUB	Chemistry
starter-206	Thijs Bon	KU Leuven	Mechanical Engineering

Toegekende projecten

Naam	Onderzoeker	Instelling	Wetenschapsdomein
2020-01	Rony Keppens	KU Leuven	Astronomy and astrophysics
2020-02	Hans De Winter	UAntwerpen	Life sciences
2020-03	Toon Verstraelen	UGent	Molecular Modelling
2020-04	Veronique Van Speybroeck	UGent	Molecular Modelling
2020-05	Jan Turek	VUB	Chemistry
2020-06	Veronique Van Speybroeck	UGent	Molecular Modelling
2020-07	Veronique Van Speybroeck	UGent	Molecular Modelling
2020-08	Veronique Van Speybroeck	UGent	Molecular Modelling
2020-09	Rony Keppens	KU Leuven	Astronomy and astrophysics
2020-11	Toon Verstraelen	UGent	Molecular Modelling
2020-12	Leen Decin	KU Leuven	Astronomy and astrophysics
2020-13	Veronique Van Speybroeck	UGent	Molecular Modelling
2020-15	Geoffrey Pourtois	imec	Technology
2020-16	Geoffrey Pourtois	imec	Technology
2020-17	Milorad Milosevic	UAntwerpen	Physics
2020-18	Leen Decin	KU Leuven	Astronomy and astrophysics
2020-19	Bart Merci	UGent	Technology
2020-20	Tribhuwan Pandey	UAntwerpen	Physics
2020-22	Rony Keppens	KU Leuven	Astronomy and astrophysics
2020-23	Veronique Van Speybroeck	UGent	Molecular Modelling
2020-24	Robin Baeyens	KU Leuven	Astronomy and astrophysics
2020-25	Veronique Van Speybroeck	UGent	Molecular Modelling
2020-26	Veronique Van Speybroeck	UGent	Molecular Modelling
2020-27	Dirk Lamoen	UAntwerpen	Physics
2020-28	Dirk Lamoen	UAntwerpen	Physics
2020-29	Veronique Van Speybroeck	UGent	Molecular Modelling
2020-30	Frank De Proft	VUB	Chemistry
2020-31	Ken Haenen	UHasselt	Physics
2020-33	Daniel Escudero	KU Leuven	Chemistry
2020-35	Jonas Bekaert	UAntwerpen	Physics
2020-36	Rony Keppens	KU Leuven	Astronomy and astrophysics
2020-37	Frank De Proft	VUB	Chemistry

Toegekende projecten

Naam	Onderzoeker	Instelling	Wetenschapsdomein
2020-38	Jeremy Harvey	KU Leuven	Chemistry
2020-39	Joris Degroote	UGent	Technology
2020-40	Hans De Winter	UAntwerpen	Life sciences
2020-41	Leen Decin	KU Leuven	Astronomy and astrophysics
2020-42	Stefaan Poedts	KU Leuven	Astronomy and astrophysics
2020-44	Veronique Van Speybroeck	UGent	Molecular Modelling
2020-45	Veronique Van Speybroeck	UGent	Molecular Modelling
2020-46	Veronique Van Speybroeck	UGent	Molecular Modelling
2020-47	Kevin Van Geem	UGent	Technology
2020-48	Toon Verstraelen	UGent	Molecular Modelling
2020-49	Frank De Proft	VUB	Chemistry
2020-50	Toon Verstraelen	UGent	Molecular Modelling
2020-51	Francesco Pucci	KU Leuven	Astronomy and astrophysics
2020-52	Milorad Milosevic	UAntwerpen	Physics
2020-53	Mark Saeys	UGent	Chemistry
2020-55	Frederik Tielens	VUB	Chemistry
2020-56	Nicolas Moens and Ileyk El Mellah	KU Leuven	Astronomy and astrophysics
2020-57	Bart Ripperda, Thomas Hertog and Bert Vercnocke	KU Leuven	Astronomy and astrophysics
2020-58	Kenneth Goossens	UAntwerpen	Life sciences
2020-59	Samuel Helsen and Francois Klein	KU Leuven	Earth sciences
2020-60	Santiago Lopez Castano	MOW	Technology
2020-61	Krishna Prasad Sayamanthula and Mijie Shi	KU Leuven	Chemistry
2020-62	Yuhao Zhou and Rony Keppens	KU Leuven	Astronomy and astrophysics
2020-63	Massimo Bocus	UGent	Molecular Modelling
2020-64	Maarten Cools-Ceuppens, Michiel Larmuseau, Michael Sluydts and Toon Verstraelen	UGent	Molecular Modelling
2020-65	Pieter Cnudde, Samuel Neale and Veronique Van Speybroeck	UGent	Molecular Modelling
2020-66	Ishaan Sood and Johan Meyers	KU Leuven	Technology
2020-67	Michiel van Setten and Geoffrey Pourtois	imec	Physics
2020-68	Prashant Kumar	KU Leuven	Chemistry
2020-69	Emerick Guillaume	UHasselt	Physics
2020-70	Yi Ouyang and Kevin Van Geem	UGent	Technology

Toegekende projecten

Naam	Onderzoeker	Instelling	Wetenschapsdomein
2020-71	Navaneeth Kodunthirappully Narayanan and Joris Degroote	UGent	Technology
2020-72	Jose Nunez Ares	KU Leuven	Technology
2020-73	Michel Houssa and Ruishen Meng	KU Leuven	Physics
2020-74	Florian Wéry, Laurien Vandewalle and Kevin Van Geem	UGent	Technology
2020-75	Tom Braeckevelt	UGent	Computer Science
2020-76	Lilla Koloszar, Silvania Lopes and Raimondo Giamanco	VKI	Technology
2020-77	Tribhuwan Pandey	UAntwerpen	Physics
2020-78	Alexander Hoffman, Sven Rogge and Veronique Van Speybroeck	UGent	Molecular Modelling
2020-79	Siebe Vanlommel and Veronique Van Speybroeck	UGent	Molecular Modelling
2020-80	Jan Bolte	KU Leuven	Astronomy and astrophysics
2020-81	Sander Vandenhaute and Aran Lamaire	UGent	Molecular Modelling
2020-82	Xiaojing Zuo, Yuri Coutinho and Sourav Chatterjee	KU Leuven	Technology
2020-83	Thobani Gambu, Yaoyuan Zhang, Sara Santos and Cesar Urbina Blanco	UGent	Technology
2020-84	Thobani Gambu, Yaoyuan Zhang, Sara Santos and César A Urbina-Blanco	UGent	Technology

Personeelslijst

Instelling	Naam	% tewerkstelling in het kader van HPC
KU Leuven	Herman Moons	20%
KU Leuven	Leen Van Rentergem	30%
KU Leuven	Jan Ooghe	100%
KU Leuven	Jan De Laet	100%
KU Leuven	Maxime Van den Bossche	100%
KU Leuven	Mustafa Dikmen	100%
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	100%
KU Leuven	Rudy Rys	40%
KU Leuven	Tom van Mierlo	100%
KU Leuven	Tom Vanhout	20%
KU Leuven	Yves Daniels	50%
KU Leuven	Christophe van Buggenhout	50%
KU Leuven	Sofie Pieraerd	10%
KU Leuven	Els veraverbeke	10%
KU Leuven	Philip Brusten	10%
UGent	Wouter Depypere	100,00%
UGent	Stijn De Weirdt	100,00%
UGent	Alvaro Simon Garcia	100,00%
UGent	Andy Georges	100,00%
UGent	Kenneth Hoste	100,00%
UGent	Ewald Pauwels	100,00%
UGent	Balazs Hajgato	100,00%
UGent	Kenneth Waegeman	100,00%
UGent	Bart Verheyde	100,00%
UGent	Danny Schellemans	10,00%
UGent	Johan Van Camp	30,00%
UGent	Frédéric De Leersnijder	20,00%
UGent	Wim Waeyaert	20,00%
UGent	Werend Brantegem	10,00%
UGent	Dieter Roefs	50,00%
UHasselt	Geert Jan Bex	100,00%
UHasselt	Rafal al-Takreeti	50,00%
UAntwerpen	Franky Backeljauw	100,00%
UAntwerpen	Stefan Becuwe	100,00%
UAntwerpen	Kurt Lust	100,00%
UAntwerpen	Carl Mensch	100,00%
UAntwerpen	Engelbert Tijskens	100,00%
UAntwerpen	Annie Cuyt	5,00%
UAntwerpen	Koen Decauwsemaecker	10,00%
UAntwerpen	Herwig Kersschot	10,00%

Personeelslijst

Instelling	Naam	% tewerkstelling in het kader van HPC
UAntwerpen	Wim Holemans	5,00%
UAntwerpen	Bertin Peeters	5,00%
VUB	Samuel Moors	100,00%
VUB	Stéphane Gérard	100,00%
VUB	Alex Domingo Toro	100,00%
VUB	Ward Poelmans	100,00%
VUB	Dirk Heyvaert	15,00%
VUB	Philippe Leemans	25,00%
VUB	Michel Luybaert	20,00%
VUB	Olivier Devroede	20,00%
VUB	Johan D'Hondt	15,00%
VUB	Steven Opstaele	10,00%
VUB	Robert Jansen	10,00%
VUB	Stefan Weckx	10,00%
VUB	Veerle De Rademaeker	2,00%
VUB	Nina De Bruyne	5,00%
VUB	Henri Vanroelen	5,00%

VLAAMS
SUPERCOMPUTER
CENTRUM



Letter of Support

for

EDIH###

To whom it might concern

We are writing on behalf of the Flemish Supercomputer Center (VSC) to express our support for the candidacy of ##### in the domain of #####

The Flemish Supercomputer Center (Vlaams Supercomputer Centrum - VSC) is a partnership between the five Flemish universities and their university associations: Associatie Universiteit & Hogescholen Antwerpen, Universitaire Associatie Brussel, Associatie Universiteit Gent, Associatie KU Leuven and Associatie Universiteit-Hogescholen Limburg. This consortium established by the Flemish Government in December 2007 brings together knowhow in scientific and technical computing (including high performance computing, high throughput computing, cloud computing and data processing) in Flanders. The VSC is managed by the Research Fund – Flanders (FWO).

For this ##### application VSC can offer HPC services in a demand-driven manner based on industrial needs. The range of services that VSC supply are built on four pillars: consultancy, research collaboration, training and computing power.

- Consultancy: VSC experts analyse the specific needs and examine how supercomputing can offer added value.
- Research collaboration: The VSC acts as HPC contact and can channel the question from a company for research collaboration (e.g. in the context of an R&D project).
- Training: The VSC regularly organises basic training events. Topics include Linux, (parallel) programming languages and paradigms, code optimization, but also application-driven training such as materials science, computational fluid dynamics etc.
- Computing power: Computing time on the state-of-the-art supercomputing infrastructure is available within the VSC network. Users receive step-by-step support for starting computational tasks and a special help-desk is ready to solve user-related questions and to assist the users in the installation of specific software.

Yours sincerely,

Engelbert Tijskens

Stijn de Weirdt

Ingrid Barcena



vscentrum.be



*Innovative computing
for a smarter Flanders*



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, Bert Tijskens,
Johan Van Camp, Ewald Pauwels,
Stijn De Weirdt, Stefan Weckx,
Ward Poelmans, Geert Jan Bex,
Caroline Volckaert, Tim Jaenen

Creatie en vormgeving

Rafal Al-Tekreeti

Uitgegeven in **juni 2021**