

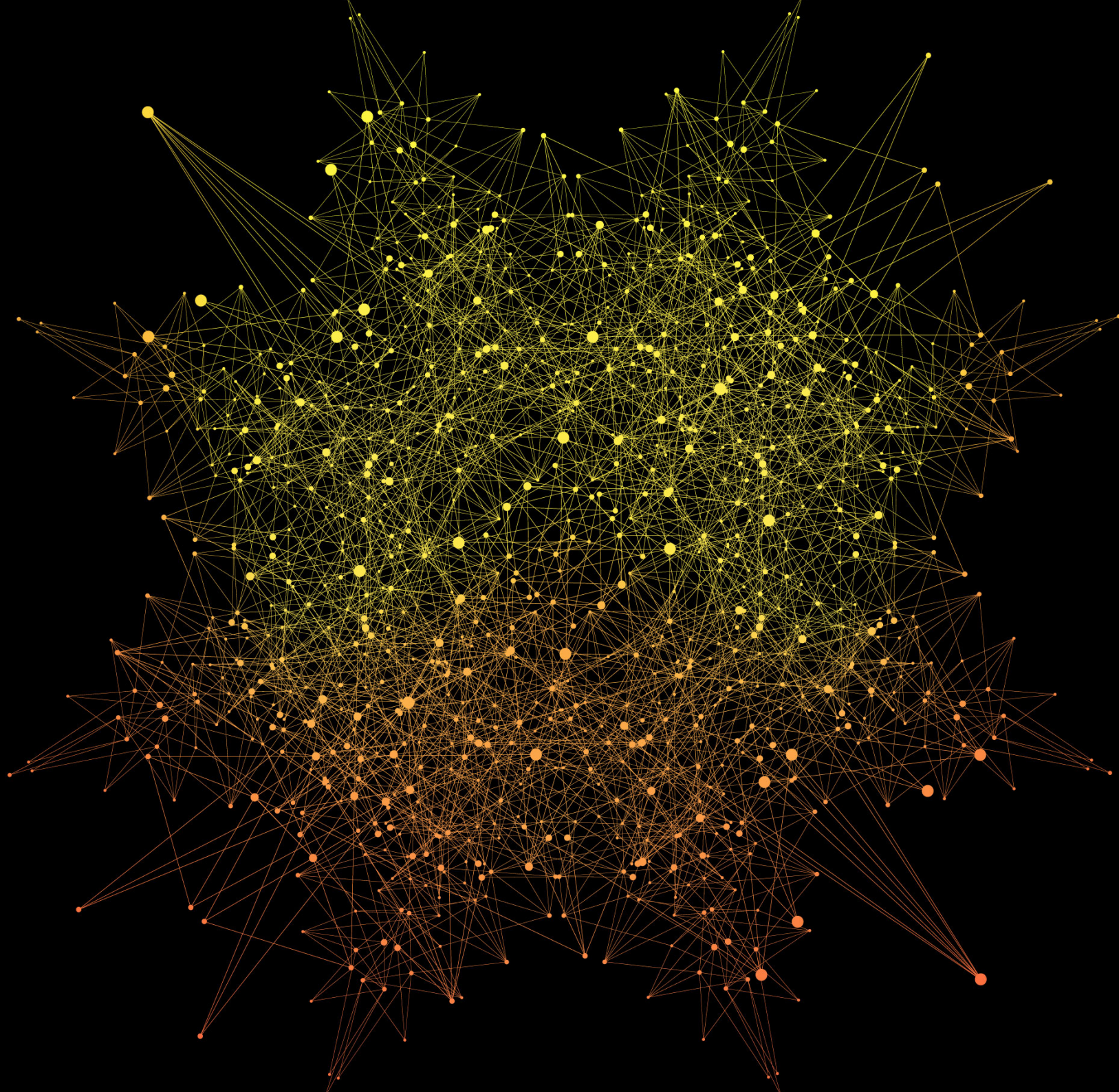


Vlaams Supercomputer Centrum
Jaarverslag
2022

*Empowering innovation through
advanced computing solutions*

Met steun van
fwo





04 | VOORWOORD

06 | IN DE KIJKER

Compute
Evenementen
Europa
Succesverhalen

08 | HET VSC UITGELICHT

Ter inleiding	08
Financiering van het VSC	09
Recurrente financiering	09
Eenmalige investering SaaS	10
Op naar VSC 2.0	12

16 | HET TIER-1 SUPERCOMPUTERPLATFORM

Activiteiten Tier-1 platform	16
Tier-1 Compute	17
Tier-1 Data	22
Tier-1 Cloud	26
Integratie	29
VSC projecten	30

32 | TIER-2 INFRASTRUCTUUR

Beschikbare infrastructuur	32
Exploitatie en gebruik	39
Toekennen rekentijd Tier-2	47
Gebruikersondersteuning	48
Beantwoorden van vragen van gebruikers	48
Bijeenkomsten met gebruikers / specifieke ondersteuning	50

54 | PERSONEEL

Subsidiëring	54
Effectieve personeelsinzet	55
Profielen	56
Gevorderde ondersteuning	58

60 | OUTREACH NAAR BEDRIJVEN

Testgebruikers	60
Bestaande en nieuwe klanten	60
Gebruikersondersteuning Hortense t.b.v. industrie	61
Community building	63
Studieopdracht HPC potentieel in Vlaanderen	65
VSC Industry Road Tour	66
Uitgebreide HPC ondersteuning	67

68 | OPLEIDINGEN

72 | EVENEMENTEN

VSC Gebruikersdag	72
VSC Lunchsessie rond OpenFOAM: "CFD meets HPC"	73
iRODS User Group	74
KU Leuven Tier-2 launch event	74

76 | INTERNATIONALE SAMENWERKING

PRACE, EuroHPC, LUMI, EuroCC	76
EGI	79

80 | SUCCESVERHALEN

Sally Chambers Digital Humanities	82
Julie Birkholz Digital Humanities	83
Wim Thiery Klimaatverandering	84
PathoSense Genome analysis in infectious diseases	85

86 | BIJLAGEN

Personeelslijst	86
Tier-1 Compute 2022 GPU & CPU	88
Tier-1 Cloud 2022	92



VOORWOORD

Impact op excellent onderzoek blijft in de VSC dienstverlening een belangrijke drijfveer. VSC wil immers bijdragen aan het versterken van het innovatiepotentieel in Vlaanderen door het aanbieden van diensten en infrastructuur op regionaal (Tier-1) en lokaal (Tier-2) niveau voor alle RDI activiteiten in de academische wereld, de industrie en de overheid. Daarbij waakt het VSC ook over de internationale ontwikkelingen en verzekert ze de aansluiting aan de Europese HPC doelstellingen.

2022 werd opnieuw een boeiend en uitdagend jaar voor het VSC. Na meer dan 6 jaar dienst werd Tier-1 BrENIAC eind 2022 uitgeschakeld. De opvolger Hortense is in de loop van 2022 in productie genomen en heeft de rol van Vlaamse supercomputer overgenomen. Ook de data en cloud componenten verwelkomden de eerste (piloot) gebruikers.

Intussen zijn via de Europese HPC initiatieven zoals EuroHPC, LUMI en EuroCC de samenwerkingen rond HPC binnen België en Europa verder uitgewerkt. In het National Competence Centre (NCC) werkt het VSC, via de vijf Vlaamse associaties, samen met het Waalse CENAERO en CECI aan de uitbouw van een referentiecontactpunt rond HPC op nationaal niveau voor klanten uit de industrie, wetenschappen, (toekomstige) HPC-experten en het grote publiek. Verder gingen de eerste Belgische (piloot) projecten op LUMI met de infrastructuur aan de slag.

In 2022 organiseerde VSC ook verschillende evenementen naar gebruikers. Zo waren er de VSC gebruikersdag, een (online) lunchsessie rond OpenFOAM, de iRODS gebruikersgroep, het KU Leuven Tier-2 launch event en VSC Industry Tour evenementen rond health en de maritieme sector.

Tenslotte versterkte VSC de inspanningen naar de niet-academische gebruikers. De huidige dienstverlening wordt aangepast aan de specifieke noden van deze organisaties en er wordt op een proactieve wijze naar mogelijke klanten gezocht. Dit vertaalde zich in 2022 in het groeiend aantal niet-academische testgebruikers en industrieel verbruik dat jaar na jaar stijgt. Verder werden er nieuwe initiatieven uitgewerkt, zoals community building en de studieopdracht rond HPC potentieel in Vlaanderen.



Het Tier-1 Supercomputing-as-a-Service project waarbij naast Tier-1 rekenkracht, ook een data component en cloud faciliteiten worden aangeboden, liep echter eind 2022 ten einde. De financiering voor een toekomstgerichte en duurzame uitbouw van het Tier-1-niveau blijft noodzakelijk om de gebruikers te kunnen blijven ondersteunen in hun nood aan rekenkracht, en om Vlaanderen competitief te houden in een snel evoluerende, op big data gebaseerde wetenschappelijke en technologische wereld. In 2022 werd door de HEC-raad hard gewerkt aan het uitschrijven van het toekomstplan voor VSC vanaf 2023 en financiering voor de komende jaren werd intussen verzekerd.

Het VSC is dus klaar voor een uitdagende toekomst!

KU Leuven

Leen Van Rentergem | Ingrid Barcena | Jan Ooghe

UAntwerpen

Annie Cuyt | Stefan Becuwe

UGent

Johan Van Camp | Ewald Pauwels

UHasselt

Geert Jan Bex | Rafal Al-Tekreeti

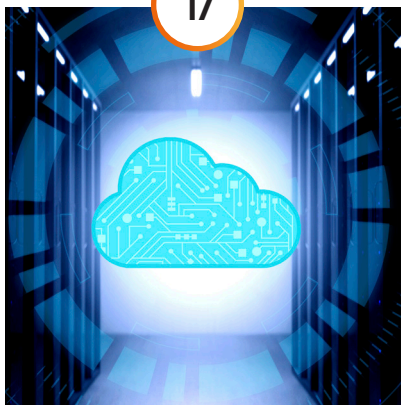
VUB

Stefan Weckx | Ward Poelmans

FWO

Caroline Volckaert | Tim Jaenen

17



Compute

Na meer dan 6 jaar dienst werd Tier-1 BrENIAC eind 2022 uitgeschakeld. De opvolger Hortense is in de loop van 2022 in productie genomen en heeft de rol van Vlaamse supercomputer overgenomen.

72



Evenementen

In 2022 werd de draad opnieuw opgepikt met de organisatie van verschillende evenementen. Zo waren er de VSC gebruikersdag, een (online) lunchsessie rond OpenFOAM, de iRODS gebruikersgroep, het KU Leuven Tier-2 launch event en VSC Industry Tour evenementen rond health en de maritieme sector.

76



Europa

Onder de EuroHPC vlag zetten we EuroCC en LUMI in de kijker. Bij EuroCC werd de eerste fase van de nationale competentiecentra afgerond en volop gewerkt aan het vervolproject. Voor LUMI werden de eerste oproepen voor projecten gelanceerd op het Belgische aandeel van de machine.

80



Succesverhalen

Op deze pagina belichten we een aantal indrukwekkende succesverhalen van onderzoekers, wetenschappers en bedrijven die tot nu toe baanbrekende resultaten hebben behaald die zonder de infrastructuur van VSC niet mogelijk waren geweest.



*Innovative Computing
for a Smarter Flanders*

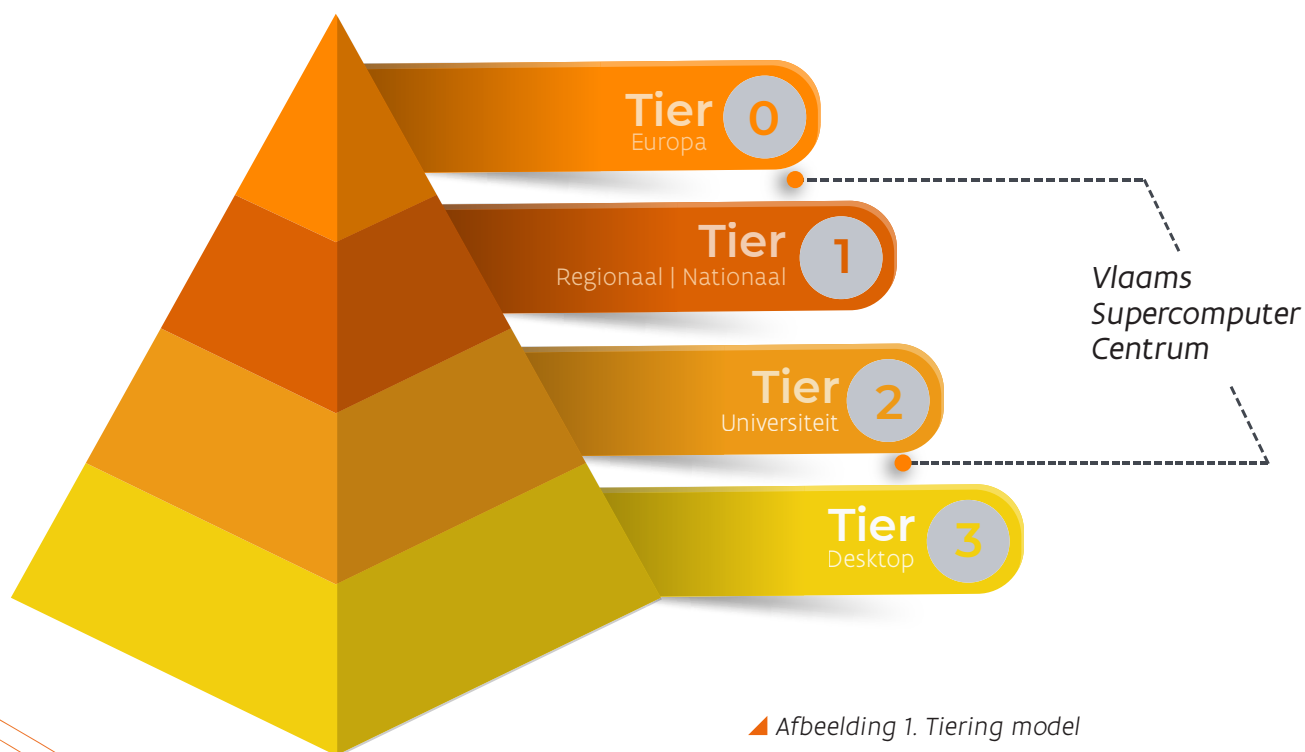
HET VSC UITGELICHT

Ter inleiding

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

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

In het Europees model voor HPC wordt een onderscheid gemaakt tussen drie niveaus: de reken capaciteit waarover onderzoeksinstituten beschikken (Tier-2), de reken capaciteit waarvan de noden en de kosten een instelling overstijgen en die op het niveau van een regio of een land voorzien wordt (Tier-1) en de superzware rekeninfrastructuur (Tier-0). Het VSC richt zich vooral op de lagen Tier-2 en Tier-1, en poogt zo een getrapte brug te vormen tussen Tier-3 en Tier-0.



▲ Afbeelding 1. Tiering model

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 6.501.000 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.

Recurrente financiering

Bovenop het recurrent budget van 6.381.000 werd er in 2022 een eenmalige indexatie van 120.000 euro aan het budget toegevoegd gezien ook infrastructuurmiddelen gedeeltelijk worden geïndexeerd. Een deel van deze indexatie kon worden toegewezen aan VSC-personeelsmiddelen. De loonkosten zijn immers al jaren onveranderd gebleven en werden nog nooit geïndexeerd, noch een anciënniteit of een carrièrepad werd opgenomen in VSC-personeelsmiddelen waardoor de loonbudgetten elk jaar minder toereikend worden. Door de indexatie kunnen de personeelsmiddelen hiermee van 95.000 euro naar 100.000 euro per VTE stijgen.

In 2022 werd de Tier-2 infrastructuur gefinancierd door het FWO verdeeld over 3.716.000 euro investeringen in hardware en werking, 2.400.000 euro in personeel en Belnet kost (35.000 euro). Daarnaast werd 100.000 euro gereserveerd voor een consultancyopdracht en de outreach activiteiten naar niet-academisch gebruik werden ondersteund met een budget van 250.000 euro. Het gezamenlijk budget bedraagt dus 6.501.000 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
Personeel in Euro	€ 600.000	€ 200.000	€ 500.000	€ 300.000	€ 400.000	€ 2.000.000	€ 200.000	€ 200.000	€ 2.400.000
totaal personeel	€ 600.000	€ 200.000	€ 500.000	€ 300.000	€ 400.000	€ 2.000.000	€ 200.000	€ 200.000	€ 2.400.000
Herculesleutel 2019	0,4126	0,04	0,3179	0,1037	0,1258	1			
CAPEX en werking Tier-2	€ 1.533.222	€ 148.640	€ 1.181.316	€ 385.349	€ 467.473	€ 3.716.000			€ 3.716.000
Belnet	€ 35.000					€ 35.000			€ 35.000
consultancy						€ 100.000			€ 100.000
outreach en industrie						€ 250.000			€ 250.000
Totaal						€ 6.101.000			€ 6.501.000

▲ Tabel 1. Verdeling recurrent budget 2022

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

Eenmalige investering SaaS

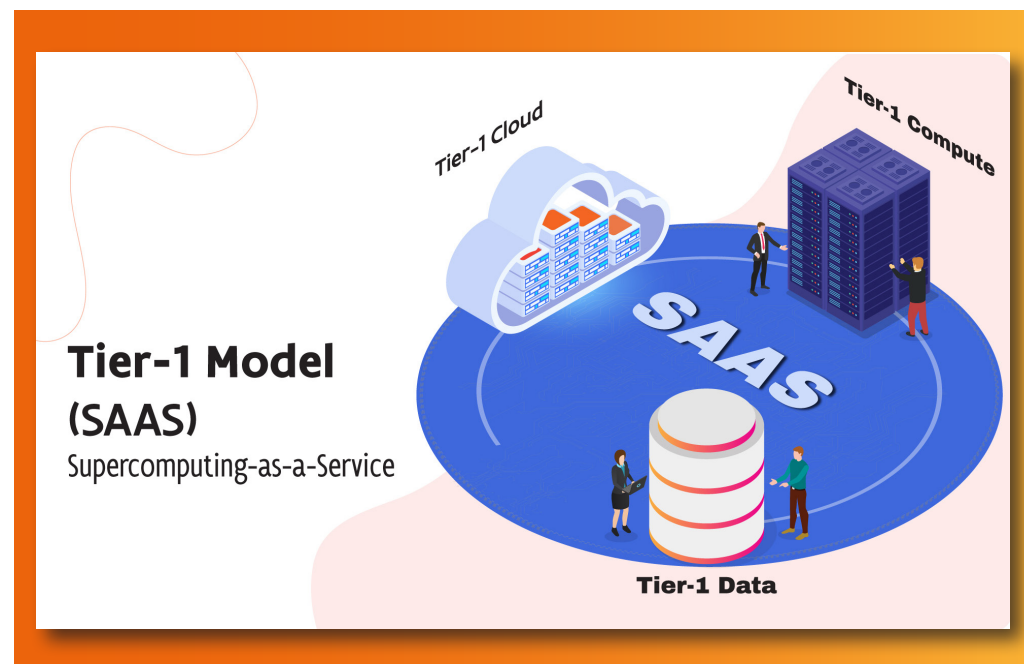
Het VSC biedt sedert 2018 een nieuw conceptueel Tier-1 model aan: Supercomputing-as-a-Service (SaaS). De Tier-1 supercomputing infrastructuur in Vlaanderen was voordien vooral gericht op gebruikers met zware rekenvraagstukken (typische HPC/HTC workloads). Hoewel dit platform reeds erg succesvol was, komt de 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.

Binnen het SaaS-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 rekentaken kunnen verwerken.
2. Onlosmakelijk daaraan verbonden is een data component. Steeds meer gebruikers hebben immers computationeel werk dat intensief gebruik maakt van grote datasets. Het migreren van deze data van en naar de compute infrastructuur telkens deze voor een berekening moet worden gebruikt, is omwille van de schaal zeer inefficiënt. Het is dan ook noodzakelijk een data component toe te voegen waar grote datasets gedurende een langere tijd kunnen opgeslagen worden en van daaruit ook op een efficiënte manier worden verwerkt.
3. Onderzoek met deze datasets vraagt veelal ook een flexibele gebruiksomgeving: een omgeving waar op een interactieve manier, op maat van de toepassingen en van de gebruikers analyses kunnen gebeuren; een omgeving waar pre- en postprocessing kan worden uitgevoerd; een omgeving waar de data op een webgebaseerde 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



▲ Afbeelding 2. SaaS

ook een centraal beheerde Tier-1 data omgeving wordt opgebouwd en cloud services worden aangeboden.

De laatste twee componenten zijn de meest recente 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 kan worden uitgebouwd om het Supercomputing-as-a-Service concept te verwezenlijken:

Aangezien de Tier-1 financiering afloopt eind 2022, werden in 2022 concrete stappen gezet 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.

Concept	2018	2019	2020	2021	2022	Totaal (M€)
Tier-1b upgrade	€ 5.000.000			€ 142.780		
Tier-1c fase 1			€ 5.022.301	€ 977.699	€ 300.000	
Tier-1c fase 2					€ 6.200.000	
Tier-1 Compute	€ 5.000.000	€ 0	€ 5.022.301	€ 1.120.479	€ 6.500.000	€ 17.642.780
Tier-1 Data	€ 0	€ 360.000	€ 46.970	€ 70.930	€ 4.585.202	€ 5.063.102
Tier-1 Cloud	€ 0	€ 435.000	€ 475.000	€ 372.500	€ 917.500	€ 2.200.000
OMT (2 VTEs)	€ 190.000	€ 190.000	€ 190.000	€ 190.000	€ 190.000	
2 VTEs (Data/Cloud)	€ 0	€ 190.000	€ 190.000	€ 190.000	€ 190.000	
2 VTEs (Data/Cloud)	€ 0		€ 190.000	€ 190.000	€ 190.000	
Tier-1 personeel	€ 190.000	€ 380.000	€ 570.000	€ 570.000	€ 570.000	€ 2.280.000
Tier-1 stroom		€ 230.000	€ 391.973	€ 634.361	€ 1.057.515	€ 2.313.849
Tier-1 Integratie	€ 0	€ 45.000	€ 77.269	€ 125.000	€ 253.000	€ 500.569
Totaal	€ 5.190.000	€ 1.450.000	€ 6.583.513	€ 2.893.269	€ 13.883.217	€ 30.000.000

▲ Tabel 2. Details impulsfinanciering

Op naar VSC 2.0

De impulsfinanciering voor het Tier-1-niveau in Vlaanderen loopt eind 2022 af. Een nieuw strategisch plan en financiering voor een toekomstgerichte en duurzame uitbouw van het Tier-1-niveau zijn noodzakelijk om de gebruikers te kunnen blijven ondersteunen in hun nood aan rekenkracht, en om Vlaanderen competitief te houden in een snel evoluerende, op big data gebaseerde wetenschappelijke en technologische wereld. Terzelfdertijd wordt onder impuls van de Europese Commissie via de EuroHPC Joint Undertaking sterk ingezet op zeer grote rekenkracht, voornamelijk onder de vorm van een Europees (pre-)exascale Tier-0 niveau, maar ook op de eigen ontwikkeling van hardware technologie, niet in het minst vanuit geopolitiek strategische overwegingen.

Gezien deze recente evoluties dient het VSC mee te groeien in een vernieuwde rol binnen Vlaanderen. Daar waar het VSC tot nu toe een louter regionaal karakter had, met vooral vanuit historisch perspectief een focus op gebruikers binnen de universitaire associaties, dient de gebruikersbasis binnen Vlaanderen actiever verbreed te worden, en dient die verbrede gebruikersbasis ook gestimuleerd en ondersteund te worden om stappen te zetten richting een Europees ecosysteem van (pre-)exascale clusters en regionale expertisecentra, waarbinnen het VSC een volwaardige partner wenst te zijn.

In 2022 werd door de HEG-raad hard gewerkt aan het uitschrijven van het toekomstplan voor VSC dat op 25 mei 2022 werd goedgekeurd door de raad van bestuur.

De krijtlijnen zijn als volgt samen te vatten:

➔ **VSC 2.0 als regionaal servicecenter**

Het VSC zal een virtuele, decentrale organisatie blijven, onder toezicht van en in samenwerking met het FWO. De operationele taken worden uitgevoerd door de vijf universitaire associaties, waarvan er vier ook een infrastructuur hub zijn. Ten behoeve van de groeiende groep gebruikers zal het VSC 2.0 haar operationele taken duidelijker positioneren, waarbij het contact met de gebruikers en potentiële gebruikers verloopt via servicepunten die als een single point of contact fungeren, en waarbij voor de interne organisatie elke associatie de verantwoordelijkheid opneemt om een welbepaalde service VSC breed te organiseren. Organisaties buiten de brede groep van kennisinstellingen, zoals bedrijven en overheidsinstanties, richten zich tot een specifiek servicepunt.



→ Een Management Team voor de dagelijkse leiding

De bestaande governance met een HEC-raad, een Industriële Raad en een Gebruikersraad blijft behouden, alsook de situering van de HEC-raad binnen het FWO. Voor de dagelijkse leiding wordt een vierledig Management Team (MT) opgericht, met medewerkers die betrokken zijn bij de dagelijkse activiteiten. Concreet zal elke hub één medewerker afvaardigen naar het MT.



→ Naar een geïntegreerd, recurrent budget voor supercomputing in Vlaanderen

Om de ambities van het VSC waar te maken, het VSC als kernfaciliteit voor academisch onderzoek, het VSC als regionaal servicecentrum en het VSC als regionale hub naar Tier-0, is een recurrente financiering cruciaal. Recurrente financiering, in plaats van impulsfinanciering, voor de Tier-1 omgeving is noodzakelijk om het VSC 2.0 verder uit te bouwen en hiervoor voorziet het VSC 2.0 Toekomstplan in een extra recurrent budget voor Tier-1 van 6.400.000 euro per jaar.

Na de oplevering van het VSC 2.0-plan werkte de HEC-raad vervolgens in de tweede helft van 2022 aan het verder operationaliseren van dit plan. Intussen werd door de Vlaamse Regering naast de recurrente middelen een eenmalige investering voor VSC 2.0 van 19,2 miljoen voor de periode 2023 - 2025 vrijgemaakt. Deze financiering is echter geen recurrente financiering. Het FWO zal blijvend inzetten om de VSC-financiering recurrent te krijgen.

In het VSC 2.0-Toekomstplan is opgenomen dat ten behoeve van de groeiende groep gebruikers, het VSC haar operationele taken duidelijker zal positioneren, waarbij het contact met de (potentiële) gebruikers verloopt via servicepunten die als een single point of contact fungeren, en waarbij, voor de interne organisatie, elke associatie de verantwoordelijkheid opneemt om een welbepaalde service VSC-breed te organiseren. Een servicepunt zal een vraag van een gebruiker analyseren, en indien nodig, hulp inroepen van meer gespecialiseerde experts binnen het VSC om uiteindelijk een oplossing aan te bieden aan de gebruiker. Zo zal KU Leuven zich toeleggen op data storage en compute, UAntwerpen op het Europese Tier-0-luik, UGent op cloud computing en compute, UHasselt op marketing en communicatie en coördinatie van de trainingen, en de VUB het servicepunt voor gebruikers buiten de kennisinstellingen organiseren. Voor de dagelijkse leiding van het VSC wordt een Management Team (MT) opgericht.

Voor de uitwerking en verdeling van de VSC middelen vanaf 2023 werd een globaal plan, incl. de twee begrotingslijnen opgesteld:

- Het recurrent VSC 1.0 budget. Bij constant beleid is er per jaar voor het VSC een begrotingslijn van 6.501.000 euro beschikbaar.
- Het eenmalig VSC 2.0 budget. Voor het VSC 2.0 plan werd er tijdens de BA 2022 19,2 miljoen euro aan vastleggingskrediet vrijgemaakt met een jaarlijkse betaalkalender van 6,4 miljoen euro voor de periode 2023-2025.

“


Our dream of having access to all European digital cultural heritage for analysis by humanities researchers is becoming a reality with the help of

VSC

”

SALLY CHAMBERS

DARIAH-EU Secretaris-generaal,
Universiteit Gent.

Ontdek haar succesverhaal op pagina 82 

HET TIER-1 SUPERCOMPUTERPLATFORM

Het Tier-1 SaaS project dat werd opgestart in maart 2018, leverde in 2022 verscheidene resultaten en infrastructuur componenten op, in overeenstemming met het investeringsplan.

Activiteiten Tier-1 platform

De volgende acties werden in 2022 uitgevoerd voor de verschillende componenten van de Tier-1 SaaS:

- de start van de productiefase van Hortense,
- de bestelling van de fase 2 uitbreiding voor Tier-1 Compute Hortense,
- de bestelling van een extra koelingcircuit t.b.v. fase 1 en fase 2 van Tier-1 Compute Hortense,
- uitvoering van de aankoopprocedure voor de Tier-1 Data storage backend voor de productie omgeving,
- installatie van de Tier-1 Data storage backend voor de productie omgeving in Leuven/Heverlee datacenters
- ontwikkeling van een nieuwe portal (ManGO portal) voor de Tier-1 Data component
- verbeterde documentatie en introductie van platform onafhankelijke API 'Terraform' in het Tier-1 Cloud platform,
- installatie van snellere storage hardware in het Tier-1 Cloud platform.

Verder werden ook een aantal taken uitgevoerd met betrekking tot de integratie van de verschillende Tier-1 SaaS-componenten:

- Introductie van 'resource application' webportal esapp.hpc.ugent.be voor Tier-1 Compute Hortense waar gebruikers verbruikte/beschikbare rekentijd per project kunnen consulteren,
- Upgrade van de VSC accountpage, met fixes en extra features, zoals de mogelijkheid om keyless accounts te gebruiken,
- Afsluiten Globus overeenkomst voor de verschillende instituten
- Opzetten Globus endpoints aan de verschillende instituten
- Afsluiten contract voor de verdere opbouw van het ISO 27001-traject

Tier-1 Compute

Voor de Tier-1 Compute-component werden in 2022 voor zowel de productie van Hortense als de beëindiging van BrENIAC volgende taken uitgevoerd:

Exploitatie Tier-1c (Hortense)

Op 15 maart 2022 werd de derde Tier-1 supercomputer van het VSC – “Hortense” – officieel in productie genomen. Aan de kickoff (via online meeting) namen 76 gebruikers deel. Tot die tijd draaiden verscheidene largescale testers en gebruikers van toegekende projecten in 2021 in ‘pilot’ modus.

In 2022 werden in totaal 61 projecten toegekend door de Tier-1 allocation board, in de cutoff calls van 7 februari, 7 juni en 3 oktober. 89 starting grants werden toegekend aan onderzoekers, ter voorbereiding van toekomstige full project proposals. Ook werd een collaborative grant toegekend aan het “Storage4Climate 2.0” project, voor een consortium van onderzoekers uit VUB, KU Leuven, UGent en KMI die samenwerken rond klimaatonderzoek.

Ook gedurende 2022 werden gradueel alle industrie klanten van BrENIAC overgezet naar Hortense. Tegelijk werd een bijkomend cohort aan nieuwe industrie klanten begeleid en verwelkomd op de nieuwe Tier-1 Compute infrastructuur. Middels verscheidene intake meetings konden deze bedrijven kennismaken met VSC en de Tier-1 Compute infrastructuur Hortense: AZDelta, Atlas Copco, 3E, SWave, Diabatix, Daikin Europe, ePotentia, DiamCAD, Antea Group, DEME, Vireca, EuroSense, Valcun, Ontoforce, Kytos.

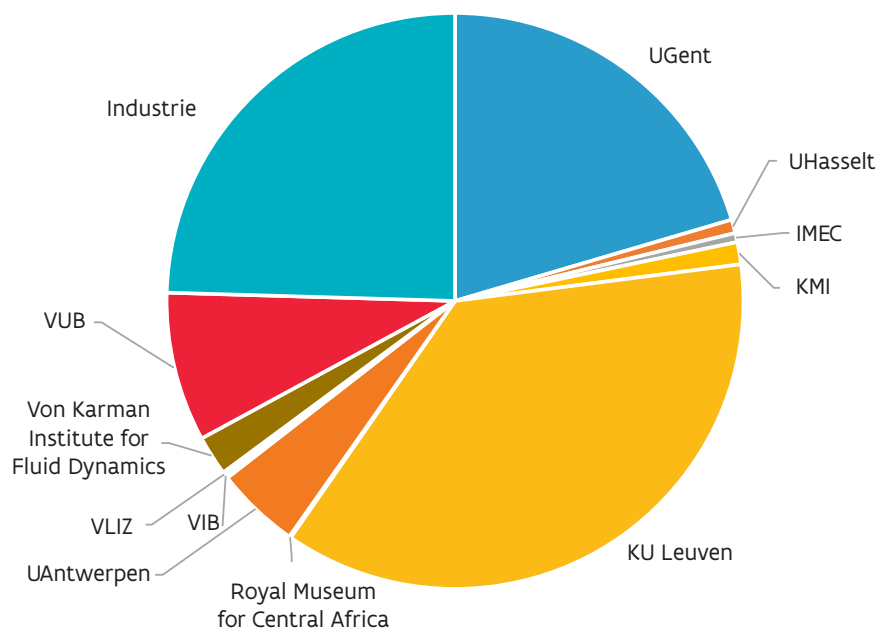
De lopende Tier-1 contracten met bedrijven werden aangepast om ook de nieuwe Tier-1 Hortense infrastructuur te vatten. Een apart MS Teams kanaal werd opgezet om deze administratie eenvoudiger te laten verlopen, alsook om de facturatie naar bedrijven toe af te handelen. UGent treedt hierbij vooralsnog op als administratieve coördinator voor facturatie, en zet zich in voor het uitsturen en innen van facturen aan inzake geleverde VSC Tier-1 diensten.

Hieronder een overzicht van het aantal projecten dat in 2022 liep op Tier-1 Hortense, opgedeeld per categorie en cut-off.

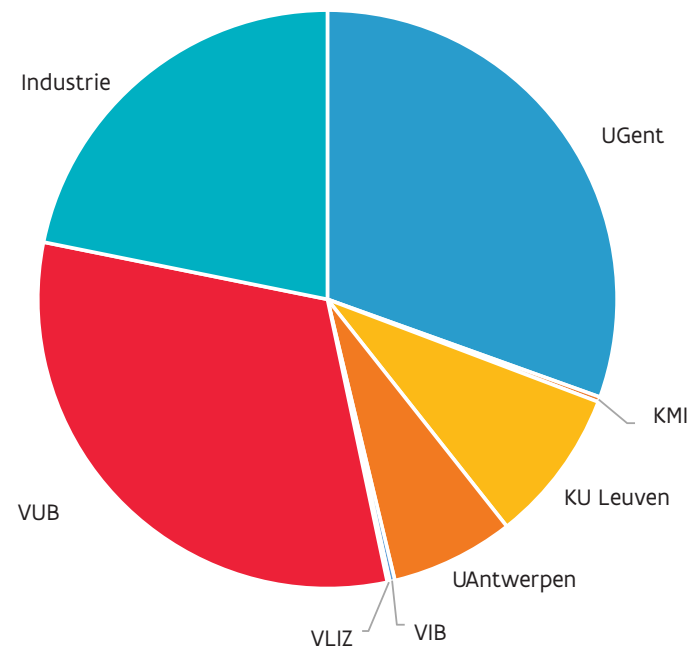
Categorie	# projects	Gealloceerde rekentijd	
		CPUhours	GPUhours
Large scale pilots	8	43.581.440	64.800
2021 projecten	22	63.407.510	64.984
2022-cutoff 1	16	61.389.085	166.844
2022-cutoff 2	25	99.545.144	69.900
2022-cutoff 3	20	67.916.270	140.968
2022 Collaborative grant	1	22.200.000	0
Starting grants	89	38.534.000	44.750
Industrie exploratory grants	15	13.988.854	112.301
Industrie contract projecten	16	114.976.000	40.800

▲ Tabel 3. Tier-1 Hortenseprojecten in 2022

Onderstaande grafieken maken inzichtelijk hoe de gealloceerde rekentijd (zowel CPU uren als GPU uren) verdeeld zijn over de verschillende onderzoeksinstellingen en industrie.

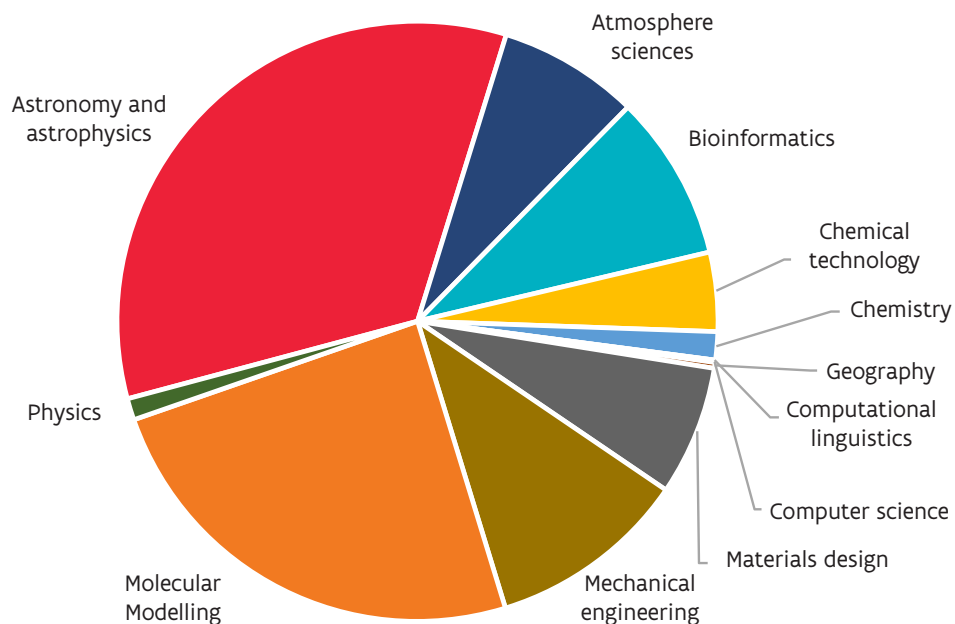


▲ Afbeelding 3. Gealloceerde Tier-1 Hortense rekentijd per instelling (CPU uren)

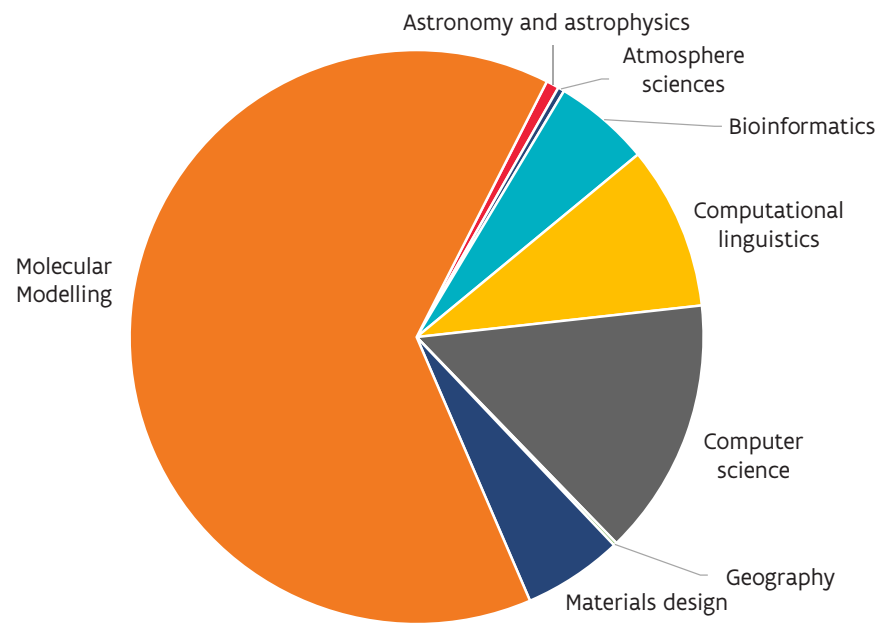


▲ Afbeelding 4. Gealloceerde Tier-1 Hortense rekentijd per instelling (GPU uren)

Het aantal wetenschapsdomeinen dat gebruik maakt van rekenkracht is steeds diverser, zoals blijkt uit onderstaande opsplitsing van de toegekende rekentijd op Tier-1 Hortense volgens domein. Naast eerder 'traditionele' domeinen, zoals astronomie en astrofysica, moleculaire modellering, computerwetenschappen en bioinformatica, is in 2022 nu ook computationele linguïstiek prominent vertegenwoordigd.



▲ Afbeelding 5. Gealloceerde Tier1 Hortense rekentijd (CPU uren) volgens wetenschappelijk domein



▲ Afbeelding 6. Gealloceerde Tier1 Hortense rekentijd (GPU uren) volgens wetenschappelijk domein

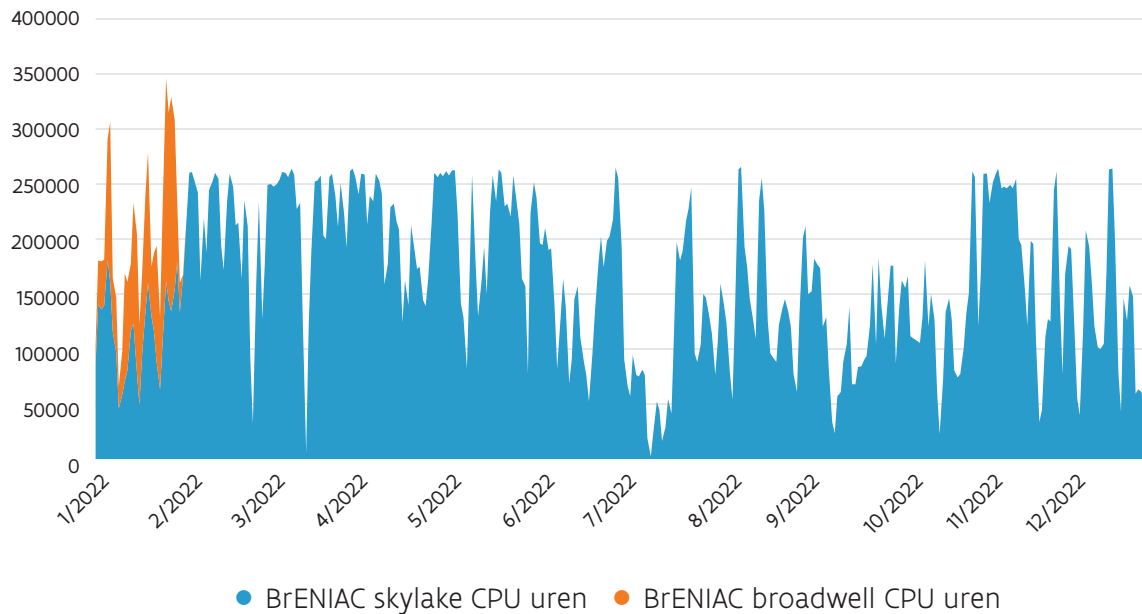
In de week van 24-28 oktober 2022 werd de Tier-1 Hortense service even onderbroken voor onderhoudswerken. De hardware van sommige rekennodes werd gerepareerd, systeem software werd up to date gebracht en initiële voorbereidende werkzaamheden werden uitgevoerd aan het datacenter, ter voorbereiding van de tweede fase van Tier-1 Hortense.

Deze tweede fase van Tier-1 Hortense werd in de loop van 2022 besteld, om de capaciteit van de Tier-1 Compute capaciteit van het VSC op peil te houden. Met deze bestelling zal Tier-1 Hortense nagenoeg verdubbelen in capaciteit en rekenkracht. Tevens werd een extra koelingscircuit besteld voor het datacenter dat Hortense huisvest. Dit zal zorgen voor meer energie-efficiëntie van beide fases van Tier-1 Hortense. Productie van fase 2 en het extra koelingscircuit is verwacht voor de eerste helft van 2023.

Exploitatie Tier-1b (BrENIAC)

Nu Hortense de fakkel heeft overgenomen, luidde 2022 het definitieve afscheid van BrENIAC in. Na bijna 6 jaar werking werd de Broadwell partitie afgesloten vanaf 1 februari 2022. Een onderhoudsperiode was nodig op 24/2 en 14/3 om de nodes af te koppelen. De Skylake partitie (geïnstalleerd in 2019) heeft nog het volledige jaar dienstgedaan. Een deel van de nodes zullen na uitbouw verhuizen naar de verschillende VSC sites om verder dienst doen binnen Tier-1 cloud, als interne test cluster of als setup voor interactieve nodes.

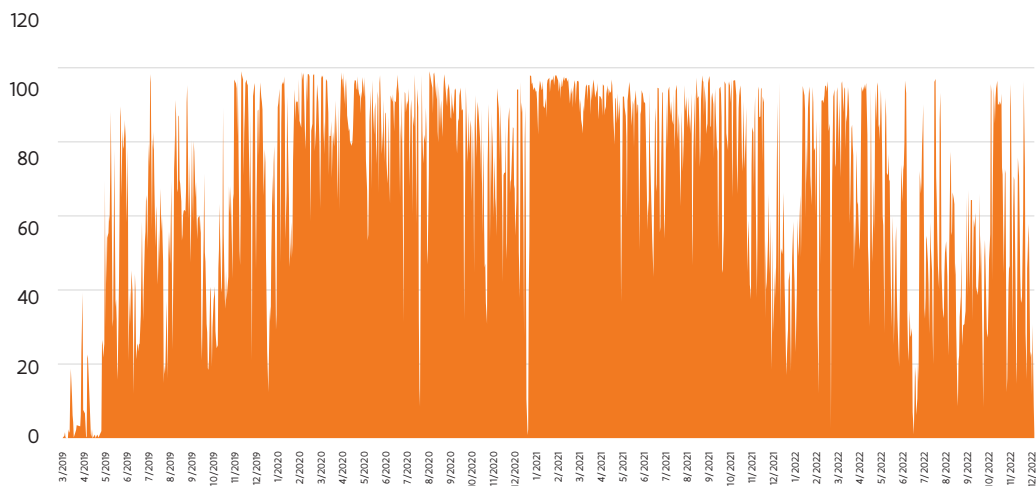
In de eerste twee cut-offs werden nog 9 projecten toegekend die uitgevoerd werden op BrENIAC. Vanaf de derde cutoff werden enkel projecten op Hortense toegekend. Het Climate collaboration project en industrie gebruikers hebben nog het ganse jaar kunnen werken op BrENIAC. Deze projecten zorgden nog voor een goede bezetting van de machine.



▲ Afbeelding 7. BrENIAC bezetting 2022

Kijken we enkel naar de Skylake partitie, dan is duidelijk dat deze vanaf het begin steeds goed in gebruik is geweest, zonder grote periodes van onbeschikbaarheid.

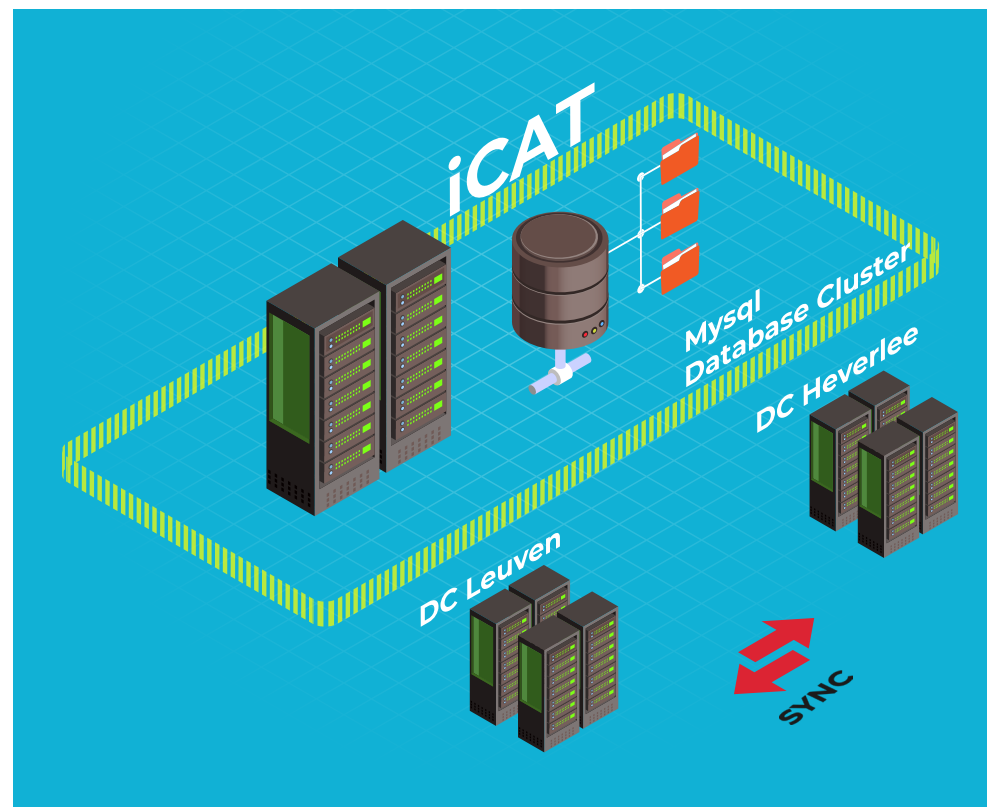
[BrENIAC skylake] Utilization (%)



▲ Afbeelding 8. Bezetting van de Skylake nodes sinds het begin van de installatie.

Tier-1 Data

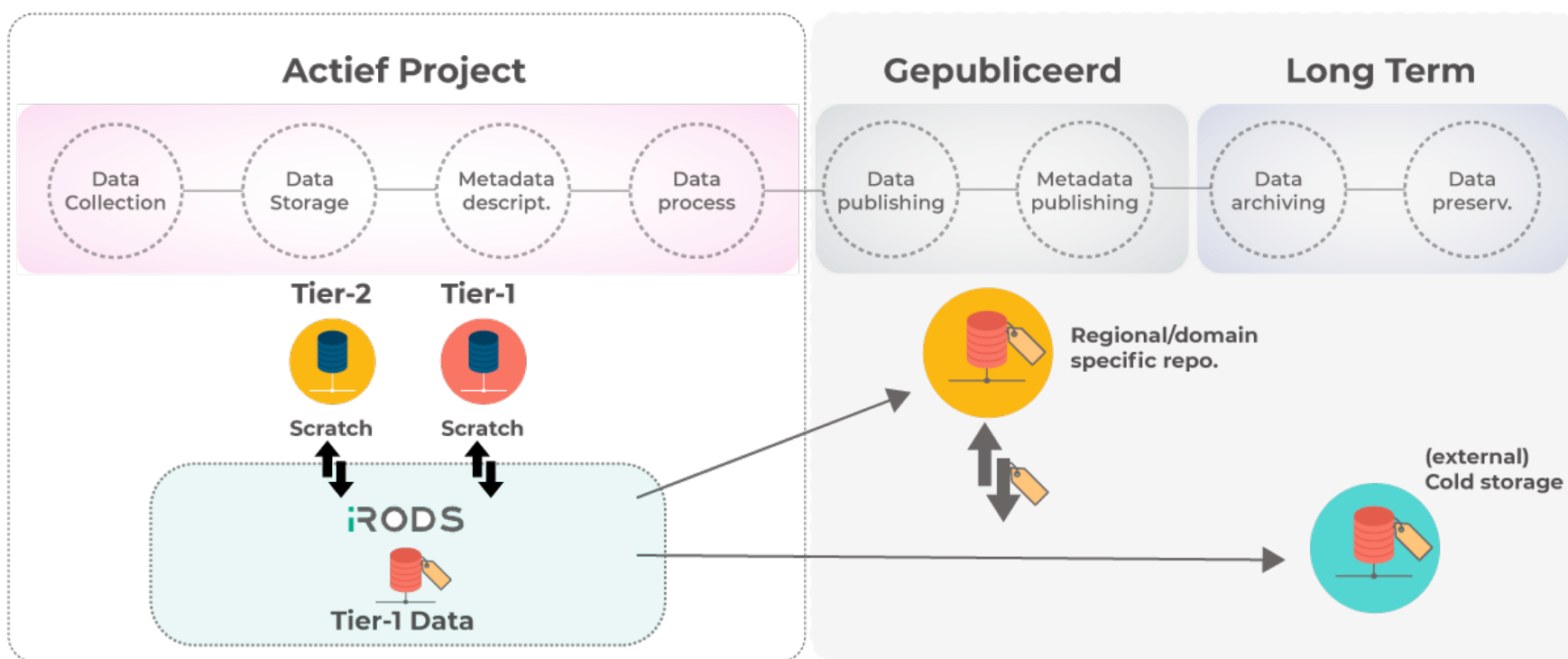
In 2022 werd de aanbestedingsprocedure voor de Tier-1 Data backend storage uitgevoerd. Lenovo kwam als winnaar uit de bus met een systeem met vier Distributed Storage Solution for Spectrum Scale (DSS-G280) met een bruikbare opslagcapaciteit van 27 PB (dubbele kopie) en 5 jaar support. Deze wordt geïnstalleerd in twee verschillende datacenters met een synchrone replicatie (mirroring), zodat de data beschermd is tegen grote ongelukken. Het systeem is schaalbaar (beide scale-up en scale-out) en implementeert een declustered RAID 8+3 erasure code om het systeem te beschermen tegen disk, node en block uitval. Bovendien kan het systeem gebruikmaken van snapshots op filesystem niveau voor extra databescherming en data wordt geëncrypteerd at rest via software encryptie. Het nieuwe storage is ook multiprotocol. Het is native Spectrum Scale (GPFS) en kan ook via een gateway als NFS, S3, SMB, CIFS en HDFS geëxporteerd worden.



▲ Afbeelding 9. Overzicht Tier-1 Data infrastructuur. ▲

▲ Afbeelding 10. Eerste levering van Tier-1 data componenten. ▲

In 2022 werden ook al de fundamenten gelegd voor een portal toepassing bovenop de storage om het beheren van metadata en het zoeken naar data via een eenvoudige interface aan te bieden. Dit zal een essentieel onderdeel zijn, want het opzetten van een goede metadatastructuur is waar de meerwaarde zal zitten voor toekomstig gebruik van data. Het platform is gepositioneerd voor actieve data die verwerkt worden op de VSC compute componenten. Publicatie en lange termijn bewaren gebeurt op andere platformen, maar de beschikbaarheid van de metadata zal de overgang naar deze fase wel kunnen faciliteren. Het is voorzien dat Tier-1 Data platform in april 2023 in productie zal gaan.



▲ Afbeelding 11. Tier-1 data in de levenscyclus van onderzoeksdata.

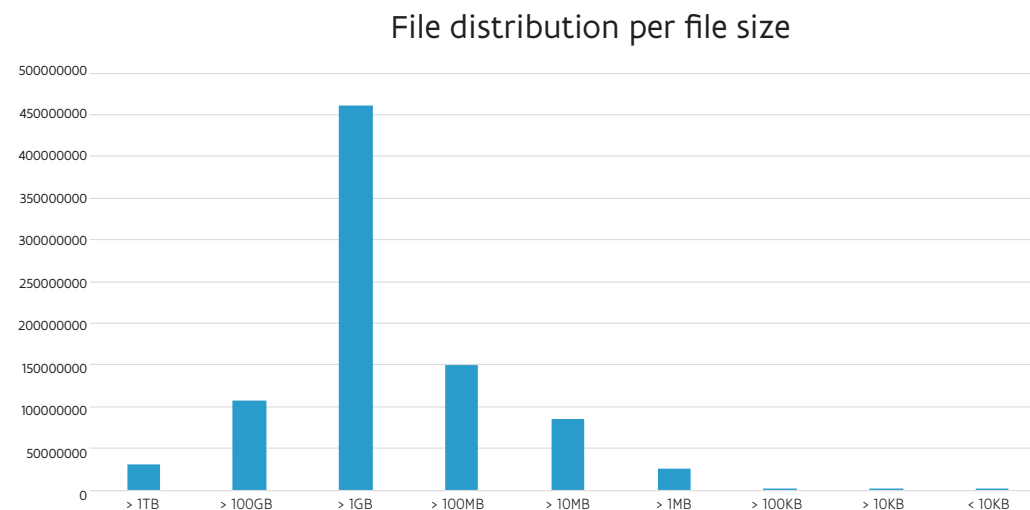
In 2022 werd het piloot gebruik verder ondersteund. In totaal hebben acht pilootprojecten het Tier-1 Data platform getest waarvan drie nieuwe:

- **Belgium Lifewatch-ERIC.** LifeWatch Belgium is een van de zeven nationale knooppunten waaruit LifeWatch ERIC bestaat, het e-Science European Infrastructure-consortium dat gegevensbronnen, webservices en virtuele onderzoeksomgevingen (VRE) levert aan onderzoek naar biodiversiteit en ecosystemen.
- **PiDGiN.** Het doel van hun onderzoeksproject is het ontwikkelen van een hoogwaardige dataset van weefsel van patiënten met longkanker, zodat op basis hiervan machine learning algoritmen/AI kunnen worden ontwikkeld die op basis van beelden kunnen zoeken naar voorspellers van longkanker.
- **Eco-evolutionary genomics.** Deze groep bestudeert de moleculaire en genetische mechanismen achter de capaciteit van enkele soorten organismes die zich binnen enkele generaties opmerkelijk snel aanpassen met complexe genetische en fenotypische veranderingen. De studie van deze voorbeelden van 'hoge evolueerbaarheid' zou kunnen helpen om de effecten van veranderingen in het milieu beter voorspellen.

De acht piloten gebruiken in totaal 820 TB (single copy) wat ongeveer 72 % is van de totale beschikbare capaciteit op de piloot infrastructuur.

Piloot	Storage (single kopie) (GB)	#Gebruikers
lt1_es2020	788361,8448	83
lt1_d_pilot_005	6324,237412	3
lt1_d_pilot_009	1525,479709	3
lt1_d_pilot_004	106,8334443	2
lt1_d_pilot_006	34,21357271	4
lt1_d_pilot_008	0,021932112	7
lt1_d_pilot_007	0,001933326	3

▲ Tabel 4. Pilootgebruik data platform in 2022



▲ Afbeelding 12. Tier-1 Data, file distribution per file size

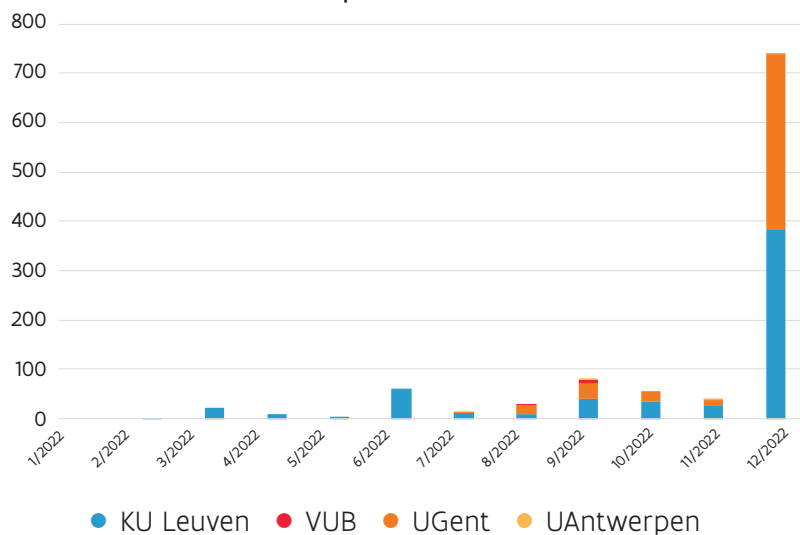
Globus online

Globus online (www.globus.org) is een softwareoplossing om gegevens te kunnen uitwisselen op een veilige, snelle en betrouwbare manier tussen verschillende opslagoplossingen. In 2022 werd Globus uitgerold naar de verschillende instellingen. Er zijn nu endpoints op alle Tier-2 clusters, op de Tier-1 clusters en ook naar Tier-1 Data via een connector. Dit vereenvoudigt transfers van en naar de clusters.

In totaal zijn 25 managed endpoints beschikbaar voor het VSC; 16 aan de KU Leuven, 2 aan UGent, 1 aan UAntwerpen, 3 aan VUB en 15 voor verschillende onderzoeksgroepen.

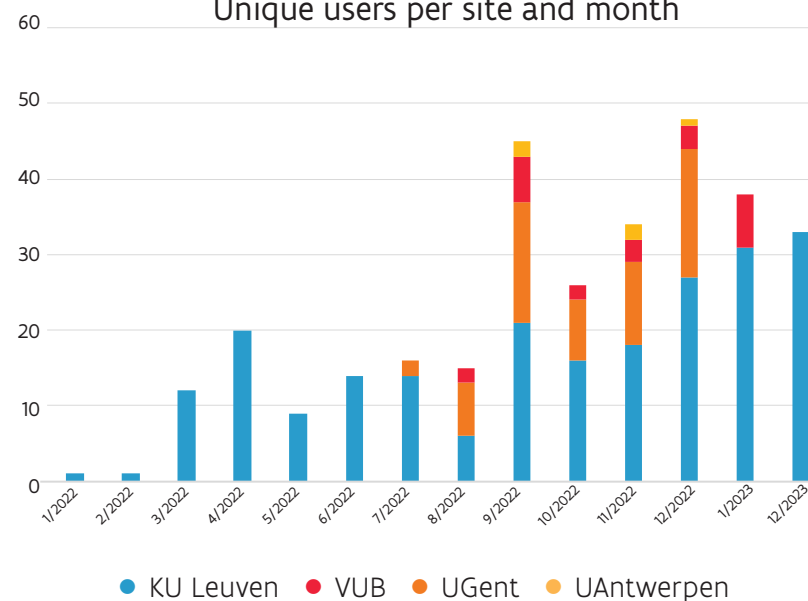
Met de stopzetting van BrENIAC werd Globus intensief gebruikt om data naar Hortense of naar andere Tier-2 systemen te transfereren. Tussen december 2022 en januari 2023 werden meer dan 300 data transfers taken gestart (242 naar Hortense en 78 naar Tier-2 systemen). Er werd in totaal 525 TB aan data en meer dan 21 miljoen files overgezet.

TB transferred (to/from) per site and per month



▲ Afbeelding 13. TB overgezet (van/naar) per site en per maand.

Unique users per site and month



▲ Afbeelding 14. Unieke gebruikers per site en per maand.

Support

Een belangrijke taak van het Tier-1 Data team in 2022 was ook de ondersteuning van de gebruikers. Het training materiaal en de documentatie werden herbekeken en aangepast waar nodig om de nieuwe functionaliteiten en het nieuwe portal te beschrijven.

Tier-1 Cloud

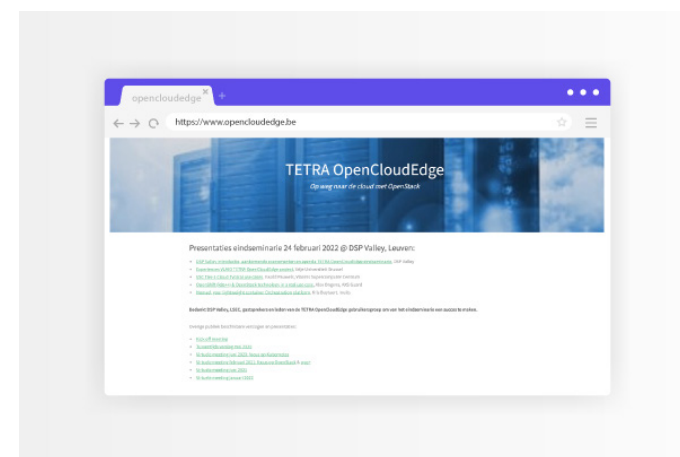
Onderzoekers die de VSC Tier-1 HPC services gebruiken, hebben ook vaak nood aan een flexibelere omgeving waarin ze kunnen gebruikmaken van software of services naast een grootschalig HPC-systeem, zoals op maat gemaakte softwarepakketten, interactieve data-analyses, workflow portals, data-visualisatie en specifieke pre- en postprocessing-taken.

De Tier-1 Cloud infrastructuur lenigt deze nood door een Cloud service gebaseerd op OpenStack te implementeren die 'on demand' resources aanbiedt in een meer flexibele en cloud-achtige manier. Dit is een Infrastructure-as-a-Service (IaaS) faciliteit die de capaciteit biedt om resources in te zetten, zoals virtual machines (VMs), storage en netwerken met volledige controle door de gebruikers van deze resources. Een catalogus van VM en orkestratie templates is beschikbaar, die het eenvoudig maakt om virtuele machines met verschillende 'flavours', een webserver, een basis cluster, etc. op te zetten met slechts een paar muisklikken.

In 2022 werd gewerkt aan het verbeteren van de documentatie voor de eindgebruiker (hpcugent.github.io/vsc_user_docs/pdf/intro-Cloud.pdf) en werd snellere storage hardware ingebouwd in het Tier-1 Cloud platform. Tevens werd de mogelijkheid geïntroduceerd om Terraform te gebruiken. Dit is een 'infrastructuur als code' tool waarmee cloud- en lokale resources kunnen worden gedefinieerd in voor mensen leesbare configuratiebestanden. Dit maakt het voor de eindgebruiker gebruiksvriendelijker om orkestratie van VMs te doen, met zelfs de mogelijkheid om ook eenvoudig Windows toepassingen te lopen.

Betere bekendmaking van het Tier-1 Cloud platform blijft een pertinent aandachtspunt. In 2022 werd met die reden o.m. deelgenomen aan het eindseminarie van het TETRA OpenCloudEdge project op 24/02/2022 (www.opencloudedge.be), met de presentatie "VSC Tier-1 Cloud: Typical use cases".

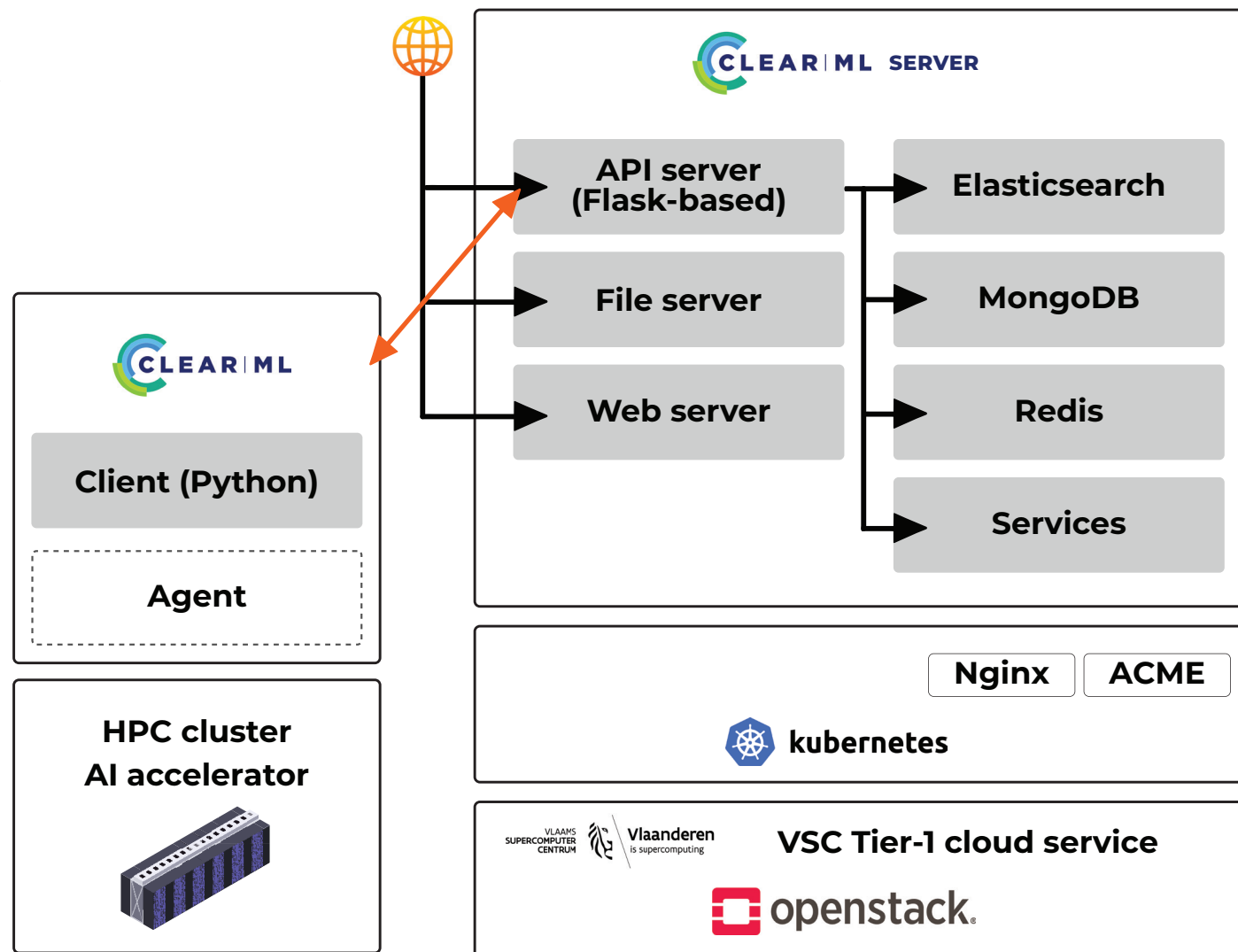
Om beter zicht te krijgen op het Cloud aanbod van commerciële spelers, was er op 8/12/2022 ook een verkennend gesprek met vertegenwoordigers van Microsoft Azure cloud services. Uit dat gesprek kwam naar voor dat het VSC Tier-1 Cloud platform een duidelijk complementaire waarde heeft voor academische en industriële gebruikers ten opzichte van commerciële services.



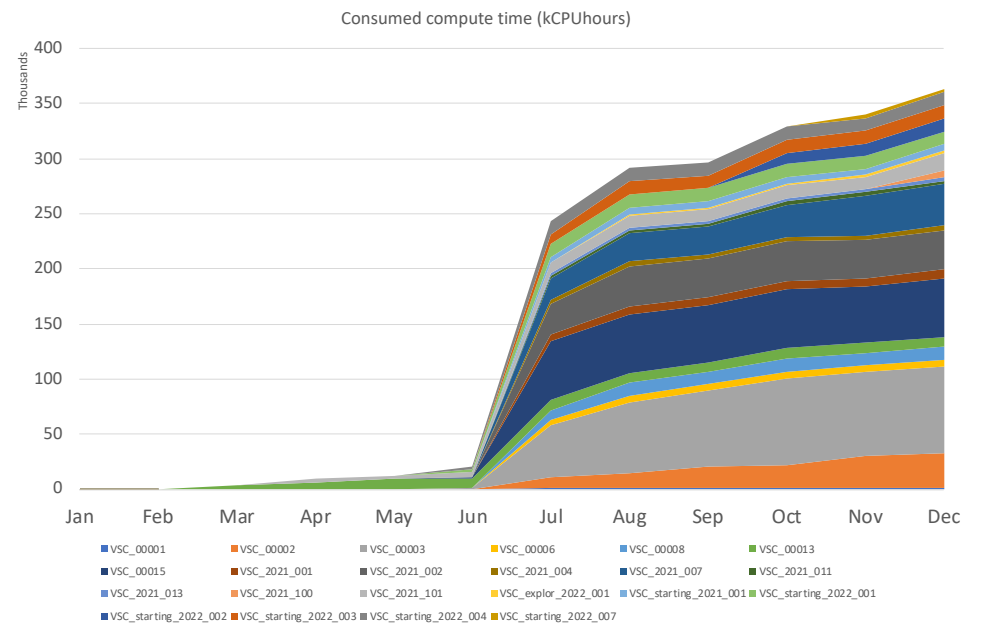
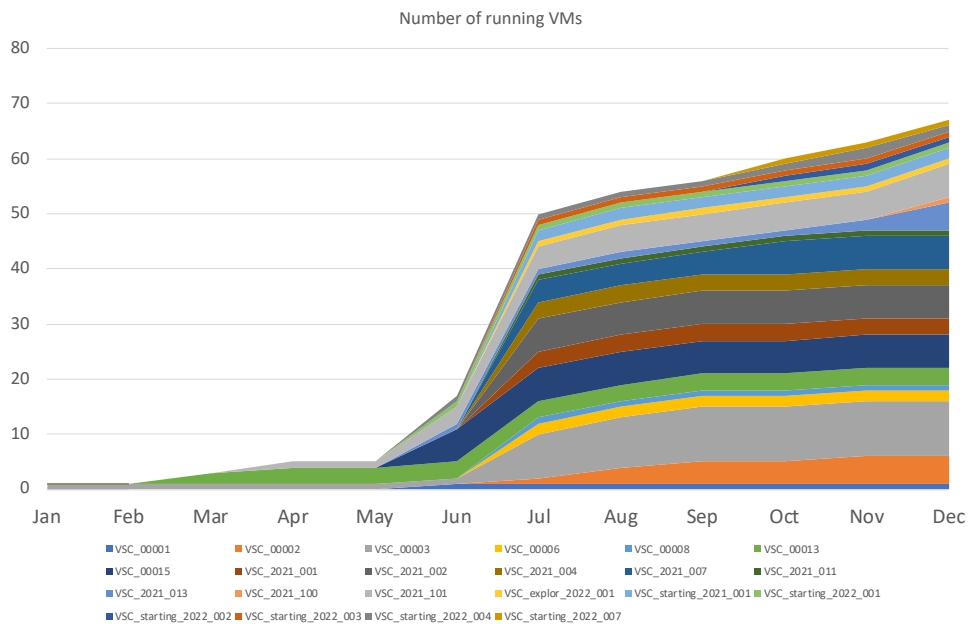
▲ Afbeelding 15. OpenCloudEdge website 

Ter illustratie van een Cloud workflow:

In project 2022-05 wordt een cloud stack opgezet op het Tier-1 Cloud platform om AI model training op HPC clusters te orchestreren en op te volgen. HPC clusters met GPU capaciteit worden daarbij geïmplementeerd.

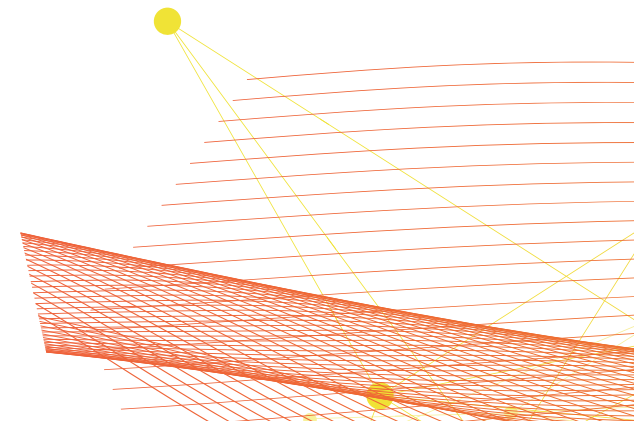


▲ Afbeelding 16. Voorbeeld van de workflow voor project 2022-05 op het Tier-1 Cloud platform.



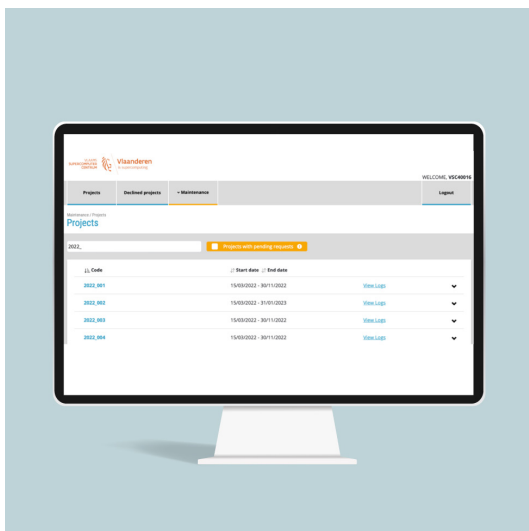
▲ Afbeelding 17. Gebruikstatistieken voor Tier-1 Cloud platform in 2022


De bulk van alle activiteit in 2022 situeert zich in de tweede jaarhelft, volgend op de succesvolle Tier-1 Cloud aanvraagronde met cutoff 7 juni 2022. 14 nieuwe projecten namen toen een aanvang, waarvan 8 starting grant projects, 5 full proposals en 1 free exploratory project vanuit industrie. In totaal werd in 2022 rekentijd ten belope van 1.912.552 CPU-uur verbruikt op het Tier-1 Cloud platform, verdeeld over bijna 70 verschillende virtuele machines.



Integratie

In 2022 werd ook een aantal aspecten rond integratie uitgewerkt. De aankoopprocedure om een consulting opdracht af te sluiten met het consultancybedrijf Deloitte werd afgerond. VSC doet samen met de consultants een benchmarking t.o.v. de ISO 27001 norm voor de Tier-1 compute service. Er wordt nagegaan waar VSC zich kan verbeteren en hoe procesmatig te organiseren om informatiebeveiliging structureel op te nemen in het beheer van het VSC. In een eerste fase werden WP 1 en WP 2 doorlopen die vooral gericht waren op het in kaart brengen van risico's. In WP 3 wordt gewerkt om een ISMS handboek te bekomen dat als een basis kan dienen voor implementatie.



▲ Afbeelding 18. Screenshot van de Resource application web portal 

Begin juni 2022 werd de 'Resource Application' resapp.hpc.ugent.be project portal voor Tier-1 Hortense in bedrijf genomen. Deze centrale web applicatie laat gebruikers eenvoudig toe om hun verbruikte/beschikbare rekentijd te consulteren en te beheren, voor elk project (incl. starting grants) waarin ze zijn betrokken op Tier-1 Hortense. Inloggen is heel eenvoudig, via een single sign on met de vsc-id, en de interface is verder heel gebruiksvriendelijk en intuïtief.

Ook in 2022 werd een uitgebreide upgrade doorgevoerd van de VSC accountpage account.vscentrum.be. Deze service centraliseert alle account- en groepenbeheer binnen het VSC en regelt toegang tot alle Tier-1 en Tier-2 infrastructuur. De front- en backend van deze service wordt onderhouden door UGent. Naast enkele bugfixes en security updates, werden bijkomende features geïntroduceerd, waaronder de mogelijkheid om ook zonder public/private ssh-keypair te authenticeren met de VSC accountpage. Dit waarborgt een verbeterde gebruikerservaring voor de gebruikers die uitsluitend middels webportals interfacen met VSC infrastructuur.

Verder werd nog samengewerkt aan andere projecten over de hubs heen, die in volgende sectie beschreven worden.

VSC projecten

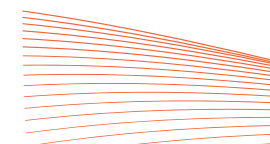
Om de samenwerking binnen het VSC te vergroten en meer gebruik te maken van de specifieke kennis en knowhow op elke VSC hub werd begin 2022 gestart met VSC brede projecten. In januari werd er binnen het operationeel team een open oproep gestart met de vraag naar onderwerpen. Er werden uiteindelijk 19 voorstellen opgesteld waarvan er 8 gekozen werden om op te starten. Deze 8 voorstellen werden geselecteerd op basis van volgende criteria:

- impact op de VSC gebruikers,
- aantal VSC hubs die interesse tonen,
- beschikbare tijd en mensen om het project uit te voeren.

Per project werd er een trekker aangewezen die voor de algemene opvolging moest zorgen. De voortgang werd elke maand binnen het operationeel team (OT) overleg besproken. In september werd een eerste evaluatie gehouden. Alle VSC hubs zijn enthousiast over de concrete samenwerking in het kader van deze projecten en er zal zeker een vervolg komen in 2023.

De uitgekozen projecten in 2022 zijn:

- Testsuite met ReFrame. Het doel was om een suite van performance benchmarks en conformiteit tests voor alle VSC clusters te bouwen met het ReFrame framework. Het resultaat is een groep tests om de Common User Environment te testen op de verschillende VSC clusters en daarnaast nog een aantal performance tests voor zowel microbenchmarks als een aantal end-user pakketten (NumPy, ...). Naar de toekomst willen we hier nog werk maken van het centraal verzamelen en analyseren van alle resultaten.
- VSC Accountpage verbeteren. De accountpage is een kritieke component geworden om de VSC infrastructuur te benaderen en te gebruiken. In dit project werd o.a. gewerkt aan een high available versie van de accountpage (over beide datacenters van de UGent). Daarnaast zijn er talloze kleine en grote verbeteringen aangebracht zoals het automatisch kunnen aanmaken van VSC accounts of een account zonder ssh sleutel.
- XDMoD. XDMoD is een tool om het gebruik van resources op een HPC cluster bij te houden. Binnen het VSC gebruiken we deze tool al langer, maar een grondige herwerking was nodig. Er is nu een recente versie van XDMoD beschikbaar die VSC gebruikers ook toelaat om hun eigen gebruik van resources op de verschillende VSC clusters te raadplegen. Alle gebruiksgrafieken in dit verslag komen ook uit XDMoD.
- Centralisatie software installaties. Alle VSC hubs installeren allerlei wetenschappelijke software voor hun gebruikers met behulp van EasyBuild. Met dit project was het de bedoeling om dit op een meer homogene en gestructureerde wijze te doen over alle VSC clusters. Er zijn afspraken gemaakt binnen het VSC over de aanpak en er zijn maandelijkse vergaderingen om verder af te stemmen. Er wordt ook gewerkt aan een centraal formulier waarbij gebruikers software installaties kunnen aanvragen voor alle VSC clusters.
- Migratie weg van CentOS 7 en Python 2. Dit is een vrij technisch project. Zowel CentOS 7 als Python 2 zijn einde levensduur. Alle software en tools binnen het VSC werden klaargemaakt om over te stappen op de volgende versies.



- Multifactor authentication. Het inloggen met een ssh sleutel op een VSC cluster is vandaag single factor. Om de algemene beveiliging te verbeteren willen we multifactor authenticatie gaan gebruiken bij het inloggen op een VSC cluster. Er werd een proof of concept gemaakt en al in productie gezet bij de VSC clusters van de KU Leuven. Dit gaat nu worden uitgebreid naar de rest van het VSC.
- Netwerk monitoring. De verschillende VSC clusters zijn onderling verbonden via een dedicated netwerk verbinding van Belnet. De performantie van deze verbinding werd niet gemeten noch gemonitord. In dit project hebben we de tool perfsonar opgezet die de bandbreedte en latency tussen alle VSC hubs meet.
- EESSI. Er is een initiatief gestart genaamd European Environment for Scientific Software Installations met als doel gemeenschappelijke software installaties te hebben tussen HPC clusters maar evengoed een laptop. In dit project hebben we geëvalueerd of we dit project kunnen gebruiken binnen het VSC. Op dit ogenblik is het project nog niet matuur genoeg, maar verschillende zaken zijn wel herbruikbaar voor het “Centralisatie software installaties” project.

TIER-2 INFRASTRUCTUUR

Beschikbare infrastructuur

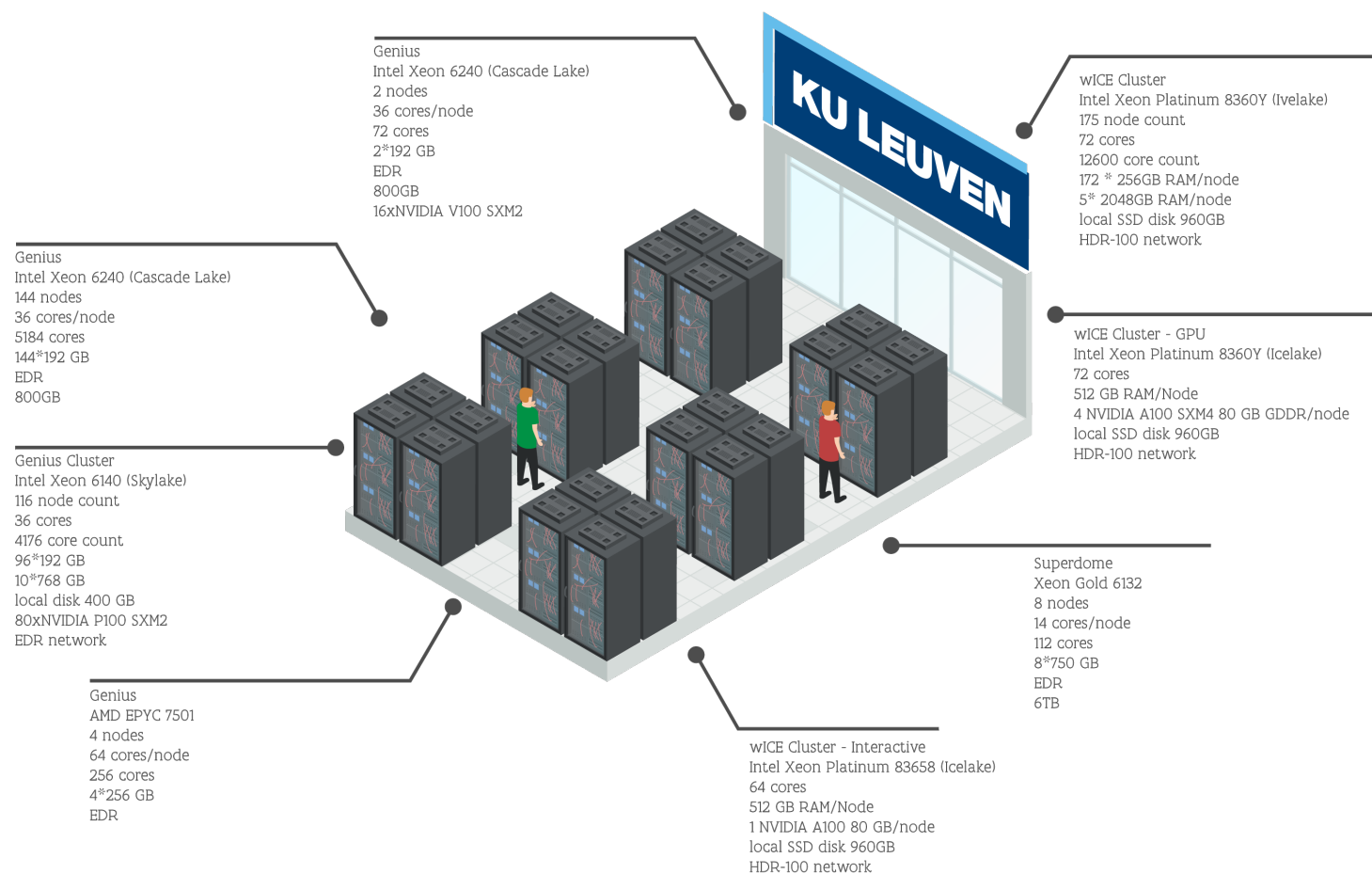
In deze sectie wordt een overzicht gegeven van de Tier-2 infrastructuur die binnen de verschillende Vlaamse universiteiten beschikbaar is. Het gebruik ervan wordt eveneens geïllustreerd.

► **KU Leuven en Universiteit Hasselt**

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

De infrastructuur bestaat uit:

- 2 clusters, 6 partities
- 1790 CPU TF, GPU 752 TF
- 23194 CPU cores
- 120 TB geheugen
- 117 GPU devices / 368.640 cuda cores



▲ Afbeelding 19 - Tier-2 infrastructuur KU Leuven – UHasselt

In mei 2022 werd gestart met de installatie van wICE, de nieuwe Tier-2 cluster, gebaseerd op de Intel Icelake generatie CPU's en geleverd door NEC. Eind juni werden voorlopige performance testen uitgevoerd. Door vertragingen in de levering van netwerk componenten en een aantal GPU nodes kon de machine nog niet volledig geaccepteerd worden. Er kon wel gestart worden met een aantal piloot gebruikers in een gesloten piloot. In september werd de definitieve bekabeling aangebracht en de bijkomende GPU nodes werden geleverd. De acceptance testen werden succesvol uitgevoerd zodat de machine opgeleverd was eind september. Vanaf 15 oktober werd de machine, na een inauguratie event, opengesteld voor alle gebruikers. Om de migratie naar het nieuwe systeem, met een nieuwe scheduler (Slurm), vlot te laten verlopen, werden verschillende informatiesessies georganiseerd om de onderzoekers te helpen met de transitie van PBS naar Slurm.

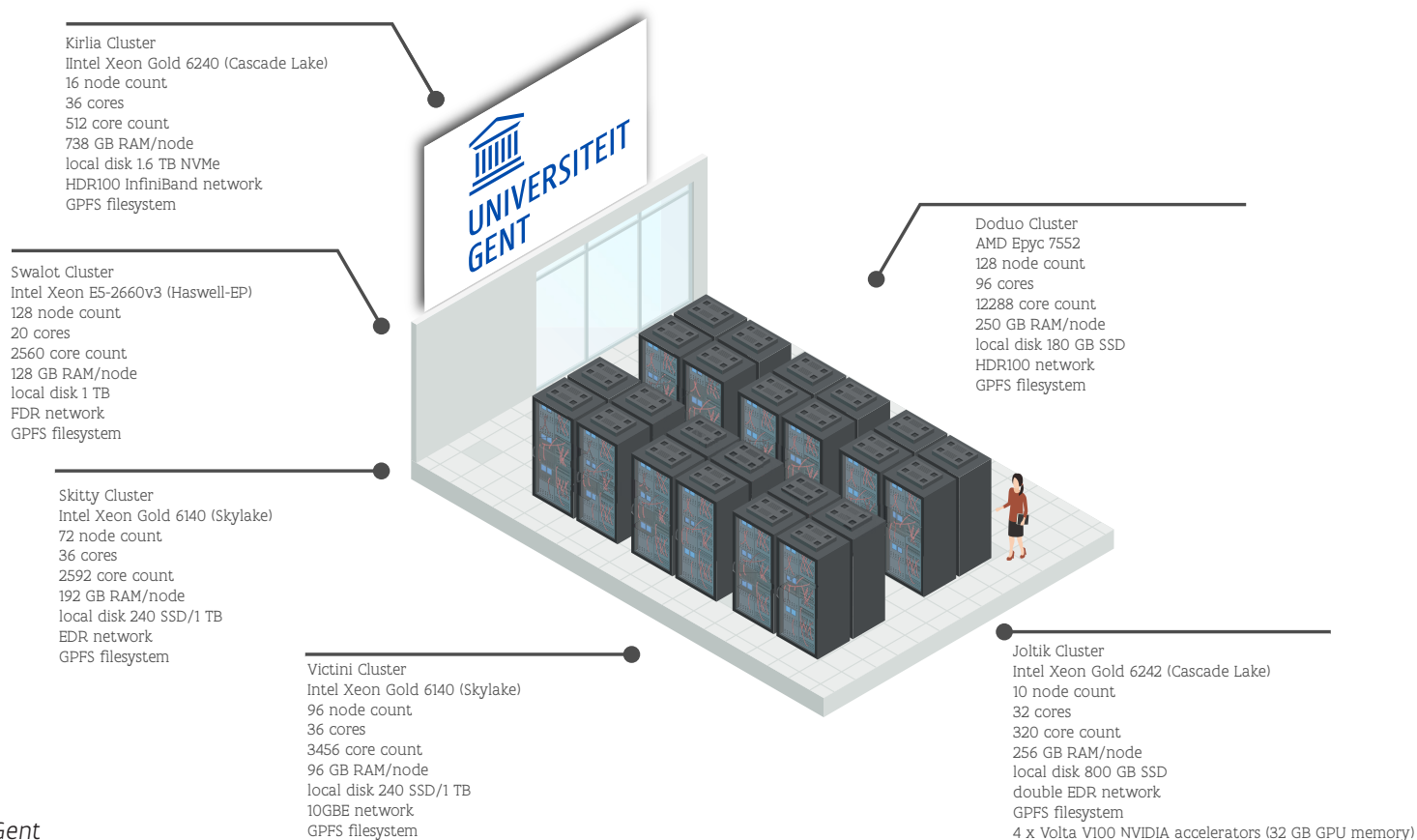
De nieuwe cluster bevat een aantal kenmerken om interactief gebruik te ondersteunen en om drempelverlagend te zijn voor nieuwe gebruikersgroepen. Open OnDemand is hierbij een belangrijk instrument. Het is een webinterface die ontwikkeld is door de Amerikaanse HPC community (geleid door Ohio Supercomputer Center). Via een webinterface kan de onderzoeker jobs op de cluster lanceren, maar kunnen er ook eenvoudig (interactieve) applicaties opgestart worden, zoals jupyter notebooks, R Studio, interactieve desktops op compute nodes ... De cluster bevat een aantal nodes specifiek voor interactief gebruik. Een onderzoeker kan hierop een beperkte set aan resources krijgen voor een tijd die één werkdag beslaat. Op deze manier is het voor veel gebruikers mogelijk om snel een interactieve sessie of applicatie op te starten.

In 2022 is aan KU Leuven ook Multifactor Authenticatie uitgerold voor toegang naar de clusters. De gebruiker moet hierdoor niet enkel in het bezit zijn van een private ssh-key, maar ook toegang hebben tot de instituutsaccount. Aan KU Leuven is deze gebaseerd op wachtwoord of bezit en toegang tot een GSM die de gebruiker eerder geregistreerd heeft. Met deze bijkomende factor wordt het beveiligingsniveau verhoogd.

► Universiteit Gent

De Tier-2 infrastructuur van UGent is opgebouwd uit verschillende clusters, elk met specifieke kenmerken:

- 8 clusters in productie
- 5 CPU clusters
- 2 GPU clusters
- 1 interactieve debug cluster
- In totaal 22.464 CPU cores, 76 GPU acceleratoren (NVIDIA)



▲ Afbeelding 20 - Tier-2 infrastructuur UGent

In de loop van 2022 werden volgende infrastructuur wijzigingen doorgevoerd:

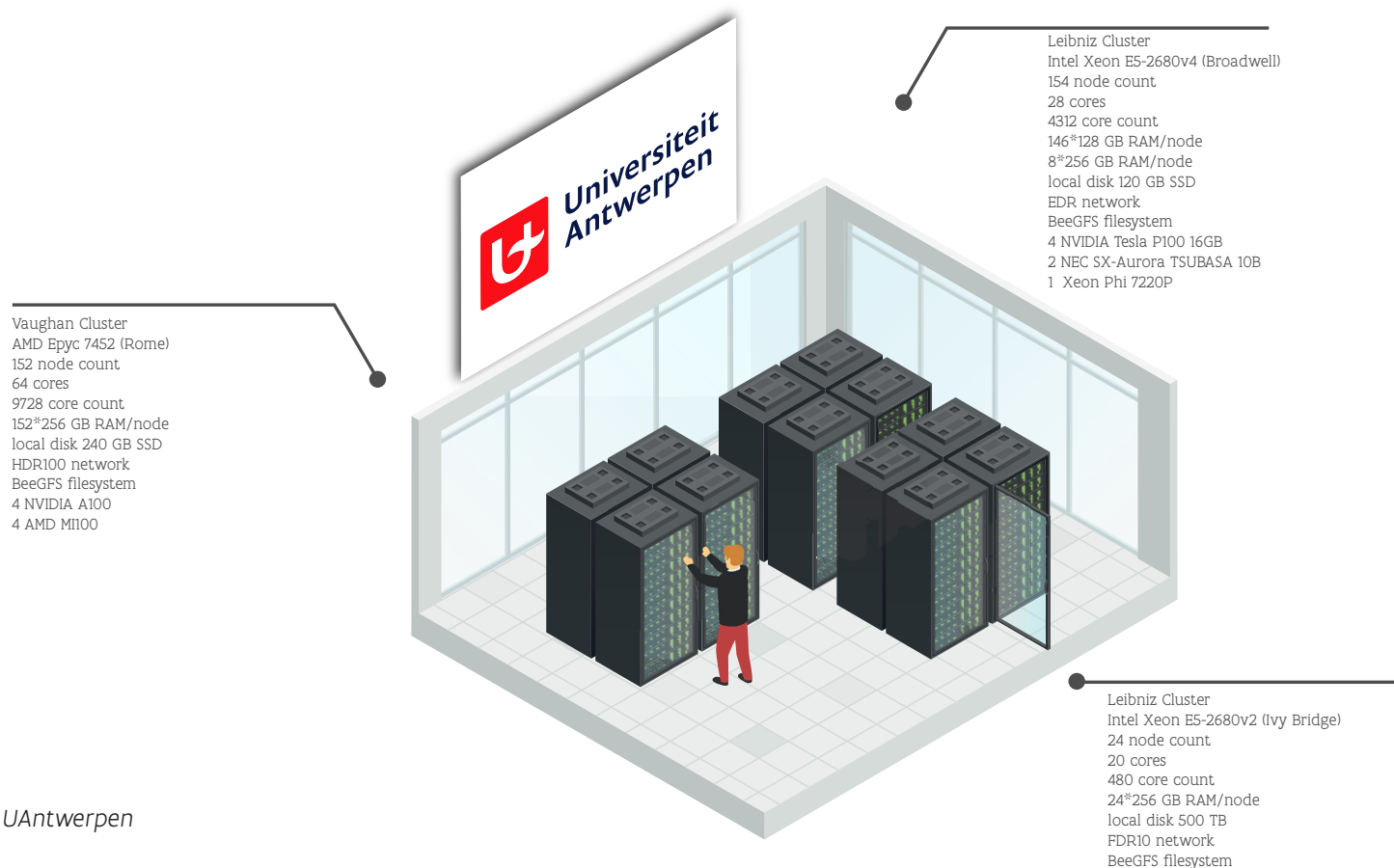
- De hardware van de HPC-UGent Tier-2 gedeelde bestandssystemen (HOME, DATA, SCRATCH) werd geüpdatet met de nieuwste generatie opslagservers voor een totale opslagruimte van meer dan 3,6 PB.
- Cluster accelgor werd in productie genomen. Dit is een GPU-cluster met 9 nodes met in totaal 432 AMD Milan CPU-cores en 36 NVIDIA A100 GPUs, elk met 80 GB GPU-geheugen.
- Interactieve debug cluster slaking werd in productie genomen. Deze cluster heeft een speciale configuratie: door strikte gebruikerslimieten op te leggen en de beschikbare resources (cores, geheugen, lokale schijf) te oversubscriben, krijgt de gebruiker vrijwel onmiddellijk toegang tot een bescheiden hoeveelheid resources, zonder te wachten tot jobs effectief beginnen lopen na een wachtrij. Dit komt tegemoet aan frequente verzoeken van gebruikers naar een snelle manier om interactieve sessies te starten, of om een snelle feedbackloop te hebben bij het testen/debuggen van jobscripts.
- Alle clusters en login nodes werden uniform gemigreerd naar Red Hat Enterprise Linux 8 (RHEL8). Hiermee kwamen alle clusters in lijn met de meest recente clusters die reeds RHEL8 draaiden, net als Tier-1 Compute cluster Hortense. Dit maakt het onderhoud van de HPC-UGent Tier-2 infrastructuur aanzienlijk eenvoudiger.
- Een nieuw Tier-2 Globus-endpoint (VSC UGent Tier-2 filesystems) werd geïntroduceerd, gebruikmakend van de nieuwste Globus-versie.

► Universiteit Antwerpen

In 2022 werd de bestaande Tier-2 infrastructuur niet gewijzigd. In het najaar werd wel een bestelling geplaatst om de Vaughan cluster en het storage systeem verder uit te breiden in 2023.

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

- 540 TF CPU, 106 TF GPU
- 14.464 CPU cores
- 7 accelerator nodes (een node met Xeon Phi 7720P, een node met NEC SX-Aurora TSUBASA 10B, twee nodes met 2 Tesla P100, een node met 4 NVIDIA A100, twee nodes met 2 AMD MI100)
- 65 TB geheugen

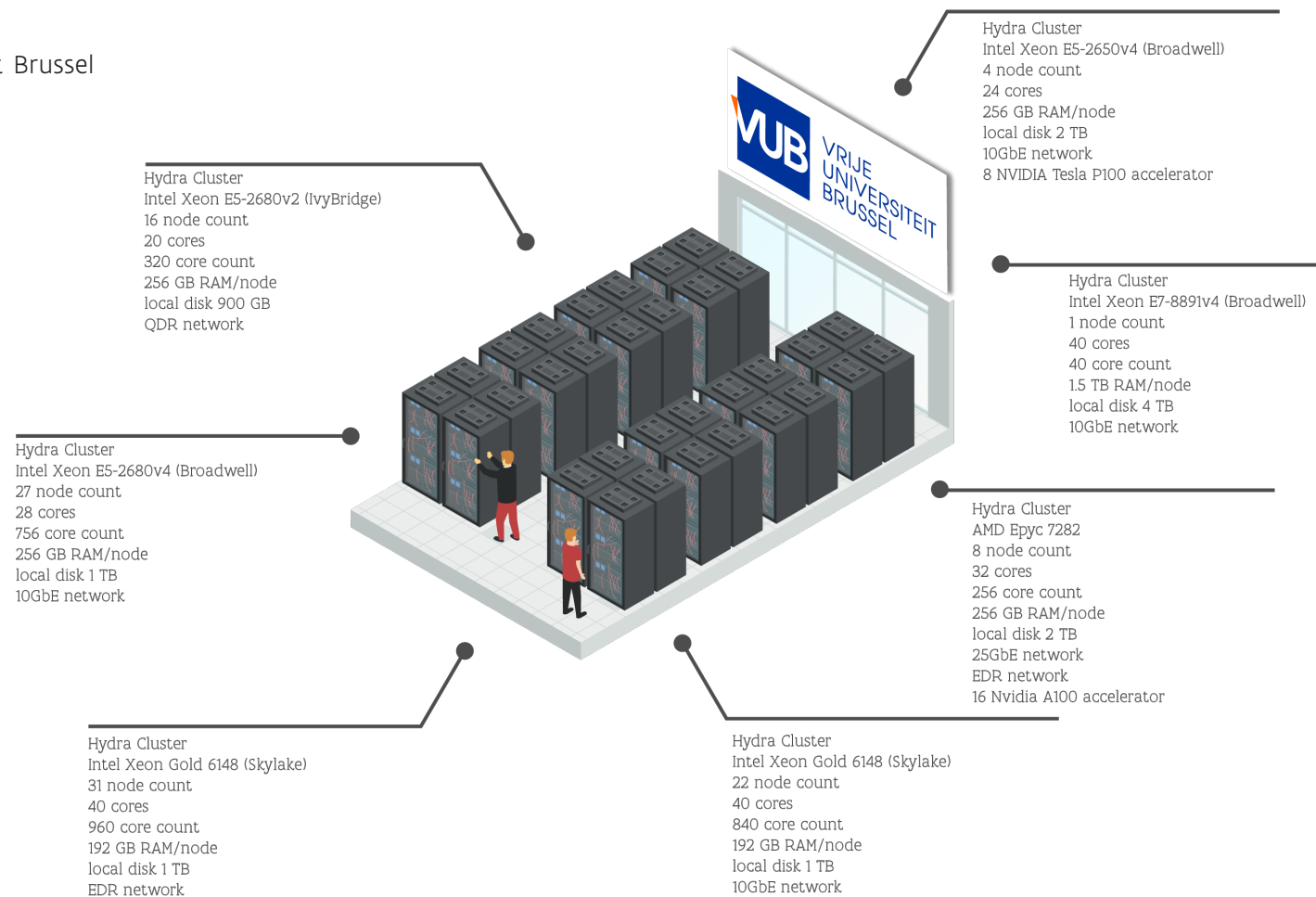


▲ Afbeelding 21 - Tier-2 infrastructuur UAntwerpen

► Vrije Universiteit Brussel

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

- 1 cluster / 7 partities
- 213 TF CPU, 197 TF GPU
- 3.464 CPU cores / 139.264 GPGPU cores
- 25 TB geheugen



▲ Afbeelding 22 - 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. In 2022 zijn volgende wijzigingen gebeurd aan de Hydra-omgeving:

- Er werden 2 extra GPU nodes toegevoegd met elk 2 Nvidia A100 GPU's aan boord.
- De oude Kepler GPU nodes zijn uit productie gehaald.
- De hele cluster is verhuisd naar het nieuwe datacenter.

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

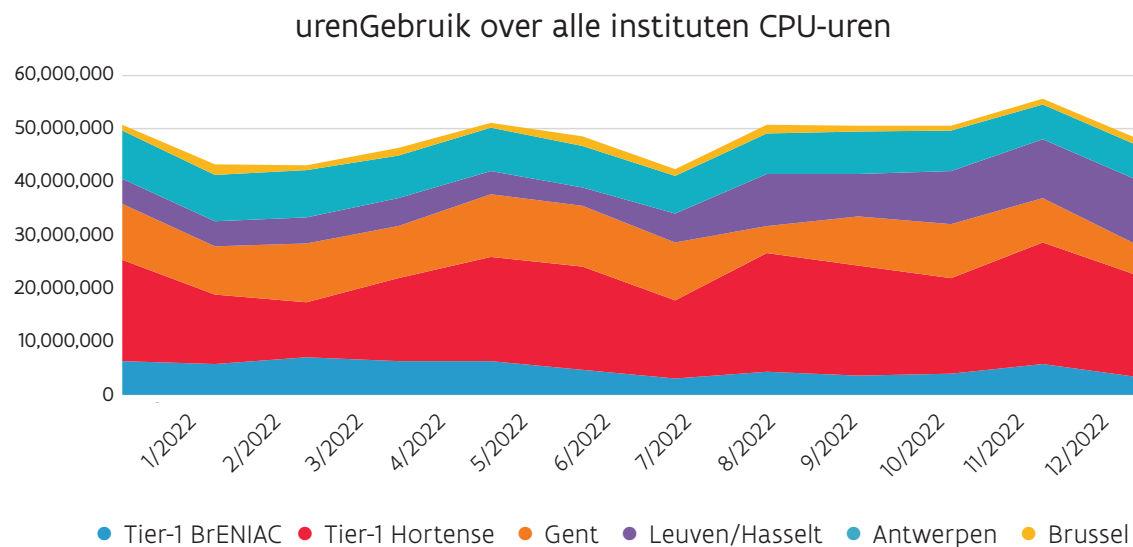
- 1 cluster
- 177 TF
- 5.800 CPU cores
- 48 TB geheugen

In 2022 werd er geen extra compute capaciteit toegevoegd aan de cluster, maar werd er wel 4 PB aan storage toegevoegd aan het dCache systeem.

Exploitatie en gebruik

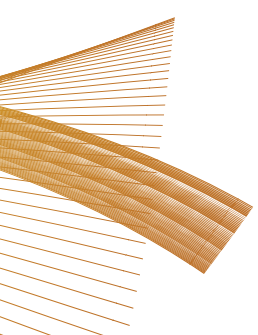
Na de beschrijving van de infrastructuur, geven wordt vervolgens een overzicht gegeven van het gebruik van de Tier-1 en de Tier-2.

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.

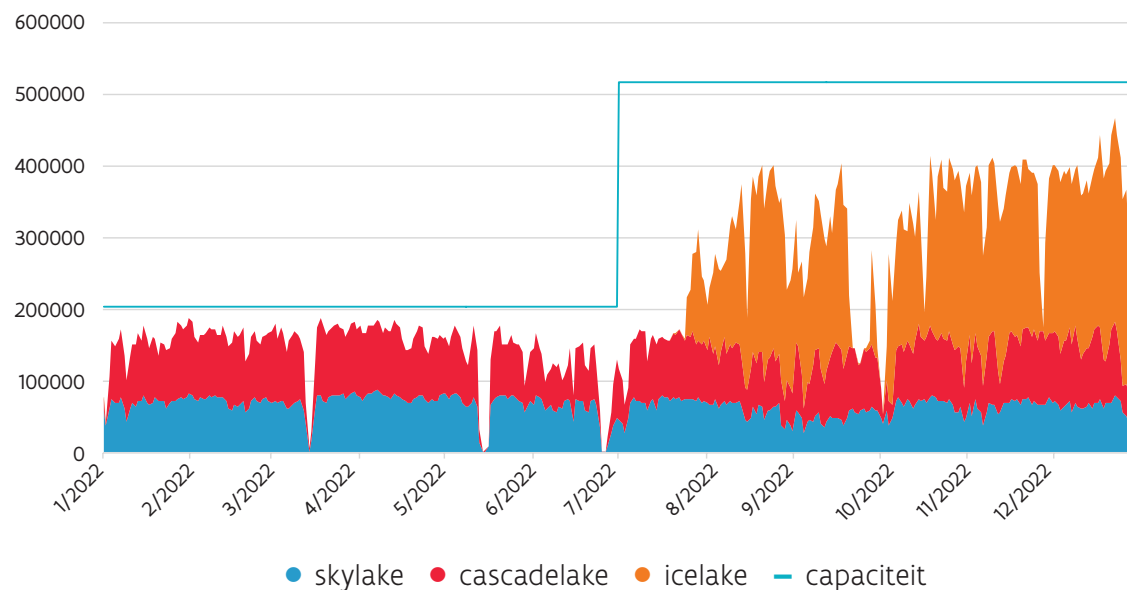


▲ Afbeelding 24 - Gebruik uitgedrukt in core-uren van alle VSC clusters.

Afbeelding 24 geeft het gecumuleerde gebruik weer van de Tier-1 en Tier-2 infrastructuur. Het totaal aantal core-uren blijft verder stijgen in 2022. De Tier-2 infrastructuur bij de verschillende instellingen werd vernieuwd en/of uitgebreid. De kaap van 50 miljoen core uren werd regelmatig overschreden. Deze cijfers bevatten enkel de thin node clusters en niet de GPU-computing of Grid-computing.

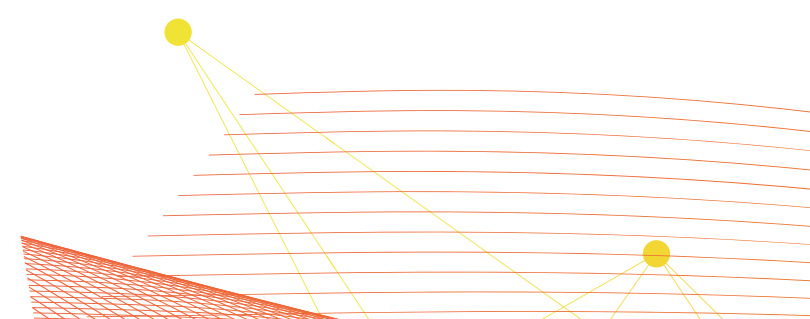


Gebruikte CPU-uren op clusters KU Leuven & UHasselt

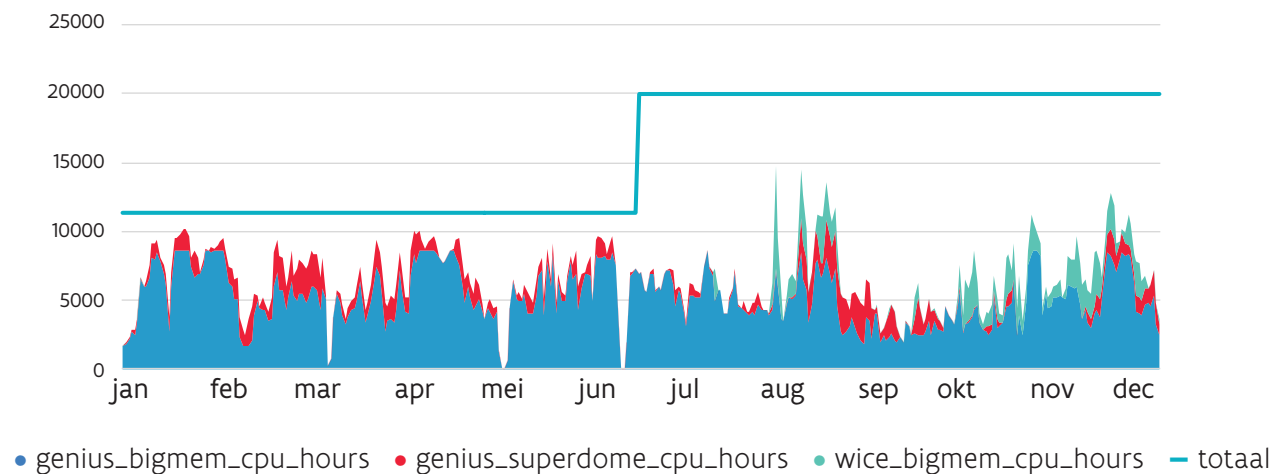


▲ Afbeelding 25 - Gebruikte core uren op de KU Leuven/UHasselt thin node cluster.

Afbeelding 25 - 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. In maart was er een downtime om netwerk voorbereidingen uit te voeren voor de komst van de nieuwe Tier-2 cluster. Eind mei was er een downtime die te wijten was aan problemen op het parallel filesysteem. Tijdens de downtime in juli werd een grote onderhoudsoperatie uitgevoerd om het probleem op te lossen. Vanaf juli is er een toename van gebruikte core-uren te zien. Dit is het operationeel worden van de nieuwe Tier-2 cluster wICE. Deze werd tot oktober in gesloten piloot fase gebruikt door een beperkt aantal gebruikers om de stabiliteit en performantie van het systeem te testen. In september was nog een downtime om een definitieve bekabeling uit te voeren. Vanaf half oktober was de machine in een open piloot fase en kon ze gebruikt worden door alle onderzoekers. Ongeveer 994 gebruikers, gespreid over vele onderzoeksdomeinen hebben in 2022 gerekend op deze thin node clusters.



Gebruik CPU-uren op big en shared memory nodes KU Leuven

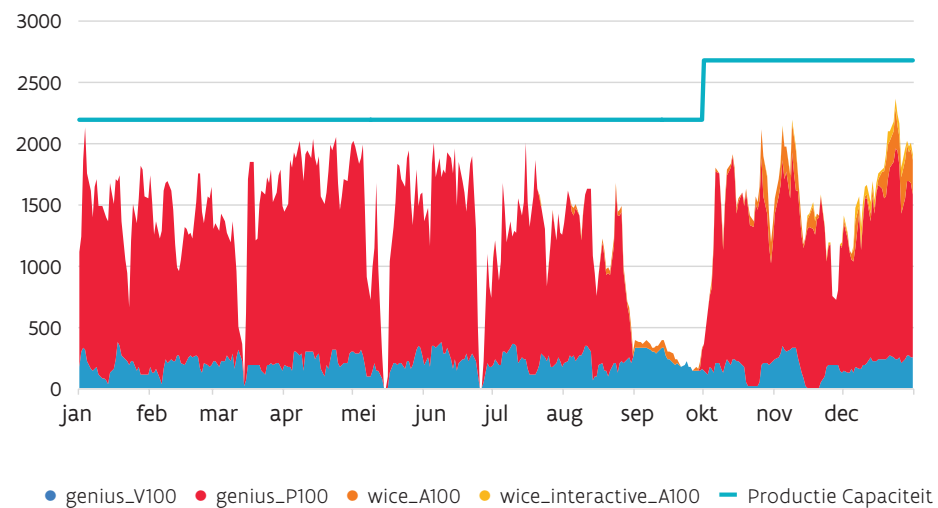


▲ Afbeelding 26 - Gebruik van shared memory.

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.

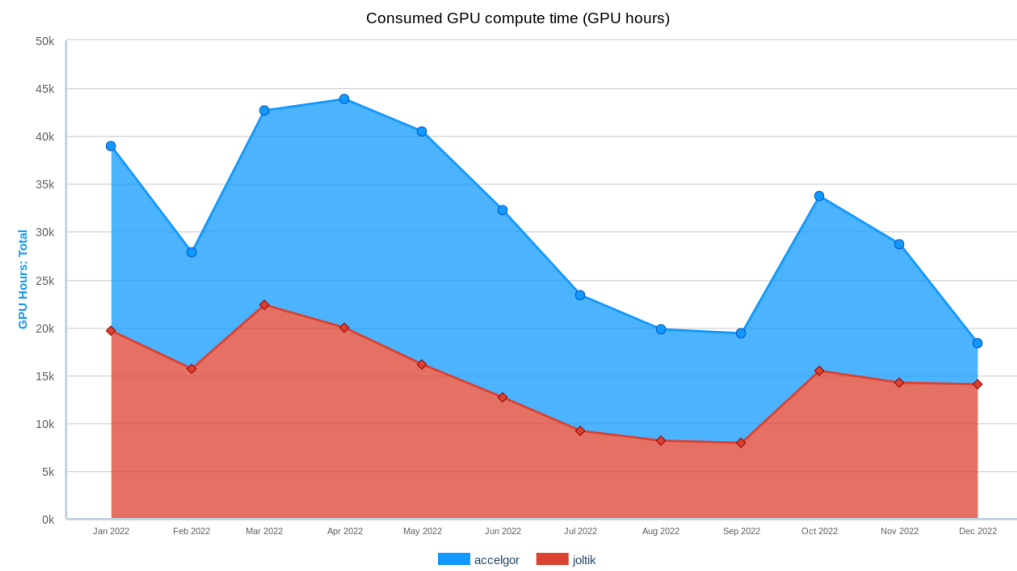
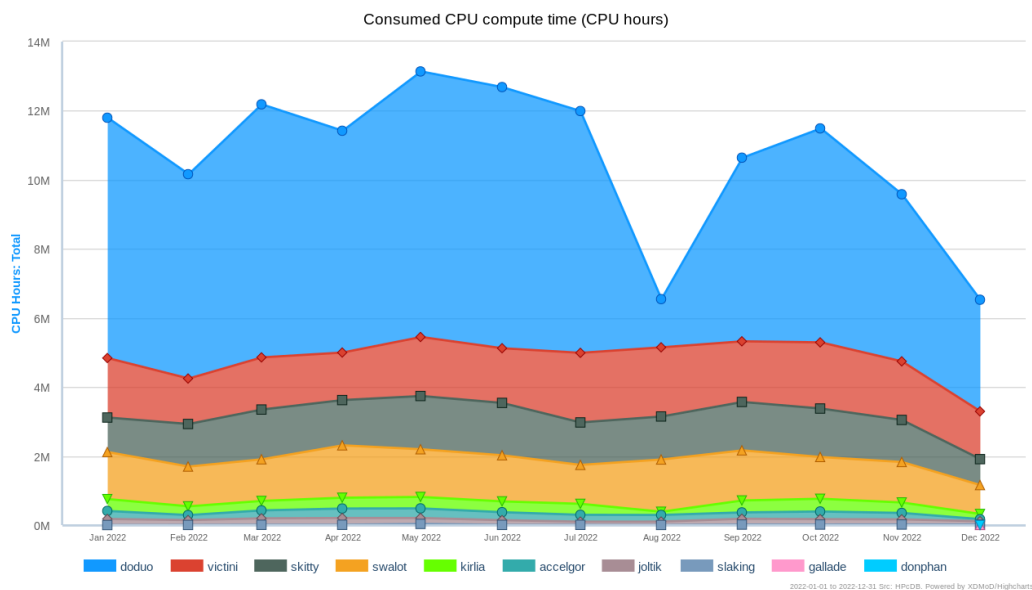
De big memory en shared memory nodes gebruiken een hogere memory/core ratio, soms worden niet alle cores in de node gebruikt, maar wel het volledige geheugen. Dus we verwachten hier geen 100% bezetting. De grafiek toont aan dat er een constante bezetting van de big memory nodes is. Voor de shared memory machine, Superdome, lijkt dit aandeel kleiner, maar met een beperkt aantal cores kan hier een veel grotere hoeveelheid RAM gebruikt worden. De workload die hierop loopt, kan typisch niet op andere machines. De large memory nodes van WICE werden ook in gebruik genomen, maar nog niet grootschalig gebruikt in de piloot fase.

Gebruikte GPU-uren op clusters KU Leuven



▲ Afbeelding 27 - Gebruik van GPU nodes.

Het gebruik van de GPU's wordt getoond voor de verschillende GPU devices. Het mag duidelijk zijn dat deze een essentieel onderdeel zijn van de HPC infrastructuur. De GPU's van WICE waren pas beschikbaar in oktober. Ze zijn sindsdien meer en meer in gebruik genomen. Deze GPU's van de Ampere (A100) generatie kunnen 4 maal zoveel rekenwerk uitvoeren als de P100. Door de grote hoeveelheid GPU RAM worden ook nieuwe analyses mogelijk, die voorheen niet mogelijk waren.

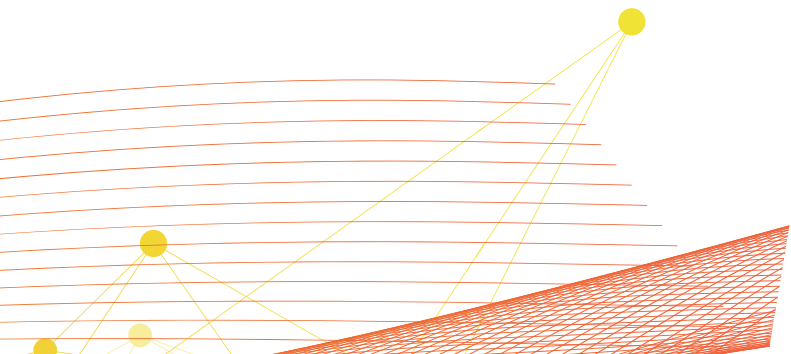


▲ Afbeelding 28 - Gebruik van de UGent infrastructuur.

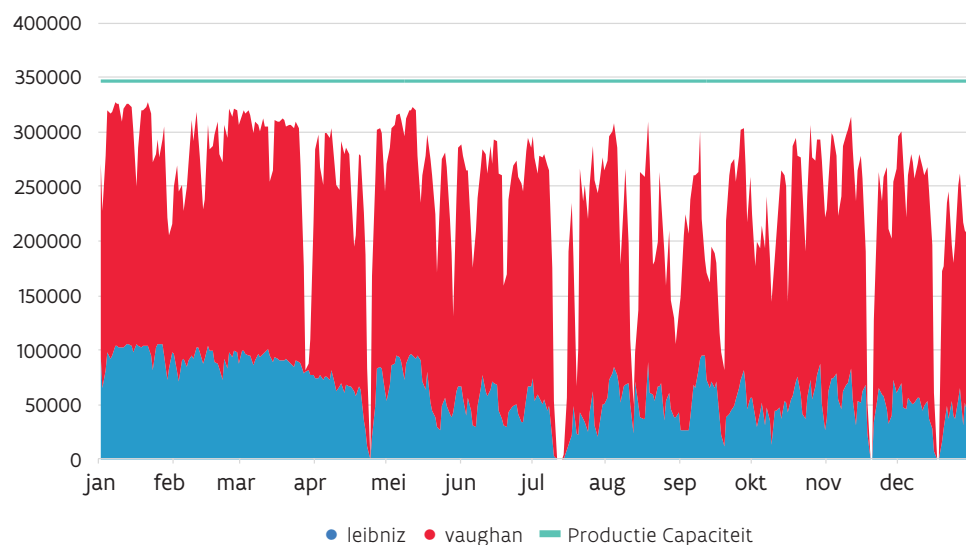
Afbeelding 28 geeft het cumulatieve gebruik in 2022 weer van alle rekenclusters aan de Universiteit Gent.

In 2022 werden in totaal 128.154.061 CPU core uren verbruikt op de Tier-2-rekenclusters van de Universiteit Gent. Dit zou overeenkomen met 14.629 jaar rekenwerk op één enkele core. Op de GPU clusters joltik en accelgor werd in totaal 369.379 aan GPU uren verbruikt.

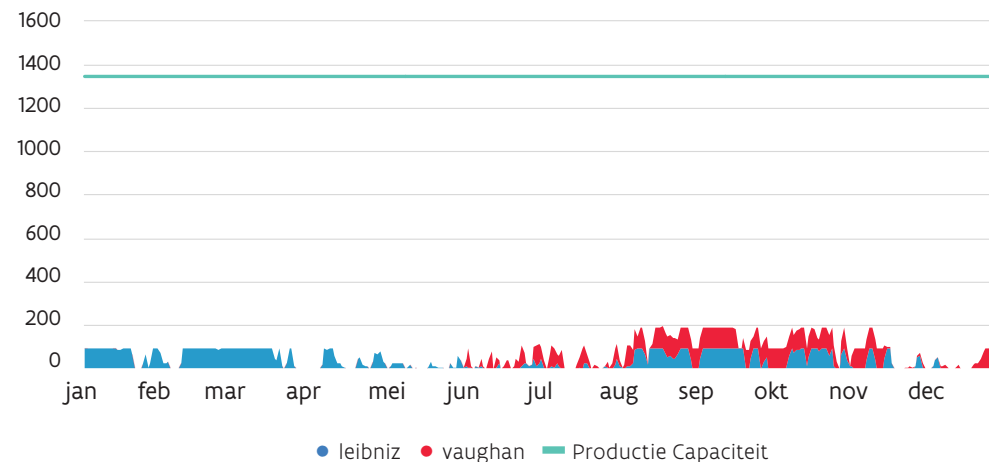
Het gemiddelde effectieve gebruikpercentage bedraagt 68% voor alle clusters met CPU capaciteit in 2022. Voor de GPU clusters in productie is het effectieve gebruikpercentage gemiddeld 61%. Deze percentages geven aan hoeveel van het theoretisch beschikbare rekenvermogen in één jaar werd gebruikt. Hierbij werd enkel rekening gehouden met de uitgebreide onderhoudsperiode van 28/11-14/12/2022 waarin alle machines onbeschikbaar waren. Andere mineure uitvaltijden werden niet in rekening gebracht, dus het werkelijke gemiddelde gebruikpercentage is hoger.



Gebruikte CPU-uren op clusters UAntwerpen



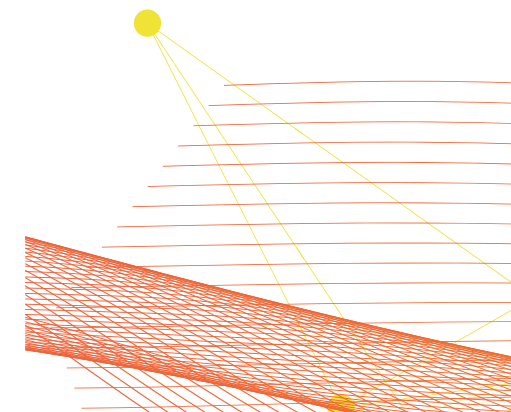
Gebruikte GPU-uren op clusters UAntwerpen



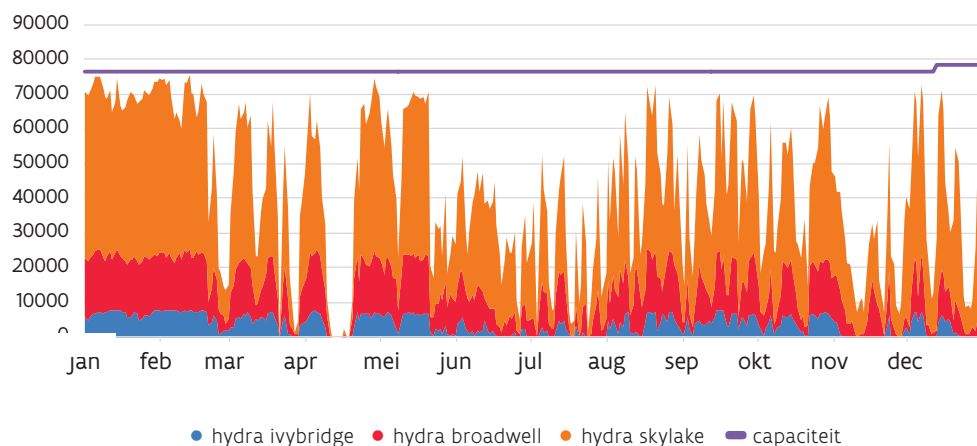
▲ Afbeelding 29 - Gebruik van de UAntwerpen infrastructuur.

De grafiek van Afbeelding 29 stelt het cumulatieve gebruik voor van de clusters Leibniz en Vaughan aan de Universiteit Antwerpen.

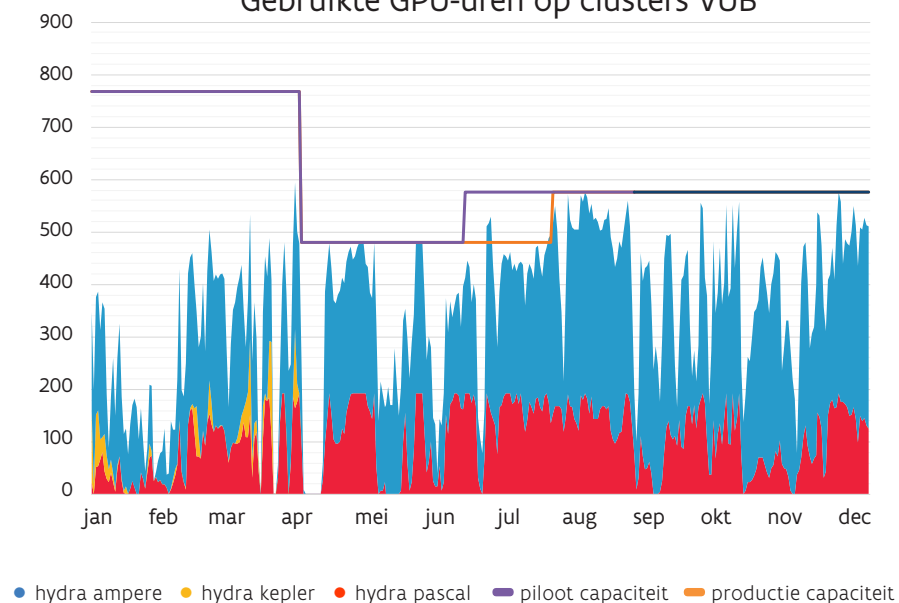
Om de overstap van PBS/Torque naar Slurm voor te bereiden op Leibniz, en om een OS upgrade op Vaughan door te voeren, is Vaughan eind maart even niet beschikbaar geweest. Door onvoorziene stroomonderbrekingen in de omgeving van de campus, waren de clusters tijdelijk niet beschikbaar eind april en half september. Door problemen met de koeling rond half juli en half augustus waren de clusters op dat moment tijdelijk niet beschikbaar. En door voorziene stroomonderbrekingen op campus half juli, half november en half december, hebben we de infrastructuur ook even moeten uitschakelen.



Gebruikte CPU-uren op clusters VUB



Gebruikte GPU-uren op clusters VUB

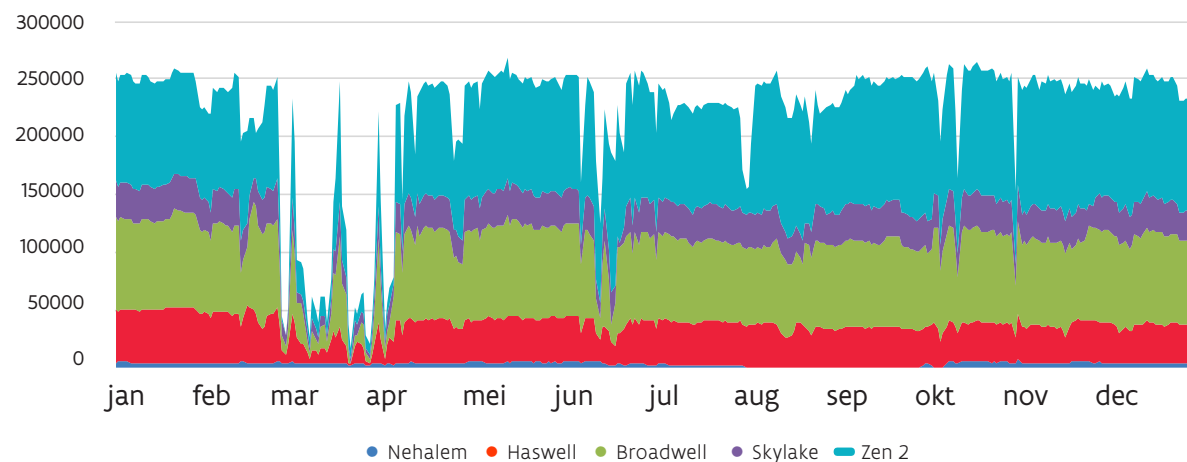


▲ Afbeelding 30 - Gebruik van de VUB infrastructuur.

Het gemiddelde gebruik lag in 2022 op 55% voor het CPU gedeelte en 60% voor het GPU gedeelte. Voor het CPU gedeelte zien we vanaf eind mei een verandering in gedrag. Er zijn periodes met heel veel korte jobs wat een erg volatiel gebruik geeft. Een aantal grote gebruikers zijn met succes naar de Tier 1 verhuisd wat dit deels kan verklaren. Het GPU gedeelte is een stuk populairder geworden tegenover 2021. We zien een vrij constant hoog gebruik.

Half april is de hele cluster verhuisd naar een nieuw datacenter wat een downtime van 5,5 dagen gaf. Daarnaast was er een algemene stroomonderbreking op 20 maart, verschillende netwerkincidenten (5 mei, 9 november en 18 november), een probleem met de storage op 10 augustus en een gepland onderhoud op 4 juli.

Gebruikte CPU-uren op grid cluster VUB



▲ Afbeelding 31 - Gebruik van BEgrid cluster aan de VUB

De BEgrid cluster is heterogeen: de cluster bestaat uit verschillende series van worker nodes met verschillende generaties van voornamelijk Intel CPUs. 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 76%.

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.

Tussen 22 februari en 6 juni was het netwerk niet stabiel: af en toe viel de verbinding weg wat een grote impact had op de storage en cluster. Daarnaast waren er nog problemen met het batch systeem op 2 februari, hardware problemen met een onderdeel van de storage op 12 april en certificaat problemen op 26 en 27 april.

Op 17 mei was er een gepland onderhoud van het storage systeem.

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 account.vscenrum.be. Deze website en database centraliseert tevens alle gebruikersinformatie over de instellingen heen over storage quota, lidmaatschap van gebruikersgroepen, virtuele organisaties, etc.

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

Instelling	Compute time in corehours			
	UAntwerpen	VUB	UGent	KU Leuven/UHasselt
@UAntwerpen		112	86.216	53.614
@VUB	490		81.413	831.536
@UGent	3.171.882	281.508	123.611.488	398.947
@KU Leuven / UHasselt	56	147.155	315.526	

▲ Tabel 5. Cross-site rekenen in core-uren

Instelling	Compute time in GPUhours			
	UAntwerpen	VUB	UGent	KU Leuven/UHasselt
@UAntwerpen		1		
@VUB	15		32	
@UGent	2563	8068	355.192	1654
@KU Leuven / UHasselt				

▲ Tabel 6. Cross-site rekenen in GPU-uren

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

Elke VSC Tier-2 hub beschikt over een eigen helpdesk, die nauw aansluit bij de gebruikservaring op de betrokken Tier-2 infrastructuur en daardoor dus snel kan inspelen op de gebruikersvragen. Onderstaande tabel geeft inzicht in het volume aan tickets per instelling, waar mogelijk opgesplitst in:

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

	UAntwerpen	VUB	UGent	KU Leuven/UHasselt
Helpdesk tickets Tier-2 + grid, per instelling				
Accounts	116	102	123	2020
Software	198	120	136	413
Overig	105	654	1112	532

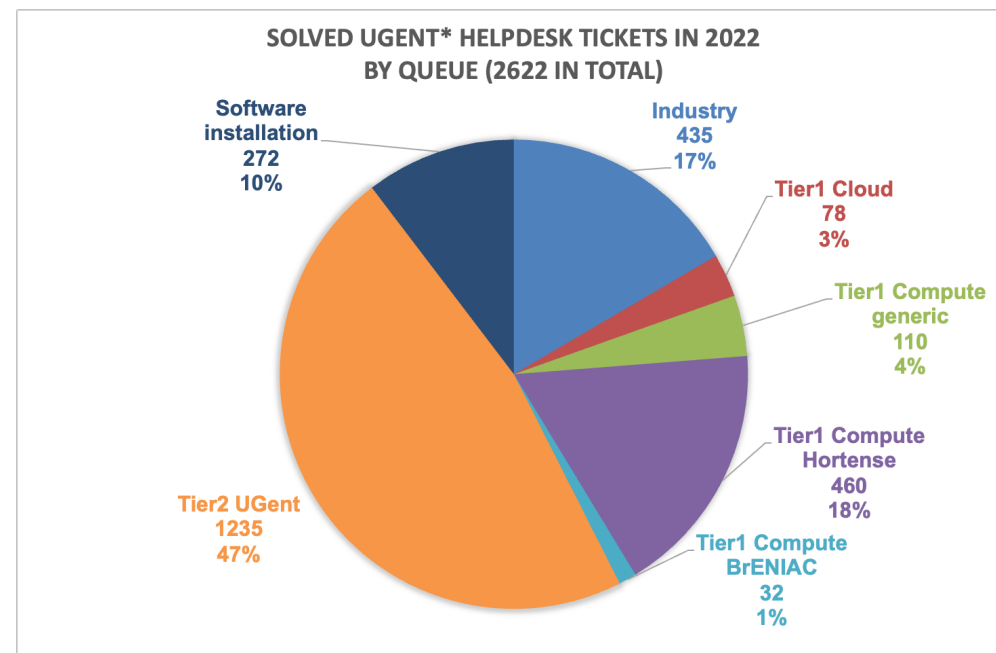
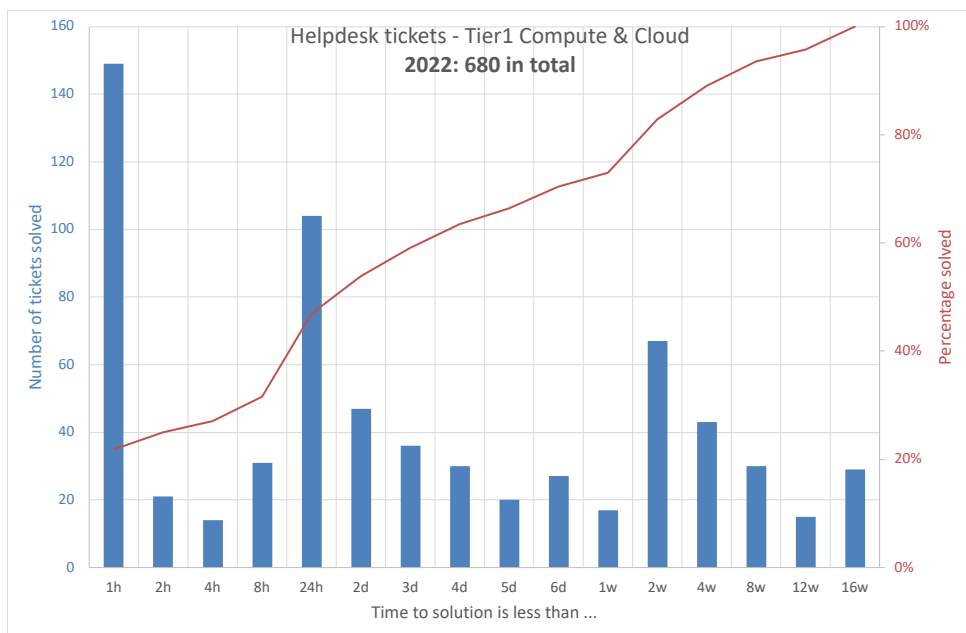
▲ Tabel 7. Details van de helpdesk tickets.

Voor verscheidene VSC Tier-1 services werd in 2021 gestart met een gecentraliseerde VSC helpdesk, op een platform onder beheer van UGent. Onderstaande grafiek geeft een idee van het aantal vragen binnen dit helpdesk platform (inclusief de Tier-2 helpdesk tickets voor UGent).

Het email adres cloud@vscentrum.be verzamelt alle gebruikersvragen met betrekking tot het Tier-1 Cloud platform binnen het gecentraliseerde helpdesk systeem. UGent staf staat in voor het beantwoorden en opvolgen van de tickets. In 2022 werden 78 tickets m.b.t. Tier-1 Cloud behandeld en opgelost.

Gebruikersvragen met betrekking tot een Tier-1 Compute platform worden verzameld via het generieke email adres compute@vscentrum.be. In 2022 kwamen zo 602 gebruikersvragen voor Tier-1 Compute binnen die werden opgelost. Binnen het helpdesk platform gebeurt een triage, naargelang de vragen Tier-1 Compute BrENIAC of Hortense betreffen, dan wel generiek van aard zijn. Vragen of problemen in verband met BrENIAC worden door het KU Leuven team behandeld, die voor Hortense door het UGent team. In 2022 werden ook alle vragen van industrie gebruikers op het Tier-1 Compute platform op deze manier behandeld.

Onderstaande grafiek geeft een beeld van de snelheid waarmee gebruikersvragen in de Tier-1 Compute en Tier-1 Cloud helpdesks werden afgehandeld.



▲ Afbeelding 32. Opgeloste helpdesktickets in 2022 aan UGent.

▲ Afbeelding 33. Oplossingstijd van Tier-1 Cloud-helpdesktickets

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 hiervan zijn: het optimaliseren van bestaande workflows, analyse en optimaliseren van code, ondersteuning geven aan het schrijven van onderzoeksprojecten.

Daarnaast vinden er aan elke instelling nog gebruikersbijeenkomsten plaats waarin een afvaardiging van de gebruikers vertegenwoordigd is. En proberen we via outreach het VSC in de kijker te plaatsen en nieuwe gebruikers proberen aan te trekken.

→ **KU Leuven en Universiteit Hasselt**

In 2022 werden er 12 introductie sessies georganiseerd. Hiervan waren er 5 georganiseerd in de opleidingskalender en 7 online en adhoc volgens de instroom van nieuwe gebruikers. Dit zorgt voor een heel flexibele manier voor een vlotte start voor nieuwe gebruikers. Er is ook online videomateriaal, wat altijd kan geconsulteerd worden. Verder wordt er ook altijd gezorgd dat VSC wordt voorgesteld op events specifiek voor de introducties voor nieuw academisch personeel.

De nieuwe Tier-2 die in 2022 is opgeleverd, bracht ook specifiek werk met zich mee. Op de nieuwe cluster wordt Slurm gebruikt als job scheduler. Er werden de nodige infosessies voorzien om eerst de piloot gebruikers en daarna alle gebruikers bekend te maken met het systeem. Voorts moest ook het accounting systeem uitgewerkt worden voor Slurm dat geïntegreerd werd op de bestaande procedures. Voor de groep van Biomedische wetenschappen werd op de nieuwe cluster ook een nieuw systeem uitgewerkt om met dedicated nodes te werken.

WICE bevat ook een specifieke interactieve partitie, bedoeling is om deze samen met de Open OnDemand portal een lagere instapdrempel te geven aan gebruikersgroepen die nu nog niet op de HPC werken en ook aan de bestaande gebruikers die snel post-processing van hun data op de cluster kunnen doen. WICE werd opgestart met een lanceer event, waarbij gebruikers ook de kans hadden om met elkaar te netwerken.

De overgang naar MFA authenticatie werd ook goed opgevolgd voor onze gebruikers.

Naast de dagdagelijkse support geïnitieerd via de servicedesk, zijn er nog enkele acties die specifiek vermeld kunnen worden: ondersteuning van 2 studentteams in kader van Agoria Solar team en Formula Electric, voltooiing van de consulting voor de migratie van onderzoekssoftware Aquacrop naar Fortran zodat de gebruikte modules beter schalen en eenvoudiger ingezet kunnen worden binnen HPC simulaties. Verder werden ook verschillende nieuwe gebruikers opgeschaald naar Tier-1.

Binnen de Europese projecten werden voor PRACE de bestaande MOOCs ondersteund. Voor EuoHPC werd meegewerkt aan work packages specifiek gericht op industrie. In dit kader werd ook AlphaFold geïnstalleerd en ondersteund op de Tier-2 clusters.

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.:

- Vakgroep Toegepaste Wiskunde, Informatica en Statistiek, UGent
- AZDelta
- Atlas Copco
- Center for Molecular Modeling, UGent
- Industrial Microbiology and Food Biotechnology, VUB
- Koninklijke Bibliotheek van België (KBR)
- PProGRes onderzoeksgroep, UGent
- Toegepaste Mechanica en Energieconversie (TME), KU Leuven
- Vlaams Instituut voor de Zee (VLIZ)
- 3E
- Koninklijk Museum voor Midden-Afrika
- SWave
- BioMMedA, UGent
- Vakgroep Biochemie en Microbiologie, UGent
- Instituut voor Landbouw-, Visserij- en Voedingsonderzoek (ILVO)
- Diabatix
- Daikin Europe
- Vakgroep Omgeving, UGent
- Koninklijk Meteorologisch Instituut van België (KMI)
- ePotentialia
- Onderzoeksgroep Digital Mathematics (DIMA), VUB
- DiamCAD

- Onderzoeksgroep Mycology, UGent
- Antea Group
- DEME
- Vireca
- EuroSense
- Vakgroep Structuur en Herstel van de Mens, UGent
- UG Instituut voor functionele en metabole beeldvorming, UGent
- UZGent
- Valcun
- Ontoforce
- Plantentuin Meise
- AZ Maria Middelaes, Gent
- Thinkubate
- Daikin
- Koninklijke Musea voor Schone Kunsten van België
- Vakgroep dierwetenschappen en aquatische ecologie, UGent
- Biolizard
- HOGent
- UMICORE
- Plasma-astrophysics, KU Leuven
- Kytos

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:

- 22/04/2022, ICT commissie UGent
- 16/05/2022, HPC intro en rondleiding voor studenten bachelor Physics and Astronomy (UGent)
- 20/05/2022, ICT gebruikerscommissie UGent
- 26/09/2022, Visietraject universiteitsbibliotheek UGent
- 15/11/2022, HPC intro en rondleiding voor studenten van het vak “Python for Scientists” (UGent)

Om tegemoet te komen aan de immer toenemende vraag van onderzoekers rond dataopslag en -beheer, werden onder meer verscheidene specifieke acties gevoerd:

- 11/10/2022: “Storage platforms @ UGent”, faculteit Economie en Bedrijfskunde (UGent)

→ **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. Daarbij kunnen we ook gebruikmaken van de kennis die wordt opgedaan met de LUMI machine.

Jaarlijks worden 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).

Speciale aandacht werd in 2022 ook besteed aan de overgang PBS/Torque naar Slurm voor de Leibniz cluster. (Op Vaughan is Slurm reeds actief vanaf de ingebruikname van de machine.)

Daarnaast is er de begeleiding van masterstudenten bij het gebruik van de infrastructuur, en ondersteuning bij de aanvragen voor rekentijd op Tier-1 en Tier-0 en bij computationele aspecten van (interuniversitaire) projectaanvragen.

We werken ook actief mee binnen Europese projecten als PRACE en EuroHPC (LUMI en NCC). Voor PRACE werd binnen de SHAPE oproep voor Eurosense een multi-node multi GPU training schema opgezet gebaseerd op Horovod en PyTorch om de performantie van verschillende AI modellen te vergelijken. De code draait op Hortense. Daarnaast werd mee de laatste hand gelegd aan release 2.2 van de PRACE Unified European Application Benchmark Suite (UEABS), publiek beschikbaar sinds 20 december 2022.

In het kader van outreach, zowel binnen VSC als het NCC, werden ook verschillende taken uitgevoerd, zoals de VSC Industry Road Tour voor de maritieme sector, en een presentatie van VSC en NCC in Dundee, een innovatiehub in Antwerpen. We organiseerden ook seminars over kwantumcomputing en waren medeoprichter van de AlphaFold-community, waarvoor verschillende trainingen georganiseerd werden en een symposium in Brussel met deelnemers uit academia, overheid en het bedrijfsleven. Er werden specifieke inspanningen geleverd om contacten te leggen met bedrijven in de maritieme, chemische en life sciences sectoren en met softwareleveranciers voor industriële toepassingen. Het team werkte mee aan de creatie van outreach materiaal en voerde gesprekken met andere NCC's om informatie te verzamelen over hun

infrastructuur en toegangsbeleid. We waren actief aanwezig op verschillende evenementen, waaronder de AE expo, Future Exploration of the Waterborne Transport Sector, en events van sectororganisaties.

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

Binnen de UAntwerpen is de gebruikersgroep sinds 2006 actief.

→ **Vrije Universiteit Brussel**

In 2022 is de hele cluster verhuisd naar een nieuw datacenter op de VUB campus. Er is erg veel tijd gestoken in de voorbereiding en planning. De verhuis zelf is dan ook vrij vlot verlopen. We hebben van de gelegenheid ook gebruik gemaakt om de nodige ruchtbaarheid te geven aan HPC binnen de VUB. Daarnaast zijn er verschillende vergaderingen geweest met onderzoeksgroepen om hun te introduceren tot HPC en VSC in het algemeen en af te stappen van hun eigen machines. Een aantal groepen werd ook warm gemaakt om het Tier-1 Cloud platform te proberen naast de gebruikelijke push richting Tier-1 Compute van de grote gebruikers.

De klimaat groep van de VUB heeft verder nog specifieke ondersteuning gekregen om te migreren van BrENIAC naar Hortense.

De jaarlijkse user survey leert ons dat de gebruikers tevreden zijn over de ontvangen dienstverlening.

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 en vanuit het departement onderzoeksbeleid. Qua cursussen worden tweemaal per jaar de cursussen “Introduction to Linux” en “Introduction to the use of HPC at the VUB” georganiseerd.

PERSONEEL

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

Subsidiëring

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". Sinds 2020 worden binnen dit Tier-1 SaaS project ook 2 VTE toegewezen aan Cloud (UGent) en 2 VTE aan Data (KU Leuven). Dit Tier-1 SaaS project is afgelopen eind 2022.

Omdat elke universiteit een ander personeelsbeleid voert en verschillende verloningsprincipes hanteert, wordt voor elke VTE een vast bedrag van 100.000 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 8. 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 9. 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 kan 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 universiteiten¹ zetten samen bijna 51 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	15,75	27
UAntwerpen ¹	6,5	13
VUB	5,1	16
UHasselt	2,5	3
KU Leuven	21,1	27
Totaal	50,95	86

▲ Tabel 10. Aantal VTE ingezet en koppen betrokken bij HPC via het VSC

¹We 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.

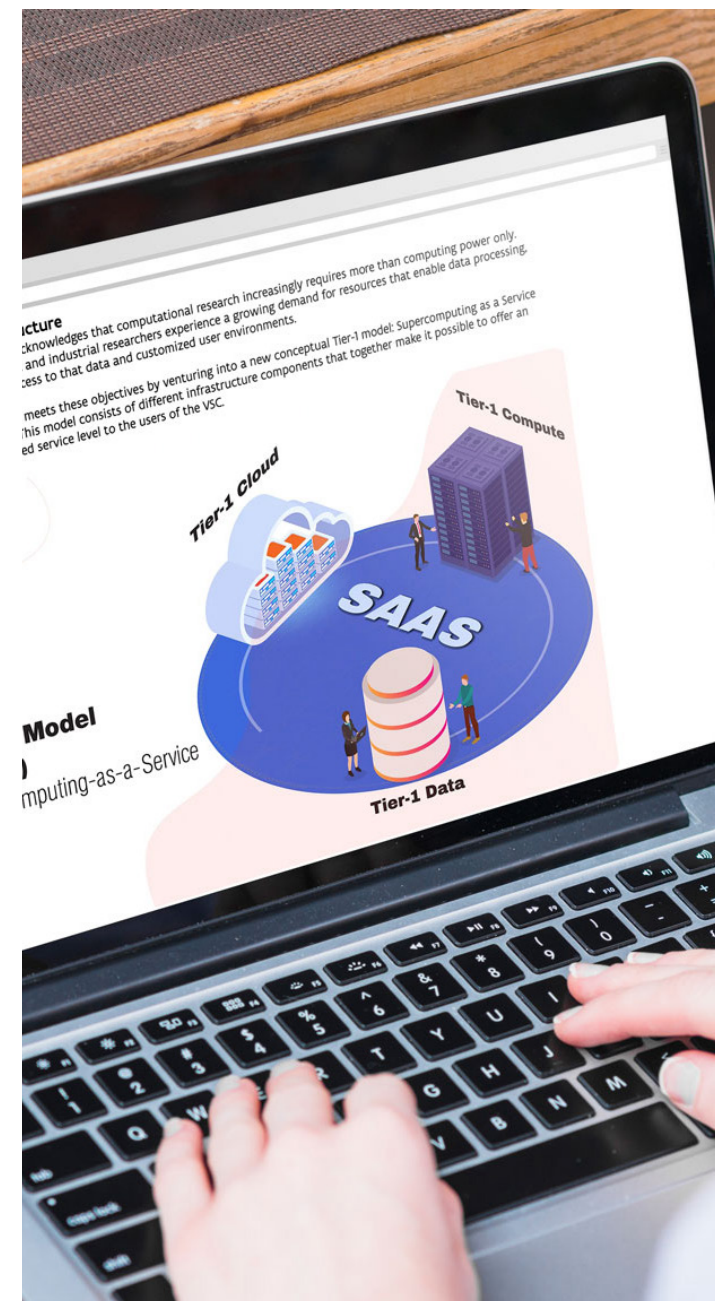
Outreach

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 betrokken in de verschillende activiteiten kan u hieronder vinden.

	Infrastructuurbeheer	Systeembeheer	Basis gebruikersondersteuning	Wetenschappelijke of gevorderde ondersteuning	Management	Outreach
KU Leuven	6	7	11	8	4	5
UAntwerpen	5	3	7	4	4	2
UGent	9	9	11	8	4	6
UHasselt			1	1	1	1
VUB	5	3	7	6	6	4
Totaal	25	22	37	27	19	18

▲ Tabel 11. 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.



▲ Afbeelding 34. Beschikbare expertise in wetenschappelijke domeinen



OUTREACH NAAR BEDRIJVEN

De VSC infrastructuur kan ook gebruikt worden door niet-academische gebruikers in Vlaanderen. In de afgelopen jaren versterkte VSC daarom de inspanningen naar bedrijven. Concreet houden deze inspanningen in dat de huidige dienstverlening aangepast wordt aan de specifieke noden van dergelijke organisaties en dat er verder op een proactieve wijze naar mogelijke klanten wordt gezocht.

Dit toont zich in het aantal niet-academische testgebruikers en industrieel verbruik dat jaar na jaar stijgt. In 2022 werd er verder gebouwd op eerdere outreach initiatieven naar de industrie. Verder werden er nieuwe initiatieven uitgewerkt, zoals community building en de studieopdracht HPC potentieel in Vlaanderen.

Testgebruikers

Niet-academische gebruikers kunnen gratis 500.000 core-uren of 1.000 GPU-uren krijgen om een proof-of-concept uit te voeren en te verifiëren of de infrastructuur geschikt is voor hun applicaties. Bedrijven kunnen daarbij ook rekenen op de ondersteuning van het HPC-personeel.

In totaal zijn er in 2022 dertien bedrijven als testgebruiker met Tier-1 aan de slag gegaan. Omdat Hortense dit jaar in productie ging, zijn drie van deze bedrijven bestaande klanten die ook de nieuwe infrastructuur wilden uittesten. De overige bedrijven komen uit sectoren zoals biotechnologie, artificiële intelligentie, consultancy, farmacie, etc.

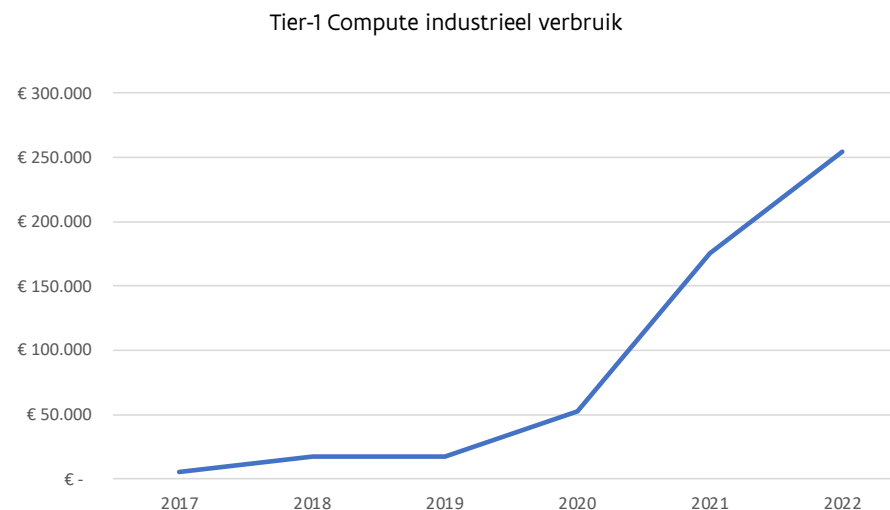
	Exploratieprojecten
2020	7
2021	8
2022	13

▲ Tabel 12. Evolutie exploratieprojecten.

Bestaande en nieuwe klanten

Voor verder gebruik worden klanten alleen gefactureerd voor de gebruikte rekentijd en gereserveerde schijfruimte, volgens vaste tarieven (www.vscentrum.be/getaccess). Concreet gaat het over een kleine tiental bedrijven die regelmatig van de Tier-1 infrastructuur gebruik maken. Hun verbruik neemt jaar na jaar toe.

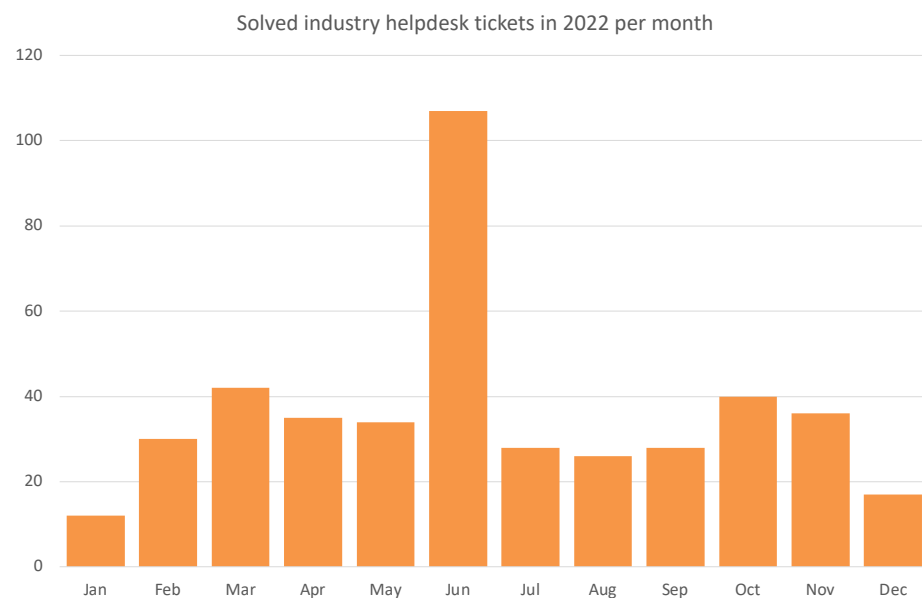
▲ Afbeelding 35. VSC Tier-1 Compute verbruik (in €)



Gebruikersondersteuning Hortense t.b.v. industrie

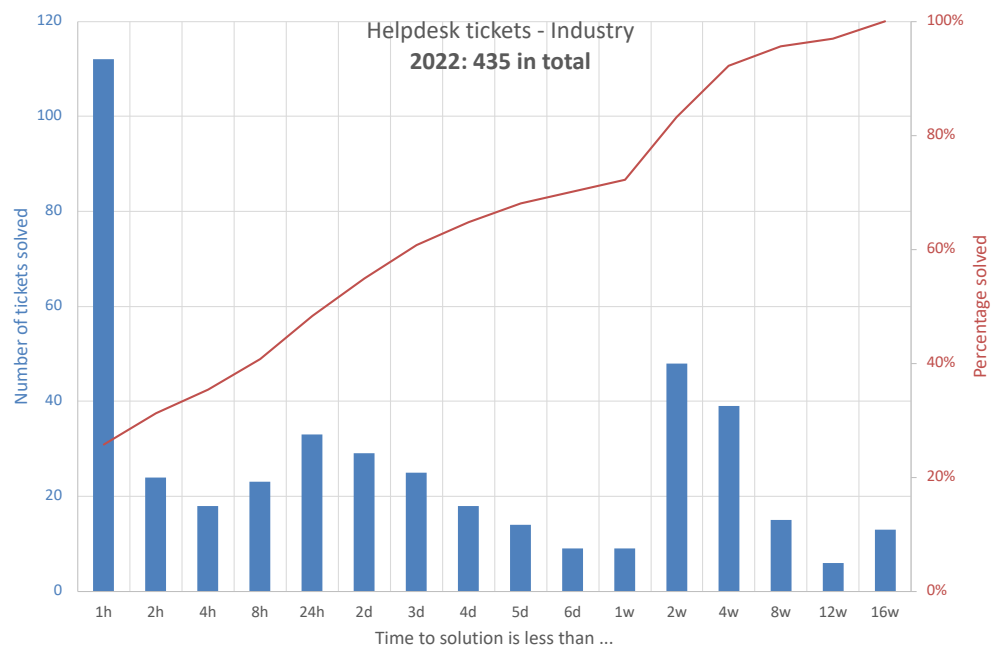
Inbegrepen in het gebruik van Tier-1 Hortense door niet-academische gebruikers hoort ook een gebruikersondersteuning, via de 1e en 2e lijns helpdesk compute@vscentrum.be, integraal behandeld door het HPC-UGent team die verantwoordelijk is voor de Tier-1 Compute infrastructuur Hortense.

In 2022 werden in totaal 435 tickets behandeld en opgelost, specifiek voor industrie. Dit zijn o.m. vragen van bedrijven die in een exploratieve fase zitten, maar evenzeer vragen van bedrijven die een meer structureel contract met VSC hebben aangegaan.



▲ Afbeelding 36. Aantal behandelde industrie tickets in 2022, opgesplitst per maand.

Bovenstaande grafiek geeft een indicatie van het tempo aan vragen van industriële klanten naar de compute@vscentrum.be helpdesk in 2022. De uitgesproken piek aan vragen in juni 2022 kan gelinkt worden aan de workshop “AI for Materials Industry” op 27 juni 2022.



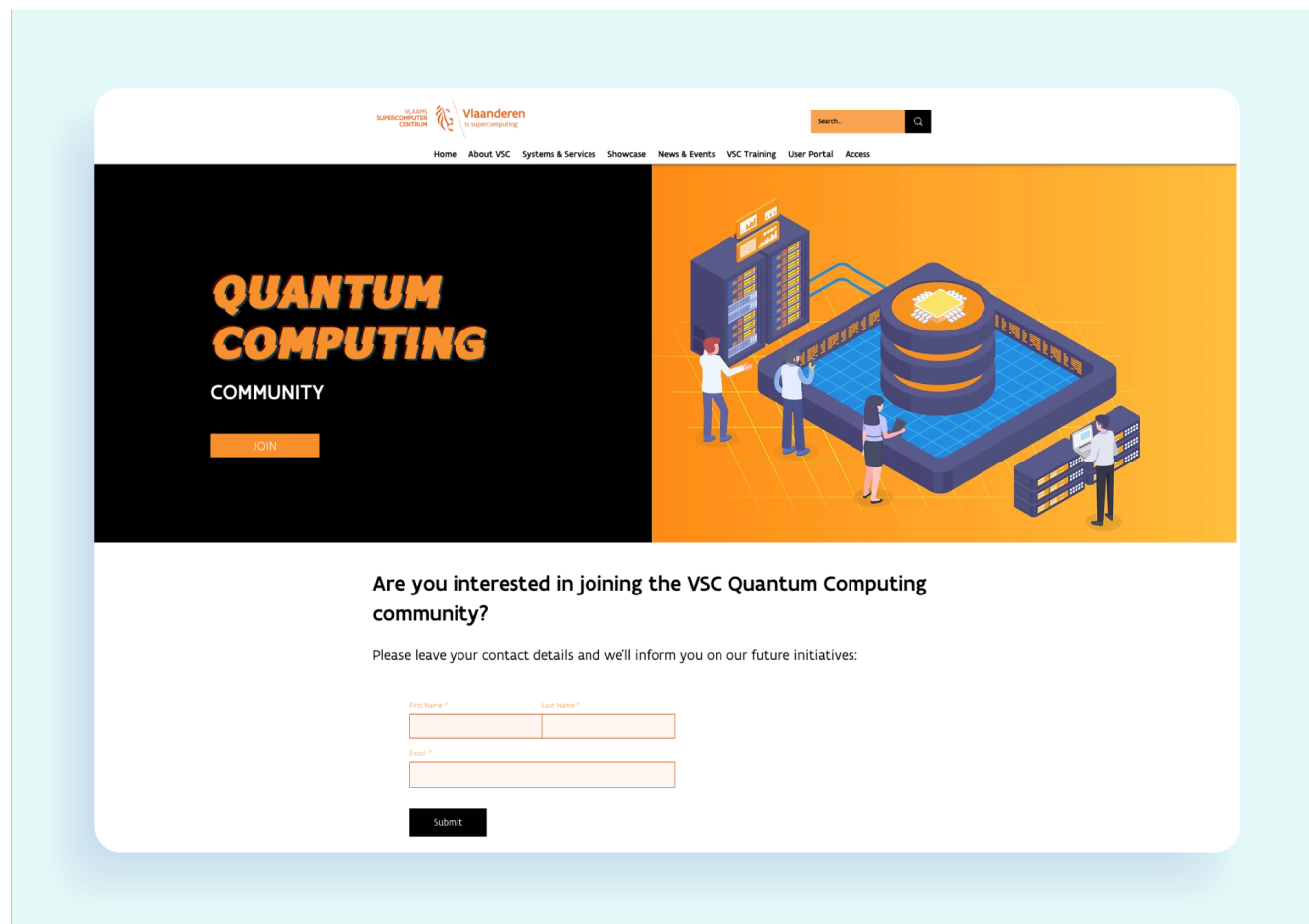
▲ Afbeelding 37. Afhandelingstijd van industrie tickets in 2022.

De afhandelingstijd van vragen door niet-academische gebruikers is uiteraard afhankelijk van de complexiteit van de vraag. Bovenstaande grafiek geeft inzicht in de verdeling van de afhandelingstijd voor alle opgeloste tickets in 2022. Ongeveer 50% van alle vragen m.b.t. industrie wordt opgelost binnen 24 uur. Meer dan 80% van alle vragen is opgelost en afgehandeld binnen 2 weken.

Community building

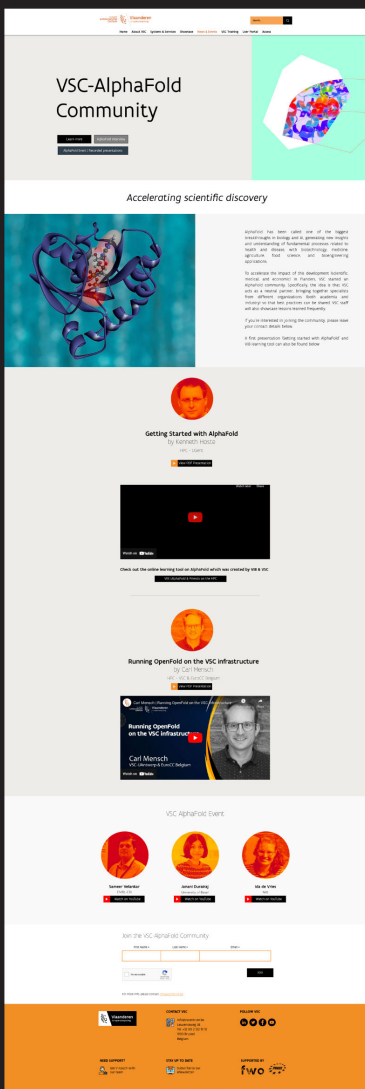
Quantum computing community

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 nul of één heeft. Fysiek kan een bit een elektronisch schakelaartje zijn dat aan of uit staat. Elke moderne chip bevat er miljoenen. De quantumcomputer rekent met qubits, die – in een variabele mix – de waarde nul én één hebben. Sinds 2020 organiseert VSC, samen met IBM, op regelmatige basis reeksen trainingssessies rond Quantum Computing. Op die manier heeft VSC een groep enthousiastelingen verzameld in een community. De bedoeling is om vanaf 2023 een meer gedetailleerd zicht te krijgen op de specifieke noden van deze community en om daarop verder in te kunnen spelen. Onderzoekers kunnen hun interesse in de community kenbaar maken via www.vscentrum.be/quantumcommunity.



▲ Afbeelding 38. Webpagina van de Quantum Computing Community.





AlphaFold community

Eiwitten zijn complexe biomoleculen die bestaan uit grote ketens van aminozuren. Elk eiwit heeft een unieke vorm en het is een immense uitdaging voor onderzoekers om uit te zoeken hoe eiwitten hun structuur krijgen - algemeen bekend als het protein folding problem. AlphaFold, een artificieel intelligentie programma ontwikkeld door DeepMind, blijkt met een grote nauwkeurigheid deze taak te kunnen uitvoeren. Het wordt daarom één van de grootste doorbraken in biologie en AI genoemd. AlphaFold genereert nieuwe inzichten met toepassingen in biotechnologie, geneeskunde, landbouw, voedingswetenschap en bio-engineering. Om de impact van deze ontwikkeling in Vlaanderen te versnellen, heeft VSC een AlphaFold community opgestart. Concreet is het de bedoeling dat VSC optreedt als neutrale partner die specialisten van verschillende organisaties (zowel academisch als industrieel) samenbrengt zodat best practices kunnen worden gedeeld (www.vscenrum.be/alphafold).

▲ Afbeelding 39. Webpagina van de AlphFold Community.

Studieopdracht HPC potentieel in Vlaanderen

In 2022 lanceerde VSC op initiatief van de VSC industriële raad een opdracht tot een voorstudie met betrekking tot het aanstellen van een consultant aangaande het uitwerken van een marktonderzoek en potentieelinschatting van HPC gebruik bij bedrijven in Vlaanderen.

Het doel van de opdracht was driedelig en kan als volgt worden omschreven:

● Marktonderzoek

- Het beschrijven van het huidige HPC gebruik bij bedrijven in Vlaanderen:
 - Marktonderzoek van de bedrijven in Vlaanderen die HPC momenteel al gebruiken;
 - Verzamelen van informatie over hun HPC gebruik en een lijst aanleggen van deze bedrijven;
 - In kaart brengen van de meerwaarde van HPC voor deze bedrijven.

● Potentieelinschatting

- Het beschrijven van het potentieel HPC gebruik bij bedrijven in Vlaanderen:
 - Potentieelinschatting van de bedrijven in Vlaanderen die grote meerwaarde zouden ondervinden van HPC gebruik;
 - Verzamelen van informatie over hun potentieel HPC gebruik en een lijst aanleggen van deze bedrijven;
 - In kaart brengen van de meerwaarde van HPC voor deze bedrijven.

● Klantenontwikkeling

- Het uitwerken van manieren waarop aan klantontwikkeling kan worden gedaan: Mogelijke rubrieken in de beschrijving van de klantenontwikkeling kunnen zijn:
 - Welke manieren van eerste contactname en opvolging best zouden werken;
 - Welke business cases meest interessant zijn;
 - Welke services moeten worden geboden;
 - Welke ondersteuning verwacht wordt;
 - Welke exploitatiemodellen aangewezen zijn (toegangsmodaliteiten, aanrekenmodellen,...);

Intussen werd een consultancybedrijf door de industriële raad geselecteerd voor de opdracht. De industriële raad apprecieerde de commercieel georiënteerde aanpak van dit bedrijf en de vele 'goesting' die ze toonden voor die project. De keuze voor een start-up uit Vlaanderen is, volgens de industriële raad, een bewuste keuze waarbij de inschatting is dat het de meeste kans geeft om bruikbare resultaten op te leveren. De resultaten van de opdracht worden verwacht in 2023.



VSC Industry Road Tour

Na succesvolle events in 2021 organiseerde VSC ook in 2022 een tweetal Industry Road Tour events. De Industry Road Tour events zijn thematische, live events voornamelijk gericht op industrie, met als bedoeling HPC use cases te tonen in een specifieke sector.

Op 27 juni vond bij Universiteit Hasselt, in samenwerking met Health Campus Limburg, Bioville en het Data-Science Instituut, een road tour event rond health plaats. Een twintigtal experts konden er luisteren naar presentaties van Janssen Pharmaceutical en UHasselt. Deze presentaties kunnen [hier](#) worden bekeken.

Op 22 november vond, in samenwerking met MCA, een road tour rond de maritieme sector plaats. Het event kon zowel live als online worden gevolgd. Er werd getoond hoe meer rekenkracht helpt om het scheepvaartverkeer op de Noordzee te begrijpen (TU Delft), hoe bemanning en planning kunnen worden geoptimaliseerd (Motulus) en welke stappen belangrijke spelers in de maritieme sector nemen in een tijdperk van data en digitalisering in de scheepvaart (Euronav).



▲ Afbeelding 40. Sfeerbeelden van de VSC Industry Road Tour en de webpagina.

Uitgebreide HPC ondersteuning

Na de succesvolle oproep in 2021, kwam er in 2022 opnieuw een vraag voor uitgebreide HPC ondersteuning. Bedoeling is dat VSC-medewerkers met de geselecteerde organisaties samen werken om op HPC in hun R&D-omgeving te introduceren, bestaande workflows te optimaliseren of om performance bottlenecks weg te nemen.

Om in aanmerking te komen voor een aanvraag moet de organisatie:

- **de mankracht en de domeinexpertise hebben om samen met de VSC-experts te werken aan het project;**
- **kunnen bijdragen aan de promotie van het project (vb. VSC Success Story);**
- **een knowledge unit indienen (technisch eindrapport, leermateriaal, demo, ...) met de projectresultaten.**

De aanvraag van Eurosense werd door de industriële raad in oktober 2022 beoordeeld en goedgekeurd op kwaliteit van de concrete opdracht (business case, kennis rond supercomputing, etc.) en haalbaarheid (in samenwerking met het operationele team van VSC).

Titel	Organisatie	Aantal persoonsmaanden VSC
Classification of LiDAR points based on deep learning approach	Erosense	1

▲ Tabel 13. Uitgebreide HPC ondersteuning.

Om geïnformeerd te blijven over toekomstige oproepen voor uitgebreide HPC ondersteuning, kan u een email sturen naar info@vscentrum.be.

OPLEIDINGEN

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 de industrie en de publieke sector. De standaard opleidingen zijn vrij toegankelijk en gratis. In 2022 zagen we ook een toename van deelnemers uit andere landen, al is hun aandeel nog gering.

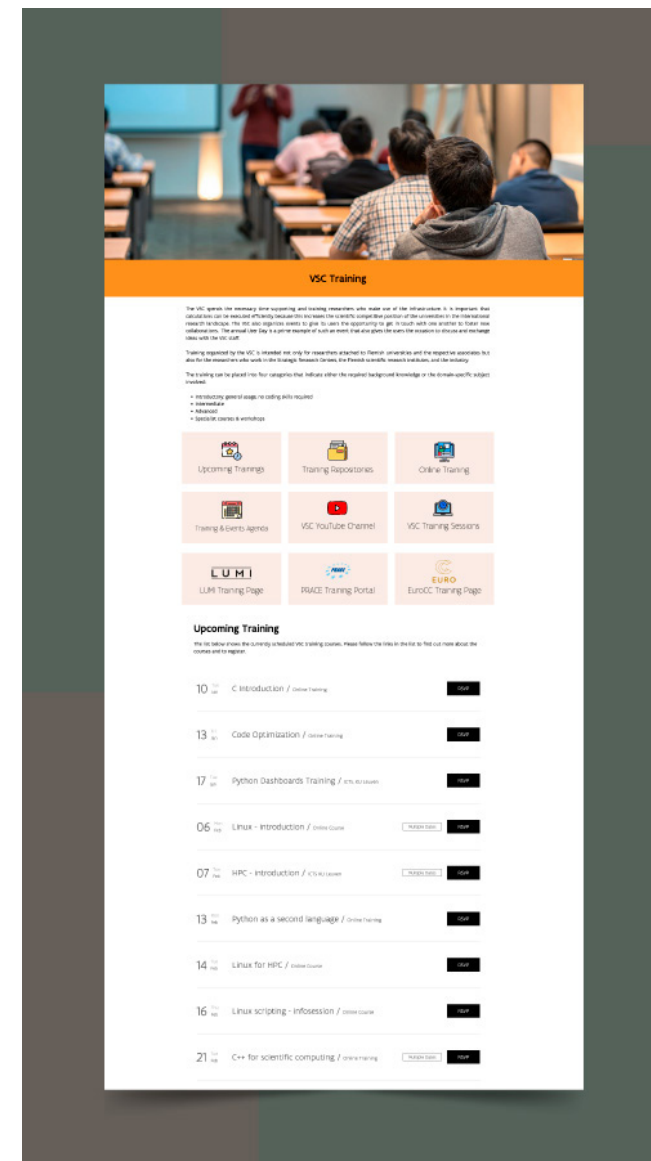
Voor het VSC is opleiding belangrijk. Berekeningen met behulp van supercomputing infrastructuur zijn immers duur, zowel qua investering als uitbating. Er wordt dus verwacht dat ze efficiënt gebeuren, en hieraan dragen de trainingen in hoge mate bij. Hoewel het financiële aspect uiteraard belangrijk is op korte termijn, zal een professioneel gebruik van deze infrastructuur op langere termijn ook zorgen voor een grotere competitiviteit van zowel onze onderzoekers als onze bedrijven.

Opleidingen en trainingsmateriaal dragen ook bij tot de uitstraling en reputatie van het VSC. Uit de analytics van de VSC website blijkt immers dat de pagina over training tot de meest bezochte van de site behoort. Training is ook een onderwerp dat zich goed leent voor samenwerking met andere HPC organisaties zoals bijvoorbeeld CECI, maar ook internationaal binnen PRACE en EuroCC.

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 zeerste 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.



▲ Afbeelding 41. De nieuwe webpagina van VSC Opleidingen



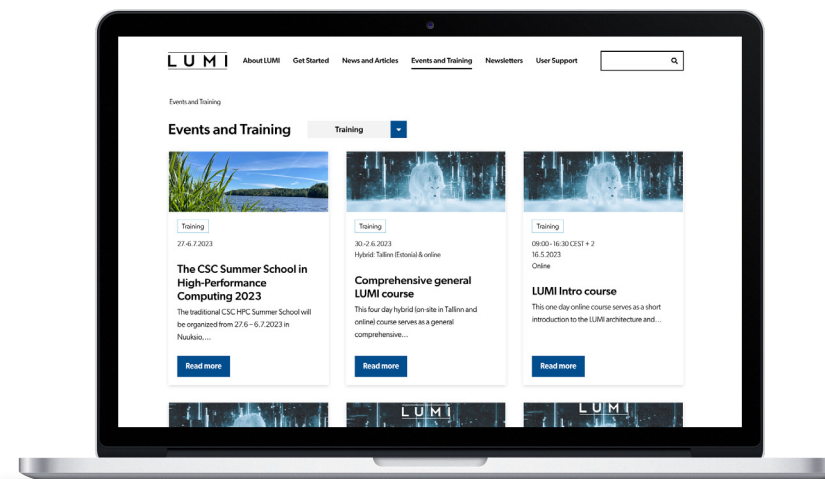
Om de sessies op het intermediate niveau te volgen, zijn de introductory-cursussen als voorkennis vereist. Deze sessies behandelen dan ook specifiekere onderwerpen. De meerderheid van deze cursussen is bedoeld voor gebruikers die zelf software ontwikkelen, hetzij voor rekenintensieve toepassingen, hetzij 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. Veel van deze trainingen worden online gegeven, zodat de geografische afstand geen rol meer speelt, wat drempelverlagend zou moeten werken.

Opleidingen op advanced niveau vereisen nog meer ervaring en zijn meer domein specifiek dan de intermediate opleidingen, die er ook vaak vereiste voorkennis voor vormen. Voor deze cursussen doet het VSC een beroep op externe lesgevers. Vaak zijn ze verbonden aan PRACE Training Centers (PTC) of komen ze uit de industrie. Vanwege de pandemie werd in 2022 geen beroep gedaan op externe experts. Het Belgische PTC heeft wel een PRACE training verzorgd over “Python for HPC”. Het aanbod aan PRACE en LUMI trainingen werd geregeld onder de aandacht gebracht via sociale media.

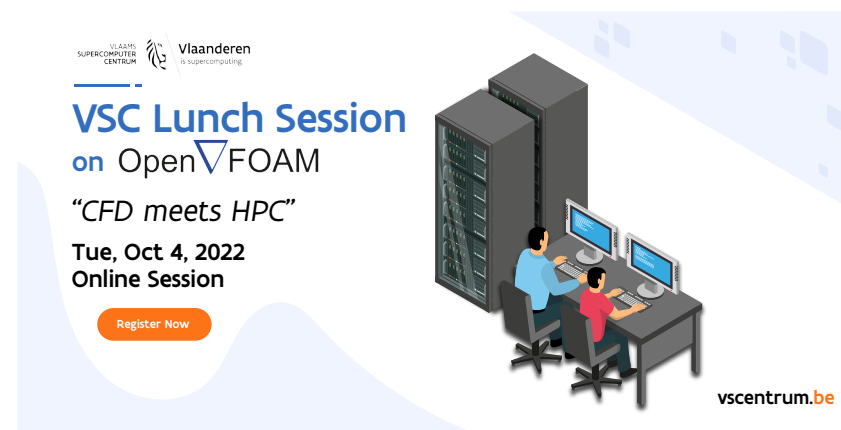
Sommige opleidingen passen in geen van deze drie niveaus: ofwel zijn ze te domeinspecifiek, ofwel omvatten ze het volledige introductory tot advanced niveau. Dit verklaart de term “specialist”, aangezien ook hiervoor vaak beroep gedaan wordt op externe specialisten. Er werd een reeks trainingssessies over kwantumcomputing georganiseerd, een lunchbox sessie over OpenFOAM en een trainingevent over AlphaFold in samenwerking met VIB.

Het merendeel van de training events die het VSC organiseerde, gingen online door. Een voordeel hiervan is dat ze gemakkelijker toegankelijk zijn voor deelnemers op andere locaties.

Het videomateriaal dat via YouTube beschikbaar is, wordt gebruikt, maar kan zeker nog meer gepromoot worden.



▲ Afbeelding 42. LUMI “Training” webpagina



▲ Afbeelding 43. Promo-afbeelding van OpenFoam Lunch Session

De twee MOOCs die het VSC voor PRACE ontwikkelde, “Defensive programming and debugging” en “Fortran for scientific computing” werden permanent opengesteld zodat deelnemers op elk moment kunnen starten. Voor deze runs zijn er respectievelijk 474 en 990 deelnemers. De grootste verdienste van deze formule is dat de trainingen toegankelijk zijn voor deelnemers van overal ter wereld, dus ook voor deelnemers die om wat voor reden dan ook niet in staat zijn een face-to-face opleiding bij te wonen. We telden deelnemers vanuit respectievelijk 79 en 85 verschillende landen.

Het VSC participeert sinds september 2020 ook in het EuroCC National Competence Center voor het training work package. Hiervoor werd het HPC opleidingsaanbod in België in kaart gebracht. Het VSC nam deel aan verscheidene activiteiten rond training en deelde onder meer ervaringen met en best practices rond MOOCs.

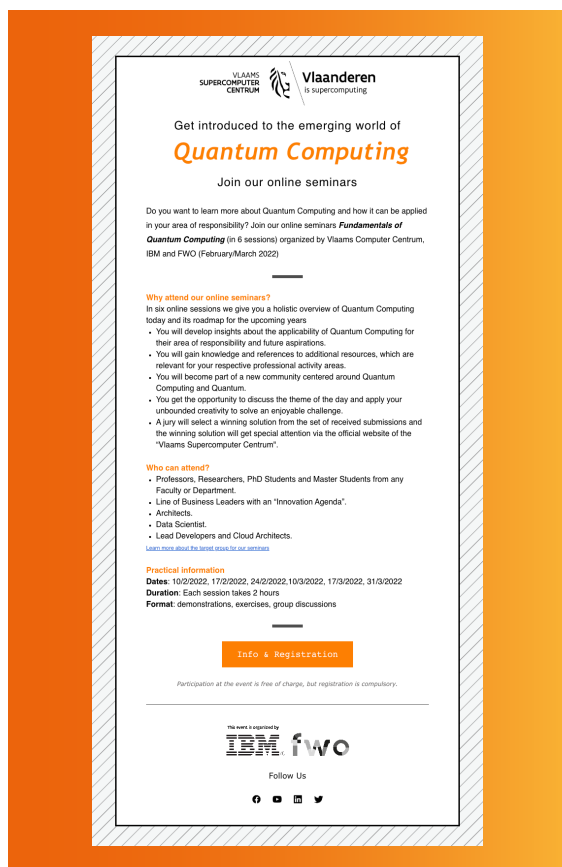
VSC staf gaf diverse trainingen, onder meer aan CSC staf, over het gebruik van de software installatie tool EasyBuild, ontwikkeld door het VSC. VSC stafleden waren ook betrokken bij trainingen over het gebruik van de LUMI pre-exascale machine. Op de tweede AIDA winterschool die online doorging, verzorgde het VSC modules over data processing en aspecten van machine learning.

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. In 2022 werd bijvoorbeeld een training over het gebruik van GPU's vanuit Python programma's uitgewerkt, evenals over software ontwikkeling met behulp van CMake.

VSC staf volgde zelf ook trainingen waaronder die georganiseerd door LUMI over het gebruik van LUMI-C en LUMI-G, Julia for High Performance Computing (HLRS) en diverse online trainingen (een halve of een hele dag).

De website van het VSC maakt het opleidingsaanbod bekend, zodat de informatie voor alle geïnteresseerden beschikbaar is. Deze sectie van de website werd in 2022 grondig vernieuwd en uitgebreid. Het online training materiaal kan nu ook gemakkelijk teruggevonden worden via de website.

Via interne mailinglists en sociale media worden de aankondigingen verspreid onder de gebruikers van de infrastructuur. Gericht mailings vestigen de aandacht op specifieke opleidingen als die nuttig kunnen zijn voor een beperkte doelgroep of voor potentiële gebruikers. De Belgische NCC startte in november 2021 met disseminatie via Twitter en LinkedIn, en ook via deze kanalen worden trainingen aangekondigd.



▲ Afbeelding 44. Nieuwsbrief van Quantum Computing online seminars.



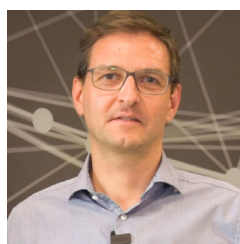
▲ Afbeelding 45. VSC training overzicht 2022

EVENEMENTEN

VSC Gebruikersdag

Op 21 juni 2022 heeft VSC een nieuwe “fysieke” gebruikersdag georganiseerd, na twee jaar van online bijeenkomsten. De gebruikersdag vond plaats aan de Universiteit Gent. Zoals steeds waren er gebruikers, partners en het VSC team zelf, naast deelnemers uit de industrie en onderzoeksinstellingen.

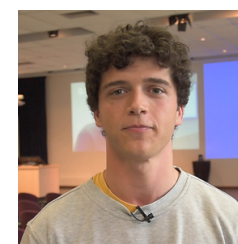
De deelnemers werden verwelkomd door Francisco Hernandez, voorzitter van de gebruikersraad. Na de voorstelling van Hortense, de nieuwe Tier-1, door Ewald Pauwels (HPC coördinator in UGent en lid van het VSC Operationele Team), waren er nog vier voordrachten. Hierbij kwamen zowel sprekers uit universiteiten, industrie als een SOC aan het woord. Bij de laatste twee voordrachten werden respectievelijk AI en het Tier-1 Cloud platform belicht.



prof. dr. Stefan Weckx



Industrial Microbiology and Food Biotechnology



dr. Mats Denayer



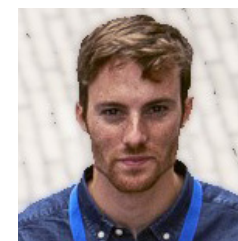
Assessing polymer solubility via high-throughput molecular dynamics simulations on the VSC Tier-1 supercomputer



dr. Jan Van Looy



Supercomputing and commercial AI applications: opportunities and challenges



dr. Lennert Schepers



LifeWatch data cloud

▲ Afbeelding 46. Evenementsprekers (boven), afbeeldingen van het evenement (links)

Na deze voordrachten konden de deelnemers een bezoek brengen aan het datacenter van UGent en zo ook een blik werpen op Hortense. De gebruikersdag werd afgesloten met een receptie waar er voldoende tijd was voor het uitwisselen van ervaringen, netwerking e.d.

 **Ontdek de webpagina van VSC Gebruikersdag 2022**



VSC Lunchsessie rond OpenFOAM: "CFD meets HPC"

Naast een gebruikersdag organiseert VSC ook (virtuele) lunchsessies. Hierbij komt één onderwerp aan bod dat kan rekenen op een ruime interesse, zowel vanuit de onderzoeksinstellingen als de industrie. Een lunchsessie is opgevat als voorstelling van enkele use cases, gevolgd door een Q&A. Na de lunchsessie over artificiële intelligentie in 2021, werd op 4 oktober 2022 een lunch sessie rond OpenFOAM georganiseerd: "CFD meets HPC".

De korte inleiding door Stefan Becuwe (HPC coördinator in UAntwerpen en lid van het VSC Operationele Team) werd gevolgd door drie voordrachten met sprekers uit verschillende sectoren en een Q&A moment.

- dr. Lilla Kapa-Koloszár (von Karman Institute): "Thermal hydraulics of advanced liquid metal nuclear reactors"
- Florian Wéry (UGent): "CFD-DEM model development: validation and application to a gas-solid vortex reactor"
- dr. Lieven Vervecken (Diabatix): "ColdStream: revolutionary thermal software"

Deze lunch sessie werd gevolgd door 86 deelnemers.

iRODS User Group

iRODS is de open source data management software die gebruikt wordt in het Tier-1 data platform. KU Leuven is lid van het iRODS consortium en organiseerde in 2022 de iRODS User Group meeting (5-8 juli, irods.org/ugm2022/). De meeting brengt iRODS gebruikers en admins van vele verschillende instellingen samen met de iRODS ontwikkelaars. Ervaringen met iRODS worden gedeeld en het geeft een overzicht hoe de iRODS ontwikkeling verder evolueert. Het programma omvatte een 30-tal presentaties en voordrachten. 75 personen namen deel aan de conferentie. KU Leuven presenteerde hier ook het iRODS portal dat in ontwikkeling is en door het VSC Tier-1 data platform gebruikt gaat worden. Het toonde ook hoe het VSC Tier-1 data platform de Globus service integreert.

Aansluitend op de iRODS User Group meeting werd ook een Globus Online training gehost zowel voor gebruikers als admins van de service binnen het VSC. 37 personen namen deel aan deze sessies.

KU Leuven Tier-2 launch event

Op 13 oktober werd een lanceringsevent georganiseerd voor de nieuwe Tier-2 cluster. In de voormiddag werden rondleidingen georganiseerd in het datacenter. In de loop van de dag waren er verscheidene parallele sessies die nieuwe functionaliteiten van het systeem belichtten. Verschillende doelen werden hiermee afgedekt:

- de machine voor te stellen zodat gebruikers met de nieuwe resources vertrouwd geraken,
- omschakeling van het scheduler systeem belichten,
- nieuwe interactieve mogelijkheden introduceren,
- inzicht geven in de complete architectuur van een HPC cluster om het belang van efficiënt gebruik van de machine te kaderen,
- gebruikers van de machine de gelegenheid geven om met elkaar te netwerken en te leren van elkaar.

Voormiddag:

- Datacenter tour (8 rondleidingen met ongeveer 10 personen per rondleiding)
- Parallele sessies: Slurm Introduction / OpenOnDemand

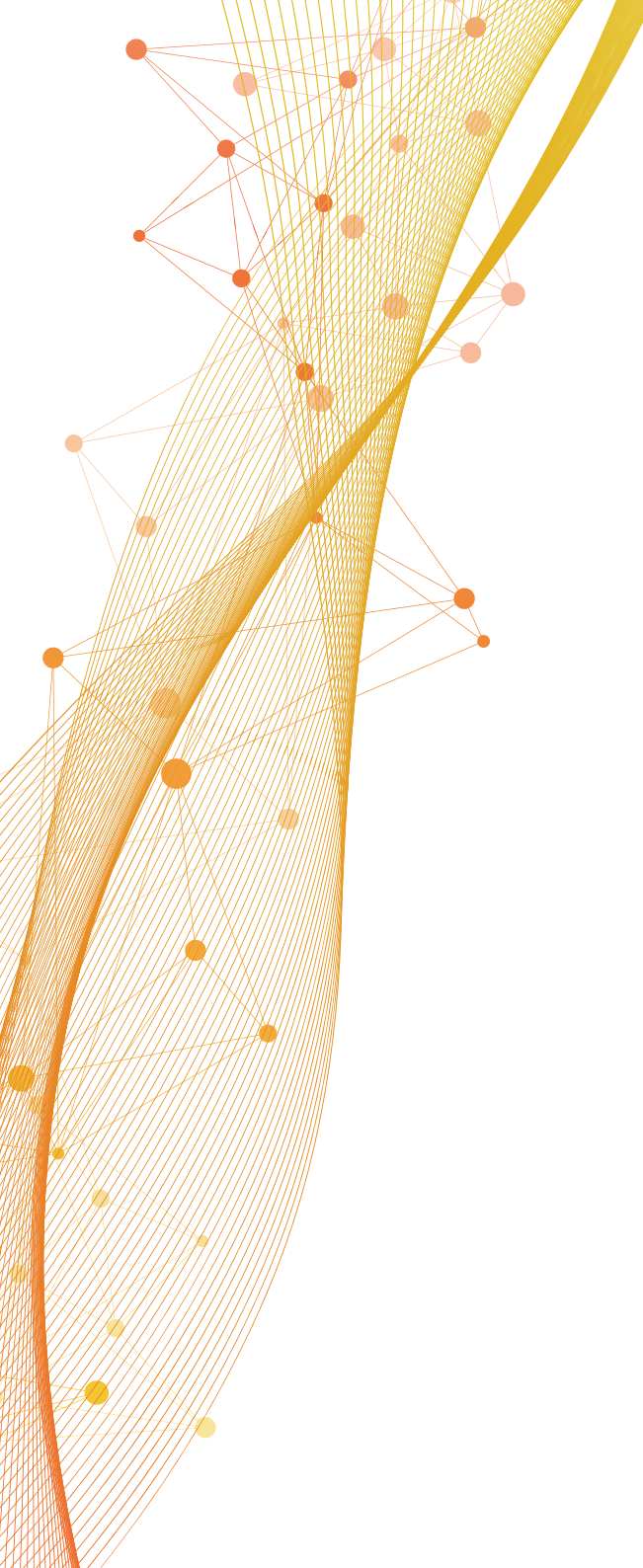
Namiddag:

- Plenaire sessie: voorstelling van de nieuwe Tier-2
- Parallele sessies: Slurm Introduction / OpenOnDemand / Lustre filesystem & parallel storage
- Gebruik van HPC door Solar team
- 1-minuut presentaties van poster sessie & wrap-up
- Receptie / Poster sessie

In totaal waren er 109 inschrijvingen voor de dag en bezochten een 80-tal personen het datacenter.



▲ Afbeelding 47. Sociale media post van iRODS



“ Our collaboration with VSC has enabled our chapters to test and train models in a very easy, effective and cost efficient way. It truly cleared blockades to test out more bold ideas and really enabled us to keep pushing the state of the art ”

MATTHIAS FEYS

CTO, ML6

INTERNATIONALE SAMENWERKING

PRACE, EuroHPC, LUMI, EuroCC

VSC is actief in een aantal Europese projecten, waaronder PRACE en EuroHPC.

PRACE



▲ Afbeelding 48. Afbeelding van PRACE website

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. In het veranderende Europese HPC landschap zal in 2023 de toekomstige rol van PRACE duidelijk worden.

Bij de aanvragen voor rekestijd in PRACE Call 24 was er geen project vanuit Vlaanderen.

Daarnaast zijn er de PRACE IP (Implementation Phase) projecten. Het VSC nam zowel deel aan het PRACE 5IP als aan het PRACE 6IP project. Het PRACE 6IP project, gestart in mei 2019, is afgelopen op 31 december 2022. De universiteiten van Antwerpen en Leuven waren de Vlaamse partners in dit project.

Voor training (WP 4) werden twee MOOCs gerealiseerd met financiële steun van KU Leuven. Deze zijn ter beschikking via het FutureLearn platform. De eerste, "Defensive programming and debugging" ging van start in april 2019 en had in totaal meer dan 6000 deelnemers. De tweede, "Fortran for scientific programming" startte in september 2021 en telde 1000 deelnemers. Een interessant aspect van deze formule is de grote internationale uitstraling. Deze online trainingen kunnen gevolgd worden door om het even wie met toegang tot internet. We tellen dan ook deelnemers uit alle bewoonde continenten.

In een samenwerking met CECI, onze Waalse collega's, kandideerde België om erkend te worden als PRACE Training Center. Deze kandidatuur werd weerhouden en samen met CECI organiseerde het VSC een aantal PRACE trainingen over "Parallel programming with MPI and OpenMP", "HPC workflows" en "Python for HPC".

UAntwerpen was actief binnen WP 7 waar het bedrijven heeft ondersteund met code-optimalisatie via "Preparatory Access" (Diabatix, cut-off 40) of geholpen richting HPC via het SHAPE programma (VIPUN, Call 11; Eurosense, Call 14). Daarnaast heeft UAntwerpen ook meegewerkt aan de Unified European Application Benchmark Suite (UEABS). In 2022 is UEABS afgewerkt en versie 2.2 is gepubliceerd op 20 december 2022.

EuroHPC

EuroHPC is een initiatief van de EU om een “World Class Supercomputing Ecosystem” in Europa uit te bouwen. Twee van de EuroHPC projecten waarin ook VSC betrokken is, zijn LUMI en EuroCC.

LUMI

Als tweede grootste partner in het LUMI consortium is België actief betrokken bij LUMI. Aan het begin van 2022 kwam de CPU-partitie beschikbaar van LUMI voor alle gebruikers. De pilootfase van de GPU partitie startte in november. Maar LUMI kende ook een lange onbeschikbaarheid tijdens het grootste deel van juni en juli voor een upgrade van de interconnect en de integratie van de LUMI-G hardware. In november werd op het FWO de eerste LUMI-training met fysieke aanwezigheid georganiseerd “Detailed Introduction to the LUMI-C environment and architecture”.

Ook op LUMI is er rekentijd beschikbaar. In 2022 hebben we binnen België twee oproepen gelanceerd voor het Belgische aandeel in de rekentijd van LUMI. In de eerste oproep werd een “preparatory” project van Tim Lebailly (KU Leuven) goedgekeurd. Bij de tweede oproep werden “preparatory” projecten van Hans De Winter (UAntwerpen), Fileto Rodriguez (VUB), Yuheng Zhao (VUB) en Tânia Sofia Cação Ferreira (VKI) goedgekeurd, en “regular” projecten van Pieter Cnudde (UGent) en Tim Lebailly (KU Leuven).



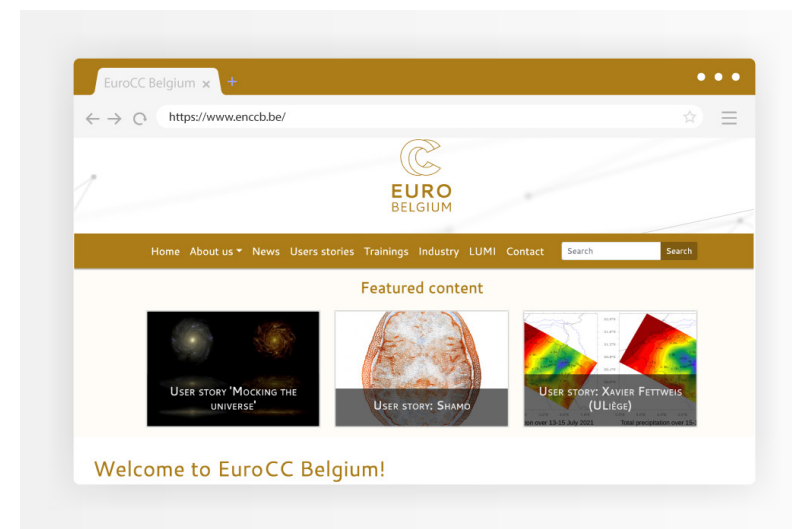
EuroCC

EuroCC is een ander belangrijk EuroHPC project waaraan VSC deelneemt. Onder EuroCC zijn in verschillende landen zogenaamde “nationale competentiecentra rond HPC” voor HPC, HPDA en AI opgericht. Het project is op 1 september 2020 gestart, hoewel de Vlaamse cofinanciering pas in de zomer van 2021 beschikbaar werd, wat vertraging veroorzaakte. In 2022 is hard gewerkt om achterstanden in te halen en de taken in het project uit te voeren. Alle Vlaamse universiteiten hebben hieraan meegewerkt en kregen ondersteuning van FWO. Dit project is afgelopen op 31 december 2022. Een aanvraag voor het vervolgproject EuroCC 2 werd in 2022 voorbereid en zal starten in januari 2023.

Er werd een website ontwikkeld (www.enccb.be) en sociale media kanalen aangemaakt om meer bekendheid te geven aan het initiatief en het gebruik van HPC, HPDA en AI te promoten bij academici en industrie. De competenties in deze domeinen aanwezig in België werden in kaart gebracht. Ook op gebied van training werd nieuw trainingsmateriaal ontwikkeld. Een interessant voorbeeld daarvan is een teaching kit voor docenten die hun studenten iets willen vertellen over HPC.

Om industrie meer te betrekken bij HPC, werden meer dan 24 bedrijven uitgebreid geïnterviewd om hun HPC-behoefte en verschillende uitdagingen en belemmeringen voor bredere HPC-adoptie in kaart te brengen. Daarnaast werden 14 KMO's actief ondersteund, inclusief 12 proof-of-concept projecten op het gebied van o.a. vloeistofmodellering, biotechnologie en AI.

De samenwerking tussen NCC België en VSC heeft ook geleid tot de succesvolle organisatie van diverse VSC Industry Road Tour-evenementen voor de maritieme, biotechnologische en farmaceutische industrie, met deelname vanuit de academische, overheid en private sectoren. Actieve deelname van leden van VSC en NCC België aan deze evenementen en die van onze partners in sectoren zoals creatieve, technische, chemische, energie en maritieme industrie, alsook de evenementen van EuroCC zelf, is belangrijk om een breed netwerk te ontwikkelen in Vlaanderen en kennis van de markt op te bouwen.



▲ Afbeelding 49. Website van EuroCC Belgium

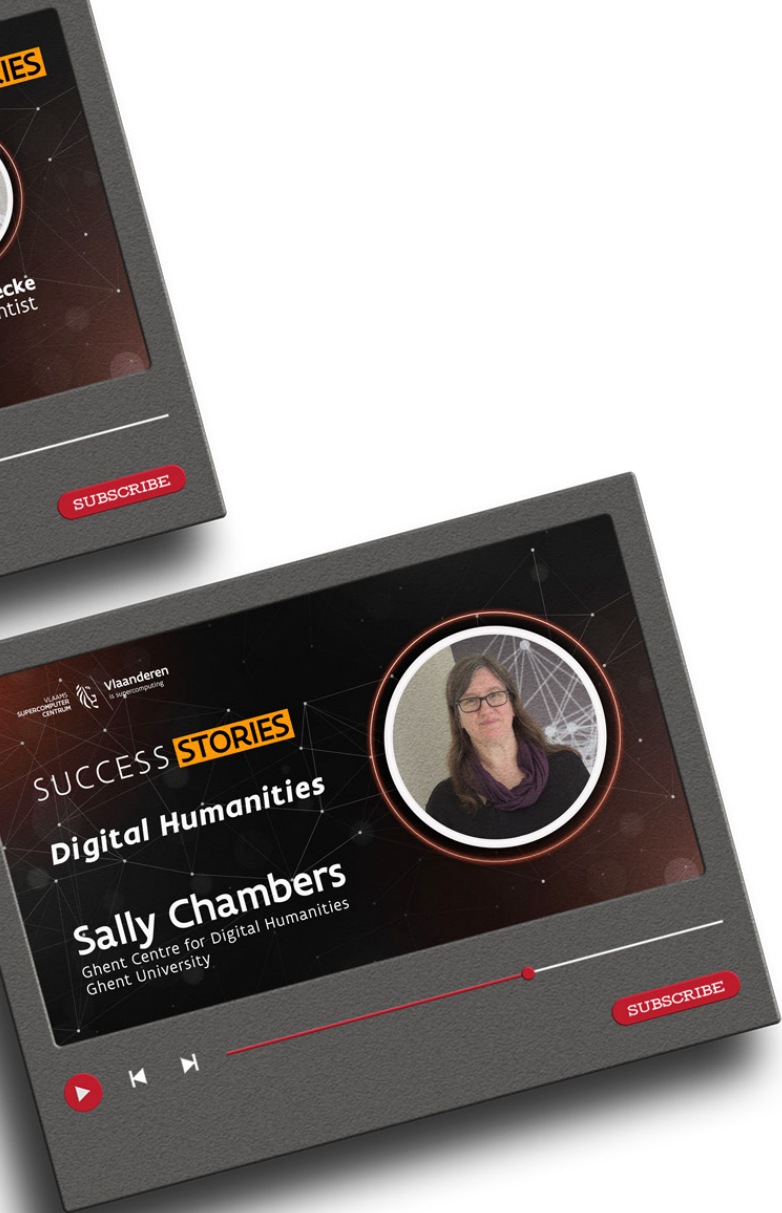


EGI

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 Neutrino Observatory”. 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.

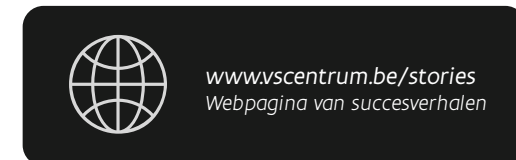




SUCCESVERHALEN

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.

Succesverhalen zijn te vinden op:



SALLY CHAMBERS | DIGITAL HUMANITIES

Ontdek hoe Digital Humanities de rekenkracht van VSC gebruikt om modellen te trainen om de kennis die onderzoekers nodig hebben uit honderden jaren gedigitaliseerde kranten te halen. In de video komt Sally Chambers van het Ghent Centre for Digital Humanities aan de Universiteit Gent aan het woord. Ze is ook een digitale bibliothecaris en werkt als secretaris-generaal in het DARIAH-EU Coördinatiebureau van het Göttingen Centre for Digital Humanities, Duitsland.



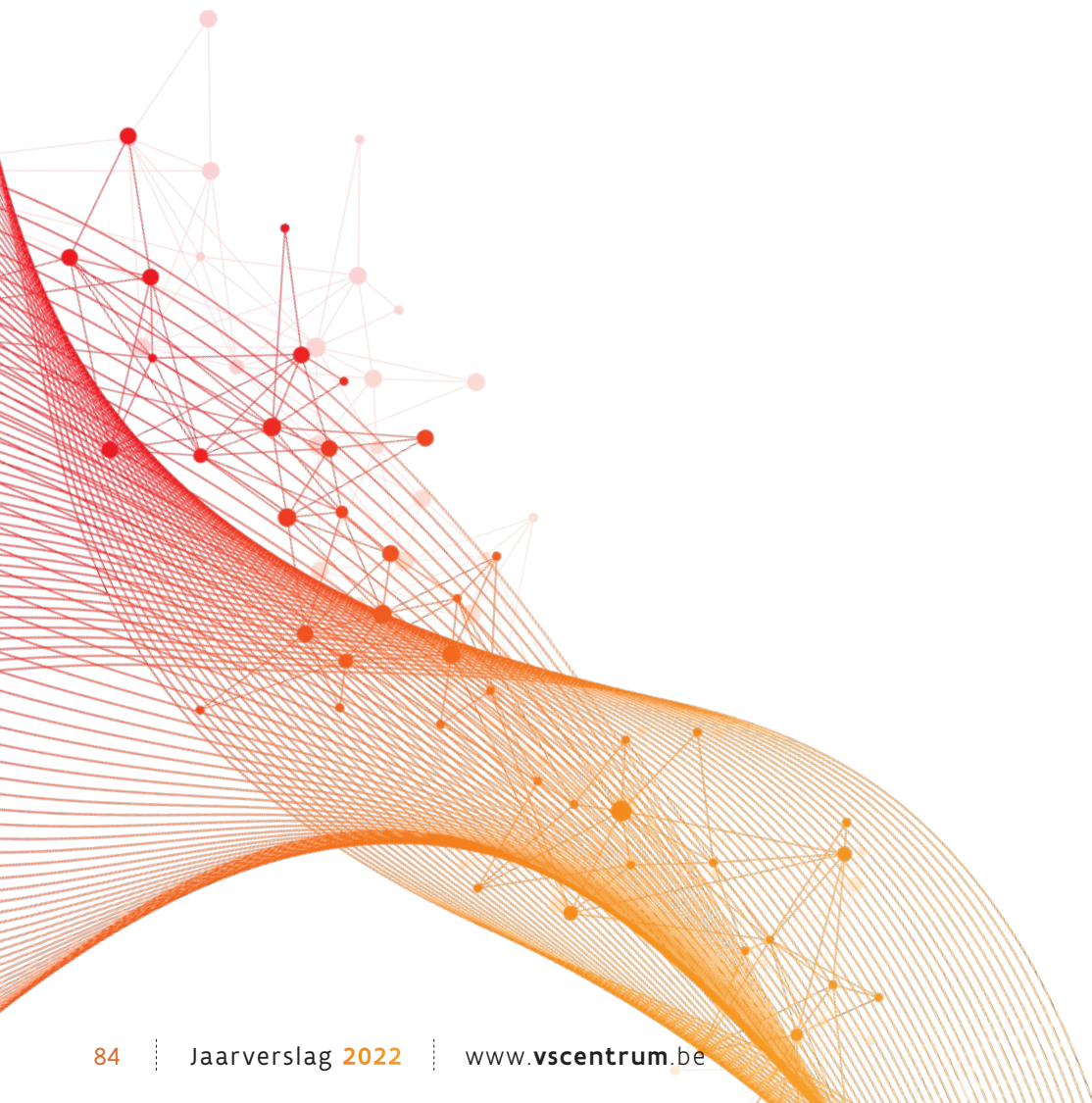
JULIE BIRKHOLZ | DIGITAL HUMANITIES

Een academicus die ernaar streeft het gebruik van supercomputers binnen digitale geesteswetenschappen te verbeteren, is Julie M. Birkholz, assistent-professor Digital Humanities aan de Universiteit Gent en hoofd van het Digital Research Lab van de KBR (Koninklijke Bibliotheek van België).



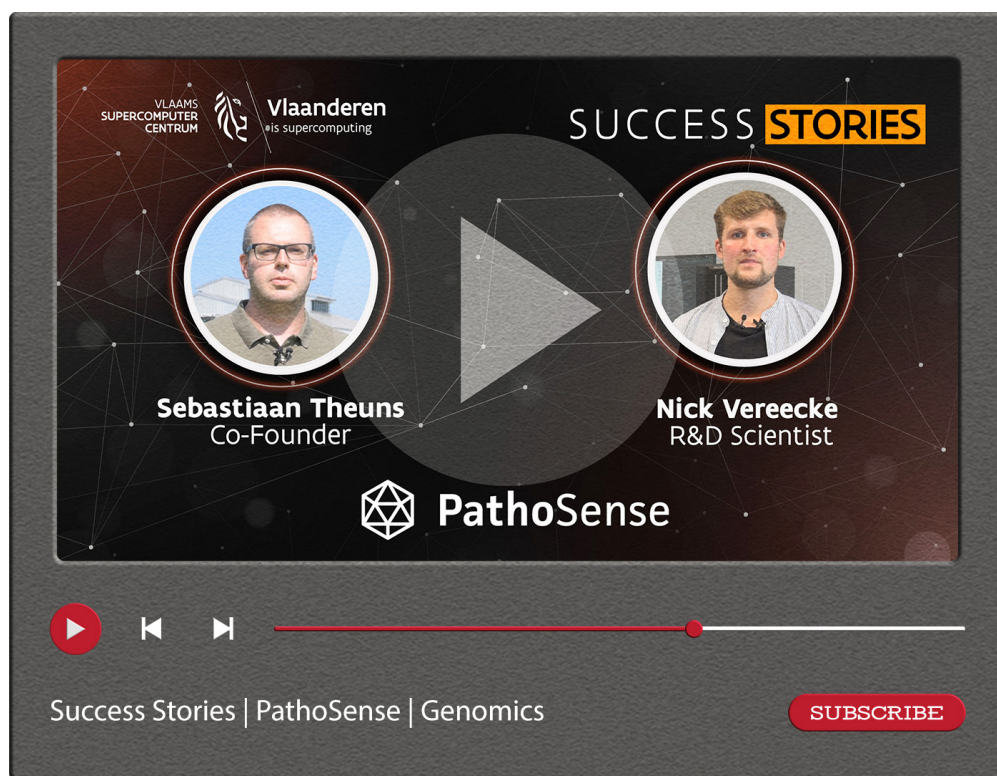
WIM THIERY | KLIMAATVERANDERING

Klimaatwetenschapper prof. dr. Wim Thiery van de Vrije Universiteit Brussel gebruikt de VSC infrastructuur al geruime tijd om de toekomstige evolutie van klimaatverandering te modelleren. In zijn succesverhaal vertelt hij wat de computerkracht van VSC's supercomputers betekent voor zijn onderzoek en ons begrip van het wereldwijde klimaatsysteem.



PATHOSENSE | GENOME ANALYSIS IN INFECTIOUS DISEASES

Een verhaal over het gebruik van de kracht van supercomputing in de genomica van infectieziekten. Onze twee gasten Sebastiaan Theuns (mede-oprichter) en Nick Vereecke (R&D-wetenschapper) bij PathoSense, een spin-offbedrijf van de Universiteit Gent, vertellen ons hoe ze de kracht van VSC's supercomputers gebruiken voor high-throughput analyse van nanopore pathogene genomics gegevens.



BIJLAGEN

Personeelslijst

Instelling	Naam	% tewerkstelling in het kader van HPC
UGent	Wouter Depypere	100%
UGent	Stijn De Weirdt	100%
UGent	Alvaro Simon Garcia	100%
UGent	Andy Georges	100%
UGent	Kenneth Hoste	100%
UGent	Ewald Pauwels	100%
UGent	Balazs Hajgato	100%
UGent	Kenneth Waegeman	100%
UGent	Bart Verheyde	100%
UGent	Danny Schellemans	10%
UGent	Johan Van Camp	30%
UGent	Frédéric De Leersnijder	20%
UGent	Wim Waeyaert	20%
UGent	Bruno Cardon	20%
UGent	Koen Van Hecke	5%
UGent	Tim De Roeck	15%
UGent	Debby Elbers	10%
UGent	Ruth Degroote	10%
UGent	Michel Raes	15%
UGent	Myriam Mertens	10%
UGent	Dieter Roefs	60%
UGent	Denis Krišt'ák	100%
UGent	Filip Kružík	100%
UGent	Petr Kral	25%
UGent	Hafsa Naeem	25%
UGent	Martin Sakin	100%
UGent	Peter Hardon	100%
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%

Instelling	Naam	% tewerkstelling in het kader van HPC
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	Steven Vandenbrande	100%
KU Leuven	Jef Scheepers	100%
KU Leuven	Wouter Van Assche	100%
KU Leuven	Wouter Lampaert	100%
KU Leuven	Louis Roeben	100%
KU Leuven	Jo Vandeginste	50%
KU Leuven	Yorick Poels	100%
KU Leuven	Peter veraedt	100%
KU Leuven	Guy Van Den Bergh	100%
KU Leuven	Rudy Rys	40%
KU Leuven	Tom van Mierlo	100%
KU Leuven	Tom Vanhout	20%
KU Leuven	Koen Vanherck	30%
KU Leuven	Lennart Peeter	100%
KU Leuven	Bart Vanneste	100%
KU Leuven	Sofie Pieraerd	10%
KU Leuven	Philip Brusten	10%
UAntwerpen	Franky Backeljauw	100%
UAntwerpen	Stefan Becuwe	100%
UAntwerpen	Kurt Lust	50%
UAntwerpen	Carl Mensch	100%
UAntwerpen	Michele Pugno	60%
UAntwerpen	Engelbert Tijskens	100%
UAntwerpen	Robin Verschoren	100%
UAntwerpen	Annie Cuyt	5%
UAntwerpen	Wim Vanroose	5%
UAntwerpen	Koen Decauwsemaecker	10%

Personeelslijst

Instelling	Naam	% tewerkstelling in het kader van HPC
UAntwerpen	Herwig Kersschot	10%
UAntwerpen	Wim Holemans	5%
UAntwerpen	Bertin Peeters	5%
VUB	Alex Domingo Toro	100,00%
VUB	Samuel Moors	100,00%
VUB	Stéphane Gérard	100,00%
VUB	Ward Poelmans	100,00%
VUB	Olivier Devroede	30,00%
VUB	Steven Opstaele	15,00%
VUB	Johan D'Hondt	10,00%
VUB	Micky Mattens	10,00%
VUB	Serge Morabito	10,00%
VUB	Stefan Weckx	10,00%
VUB	Alain Graulus	5,00%
VUB	Henri Vanroelen	5,00%
VUB	Luc Eulaerts	5,00%
VUB	Marc Pierloot	5,00%
VUB	Bernadette Van Gansbeke	2,00%
VUB	Jan Paredis	2,00%
UHasselt	Geert Jan Bex	100%
UHasselt	Rafal Al-Takreeti	50%

Tier-1 Compute 2022 | GPU & CPU

EasyChairCode	Titel	Aanvrager	Instelling	Afdeling
2022-1	Strainfield Evaluations in Metal Halide Perovskites	Teunissen, Johannes	UGent	Center for Molecular Modeling / EA1
2022-2	Atomic growth mechanism of 100 diamond surfaces	Guillaume, Emerick	UHasselt	Materials physics (IMOMAF)
2022-3	Calculation of vibrational spectra of framework materials via static and dynamic approaches	Hoffman, Alexander	UGent	Center for Molecular Modeling
2022-4	High-throughput simulations of unexplored polymer/solvent combinations.	Denayer, Mats	VUB	DSCH - ALGC
2022-6	Design of a microkinetic model for methanation on Co and Ni	Rommens, Konstantijn	UGent	Department of Materials, Textiles and Chemical Engineering Laboratory for Chemical Technology (LCT), Mark Saeys group
2022-7	Development of Machine Learning Potentials for Co-Based Catalysts to Recycle CO2 to Jet Fuel	Rommens, Konstantijn	UGent	Department of Materials, Textiles and Chemical Engineering Laboratory for Chemical Technology (LCT), Mark Saeys group
2022-8	Determining the influence of the chemical components on the phase stability of metal halide perovskites	Braeckvelt, Tom	UGent	Center for Molecular Modeling / EA17
2022-9	The first general relativistic kinetic simulations of accreting and flaring black holes	Küchler, Lorenzo; Ripperda, Bart; Hertog, Thomas; Vercnocke, Bert; Mayerson, Daniel	KU Leuven	theoretical physics group, physics department; department of astrophysical sciences
2022-10	Simulation on solar flares and solar prominence eruptions	Zhou, Yuhao; KEPPENS, Rony	KU Leuven	CmPA, Department of Mathematics
2022-11	Structure-based design of lysosome targeting chimeric proteins	Mehdipour, Ahmad Reza	UGent	Center for Molecular Modeling
2022-12	Measuring diffusion limitations of aromatic species in MTH catalysts	Mancuso, Jenna	UGent	Center for Molecular Modeling
2022-13	Computational Fluid Dynamics Based Process Intensification of CO2 Capture: Gas-liquid Chemisorption in a Gas-Liquid Vortex Reactor	Ouyang, Yi	UGent	Laboratory for Chemical Technology; Department of Materials, Textiles and Chemical Engineering (EA11)
2022-14	Unravelling spontaneous food fermentation processes using shotgun metagenome sequencing	Weckx, Stefan	VUB	Research Group of Industrial Microbiology and Food Biotechnology (IMDO), Faculty of Sciences and Bioengineering Sciences
2022-15	Computational Study of Stacking in Covalent Organic Frameworks (COFs) for Water splitting and CO2 Reduction	Rawat, Kuber Singh	UGent	Center for Molecular Modeling / EA17
2022-16	Enumeration and characterization of cost-efficient experimental	Nunez Ares, Jose	KU Leuven	Biosystems Department – MeBIOS Division – Biostatistics Group
2022-17	Spatial-Aware Self-Supervised Learning	Lebailly, Tim	KU Leuven	PSI (Processing Speech and Images) / ESAT (Electrical Engineering Department)
2022-18	Microstructure evolution simulations during additive manufacturing of metallic materials using the MOOSE Framework.	Amorim Coutinho, Yuri	KU Leuven	Nano- and Microstructure Design of Materials / Department of Materials Engineering
2022-19	Modelling hydrogenation over a solid micellar catalyst.	Santos, Sara	UGent	Laboratory for Chemical Technology (LCT), Professor Mark Saeys research group Department for Materials, Textiles and Chemical Engineering
2022-20	Hydrogen diffusion in a clathrate	Lamaire, Aran	UGent	Center for Molecular Modeling

Tier-1 Compute 2022 | GPU & CPU

EasyChairCode	Titel	Aanvrager	Instelling	Afdeling
2022-21	Direct Numerical simulation of development of boundary layer in a natural convection flow of low-Prandtl fluid	Oder, Jure	von Karman Institute for Fluid Dynamics	Environmental and Applied Fluid Dynamics Department
2022-22	A first-principles study of the role of the oxygen environment on the anionic redox reaction in Ti ⁴⁺ -substituted Li ₂ MnO ₃	Mayda Bacaksiz, Selma	UAntwerpen	EMAT / Department of Physics
2022-23	Ensemble Modeling of Coronal Mass Ejections based on Multi-Level Monte-Carlo Techniques	Samara, Evangelia	KU Leuven	Centre for mathematical Plasma Astrophysics (CmPA), Dept. of Mathematics
2022-36	Investigating the role of methoxy species on alkene diffusion in the MTO process	Pieter Cnudde, Jenna Mancuso and Massimo Bocus	UGent	Center for Molecular Modeling
2022-37	Organometallic Chemistry of Cycloalkane-based Metallocatenanes: a Synthetic and Computational Investigation	Nil Roig Vidal and Mercedes Alonso Giner	VUB	General Chemistry Group / Department of Chemistry
2022-38	A molecular dynamical investigation of the reaction mechanism and regioselectivity of the electrophilic catalytic aromatic bromination of different substituted benzenes	Xavier Deraet and Frank De Proft	VUB	Algemene Chemie (ALGC)/Department of Chemistry
2022-39	Modelling the transport of solar energetic particles in the inner heliosphere	Nicolas Wijzen, Antonio Niemela and Edin Husidic	KU Leuven	Centre for mathematical Plasma Astrophysics (CmPA), Dept. of Mathematics
2022-40	Piezo and flexoelectricity driven by ripple deformation in transition metal dichalcogenides monolayers	Tribhuwan Pandey	UAntwerpen	Department of Physics/CMT group
2022-41	Closed loop control of windfarms for power maximization, load reduction and reference tracking under time varying inflow conditions	Ishaan Sood and Johan Meyers	KU Leuven	Turbulent Flow Simulation and Optimization (TFSO) Research Group Mechanical Engineering Department
2022-42	The first general relativistic kinetic simulations of accreting and flaring black holes II	Bart Ripperda, Thomas Hertog, Lorenzo Kuchler, Daniel Mayerson and Bert Vercnocke	KU Leuven	theoretical physics group, physics department department of astrophysical sciences
2022-43	Calculation of vibrational spectra of the lead-halide perovskite CsPbBr ₃	Alexander Hoffman, Aran Lamaire, Siebe Vanlommel, Sven Rogge and Veronique Van Speybroeck	UGent	Center for Molecular Modeling
2022-44	Methane diffusion in a clathrate	Aran Lamaire, Alexander Hoffman and Veronique Van Speybroeck	UGent	Center for Molecular Modeling
2022-46	Validation of a fast set-point optimization model for wind farms using a large-eddy simulation framework	Luca Lanzilao and Johan Meyers	KU Leuven	Turbulent Flow Simulation and Optimization (TFSO) Research Group, Mechanical Engineering Department
2022-47	Ensemble Modeling of Coronal Mass Ejections based on Multi-Level Monte-Carlo Techniques - Part 2	Evangelia Samara and Daniela Maci	KU Leuven	Centre for mathematical Plasma Astrophysics (CmPA), Dept. of Mathematics
2022-48	Generation of kinetic Alfvén waves from large-scale phase mixing	Francesco Pucci and Fabio Bacchini	KU Leuven	CmPA, Department of Mathematics
2022-49	Oxygen migration on UO ₂ surfaces	Ine Arts	UAntwerpen	EMAT / Departement of Physics
2022-50	Universal Machine Learning Potential for Metal-Organic Frameworks using Active Learning	Sander Vandenhaute and Veronique Van Speybroeck	UGent	Center for Molecular Modeling

Tier-1 Compute 2022 | GPU & CPU

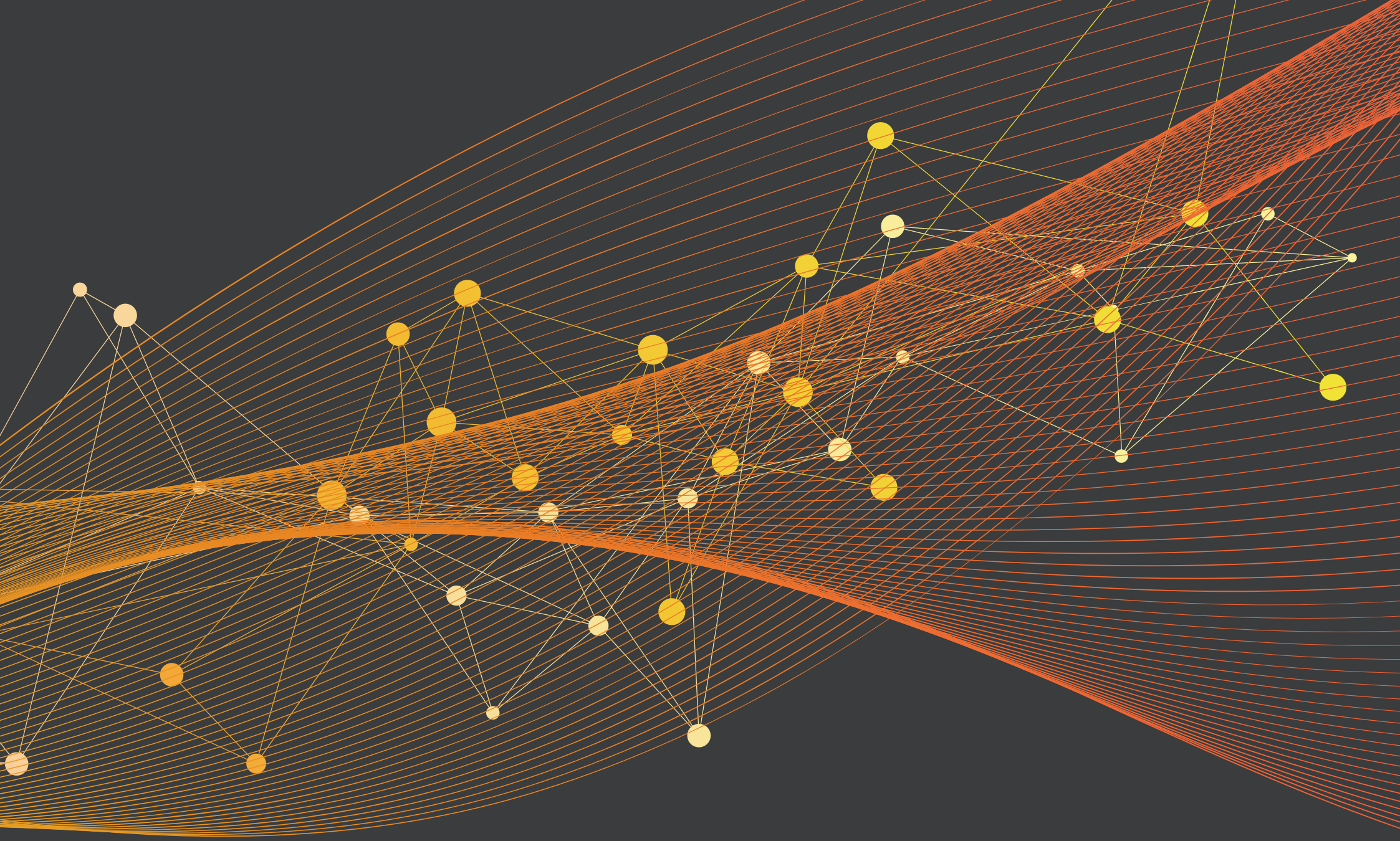
EasyChairCode	Titel	Aanvrager	Instelling	Afdeling
2022-51	First-principle study of the magnetic ground state of uranium dioxide	Selma Mayda Bacaksiz	UAntwerpen	EMAT / Department of Physics
2022-52	Validation of CFD liquid metal pool-type nuclear reactor thermal-hydraulics simulations by reduced scaled experiments	Silvania Lopes and Lilla Koloszar	von Karman Institute for Fluid Dynamics	Environmental and Applied Fluid Dynamics Department
2022-53	Three-dimensional data-driven simulations of solar eruptions	Xiaohong Li, Rony Keppens, Yuhao Zhou and Wenzhi Ruan	KU Leuven	CmPA, Department of Mathematics
2022-54	Particle-in-Cell (PIC) simulations of tearing mode instabilities in fusion tokamaks	Jincai Ren and Giovanni Lapenta	KU Leuven	Department of Mathematics, Centre for Mathematical Plasma Astrophysics
2022-55	Modelling particle acceleration and transport at a 3-D coronal mass ejection-driven shock	Zheyi Ding	KU Leuven	Centre for mathematical plasma-astrophysics
2022-56	High-resolution weather simulations of the Belgian offshore wind farm cluster	Wim Munters and Sara Porchetta	Von Karman Institute for Fluid Dynamics	Department of Environmental and Applied Fluid Dynamics Research; Expertise group on Environmental Flows
2022-57	The first general relativistic kinetic simulations of accreting and flaring black holes III	Bart Ripperda, Thomas Hertog, Lorenzo Kuchler, Bert Vercnocke and Daniel Mayerson	KU Leuven	Theoretical physics group, physics department; department of astrophysical sciences
2022-58	VSC tier1 application form 03/10/2022	Mats Denayer	VUB	DSCH - ALGC
2022-59	Weighted averages of steady RANS results for the CFD modeling of long-term averaged urban wind and pollutant concentration patterns	Tom Lauriks	UAntwerpen	Bioscience Engineering Department, Sustainable Energy, Air and Water Technology Group
2022-60	Density functional theory (DFT) Investigation of interactions between PAR pyrophosphate and metal ions in dense liquid phases.	Yuheng Zhao, Frederik Tielens and Ionut Tranca	VUB	Materials Modeling Groups of ALGC, Chemistry department
2022-61	CFD based study of decoking in different steam cracking reactor coil geometries	Victor Rosa, Florian Wéry, Kevin Van Geem and Yi Ouyang	UGent	"Laboratory for Chemical Technology (LCT); Department of Materials, Textiles and Chemical Engineering (EA11)"
2022-62	Creation of a Dutch language model suite for fine-grained event extraction in Dutch newspaper and social media data.	Els Lefever, Véronique Hoste, Loic De Langhe and Pranaydeep Singh	UGent	Language and Translation Technology Team (LT3) / Department of Translation, Interpreting and Communication.
2022-63	Reliable and accurate calculation of lubricant properties from equilibrium molecular dynamics simulations	Gözdenur Toraman, Toon Verstraelen and Dieter Fauconnier	UGent	Soete Laboratory-Department of Electromechanical, Systems and Metal Engineering
2022-65	The quest for phase-transition pathways in CsPbI3	Johannes Teunissen and David Devoogdt	UGent	Center for Molecular Modeling / EA17
2022-66	Rationalizing Phase Selection in Inorganic Zeolite Synthesis Through Extensive DFT Calculations	Jelle Vekeman and Toon Verstraelen	UGent	Center for Molecular Modeling
2022-68	Modelling the Oxygen and Hydrogen Evolution Reaction on Covalent Organic Frameworks for Water Splitting	Kuber Singh Rawat and Veronique Van Speybroeck	UGent	Center for Molecular Modeling / EA17
2022-69	Continuation: Determining the influence of the chemical components on the phase stability of metal halide perovskites	Tom Braeckvelt and David Devoogdt	UGent	Center for Molecular Modeling / EA17

Tier-1 Compute 2022 | GPU & CPU

EasyChairCode	Titel	Aanvrager	Instelling	Afdeling
2022-70	Elucidating the chemical nature of extraframework aluminum species interacting with zeolite catalyst active sites	Jenna Mancuso, Massimo Bocus and Pieter Cnudde	UGent	Center for Molecular Modeling
2022-71	Modelling of redox properties of VOx on different support materials	Sara Santos, Konstantijn Rommens and Dengxin Yan	UGent	Laboratory for Chemical Technology (LCT) under Prof. Mark Saeys research group, Department of Materials, Textiles and Chemical Engineering
2022-73	Enumeration and characterization of cost-efficient experimental	Jose Nunez Ares, Mohammed Saif Ismail Hameed, Peter Goos and Bart De Ketelaere	KU Leuven	"Biosystems Department – MeBIOS Division – Biostatistics Group"
2022-75	Numerical simulation of re-entry vehicle aerothermodynamics using in-house CFD solver	Vatsalya Sharma and Vincent Giangaspero	KU Leuven	"Centre for Mathematical Plasma Astrophysics (CmPA), Department of Mathematics"
2022-76	Density functional theory study of carbon materials modified with metals and oxides	José Luis, Nuñez	VUB	Materials Modelling Group, General Chemistry Research Group (ALGC),

Tier-1 Cloud 2022

EasyChairCode	Titel	Aanvrager	Instelling	Afdeling
2022-01	Analysis of large single-cell RNAseq datasets from nasal polyps	Yannick Gansemans	UGent	Laboratory of Pharmaceutical Biotechnology
2022-02	Corporate Social Responsibility and Business Sustainability: Address the Shortages of Essential Medicines	Lan Li	UGent	Faculty of Economics and Business Administration Marketing, Innovation and Organisation
2022-03	Discovering chemical rules and concepts in quantum chemical data generated with GQCP using explainable deep learning	Guillaume Acke and Patrick Bultinck	UGent	Quantum Chemistry Group, Department of Chemistry
2022-04	LM-UGent bioinformatics lab server	Eliza Depoorter and Charlotte Peeters	UGent	Laboratory of Microbiology (LM-UGent), Department of Biochemistry and Microbiology (WE10)
2022-05	Distributed ML-Ops services for HPC clusters	Kurt De Grave	Flanders Make VZW	DecisionS



vscentrum.be



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

Leuvenseweg 38
1000 Brussel
T 02 512 91 10

Verantwoordelijke uitgever

dr Hans Willems
secretaris-generaal FWO

Copyright

Fonds Wetenschappelijk Onderzoek-Vlaanderen

Teksten

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

Creatie en vormgeving

Rafal Al-Tekreeti

Uitgegeven in juni 2023

VLAAMS
SUPERCOMPUTER
CENTRUM



Vlaanderen
is supercomputing